

## 衰减全反射红外光谱对易燃液体的快速筛选

程芳彬<sup>1</sup>, 孙振文<sup>2\*</sup>, 刘占芳<sup>2</sup>, 张冠男<sup>2</sup>, 徐静阳<sup>3</sup>,  
乔婷<sup>2</sup>, 朱军<sup>2</sup>, 陈令新<sup>4</sup>, 刘耀<sup>1, 2\*</sup>

1. 中国人民公安大学刑事科学技术学院, 北京 100076
2. 公安部物证鉴定中心, 北京 100038
3. 浙江警察学院, 浙江 杭州 330100
4. 中国科学院海岸带研究所, 山东 烟台 264003

**摘要** 纵火是一种严重危害公共安全和社会稳定的个人极端暴力犯罪行为。在纵火案件调查过程中, 火灾残留物中的易燃液体(ILs)是确定火灾性质和判断起火原因的重要物证, ILs的分析一直是法庭科学工作者关注的热点。利用衰减全反射红外光谱法(ATR-FTIR)对汽油、柴油、煤油、植物油等常见ILs进行检验, 结合主成分分析(PCA)、层次聚类分析(HCA)、判别分析(DA)三种化学计量学方法, 实现了常见易燃液体的快速筛选。通过红外光谱定性分析, 汽油、柴油、植物油与含氧有机溶剂的红外光谱图差异明显, 可相互区分, 而柴油、煤油、航空煤油、溶剂油、汽轮机油五类ILs的红外谱图无明显差异, 仅通过图谱的直接比较, 无法进行区分。重点选取 $1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$ 范围的红外特征吸收峰, 结合PCA, PCA-HCA, PCA-DA化学计量学方法进行比较, 成功将航空煤油与其余四类ILs区分开; 最后选取 $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 范围的红外特征吸收峰, 利用PCA, PCA-HCA, PCA-DA方法, 可将其余四种ILs实现互相区分。研究结果表明, ATR-FTIR结合化学计量学方法对常见ILs进行定性分析, 具有方便、快捷、准确的优点, 可作为ILs种类的快速筛选方法。

**关键词** 衰减全反射红外光谱; 易燃液体; 筛选

**中图分类号:** X928.7 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2018)08-2355-07

### 引言

火灾是一种极具破坏力的恶性事件, 给国家和谐稳定和人民生命财产安全带来巨大威胁。2015年, 我国共发生33.8万起火灾, 造成1742人死亡, 1112人受伤, 直接经济损失高达269.5亿元人民币。火灾残留物中易燃液体(ignitable liquids, ILs)的检测是判断火灾是事故还是人为纵火的重要依据。过去几十年, 国际上开展易燃液体残留物(ILRs)检测项目的实验室根据ILs性质的不同, 建立了一整套气相色谱-质谱仪(gas chromatography-mass spectrometer, GC-MS)鉴定ILs的标准。由于ILs种类繁多, 组分和性质差异比较大, 要选择不同的色谱条件来进行分离, 这就需要一种筛选手段初步判断ILs的种类。目前鉴定人员主要通过ILs的气味、

颜色等特征或直接顶空-GC-MS等方法进行初筛, 但气味、颜色等特征判别法错误率较高, 直接顶空-GC-MS等方法存在操作繁琐、花费时间长的缺点<sup>[1]</sup>。因此, 急需一种简单方便、分析速度快、准确率高的ILs种类筛选方法。

衰减全反射红外光谱法(attenuated total reflection fourier transform infrared, ATR-FTIR)以其操作简单、方便、快速, 样品不需要任何前处理过程, 能提供足够特征信息等优势, 已应用到纤维<sup>[2]</sup>、染料<sup>[3]</sup>、胶带<sup>[4-5]</sup>、油漆<sup>[3]</sup>和ILs<sup>[6-9]</sup>等物证的分析检测中。Peets等<sup>[2]</sup>利用ATR-FTIR并结合主成分分析(principal component analysis, PCA)和判别分析(discriminant analysis, DA)对单组分和多组分纤维进行了分类。Hayes等<sup>[3]</sup>利用ATR-FTIR结合偏最小二乘法化学计量学方法建立了染料和油漆的定量分析方法。Goodpaster等<sup>[4]</sup>利用ATR-FTIR结合层次聚类分析(hierarchical clustering

收稿日期: 2017-06-13, 修订日期: 2017-10-20

基金项目: 国家自然科学基金项目(21575159, 21275158), 证据科学教育部重点实验室(中国政法大学)开放基金项目(2016KFKT02), 公安部科技强警基础工作专项(2016GABJC20), 公安部基本科研业务费专项资金项目(2016JB006)资助

作者简介: 程芳彬, 1989年生, 中国人民公安大学刑事科学技术学院博士研究生 e-mail: chengfangbin3@163.com

\* 通讯联系人 e-mail: skbuffon@163.com; liuyao1123@aliyun.com

analysis, HCA)建立了不同品牌电工胶带的区分方法, 准确率高达 88%。ATR-FTIR 也被应用于汽油或柴油燃料的检测, 用于 ILs 分类<sup>[8-10]</sup>、质量控制<sup>[7-9]</sup>和表征 ILs 的反应<sup>[9]</sup>。

利用 ATR-FTIR 法结合 PCA, HCA, DA 三种化学计量学方法, 对采集到的 57 个常见 ILs 样品进行种类区分, 根据不同 ILs 的红外特征吸收, 建立了一种 ILs 种类的快速筛选方法。

## 1 实验部分

### 1.1 样本

汽油、柴油、煤油、植物油等是实际纵火案件中最经常遇到的 ILs, 乙醚、酒精等含氧有机溶剂也会偶尔出现。依据实际案件中常见 ILs 种类, 分别从加油站、炼油厂、国药集团化学试剂有限公司 (Sinopharm Chemical Reagent Co., Ltd; SCRC) 及实际案件中, 采集到汽油九种、柴油 14 种、煤油四种、植物油九种、含氧有机溶剂五种, 另外包括三种苯系化合物和四种常见有机溶剂, 见表 1。根据 ILs 的名称和

性质, 共分为十一组。

### 1.2 仪器与参数

德国 BRUKER 公司生产 VERTEX 70 型傅里叶变换红外光谱仪, 配置 ATR 附件和红外显微镜。光谱扫描范围为 4 000~400  $\text{cm}^{-1}$ , 分辨率为 4  $\text{cm}^{-1}$ , 扫描次数为 32, 测试过程中扣除二氧化碳和水的干扰。

### 1.3 红外光谱的采集和处理

红外光谱的采集: 测量前, 先用酒精棉球将 ATR 样品台擦拭干净, 利用移液器吸取 ILs 液体约 20  $\mu\text{L}$ (对于极易挥发的 ILs 如乙醚, 要多吸取一些)滴加到 ATR 晶体表面, 按照 1.2 仪器参数扫描, 获取样品的红外谱图, 每个样品至少扫描三次。

数据处理: 首先通过观察红外特征吸收峰, 对样品进行初步筛选, 直观的图谱比对是鉴定过程中最简单、最常用的一种区分手段。然后选取谱图相似 ILs 的红外特征吸收范围, 结合 PCA, PCA-HCA, PCA-DA 化学计量方法对其进行深入分析, 进行更为客观的判别。

表 1 样本

Table 1 Collected experimental samples

No.	ILs	Origin/Brand	Group	No.	ILs	Origin/Brand	Group
1	Gasoline90 <sup>#</sup>	Henan Oilfield	I	31	Solvent oil 200 <sup>#</sup>	Henan Oilfield	V
2	Gasoline97 <sup>#</sup>	Henan Oilfield		32	Solvent oil 260 <sup>#</sup>	Henan Oilfield	
3	Gasoline70 <sup>#</sup>	Qilu Petrochemicals		33	Turbine oil	Lanzhou Petrochemical	VI
4	Gasoline90 <sup>#</sup>	Qilu Petrochemicals		34	Turbine oil	Shengli Oilfield	
5	Gasoline93 <sup>#</sup>	Shengli Oilfield		35	Transformer oil	Lanzhou Petrochemical	VII
6	Gasoline97 <sup>#</sup>	Shengli Oilfield		36	Transformer oil	Henan Oilfield	
7	Gasoline90 <sup>#</sup>	Lanzhou Petrochemical		37	Rapeseed oil	Arowana	VIII
8	Gasoline 1	In the case		38	Sunflower seed oil	Duoli	
9	Gasoline 2	In the case		39	Camellia oil	Nafumen	
10	Diesel0 <sup>#</sup>	Lanzhou Petrochemical	40	Olive oil	Baiye		
11	Diesel-10 <sup>#</sup>	Lanzhou Petrochemical	41	Olive oil	Ouliweier		
12	Diesel-20 <sup>#</sup>	Lanzhou Petrochemical	42	Corn oil	Duofuer		
13	Diesel-50 <sup>#</sup>	Qilu Petrochemicals	43	Corn oil	Xiwang		
14	Diesel-10 <sup>#</sup>	Qilu Petrochemicals	44	Soybean oil	Jinlongyu		
15	Diesel5 <sup>#</sup>	Qilu Petrochemicals	45	Soybean germ oil	Sanjiu		
16	Diesel20 <sup>#</sup>	Qilu Petrochemicals	II	46	Ethanol	SCRC	
17	Diesel20 <sup>#</sup>	Shengli Oilfield		47	Acetone	SCRC	
18	Diesel0 <sup>#</sup>	Henan Oilfield		48	Methanol	SCRC	IX
19	Diesel-35 <sup>#</sup>	Henan Oilfield		49	Ether	SCRC	
20	Diesel-50 <sup>#</sup>	Henan Oilfield	III	50	Isopropyl alcohol	SCRC	
21	Diesel10 <sup>#</sup>	Daqing Oilfield		51	Benzene	SCRC	
22	Diesel20 <sup>#</sup>	Daqing Oilfield		52	Toluene	SCRC	X
23	Diesel30 <sup>#</sup>	Daqing Oilfield		53	Ethylbenzene	SCRC	
24	Kerosene	Lanzhou Petrochemical		54	N-hexane	SCRC	
25	Kerosene	Qilu Petrochemicals		55	Acetonitrile	SCRC	XI
26	Kerosene	Daqing Oilfield		56	Ethyl acetate	SCRC	
27	Kerosene	Shengli Oilfield		57	Trichloromethane	SCRC	
28	Aviation coal	Shengli Oilfield		IV			
29	Aviation coal	Lanzhou Petrochemical					
30	Aviation coal	Qilu Petrochemicals					

PCA 作为一种数据降维方法,可以简化数据处理过程,更为直观地表现数据间的联系。HCA 与 DA 分别是对对象归类和种属判别的化学计量学方法。结合不同 ILs 的红外特征,分别选取中红外波数范围(4 000~400 cm<sup>-1</sup>)和 1 136~976 cm<sup>-1</sup>, 837~400 cm<sup>-1</sup> 指纹区波数范围的数据,利用 SPSS(version 22.0)对其进行 PCA, PCA-HCA, PCA-DA 数据处理。其中,PCA 得分图中保留两位主成分,分别记为 PC1 与 PC2;数据经 HCA 处理后为谱系图,通过距离表现 ILs 之间的差异;DA 数据处理中,分组变量设置按照表 1,得分图中的组质心与分类的准确率可呈现分类结果。

## 2 结果与讨论

### 2.1 ILs 的红外谱图

图 1 是四种常见 ILs 的 FTIR 谱图,从图中可以看出,汽油、柴油和植物油的红外谱图差异明显,可以通过比对成功区分,而柴油和煤油吸收峰非常相似,难以区分。

汽油与其他 ILs 最大的区别就是其中含有大量的芳香族化合物,在 3 019 cm<sup>-1</sup>处有吸收峰,表明其中含有芳香族或

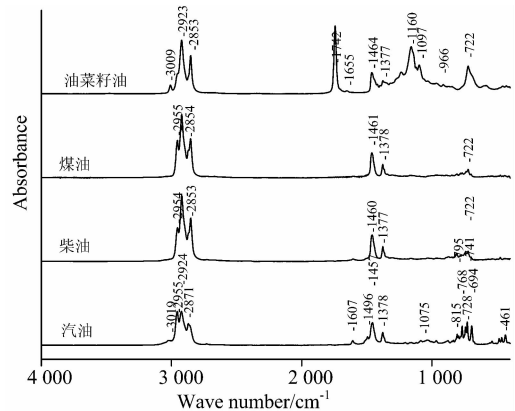


图 1 汽油、柴油、煤油、油菜籽油的 FTIR 光谱

Fig. 1 FTIR spectrum of gasoline, diesel, kerosene and rapeseed oil

烯烃的不饱和 C—H 伸缩振动。同时,在 1 000~400 cm<sup>-1</sup> 指纹区出现的多个吸收峰,说明汽油中含有大量芳香族化合物,见表 2。

表 2 易燃液体的红外特征吸收峰

Table 2 Assignations of the main FTIR bands of ILs

Wavenumber/cm <sup>-1</sup>	Assignment	Functional group or possible compound
3019	$\nu$ C—H of alkenes and aromatic rings	=C—H (aromatic)
1 500~1 300	$\delta$ C—H	—CH <sub>3</sub> (alkane); C—CH <sub>3</sub>
1 075	$\nu$ C—OH	*
1 000~400	$\delta$ opp C—H of alkenes and aromatic rings	Aromatic =C—H
815	$\delta$ opp C—H of aromatic rings	Aromatic =C—H
795	$\delta$ opp p-di-C—H of aromatic rings	para-Xylene
768	$\delta$ opp m-di-C—H of aromatic rings	meta-Xylene
741	$\delta$ opp o-di-C—H of aromatic rings	ortho-Xylene
728	$\delta$ opp Mono-C—H of aromatic rings	Toluene
694	$\delta$ opp Mono-C—H of aromatic rings	Toluene
461	C—C—C in plane bending	Toluene

$\nu$ =stretching,  $\delta$ =bending,  $\delta$ opp=out of plane bending, \* = no data

植物油是脂肪酸甘油三酯的混合物,1 742 cm<sup>-1</sup>处是酯键羰基(—C=O)的红外特征吸收峰,1 160, 1 119和1 097 cm<sup>-1</sup>是酯键中碳氧单键(—C—O)的伸缩振动峰,966和721 cm<sup>-1</sup>分别是反式脂肪酸和顺式脂肪酸链的伸缩振动吸收峰。通过上述特征吸收峰,可将植物油与其他种类 ILs 成功区分<sup>[11]</sup>。柴油、煤油、航煤、溶剂油和汽轮机油的主要成分均为烷烃,红外光谱差异不明显,仅在个别吸收峰位置略有不同,见图 2。航煤在 1 136~976 cm<sup>-1</sup>范围内有特征吸收峰,而其他样品在此波数范围内没有吸收,可实现与其他四种 ILs 的区分。其余四种 ILs 在 837~400 cm<sup>-1</sup>有细微差异,仅靠谱图比较无法区分。

### 2.2 ILs 鉴别模型的建立

#### 2.2.1 PCA

为了总体了解 ILs 之间的差异,利用整个波数范围内的红外数据(4 000~400 cm<sup>-1</sup>)进行 PCA 分析,见图 3(a)。由

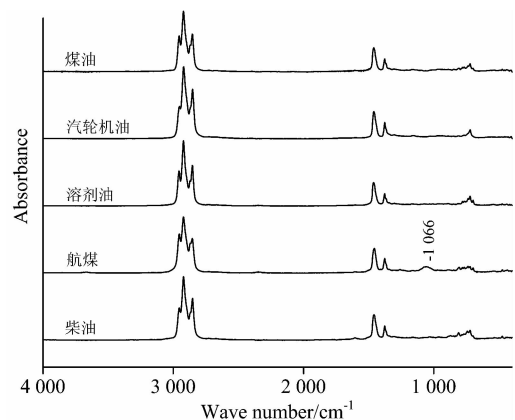
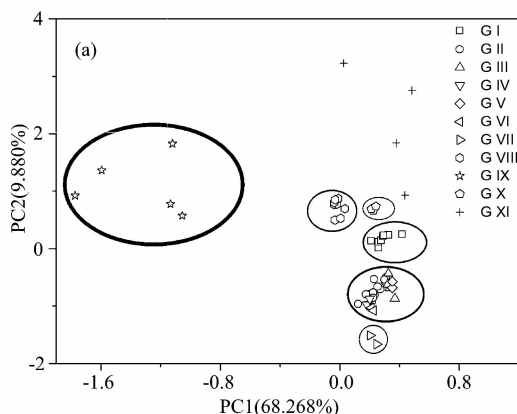


图 2 柴油、煤油、航煤、溶剂油和汽轮机油的 FTIR 光谱

Fig. 2 FTIR spectrum of diesel, kerosene, aviation coal, solvent oil and turbine oi

图可见,选取两个主成分来表征 ILs, 贡献率分别为:  $PC1=68.268\%$ ,  $PC2=9.880\%$ , 累计贡献率为  $78.148\%$ 。各组 ILs 有明显的聚类趋势, 可以很容易将汽油、柴油、植物油、含氧有机溶剂、苯系化合物之间区分开来。但柴油、煤油、航煤、溶剂油、汽轮机油之间差异较小, 聚集在一起, 难以区分。

$1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$  是航煤的红外特征吸收峰, 选取柴油、煤油、航煤、溶剂油、汽轮机油在此范围的光谱数据进行



PCA 分析, 见图 3(b)。由图可知, 各组 ILs 有一定程度的聚类, 航煤、汽轮机油与其他 ILs 分布差异较大, 其中航煤最为明显, 可与其他 ILs 样品区分。

为了对柴油、煤油、溶剂油、汽轮机油进一步区分, 选取  $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$  指纹区进行 PCA 分析, 见图 3(c)。这四类 ILs 有明显的聚类趋势, PCA 得分图中差异明显, 可成功区分。

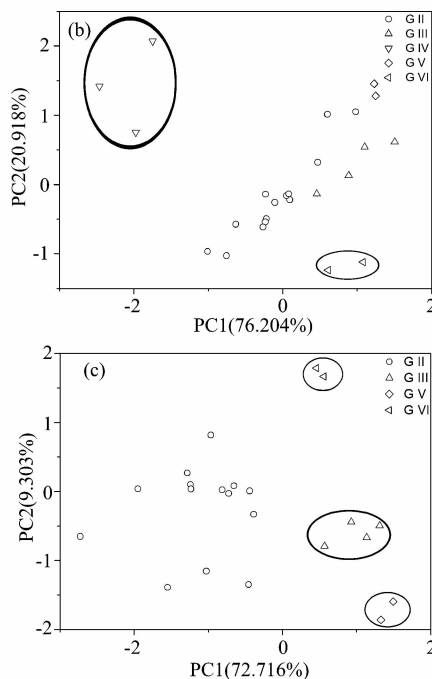


图 3 易燃液体不同分组的 PCA 得分图: (a) 全组; (b) II, III, IV, V, VI 组; (c) II, III, V, VI 组; G=Group(下同)

Fig. 3 Score plot of PC2 versus PC1, obtained from (a) all Goup; (b) Group II, III, IV, V, VI; (c) Goup II, III, V, VI; G=Group

### 2.2.2 PCA-HCA

单独通过 PCA 得分图对 ILs 进行分类, 具有一定的主观性, 为了更加客观的研究 ILs 之间的差异, 对 PCA 处理后的数据进行 HCA 分析, 见图 4。

图 4(a) 为  $4\ 000\sim 400\text{ cm}^{-1}$  的树形聚类图。由图可知, ILs 的 IR 数据经 PCA-HCA 处理之后, 各类 ILs 有明显的聚类倾向, 选择不同的距离, 可将汽油、植物油、含氧有机溶剂、苯系化合物进行归类, 而对一些组成相似的柴油、煤油、航煤、溶剂油、汽轮机油分类效果不明显, 难以进行区分, 这一现象进一步验证了通过 PCA 直接观察所得出的结论。

图 4(b) 为  $1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$  范围的树形聚类图。IR 数据经 PCA-HCA 处理之后, 在距离为 12 处, ILs 被分成两大类。航煤为单独一类, 柴油、煤油、溶剂油、汽轮机油为另一类。由此可见, 航煤与其他 ILs 在  $1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$  范围内差异明显。汽轮机油与其余三种 ILs 的差异并不明显, 在距离为 6 时, 归为一类。其余三种 ILs 有一定的聚类倾向, 但难以区分。

图 4(c) 为  $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$  范围的树形聚类图。由图可见, 柴油、煤油、溶剂油和汽轮机油聚类倾向明显, 通过选择不

同的距离, 可将其区分。其中, 汽轮机油与其余三种 ILs 差异最为明显; 柴油样品之间差异性比较大, 在距离为 13 时, 聚为一类; 煤油和溶剂油在距离为 3 时, 可成功区分。

### 2.2.3 PCA-DA

DA 是在分类确定的情况下, 解决研究对象归属问题的化学计量学方法<sup>[11]</sup>。根据已知的 ILs 种类, 对测试数据进行 PCA-DA 分析。

图 5(a) 为  $4\ 000\sim 400\text{ cm}^{-1}$  范围数据的 PCA-DA 得分图。如图所示, 汽油、变压器油、植物油、含氧有机溶剂和苯类化合物之间区分明显, 而柴油、煤油、航煤、溶剂油、汽轮机油有重合区域, 组质心几乎重合在了一起, 存在误判。通过判别函数预测, 57 个观测值中 52 个分类正确, 5 个被判错, 交叉验证有  $52/57=91.2\%$  的原始观测被判对。与聚类分析结果相似, 5 个判错的观测值主要集中在柴油、煤油、航煤、溶剂油、汽轮机油分类组中。

为了对柴油、煤油、航煤、溶剂油、汽轮机油进行更为准确的分类, 选取  $1\ 136\sim 976$  与  $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$  范围内的数据分别经过 PCA-DA 处理。如图 5(b) 所示, 在  $1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$  波数范围内, 航煤与其他 ILs 差异明显, 可将其区分出

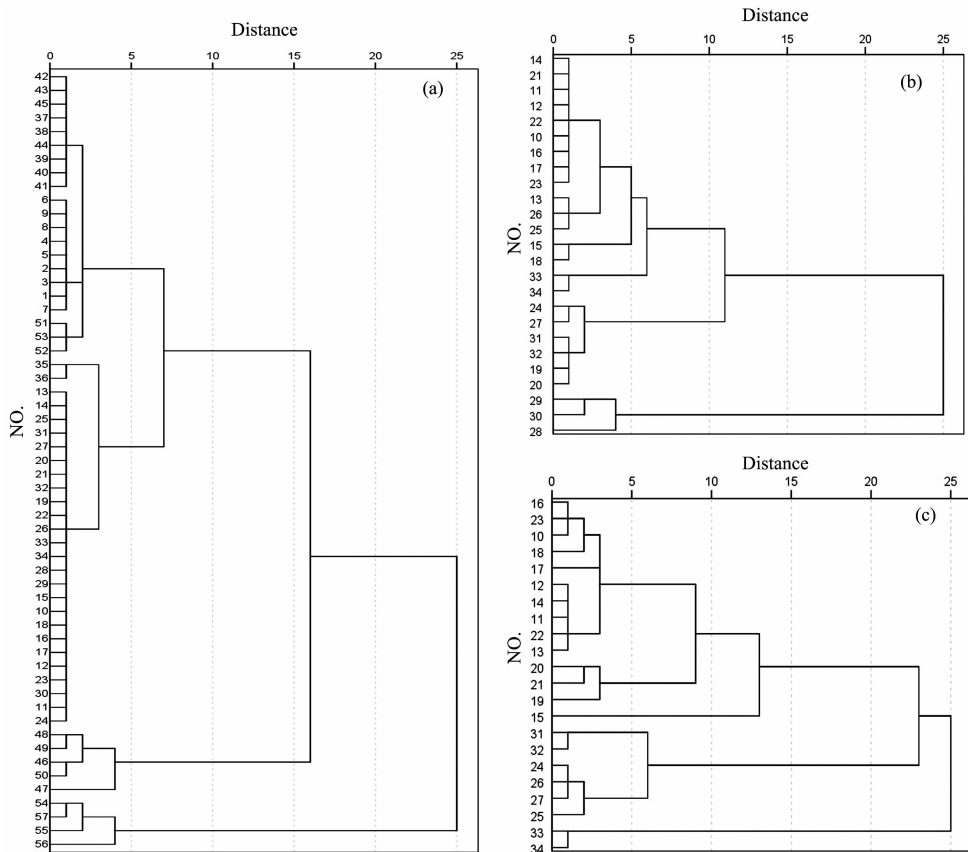


图 4 易燃液体不同分组的层次聚类分析: (a) 全组; (b) II, III, IV, V, VI 组; (c) II, III, V, VI 组

Fig. 4 Linkage clustering analysis showing ILs IR spectra: (a) all Goup, (b) Group II, III, IV, V, VI; (c) Goup II, III, V, VI; G=Group

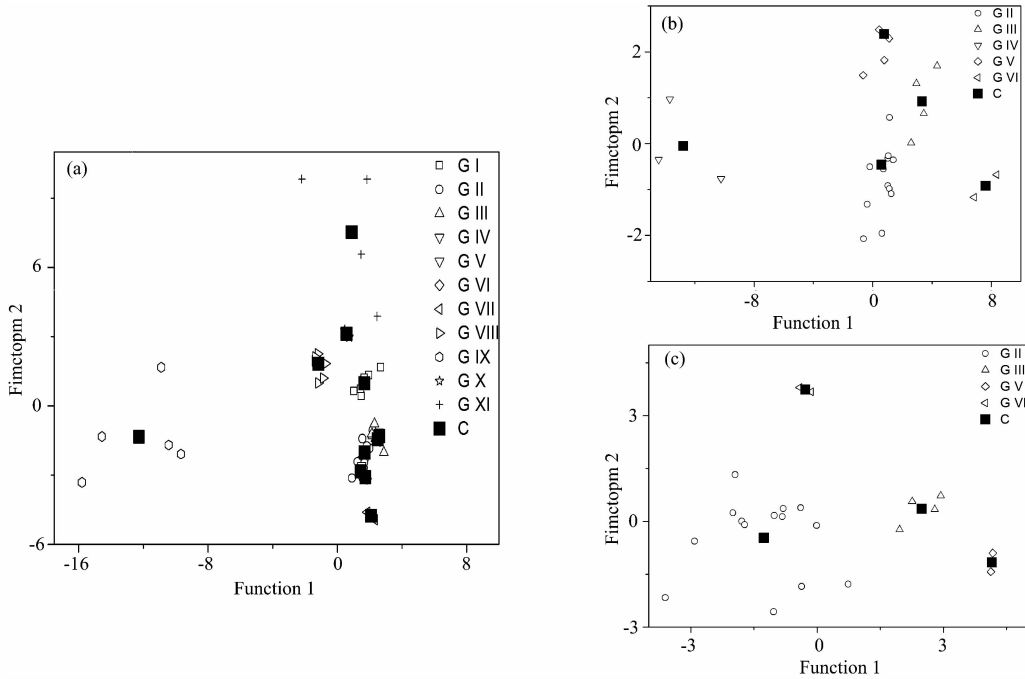


图 5 易燃液体不同分组的 PCA-DA 得分图: (a) 全组; (b) II, III, IV, V, VI 组; (c) II, III, V, VI 组; C=Centroids

Fig. 5 Plot of the first two canonical discriminant functions obtained by performing DA on the first two PCs coming from (a) all Goup, (b) Group II, III, IV, V, VI; (c) Goup II, III, V, VI; C=Centroids

来。通过判别函数预测, 25 个观测值中 23 个分类正确, 2 个被判错, 交叉验证准确率为  $23/25=92\%$ 。2 个判错的观测值集中于柴油中。如图 5(c) 所示, 在  $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$  指纹区, 其余四种 ILs 聚类倾向明显, 不存在重合区域。通过判别函数预测, 交叉验证准确率为  $100\%$ 。

### 3 结 论

利用 ATR-FTIR 对 57 个 ILs 样品进行快速分析, 并结合 PCA, PCA-HCA, PCA-DA 化学计量学方法建立了 ILs 的分类模型。由于大部分种类的 ILs 吸收谱图差异性比较大, 通过比较整个波数范围内 ( $4\ 000\sim 400\text{ cm}^{-1}$ ) 的 IR 数据可通过直观比较将其进行分类, 而柴油、煤油、航煤、溶剂

油、汽轮机油总谱图差异不明显, 此范围不适合对其分类;  $1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$  为航煤的特征吸收峰, 重点选取此范围, 并结合 PCA, PCA-HCA, PCA-DA 化学计量学方法, 可将其与其他四种 ILs 区分; 柴油、煤油、溶剂油、汽轮机油在  $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$  指纹区范围内有一定的差异, 选取此范围并应用 PCA, PCA-HCA, PCA-DA 化学计量学方法, 可将其进行区分。实验结果表明, 此方法方便快捷、准确率高, 可作为 GC-MS 分析 ILs 前的种类快速筛选手段, 为 GC-MS 条件的设置和优化提供借鉴和参考。此外, 据已发表的文章, 这是首次提出将 ATR-FTIR 应用到 ILs 的快速筛选中, 但此方法能否适用于实际案件中组分更加复杂的物证, 还有待进一步研究。

### References

- [1] Stauffer E, Dolan J A, Newman R. Fire Debris Analysis. New York: Academic Press, 2007. 432.
- [2] Peets P, Leito I, Pelt J, et al. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2017, 173: 175.
- [3] Hayes P A, Vahur S, Leito I. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2014, 133: 207.
- [4] Goodpaster J V, Sturdevant A B, Andrews K L. Journal of Forensic Sciences, 2009, 54(2): 328.
- [5] Zięba-Palus J, Nowińska S, Kowalski R, et al. Journal of Molecular Structure, 2016, 1126(9): 232.
- [6] Silva M P F D, Brito L R E, Honorato F A, et al. Fuel, 2014, 116(1): 151.
- [7] Yousefinejad S, Aalizadeh L, Honarasa F. Analytical Methods, 2016, 8(23): 4640.
- [8] Khanmohammadi M, Garmarudi A B, Ghasemi K. Fuel, 2013, 111(3): 96.
- [9] Martinalberca C, Ojeda F E, Garcíaruíz C. Applied Spectroscopy, 2016, 70(3): 520.
- [10] Monfreda M. Journal of Forensic Sciences, 2011, 56(2): 372.

## Study on Rapid Screening of Ignitable Liquid by Attenuated Total Reflection Infrared Spectroscopy

CHENG Fang-bin<sup>1</sup>, SUN Zhen-wen<sup>2\*</sup>, LIU Zhan-fang<sup>2</sup>, ZHANG Guan-nan<sup>2</sup>, XU Jing-yang<sup>3</sup>, QIAO Ting<sup>2</sup>, ZHU Jun<sup>2</sup>, CHEN Ling-xin<sup>4</sup>, LIU Yao<sup>1,2\*</sup>

1. School of Forensic Science, People's Public Security University of China, Beijing 100076, China

2. Institute of Forensic Science, Ministry of Public Security, Beijing 100038, China

3. Zhejiang Police College, Hangzhou 330100, China

4. Yantai Institute of Coastal Zone Research, Chinese Academy of Sciences, Yantai 264003, China

**Abstract** As a destructive criminal behavior, arson has brought serious losses to public safety and social stability. Subject to the destruction of fire and fire fighting behavior, most evidence has become beyond recognition. It brings a great difficulty in determining the direction of investigation and a fair trial of criminal suspect. The ignitable liquids at fire scenes are important evidence to judge the case nature. And the types determination is the key point of criminal identification. In this paper, the rapid screening method of common Ignitable Liquid was established by attenuating total reflection infrared (ATR-FTIR) spectroscopy combined with PCA, HCA and DA. The IR spectra of gasoline, diesel oil, vegetable oil and oxygenated organic solvents were significant different and by virtue of this, mutual distinction can be achieved. But there was no significant difference in IR spectra of diesel, kerosene, aviation kerosene, solvent oil and turbine oil and only by direct comparison can not achieve mutual distinction. Next, the IR absorption range ( $1\ 136\sim 976\text{ cm}^{-1}$ ) combined with chemometric tools (PCA, PCA-HCA, PCA-DA) was used for separating aviation kerosene from the remaining four types of ILs. Finally, the infrared absorption peaks in the range of  $837\sim 400\text{ cm}^{-1}$  were selected, and the other four kinds of ILs were distinguished by PCA, PCA-HCA and PCA-DA chemometrics methods. Our experimental results showed that ATR-FTIR can provide sufficient information on ignitable liquids. Combined

with some chemometrics methods, ATR-FTIR successfully completed the qualitative analysis of common ILs. Once the model is established, this method becomes convenient and accurate, and can be applied to rapid screening of ILs types.

**Keywords** Attenuating total reflection infrared spectroscopy; Ignitable liquids; Screening method

(Received Jun. 13, 2017; accepted Oct. 20, 2017)

\* Corresponding authors

## 第二十届全国分子光谱学学术会议暨 2018 年光谱年会 (第一轮通知)

由中国光学学会和中国化学会主办的“第 20 届全国分子光谱学学术会议”暨由中国光学会光谱专业委员会主办的“2018 年光谱年会”将于 2018 年 10 月 19—22 日在山东省青岛市召开,会议由中国科学院青岛生物能源与过程研究所承办。

自 1979 年在桂林召开第一届会议以来,全国分子光谱学学术会议已经成功举办了 19 届,2018 年将迎来会议的四十周年,也将是时隔 28 年再次在青岛市举办。本次会议由我国光谱科学工作者的又一次盛会,将全力展示我国在光谱及相关领域的最新研究进展及取得的成果,增进广大光谱科学工作者及其支持光谱事业人们间的交流与合作,促进我国光谱事业的发展。届时大会组委会将邀请国内外光谱及相关领域的院士、知名专家学者到会作大会报告,同时会议还将组织各类专题讨论和学术交流。大会组委会诚挚的欢迎国内外光谱界的同仁莅临本届盛会,共同见证光谱会议四十年的发展成果,真诚期待大家 2018 年金秋 10 月在青岛相聚。

### 征文范围

分子光谱理论研究,红外光谱、拉曼光谱、荧光光谱、磷光光谱、紫外-可见吸收光谱、化学发光等光谱技术在物理、化学、生物、材料科学、表面/界面科学、医药、环境、工业过程、催化学、地学、农林及其他领域的基础理论与应用研究的最新科研成果。

原子光谱、激光光谱、光谱成像等各类光谱技术的最新理论和应用研究成果,同时也欢迎光谱相关技术(如质谱、核磁共振等)的最新应用和研究成果。

### 论文摘要要求

- (1) 论文内容必须是未在期刊杂志上发表过或其他全国或国际会议宣读过的。
- (2) 提交论文扩展摘要一份,纸张大小用 A4 纸版式(用 Office word 软件排版,页边距为 2 cm,单倍行距)。
- (3) 扩展摘要按以下顺序排版:文题(三号黑体居中);作者(四号仿宋居中);单位(小四号宋体居中,含所在省市、邮政编码、电子邮址(如有));论文的创新性,研究意义与结果(五号宋体);关键词和主要参考文献(自版芯左起,五号宋体)。文稿中可穿插主要论据的图、表和照片,图题、图注和表题、表注一律用英文表述。摘要的字数,包括图、表,参考文献,总共不能超过 2 个页面。
- (4) 具体投稿要求可参看模板及《光谱学与光谱分析》征稿简则。稿件一经录用,将由《光谱学与光谱分析》以增刊或会议论文集形式发表。

论文摘要模板请参考: <http://www.sinospectroscopy.org.cn/uploads/newsfile/20110928105323.doc>

- (5) 论文摘要截稿日期:2018 年 4 月 30 日。

### 论文摘要提交方式

论文摘要全部通过电子版提交,不接受手写提交稿。欢迎大家通过网站提交论文,请您注册登陆中国光谱网(<http://www.sinospectroscopy.org.cn>),在主页会议会展栏目下本次会议通道,点击会议投稿按提示要求上传您的论文摘要。论文摘要将采用网上评审的方式,你可在网上浏览对您论文的评审结果和修改意见。若通过电子邮件方式提交论文,请发往: [limin@qibebt.ac.cn](mailto:limin@qibebt.ac.cn)。

论文摘要提交具体步骤:

1. 请您在光谱网上(<http://www.sinospectroscopy.org.cn>)用真实姓名注册,已经注册的用户,请修正和完善您的个人信息。

(下转 2378 页)