第36卷 第4期 物 理 学 报 Vol. 36, No. 4
1987 年 4 月 ACTA PHYSICA SINICA Apr., 1987

利用X射线出射强度简化公式进行微分析

薛 德 钧
(山东省分析测试中心)

1986 年 4 月 16 日收到

提 要

根据X射线产量深度分布函数的矩形模型，考虑到样品对X射线的吸收，导出X射线出射强度 I 的计算公式：$I = McI_0G$，其中 M 为常数，c 为被测元素的重量浓度，I_0 为强度因子，G 为校正因子，利用这种方法，计算了不同加速电压条件下不锈钢、铝合金、黄铜、硫化物等不同材料样品的定量分析结果，与化学分析值相比，376 个测试数据的标准误差为 0.62%.

电子探针分析中，样品内质量深度 ρz 处、$d\rho z$ 厚度范围内产生的特征X射线强度可用下式表示[1]：

$$dI = k\omega LQ\frac{N}{A}d\rho z, \tag{1}$$

其中 k 为与电子束电流成正比的常数.

按X射线产量深度分布函数 $\phi(\rho z)$ 的定义，$\phi(\rho z)$ 等于深度 ρz 处、薄层 $d\rho z$ 内产生的X射线强度与同样厚度的孤立薄层内所产生的X射线强度之比. 考虑到吸收与荧光效应，出射X射线强度 I 可以表示为[1]

$$I = kL\omega Q_0\frac{N}{A}F\int_0^\infty \phi(\rho z)e^{-\chi\rho z}d\rho z, \tag{2}$$

其中 Q_0 为孤立薄层的电离截面，F 为荧光校正因子，L 为被测X射线在该线系中所占强度比，$\chi = \mu\csc\psi$，μ 为质量吸收系数，ψ 为X射线出射角.

我们选用 Bishop 提出的矩形模型[2]. 设 H 为矩形模型的高度，$2\overline{\rho z}$ 为矩形X射线产量分布函数的深度，(2)式可以化为

$$I = KL\omega Q_0\frac{N}{A}FH\frac{1-\exp(-2\chi\overline{\rho z})}{\chi}. \tag{3}$$

图1为归一化处理了的X射线深度分布函数. 从图1可见，在相同过压比条件下 ($U_0 = 10$)，各种元素的表面X射线产量值均接近于0.4，而矩形模型的高度值为0.5，因此，可以近似地认为

$$H \doteq 1.25\phi(0), \tag{4}$$

$\phi(0)$ 与 $\overline{\rho z}$ 可以按 Love 等人[3,4]给出的公式计算.

随着过压比的变化，(4)式所示关系可能有变化，再考虑到(4)式的近似性等不准确因素，我们在(3)式中再增加一个过压比校正因子 V. 设被测元素的重量浓度为 c，并把所

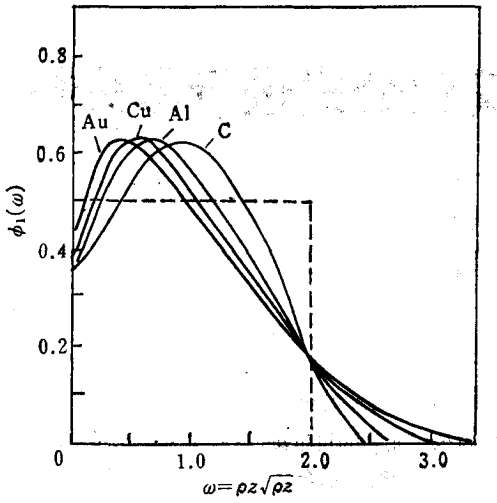


图 1 过压比 $U_0=10$ 时，用 Monte carlo 方法得到的X射线产量分布函数曲线随原子序数的变化 虚线表示矩形模型

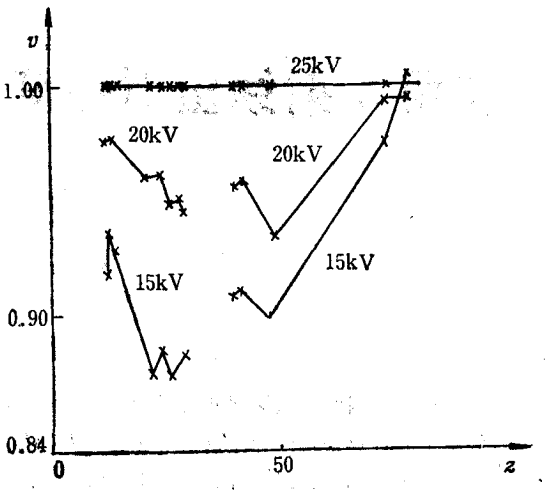


图 2 过压比校正因子 V 的实测结果

有常数合在一起用M表示，则(3)式可以改写为

$$I = cML\omega Q_0 V \frac{1}{A}\phi(0)\frac{1-\exp(-2\chi\overline{\rho z})}{\chi}F. \tag{5}$$

我们用一组标样，用 733 型电子探针，以实验方法，得到了V的表达式. 设探测器接收到的X射线强度为 P，令加速电压为 25kV 时，V 的值为 1，则可得到

$$V = \frac{P}{Q_0\phi(0)\dfrac{1-\exp(-2\chi\rho z)}{\chi}N_0}, \tag{6}$$

N_0 为 25kV 时，$P/[Q_0\phi(0)(1-\exp(-2\chi\rho z))/\chi]$ 的值. 图 2 为 V 的实测结果.

由图 2 所示数据，可拟合成表达式

$$V = D_1 U^{D_2} \tag{7}$$

对于K系X射线

$$D_1 = -1.020 + 0.268z - 1.351\times10^{-2}\times z^2 + 2.216\times10^{-4}\times z^3,$$

$$D_2 = 1.087 - 0.164z + 8.993\times10^{-3}\times z^2 - 1.501\times10^{-4}\times z^3;$$

对于L系X射线

$$D_1 = 0.658 - 3.338\times10^{-4}\times z - 7.935\times10^{-5}\times z^2 + 1.863\times10^{-6}\times z^3,$$

$$D_2 = 2.122 - 0.124z + 2.454\times10^{-3}\times z^2 - 1.626\times10^{-5}\times z^3.$$

综上所述，特征X射线出射强度 I 的计算式可以归结为

$$I = cMI_0G, \tag{8}$$

其中M为与束流成正比的常数，与被测X射线谱线种类及加速电压无关，其绝对值对于电子探针测试方法的建立无关紧要，不予深入讨论. I_0 可定义为强度因子，它取决于被测谱线种类、被测元素种类和加速电压，

$$I_0 = L\omega Q_0 V \frac{1}{A}. \tag{9}$$

G 可定义为校正因子，它表示试样材料对被测X射线的作用，

$$G = \phi(0)F \frac{1 - \exp(-2\chi\overline{\rho z})}{\chi}. \tag{10}$$

将测得的X射线强度用 P 表示，并且将常数因子M与谱仪探测效率[5]合并为谱仪功能因子 T，则可以按下式经过多次迭代计算出被测元素的重量浓度 c，

$$c = \frac{P}{TI_0G}. \tag{11}$$

我们用此方法，对一些样品作了微区成分分析．按化学分析结果，这些样品的成分(%)为

不锈钢　$Al_{0.25}$, $Si_{0.46}$, $P_{0.01}$, $S_{0.00}$, $Ti_{2.0}$, $V_{0.44}$, $Cr_{14.81}$, $Mn_{1.62}$, $Fe_{53.}$, $Ni_{25.4}$, $Mo_{1.28}$.

不锈钢　$Si_{0.68}$, $P_{0.027}$, $S_{0.006}$, $Ti_{0.73}$, $Cr_{17.9}$, $Mn_{1.39}$, $Fe_{68.92}$, $Ni_{10.72}$.

铝镁合金　$Mg_{7.45}$, $Al_{91.03}$, $Si_{0.22}$, $Ti_{0.02}$, $Mn_{0.8}$, $Fe_{0.15}$, $Ni_{0.15}$, $Cu_{0.17}$, $Zn_{0.04}$.

黄铁矿　$S_{53.4}$, $Fe_{46.6}$.　辉钼矿　$S_{40.06}$, $Mo_{59.94}$.　辉锑矿　$S_{28.6}$, $Sb_{71.4}$.　辉铋矿 $S_{18.7}$, $Bl_{81.}$.

黄铜　$Al_{2.21}$, $P_{0.004}$, $Fe_{0.03}$, $Cu_{76.55}$, $Zn_{21.05}$, $As_{0.01}$, $Sb_{0.002}$, $Pb_{0.14}$.

方铝矿　$S_{13.4}$, $Pb_{86.60}$.

电子探针分析使用了 15kV 与 25kV 不同的加速电压，3×10^{-8}A 与 5×10^{-9}A 不同

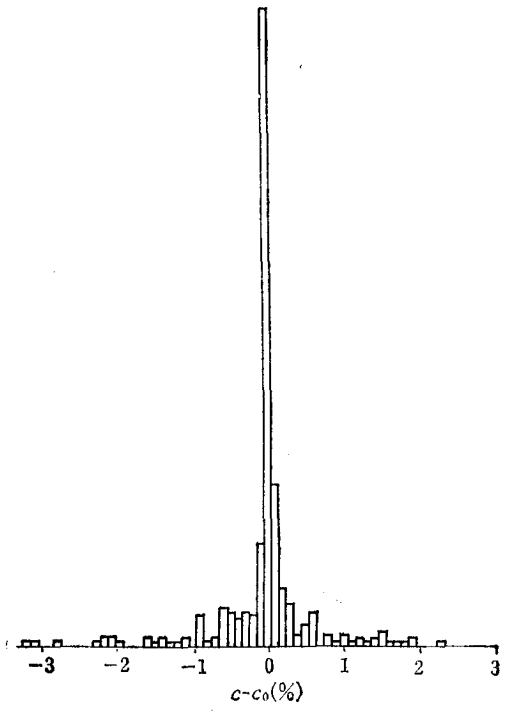


图 3　定量分析误差直方图．c 为本文所述方法电子探针分析所得重量浓度；c_0 为重量浓度真值(化学分析值)

的电子束电流，共测得 376 个数据。以化学分析数据作为真值，误差分布直方图如图 3. 标准误差为 0.62%。由图 3 可见，绝大部分误差在 −1.5—1.5% 之内，满足一般电子探针分析要求，

感谢中国科学技术大学吴自勤教授的帮助。

参 考 文 献

[1] J. B. Reed, Electron Microprobe Analysis, Cambridge University Press, (1975).
[2] H. E. Bishop, *J. Phys. D*, 1(1974), 2009.
[3] G. Love, M. G. Cox and V. D. Scott, *J. Phys. D*, 11(1978), 23.
[4] G. Love and V. D. Scott, *J. Phys. D*, 11(1978), 1369.
[5] 薛德钧，电子显微学报，5(1986),39.

APPLICATION OF SIMPLIFIED EXPRESSION OF EMITTED CHARACTERISTIC X-RAY INTENSITY FOR MICROANALYSIS

XUE DE-JUN

(Analyzing & Testing Center of Shandong Province, Jinan)

ABSTRACT

Based upon the model of depth distribution of X-ray production and consideration of absorption of X-ray by matrix of the sample, the expression of emitted characteristic X-ray intensity I has been derived $I = MCI_s G$, where M is a constant, C is the concentration of measured element, I_s is the X-ray intensity factor and G is the correction factor. By this method the results of quantitative analysis under various accelerating voltage are obtained for stainless steel, aluminium alloy, brass and sulfide. Comparing with chemical analysis, the standard deviation of 376 data is 0.62%.