

SEA no.13 能谱匹配的介绍

1998.7

1. 前言

何为能谱匹配软件

预先将已测试好的原料样品的能谱登录到数据库中，然后在数据库中搜索与未知样品的能谱最接近的能谱的软件。

常用于以下情况

① 各种原料合金的判别

无需进行定量分析，仅仅10秒就可以判别SUS303和304。

无需进行定量值和规格值的比较，也可以进行钢种的判定。

② 良品和不良品的判别

通过对数据库中良品的能谱的比对，可以判别产品的好坏。

当有异物混入时，能谱发生变化，差异度则变大。差异度的判定结果是可以任意设定的，在变成规格外的差异度时，可将判定结果设置为「不一致」。另外，初期可将判定结果设置为，差异度20以下「一致」，200以下「几乎一致」，其以上表示「不一致」。此外，一次最多可以在数据库中登录200个能谱数据。

2. 匹配实例

2-1 合金素材 (Inconel)

把 Ni系原料合金标准样品登录到数据库里。将Inconel-825作为测量样品，用了10秒的测量时间进行匹配。匹配结果表明只有Inconel-825一致，其他的都不一致，从而可以得知搜索的结果是正确的。

| 数据库名 | 差异度 | 判定结果 |
|-------------|--------|------|
| INCONEL.825 | 5.3 | 一致 |
| INCONEL.800 | 722.4 | 不一致 |
| INCONEL.690 | 1172.6 | 不一致 |
| INCONEL.625 | 3022.6 | 不一致 |

2-2 碳酸钙 把碳酸

把碳酸钙导入数据库，在相同同碳酸钙样品中添加氯化钙制作出混合样品（CaCO₃:CaCl₂=4:1）然后 进行能谱匹配。

| (a) | | | (b) | | |
|------------------------|-----|------|------------------------|-------|------|
| 档案名 | 差异度 | 判定结果 | 档案名 | 差异度 | 判定结果 |
| CaCO ₃ .STD | 5.2 | 一致 | CaCO ₃ .STD | 149.2 | 几乎一致 |

(a)表示碳酸钙的匹配结果。差异度很小，判定结果也「一致」。

(b)表示混合氯化钙样品的匹配结果。差异度为149.4比较大，判定结果为「几乎一致」。（如想表示「不一致」，需要修改设定）当异物混入时，差异度变大，判定的结果也无法「一致」。另外，表示内容时，可以查出由于哪个元素的差异度大而导致全体的差异度变大。

| 项目 | 内容 |
|------|--------------------------|
| 光谱 | CaCO ₃ .STD |
| 评论 | |
| 测量时间 | 100.1sec |
| 有效时间 | 70.9sec |
| 照射径 | 3mm |
| 电压 | 50KV |
| 电流 | 60μA |
| 聚酯薄膜 | 无 |
| 差异度 | 149.384523 几乎一致 |
| | Cl:115.0, Ca:21.9, K:1.4 |

以上表格显示了氯化钙混合样品的匹配信息。从「差异度」项目可以看出，Cl（氯）占据整体差异度的八成左右，是差异度最大的元素。

3. 总结

如使用光谱匹配的功能，即使不进行定量分析，在数据库里比较一下就可以知道样品是何物。此外，判别良品・或不良品等的时候，进行常规测量时也很方便。