

文章编号: 1007-2934(2019)03-0082-04

# 基于光纤光谱仪的溶液浓度测量系统

孙德藩, 刘 鹏\*

(中国石油大学(华东)理学院, 山东 青岛 266580)

**摘 要:** 设计了一种基于光纤光谱仪的溶液浓度测量系统。利用该系统对已知浓度的  $\text{KMnO}_4$  溶液进行吸收光谱测量, 探究溶液浓度与吸光度之间的关系。结果表明吸收光谱中的三个波峰处, 吸光度数值与溶液浓度之间的线性相关程度均大于 0.99, 与理论有着良好的一致性。本系统同时具有结构紧凑与测量精确可靠的特点, 可有效提高溶液浓度测量效率, 非常适用于本科教学和科研工作。

**关 键 词:** 溶液浓度; 吸收光谱; 吸光度; 线性拟合

中图分类号: O 4-33

文献标志码: A

DOI: 10.14139/j.cnki.cn22-4228.2019.03.021

溶液浓度是表征介质溶液特性的主要参量之一, 溶液浓度的测量在食品、化工、环境监测、科学研究等方面有着广泛的应用<sup>[1-2]</sup>。溶液浓度的测量主要有分光光度法、红外光谱法、电化学、流动注射法、旋光度法等<sup>[3]</sup>。由于原理简单、应用范围广, 分光光度法得到广泛应用, 其中利用紫外-可见光分光光度计进行浓度测量最为普遍<sup>[4]</sup>。但由于紫外-可见光分光光度计存在体积大、不易携带、测量速度慢等问题<sup>[5-6]</sup>, 不适宜在非实验室环境下进行测量, 同时该方法仅采取一个吸收峰的吸光度, 所得数据单一, 很难提高其测量精度, 大大限制其使用范围。

本文设计了一种基于光纤光谱仪的溶液浓度测量系统, 该系统体积小、易携带, 可在多种环境下实现实时在线测量。同时, 利用对全谱数据进行处理分析, 结合朗伯-比尔定律 (Lambert-Beer-law), 实现精确高效的溶液浓度测量。

## 1 系统设计

光源发出的连续光经光纤照射到装有  $\text{KMnO}_4$  溶液的比色皿透光面上, 透射光被光纤光

谱仪接收, 在与光谱仪相连的计算机中实时显示吸收光谱。系统框图如图 1 所示。

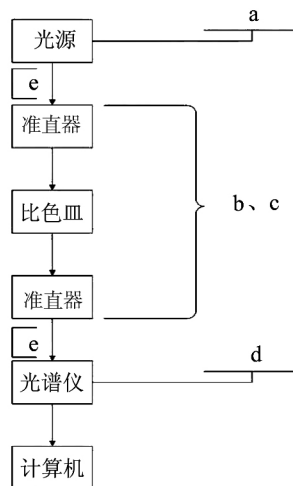


图 1 测量系统框图

实验的主要器件: a: DH-2000BAL 光源 (波长: 230 ~ 2 500 nm)、b: CV-Q-10 石英比色皿 (10 mm)、c: CUV-UV 比色皿支架 (10 mm 光程)、d: OceanOpticsMaya2000 Pro 光纤光谱仪 (光谱范围: 165 ~ 1 100 nm)、e: QP450-2-XSR 光纤。此外还包括电子天平、计算机、 $\text{KMnO}_4$ 、去离子水等。实验测量时搭建的实物图如图 2 所示。

收稿日期: 2019-03-10

基金项目: 中国石油大学(华东)大学生创新创业训练计划资助(20171454)

\* 通讯联系人

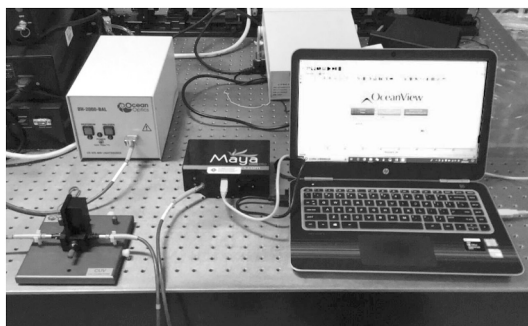


图2 测量系统实物图

## 2 测量原理与测量方法

光与  $\text{KMnO}_4$  溶液的相互作用过程满足朗伯-比尔定律(Lambert-Beerlaw)。朗伯-比尔定律的物理意义是当一束平行单色光垂直通过某一均匀非散射的吸光物质溶液时,其吸光度与溶液的浓度及透光层厚度满足(1)式<sup>[7]</sup>。

$$A = \lg\left(\frac{I_0}{I_1}\right) = Kbc \quad (1)$$

其中  $A$  为吸光度  $I_0$  为入射光强  $I_1$  为透过光强,  $K$  为摩尔吸收系数(与透光溶液种类及入射光的波长  $\lambda$  有关的吸光物质的重要特征值<sup>[8]</sup>)  $c$  为溶液浓度  $b$  为透光液层厚度。通过  $I_0$  和  $I_1$  的值进行推导,可得如(2)式的溶液浓度  $c$  的表达式。

$$c = \frac{\lg\left(\frac{I_0}{I_1}\right)}{Kb} = \frac{A}{Kb} \quad (2)$$

对于在同一个比色皿中存放的一定浓度的液体  $K$  和  $b$  的值是一定的,故可以通过  $I_0$  和  $I_1$  推导出液体中吸光物质的浓度  $c$ ,从而实现溶液浓度的测量。

测量过程主要分为两部分:  $\text{KMnO}_4$  溶液配置和  $\text{KMnO}_4$  溶液吸收光谱测量。

### (1) $\text{KMnO}_4$ 溶液配制:

利用电子天平称取 0.158 g  $\text{KMnO}_4$  固体,使用去离子水进行充分溶解,利用容量为 100 mL 的容量瓶进行配置。将所得溶液作为母液,按照不同比例进行稀释,从而得到  $1 \times 10^{-3}$ 、 $7.5 \times 10^{-4}$ 、 $6 \times 10^{-4}$ 、 $5 \times 10^{-4}$ 、 $3 \times 10^{-4}$ 、 $2.5 \times 10^{-4}$ 、 $1 \times 10^{-4}$  mol/L 等不同浓度的  $\text{KMnO}_4$  溶液。

### (2) $\text{KMnO}_4$ 溶液吸收光谱测量

由于配置的  $\text{KMnO}_4$  溶液利用去离子水作为溶剂,在正式测量前需要对去离子水进行吸收光谱测量,将所得光谱作为背景光谱进行记录。取

配置好的多组已知浓度的  $\text{KMnO}_4$  溶液置入相同规格的比色皿进行吸收光谱测量,记录全谱数据。为保证实验的准确性,减少实验误差,每隔 5 分钟对其光谱数据进行记录,每组溶液记录 5 次。为提高信号质量,调整积分时间为 100 ms,信号平均次数设置为 10 次。需要注意的是,由于 Ocean-Optics Maya2000 Pro 光纤光谱仪存在光强阈值上限,在实验前需调整光源功率,使光源光强在光谱仪的阈值范围内。

## 3 测量结果与准确度分析

利用光纤光谱仪对不同浓度的  $\text{KMnO}_4$  溶液进行吸收光谱测量,利用 Origin 软件对测得的多组全谱数据进行均值拟合处理,结果如图 3 所示。由图可得,在 250~700 纳米范围内,  $\text{KMnO}_4$  溶液存在三个明显的吸收峰、两个吸收谷。随着溶液浓度的增加,吸收过程增强,即吸收谱线高度增加。

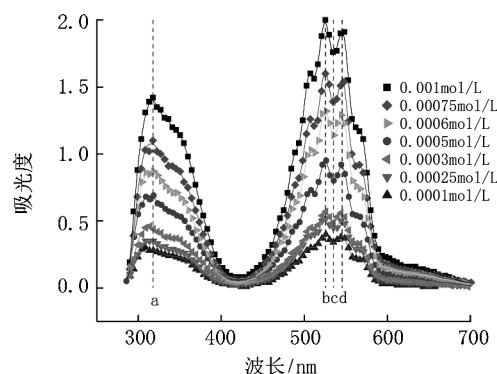
图3 不同浓度  $\text{KMnO}_4$  溶液的测量结果

表1 波长为 317.765 nm(划线 a)时所对应的测量数据

浓度/(mol/L)	吸光度	峰值波长/nm
0.000 10	0.205 6	317.765
0.000 25	0.345 3	317.765
0.000 30	0.443 0	317.765
0.000 50	0.765 2	317.765
0.000 60	0.863 6	317.765
0.000 75	1.100 2	317.765
0.001 00	1.420 0	317.765

由于第一个吸收谷,随溶液浓度变化不明显,分别取波长为 317.765 nm、525.601 nm、545.624 nm 的三个波峰处的吸光度数值以及 535.164 nm 处的波谷处吸光度数值即图中划线 a、b、d、c 与拟合曲线的交点对应的数值进行处理分析。为减小实验误差,对同浓度光谱的吸光度峰值等数据进行均值处理。

对表一数据进行线性拟合处理,结果如图4所示。

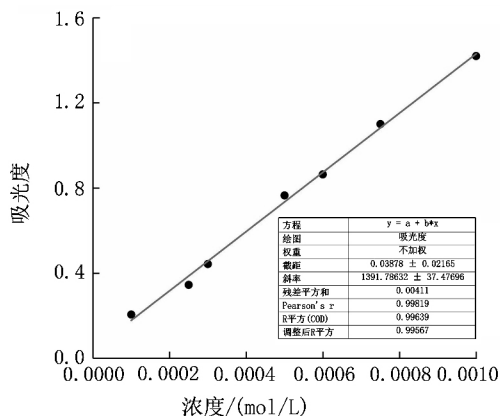


图4 划线a对应数值的线性拟合处理结果

表2 波长为525.601 nm(划线b)时所对应的测量数据

浓度/(mol/L)	吸光度	峰值波长/nm
0.000 10	0.300 7	525.601
0.000 25	0.556 0	525.601
0.000 30	0.609 0	525.601
0.000 50	1.010 0	525.601
0.000 60	1.201 0	525.601
0.000 75	1.505 0	525.601
0.001 00	1.977 1	525.601

对表二数据进行线性拟合处理,结果如图5所示。

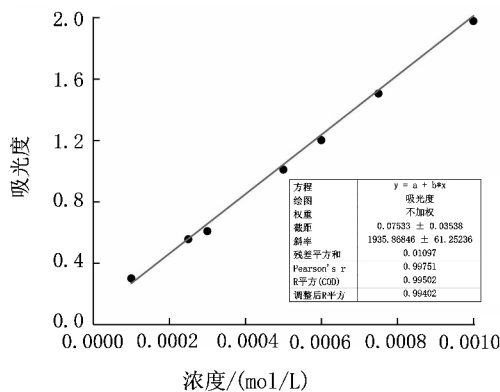


图5 划线b对应数值的线性拟合处理结果

表3 波长为545.624 nm(划线d)时所对应的测量数据

浓度/(mol/L)	吸光度	峰值波长/nm
0.000 10	0.386 4	545.624
0.000 25	0.665 0	545.624
0.000 30	0.750 1	545.624
0.000 50	1.100 1	545.624
0.000 60	1.276 5	545.624
0.000 75	1.550 7	545.624
0.001 00	1.910 2	545.624

对表三数据进行线性拟合处理,结果如图6所示。

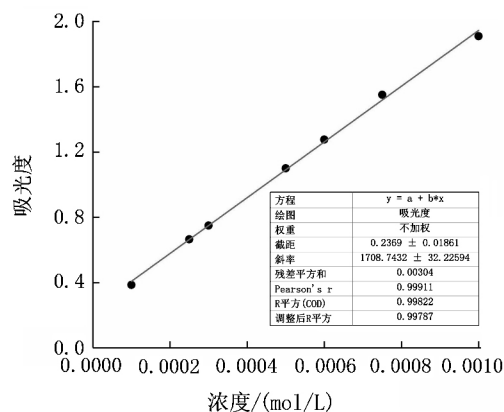


图6 划线d对应数值的线性拟合处理结果

表4 波长为535.164 nm(划线c)时所对应的测量数据

浓度/(mol/L)	吸光度	峰值波长/nm
0.000 10	0.290 1	535.164
0.000 25	0.45 5	535.164
0.000 30	0.56 3	535.164
0.000 50	0.865 78	535.164
0.000 60	1.078 8	535.164
0.000 75	1.360 5	535.164
0.001 00	1.746 1	535.164

对表4数据进行线性拟合处理,得到结果如图7所示

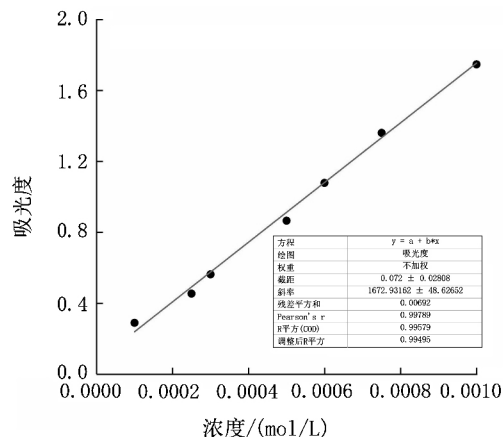


图7 划线c对应数值的线性拟合处理结果

对上述线性拟合处理结果进行整理,得到如图8所示结果。

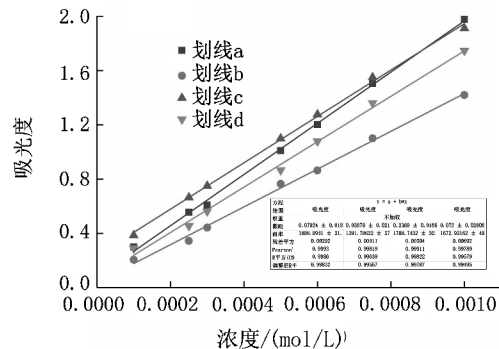


图8 划线c、d对应数值的线性拟合处理结果

由上述结果可得,吸收光谱吸收峰峰值吸光度与  $\text{KMnO}_4$  溶液浓度之间具有很好的线性响应关系。拟合发现,三个吸收峰峰值吸光度以及第二个波谷的吸光度与相应溶液浓度的线性相关程度  $R^2$  值分别为 0.996 39、0.995 02、0.997 87 和 0.995 79,均大于 0.99,实验结果与理论具有很好的一致性,此测量方法具有一定的可靠性。

在实验过程中,由于溶液配置精度受限,同时在测量过程中有噪声影响,可能会使部分测量结果出现误差。在利用本系统进行溶液浓度测量时,可根据吸收强度的不同选取不同处的校正曲线进行测量,从而减小实验误差。需要注意的是,在此方法测量溶液浓度需要满足朗伯-比尔定律,即在非饱和吸收的情况下,吸光度与溶液浓度才满足线性关系。

## 4 结 论

本文利用光纤光谱仪测量不同浓度的  $\text{KMnO}_4$  溶液的吸收光谱,通过建立吸收光谱中的吸收峰值与样品浓度之间的函数关系,反演得到溶液的溶度信息,从而达到测量溶液浓度的目的。实验结果表明,所取的  $\text{KMnO}_4$  溶液的多个特定波长下的吸光度值与溶液浓度的线性相关程度值均

大于 0.99,具有一定的可靠性与准确性。同时,本测量系统利用光纤光谱仪作为主要的测量仪器,体积小、易携带,可实现在非实验室条件下快速精确测量,大大提高溶液浓度测量的效率。

## 参考文献:

- [1] 李劲松.朗伯-比尔定律实验教学设计研究[J].大学物理实验,2015,4(6):55-57.
- [2] 刘景旺,张博洋,李树峰,等.近红外吸收光谱技术快速检测奶制品中添加三聚氰胺[J].光散射学报,2010,22(3).
- [3] 李华侃.茚三酮分光光度法测定阿米卡星[J].理化检验(化学分册),2012,48(8):981-982.
- [4] Assael M J, Chen C F, Metaxa I, et al. Thermal Conductivity of Suspensions of Carbon Nanotubes in Water [J]. International Journal of Thermophysics, 2004, 25(4): 971-985.
- [5] 张洪武,潘江,王玉刚,等.瞬态热线法液体导热系数测试系统的研制[J].中国计量学院学报,2010,21(4):5-10.
- [6] Fyffe S. Agilent's CMOS image sensors worth phoning home about. (Agilent Technologies Inc.) (Brief Article) (Statistical Data Included) [J]. Electronic Business Asia, 2000(December).
- [7] 裴轲.环保监测中紫外可见分光光度计的应用探析[J].河南科技,2014(7):195-196.
- [8] 刘世华,谢斌,李继平,等.紫外光区、吐温-80 水溶液中硫酸钴(II)配合物摩尔吸光系数的研究[J].光谱实验室,2001,18(5):604-606.

## Solution Concentration Measurement System Based on Optical Fiber Spectrometer

SUN Defan, LIU Peng\*

(College of Science, China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

**Abstract:** A solution concentration measurement system based on optical fiber spectrometer is designed in this paper. Using the system to measure absorption spectrum of the known concentration of potassium permanganate solution, explores the relationship between the solution concentration and the absorbance. The results show that the linear correlation between the absorbance value at the three peaks of the absorption spectrum and the concentration of the solution is greater than 0.99, which is in good agreement with the theory. The results show that the system has the characteristics of compact structure, accurate and reliable measurement, and can effectively improve the measurement efficiency of the concentration of the solution, which is very suitable for undergraduate teaching and scientific research work.

**Key words:** solution concentration; absorption spectrum; absorbance; linear fitting