SPECTRO ANALYTICAL INSTRUMENTS
ホワイトペーパー



シンプル、簡単、パワフルな蛍光X線分析ソフトウェア

はじめに

分光計は、物理学や化学の難解な原理を応用した複雑な技術に依存しています。しかし、だからといって分光計の操作が複雑であるべきというわけではありません。

例えば、広く使用されているエネルギー分散型蛍光X線分析（ED-XRF）装置では、試料中の各元素の分析結果がパーセント、または100万分の1（ppm）で表示されます。ユーザーは、これらの数値をさらに解釈して、結論を出したり、プロセスの決定を行ったりします。このような定量的な分析指標は、強力なスペクトロメーターが行う複雑で困難な分析に必要とされることがよくあります。しかし、化学薬品、化粧品、一次金属製造、プラスチック、石油・燃料の製造や研究分析など、他の多くのアプリケーションでは、正確な定量は実際には必要ありませんし、有用でもありません。

多くの場合、高性能の分析装置に求められるのは、"はい、この合金等級です "という材料識別（PMI）のような定性的な結果だけです。また、ユーザーが必要とする唯一の結果は、事前に設定されたデータベース内の最も近い一致です： 「それは（おそらく）サプライヤーCのものです。

本稿では、スピード、簡便性、柔軟性、使いやすさ、分析力を兼ね備えたこれらのニーズに応えるために開発されたツール、SPECTRO Analytical Instruments社のIdentソフトウェアに焦点を当てます。

[ED-XRF分析装置SPECTRO XEPOS、SPECTROCUBE、SPECTRO MIDEX、SPECTROSCOUTには、Identを組み込んだXRF Analyzer Proソフトウェアが標準で付属しています。Identは旧機種へのアップグレードも可能です。ご相談ください。]



識別：従来の方法

XRF分光計のソフトウェアは、通常、測定されたスペクトル内の元素からの信号を決定することにより、サンプル内に存在する元素を識別します。同定は、計算された濃度に基づいて行うことができます。しかし、サンプルに多くの元素が含まれていたり、検出可能な元素が有意な濃度で含まれていない場合、同定はかなり複雑になります。各濃度を別のサンプル中の同じ元素の濃度と比較することで、1つのサンプルの特定のソースを見つけることは、大変な作業となり、時間がかかり、エラーも生じます。

もう一つのアプローチは、そのサンプルから測定された全スペクトルの主成分分析を行うことです。しかし、スペクトル間のわずかな違いしか観察されないこともあり、同定は困難です。

そのため、一般的に、識別／比較分析はかなりの時間と労力を消費する可能性があります。さらに悪いことに、最も関連性の高い情報を抽出し、解釈する際に、ユーザーに困難をもたらす可能性があります。

分光計メーカーは、ソフトウェア内に「フィンガープリント」機能を開発することで、これらの問題への対処をある程度進めてきました。

倫理的に問題のある出所からの原料を排除しようとするバイヤーが、金のドーレ・サンプルを迅速に分析して、特定の鉱山や地域で産出されたものであることを特定する必要があった場合です。蛍光*X*線分析装置は、*20*の元素と*120*の標準物質のアドホックキャリブレーションを使用して主成分分析を実行し、各サイトのシグネチャーを開発しようとしました。この方法によって、サンプル・グループをある程度クラスタリングし、共通の起源点を示唆することができました。

1. https://www.lbma.org.uk/articles/geoforensic-passport-to-validate-origin-of-dor%C3%A9

しかし、この最初のステップではすべてのケースで信頼できる結果が得られない可能性があることを考慮し、この方法には、より複雑で高価なMC-ICP-MSアナライザーを使った、より精巧な予備テストが含まれています。加えて、サンプル組成のわずかな変化は、蛍光X線フィンガープリントの段階で信頼できる同定を妨げる可能性があります。

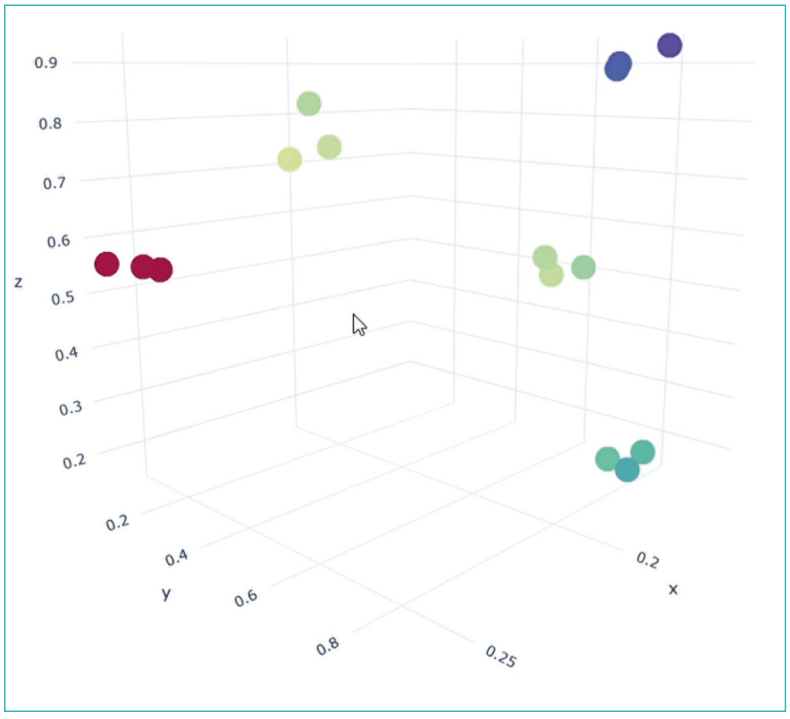
識別：新たなアプローチ

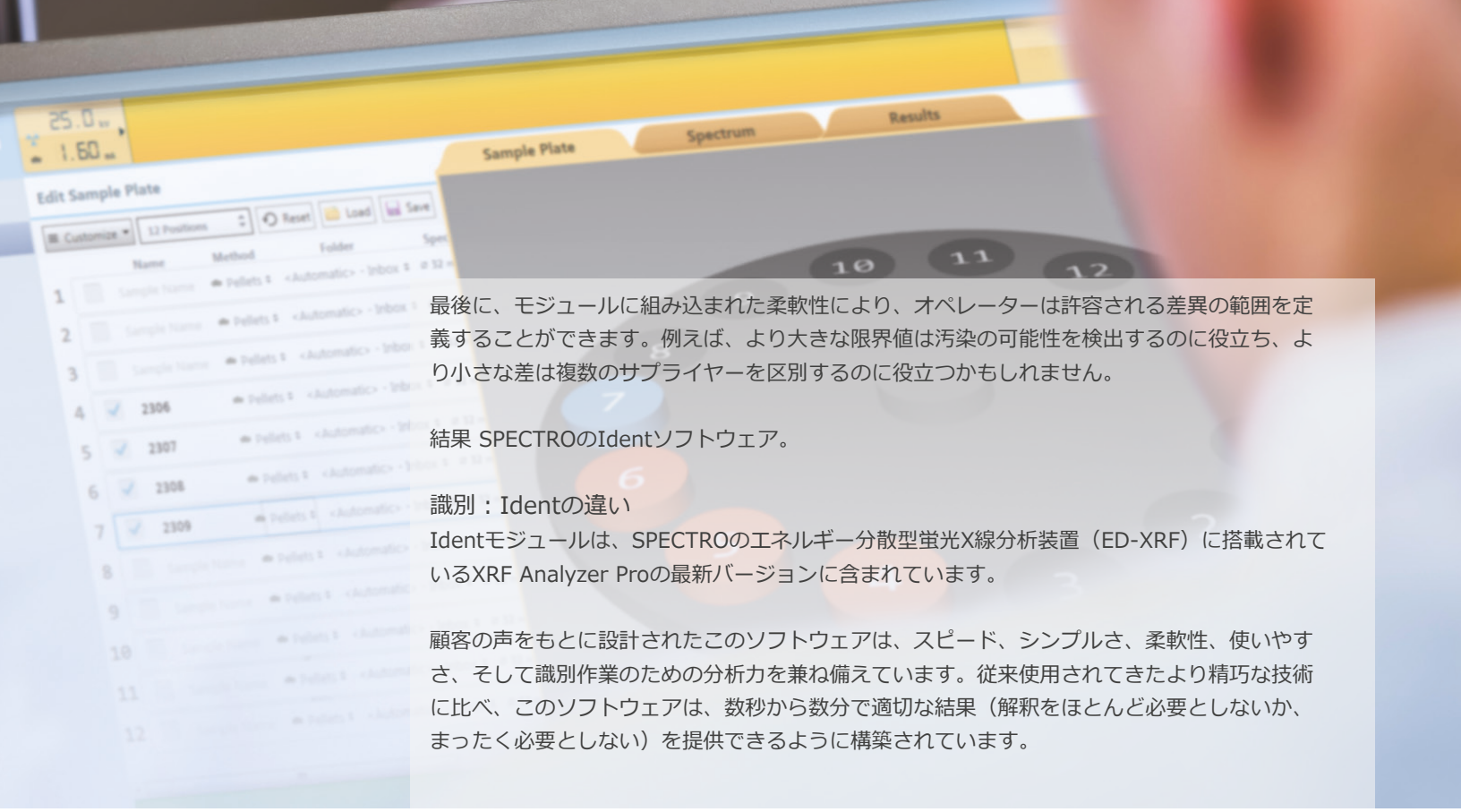
SPECTROの専門家は、既存のアプローチに磨きをかけることにしました。そして、XRFアナライザー・プロの新しいモジュールを設計し、ユーザーが求める簡単で強力な同定と比較を実現するための機能強化を図りました。

古典的な主成分分析では、スペクトル全体を見るが、微小な重要な違いは考慮しません。また、サンプル中のいくつかの元素が、もともと濃度に大きな広がりがある場合にも問題が生じます。

パスポート法のような解決策から逃れられるかもしれない小さな違いも検出するために、ソフトウェアはスペクトルのすべての定義された領域からの情報をデータベース内のサンプルと比較します。クラスタリング結果の分解能を高めるためには、パラメータは多ければ多いほどよいです（図参照）。各スペクトル内の複数の領域を使用することで、より多くの関連パラメータが得られます。これにより、サンプルを特徴付ける100以上のポイントが可能になり、異なるソースやサプライヤーを特定するのに理想的です。

*3*つのパラメータを使用した例を示すグラフィック（のみ）





最後に、モジュールに組み込まれた柔軟性により、オペレーターは許容される差異の範囲を定義することができます。例えば、より大きな限界値は汚染の可能性を検出するのに役立ち、より小さな差は複数のサプライヤーを区別するのに役立つかもしれません。

結果 SPECTROのIdentソフトウェア。

識別：Identの違い

Identモジュールは、SPECTROのエネルギー分散型蛍光X線分析装置（ED-XRF）に搭載されているXRF Analyzer Proの最新バージョンに含まれています。

顧客の声をもとに設計されたこのソフトウェアは、スピード、シンプルさ、柔軟性、使いやすさ、そして識別作業のための分析力を兼ね備えています。従来使用されてきたより精巧な技術に比べ、このソフトウェアは、数秒から数分で適切な結果（解釈をほとんど必要としないか、まったく必要としない）を提供できるように構築されています。

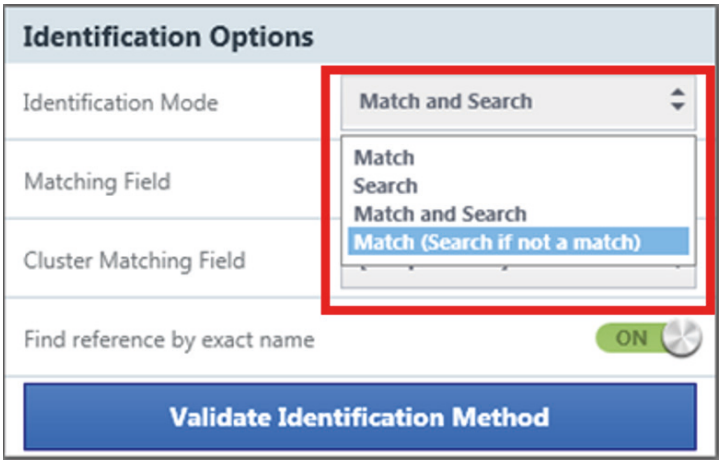
ユーザーは、元素濃度（%、ppm、mg/m2、...）を示す定量的な結果を必要とせず、材料の同定やデータベース内の最も近い一致のような定性的な結果を必要とする場合にIdentを使用します。

Identの使用要因は以下の通りです：

- **認証標準試料の校正は不要。**ユーザーはデータベースを構築するために関連する初期サンプルを供給するだけで、ソフトウェアは測定されたスペクトルを調べ、各サンプルのフィンガープリントを作成します。今後、新しく導入される全てのサンプルは、迅速にフィンガープリントを作成し、データベースの残りの部分と比較することができます。
- **簡単な検証。** 各行列の各要素について各校正を検証する代わりに、ユーザーはデータベースの全サンプルを互いにチェックし、結果を見るだけでよいです。
- **正答か一致。**ユーザーの好みに応じて、Identはポジティブな材料識別または一致/不一致の結果を提供することができます。
- **差異チェック。**関心領域と最大偏差係数を最適化することができます。そのため、ソフトウエアはスペクトルの最も大きな差異を持つ領域を表示することができます。
- **幅広い元素の範囲。**Identは、蛍光X線分析で直接検出可能なフッ素（F）からウラン（U）までの標準範囲の元素以外の元素を含むサンプルを実際に識別することができます。例えば、全スペクトルを調べることで、後方散乱放射からの情報を使用して、上記の元素範囲の濃度が有意でないサンプル、例えば酸素（O）を含むサンプルと含まないサンプルを区別することができます。
- **高い信頼性。**SPECTROのスペクトロメーターは、クリーンなスペクトルを提供します。これにより、より信頼性の高い同定と照合が可能になります。

Identの機能

このソフトウェアは、ユーザーにいくつかの簡単な識別オプションを提供し
ます。:



一致

- 関連するすべてのサンプルをデータベースに分析
- 指定されたサンプル名で新しいサンプルを分析し、元のサンプルとの一致を確認
- ソフトウェアが参照サンプルとの一致／不一致を表示

これは例えば、同じ品目番号を持つ2つのサンプルが同一であるかどうかを判定するために使用できます。

検索

- すべての関連サンプルをデータベースに分析
- 新しいサンプルの分析
- ソフトウェアが参照サンプルを検索し、最も近い一致を特定

これは、データベース内の類似サンプルのリストを、マッチングの質が高い順に返します。

検索と一致

- 上記の両方の組み合わせ

最も一般的に使用されるモードで、未知のサンプルをデータベースから既知のサンプルと照合し、ヒットする可能性のある他のサンプルのリストを測定ウィンドウに表示します。

一致しない場合は検索

- 上記の両方の組み合わせ

これにより、未知のサンプルがデータベースから既知のサンプルと照合されます。一致しない場合は、ソフトウェアが検索を行い、ヒットする可能性のある他のサンプルを特定します。

上記すべてにおいて、一致が確認された場合、分析ソフトウェアでプレート番号の横にチェックマークが表示され、即座に識別することができます。

前述したように、ポジティブな一致が見つかったかどうかにかかわらず、ソフトウェアはスペクトルの最も差の大きい領域を表示することもできます。これは、汚染物質の可能性を特定するなどの目的に使用できます。(例を参照)。



酸化鉄を主成分とする赤色顔料のマンガン（Mn）信号の違いは、汚染を示す。

Identの追加機能：自動プログラム検索

機能性の追加要素として、Identは自動プログラムファインダー（APF）と組み合わせることができ、手動によるメソッド選択の必要性をなくすことができます。

APFソフトウェア・サブモジュールは、データベース内の指定された元素との最初の一致に基づき、その一致を特定の検量線方法に関連付けることができます。その後、ユーザーは自動マトリックスマッチング検量線を使用して、適用する正しい分析メソッドを決定するオプションがあります。これにより、定量分析に誤った分析法を選択するリスクを低減できます。

例えば、コンプライアンス・スクリーニングでは、このソフトウェアはサンプルがプラスチック、スチール、真鍮、ザマック合金などであるかを判断し、コンプライアンス・テストに最適な方法を選択することができます。石灰石、ボーキサイト、長石など、溶融ビーズとして調製された酸化性原料については、最適な方法を選択することができます。また、燃料の識別では、ディーゼルまたはバイオディーゼル分析を自動的に選択することができます。これらすべてのアプリケーションにおいて、オペレーターはメソッドを手動で選択する必要がありません。

Identアプリケーション

Identは、環境、社会、コーポレート・ガバナンス（ESG）、ジオフォレンジック、サプライチェーンの完全性、出荷材料のバッチ管理など、多くのアプリケーションに適しており、明確な利点があります。

Identの機能は、シンプルなユーザーソリューションを提供することができます：

- **エンジンの摩耗：航空学。**誰も認証された基準破片粒子を製造していません。そのため、航空会社がどの航空機エンジン部品がエンジン摩耗のホットスポットであるかを特定したい場合、その特定ソフトウェアは元素指紋を使用して、部品合金のリストから最も摩耗しやすい原因を特定します。



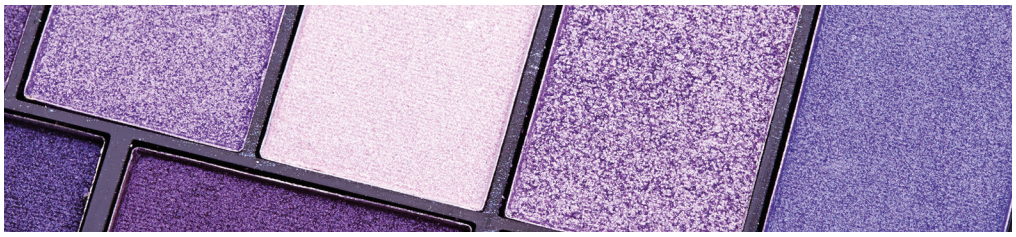
- **受入検査：コークス**　有用な特性（発熱量、灰分など）によるコークスパイルの選別を簡素化するために、一次鉄鋼メーカーは異なるサプライヤーのサンプルを識別する必要があります。そのため、このソフトウェアはサンプルのスペクトルを比較し、様々な領域の違いにフラグを立てることで、各サプライヤー、そして多くの場合、個々のバッチの識別を可能にします。



- **Geoforensics：宝石。**　紛争鉱物について懸念がある場合、バイヤーはソフトウェアを使って簡単な2D図を描きます。例えばモザンビークで採掘された宝石とタンザニアで採掘された宝石を、クロムや鉄の指紋濃度を比較することで区別することができます。



- **入荷検査：化粧品。** 化粧品会社の検査官は、わずかな元素濃度の違いなど気にも留めないかもしれない。しかし、入荷する原料において、酸化チタン（TiO2）と酸化亜鉛（ZnO）の違いを知ることは非常に重要であります。個人的な検査ではうまくいきません。両者は事実上同じ白い粉だからです。しかし、Identは最短時間で原料を識別することができます。



- **出荷検査：医薬品。**製薬メーカーは、出荷する医薬品について細心の注意を払わなければなりません。輸液の出荷バッチにおいて、バッグの中の液体は塩化ナトリウム（NaCl）か塩化カリウム（KCl）か？Identを使えば、製品に含まれる何百もの成分のデータベースを構築し、計算された濃度ではなく、単純に一致する出荷サンプルをチェックすることができます。



- **コンプライアンス検査：石油化学。**燃料サンプルはディーゼルかバイオディーゼルでしょうか？Identは、酸素を含まないディーゼルの鉱油と比較して、酸素を含むバイオディーゼルのエステルを分析することで、簡単なPMIチェックを行うことができます。繰り返しますが、蛍光X線分析装置は、元素濃度を得るために酸素を直接測定することはできません。



結論

複雑な解釈を必要とする精巧な分析を行うことなく、迅速で簡単な回答を求めて蛍光X線分析計を利用するユーザーは、新世代の洗練された同定ツールにアクセスできるようになりました。

例えば、SPECTROのIdentソフトウェアは、試料の同定、複数の試料間の簡単な照合、分析法の自動選択を可能にします。これらの機能により、さまざまな分析アプリケーションにおいて、迅速かつ問題なく、適切な結果を得ることができます。

お問合せ

装置の見積りを依頼

装置のデモを依頼

リソースライブラリ

www.spectro.jp

GERMANY
SPECTRO Analytical Instruments GmbH
Boschstrasse 10
D-47533 Kleve
Tel. +49.2821.892.0
spectro.sales@ametek.com

U.S.A.
SPECTRO Analytical Instruments Inc.
50 Fordham Rd
Wilmington 01887, MA
Tel. +1 800 548 5809
+1 201 642 3000
spectro-usa.sales@ametek.com

CHINA
AMETEK Commercial
Enterprise (Shanghai) CO., LTD.
Part A1, A4 2nd Floor Building No. 1 Plot Section
No. 526 Fute 3rd Road East; Pilot Free Trade Zone
200131 Shanghai
Tel. +86.400.022.7699
spectro-china.sales@ametek.com

Subsidiaries:
▶**FRANCE:** Tel. +33.1.3068.8970, spectro-france.sales@ametek.com ▶**GREAT BRITAIN:** Tel. +44.1162.462.950, spectro-uk.sales@ametek.com
▶**INDIA:** Tel. +91.22.6196.8200, sales.spectroindia@ametek.com ▶**ITALY:** Tel. +39.02.94693.1, spectro-italy.sales@ametek.com
▶**JAPAN:** Tel. +81.3.6809.2405, spectro-japan.info@ametek.co.jp ▶**SOUTH AFRICA:** Tel. +27.11.979.4241, spectro-za.sales@ametek.com

SPECTRO operates worldwide and is present in more than 50 countries. For SPECTRO near you, please visit www.spectro.com/worldwide

© 2021 AMETEK Inc., all rights reserved, subject to technical modifications • D-21, Rev. 0 • Photos: SPECTRO, Adobe Stock
Registered trademarks of SPECTRO Analytical Instruments GmbH • SPECTRO: USA (3,645,267); EU (005673694); “SPECTRO”: EU (009693763); “SPECTRO XEPOS”: Germany (39851192), USA (2,415,185); „MIDEX”: EU (003131984), USA (2,864,548); „SPECTROSCOUT”: EU (10705424); SPECTROCUBE: EU (017937930), USA (1,448,336)