

## 使用 Agilent 8700 LDIR 激光红外成像系统分析有色微塑料



### 作者

Wesam Alwan 和  
Darren Robey  
安捷伦科技有限公司

### 摘要

为了满足塑料的不同生产目的，如保护作用、实用性和美观，它们往往被制成各种颜色。在使用拉曼显微成像等光谱技术分析微塑料时，塑料中的染料/色素会导致结果不准确。本应用简报通过使用 **Agilent 8700 LDIR 激光红外成像系统** 分析有色聚对苯二甲酸乙二醇酯 (PET) 微塑料来展示了如何克服这一挑战。该系统实现了不受颗粒颜色影响的准确微塑料分析。

## 前言

广泛存在的塑料污染已成为全球最紧迫的环境问题之一。2022 年的一份报告显示，到 2060 年，全球塑料垃圾的数量将增加近两倍，其中有 15% 会进入生态系统中<sup>[1]</sup>。其中一些污染以微塑料的形式存在，这些微小的颗粒会污染水体和食物链。

要了解微塑料的影响，需要对其进行适当的表征。但拉曼显微成像等传统的光谱技术无法对有色微塑料进行可靠分类，而这却是确定微塑料生态影响的关键步骤。在拉曼显微镜中，与聚合物本身相比，染料和色素会产生尖峰和更高强度的响应，从而导致不准确的微塑料鉴定<sup>[2-5]</sup>。为了克服这个问题，需要针对常见的染料和色素进行耗时的测量优化并创建谱库。

本应用简报表明，使用 8700 LDIR 激光红外成像系统的自动化微塑料分析工作流程时，添加到聚合物中的着色剂（染料和色素）对微塑料表征没有负面影响（图 1）。



图 1. Agilent 8700 LDIR 激光红外成像系统可对微塑料进行高速常规分析，包括样品中存在的颗粒数量、颗粒大小和化学组成

首先使用扫描模式以单波数 ( $1442\text{ cm}^{-1}$ ) 快速扫描样品区域，以生成红外图像。选择该波数是为了确保准确检测微塑料（由于存在碳氢键，大多数塑料聚合物在该波数下产生吸收峰）。对于不含碳氢键的罕见聚合物类型，颗粒检测基于颗粒返回的散射光。此图像用于定位该区域中的颗粒并描述其大小和形状。定位每个颗粒后，LDIR 会快速自动移动到每个颗粒位置，并获得完整光谱。然后将该光

谱与微塑料谱库进行比较，从而确定最佳的光谱匹配结果，并按每个颗粒进行报告。本研究使用 **Agilent Clarity** 软件随附的 Microplastics Starter 2.0 谱库。该谱库来源可靠，其中包括与微塑料（例如样品和矿物中存在的核心聚合物和天然材料）分析相关的多种光谱<sup>[6,7]</sup>。为了验证微塑料鉴定结果，根据需要使用了安捷伦内部谱库。

## 实验部分

本研究使用市售有色聚对苯二甲酸乙二醇酯 (PET) 瓶 (棕色、白色和钴蓝色 100 mL PET 圆形瓶, 产品编号: BOPBRB100, New Directions Australia) (图 2)。



图 2. 本研究中使用的有色聚对苯二甲酸乙二醇酯塑料瓶

为了制备用于分析的样品, 使用大多数五金店均有售的金属锉刀, 将 PET 瓶的一部分磨成细粉。将颗粒收集至装有 5 mL 无水乙醇 (Scharlau ET00052500; CAS 号: 64-17-5) 的样品瓶中, 剧烈振摇, 无需进一步处理即可获得微塑料溶液。用移液器将多份 10  $\mu$ L 微塑料悬浮液转移到一块低辐射红外反射玻片 (7.5  $\times$  2.5 cm; MirrIR, Kevley Technologies, Ohio, USA) 上。然后将玻片在室温下干燥, 确保乙醇在分析前蒸发 (约 2 min)。

Clarity 软件中包含的自动化颗粒分析工作流程可用于所有样品。此工作流程可自动设置所有必要的仪器设置, 包括扫描速度、吹扫速度和衰减。这些设置无法更改。分析人员可以调整多个选项的默认设置, 包括颗粒检测系统的灵敏度、粒径范围和粒径分类。此外, 分析人员还可以自行设置匹配质量指数范围。匹配质量描述了样品光谱与参比谱库中光谱的匹配程度。对于本实验, 分类范围 (即通过“高”、“中”和“低”来表征光谱匹配质量) 设置为:

- 低置信度 0.65–0.75
- 中置信度 0.75–0.80, 以及
- 高置信度 0.80–0.99

将落在该范围外的任何粒子 (即置信度 < 0.65) 都归类为“不明确”。

在本研究中, 设置最小粒径为 10  $\mu$ m, 最大粒径约为 2000  $\mu$ m (覆盖团聚颗粒)。

## 结果与讨论

为了确定 LDIR 能否准确鉴定有色 PET, 分别评估了每种颜色的样品。所得结果汇总于表 1。

在扫描的每个区域内, 检测到超过 150 个颗粒。然后通过 LDIR 实现了对有色 PET (棕色、白色和蓝色) 微塑料 (> 95%) 的准确鉴定 (图 3)。除了准确鉴定这些颗粒外, 大部分颗粒都获得了高匹配质量指数 (高置信度), 分别为 76.6% (棕色 PET)、89.7% (白色 PET) 和 84.9% (蓝色 PET)。LDIR 高放大倍率可见光摄像头有助于直观区分有色 PET, 如图 4 所示。LDIR 结果表明, 添加到 PET 瓶中的着色剂 (染料和色素) 对准确表征 PET 生成的微塑料没有影响 (图 4)。

在拉曼光谱中, 这些色素的存在可能会增加荧光背景并产生额外的峰, 从而干扰拉曼光谱。在这种情况下, LDIR 具有一定的优势, 因为与 PET 聚合物信号相比, 添加的着色剂信号较弱, 如图 5 所示。有色 PET 表现出非常相似的谱图, 没有其他反映所添加的色素/染料的峰。

表 1. 使用 LDIR 获得的有色 PET 结果

样品	扫描面积 (mm)	颗粒总数	鉴定为 PET 的颗粒	鉴定质量	图
棕色 PET	19.08 $\times$ 19.71	201	193 (96.0%)	高置信度: 154 (76.6%) 中置信度: 23 (11.4%) 低置信度: 24 (11.9%)	3A
白色 PET	10.27 $\times$ 10.66	156	152 (97.4%)	高置信度: 140 (89.7%) 中置信度: 10 (6.4%) 低置信度: 5 (3.2%) 不明确: 1 (0.6%)	3B
蓝色 PET	13.24 $\times$ 18.30	319	310 (97.2%)	高置信度: 271 (84.9%) 中置信度: 32 (10.0%) 低置信度: 15 (4.7%) 不明确: 1 (0.3%)	3C

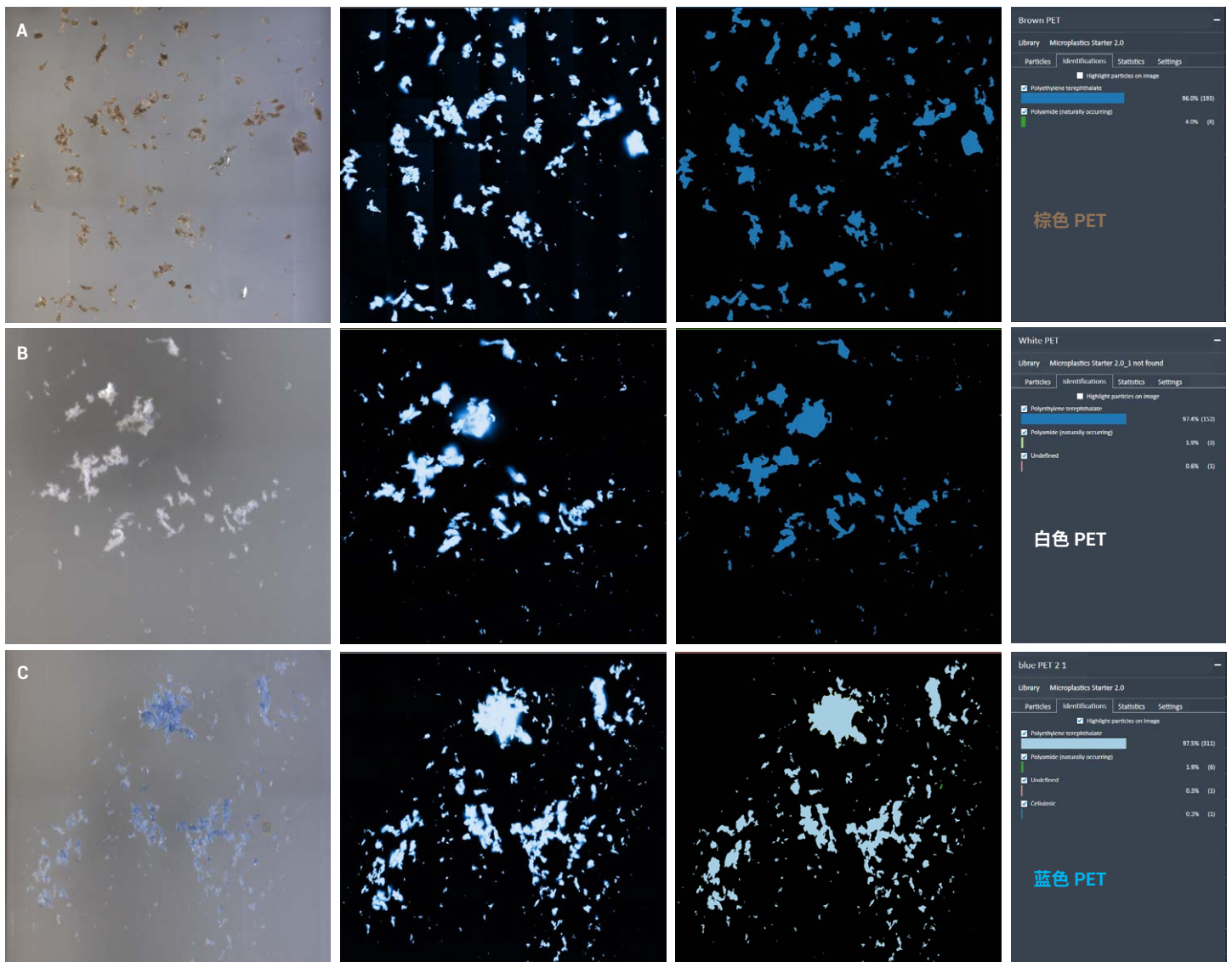


图 3. 使用 Agilent Clarity 软件进行的有色 PET 微塑料自动化工作流程分析：(A) 棕色 PET；(B) 白色 PET；(C) 蓝色 PET。对于每种颜色的样品，从左到右依次为：选定区域的可见光图像；1442  $\text{cm}^{-1}$  处扫描获得的红外图像；根据鉴定出的微塑料类型标示发现的颗粒；以及根据鉴定出的微塑料生成的自动统计数据

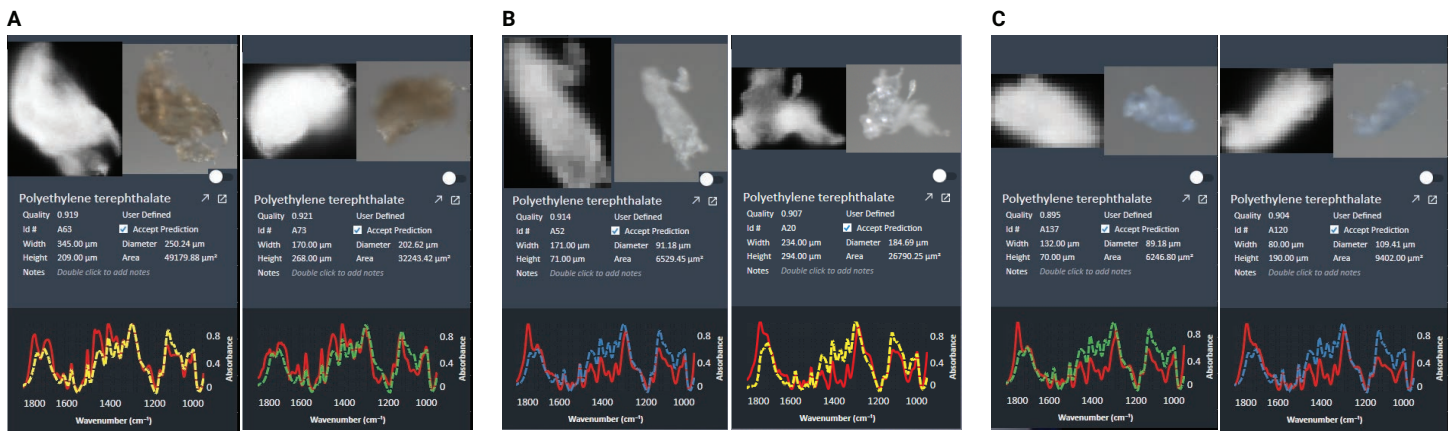


图 4. 有色 PET 微塑料示例: (A) 棕色 PET; (B) 白色 PET; (C) 蓝色 PET。可以显示颗粒信息, 如红外图像、可见光图像、匹配质量指数、大小以及光谱 (红色实线) 与匹配的谱库光谱 (虚线) 的叠加图

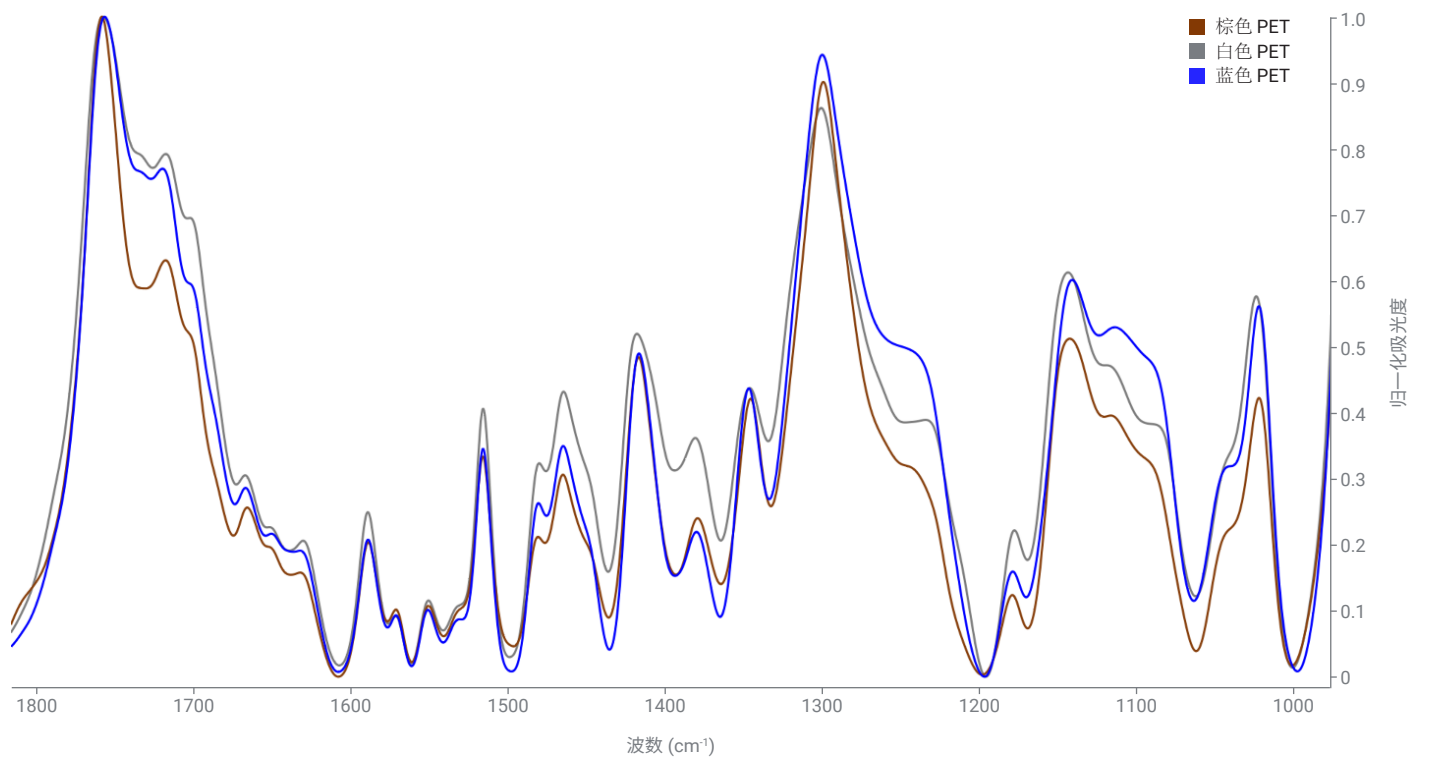


图 5. 有色 PET 微塑料的叠加谱图

## 结论

环境中存在许多有色合成微粒。添加的色素/染料可能会给微塑料的拉曼光谱分析带来挑战（例如，微塑料鉴定错误、方法优化、着色剂的谱库创建和繁琐流程）。本应用简报表明 Agilent 8700 LDIR 可以成功鉴定有色 PET 微塑料。添加的着色剂（染料和色素）对准确表征 PET 微塑料没有影响。使用该系统可以节省大量的时间，降低微塑料分析的复杂性。此外，Agilent Clarity 软件中的全自动颗粒分析方法也是用户获取有关粒径、每个颗粒的可见光和红外图像、粒径分布和微塑料鉴定信息的有效方法。

## 更多信息

- Agilent 8700 LDIR 激光红外成像系统
- Agilent Clarity 软件
- 微塑料技术常见问题解答
- 分析水中的微塑料

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

[www.agilent.com/chem/8700-ldir](http://www.agilent.com/chem/8700-ldir)

DE84387617

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2023  
2023 年 1 月 13 日，中国出版  
5994-5615ZHCN

## 参考文献

1. Organisation for Economic Co-Operation and Development. Global Plastic Waste Set to Almost Triple by 2060, says OECD. March 6, 2022. <https://www.oecd.org/environment/global-plastic-waste-set-to-almost-triple-by-2060.htm> (访问时间 2022-12-13)
2. Schymanski, D. et al. Analysis of Microplastics in Drinking Water and Other Clean Water Samples With Micro-Raman And Micro-Infrared Spectroscopy: Minimum Requirements and Best Practice Guidelines. *Anal. Bioanal. Chem.* **2021** Oct, 413(24), 5969–5994. DOI: 10.1007/s00216-021-03498-y. Epub 2021 Jul 20. PMID: 34283280; PMID: PMC8440246
3. Nava, V. et al. Raman Spectroscopy for the Analysis of Microplastics in Aquatic Systems. *Appl. Spectrosc.* **2021**, 75(11), 1341–1357 DOI:10.1177/00037028211043119
4. K ppler, A. et al. Analysis of Environmental Microplastics by Vibrational Microspectroscopy: FTIR, Raman or Both? *Anal. Bioanal. Chem.* **2016** Nov, 408(29), 8377–8391. DOI: 10.1007/s00216-016-9956-3. Epub 2016 Oct 8. PMID: 27722940
5. Lenz, R. et al. A Critical Assessment of Visual Identification of Marine Microplastic Using Raman Spectroscopy for Analysis Improvement. *Mar. Pollut. Bull.* **2015** Nov 15, 100(1), 82–91. DOI: 10.1016/j.marpolbul.2015.09.026. Epub 2015 Oct 9. PMID: 26455785
6. Primpke, S. et al. Reference Database Design for the Automated Analysis of Microplastic Samples Based on Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy. *Anal. Bioanal. Chem.* **2018**, 410, 5131–5141. DOI: [10.1007/s00216-018-1156-x](https://doi.org/10.1007/s00216-018-1156-x)
7. De Frond, H.; Rubinovitz, R.; Rochman, C. M.  $\mu$ ATR-FTIR Spectral Libraries of Plastic Particles (FLOPP and FLOPP-e) for the Analysis of Microplastics. *Anal. Chem.* **2021**, 93(48), 15878–15885 DOI: 10.1021/acs.analchem.1c02549