

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載
 【部門区分】第6部門第1区分
 【発行日】令和5年9月4日(2023.9.4)

【公開番号】特開2022-186254(P2022-186254A)
 【公開日】令和4年12月15日(2022.12.15)
 【年通号数】公開公報(特許)2022-231
 【出願番号】特願2021-94383(P2021-94383)
 【国際特許分類】

G 0 1 N 23/2055(2018.01)

10

G 0 1 N 23/207(2018.01)

【F I】

G 0 1 N 23/2055 3 2 0

G 0 1 N 23/207

【手続補正書】

【提出日】令和5年8月25日(2023.8.25)

【手続補正1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0023

20

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0023】

【図1】本発明の定量分析システムを示す概略図である。

【図2】本発明の処理装置を示すブロック図である。

【図3】検量線の作成方法を示すフローチャートである。

【図4】本発明の定量分析の方法を示すフローチャートである。

【図5】(a)、(b)それぞれ部分積算測定における結果の積算および規格化の方法を示す概略図である。

【図6】セメント製造プラントを示す概略図である。

30

【図7】(a)、(b)それぞれ全パターンおよび一部のX線回折プロファイルを示す図である。

【図8】(a)~(c)それぞれ実施例におけるスケール因子、検量線および変換後の定量値を示す表およびグラフである。

【図9】(a)~(c)それぞれ検量線法による積分強度(counts)、検量線および変換後の定量値を示す表およびグラフである。

【図10】リートベルト法による定量値を示す表である。

【図11】(a)、(b)それぞれ検量線とは異なるマトリックスを用いたときの実施例におけるスケール因子、その検量線を用いた変換後の定量値を示す表である。

【図12】(a)、(b)それぞれ検量線とは異なるマトリックスを用いたときの積分強度(counts)、その検量線を用いた変換後の定量値を示す表である。

40

【図13】部分積算測定および通常測定(単一測定)を用いたときの実施例における定量値を示す表である。

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0051

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0051】

指定受付部360は、条件の指定を受け付ける。条件の指定は、ユーザによる入力やA

50

Iによって選択決定されることによって行われる。例えば、表示装置A2のディスプレイに、条件の指定をユーザに入力させるためのユーザインターフェース（UI）画面を表示し、ユーザは当該画面にて入力を求められている項目に対して、入力装置を操作して情報を入力する。これにより、あらかじめ複数の条件で被検成分の定量が想定される場合でも、指定された条件に応じて準備された適切な検量線が選択され、高精度な定量が可能になる。

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0060

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0060】

また、添加した被検成分のパターンがデータベースの情報から計算された理論回折プロファイルと相違する場合は、添加した被検成分のみの回折プロファイルを取得して、解析パラメータの初期値に代えてもよい。被検成分のスケール因子は、被検成分の含有量によって異なるため、検量線が規定する範囲の中間に位置する被検試料の含有率の試料の解析条件をテンプレートにしておくことが好ましい。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0064

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0064】

（定量分析の方法）

図4は、定量分析の方法を示すフローチャートである。この定量分析の方法は、プログラムの実行により行われる。ソフトウェアが起動された処理装置300では、事前に検量線を作成した標準試料ごとに最適な測定および解析の条件が設定されている。まず、処理装置300は、ユーザによる分析対象試料の種類を選択および測定開始の指示を受け付ける（ステップS111）。分析対象試料の種類は、予め製品の種類に応じて標準試料情報記憶部330に入力候補として記憶されており、ユーザはいずれかを選択することにより設定できる。これを受け、用いられる測定条件のテンプレート、WPPF解析のテンプレートおよび被検成分の検量線が設定される。そして、分析に使用する検量線を作成するために測定した標準試料と同じ条件で測定するために、測定条件のテンプレートの情報が装置制御部へ転送され、分析対象試料の測定が開始される。

【手続補正5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0085

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0085】

[実施例]

実際にマトリックスとして標準のセメントに標準試料のライムを混合し、上記の定量分析（実施例）、検量線法およびWPPF法のそれぞれによりライムの含有率を算出することで、本発明によりライムの定量値の精度と正確さが向上することを確認した。実施例およびWPPF法の解析には、SmartLab StudioII（リガク製、以下SLSII）を用いた。また、検量線法での積分強度の算出には、積分強度計算システム（リガク製）を用いた。

【手続補正6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0088

10

20

30

40

50

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0088】

一方、従来の検量線法により試料1～7中のライムを定量した。積分強度を算出（繰り返し測定）し、得られた積分強度の平均値を用いて検量線を作成した。そして、この検量線を用いて試料1～7の定量分析を行った。図9（a）～（c）は、それぞれ検量線法による積分強度(counts)、含有率の変換に用いた検量線および変換後の定量値を示す表およびグラフである。いずれの結果においてもマトリックス成分が同一の場合は添加量通りの定量結果が得られている。

10

20

30

40

50