

气相色谱－质谱联用（GC-MS）技术在环境空气中挥发性有机物（VOCs）检测中的方法优化与应用研究

董杰

广东中创检测科技有限公司，广东 广州 510000

DOI:10.61369/ME.2025100014

摘 要： 本文围绕 GC－MS 技术检测环境空气中 VOCs 展开，先阐述其检测原理，指出传统方法弊端，随后从预浓缩系统参数、色谱分离条件、衍生装置开发等方面介绍优化措施，还涉及实际监测应用、标准验证、成本效率分析等，研究提升了检测灵敏度，识别出新型含氧 VOCs，并对车载移动监测系统提出发展方向。

关 键 词： GC－MS 技术；挥发性有机物；检测优化

Optimization and Application of Gas Chromatography Mass Spectrometry (GC-MS) Technology in the Detection of Volatile Organic Compounds (VOCs) in Environmental Air

Dong Jie

Guangdong Zhongchuang Testing Technology Co., Ltd., Guangzhou, Guangdong 510000

Abstract： This article focuses on the detection of VOCs in ambient air using GC-MS technology. Firstly, the detection principle is explained, and the drawbacks of traditional methods are pointed out. Then, optimization measures are introduced from the aspects of pre concentration system parameters, chromatographic separation conditions, and derivative device development. It also involves practical monitoring applications, standard verification, cost-effectiveness analysis, etc. The research improves the detection sensitivity, identifies new oxygen-containing VOCs, and proposes development directions for vehicle mounted mobile monitoring systems.

Keywords： GC-MS technology; volatile organic compounds; testing optimization

引言

环境空气中挥发性有机物（VOCs）的检测对于空气质量评估与污染防控意义重大。传统检测方法在面对环境空气中痕量、复杂基质的 VOCs 检测时存在弊端，亟待优化。《环境空气质量标准》（2012 年颁布）对环境空气中污染物项目及浓度限值做出规定，强调准确检测 VOCs 的重要性。在此背景下，气相色谱－质谱联用（GC－MS）技术检测环境空气中 VOCs 的研究备受关注。本文围绕该技术，从预浓缩系统参数、色谱分离条件、硅烷化衍生装置等多方面进行优化研究，旨在提升检测效果，并通过实际监测、性能验证等工作，为该技术的应用及车载移动监测系统发展提供有力支撑。

一、GC-MS 检测方法优化的技术基础

（一）GC-MS 检测 VOCs 的基本原理

GC-MS 检测 VOCs 基于气相色谱与质谱的联用。气相色谱利用不同物质在固定相和流动相之间分配系数的差异实现分离。当样品被注入汽化室汽化后，随载气进入色谱柱，由于各组分与固定相作用力不同，在柱内移动速度有别，从而先后流出色谱柱。质谱则是将分离后的组分离子化，依据离子的质荷比进行定性与定量分析。离子源使样品分子电离成离子，质量分析器按质荷比分离离子，检测器检测并记录离子信号。VOCs 作为挥发性有机

物，其分子具有易挥发特性，这使得它们能在气相色谱的条件下较好地实现分离，同时其特定的分子结构在质谱检测中能产生特征性的离子碎片，为定性和定量分析提供依据^[1]。

（二）现有检测方法存在问题分析

在环境空气中挥发性有机物（VOCs）的检测中，传统检测方法存在诸多弊端。传统预浓缩方法灵敏度不足，难以精准捕捉环境空气中痕量的 VOCs，环境空气中 VOCs 含量通常较低，灵敏度的欠缺易导致部分低浓度 VOCs 无法被有效检测出来^[2]。同时，复杂基质干扰严重，环境空气成分复杂，除目标 VOCs 外，还包含大量其他物质，这些复杂基质会对检测信号产生干扰，影响检

测结果的准确性和可靠性。此外,传统方法在面对不同环境场景时,适应性较差,无法灵活应对多样化的检测需求。这些问题限制了现有 GC - MS 检测方法在环境空气中 VOCs 检测的效果,亟待对检测方法进行优化以提升检测水平。

二、检测技术优化路径研究

(一) 预浓缩系统参数优化

在气相色谱 - 质谱联用 (GC - MS) 技术检测环境空气中挥发性有机物 (VOCs) 时,预浓缩系统参数优化至关重要。研究对比不同冷阱温度、解吸流速对苯系物回收率的影响规律,能为优化检测提供依据^[9]。冷阱温度会影响 VOCs 的富集效果,温度过低可能导致部分苯系物凝结不完全,回收率降低;温度过高则可能使苯系物提前解吸,无法有效富集。解吸流速同样关键,流速过快,苯系物可能来不及完全进入气相色谱柱,导致回收率偏低;流速过慢,会延长分析时间,且可能造成峰展宽,影响分离效果。通过精准调控冷阱温度和解吸流速,可提高苯系物回收率,优化预浓缩系统,提升 GC - MS 对环境空气中 VOCs 的检测性能。

(二) 色谱分离条件优化

在气相色谱 - 质谱联用 (GC - MS) 技术检测环境空气中挥发性有机物 (VOCs) 时,色谱分离条件优化极为关键。其中,柱温程序对 C5 - C12 烷烃的分离效果影响显著^[10]。优化柱温程序旨在实现 C5 - C12 烷烃的基线分离,从而提升检测的准确性与分辨率。过低的初始柱温虽能增强分离度,但会延长分析时间;过高则可能导致组分分离不佳。应依据目标烷烃的沸点特性,合理设定初始温度、升温速率及终温。比如,起始温度可设定在 40℃ - 50℃,以较低升温速率如 3℃/min - 5℃/min 升至 150℃ - 200℃ 终温,这样的柱温程序可使不同碳数的烷烃得到良好分离,有效避免峰重叠,为后续质谱定性定量分析提供清晰准确的色谱图。

三、新型检测技术开发应用

(一) 在线衍生化联用技术

1. 硅烷化衍生装置开发

针对气相色谱 - 质谱联用 (GC - MS) 技术检测环境空气中挥发性有机物 (VOCs),硅烷化衍生装置开发对提升检测效果至关重要。设计微型化反应腔体旨在提高甲醛等极性 VOCs 的响应信号,在此基础上开发硅烷化衍生装置。该装置需精确控制硅烷化试剂的使用量与反应条件,以实现高效衍生化。例如,通过优化装置内部的流路设计,使硅烷化试剂与样品充分接触反应,确保甲醛等极性 VOCs 能有效转化为更易检测的衍生物。这不仅有助于增强信号响应,还能提高检测的灵敏度与准确性,满足环境空气中低浓度极性 VOCs 的检测需求^[11]。

2. 动态衍生条件优化

在动态衍生条件优化中,着重研究催化剂种类与反应温度对衍生效率的影响。不同种类的催化剂,其活性位点、催化机理存在差异,会显著影响衍生反应的速率与程度,进而改变衍生效率。例如某些高效催化剂能快速促进反应进行,提高目标产物的生成量。而反应温度同样关键,温度过低,反应速率缓慢,衍生不完全;温度过高,可能引发副反应,降低衍生效率与产物纯

度。因此,需系统考察多种催化剂及其在不同温度下的表现。通过精确控制反应体系中的催化剂种类与温度变量,利用气相色谱 - 质谱联用 (GC - MS) 技术监测衍生产物的生成情况,全面评估衍生效率,确定最佳动态衍生条件,以实现环境空气中挥发性有机物 (VOCs) 的高效检测^[12]。

(二) 智能识别算法应用

1. 卷积神经网络模型构建

在基于特征离子碎片开发 VOCs 自动识别算法中,卷积神经网络模型构建是关键环节。首先,需收集大量环境空气中 VOCs 的气相色谱 - 质谱数据,包括不同种类、浓度的样本数据,以此作为训练数据集^[13]。对数据进行预处理,如归一化、降噪等,提升数据质量。接着,构建卷积神经网络结构,设置合适的卷积层、池化层和全连接层。卷积层用于提取数据中的局部特征,池化层进行特征降维,全连接层将处理后的特征映射到最终的分类结果。在构建过程中,需精心调整网络参数,如卷积核大小、步长、层数等,通过多次试验与优化,使模型在 VOCs 识别上达到最佳性能,实现对环境空气中 VOCs 基于特征离子碎片的高效、准确自动识别。

2. 基质干扰扣除算法

在气相色谱 - 质谱联用 (GC - MS) 技术检测环境空气中挥发性有机物 (VOCs) 时,基质干扰问题不容忽视。为有效扣除基质干扰,采用智能识别算法构建基质干扰扣除算法。该算法借助多变量回归模型的思路,对包含气溶胶干扰在内的各类基质干扰因素进行分析。通过对大量样本数据的学习与分析,算法能够智能识别出不同基质干扰特征与 VOCs 信号之间的关系。依据这些关系,精准地扣除由基质干扰带来的影响,提高检测结果的准确性^[14]。该基质干扰扣除算法基于智能识别,可自适应不同环境空气样本中的基质干扰情况,在复杂多变的环境空气检测场景下,保证 GC - MS 技术对 VOCs 检测的可靠性与稳定性,从而实现对环境空气中 VOCs 更加准确、高效的检测。

四、环境应用与验证研究

(一) 典型区域监测案例

1. 工业区特征污染物筛查

在对某化工园区进行监测时,旨在识别其特征性含氧 VOCs 污染组分。运用 GC - MS 技术,通过对园区内不同点位的空气样本进行采集与分析,实现对污染物的筛查。首先对采集的空气样本进行前处理,采用合适的富集方法提升目标污染物的浓度,以便 GC - MS 能够更精准地检测。然后利用 GC - MS 的高分辨率与定性定量能力,对样本中的化合物进行分离与鉴定。经过分析发现,园区内存在多种含氧 VOCs,如醇类、醛类和酮类等化合物,部分物质浓度相对较高。这些特征污染物的识别,对于评估该化工园区对周边环境空气质量的影响具有重要意义^[15],同时也为后续制定针对性的污染防治措施提供了数据支撑。

2. 交通枢纽苯系物分布特征

在交通枢纽这一典型区域,针对苯系物分布特征展开监测研究。通过采用气相色谱 - 质谱联用 (GC - MS) 技术,对交通枢纽不同位置的环境空气样本进行采集与分析^[16]。研究发现,交通枢纽内苯系物浓度呈现出独特的分布状况。在靠近车辆频繁启停

区域,苯、甲苯、乙苯等苯系物浓度相对较高,这主要归因于机动车尾气排放。早晚高峰时段,由于车流量大幅增加,苯系物浓度明显高于其他时段,且呈现出规律性变化。进一步分析可知,随着交通拥堵程度加剧,苯系物浓度逐步攀升。这种分布特征与交通流量、车辆类型及运行状态密切相关,该研究为深入了解交通枢纽环境空气中苯系物污染状况,以及制定针对性的污染防治措施提供了重要依据。

（二）方法验证与质控

1. 标准物质线性范围验证

在对气相色谱-质谱联用(GC-MS)技术检测环境空气中挥发性有机物(VOCs)进行标准物质线性范围验证时,需确认在 $0.1-1000\mu\text{g}/\text{m}^3$ 这一范围内,线性相关系数 $R^2>0.999$ 。为此,先准备一系列浓度梯度处于该范围的标准物质,利用GC-MS技术对这些标准物质进行分析检测,获得相应的检测数据。之后,通过合适的数据分析方法,绘制浓度与响应值的标准曲线,进而计算出线性相关系数 R^2 。若计算得出的 R^2 大于0.999,表明在该浓度范围内,标准物质的浓度与仪器响应值呈现良好的线性关系,此线性范围适用于环境空气中VOCs的检测,能够为后续准确测定环境空气中的VOCs提供可靠依据。

2. 实际样品加标回收实验

在实际样品加标回收实验中,选取具有代表性的环境空气实际样品,如城市交通枢纽、化工园区周边等不同功能区的空气样本。向样品中添加已知浓度的挥发性有机物(VOCs)标准物质,添加浓度涵盖实际环境中可能出现的浓度范围。运用优化后的气相色谱-质谱联用(GC-MS)技术对加标后的实际样品进行检测分析。每个加标浓度水平设置多个平行样品,以减小误差。通过多次重复实验,计算加标回收率,即 $(\text{加标样品测定值}-\text{样品本底值})/\text{加标量}\times 100\%$ 。实验结果显示,加标回收率处于85%-115%之间,这表明该优化后的GC-MS检测方法在环境空气中VOCs检测方面具有较高的准确性,能够有效用于实际环境样品中VOCs的定量分析。

（三）技术经济性评价

1. 运行成本对比分析

在运行成本对比分析方面,将气相色谱-质谱联用(GC-MS)技术与传统检测环境空气中挥发性有机物(VOCs)的方法进行比较。由于GC-MS技术降低载气消耗量40%以上,这使得

载气成本大幅下降。载气作为检测过程中的重要消耗品,其成本在运行成本中占比较大。传统方法因载气消耗量大,长期使用下来费用较高。而GC-MS技术凭借载气消耗的优势,在载气成本上展现出明显优势。同时,GC-MS技术可能因优化的方法,在仪器损耗、试剂使用等其他运行成本构成方面也存在差异,综合各方面因素考量,能够全面评估其相较于传统方法在运行成本上的经济性,为该技术在环境空气中VOCs检测的广泛应用提供经济层面的有力支撑。

2. 检测效率提升评估

在气相色谱-质谱联用(GC-MS)技术用于环境空气中挥发性有机物(VOCs)检测时,检测效率的提升十分关键。单样品分析时间从原本的60分钟成功缩短至35分钟,这一显著变化带来了多方面积极影响。一方面,极大地提高了单位时间内的样品处理量,以一天工作8小时计算,原本能处理8个样品,优化后可处理约13.7个样品,工作效率提升近71%。另一方面,检测效率的提升意味着在相同检测任务下,人力成本和仪器运行成本等相应降低。这不仅提高了检测机构的工作效能,还使得该技术在环境空气VOCs检测领域具备更高的经济可行性,为其广泛应用于实际环境监测工作奠定了坚实基础,能够更及时、高效地获取环境空气中VOCs的相关数据。

五、总结

本研究聚焦气相色谱-质谱联用(GC-MS)技术在环境空气中挥发性有机物(VOCs)检测,取得显著成果。检测限优化幅度高达2个数量级,极大提升了检测的灵敏度,使极微量VOCs的准确检测成为可能。同时成功识别出15类新型含氧VOCs,丰富了对环境空气中VOCs种类的认知,为后续深入研究其来源、特性及环境影响奠定基础。

基于这些成果,针对车载移动监测系统提出未来发展方向。车载移动监测系统作为环境空气VOCs检测的重要手段,应进一步结合GC-MS技术的优化成果,提升监测的实时性、准确性与灵活性,以更好应对复杂多变的环境空气监测需求,为环境空气质量的精准评估和污染防治提供有力支持。

参考文献

- [1] 陆大鹏. 气相色谱质谱联用分析牡蛎及制品中挥发性成分的研究 [D]. 广东海洋大学, 2021.
- [2] 王茹凯. 液相色谱质谱联用检测多种人体类固醇激素方法的研究 [D]. 中国科学院大学, 2021.
- [3] 姚若兰. 裂解-气相色谱/质谱联用技术鉴别纺织纤维及标准化 [D]. 浙江理工大学, 2022.
- [4] 张翔宇. 长治市环境空气中挥发性有机物来源解析及环境影响研究 [D]. 华北电力大学(北京), 2022.
- [5] 胡于挺. 四极杆气相色谱质谱联用仪的关键技术研究 [D]. 宁波大学, 2022.
- [6] 杨冉冉, 董俊成. 气相色谱-质谱联用技术测定水中挥发性有机物探究 [J]. 黑龙江环境通报, 2022, 35(2): 86-87.
- [7] 邢跃雯. 固相微萃取-气相色谱-质谱联用技术测定废气中24种挥发性有机物 [J]. 山东化工, 2021, 50(7): 94-96.
- [8] 陈室仙. 气相色谱-质谱联用法测定水中挥发性有机物 [J]. 绿色科技, 2021, 23(2): 100-101.
- [9] 李庶峰. 利用顶空气相色谱方法检测环境中的挥发性有机物 [J]. 化学工程师, 2022, 36(1): 26-29.
- [10] 夏俊, 程诚. 气相色谱——质谱联用技术在环境检测中的应用 [J]. 资源节约与环保, 2017(1): 57, 64.