

International Standard Norme internationale



6955

INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION • МЕЖДУНАРОДНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПО СТАНДАРТИЗАЦИИ • ORGANISATION INTERNATIONALE DE NORMALISATION

Analytical spectroscopic methods — Flame emission, atomic absorption, and atomic fluorescence — Vocabulary

First edition — 1982-07-15

Méthodes d'analyse par spectroscopie — Émission de flamme, absorption atomique et fluorescence atomique — Vocabulaire

Première édition — 1982-07-15

UDC/CDU 543.42 : 001.4

Ref. No./Réf. n° : ISO 6955-1982 (E/F)

Descriptors : atomic absorption spectrometry, atomic fluorescence spectrometry, flame photometry, emission spectrometry, vocabulary.
Descripteurs : spectrométrie d'absorption atomique, spectrométrie de fluorescence atomique, photométrie de flamme, spectrométrie d'émission, vocabulaire.

Foreword

ISO (the International Organization for Standardization) is a worldwide federation of national standards institutes (ISO member bodies). The work of developing International Standards is carried out through ISO technical committees. Every member body interested in a subject for which a technical committee has been set up has the right to be represented on that committee. International organizations, governmental and non-governmental, in liaison with ISO, also take part in the work.

Draft International Standards adopted by the technical committees are circulated to the member bodies for approval before their acceptance as International Standards by the ISO Council.

International Standard ISO 6955 was developed by Technical Committee ISO/TC 47, *Chemistry*, and was circulated to the member bodies in March 1981.

It has been approved by the member bodies of the following countries :

Australia	Germany, F. R.	Poland
Austria	Hungary	Portugal
Belgium	India	Romania
Brazil	Italy	South Africa, Rep. of
China	Korea, Rep. of	Switzerland
Czechoslovakia	Mexico	Thailand
Egypt, Arab Rep. of	Netherlands	USSR
France	Philippines	

No member body expressed disapproval of the document.

Avant-propos

L'ISO (Organisation internationale de normalisation) est une fédération mondiale d'organismes nationaux de normalisation (comités membres de l'ISO). L'élaboration des Normes internationales est confiée aux comités techniques de l'ISO. Chaque comité membre intéressé par une étude a le droit de faire partie du comité technique correspondant. Les organisations internationales, gouvernementales et non gouvernementales, en liaison avec l'ISO, participent également aux travaux.

Les projets de Normes internationales adoptés par les comités techniques sont soumis aux comités membres pour approbation, avant leur acceptation comme Normes internationales par le Conseil de l'ISO.

La Norme internationale ISO 6955 a été élaborée par le comité technique ISO/TC 47, *Chimie*, et a été soumise aux comités membres en mars 1981.

Les comités membres des pays suivants l'ont approuvée :

Afrique du Sud, Rép. d'	Égypte, Rép. arabe d'	Pologne
Allemagne, R. F.	France	Portugal
Australie	Hongrie	Roumanie
Autriche	Inde	Suisse
Belgique	Italie	Tchécoslovaquie
Brésil	Mexique	Thaïlande
Chine	Pays-Bas	URSS
Corée, Rép. de	Philippines	

Aucun comité membre ne l'a désapprouvée.

Analytical spectroscopic methods — Flame emission, atomic absorption, and atomic fluorescence — Vocabulary

Scope and field of application

This International Standard defines specific terms for flame emission, atomic absorption and atomic fluorescence spectroscopic analytical methods, with a view to facilitating understanding between analysts.

It takes maximum account of the existing terminology, in both French and English, in order to achieve the greatest possible harmonization. In particular, it takes account of the IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) nomenclature.

Reference

ISO 6286, *Molecular absorption spectrometry — Vocabulary — General — Apparatus*.

Terms and definitions

1 General terms

PRELIMINARY NOTE — The term "spectroscopy", as recommended by IUPAC, means the general study of spectra, irrespective of the method of observation; the term "spectrometry" implies the measurement of the intensity of the radiation.

1.1 flame emission spectrometry (FES) : A method of determining chemical elements based on the measurement of the intensity of characteristic electromagnetic radiation emitted by atoms or molecules in a flame.

1.2 atomic absorption spectrometry (AAS) : A method of determining chemical elements based on the measurement of the absorption of characteristic electromagnetic radiation by atoms in the vapour phase.

1.3 atomic fluorescence spectrometry (AFS) : A method of determining chemical elements based on the measurement of the re-emission of characteristic electromagnetic radiation by atoms, following the absorption of radiation in the vapour phase. The wavelengths of the absorbed and re-emitted radiation may be identical (atomic resonance fluorescence spectrometry) or different.

1.4 atomic vapour : A vapour containing free atoms of the element to be determined (the analyte).

Méthodes d'analyse par spectroscopie — Émission de flamme, absorption atomique et fluorescence atomique — Vocabulaire

Objet et domaine d'application

La présente Norme internationale définit certains termes spécifiques pour les méthodes d'analyse par spectroscopie d'émission de flamme, d'absorption atomique et de fluorescence atomique, dans le but de faciliter la compréhension entre analystes.

Elle tient le plus grand compte des termes existants, aussi bien en français qu'en anglais, afin d'aboutir à la meilleure harmonisation possible. En particulier, elle tient compte de la nomenclature de l'UICPA (Union internationale de chimie pure et appliquée).

Référence

ISO 6286, *Spectrométrie d'absorption moléculaire — Vocabulaire — Généralités — Appareillage*.

Termes et définitions

1 Termes généraux

NOTE PRÉLIMINAIRE — Le terme «spectroscopie» désigne, comme le préconise l'UICPA, l'étude générale des spectres, quelle que soit la méthode d'observation; le terme «spectrométrie» implique le mesurage de l'intensité des radiations.

1.1 spectrométrie d'émission de flamme (SEF) : Méthode de dosage d'éléments chimiques fondée sur le mesurage de l'intensité de l'émission de radiations photoniques spécifiques par des atomes ou des molécules dans une flamme.

1.2 spectrométrie d'absorption atomique (SAA) : Méthode de dosage d'éléments chimiques fondée sur le mesurage de l'absorption de radiations photoniques spécifiques par des atomes en phase vapeur.

1.3 spectrométrie de fluorescence atomique (SFA) : Méthode de dosage d'éléments chimiques fondée sur le mesurage de la réémission de radiations photoniques spécifiques par des atomes, consécutive à l'absorption de radiations en phase vapeur. La longueur d'onde de la radiation absorbée et celle de la radiation réémise peuvent être identiques (spectrométrie de fluorescence de résonance atomique) ou différentes.

1.4 vapeur atomique : Vapour contenant des atomes libres de l'élément à doser (analyte).

1.5 energy level : A stationary quantum state (of a free atom, ion or molecule) equal in value to a particular internal energy. This energy is often expressed in electron volts, but should preferably be expressed in kilojoules per mole.

1.6 ground state : The level of minimum internal energy (of a free atom, ion or molecule). It is conventional to assign the energy value of zero to this level.

1.7 resonance level¹⁾ : An energy level (of an excited atom, ion or molecule) capable of reversion to the ground state by a direct electromagnetic transition (see 1.11).

1.8 excitation energy : The energy that must be supplied to an atom to transfer it from the ground state to a given energy level above the ground state.

1.9 resonance energy²⁾ : The energy required to promote the transfer the atom from the ground state to a resonance level by absorption of one photon.

1.10 ionization energy : The minimum energy that must be supplied to remove an electron from an atom in the ground state.

1.11 electronic transition : The passage of an electron of an atom, ion or molecule from an energy level E_1 to another energy level E_2 .

An electronic transition may be accompanied by the emission or absorption of a photon $h\nu$ such that $h\nu = |E_2 - E_1|$; it is then called "an electromagnetic transition"; in general, it obeys certain rules called "electromagnetic selection rules".

NOTE — In the formula, h is the Planck constant and ν is the frequency of emitted or absorbed photon.

1.12 spectral line (of an atom)³⁾ : A very narrow band of frequencies of electromagnetic radiation emitted or absorbed by atoms which undergo a single electromagnetic transition.

This radiation is centred on a peak whose wavelength characterizes the line and which corresponds to the emission or absorption maximum.

A distinction is made between lines corresponding to transition of neutral atoms (e.g. Ba I 553,5 and 577,8 nm) and ions (e.g. Ba II 455,4 nm).

1) Some authors use the following more restricted definition of the **resonance level of a particular atom** : The lowest level capable of reversion to the ground state by a direct electromagnetic transition.

2) Some authors use the following, more restricted definition of **resonance energy** : The energy required to transfer the atom from the ground state to the resonance level defined as in the note to 1.7.

3) The term "line" has its origin in the appearance of an atomic spectrum observed with a spectroscope, in which different wavelengths appear monochromatically as images of the (linear) slit.

1.5 niveau d'énergie : État quantique stationnaire (d'un atome libre, d'un ion ou d'une molécule), équivalent à une énergie interne particulière. Cette énergie s'exprime souvent en électronvolts mais, de préférence, en kilojoules par mole.

1.6 niveau fondamental : Niveau d'énergie minimale interne (d'un atome libre, d'un ion ou d'une molécule). Par convention, la valeur zéro de l'énergie est attribuée à ce niveau.

1.7 niveau de résonance¹⁾ : Niveau d'énergie (d'un atome excité, d'un ion ou d'une molécule) pouvant revenir par une transition photonique (voir 1.11) directe au niveau fondamental.

1.8 énergie d'excitation (d'un atome) : Énergie qu'il faut fournir à un atome pour l'amener du niveau fondamental à un état énergétique donné supérieur au niveau fondamental.

1.9 énergie de résonance²⁾ : Énergie nécessaire pour amener l'atome du niveau fondamental à un niveau de résonance par absorption d'un photon.

1.10 énergie d'ionisation : Énergie minimale qu'il faut fournir à un atome au niveau fondamental pour en extraire un électron.

1.11 modification électronique; transition électronique : Passage d'un électron, d'un atome, d'un ion ou d'une molécule d'un niveau d'énergie E_1 à un autre niveau d'énergie E_2 .

Une modification électronique peut être accompagnée de l'émission ou de l'absorption d'un photon $h\nu$ tel que $h\nu = |E_2 - E_1|$; elle est alors dite «transition photonique»; elle obéit en général à certaines règles dites «règles de sélection photonique».

NOTE — Dans la formule, h est la constante de Planck et ν est la fréquence du photon émis ou absorbé.

1.12 raie spectrale (d'un atome)³⁾ : Intervalle très étroit de fréquences de radiations photoniques émises ou absorbées par des atomes qui subissent une transition photonique unique.

Ces radiations sont groupées autour d'une radiation centrale dont la longueur d'onde caractérise la raie et qui correspond au maximum d'émission ou d'absorption.

On distingue des raies correspondant à la transition d'atomes neutres (par exemple Ba I 553,5 et 577,8 nm) et des raies d'ions (par exemple Ba II 455,4 nm).

1) Dans certains travaux scientifiques, on utilise la définition plus restrictive suivante du **niveau de résonance d'un atome unique** : Niveau excité d'énergie minimale pouvant revenir par une transition photonique directe au niveau fondamental.

2) Dans certains travaux scientifiques, on utilise la définition plus restrictive suivante de l'**énergie de résonance** : Énergie amenant l'atome du niveau fondamental au niveau de résonance défini restrictivement dans la note 1).

3) Le terme «raie» a son origine dans l'aspect d'un spectre atomique observé avec un spectroscopie, dans lequel les différentes longueurs d'onde apparaissent comme les images monochromatiques de la fente linéaire.

1.13 line profile : The curve representing the variation of emitted radiation intensity as a function of wavelength (emission line) or the variation of the absorption factor as a function of wavelength (absorption line).

1.14 half-intensity width : The wavelength interval between the two points on the line profile where the intensity is equal to half the maximum intensity of the profile.

1.15 resonance line : A line corresponding to a transition between a resonance level and the ground state.

1.16 characteristic line : A line used for the measurement of analyte concentration by flame atomic emission, absorption or fluorescence in the vapour phase.

Characteristic lines include resonance and other lines.

1.17 self-absorption : A phenomenon occurring in an emission source when the radiation emitted by the excited atoms in the interior of the source is partly absorbed by atoms of the same kind present in this source.

As a result, the observed intensity of a spectral line may be less and its width greater than would be the case for a source having a very small optical path and the same concentration of emitting atoms per unit volume.

Self-absorption may occur in all emitting sources, whether they are homogeneous or not, thermal or non-thermal.

1.18 self-reversal : A phenomenon occurring in an emission source and revealed when the intensity measured at the centre of the line is lower than the intensity measured on either side of the centre. This phenomenon is due to the absorption of radiation from the core by the outer layers of the emitting vapour, which are cooler than the core.

In extreme cases, the intensity at the centre of the line is so weak that only the wings remain, giving the appearance of two fuzzy lines.

1.19 line-broadening : An increase in the theoretical width of the spectral line owing to thermal motion of the emitting atoms (Doppler effect), to electric field (Stark effect), to self-absorption and to pressure (Lorentz effect). This phenomenon leads to a loss of sensitivity of the determination.

1.20 band (molecular) : A group of narrowly spaced lines emitted or absorbed by a molecule that undergoes a single electromagnetic transition between levels having different rotational and/or vibrational energies.

1.13 profil d'une raie : Courbe représentative de la variation de l'intensité de la radiation émise en fonction de la longueur d'onde (raie d'émission) ou de la variation du coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde (raie d'absorption).

1.14 largeur d'une raie : Intervalle séparant les longueurs d'onde des deux radiations correspondant aux deux points du profil dont les intensités sont égales à la moitié de l'intensité maximale de ce profil.

1.15 raie de résonance : Raie correspondant à une transition entre un niveau de résonance et le niveau fondamental.

1.16 raie caractéristique : Raie utilisée pour le mesurage de la concentration en l'élément à doser (analyte) par émission de flamme, absorption atomique ou fluorescence atomique en phase vapeur.

Les raies caractéristiques comportent les raies de résonance et d'autres raies.

1.17 auto-absorption : Phénomène qui se produit dans une source d'émission lorsque la radiation émise par les atomes excités à l'intérieur de la source est partiellement absorbée par des atomes de même espèce présents dans cette source.

En conséquence, l'intensité observée d'une raie spectrale peut être plus faible et sa largeur plus grande que ce ne serait le cas pour une source où le parcours optique est très faible, et qui a la même concentration en atomes émetteurs par unité de volume.

L'auto-absorption peut se produire dans toutes les sources émettrices, qu'elles soient homogènes ou non, thermiques ou non thermiques.

1.18 renversement d'une raie : Phénomène qui se produit dans une source d'émission et mis en évidence lorsque l'intensité mesurée au centre de la raie est plus faible que l'intensité mesurée de part et d'autre de ce centre. Ce phénomène est dû à l'absorption des radiations des couches internes par les couches externes du milieu émetteur qui sont plus froides que les couches internes.

Dans les cas extrêmes, l'intensité au centre de la raie est si faible que seules les extrémités restent pour donner l'apparence de deux raies floues.

1.19 élargissement d'une raie : Accroissement de la largeur théorique de la raie spectrale dû au mouvement thermique des atomes émetteurs (effet Doppler), au champ électrique (effet Stark), à l'auto-absorption et à la pression (effet Lorentz). Ce phénomène conduit à une perte de sensibilité du dosage.

1.20 bande (moléculaire) : Groupe de raies étroitement espacées émises ou absorbées par une molécule qui subit une transition photonique unique entre niveaux d'énergie à transition rotationnelle et/ou vibrationnelle.

2 Specific components of flame emission, atomic absorption and atomic fluorescence equipment, and their functions

2.1 Line sources

2.1.1 discharge lamp : A lamp containing a vapour or gas excited by the passage of a current under high potential and producing the characteristic lines of the elements it contains.

2.1.2 hollow-cathode lamp : A discharge lamp in which the cathode is a hollow body containing one or more elements, and which operates under conditions such that the vapour of the elements, produced by cathodic sputtering, emits particularly narrow characteristic lines.

2.1.3 (high-frequency excited) electrodeless-discharge lamp : A lamp in which the elements are excited by a high-frequency electromagnetic field (it has no internal electrodes).

2.1.4 continuum lamp : A lamp which, over a given spectral range, gives continuous emission, i.e., emission that cannot be resolved into lines.

2.2 Terms common to all atomizers

2.2.1 desolvation : Removal of the solvent, giving rise to particles of the solute.

2.2.2 volatilization : Conversion of the solute particles containing the analyte from the solid and/or liquid phase to the vapour phase.

2.2.3 atomization : Conversion of a compound of the analyte to an atomic vapour.

2.2.4 atomizer : A device producing atomization.

2.2.5 overall efficiency of atomization : The ratio of the mass of analyte converted into free atoms in the atomizer to the mass of analyte entering the dispersion device.

2.2.6 (local) fraction atomized : The ratio of the number of free atoms to the total number of atoms of the analyte present in the gaseous phase in the observation volume.

2.2.7 (atomic) excitation source : An atomizer intended to convert free atoms to an excited state.

2.2.8 dispersion (of the sample) : Conversion of the whole or part of the liquid or solid sample into a physical form sufficiently finely divided to allow it to be atomized upon introduction into the atomizer.

2 Parties d'appareillage spécifiques de l'émission de flamme, de l'absorption atomique et de la fluorescence atomique, et leurs fonctions

2.1 Sources de raies

2.1.1 lampe à décharge : Lampe contenant une vapeur ou un gaz excité par le passage d'un courant sous haute tension et produisant les raies caractéristiques des éléments contenus.

2.1.2 lampe à cathode creuse : Lampe à décharge dans laquelle la cathode est un corps creux contenant un ou plusieurs éléments et qui fonctionne dans des conditions telles que la vapeur des éléments produite par pulvérisation cathodique émette des raies caractéristiques particulièrement fines.

2.1.3 lampe à excitation haute fréquence : Lampe dans laquelle les éléments sont excités par un champ électromagnétique à haute fréquence (elle ne comporte pas d'électrodes internes).

2.1.4 lampe à fond continu : Lampe produisant une émission continue (non décomposable en raies) dans un domaine spectral déterminé.

2.2 Termes communs à toutes les sources d'atomisation

2.2.1 désolvation : Élimination du solvant donnant naissance à des particules du soluté.

2.2.2 volatilisation : Conversion des particules de soluté contenant l'élément à doser de l'état solide et/ou liquide à l'état de vapeur.

2.2.3 atomisation : Conversion d'un composé de l'élément à doser en vapeur atomique.

2.2.4 source d'atomisation; atomiseur : Dispositif permettant l'atomisation.

2.2.5 rendement global d'atomisation : Rapport du débit massique d'élément à doser transformé en atomes libres dans la source d'atomisation au débit massique d'élément à doser entrant dans le dispositif de dispersion.

2.2.6 rendement local d'atomisation : Rapport du nombre d'atomes libres au nombre total d'atomes de l'élément à doser présents dans la phase gazeuse en fonction du volume observé.

2.2.7 source d'excitation : Source d'atomisation destinée à amener des atomes libres à un niveau excité.

2.2.8 dispersion (de l'échantillon) : Conversion de tout ou partie de l'échantillon liquide ou solide en un état physique suffisamment divisé pour permettre son atomisation dans la source d'atomisation.