

# 色谱软件在 TVOC 检测中的应用

胡韶明,毕春晖,楼 琦

(杭州英谱科技开发有限公司,浙江 杭州 310003)

**摘 要:**根据国家对建筑行业提出的新要求,提出了进行室内环境污染检测的新的色谱专用软件,能满足 TVOC 监测的需要。

**关键词:**TVOC; 色谱软件; 色谱分析

**中图分类号:**0658

**文献标识号:**B

**文章编号:**1671-8798(2003)S0-0043-03

色谱法发明至今已有 100 年的历史,最近 30 年来,色谱学各分支都得到深入研究,并广泛地应用于许多领域。随着生活水平的提高,建筑工程建设越来越多,家庭装修越来越普及,由此所致的室内环境污染已经引起人们的普遍关注,室内空气质量也引起了国务院及各有关部门领导的高度重视。为预防和控制建筑工程中建筑材料和装修材料产生的室内环境污染,保障公众健康,维护公共利益,国家建设部已把气相色谱分离技术作为室内环境污染检测的指定技术。信息时代的到来,信息社会正对我们现代分析实验室的分析方法、数据处理及结果报送提出了新的要求。利用计算机这一现代化工具和配以专业软件的应用,可以快速、准确地解决实验室中的各种复杂数据的管理、统计和报送。专用的色谱数据软件的有效应用,可以大大加快检测的速度,减少人工操作、计算和报送带来的误差。

杭州英谱科技开发有限公司在色谱数据处理领域中已经有 10 年的探索和耕耘,积累了许多经验。为积极配合国家建设部的相关工作,2003 年 6 月,我们为建筑行业更好地开展室内环境污染检测的工作,开发了一套专用的色谱数据处理软件“HS2000 色谱数据工作站 室内环境污染(TVOC)检测专用版”。这套软件经过北京和上海的有关专业实验室的使用和测试,使用效果良好,改善了色谱检测的操作复杂度,减轻了手工计算的工作量。同时使色谱检测过程更容易达到国标的要求。

## 1 国内外现状

目前,国外的色谱仪器公司在配套仪器时使用的一般都是自己公司开发的色谱数据工作站软件。这些软件有功能全面,操作方便,软件稳定性好等优点,尤其是通过软件能对色谱仪器进行操作。但是,在 TVOC 检测应用方面,使用国外软件也存在不适应中国国情的问題:

(1)不能及时地修改软件来适应特殊的需要。由于色谱软件是相对专业化的软件产品,在国外软件的生命周期也比普通软件更长。往往一个软件推向市场后,会运作很长时间。所以在开发设计过程中会很全面地考虑各种需要,但在推向市场后除非是根本性的错误,一般不再修改。然而,目前国外色谱软件都没有针对 TVOC 检测的方法,只能计算出采集样品中的有关物质的含量,不能根据国家标准要求进一步换算和计算最终检测结果。因此,在 TVOC 检测应用过程中,使用进口软件时需要做很多补充的手工计算。

(2)由于建筑行业才接触色谱技术来进行检测,对色谱的很多理论、应用都不特别熟悉,如果直接使用功

收稿日期:2003-10-10

作者简介:胡韶明(1967—),男,工程师,浙江杭州人,主要从事色谱专用软件的开发研究。



能很全面、相对操作复杂的非母语软件,会遇到很多使用问题。而且,国外软件的支持培训费用相对较高,培训的机会也比较少。所以,建筑行业使用进口软件不是特别合适。

TVOC 检测是色谱法在痕量检测领域的新应用,对色谱工作站的性能要求非常高,而国内色谱软件在功能、性能上却良莠不齐。

(1)目前国内很多色谱软件都无法对多组份进行多浓度点、多平行样的校正计算,也就是说不能通过软件直接求得多浓度标样的校正曲线和相关系数,而 TVOC 检测中需要对苯、甲苯等 8 个受控有机挥发物进行 5 个浓度点标定计算,所以国内很多色谱工作站无法满足 TVOC 检测的基本要求。

(2)国内绝大部分软件只能对已识别(有标样)的组分色谱峰进行定量计算,而对未识别(无标样)的色谱峰无法进行准确的定量计算。在 TVOC 样品检测中,实际样品相当复杂,不可能对所有组分都获取标样来计算含量,有些组份甚至无法确定其成分。因此,GB50325-2001 要求:对已识别的 8 个受控有机挥发物定性定量计算外,对其余未识别的有机挥发物要求以“甲苯”为标准进行定量计算。

(3)为了更好更准确判别污染源,控制污染源,TVOC 检测标准中要求扣除空白样品以便准确地判别材料中所带来的污染量;而目前国内绝大部分色谱软件都无法进行自动扣除空白样品这一特殊计算方法,只能进行手动计算,从而需要测试人员进行大量的计算。

(4)国标 GB50325-2001 要求所报送的 TVOC 总含量是指各种挥发性有机物在标准状态下的总含量,这就需要根据采样时的温度和压力进行标准化换算。而目前国内色谱软件中对数据的统计及进一步处理数据的能力很弱,无法直接在色谱软件中得到最终 TVOC 总含量的数据报告。

(5)实际样品中各种有机挥发物的含量都很低,在检测过程中,检测灵敏度往往放至色谱仪的最高档位,导致信噪比大大降低,所以色谱信号对色谱数据采样卡(A/D 转换卡)的性能提出了新的要求。

## 2 专用新软件

针对国内外色谱数据处理软件中目前存在的各种缺陷,在色谱界有关专家的帮助下,我公司在原有成熟的核心技术的基础上,于 2003 年 6 月成功推出了专用于 TVOC 检测的色谱数据工作站软件。该软件完全符合 GB 50325-2001 和 GB T18883-2002 的要求,弥补了国内外其他软件在 TVOC 方面应用的不足。

(1)软件采用了多组份、多浓度、多次平行标样的校正方法,一次完成甲醛、苯、甲苯、对(间)二甲苯、邻二甲苯、苯乙烯、乙苯、乙酸丁酯、十一烷等八个受控有机挥发物的标准曲线的计算。通过对配制了规定浓度的标准样品的色谱分析,对标准样品的色谱图,利用最小二乘法回归拟合模型进行线性拟合计算和检验,得到各组份的标准曲线回归方程( $y = ax + b$ )和相关系数( $R$ )。

(2)通过“杂质计算”功能,解决了 TVOC 检测中有关不能定性的组份的定量计算。色谱的定性是根据色谱的保留值规律来实现的,TVOC 检测中除了对苯、甲苯等 8 个受控组份可以正确定性定量计算外,根据国标的要求,另有十多个未能识别(无标样)的组份需要以“甲苯”为标准进行定量计算。根据这一特殊要求,利用计算机的一些处理技术,对已定性色谱峰根据自身标准计算,对未定性的色谱峰可以设定为按“甲苯”的校正曲线来计算。

(3)根据 TVOC 国标的要求,引进扣除空白样品的计算方法,实现了对各种有机挥发物的自动扣除空白的功能。软件在计算各组份含量时,可以先对所对应的多个空白样品谱图文件中找到的相应的空白组份进行自动平均,然后,从待测样品组份的含量中减除平均的空白样品对应组份的含量,得到样品中真正由室内装潢材料带来的有机挥发物的含量。保证了检测的正确性和公正性。

(4)软件中增加了数据的标准化的转换。初步计算得到的含量是在采样温度和压力条件下测量的结果,没有标准的可比性。所以,根据国标的要求,设计了标准化转换功能。可以把计算得到的各个挥发性有机物的各组份含量,根据当时取样的环境温度和大气压力,自动换算成标准状态下的含量和 TVOC 的总含量,整个实验操作过程只需要操作人员在软件中正确填写采样时的温度、压力及采样体积,从而真正实现了无纸化的操作,极大地减轻了操作人员的计算、换算等各项工作量,避免了人为因素带来的计算误差,提高了工作效率。



(5) 色谱定性一直是色谱技术中迫切需要解决的薄弱环节。拥有独特的手动定性功能,可以很方便地消除系统定性误差,来修正TVOC检测中各组分保留时间偏差带来的定性、定量误差。

(6) 通过大量实验,根据实际检测情况,总结了一套切实可行的判峰参数,作为TVOC软件的默认工作参数。在打开TVOC专用软件时,各项参数都在预设的TVOC检测方法中自动调入。所以即使是初次使用色谱进行TVOC检测的工作人员,也可以保证结果可靠、稳定,并很快地完成分析任务。

(7) TVOC专用版软件还采用了全新2003版24位高精度色谱数据采集卡,具有0.1  $\mu\text{V}$ 的高分辨率和正负2.5 V宽动态范围,可以清晰地检测到TVOC样品中各个微量组份的色谱峰,从而保证了检测的准确性 and 结果精确度。

### 3 总 结

TVOC专用软件的出现,给室内环境污染检测带来了新的活力,大大提高了广大用户的经济效益,降低了操作人员的工作量;通过北京和上海用户的广泛使用,并受到广大用户一致好评。

在设计和开发过程中,查访了广大的用户,发现各用户之间对国标的理解和算法不尽相同,通过一个完全符合国标操作过程的专用软件的使用,可有助于国标在实际检测过程中的实施,从而更好地保证检测机构的正确性和公正性。同时,在实际应用过程中,还发现一些可以进一步改进的方面。

(1) 采样同步的问题。由于目前样品的获得都通过热解析装置来实现,也就是通过在色谱仪器上安装一个热解析装置,将样品迅速解出,进样。色谱方法上还使用了时间程序升温。所以,进样后需要同时启动解析仪、色谱仪和色谱工作站软件三个开始信号。实际操作困难,同时也造成了保留时间重复性不好,给样品定性、定量带来一定影响。今后我们将和色谱仪、解析仪的厂家积极合作,使进样过程自动完成,有效提高样品的重复性,降低操作难度。

(2) 在软件方面还可以加强网络管理、网络传输的功能,使国家有关机关可以有效监督和把握各个检测点的检测情况,获得环境污染方面的宏观数据。

#### 参考文献:

- [1] 卢佩章,戴朝政,张祥民著.《色谱理论基础》[M]. 北京:科学出版社,1997.
- [2] GB50325-2001 民用建筑工程室内环境污染控制规范[S].
- [3] GB/T18883-2002 室内空气质量标准[S].

## The application of chromatographic software in TVOC detection

HU Shao-ming, BI Chun-hui, LOU Qi

(Hangzhou Yingpu Technological Company, Zhejiang Hangzhou 310003, China)

**Abstract:** A special chromatographic software for the detection of in-door environmental pollution is presented in this paper, according to the new request for architecture. The new software can satisfy the needs of the detection of TVOC.

**Keywords:** TVOC, chromatographic software, chromatographic analysis