

近红外与中红外光谱分析的区别

近红外光(NIR)是介于可见光区和中红外光区间的电磁波,不同文献中对其波长范围的划分不尽相同,美国试验和材料协会(ASTM)规定为700nm至2500nm。NIR常被化分为短波近红外(SW-NIR)和长波近红外(LW-NIR),其波段范围分别为700—1100nm和1100—2500nm。

1800年,Herschel首次发现了NIR光谱区;1900年前后,NIR光谱仪器使用玻璃棱镜和胶片记录器,其光谱范围局限于700nm—1600nm。50年代的商品NIR光谱仪使用硫化铅光敏电阻作检测器,其波长范围能延伸至3000nm,能用于定量分析,但,由于NIR消光系数低和谱带宽而解析困难,该技术并没有获得广泛应用。60年代,KarlNorris

使用漫反射技术对麦子水分、蛋白和脂肪含量进行研究,发现NIR光谱用于常规分析的实用价值。随计算机发展和化学计量学(Chemometrics)诞生,NIR和化学计量学结合产生了现代NIR光谱学。NIR最先应用于农业领域。80年代,光谱仪器制作和计算机技术水平有了大的提高,NIR被广泛应用于在工业和其它领域。近几届匹司堡分析仪器会议上,NIR已成为红外光谱分析报道的热点。NIR在线分析应用给石化工业带来了巨大经济效益,更是引人注目。

根据红外辐射在地球大气层中的传输特性,通常分为近红外(0.75 μ m到3 μ m)、中红外(3 μ m到30 μ m)、远红外(30 μ m到1000 μ m)。

近红外与中红外(红外)光谱法主要区别是波长不同,应用领域不同。

红外吸收光谱法是定性鉴定化合物及其结构的重要方法之一,在生物学、化学和环境科学等研究领域发挥着重要作用。无论样品是固体、液体和气体,纯物质还是混合物,有机物还是无机物,都可以进行红外分析。红外光谱法广泛应用于高分子材料、矿物、食品、环境、纤维、染料、粘合剂、油漆、毒物、药物等诸多方面,在未知化合物剖析方面具有独到之处。

近红外光谱(NIR)分析技术是近年来分析化学领域迅猛发展的高新分析技术,越来越引起国内外分析专家的注目,在分析化学领域被誉为分析“巨人”,它的出现可以说带来了又一次分析技术的革命。

近红外区域按ASTM定义是指波长在780~2526nm范围内的电磁波,是人们最早发现的非可见光区域。由于物质在该谱区的倍频和合频吸收信号弱,谱带重叠,解析复杂,受当时的技术水平限制,近红外光谱“沉睡”了近一个半世纪。直到20世纪50年代,随着商品化仪器的出现及Norris等人所做的大量工作,使得近红外光谱技术曾经在农副产品分析中得到广泛应用。到60年代中后期,随着各种新的分析技术的出现,加之经典近红外光谱分析技术暴露出的灵敏度低、抗干扰性差的弱点,使人们淡漠了该技术在分析测试中的应用,从此,近红外光谱进入了一个沉默的时期。80年代后期,随着计算机技术的迅速发展,带动了分析仪器的数字化和化学计量学的发展,通过化学计量学方法在解决光谱信息提取和背景干扰方面取得的良好效果,加之近红外光谱在测样技术上所独有的特点,使人们重新认识了近红外光谱的价值,近红外光谱在各领域中的应用研究陆续展开。进入90年代,近红外光谱在工业领域中的应用全面展开,有关近红外光谱的研究及应用文献几乎呈指数增长,成为发展最快、最引人注目的一门独立的分析技术。由于近红外光在常规光纤中具有良好的传输特性,使近红外光谱在在线分析领域也得到了很好的应用,并取得良好的社会效益和经济效益,从此近红外光谱技术进入一个快速发展的新时期。

我国对近红外光谱技术的研究及应用起步较晚,除一些专业分析工作人员以外,近红外光谱分析技术还鲜为人知。但1995年以来已受到了多方面的关注,并在仪器的研制、软件开发、基础研究和应用等方面取得了较为可喜的成果。但是目前国内能够提供整套近红外光谱分析技术(近红外光谱分析仪器、化学计量学软件、应用模型)的公司仍是寥寥无几。随着中国加入WTO及经济全球化的浪潮,国外许多大型分析仪器生产商纷纷登陆中国,想在第一时间占领中国的近红外光谱分析仪器市场。由此也可以看出近红外光谱分析技术在分析界炙手可热的发展趋势。在不久的将来,近红外光谱分析技术在分析界必将为更多的人所认识和接

受。

现代近红外光谱分析是将光谱测量技术、计算机技术、化学计量学技术与基础测试技术的有机结合。是将近红外光谱所反映的样品基团、组成或物态信息与用标准或认可的参比方法测得的组成或性质数据采用化学计量学技术建立校正模型，然后通过对未知样品光谱的测定和建立的校正模型来快速预测其组成或性质的一种分析方法。

与常规分析技术不同，近红外光谱是一种间接分析技术，必须通过建立校正模型（标定模型）来实现对未知样品的定性或定量分析。具体的分析过程主要包括以下几个步骤：

- 一：选择有代表性的样品并测量其近红外光谱；
- 二：采用标准或认可的参考方法测定所关心的组分或性质数据；
- 三：将测量的光谱和基础数据，用适当的化学计量方法建立校正模型；
- 四：未知样品组分或性质的测定。

由近红外光谱分析技术的工作过程可见，现代近红外光谱分析技术包括了**近红外光谱仪、化学计量学软件和应用模型**三部分。三者的有机结合才能满足快速分析的技术要求，是缺一不可的。

与传统分析技术相比，近红外光谱分析技术具有诸多优点，它能在数十秒内，仅通过对被测样品完成一次近红外光谱的采集测量，即可完成其多项性能指标的测定（最多可达十余项指标）。光谱测量时不需要对分析样品进行前处理；分析过程中不消耗其它材料或破坏样品；分析重现性好、成本低。对于经常的质量监控是十分经济且快速的，但对于偶然做一两次的分析或分散性样品的分析则不太适用。因为建立近红外光谱方法之前必须投入一定的人力、物力和财力才能得到一个准确的校正模型。

近红外光谱主要是反映 C-H、O-H、N-H、S-H 等化学键的信息，因此分析范围几乎可覆盖所有的有机化合物和混合物。加之其独有的诸多优点，决定了它应用领域的广阔，使其在国民经济发展的许多行业中都能发挥积极作用，并逐渐扮演着不可或缺的角色。主要的应用领域包括：**石油及石油化工、基本有机化工、精细化工、冶金、生命科学、制药、医学临床、农业、食品、饮料、烟草、纺织、造纸、化妆品、质量监督、环境保护、高校及科研院所等**。在石化领域可测定油品的辛烷值、族组成、十六烷值、闪点、冰点、凝固点、馏程、MTBE 含量等；在农业领域可以测定谷物的蛋白质、糖、脂肪、纤维、水分含量等；在医药领域可以测定药品中有效成分，组成和含量；亦可进行样品的种类鉴别，如酒类和香水的真假辨别，环保废弃物的分检等。

相信随着科学技术的不断发展，近红外光谱分析技术这一先进的技术必将得到广泛的认同和应用。