

マイコンによる X 線粉末回折線鉱物検索システム HP-85 を用いた BASIC プログラム

五十嵐 俊雄 (鉱床部)
Toshio IGARASHI

まえがき

マイコン (マイクロコンピュータ パーソナルコンピュータ) の普及は大変目覚ましく 個人が所有していることも珍しくなくなった。その使われ方も 科学技術 計測 計算 ビジネス ゲーム と幅広く応用されている。

ここでは昭和55年9月に地質調査所鉱床部に導入された HP-85 を用いて作成した X 線粉末回折線による鉱物検索プログラムを例にとり マイコンによる検索システムの概要を紹介する。

もともとこの HP-85 は 主として実験測定値の解析用を使用するため導入されたものであるが 本来の解析以外に汎用的に応用できるすぐれた性能を有する。現在本機を用いて種々の試みを行っている。例えばグラフィック機能を利用して 鉱物資源統計などの図形パターン化やシミュレーションを行っているが これについては別の機会に紹介することとする。

ここで紹介する検索プログラムは 以前に日立ベーシックマスターレベル 2 (MB 6880 L2) 用に作成したプログラムを HP-85 に移植したものである。

ベーシックマスターレベル 2 は NEC PC-8001 シャープ MZ-80 シリーズなどとともに BASIC 言語を用いる

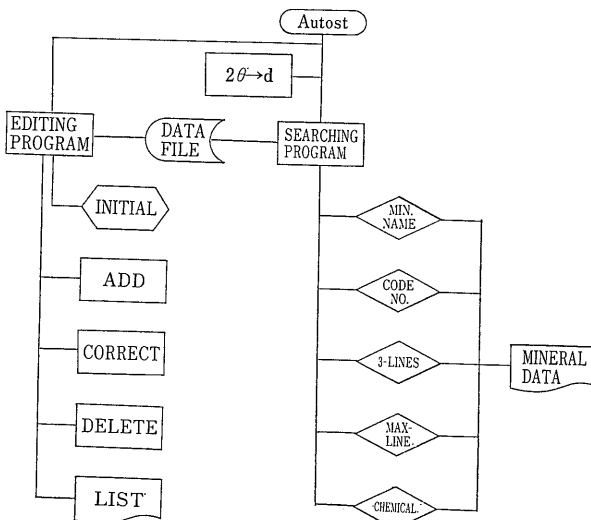
普及度の高い標準的な国産マイコンである。これに対して HP-85 はプロフェッショナル・ユースを旨とするパーソナルコンピュータで CRT ディスプレイ サーマルプリンタ テープユニットを内蔵し 拡張 BASIC を用いる上位機種である。したがってここで紹介するプログラムも単純な移植ではなく HP-85 のもつ機能の特徴を生かすように改良を加えている。

標準的なレベル 2 BASIC との相異点は折にふれて述べることにするが プログラムの考え方や組立ての要点は変わっていないので このプログラムの他機種のマイコンへの移植に際して 参考になる点があるであろうことを期待している。

地球科学の各分野におけるマイコンの応用は今後ますます普及していくことと考えられるが これは会話型の BASIC 言語を用いるマイコンが 特殊な専門家を必要とせず プログラム作成技術の修得も 短時間に容易にできることにあることを理解されるであろう。

1. プログラムの構成

ここで紹介するシステムの概要は第 1 図に示してある。小規模ではあるが データベースとよばれるものを基盤



CAT	NAME	TYPE	BYTES	RECS	FILE
	2θ→d	PROG	256	15	1
	Autost	PROG	256	1	2
	X-RAY	PROG	256	18	3
	DATA-1	DATA	100	1502	4
	INIT	PROG	256	16	5
	EDIT	PROG	256	19	6

第 1 表 カートリッジに入っているシステムのディレクトリの内容

第 1 図 X 線粉末回折線による検索システムの構造

としており

- (1) データを作成・編集するための編集プログラム
- (2) データファイル
- (3) 検索プログラム

の3つを主軸とし これにプログラムの実行を効率よく行わせるために必要な補助プログラムが附随している。

システムは第1表に示すように 2θ→d変換プログラム オートスタートプログラム 検索プログラム データファイル 初期設定 および編集プログラムの各パートに分かれているが これらはプログラム上では連結しており 有機的に運用される。

オートスタートプログラムは電源をONすると同時に自動的にプログラムの実行がスタートし 作業の内容により 2θ→d変換プログラム 検索プログラム あるいは 編集プログラムが選択されるようになっており プログラムをロードさせる時の実行時間の短縮と 誤操作の防止を図っている。

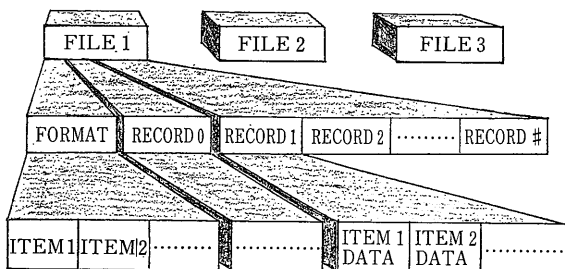
2. データの構造

一般に用いているデータファイルは 第2図に示すような構造をとっている。このシステムでも同様で 第1表に示す DATA-1 のファイル名でカートリッジに収容されている。1ファイルに含まれるレコード数は1500に設計し アイテムとしては 鉱物名 レコード番号 コード番号 3本の最強線の d 値 (いわゆる 3-LINES) 最大回折線の d 値 化学組成が記録されている。

1レコード当たり 必要なメモリは100バイトであるが 具体的には 鉱物名に20字 コード番号に7字 化学組成に24字を割り当て 他のアイテムは数値として入力している。

HP-85 で使用するテープ・カートリッジの標準的容量は 780プログラム・レコード(195キロバイト) 850データ・レコード(210キロバイト)で 42ファイルのデータ・ディレクトリ容量を有し 一般のマイコンで使用するフロッピーディスク並みの性能もっている。

一般のマイコンで処理する場合 フロッピーディスクやデジタルテープレコーダーを装備していれば 同じようなデータファイルの構成で行うのが理想的であるが 多くの場合 テープレコーダーにプログラムやデータを保存し 処理はオンボードのメモリにロードして行うので メモリの容量と文字列配列の大きさに制限され255レコード (ただし 化学組成を除く) が限界である。たゞこの場合の処理は オンボードのメモリに書き込まれたデータのみで行うので 実行時間はきわめて速い。



第2図 データの構造

当初ベーシックマスターレベル2用で作成したプログラムでは 検索プログラムと各種のデータプログラムを MERGE して実用に供していたが 現在はプログラムをできるだけ短縮し データの収容量を多くするよう改良している。

3. 編集プログラム

システムのなかで X線粉末回折線データファイルの作成 レコードの追加 修正 削除 およびリスト作成の機能を受け持つプログラムである。

データファイル初期設定

マイコンで用いるデータファイルについては 新期に開設する場合と 既に設定してあるデータファイルにデータを追加していく場合で 手続き的に異なる。

新期のデータファイルは CREATE ステートメントによって開設され 6文字以内のファイル名を付けなければならないが 一たん 開設した後でのデータの追加 修正 削除などでは使用しないプログラムとなる。

このため 無用の誤操作を避けるためにも 主要プログラムとは切り離し CHAIN ステートメントで互に連結している。

このプログラムでは 特に 2つの初期設定をしている点に特徴がある。第1は1500レコード全体にわたって 鉱物名 コード番号 化学組成に “*” を 3-LINES最大回折線に EPS (計算機の最小の値 (1E-499)) レコード番号に 0 をそれぞれ入れたことである。この効用はプログラムの実行時間の短縮に利用する点にあるが これについては後にふれる。第2は データファイルの最初のレコード (レコード番号0) の鉱物名に “2” を入れておき プログラム実行後には最後に入力したレコード番号+2と置き換えられ 他の項目は最後の入力と同じ内容を記録させていることである。これも 検索時間の短縮に有効に活用される。

LIST FROM RECORD NO. 0 TO 4

NO. MINERAL NAME	CODE NO.
1ST 2ND 3RD LARGEST	
NO. CHEMICAL COMPOSITION	
640	SUDQ363
14.92 7.31 3.63	31.08
638	
ACANTHITE	14-72
2.61 2.44 2.38	3.96
1 Ag ₂ S	
ACMITE	18-1222
2.90 6.37 4.42	6.37
2 NaFeSi ₂ O ₆	
ACMITE-AUGITE	18-1221
6.38 2.91 2.98	6.38
3 NaCaFeAlTiSiO(OH)F	
ACMITE-AUGITE	19-1
2.96 6.45 3.00	6.45
4 CaNaFeMnZnMg(SiAl) ₂ O ₆	

LIST UP DONE

第2表 データファイルの出力例

データの追加

鉱物の数はおよそ 11,000 あると云われるが ASTM データファイルを例にとると MINERAL SECTION には約2300個の X線粉末回折線データが収録されている。しかし その多くは産出が稀な鉱物であり 実用的には 数100個のデータでかなりの範囲をカバーできると思われる。本プログラムで用いるデータファイルに現在入力しているデータは660個程度で 1500個の収容量からみて余裕は充分にあり 必要に応じて データの追加補充を随時行うことができる。

プログラムの実行に際しては 追加レコードが収容されるべきレコード番号が レコード番号0の鉱物名に記録されていることを利用し 検索時間の大幅な短縮を図っている(第2表 データファイルの出力例を参照)。レコードの追加は 何個でも 連続して入力可能で 最後に入力した レコード番号+1 がレコード番号0の鉱物名を置き換えるようになっている。

修正プログラム

入力時に誤記録されたデータは このプログラムで随時修正することができる。

修正を要するレコードはレコード番号(各レコードの化学組成の前に記録されている通し番号)で呼び出される。

修正事項は鉱物名 コード番号 3強回折線 最大回折線 化学組成の順に行われる。修正を要しない事項は END LINE キーを空押しすることにより 次の事項に移る。修正が完了すると 新しいデータは前のデータと置換えられて データファイル中に記録される。

削除プログラム

不必要となったレコードをデータファイルから削除するプログラムである。不必要となるレコードをコード番号で呼び出し 確認の後削除し 以後のレコードについては順次レコード番号を繰り上げ 最後のレコードをレコード番号1に入れ直して実行を終了する。

リストの作成

データファイルに入力されているレコードのリストを作成するプログラムである。主として 入力してあるアイテムの確認に用いられる。レコード数が多数入力されているため 全リストの出力には時間を要するので 希望するレコード番号の範囲で出力させることができる。なお入力されていないレコードのアイテムには鉱物名に“*”が入力されていることを利用し 実行を終了させる。

4. 検索プログラム

X線粉末回折線の処理をルーチン化する主要なプログラムである。

回折角 2θ から面間隔 d を計算し 同時に相対強度 I を表示する補助プログラムである $2\theta \rightarrow d$ 変換プログラムと 鉱物名 コード番号 レコード番号 3本の最強回折線 最大回折線 および化学組成 の夫々で検索できるプログラムで構成されている。

$2\theta \rightarrow d$ 変換プログラム

X線粉末回折法では云うまでもなく BRAGG の公式

$$n\lambda = 2d\sin\theta$$

に従い 一定の波長 λ のもとで 反射角 θ を測定して面間隔 d を計算するとともに 最強回折線の強度を 100 として 各回折線の相対強度 I を知る必要がある。

この過程はインターフェイスを介して 測定機とマイコンを接続すれば自動的に行うことができるが ここでは記録紙上に得られたチャートからの処理を前提としている。

プログラムは サンプル名と産地を記入した後 相対強度が必要かどうかを決め 相対強度が必要な場合は測定で得られたピークの位置 (2θ) と高さを順次入力してゆく。データの入力が終了すると データは 2θ の小さいものから 大きくなる順序にソーティングされ 10個づつ表示される。この段階のチェックで 誤りが発見された場合には 内蔵されている修正プログラムを用

いデータの追加 訂正 削除が簡単にできる。

確認が終了するとただちに計算が開始され 第7表でみられるフォーマットで出力される。ここで出力される相対強度 (I) は入力されたピークの高さをマイコン自身が判断し もっとも高い値を100とし 他はその百分比の値として計算されたもので表わされる。

2θ は小数点以下2桁で入力し d が10以上の場合 小数点以下1桁 9.99以下3.00までは2桁 それ以下は3桁で出力される。マイコン内での精度は有効桁12で行われている。ベーシックマスターレベル2は9桁 NEC PC8001 とシャープMZ80 シリーズは5桁である。

ところで 天然の試料には石英が含まれることが多く また 石英が内部標準試料として用いられる例も少なくない。そこでこの2θ→d変換を行うと同時に石英の回折線のチェックを行うことにした。第7表bがその例で測定値中に石英の回折線が含まれている場合には REMARK の欄に Q(100)のように表われ この線が石英の最強回折線であることを示している。試料中に石英が含まれているかどうかの判定は 計算値 d の中に石英の最強回折線 3.343 と2番目に強い回折線である 4.26 がそれぞれ 2θ に換算して ±0.1° の範囲内で存在していることを条件としている。

このプログラムは CHAIN ステートメントで検索プログラムと連結しているが データの共有はとくにない。

鉱物名による検索

データファイル中には 鉱物名が20字以内で入力されている。プログラムはデータファイルをオープンし 検索しようとする鉱物名と比較して 目的とする鉱物名を印刷出力する単純なものであるが POS という関数を使用している点に特徴がある。HP-85のPOS関数は ある文字列の中に 特定の副文字列が含まれている場合その位置を示す機能を有している。このプログラム中では

```
IF POS(M$, A$)=1 THEN.....
```

のように用いられるが これはデータファイル中の鉱物名 A\$ の頭の部分に M\$ で表わされる文字列が含まれているかどうかの判定を意味している。

使用例1] CHALCO で始まる鉱物名を検索する(第3表a)。もちろん CHALCOPYRITE と入力すれば黄銅鉱のみが出力される(第3表b)。

使用例2] ALBITE と入力すれば ALBITE LOW と ALBITE HIGH の両者が出力される(第3表c)。この場合も ALBITE LOW と入力すれば 該当鉱物だけが

出力される(第3表d)。蛇足になるが ここで注意を要することは 一般にマイコンでは (,) カンマは 入力項目 関数 ステートメントなどの区切りに用いられるため ALBITE, LOW のように入力すると「入力項目が多すぎる」というエラーメッセージがでることになる。このプログラムもその例外ではなく データファイル中に ALBITE LOW のように記録してあるため ALBITE, LOW と入力しても検索されない。

HP-85のPOS関数は一般のマイコンには含まれていないか 含まれている場合でも現在のプリント位置を求める関数として使用され 機能が異なる。このためベーシックマスターレベル2用プログラムでは文字列を取り扱う関数である LEFT\$(X\$, n) を用いている。この関数は X\$ で表わされる文字列の左端から n 個目までの文字列を表す。n=7として実用しているが 一応の目標は果している。

検索する鉱物名は大文字 小文字 あるいは両者の混合であっても差し支えない(第3表a~d)。これは HP-85に内蔵されている関数である UPC\$(A\$)の機能による。UPC\$(A\$)は文字列A\$中の小文字を全部大文字に変換する関数で

```
A$=UPC$(A$)
```

とすることにより 入力された文字列は全て大文字として取り扱われてプログラムが実行されることになる。

この関数も一般のマイコンには内蔵されていない。とくに国産のマイコンはカナ文字が使用できる反面 英小文字はキーボードから直接入力できず CHR\$ 関数で扱われている例がある。このため まずプログラムでフルキーボード化する必要があり さらに小文字から大文字への変換をサブルーチン化しておかねばならない。

したがってプログラムのサイズがやゝ大きくなり 変数の領域を狭めることとなる。

このプログラムを実行させた場合 鉱物名はループ計算によりデータファイルに記録されている全鉱物について検索されるが 1500レコードを収容するデータファイルでは 検索を完了するのに 15分程度を要する。実際には全レコードに鉱物のデータが記録されておらず 仮に700個の鉱物データが記録されているとすると 701番目からのレコードには 初期設定により 鉱物名 コード番号 化学組成としてそれぞれ“*”が入力されている。これを利用し 鉱物名とコード番号が“*”であるときに プログラムの実行を終了するようにしてありその後のレコードの検索は省略し 時間の短縮を図つ

a
SEARCHING BY MINERAL NAME CHALCO

CHALCOOCITE	1.98	1.88	2.40	23-961
85 Cu ₂ S			4.24	
CHALCOKYANITE	3.55	2.61	4.19	15-775
86 CuSO ₄			4.19	
CHALCOMENITE	5.39	4.94	3.35	17-523
87 CuSeO ₃ ·2H ₂ O			5.76	
CHALCOPYRITE	3.03	1.85	1.59	9-423
88 CuFeS ₂			3.03	
CHALCOSTIBITE	3.13	3.00	1.76	9-143
89 CuSbS ₂			7.38	
CHALCOPHYLLITE	9.54	4.79	2.59	19-379
440 CuAl(A=O)(SO) ₄ (OH)·3.6H ₂ O			9.54	
CHALCOSIDERITE	3.77	3.39	3.02	8-127
441 CuFe ₆ (P O ₄) ₄ (OH)8.4H ₂ O			6.40	

SEARCH BY MINERAL NAME DONE

b
SEARCHING BY MINERAL NAME
chalcopyrite

CHALCOPYRITE	3.03	1.85	1.59	9-423
88 CuFeS ₂			3.03	

SEARCH BY MINERAL NAME DONE

c
SEARCHING BY MINERAL NAME
ALBITE

ALBITE HIGH	3.21	3.18	4.03	20-572
12 NaAlSi ₃ O ₈			5.33	
ALBITE HIGH	3.18	3.75	3.21	10-393
13 NaAlSi ₃ O ₈			6.43	
ALBITE LOW	3.20	3.78	6.39	9-466
14 NaAlSi ₃ O ₈			6.39	
ALBITE LOW	3.19	4.03	3.21	20-554
15 NaAlSi ₃ O ₈			6.38	
ALBITE LOW	4.03	3.22	3.66	19-1184
16 NaAlSi ₃ O ₈			6.38	

SEARCH BY MINERAL NAME DONE

d
SEARCHING BY MINERAL NAME
Albite Low

ALBITE LOW	3.20	3.78	6.39	9-466
14 NaAlSi ₃ O ₈			6.39	
ALBITE LOW	3.19	4.03	3.21	20-554
15 NaAlSi ₃ O ₈			6.38	
ALBITE LOW	4.03	3.22	3.66	19-1184
16 NaAlSi ₃ O ₈			6.38	

SEARCH BY MINERAL NAME DONE

第3表

鉱物名による検索例

- a: ALBITE による検索
- b: Albite Low による検索
- c: CHALCO による検索
- d: chalcopyrite による検索

ている。

コード番号による検索

データファイル中のレコードにはデータの出所を示すコード番号が記録されており これをもとに 詳細なデータの検討を行うことができる。コード番号は7字以内の数字または文字で入力されている。ASTMカードをもとしたものは「17-521」の形式で入力されている。注意を要するのは「6-0710」のような例でレコードでは「6-710」と「0」を省略してあるので検索も「0」を省略した形で行わないと出力されない。

プログラムは同一コード番号のレコードは重複しない前提で 順次目的とするコード番号とレコード番号が一致したとき データを出力し プログラムが終了する。

このコード番号による検索では コード番号の付け方を充分検討しておくことが重要であろう。検索の目的は鉱物のデータを知ることよりは 必要なデータが入力されているか どうかの確認に用いられることが多いことに留意すべきである。

3 — LINESによる検索

X線粉末回折線による定性分析では 従来から Hanawalt 法とよばれる方法が広く行われている。この方法では 未知試料のX線粉末回折線と相対強度の表を作り (この作業は「2θ→dの変換と相対強度の計算」参照) このうちから 最強線3本を選び 既知物質の表と比較し 一致するものがあつた場合 残りの回折線を比較して同定を行う。この3本の最強線による比較作業をマイコンに行わせるのが本プログラムである。

プログラムの考え方は単純で 3本の最強回折線を順に入力し これらとデータファイルに収容されている各レコードを比較し 該当するレコードを出力させるだけのものである。

しかし (1)天然に産する鉱物は 必ずしも理想的に標準的なものではなく また X線回折装置や試料作成に伴う誤差もある。また (2)多くの場合複数の鉱物が共在し単純に3本の最強線のみで比較することはできない。これらある程度カバーできるように工夫がなされなければならない。

① X線粉末回折線が標準的な試料に対して 多少偏倚して表われる現象は 特殊な鉱物を除けば一般的であって 例外的なことではない。この原因としては 鉱物^晶が固溶体を形成することが多いなどの鉱物学的要因と 実験条件にマッチしたセッティングが不完全であったり 試料作成が特殊な場合などの機械的な要因がある。

問題は測定 計算された面間隔 d について どの程度の偏倚量の範囲で 比較し検索を行うかを決定することであるが ランニングテストを重ね 測定された 2θ を $\pm 0.2^\circ$ の範囲で検索することにした。具体的には 3本の最強線の d 値を入力すると マイコン内部で $d \rightarrow 2\theta$ 変換を行い $2\theta + 0.2^\circ$ と $2\theta - 0.2^\circ$ について各々の d を再計算して データファイル中の数値と比較することになる。

念のため付言すると 10° 付近では 0.176A 20° 付近では 0.044A 30° 付近では 0.019A 60° 付近では 0.0046A 程度の d の偏倚量をカバーすることになる。

マイコンの三角函数計算は全てラジアンで行われ プログラムの中で 度からラジアンに ラジアンから度に変換する必要がある。HP-85では これらの変換に DTR と RTD の関数があり それぞれを利用することにより プログラミングが容易であるが 一般のマイコンにはこのような機能をもつ関数は内蔵されておらず 度からラジアンの変換には PAI/180の計算を行う必要がある。さらに HP-85には Arc Sin 計算のため ASN (X) 関数が内蔵されているため 前記の計算は簡単になされるが 一般のマイコンには Arc Sin 関数は内蔵されていない。このためベーシックマスターレベル 2用のプログラムでの偏倚量は 2θ には変換せず d の $\pm 1\%$ の範囲で行っている。この方法では $2\theta = 10^\circ$ 付近で 0.09A 20° 付近で 0.044A 30° 付近で 0.03A 60° 付近で 0.015A 程度の d の偏倚量をカバーすることになる。この方法は HP-85のプログラムと比較すると 20° 以下の低角度でやゝ厳しく 高角度側ではやゝゆるいこととなるが 実用に当たってはさほど問題を生じなかった。

② 次に 複数の鉱物が混在する場合であるが この対策にもいくつかの方法がある。例えば 最大面間値を用いる方法(これについて後で述べる)などがあるが こゝでは 1~2本の最強回折線を用いて より広い範囲で鉱物の検索を行い 出力された鉱物群から 検索対象外の d 値との比較 産地 産状 化学組成 その他の情報を検討し 消去法により検索範囲を狭めてゆく方法が可能なプログラムとしている。

具体的には このプログラムを用いて 1本 (あるい

は 2本) の最強回折線を入力し END LINE キー (一般のマイコンの「複改」キーあるいは「CR」キー) を押すことにより 検索が実行される。

このため d の入力は文字列変数で行い プログラム中で数字から数値への変換を行っている。

ところで いわゆる 3-LINES について もう一つ注意を要する事項がある。それは回折線の相対強度で天然に産する鉱物では 必ずしも標準的なものと同じ順序の相対強度を示すとは限らない。このような現象に対処するため このプログラムでは 1番目の回折線が 2番目と入れ変わったケース 2番目の回折線が 1番目あるいは 3番目と入れ変わったケース 3番目の回折線が 2番目と入れ変わったケース でも検索が行われ出力されるようプログラミングされている。

最強線を 1本あるいは 2本入力した場合も同様の検索を行う。

この検索プログラムも 初期設定でデータが入力されていない部分の鉱物名に “*” が入力されていることを利用し 検索時間の短縮を図っている。

使用例として第 4 表 a-c を示す。第 4-a 表は最強回折線として 3.33 を入力したときに出力された鉱物の一部である (全部で 27 鉱物が出力された)。この表でみられるように 3.31~3.35 の範囲の d が 1 番目か 2 番目に記録されている鉱物を検索出力している。

第 4-b 表は 2 番目の回折線として 4.25 を入力した例で この結果は 2 鉱物のみが出力された。

第 4-c 表は さらに 3 番目の回折線として 1.815 を入力した場合で 1 鉱物のみが出力される結果となった。

最大回折線による検索

鉱物の種類によっては もっとも低角度側で検出される回折線 すなわち d の値が最大となる回折線が 特徴的で 鉱物種を特定したり 見当をつける有力な手掛りとなることが多い。このため データ ファイル中のレコードには各鉱物の最大回折線が記録されている。

この最大回折線は強度とは関係なく 利用できる。検索例として 最大回折線に 14.2A を入力した結果を第 5 表に示す。この場合も 3-LINES と同様 2θ に換算して $\pm 0.2^\circ$ の範囲の最大回折線を有する鉱物を全レコードにわたって検索している。

化学組成による検索

データファイルのレコード中に 化学組成は 24 字以内で記録されている。このプログラムでは 一般に Au

a

```
SEARCHING BY
1ST LINE : 3.33
-----
ARGENTOPYRITE          7-347
 3.34  1.81          3.62  5.81
 52  AgFe2S3
-----
CASSITERITE           21-1250
 3.35  2.64          1.77  3.35
 81  SnO2
-----
CINNABAR              6-256
 3.35  2.86          1.98  3.59
100  HgS
-----
CLINOFERROSILITE     17-548
 3.03  3.35          3.23  6.47
103  FeSiO3
-----
ILLITE 1M             2-462
 3.35  2.60          1.99  10.00
189  KAl2(Si3AlO10)(OH)2
-----
LEPIDOLITE 1M        10-485
 3.34  10.00         4.99  10.00
219  K(LiAl)(AlSi)O(OH)
-----
LEPIDOLITE 3M        10-483
 9.93  3.33          2.61  9.93
220  K(LiAl)(AlSi)O(OH)
-----
LEPIDOLITE 120       15-62
 3.31  2.59          1.98  9.94
221  K(LiAl)(AlSi)O(OH)
-----
LEPIDOLITE 3T        10-484
 3.32  2.58          10.00  10.00
222  K(LiAl)(AlSi)O(OH)
-----
LOPEZITE              12-300
 3.32  3.49          3.68  6.82
227  K2Cr2O7
```

b

```
SEARCHING BY
1ST LINE : 3.33
2ND LINE : 4.25
-----
ORTHOCLASE           19-931
 3.31  3.77          4.22  6.62
280  KAlSi3O8
-----
QUARTZ LOW           5-490
 3.34  4.26          1.82  4.26
321  SiO2
-----
SEARCH BY 3 LINE DONE
```

c

```
SEARCHING BY
1ST LINE : 3.33
2ND LINE : 4.25
3RD LINE : 1.815
-----
QUARTZ LOW           5-490
 3.34  4.26          1.82  4.26
321  SiO2
-----
SEARCH BY 3 LINE DONE
```

Agのように元素記号を用いて検索が行われる。例えば Agと入力すれば 化学組成中に Agが含まれる鉱物は全て印刷出力される。

このプログラムの作成でも 鉱物名による検索で用いた POS 関数の機能を応用している。こゝでは

IF POS(F\$, X\$)>0 THEN.....

としている。文字列 F\$の中に X\$で表わされる副文字列が含まれていれば POS 関数が F\$の先頭から何番目に位置するか出力してくれることを利用している。すなわち 目的とする元素記号が含まれていなければ POS(F\$, X\$)=0 となるのに対し 含まれていればその位置により POS(F\$, X\$) は1以上の整数となる。このため POS 関数を利用すれば 目的とする元素記号が含まれていればその位置にかかわらず検索し 出力させることが容易にできることになる。

こゝで問題となるのは 1字の元素記号をもつ H B C N O F P S K V Y I W Uの元素群である。2字の元素記号をもつ元素は大文字と小文字の組合せで Pbのように他の元素と区別できるが Pと入力すると Pのほかにも Pd Pb Pt などを含む鉱物群も出力されることになる。

1字の記号をもつ元素のうち H C O S を含む鉱物はきわめて多く 現実に検索する意味はあまりない。また K V Y I W U の各元素については これらを頭文字とする2字の元素は存在しないか 存在しても鉱物としては稀少産出であることから 区別しなくともあまり不便ではない。Nについては逆に Nbが鉱物として産出する重要な元素である程度である。

したがって 実用的には B F Pの3元素を それぞれの文字を頭文字とする2字の元素記号と区別すればよい。このため こゝで作成したデータファイルでは この3元素記号の後1文字を空白にして記録してある。

第4表 3-LINESによる検索例

- a 1ST LINE:3.33による検索
一部(全部で27レコードが出力された)
- b 1ST LINE:3.33
2ND LINE:4.25による検索
- c 1ST LINE:3.33
2ND LINE:4.25
3RD LINE:1.815による検索

SEARCHING BY LARGEST LINE
14.2

CHLORITE 1a	16-362
7.10 3.55 14.20	14.20
90 M ₃ FeAlSiAl ₁₀ OH	
CHLORITE 1b	16-351
7.15 3.59 14.40	14.40
91 M ₃ FeAlSiAl ₁₀ OH	
NONTRONITE	2-27
13.90 4.44 3.54	13.90
274 FeAlSiAl ₁₀ OH.H ₂ O	
SAPONITE	13-86
14.20 1.53 3.67	14.20
336 M ₃ AlFeSiAlFe ₁₀ OH.H ₂ O	
THURINGITE	13-29
7.05 3.53 2.52	14.10
380 FeMnAlSiAl ₁₀ OH	
THURINGITE	21-1227
7.05 3.52 2.60	14.10
381 (FeM ₃ Al) ₆ (SiAl) ₄₀ 10(OH) ₂	
THURINGITE	7-78
7.07 14.10 3.54	14.10
383 M ₃ FeAlSiAl ₁₀ OH	
VERMICULITE	16-613
14.20 1.53 4.57	14.20
398 M ₃ FeXAlSi ₁₀ OH.H ₂ O	
CLINOCLORE	19-749
7.12 3.56 2.55	14.30
444 M ₃ 5Al(Si ₃ Al) ₁₀ (OH) ₈	

SEARCH BY LARGEST LINE DONE

第5表 最大回折線による検索例

例えば P を目的に検索するため入力すると プログラム内部では“P”として扱い 結果的に含りん鉱物群を検索することが可能となる。

なお このプログラムでは 1元素だけではなく CO₃ OH SO₄ などによる検索も可能である。

一般に通常のマイコンには HP-85の POSのこのような機能に相当する文字関数は含まれていないため ベーシックマスターレベル2用のプログラムには 化学組成による検索プログラムは組み込まれていない。

こゝでも プログラムの実行は鉱物名の“*”で終了させ 検索時間の短縮化を図っている。

参考例として Bi による検索結果を第6表に掲げた。

最後に実際にこのプログラムを実行した例をあげる。第7表 a はひすい輝石だけからなる岩石と考えていた試料である。X線粉末回折試験で得られたチャートからの測定値を本プログラムの 2θ→d 変換プログラムにより面間隔と相対強度を求める。その結果から 2.845 2.936 3.44 の3本の強い回折線を選び 3-LINES プログラムで検索したが 該当する鉱物が出力されなかつ

SEARCHING BY CHEMICAL SYMBOL
Bi

AIKINITE	22-606
3.66 3.18 4.07	4.07
7 CuPbBiS	
AIKINITE	7-223
3.68 3.19 2.88	4.08
8 2CuPbBiS ₃	
ARGYRODITE	14-356
3.02 1.86 2.66	3.14
53 Ag(SbBi) ₂ S ₂	
BISMITE	14-699
3.25 2.71 2.69	5.28
62 Bi ₂ O ₃	
BISMUTH	5-519
3.28 2.27 2.39	3.95
63 Bi	
BISMUTHINITE	17-320
3.57 3.12 3.53	7.94
64 Bi ₂ S ₃	
BISMUTITE	4-666
2.95 2.14 1.62	3.72
65 Bi ₂ O ₂ CO ₃	
EMPLECTITE	10-474
3.05 3.23 3.13	7.38
133 CuBiS ₂	
GALENOBISMUTITE	20-571
3.47 2.05 2.04	4.59
152 PbBi ₂ S ₄	
WITTICHENITE	9-488
2.85 3.08 4.55	5.68
403 Cu ₃ BiS ₃	
AIKINITE	22-606
3.66 3.18 4.07	5.20
413 Cu _{1.0} Pb _{0.8} Bi _{1.1} S ₃	
ARSENOBISMITE	7-358
3.11 6.06 1.84	6.06
417 Bi ₂ (AsO ₄)(OH) ₃	
BISMUTOTANTALITE	16-909
3.14 2.94 1.73	5.88
436 BiTaO ₄	
CUPROBISMUTITE	19-394
3.07 2.73 3.25	6.25
450 CuBiS ₂	
TETRADYMIT	19-1330
3.10 2.29 2.11	4.86
594 Bi ₂ Te _{1.65} Si _{1.35}	

SEARCHING BY CHEMICAL SYMBOL
DONE

第6表 元素記号による検索例 (Bi による検索)

たため 3番目を除いて 2本の回折線で検索したところ JADEITE が出力された。そのコード番号 ASTM 22-1338でチェックし 残った回折線である 3.44と 5.65 で検索を行ったところ ANALCINE が出力され この試料が JADEITE と ANALCINE の混合物であることが判明した。

a

SAMPLE NAME AND NO. : ABC-123

LOCALITY : DEF

2θ	d	I	REMARK
14.08	6.28	9	
15.66	5.65	15	
18.16	4.88	2	
19.58	4.53	2	
20.30	4.37	10	
20.56	4.32	23	
25.84	3.44	23	
26.46	3.37	22	
27.22	3.27	7	
28.52	3.17	26	
30.42	2.93	77	
31.42	2.845	100	
33.12	2.78	2	
35.38	2.535	2	
35.84	2.503	26	
36.94	2.431	22	
40.60	2.220	9	
41.54	2.172	10	
43.48	2.080	23	

SEARCHING BY
1ST LINE : 2.845
2ND LINE : 2.936
3RD LINE : 3.44

1ST LINE 2.845
2ND LINE 2.936
3RD LINE 3.44
IS NOT FILED

SEARCH BY 3 LINE DONE

SEARCHING BY
1ST LINE : 2.845
2ND LINE : 2.936

JADEITE 22-1338
2.83 2.92 4.29 6.22
198 NaAlSi2O6

SEARCH BY 3 LINE DONE

SEARCHING BY
1ST LINE : 3.44
2ND LINE : 5.65

ANALCIME 19-1180
3.43 5.60 2.93 9.14
23 NaAlSi2O6.H2O

ANALCIME 7-363
3.43 5.61 2.93 6.88
24 NaAl(SiO3)2.H2O

SEARCH BY 3 LINE DONE

b

SAMPLE NAME AND NO. :
Green Hard Rock

LOCALITY : Kanayamadani

2θ	d	I	REMARK
6.18	14.3	1	
12.34	7.17	3	
18.60	4.77	1	
20.80	4.27	19	Q(35)
23.94	3.71	5	
25.00	3.56	2	
26.60	3.35	85	Q(100)
30.84	2.897	100	
32.40	2.761	6	
35.20	2.547	3	
36.46	2.462	6	Q(12)
37.24	2.412	5	
39.34	2.288	5	Q(12)
40.18	2.242	3	Q(6)
40.98	2.200	16	
42.30	2.135	4	
43.66	2.071	2	
44.80	2.021	10	
45.68	1.984	3	Q(6)
49.12	1.853	2	
50.02	1.822	11	
50.36	1.810	15	
50.92	1.792	14	

Q() MAY MEAN QUARTZ AND ITS
INTENSITY :cf ASTM 5-490

SEARCHING BY
1ST LINE : 2.897
2ND LINE : 2.200
3RD LINE : 1.810

ANKERITE 12-88
2.90 2.20 1.81 3.70
34 Ca(MgFe)(CO3)2

SEARCH BY 3 LINE DONE

SEARCHING BY
1ST LINE : 7.17
2ND LINE : 3.56
3RD LINE : 14.3

CHLORITE 1a 16-362
7.10 3.55 14.20 14.20
90 MgFeAlSiAlOOH

THURINGITE 7-78
7.07 14.10 3.54 14.10
383 MgFeAlSiAlOOH

SEARCH BY 3 LINE DONE

第7表

2θ→d変換と3-LINES検索の
実例 (a,b)

第2の試料は緑色の硬い岩石である。まず 2θ→d 変換プログラムによって 面間隔 d と相対強度 I を得たが REMARK により かなりの量の石英が含まれていることが知られる。石英に該当する回折線を除いて 3本の最強線により検索を行ったところ ANKERITE が出力された。そのコード番号 ASTM 12-88でチェックし 残された回折線から 第2の 3-LINES 検索を行ったところ CHLORITE 1a と THURINGITE が出力され 緑泥石族の粘土鉱物が存在することを示した (第7表b)。

```

10 OPTION BASE 1
20 COM M#C20J,N#C7J,A,B,C,D,E,F
   #C24J
30 ON KEY# 1,"2θ→d" GOTO 100
40 ON KEY# 2,"SEARCH" GOTO 110
50 ON KEY# 3,"EDITING" GOTO 120
60 ON KEY# 4,"HELP" GOTO 130
70 CLEAR @ KEY LABEL
80 DISP "SELECT OPTION BY K#"
90 GOTO 90
100 CHAIN "2θ→d"
110 CHAIN "X-RAY"
120 CHAIN "EDIT"
130 CLEAR @ DISP "K1 : GO TO CON
   VERSION PROGRAM FOR
   2θ TO d"
140 DISP @ DISP "K2 : GO TO SEAR
   CHING PROGRAM"
150 DISP @ DISP "K3 : GO TO EDIT
   ING PROGRAM"
160 DISP @ DISP @ DISP "PUSH 'EN
   D LINE' KEY";
170 INPUT R#
180 IF R#="" THEN 20
190 END
    
```

第8表 オートスタートプログラム

```

10 OPTION BASE 1
11 --- EDITING PROGRAM ----
30 COM M#C200,M#E73,A,B,C,D,E,F
#I243
40 DIR M#C203,N#E73,F#I243
50 ON KEY# 1,"ADD" GOSUB 290
50 ON KEY# 2,"CORRECT" GOSUB 11
50
70 ON KEY# 3,"DELETE" GOSUB 163
0
80 ON KEY# 4,"LIST" GOSUB 830
50 ON KEY# 5,"INPUT" GOTO 1990
100 ON KEY# 6,"TRANS" GOTO 2990
110 ON KEY# 7,"HELP" GOSUB 170
120 ON KEY# 8,"SEARCH" GOTO 1990
130 CLEAR @ KEY LABEL
140 DISP "X-RAY DATA FILE"
150 DISP "SELECT OPTION NO.:"
150 GOTO 160
170 CLEAR @ DISP " --- EDITING
OF DATA ---"
180 DISP @ DISP " K1 : ADD DATA"
190 DISP " K2 : CORRECT DATA"
200 DISP " K3 : DELETE DATA"
210 DISP " K4 : LIST OF ALL DATA
-----"
220 DISP " K5 : MAKING NEW DATA
FILE"
230 DISP " K6 : TO SEARCHING PRO
GRAM"
240 DISP @ DISP "THIS DATA FILE
IS 1500 RECORDS AVAILABLE"
250 DISP @ DISP @ DISP "PUSH 'E
NO LINE' KEY"
260
270 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
280 | ADD DATA
290 CLEAR @ DISP "ADD DATA"
300 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
310 READ# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E,
F#
320 R#VAL(M#)
330 X9=0
340 FOR I=R TO 1501
350 READ# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E,
F#
360 IF M#="" AND N#="" THEN X9
I @ GOTO 400
370 NEXT I
380 IF X9=0 THEN DISP "NO.SPACE
FOR NEW DATA"
390 RETURN
400 | WRITING DATA
410 DISP "MINERAL NAME,"
420 INPUT M#
430 IF M#="" THEN G10
440 DISP "CODE NO.:"
450 INPUT M#
460 DISP "ENTER 1ST LINE,"
470 INPUT A

```

```

480 DISP "ENTER 2ND LINE,"
490 INPUT B
500 DISP "ENTER 3RD LINE,"
510 INPUT C
520 DISP "ENTER LARGEST LINE,"
530 INPUT D
540 E=R-1
550 DISP "CHEMICAL COMPOSITION,"
560 INPUT F#
570 PRINT# 1,R ; M#,N#,A,B,C,D,E
,F#
580 GOSUB 740
590 R#R+1
600 CLEAR @ IF R<1502 THEN 400
610 PRINT "-----"
620 M#VAL$(R)
630 PRINT# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E
,F#
640 DISP "DATA INPUTTING DONE"
650 ASSIGN# 1 TO #
660 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
670 | --- DATA FORMAT ----
680 DISP "-----"
690 DISP USING 770 ; M#,N#
700 IMAGE 200,3X,7A
710 DISP USING 810 ; E,F#
720 DISP "-----"
730 RETURN
740 | --- DATA FORMAT ----
750 PRINT "-----"
760 PRINT USING 770 ; M#,N#
770 IMAGE 200,3X,7A
780 PRINT USING 790 ; A,B,C,D
790 IMAGE 00,DD,3X, 00,DD,3X,00,
DD,3X, 00,DD
800 PRINT USING 810 ; E,F#
810 IMAGE 00DD,3X,24A
820 RETURN
830 | ---LIST----
840 CLEAR
850 DISP "LISTING PROGRAM"
860 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
870 READ# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E,
F#
880 R#VAL(M#)
890 DISP "NOW THIS DATA FILE INC
LUDES 'R-2)' RECORDS"
900 DISP @ DISP "RECORDS"
910 DISP "INPUT RECORD NO.:"
920 INPUT R#
930 INPUT R#
940 R#R#+1
950 DISP " TO:"
960 INPUT R#
970 R#R#+1
980 IF R#<R# THEN BEEP @ GOTO 95
0
990 PRINT "LIST FROM RECORD NO.:"
R#-1 ; TO ; R#-1
1000 PRINT "-----"
1010 PRINT "NO. MINERAL NAME
CODE NO.:"
1020 PRINT " 1ST 2ND 3RD
LARGEST"
1030 PRINT "NO. CHEMICAL COMP
OSITION"
1040 FOR L=R# TO R#
1050 READ# 1,L ; M#,N#,A,B,C,D,E
1060 IF M#="" THEN 1090
1070 GOSUB 740
1080 PRINT "-----"
1100 ASSIGN# 1 TO #
1110 PRINT "LIST UP DONE"
1120 CLEAR
1130 KEY LABEL
1140 RETURN
1150 | --- CORRECT ----
1160 CLEAR
1170 DISP "CORRECT OF DATA" @ DI
SP
1180 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
1190 DISP "WHAT NO. OF RECORD DO
YOU WANT TO CORRECT,"
1200 INPUT D#
1210 D#D#+1
1220 READ# 1,D# ; M#,N#,A,B,C,D,
E,F#
1230 M#M# @ N#N#
1240
1250 IF D#-1=0 THEN 1290
1260 ASSIGN# 1 TO #
1270 DISP 100,50 @ DISP "NO REC
RD"
1280 WAIT 1000 @ CLEAR @ KEY LAB
EL @ RETURN
1290 CLEAR
1300 GOSUB 740
1310 PRINT "-----"
1320 DISP "MINERAL NAME,"
1330 INPUT M#
1340 IF M#="" THEN M#M#
1350 DISP "CODE NO.,"
1360 INPUT N#
1370 IF N#="" THEN N#N#
1380 DISP "1ST LINE"
1390 INPUT A#
1400 IF A#="" THEN A#VAL$(A#)
1410 A#VAL$(A#)
1420 DISP "2ND LINE,"
1430 INPUT B#
1440 IF B#="" THEN B#VAL$(B#)
1450 B#VAL$(B#)

```

第10表 編集プログラム

```

1460 DISP "3RD LINE,"
1470 INPUT C#
1480 IF C#="" THEN C#VAL$(C#)
1490 C#VAL$(C#)
1500 DISP "LARGEST LINE,"
1510 INPUT D#
1520 D#="" THEN D#VAL$(D#)
1530 D#VAL$(D#)
1540 DISP "CHEMICAL COMPOSITION"
-----
1550 INPUT F#
1560 IF F#="" THEN F#F#
1570 PRINT# 1,D# ; M#,N#,A,B,C,D
,E,F#
1580 PRINT "RECORD NO.:"E;"MAS C
ORRECTED AS FOLLOW,"
1590 GOSUB 740
1600 PRINT "-----"
1610 ASSIGN# 1 TO #
1620 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
1630 --- DELETE ----
1640 CLEAR
1650 DISP "DELETE OF DATA"
1660 DISP
1670 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
1680 READ# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E
,F#
1690 R#VAL(M#)
1700 DISP "WHAT NO OF RECORD DO
YOU WANT TO DELETE,"
1710 INPUT D#
1720 D#D#+1
1730 READ# 1,D# ; M#,N#,A,B,C,D,
E,F#
1740 IF D#-1=0 THEN 1780
1750 ASSIGN# 1 TO #
1760 BEEP 100,50 @ DISP "NO REC
RD"
1770 WAIT 1000 @ CLEAR @ KEY LAB
EL @ RETURN
1780 DISP "FOLLOWING RECORD" @ G
OSUB 740
1790 PRINT "-----"
1800 PRINT "WILL BE DELETED"
1810 GOSUB 670
1820 DISP "WILL BE DELETED :Y/N"
-----
1830 INPUT R#
1840 IF R#="" THEN 1870
1850 IF R#="" THEN BEEP @ GOTO
1820
1860 GOTO 1990
1870 FOR J=D#+1 TO 1501
1880 READ# 1,J ; M#,N#,A,B,C,D,E
,F#
1890 IF M#="" THEN 1930
1910 PRINT# 1,J-1 ; M#,N#,A,B,C,
D,E,F#

```

```

20 INITIAL FILE MAKING --
30 COM M#E203,M#E73,A,B,C,D,E,F
#E243
40 CLEAR @ DISP " --- INITIAL DA
TA FILE MAKING PROGRA
M"
50 DISP @ DISP "THIS PROGRAM IS
USED FOR MAKING NEW DATA FI
LE 1500 RECORDS AVAI-LABLE."
60 DISP @ DISP
70 DISP "IF YOU NEED ENTER NEW
RECORD IN THE OLD DATA FILE,
PLEASE USE:"
80 DISP "ERADCKEY IN THE EDITIN
G PROGRAM."
90 DISP "PUSH 'END LINE' KEY"
110 INPUT R#
120 CLEAR
130 DISP @ DISP "SELECT OPTION B
Y NUMBER"
140 DISP @ DISP " 1 ---- TO EDI
TING PROGRAM"
150 DISP @ DISP " 2 ---- TO SER
ACHING PROGRAM"
160 DISP @ DISP " 3 ---- MAKE N
EW DATA FILE"
170 DISP @ INPUT K#
180 IF K#="" THEN 650
190 R#VAL$(K#)
200 IF K#1 OR K#3 THEN BEEP @ GO
TO 120
210 ON K GOTO 840,850,220
220 | MAKING INITIAL DATA FILE
230 DISP "ENTER NAME OF NEW DATA
FILE IN 6 CHARACTERS"
240 INPUT D#
250 CREATE OF 1500,100
260 ASSIGN# 1 TO D#
270 M#,N#,F#="" @ A,B,C,D=E#S @
E#0
280 FOR I=1 TO 1502
290 PRINT# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E
,F#
300 NEXT I
310 M#=""
320 PRINT# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E
,F#
330 ASSIGN# 1 TO #
340 | WRITING DATA
350 ASSIGN# 1 TO D#
360 READ# 1,1 ; M#,N#,A,B,C,D,E,
F#
370 R#VAL(M#)
380 DISP "MINERAL NAME,"
390 INPUT M#
400 IF M#="" THEN M#0
410 DISP "CODE NO.:"
420 INPUT N#

```

第9表 新期ファイル作成プログラム

```

10 OPTION BASE 1
20 ! ### CONVERSION 20 TO d ###
30 CON M4E20,N#E7J,A,B,C,D,E,F
   #L24
40 DIM C1(70),D1(70),S(70),S1(7
   0),R#E30J,X1#E30J,B#E50J,Z1#
   E50J,E#E33J,C#E6J
50 CLEAR
60 DISP "  "
70 DISP "  "
80 DISP "  " Conversion Procr
   am
90 DISP "  " 20(degree) to d(
   A)
100 DISP "  "
110 DISP "  "
120 DISP
130 DISP "Sample name and no.;"
140 INPUT R#
150 DISP "Locality";
160 INPUT B#
170 DISP @ DISP "Enter 20 and he
   ight of peaks"
180 V1=0
190 DISP "If you need intensity(
   I) then enter 'I'";
200 INPUT E#E1,32J
300 GOSUB 1800
400 IF UPC*(E#E1,1J)="I" THEN V1
   =1
220 I=0
230 ON ERROR GOTO 250
240 I=I+1
250 DISP @ DISP "20 of peak";
260 INPUT C#
270 IF C#="" THEN 300
280 C1(I)=VAL(C#)
290 IF V1=0 THEN 320
300 DISP "Height of peak";
310 INPUT S(I)
320 N=1
330 IF V1=0 THEN S(I)=0
340 GOTO 240
350 OFF ERROR
360 ! ----- SORTING -----
370 U1=0 @ W#0
380 FOR I=1 TO N
390 GOSUB 1800
400 IF S(I)>X9 THEN X9=S(I)
410 NEXT I
420 M1=0 @ W2=0 @ W3=0
430 FOR I=1 TO N
440 FOR J=I+1 TO N
450 IF C1(I)<C1(J) THEN 490 ELS
   E 460
460 M1=C1(I) @ W2=D1(I) @ W3=S(I)

```

```

470 C1(I)=C1(J) @ D1(I)=D1(J) @
   S(I)=S(J)
480 C1(J)=M1 @ D1(J)=W2 @ S(J)=W
   3
490 NEXT J
500 NEXT I
510 ! ----- DATA FORMAT -----
520 CLEAR
530 DISP "-----"
540 DISP "Sample name and no. ;
   "R#
550 DISP @ DISP "Locality ; "B#
560 DISP "-----"
570 DISP " No. 20 d
   "
580 DISP "-----"
590 FOR I=1 TO N STEP 10
600 FOR J=1 TO I+9
610 IF J>N THEN 680
620 DISP USING 630 ; J,C1(J),D1(
   J),S(J)
630 IMAGE X,DD,4X,DD,DD,4X,DD,DD
   ,4X,DD,DD
640 NEXT J
650 DISP "Push 'CONT' key !!"
660 PHUSE
670 NEXT I
680 DISP "-----"
690 DISP "Are there any mistake"
   "
700 INPUT E#E1,32J
710 IF UPC*(E#E1,1J)="N" THEN 13
   40
720 IF UPC*(E#E1,1J)#"Y" THEN BE
   EP @ GOTO 690
730 ! ----- CORRECT OR DELETE --
   ----
740 CLEAR
750 DISP "Select option no."
760 DISP
770 DISP " Add data -----
   " @ DISP
780 DISP " Correct data -----
   " @ DISP
790 DISP " Delete data -----
   " @ DISP
800 INPUT K
810 IF K=0 OR K>3 THEN 740
820 ON K GOTO 830,880,1160
830 ! ----- ADD DATA -----
840 CLEAR
850 DISP "Add data !"
860 I=N
870 GOTO 230
880 ! ----- CORRECT DATA -----
890 CLEAR

```

```

900 DISP "Sample name and no. ;
   "R#
910 INPUT X1#
920 IF X1#="" THEN X1#=#
930 R#=#
940 DISP "Locality ; "B#
950 INPUT Z1#
960 IF Z1#="" THEN Z1#=#
970 B#=#
980 DISP "Enter no. of data";
990 INPUT N##
1000 IF N##="" THEN 360
1010 I=VAL(N##)
1020 DISP "20 of peak ; "C1(I)
1030 INPUT C#
1040 IF C#="" THEN 1070
1050 C(I)=VAL(C#)
1060 IF U1=0 THEN 1110
1070 DISP "Height of peak ; "S(
   C)
1080 INPUT S#
1090 IF S#="" THEN 1110
1100 S(I)=VAL(S#)
1110 GOTO 360
1120 C2=OTR(C1(I)/2)
1130 D1(I)=.77025/SIN(C2)
1140 GOSUB 1800
1150 RETURN
1160 ! ----- DELETE DATA -----
1170 CLEAR
1180 DISP "Enter no. of data";
1190 INPUT N9
1200 IF N9<0 OR N9>N THEN DISP "
   No. ;N9" of data is not fi
   led yet. @ GOTO 1180
1210 DISP "20 = "C1(N9)
1220 IF V1=0 THEN 1240
1230 DISP " I = "S(N9)
1240 DISP "Delete data Y/N";
1250 INPUT E#E1,32J
1260 IF UPC*(E#E1,1J)="N" THEN 7
   20
1270 IF UPC*(E#E1,1J)#"Y" THEN B
   EP @ GOTO 1240
1280 FOR I=N9+1 TO N
1290 J=I-1 @ C1(J)=C1(I) @ D1(J)
   =D1(I) @ S(J)=S(I)
1300 NEXT I
1310 N=N-1
1320 GOTO 360
1330 ! ----- OUTPUT -----
1340 PRINT "  "
1350 PRINT "Sample name and no.
   "
1360 PRINT @ PRINT "Locality ; "
   B#
1370 PRINT "-----"
1380 PRINT " 20 " ; d " ;"
   "
1390 PRINT " " ; " Remark"

```

```

1390 PRINT "-----"
1400 FOR I=1 TO N
1410 R#=""
1420 V3=0
1430 IF IP(D1(I))>=10 THEN V3=1
1440 IF IP(D1(I))<3 THEN V3=2
1450 IF U1=1 THEN GOSUB 1850
1460 IF V1=0 THEN GOSUB 1650
1470 IF V1 THEN GOSUB 1720
1480 NEXT I
1490 PRINT "-----"
1500 GOSUB 2000
1510 DISP @ DISP "Continue to co
   nvert 20 to d ; Y/N"
1520 INPUT E#E1,32J
1530 IF UPC*(E#E1,1J)="Y" THEN 5
   0
1540 IF UPC*(E#E1,1J)#"N" THEN B
   EP @ GOTO 1510
1550 DISP "Use Searching Program
   "
1560 INPUT E#E1,32J
1570 IF UPC*(E#E1,1J)="Y" THEN 1
   510
1580 IF UPC*(E#E1,1J)#"H" THEN B
   EP @ GOTO 1550
1590 GOSUB 2000
1600 GOTO 1640
1610 CHAIN "RAY"
1620 PRINT "  "
1630 PRINT "Convert 20 to d' do
   ne"
1640 END
1650 IF V3=0 THEN PRINT USING 16
   80 ; C1(I),D1(I),R#
1660 IF V3=1 THEN PRINT USING 16
   90 ; C1(I),D1(I),R#
1670 IF V3=2 THEN PRINT USING 17
   00 ; C1(I),D1(I),R#
1680 IMAGE DD,DD,3X, 3,DD,10X,3A
1690 IMAGE DD,DD,2X,DD,D, 11X,8A
1700 IMAGE DD,DD,3X, D,DD,3X,3A
1710 RETURN
1720 S1(I)=IP(S(I)/S#100)
1730 IF V3=0 THEN PRINT USING 17
   60 ; C1(I),D1(I),S1(I),R#
1740 IF V3=1 THEN PRINT USING 17
   70 ; C1(I),D1(I),S1(I),R#
1750 IF V3=2 THEN PRINT USING 17
   30 ; C1(I),D1(I),S1(I),R#
1760 IMAGE DD,DD,3X, D,DD,3X,DDD
   ,4X,2A
1770 IMAGE DD,DD,2X,DD,D,4X,DDD,
   4X,8A
1780 IMAGE DD,DD,3X, D,DDD,2X,DD
   0,4X,8A
1790 RETURN

```

```

1800 ! CHECK OF PEAK
1810 IF D1(I)<4.28 AND D1(I)>4.2
   35 THEN U1=2
1820 IF U1=0 THEN 1840
1830 IF D1(I)<3.35 AND D1(I)>3.3
   3 THEN U1=1
1840 RETURN
1850 ! Check Quartz
1860 IF D1(I)<4.28 AND D1(I)>4.2
   35 THEN R#="Q(35)"
1870 IF D1(I)<3.35 AND D1(I)>3.
   33 THEN R#="Q(100)"
1880 IF D1(I)<2.465 AND D1(I)>2.
   45 THEN R#="Q(12)"
1890 IF D1(I)<2.288 AND D1(I)>2.
   277 THEN R#="Q(12)"
1900 IF D1(I)<2.243 AND D1(I)>2.
   231 THEN R#="Q(3)"
1910 IF D1(I)<2.132 AND D1(I)>2.
   122 THEN R#="Q(3)"
1920 IF D1(I)<1.985 AND D1(I)>1.
   976 THEN R#="Q(5)"
1930 IF D1(I)<1.821 AND D1(I)>1.
   813 THEN R#="Q(17)"
1940 IF D1(I)<1.675 AND D1(I)>1.
   669 THEN R#="Q(7)"
1950 IF D1(I)<1.662 AND D1(I)>1.
   656 THEN R#="Q(3)"
1960 IF D1(I)<1.5434 AND D1(I)>1.
   5387 THEN R#="Q(15)"
1970 IF D1(I)<1.4552 AND D1(I)>1.
   451 THEN R#="Q(3)"
1980 IF D1(I)<1.384 AND D1(I)>1.
   38 THEN R#="Q(7)"
1990 IF D1(I)<1.372 AND D1(I)>1.
   3734 THEN R#="Q(11)"
2000 IF D1(I)<1.3732 AND D1(I)>1.
   3702 THEN R#="Q(9)"
2010 RETURN
2020 ! COMMENT
2030 IF U1 THEN PRINT "Q( ) may
   be Quartz and its inten-sit
   y <= R#TH S=49"
2040 PRINT "  "
2050 RETURN
2060 ! END MARK
2070 CLEAR
2080 DISP @ DISP
2090 DISP "  "
2100 DISP "  "
2110 DISP "  " Conversion Pro
   gram
2120 DISP "  " END
2130 DISP "  "
2140 DISP "  "
2150 RETURN

```

第11表 20→d変換プログラム

```

10 OPTION BASE 1
20 I=1:PROGRAM:----
30 COM MFC20J,NFC17J,A,B,C,D,E,F
  #24J
40 ON KEY# 1,"MINERAL" GOSUB 29
  @
50 ON KEY# 2,"CODE" GOSUB 490
60 ON KEY# 3,"3-LINE" GOSUB 680
70 ON KEY# 4,"MAX" GOSUB 1600
80 ON KEY# 5,"CHEMI" GOSUB 1830
90 ON KEY# 6,"29+@" GOTO 2640
100 ON KEY# 7,"EDIT" GOTO 2030
110 ON KEY# 8,"HELP" GOSUB 160
120 CLEAR @ KEY LABEL
130 DISP "X-RAY DATA FILE"
140 DISP "SELECT OPTION NO."
150 GOTO 150
160 ! ----HELP----
170 CLEAR @ DISP "---- X-RAY POWD
  ER DATA FILE ----"
180 DISP
190 DISP " K1 : SEARCHING BY MIN
  ERAL NAME "
200 DISP " K2 : SEARCHING BY COD
  E NO.(ASTM NO. AND OTHE
  RS)"
210 DISP " K3 : SEARCHING BY 3 S
  TRONG LINES"
220 DISP " K4 : SEARCHING BY LAR
  GEST LINE"
230 DISP " K5 : SEARCHIG BY CHEM
  ICA L SYMBOL"
240 DISP " K6 : CONVERSION PROGR
  AN FOR 2@ "
250 DISP " K7 : DATA EDITING"
260 DISP @ DISP "PUSH END LINE K
  EY" @ INPUT H$
270 CLEAR @ KEY LABEL
280 RETURN
290 ! ----SEARCH MIN. NAME----
300 CLEAR @ X1=0
310 DISP "SEARCHING BY MINERAL N
  AME" @ DISP
  ANE" @ DISP
320 DISP "INPUT MINERAL NAME";
330 INPUT A$
340 PRINT "SEARCHING BY MINERAL
  NAME" @ PRINT A$
350 IF A$="" THEN 480
360 A$=UPC$(A$)
370 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
380 FOR I=1 TO 1501
390 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E,
  F$
400 IF M$="" THEN 430
410 IF POS(M$,A$)=1 THEN X1=1 @
  GOSUB 2050
420 NEXT I
430 ASSIGN# 1 TO *
440 PRINT "-----"

```

```

450 IF X1=0 THEN PRINT A$; " IS N
  OT FILED"
460 PRINT "-----"
470 PRINT "SEARCH BY MINERAL NAM
  E DONE"
480 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
490 ! ----SEARCH CODE NO.----
500 CLEAR
510 DISP "SEARCHING BY CODE NO."
520 DISP "INPUT CODE NO.;"
530 INPUT A$
540 IF A$="" THEN 670
550 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
560 FOR I=1 TO 1501
570 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E,
  F$
580 IF A$=N$ THEN GOTO 630
590 IF M$="" THEN 610
600 NEXT I
610 PRINT "-----"
620 PRINT "CODE NO. ";A$;" IS NO
  T FILED" @ GOTO 640
630 GOSUB 2950
640 ASSIGN# 1 TO *
650 PRINT "-----"
660 PRINT "SEARCH BY COD NO. DO
  NE"
670 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
680 ! ----SEARCH 3 LINE----
690 CLEAR @ X2=0
700 DISP "SEARCHING BY 3 STRONG
  LINES"
710 DISP "INPUT 1ST LINE";
720 INPUT Q1$
730 IF Q1$="" THEN 1200
740 PRINT "SEARCHING BY"
750 PRINT "1ST LINE : ";Q1$
760 Q=VAL(Q1$)
770 GOSUB 1520
780 L1=Q1 @ L2=Q2
790 DISP "INPUT 3RD LINE";
800 INPUT Q2$
810 IF Q2$="" THEN 1210
820 PRINT "2ND LINE : ";Q2$
830 Q=VAL(Q2$)
840 GOSUB 1520
850 L3=Q1 @ L4=Q2
860 DISP "INPUT 3RD LINE";
870 INPUT Q3$
880 IF Q3$="" THEN 1330
890 PRINT "3RD LINE : ";Q3$
900 Q=VAL(Q3$)
910 GOSUB 1520
920 L5=Q1 @ L6=Q2
930 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
940 FOR I=1 TO 1501
950 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E,
  F$

```

```

960 IF M$="" THEN 1110
970 IF A>L1 AND A<L2 THEN 1000
980 IF B>L1 AND B<L2 THEN 1070
990 GOTO 1100
1000 IF B>L3 AND B<L4 THEN 1050
1010 IF C>L3 AND C<L4 THEN 1030
1020 GOTO 1100
1030 IF B>L5 AND B<L6 THEN 1090
1040 GOTO 1100
1050 IF C>L5 AND C<L6 THEN 1090
1060 GOTO 1100
1070 IF A>L3 AND A<L4 THEN 1050
1080 GOTO 1100
1090 X2=1 @ GOSUB 2050
1100 NEXT I
1110 IF X2=1 THEN 1170
1120 PRINT "-----"
1130 PRINT "1ST LINE ";Q1$
1140 PRINT "2ND LINE ";Q2$
1150 PRINT "3RD LINE ";Q3$
1160 PRINT "IS NOT FILED"
1170 ASSIGN# 1 TO *
1180 PRINT "-----"
1190 PRINT "SEARCH BY 3 LINE DON
  E"
1200 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
1210 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
1220 FOR I=1 TO 1501
1230 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E
  ,F$
1240 IF M$="" THEN 1300
1250 IF A>L1 AND A<L2 THEN 1280
1260 IF B>L1 AND B<L2 THEN 1280
1270 GOTO 1290
1280 X2=1 @ GOSUB 2050
1290 NEXT I
1300 IF X2=1 THEN 1170
1310 PRINT "1ST LINE ";Q1$
1320 GOTO 1160
1330 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
1340 FOR I=1 TO 1501
1350 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E
  ,F$
1360 IF M$="" THEN 1480
1370 IF A>L1 AND A<L2 THEN 1400
1380 IF B>L1 AND B<L2 THEN 1430
1390 GOTO 1470
1400 IF B>L3 AND B<L4 THEN 1460
1410 IF C>L3 AND C<L4 THEN 1460
1420 GOTO 1470
1430 IF A>L3 AND A<L4 THEN 1460
1440 IF C>L3 AND C<L4 THEN 1460
1450 GOTO 1470
1460 X2=1 @ GOSUB 2050
1470 NEXT I
1480 IF X2=1 THEN 1170
1490 PRINT "1ST LINE ";Q1$
1500 PRINT "2ND LINE ";Q2$

```

```

1510 GOTO 1160
1520 I RANGE OF d
1530 P=.77025/Q
1540 P0=2*RTD(ASN(P))
1550 P1=DTR((P0+.2)/2)
1560 P2=DTR((P0-.2)/2)
1570 Q1=.77025/SIN(P1)
1580 Q2=.77025/SIN(P2)
1590 RETURN
1600 ! ----SEARCH MAX LINE----
1610 CLEAR
1620 X3=0
1630 DISP "SEARCHING BY LARGEST
  LINE" @ DISP
1640 DISP "INPUT LARGEST LINE";
1650 INPUT Q$
1660 IF Q$="" THEN 1810
1670 PRINT "SEARCHING BY LARGEST
  LINE" @ PRINT Q$
1680 Q=VAL(Q$)
1690 GOSUB 1520
1700 L1=Q1 @ L2=Q2
1710 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
1720 FOR I=1 TO 1501
1730 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E,
  F$
1740 IF M$="" THEN 1790
1750 IF D>L1 AND D<L2 THEN X3=1
  @ GOSUB 2050
1760 NEXT I
1770 IF X3=1 THEN 1790
1780 PRINT "LARGEST LINE ";Q$;" I
  S NOT FILED"
1790 ASSIGN# 1 TO *
1800 PRINT "-----"
1810 PRINT "SEARCH BY LARGEST LI
  NE DONE"
1820 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
1830 ! SEARCHING BY CHEMICAL ELE
  MENTS
1840 CLEAR @ X4=0
1850 DISP "SEARCHING BY CHEMICAL
  ELEMENTS"
1860 DISP
1870 DISP "INPUT CHEMICAL SYMBOL
  LIKE Au"
1880 INPUT X$
1890 PRINT "SEARCHING BY CHEMICA
  L SYMBOL" @ PRINT X$
1890 IF X$="P" THEN X$="P "
1900 IF X$="B" THEN X$="B "
1910 IF X$="F" THEN X$="F "
1920 ASSIGN# 1 TO "DATA-1"
1930 FOR I=1 TO 1501
1940 READ# 1,I ; M$,N$,A,B,C,D,E,
  F$
1950 IF M$="" THEN 1980
1960 IF POS(F$,X$)=0 THEN X4=1 @
  GOSUB 2050

```

```

1970 NEXT I
1980 ASSIGN# 1 TO *
1990 PRINT "-----"
2000 IF X4=0 THEN PRINT X$;" BEA
  RING MINERAL IS NOT FILED"
2010 PRINT "SEARCHING BY CHEMICA
  L SYMBOL DONE"
2020 CLEAR @ KEY LABEL @ RETURN
2030 CHAIN "EDIT"
2040 CHAIN "29+@"
2050 ! ---- DATA FORMAT ----
2060 PRINT "-----"
2070 PRINT USING 2080 ; M$,N$
2080 IMAGE 20@,3X,7@
2090 PRINT USING 2100 ; A,B,C,D
  2100 IMAGE DD,DD,3X, DD,DD,3X,DD
  DD,3X, DD,DD
2110 PRINT USING 2120 ; E,F,$.
2120 IMAGE 4D,2@,24@
2130 RETURN
2140 END

```

第12表 検索プログラム

参考文献

前田英明, 1979, マイコンのための BASIC の使
 いか方. 共立出版(株)
 KLUG, H. P., 1954, X-ray Diffraction Proce-
 dures. For Polycrystalline and Amor-
 phous Materials. John Wiley & Sons
 Inc.
 日立製作所, 1979, ベーシックマスターレベル
 2 MB-6880L2 取扱説明書
 特集データベース, 1980, ASCII 4, No.34
 横河・ヒューレット・パッカド(株), 1980, HP-
 85 プロフェッショナル・パーソナル・コン
 ピュータ操作ハンドブック