

卒業論文要旨

PIXE スペクトル解析ソフト PIXAN の移植

(環境計測) 岡田 芳文

1. はじめに

PIXE とは、Particle Induced X-ray Emission (荷電粒子誘導 X 線分析) のことである。加速させた荷電粒子を試料に照射し、その結果発生した元素固有のエネルギーを持つ特性 X 線を計測する。一般に、X 線の計測には Si(Li)半導体検出器が用いられ、多元素の特性 X 線を同時に検出する。よって得られるスペクトルは、複数の X 線ピークが重なり合った複雑なものになる。そこで、スペクトルから試料に含まれる元素の定量を行うにはコンピュータによる解析が必須となる。

PIXAN とは、スペクトルから含有元素の絶対濃度を求めるための PIXE スペクトル解析ソフトウェアである。1986 年、オーストラリア原子力委員会によって FORTRAN77 を用いて製作された。PIXE 研究者の間で広く使われているが、現在サポートはされていない。

本研究の目的は、PIXAN を C に移植することである。PIXAN はプログラム内部に、12 文字以上の名前のファイル入出力ができないなどの不自由な制限があること、エラーメッセージが表示されないといった問題点があった。また、パラメータの入力が全てキーボードからのコマンド操作であることなど、扱いにくく効率の悪いものであった。これらを改善する上で、言語仕様の古い FORTRAN77 から、C への移植を行うことにした。C で書くことによってプログラムの構造化が可能になり、後のプログラムの拡張、保守、移植が容易となる。また OS への対応力の向上、コンパイラの入手のしやすさなど、多くの利点を持つようになる。

移植後は問題点の改善を行い、パラメータ入力操作に関しては GUI を作成し操作性を向上させた。また、解析したスペクトルを表示させるためのグラフィック機能に関して、フリーのグラフィックツール『gnuplot』を用いた。

2. システム概要

2.1 開発環境

OS は、Microsoft Windows 2000

マシンは、SHARP Mebius PC-FJ120M (CPU : Celeron-450 MHz メモリ : 196 MB)

プログラミング言語は、C (コンパイラ : Borland C++ Compiler 5.5)

GUI 構築には、Perl / Tk (動作環境 : ActivePerl 5.6.1 built 638) を用いた。

2.2 PIXAN の構成

PIXAN は大きく分けて BATTY と THICK という、2つのプログラムで構成される。

BATTY : エネルギー校正や半値幅などのピーク形状を決定する初期パラメータ、解析する元素名などを入力し、測定したスペクトルとデータベース化された各元素のリファレンスピークとの最小二乗法を用いたフィッティングを行う。各

ピーク面積を算出し、解析したスペクトルとバックグラウンドを表示させる。

THICK : 試料の含有元素濃度とピーク面積の間には比例関係が成り立ち、その比例定数は照射荷電粒子量と各元素の X 線生成断面積で決まる。ただし試料に厚みがある場合、試料内部での照射荷電粒子の減速や発生した特性 X 線の減衰が起こるため補正が必要となる。**THICK** では、試料の厚さによる補正を加えた比例定数の算出を行う。

2.3 改良点



図1 作成した GUI

BATTY において、パラメータを入力する機能を持ったグラフィカルユーザーインターフェイス (GUI) を作成した (図 1)。この GUI 上で全ての入力操作ができる。また、入力値の保存、読み込みを行えるようにした。GUI 構築には、様々な OS 上で使用できることを考慮に入れ、Perl を用いた GUI 作成モジュール『Perl/Tk』を用いた。

図 2 に **gnuplot** で表示させたスペクトルを示す。**gnuplot** は多様な OS、出力形式にサポートし、日本語化も行われているソフトウェアである。また、コマンド駆動型であるので **PIXAN** プログラム内からの操作が可能となる。よって、各ピークに対応する元素名などをスペクトルと共に表示させることができた。

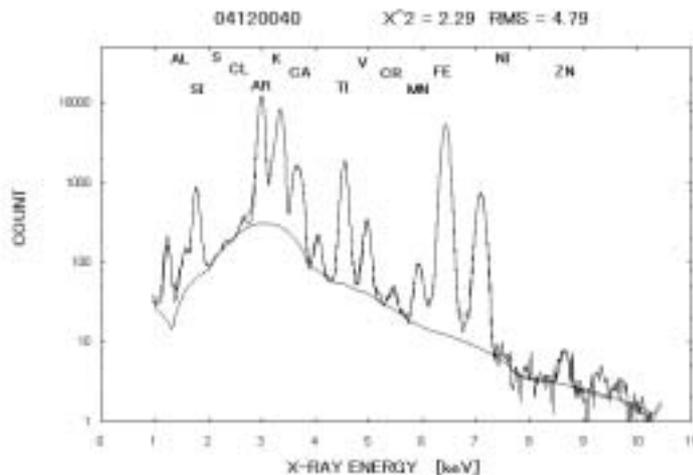


図2 gnuplot で表示させたスペクトル

現在、低エネルギー部分のバックグラウンドの形状に関する研究が進められている。今後、新たなスペクトル解析原理が確立されようとしており、それに対応するためにはプログラムの拡張、改良が必要となる。よって、プログラムには汎用性、可読性が求められる。そこで、作成したプログラムには複数のファイルに分割するなどの構造化を施した。

以上の改良点加わった実用可能な移植版 **PIXAN** が完成した。