

# Application of X-ray Fluorescence Spectroscopy in Detection of Soil Heavy Metals

Shengqun Tang

Guangxi Coal Geology Bureau of China Coal Geology Administration, Liuzhou, Guangxi, 545005, China

## Abstract

With the promotion of economic development, China's industry has also made rapid development, and the pollution of industrial wastes and chemical pesticides has been aggravated, seriously affecting human health. Through advanced soil heavy metal testing and analysis methods, it can provide a more accurate basis for reasonably avoiding the harm of heavy metals. This paper expounds the basic principle of X-ray detection, analyzes the influence of detection conditions on the detection of heavy metal elements in soil by X-ray spectrum, and finally puts forward the analysis and research content of X-spectrum.

## Keywords

X-ray; fluorescence spectrum; soil heavy metal detection; application

## X 射线荧光光谱在土壤重金属检测中的应用阐述

唐胜群

中国煤炭地质总局广西煤炭地质局, 中国·广西柳州 545005

## 摘要

在经济发展的推动之下, 中国工业也取得突飞猛进的发展, 工业废弃物、化学农药污染加重, 严重影响人类的身体健康, 通过先进土壤重金属测试分析方法, 能够为合理避免重金属元素危害提供更加精准依据。文章通过对 X 射线检测的基本原理进行阐述, 分析了检测条件对 X 光谱检测土壤重金属元素产生的影响, 最后提出 X 光谱的分析研究内容。

## 关键词

X 射线; 荧光光谱; 土壤重金属检测; 应用

## 1 引言

随着城市化进程不断加快, 工厂在进行废水排放过程中, 金属污染物日益增多, 打破了土壤生态平衡, 严重影响植物的正常生长, 进而危及人类生命健康。通常情况下, 重金属并不能在自然界中直接分解, 植物吸收之后会进行富集, 富集之后的重金属元素随着食物链进入到人体, 严重影响人体的身体健康, 这时必须要对土壤重金属元素进行检测。以往土壤重金属检测大多采用电感耦合等离子质谱法和发射光谱法, 使用过程中具备较高的精准度, 为避免二次污染, 需要进行强酸进行溶解。而 X 射线荧光光谱检测较之其他方法, 成本及效率大为改进, 亦能有效的进行重金属的检测和筛查, X 射线荧光光谱法成为相对先进土壤重金属测试分析方法。

## 2 X 射线检测的基本原理

X 射线波长在 0.001 至 10nm 之间, 在进行检测过程中, 产生的能量差异较大, 会出现电子跃迁, 在检测过程中, 需要进行样品照射, 需要对二次特征的射线能量、品率等数据进行详细记录, 可以得到定性和定量的数据分析, 再结合相关的数据信息进行定性分析。

X 射线荧光光谱仪, 分为波长色散型、能量色散型。光谱波长色散型, 主要由分光晶体色散后的波长测量元素含量, 对样品中的元素进行定量和定性分析; 能量色散型是利用高灵敏半导体进行检测, 然后通过多通道分析器对元素含量进行测定, 对样品进行定性分析。

X 光谱分析主要是利用初级 X 射线, 激发待测物质中的原子, 这时会产生荧光或者是

刺激 X 射线。然后,再根据土壤样品中的待测元素,荧光强度和含量之间的线性关系进行定量分析。一般情况下,土壤中元素颇为复杂,能有效地产生本体和基体效应,会干扰 X 射线荧光光谱的信息。在进行土壤物理化学性质和仪器检测过程中能够影响重金属, X 射线荧光光谱,这时会使得元素的检测准确度降低,在进行 X 光谱检测技术使用过程中需要对不同测量条件下,对检测结果产生的影响。对光谱解析的必要性和定量模型进行分析,为 X 射线荧光光谱检测奠定基础。

### 3 检测条件对 X 光谱检测土壤重金属的影响

#### 3.1 土壤样品制备条件

在进行土壤重金属检测应用,必须要对土壤样品进行制备。土壤因组成成分颇为复杂,物理化学性质各异,严重影响重金属元素中 X 射线荧光光谱的差异。在试验过程中,可以使用便携式 X 射线荧光光谱对土壤中重金属元素进行测定。土壤粒径、含水量等因素对测定土壤元素含量的精密度有着很大影响,也会影响样品检测特征的峰值。例如,土壤含水量从 5% 提高到 25%,无水样品的相对丰度会从 80% 降低到 60%,因此,土壤样品应该处于完全干燥,混合均匀的状态,样品厚度应该有机统一,可以使用粉末压片的方式,将土壤制成直径为 3.2cm 左右的圆片,严格地按照国家标准物质为机体自制校准物质,绘制编制曲线。在检测过程中,为了快速得到检测,数据可以通过最少试验次数,考察多因素对实验结果产生的影响,设计均匀的实验方式、检测时间、含水量等多种因素,做好评价因子的计算工作结合二次多项式逐步回归法,建立整体水平交为标准的标准偏差和条件检测之间的回归模型<sup>[1]</sup>。

#### 3.2 仪器检测条件

在进行仪器检测过程中,对土壤的重金属检测精度问题进行分析,还需要对 X 射线荧光光谱仪的检测条件进行全面改进,例如:在进行探测器校对过程中,为了避免 X 射线影响,可以使用 X 射线和样品垂直照射的方式,将探测器和光源垂直放置优化效果,对少数少量元素的对数偏差进行分析。也可使用滤光片,对 X 射线光管的能量色散型进行分析,使起精确度可以提高精确度,在进行数据探究过程中,它能有效地提高信噪比和灵敏度<sup>[2]</sup>。

## 4 土壤重金属 X 光谱分析研究

### 4.1 光谱解谱方法

在进行土壤重金属 X 光谱分析研究过程中,需要构建定量模型,这是建立光谱的关键内容,它能有效提升 X 光谱的分析准确度,实现信息的数据处理,信号脉冲在处理过程中往往会出现噪声的干扰。尤其是在进行数据采集过程中,这种干扰无法避免,机体效应和本体都会产生定量分析,这时会对分析计算产生消极影响,在进行解谱方法使用过程中,可以使用光谱去噪本体和本底扣除以及整体效应方式建立模型工作。

与此同时,必须要对光谱进行全面的预处理工作,减少不必要的噪声干扰,做好检测工作。除此之外,光谱去噪的方法主要有傅里叶变换、多项式滤波器、移动平均法等多种方式。小波变换还具有去相关性、选机灵活性等特点。在进行去噪过程中,它成为主要的方式,使用小波变换要比傅里叶变换法和移动平均法的去噪效果更好。除此之外,还可以使用匹配滤波器在进行选择过程中,可以选择高斯函数可以作为匹配滤波器的平滑处理能,降低噪声和系统产生的误差,使用最小二乘法拟合高斯函数,简化数据处理过程,能取得良好的效果,进行小波变换去噪处理,线谱光滑效果较为明显、稳定性高、信噪比更为显著,使用 X 荧光光谱进行光滑去噪处理过程中能充分发挥小波变换的作用,它能有效的祛除本体。X 法快速检测样品, X 射线和样品之间会产生相互作用,导致 X 射线信号成本的发生偏移现象。在进行光谱解析过程中,必须要去除本体。在傅里叶变换核销方法结合过程中,将光谱进行傅里叶变换之后需要通过低通滤波器滤出光波中的成分,以此为基础,需要将上述过程的本底进行扣除。

在进行检测过程中,机体效应会逐渐增强,吸收效应也会有所增加, X 射线荧光和金属元素含量之间存在一定的联系,需要考虑到基体效应产生的问题。在能量色散型 X 射线荧光光谱仪探究过程中,可以考虑到系说法,对元素之间产生的效应进行校正,在限行范围之内选择阿尔法系数,对基体效应进行校正,建立检测元素工作,体现提高检测方法的准确度,才能进行更好的检测<sup>[3]</sup>。

### 4.2 定量模型建立

在进行定量模型建立过程中,使用解谱技术能有效地降

低干扰信息,在定量模型建立过程中需要选择特征波段以及模型优化,在模型构建过程中常见的有多元线性回归,偏最小二乘法支持向量机等多种方式。一般情况下,在进行土壤重金属元素检测过程中,考虑到实用性可能会选择偏最小二乘法,这是X光谱检测重金属的主要方式,定量模型在构建过程中,需要考虑到PLS的线性模型,它具备较高的容错能力,如果样本中的重金属元素含量较低,这时模型预测的稳定性会逐渐降低,可以使用BP非线性模型提高样本的预测精度,BP非线性模型具有较强的非线性处理能力,能有效地处理复杂的问题。尤其是容错能力和泛化能力,会使预测结果出现一定的错误,这时必须要进行模型优化,全面提高模型的准确度。

## 5 结语

X射线荧光光谱技术在使用过程中,具有无损检测、操

作便利、成本较低等一系列的优势,被广泛使用在土壤重金属检测中。使用过程中,应考虑到仪器准确度和智能化,定量模型检测结合相应的计量学方法,实现模型预测精度的优化,能实现手机之间的通讯,实现全方位的推广。

## 参考文献

- [1] 程烜,周国敏.X射线荧光光谱在土壤重金属检测中的应用研究进展[J].中国资源综合利用,2018,36(10):98-100.
- [2] 王世芳,韩平,王纪华,等.X射线荧光光谱分析法在土壤重金属检测中的应用研究进展[J].食品安全质量检测学报,2019,7(11):4394-4400.
- [3] 邝荣禧,胡文友,何跃,等.便携式X射线荧光光谱法(PXRF)在矿区农田土壤重金属快速检测中的应用研究[J].土壤,2018,47(3):589-595.