

5-6.715
282

岩石 矿物的
X射线荧光光谱分析

[苏]B.П.阿福宁 T.H.古尼切娃

宋吉人 周国清 译

地质出版社

内 容 提 要

X射线荧光光谱法可分析物质的化学成分,本书就是研究这种方法的基
本理论和实际应用的专题著作。它着重于用现代的多道仪器,及自动处理测
量数据的方法来进行岩石、矿物的分析,并简要地说明了现代的自动化X射
线分析装置的特性。

本书可供分析实验室的工程技术人员使用,也可供有关部门,如:黑色、
有色金属,水泥,玻璃和其他工业部门从事X射线光谱分析的专业人员及高
等院校有关师生参考。

中国地质科学院测试所马光祖同志对本书的出版过程中,大力支持,在
此表示感谢。

参加本书校阅工作的有辽宁省地质局中心实验室彭天祥同志、北京大学
化学系李安模同志,中国地质科学院测试所安庆骥同志。

В. П. Афонин Т. Н. Гуничева
рентгеноспектральный флуоресцентный
Анализ Горных пород и минералов
Издательство «Наука», 1977.

岩石 矿物的 X射线荧光光谱分析

[苏]В. П. 阿福宁 Т. Н. 古尼切娃

宋吉人 周国清 译

*

地质部书刊编辑室编辑

地质出版社出版

(北京西四)

地质印刷厂印刷

(北京安德路47号)

新华书店北京发行所发行·各地新华书店经售

*

开本: $850 \times 1168^{1/32}$ ·印张: $7^{3/16}$ ·插页: 2个·字数: 193,000

1980年10月北京第一版·1980年10月北京第一次印刷

印数1—2,900册·定价1.30元

统一书号: 15038·新535

序 言

在测定矿物原料的元素组成时，X射线荧光光谱法的作用在日益增长。它的基本优点是：效率高，速度快，所测的元素和浓度范围广，可定量测定每个元素而与样品的总化学成分无关；对样品可进行非破坏性分析；有较高的测定准确度（相对误差1—5%）。此外，在X射线光谱仪上测得的结果，便于下一步用数字电子计算机处理。

使用现代的多道X光谱仪（量子计），在原子序数从9号(F)到92(U)的范围内，可以同时测定24种元素。自从研制了带有半导体探测器的光谱仪，更提供了在5—10分钟内可自动测定80个元素的可能性。这种能在宽广的元素范围，进行大量的分析工作的优点，引起了地质和地球化学研究部门人员的兴趣。

现在，原则上已能用新方法来完成硅酸盐分析。用X射线光谱法同时测定造岩元素的总和从方法来讲是最复杂的任务之一。由于化学成分和矿物组分对二次谱线强度的影响，迫使人们要去寻求关于分析线强度与被分析元素浓度间的单值关系的方法。为了降低分析误差，引进了对一次和二次辐射的吸收校正，以及样品元素的辐射产生的增强激发校正。近几年来，基本参数法得到了迅猛的发展，它可以找出足够通用的方法去解决各种各样的分析任务。这个方法的各种方案之一，就是利用由X射线荧光光谱的激发理论得到的方程组，来测量强度而确定元素的含量。当采用自动多道的X射线光谱仪同数字电子计算机配套时，本法将有更广阔的前景。

以前，由М. А. 勃洛欣(Блохин)^[18]，Н. Ф. 洛谢夫(Лосев)^[62]，Р. О. 缪尔列尔(Мюллер)^[206]，П. Е. 别尔京(Бертин)^[117]，Р. 德任金斯(Дженкинс)和Ж. 佛里斯(Вриз)^[181]，

Л. В. 阿扎罗夫 (Азаров)^[108] 等发表的一些专著, 研究了X射线光谱分析的一般问题。唯有 И. 阿德列尔^[101] (Адлер) 的专著专门研究了X射线光谱分析对矿物的分析, 但它很少被广大的读者所接受。

本书的任务是系统总结近十年积累的在X射线荧光分析的理论方面和它在地质和地球化学的实际应用方面的资料, 本书在写作时, 应用了苏联和外国专家们的著作, 以及由苏联科学院西伯利亚分院地球化学研究所X射线光谱分析实验室的工作人员完成的研究成果, 有些材料是首次发表的。

第一章研究了方法的物理基础——一次和二次光谱激发的理论, X射线辐射和电子束同物质的相互作用。特别着重描述了关于一次辐射的光谱成分对X射线荧光强度影响的新资料。

第二章简要叙述了现代X射线辐射探测器的工作原理, 提供了新型分析晶体的参考资料。和列出了苏联国内外生产的一批仪器的简要特性。

第三章专门讲基体效应的理论和实验结果: 一次和二次辐射的吸收效应; 样品元素的辐射对分析线的增强激发效应; 辐射体不均匀性的影响等等。当评价粉末样品的物相组成和粒度组成对X射线荧光强度的影响时, 第一次应用了蒙特——卡罗方法。

第四章描述了用于分析矿物的X射线光谱测定元素的方法。作者采用基本参数法为分类基础, 试图把许多分析方法系统化。

当描述地质样品分析的制备方法时, 着重对最通用的, 同时又是最复杂的熔剂熔融制样法进行描述。第五章是首次在X射线光谱分析的专著文献中研究了制备玻璃状辐射体的物理——化学过程。

第六章即最后一章, 评价了X射线光谱分析法的主要计量特征: 重现性, 准确度, 检出限。详细叙述了与评价检出限有关的问题, 因为这方面的有关资料, 既不充分, 有时又相互矛盾。

(下略)

目 录

序 言

第一章 X射线光谱的激发	1
(一) 特征X射线谱	1
(二) 荧光产额	3
(三) X射线和电子束对物质的穿透	7
1. X射线的吸收	7
2. X射线的散射	12
3. 电子的韧致辐射	15
4. 电子的散射	19
5. 电子的反向散射	19
6. 电子束强度的衰减	22
(四) 一次特征谱的强度	22
1. 电子碰撞引起原子电离的有效横截面的计算	23
2. 近似分析中一次特征谱的强度计算	24
3. 蒙特—卡罗法计算一次特征谱线的强度	28
(五) X射线连续谱的强度	32
1. 韧致辐射的激发截面	32
2. 重阳极的韧致辐射强度	33
3. 克拉梅斯公式对电子散射和辐射吸收效应的校正	34
(六) X射线荧光光谱的强度	37
1. 强度公式的推导	37
2. 管窗滤过的一次辐射对X射线荧光光谱强度的影响	40
3. 激发X射线荧光光谱的X射线管阳极材料的选择	42
第二章 X射线光谱的记录方法和X射线荧光光谱仪	44
(一) X射线辐射的探测器	44
1. 正比计数器	44

35617

2. 闪烁计数器.....	47
3. 半导体探测器.....	48
(二) X射线光学系统的基本类型和X射线辐射 的分光晶体	50
1. 平面晶体的X射线光学系统.....	50
2. 弯晶X射线光学系统.....	51
3. 分析晶体.....	52
(三) 荧光分析用的X射线管	55
1. X射线管辐射的光谱成分.....	58
2. X射线管电极接地的最佳方案.....	60
(四) 现代X射线荧光光谱仪的主要类型	61
1. 波长色散(晶体一衍射)光谱仪.....	62
2. 能量色散光谱仪.....	64
第三章 基体效应	69
(一) 试样材料对一次和二次辐射的吸收	69
(二) 基体辐射激发的分析线强度	70
(三) 样品的不均匀性对X射线荧光光谱强度的 影响.....	73
1. X射线荧光激发过程的蒙特一卡罗法模拟.....	74
2. 不均匀样品中被激发的X射线荧光强度的分析式.....	80
(四) 被测元素在化学键影响下的分析线位移.....	84
(五) 样品的化学成分对X射线背景强度的影响	85
第四章 X射线荧光光谱的分析方法	88
(一) 基本参数法.....	89
1. 基本参数法分析的一般方案.....	89
2. 非线性方程组的解法.....	90
3. 灼烧样品和熔剂时稀释和损耗的计算.....	91
4. 基本参数法分析时计算浓度的程序.....	92
5. 分析实例.....	94
(二) 大批分析多组分样品时基本参数法的简便 方案.....	96

1. 吸收校正计算公式的推导	96
2. 校正吸收时, 由于衰减系数的不定性而引起的浓度测定误差	104
3. 基体激发校正的简化表达式	107
(三) 分析相似组成样品的理论校正法	112
(四) 改变二次辐射选取角的理论校正法	116
(五) 半经验校正法	120
1. 二元标准法	121
2. 半经验系数校正法	125
3. 对分析线吸收校正的外标法	127
(六) 经验校正法	130
1. 比特季—勃里斯法	131
2. 标准同被测元素含量相同的分析法	132
3. 根据任意成分标准的分析	133
(七) 等同的数学校正法	133
(八) 固定校正值的分析	136
1. 直接外标法	137
2. 稀释法	140
3. 内标法	147
第五章 分析样品的制备	156
(一) 岩石、矿物粉末的不均匀性	156
(二) 岩石和矿物熔融时的物理—化学过程	158
(三) 熔剂的选择	161
(四) 熔融矿物原料所用坩埚的要求	162
(五) 岩石样品变成玻璃体的最佳条件	166
(六) 熔融条件和原始混合物的状态	168
(七) 由岩石熔体浇铸的辐射体	172
(八) 玻璃状辐射体制备的自动化	174
(九) 由熔体制备粉末辐射体的方法	175
(十) 玻璃状辐射体的化学稳定性	177
第六章 X射线光谱分析的计量特征	179

(一) 分析方法的重现性	179
(二) 多级方差分析	182
(三) 分析结果的准确度和精密度	185
(四) 分析方法的灵敏度和被测元素的检出限	186
附录	199
参考文献	207

第一章 X射线光谱的激发

X射线是一种电磁振荡，其光谱波长范围大约从 $1000 \text{ \AA}$ 到 $1/1000 \text{ \AA}$

分析物质时所用辐射波长的范围基本上是从 0.1 到 $10 \text{ \AA}$ 。X射线的激发由高能粒子束——电子，光子，质子， α -粒子，重离子和近年来由介子轰击物质而得。电子法和光子法是激发X射线的基本方式。电子法用于X射线光谱局部区域分析上。分析物质总成分时，可用光子激发法。配有铍薄窗的特制大功率的X射线管能产生高能光子束。管的辐射光谱由特征和连续谱两部分组成，它们产生的性质有着本质区别。

(一) 特征X射线谱

根据玻尔 (Бор) 的原子模型，原子中电子排列在具有一定能级的壳层中。每一能级的能量决定于处在这一能级的电子动能和位能之和

$$E = -\frac{2\pi^2 m e^4 F^2}{n^2 h^2} \quad (1.1)$$

这里 F ——有效核电荷； n ——主量子数。相应于主量子数值 $n=1, 2, 3, 4$ ，能级可称作 K -, L -, M -和 N -壳层。每一能级的电子有一定的状态。状态的形式决定于角量子数 $l=0, 1-5$ 。 K -壳层仅有一个状态，特征是 $l=0$ ，此壳层没有分裂^①； L -壳层可分为三个支壳层： L_I 、 L_{II} 和 L_{III} ，而 M -壳层则分为五个支壳层。

① 即无支壳层——译者注。

当高能粒子与原子进行非弹性碰撞时，电子能从某一内层被逐出，并在一定壳层上形成空穴。由外层的一个电子的跃迁来填充空穴时所放出X射线光子的能量等于完成跃迁的*I*和*J*二壳层能量之差

$$h\nu = \Delta E = E_i - E_j \quad (1.2)$$

这里 ν —— 电磁振荡的频率。

把 (1.1) 式代入 (1.2) 式，则得

$$\Delta E = 2\pi^2 m e^4 F^2 h^{-2} \left(\frac{1}{n_j} - \frac{1}{n_i} \right) \quad (1.3)$$

考虑到 $\lambda = \frac{hc}{\nu}$ ，因此，X射线光谱波长近似地可用下式来计算

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{h}{F^2} \quad (1.4)$$

这里 $k = \frac{h^3 c}{2\pi^2 m e^4} \left(\frac{1}{n_j} - \frac{1}{n_i} \right)^{-1}$

代入 $F \simeq (Z - \sigma)$ ，这里 σ — 核屏蔽常数，即可得X射线光谱谱线的莫塞莱 (Мозли) 定律：

$$\lambda = k(Z - \sigma)^{-2} \quad (1.5)$$

例如，在 $L_{\alpha_1} \rightarrow K$ 跃迁时所产生的 $\lambda_{K\alpha_1}$ 线按莫塞莱定律可写成：

$$\lambda_{K\alpha_1} \simeq 0.121 \cdot 10^{-4} (Z - 1)^{-2} \quad (1.6)$$

莫塞莱定律可作为X射线光谱定性分析的基础，因为它确定了X射线特征谱波长与原子序数间的单值关系。当轰击质点的能量达到激发*q*壳层的能量时立即产生与跃迁到被激发层有关联的全部系列的谱线。系列中相对强度取决于相应跃迁的几率。X光谱最明显的标识谱线的波长，*K*-, *L*-系线的相对强度和*K*-, *L*-层的激发电位详见表1, 2 (参见附录)。

(二) 荧光产额

前已叙述过, (1.1) 式确定的剩余能量从较不紧密壳层的跃迁在填充“空穴”时转递给放出的X光量子。这种跃迁方式称为辐射。但存在着原子的离子化时获得的剩余能量中释放的另一机理, 即从外层中的一层上放出一个电子(这种现象称为俄歇效应, 而此时所放射的电子称俄歇电子)。用放射俄歇电子来填充空穴乃是无辐射形式的跃迁。X光量子的辐射与俄歇效应是一个竞争过程。它们中发生的或然率取决于壳层的相应宽度。可以计算出 q -壳层的自然宽度(与物质的温度和密度无关)为辐射宽度 Γ_r 和俄歇宽度 Γ_a 之和。辐射跃迁的几率在数量上表示为荧光产额 ω_q 。

K -壳层荧光产额是该层上的空穴被伴随发生的X射线量子的跃迁所填充的几率:

$$\omega_K = \frac{I_K}{n_K} \quad (1.7)$$

这里 I_K ——伴有辐射跃迁的电离数; n_K —— K -壳层总电离数相应无辐射跃迁的几率在数量上表示为俄歇产额值 a_K , 且

$$\omega_K + a_K = 1 \quad (1.8)$$

但 L 壳层和其它高能级壳层荧光产额的难以测定是由于支壳层之间发生跃迁而使原始形成的空穴重新分配所致。电子从高能支壳层向低能支壳层这种跃迁称科斯特尔—克罗尼格 (Костер-Крониг) 跃迁。如果在壳层间跃迁时, 辐射或无辐射跃迁的几率相符, 则在支壳层间跃迁时, 辐射跃迁的几率少得可忽略不计。

现在研究一下与高能壳层荧光产额测定有关的一些问题。显然, 在这种情况下荧光总产额将决定于各支壳层荧光产额的分量。 q -壳层的 i -支壳层的荧光产额可写成

$$\omega_{iq} = \frac{I_{iq}}{n_{iq}} \quad (1.9)$$

此时 q -壳层荧光产额平均值为

$$\overline{\omega}_q = \sum_{i=1}^k N_{iq} \omega_{iq} \quad (1.10)$$

这里 N_{iq} —— q -壳层的 i 支壳层上原始空穴的相对数:

$$N_{iq} = \frac{n_{iq}}{\sum n_{iq}}, \quad \sum_{i=1}^k N_{iq} = 1 \quad (1.11)$$

以上是 q -壳层的所有 k -支壳层之和。

q -壳层的总空穴数

$$n_q = \sum_{i=1}^k n_{iq} \quad (1.12)$$

此时平均荧光产额

$$\overline{\omega}_q = \frac{I_q}{n_q} \quad (1.13)$$

这里 I_q 是跃迁到 q -壳层所生成的光子数。

测定 $\overline{\omega}_q$ 时从高能层未发生跃迁, 即科斯特尔—克罗尼格跃迁以前, 原始空穴数不应变化。

显然, 在具体实验中所得的平均荧光产额, 将取决于原始空穴的分配。而此分配取决于激发质点的类型和它们的能量。例如, 用能量接近于激发 L -壳层能量的光子激发时, 三个支壳层间的原始空穴的分配关系大致如下:

$$N_1:N_2:N_3 \simeq 1:2:3$$

在能量大大超过激发 L -壳层能量的电子激发时, 其原始空穴的比例关系将为:

$$N_1:N_2:N_3 \simeq 1:1:2$$

为此要着重指出, 荧光产额平均值不是原子的基本特征, 它既取决于支壳层各荧光产额, 又取决于原始空穴的分配, 此分配在很大程度上成为实验条件的特征。在不同实验条件下可获得高能壳层荧光产额的不同平均值。为了测量 q -壳层所有的 K -支壳层的

[illegible]

在计算平均荧光产额时如果把科斯特尔-克罗尼格跃迁考虑在内,可提出两种不同看法^[150,112]。

(2) 平均荧光产额 $\bar{\omega}_q$ 可认为是还未被科斯捷尔—克罗尼格跃迁所改变的空穴 N_{iq} 的原级分配和考虑了支壳层间跃迁影响空穴进一步再分配的系数 ν_{iq} 的线性组合。

平均荧光产额如用已变的空穴分配来叙述, 则如下的关系式是正确的。

$$\overline{\omega}_q = \sum_{i=1}^k V_{iq} \omega_{i_q} \quad (1.15)$$

与 (1.10) 式中的系数 N_{i_q} 不一样, 系数 V_{i_q} 包括跃迁到高能支壳层的空穴。 V_{i_q} 系数的不等式是正确的

$$\sum_{i=1}^k V_{ia} > 1 \quad (1.16)$$

K-和 L- 辐射的荧光产额值

表 1

元素	ω_K	元素	ω_K	$\bar{\omega}_L$	元素	ω_K	$\bar{\omega}_K$	元素	ω_K	$\bar{\omega}_L$	元素	ω_K
5B	0.0008	21Sc	0.190		37Rb	0.669		53I	0.882		70Yb	0.950
6C	0.0024	22Ti	0.219		38Sr	0.691		54Xe	0.889		71Lu	0.952
7N	0.0047	23V	0.250	0.0024	39Y	0.711	0.091	55Cs	0.895	0.089	72Hf	0.954
8O	0.0077	24Cr	0.282		40Zr	0.730	0.057	56Ba	0.901	0.093	73Ta	0.956
9F	0.012	25Mn	0.314	0.003	41Nb	0.748		57La	0.906	0.110	74W	0.957
10Ne	0.016	26Fe	0.347		42Mo	0.764	0.067	58Ce	0.911	0.163	75Re	0.959
11Na	0.022	27Co	0.381		43Tc	0.779		59Pr	0.915	0.167	76Os	0.961
12Mg	0.030	28Ni	0.414		44Ru	0.793		60Nd	0.920	0.170	77Ir	0.962
13Al	0.036	29Cu	0.445	0.006	45Rh	0.807		62Sm	0.928	0.188	78Pt	0.963
14Si	0.047	30Zn	0.479		46Pd	0.819		63Eu	0.931	0.17	79Au	0.964
15P	0.060	31Ga	0.510	0.0064	47Ag	0.830	0.066	64Gd	0.934	0.198	80Hg	0.966
16S	0.076	32Ge	0.540		48Cd	0.840		65Tb	0.937	0.194	81Tl	0.967
17Cl	0.094	33As	0.567		49In	0.850		66Dy	0.940	0.14	82Pb	0.968
18Ar	0.115	34Se	0.596		50Sn	0.859		67Ho	0.943		83Bi	0.976
19K	0.138	35Br	0.622		51Sb	0.867	0.119	68Er	0.945		90Th	0.49
20Ca	0.163	36Kr	0.646		52Te	0.875	0.122	69Tm	0.948		92U	0.57

系数 V_{iq} 之和大于 1，因为在此情况下转移到其它支壳层的空穴次数被认为大于 1。空穴从支壳层 q_i 向高能支壳层 q_j 跃迁的几率，用 f_{ij}^q 来表示，则系数 V_{iq} 可以用空穴的原级分配来表示：

$$\begin{aligned} V_{1q} &= N_{1q} \\ V_{2q} &= N_{2q} + f_{12}^q N_{1q} \\ V_{3q} &= N_{3q} + f_{23}^q N_{2q} + (f_{13}^q + f_{12}^q f_{23}^q) N_{1q} \end{aligned} \quad (1.17)$$

如用空穴分配来表示平均荧光产额，则

$$\bar{\omega}_q = \sum_{i=1}^k N_{iq} \nu_{iq} \quad (1.18)$$

反映 q -壳层量子产额的系数 ν_{iq} ，与 q_i 支壳层的原级空穴相联系。很明显 ω_{iq} 不同于系数 ν_{iq} 。 $V_{iq} \omega_{iq}$ 和 $N_{iq} \nu_{iq}$ 的乘积同样也不等。 $V_{iq} \omega_{iq}$ 值为从高能壳层的 q -壳层的任一壳层向 i -支壳层的一个空穴做辐射跃迁的次数。

当向 q -壳层的全部支壳层跃迁时 $N_{iq} \nu_{iq}$ 值为计算 i -支壳层一个空穴的量子产额。 L -壳层的系数 ν_{iq} 与支壳层的荧光产额的关系呈如下关系式：

$$\begin{aligned} \nu_1^L &= \omega_{1L} + f_{13}^L \omega_{2L} + (f_{12}^L + f_{12}^L f_{23}^L) \omega_{3L} \\ \nu_2^L &= \omega_{2L} + f_{23}^L \omega_{3L} \\ \nu_3^L &= \omega_{3L} \end{aligned} \quad (1.19)$$

K -, L -和 M -壳层荧光产额的最新数据见表 1。此外，评定荧光产额值还可利用下列近似经验公式^[236, 26]：

$$\bar{\omega}_q = \frac{Z^4}{(a_q + Z^4)} \quad (1.20)$$

这里

$$a_K = 1.06 \cdot 10^6, \quad a_L = 1 \cdot 10^8, \quad a_M = 1.4 \cdot 10^9$$

(三) X射线和电子束对物质的穿透

1. X射线的吸收

X 射线束，穿透物质薄层 dx ，而被减弱的相对值为 $\frac{dI}{I}$ ，此值与薄层厚度成正比

$$\frac{dI}{I} = -\mu_l dx \quad (1.21)$$

这里 μ_l ——与 x 无关的比例常数。

用 (1.21) 式对电子束通过的全路程进行积分可获得著名的 X 射线衰减的比耳 (Бер) 定律

$$I = I_0 \exp(-\mu_l x) \quad (1.22)$$

这里 I_0 ——起始的光子数； I ——透过薄层厚度 x 后的光子数。从 (1.22) 式可见， μ_l 的量纲 $[\mu_l] = \text{厘米}^{-1}$ 。系数 μ_l 为线性衰减系数并表示单位路程长的光子束的衰减率。在计算中用质量吸收系数 μ 更方便，它反映了通过单位物体质量后减少的光子数量。质量衰减系数与下列的线性关系相联系： $\mu = \frac{\mu_l}{\rho}$ ，即 $[\mu] = \text{厘米}^2/\text{克}$ 。

利用质量衰减系数，比尔 (Бер) 定律应写成

$$I = I_0 \exp(-\mu \rho x) \quad (1.23)$$

引起光子束衰减的两种过程为：与原子相碰撞时改变光子的运动方向和真正的光电吸收，此时碰撞光子被原子内层所俘获，其能量转移给轨道上的电子而使电子离开原子。因此，衰减系数由两部分组成

$$\mu = \tau + \sigma \quad (1.24)$$

这里 σ ——散射系数； τ ——各壳层的部分吸收系数之和

$$\tau = \tau_K + \tau_{L_I} + \tau_{L_{II}} + \tau_{L_{III}} + \tau_{M_I} + \dots$$

用 (1.24) 式计算 τ 和 σ 系数的过程在统计上是相互独立的。

图 1 说明了吸收系数与辐射波长的关系。在 Pb 原子 K -, L_{I-} , $L_{II}L_{III}$ -壳层的激发能量相应的波长上发生吸收突跃，测定此值的关系式为

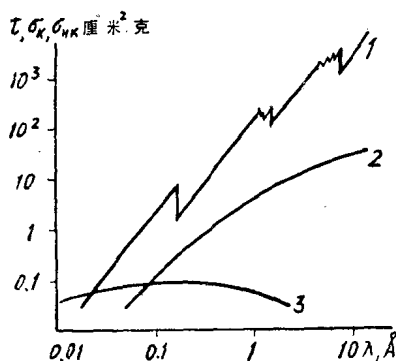


图 1 Pb 的质量吸收系数和散射系数与X射线辐射波长的关系

1— τ ; 2— σ ; 3— σ_{HK}

$$S_q = \frac{\sum_{q=1}^n \tau_q}{\sum_{q=1}^n \tau_q} \quad (1.25)$$

被 q -层吸收的光子相对量

$$r_q = \frac{(S_q - 1)}{S_q}$$

(1.26)

r_q 值的计算可借助于

下列经验式^[236]:

$$r_q = b_q + c_q z \quad (1.27)$$

这里 $b_K = 0.924$, $c_K = 1.44 \cdot 10^{-3}$, $b_L = 0.548$, $c_L = 2.31 \cdot 10^3$

除线性和质量吸收系数外,有时采用原子吸收系数,它反映了与单个原子平均的相互作用所引起光子束的衰减。原子吸收系数与质量吸收系数的关系式为

$$\tau_a = \frac{\tau A}{N}, [\tau_a] = \text{厘米}^2 \quad (1.28)$$

这里 N ——阿佛加得罗数; A ——原子量;

$\frac{A}{N}$ ——物质的单位体积的原子数。

至于谈到 τ_a 的物理概念,可以看到,此值为原子的应该具有的截面,以使每次击中此光子截面时吸收的几率为100%,即: τ_a 为吸收的有效横截面因为每次吸收光子时都发生原子电离,则 τ_a 数量上应等于通过俘获光子而使原子电离的有效横截面。

$\tau(\lambda)$ 是具有第一种间隙逐段连续函数。在实际计算中它近似地有如下关系式:

$$\tau(\lambda) = \text{const} Z^m \lambda^n \quad (1.29)$$