

## Néhány talajminta infravörös spektrumának értelmezése

TÖRÖK ISTVÁN

*Országos Mezőgazdasági Minőségvizsgáló Intézet, Budapest*

Az infravörös spektroszkópia az elméleti kutatások mellett a gyakorlati analitika módszerei között is egyre szélesebb körben elterjedt. A talajtani vizsgálatokban is szerepet kapott az infravörös technika és főleg a kvalitatív értékelés ad sok értékes adatot, míg a kvantitatív következtetések még nem érik el a kívánt mérési pontosságot.

A vizsgálati adatok értelmezése főleg a röntgendiffrakciós mérések kiértékeléséhez ad kiegészítést. Az ásványtani vizsgálatoknál a mintában jelenlevő agyagásványok 5–10% pontossággal kvantitatív is értékelhetők, míg a kvalitatív kiértékelés lehetővé teszi egymás mellett több alkotórész meghatározását.

A talajok infravörös vizsgálatában először a humusztartalom meghatározására dolgoztak ki módszereket [4].

A humusz vegyületek  $7 \mu$  körül adnak abszorpciós sávot és a különböző humuszfrakciók meghatározása is lehetővé válik.

A talajok ásványi összetevőinek infravörös vizsgálata, az agyagásványok meghatározása a talaj finom diszperz frakciójából történik általában [6], de közvetlenül a talajmintából is elvégezhető a mérés. A vizsgált minta részecske mérete az abszorpciós sávok élességét befolyásolja. A pontos kvantitatív ásványelemzéshez az 1–2  $\mu$ -os frakció a legalkalmasabb. A kvantitatív spektrumot a durvább részecskék annyiban változtatják, hogy a sávok diffúzabbá válnak, de a helyzetük nem változik.

A talajok infravörös felvételeinél általában a film-technikát vagy a KBr technikát alkalmazzák. A film-technikánál a kis mennyiségű talajmintát könnyen párologó oldószerrel NaCl lemezre visszük fel és az oldószer elpárolgása után vékony réteget kapunk. A KBr technikánál analitikai tisztaságú KBr-al a talajmintát kis pasztillává préseljük és az átlátszó pasztillát helyezük a fény útjába.

A talajvizsgálatoknál leggyakrabban az alábbi spektrumsávokat vizsgáljuk.

3 $\mu$	OH abszorpciós sávok
6,2	kötöttvíz
7,0	humusztartalom
9–11	agyagásványok
11–12	karbonátok
12,5	kvare
15	szulfátok

Az ásványi alkotók meghatározásánál standard felvételek ismeretében végezhetjük el az analízist, így az egymást elfedő sávok értékeit is meghatározhatjuk [3].

A talaj infravörös spektruma az egyes kémiai alkotórészek pontos ismeretében félkvantitatív vagy kvantitatív vizsgálat végrehajtására is alkalmas [2].

### Anyag és módszer

A dolgozatban az volt a cél, hogy a talajok infravörös vizsgálatára alkalmas módszert meghatározzuk és a talajspektrumok ismeretében, valamint a kémiai, ásványtani összetevők ismeretében összefüggéseket állapítsunk meg az abszorpciós sávok helyzete és a talaj összetevői között.

A felvételek értékelésében kvalitatív értelmezést kívánunk adni a talajspektrum alapján, valamint a további mérésekhez szolgáló alapösszefüggések felismerése a cél.

3 különböző tulajdonságú, kémiai összetételű talaj, valamint 1 kolloid frakció spektrumát vettük fel.

A talajminták jellemző adatait az 1. táblázat tartalmazza feltüntetve az ásványi összetételt is [1, 5].

#### 1. táblázat

A vizsgált talajok kémiai és ásványtani adatai, %-ban

(1) Minta	(2) Fizikai agyag	pH	(3) Kar- bonát	(4) Humusz	SiO <sub>2</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	(5) Kolloid frakció		
								illit	kvarc	montmorillonit
A <sub>5</sub>	14,30	9,0	12	0,8	50,0	6,0	12	10–20	20–30	5
A <sub>6</sub>	41	8,5	24	5,5	60	7,0	15	10–20	20–30	—
B <sub>34</sub>	21	7,0	7	—	57	8,0	17	10–20	10–20	5

A felvételeket KBr technikával UR-10 infravörös spektrofotométerrel készítettük (1. 2. 3. 4. ábra).

A minták kiválasztása úgy történt, hogy a felső szintből, mélyebb szintből, eltérő humusz tartalmú, eltérő SiO<sub>2</sub> tartalmú talajminták szerepeljenek, valamint 1 kolloid frakció, ahol az ásványi összetevők spektrumát a szerves fázis nélkül vizsgálhatjuk.

A felvételek értékelésében előfordulnak mind azok a spektrumsávok, amelyek más talajminták vizsgálatánál jelentkezhetnek, tehát a 4 spektrum jól reprezentálja a talaj infravörös spektrumok értékelésének módszereit.

### Eredmények és értékelések

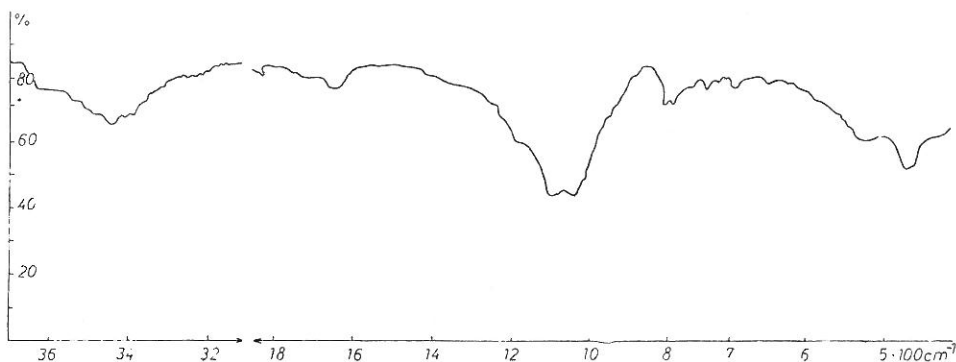
Az 1. ábra az A<sub>5</sub> talaj kolloidfrakciójának felvételén a 3400–3600 cm<sup>-1</sup> tartományban jól mérhető az OH kötésekre jellemző abszorpciós sáv, amely a 2. sz. ábrán alig mérhető. Az agyagásványok kristályrácsában levő OH köté-

sek adják a fenti abszorpciós sávot, amely a talajminták felvételénél már nem jelentkezik, mivel a talajban a kolloid frakció 10% körül van és a kolloid frakció spektrumában található abszorpciós érték erősen lecsökken.

A spektrum 1450  $\text{cm}^{-1}$  körüli tartományában a humusz-frakció abszorpciós sávja található, ez a sáv kolloid frakció spektrumában érthetően nem jelentkezik.

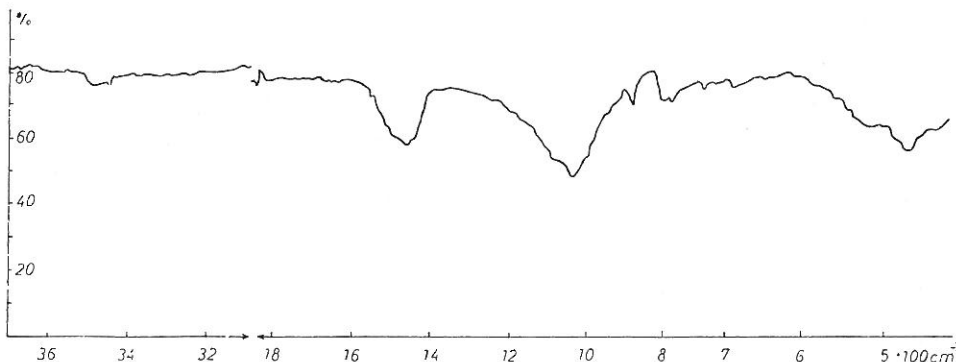
Az 1050–1100  $\text{cm}^{-1}$ -nél jelentkező sáv az agyagásványokra jellemző. Összehasonlítva az 1. és 2. ábra megfelelő sávjait, jól látható, hogy a talaj spektrumában ez a sáv kisebb intenzitású, mint a kolloid frakció felvételén. A 800  $\text{cm}^{-1}$ -nél találhatjuk a kvare abszorpciós sávját. A 400–500  $\text{cm}^{-1}$ -nél jelentkező abszorpciós sáv az agyagásványoktól ered.

Az 1. és 2. felvételekből tehát megállapítható, hogy az agyagfrakció mennyiségére és a humusz jelenlétére a spektrum alapján következtethetünk. A 3. ábrán a B<sub>54</sub> talajminta spektrumából megállapítható, hogy az agyagásvány tartalom az előbbi talajénál nagyobb, amit a kémiai adatok is bizonyítanak.



1. ábra

A<sub>5</sub> talajminta kolloid frakciójának infravörös spektruma. Ordináta: transzmittancia, %. Abszcissa: hullámszám,  $\text{cm}^{-1}$



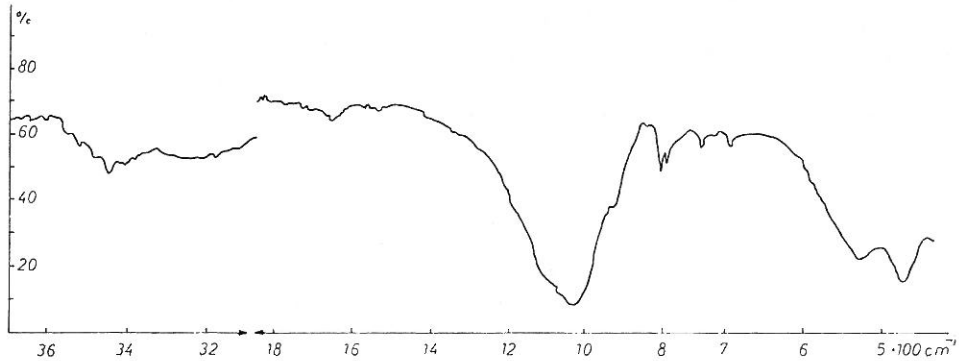
2. ábra

A<sub>3</sub> talajminta infravörös spektruma. Ordináta: transzmittancia, %. Abszcissa: hullámszám,  $\text{cm}^{-1}$

A kvarc abszorpciós sávjai is azt bizonyítják, hogy a mintában a kvarc mennyisége az előbbi talajéhoz viszonyítva nagyobb.

A humusztartalom a spektrum alapján nem mutatható ki, ami a mélyebb szintből származó mintánál várható is volt. Az SiO abszorpciós sáv értéke azt mutatja, hogy a mintában sok szilikát található.

A 4. ábra nagy humusztartalmat mutat, ami a megadott táblázat adatainak megfelel. Az 1000—1200  $\text{cm}^{-1}$ -nél jelentkező abszorpciós sávok a kvarc és az agyagásványok jelenlétét jelzik. A spektrum alapján Ca-szilikátot állapíthatunk meg a mintában.

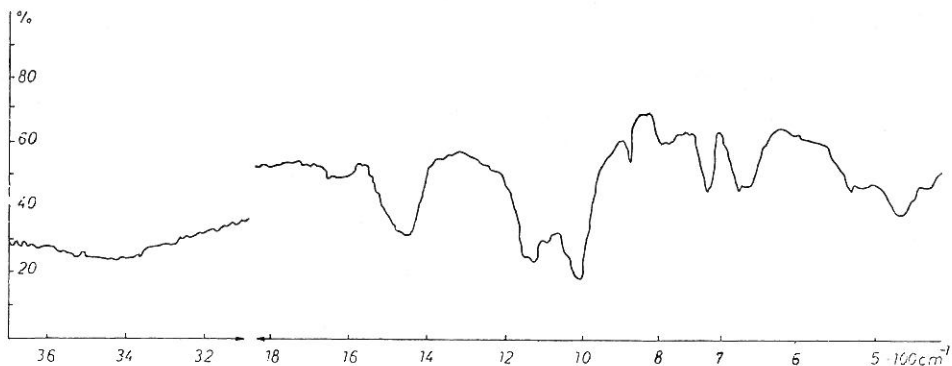


3. ábra

B<sub>1</sub> talajminta infravörös spektruma. Ordináta: transzmittancia, %. Abszcissa: hullám-szám,  $\text{cm}^{-1}$

A 700  $\text{cm}^{-1}$ -nél levő sávok nagyobb mennyiségű karbonátok jelenlétét mutatják. Ezek a sávok a korábbi talajminták spektrumában nem mérhetőek, mivel a mintában a karbonáttartalom kisebb, mint a 4. mintánál.

A fenti értékelés alapján látható, hogy a talajok infravörös spektrumából a humusz és agyagásvány tartalomra, a kvarc jelenlétére következtethetünk.



4. ábra

A<sub>6</sub> talajminta infravörös spektruma. Ordináta: transzmittancia, %. Abszcissa: hullám-szám,  $\text{cm}^{-1}$

A kvalitatív értékelés lehetővé teszi az agyagásványok meghatározását. A kvantitatív kiértékeléshez további minták és standard felvételek szükségesek, bár közelítő becslést így is végezhetünk.

Az infravörös spektroszkópia gyors és jól értékelhető adatokat szolgáltat a talajvizsgálatokban, amely adatok más módszerekkel nehezebben megközelíthetők.

A további mérések lehetővé teszik hogy az infravörös spektrum alapján rutinszerű kiértékelést végezzünk.

### Összefoglalás

Az infravörös spektroszkópia az elméleti kutatások mellett az analitikai vizsgálatok terén is elterjedt.

A talajok vizsgálatában sok értékes adatot szolgáltat az infravörös spektrum.

A dolgozatban a talajok infravörös mérés technikájának kidolgozása volt a cél, valamint néhány fontos alapját ismertetni a spektrum értelmezésének.

3 különböző talaj és 1 talajminta kolloid frakciójának felvételét és kiértékelését végeztük el. Az infravörös felvételt UR-10 spektrofotométerrel végeztük KBr pasztillázással. A talajok spektruma jól mutatja a talajban levő humuszt, valamint az agyagásványokat és a kvarc jelenlétét.

A spektrum alapján tehát kvalitatív értékelésben megállapítható az előforduló agyagásvány és összehasonlító vizsgálatok során kvantitatív méréseket is végezhetünk. Ezt bizonyítja az 1. és 2. spektrum, ahol a kolloid frakció SiO abszorpciós sávja jelentősen nagyobb, mint ugyanannál a talajnál. A kolloid frakció százalékos összetételben több agyagásványt tartalmaz. A humusz abszorpciós sávja a kolloid frakció spektrumában nem jelentkezik.

Megállapítható, hogy a talaj infravörös spektruma sok hasznos információt szolgáltat, mely más módszerekkel nehezebben megközelíthető. Megfelelő számú standard talajminta felvételével kvantitatív kiértékelés is lehetővé válik.

### Irodalom

- [1] DARAB, K., GEREI, L., REMÉNYI, MNÉ & SZENDREI, G.: A talajok különböző szemcsenagyságú mechanikai elemeinek ásványi összetétele. *Agrokémia és talajtan* **20**, 119-141. 1971.
- [2] DE, S. K.: Infrared spectra of a hill soil profile. *Indian J. Agric. Chem.* **2**, 102-106. 1970.
- [3] HUNT, J. M. et al.: Infrared absorption spectra of minerals and other inorganic compounds. *Anal. Chem.* **25**, 1169-1174. 1953.
- [4] KASATOCSEKIN, V. I. & KONONOVA, M. M.: Poglusenie infrakrasznava szpektra guminovümi veszesztvami poesvü. *Dokl. AN SSSR.* **119**, 785-787. 1969.
- [5] SZENDREI, G.: Kiskunsági szikes talajok mikromorfológiai vizsgálata. *Agrokémia és talajtan.* **19**, 231-242. 1970.
- [6] TUDDENHAM, W. M. & LYON, R. J. P.: Infrared techniques in the identification and measurement of minerals. *Anal. Chem.* **32**, 1630-1634. 1960.

Érkezett: 1972. április 16.

## Interpretation of the Infrared Spectra of Some Soil Samples

I. TÖRÖK

National Institute for Agricultural Quality Testing, Budapest (Hungary)

### Summary

Infrared spectrometry has been applied not only for theoretical investigations but also for analytical purposes.

Infrared spectra provide a lot of valuable data for soil studies.

The present paper has aimed the elaboration of the infrared spectrometry techniques for soils, as well as to give an example for the interpretation of infrared spectra for soils.

The infrared spectra of three various soils and the colloidal fraction of one soil sample were measured and interpreted. The infrared spectrometry analyses has been made by an UR-10 spectrophotometer using the KBr pellet method. The spectra of the soils clearly show the presence of humus in the soils as well as clay minerals and quartz.

Thus, on the basis of spectra, the occurrence of different clay minerals can be detected qualitatively and, on the course of comparative studies, quantitative measurements can be performed, too. This fact can be proved by spectra No 1 and 2, where the SiO absorption band of the colloidal fraction is considerably higher than that for the same soil. The colloidal fractions contain a higher percentage of clay minerals. The absorption band of the humus does not appear in the spectrum of the colloidal fraction.

It can be stated that the infrared spectrum of the soil gives a number of useful information which would be more difficult to approach by other techniques. Analyses made on a proper number of standard soil samples allow quantitative evaluation as well.

*Table 1.* Chemical and mineralogical data of the studied soils in %. (1) Sample. (2) Physical clay content. (3) Carbonate content. (4) Humus content. (5) Colloidal fraction, illite, quartz and montmorillonite.

*Fig. 1.* Infrared spectrum of the colloidal fraction of soil sample A<sub>5</sub>. Vertical axis: Transmittance, %. Horizontal axis: Wave number, cm<sup>-1</sup>.

*Fig. 2.* Infrared spectrum of the soil sample A<sub>5</sub>. Vertical axis: Transmittance, %. Horizontal axis: Wave number, cm<sup>-1</sup>.

*Fig. 3.* Infrared spectrum of the soil sample B<sub>54</sub>. Vertical axis: Transmittance, %. Horizontal axis: Wave number, cm<sup>-1</sup>.

*Fig. 4.* Infrared spectrum of the soil sample A<sub>6</sub>. Vertical axis: Transmittance, %. Horizontal axis: Wave number, cm<sup>-1</sup>.

## Interprétation des spectres infra-rouges de quelques échantillons de sol

I. TÖRÖK

Institut National pour la Qualification des Produits Agraires, Budapest (Hongrie)

### Résumé

Outre les recherches théoriques, la spectrométrie infra-rouge est employée aussi dans les travaux analytiques; les spectres infra-rouges peuvent fournir des données importantes concernant les caractéristiques des sols.

Le but de notre étude était d'élaborer cette technique de mesure ainsi que de donner un exemple pour l'interprétation des spectres au cas des sols.

On a enregistré et évalué les spectres reçus avec des échantillons de différents sols et avec la fraction colloïdale d'un de ces sols. Les analyses étaient faites à l'aide d'une spectrophotomètre UR-10 en se servant de la méthode aux pastilles à KBr. Les spectres des sols montrent bien la présence de l'humus, des minéraux d'argile et du quartz.

A base des spectres, les minéraux d'argile présents dans le sol peuvent être interprétés qualitativement et par les analyses comparatives des mesurages quantitatifs de- viennent aussi possibles. Ce fait est justifié par les spectres No. 1 et 2 ou les raies d'ab- sorption de SiO pour la fraction colloïdale sont beaucoup plus larges que celles du même sol. Le pourcentage des minéraux d'argile est plus haute dans la fraction colloïdale. Les raies d'adsorption de l'humus ne se présente pas dans le spectre de la fraction colloïdale.

En résumant, on peut établir que les spectres infrarouges des sols fournissent des informations importantes qui sont moins accessibles par des autres méthodes. Si l'on enrégistre les données reçues avec une nombre suffisante d'échantillons de sol, l'évalua- tion quantitative devient aussi possible.

*Tableau 1.* Données chimiques et minéralogiques des sols examinés en pourcent. (1) Échantillons de sol. (2) Teneur en argile physique. (3) Teneur en carbonate. (4) Teneur en humus. (5) Fraction colloïdale; illite, quartz et montmorillonite.

*Fig. 1.* Spectres infra-rouges de la fraction colloïdale de l'échantillon de sol A<sub>3</sub>. Ordonnée: Transmittance, %. Abscisse: Nombre d'onde, cm<sup>-1</sup>.

*Fig. 2.* Spectres infra-rouges de l'échantillon de sol A<sub>5</sub>. Ordonnée: transmittance, %. Abscisse: nombre d'onde, cm<sup>-1</sup>.

*Fig. 3.* Spectres infra-rouges de l'échantillon de sol B<sub>54</sub>. Ordonnée: transmittance, %. Abscisse: nombre d'onde, cm<sup>-1</sup>.

*Fig. 4.* Spectres infra-rouges de l'échantillon de sol A<sub>6</sub>. Ordonnée: transmittance, %. Abscisse: nombre d'onde, cm<sup>-1</sup>.

## Анализ инфракрасного спектра нескольких почвенных образцов

И. ТЁРЁК

Государственный институт по контролю за качеством почв и сельскохозяйственных продуктов, Будапешт (Венгрия)

### Резюме

Инфракрасная спектроскопия получила признание не только в теоретических, но и в аналитических исследованиях.

Инфракрасный спектр дал много интересных данных в исследовании почв.

В данной работе поставили цель разработать измерительную технику для инфра- красного спектра почв, а также дать некоторые основы для анализа спектра.

Провели съемку и анализ спектра трех различных почв и коллоидной фракции одного почвенного образца. Съемку инфракрасного спектра провели спектрофотометром KR-10, пластинку изготовляли с KBr. Почвенный спектр хорошо показывает наличие в почве гумуса, а также глинистых минералов и кварца.

Таким образом, на основе спектра качественно можно определить встречаю- щиеся глинистые минералы и в ходе сравнительных исследований провести кванти- тативные измерения. Это подтверждается спектрами 1. и 2., где полоса адсорбции SiO<sub>2</sub> для коллоидной фракции гораздо значительнее, чем для той же почвы. В коллоидной фракции процентный состав глинистых минералов выше. Адсорбционная полоса гумуса в спектре коллоидной фракции не проявлялась.

Можно утверждать, что инфракрасный спектр почв дал много полезной инфор- мации, которую другими методами получить труднее. При съемке определенного коли- чества почвенных образцов становится возможной и квантитативная оценка.

*Табл. 1.* Химический и минералогический состав изучаемых почв, в %. (1) Обра- зец. (2) Физическая глина. (3) Карбонаты. (4) Гумус. (5) Коллоидная фракция, иллит, кварц и монтмориллонит.

*Рис. 1.* Инфракрасный спектр коллоидной фракции почвенного образца A<sub>3</sub>. Ор- дината: трансмиттанция %. Абсцисса: число волн см<sup>-1</sup>.

*Рис. 2.* Инфракрасный спектр почвенного образца A<sub>5</sub>. Ордината: трансмиттанция %. Абсцисса: число волн, см<sup>-1</sup>.

*Рис. 3.* Инфракрасный спектр почвенного образца B<sub>54</sub>. Ордината: трансмиттанция %. Абсцисса: число волн, см<sup>-1</sup>.

*Рис. 4.* Инфракрасный спектр почвенного образца A<sub>6</sub>. Ордината: трансмиттанция %. Абсцисса: число волн, см<sup>-1</sup>.