



Introduction à la spectroscopie de sol

Issam Barra, PhD

Expert en spectroscopie de Sol,

GSP-FAO

Issam.barra@fao.org

Détermination des paramètres de sol



Spectroscopie de sol

1960s Premiers travaux?

1980s digital, chemiometrie

2000s NIR, MIR, bibliothèques spectrales

2020s spéctroscopie de terrain, prediction

C'est quoi un spectre?

Spectre nom singulier

Spectres nom pluriel

Spectrale adjectif

Modelisation des spectres de sol

Inference spectral

La prédiction d'une ou plusieurs propriétés à partir d'un ou plusieurs spectres (**directe**), ou à partir d'une ou plusieurs propriétés du sol prédites à partir de ce ou ces spectres (**indirecte**).

Can mid infrared diffuse reflectance analysis replace soil extractions?

L. J. Janik^{AB}, R. H. Merry and J. O. Skjemstad^A

^A CSIRO, Land and Water, PMB No. 2, Glen Osmond, SA 5064, Australia.

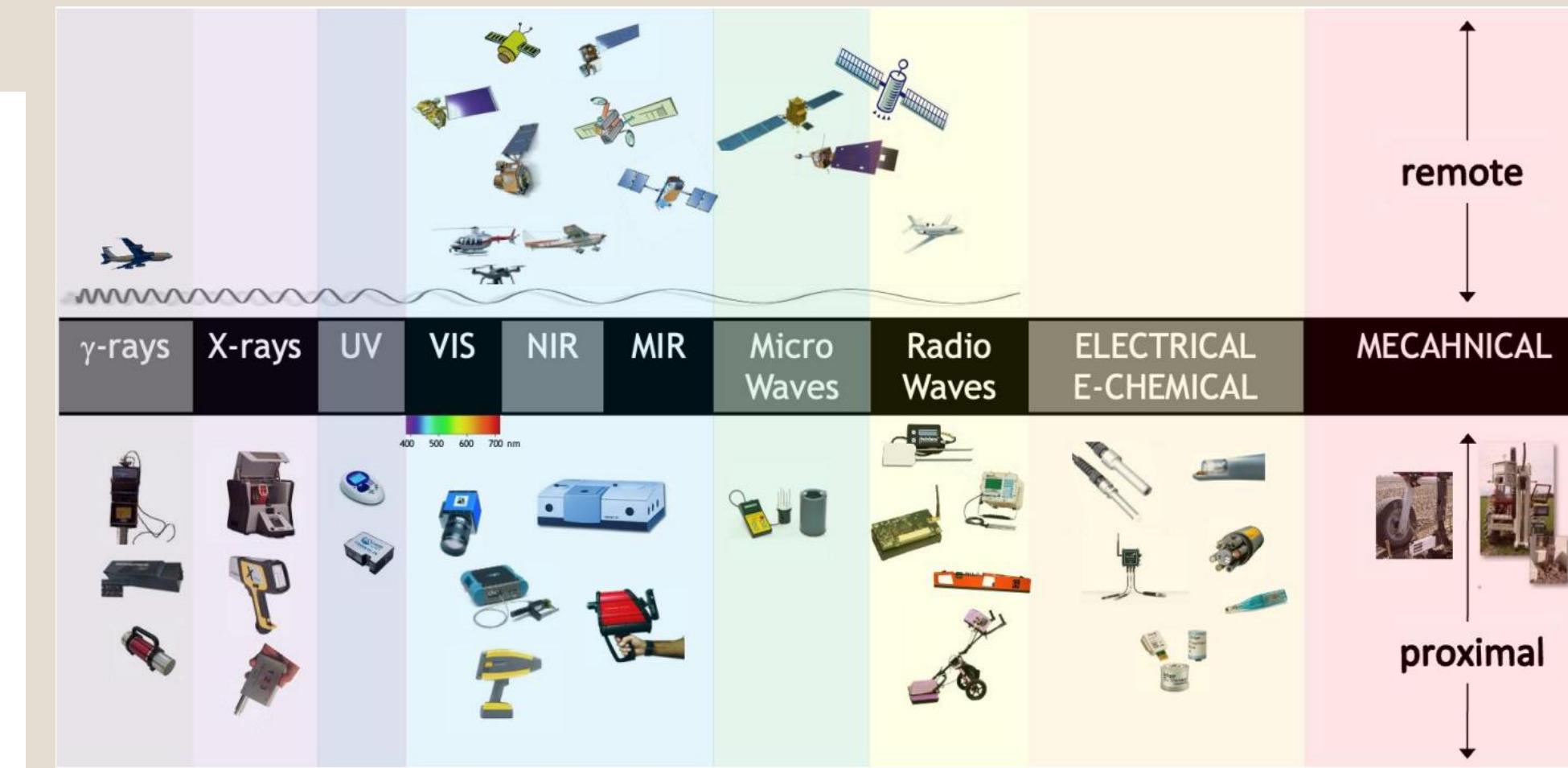
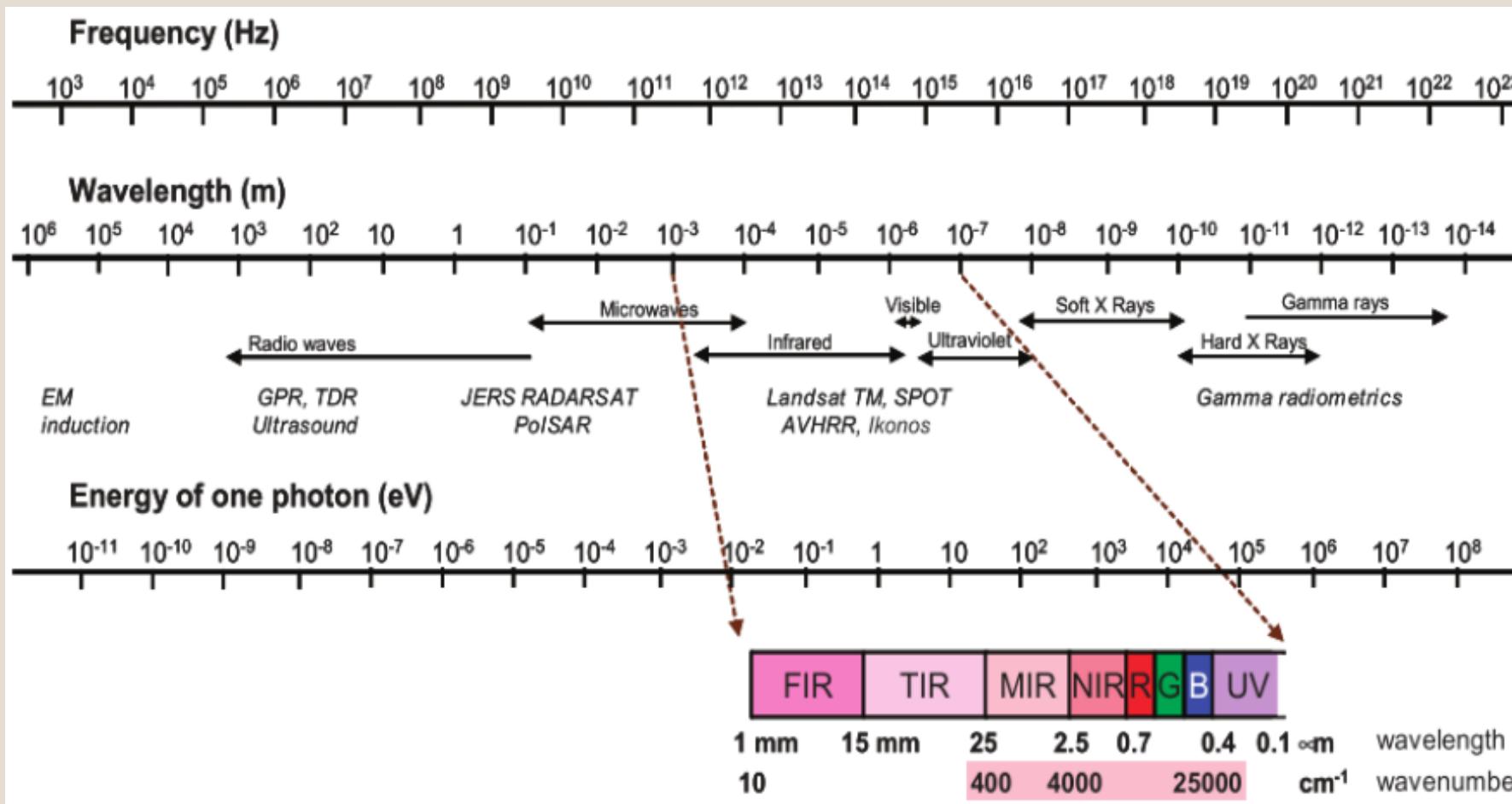
^B Corresponding author; e-mail: les.janik@adl.clw.csiro.au

Summary. Recent developments in infrared spectroscopy and computer software, together with decreasing spectrometer costs, have resulted in an increase in the potential for soil analysis. Infrared spectroscopy in both the near and mid infrared ranges allows rapid acquisition of soil information at quantitative and qualitative, or indicator, levels for use in agriculture and environmental monitoring. In this paper, we describe how mid infrared diffuse reflectance analysis can provide results comparable in accuracy

with many traditional extractive and digestion laboratory methods in soil studies, with the possibility of either replacing or enhancing them. Examples are given for estimation of lime requirement, organic carbon, exchangeable cations, air-dry moisture, clay content and biological indicators. Infrared methodology appears to have advantages in facilitating some soil analyses that are otherwise very time-consuming or expensive, or where spatially dense data is required.

Réactions des ondes électromagnétiques avec la matière

- Les **radiations électromagnétiques (EM)** peuvent être **réfléchies, transmises ou absorbées** par la matière.
- L'énergie absorbée peut **exciter des électrons** et provoquer la **vibration ou la rotation des liaisons moléculaires**.
- Les **molécules interagissent avec le vecteur électrique** du rayonnement infrarouge (IR), ce qui entraîne une **absorption à différentes fréquences**.
- Les **groupes fonctionnels** absorbent à **plusieurs fréquences**, impliquant différents types de **vibrations de liaisons chimiques**, par exemple les **étirements (stretching)** et les **déformations angulaires (bending)**.



TECHNIQUES SPECTROSCOPIQUES

UV Vis (Ultraviolet Visible)

NIR (Near Infrared)

MIR /(FTIR) (Mid Infrared)

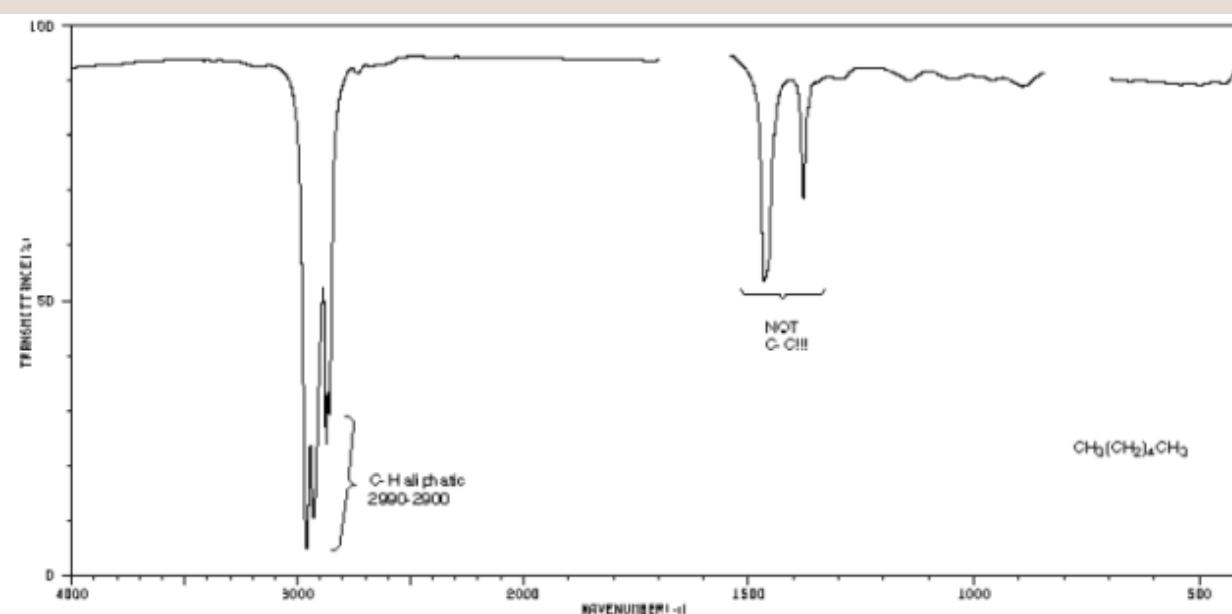
XRF (X Rays Fluorescence)

LIBS (Laser-induced breakdown spectroscopy)

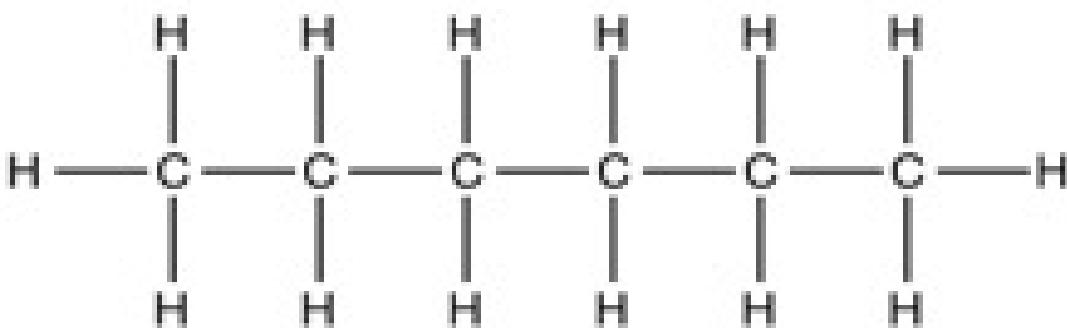
Raman

.....

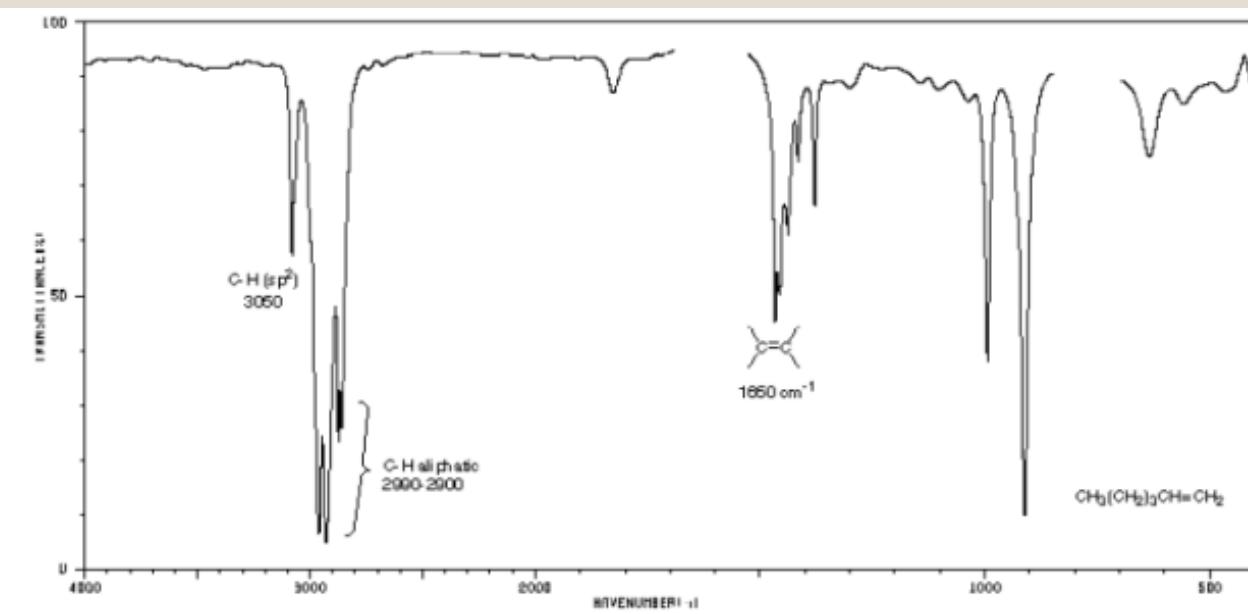
SPECTROSCOPIE INFRAROUGE



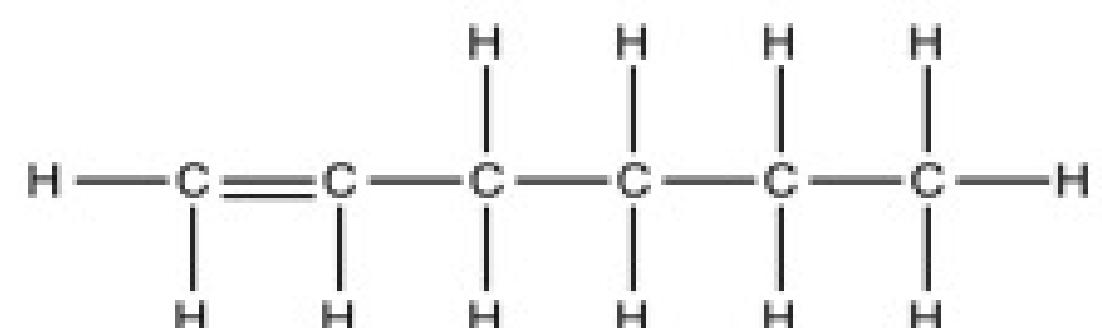
Hexane



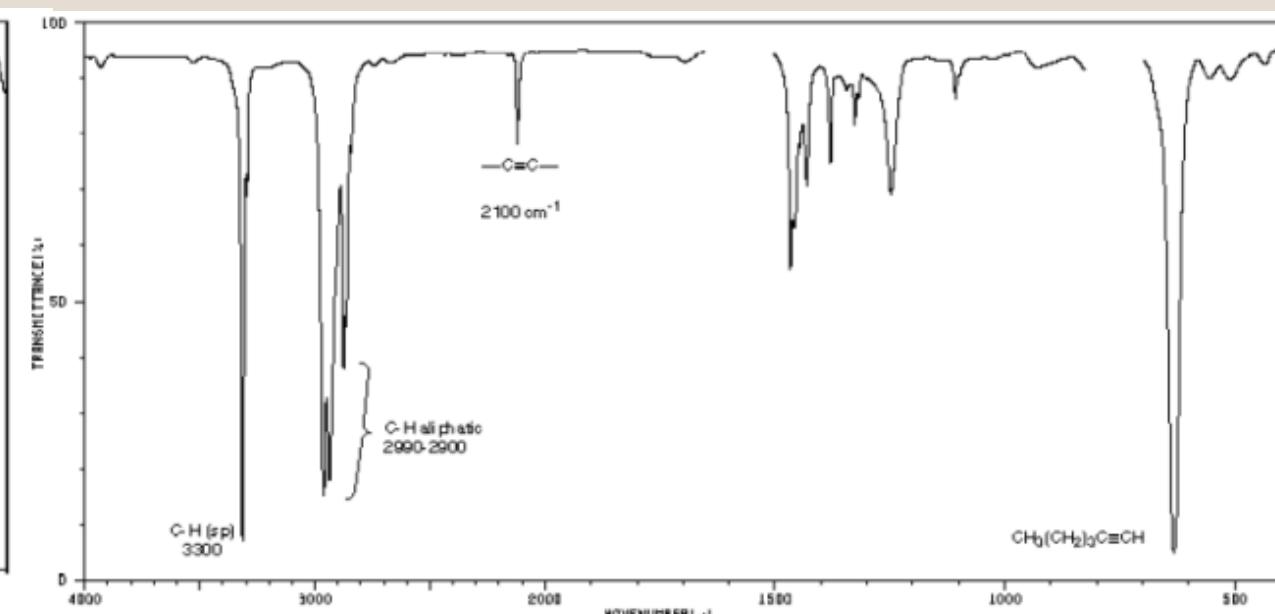
hexane
C₆H₁₄



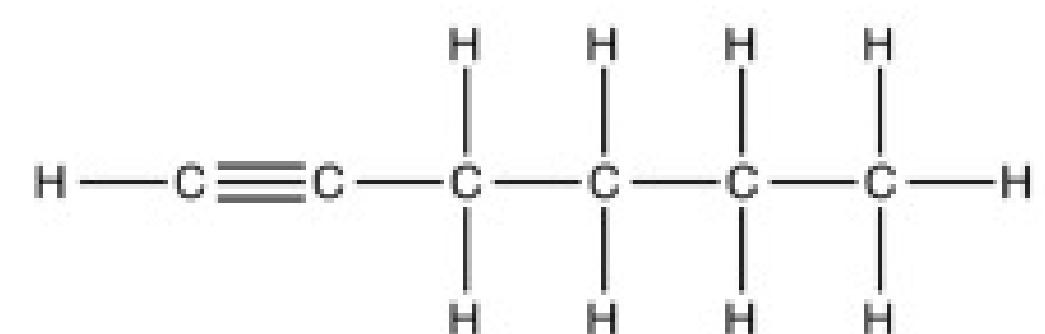
Hexene



1-hexene
C₆H₁₂



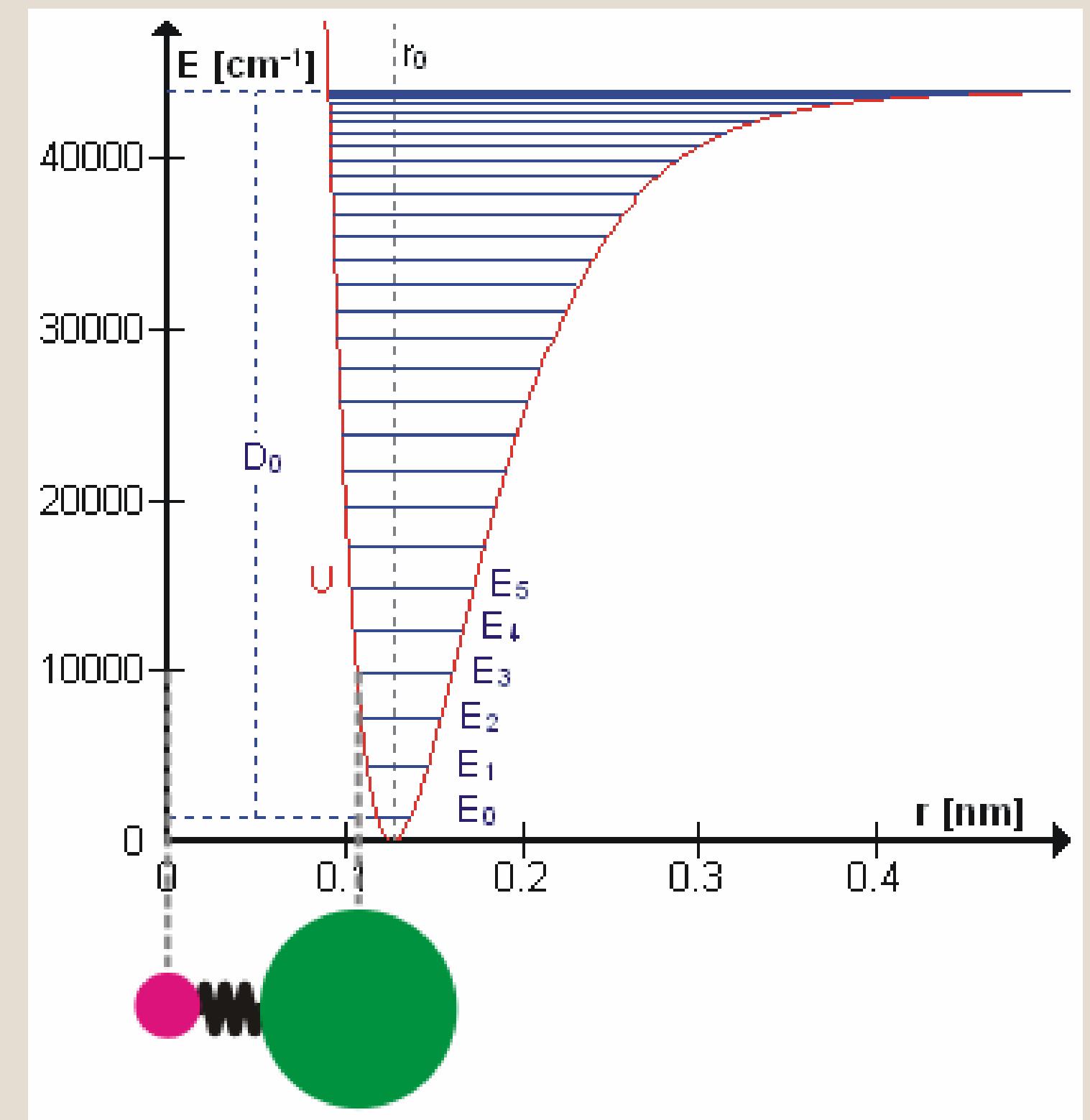
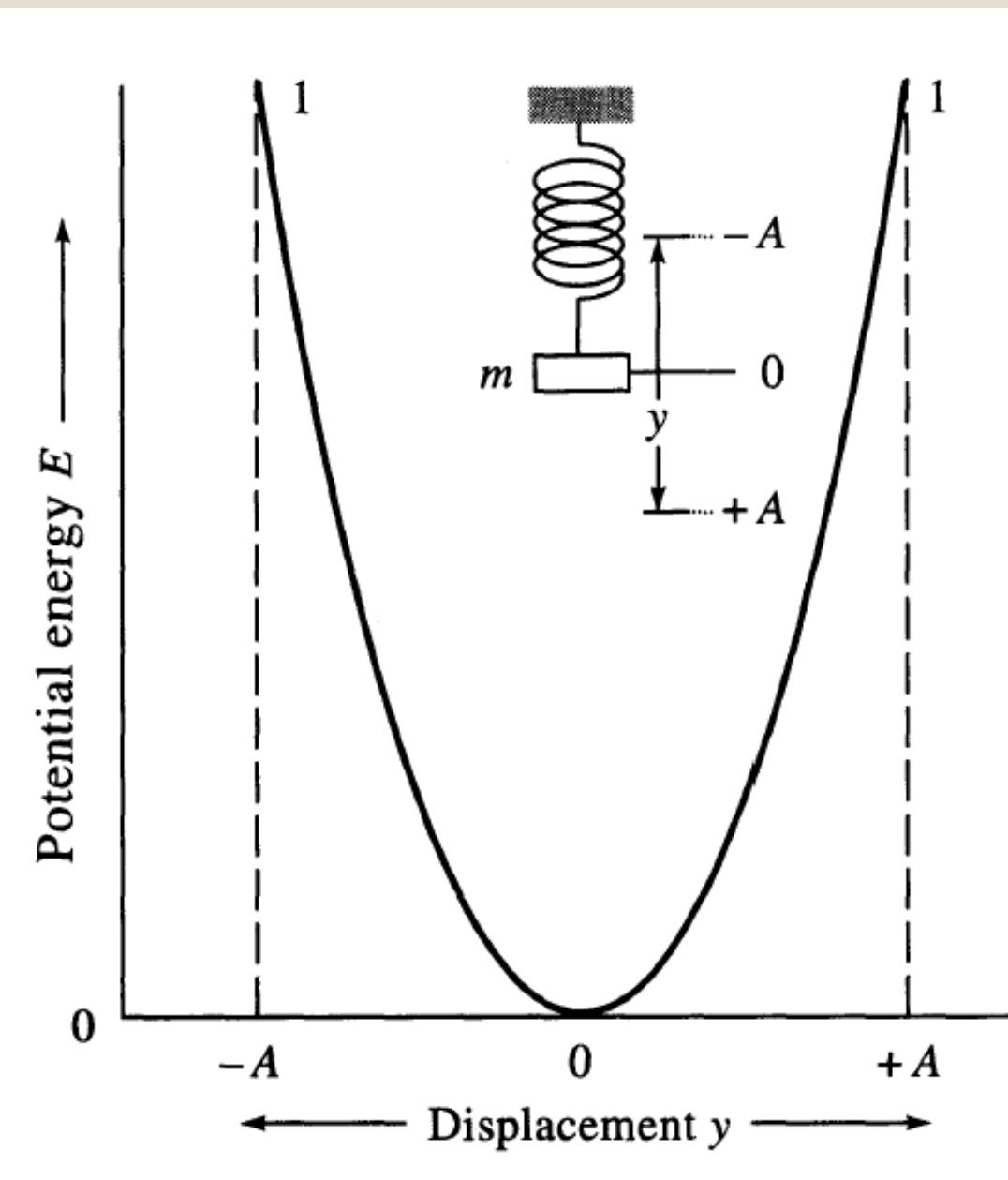
Hexyne



1-hexyne
C₆H₁₀

Theorie d'Absorption IR

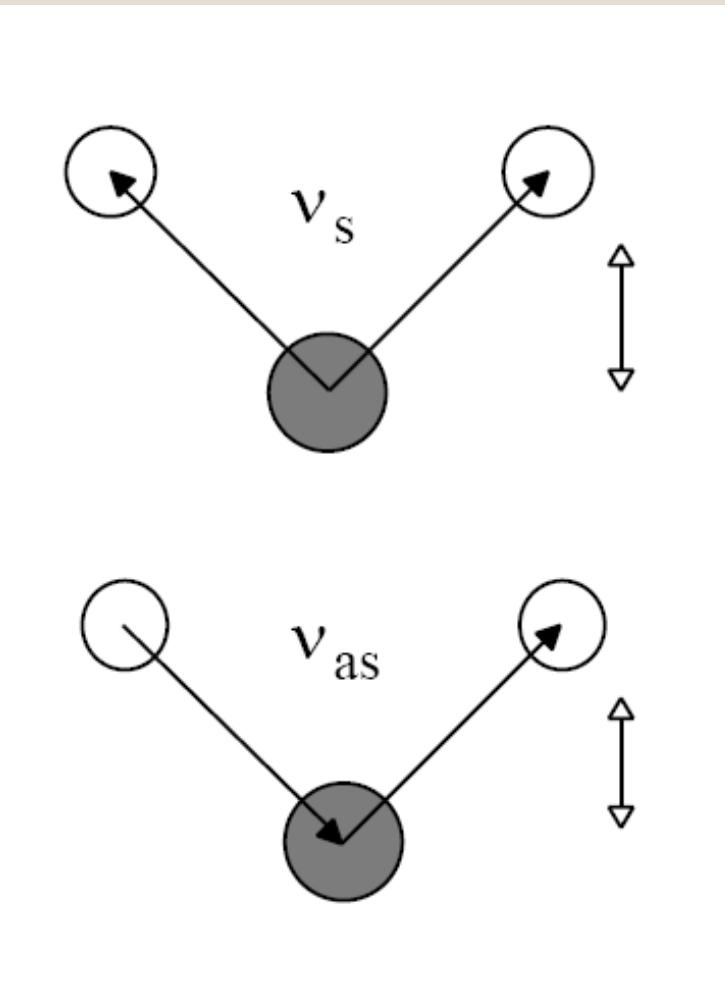
Vibrations moléculaires



Types de Vibrations Moléculaires

Étirement de liaison

symmetric



asymmetric

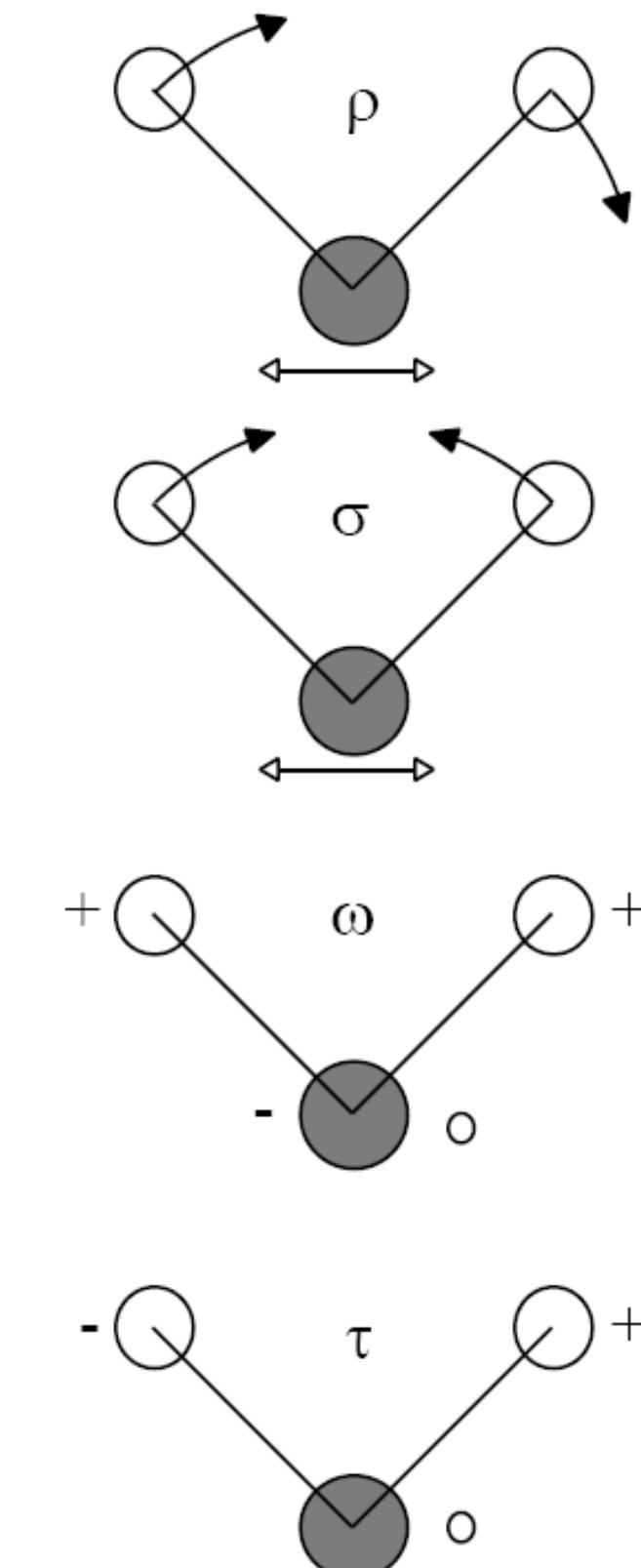
In-plane rocking

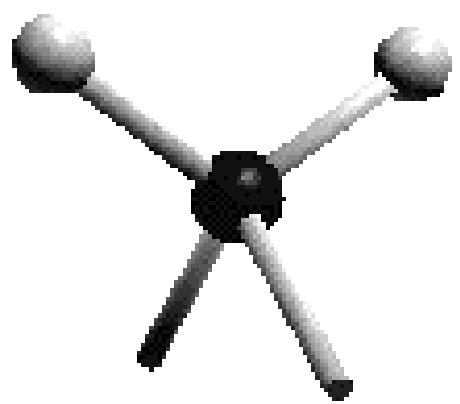
In-plane scissoring

Out-of-plane wagging

Out-of-plane twisting

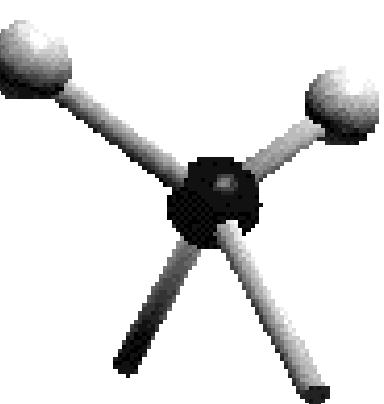
Déformation angulaire





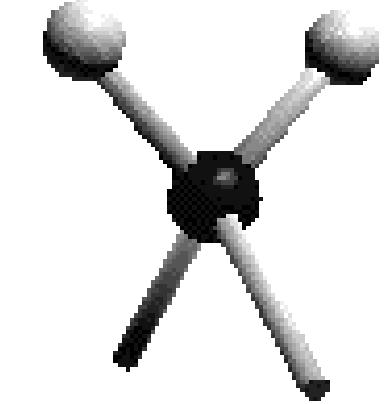
Copyright © 1997 Charles B. Abrams

symmetric



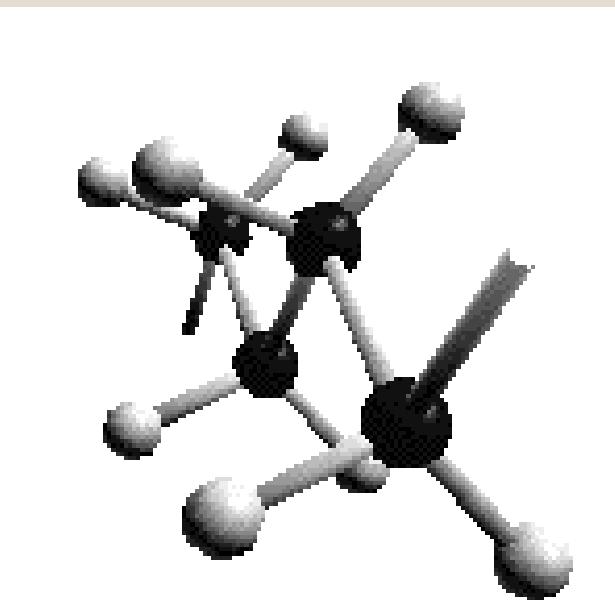
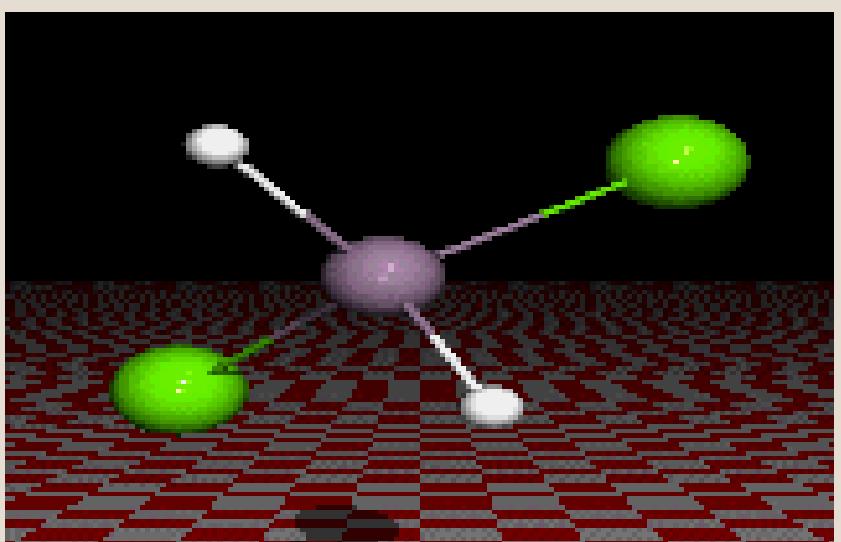
Copyright © 1997 Charles B. Abrams

asymmetric



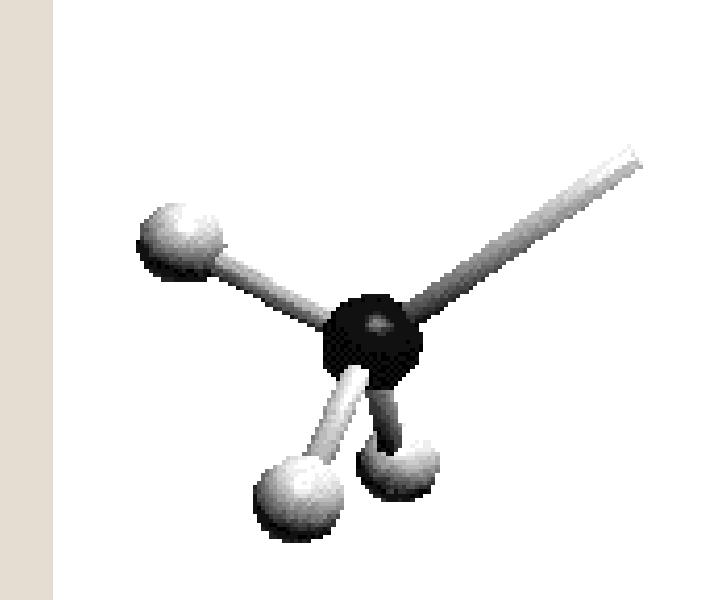
Copyright © 1997 Charles B. Abrams

In-plane scissoring



Copyright © 1997 Charles B. Abrams

Out-of-plane twisting

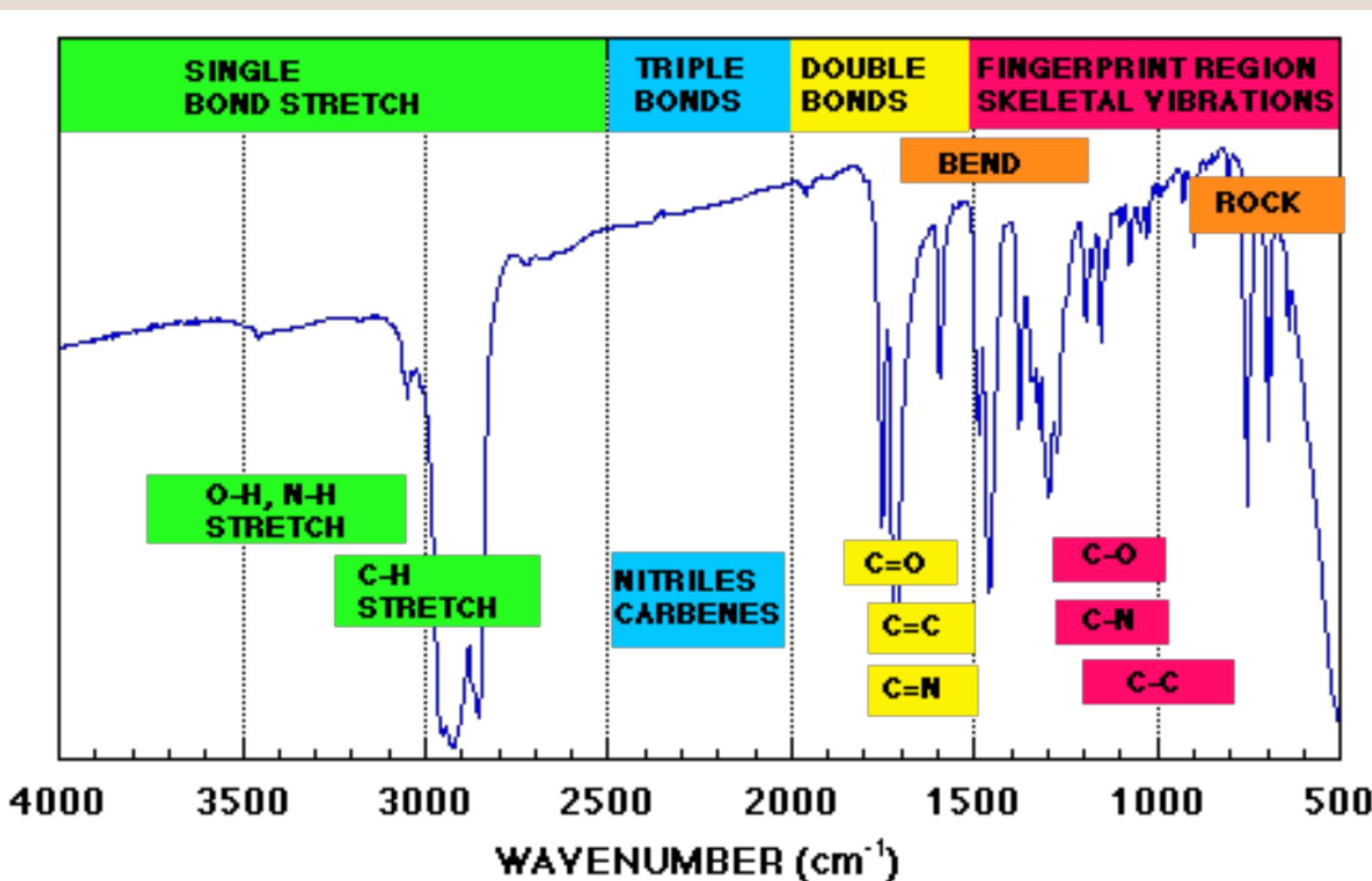


Copyright © 1997 Charles B. Abrams

In-plane rocking

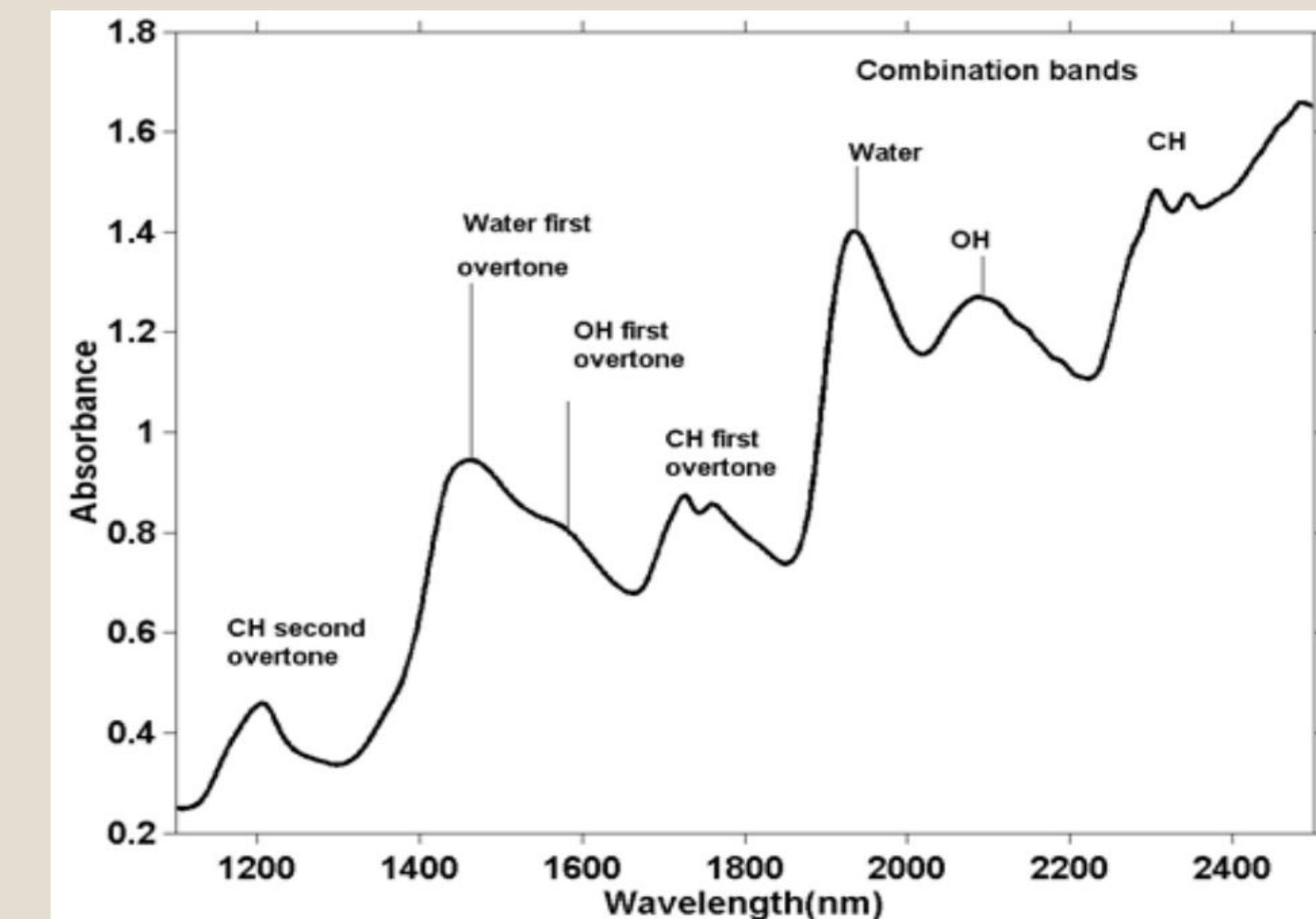
Out-of-plane wagging

Les spectres mesurent la composition du sol, qui détermine ses propriétés.



Mid infrared (4000-400 cm⁻¹)

- ✓ Vibrations fondamentales des liaisons entre molécules qui absorbent la lumière infrarouge (IR).
- ✓ Les spectres fournissent une **empreinte digitale** des substances, plus facilement interprétable.
- ✓ Ils offrent un **profil plus complet** des composés inorganiques et organiques.



Near infrared (1100-2500 nm)

- ✓ Bandes combinées et harmoniques des vibrations fondamentales du MIR
- ✓ Souvent négligées : spectres complexes
- ✓ Un rayonnement plus énergétique permet une pénétration plus profonde dans l'échantillon

TECHNIQUES SPECTROSCOPIQUES

UV Vis (Ultraviolet Visible)

NIR (Near Infrared)

MIR /(FTIR) (Mid Infrared)

XRF (X Rays Fluorescence)

LIBS (Laser-induced breakdown spectroscopy)

Raman

.....

Limitations:

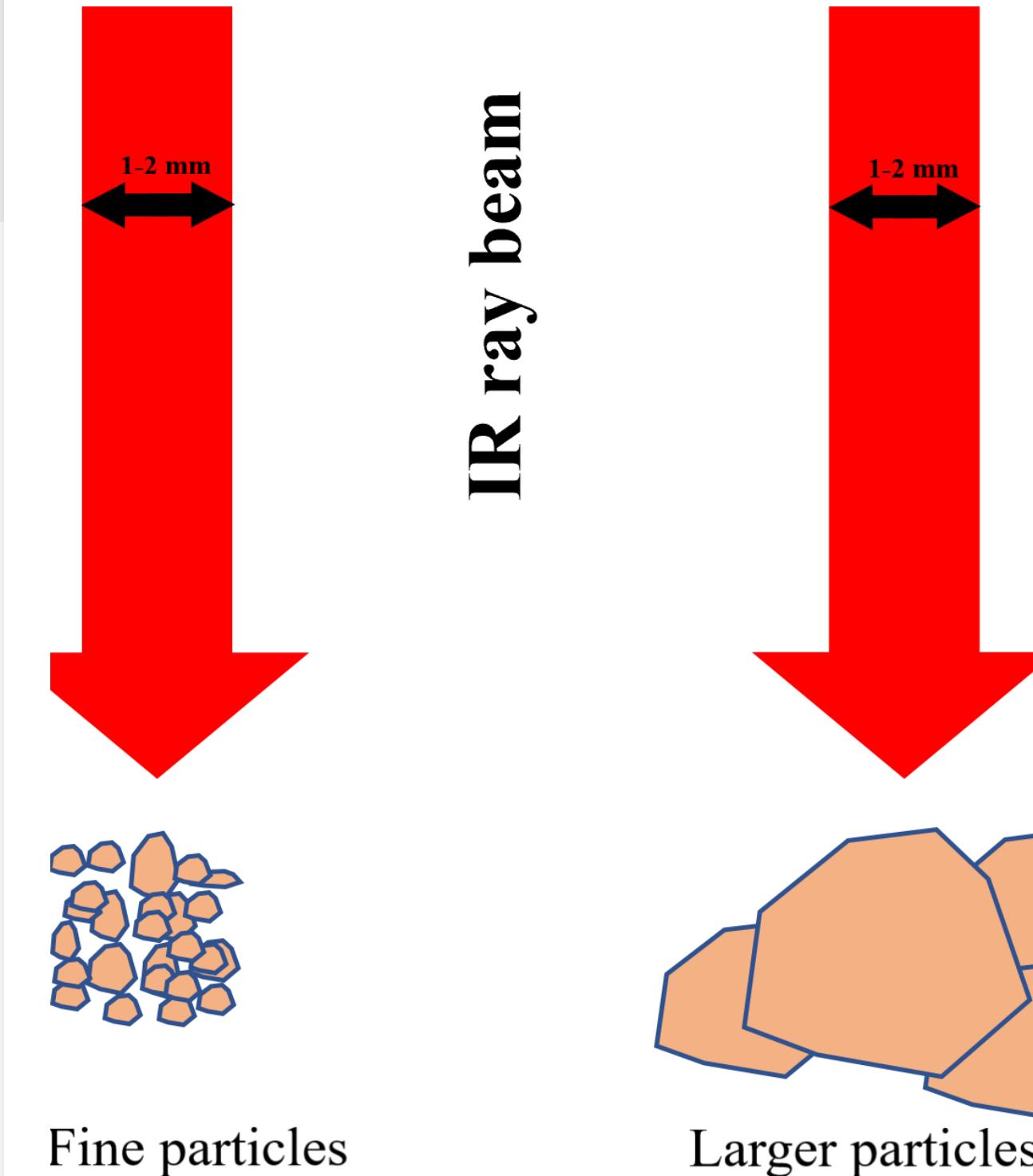
Préparation des échantillons

Calibration (modélisation)

Préparation des échantillons

Pouquoi un broyage fin?

- Homogénéiser l'échantillon
- Taille du faisceau et surface de balayage
- Prévenir les réflexions spéculaires
- Réflectance plus élevée
- Éliminer les artefacts spectraux
- Absorptions bien définies
- Exposer davantage de matériaux par la désagrégation des agrégats



Préparation des échantillons

Pourquoi le séchage?

- Standardisation des niveaux d'humidité
- Amélioration de la précision du signal
- Prévention des altérations physiques
- Conservation et stabilité à long terme
- Cohérence entre les études



Préparation des échantillons

Pourquoi le séchage?

Le processus de séchage implique généralement un séchage à l'air ou au four à des températures inférieures à 40 °C afin d'éviter d'altérer la matière organique et d'autres composants sensibles du sol. Après le séchage, les sols sont souvent tamisés pour éliminer les particules grossières et obtenir un échantillon plus fin et homogène, adapté à la spectroscopie.



Thank you



Introduction à la spéctroscopie de sol

Issam Barra, PhD

Expert en spectroscopie de Sol, GSP-FAO

Issam.barra@fao.org