

利用 FTIR 光谱实现整个生命周期的 塑料材料鉴定

使用配备 ATR 的 Agilent Cary 630 FTIR 鉴定塑料的
聚合物类型



作者

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

前言

鉴于塑料广泛应用于我们日常的生活，更充分地了解塑料的生命周期非常有用。从地下开采出来后，原油和天然气会被精炼成多种烃产品，例如乙烷和丙烷^[1]。这些产品用作塑料颗粒或微粒的起始材料或结构单元，然后用于生产塑料产品。根据成品的不同，可以使用不同的工艺（如注塑、成型机械和吹塑）对塑料颗粒进行成型加工。最终塑料产品包括大多数行业中使用的各种物品，包括饮料和液体装瓶、包装材料、婴儿用品、玩具、纺织品、建筑以及许多其他样品类型^[2]。

塑料产品使用后，可以回收利用，或作为废物在填埋场或焚化炉进行处置。如果塑料的收集和处置方法存在任何缺陷，废弃物最终会进入环境中（图 1）。乱丢和不当倾倒塑料废物也会增加环境中的塑料量。

对于图 1 中概述的每个步骤，材料鉴定是一项重要的质量保证或安全控制分析措施，广泛用于塑料行业中。生产前和生产后的材料分析可确保成品符合预期用途所需的质量和纯度。因此，材料鉴定是许多行业标准中的重要要求。同样的检测技术越来越多地用于在回收中心鉴定塑料废物，帮助保证回收塑料的质量，以及鉴定从环境中收集的塑料碎片。

傅立叶变换红外 (FTIR) 光谱能够提供可靠、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。本应用简报重点介绍了 **Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪**（图 2）如何提供一种简单的工作流程，实现塑料整个生命周期中的材料鉴定。



图 2. 配备钻石晶体衰减全反射 (ATR) 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪

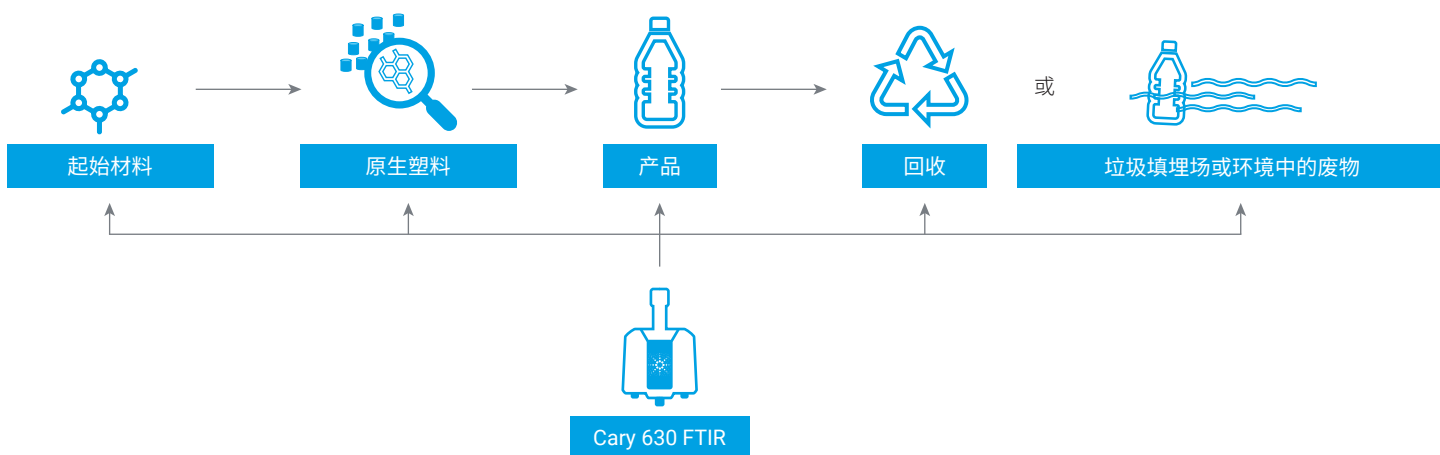


图 1. 塑料的生命周期。在塑料生命周期的每个阶段，材料鉴定可确保可靠的质量控制，并为起始材料和成品提供准确的安全要求。Agilent Cary 630 FTIR 与 Agilent MicroLab 软件相结合，可用于对不同样品类型执行快速、简单且可靠的材料鉴定工作流程

实验部分

样品：本研究使用五个样品，涵盖塑料生产、使用、回收和处置的四个阶段：

1. 增塑剂 — 起始材料
2. 微粒 — 塑料原料
3. 咖啡盖 — 塑料产品
4. 水瓶 — 回收产品
5. 塑料碎片 — 收集自 Mordialloc 海滩 (Victoria, Australia)

仪器：本研究中使用的配备钻石晶体 ATR 附件的 Cary 630 FTIR 光谱仪 (图 2)。

软件：Cary 630 FTIR 光谱仪采用 Agilent 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 3)。

生成谱库：样品 1 通过安捷伦 ATR 演示谱库进行鉴定。样品 2-5 通过用户生成的聚合物谱库进行鉴定，该谱库是使用聚合物样品试剂盒 (Scientific Polymer Products, Inc.; 目录号 205; 批号 600801012) 开发的。用户生成的光谱库包含塑料行业中最常用的聚合物的 ATR 光谱，其中包括：

- 聚苯乙烯 (PS)
- 聚丙烯 (PP)
- 高密度聚乙烯和低密度聚乙烯 (HDPE 和 LDPE)
- 聚对苯二甲酸乙二醇酯 (PET)
- 聚氯乙烯 (PVC)
- 聚碳酸酯 (PC)
- 聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA)
- 聚甲醛 (POM)
- 聚酰胺 (PA)
- 聚四氟乙烯 (PTFE)



图 3. 直观的 Agilent MicroLab 软件使 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪只需三步即可轻松找到答案。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

使用表 1 所示的参数，通过相似度检索算法来进行谱库搜索。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，直接从结果界面向谱库中添加谱图。

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) 和安捷伦 ATR 演示谱库
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

使用配备钻石晶体 ATR 采样附件的 Cary 630 FTIR 来鉴定代表塑料生命周期的五个不同样品。使用相似度算法搜索用户生成的光谱库，所有五个样品均以高于 0.97 的匹配质量指数 (HQI) 得到鉴定 (1 为最高理论值)。如表 2 所示，HQI 值为 0.99599 (增塑剂，甘油)、0.99621 (塑料微粒，LDPE)、0.97809 (咖啡盖，PS)、0.98622 (水瓶，PET) 和 0.98940 (风化塑料，PP)。

表 2. 使用 Agilent Cary 630 FTIR-ATR 和相似性搜索算法所获得的塑料材料鉴定分析结果汇总

样品名称	图片	材料鉴定结果	匹配质量指数
增塑剂 (起始材料)		甘油	0.99599
塑料微粒 (原料)		LDPE	0.99621
塑料产品 (咖啡盖)		PS	0.97809
回收塑料 (水瓶)		PET	0.98622
风化塑料 (废物)		PP	0.98940

为轻松查看由 Cary 630 FTIR 生成的数据，根据用户定义的置信度阈值对获得的每个样品的材料鉴定结果进行颜色编码 (图 4)。在本研究中，HQI 高于 0.95 的结果以绿色进行颜色编码，表明光谱匹配良好，并为材料的鉴定结果提供了可信度。对结果进行颜色编码将 Cary 630 FTIR 系统转变为一种简便易用的一站式解决方案，有助于快速做出决策。



图 4. Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪对五个塑料样品的定性分析结果（红色迹线）和谱库匹配结果（蓝色迹线）。表中显示了各样品的匹配质量、所用谱库和匹配结果名称；(A) 增塑剂；(B) 颗粒；(C) 咖啡盖；(D) 水瓶；(E) 风化塑料

结论

Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪提供了一种简单易用的解决方案，能够对用于制造塑料的原料到回收和废弃的塑料进行材料鉴定。

Cary 630 FTIR 和 MicroLab 软件有利于快速、轻松地生成聚合物谱库，从而快速鉴定增塑剂、微粒、杯盖、回收水瓶和海滩塑料碎片。所有五个样品的匹配质量指数 (HQI) 均高于 0.97 (1 为最高理论值)。MicroLab 软件根据 HQI 对鉴定结果应用颜色编码，从而能够快速、轻松地查看数据的质量。

本研究表明，配备 ATR 采样附件的 Cary 630 FTIR 能够灵活应用于根据制造商、回收商或环境研究人员的要求对样品进行材料鉴定。

参考文献

1. Rhodes, C. J. Plastic Pollution and Potential Solutions, *Sci. Prog.*, **2018** 101(3), 207–260. doi: 10.3184/003685018X15294876706211. Epub 2018 Jul 19. PMID: 30025551.
2. British Plastic Federation, Plastics Applications, accessed May 2023, <https://www.bpf.co.uk/plastipedia/applications/Default.aspx>

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

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

DE43093893

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 6 月 6 日, 中国出版
5994-6145ZHCN