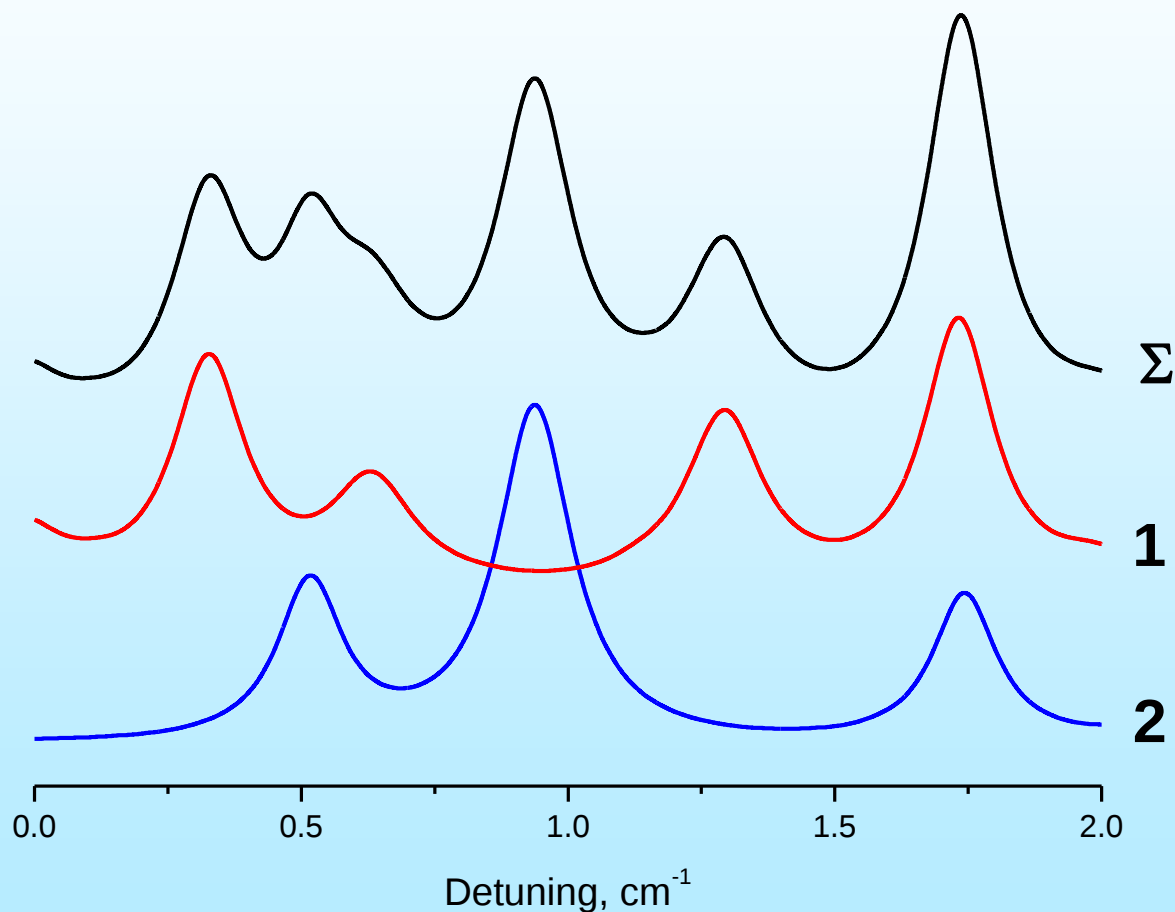


***16-ый ОБЩЕРОССИЙСКИЙ СЕМИНАР ПО ДИОДНОЙ ЛАЗЕРНОЙ
СПЕКТРОСКОПИИ им. А.М.Прохорова (ДЛС-16)***

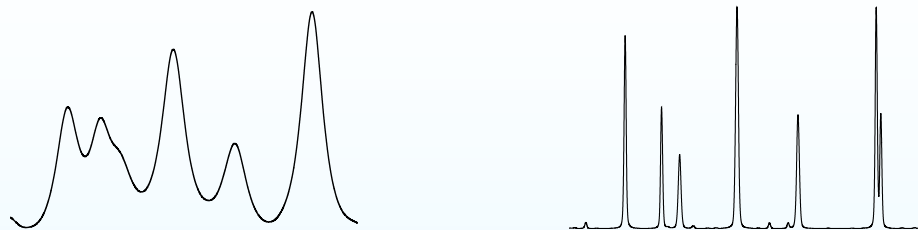
Обработка спектров поглощения с использованием синтезированных спектров молекул

... М.В.Спиридонов ...
Физический институт им. П.Н.Лебедева

Обработка сложных многокомпонентных спектров с переналоженными линиями

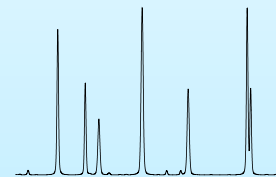


1 Запись аналитического и реперного (низкое давление) спектров



2 Нахождение центров линий в реперном спектре

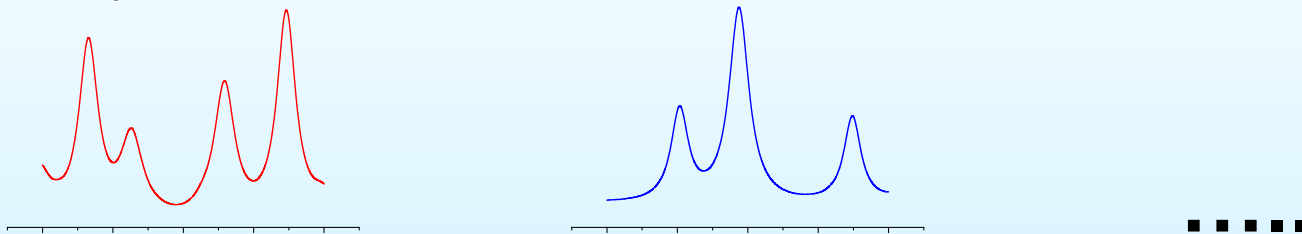
3 Идентификация линий в реперном спектре



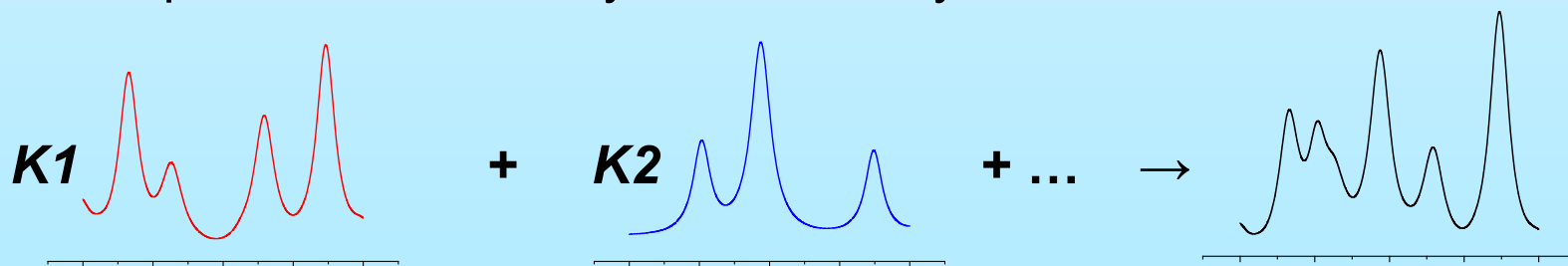
4 Определение частот в центрах линий реперного спектра по базе данных (HITRAN) и получение дискретной частотной шкалы

5 Интерполяция и получение абсолютной частотной шкалы во всей рабочей области

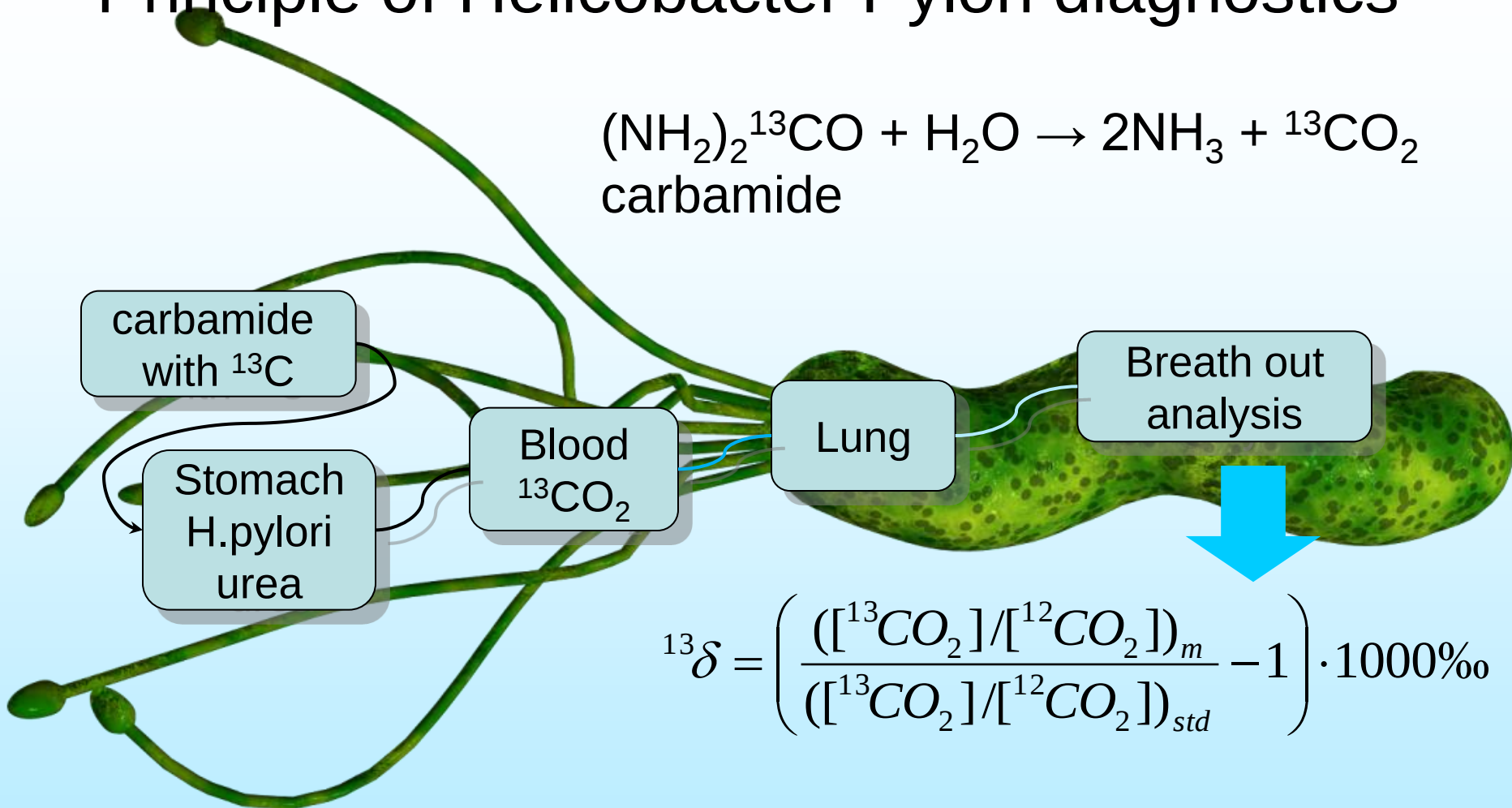
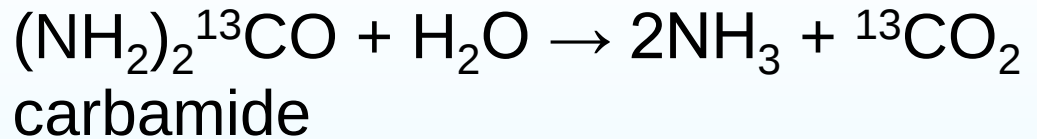
6 Расчет спектров молекул в рабочей области с использованием данных из HITRAN (интенсивности, частоты, уширения, сдвиги), а также температуры и давления в аналитической кювете



7 Многомерная линейная регрессия регистрируемого аналитического спектра по расчетным спектрам. Коэффициенты регрессии ***K_i*** дают концентрацию соответствующих молекул



Principle of Helicobacter Pylori diagnostics

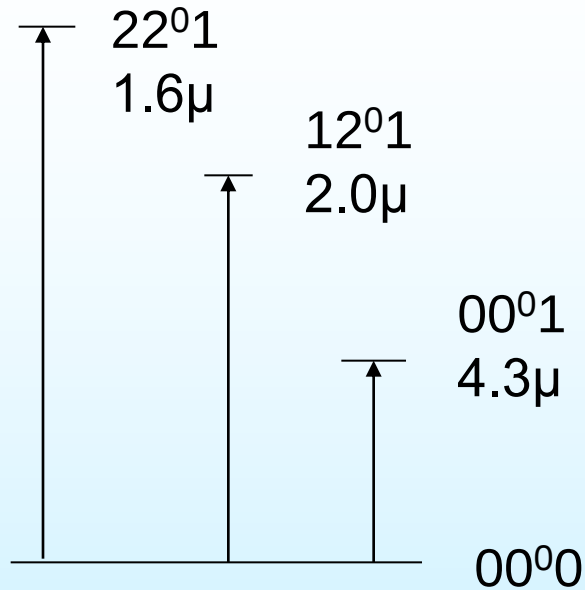
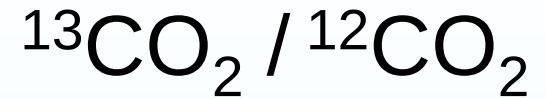


$$^{13}\delta = \left(\frac{([^{13}\text{CO}_2]/[^{12}\text{CO}_2])_m}{([^{13}\text{CO}_2]/[^{12}\text{CO}_2])_{std}} - 1 \right) \cdot 1000\text{‰}$$

2 successive tests, $\delta_2 - \delta_1$

Precision required - 0.5‰

Absorption bands to measure

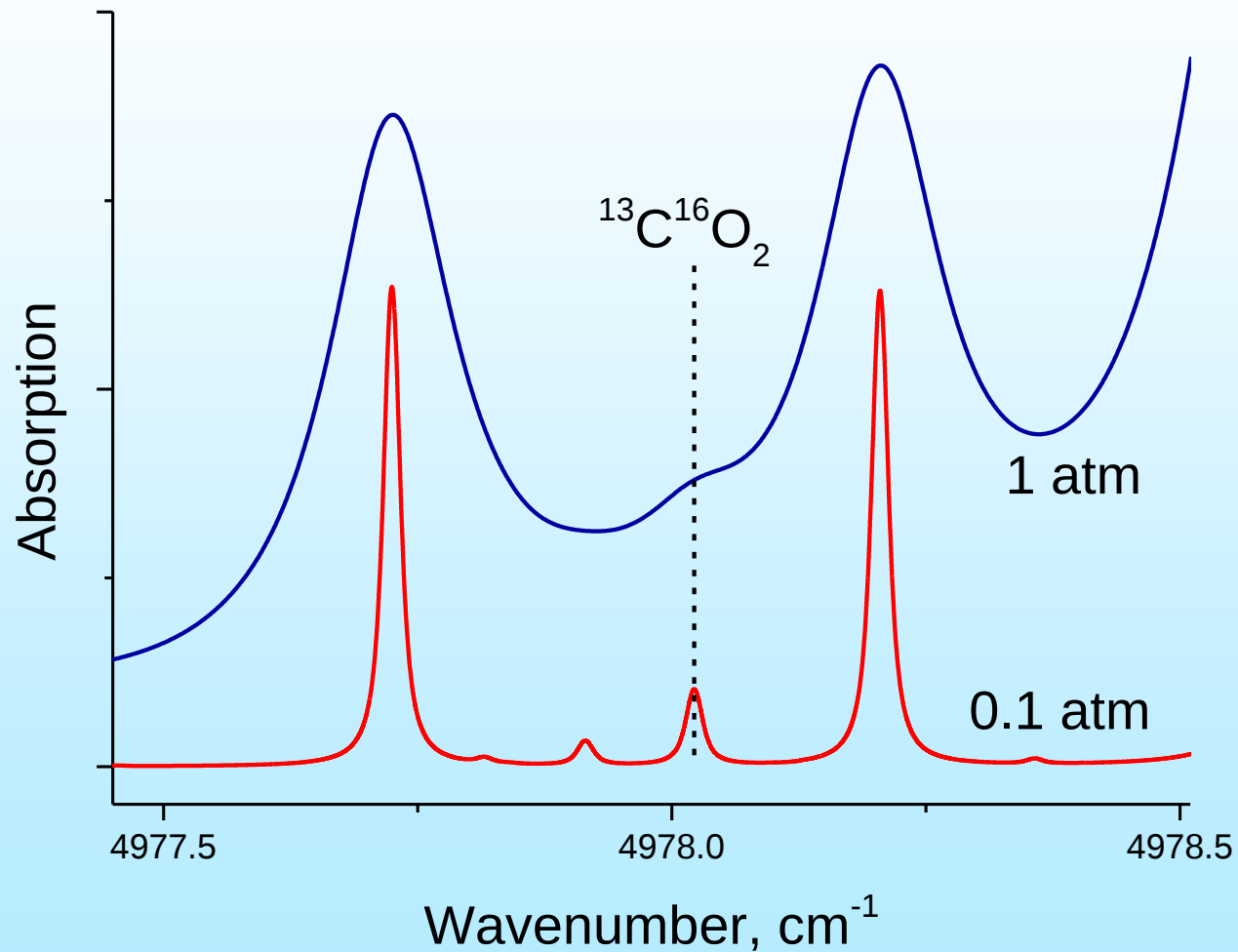


$$\sigma_{4.3\mu} : \sigma_{2.0\mu} : \sigma_{1.6\mu} \sim 2 : 10^{-3} : 10^{-5}$$

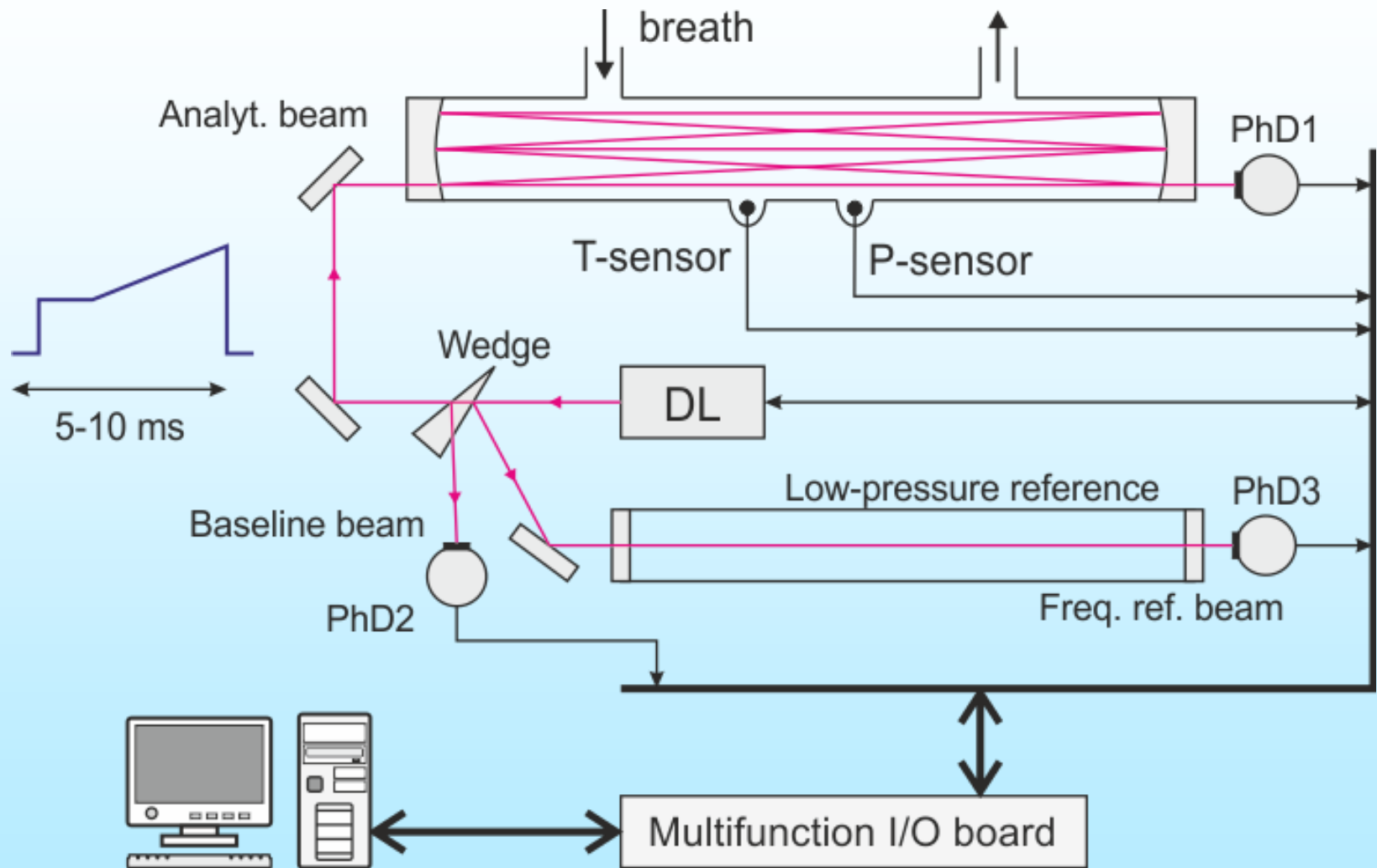
cooling required
(not always)

too weak

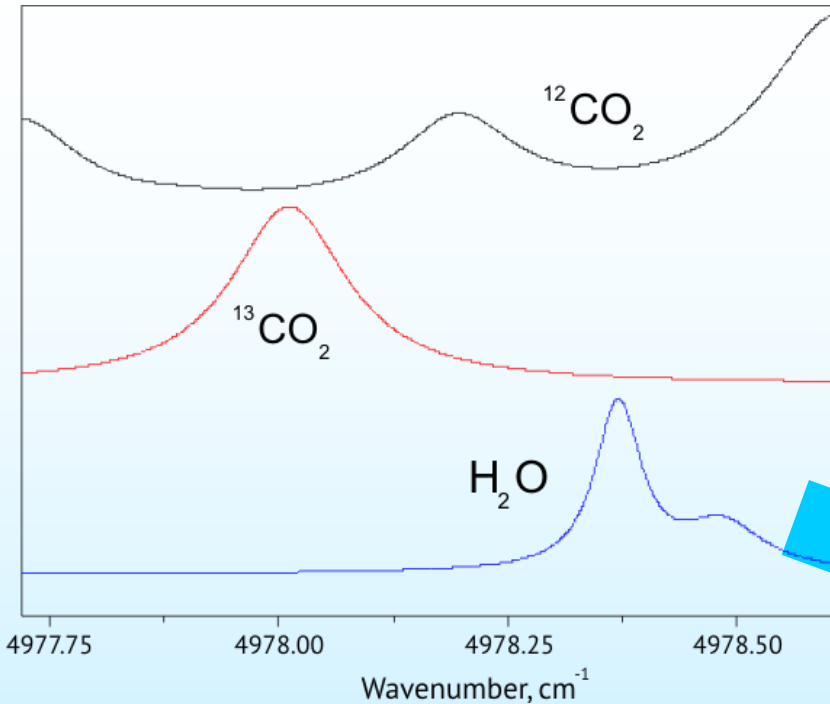
CO₂ spectrum in 2.007 μ region



Sketch of the setup

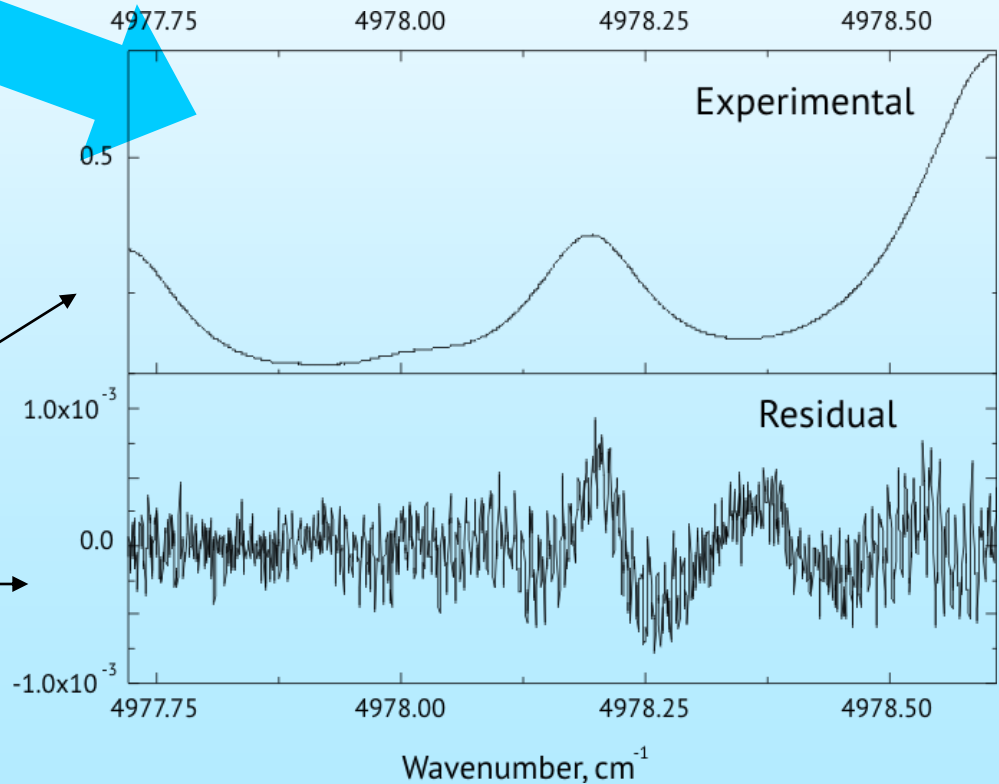


Processing, multivariate regression



$$\ln I_a(\nu) = \ln I_b(\nu) + \sum_i k_i \alpha_i(\nu) \cdot L + P^{(3)}(\nu)$$

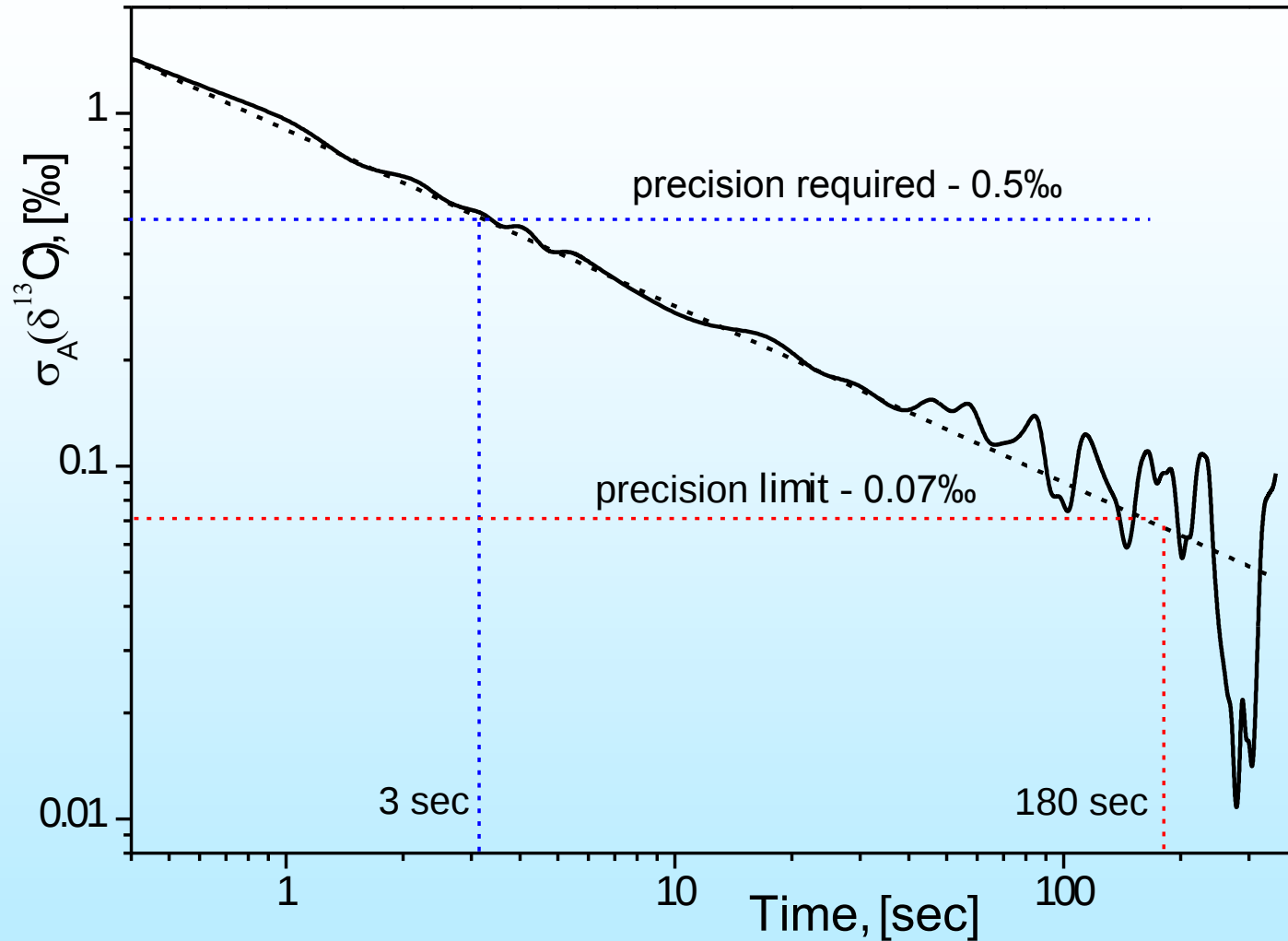
- HITRAN-2008 database (corrected)
- Voigt profiles
- accuracy of frequency scale < 3*10⁻⁵cm⁻¹



Spectrum of CO₂ in human exhale and a procedure of multivariate linear regression

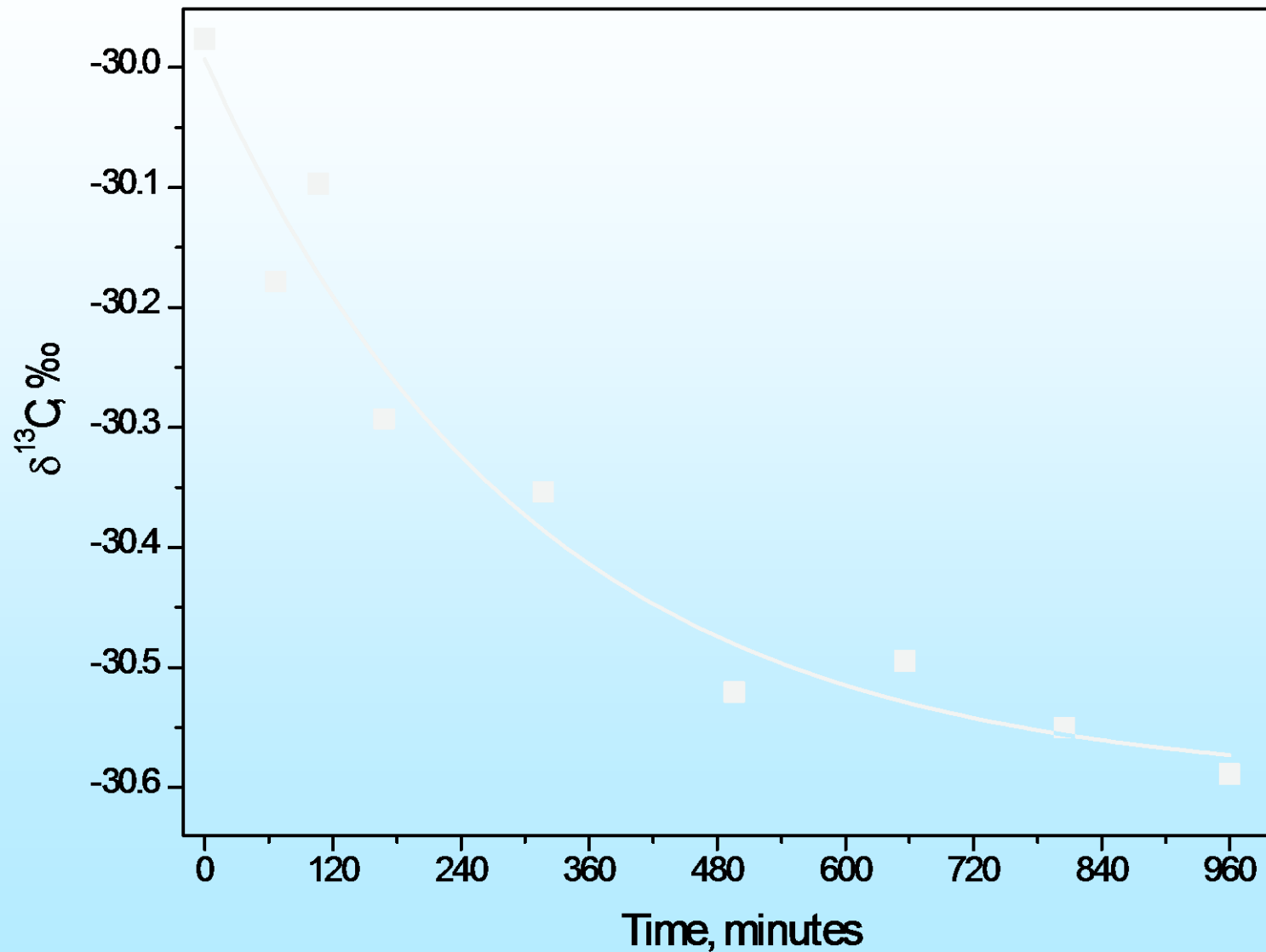
Single scan residual < 10⁻³

Statistical analysis of δ



Allan deviation plot for the isotopic ratio $\delta^{13}C$, ‰

Long-term reproducibility for δ (16h) - 0.5‰



Выводы

1. Разработана методика, позволяющая проводить точные количественные спектральные измерения в условиях сложного многокомпонентного спектра с переналожением линий
2. Проведены измерения изотопического отношения $^{13}\text{CO}_2 / ^{12}\text{CO}_2$ в выдохе при атмосферном давлении. Точность измерения параметра δ составила 0.07 ‰ при времени измерения 3 минуты
3. Методика показывает хорошие результаты с лазерами типа VCSEL, однако с DFB лазерами возникает ряд проблем