

冶金产品化学分析
分光光度法通则

UDC 669:543.06

GB 7729—87

Chemical analysis of metallurgical products
General rule for spectrophotometric methods

1 适用范围

- 1.1 本通则仅就冶金产品化学分析中分光光度法国家标准的制(修)订、所使用的分光光度计以及它们所涉及的主要术语、符号和理论,在本标准适用的范围内,作出共同性的论述、要求和规定,但不涉及每一项分光光度法和每一类分光光度计的具体内容和操作细节。
- 1.2 凡制(修)订冶金产品化学分析分光光度法国家标准时,应遵守本标准。

2 术语和符号

- 2.1 光辐射——又称“光”。是以电磁波形式传递的一种辐射能,波谱中的一个小区域。本标准中的“光”,系指波长约在180~1 000nm区域的近紫外光谱区,可见光谱区和部分近红外光谱区。
- 2.2 入射光强度——投射到介质外表面的光辐射的强度,符号为 I_0 。
- 2.3 透射光强度——透过介质后光辐射的强度,符号为 I 。
- 2.4 透射——光辐射通过介质后,其波长不发生改变。
- 2.5 透射率——透射光强度(I)与入射光强度(I_0)之比值,符号为 τ 。数学表达式为:

$$\tau = \frac{I}{I_0}$$

- 2.6 光吸收——入射光通过与介质的相互作用,转变为另外一种形式的能。
- 2.7 吸光度——透射率(τ)倒数的对数(以10为底),符号为 A 。数学表达式为:

$$A = \lg \frac{1}{\tau}$$

- 2.8 摩尔吸收系数——光程(b)以厘米(cm)为单位、吸光物质的量的浓度(c)以摩尔/升(mol/L)单位所表示的吸收系数,符号为 ϵ ,它是与吸光物质和入射光频率有关的特征常数。数学表达式为:

$$\epsilon = \frac{A}{bc}$$

单位为 $\text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

- 2.9 吸收光谱——分子吸收光谱的简称。为吸光物质溶液在一定浓度和光程时,吸光度(或吸光度的任意函数)对波长(或波长的任意函数)绘成的曲线图。每种物质的吸收光谱表示该物质的特征。
- 2.10 分光光度法——又称分子吸收分光光度法,可简称光度法。是一种用作物质成分的定性、定量分析的测试技术。光辐射经波长选择器得到适宜的波带,根据物质的特征吸收光谱,检测吸光物质对确定波带光能的吸收,即可得到所测物质的定性、定量结果。
- 2.11 分光光度计——简称光度计。为提供两束光辐射能量的比值(或该比值的函数,它们均是光谱位置的函数)而设计的具有组合装置的一种光学仪器。两束光可以从时间、空间或同时从时间和空间上相

分离。

利用色散元件可在任意选择的波长(仪器允许的范围)内提供高纯度光辐射的精密光度计通常称为分光光度计。用滤光片的光度计称为滤光片光度计,笼统称为分光光度计。

2.12 光度读数——通常是指所用光度计的刻度读数。一般的光度计,读数刻度为透射率(τ)、吸光度(A),或者与之成比例的任意刻度表示法。

2.13 参比溶液——用来与待测物质的吸收溶液进行比较的溶剂或补偿溶液。

2.14 补偿溶液——有的分光光度法不宜使用溶剂作参比溶液,需要用“空白”试液、不发色的试液或者发色后再退色的试液等作参比溶液。这些试液统称为补偿溶液。

2.15 背景吸收——消除干扰后,试液中除待测元素与显色剂生成的吸光物质外,其他元素形成的离子、分子、化合物或络合物产生的吸收。

2.16 试剂空白——作为杂质存在于溶剂及试剂中的待测元素与显色剂生成的吸光物质产生的吸收。

3 理论

3.1 分子吸收分光光度法的基本定律是朗伯(Lambert)-波格(Bouguer)定律和比尔(Beer)定律。

3.1.1 朗伯-波格定律

当一束平行的、强度为 I_0 的单色光(入射光)以垂直于界面的方向入射,通过一具有平面的平行表面,并且是均匀的、各向同性的、不发光也无散射作用的吸光介质,同时,通过的光程为 b ,则透射光强度 I 由式(1)表示:

$$I = I_0 \cdot e^{-Kb} \dots\dots\dots (1)$$

式中: e ——自然对数的底;

K ——线性吸收系数。

3.1.2 比尔定律

在其他因数为确定值的情况下,平行单色光束的强度随着吸光化合物的浓度增加而按指数形式减小。其表达式为:

$$I = I_0 \cdot e^{-K_m \rho} \dots\dots\dots (2)$$

或者是:

$$I = I_0 \cdot e^{-K_c c} \dots\dots\dots (3)$$

式中: K_m 和 K_c ——吸收系数,在给定实验条件下为常数;

ρ ——质量浓度(g/L);

c ——物质的量浓度(mol/L)。

3.1.3 朗伯-波格定律和比尔定律的结合式

朗伯-波格定律和比尔定律相结合,常称为朗伯-比尔定律。简称为比尔定律。

其单一表达式为:

$$I = I_0 \cdot 10^{-\epsilon b \rho} \dots\dots\dots (4)$$

或者是:

$$I = I_0 \cdot 10^{-\epsilon b c} \dots\dots\dots (5)$$

式中: ϵ ——质量吸收系数,在给定实验条件下为常数。

3.2 朗伯-比尔定律的加和性

当一束平行单色光以垂直入射方式通过一具有平面的平行表面,并且是均匀的、各向同性的、不发光也无散射作用的由 n 种相互不起作用的溶于溶液的化合物所组成的介质,则总吸光度等于 n 种特征吸光度的总和。

3.3 朗伯-比尔定律的变换式

利用3.2条的加和性原理,可以得到朗伯-比尔定律的变换式,即: