

(299) XMA定量補正計算への電子計算機の利用

日本鋼管 技術研究所 大久保益太 宮下芳雄

榊井 明・徳永寿巳

1. 緒言 XMAによる測定値から試料組成を求めるためには、それぞれ、吸収、原子番号、蛍光効果を考慮した補正計算をする必要がある。この計算のために多くの補正法が報告されているが、これらはいずれも複雑であり、しかも計算精度をあげるために逐次近似法による必要があるため、計算量が膨大となり、そのままの形で手計算を行なうことは事実上困難となる。筆者らは昭和40年以来、電子計算機(IBM360)を補正計算に利用し、計算精度および作業能率を高めるとともに、データの整理および保管などにも役立たせてきた。

2. プログラムの内容 筆者らが用いている計算プログラムのフローチャートを図1に示す。まず①で原子番号、吸収係数など計算に必要な物理定数データを読み込む。②ではそれぞれ測定試料と標準試料に関する特性X線強度 I_i, I_{i0} を分析元素ごとに読み込み、③で各元素のX線相対強度 $R_i (=I_i/I_{i0})$ を計算する。④でこの値を標準化($n_i = R_i / \sum_{i=1}^n R_i$)することにより n_i を求め、これを濃度と仮定して以後の必要な計算⑤~⑨を行なう。④~⑨の計算を10回くりかえすと表1に示すように計算結果が成分ごとに印刷され、この値から各補正効果の寄与する割合をも知ることができる。また計算結果が収れんするようすを $Al_2O_3-SiO_2-MnO-FeO$ 系存在物について示した表2より、10回のくりかえしで十分であることがわかる。以上の計算は、合金試料についてはそのまま適用できるし、酸化物系存在物のように酸素を含む場合にも、各金属元素と化学量論的に結びつく酸素の割合をあらかじめ与えておくことにより容易に適用できる。また、たとえば、 $SiO_2-MnO-MnS$ のように1種類の金属元素が酸素と硫黄と同時に結びついている場合にも応用できる。計算に必要な時間は1試料当たり平均5秒で、これは計算機借用料金として35円に相当する。

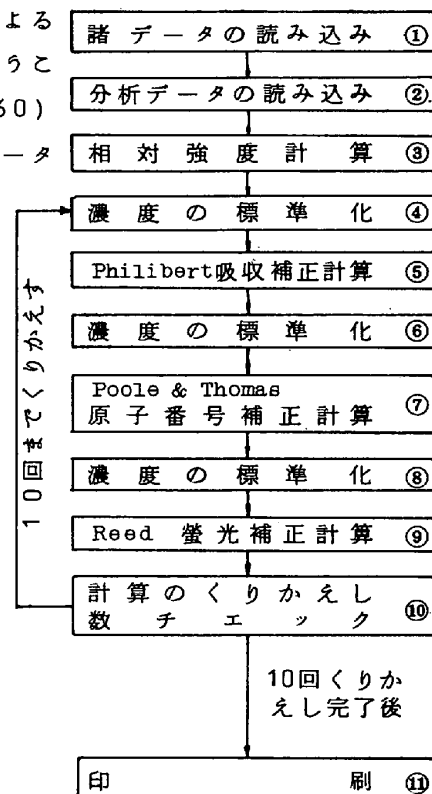


図1 フローチャート

表1 アウトプットデータ

ANALYSIS NO.	6	7	15	16	SAMPLE NO.
UNKN. I.	2298	18286	404897	71774	
BACK. I.	400	400	800	800	
PURE. I.	230949	489609	867078	868201	
BACK. I.	500	500	1000	1000	
COMP. R.	0.88946	1.13931	0.29123	0.28649	
I/10	0.00824	0.03657	0.46658	0.08184	
COMP. 10	0.01556	0.07823	0.60247	0.10529	0.80155
ABSOP. E.	0.03310	0.10790	0.46357	0.08047	
COMP.	0.06255	0.23083	0.59858	0.10353	0.99549
ATOM. E.	0.03015	0.09998	0.48267	0.08432	
COMP.	0.05696	0.21389	0.62324	0.10848	1.00256
FLUO. E.	0.03013	0.09996	0.48267	0.08432	
COMP.	0.05693	0.21384	0.62324	0.10848	1.00248

表2 収れんのようす

くりかえし	Al_2O_3	SiO_2	MnO	FeO	計
相対強度	0.119	0.161	0.204	0.012	0.496
1	0.367	0.475	0.233	0.013	1.088
2	0.292	0.456	0.234	0.013	0.995
3	0.301	0.442	0.234	0.013	0.990
4	0.300	0.448	0.234	0.013	0.995
5	0.300	0.446	0.234	0.013	0.993
6	0.300	0.446	0.234	0.013	0.993
7	0.300	0.446	0.234	0.013	0.993
8	0.300	0.446	0.234	0.013	0.993
9	0.300	0.446	0.234	0.013	0.993
10	0.300	0.446	0.234	0.013	0.993