

化工原料质量评价中微量元素分析技术的经济性研究

张占举（山东源海新材料科技有限公司，山东 滨州 251900）

杨 雪 商俊勇（山东金海钛业资源科技有限公司，山东 滨州 251900）

摘要：微量元素分析技术不仅对产品质量具有重要影响，同时也在确保生产过程的经济性和环境可持续性方面发挥着关键作用。随着分析技术的进步，原子吸收光谱法（AAS）、电感耦合等离子体发射光谱法（ICP-OES）、电感耦合等离子体质谱法（ICP-MS）和X射线荧光光谱法（XRF）等技术广泛应用于化工原料微量元素的检测，并在经济效益评估中扮演重要角色。本文通过探讨几种常用微量元素分析技术在化工原料质量评价中的应用，分析了这些技术在成本、效率、精度等方面的经济性，并对如何优化实验方法以提高分析的经济效益进行了讨论。

关键词：化工原料；质量评价；微量元素；经济性

0 引言

微量元素作为化学成分的一部分，虽然其含量极低，但对化工原料的性能、稳定性和安全性具有重要影响。因此，准确、高效地检测和分析化工原料中微量元素的含量，是保障化学品品质、优化生产工艺和提升经济效益的关键环节。然而，微量元素分析不仅仅是对质量的监控，更是一个与生产成本、设备投资、操作流程等经济因素密切相关的过程。不同的分析技术对实验成本、检测效率、仪器设备要求以及后续的数据处理过程等方面的影响，直接决定了其在实际应用中的经济性。因此，评估和比较这些分析技术的经济性，对于选择最适合的检测手段和优化化工原料质量控制流程具有深远的意义。

1 化工原料质量评价微量元素分析技术

1.1 原子吸收光谱法（AAS）

原子吸收光谱法（AAS）通过将待测样品引入火焰或石墨炉中，使其在高温条件下解离成自由原子，吸收特定波长的光谱线，吸光度与原子浓度之间遵循比尔-朗伯定律（Beer-Lambert Law）：

$$A=\epsilon cl \quad (1)$$

其中 A 为吸光度， ϵ 为吸光系数， c 为分析物的浓度， l 为光程。对于目标元素，通过选取与元素对应的特征吸收线，可以精确测定元素的浓度。在火焰原子吸收光谱法（FAAS）中，样品被引入火焰中，在火焰中形成激发态原子，吸收光的强度与元素的含量呈线性关系，而石墨炉原子吸收光谱法（GFAAS）则利用石墨炉高温加热的方式提供更高的灵敏度，能够对微量元素进行更精确的定量分析。在 AAS 分析中，待测样品溶液被喷雾化为雾状进入火焰或石墨炉中，特

定波长的光束通过原子蒸气，部分光能被原子吸收，未被吸收的光则经过检测器被记录。该过程的化学反应可以表示为： $M+hv \rightarrow M^*$ ，其中 M 代表分析物原子， $h\nu$ 为吸收的光量子， M^* 为激发态原子。吸光度与原子浓度之间的关系为：

$$A=k \cdot C \quad (2)$$

其中 A 为吸光度， k 为校准系数， C 为元素浓度。通过比较样品的吸光度与标准溶液的吸光度，结合标准曲线法，可以准确求得样品中微量元素的含量^[1]。

1.2 电感耦合等离子体发射光谱法（ICP-OES）

电感耦合等离子体发射光谱法（ICP-OES）利用电感耦合等离子体产生高温环境（约 6000 至 8000 K），将待测样品中的元素激发到高能态，然后通过测量元素发射的特征光谱线来定性和定量分析元素的含量。在分析过程中，待测溶液通过喷雾器转化为雾状，并通过载气进入等离子体中，在高温条件下，样品中的原子和离子被激发并产生特征的光谱辐射，光谱的强度与元素的浓度呈线性关系。根据经典的布尔-朗伯定律，可以表示为：

$$I=I_0 \cdot e^{-\alpha x} \quad (3)$$

其中， I 为通过样品的辐射强度， I_0 为入射辐射强度， α 为吸光系数， x 为样品的厚度。在 ICP-OES 中， I 可以表示为元素发射光谱的强度， I_0 则为入射激光的强度。根据此关系，样品中元素的浓度与发射光强度之间的线性关系可以通过标准曲线法进行定量分析。在分析复杂基质中，常出现信号干扰，尤其是基质元素的光谱重叠效应，这时通常采用实时监测算法来消除基质效应并提高分析的准确性。常见的实时监测算法基于最小二乘法拟合的原理，用于消除干扰

表 1 X 射线荧光光谱法应用数据

| 元素 | 测量浓度 (%) | 测量误差 (%) | 检测限 (ppm) | 校准曲线类型 | 样品类型 |
|--------|----------|----------|-----------|--------|-------|
| 铅 (Pb) | 0.05 | 1.5 | 10 | 标准曲线法 | 固体、液体 |
| 镉 (Cd) | 0.02 | 2.0 | 5 | 内标法 | 固体、液体 |
| 铜 (Cu) | 0.1 | 1.0 | 20 | 标准曲线法 | 固体、粉末 |
| 锌 (Zn) | 0.3 | 1.2 | 25 | 内标法 | 固体、粉末 |
| 镍 (Ni) | 0.05 | 1.8 | 8 | 标准曲线法 | 固体、液体 |
| 铁 (Fe) | 1.5 | 0.5 | 50 | 内标法 | 固体、粉末 |
| 硫 (S) | 0.03 | 2.5 | 15 | 标准曲线法 | 固体、液体 |
| 磷 (P) | 0.2 | 2.0 | 30 | 内标法 | 固体、粉末 |

光谱线对目标元素信号的影响，其算法可以表示为：

$$y = \sum_{i=1}^n c_i x_i + \delta \quad (4)$$

其中， y 为目标元素的测量值， c_i 为待拟合的参数， x_i 为干扰因素的光谱信号， δ 为拟合误差。通过最小化误差项，该算法能够有效去除基质效应，并且优化实际应用中的光谱分析^[2]。

1.3 电感耦合等离子体质谱法 (ICP-MS)

电感耦合等离子体质谱法 (ICP-MS) 结合了电感耦合等离子体 (ICP) 产生的高温等离子体源和质谱仪的质量分析功能，其原理基于样品中元素在等离子体中被离子化为带电粒子，然后通过质谱仪根据离子质量与电荷比 (m/z) 进行分离并检测。在 ICP-MS 中，样品溶液被喷雾化为雾状并引入高温等离子体中，等离子体温度可高达 6000 – 8000 K，能够有效地将样品中的元素分子完全解离为原子及离子，反应过程可以表示为： $M + hv \rightarrow M^* \rightarrow M^+ + e^-$ ，其中 M 为分析元素， hv 为光子能量， M^+ 为生成的离子， e^- 为电子。生成的离子随后被送入质谱仪中，依据其质荷比进行质量分析，最终通过检测器记录各个离子的信号强度，信号强度与元素的浓度呈线性关系，从而实现定量分析。ICP-MS 的显著优势在于其低至 ppt (万亿分之一) 级的检测限，能够有效分析化工原料中极低浓度的微量元素，且具有较高的元素选择性与广泛的元素分析能力，可以同时检测多个元素，满足复杂基质的多元素分析需求。相比于传统的分析方法，ICP-MS 能够提供更为精确的同位素比值、元素含量以及在复杂基质中的去干扰能力，使得其在化工原料质量评价中发挥了重要作用^[3]。

1.4 X 射线荧光光谱法 (XRF)

X 射线荧光光谱法 (XRF) 基于样品在激发源 (通

常为高能 X 射线) 照射下，发生内壳电子的激发和外壳电子的跃迁，导致元素特有的荧光辐射 (X 射线荧光) 被释放出来，不同元素的荧光特征波长和能量是唯一的，因此可以通过测量荧光辐射的强度和波长来确定样品中各元素的浓度。通过能量色散 X 射线荧光 (EDXRF) 和波长色散 X 射线荧光 (WDXRF) 两种技术，XRF 能够在短时间内提供高灵敏度、高通量的分析结果，尤其适合多元素同时分析。在化工原料中，XRF 能够有效地测定各种金属元素和一些非金属元素，如铅、锌、镉、铜、铁、硫、磷等，且其测定结果与元素浓度呈线性关系。实验过程中，样品被高能 X 射线激发，产生的荧光辐射通过探测器被捕获，荧光强度与元素浓度相关，荧光辐射的波长与元素的原子序数成正比，反应过程可以表示为： $M + hv \rightarrow M^* \rightarrow M + hv_{\text{fluorescence}}$ ，其中 M 代表分析元素， hv 为激发光子， $hv_{\text{fluorescence}}$ 为荧光辐射光子。通过标准曲线法和内标法，结合不同元素的特征峰，XRF 能够定量分析样品中的微量元素含量。具体如表 1 所示。

通过表格可以看到，XRF 技术在多个化工原料中均能够提供可靠的微量元素分析结果，具有较好的定量精度和较低的检测限。

2 化工原料微量元素分析的实验方法

2.1 实验样品的选择与处理

实验样品的选择应考虑原料的类型、来源及其代表性，通常需要从整个批次中选取具有代表性的样本，避免因样品的非均匀性而导致测量误差。在样品的处理过程中，需要对样品进行充分的均匀化处理，通过研磨、粉碎等手段确保样品的均质性，特别是对于固体化工原料，通常使用球磨或喷雾干燥法对样品进行处理，使其达到合适的粒度范围。对于一些粘性或易吸湿的样品，应避免因水分过多导致元素的挥发或吸

表 2 实验数据

| 元素 | 测定浓度 (ppm) | 误差 (%) | 精密度 (RSD) | 检测限 (ppb) | 标准样品回收率 (%) |
|--------|------------|--------|-----------|-----------|-------------|
| 铅 (Pb) | 150.5 | ± 1.5 | 0.8 | 10 | 98.7 |
| 镉 (Cd) | 12.3 | ± 2.0 | 1.2 | 5 | 96.5 |
| 铜 (Cu) | 87.9 | ± 1.0 | 0.5 | 15 | 99.2 |
| 锌 (Zn) | 120.4 | ± 1.3 | 0.7 | 20 | 97.8 |
| 镍 (Ni) | 24.7 | ± 1.8 | 1.0 | 8 | 98.2 |
| 铁 (Fe) | 2.5 | ± 0.5 | 0.3 | 50 | 101.1 |
| 硫 (S) | 0.5 | ± 1.0 | 0.4 | 30 | 98.0 |
| 磷 (P) | 14.9 | ± 2.2 | 1.1 | 18 | 97.3 |

附现象，因此在样品预处理过程中，干燥操作是不可或缺的，常通过烘箱或真空干燥器控制样品的水分含量，确保水分含量控制在合适的范围内。在样品溶解或消解阶段，酸溶解法通常用于化工原料中微量元素的提取，这一过程可采用高温高压下的微波消解法或传统的湿法消解法，常用的消解酸包括浓硝酸、氢氟酸、王水等，反应过程如下： $M_{solid} + HNO_3 \rightarrow M_{aq} + NO_3^- + H_2O$ ，其中 M 代表目标元素， HNO_3 为硝酸， M_{aq} 为溶解后的元素。消解过程中，需要精确控制酸的浓度、反应温度及时间，以保证高效而完整的元素溶解，避免因溶解不完全而导致分析误差。对于某些难溶性化工原料，可能需要采用更为复杂的溶剂提取或火焰法处理，以确保微量元素能够充分释放。样品处理后的溶液经过过滤或离心去除不溶性物质，得到清洁的溶液供进一步的分析^[4]。

2.2 分析方法的建立与优化

分析方法的建立需要根据待测元素的性质、样品基质以及分析需求选择合适的分析技术，如原子吸收光谱法 (AAS)、电感耦合等离子体质谱法 (ICP-MS)、X 射线荧光光谱法 (XRF) 等。选择合适的分析方法不仅依赖于元素的检测限要求，还与样品基质的复杂程度密切相关，因此在分析方法的初步建立过程中，需要对样品的化学组成、元素浓度范围以及可能的基质干扰进行详细评估。针对不同类型的元素和基质，通常采用标准加入法、内标法或外标法等校准方法来提高测定的准确性和精度。标准加入法常用于复杂基质中，能够有效消除基质效应的干扰，而内标法则通过加入已知浓度的元素标准溶液来补偿仪器漂移和样品量差异。

2.3 结果分析与讨论

结果分析不仅需要从统计学角度进行检验，还要结合实验的具体条件进行全面的讨论，常见的结果分

析包括元素浓度的定量分析、仪器检测限的评估、精密度和准确度的验证以及可能出现的基质效应与干扰的识别。在实际分析中，元素的浓度通常通过与标准样品或标准溶液的比较来进行定量，采用标准曲线法、内标法或标准加入法等技术进行结果的修正，以确保分析结果的准确性。此外，仪器的检测限是分析方法评估的一个重要指标，低检测限意味着能够检测到更低浓度的元素，对于微量元素分析尤其重要。在进行结果讨论时，还需要结合实验误差的来源对分析结果的精度和可靠性进行评估，误差可能来源于仪器的稳定性、样品的处理过程、基质效应的干扰等因素。为了消除这些干扰，需要通过合理的前处理方法、优化的实验条件及校准技术来保证分析结果的高精度。对于复杂样品的分析，基质效应可能会对某些元素的测定产生较大影响，例如溶液中的高浓度背景物质可能导致某些元素信号的衰减或增强，这时需要通过仪器参数的调整或特殊校正方法进行处理。如表 2 所示。

通过表格可以看到，在进行微量元素分析时，采用合适的分析方法和优化的实验条件可以有效控制误差并提高分析精度。在此过程中，不同元素的回收率与检测限反映了实验方法在不同化工原料中的适用性和可靠性，基于这些结果的分析与讨论有助于进一步优化实验条件并提升分析技术的整体性能^[5]。

3 微量元素分析技术的经济性分析

在化工原料质量评价中，微量元素分析技术的经济性分析主要涉及其技术实施成本、设备维护、消耗材料以及所需时间等多个因素。首先，微量元素分析技术的核心设备包括高精度的光谱分析仪器、质谱仪、原子吸收光谱仪等，设备投资费用较高，且部分设备对实验环境有严格要求，可能需要配置专门的通风系统和温控系统，从而增加了初期的资本投入。此外，设备的日常维护费用也不可忽视，尤其是对于高端分

析仪器，其维护周期较长，但维护成本较高，要求操作人员具备较高的技术水平，这也导致了培训和技术服务的成本上升。其次，微量元素分析技术在实际应用中的消耗材料包括标准溶液、试剂以及消耗品，如比色皿、滤纸等。这些材料的采购成本和消耗速率直接影响着分析的单位成本，尤其是在大批量样品分析时，相关材料的消耗量会显著增大。

4 结语

总之，微量元素分析技术在化工原料质量评价中的应用，不仅是确保产品品质的重要手段，也在实现生产过程经济化、降低生产成本方面具有不可忽视的作用。随着分析技术的不断进步，优化分析手段、降低成本、提高经济效益成为当前化工行业迫切需要解决的问题。因此，全面评估各类微量元素分析技术的经济性，深入研究其在实际生产中的适应性，能够为化工企业提供更加科学、经济的质量控制方案，并为相关技术的推广和应用提供理论依据。

参考文献：

- [1] 刘旭旭. 玻纤化工原料纯碱制备工艺及其质量检测[J]. 山西化工, 2024, 44(08):141-143.

- [2] 孙岩, 黄福凯, 王欢欢. 石油化工原料质量检验的影响因素分析[J]. 中国石油和化工标准与质量, 2024, 44(14):53-55.
- [3] 张莎莎. 有机肥料生产中的有机化工原料选择与质量控制[J]. 石化技术, 2024, 31(07):85-86.
- [4] 鞠艳萍. 化工原料质量检验检测问题分析[J]. 天津化工, 2023, 37(04):45-47.
- [5] 王亭亭, 王继源, 王梅, 等. 化工原料质量检验检测中的问题[J]. 化工管理, 2021, (17):48-49.

作者简介：

张占举 (1977-)，男，汉族，山东滨州人，毕业于国家开放大学，大专，工程师，研究方向：化工工程、化学分析及质量管理等。

杨雪 (1986-)，女，汉族，河北沧州人，毕业于中国石油大学，本科，高级技师、工程师，研究方向：化工工程、化学分析及质量管理等。

商俊勇 (1976-)，男，汉族，山东滨州人，毕业于西北工业大学，本科，高级技师、工程师，研究方向：化工工程、化学分析及质量管理等。

