

使用 FTIR 光谱仪对塑料碎片进行快速简单的材料鉴定

使用配备 ATR 的 Agilent Cary 630 FTIR 鉴定海滩样品的聚合物类型



作者

Wesam Alwan 和
Fabian Zieschang
安捷伦科技有限公司

前言

在合成塑料的发明、开发和早期生产阶段，合成塑料产量较小，塑料废弃物的处理相对可控。但在过去的几十年里，塑料产量的增长速度超过了其他任何材料。据估计，目前全球每年会产生大约 4 亿吨的塑料废弃物，其中很大一部分最终进入了自然环境^[1]。

在最近的一些研究中，研究人员一直在探索塑料污染对陆地生态系统（包括海滩生态系统）的影响^[2,3]。要了解塑料污染对环境的影响，其中一个重要步骤就是改进用于鉴定塑料废弃物和微塑料颗粒的分析方法。

傅立叶变换红外 (FTIR) 光谱能够提供可靠的性能、高质量的数据以及经济高效的分析，非常适合用于鉴定不同类型的塑料。本研究重点介绍了 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪 (图 1) 如何为研究人员提供一种简单的工作流程，帮助他们实现塑料碎片的材料鉴定。该工作流程包括样品前处理、谱库生成、样品分析和数据报告。



图 1. 配备钻石晶体衰减全反射 (ATR) 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪

实验部分

样品

塑料碎片收集自 Mordialloc 海滩 (Victoria, Australia)。本研究共选择了 9 个在环境中明显降解的样品 (图 2)。



图 2. 从澳大利亚海滩收集并在本研究中使用 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪进行分析的塑料碎片

仪器

本研究使用配备钻石晶体 ATR 附件并由 Agilent MicroLab 软件控制的 Cary 630 FTIR 光谱仪 (图 1)。该软件使用图片式向导界面指导分析人员完成所有分析步骤。为了尽可能增大样品与钻石晶体的接触面积，使用刀片将每个硬质塑料样品切成薄片 (约 2 mm)。将样品放置在平台上，使用表 1 所列的操作参数通过 FTIR-ATR 直接进行测量。

生成谱库

通过参考用户生成的聚合物谱库鉴定塑料碎片样品，该谱库包含塑料行业中最常用的聚合物的 ATR 光谱。该谱库使用聚合物样品套装 (Scientific Polymer Products, Inc.; 货号 205; 批号 600801012) 开发，该聚合物样品套装包括聚苯乙烯、聚丙烯、高密度和低密度聚乙烯、聚对苯二甲酸乙二醇酯、聚氯乙烯、聚碳酸酯、聚(甲基丙烯酸甲酯)、聚甲醛、聚酰胺和聚四氟乙烯。

谱库搜索方法采用相似度检索算法（表 1）。使用 MicroLab 软件可以轻松创建、维护并管理谱库。只需几秒即可创建新谱库。可以在创建时或其他任意时间点向谱库中添加谱图，包括直接从结果界面添加。

表 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 操作参数

参数	设置
方法	谱库搜索
所用谱库	用户生成的聚合物谱库 (Agilent Internal Mini)
检索算法	相似度
光谱范围	4000–650 cm^{-1}
背景扫描次数	64
样品扫描次数	64
光谱分辨率	4 cm^{-1}
背景校正	空气
不同颜色表示的置信度阈值	绿色 (高置信度) : > 0.95 黄色 (中置信度) : 0.90–0.95 红色 (低置信度) : < 0.90

结果与讨论

尽管图 2 中不同样品的颜色不同，但 9 个塑料碎片样品中有 8 个样品经鉴定为聚丙烯，1 个样品经鉴定为高密度聚乙烯。如表 2 所示，聚丙烯结果的匹配质量指数 (HQI) 范围为 0.94651–0.99405，高密度聚乙烯的 HQI 为 0.97110。

针对每个谱库项目都会自动计算 HQI，该值表示实测光谱与谱库谱图的匹配程度。在原辅料鉴定中，HQI 通常用作合格/不合格标准。本研究使用用户自定义标准，详见表 1（采用不同颜色表示不同的置信度阈值）。

表 2. 风化塑料碎片样品的材料鉴定结果汇总

样品名称	图片	材料鉴定结果	匹配质量指数
蓝绿色塑料		聚丙烯	0.98133
绿色塑料		聚丙烯	0.94651
黄色塑料		聚丙烯	0.98414
蓝色塑料 1		高密度聚乙烯	0.97110
蓝色塑料 2		聚丙烯	0.99405
橙色塑料 1		聚丙烯	0.98940
红色塑料		聚丙烯	0.97501
橙色塑料 2		聚丙烯	0.98414
蓝色塑料 3		聚丙烯	0.99034

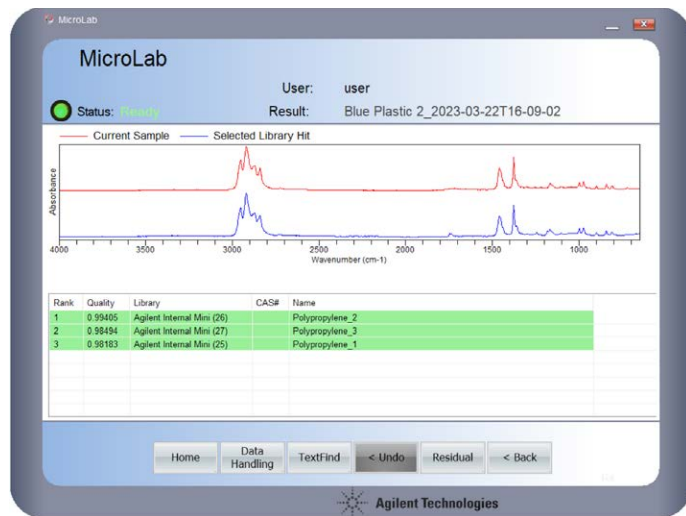
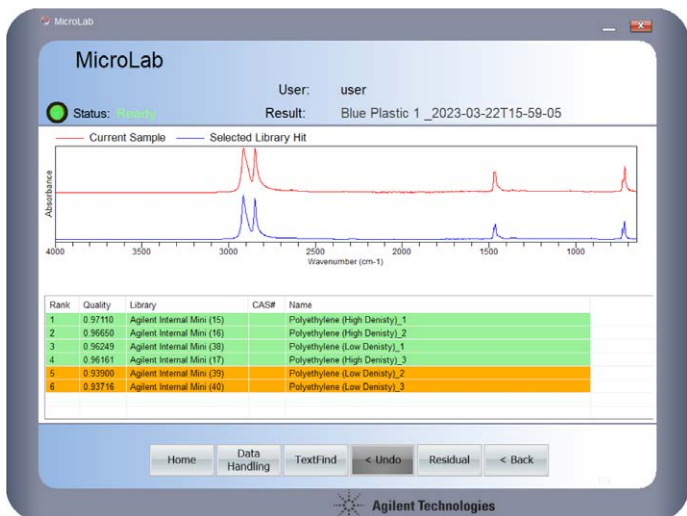


图 3. 塑料碎片的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪定性分析结果（红色曲线）和谱库匹配（蓝色曲线）示例。表中显示了各样品的匹配质量、所用谱库和匹配结果名称。根据 HQI 对结果进行颜色标记可用于定义置信水平，帮助用户解读结果，减少疏忽导致的错误

为了方便解读结果，将获得的每个样品的材料鉴定结果采用不同的颜色显示在屏幕上，如图 3 所示。该功能将 FTIR 系统变成了一种一站式解决方案，有助于快速做出决策。

Cary 630 FTIR 光谱仪采用 **MicroLab 软件** 控制，该软件通过可视化界面，指导用户开展从样品引入到报告生成的各个分析步骤（图 4）。

配备 ATR 附件的 Cary 630 可用于生成易于更新和优化的谱库。MicroLab 还提供多种谱库搜索算法，可满足不同的分析需求，提高了仪器的灵活性。



- ① 开始分析
- ② 按照图片式向导软件的指导进行操作
- ③ 即刻获得颜色标记的有指导意义的结果

图 4. 直观的 Agilent MicroLab 软件工作流程帮助用户通过 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪更快速、轻松地找到答案。图片式向导软件减少了培训需求，同时尽可能降低用户引起错误的风险

安捷伦环境研究解决方案

安捷伦提供一系列台式和便携式手持仪器，用于现场、实验室和远程户外环境中的塑料和微塑料分析，能够即刻提供实时结果，从而推动全球的塑料和微塑料研究。除了 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪外，安捷伦还提供以下仪器：



Agilent 8700 LDIR 激光红外成像系统

提供全新的前沿化学成像和微塑料光谱分析方法。



Agilent 4300 手持式 FTIR 光谱仪

采用轻便的人体工程学设计，集易用性、耐用性和灵活性于一体。



Agilent 4500 系列便携式 FTIR 光谱仪

化学、石化、食品和聚合物行业原料和成品的现场分析。



Agilent 5500 系列紧凑型 FTIR 光谱仪

紧凑型现场分析仪，旨在日复一日快速提供可靠、准确的结果。

结论

配备 ATR 采样附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪为鉴定从澳大利亚海滩收集的 9 个降解塑料碎片样品提供了一种快速、简单的方法。

使用直观的图片引导式 Agilent MicroLab 软件建立方法，并基于常用聚合物的标准样品自行构建谱库。软件自动比较 Cary 630 FTIR 采集的样品光谱与聚合物谱库中的光谱，并根据用户定义的匹配质量置信区间鉴定聚合物类型。

本研究证明了配备 ATR 的 Cary 630 FTIR 能够使用根据应用定制的方法快速鉴定聚合物型塑料废弃物。

更多信息

- Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪
- Agilent MicroLab 软件
- Agilent MicroLab Expert 软件
- FTIR 分析与应用指南
- FTIR 光谱基本原理 — 常见问题解答
- ATR-FTIR 光谱概述
- 微塑料技术常见问题解答

查找当地的安捷伦客户中心：

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

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com/chem/cary630

DE4704429

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 5 月 17 日，中国出版
5994-5986ZHCN

参考文献

1. United Nations Environment Program, Our Planet is Choking on Plastic, accessed April 2023, <https://www.unep.org/interactives/beat-plastic-pollution/>
2. Andrady, A. L. Weathering and Fragmentation of Plastic Debris in the Ocean Environment, *Mar. Pollut. Bull.*, **2022**, 180:113761. doi: 10.1016/j.marpolbul.2022.113761. Epub 2022 Jun 1. PMID: 35665618
3. Lavers, J. L.; Rivers-Auty, J.; Bond, A. L. Plastic Debris Increases Circadian Temperature Extremes in Beach Sediments., *J. Hazard Mater.*, **2021**, 15; 416: 126140. doi: 10.1016/j.jhazmat.2021.126140. Epub 2021 May 17. PMID: 34492929