(19)国家知识产权局

(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 112067639 B
(45)授权公告日 2024.11.26

(21)申请号 202010435645.3

(22)申请日 2020.05.21

(65)同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 112067639 A

(43)申请公布日 2020.12.11

(30)优先权数据
2019-108639 2019.06.11 JP

(73)专利权人 株式会社岛津制作所
地址 日本京都府

(72)发明人 冈本康之 铃木桂次郎

(74)专利代理机构 北京林达刘知识产权代理事务所(普通合伙) 11277
专利代理师 刘新宇

(51)Int.Cl.
G01N 23/207(2006.01)

(56)对比文件
KR 20160128053 A,2016.11.07

审查员 杨涛

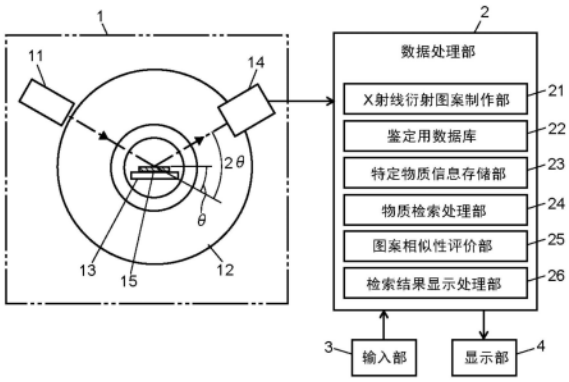
权利要求书1页 说明书7页 附图3页

(54)发明名称

分析装置以及X射线衍射装置

(57)摘要

一种分析装置以及X射线衍射装置,实现作业环境测定中的石棉、游离硅酸的分析的高效化。X射线衍射装置具备:数据库,收录有多个已知物质的标准X射线衍射图案;候选提取部,对通过分析试样而得到的实测X射线衍射图案与数据库中收录的各物质的标准X射线衍射图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准X射线衍射图案的物质来作为鉴定候选;显示处理部,制作配置有显示由候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息的第一显示栏、针对在数据库中收录的物质中的预先决定的特定的一种或多种物质来显示包含候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息的第二显示栏、以及显示实测X射线衍射图案的波形显示栏的显示画面,并显示在显示部中。



CN 112067639 B

1.一种分析装置,利用通过对试样进行分析而得到的波形图案来鉴定所述试样中包含的物质,所述分析装置具备:

数据库,其收录有多个已知物质的标准波形图案;

候选提取部,其对通过分析试样而得到的实测波形图案与所述数据库中收录的各物质的标准波形图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准波形图案的物质来作为鉴定候选;以及

显示处理部,其制作在同一画面上配置有第一显示栏和第二显示栏的显示画面并使显示部显示该显示画面,其中,所述第一显示栏显示由所述候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息,所述第二显示栏针对在所述数据库中收录的物质中的、预先决定的特定的一种或多种物质来显示包含所述候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息。

2.一种X射线衍射装置,利用通过对试样进行X射线衍射分析而得到的X射线衍射图案来鉴定所述试样中包含的物质,所述X射线衍射装置具备:

数据库,其收录有多个已知物质的标准X射线衍射图案;

候选提取部,其对通过分析试样而得到的实测X射线衍射图案与所述数据库中收录的各物质的标准X射线衍射图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准X射线衍射图案的物质来作为鉴定候选;以及

显示处理部,其制作在同一画面上配置有第一显示栏、第二显示栏以及波形显示栏的显示画面并使显示部显示该显示画面,其中,所述第一显示栏显示由所述候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息,所述第二显示栏针对在所述数据库中收录的物质中的、预先决定的特定的一种或多种物质来显示包含所述候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息,所述波形显示栏显示所述实测X射线衍射图案。

3.根据权利要求2所述的X射线衍射装置,其特征在于,

所述特定的一种或多种物质是被分类为石棉和游离硅酸的物质。

分析装置以及X射线衍射装置

技术领域

[0001] 本发明涉及一种用于鉴定试样中包含的特定物质的分析装置以及X射线衍射装置。

背景技术

[0002] 为了防止在产生粉尘的工作环境下进行作业的劳动者的健康损害,在我国有义务针对可能产生健康损害的特定物质实施工作环境测定。在这样的物质中的游离硅酸和石棉(Asbestos)的定性分析和定量分析中利用了X射线衍射装置(参照非专利文献1、2)。

[0003] 在X射线衍射装置中,向粉体等试样照射规定波长的X射线,用检测器检测由于属于构成试样的原子的电子而发生散射或干涉从而产生的衍射X射线。此时的衍射角度取决于物质的晶格面间隔,衍射强度取决于原子或分子的排列状态及原子种类。因此,如果向试样照射已知波长的X射线,并对此求出从试样得到的衍射X射线的衍射角度与X射线强度的关系,则能够获得在规定的衍射角度附近能够观测到X射线强度的峰值的X射线衍射图案。将通过这样的实测得到的X射线衍射图案与已知物质的X射线衍射图案进行比较,由此能够鉴定试样中包含的物质(参照专利文献1等)。

[0004] 在非专利文献2等所记载的实际的X射线衍射装置中,通过在计算机上运行的鉴定用软件来评价实测X射线衍射图案与数据库中收录的各种物质的标准X射线衍射图案的相似性,被判定为相似性高的物质作为鉴定候选以一览列表的方式显示在显示部的画面上。用户例如在画面上确认该鉴定候选的物质的X射线衍射图案与实测X射线衍射图案的一致性,进而基于与作为分析对象的试样有关的知识和经验等来鉴定试样中包含的物质,也就是判断该鉴定候选是否为正确的物质。

[0005] 现有技术文献

[0006] 专利文献

[0007] 专利文献1:日本特开2018-21836号公报

[0008] 非专利文献

[0009] 非专利文献1:“作業環境測定ガイドブック1鉱物性粉じん・石綿・RCF(作业环境测定指南1矿物性粉尘、石棉、RCF)”,公益社团法人日本作业环境测定协会,平成30年9月25日第六版发行

[0010] 非专利文献2:“XRD-6100作業環境中の遊離珪酸および石綿(アスベスト)の定性・定量分析に最適。(XRD-6100最适合作业环境中的游离硅酸和石棉(Asbestos)的定性和定量分析。))”,[线上],株式会社岛津制作所,[2019年3月26日检索],因特网<URL:http://www.an.shimadzu.co.jp/surface/x d/use04.htm>

发明内容

[0011] 发明要解决的问题

[0012] 然而,在以往的X射线衍射装置中存在如下问题。

[0013] 一般情况下,X射线衍射中的用于物质鉴定的数据库中收录的物质的数量非常多。例如,在石棉等的鉴定中使用的代表性粉末X射线衍射用数据库即“ICDD PDF-2 2018”的矿物子文件中收录了约3万种庞大数量的物质。另外,在这样的庞大数量的物质的X射线衍射图案中,波形形状类似的情况也相当多。因此,通常情况下,作为在鉴定用软件中的自动检索的结果,显示出相当多的候选。

[0014] 在对建筑材料等粉体试样中含有的石棉和游离硅酸进行分析的情况下,在该试样中含有这些目标物质以外的多种夹杂物。因此,在物质候选的列表中,除了目标物质以外,还能够列举出多种夹杂物的候选。用户需要一边针对这些多个候选一个一个地确认X射线衍射图案一边进行鉴定作业,因此该作业非常繁琐且费时。另外,如果对列表中列举的物质的候选的数量进行限制,则还存在石棉和游离硅酸等目标物质的候选从列表中漏掉的情况。

[0015] 另外,特别是石棉,通常即使在从建筑工地排出的粉尘等中含有石棉,但多数情况下其含量也很少。因此,在X射线衍射中,赋予物质特征的三强射线(按相对强度从高到低的顺序截止到第三个的峰值)往往很小,因此,与数据库中收录的正确的物质的标准X射线衍射图案的相似性变低,有时难以鉴别为是石棉。

[0016] 本发明是为了解决上述问题而完成的,其目的在于提供如下一种分析装置以及X射线衍射装置:在基于X射线衍射图案等的分析结果来鉴定石棉和游离硅酸等特定物质时,能够减少用户的繁杂的操作来高效且高精度地鉴定物质。

[0017] 用于解决问题的方案

[0018] 为了解决上述问题而完成的本发明所涉及的分析装置的第一方式是一种利用通过对试样进行分析而得到的波形图案来鉴定所述试样中包含的物质的分析装置,其具备:

[0019] 数据库,其收录有多个已知物质的标准波形图案;

[0020] 候选提取部,其对通过分析试样而得到的实测波形图案与所述数据库中收录的各物质的标准波形图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准波形图案的物质来作为鉴定候选;以及

[0021] 显示处理部,其制作配置有第一显示栏和第二显示栏的显示画面并显示在显示部中,其中,所述第一显示栏显示由所述候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息,所述第二显示栏针对在所述数据库中收录的物质中的、预先决定的特定的一种或多种物质来显示包含所述候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息。

[0022] 为了解决上述问题而完成的本发明所涉及的X射线衍射装置的第一方式是一种利用通过对试样进行分析而得到的X射线衍射图案来鉴定所述试样中包含的物质的X射线衍射装置,其具备:

[0023] 数据库,其收录有多个已知物质的标准X射线衍射图案;

[0024] 候选提取部,其对通过分析试样而得到的实测X射线衍射图案与所述数据库中收录的各物质的标准X射线衍射图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准X射线衍射图案的物质来作为鉴定候选;以及

[0025] 显示处理部,其制作配置有第一显示栏、第二显示栏以及波形显示栏的显示画面并显示在显示部中,其中,所述第一显示栏显示由所述候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息,所述第二显示栏针对在所述数据库中收录的物质中的、预先决定的特定的

一种或多种物质来显示包含所述候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息,所述波形显示栏显示所述实测X射线衍射图案。

[0026] 此外,在本发明所涉及的X射线衍射装置中,预先决定的特定的一种或多种物质能够设为被分类为石棉和游离硅酸的物质。

[0027] 发明的效果

[0028] 在本发明所涉及的第一方式的分析装置或X射线衍射装置中,预先确定为在第二显示栏中显示例如石棉和游离硅酸等作为检查对象的目标物质,由此即使在提取出多个与这样的目标物质相比波形图案(X射线衍射图案)的相似性更高的夹杂物的候选物质的情况下,用户也能够在第二显示栏中确认目标物质的相似性评价的结果。由此,能够根据目标物质的相似性评价的结果,根据需要迅速地执行波形图案的一致性的确认,且能够以较少的工夫高效地进行目标物质的鉴定、也就是确认在试样中是否包含目标物质。

[0029] 另外,如果实测波形图案与目标物质的标准波形图案的相似性相对低且在第一显示栏中显示该情况,则即使在相当下位地显示或由于显示数量的制约而不显示的情况下,根据本发明,由于目标物质显示在第二显示栏中,因此也能够高精度地进行鉴定。另外,对于目标物质以外的夹杂物等,也能够基于第一显示栏中显示的信息,与以往同样地进行详细的鉴定作业。

附图说明

[0030] 图1是作为本发明的一个实施方式的X射线衍射装置的主要部分的结构图。

[0031] 图2是本实施方式的X射线衍射装置的自动检索结果的显示处理的说明图。

[0032] 图3是示出本实施方式的X射线衍射装置的自动检索结果的显示画面的一例的图。

[0033] 附图标记说明

[0034] 1:X射线衍射测定部;11:X射线照射部;12:测角仪;13:试样支架;14:X射线检测部;15:试样;2:数据处理部;21:X射线衍射图案制作部;22:鉴定用数据库;23:特定物质信息存储部;24:物质检索处理部;25:图案相似性评价部;26:检索结果显示处理部;3:输入部;4:显示部;100:检索结果显示画面;101:轮廓显示栏;102:处理后图表显示栏;103:特定化合物列表显示栏;104:一般化合物列表显示栏。

具体实施方式

[0035] 以下,参照附图对作为本发明的一个实施方式的X射线衍射装置进行说明。

[0036] 图1是本实施方式的X射线衍射装置的主要部分的结构图。

[0037] 如图1所示,本实施方式的X射线衍射装置具备X射线衍射测定部1、数据处理部2、输入部3以及显示部4。

[0038] X射线衍射测定部1包括X射线照射部11、测角仪12、试样支架13以及X射线检测部14,X射线照射部11包括X射线管。试样15被设置为其表面成为测角仪12的中心。测角仪12使试样支架13和X射线检测部14分别转动,使得保持从X射线照射部11向试样15入射的X射线与试样15的表面(结晶面)所成的角度θ始终等于试样15的表面与朝向X射线检测部14的射出X射线所成的角度θ的关系。如果进行这样的角度扫描并求出旋转角度2θ与X射线强度的关系,则能够得到X射线衍射图案。

[0039] 此外,X射线衍射测定部1也可以不是这种角度扫描型的X射线衍射装置,而是能量分散型的X射线衍射装置。

[0040] 数据处理部2包括X射线衍射图案制作部21、鉴定用数据库22、特定物质信息存储部23、物质检索处理部24、图案相似性评价部25、检索结果显示处理部26等来作为功能块。鉴定用数据库22使用与作为分析对象的物质的种类等对应的数据库即可,在对石棉和游离硅酸进行分析时,作为鉴定用数据库22,例如能够使用上述的“ICDD PDF-2 2018”的矿物子文件。在图1中,鉴定用数据库22包括在数据处理部2中,但也可以是在数据处理部2的外部设置鉴定用数据库22使得能够从数据处理部2进行访问的结构。

[0041] 此外,数据处理部2的实体通常是安装有专用的数据处理用软件的个人计算机,通过使该软件在计算机上运行,能够实现上述各功能块的功能。

[0042] 接着,参照图1和图2对使用本实施方式的X射线衍射装置分析石棉和游离硅酸的情况下的特征性的处理动作进行说明。图2是本实施方式的X射线衍射装置的自动检索结果的显示处理的说明图。

[0043] 在X射线衍射测定部1中,对作为分析对象的试样15执行X射线衍射,由X射线检测部14得到的数据被输入到数据处理部2。在数据处理部2中,X射线衍射图案制作部21制作将横轴设为衍射角度、将纵轴设为X射线强度的X射线衍射图案的波形图。进而,X射线衍射图案制作部21在该波形图中按照规定的峰值检测算法执行峰值检测,求出与检测到的各峰值对应的线峰值。线峰值的位置表示衍射角度,线峰值的高度表示该衍射角度下的X射线强度。

[0044] 物质检索处理部24依次读出鉴定用数据库22中收录的化合物的信息,由图案相似性评价部25将与各化合物对应的标准X射线衍射图案同通过上述实测得到的X射线衍射图案进行比较,按照规定的算法计算出表示波形形状或线峰值的图案的相似性的指标值(以下称为“相似度”)。相似性越高,相似度为越大的值。在以往的X射线衍射装置中,例如在收录于鉴定用数据库22的所有化合物中选择相似度为规定阈值以上的化合物来作为候选物质,按照相似度从大到小的顺序进行列表化并显示在显示部4的画面上。与此相对地,在本实施方式的装置中,实施如下的特征性的处理。

[0045] 如图2的(a)所示,在鉴定用数据库22中,对于庞大数量的化合物,收录有化学式等关联信息、标准X射线衍射图案等信息。另一方面,在特定物质信息存储部23中存储有在被收录于鉴定用数据库22的化合物中与石棉及游离硅酸的分析对应地预先指定的特定化合物的信息。该特定物质信息存储部23中存储的信息只要能够与收录在鉴定用数据库22中的信息建立关联即可,因此也可以仅存储例如化合物名称或者用于确定各化合物的编号(作为一例,为在后述的图3中记载的卡编号)。或者,也可以如图2的(b)所示,对于指定的特定化合物,存储与收录在鉴定用数据库22中的信息相同的信息。

[0046] 此外,上述特定化合物根据石棉和游离硅酸的分析等的分析目的不同而不同,因此,例如本装置的制造商或提供数据处理用软件的制造商按每个分析目的预先确定特定化合物即可。在该情况下,优选的是,当用户通过使用与分析目的相应的应用软件等来间接或直接地选择分析目的时,自动选择适合该分析目的的特定化合物。另外,也可以是,用户能够重新指定特定化合物,或者删除或追加已经登记的特定化合物的一部分。

[0047] 作为一例,在对石棉和游离硅酸进行分析的情况下,将非专利文献1中记载的化合

物定为特定化合物即可。具体而言,作为被分类为游离硅酸的化合物(物质),包括石英(Q)、方英石(Cr)、磷石英(Tr)等。另外,作为被分类为石棉的化合物(物质),包括温石棉(Chr)、青石棉(Cro)、茶石棉(Amo)、透闪石(Tre)、阳起石棉(Act)、直闪石棉(Ant)、海泡石(Se)等。

[0048] 与以往的装置同样地,物质检索处理部24和图案相似性评价部25将与收录在鉴定用数据库22中的各化合物对应的标准X射线衍射图案同实测X射线衍射图案进行比较,按照规定的算法计算出波形形状或线峰值的图案的相似度。因而,按鉴定用数据库22中收录的每种化合物求出相似度。

[0049] 检索结果显示处理部26制作如图2的(c)所示的检索结果显示画面100。在检索结果显示画面100中配置有轮廓显示栏101、处理后图表显示栏102、特定化合物列表显示栏103以及一般化合物列表显示栏104。在轮廓显示栏101中显示通过实测得到的X射线衍射图案的波形图(轮廓)。由于该轮廓是在由物质检索处理部24执行处理之前得到的,因此当在检索结果显示画面100中指定作为鉴定处理对象的试样等时,在轮廓显示栏101中显示轮廓。

[0050] 在特定化合物列表显示栏103中显示一览地示出与上述特定化合物有关的化合物关联信息和相似度的列表。此外,如果由物质检索处理部24进行的处理未结束,则不求出相似度,但由于特定化合物列表显示栏103中显示的列表中的化合物已确定,因此也可以在如上所述那样在轮廓显示栏101中显示轮廓的同时,在特定化合物列表显示栏103中显示除相似度的信息以外还记载有其他化合物关联信息的列表。

[0051] 在一般化合物列表显示栏104中,针对在鉴定用数据库22中收录的所有化合物中相似度为规定阈值以上的化合物来显示一览地示出化合物关联信息和相似度的列表。在由物质检索处理部24进行的处理结束并求出相似度之前不确定该列表中显示的化合物。因此,在由物质检索处理部24进行的处理结束并求出相似度的时刻以后显示该列表。

[0052] 另外,在处理后图表显示栏102中显示根据实测X射线衍射图案计算出的线峰值的图表、由用户在特定化合物列表显示栏103和一般化合物列表显示栏104所显示的列表中指定的化合物的标准X射线衍射图案的线峰值图表、作为计算基于上述实测的线峰值图表与标准线峰值图表之差所得到的结果的峰值差图表、所有被判断为含有的化合物的峰值图表的叠加等。在用户详细地确认作为检索结果而被提取出的候选物质的X射线衍射图案来进行鉴定化合物的作业时使用这些图表。

[0053] 当通过物质检索处理部24和图案相似性评价部25针对鉴定用数据库22中收录的各化合物(例如图2的(a)中的化合物A、B、C、…)求出X射线衍射图案的相似度时,检索结果显示处理部26接收X射线衍射图案的相似度,在所有化合物中选择相似度为规定阈值以上的化合物作为候选物质,按照相似度从大到小的顺序制作列表,并显示在一般化合物列表显示栏104中。

[0054] 与此同时,检索结果显示处理部26针对特定物质信息存储部23中存储的各化合物(例如图2的(b)中的化合物a、b、c、…)选出由物质检索处理部24和图案相似性评价部25计算出的相似度,制作特定化合物的列表并显示在特定化合物列表显示栏103中。或者,如上所述,在轮廓显示栏101中显示轮廓的同时在特定化合物列表显示栏103中显示有列表的情况下,在该列表中追加各化合物的相似度。

[0055] 由此,在对石棉和游离硅酸进行分析的情况下,包含与石英、方英石、磷石英、温石

棉、青石棉、茶石棉、透闪石、阳起石棉、直闪石棉、海泡石等用户所关注的化合物有关的化合物关联信息和X射线衍射图案的相似度来作为信息的列表与除此以外的化合物的列表分开地显示在特定化合物列表显示栏103中。在特定化合物列表显示栏103中显示的列表中，可以按照相似度的值从高到低的顺序重新排列各化合物的顺序，或者也可以与相似度的大小无关地按照预先决定的顺序排列化合物。总之，对于试样中含有的量为微量且实测X射线衍射图案与标准X射线衍射图案的相似性低那样的化合物，也在特定化合物列表显示栏103中的列表中显示该化合物的化合物信息和相似度。

[0056] 图3是示出实际的检索结果显示画面100的一例的图。在检索结果显示画面100中的各显示栏101～104中分别显示有如上述那样的图表或列表。列表中的R是相当于相似度的值。

[0057] 这样，当用户通过利用输入部3进行点击操作等而在特定化合物列表显示栏103所显示的列表中或者在一般化合物列表显示栏104所显示的列表中指定一个化合物时，检索结果显示处理部26在处理后图表显示栏102中显示根据所指定的该化合物的标准X射线衍射图案得到的线峰值图表、作为计算该线峰值图表与根据实测X射线衍射图案得到的线峰值图表之差所得到的结果的峰值差图表。用户通过确认这些图表，能够详细地研究在试样中是否含有例如在特定化合物列表显示栏103所显示的列表中的特定化合物。

[0058] 另一方面，在一般化合物列表显示栏104所显示的列表中，与还包括石棉和游离硅酸以外的化合物在内的各种化合物有关的化合物关联信息和相似度按照该相似度从高到低的顺序进行显示。因而，也能够与以往同样地进行例如针对建筑材料的主要物质等试样中包含的夹杂物的鉴定作业。在不需要对石棉和游离硅酸以外的化合物进行分析的情况下，忽略一般化合物列表显示栏104中显示的列表即可。

[0059] 此外，也可以是，物质检索处理部24和图案相似性评价部25优先计算特定物质信息存储部23中存储的各化合物的标准X射线衍射图案与实测X射线衍射图案的相似度，检索结果显示处理部26将其结果显示在特定化合物列表显示栏103中的列表中，之后，针对收录在鉴定用数据库22中的各化合物计算X射线衍射图案的相似度。由此，能够迅速地确认被分类为石棉和游离硅酸的特定化合物的检索结果。

[0060] 此外，上述实施方式是本发明的一例，即使在本发明的主旨的范围内适当进行修改、变更、追加也包含在本申请的权利要求书的范围内，这是显而易见的。

[0061] 例如，在上述实施方式的说明中，在作业环境测定中的石棉和游离硅酸的分析中使用了X射线衍射装置，但也能够考虑在产品的品质管理等其他领域的分析中使用X射线衍射装置。在产品的品质管理的情况下，选择作为管理对象或作为报告对象的一种或多种化合物来作为特定化合物即可，由此能够实现品质管理的作业效率的改善。

[0062] 另外，上述实施方式是将本发明所涉及的分析装置应用于X射线衍射装置的实施方式，但本发明也能够应用于如下的其他分析装置：通过分析试样来获取表示某些波形形状的图表，例如X射线吸收光谱、吸光光谱、质谱或色谱，将其波形形状或峰值的位置等与已知物质的标准图表进行比较并评价相似性，基于其结果来鉴定物质。

[0063] [各种方式]

[0064] 上述例示性的实施方式是以下方式的具体例，这对于本领域技术人员来说是显而易见的。

[0065] 本发明所涉及的分析装置的第一方式是一种利用通过对试样进行分析而得到的波形图案来鉴定所述试样中包含的物质的分析装置,其具备:

[0066] 数据库,其收录有多个已知物质的标准波形图案;

[0067] 候选提取部,其对通过分析试样而得到的实测波形图案与所述数据库中收录的各物质的标准波形图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准波形图案的物质来作为鉴定候选;以及

[0068] 显示处理部,其制作配置有第一显示栏和第二显示栏的显示画面并显示在显示部中,其中,所述第一显示栏显示由所述候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息,所述第二显示栏针对在所述数据库中收录的物质中的、预先决定的特定的一种或多种物质来显示包含所述候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息。

[0069] 另外,本发明所涉及的X射线衍射装置的第一方式是一种利用通过对试样进行X射线衍射分析而得到的X射线衍射图案来鉴定所述试样中包含的物质的X射线衍射装置,其具备:

[0070] 数据库,其收录有多个已知物质的标准X射线衍射图案;

[0071] 候选提取部,其对通过分析试样而得到的实测X射线衍射图案与所述数据库中收录的各物质的标准X射线衍射图案的相似性进行评价,提取表示相似性高的标准X射线衍射图案的物质来作为鉴定候选;以及

[0072] 显示处理部,其制作配置有第一显示栏、第二显示栏以及波形显示栏的显示画面并显示在显示部中,其中,所述第一显示栏显示由所述候选提取部提取出的一个或多个鉴定候选的信息,所述第二显示栏针对在所述数据库中收录的物质中的、预先决定的特定的一种或多种物质来显示包含所述候选提取部中的相似性的评价结果的该物质的信息,所述波形显示栏显示所述实测X射线衍射图案。

[0073] 根据第一方式所涉及的分析装置或X射线衍射装置,预先根据分析目的等适当地确定特定的一种或多种物质,由此即使在提取出多种与这种特定物质相比波形图案(X射线衍射图案)的相似性更高的夹杂物的候选物质的情况下,用户也能够根据显示在第二显示栏中的信息来确认特定物质的相似性评价的结果。由此,能够以较少的工夫高效地进行目标物质的鉴定、也就是以较少的工夫高效地确认在试样中是否包含该目标物质。即,能够减轻用户的用于试样中的物质鉴定的作业负担,能够缩短作业时间。

[0074] 另外,由于试样中的目标物质的量是微量的,因此即使在波形图案(X射线衍射图案)的相似性低的情况下,也能够将这样的物质无遗漏地作为物质的候选来进行鉴定作业。由此,能够以高精度进行试样中的物质鉴定。当然,对于目标物质以外的夹杂物等,也能够与以往同样地进行详细的鉴定作业。

[0075] 关于本发明的第二方式所涉及的X射线衍射装置,在第一方式的X射线衍射装置中,所述特定的一种或多种物质能够设为被分类为石棉和游离硅酸的物质。

[0076] 根据该第二方式,能够高效地进行作业环境测定中的石棉和游离硅酸的定性分析和定量分析。

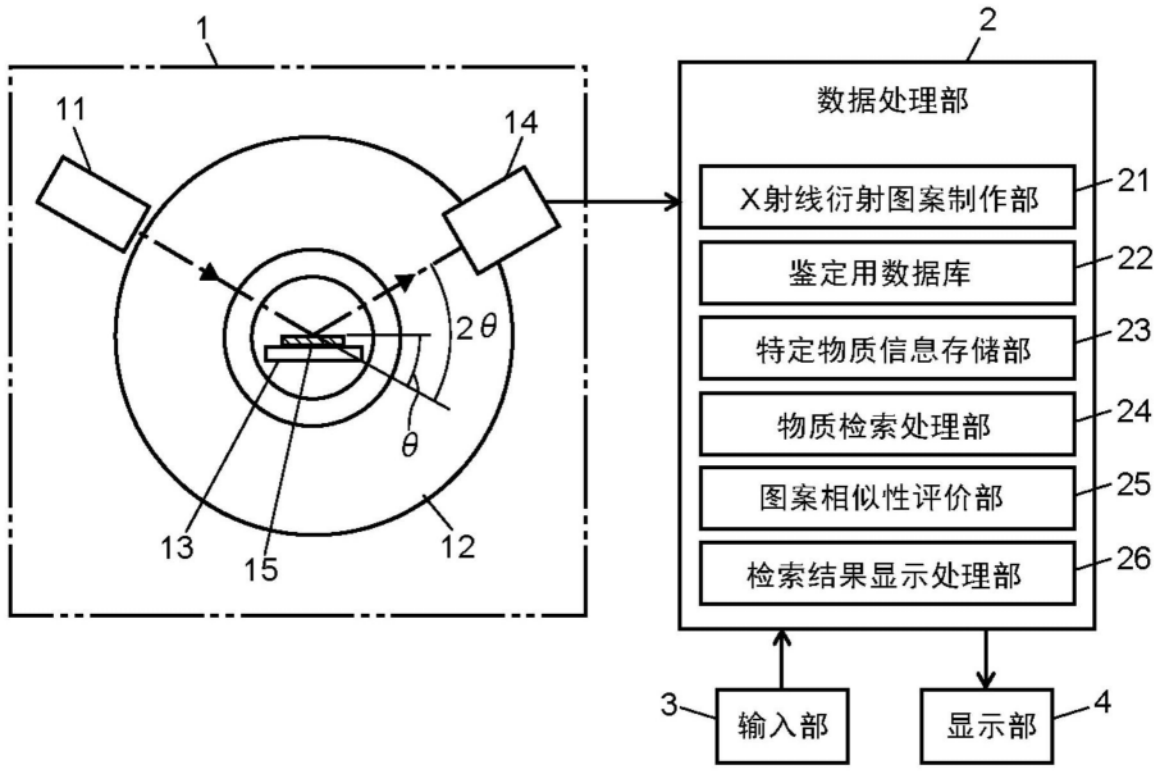

1
11
14
2θ
θ
13
15
12
2
数据处理部
X射线衍射图案制作部
21
鉴定用数据库
22
特定物质信息存储部
23
物质检索处理部
24
图案相似性评价部
25
检索结果显示处理部
26
3
输入部
显示部
4

图1

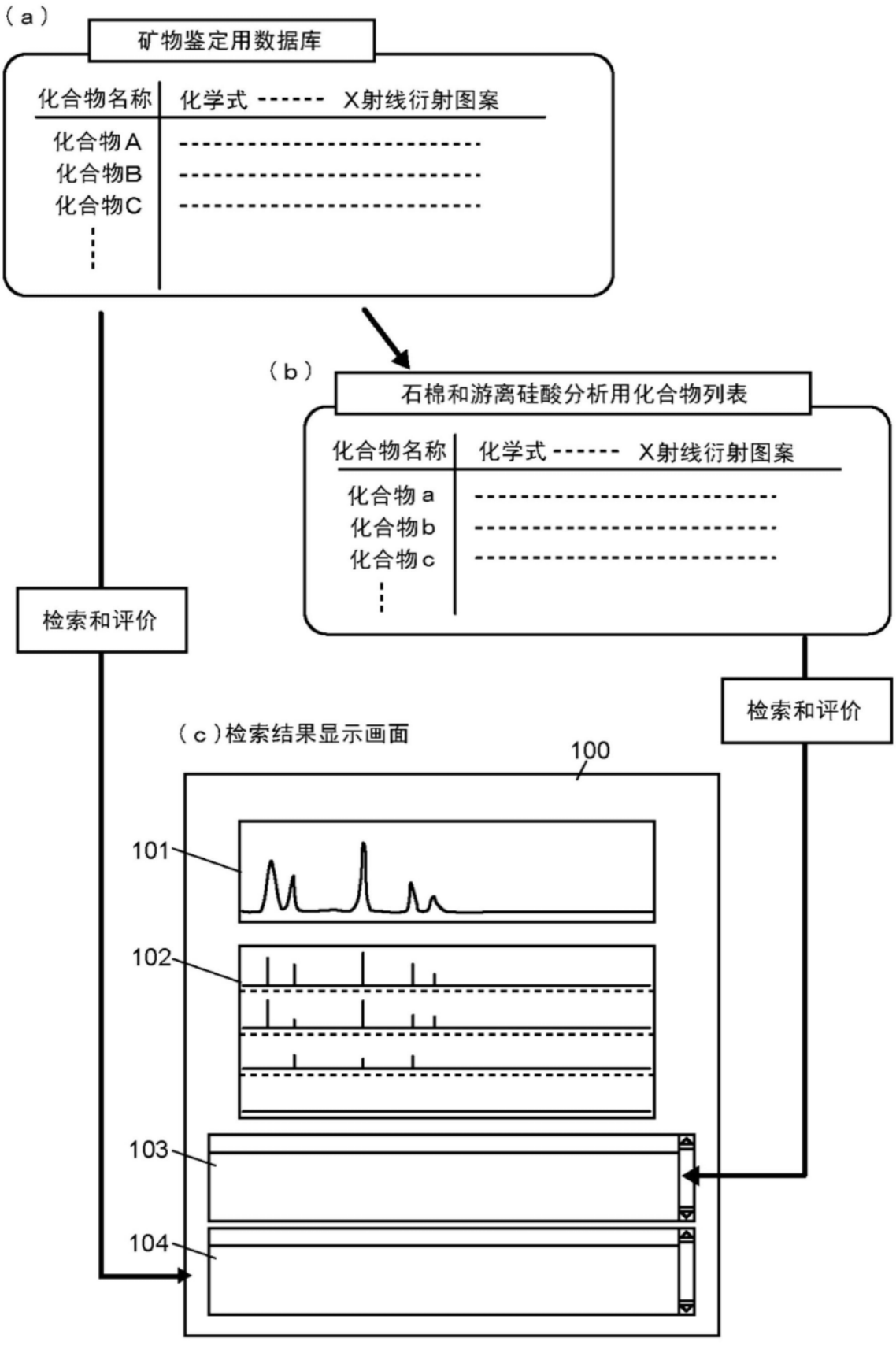

（a）
矿物鉴定用数据库
化合物名称
化学式 ------ X射线衍射图案
化合物A
化合物B
化合物C
（b）
石棉和游离硅酸分析用化合物列表
化合物名称
化学式 ------ X射线衍射图案
化合物a
化合物b
化合物c
检索和评价
检索和评价
（c）检索结果显示画面
100
101
102
103
104

图2

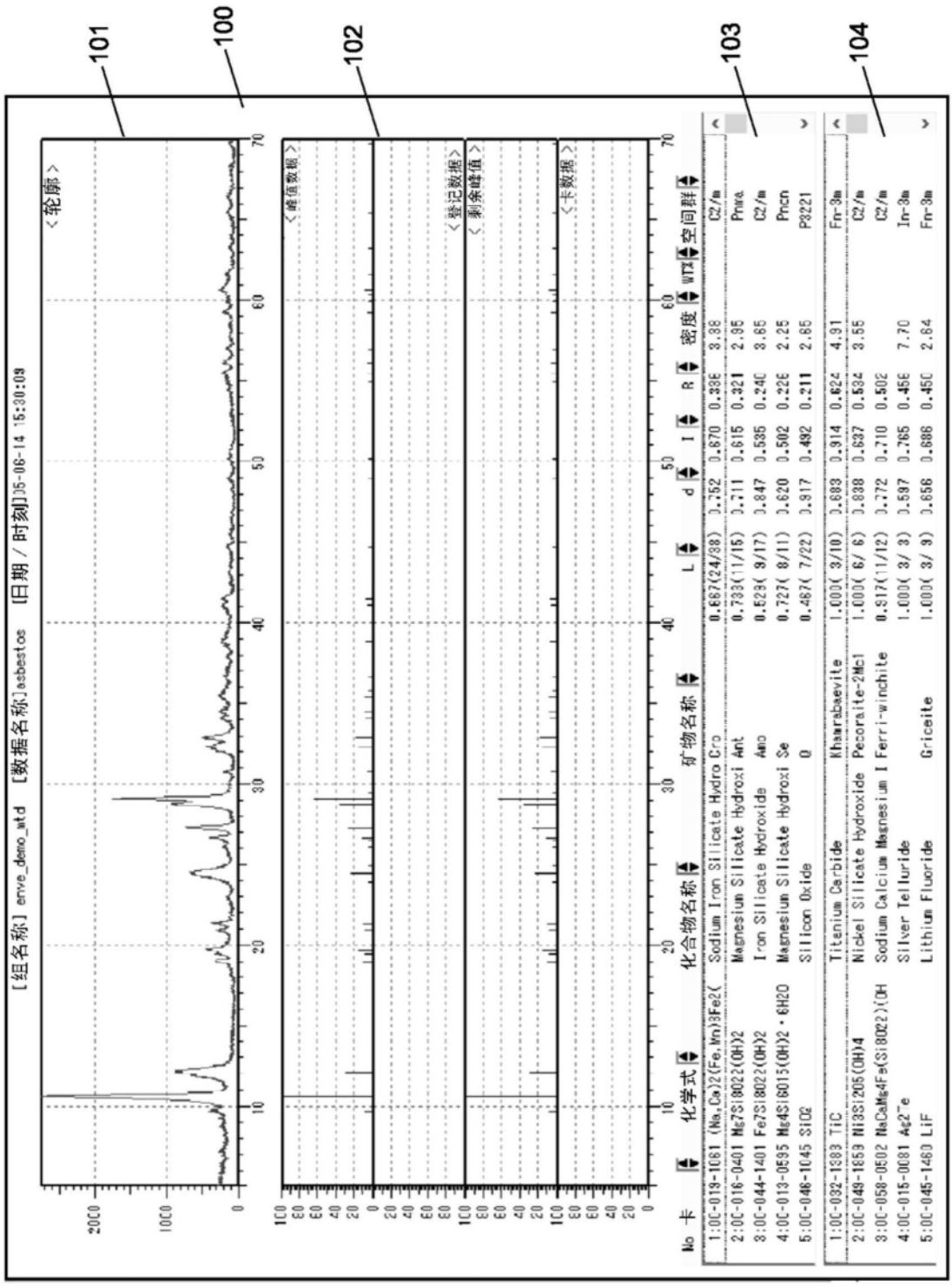

101
100
102
103
104
[组名称] erve_demo_wtd [数据名称]asbestos [日期/时刻]05-06-14 15:30:09
<轮廓>
<峰值数据>
<登记数据>
<剩余峰值>
<卡数据>
No 卡 化学式 化合物名称 矿物名称 L d I R 密度 WTA 空间群
1:00-019-1061 (Na,Ca)2(Fe,Mn)3Fe2(Sodium Iron Silicate Hydro Cro 0.667(24/38) 3.752 0.870 0.386 3.38 C2/m
2:00-016-0401 Mg7Si8022(OH)2 Magnesium Silicate Hydroxi Ant 0.733(11/15) 3.711 0.615 0.321 2.95 Pnma
3:00-044-1401 Fe7Si8022(OH)2 Iron Silicate Hydroxide Amp 0.529(9/17) 3.847 0.585 0.240 3.85 C2/m
4:00-013-0595 Mg4Si6015(OH)2・6H2O Magnesium Silicate Hydroxi Se 0.727(8/11) 3.620 0.502 0.226 2.25 Pncn
5:00-046-1045 SiO2 Silicon Oxide 0 0.467(7/22) 3.817 0.492 0.211 2.65 P3221
1:00-032-1383 TiC Titanium Carbide Khamrabaevite 1.000(3/10) 3.683 0.914 0.624 4.91 Fm-3m
2:00-049-1659 Ni3Si2O5(OH)4 Nickel Silicate Hydroxide Pecoraite-2Mc1 1.000(6/ 6) 3.838 0.637 0.534 3.55 C2/m
3:00-058-0502 NaCaMg4Fe(Si8O22)(OH Sodium Calcium Magnesium I Ferri-winchite 0.817(11/12) 3.772 0.710 0.502 C2/m
4:00-015-0081 Ag2Te Silver Telluride 1.000(3/ 3) 3.597 0.765 0.456 7.70 Im-3m
5:00-045-1460 LiF Lithium Fluoride Griceite 1.000(3/ 9) 3.658 0.686 0.450 2.64 Fm-3m

图3