

# 运用低成本红外光谱仪 分析土壤主要功能特性 —营养性和污染性

作者

Robert J. Packer and Ben B. Perston  
Perkin Elmer LAS (UK),  
Chalfont Road, Seer Green,  
Beaconsfield HP9 2FX,  
UK (las.perkinelmer.com)

## 1 简介

随着世界人口的增多，食物短缺和可居住空间的缺乏是两大主要问题。对土壤进行检测可以为解决这两个问题提供信息帮助。我们通过对土壤中养分程度的测定知道土壤维持谷物生长的能力，而通过对其污染物水平的测定可以知道这种土地是否适合居住。

对于土地复垦和环境工程活动，由烃类化合物引起的土壤污染是一个严重问题。逸出气体分析，更具体地说是TGA-IR，可以用来分析土壤中烃类化合物污染的程度，中红外对提取物质的测量限可达到ppm级。



图1 在肯尼亚制备样品准备红外测定

在营养成分测定方面，近红外和中红外漫反射光谱已备受关注，因为该法比常规土壤分析方法更有优势。不仅节约成本和时间，而且可以完成土壤测量中大量数据采集的设置。从单一的谱图就能获取土壤的物理、化学和生物特性，这种获取信息的能力更增添了该技术的吸引力。

## 2 烃类化合物污染：TGA-IR

有许多被烃类化合物产品污染的案例。燃料储罐或传输管线中的燃料泄漏是最常见的例子，还有车辆冲洗区的雨水径流，这只是两个例子。因此，在环境监测或土地复垦方面，土壤污染的监测是十分重要的。

热重-红外（TG-IR）联用可以对污染物定性和定量，而无需进行样品的制备。

获得的土壤样品中混有浓度大约为10% m/m的柴油燃料。把17mg的土壤试样放入PerkinElmer TGA 4000的坩埚中，用10cm长的气室TL8000传输线把TGA与PerkinElmer红外光谱仪相联（如图2）。

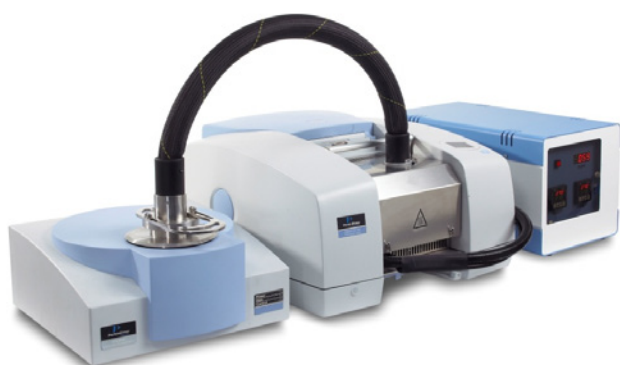


Figure 2 PerkinElmer TGA-IR 系统

图3a 是土壤试样的失重曲线，显示了三个明显的重叠的失重区间。在700℃，约有65%的残留，在这个阶段损失的可以认为主要是有机物。

图3b 是红外测试的结果，此图显示了当温度明显高于环境温度时，水蒸气增加，这表明了土壤不是完全干燥的，对应了第一阶段的质量损失。Gram-Schmidt热谱图中的第一个峰大约在230℃，这与第二阶段的失重相对应。光谱分析揭示了这是水蒸气、脂肪族烃化合物和处于1745cm<sup>-1</sup>的酯的混合物。这表明此污染物是带有一部分生物柴油（脂肪酸甲酯）的柴油燃料。热分析数据再次表明在此温度区域有10%的质量损失，这与已知的柴油浓度相一致。

## 3 烃类化合物污染：中红外

如果污染浓度很低，那么必须进行样品制备。经过溶剂萃取，中红外可以检测到ppm（10<sup>-6</sup>）量的污染物。有三种不同的红外光谱方法可以测量环境中的烃类化合物（也常用这些方法测量水中的油量）。

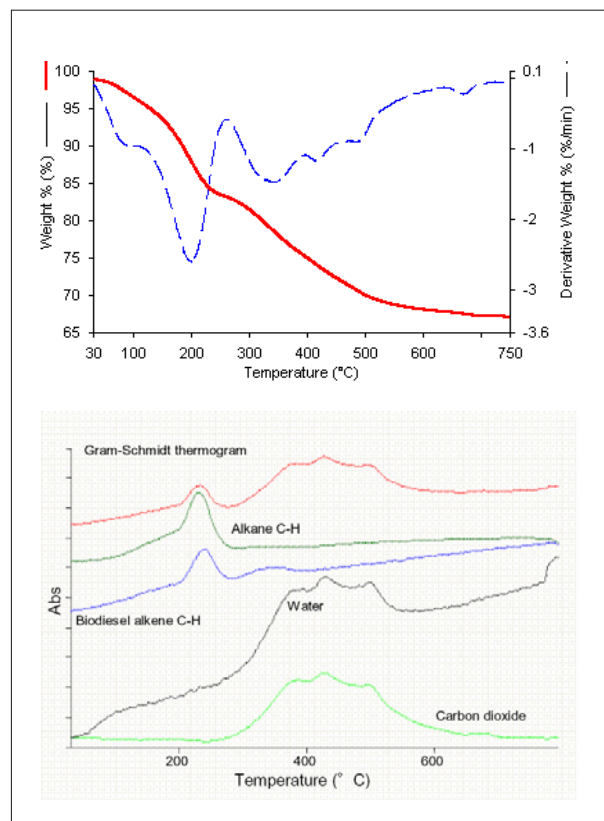


图3 a) 被污染的土壤试样的热重曲线和微分热重曲线

b) 被污染的土壤试样的温度—吸收度曲线

1) 使用全卤化溶剂（因C-H伸缩模式而没有吸收）中萃取非极性物质，再用相对较长的传输光程测定试样的光谱。这种方法利用了较长的传输光程和牢固的C-H键，因此灵敏度最高，但是所需的溶剂比较昂贵。

2) 使用挥发性碳氢类化合物溶剂（如戊烷或己烷）用于萃取。将已知容量的提取液放置在衰减全反射（ATR）晶体上，进行光谱测定。该方法灵敏度低，但使用的溶剂易得到。

3) 使用环己烷作为萃取剂，用红外透过率的方法进行测定。该法所需的光程较短，定量的键较弱，因此其灵敏度比之前的方法都低，而优点是使用的溶剂易得，传输取样便利。

这些萃取方法对于干燥、易分开的土壤很有效，但是如果土壤潮湿、聚为一团就不容易了。在这种情况下，如果先将土壤初步地碾碎，均匀地涂在托盘上，再放置一夜干燥或许就能得到较好的结果。

这三种方法均可以用Spectrum Two FT-IR红外光谱仪与环境烃类化合物分析包一起（如图4a和4b）来确定土壤或水中的碳氢类化合物的含量。



图4 a) Spectrum Two FT-IR红外光谱仪 b) 环境烃类化合物分析包

#### 4土壤的营养评价：中/近红外

使用红外光谱技术分析土壤的营养性比使用传统的ICP-MS或XRF技术分析具有许多优点。首先，系统的成本远远低于传统方法，无论是初始购买价格还是后续的保养。其次，检测快速，可在现场测试并当场得到答案。缺点：测量不直接，因此化学统计模型必须与收集到的宽泛、大量的光谱数据相关联，这样的结果才有意义。

中红外和近红外漫反射光谱技术均已用于土壤分析中。中红外可以提供有关土壤性质的更丰富的信息，这是因为检测到的矿物和有机物的基本振动与土壤性能（如维持植物生长的能力）有关。近红外检测到的是土壤中物质的较简单的泛频峰，其具有易重叠、较宽吸收峰的特征。

中红外已在非洲撒哈拉以南地区用于分析土壤维持植物生长的能力。图5是在现场使用PerkinElmer Spectrum Two光谱仪分析的实例。

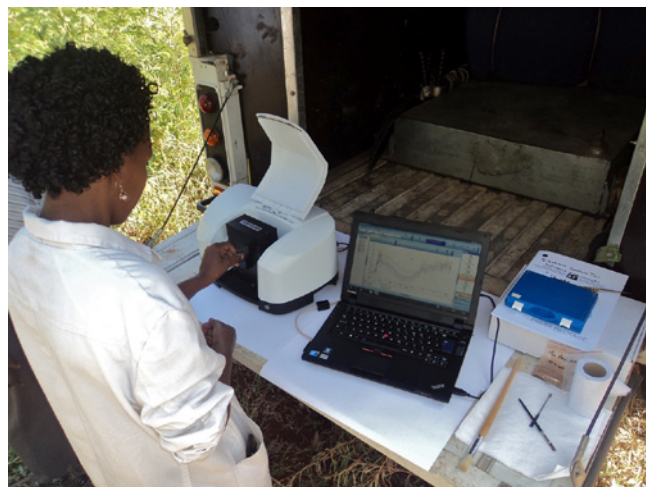


图5 带有漫反射附件的Spectrum Two傅里叶红外光谱仪被放在一辆车后用于测定肯尼亚西部的田间土壤

#### 5 结论

土壤测定对于世界持续的人口膨胀来说至关重要。虽然一些以实验室为基础的技术可用于这些测量，但事实已表明中红外可以进行土壤污染程度和营养水平的分析，且快速和低成本。

PerkinElmer, Inc.

珀金埃尔默仪器（上海）有限公司

地址：上海 张江高科技园区 张衡路1670号

邮编：201203

电话：021-60645888

传真：021-60645999

www.perkinelmer.com.cn



要获取全球办事处的完整列表，请访问<http://www.perkinelmer.com.cn/AboutUs/ContactUs/ContactUs>

版权所有 ©2012, PerkinElmer, Inc. 保留所有权利。PerkinElmer® 是PerkinElmer, Inc. 的注册商标。其它所有商标均为其各自所有者或所有者的财产。