

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6638537号

(P6638537)

(45) 発行日 令和2年1月29日(2020.1.29)

(24) 登録日 令和2年1月7日(2020.1.7)

(51) Int.Cl.

F I

G O 1 N 23/223 (2006.01)

G O 1 N 23/223

G O 1 N 21/35 (2014.01)

G O 1 N 21/35

G O 1 N 21/31 (2006.01)

G O 1 N 21/31 6 1 O Z

G O 1 J 3/42 (2006.01)

G O 1 J 3/42 U

G O 1 J 3/44 (2006.01)

G O 1 J 3/44

請求項の数 1 (全 11 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2016-84964 (P2016-84964)
 (22) 出願日 平成28年4月21日(2016.4.21)
 (65) 公開番号 特開2017-194360 (P2017-194360A)
 (43) 公開日 平成29年10月26日(2017.10.26)
 審査請求日 平成30年10月31日(2018.10.31)

(73) 特許権者 000001993
 株式会社島津製作所
 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地
 (74) 代理人 110001069
 特許業務法人京都国際特許事務所
 (72) 発明者 村上 幸雄
 京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会
 社島津製作所内

審査官 蔵田 真彦

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 試料解析システム

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

蛍光 X 線分析装置と、赤外分光光度計及びラマン分光光度計のうちの少なくとも 1 つとを含む複数の分析装置を用いた対象試料の測定データから該対象試料を特定するために用いられる試料解析システムであって、

複数の参照物について、前記複数の分析装置のそれぞれにより取得された測定データが保存された記憶部と、

前記分析装置ごとに、前記対象試料の測定データを前記複数の参照物の測定データと照合し、前記複数の参照物のそれぞれについて前記対象試料との一致度を求める測定データ照合部と、

前記蛍光 X 線分析装置を用いた前記対象試料の測定データから、コンプトン散乱線とレイリー散乱線の強度比を求める散乱線強度比算出部と、

前記強度比に基づいて、前記蛍光 X 線分析装置、及び前記赤外分光光度計又は前記ラマン分光光度計に関する一致度に重み付けを与える係数を決定する係数決定部と、

前記複数の参照物のそれぞれについて、前記複数の分析装置について求められた一致度を統合して統合一致度を算出する統合一致度算出部と、

前記統合一致度が高い順に所定数の参照物に関する情報を出力する照合結果出力部と、を備え、

前記統合一致度算出部が、前記蛍光 X 線分析装置、及び前記赤外分光光度計又は前記ラマン分光光度計に関する一致度に前記係数を反映して前記統合一致度を算出することを特

徴とする試料解析システム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、無機物の分析に適した、蛍光X線分析装置、原子吸光光度計、及び誘導結合プラズマ発光分析装置のうちの少なくとも1つと、有機物の分析に適した赤外分光光度計及びラマン分光光度計のうちの少なくとも1つとを含む複数種類の分析装置を用いて取得した対象試料の測定データを参照物の測定データと照合することにより対象試料を特定する試料解析システムに関する。

【背景技術】

10

【0002】

食品等の製品にビニール片や金属片などの異物が混入した状態で市場に出荷されてしまうと当該製品への信頼性が著しく低下することから、工場などでは製品の異物検査が行われている。製品の異物検査において異物が発見されると、その異物を分析して含有物質や含有元素、それらの含有量などを決定し、参照物データベースにより異物を特定して出所や混入経路を解明する。

【0003】

ビニール片などの有機物からなる異物の分析に適した分析装置にフーリエ変換赤外分光光度計（FTIR）がある。FTIRでは、固定鏡及び移動鏡を含むマイケルソン型干渉計により生成した干渉波を異物に照射して透過光や反射光をインターフェログラムとして測定する。そして、これをフーリエ変換することにより、横軸に波数、縦軸に強度（吸光度又は透過率など）をとった吸収スペクトルを得る。吸収スペクトルには、異物に含まれる各種物質の振動エネルギーや回転エネルギーに対応する波長において赤外光の吸収が現れる。従って、異物の吸収スペクトルのパターンを参照物データベースに予め保存された種々の参照物の吸収スペクトルと比較することにより、含有物質の類似性から異物を特定することができる（例えば特許文献1）。

20

【0004】

一方、金属片などの無機物を含む異物の分析に適した分析装置にはエネルギー分散型蛍光X線分析装置（EDX）がある。EDXでは、異物にX線を照射して蛍光スペクトルを取得する。蛍光スペクトルには、各元素に固有のエネルギー位置に蛍光X線のピークが現れる。従って、蛍光スペクトルのピーク位置を調べることにより異物に含まれる元素を特定することができる。特定した元素の定量法にはFP法（ファンダメンタルパラメータ法）と検量線法の2つがある。FP法では、主成分の組成を仮定したうえで理論式を用いて蛍光X線の実測強度を再現することにより各元素の定量値を求める（例えば特許文献2、3）。検量線法では同じ組成で含有量が既知の標準試料を複数測定して検量線を作成する必要がある一方、FP法ではその必要がないことから手軽に分析を実行できるという利点がある。なお、FP法による定量値は、検量線法により求められる厳密な定量値と区別するために半定量値とも呼ばれる。FP法により求められた異物の各元素の半定量値を参照物データベースに予め保存された種々の参照物に含まれる各元素の半定量値と比較することにより、含有物質の類似性から異物を特定することができる。

30

40

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献1】特開2001-74650号公報

【特許文献2】特開平8-334481号公報

【特許文献3】特開2010-223908号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

従来、無機物と有機物の両方を含む異物は、FTIRを用いて取得した吸収スペクトル

50

を参照物データベースに保存された吸収スペクトルと比較することにより特定され、また E D Xを用いて取得した半定量結果を参照物データベースに保存された半定量値と比較することによっても特定されていた。F T I Rでは主に有機物の一致度に基づいて異物が特定され、E D Xでは主に無機物の一致度に基づいて異物が特定される。そのため、F T I Rでの特定結果とE D Xでの特定結果が一致しない場合があった。こうした場合には、分析者が両装置での特定結果を勘案して最終的な判断を下す必要があり、その判断は分析者の経験に委ねられるため、分析者の熟練度によっては同じ異物を別の物として特定してしまう(例えば、無機物に関する知見を十分に有する分析者であっても、有機物に関する知見が十分でないとF T I Rの特定結果を誤って判断してしまう)場合があるという問題があった。

10

【0007】

ここでは具体的な分析装置としてF T I RとE D Xの組み合わせを挙げたが、無機物の分析に適した装置として原子吸光光度計や誘導結合プラズマ発光分析装置が用いられる場合もある。また、有機物の分析に適した装置としてラマン分光光度計が用いられる場合もある。さらに、3つ以上の装置を併用して異物を分析する場合もある。これらのいずれの場合にも上記同様の問題があった。

【0008】

本発明が解決しようとする課題は、異物等の対象試料が有機物と無機物のいずれである場合にも、分析者の熟練度に依存することなく対象試料を正しく特定することができる試料解析システムを提供することである。

20

【課題を解決するための手段】

【0009】

上記課題を解決するために成された本発明は、蛍光X線分析装置と、赤外分光光度計及びラマン分光光度計のうちの少なくとも1つを含む複数の分析装置を用いた対象試料の測定データから該対象試料を特定するために用いられる試料解析システムであって、

複数の参照物について、前記複数の分析装置のそれぞれにより取得された測定データが保存された記憶部と、

前記分析装置ごとに、前記対象試料の測定データを前記複数の参照物の測定データと照合し、前記複数の参照物のそれぞれについて前記対象試料との一致度を求める測定データ照合部と、

30

前記蛍光X線分析装置を用いた前記対象試料の測定データから、コンプトン散乱線とレイリー散乱線の強度比を求める散乱線強度比算出部と、

前記強度比に基づいて、前記蛍光X線分析装置、及び前記赤外分光光度計又は前記ラマン分光光度計に関する一致度に重み付けを与える係数を決定する係数決定部と、

前記複数の参照物のそれぞれについて、前記複数の分析装置について求められた一致度を統合して統合一致度を算出する統合一致度算出部と、

前記統合一致度が高い順に所定数の参照物に関する情報を出力する照合結果出力部と、を備え、

前記統合一致度算出部が、前記蛍光X線分析装置、及び前記赤外分光光度計又は前記ラマン分光光度計に関する一致度に前記係数を反映して前記統合一致度を算出することを特徴とする。

40

【0010】

前記統合一致度は、例えば、各分析装置に関する一致度を加算したり平均したりすることにより求めることができる。また、後述するように、測定データに基づき対象試料の特性を反映して統合一致度を求めるようにしてもよい。

前記照合結果出力部が出力する、参照物に関する情報は、例えば参照物の名称や測定データである。また、その出力は、表示部の画面への表示や印刷による出力等、適宜の形態で実行することができる。

【0011】

本発明に係る試料解析システムでは、無機物の分析に適した蛍光X線分析装置、原子吸

50

光光度計、及び誘導結合プラズマ発光分析装置のうちの少なくとも１つと、有機物の分析に適した赤外分光光度計及びラマン分光光度計のうちの少なくとも１つとを含む複数の分析装置のそれぞれにより取得された複数の参照物の測定データが記憶部に予め保存されている。そして、分析装置ごとに、対象試料の測定データを各参照物の測定データと照合し、それぞれについて一致度を求める。また、各参照物について、複数の分析装置について求められた一致度を統合した統合一致度を求め、その一致度が高い順に所定数の参照物に関する情報を出力する。この試料解析システムを用いると、分析者自らが何ら判断を下すことなく統合一致度が高い順に所定数の参照物の情報を得ることができるため、対象試料が有機物と無機物のいずれである場合にも分析者の熟練度に依存することなく試料を正しく特定することができる。

10

【 0 0 1 2 】

本発明に係る試料解析システムにおいて、前記複数の分析装置が蛍光Ｘ線分析装置を含むように構成すると、該蛍光Ｘ線分析装置を用いた測定データに対象試料のコンプトン散乱線とレイリー散乱線に関するデータが含まれる。蛍光Ｘ線分析装置では、対象試料に占める有機物（C, H, O, Nなどの軽元素からなる物質）の割合が高いほどコンプトン散乱線の強度が大きくなり、無機物の割合が高いほどレイリー散乱線の強度が大きくなる。

【 0 0 1 4 】

上記態様の試料解析システムでは、蛍光Ｘ線分析装置による対象試料の測定データから、該対象試料の特性（無機物、有機物、あるいはそれらの混合物）に応じた係数を求め、蛍光Ｘ線分析装置、及び赤外分光光度計又はラマン分光光度計に関する一致度にその係数を反映して各参照物の統合一致度を求める。例えば、蛍光Ｘ線分析装置の測定データからコンプトン散乱線の強度とレイリー散乱線の強度の比（コンプトン散乱線の強度／レイリー散乱線の強度）を求め、その比が1.0未満であれば無機物であると判定し蛍光Ｘ線分析装置に関する一致度の優先度を高くする係数を、その比が1.0以上2.0未満であれば無機物と有機物の混合物であると判定して蛍光Ｘ線分析装置と赤外分光光度計（又はラマン分光光度計）の一致度を等分に反映する係数を、その比が2.0以上であれば有機物であると判定し赤外分光光度計（又はラマン分光光度計）に関する一致度の優先度を高くする係数を、それぞれ用いて統合一致度を求めるように構成することができる。これにより、対象試料の特性に適した分析装置の一致度を反映した、より正確な統合一致度を得ることができる。

20

30

【発明の効果】

【 0 0 1 5 】

本発明に係る試料解析システムを用いることにより、対象試料が有機物と無機物のいずれである場合にも分析者の熟練度に依存することなく試料を正しく特定することができる。

【図面の簡単な説明】

【 0 0 1 6 】

【図 1】本発明に係る試料解析システムの一実施例である異物解析システムの要部構成図。

【図 2】本実施例の試料解析システムにおけるEDXデータの一例。

40

【図 3】本実施例の試料解析システムで表示される初期画面の一例。

【図 4】本実施例の試料解析システムで表示される解析画面の一例。

【図 5】本実施例の試料解析システムで表示される解析結果画面の一例。

【図 6】本実施例の試料解析システムにおける統合解析について説明する図。

【図 7】本実施例の試料解析システムにおける統合解析の結果を説明する図。

【図 8】本実施例の試料解析システムにおいてレポート出力レイアウトを編集する画面の一例。

【図 9】本実施例の試料解析システムで表示されるライブラリ画面の一例。

【発明を実施するための形態】

【 0 0 1 7 】

50

本発明に係る試料解析システムの一実施例について、以下、図面を参照して説明する。

【0018】

図1に本実施例の試料解析システムの要部構成を示す。

本実施例の試料解析システム1は、データ処理部10と、データ処理部10に接続された入力部20及び表示部30を有する。データ処理部10は、記憶部11のほか、機能ブロックとして測定データ照合部12、散乱強度比算出部13、係数決定部14、統合一致度算出部15、及び照合結果出力部16を備えている。データ処理部10の実体は一般的なパーソナルコンピュータであり、CPUで試料解析プログラムを実行させることにより上記の各機能ブロックが具現化される。

【0019】

記憶部11には、エネルギー分散型蛍光X線分析データベース(EDX-DB)111、フーリエ変換赤外分光データベース(FTIR-DB)112、及び参照物データベース(参照物DB)113が設けられている。さらに、データ処理部10は蛍光X線分析装置(EDX)40及びフーリエ変換赤外分光光度計(FTIR)50にも接続されており、これらの装置を用いて試料を測定したり、その測定により取得したデータを記憶部11に保存したりすることができる。

【0020】

EDX-DB111には、複数の参照物をEDX40(あるいは別のEDX)で測定することにより得た測定データが保存されている。図2に示すように、EDXに関する測定データには、参照物を特定するID番号、参照物の名称、該装置に搭載されたカメラによりX線照射部位を撮影した画像、測定条件、定量分析結果、及びプロファイル(EDXスペクトルデータ)が含まれる。また、測定者等が作成した参照物に関するコメント(例えば参照物の測定部位)が含まれている。

【0021】

FTIR-DB112には、複数の参照物をFTIR50(あるいは別のFTIR)で測定することにより得た測定データが保存されている。FTIRに関する測定データには、参照物を特定するID番号、参照物の名称、測定条件、及びスペクトルデータが含まれる。また、測定者等が作成した参照物に関するコメントが含まれている。

【0022】

参照物DB113には、複数の参照物自体に関するデータが保存されている。具体的には、参照物を特定するID番号、参照物の名称、参照物に含まれる元素や化合物とその含有量(あるいは含有比)、参照物の写真(カメラ画像)、参照物の入手日時や場所などに関するコメントが含まれている。

【0023】

次に、製品の異物検査で発見された異物(対象試料)を、EDX40及びFTIR50により取得した測定データに基づいて特定する手順について、図3～図7を参照して説明する。

【0024】

使用者は、予め異物の測定データ(EDXデータ及び/又はFTIRデータ)を取得し記憶部11に保存しておく。

続いて、使用者が試料解析プログラムの実行を指示すると、図3に示すように、「解析」、「ライブラリ」、及び「キャンセル」の3つの選択肢が表示される。入力部20を通じて使用者が「解析」を選択すると異物の解析が開始される。「ライブラリ」を選択するとEDX-DB111、FTIR-DB112、及び参照物DB113に保存されている複数の参照物の測定データ等を確認・編集したり、あるいは新たな参照物の測定データ等を追加・削除したりすることができる。「キャンセル」を選択すると試料解析プログラムが終了する。

【0025】

使用者が「解析」を選択すると、図4に示すように、「EDX」、「FTIR」、「統合」、「キャンセル」の4つの選択肢が表示される。「EDX」を選択するとエネルギー

10

20

30

40

50

分散型 X 線分析データ (EDX データ) のみに基づく異物の解析が開始され、「FTIR」を選択するとフーリエ変換赤外分光データ (FTIR データ) のみに基づく異物の解析が開始される。「統合」を選択すると、EDX データと FTIR データの両方に基づく異物の解析が開始される。「キャンセル」を選択すると図 3 に示す画面に戻る。

【0026】

使用者が「EDX」を選択すると、異物の EDX データファイルを使用者に指定させる画面が表示される。使用者が EDX データファイルを指定すると、測定データ照合部 12 は指定されたファイルの EDX データから試料に含まれる各元素の定量値を読み出す。そして、EDX - DB 111 に保存された複数の参照物の EDX データに含まれる定量値と比較し、各参照物について異物との一致度を求める。具体的には、例えば各元素について異物に含まれる各元素の定量値と参照物に含まれる各元素の定量値の差の絶対値の和 (相違度) を求め、これを所定値から差し引いた値を一致度とすることができる。なお、多くの場合、異物や参照物の定量値には、異物 (あるいは参照物) の主成分の組成を仮定し、理論式を用いて蛍光 X 線の実測強度を再現する FP 法により求められた各元素の定量値 (半定量値) が用いられる。もちろん、検量線法により求めた定量値を用いてもよい。

【0027】

測定データ照合部 12 により各参照物について異物との一致度が求められると、照合結果出力部 16 は、一致度が高い順に所定数の参照物を表示部 30 に表示する。一致度が高い順に 5 つの参照物を表示した例を図 5 に示す。使用者はこれを確認し、一致度が最も高い参照物として異物を特定することができる。なお、照合結果出力部 16 が、一致度が所定値以上の参照物全てを表示したり、あるいは一致度が最も高い参照物のみを表示したりするようにしてもよい。

【0028】

図 5 に示す画面に、各参照物とともに表示されているチェックボックスを使用者が選択するとチェックボックスの白黒が反転する (黒塗りが選択状態である)。続いて使用者が画面上部の印刷ボタンを押すと、該当する参照物について EDX - DB 111 に保存されている測定データ等が印刷される。また、使用者が、各参照物について表示されている「EDX データ」、「コメント」、「EDX 写真」、及び「カメラ画像」ボタンを押すと、当該参照物に関するこれらのデータを画面上で確認することができる。画面上部の「次の解析へ」ボタンを押すと図 4 に示す画面に戻る。「登録」ボタンを押すと、今回、解析した異物の EDX データが、新しい参照物の EDX データとして EDX - DB 111 に追加登録される。

【0029】

使用者が「FTIR」を選択した場合も、測定データ照合部 12 は、使用者に異物の FTIR データファイルを指定させる。そして、指定された FTIR データファイルからスペクトルデータを読み出し、FTIR - DB 112 に保存された複数の参照物のスペクトルデータと比較して、各参照物について異物との一致度を求める。具体的には、例えばスペクトルデータに含まれる吸収ピークごとに、吸収ピークの位置 (波数や波長) 及びピーク高さ (あるいはピーク面積) を比較することにより異物との一致度が求められる。

【0030】

測定データ照合部 12 により、各参照物について異物との一致度が求められると、照合結果出力部 16 は、一致度が高い順に所定数の参照物を表示部 30 に表示する (図 5 と同様の画面が表示される)。これにより、使用者が異物を特定することができる。ここでも、照合結果出力部 16 が、一致度が所定値以上の参照物全てを表示したり、あるいは一致度が最も高い参照物のみを表示したりするように構成することもできる。

【0031】

次に説明する「統合」が本実施例の試料解析システムの特徴の 1 つである。

使用者が「統合」を選択すると、測定データ照合部 12 は、使用者に EDX データファイル及び FTIR データファイルをそれぞれ指定させる。使用者が EDX データファイル及び FTIR データファイルをそれぞれ指定すると、EDX データファイルから異物に含

10

20

30

40

50

まれる各元素の定量値を読み出し、F T I Rデータファイルからスペクトルデータを読み出す。そして、各参照物について、E D Xデータの一致度及びF T I Rデータの一致度を求める。

【 0 0 3 2 】

また、使用者が「統合」を選択した場合には、散乱強度比算出部 1 3 が、E D Xデータファイルから測定条件及びプロファイル（測定時に得られたスペクトル）を読み出す。そして、測定時の照射X線のエネルギーに基づいてスペクトルからコンプトン散乱線（照射X線と異なるエネルギー位置のピーク）とレイリー散乱線（照射X線と同じエネルギー位置のピーク）の強度を求め、その比（コンプトン散乱線の強度 / レイリー散乱線の強度）を求める。

10

【 0 0 3 3 】

続いて、係数決定部 1 4 が、この比（コンプトン散乱線の強度 / レイリー散乱線の強度）に基づきE D XデータとF T I Rデータに対する重み付けの係数（E D X係数とF T I R係数）を決定する。具体的には、上記の比が1.00以下であれば異物が無機物であると判定してE D X係数とF T I R係数をそれぞれ0.8、0.2に決定する。また、この比が1.00よりも大きく2.00以下であれば異物が有機物と無機物の混合物であると判定してE D X係数とF T I R係数をいずれも0.5に決定する。さらに、この比が2.00よりも大きければ異物が有機物であると判定してE D X係数とF T I R係数をそれぞれ0.2、0.8に決定する。本実施例ではE D X係数とF T I R係数の組み合わせを3通りとしたが、更に細かく分けてもよく、あるいは上記の比を変数とする数式を用いてE D X係数とF T I R係数を決定するようによい。

20

【 0 0 3 4 】

係数決定部 1 4 によりE D X係数とF T I R係数が求められると、統合一致度算出部 1 5 は、各参照物について求められたE D Xデータに基づく一致度にE D X係数を乗じ、F T I Rデータに基づく一致度にF T I R係数を乗じて、これらの和を求める。これが各参照物の統合一致度となる。

【 0 0 3 5 】

ここで、同一の異物について、E D Xデータに基づいて一致度が高い参照物をリストアップしたもの（図 4 で「E D X」を選択したときの結果に相当）とF T I Rデータに基づいて一致度が高い参照物をリストアップしたもの（図 4 で「F T I R」を選択したときの結果に相当）の一例を図 6 に並べて表示する。この例ではE D Xデータに基づく結果とF T I Rデータに基づく結果が一致していない。

30

【 0 0 3 6 】

図 7 は、異物が無機物と有機物の混合物であると判定されE D X係数とF T I R係数がいずれも0.5である場合について、図 6 の一致度を統合して統合一致度を求め、統合一致度が高い順に参照物をリストアップした例である。このように、2つのデータに基づいてそれぞれ一致度を求めた結果が一致しない場合でも、本実施例の試料解析システムではそれらを統合した一致度（統合一致度）を算出し、両データに基づく単一の結果を使用者に提示することができる。

【 0 0 3 7 】

40

本実施例の試料解析システムでは、コンプトン散乱線の強度とレイリー散乱線の強度比に基づいて、異物が無機物、有機物、それらの混合物のいずれであるかを判定し、無機物である場合には無機物の分析に適したE D Xの測定データに重み付けする係数を、有機物である場合には有機物の分析に適したF T I Rの測定データに重み付けする係数を用いて統合一致度を算出するため、異物の特性に応じて統合一致度を適切に求めることができる。

【 0 0 3 8 】

各参照物の統合一致度が求められると、照合結果出力部 1 6 は、図 5 の画面に各参照物のF T I Rデータを確認するための「F T I Rデータ」ボタンを追加した画面を表示部 3 0 に表示する。各ボタンを選択したときの動作は上述したとおりである。

50

【 0 0 3 9 】

図 5 を参照して説明したとおり、本実施例の試料解析システムでは、上記のようにして得た異物の解析結果（異物との一致度が高い参照物に関するデータ）をレポートとして印刷することができる。図 8 に、印刷するレポートの項目やレイアウトを設定するための画面例を示す。画面左側の表示項目欄 6 1 には、レポートに表示させることが可能な項目が列挙されている。レポートに表示可能な項目には、参照物名、異物との一致度、該一致度の順位、参照物に関するコメント（参照物の採取日時、測定日時等の情報）、カメラ画像、EDX 画像、EDX 測定条件、EDX による定量分析結果、EDX プロファイル、FTIR 測定条件、及び FTIR プロファイル（スペクトル） が含まれる。使用者がこれら項目の 1 つを画面右側のレイアウト編集領域 6 2 にドラッグアンドドロップで移動させると、レイアウト欄に当該項目を表示する領域が示される。レイアウト欄に表示された領域の位置と大きさを適宜に調整することによりレポートの出力レイアウトを決定する。このとき、EDX プロファイル、あるいは FTIR プロファイル を選択すると、異物と参照物の EDX プロファイルや FTIR プロファイル が異なる色で重畳表示され、使用者はレポート上で異物と参照物の測定データがどの程度一致しているかを確認することができる。

10

【 0 0 4 0 】

次に、図 3 における「ライブラリ」を選択したときの動作を説明する。

図 9 は、使用者が「ライブラリ」を選択したときに表示される画面の一例である。この画面に表示されたライブラリー一覧 7 1 により、使用者は複数の参照物に関するどのような情報や測定データが記憶部 1 1 に保存されているかを確認することができる。各項目について、参照物の測定データ等が保存されている場合にはチェックマークが表示され、保存されていない場合には「未登録」と表示される。また、カメラ画像が複数登録されている場合にはチェックマークとともにその枚数が表示される。

20

【 0 0 4 1 】

使用者がライブラリー一覧 7 1 において未登録の項目を選択すると、測定データ等のファイルを指定させる画面が表示され、使用者がファイルを指定すると該ファイルがデータベースに登録される。また、チェックマークが付された項目を選択すると、既にデータベースに登録されている内容を確認したり、コメントを編集したりすることができる。また、新規登録ボタン 7 2 を選択するとデータベースに新たな参照物の測定データ等を追加登録する画面に移行する。また、画面下部に表示されたボックスと検索ボタン 7 3 を通じてデータベースに登録されている参照物を検索することができる。

30

【 0 0 4 2 】

本実施例の試料解析システムでは、異物の特定に使用する EDX データや FTIR データ以外の測定データ（例えば電子顕微鏡像など）や過去に出力したレポート情報なども記憶部 1 1 に保存し、参照物 ID を介して EDX データや FTIR データ等と対応付けて管理することもできる。これにより、様々な目的で取得した参照物の測定データ等を本実施例の試料解析システムで一元的に管理することができる。

【 0 0 4 3 】

上記実施例は一例であって、本発明の趣旨に沿って適宜に変更することができる。上記実施例ではデータ処理部 1 0 の記憶部 1 1 内にデータベースを備えた構成としたが、各データベースをデータ処理部 1 0 に接続された別の装置内に設けたり、あるいはデータ処理部 1 0 がネットワークを介して接続可能なオンラインデータベースとしたりすることもできる。

40

【 0 0 4 4 】

上記実施例では試料解析システム 1 に EDX 4 0 及び FTIR 5 0 を接続しているが、必ずしもこれら分析装置を接続する必要はない。また、無機物の解析に適した分析装置には、EDX のほかにも原子吸光光度計や誘導結合プラズマ発光分析装置などがあり、これらの装置を用いて取得した異物の測定データを EDX データに代えて、あるいは追加して用いることもできる。さらに、有機物の解析に適した分析装置として、ラマン分光光度計を用いて上記実施例と同様に構成することもできる。

50

【符号の説明】

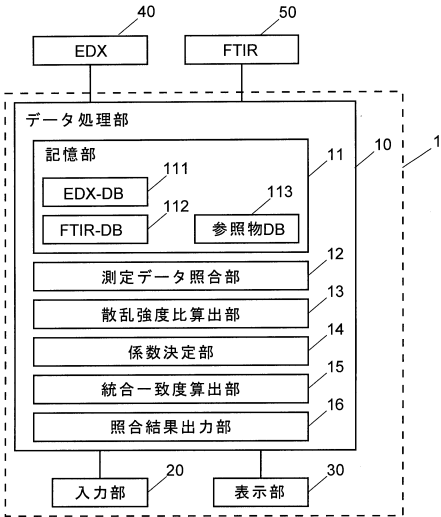
【 0 0 4 5 】

- 1 0 ...データ処理部
- 1 1 ...記憶部
- 1 1 1 ...エネルギー分散型蛍光X線データベース
- 1 1 2 ...フーリエ変換赤外分光データベース
- 1 1 3 ...参照物データベース
- 1 2 ...測定データ照合部
- 1 3 ...散乱強度比算出部
- 1 4 ...係数決定部
- 1 5 ...統合一致度算出部
- 1 6 ...照合結果出力部
- 2 0 ...入力部
- 3 0 ...表示部
- 4 0 ...エネルギー分散型蛍光X線分析装置
- 5 0 ...フーリエ変換赤外分光光度計
- 6 1 ...表示項目欄
- 6 2 ...レイアウト編集領域
- 7 1 ...ライブラリー一覧
- 7 2 ...新規登録ボタン
- 7 3 ...検索ボタン

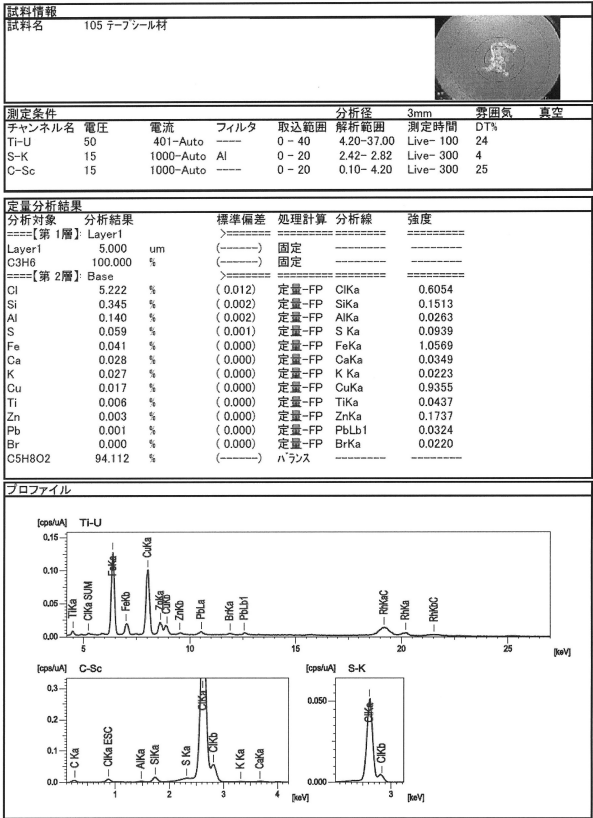
10

20

【図 1】



【図 2】



【図 3】

統合解析を始めます。

解析 ライブラリ キャンセル

【図 4】

どの解析を実施しますか。

EDX FTIR 統合 キャンセル

【図 5】

EDX解析の結果は以下の通りです。

印刷 次の解析へ 登録 終了

印刷 ID

■ 10 1位: 参照物_7 (一致度: 0.998)
EDXデータ コメント EDX写真 カメラ画像

■ 03 2位: 参照物_5 (一致度: 0.996)
EDXデータ コメント EDX写真 カメラ画像

■ 10 3位: 参照物_1 (一致度: 0.986)
EDXデータ コメント EDX写真 カメラ画像

□ 10 4位: 参照物_6 (一致度: 0.977)
EDXデータ コメント EDX写真 カメラ画像

□ 10 5位: 参照物_3 (一致度: 0.975)
EDXデータ コメント EDX写真 カメラ画像

【図 6】

順位	EDX		FTIR	
	参照物	一致度	参照物	一致度
1	参照物_7	0.998	参照物_2	0.999
2	参照物_5	0.996	参照物_5	0.895
3	参照物_1	0.986	参照物_6	0.886
4	参照物_6	0.977	参照物_7	0.862
5	参照物_3	0.975	参照物_3	0.858
6	参照物_2	0.965	参照物_10	0.856
7	参照物_4	0.954	参照物_9	0.835
8	参照物_8	0.938	参照物_1	0.828
9	参照物_9	0.919	参照物_8	0.814
10	参照物_10	0.881	参照物_4	0.799

【図 7】

順位	参照物	統合一致度
1	参照物_2	0.982
2	参照物_5	0.946
3	参照物_6	0.932
4	参照物_7	0.930
5	参照物_3	0.917
6	参照物_1	0.907
7	参照物_9	0.877
8	参照物_4	0.877
9	参照物_8	0.876
10	参照物_10	0.869

【図 8】

表示項目 レポート出力レイアウト

61 参照物名 参照物名 コメント 順位 一致度

一致度 カメラ画像 EDX画像

順位 コメント EDX測定条件

コメント EDXプロフィール

カメラ画像 EDX定量結果

EDX画像 FTIR測定条件

EDX測定条件 FTIRプロフィール

EDX定量分析結果

EDXプロフィール

FTIR測定条件

FTIRプロフィール

62

【図 9】

ライブラリー一覧

参照物ID	参照物名	EDX			FTIR		その他	
		EDX写真	EDXデータ	コメント	FTIRデータ	コメント	カメラ画像	コメント
1	AAAA_1	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
2	AAAA_2	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
3	AAAA_3	✓	✓	✓	未登録	未登録	✓	✓
4	AAAA_4	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
5	AAAA_5	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
6	BBBB_1	未登録	未登録	未登録	✓	✓	✓	✓
...

新規登録 検索

72 73

○ 名称 ○ ID ○ フリーワード

71

 フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
G 0 1 N 21/65	(2006.01)	G 0 1 N 21/65	
G 0 1 N 21/63	(2006.01)	G 0 1 N 21/63	Z

(56)参考文献 米国特許出願公開第 2 0 1 2 / 0 0 7 2 1 2 2 (U S , A 1)
 特開 2 0 0 7 - 0 0 3 5 3 2 (J P , A)
 特表 2 0 1 5 - 5 1 9 5 7 1 (J P , A)
 米国特許出願公開第 2 0 1 3 / 0 3 2 1 7 9 3 (U S , A 1)
 米国特許出願公開第 2 0 1 3 / 0 2 0 8 8 5 0 (U S , A 1)

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)
 G 0 1 N 2 1 / 0 0 - 2 1 / 0 1、2 1 / 1 7 - 2 1 / 7 4、
 2 3 / 0 0 - 2 3 / 2 2 7 6
 G 0 1 J 3 / 0 0 - 3 / 5 2