

# Application of Infrared Spectroscopy in the Detection of Soil Organic Matter (SOM)

Danni Yu, Siqing Lei, Si Li\*, Zhongyuan Jiang, Zhixi Gao, Kehou Ao

School of Chemistry and Chemical Engineering, Zunyi Normal College, Zunyi Guizhou  
Email: \*lisi80@126.com

Received: Jul. 23<sup>rd</sup>, 2016; accepted: Aug. 14<sup>th</sup>, 2016; published: Aug. 17<sup>th</sup>, 2016

Copyright © 2016 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## Abstract

Infrared spectroscopy has incomparable advantages, compared with the traditional method for the determination of organic matter in soil. In this paper, the application of infrared spectroscopy to the analysis of soil organic matter (SOM) is tested and analyzed, summarizing several aspects of the near infrared, diffuse reflection and attenuated total reflection. Finally, the application of infrared spectroscopy in the detection of SOM is prospected, which provides reference for the further research.

## Keywords

Soil Organic Matter, Infrared Spectroscopy, Diffuse Reflection, Attenuated Total Reflection, Overview

# 红外光谱在土壤有机质检测中的应用进展

虞丹尼, 雷世勤, 黎 司\*, 江忠远, 高智席, 敖克厚

遵义师范学院化学化工学院, 贵州 遵义

Email: \*lisi80@126.com

收稿日期: 2016年7月23日; 录用日期: 2016年8月14日; 发布日期: 2016年8月17日

## 摘 要

红外光谱应用于土壤有机质的分析检测, 具有较传统土壤有机质的测定方法无可比拟的优势, 本文对红

\*通讯作者。

文章引用: 虞丹尼, 雷世勤, 黎司, 江忠远, 高智席, 敖克厚. 红外光谱在土壤有机质检测中的应用进展[J]. 分析化学进展, 2016, 6(3): 51-55. <http://dx.doi.org/10.12677/aac.2016.63008>

外光谱法应用于土壤有机质分析测试,着重从近红外、漫反射、衰减全反射几个方面进行了综述,最后对红外光谱在土壤有机质检测应用方面进行了展望。这为后续研究提供有益参考。

## 关键词

土壤有机质, 红外光谱, 漫反射, 衰减全反射, 综述

## 1. 引言

有机质作为土壤中重要的最活跃化学组成成分之一, 尽管其含量较低但却对土壤的肥力和结构有重要影响。土壤中有机质的形成是由各种动植物、微生物及人工施肥经过分解转化形成, 是影响土壤中植物、生物生长、衍繁、营养物质的分解、转化及土壤中污染物的迁移、转化过程[1][2]。为了弄清土壤有机质的复杂组成, 已有大量报道运用干烧法、湿烧法、水合热法、灼烧法、重铬酸钾法等测定土壤中有机质方法[3], 如: 陈丽琼[4]、郝冠军[5]、季天委[6]等都运用了重铬酸钾法对不同土壤有机质进行了测试; 郎松岩[7]、邵则瑶[8]、王雪征[9]、李林[10]则分别应用容量法、水和热法、比色法、灼烧法和化学法测定了土壤中的有机质含量。虽然上述方法都能对土壤中有机质进行测定, 但各自都存在不足之处, 如: 土壤中还原性物质等会影响容量法分析测定结果[7]; 干、湿烧法测定土壤有机质时, 需要特定的设备仪器进行方法校对才准确, 且整个操作过程费时[11]; 重铬酸钾法对有机质的测试条件相对比其他测试方法还要苛刻[4]-[12]。

针对于传统土壤有机质的检测方法比较复杂、繁琐、耗时、对分析样品有不同程度的破坏, 且对检测人员都有较高的要求。将红外光谱应用于土壤有机质检测能够对以上缺点有极大的改善。红外光谱法基于不同物质对红外光具有选择性吸收原理, 用于判断物质分子的组成结构及含量, 既可以进行定性分析, 也可以用于定量分析, 绝大多数有机物都有红外吸收[13]。红外光谱法测试土壤有机质具有简单、快速、绿色环保、不需要专业的技术人员操作等优点[14]。土壤中有机质含量相对较低, 虽然其组成元素只有 C、O、H、N 等, 但其元素之间相互结合组成不同的官能团, 而红外光谱法就是能提供这些官能团的结构信息。通过在一定范围内的红外光谱, 测量显示的主要是含有 C-H、N-H 等基团吸收的记录, 并且一个官能团能有多条谱带可供选择, 这样对于排除干扰更有利, 光源发光能量较低, 检测器的灵敏度也很低, 可以对一般物质(特别是粮食农作物)的质量、物种情况、组成成分等方面进行全面的定量和定性检测, 以及快速检测等[15]。基于红外光谱对于土壤有机质检测应用方面广阔的前景, 本文对各种红外光谱法应用于土壤有机质检测方面进行了初步的综合评述, 为土壤有机质的研究及红外光谱应用提供有益参考。

## 2. 近红外光谱法

红外光谱根据波长的不同分近、中、远红外。近红外光谱区(Near Infrared Spectroscopy, NIS)按 ASTM (American Society of Testing Materials)的定义是指波长在 780~2526 nm 之间的电磁波[16]。在分析过程中, 样品的组成决定了谱图特征。在不同的化学环境中相同基团的谱图特征也存在很大差别, 物质经过光的照射从而使分子能量增加使其中的化学键发生倍频和合频振动产生谱图。因此在一定的红外光谱范围内, 主要是测量含有-COOH、-OCH<sub>3</sub>、-NH<sub>2</sub>、-CHO 等基团的特征吸收的谱图记录, 用红外光谱法获取有机化合物的信息和性质较准确、快速。常采用偏最小二乘法(PLS)、BP 神经网络模型、主成分回归法(PCR)建立模型[17]。2002 年于飞建等人运用近红外光谱法分析土壤中的有机质和氮素含量[18]。在 2010 年韩瑞珍等人应用可见/近红外光谱技术对土壤有机质进行了定量分析[19], 得出测量结果, 建立偏最小二乘法模型没有 BP 神经网络模型测量精确。2011 年岑一郎等人运用可见/近红外漫反射光谱测定土壤有机质,

指出土壤颗粒的不同对土壤有机质的测量会有很大的影响[20]。在 2014 年贾生尧[21]等人也运用可见—近红外光谱技术,同时采用不同的建模方式对土壤有机质的含量进行测定。2014 年王洪涛基于近红外光谱技术建立不同模型预测森林有机碳含量[22]。2015 年杨海清等人运用可见—红外光谱检测土壤中的有机质[23]。

近红外区多用于有机物质的定量研究,无机化合物的研究鉴定多运用远红外区。近红外光谱分析虽然具备了测试方法快捷简单、过程绿色环保、测试对样品无破坏、成本较低等红外光谱优点外,但也存在一些缺点,一是在于灵敏度不高,因此会造成相对误差相对较大;二是因为红外光谱不是一种直接的方法用于测量,通常需要用化学分析方法取得一定的样品数据用于分析,所以精确度还不会达到化学分析方法的精度测量,而且模型的建立也需要时间及具备相应的基础知识;再者,近红外光在 780~2526 nm 的浅的测量范围,一般物质的测定只适合对在这个范围内有特征吸收的官能团或者与之相关的属性进行测定,而且含量一般要高于 0.1%才可以使用于近红外进行测定。

### 3. 漫反射法

由于样品表面的不平整使光照射后产生多种反射光,而漫反射就是弥补了这一缺点,将光源进入样品后的各种反射进行吸收后再重新返回到表面[24]。运用带有漫反射附件对样品进行分析的红外光谱法就称为漫反射光谱法。样品对光的吸收强度、散射强度和物理状态在很大程度上影响漫反射的吸收强度,且样品组分含量与其光强度不符合 Lambert-Beer 定律。因此漫反射要应用于物质的定量分析,就需要建立和样品成线性关系的光谱参数。2010 年李民赞[25]等人运用近红外漫反射光谱原理实现了土壤有机质的快速测定,仪器使用 LED 作为光源,使用不同光纤实现了光信号由光源从地下往上层表面进行信息传递技术,经过这样优化的电压与放大滤波电路的方法可以减少噪声对测定结果的影响,而且大大降低了能量消耗,且提供了稳定的光源,能够快速测定,是一种理想的方便外出检测土壤有机质含量的仪器,2011 年王淼[26]等人采用近红外漫反射光谱测定土壤有机质的预测的最佳波长的选择,在波长为 1300~2400 nm 范围内,建立有机质偏最小二乘法模型,在检测中该方法以自身的优点,避免还原性氧化铁等较多对有机质检测造成干扰的因素。刘雪梅[27]等人运用近红外光谱,同时测定土壤中的有机质的含量及 P 含量,采用近红外漫反射光谱原理,对光谱数据主成分分析建立六个不同模型分别测得土壤有机质含量且进行对比。

### 4. 衰减全反射红外光谱法

近红外光谱对一些难粉碎、难熔、难溶的特殊样品进行测试还很困难。为了克服这些存在的缺点,发展了傅里叶变换衰减全反射红外光谱仪(Attenuated Total Internal Reflectance Fourier Transform Infrared Spectroscopy,简称 ATR-FTIR),ATR-FTIR 使分析变得更加快捷方便。ATR 是根据光内反射原理设计的,产生谱图的原因同样是物质对光进行有选择的吸收,红外光从光源发出先通过折射率大于样品折射率的晶体再折射到样品表面上,即入射光的要大于临界角才能发生全内反射,在这个过程中大部分光直接被反射回表面,而有一部分红外光被样品吸收,从而使回到表面的反射光强度有所减弱[28]。对于一些难以制成表面平整的样品、和一些难以制成规定规格的样品,ATR 则可以对其进行快捷不破坏的测定,从红外光谱图像中可以得出物质的空间结构及官能团。多用于定性结构分析,少量用于定量分析。锗晶体的折射率大于 1.5,在作为 ATR 反射元件时可以测得流体的组分和受污染状况[29]。2009 年陶丽珍等人运用 ATR 鉴别纤维[30];邵秋艳[31]等人在 2014 年运用衰减全反射光谱快速测定氮及其同位素。孙跃春,王莹[32]运用 ATR-FTIR 技术测定土壤中氮、磷、钾等其他元素的含量,并且使用此方法测得的有效磷、氮含量更准确。ATR-FTIR 的发展,很好的为测定土壤中原位氮及其研究氮的硝化过程提供了更好手段,

可以在溶液和土壤中硝态氮以及氮同位素标记硝态氮测定中应用。马连刚[33]等也采用 ATR-FTIR 快速简便地分析了土壤中重要的组成成分胡敏酸的分子结构和官能团。

ATR-FTIR 一般不用于短波波长的测定而多用于中波波长的红外测定,因此一般 ATR 常用于物质的结构分析上,即用于物质的定性分析,存在的不足就是定量分析技术不是特别成熟而没有得到广泛应用,而且 ATR 所用的方法的模型校正,要根据标准数据库的模型相匹配,精确度要相统一。因此红外在运用于检测土壤有机质的含量中,近红外的应用要多于 ATR-FTIR 光谱。

## 5. 展望

随着科学发展的不断进步,红外技术从 19 世纪至今的不断发展,系统更加完善,并且计算机技术的迅猛发展,能够很好的为红外光谱技术的提高提供帮助,发展 ATR 实现了样品凹凸不平的表面结构进行无破坏测定,极大地扩展了红外的应用领域,获得的红外图像更能准确表明物质的空间结构及官能团的分布情况。在漫反射的应用方面,使一些难压片的样品也能够得到检测,应用于更多领域,中红外在用于结构和定性分析的同时,用于定量分析也在不断改进与完善,而更加完善软件的数理统计方法,同时创建新的分析方法,红外测温技术的普遍应用与提高,仪器携带更加快捷,克服数学建模的不足,成本的不断降低的硬件设备与从谱图中提取有效信息的精确度的提高,使红外光谱技术的更加完善,基于任何物质在温度高于绝对零度的条件下都能向外辐射各种波长的特点,使红外光谱技术将在以后得到更加广阔的应用。

## 6. 结论

本文对近红外、ATR、漫反射等几种红外光谱应用于土壤有机质的检测分析进行了初步综合评述,与传统的土壤有机质分析方法相比,不同的红外光谱分析法都表现出操作简便快捷、对样品无破坏、测试过程绿色环保等一系列优点;此外,近红外在应用上主要受制于各种模型的建立与引入,ATR 和漫反射均要求额外配备相应的测试附件而增加了测试成本,ATR 还具有较低的灵敏度,漫反射同样要求数学模型的结合才能更好实现对土壤有机质的分析应用。

## 基金项目

贵州省教育厅自然科学研究项目:黔教合 KY 字[2013]172 号资助;贵州省科学技术基金:黔科合 J 字 LKZS[2014]02 号、15 号,黔科合 LH 字[2015]7037 资助;遵义师范学院博士基金:2013BJ03,2013BJ02 资助。

## 参考文献 (References)

- [1] 赵劲松,张旭东,袁星,王晶. 土壤溶解性有机质的特性与环境意义[J]. 应用生态学报,2013,14(1): 126-130.
- [2] 吴才武,夏建新,段峥嵘. 土壤有机质测定方法述评与展望[J]. 土壤,2015,47(3): 453-460.
- [3] 于彬,郭彦青,杨乐苏. 化学氧化法测定土壤有机质的研究进展[J]. 广东林业科技,2007,23(1): 100-103.
- [4] 陈丽琼,胡勇. 硫酸银对重铬酸钾法测定土壤有机质的影响研究[J]. 环境科技,2011,24 增刊(1): 69-70.
- [5] 郝冠军,黄懿珍,赵晓艺,奚有为,方海兰. 重铬酸钾外加热法测定土壤有机质的不确定度评定[J]. 上海农业学报,2011,27(3): 103-109.
- [6] 季天委. 重铬酸钾容量法中不同加热方式测定土壤有机质的比较研究[J]. 浙江农业学报,2005,17(5): 311-313.
- [7] 郎松岩,张福金,李秀萍,任超,骆洪. 容量法测定土壤有机质不同消解方式的比较[J]. 内蒙古农业科技,2009(1): 57-59.
- [8] 邵则瑶,黄业海,李酉开. 水合热法测定土壤有机质的研究[J]. 土壤通报,1980(3): 29-31.
- [9] 王雪征,茜晓哲,庞建周,陈淑萍,张文英. 比色法测定土壤有机碳含量的可行性研究[J]. 河北农业科学,2014,18(5): 100-104.



- [10] 李林, 李捷, 陈俊英, 蔡耀辉. 灼烧法与化学法测定土壤有机质对比与拟合分析[J]. 安徽农业科学, 2015, 47(26): 81-83.
- [11] 刘云香. 土壤有机质不同测定方法的比较[J]. 农村科技, 2007(6): 27-28.
- [12] 王玲欣. 重铬酸钾法测定土壤有机质应注意事项[J]. 北京农业, 2012(4): 41-42.
- [13] 武汉大学主编. 分析化学(第五版下册)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2007: 262-263.
- [14] 王多加, 周向阳, 金同铭, 胡祥娜, 钟娇娥, 吴启堂. 近红外光谱检测技术在农业和食品分析上的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2004, 24(4): 447-450.
- [15] 袁天军, 王家俊, 者为, 段焰青, 李伟, 侯英, 杨式华, 赵艳丽, 张金渝. 近红外光谱法的应用及相关标准综述[J]. 中国农学通报, 2013(29): 190-195.
- [16] 韩春亮, 郑利宇, 崔凤霞. 近红外光谱的原理及应用[J]. 河南教育学院学报, 2009, 18(4): 19-21.
- [17] 熊英. 近红外光谱的原理及应用[J]. 中山大学研究生学刊, 2013, 34(2): 17-19.
- [18] 于飞建, 闵顺耕, 巨晓棠, 张福锁. 近红外光谱法分析土壤中的有机质和氮素[J]. 分析实验室, 2002, 21(3): 49-51.
- [19] 韩瑞珍, 宋韬, 何勇. 基于可见 - 近红外光谱的土壤有机质含量预测[J]. 中国科学: 信息科学, 2010, 40(1): 111-116.
- [20] 岑益郎, 宋韬, 何勇, 鲍一丹. 基于可见/近红外漫反射光谱的土壤有机质含量估算方法研究[J]. 浙江大学学报, 2010, 37(3): 300-302.
- [21] 贾生尧, 唐旭, 杨祥龙, 李光, 张建国. 可见 - 近红外光谱技术结合递归变量选择算法对土壤全氮与有机质含量测定研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(8): 2071-2075.
- [22] 王洪涛. 基于近红外光谱技术预测森林土壤有机碳含量的研究[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 东北林业大学, 2014: 24-35.
- [23] 杨海清, 祝旻. 基于可见近红外光谱特征波长选择的土壤有机质快速检测研究[J]. 红外, 2015, 36(2): 42-48.
- [24] 邱雁. 漫反射光谱的理论与应用研究[D]: [硕士学位论文]. 上海: 同济大学, 2007: 3-4.
- [25] 李民赞, 潘雯, 郑立华, 安晓飞. 基于近红外漫反射测量的便携式土壤有机质测定的开发[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(4): 1146-1149.
- [26] 王淼, 解宪丽, 周睿, 王宝良, 王昌昆, 刘娅, 潘剑君, 沈润平, 潘贤章. 基于可见光 - 近红外漫反射光谱的红壤有机质预测及最优波段选择[J]. 土壤学报, 2011, 48(5): 1084-1089.
- [27] 刘雪梅, 章海亮. 基于近红外光谱的不同建模方法检测土壤有机质和速效 P 含量的研究[J]. 西北农林科技大学学报(自然科学版), 2013, 41(4): 53-56.
- [28] 黄红英, 尹齐和. 傅里叶变换衰减全反射红外光谱法(ATR-FTIR)的原理与应用进展[J]. 中山大学研究生期刊(自然科学, 医学版), 2011, 32(1): 21-27.
- [29] 徐琳, 王乃岩, 霸书红, 王云龙. 傅里叶变换衰减全反射红外光谱法的应用与进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2004, 24(3): 318-319.
- [30] 陶丽珍, 潘志娟, 蒋耀兴, 秦大可. 衰减全反射傅里叶红外光谱在纤维鉴别中的应用[J]. 上海纺织科技, 2009, 37(9): 17-19.
- [31] 邵艳秋, 杜昌文, 申亚珍, 马菲, 周健民. 基于中红外衰减全反射光谱的氮同位素标记硝态氮的快速测定[J]. 分析化学研究报告, 2014, 42(5): 747-752.
- [32] 孙跃春, 王莹. 光谱技术在草地土壤检测中的应用和展望[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(10): 2017-2021.
- [33] 马连刚, 肖保华, 唐婷. 胡敏酸衰减全反射 - 傅里叶变换 - 红外光谱研究[J]. 地球与环境, 2014, 42(1): 55-61.

**期刊投稿者将享受如下服务：**

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击：<http://www.hanspub.org/Submission.aspx>