

# 傅立叶变换红外光谱法直接定性分析水样中有机污染物

郁建桥, 王霞, 陈波  
(江苏省环境监测中心, 江苏 南京 210036)

**摘要:**用蒸馏水作为样品红外光谱的背景图谱,在水样图谱中扣除背景图谱即得到其中主要污染物的红外图谱,通过解谱,可对水样中的成分作出快速定性,在环境应急监测中得到应用。

**关键词:**红外光谱法; 水样; 应急监测

**中图分类号:** O657.33 **文献标识码:** B **文章编号:** 1006-2009(2005)01-0034-01

## The Qualitative Analysis for some Organic Pollutants in Water with FTIR Spectrometry

YU Jian-qiao, WANG Xia, CHENG Bo

(Jiangsu Environmental Monitoring Center, Nanjing, Jiangsu 210036, China)

**Abstract:** Using distilled water as a background, the infrared spectrum of the main pollutants was obtained by subtraction water spectrum from that of the sample. The qualitative analysis of the pollutants in the sample could be conducted by analyzing the infrared spectrum. A rapid method for qualitative analysis of some pollutants in water is established.

**Key words:** FTIR spectrometry; Liquid sample; Emergency monitoring

傅立叶变换红外光谱法在环境监测中主要是用于油类、环境空气和废气中污染物的测定<sup>[1,2]</sup>。众所周知,水分对红外光谱法的干扰较大,传统的红外光谱法所分析的样品一般需是无水的,难以用于废水样品的测定,更不能满足污染事故应急监测的时效性要求。今通过试验,将这一方法作了改进,可直接对水样作定性分析。

### 1 试验

#### 1.1 仪器

EQU NOX 55 傅立叶变换红外光谱仪,德国 Brucker 仪器公司; DTGS 检测器, 4 000  $\text{cm}^{-1}$  ~ 400  $\text{cm}^{-1}$  波数。

#### 1.2 仪器分析条件

4  $\text{cm}^{-1}$  分辨率,单反射 ATR (MIRacle) 谱,采样范围 4 000  $\text{cm}^{-1}$  ~ 600  $\text{cm}^{-1}$ ,背景(蒸馏水)和样品的累加次数均为 512 次。

#### 1.3 试验方法

用蒸馏水作为样品红外光谱的背景图谱,在样品图谱中扣除背景图谱即得到样品中主要污染物

的红外谱图。

### 2 谱图解析

取某企业羊毛洗涤水作红外光谱分析,见图 1。

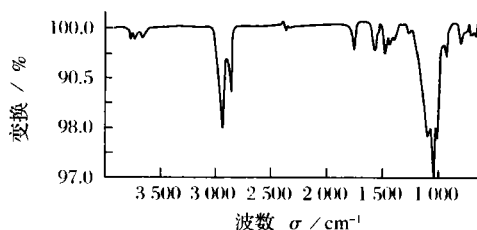


图 1 某企业羊毛洗涤水的红外光谱

从图 1 分析可知, 1 093  $\text{cm}^{-1}$  处,是典型的 C-O-C 振动峰, 1 464  $\text{cm}^{-1}$  处,是典型的  $\text{CH}_2$  剪刀振动峰,因此该样品中含有聚醇类物质。另外,将  
(下转第 46 页)

收稿日期: 2004-08-13; 修订日期: 2004-12-12

作者简介: 郁建桥 (1966—), 男, 江苏沭阳人, 高级工程师, 硕士, 从事环境监测工作。

返回。

## 2.2 用户界面设计

利用 HTML 语言编写 HTML 文档, 作为 CGI 网关程序的用户界面。该项目用 Frontpage 2002 生成本站点和各个界面。

## 2.3 设置服务器, 启动 CG 执行功能

得到 CGI 程序后, 必须把它放进服务器中。具体实现如下:

(1) 首先在站点目录下建立 CGI- B N 目录, 将所有的 CG 程序拷到此目录下;

(2) 进入 Web Server 设置界面, 设置站点目录为根目录;

(3) 添加虚拟目录, 设定刚才建立的 CGI- B N 为执行。

设置完成后服务器就允许 CGI 程序执行了, 但还需在编写好的网络文档上进行修改, 打开站点, 在查询对应网页中插入 `< form METHOD = "POST" ACTION = "/CGI- B N/waterq_exewaterq.exe">` 代码即可。

现在可以在任何一台浏览器上输入服务器的

IP 就可以查询数据了。

## 3 结语

在 Delphi 中利用 CGI 的中介作用, 将服务器与数据库集成为一个整体, 使用户能在网络环境中充分利用浏览器, 方便进行多种数据库操作。并结合实际, 建立了东江水质信息的 B/S (浏览器-服务器) 网络结构, 实现了网络的交互功能。

### [参考文献]

- [1] 卿 华. 公共网关接口 CGI 的设计与实现 [J]. 计算机工程与科学, 1999, 21 (2): 38- 39.
- [2] 唐红梅. 公共网关接口 CGI 及其应用 [J]. 计算机时代, 1999, 11: 8- 9.
- [3] 李 军. 在 Delphi 6 应用开发中使用 ADO [J]. 陕西工学院学报, 2003, 19 (1): 35.
- [4] 赵应丁. Delphi 7 数据库应用技术与实例 [M]. 北京: 中国水利水电出版社, 2003. 151- 159.
- [5] 王志强. Delphi 7 经典开发案例 [M]. 北京: 中国铁道出版社, 2003. 146- 152.

(上接第 34 页)

$1\ 009\ \text{cm}^{-1}$ ,  $1\ 036\ \text{cm}^{-1}$ ,  $1\ 549\ \text{cm}^{-1}$  与胆固醇的标准谱进行对比, 能得到该样品中含有胆固醇。 $1\ 737\ \text{cm}^{-1}$  处为典型的酯基峰。所以, 该样品中含有醇、胆固醇和酯等类别的混合物。

为对该法确认, 又对洗毛废水和由洗毛废水提取的羊毛脂 (纯度 80%) 的 ATR 图进行对照分析, 结果表明两者的红外光谱图有良好的一致性, 从而佐证了该定性方法的可行性和可靠性。羊毛脂是由醇类和酯类等组成的混合物, 这也表明谱图所反映的红外光谱信息与实际样品所含物质的一致性。两者的红外光谱对比见图 2。

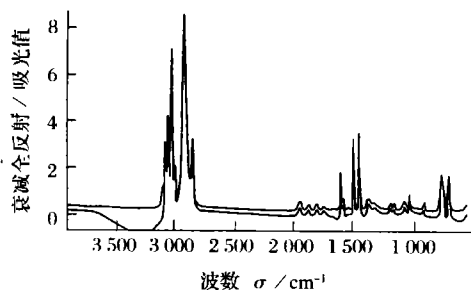


图 2 洗毛废水与羊毛脂红外光谱的对比

## 3 讨论

红外光谱法能对未知纯物质作准确性, 而对混合物则基本没有优势而言。企业排放的污染物一般都比较复杂, 应用红外光谱法作准确性还非常困难, 它只能分辨出主要的官能团, 也就是说只能通过判别其官能团而确定其含有哪一类物质。

在环境污染事故的应急监测中, 要求监测速度快, 并不要十分准确, 只要能判别出主要污染物的种类即可, 该方法基本能满足这一需求。

水和二氧化碳对红外光谱法光谱的干扰非常严重, 该方法虽能避免这方面一定的干扰, 但在解谱方面首先仍应考虑这方面问题。

### [参考文献]

- [1] 边归国. 傅立叶变换红外光谱法在环境监测中的应用进展 [J]. 环境监测管理与技术, 2004, 16 (1): 11- 12.
- [2] 王宗明, 何欣翔, 孙殿卿. 实用红外光谱学 [M]. 北京: 石油工业出版社, 1982.