



Apoyo al Plan Nacional de Descarbonización de Costa Rica

Capacitación
Evaluación y monitoreo del carbono del suelo

PRINCIPIOS DE LA ESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y APLICACIÓN A LOS SUELOS

23-25 de nov. 2021

Julien Demenois

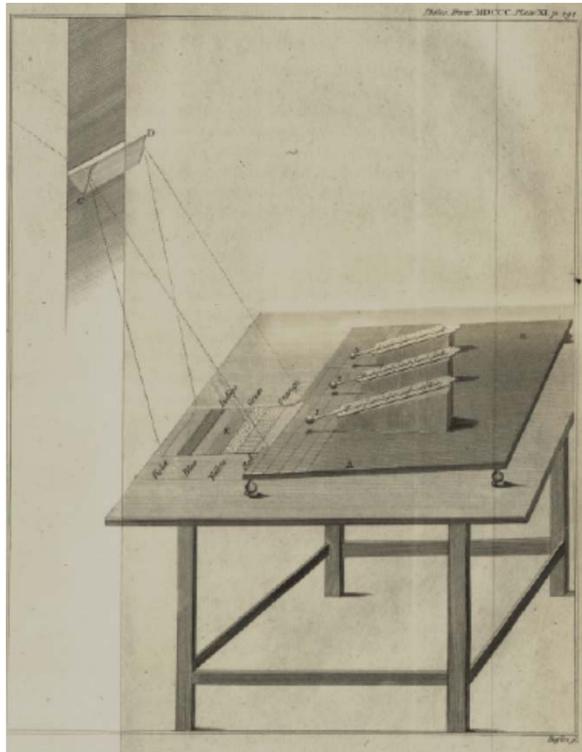


PARTE 1

PRINCIPIOS DE LA ESPECTROSCOPÍA INFRARROJA

Historia de la espectroscopía IR

Experiencias con termómetros de Sir William Herschel en 1800



| No. 1. | No. 2. | No. 3. |
|-----------------|-----------------|-----------------|
| 45 | - | 44 |
| 49 | - | 44 |
| 51 | $44\frac{3}{4}$ | 44 |
| $50\frac{1}{4}$ | $43\frac{3}{4}$ | $43\frac{1}{2}$ |

1. el poder de calentamiento de los colores prismáticos no es igual. El poder de calentamiento de los rayos rojos es mayor
2. el máximo poder de calentamiento se encuentra en los rayos invisibles

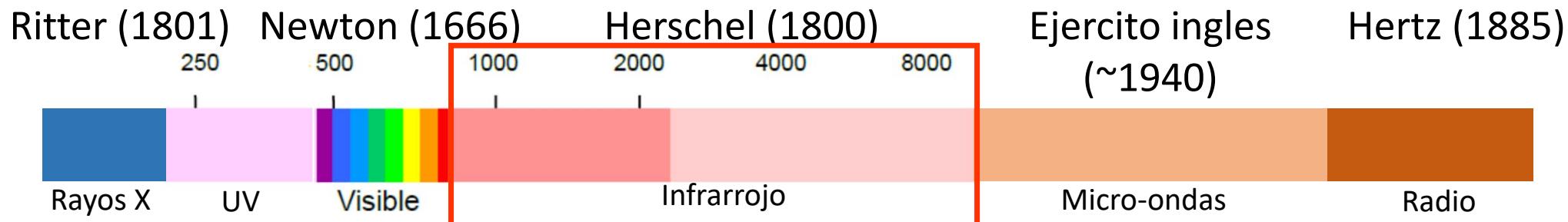
Herschel, W. 1800. *Investigation of the Powers of the Prismatic Colours to Heat and Illuminate Objects; With Remarks, That Prove the Different Refrangibility of Radiant Heat. To Which is Added, an Inquiry into the Method of Viewing the Sun Advantageously, with Telescopes of Large Apertures and High Magnifying Powers.* Philosophical Transactions of the Royal Society 90:255–283.

Herschel, W. 1800. *Experiments on the Refrangibility of the Invisible Rays of the Sun.* Philosophical Transactions of the Royal Society 90:284–292.

<https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rstl.1800.0015>

Historia de la espectroscopía IR

El espectro electromagnético

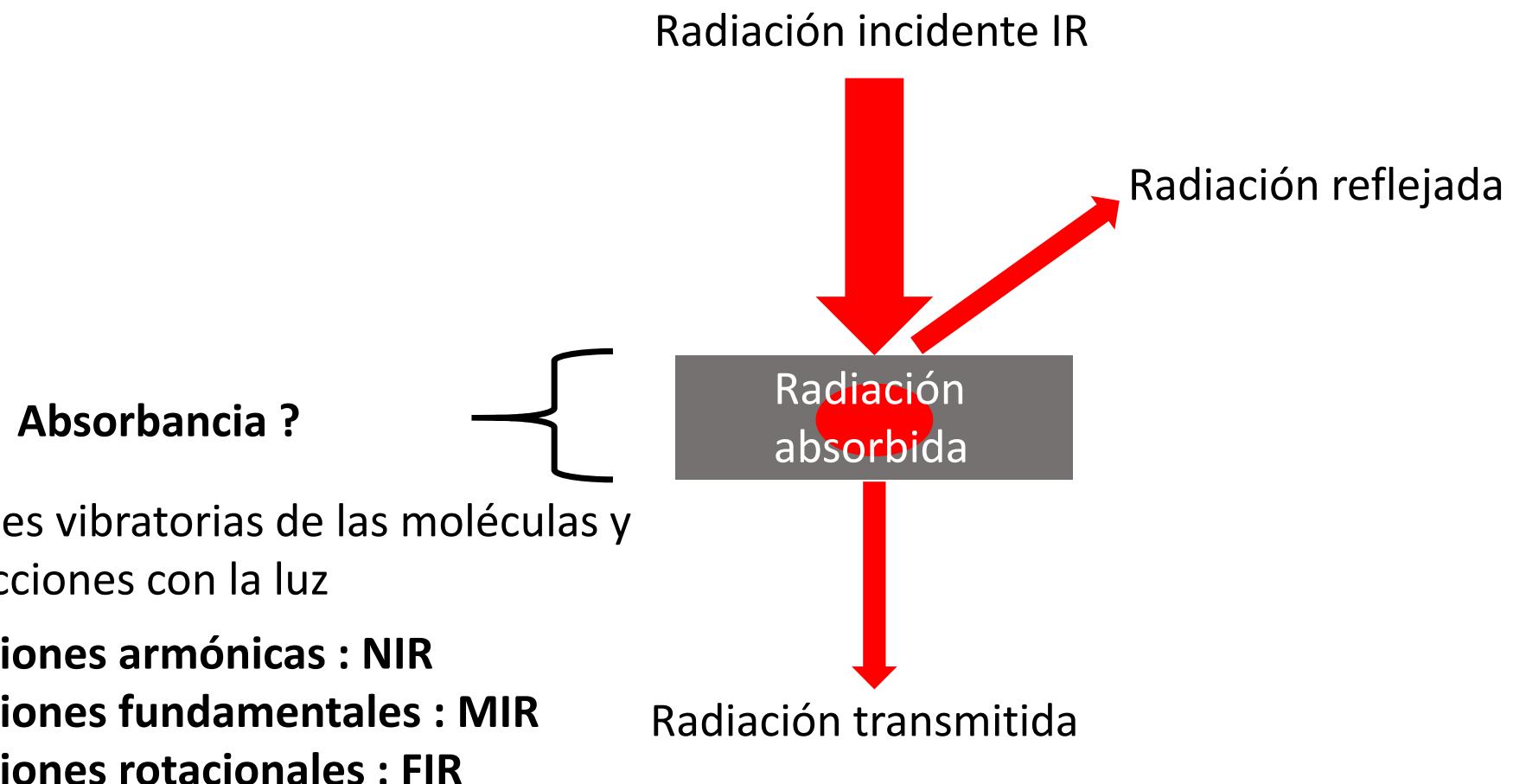


Röntgen
(1895)

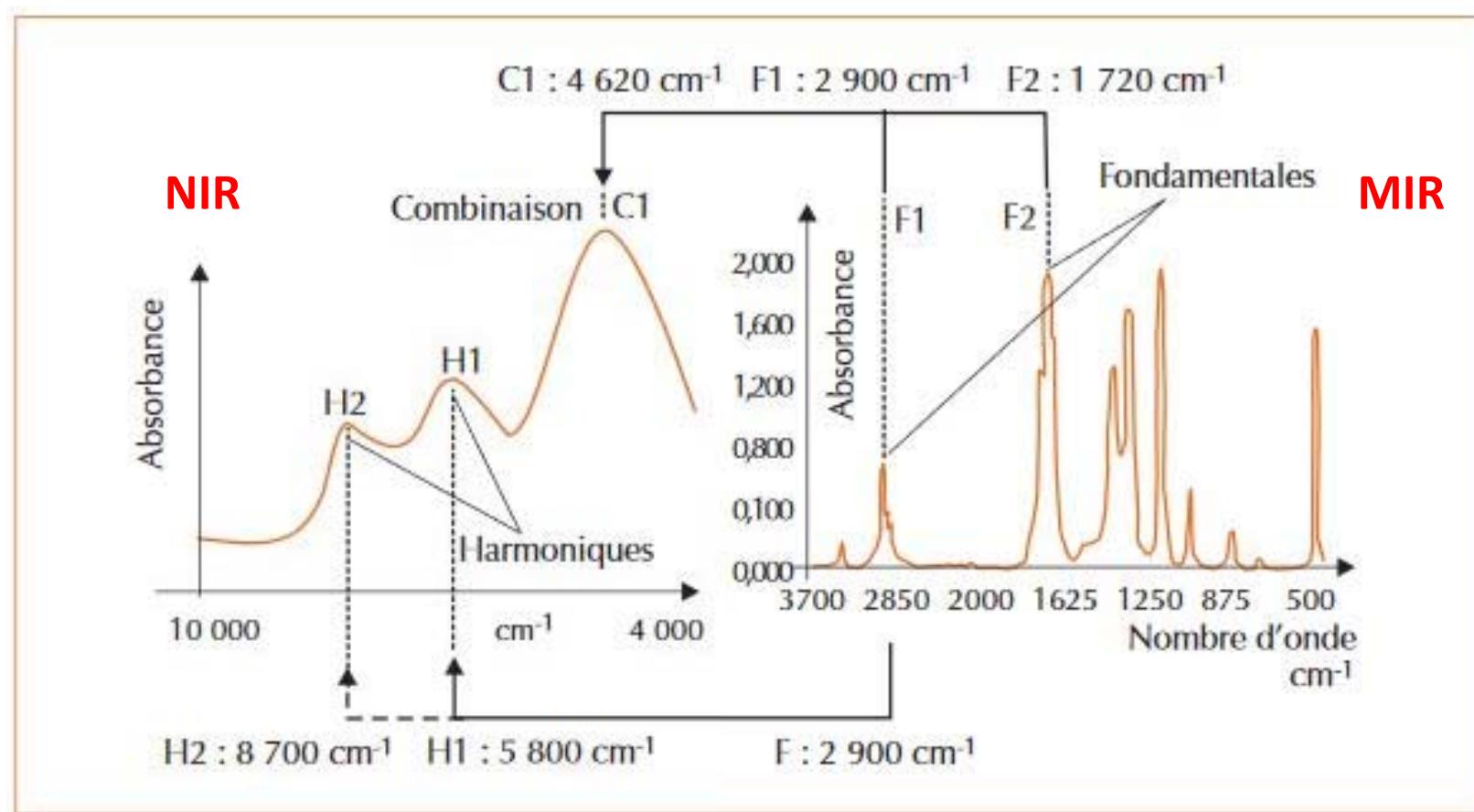
- 800 nm hasta 2500 nm = Infrarrojo Cercano (NIR)
- 2500 nm hasta 25 μm = Medio Infrarrojo (MIR)
- 25 μm hasta 500 μm = Infrarrojo Lejano (FIR)

El principio general de la espectroscopía infrarroja

Absorbancia, reflectancia, y transmisión



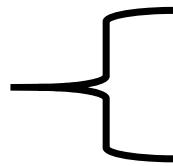
NIR versus MIR



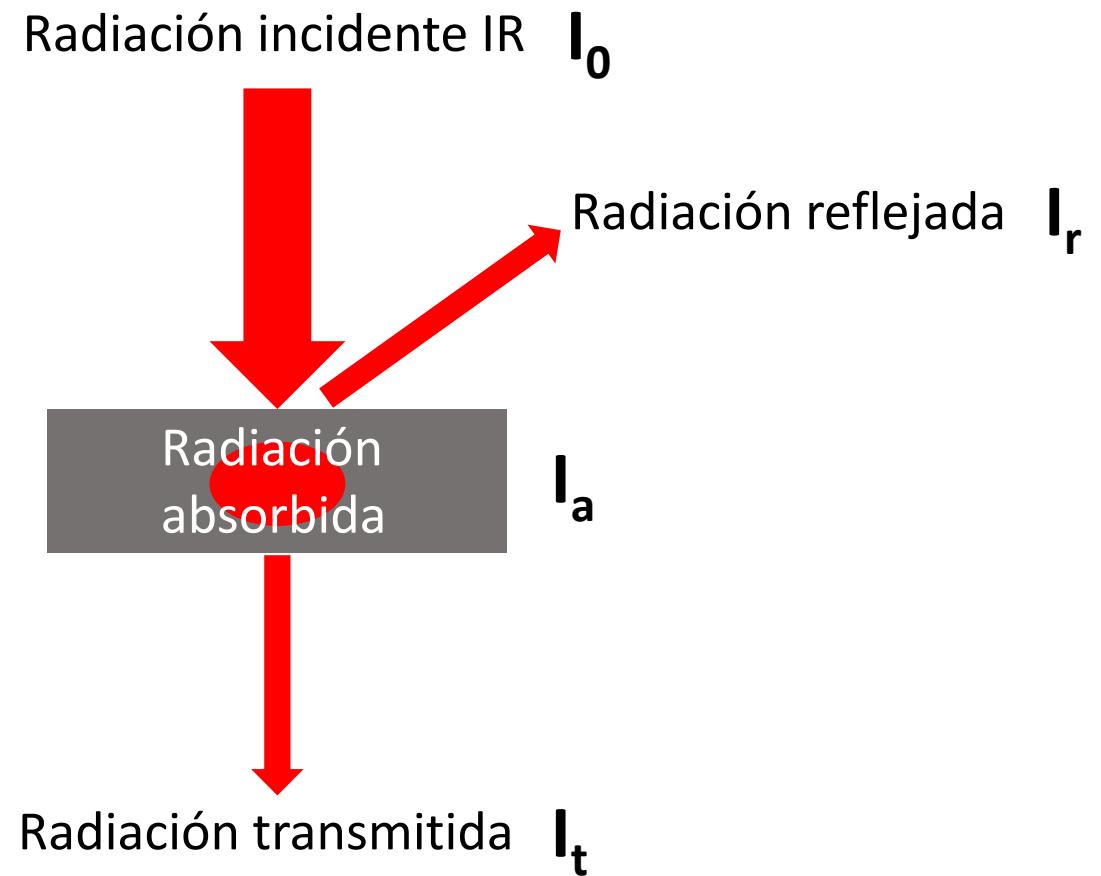
El principio general de la espectroscopía infrarroja

La ley de Beer-Lambert

$$A_\lambda = \epsilon Cl = \log (I_0/I_r) = \log (I_0/I_t)$$

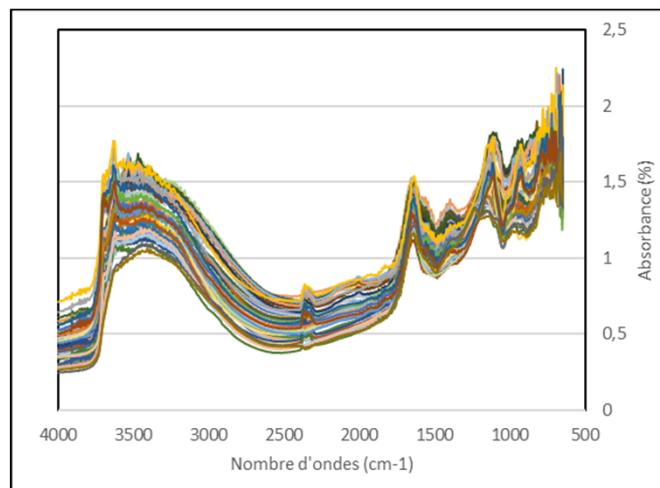


- Enlace entre longitud de onda (λ) y enlace químico
- Absorbancia (A) proporcional a la concentración (C)
- => medición cuantitativa y cualitativa



El principio general de la espectroscopía infrarroja

Modelo de predicción



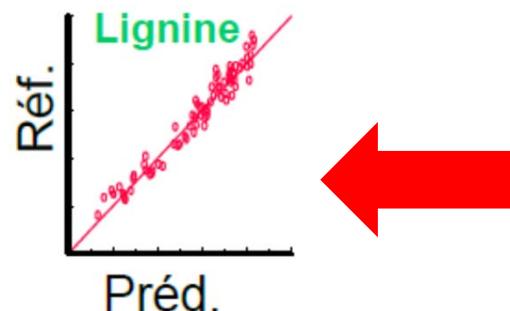
Matriz de los espectros (X)

| | λ_1 | λ_2 | λ_3 | ... | λ_p |
|----|-------------|-------------|-------------|-----|-------------|
| C1 | A1, 1 | A1, 2 | A1, 3 | | A1, p |
| C2 | A2, 1 | A2, 2 | A2, 3 | | A2, p |
| C3 | A3, 1 | A3, 2 | A3, 3 | | A3, p |

Referencias de laboratorio (Y)

| | Var1 | Var2 | ... | Varp |
|----|------|------|-----|------|
| C1 | Y1,1 | Y1,2 | | Y1,p |
| C2 | Y2,1 | Y2,2 | | Y2,p |
| C3 | Y3,1 | Y3,2 | | Y3,p |

$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_p X_p$$



Desarrollo de calibración,
regresión (PLS, ...)

El principio general de la espectroscopía infrarroja

Pros y cons

| Beneficios |
|--|
| Medicion rapida |
| Costo bajo por cada medicion |
| Medicion en campo posible |
| Analises cuantitaves y cualitatives |
| Medicion a larga escala (territorio, pais) |
| Non destructiva y sin solvantes o gases |

=> Una tecnica muy utilisada en agro-alimentaria y tambien por los suelos

El principio general de la espectroscopía infrarroja

Pros y cons

| Beneficios | Inconvenientes |
|--|---|
| Medicion rapida | Base de datos de referencia |
| Costo bajo por cada medicion | Equipamiento caro al inicio (~100 kUSD) |
| Medicion en campo posible | Competencias en quimiometria |
| Analises cuantitaves y cualitatives | |
| Medicion a larga escala (territorio, pais) | |
| Non destructiva y sin solvantes o gases | |

=> Una tecnica muy utilizada en agro-alimentaria y tambien por los suelos



PARTE 2

APLICACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA A LOS SUELOS

Los desafios de la aplicacion de la espectroscopía infrarroja a los suelos

El suelo, una matriz muy especial

- Mucha humedad (enlace H-OH - 1900 nm) => « ruido » en los espectros
 - Diversidad mineralogica
 - Diversidad organica
 - Diversidad de granulometria
 - Fases solida, liquida y gaseosa
- ⇒ **Inicio en pedología en los 70s y desarrollo en los 90s para predir el Carbono y el Nitrogeno de los suelos**
- ⇒ **Prediccion del stock de carbono (+/- 7%), del contenido de carbono (+/-10 %)**

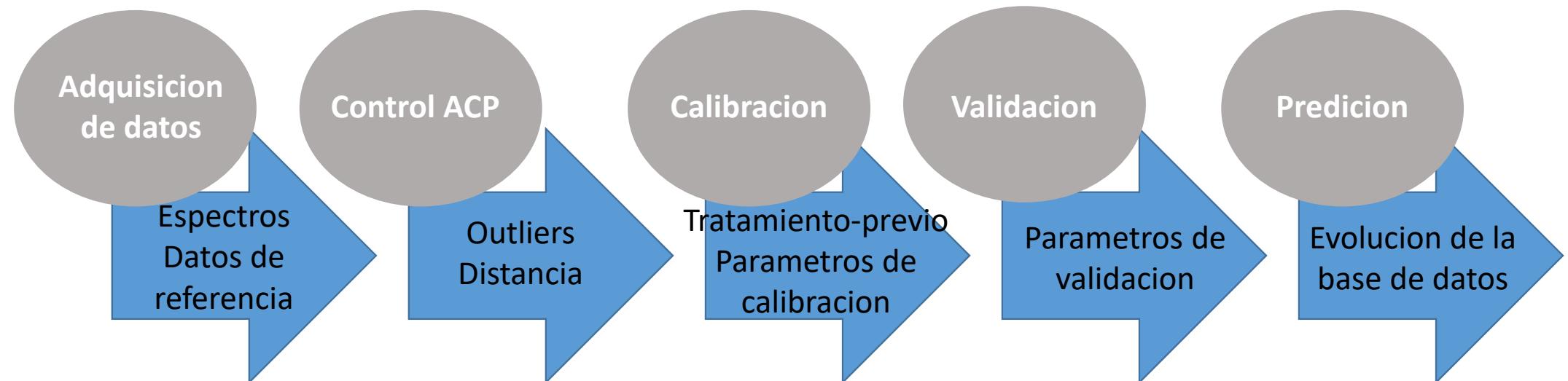
Las soluciones por la aplicacion de la espectroscopía infrarroja a los suelos

El suelo, una matriz muy especial

- Mucha humedad → Secar las muestras de suelo
 - Diversidad mineralogica
 - Diversidad organica
 - Diversidad de granulometria
 - Fases solidas, liquida y gaseosa
- Homogeneizar las muestras o aplastar el suelo
- + hacer tratamiento-previo a la analise de los espectros
(SNV, detrend, derivada, alisado)

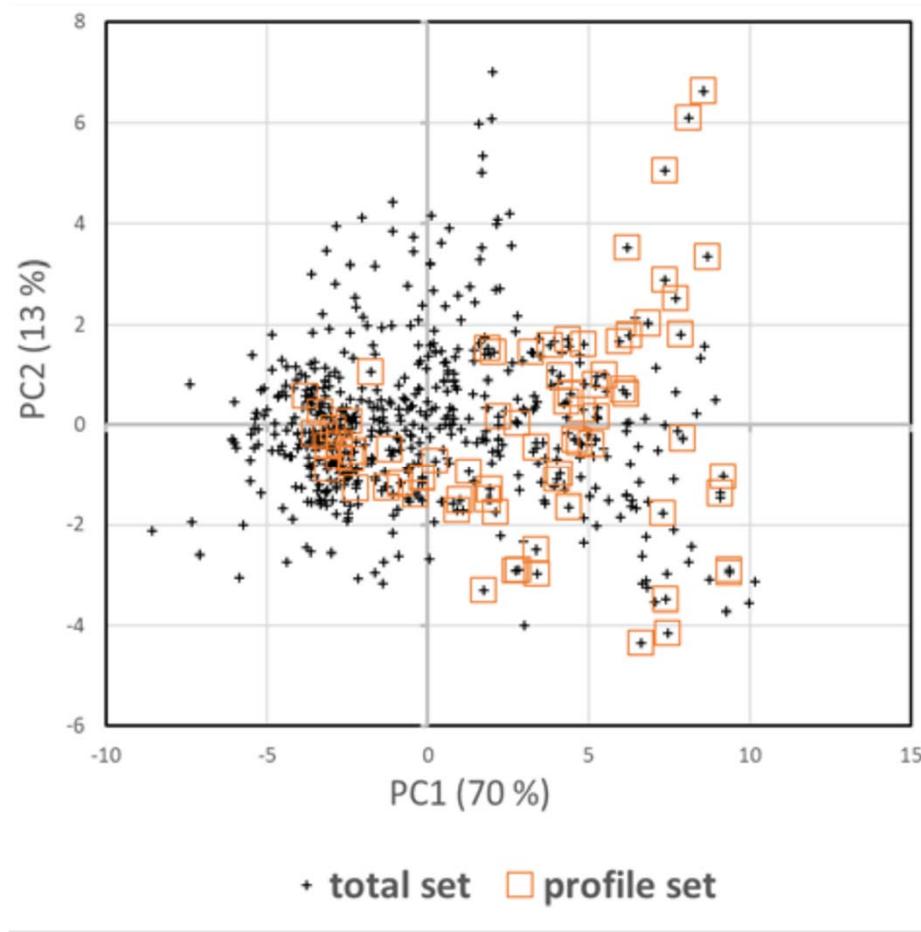
Las soluciones por la aplicación de la espectroscopía infrarroja a los suelos

El proceso de desarrollo del modelo de predicción



El proceso de desarrollo del modelo de predicción por los suelos

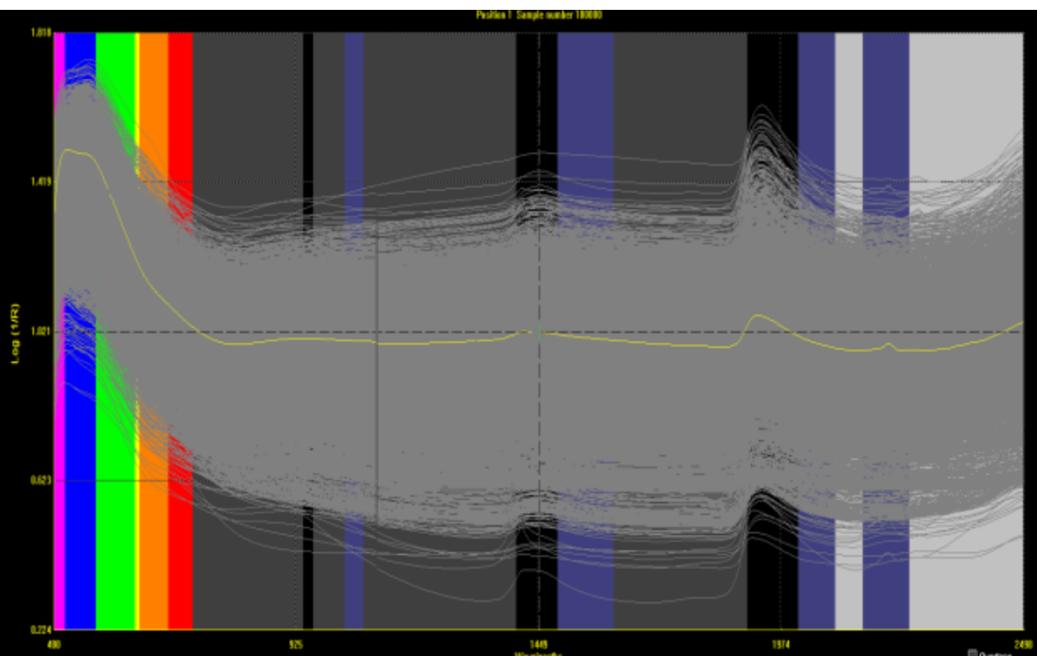
Control ACP



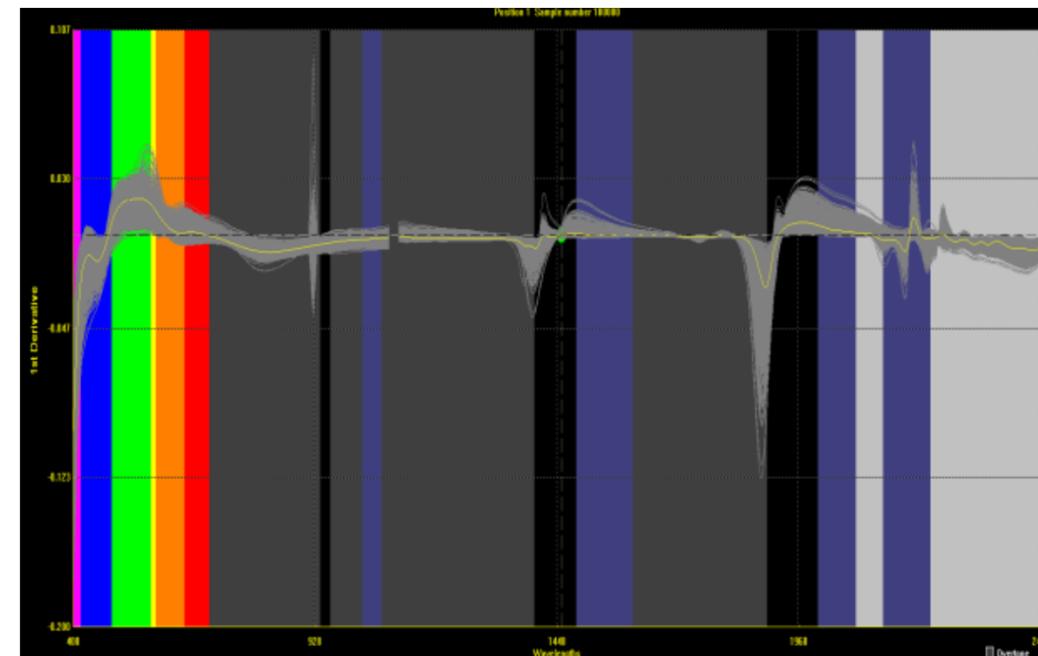
Chevallier et al. (2019), <https://soil.copernicus.org/preprints/soil-2019-14/soil-2019-14.pdf>

El proceso de desarrollo del modelo de predicción por los suelos

Calibración



Sin tratamiento-previo



Con tratamiento-previo



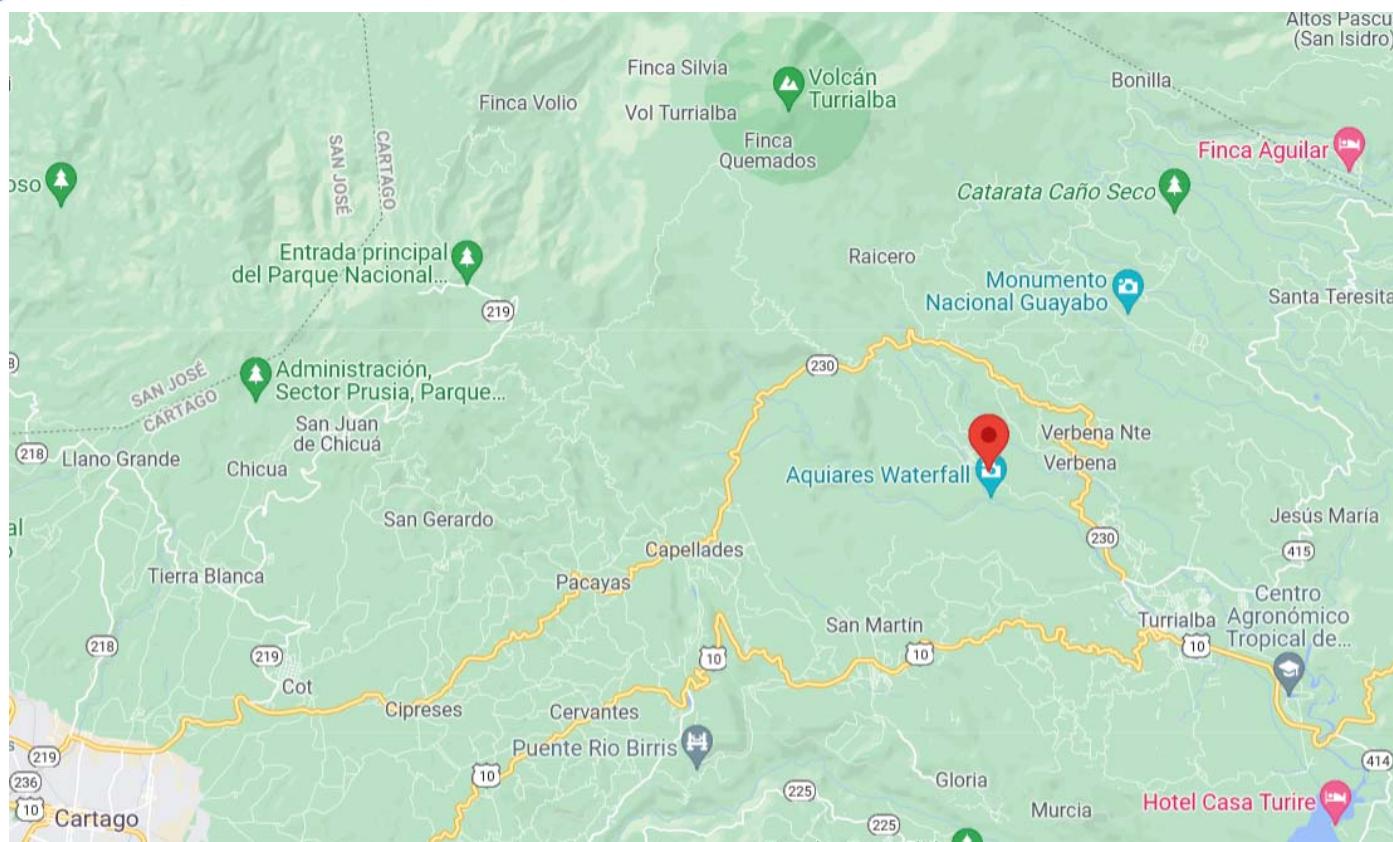
A large, semi-transparent dark brown arrow-shaped graphic points from left to right. The text "PARTE 3" is written in white capital letters on the left side of the arrow.

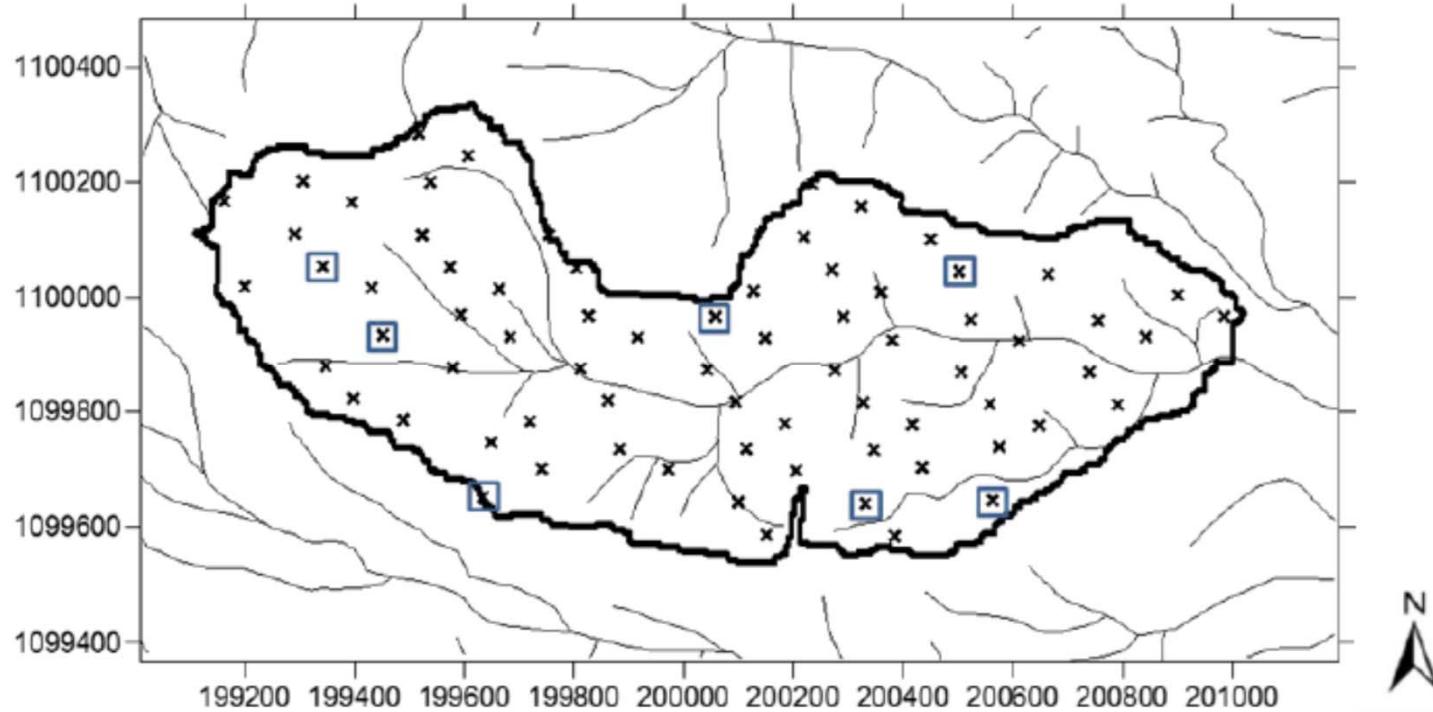
PARTE 3

EJEMPLO DE APLICACIÓN EN COSTA RICA

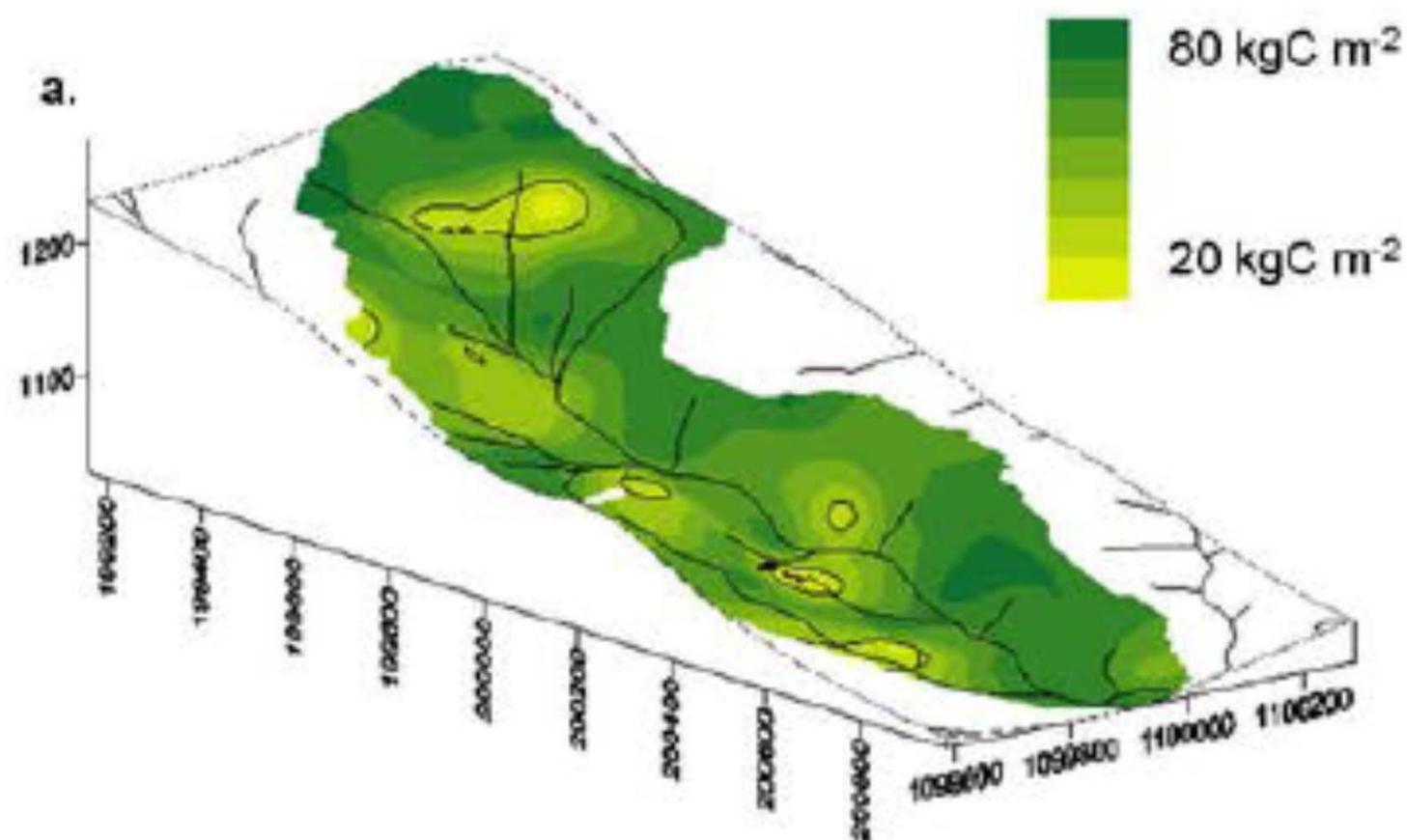
Soil andic properties as powerful factors explaining deep soil organic carbon stocks distribution: the case of a coffee agroforestry plantation on Andosols in Costa Rica

Tiphaine Chevallier¹, Kenji Fujisaki¹, Olivier Roupsard^{1,2}, Florian Guidat³, Rintaro Kinoshita^{3,5}, Elias de Melo Viginio Filho³, Peter Lehner⁴, Alain Albrecht¹





- 69 perfiles de suelo (0-200 cm) => 598 muestras de suelo
- 598 espectros MIR (4 500 hasta 478 cm^{-1})
- 98 muestras de suelo analizadas en laboratorio (SOC, Al, Fe, Si, pH)





RESUMEN

- Velocidad de medición alta
- Costo de medición bajo
- Necesidad de manejar la parte de quimiometría y de tener base de datos con análisis de suelo