

AbsC の使い方

目次

1	はじめに	2
2	手早く使いはじめる	2
2.1	最低限の使い方	2
2.2	具体例	2
3	重量、形状、密度、厚さ	3
3.1	吸収係数を計算する基礎になる物質量の指定	3
3.2	吸収係数を指定した時の「重量」の決定	3
3.3	密度を指定することによる試料寸法の計算	3
4	希釈物質	4
5	組成入力欄	5
6	吸収スペクトルの表示とその操作	5
7	蛍光スペクトルの表示	6
7.1	大気、フィルターの効果	6
7.2	絶対強度の計算	6
7.3	蛍光強度シミュレーションの確からしさ	6
8	データベースの不備	6
9	組成入力以外の入力欄	7
10	表示と使い方	8
11	「密度、厚さ」と「重量、底面積」の関係	9
11.1	共通	9
11.2	「密度、厚さ」が指定された時の吸収係数の計算	9
11.3	「重量、底面積」が指定された時の吸収係数の計算	10
11.4	$M_r = M'_r$ 、 $\gamma = \gamma'$ であることの確認	11

1 はじめに

AbsC は、透過法での XAFS 測定の際、最適な試料濃度や厚さを決定するのに必要となる吸収係数の計算を支援する事を目的としたプログラムです。また、吸収スペクトルの簡単なシミュレータとしても使えます。

2 手早く使いはじめる

2.1 最低限の使い方

AbsC の使い方はそれほど難しくありません。

まず、基本の規則として、AbsC のウインドウ上で「薄黄色の四角枠」になっている部分は AbsC が人間に何かを表示するところで入力できません。一方、AbsC 上で「白い四角枠」は入力が可能な欄ですが、場合によっては AbsC が値を表示することもあります。

この事を知った上で、とにかく使ってみよう、という場合は、

1. 「対象物質組成」と書かれた欄に、適当に化学式を記入する (どのような化学式が入力できるかは、後の「組成入力欄」を見て下さい。AbsC はかなり柔軟な表現を許します)、
2. 「元素選択」で、 $\Delta\mu_t$ を計算する対象になる元素と、吸収端を選択する、
3. ウインドウ上部の「錠剤形状」「直径」の数字を見ておく、
4. 「 $\Delta\mu_t$ 」と書かれている欄の右の白い入力欄に「1」と入力する、

としてみてください。これで最低限の結果が出ます (画面下部に表示されたスペクトルのグラフと「対象物質」の「重量」が計算結果です)。

2.2 具体例

前述の、「最低限の使い方」で何が起きているのかをもう少し具体的に解説してみます。AbsC を起動した直後に以下の操作をしてみてください。

1. 「対象物質組成」に「Fe₂O₃」と入力する。
この時すでにグラフが表示されます。このグラフは「Fe₂O₃」がある適当な厚さあった時の吸収スペクトルで、縦軸の値を気にしなければ、対象物質の吸収スペクトルのシミュレーションになっています。
2. 「錠剤形状」の欄を確認する。
AbsC を起動した状態のままなら、「直径」が「7mm」と表示されているはずですが、この欄は純粋な入力欄で、違う大きさの錠剤を作るつもりならそのサイズを入力すれば良いのですが、今はこのままにします。
3. 「元素選択」で「Fe」の「K」を選択する。
この時点では何も起こりません。ここでの入力は次に行うエッジジャンプの計算をどのエネルギー点で行うかの指定です。

4. 「 $\Delta\mu t$ 」の右の入力欄に「1」と入力する。

この結果、「Fe-K エッジでのエッジジャンプ ($\Delta\mu t$) が 1 である」ような、吸収スペクトルが表示されます。

この時更に、 $\Delta\mu t$ が 1 になるような Fe_2O_3 の量が計算されて上部の、物質重量や厚さの欄に表示されます。実際に見てみると、「対象物質」の「重量 (mg)」として「1.497」と表示されているはずですが、これは、 Fe_2O_3 を 1.497mg 計量して、直径 7mm の均一な厚さの錠剤に成形すると、その錠剤状の試料の Fe-K エッジでの $\Delta\mu t$ が 1 になることを意味します。

この時、「体積」や「厚さ」も表示されていますが、これらの数字は正しくありません。これは、対象物質の密度が正しく指定されていないからです (AbsC 起動時、密度は $1[\text{g}/\text{cm}^3]$ になっている)。

3 重量、形状、密度、厚さ

3.1 吸収係数を計算する基礎になる物質量の指定

AbsC では、吸収係数 ($\Delta\mu t$ も含む) の計算を行う際の物質の量を指定するのに、「重量、底面積 (錠剤の直径)」のペアを与える方法と、「密度、厚さ」のペアを与える方法があります。

3.2 吸収係数を指定した時の「重量」の決定

逆に $\Delta\mu t$ を指定すると、その値のエッジジャンプを与える「重量」と「厚さ」が計算されます。いずれの場合も「直径」と「密度」は純粋な入力項目で、AbsC がこれらの値を変更することはありません。

$\Delta\mu t$ が指定された時には、「直径」は指定された値のまま、その直径の錠剤を作るのに必要な物質の重量がまず最初に計算されます。さらにその重量と「密度」を使って、錠剤の体積と厚さが計算されます。

錠剤の直径は錠剤を作る人が決めることができる量です。これが決まっているとすると、「対象物質」の重量は計算された値に合わせて比較的簡単に計量できるので、それで試料の準備をすすめることができます。

3.3 密度を指定することによる試料寸法の計算

ところが、例えば前述の例で、 Fe_2O_3 1.497mg が必要と計算されても、それが実際の量として多いのか少ないのか (試薬ビン 1 本分なのか、耳かき一杯もないのか)、あるいは、できた錠剤を扱うとき、ピンセットでつまめる厚さになるかどうかは、ある程度経験がないとピンとこないでしょう (目安として、多くの場合は、数 10mg から数 100mg 程度が妥当な数字です)。この様なとき、「密度」を指定すると、試料が寸法的にどの程度のものになるのか、ある程度見当を付けることができます。

前節の例を実行した直後だと、錠剤の厚さは $0.039\text{mm}(39\mu\text{m})$ と表示されているはずですが、これは、対象物質の密度が仮に 1 だった時の値で意味がありません。 Fe_2O_3 の密度は $5.2\text{g}/\text{cm}^3$ 程度ですので、この値を入力してみます。そうすると、対象物質の「重量」が増え、計算された吸収曲線の値も大きくなったはずですが、これは、「錠剤の形状が先ほど指定 / 計算された直径

7mm、厚さ 0.039mm のまままだとして、そこに密度 $5.2\text{g}/\text{cm}^3$ で Fe_2O_3 が詰まっていたら」という計算が行われたからです。

そこでもう一度、 $\Delta\mu t$ に 1 を指定します (今の場合、この入力欄の値はすでに 1 になっているので、入力欄をマウスで選んでもう一度「Enter」を押します)。そうすると、対象物質の量は再び 1.497mg に戻ります (同じ、エッジジャンプを得るのに必要な Fe_2O_3 の量は、密度に依存しない)。一方、厚さの値は、先ほどまでと異なり $0.007\text{mm}(7\mu\text{m})$ となりました。これは密度が上がったからで、これが錠剤が出来上がった時に期待される厚さです。

しかしながら、実際に作った錠剤の密度が本当に $5.2\text{g}/\text{cm}^3$ になっているという保証はありません。理想的な Fe_2O_3 があつた時、その密度が $5.2\text{g}/\text{cm}^3$ だというのなら、粉末を圧縮して作った錠剤の密度はそれより小さいというのが普通でしょう。このため、「厚さ」は目安の量にしかありませんし、「密度」の数値を厳密に調べて入力してもあまり意味はありません。

4 希釈物質

前節の例で、参考程度の値とは言え、 Fe_2O_3 試料の厚さは $7\mu\text{m}$ になってしまいました。これは、錠剤成形器から取り出すのも難しいと思われる厚さです。この様な時、希釈物質を使うと助かる場合があります。ここで言う希釈物質とは、X線の吸収が少ない軽い元素で出来た物質で、吸収スペクトルにはあまり影響を与えず、試料の体積を増やすのに使える物質です。この様な目的のためによく使われる物質の一つは BN です。

そこで BN を希釈物質に使った場合の計算を行うため、「希釈物質組成」に「BN」と入力しましょう。また、BN の密度は約 $2.3[\text{g}/\text{cm}^3]$ とわかっているので、希釈物質の「密度」の欄に 2.3 と入力しましょう。この時点では希釈物質の「重量」は「0」、対象物質の「割合」は「100%」などと指定されていますので、この様に入力しても計算には何も影響はありません。

次に、BN をできるだけ沢山混ぜることを考えます。しかし、その結果、吸収係数が大きくなりすぎると (試料を X 線が透過しなくなるので) 測定ができなくなります。通常、質の良い XAFS スペクトルを得るには吸収端直後の吸収係数が大きくなるエネルギーでの試料全体の吸収量 (μt) が 3 程度以下になるのが良いと良いと言われています。

そこで今の時点での「 $\mu(+)_t$ (吸収端直後の吸収係数)」の値を見てみます。ここまでの例に従って操作してきた場合、この値は「1.152」になっているはずですが、すなわち、まだ全体の吸収量が小さいので (3 に達していないので)、もう少し吸収を大きくしても構わないということです。そこで、「 $\mu(+)_t$ (吸収端直後の吸収係数)」の入力欄に「2.5」と入力して Enter を押してみます。

そうすると、対象物質の量を変えない (=エッジジャンプの大きさを変えない) ままで、吸収端直後の吸収係数を 2.5 にするのに必要な希釈物質の量が計算されます。また、その結果のスペクトルも同時に表示されます。実際に結果を見てみると、「希釈物質」の「重量」は「70.626」(mg)、これと対象物質を合わせた合計の「体積」は「30.995」 mm^3 で、直径 7mm の錠剤の「厚さ」は「0.805」(mm) になることがわかります。これなら、ピンセットで扱えそうです。また、エッジジャンプの大きさが 1 のままになっていることも確認してみてください。

もし 0.8mm ではまだ薄すぎて不安なら、「 $\mu(+)_t$ (吸収端直後の吸収係数)」の入力欄に「3」あるいは「4」などと入力して Enter を押せば、もう少し厚い試料を作るのに必要な希釈物質の量が計算できます (但し、「4」はかなり大きな数字で、オススメできません)。

以上で、測定に適した試料を作製するのに必要な、物質の量がわかりました。 Fe_2O_3 を約 1.5mg 計量し、70mg の BN とよく混合して直径 7mm の錠剤にすればよいのです。

もう一度注意しますが、錠剤形成時の圧力が小さいと実際にできる錠剤の密度が下がって厚さは 0.8mm より大きくなるかもしれません。しかし、その場合でも、吸収スペクトルには何も影響を与えません。

5 組成入力欄

対象物質組成や希釈物質組成の入力欄には、次のような規則で化学式を入れます。数字は整数で無くても良いので組成比を正しく入力して下さい。丸カッコ '()' や、角カッコ '[']' を使用することができます。角カッコ '[']' は、モル比ではなく重量比を表すために使います。

- 例 1: GaInAs₂, Ga_{0.5}In_{0.5}As, In₁Ga₁As₂ 等は全て同じ意味になります。
- 例 2: O_{0.2}N_{0.8} : 大気を表します。
- 例 3: 丸カッコに付けた数字はモル比と解釈されて展開されます。
(GaAs)_{0.5}(InAs)_{0.5} = Ga_{0.5}In_{0.5}As
- 例 4: 丸カッコはネスト (入れ子構造) にしても構いません。
((GaAs)_{0.5}(InAs)_{0.5})_{0.5}(AlAs)_{0.5} = Ga_{0.25}In_{0.25}Al_{0.5}As
- 例 5: 角カッコに付けた数字は重量比を表すものと解釈して展開されます。
[H₂O]₉₅[CuSO₄]₅ = (H₂O)_{95/18}(CuSO₄)_{5/160} = H_{10.5} O_{5.4} Cu_{0.031} S_{0.031}
重量 100 分率と考えるともかまいませんが、比が正しければ合計が 1.0 や 100 になる必要はありません。角カッコはネストできません。
また、角カッコに入った化学式と入っていない化学式を混在させることはできません。
[H₂SO]₉₅(CuSO₄) は受け付けられない。
- 例 6: 角カッコと丸カッコは同時に使用できます。
[Cu(OH)₄]₁₀[H₂O]₉₀

6 吸収スペクトルの表示とその操作

スペクトルの表示範囲を変えたり、拡大縮小するためには「表示範囲」の入力欄に、スペクトル表示の「始点」と「末尾」を指定すれば良いのですが、もっと簡便な方法があります。

スペクトル表示の上で、マウス左ボタンを押し、左右に動かすと表示範囲が左右に動きます (横軸の平行移動)。また、マウスホイールを回すと表示範囲の「幅」が変わります (横軸の拡大縮小)。縦軸のスケールは、スペクトルが縦幅いっぱいになるように常に調整されます。

スペクトルに重なって緑の線と文字で表示されるのは、試料に含まれる元素の吸収端エネルギーです。「計算点」と表示されるのは「 $\Delta\mu t$ 」を計算しているエネルギー点を示します。

スペクトルの下に、青色の線と文字で表示されるのは、試料に含まれる元素の特性蛍光 X 線エネルギーです。

7 蛍光スペクトルの表示

AbsC は対象物質の蛍光スペクトルの表示も行います。蛍光スペクトルを表示するには、特別な操作は必要なく、「励起エネルギー (励起 E[keV])」を入力すると、そのエネルギーで励起した時の蛍光スペクトルが表示されます。

励起エネルギーを入力する簡便な方法として、グラフ表示の上でシフトキーを押しながらマウスを動かすことでエネルギーを指定できます。

7.1 大気、フィルターの効果

AbsC では、試料と検出器の間の大気の影響や、適当なフィルタを挿入した時のフィルタの影響を考慮したスペクトルを計算できます。

大気の影響を入れるには「大気 [cm]」の欄に、試料と検出器の間で X 線が大気中を走る距離を入力します。もうひとつある「距離 [cm]」は試料と検出器の間の距離です。大気中の測定では両方に同じ数字を入れて下さい。真空槽等があって試料と検出器間の距離と、大気中を走る距離が違う場合には違う数字になります。

フィルタの影響を考慮するには、「フィルタ 1」、「フィルタ 2」の欄の「組成」「厚さ」「密度」にフィルタの組成や厚さ密度を入力して下さい。組成さえ正しければ「厚さ」や「密度」が適当でも、大体のフィルタの効果がわかります。

7.2 絶対強度の計算

「I0[個/s]」「MCA Ch[keV]」「分解能 (FWHM)[keV]」「距離 [cm]」「検出器半径 [cm]」の入力項目は、蛍光の絶対強度を計算するための入力項目です。正しい数字になっていなくても、ひとつのスペクトルの中での各ピークの相対強度比や、別々の計算をした時のそれぞれのピークの強度比等の相対強度は正しいので、あまり気にする必要はありません。

7.3 蛍光強度シミュレーションの確からしさ

AbsC での蛍光強度シミュレーションでは、K 線と L 線の分岐比はほぼ正しく計算されています。K 線同士の分岐比はそれほどきちんとは計算されていませんが、ある程度正しくなっています。L 線同士の分岐比は計算されておらず、固定の比率で表示していますので目安だと思って下さい。

8 データベースの不備

AbsC が持っているデータベースでは、一部の元素に関しては LI, LII, LIII の全部の値を持っていなかったり、計算された吸収係数の値がおかしくなる部分が有ります (4f 遷移金属の L 吸収端などで顕著)。このような症状はわかっているのですが、系統的に使える他のデータベースが無いため現状、放置されています。良い解決方法があればお教え下さい。

9 組成入力以外の入力欄

この節の記述は、すこし古いバージョンの AbsC に対応した記述で、今後改定していく予定です。現在の AbsC を扱う場合でも参考になるかもしれませんが、現在のバージョンの動作と対応していない部分がある可能性が有ります。

- 密度 ((Target の)Density) : 試料の密度を入れます。他の物質と混合して希釈する様な場合は、次のバインダの項目で入力しますので、ここは対象物質のみの密度をそのまま入れてください。
わからなければ適当な数字でも大丈夫です。その場合、「厚さ」は計算に正しく反映されませんが、計算の結果得られた「 μt 」や「重量」は密度と無関係に正しくなります(その重量を取って、指定の径のシリンダに入れると、その μt になる)。
- バインダ組成 (Binder Comp.) : 試料の希釈に使う物質の化学式を入れます。
式の書き方は対象組成と同じです。
- 密度 ((Binder の)Density) : 希釈物質の密度を入れます。
これも不明なら適当な数字を入れて下さい。(BN の密度は 2.34 g/cm³)
- 対象/バインダ (Tgt/Bnd)[mol%]: 測定対象物質と希釈物質のモル比 (を%で表したもの) を入力します。
- 対象/バインダ (Tgt/Bnd)[Wt%]: 測定対象物質と希釈物質の重量比を (を%で表したもの) を入力します。
- 厚さ (Thickness)[mm] : 希釈物質込みの試料の厚さを入力します。
- 元素選択 (Select Element) : 吸収端原子の選択。(対象物質の構成元素元素が候補になります)
- 吸収端 (Absorption Edge) : 吸収端の種類 (K 端、LI 端... 等)。
- 吸収量計算点 (Center)[keV]: 吸収係数を計算するエネルギー。
吸収端原子と吸収端の種類を決めると吸収端の数字が出ますが、他の値を入れることも可能です。
- $\Delta\mu t$ (d- μt): 吸収端前後での $\Delta\mu t$ の値。
入力欄は目標値を入力して最適な厚さやバインダの量を計算する際に使うものですが、現在は機能しません。
- $\mu(+)$ t: 吸収端直後の (指定したエネルギー直後の) μt の値。
入力欄は目標値を入力して最適な厚さやバインダの量を計算する際に使うものですが、現在は機能しません。
- 円筒直径 (Cylinder Dia.)[cm] : ペレットの直径を入力します。
- 体積 (Vol.)[cm] : ペレットの体積を表示します。
- 総重量 (Weight)[mg] : 対象物質とバインダの混合物の総重量を表示します。
- 対象重量 (Target)[mg] : 対象物質の重量を示します。

- バインダ (Binder)[mg] : バインダの重量を示します。
- Es, Ee [keV]: グラフ表示の範囲を決めています。(吸収端エネルギーからの相対値)

10 表示と使い方

この節も古い記述です。

- $\Delta\mu t$, d-mu t : 吸収端前後での μt の変化。
- $\mu(+)$ t, mu t : 通常の XAFS 測定時、吸収係数が最大となる点での μt 。
- 透過率, Transmission : 指定したエネルギーの X 線の透過率 ($\mu(\text{center})$ と「厚さ」で計算される)。
- $\Delta\mu$, d-mu : 吸収端吸収端前後での μ の変化。
- $\mu(\text{center})$, mu(center) : 指定したエネルギー位置での線吸収係数 μ 。
- $\mu(-/+)$, mu(-/+): 指定したエネルギー位置 $\pm 1\text{eV}$ の位置での線吸収係数。

11 「密度、厚さ」と「重量、底面積」の関係

この節は、最新の記述ですが、プログラム内部での考え方話ですので、通常は不要です。

AbsC では、吸収係数の計算を行う際の物質の量を指定するのに、「密度、厚さ」のペアを与える方法と、「質量、底面積」を与える方法がある。ここでは、覚書としてプログラムの内部で両者をどのようにして統一的に扱っているかを記録する。

11.1 共通

吸収係数の計算対象は2つの物質、「対象物質 (Target, T)」と「希釈物質 (Binder, B)」の混合だと考える。

化学式 $A_a B_b C_c \dots$ で表される対象物質 (T) の質量吸収係数 μ_M^T は

$$\mu_M^T = \frac{\sum_{i \in T} m_i x_i \mu_M^i}{\sum_{i \in T} m_i x_i} = \frac{\sum_{i \in T} m_i x_i \mu_M^i}{M^T}$$

と表せる。ここで、 m_i は各元素 A, B, C, \dots の原子量を、 x_i は各組成 a, b, c, \dots を表し、 $\mu_M^i [\text{cm}^2/\text{g}]$ は元素の質量吸収係数である。組成 x_i は整数とは限らない。この式の分母の

$$\sum_{i \in T} m_i x_i = M^T$$

は対象物質の分子量である。

希釈物質 (B) の質量吸収係数も同様に、

$$\mu_M^B = \frac{\sum_{i \in B} m_i x_i \mu_M^i}{\sum_{i \in B} m_i x_i} = \frac{\sum_{i \in B} m_i x_i \mu_M^i}{M^B}$$

と表せる。 M^B は希釈物質の分子量である。

また、混合物質中で対象物質 1mol に対する希釈物質の量を γ とする (混合物質中の対象物質、希釈物質それぞれの量を N_T, N_B [mol] としたとき、 $N_T : N_B = 1 : \gamma$)。

11.2 「密度、厚さ」が指定された時の吸収係数の計算

対象物質、希釈物質の密度が $\rho^T, \rho^B [\text{g}/\text{cm}^3]$ である時、それぞれの 1mol 当たりの体積は、 $V^T = M^T/\rho^T, V^B = M^B/\rho^B [\text{cm}^3/\text{mol}]$ であるので、対象物質を 1mol 含む混合物質の体積は $V = V^T + \gamma V^B$ となる。従って、この混合物質中での対象物質の密度は、

$$\rho^{T'} = \frac{M^T}{V} = \frac{M^T}{M^T/\rho^T + \gamma M^B/\rho^B} = \rho^T \rho^B \frac{M^T}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B}$$

希釈物質の密度は、

$$\rho^{B'} = \rho^T \rho^B \frac{\gamma M^B}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B}$$

となる。以上から、混合物質の線吸収係数 μ_ℓ を計算すると

$$\begin{aligned}
 \mu_\ell &= \rho^{T'} \mu_M^T + \rho^{B'} \mu_M^B \\
 &= \rho^T \rho^B \frac{M^T}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B} \frac{\sum_{i \in T} m_i x_i \mu_M^i}{M^T} + \rho^T \rho^B \frac{\gamma M^B}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B} \frac{\sum_{i \in B} m_i x_i \mu_M^i}{M^B} \\
 &= \frac{\rho^T \rho^B}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B} \left\{ \sum_{i \in T} m_i x_i \mu_M^i + \gamma \sum_{i \in B} m_i x_i \mu_M^i \right\} \\
 &= M_r \{ \mu_0^T + \gamma \mu_0^B \}
 \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
 M_r &= \frac{\rho^T \rho^B}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B} \\
 \mu_0^T &= \sum_{i \in T} m_i x_i \mu_M^i \\
 \mu_0^B &= \sum_{i \in B} m_i x_i \mu_M^i
 \end{aligned}$$

という記号を導入した。

最後に対象物質の厚さが t であるとき、対象物質による吸収の大きさは

$$\mu_\ell t = M_r t \{ \mu_0^T + \gamma \mu_0^B \} \quad (1)$$

となる。この式の中で μ_0^T と μ_0^B は物質の量に関係なく物質の種類だけで決まる。 $M_r t$ と γ は、物質の量とその比に依存し、物質の密度と厚さを指定することで決まる。

11.3 「重量、底面積」が指定された時の吸収係数の計算

対象物質と希釈物質がそれぞれ g^T 、 g^B [g] 含まれた混合物質を底面積 S [cm²]、厚さ t [cm] の錠剤状 (場合によっては、膜状、シリンダ状) に成形したとき、その中の対象物質と希釈物質の密度 $\rho^{T'}$ 、 $\rho^{B'}$ [g/cm³] は

$$\rho^{T'} = \frac{g^T}{St}, \quad \rho^{B'} = \frac{g^B}{St}$$

となる。これらを使って、 $\mu_\ell t$ を計算すると

$$\begin{aligned}
 \mu_\ell t &= (\rho^{T'} \mu_M^T + \rho^{B'} \mu_M^B) t \\
 &= \frac{g^T}{St} \frac{\sum_{i \in T} m_i x_i \mu_M^i}{M^T} t + \frac{g^B}{St} \frac{\sum_{i \in B} m_i x_i \mu_M^i}{M^B} t \\
 &= \frac{g^T}{SM^T} \mu_0^T + \frac{g^B}{SM^B} \mu_0^B \\
 &= \frac{g^T}{SM^T} \left\{ \mu_0^T + \frac{g^B M^T}{g^T M^B} \mu_0^B \right\} \\
 &= M'_r t \{ \mu_0^T + \gamma' \mu_0^B \}
 \end{aligned}$$

となる。ただし、

$$M'_r = \frac{g^T}{SM^T t} \quad M'_r t = \frac{g^T}{SM^T}$$

$$\gamma' = \frac{g^B M^T}{g^T M^B}$$

である。

ここでも、式1と同様に $M'_r t$ と γ' が物質の量とその比に依存する量である。違いは、 $M'_r t$ と γ' は物質の重量と底面積を指定することで決まることである。

11.4 $M_r = M'_r$ 、 $\gamma = \gamma'$ であることの確認

分子量 M^T 、 M^B [g/mol] の物質が g^T 、 g^B [g] あるとき両者のモル数は、 g^T/M^T 、 g^B/M^B [mol] である。従って、対象物質 1 モルに対する希釈物質の割合 γ は

$$\gamma = \frac{g^B/M^B}{g^T/M^T} = \frac{g^B M^T}{g^T M^B} = \gamma'$$

となる。この γ を使って M_r の計算を進めると

$$\begin{aligned} M_r &= \frac{\rho^T \rho^B}{\rho^B M^T + \gamma \rho^T M^B} \\ &= \frac{\rho^T \rho^B}{\rho^B M^T + \frac{g^B M^T}{g^T M^B} \rho^T M^B} \\ &= \frac{\rho^T \rho^B g^T}{g^T M^T \rho^B + g^B M^T \rho^T} \\ &= \frac{g^T}{\frac{g^T}{\rho^T} M^T + \frac{g^B}{\rho^B} M^T} \\ &= \frac{g^T}{V^T M^T + V^B M^T} \\ &= \frac{g^T}{V M^T} \\ &= \frac{g^T}{S M^T t} = M'_r \end{aligned}$$

となる。