

川崎製鉄 技術研究所 鶴岡一夫, 北川 孟, 森本一三
片山道雄, 丸山英雄, 磯辺邦夫

1. 緒言 近來, 大容量コンピュータが普及するにつれて, 研究所における各種測定機器も, 測定精度の向上, 高能率化および省力化を目的として, コンピュータ制御されるものが多くなってきた。

当所においては, 数年前より, X線回折装置のコンピュータ処理システムを計画し, 昭和48年に, IBM-1800を用いたラボ・オート方式として完成したので, ここであらましを發表する。

2. システムの概要 このシステムは, 装置として, (1)逆極点図作成装置, (2)シュルツ反射法極点図作成装置, (3)完全極点図作成装置, (4)粉末試料回折装置, (5)応力測定装置の5機種をオンラインあるいはオフラインでコンピュータに接続している。これらの他に, 粉末試料回折装置により得られた情報(結晶面間隔: d および X線回折強度比: I/I_0) より ASTMカードの値と突合せて物質の同定を行なう検索プログラム, 完全極点図作成装置より得られる集合組織に関するデータを用いて三次元方位分布関数を求めるプログラムの2つを準備した。

測定装置は, 応力測定装置を除いてはすべて終夜運転が可能であり, 逆極点図作成装置, 粉末試料回折装置, 完全極点図作成装置の3機種は, オフライン方式を採り測定データはすべて紙テープに打出させ, 夜間コンピュータに読込ませて処理している。前者は, 測定試料が100個まで自動交換が可能であり, 一度装填すると24時間連続的に測定が行なわれる。シュルツ反射法極点図作成装置, 完全極点図作成装置はオンラインでコンピュータと結合され, 測定条件(回折格子面, α および β の間隔, 積算時間など)をコントロール・ボックスで設定し, コンピュータに転送すると, 装置のすべての動作がコンピュータとの対話で行なわれる。測定結果はプロッターによって, 極点図の形で得られる。シュルツ反射法極点図作成装置は, 最大6個まで試料の自動交換が出来, 1試料の測定時間は, $\alpha = 10^\circ$, $\beta = 5^\circ$ の間隔で測定した場合, プロッターによる作図の時間を合わせて, 約1.5 hr. である。完全極点図作成装置は, 透過法による測定と, 反射法による測定の両方を行なわなければならないが, この装置では両方式の切替えもコンピュータからの指令によって自動的に行なわれる。1試料の測定時間は, 前出と同一条件の場合, 作図時間も合わせて約2 hr. である。さらにこの装置は, 自動的に3つ回折面の極点図が連続して測定出来るので, 三次元分布関数算出のためのデータをパンチされたカードとして提供する。

未知物質同定のための検索プログラムは, Johnson-Vand のプログラムを, IBM-1800で実行出来るように改訂した。Roeの方法をプログラム化した三次元分布関数導出の計算は, 計算精度を高めるためにユニバック494で実行している。

3. システム導入の効果 定型化した測定業務の省力化および能率向上, さらに測定精度の向上を目的としてこのシステムを完成させ, 下記のような成果が得られた。

- (1) 従来, 熟練度が高い測定要員の行っていた業務が簡素化されるとともに, 大巾な省力化が達成された。
- (2) 終夜無人運転が可能なので, 能率が数倍に向上した。
- (3) デジタル処理による効果, 強度変動のチェック・プログラムの導入などにより, 誤差要因が減少した。
- (4) 回折強度はステップ・スキヤン, 分割サンプリングにより計数されるので, 強度の弱い場合は積算時間を長くするなどの処置をとることにより十分に測定精度を上げることが出来る。
- (5) 三次元分布関数算出など高度の計算が可能な形式で, 測定データ処理が行なわれる。