



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 102564965 B

(45) 授权公告日 2014. 10. 08

(21) 申请号 201110461623. 5

(22) 申请日 2011. 12. 31

(73) 专利权人 聚光科技(杭州)股份有限公司

地址 310052 浙江省杭州市滨江区滨安路
760 号

(72) 发明人 俞晓峰 吕全超 陈文益 顾海涛
陈莉

(51) Int. Cl.

G01N 21/25 (2006. 01)

审查员 胡娜娜

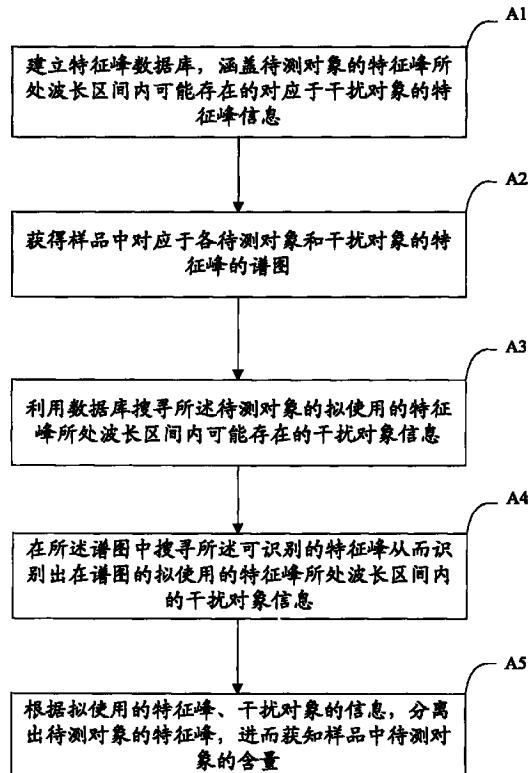
权利要求书2页 说明书7页 附图3页

(54) 发明名称

基于光谱检测技术的检测方法

(57) 摘要

本发明提供了一种检测方法,包括以下步骤：
(A1) 建立数据库,数据库涵盖待测对象的特征峰所处波长区间内可能存在的干扰对象及其特征峰波长、可识别的特征峰波长;(A2) 获得各对象的谱图;(A3) 搜寻待测对象的特征峰所处波长区间内可能存在的干扰对象及其可识别的特征峰的波长;(A4) 在所述谱图中搜寻所述可识别的特征峰:若寻获,表明波长区间内存在干扰对象的特征峰;若没有寻获,表明所述波长区间内不存在干扰对象的特征峰;从而识别出在谱图的所述波长区间内对待测对象的特征峰构成影响的干扰对象及其特征峰;(A5) 根据所述波长区间内的谱图以及识别出的干扰对象的特征峰,获得在所述波长区间内排除干扰对象影响的待测对象的特征峰,进而获知样品中待测对象的含量。本发明具有自动化程度高、测量时间短等优点。



1. 基于光谱检测技术的检测方法,所述检测方法包括以下步骤:

(A1) 建立特征峰数据库,所述数据库涵盖待测对象的特征峰所处波长区间内可能存在的对应于干扰对象的特征峰信息,所述信息至少包括干扰对象的特征峰的波长及对应的干扰对象、干扰对象的可识别的特征峰的波长;波长区间的大小根据待测对象的特征峰的宽度确定;

(A2) 获得样品中对应于各待测对象和干扰对象的特征峰的谱图;

(A3) 利用所述数据库搜寻所述待测对象的拟使用的特征峰所处波长区间内可能存在的其它特征峰对应的干扰对象以及该干扰对象对应的可识别的特征峰的波长;

(A4) 在所述谱图中搜寻所述可识别的特征峰:若寻获,表明拟使用的特征峰所处波长区间内存在与所述可识别的特征峰对应的干扰对象的特征峰;若没有寻获,表明拟使用的特征峰所处波长区间内不存在与所述可识别的特征峰对应的干扰对象的特征峰;从而识别出在所述谱图的拟使用的特征峰所处波长区间内对待测对象的特征峰构成影响的干扰对象及其特征峰;

(A5) 根据拟使用的特征峰所处波长区间内的谱图以及识别出的干扰对象的特征峰,获得在拟使用的特征峰所处波长区间内排除干扰对象影响的待测对象的特征峰,进而利用光谱检测技术获知样品中待测对象的含量。

2. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:当所述拟使用的特征峰在步骤 (A1) 中或之前已经确定,则省略所述步骤 (A3)。

3. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:所述步骤 (A4) 进一步包括:

根据识别出的干扰对象及其对应的可识别特征峰、该干扰对象的可识别特征峰与在拟使用的特征峰所处波长区间内的特征峰的强度的比值,获知在所述谱图中拟使用的特征峰所处波长区间内干扰对象的特征峰的强度。

4. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:在所述步骤 (A4) 中,在所述谱图中拟使用的特征峰所处波长区间内,若识别出的干扰对象的特征峰的强度与所述待测对象的拟使用的特征峰的比值小于阈值时,所述干扰对象的特征峰对待测对象的拟使用的特征峰的影响忽略不计。

5. 根据权利要求 4 所述的检测方法,其特征在于:所述阈值根据检测精度的需要而设置。

6. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:可识别的特征峰是:与该干扰对象的其它特征峰相比,易识别的特征峰。

7. 根据权利要求 6 所述的检测方法,其特征在于:所述易识别的特征峰是最强或次强或没有干扰或受干扰小的特征峰。

8. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:拟使用的特征峰是:与该待测对象的其它特征峰相比,最强或次强或受干扰小的特征峰。

9. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:在所述步骤 (A5) 中,利用拟合方法提取出排除干扰对象影响的待测对象的特征峰。

10. 根据权利要求 9 所述的检测方法,其特征在于:所述拟合方法是高斯拟合方法、洛伦兹、Voigt 拟合方法。

11. 根据权利要求 1 所述的检测方法,其特征在于:在所述步骤 (A2) 中,利用原子发射

光谱技术或吸收光谱技术或荧光光谱技术或拉曼光谱技术获得所述谱图。

12. 根据权利要求 1 所述的检测方法, 其特征在于 : 所述谱图至少涵盖了待测对象的拟使用的特征峰所处波长区间以及该波长区间内可能存在的干扰对象的可识别特征峰区域。

13. 根据权利要求 1 所述的检测方法, 其特征在于 : 所述波长区间涵盖待测对象的特征峰的所在区域。

14. 根据权利要求 1 至 13 任一所述的检测方法, 其特征在于 : 所述对象是元素或单质或化合物。

基于光谱检测技术的检测方法

技术领域

[0001] 本发明涉及对象如元素、单质或化合物的检测，特别涉及基于光谱检测技术的检测方法。

背景技术

[0002] 在 ICP 光谱产品中，由于 ICP 光源激发出的谱线特别丰富，谱线的干扰比较严重，目前的光谱仪的分辨能力不能完全分开所有谱线，这就必须借助算法进行一些谱线分离操作。这也是全谱直读型 ICP-OES 产品相对于扫描型或直读型 ICP-OES 的优点所在。

[0003] 谱线分离技术总的来说就是将待分析谱线和干扰谱线、基体、空白背景等分离开。目前的谱线分离操作起来比较麻烦（如 PE 的 MSF 算法和 Varian 的 FACT 算法），而且需要干扰元素已知才能正常操作。现有方法是对被分析元素和干扰元素的标样、溶液基体分别进行测量，用所得到的谱图数据进行图形解析，从而将被分析谱线旁边的干扰谱线分离出去，需要对被分析元素的纯标样、空白和干扰溶液进行测量。一旦你对每个模型的谱图感到满意后，该模型将被储存在方法中；在以后的分析当中，每条被测量谱线将依照其所建立的相应的模型对谱图进行解析。由被分析元素所产生的解析峰将参与被分析元素强度的计算。

[0004] 利用这样的方法，必须在每次进行谱线分离解析的过程中分别测量干扰谱线、待测谱线、基体以及空白等等样品，操作较为麻烦，而且自动化程度较低。

发明内容

[0005] 为了解决上述现有技术方案中的不足，本发明提供了一种检测时间短、自动化程度高的基于光谱检测技术的检测方法。

[0006] 本发明的目的是通过以下技术方案实现的：

[0007] 基于光谱检测技术的检测方法，所述检测方法包括以下步骤：

[0008] (A1) 建立特征峰数据库，所述数据库涵盖待测对象的特征峰所处波长区间内可能存在的对应于干扰对象的特征峰信息，所述信息至少包括干扰对象的特征峰的波长及对应的干扰对象、干扰对象的可识别的特征峰的波长；

[0009] (A2) 获得样品中对应于各对象的特征峰的谱图；

[0010] (A3) 利用所述数据库搜寻所述待测对象的拟使用的特征峰所处波长区间内可能存在的其它特征峰对应的干扰对象以及该干扰对象对应的可识别的特征峰的波长；

[0011] (A4) 在所述谱图中搜寻所述可识别的特征峰：若寻获，表明拟使用的特征峰所处波长区间内存在与所述可识别的特征峰对应的干扰对象的特征峰；若没有寻获，表明拟使用的特征峰所处波长区间内不存在与所述可识别的特征峰对应的干扰对象的特征峰；从而识别出在所述谱图的拟使用的特征峰所处波长区间内对待测对象的特征峰构成影响的干扰对象及其特征峰；

[0012] (A5) 根据拟使用的特征峰所处波长区间内的谱图以及识别出的干扰对象的特征峰，获得在拟使用的特征峰所处波长区间内排除干扰对象影响的待测对象的特征峰，进而

利用光谱检测技术获知样品中待测对象的含量。

[0013] 根据上述的检测方法,可选地,当所述拟使用的特征峰在步骤(A1)中或之前已经确定,则省略所述步骤(A3)。

[0014] 根据上述的检测方法,可选地,所述步骤(A4)进一步包括:

[0015] 根据识别出的干扰对象及其对应的可识别特征峰、该干扰对象的可识别特征峰与在拟使用的特征峰所处波长区间内的特征峰的强度的比值,获知在所述谱图中拟使用的特征峰所处波长区间内干扰对象的特征峰的强度。

[0016] 根据上述的检测方法,优选地,在所述步骤(A4)中,在所述谱图中的拟使用的特征峰所处波长区间内,若识别出的干扰对象的特征峰的强度与所述待测对象的特征峰的比值小于阈值时,所述干扰对象的特征峰对所述待测对象的特征峰的影响忽略不计。

[0017] 根据上述的检测方法,可选地,所述阈值根据检测精度的需要而设置。

[0018] 根据上述的检测方法,可选地,可识别的特征峰是:与该干扰对象的其它特征峰相比,易识别的特征峰。

[0019] 根据上述的检测方法,优选地,所述易识别的特征峰是最强或次强或没有干扰或受干扰小的特征峰。

[0020] 根据上述的检测方法,可选地,拟使用的特征峰是:与该待测对象的其它特征峰相比,受干扰小的特征峰。

[0021] 根据上述的检测方法,优选地,在所述步骤(A5)中,利用拟合方法提取出排除干扰对象影响的待测对象的特征峰。

[0022] 根据上述的检测方法,优选地,所述拟合方法是高斯拟合方法、洛伦兹、Voigt 拟合方法。

[0023] 根据上述的检测方法,可选地,在所述步骤(A2)中,利用原子发射光谱技术或吸收光谱技术或荧光光谱技术或拉曼光谱技术获得所述谱图。

[0024] 根据上述的检测方法,可选地,所述谱图至少涵盖了待测对象的拟使用的特征峰所处波长区间以及该波长区间内可能存在的干扰对象的可识别特征峰区域。

[0025] 根据上述的检测方法,优选地,所述波长区间涵盖待测对象的特征峰的所在区域。

[0026] 根据上述的检测方法,可选地,所述对象是元素或单质或化合物。

[0027] 上述检测方法的基本原理是:基于全谱谱图上保留有样品中所有对象(元素或单质或化合物)的特征峰(谱线)这一特征来进行分离计算的,由于待测特征峰(谱线)和干扰特征峰(谱线)相邻很近,其特征峰(谱线)形状、特征几乎一致,可以用同样的曲线进行模拟计算。

[0028] 与现有技术相比,本发明具有的有益效果为:

[0029] 1、解析过程无需知道具体干扰对象,无需处理干扰对象样品,充分利用了全谱的优势,从数据库和谱图中自动计算出干扰对象,排除干扰对象对检测的影响,从而解析出纯净的待测对象的特征峰(谱线),从而消除特征峰干扰问题,实现定量分析。摒弃了原有方法对各样品分别测定的缺点,利用采集到的丰富的谱线信息,每次分析只需要获得待测样品的光谱信息。

[0030] 2、整个检测过程自动化程度高。

[0031] 3、检测速度高。

附图说明

[0032] 参照附图,本发明的公开内容将变得更易理解。本领域技术人员容易理解的是:这些附图仅仅用于举例说明本发明的技术方案,而并非意在对本发明的保护范围构成限制。图中:

[0033] 图1是根据本发明实施例1的检测方法的流程图;

[0034] 图2是根据本发明实施例2、3中测得的波长区间($228.802\text{nm}\pm0.05\text{nm}$)内的谱图;

[0035] 图3是根据本发明实施例2、3中测得的波长区间($228.802\text{nm}\pm0.05\text{nm}$)内其它干扰元素的示意图;

[0036] 图4是根据本发明实施例2、3中排除干扰元素影响后的Cd的特征峰。

具体实施方式

[0037] 图1-4和以下说明描述了本发明的可选实施方式以教导本领域技术人员如何实施和再现本发明。为了教导本发明技术方案,已简化或省略了一些常规方面。本领域技术人员应该理解源自这些实施方式的变型或替换将在本发明的范围内。本领域技术人员应该理解下述特征能够以各种方式组合以形成本发明的多个变型。由此,本发明并不局限于下述可选实施方式,而仅由权利要求和它们的等同物限定。

[0038] 实施例1:

[0039] 图1示意性地给出了本发明实施例的基于光谱检测技术的检测方法的流程图。如图1所示,所述检测方法包括以下步骤:

[0040] (A1)建立特征峰数据库,任何一种待测对象(如元素、单质或化合物)都有自己特有的谱线,光谱检测技术往往是利用该特点去检测待测对象;

[0041] 所述数据库涵盖待测对象的特征峰所处波长区间内可能存在的对应于干扰对象的特征峰信息:待测对象的特征峰不止一条,需要建立多个这样的数据库;当然,当待测样品是经常遇到且差别不大时或根据检测经验,仅建立一个涵盖拟使用特征峰的数据库即可;数据库的建立需要查阅其它所有可能的干扰对象的特征峰,如查阅其它元素、其它单质、其它化合物的特征峰,从而为后续判断在所述区间内究竟有哪些干扰对象奠定基础;所述信息至少包括干扰对象的特征峰的波长及对应的干扰对象、干扰对象的可识别的特征峰的波长;波长区间的大小根据待测对象的特征峰的宽度确定。

[0042] 可选地,所述可识别的特征峰是指:与该干扰对象的其它特征峰相比较,最强或次强或没有干扰或干扰少的特征峰,以便通过该可识别特征峰的存在与否去判断该干扰对象是否存在。

[0043] 上述波长区间大小要涵盖待测对象的特征峰(有时还会展宽,如气体特征峰的压力展宽)的所在区域,从而有效地排除所有干扰待测对象特征峰的(干扰对象)特征峰的影响。

[0044] (A2)获得样品中对应于各对象的特征峰的谱图;如利用原子发射光谱技术、吸收光谱技术、荧光光谱技术、拉曼光谱技术去获得各对象的全谱图,该谱图涵盖了待测对象的特征峰(至少包括拟使用的特征峰所处波长区间)、待测对象特征峰所处波长区间内可能

存在的干扰对象的可识别特征峰区域。所述光谱技术对于本领域的技术人员来说是容易理解的现有技术。

[0045] (A3) 利用所述数据库搜寻所述待测对象的拟使用的特征峰所处波长区间内可能存在的其它特征峰对应的干扰对象以及该干扰对象对应的可识别的特征峰的波长；

[0046] 根据谱图中各待测对象的特征峰的具体情况去确定拟使用的特征峰，或者在检测之前根据检测经验或待测样品的类似性确定，可选地，为了检测方便，所述拟使用的特征峰选择那些易识别的特征峰，也即与待测对象的其它特征峰相比较，最强或次强或受干扰小的特征峰。

[0047] 如果在步骤 (A1) 中或之前根据检测经验已经确定了拟使用的特征峰，则该步骤 (A3) 省略。

[0048] (A4) 在所述谱图中搜寻所述可识别的特征峰：若寻获，表明拟使用的特征峰所处波长区间内存在与所述可识别的特征峰对应的干扰对象的特征峰；若没有寻获，表明所述波长区间内不存在与所述可识别的特征峰对应的干扰对象的特征峰；从而识别出在所述谱图的拟使用的特征峰所处波长区间内对待测对象的特征峰构成影响的干扰对象及其特征峰；

[0049] 在拟使用特征峰所处的波长区间内，识别出的干扰对象的特征峰可能不是一个独立的峰，而是和其它干扰对象或待测对象的特征峰叠加在一起，难以确定该干扰对象的特征峰的强度，对于该种情况，可以选择如下方法处理：干扰对象的可识别特征峰与在所述波长区间内的特征峰的强度的比值变化很小，可认为是常数，因此，可以根据干扰对象的可识别特征峰的强度以及上述比值，获知在所述谱图中拟使用特征峰所处的波长区间内干扰对象的特征峰的强度。

[0050] 在拟使用特征峰所处的波长区间内，可能存在很多干扰对象的特征峰，这些干扰对象的特征峰强度不一，对于强度相对较弱的可以选择下述方法处理：若识别出的干扰对象的特征峰的强度与所述待测对象的拟使用的特征峰的比值小于阈值时，所述其它特征峰对所述待测对象的特征峰的影响忽略不计。可选地，所述阈值根据检测精度的需要而设置，如 1/50、1/100 等，阈值越小，检测精度越高。

[0051] (A5) 根据拟使用特征峰所处的波长区间内的谱图以及识别出的干扰对象的特征峰，利用高斯拟合方法或洛伦兹拟合方法等多种拟合方法或其它算法获得排除干扰对象影响的待测对象的拟使用特征峰，进而利用光谱检测技术获知样品中待测对象的含量。

[0052] 根据本发明实施例 1 达到的益处在于：。

[0053] 实施例 2：

[0054] 根据本发明实施例 1 的检测方法在元素检测中的应用例，具体用于分析贵金属废液中的 Cd 元素含量，检测方法为：

[0055] (A1) Cd 的特征峰有：228.802nm、226.502nm...，根据废液的检测经验，选择 Cd 的拟使用的特征峰：228.802nm，这些特征峰相对较强，干扰相对较小。建立 Cd 特征峰数据库，数据库涵盖特征峰 228.802nm 所处波长区间内 (228.802nm±0.05nm) 可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W，特征峰分别为 228.812nm、228.819nm、228.825nm...，可识别特征峰波长分别为：189.042nm、214.423nm、343.489nm...

[0056] (A2) 采用原子发射光谱技术获得废液中个元素的特征峰的谱图；如图 2 所示，该

谱图至少涵盖了所述波长区间 (228.802nm±0.05nm)、该波长区间内可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的可识别特征峰区域；

[0057] (A4) 在所述谱图中搜寻对应于各可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的可识别的特征峰：189.042nm、214.423nm、343.489nm...，结果，寻获了特征峰 189.042nm、343.489nm，表明在波长区间 (228.802nm±0.05nm) 内存在干扰元素 As、Rh 的特征峰，如图 3 所示；没有寻获对应于元素 Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的可识别特征峰，表明在波长区间 (228.802nm±0.05nm) 内不存在干扰元素 Pt、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的特征峰；从而识别出在所述谱图的波长区间 (228.802nm±0.05nm) 内存在干扰元素 As、Rh 及其特征峰 228.812nm、228.825nm，；

[0058] 在谱图的波长区间 (228.802nm±0.05nm) 内，干扰元素 Rh 的特征峰是独立的峰，而干扰元素 As 的特征峰和 Rh、Cd 特征峰叠加在一起，难以确定特征峰的强度，可以选择如下方法处理：干扰元素 As 的可识别特征峰 189.042nm 与特征峰 228.812nm 的强度的比值变化很小（随样品不同有细微的变化），可认为是常数，因此，可以根据可识别特征峰 189.042nm 的强度以及上述比值，获知特征峰 228.812nm 的强度；

[0059] 在谱图的波长区间 (228.802nm±0.05nm) 内，存在干扰元素 As、Rh 的特征峰 228.812nm、228.825nm 的干扰，干扰程度不一，可以选择下述方法处理相对较弱的干扰特征峰：分别计算出干扰元素 As、Rh 的特征峰 228.812nm、228.825nm 的强度与 Cd 拟使用的特征峰 228.802nm 的强度之比，设定阈值 1/50（阈值越小，检测精度越高），上述比值都大于阈值，可见，干扰元素 As、Rh 对待测元素 Cd 的影响不能忽略。

[0060] (A5) 根据拟使用特征峰所处的波长区间内的谱图以及识别出的干扰元素 As、Rh 的特征峰 228.812nm、228.825nm，利用高斯拟合方法获得排除干扰对象影响的待测元素 Cd 的特征峰 228.802nm，如图 4 所示，进而利用原子发射光谱技术获知样品中废液中待测元素 Cd 的含量。

[0061] 实施例 3：

[0062] 根据本发明实施例 1 的检测方法在元素检测中的应用例，具体用于分析贵金属废液中的 Cd 元素含量，检测方法为：

[0063] (A1) Cd 的特征峰有：228.802nm、226.502nm...。建立 Cd 特征峰数据库，数据库涵盖特征峰 228.802nm 所处波长区间内 (228.802nm±0.05nm) 可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W，特征峰分别为 228.812nm、228.819nm、228.825nm...，可识别特征峰波长分别为：189.042nm、214.423nm、343.489nm...。同理，还需建立涵盖 Cd 的其它特征峰如 226.502nm 所处波长区间内 (226.502nm±0.05nm) 内可能存在的干扰元素对应的特征峰以及可识别特征峰的数据库；

[0064] (A2) 采用原子发射光谱技术获得废液中个元素的特征峰的谱图；如图 2 所示，该谱图涵盖了所述波长区间 (228.802nm±0.05nm)、该波长区间内可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的可识别特征峰区域；

[0065] (A3) 根据所述谱图，选择 Cd 的特征峰 228.802nm 为拟使用的特征峰，该特征峰易识别，也即与其它特征峰相比较，较强且受干扰较小。

[0066] 利用所述数据库搜寻待测元素 Cd 的拟使用的特征峰 228.802nm 所处波长区间 (228.802nm±0.05nm) 内可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、

W 及对应的可识别的特征峰 :189. 042nm、214. 423nm、343. 489nm... ;

[0067] (A4) 在所述谱图中搜寻对应于各可能存在的干扰元素 As、Pt、Rh、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的可识别的特征峰 :189. 042nm、214. 423nm、343. 489nm... , 结果, 寻获了特征峰 189. 042nm、343. 489nm, 表明在波长区间 (228. 802nm±0. 05nm) 内存在干扰元素 As、Rh 的特征峰, 如图 3 所示; 没有寻获对应于元素 Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的可识别特征峰, 表明在波长区间 (228. 802nm±0. 05nm) 内不存在干扰元素 Pt、Re、Th、Tl、Br、Ni、Ru、Co、Ir、Sc、W 的特征峰; 从而识别出在所述谱图的波长区间 (228. 802nm±0. 05nm) 内存在干扰元素 As、Rh 及其特征峰 228. 812nm、228. 825nm;

[0068] 在谱图的波长区间 (228. 802nm±0. 05nm) 内, 干扰元素 Rh 的特征峰是独立的峰, 而干扰元素 As 的特征峰和 Rh、Cd 特征峰叠加在一起, 难以确定特征峰的强度, 可以选择如下方法处理: 干扰元素 As 的可识别特征峰 189. 042nm 与特征峰 228. 812nm 的强度的比值变化很小 (随样品不同有细微的变化), 可认为是常数, 因此, 可以根据可识别特征峰 189. 042nm 的强度以及上述比值, 获知特征峰 228. 812nm 的强度;

[0069] 在谱图的波长区间 (228. 802nm±0. 05nm) 内, 存在干扰元素 As、Rh 的特征峰 228. 812nm、228. 825nm 的干扰, 干扰程度不一, 可以选择下述方法处理相对较弱的干扰特征峰: 分别计算出干扰元素 As、Rh 的特征峰 228. 812nm、228. 825nm 的强度与 Cd 拟使用的特征峰 228. 802nm 的强度之比, 设定阈值 1/50 (阈值越小, 检测精度越高), 上述比值都大于阈值, 可见, 干扰元素 As、Rh 对待测元素 Cd 的影响不能忽略。

[0070] (A5) 根据拟使用特征峰所处的波长区间内的谱图以及识别出的干扰元素 As、Rh 的特征峰 228. 812nm、228. 825nm, 利用高斯拟合方法获得排除干扰对象影响的待测元素 Cd 的特征峰 228. 802nm, 如图 4 所示, 进而利用原子发射光谱技术获知样品中废液中待测元素 Cd 的含量。

[0071] 实施例 4:

[0072] 根据本发明实施例 1 的检测方法在气体检测中的应用例, 具体用于检测天然气中甲烷 (CH_4) 的含量, 检测方法为:

[0073] (A1) CH_4 的特征峰 (谱线) 有 :3. 3um、7. 65um 等。建立 CH_4 特征峰数据库, 数据库涵盖特征峰 3. 3um 所处波长区间内 (7. 65um±0. 08um, 区间的范围考虑到了特征峰在待测气体的压力下的展宽, 压力越大, 展宽越严重, 区间范围应越大) 可能存在的干扰气体有 H_2S ... 等气体, H_2S 的特征峰分别为 2. 6um、7. 7um..., 可识别特征峰波长分别为 :2. 6um。同理, 还需建立涵盖 CH_4 的其它特征峰如 3. 3um 所处波长区间内 (3. 3um±0. 08um) 内可能存在的干扰气体对应的特征峰以及可识别特征峰的数据库;

[0074] (A2) 采用气体光谱技术 (使用 QC 激光器发出的激光穿过待测气体, 通过检测器接收穿过待测气体的光而得到谱图) 获得待测气体中各种气体的特征峰的谱图; 该谱图涵盖了所述波长区间 (3. 3um±0. 08um)、(7. 65um±0. 08um), 该波长区间内可能存在的干扰气体 H_2S ... 等气体的可识别特征峰区域;

[0075] (A3) 根据所述谱图, 选择 CH_4 的特征峰 7. 65um 为拟使用的特征峰, 该特征峰易识别, 也即与其它特征峰相比较, 较强且受干扰较小。

[0076] 利用所述数据库搜寻 CH_4 的拟使用的特征峰 7. 65um 所处波长区间 (7. 65um±0. 08um) 内可能存在的干扰气体 H_2S 等气体及对应的可识别的特征峰 2. 6um...;

[0077] (A4) 在所述谱图中搜寻对应于各可能存在的干扰气体 H₂S... 等气体的可识别的特征峰 :2. 6um..., 结果, 寻获了特征峰 2. 6um, 表明在波长区间 (7. 65um±0. 08um) 内存在干扰气体 H₂S 的特征峰; 没有寻获对应于气体? 的可识别特征峰, 表明在波长区间 (7. 65um±0. 08um) 内不存在干扰元素? 的特征峰; 从而识别出在所述谱图的波长区间 (7. 65um±0. 08um) 内存在干扰气体 H₂S 及其特征峰 2. 6um;

[0078] 在谱图的波长区间 (7. 65um±0. 08um) 内, 存在干扰气体 H₂S 的特征峰 2. 6um 的干扰, 可以选择下述方法处理较弱的干扰特征峰: 计算出干扰气体 H₂S 的特征峰 2. 6um 的强度与 CH₄ 拟使用的特征峰 7. 65um 的强度之比, 设定阈值 1/50 (阈值越小, 检测精度越高), 上述比值都大于阈值, 可见, 干扰气体 H₂S 对 CH₄ 的影响不能忽略。

[0079] (A5) 根据拟使用特征峰所处的波长区间内的谱图以及识别出的干扰气体 H₂S 的特征峰 2. 6um, 利用高斯拟合方法获得排除干扰对象影响的 CH₄ 拟使用的特征峰 7. 65um, 进而利用吸收光谱技术获知样品中天然气中 CH₄ 的含量。

[0080] 上述实施例 2-4 中示例性地给出了利用原子发射光谱技术、吸收光谱技术获得谱图及分析特征峰的情况, 当然还可以是拉曼光谱技术、荧光光谱技术等光谱技术, 这些光谱技术对于本领域的技术人员来说是容易理解的。

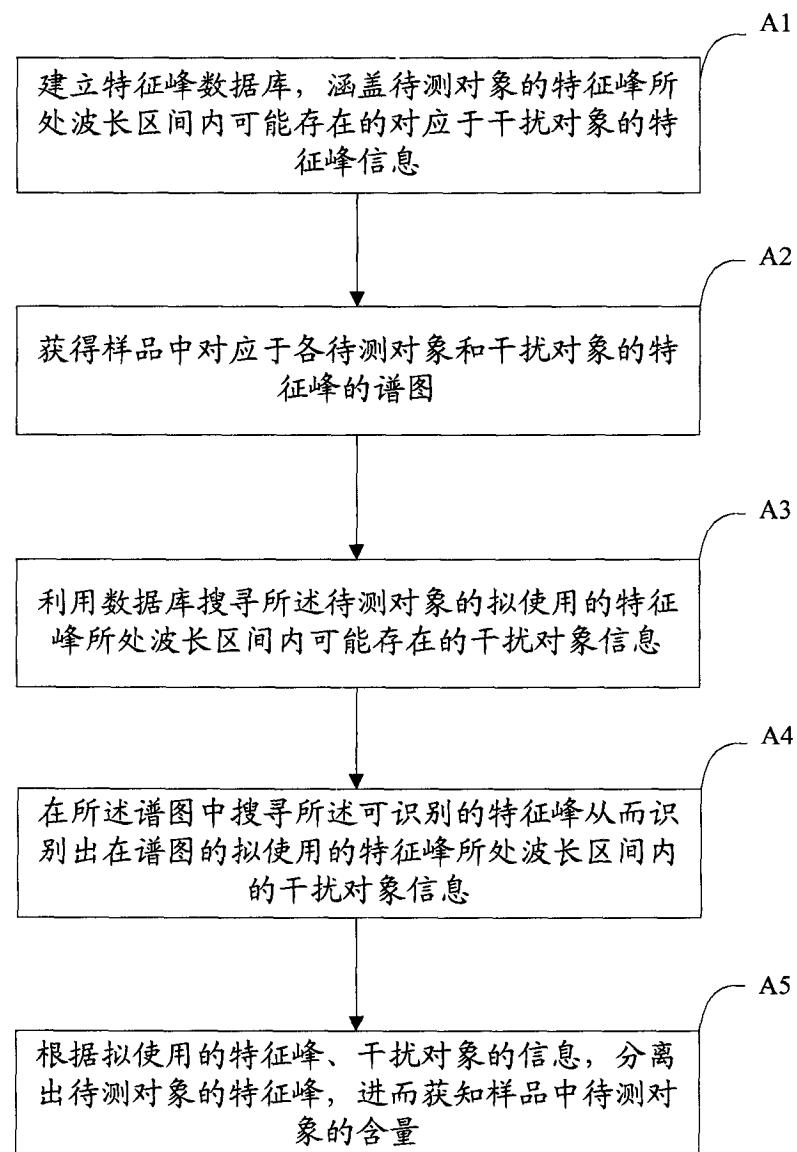


图 1

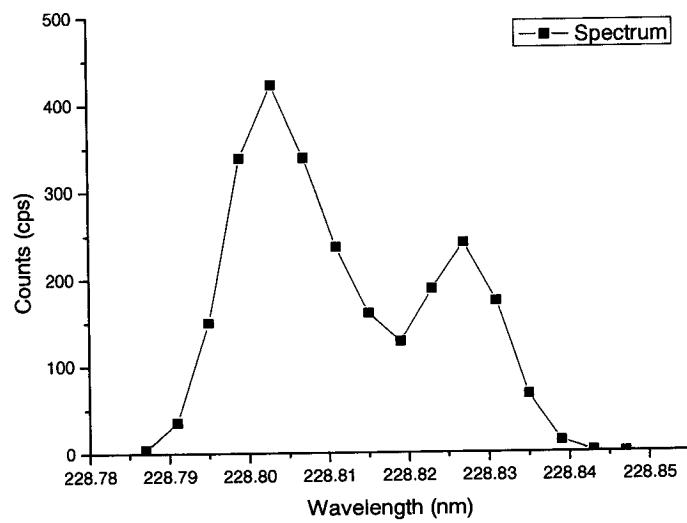


图 2

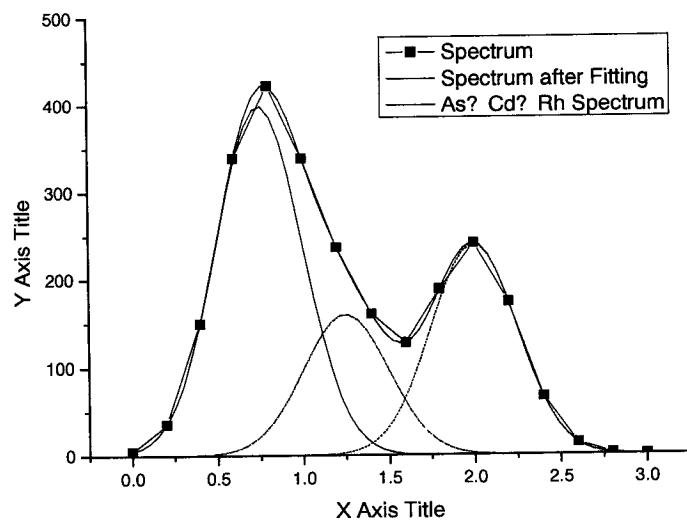


图 3

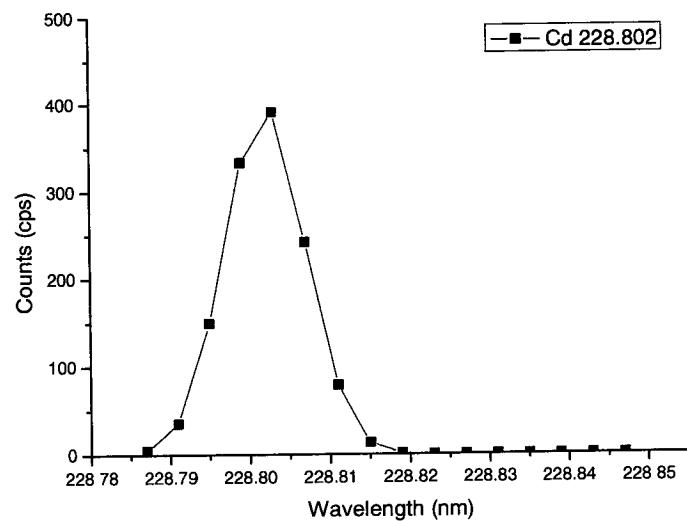


图 4