

“One for All”（一锤定音）功能在水泥分析中的应用

布鲁克 AXS 公司以其精密的制造工艺，确保所生产的每一台相同型号的 X 射线荧光光谱仪具有几乎一致的分析性能。从而使得在一台仪器上所建立的校准曲线，可以复制转移到其它仪器上，让其它仪器共享该校准曲线。这样，即节省了建立校准曲线所花费的人力物力、标准样品，更重要的是保证了测量结果的可重复性。这就是布鲁克 AXS 公司的“One for All”（一锤定音）功能。

下面是“One for All”（一锤定音）功能在水泥分析中的应用例子。

某水泥公司安装了二台 S8 Tiger 型 X 射线荧光光谱仪，见下图。希望这二台 X 射线荧光光谱仪能分析生料、熟料、水泥、砂岩、石灰石、铝矾土、铜矿渣等样品，并且要求二台仪器能得出一致的分析结果。



图 1 二台 S8 Tiger 型 X 射线荧光光谱仪

这两台仪器的序列号分别是 204623 和 204624。在序列号为 204623 的仪器上建立了适合分析上述样品的 17 条校准曲线（4 条生料、4 条熟料、4 条水泥、砂岩、石灰石、铝矾土、铜矿渣、方法监控）。要把这 17 条校准曲线转移到序列号为 204624 的仪器上。

随机的分析软件 *Spectra^{plus}* 软件具有校准曲线转移功能。

首先，要转移每一条谱线的测量参数。X 射线荧光光谱的谱线涉及的测量参数有：X 射线光管的电流电压、初级滤光片、准直器、分光晶体、探测器、 2θ 角度等。除 2θ 角度外，其它可以设定为相同的测量参数， 2θ 角度在不同的仪器上会有差异，表 1 是各条谱线在二台仪器上的 2θ 角度比较。

表 1 各条谱线在二台仪器上的 2θ 角度比较

谱线	2θ 角度	
	仪器 204623	仪器 204624
Al $K_{\alpha 1}$	144.665	144.653
Ca $K_{\alpha 1}$	113.133	113.133
Cl $K_{\alpha 1}$	65.436	65.436
Fe $K_{\alpha 1}$	57.538	57.538
K $K_{\alpha 1}$	136.69	136.69
Mg $K_{\alpha 1}$	20.491	20.491
Na $K_{\alpha 1}$	24.653	24.653
S $K_{\alpha 1}$	75.724	75.724
Si $K_{\alpha 1}$	109.003	109.003

从上表可以看出，除了 Al $K_{\alpha 1}$ 差了 0.012° ，其它谱线的测量角度完全一致。布鲁克 AXS 公司拥有自己的晶体制造公司 Bruker INCOATEC，专门研制分光晶体，所制造的分光晶体，不仅天然晶体如 LiF、PET 有相同的 $2d$ 值（晶格面间距），而且人工多层膜晶体如 XS 系列晶体也有几乎一致的 $2d$ 值，从而保证了测量角度的一致性。

其次，要校正仪器间的测量灵敏度的差异。由于构成 X 射线荧光光谱光路的部件很多，每一台仪器的测量灵敏度会略有差异。有一套专门的水泥漂移校正样用于校正仪器间的灵敏度差异，见图 2。这套水泥漂移校正样含有不同含量的 SiO_2 、 Na_2O 、 K_2O 、 Al_2O_3 、 CaO 、 MgO 、 Cl 、 Cr_2O_3 、 Fe_2O_3 、 P_2O_5 、 SrO 、 SO_3 、 TiO_2 、 MnO 等成分，该漂移校正样非常稳定，可以长期使用。



图 2 水泥专用漂移校正样

下面几个图是 Ca、Si、Fe、Na 的谱线在二台仪器上的漂移校正数据。

Ca KA1-HS-Min/B5K的漂移校正数据							
样品	谱线	日期/时间	面罩	模式	仪器编号	维护号	谱峰
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-4 18:32:58	34 mm	真空	4623		137.5
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-5 14:36:11	34 mm	真空	4623		137.4
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 16:29:21	34 mm	真空	4623		137.4
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:09:31	34 mm	真空	4624		134.7
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:46:34	34 mm	真空	4624		134.9
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:01:55	34 mm	真空	4624		134.8
FLX-Z1	Ca KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:11:02	34 mm	真空	4624		134.9

Si KA1-HS-Min/B5K的漂移校正数据							
样品	谱线	日期/时间	面罩	模式	仪器编号	维护号	谱峰
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-4 18:34:56	34 mm	真空	4623		267
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-5 14:39:44	34 mm	真空	4623		266.4
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 16:33:09	34 mm	真空	4623		266.5
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:13:10	34 mm	真空	4624		261.3
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:50:16	34 mm	真空	4624		261.3
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:07:09	34 mm	真空	4624		261.4
FLX-C3	Si KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:16:09	34 mm	真空	4624		261.4

Fe KA1-HS-Min/B5K的漂移校正数据							
样品	谱线	日期/时间	面罩	模式	仪器编号	维护号	谱峰
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-4 18:34:56	34 mm	真空	4623		53.07
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-5 14:39:44	34 mm	真空	4623		53.39
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 16:33:09	34 mm	真空	4623		53.22
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:13:10	34 mm	真空	4624		53.28
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:50:16	34 mm	真空	4624		53.15
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:07:09	34 mm	真空	4624		53.38
FLX-C3	Fe KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:16:09	34 mm	真空	4624		53.11

Na KA1-HS-Min/B5K的漂移校正数据							
样品	谱线	日期/时间	面罩	模式	仪器编号	维护号	谱峰
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-4 18:34:56	34 mm	真空	4623		19.3
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-5 14:39:44	34 mm	真空	4623		19.29
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 16:33:09	34 mm	真空	4623		19.34
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:13:10	34 mm	真空	4624		19.11
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 19:50:16	34 mm	真空	4624		19.06
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:07:09	34 mm	真空	4624		19.11
FLX-C3	Na KA1-HS-Min/B5K	2010-1-9 20:16:09	34 mm	真空	4624		19.07

校准曲线转移后，用二台仪器测量同一个样品，对比结果如下：

1、生料

样品编号	分析仪器	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO
C1	204623	12.63	2.94	2.08	44.46	0.59
	204624	12.64	2.94	2.10	44.46	0.60
C2	204623	12.87	2.95	2.09	44.27	0.59
	204624	12.92	2.92	2.10	44.34	0.59
C3	204623	13.07	2.93	2.09	44.17	0.59
	204624	13.10	2.95	2.10	44.22	0.59
C4	204623	12.68	2.89	2.07	44.46	0.59
	204624	12.73	2.90	2.07	44.52	0.59
C5	204623	12.74	2.94	2.08	44.32	0.60
	204624	12.80	2.93	2.10	44.45	0.60
C6	204623	12.71	2.93	2.09	44.34	0.60
	204624	12.74	2.91	2.11	44.44	0.60
C7	204623	12.79	2.92	2.11	44.22	0.61
	204624	12.81	2.92	2.12	44.29	0.61
C8	204623	12.34	2.91	2.06	44.52	0.62
	204624	12.36	2.90	2.08	44.59	0.62

2、熟料

样品编号	分析仪器	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO
C1	204623	22.11	5.10	3.32	67.25	0.97
	204624	22.11	5.08	3.33	67.26	0.97
C2	204623	21.92	5.15	3.36	67.22	0.98
	204624	21.95	5.12	3.38	67.28	0.98
C3	204623	22.43	5.15	3.23	67.43	0.96
	204624	22.43	5.12	3.25	67.57	0.97
C4	204623	22.69	5.28	3.27	67.09	0.96
	204624	22.74	5.29	3.29	67.12	0.96
C5	204623	22.52	5.31	3.50	66.99	0.97
	204624	22.58	5.30	3.51	67.05	0.97
C6	204623	22.47	5.26	3.43	66.69	0.99
	204624	22.48	5.24	3.45	66.87	0.99
C7	204623	22.48	5.13	3.37	67.18	0.98
	204624	22.49	5.13	3.36	67.22	0.98
C8	204623	22.44	5.08	3.28	67.44	1.00
	204624	22.50	5.09	3.29	67.56	1.01

3、水泥

样品编号	分析仪器	SO ₃	CaO	MgO
1	204623	2.71	64.14	1.35
	204624	2.72	64.24	1.35
2	204623	2.74	63.93	1.37
	204624	2.74	64.05	1.37
3	204623	2.68	64.08	1.36
	204624	2.68	64.11	1.36
4	204623	2.70	64.05	1.35
	204624	2.72	64.10	1.36
5	204623	2.72	63.88	1.36
	204624	2.73	64.02	1.37

4、回灰

样品编号	分析仪器	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO
1	204623	9.06	2.70	1.52	46.99	0.55
	204624	9.06	2.68	1.52	47.00	0.55
2	204623	8.85	2.79	1.68	47.03	0.53
	204624	8.90	2.78	1.69	47.08	0.53
3	204623	9.41	2.99	1.87	46.34	0.51
	204624	9.45	2.99	1.86	46.41	0.51
4	204623	10.03	3.04	1.88	45.95	0.52
	204624	10.06	3.05	1.88	46.03	0.52

更多详情请咨询布鲁克指定渠道商广州凯纵检测技术有限公司

咨询电话：020-22099966

地址：广州市番禺区市桥街北桥路1号中洲嘉兴大厦117、118