

光谱分析技术在金属材料理化检验中的应用

杨佳峰

化学工业设备质量监督检验中心 江苏 南京 210036

摘要: 金属材料的化学成分与组织结构直接决定其力学性能与服役寿命,理化检验对分析技术的准确性、灵敏度和效率提出了持续提升的要求。光谱分析技术凭借高灵敏度、快速检测和多元素同时分析的优势,已成为金属材料理化检验不可或缺的重要手段。本文系统梳理了原子发射光谱、原子吸收光谱、X射线荧光光谱、激光诱导击穿光谱等主流技术的基本原理与特点,深入分析了各方法在成分分析、痕量检测、牌号鉴定及失效分析等场景中的适用性与局限,并从样品前处理、仪器选型、方法验证和数据质量控制等维度提出优化策略,为检测实验室构建高效的光谱分析体系提供系统参考。

关键词: 光谱分析;金属材料;理化检验;成分分析;质量控制

引言:金属材料广泛应用于航空航天、能源装备、交通运输等国民经济支柱产业,其化学成分的精确控制是保障产品性能和质量安全的前提。主量元素的含量偏差直接影响力学性能,痕量杂质元素的富集则可能诱发晶间腐蚀、氢脆等失效模式,对金属材料实施全流程精准理化检验至关重要。光谱分析技术因分析速度快、灵敏度高、样品消耗少且能实现多元素同时测定等优势,已逐步替代传统化学湿法分析,成为理化检验的核心技术手段。近年来,随着激光技术、光纤传感和化学计量学的快速发展,光谱分析在检测精度、检出限和现场应用能力方面实现了新的突破。本文旨在系统梳理主流光谱分析技术的技术原理与应用场景,为检测人员合理选型与规范应用提供指导。

1 金属材料理化检验概述

1.1 金属材料理化检验的内涵与内容

金属材料理化检验是运用物理和化学分析方法,对金属材料的化学成分、组织结构、物理性能和化学性能进行系统检测与评价的技术活动。它贯穿于材料研发、生产制造、产品检验和失效分析的全过程。从检测内容来看,理化检验涵盖成分分析(主量元素定量、微量及痕量杂质元素测定)、组织检验(晶粒度、相组成、夹杂物评级)以及性能测试三大板块,其中成分分析是理化检验的基础与核心。从检测目的来看,理化检验发挥着进厂检验、过程控制、出厂检验和失效分析等多重功能,不同场景对分析方法的灵敏度、速度和准确性提出了差异化要求。随着金属材料牌号日益丰富、纯度不断提高,对杂质元素的检测限要求已从百万分级降至十亿分级,持续挑战着分析技术的能力边界^[1]。

1.2 光谱分析在理化检验中的角色定位

光谱分析技术是基于物质与电磁辐射相互作用原理建立的分析方法体系,通过测量被分析元素特征谱线的波长和强度实现定性与定量分析。在金属材料理化检验中,光谱分析覆盖从主量元素到痕量元素的宽广浓度范围。相较于传统化学湿法分析,光谱分析具有多方面显著优势。在分析效率上,现代光谱仪器可在数分钟内完成数十种元素的同步测定;在样品消耗上,固体直接进样技术使消耗量降至毫克级别;在检测能力上,ICP-MS检出限可达ppb级别;在适用范围上,可覆盖从铍到铀的几乎所有金属元素。正是这些特性使光谱分析成为现代金属理化检验不可替代的核心技术手段。

2 常用光谱分析技术的基本原理与特点

2.1 原子发射光谱法

原子发射光谱法(AES)的基本原理是基态原子获得激发能量后跃迁至高能态,返回低能态时发射具有特定波长的特征光谱,通过检测波长定性、测量谱线强度定量。其激发源从电弧、火花发展到电感耦合等离子体。电弧和火花激发源适用于钢铁等导电固体直接分析,在炉前快速分析中仍占一席之地。电感耦合等离子体发射光谱(ICP-OES)以氩等离子体为激发源,温度达6000~10000K,检出限可达0.001~0.1 $\mu\text{g/mL}$,线性动态范围达4~6个数量级,能同时进行多元素痕量和主量分析,是金属材料全元素分析的主力方法。

2.2 原子吸收光谱法

原子吸收光谱法(AAS)基于基态原子对特征辐射的吸收原理进行定量分析,吸收程度遵循朗伯-比尔定律。其优点是选择性强、干扰少、操作简便、运行成本低,主要用于低含量和痕量元素测定,对碱金属、碱土金属及锌、镉、铅等元素表现出色。火焰原子吸收

(FAAS)操作快速、精密度好,适用于 $\mu\text{g/mL}$ 级别元素测定;石墨炉原子吸收(GFAAS)样品利用率高,检出限可达 $10^{-12}\sim 10^{-14}\text{g}$,适用于超高纯金属中极痕量杂质分析。但AAS每次仅测一种元素,通量较低。

2.3 X射线荧光光谱法

X射线荧光光谱法(XRF)利用高能X射线激发原子内层电子产生空穴,外层电子跃迁时释放特征荧光,通过检测荧光能量或波长定性定量。其最大优势是非破坏性分析,样品无需溶解,可对块状、粉末或液态样品直接分析。波长色散型(WD-XRF)分辨率高、灵敏度高,适用于主量和次量元素精确测定;能量色散型(ED-XRF)结构紧凑、分析快,便于制成便携仪器用于现场检测。XRF广泛用于合金牌号快速鉴定、镀层厚度测量和有害元素筛查,但对轻元素灵敏度较低,痕量测定能力不及ICP类技术^[2]。

2.4 激光诱导击穿光谱法

激光诱导击穿光谱法(LIBS)将高能量脉冲激光聚焦于样品表面,使物质瞬间蒸发、离解和激发形成等离子体,冷却过程中发射特征光谱。其优势在于无需复杂样品前处理、可实现微区原位分析和远程探测,适用于材料分拣、表面质量评价、焊接接头成分分析及轻元素检测,可弥补XRF对轻元素检测的不足。微区分析能力使其在失效分析中能对断口腐蚀产物或夹杂物进行原位鉴定。当前主要局限在于精密度受激光能量波动和表面状态影响较大,定量准确度有待提高。

2.5 其他光谱分析技术简介

光电直读光谱法是原子发射的特殊实现形式,专为金属快速分析设计,在铸造行业炉前分析中实时性优势无可替代。辉光放电发射光谱法(GD-OES)利用辉光放电电源逐层剥离样品,获取元素深度分布信息,在表面处理层和涂层分析中具有独特价值。红外碳硫分析仪基于分子光谱原理检测 CO_2 和 SO_2 红外吸收,在钢铁碳硫分析中是必检项目的标准方法。不同技术的选择取决于具体检测需求和样品特性。

3 光谱分析技术在典型场景中的应用

3.1 金属材料化学成分定量分析

化学成分定量分析是光谱技术在金属检测领域最核心的应用场景,支撑着冶金与装备制造全链条的质量管控。在钢铁分析体系中,ICP-OES和光电直读光谱法可覆盖从普通生铁、碳素钢到高端特种合金钢的全牌号检测需求,单次进样即可同步完成碳、硅、锰、磷、硫五大常规元素,以及铬、镍、钼、钒等合金元素的定量测定。搭配高频燃烧模块的红外碳硫分析仪,可实现钢铁

中碳元素低至0.001%级别的精准检测,完全满足超低碳钢材的管控要求。在有色金属检测中,ICP-OES凭借宽线性范围、多元素同步分析的优势,成为铝合金、铜合金、钛合金等材料的首选检测方法。光谱定量普遍采用基体匹配的标准曲线法校准,通过选择无干扰谱线、离峰背景校正或多元光谱拟合技术消除谱线重叠与背景干扰,最终通过检出限、定量限、精密度、回收率的全流程验证,保障数据可靠性。

3.2 痕量杂质元素检测

痕量元素对金属材料性能的影响远超其含量比例的预期。航空航天高温合金中铅、铋、砷等杂质即使低于0.0005%,也可能导致高温蠕变性能显著下降。核用锆合金中硼、镉等必须控制在ppb级别以下。石墨炉原子吸收光谱法对上述元素检出限可达亚ppb级,是超痕量分析的可靠手段。电感耦合等离子体质谱法(ICP-MS)可同时给出数十个痕量元素定量结果,检出限比ICP-OES低2~3个数量级,特别适合高纯金属多元素杂质普查。痕量分析中样品前处理的污染控制是主要误差来源,需采用高纯试剂、超净环境和规范操作流程。

3.3 金属材料牌号鉴别与分拣

手持式XRF分析仪凭借操作简便、响应快速、对样品完全无损伤的核心优势,目前已成为金属回收行业、装备制造企业仓储管理环节的标准配置设备。操作人员无需复杂前处理,仅需将探头贴近被测样品表面,数秒内即可获取主要合金元素的半定量数据,与内置的全牌号数据库自动比对,快速完成金属牌号判定。针对XRF难以有效检测的镁、铝等轻元素占比偏高的合金体系,便携式LIBS技术提供了完美的技术补充,目前已在大型金属回收园区的自动化流水线上落地,实现铝合金、镁合金的高效自动分选^[3]。便携式光谱仪的绝对精度虽不及实验室大型台式仪器,但在现场快速筛查场景中,无需取样、可直接在工业现场作业的效率优势,完全可以弥补精度上的小幅不足,应用过程中只需建立适配现场场景的标准化检测流程与判定规则,即可完全满足实际使用需求。

3.4 金属构件失效分析与质量追溯

光谱分析在失效溯源中发挥关键作用。对失效部位与正常部位进行成分比对,可判断是否存在材料错用、成分偏析或有害元素富集。对断口表面腐蚀产物或夹杂物进行微区分析,有助于判断失效起始位置和扩展路径。LIBS微区分析可在不破坏断口形貌前提下对微米级特征区域进行原位表征。在质量追溯方面,现代光谱数据经信息化系统整合,可支撑从原材料到终端产品的全

过程成分数据追踪。当出现质量问题时,可快速调取历史数据进行回溯分析,精确定位问题环节,体现理化检验从“把关”向“预防”的功能升华。

4 光谱分析技术应用中的质量控制

4.1 样品前处理的规范化

样品前处理是光谱分析全流程中误差最集中的环节,其规范化程度直接影响最终结果的准确性与重现性。针对溶液进样技术,酸溶消解需依据样品基体特性选择合适体系,钢铁常用盐酸-硝酸混合酸,含硅量高的需加入氢氟酸促使硅酸盐完全分解,高温合金等难溶材料则需借助微波辅助消解,利用密闭高压条件加速反应进程。消解不彻底会使待测元素无法完全进入溶液,导致测定结果系统性偏低;酸纯度不足则可能引入杂质元素或增加背景干扰,严重损害痕量分析的可靠性。对于固体直接进样技术,样品表面状态的统一性同样至关重要——XRF要求表面平整光滑且具备足够分析面积,光电直读需呈现金属光泽且无氧化皮覆盖,LIBS则强调表面清洁且粗糙度均匀一致。建立并严格执行标准化制备流程与操作规范,是保障检测数据稳定可靠的最基本前提。

4.2 仪器校准与方法验证

获得可靠的定量分析数据,必须以系统的仪器校准和完备的方法验证为根本保障。仪器校准通常采用有证标准物质配制系列标准溶液,建立浓度与分析信号之间的响应曲线,其线性范围必须完整覆盖待测元素的预期含量区间,相关系数一般要求达到0.995以上。日常检测运行中应定期使用独立质控样品核查校准曲线状态,一旦发现偏差超出允许范围需立即查找原因并重新校准。方法验证是对整个分析方案适用性的全面考核,关键参数包括检出限与定量限(表征灵敏度水平)、精密度(以重复测试结果的相对标准偏差衡量)、准确度(通过标准物质分析或加标回收实验证实)以及测量不确定度的系统评定。型式检验和仲裁分析必须执行最严格完整的验证流程,现场快速筛查可在确保基本判断准确的前提下适度简化,但所有验证过程和结果均需形成规范记录^[4]。

4.3 检测数据的质量评价

检测数据的质量评价是光谱分析工作流程中的最终

把关环节,直接关系到后续质量判断与决策的科学有效性。定量分析结果在出具报告时,应当完整包含测定数值、实验室内重复性标准偏差以及经系统评定的测量不确定度等信息,使结果使用方能够充分理解数据的可靠程度。对于处于检出限附近的痕量测定值,应明确标注该结果位于定量限以下,仅作参考信息使用,避免因误判导致错误结论。在实验室质量管理体系框架下,需通过参加能力验证计划、开展实验室间比对活动、实施内部质量控制等多种途径对数据可靠性实施持续动态监控,质量控制图对于识别分析系统趋势性偏移具有早期预警功能。实验室信息管理系统的应用正推动光谱数据的自动化采集与智能化审核,有效减少人为干预因素,增强检测结果的客观性、可追溯性和长期趋势分析能力。

结束语

光谱分析技术已从实验室研究手段成长为金属材料理化检验领域的中坚力量。原子发射光谱、原子吸收光谱、X射线荧光光谱、激光诱导击穿光谱等技术各具特色,在成分定量分析、痕量杂质检测、牌号快速鉴别和失效分析等场景中形成了互为补充的技术体系。随着仪器硬件性能持续提升和化学计量学方法深度应用,光谱分析正朝着更高灵敏度、更宽线性范围、更微型化和智能化的方向加速演进,其在质量控制中的角色正从“数据提供者”向“质量诊断者”转变。未来,检测实验室应以方法标准化、操作规范化和数据信息化为抓手,建立覆盖全流程的质量控制体系,最大化发挥光谱分析的技术效能,为金属材料产业高质量发展提供坚实技术支撑。

参考文献

- [1]王金瑞,刘增.光谱分析技术在金属材料理化检验中的应用[J].石油化工建设,2024,46(12):89-91.
- [2]黄欣.光谱分析技术在金属材料理化检验中的应用[J].中国金属通报,2023(6):183-185.
- [3]张美娟.光谱分析技术在金属材料理化检验中的应用[J].文渊(中学版),2022(7):217-219.
- [4]任云芳.光谱技术在金属材料成分分析中的高精度应用[J].冶金与材料,2026,46(1):100-102.