

Программа идентификации минералов и документирования результатов электронно-зондового микроанализа

© С. В. Канакин

Геологический институт СО РАН, г. Улан-Удэ, Россия. E-mail: skan_61@mail.ru

Создано программное обеспечение идентификации минералов и документирования результатов рентгеноспектрального электронно-зондового микроанализа. Для распознавания минеральных фаз разработан алгоритм, основанный на стехиометрии минералов. Пополняемая база данных минералов содержит более тысячи модельных образов минералов. Отчеты в формате Excel-файлов содержат информацию о концентрации элементов, атомные проценты, компоненты, формулы оксидов и не оксидов, нормированные (100%) концентрации и компоненты. Обрабатывает результаты ЭДС (Inca, Aztec) и ВДС (JXA8200).

Ключевые слова: идентификация; минерал; стехиометрия; алгоритм; программное обеспечение.

Program for the identification of minerals and documentation of the results of electron probe microanalysis

S. V. Kanakin

Geological institute, SB RAS, Ulan-Ude, Russia. E-mail: skan_61@mail.ru

Software has been created to identify minerals and document the results of X-ray spectral electron probe microanalysis. For recognition of mineral phases, an algorithm based on the stoichiometry of minerals has been developed. The replenished database of minerals contains more than a thousand models of minerals. Reports in Excel file format contain information on the concentration of elements, atomic percentages, components, oxides and non-oxide formulas, normalized (100%) concentrations and components. Software processes the results of EDS (Inca, Aztec) and WDS (JXA8200).

Keywords: identification; mineral; stoichiometry; algorithm; software.

Программное обеспечение современных приборов электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа реализует широкий спектр аналитических инструментов, но, как правило, имеет ограниченный набор вариантов представления результатов анализа. Это во многом обусловлено отсутствием в программах эффективных методов идентификации минералов.

Существующие [1–4] в СЭМ-ЭДС алгоритмы компьютерной автоматизации процесса распознавания минеральных фаз, использующие методы опираются на применение пороговых значений (или энергетических окон) для всех анализируемых элементов. Сложность применения этих методов заключается в том, что пороги и размеры диапазонов должны быть определены для каждой фазы. В то время как, для фаз твердых растворов эти значения могут значительно варьировать.

Предложенный К. Стеффеном [5] метод, основанный на использовании стехиометрии минералов с описанием моделей по схеме Д. Б. Томпсона [6], также имеет ряд недостатков. Во-первых, подготовка данных модельных составов требует значительных усилий и глубокого понимания кристаллохимии, а составление моделей по схеме Д.Б. Томпсона только основных пороодообразующих минералов является сложной задачей. Во-вторых, данный алгоритм предназначен для классификации только кислородсодержащих минеральных фаз. Кроме того, алгоритм очень требователен к качеству входных аналитических данных. Таким образом, нельзя говорить о полной автоматизации процесса идентификации минералов методом К. Стеффена, как и любым другим. Представляется целесообразным, наряду с «лучшим» вариантом распознавания, предлагать аналитику для принятия решения список вариантов идентификации.

В разработанной автором программе используется оригинальный алгоритм идентификации, также основанный на стехиометрии минералов. Он не претендует на однозначную идентификацию минералов, но учитывает описанные выше недостатки методов К. Стеффена и других авторов. В его основе лежит поиск минимального отклонения между теоретическими формульными коэффициентами подходящих по составу минералов и коэффициентами этих минералов, рассчитанными для химического состава конкретного анализируемого объекта с использованием следующего выражения:

$$D_K = \sum_{j=1}^M \left((X_j - K_j) / K_j \right)^2$$

где K_j – формульный коэффициент компонентов j -того блока образа минерала, X_j – суммарный формульный коэффициент соответствующего по набору компонентов (химических элементов) блока аналитических данных, M — количество блоков образа.

На выходе работы алгоритма мы имеем: если какой-либо минерал идентифицирован, соответствующее название и, в любом случае, список вариантов идентификации. Этот список крайне необходим, так как идеальных алгоритмов не существует, а за результат в конечном итоге отвечает аналитик, который в режиме оценки качества автоматической идентификации программы может выбрать из вышеупомянутого списка другой минерал, по его мнению, более подходящий. Это бывает полезным также в том случае, когда алгоритм не смог идентифицировать минеральную фазу.

Ввод аналитической информации в программу может производиться либо захватом из папки обмена Windows (Clipboard) для (Inca, Aztec), либо загрузкой файлов данных с диска. После чего данные автоматически обрабатываются, идентифицируются, и сохраняются в базу аналитических данных программы для возможного последующего использования. Изображения, получаемые в процессе анализа, также могут быть захвачены из папки обмена или считаны с диска.

Отчет, создаваемый программой может включать в себя четыре типа Excel-файлов. Это:

1. INCA | AZTEC Sites Report — результаты в том виде, в котором были помещены в Clipboard.

2. General Report — сводные таблицы результатов, приведенных к единому порядку следования анализируемых элементов.

3. Fe³⁺ Report — таблицы результатов расчета 3–валентного железа

4. Images — таблица со ссылками на загруженные изображения.

Первые два содержат по семь листов, на которых помещаются:

1. Концентрации элементов. Здесь присутствуют данные для всех захваченных программой спектров.

2. Атомные проценты. Те же спектры, что на первом листе.

3. Компоненты. Это концентрации в окисном виде. Содержатся спектры, идентифицированные как оксидные минералы.

4. Формула, рассчитанная с учетом идентификации минералов оксидов. Те же спектры, что на третьем листе.

5. Формула, рассчитанная с учетом идентификации минералов не оксидов.

6. Концентрации элементов (нормированные к 100%).

7. Компоненты (нормированные к 100%).

Fe³⁺ Report содержит три листа информации: о формульных коэффициентах, рассчитанных компонентах и компонентах, нормированных к 100%.

Представление теоретических формул минералов в виде пригодном для компьютерного использования осуществляется по следующей схеме. Для минерала создается модельный образ, состоящий из блоков, каждый из которых соответствует изоморфной группе химических элементов, входящих в состав минерала, с соответствующим коэффициентом.

Для ввода и редактирования модельных образов в программе реализован специальный режим. На данный момент в базу данных модельных образов программы помещено около восьмисот минералов, не содержащих кислород: сульфиды, арсениды, теллуриды, висмутиды, интерметаллиды. Кроме того, введены все основные породообразующие силикатные минералы, карбонаты, фосфаты, сульфаты, простые окислы (всего порядка 200 моделей).

Опыт использования программы показал, что в зависимости от качества аналитических данных, вероятность точной автоматической идентификации составляет от 60 до 100%. Программа существенно облегчает работу по поиску необходимых фаз, контроль правильности анализа. Кроме того, полнота данных отчета программы позволяет существенно сократить время, затрачиваемое геологом при последующей их обработке.

Автор выражает глубокую признательность Николаю Семеновичу Карманову за объективную критику и всестороннюю поддержку.

Литература

1. Bowman L. E., Spilde M. N., Papike J. J. Automated energy dispersive spectrometry model analysis applied to diogenites // Meteoritics and Planetary science. 1997. V. 32. P. 869–875

2. Quantitative mineralogical characterization of lunar high-Ti mare basalts and soils for oxygen production / J. G. Chambers [et al.] // Jour. Geophysical Research. 1995. V. 100. P. 14391–14401.

3. Clarke G. L., Daczko N. R., Nockolds C. A method for applying matrix corrections to X-ray intensity maps using the Bence-Albee algorithm and Matlab // *Journal of Metamorphic Geology*. 2001. V. 19. P. 635–644.
4. X-ray digital imaging and petrology of lunar mare soils: Data input for remote sensing calibrations / L. A. Taylor [et al.] // *Icarus*. 1996. V. 124. P. 500–512.
5. Steffen K. An automated system for phase identification and quantitative composition determination using the electron microprobe: Theory and applications // *American Mineralogist*. 2004. V. 89. P. 1546–1552.
6. Thompson J. B. Composition space; an algebraic and geometric approach / *Characterization of metamorphism through phase equilibria*. Ed. By J. M. Ferry. Washington, Mineralogical Society of America, 1982. P. 1–31.

Канакин Сергей Васильевич, кандидат геолого-минералогических наук, заведующий лабораторией Геологического института СО РАН, г. Улан-Удэ.