

微处理机在线判定气相色谱法低沸点 碳氢化合物色谱峰

李浩春 戴朝政 徐方宝 卢佩章

(中国科学院大连化学物理研究所)

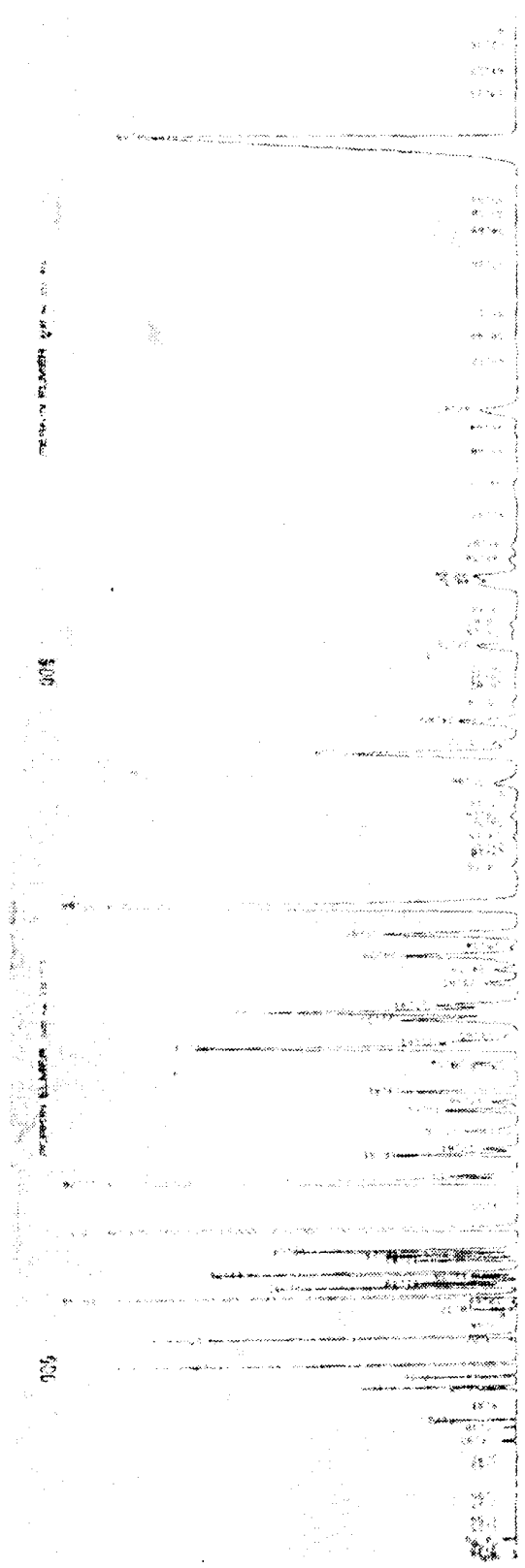
目前最新型的气相色谱仪都有微处理机这个部件。此微处理机进行色谱峰的定性时,大多数只能给出组分的相对保留值,少数则是要预先在微处理机中存入了组分在规定的固定相与操作条件相对应的保留值后,才可以判定色谱峰可能为何物^[1-5]。由于不可能在微处理机中,直接储存大量组分在任一柱温及不同固定相的保留值(如保留指数或相对保留值)供作色谱峰定性用,于是我们决意要在色谱保留值理论的引导下,寻求可用最少的参数就能较准确地计算出组分在不同柱温和不同固定相时保留指数的方法,并且在微处理机中储存这些参数,代替直接储存组分的保留指数供色谱峰定性用。最近,我们报道了可以用少数参数计算与预测低沸点异构烷烃、环烷、芳烃保留指数的方法^[6];本文则是报道我们运用自编的程序,用这些参数计算出给定柱温及固定相的 C_3 — C_9 异构烷烃、环烷、芳烃的保留指数计算值,代替直接储存组分保留指数的数值,然后对色谱峰进行在线定性的结果。

我们使用的仪器是 Perkin-Elmer 公司 Sigma 1 型气相色谱仪。它由分析器与控制台所组成。分析器装有色谱炉、检测器、气流系统、进样系统、温控系统等。控制台有微处理机,其 RAM 量为 8K 字组,磁带每面容量为 15K 字组,字长为 8 组,可用 BASIC 语言编写程序。

实验时根据样品分析所需的操作条件,按此色谱仪操作规程编排分析方法操作程序,同时将自编的色谱峰在线定性程序由磁带调入到控制台,当这些准备工作完成后,就可进行实验。实验开始时先从键盘输入使用的固定相的名称及柱温、分析方法号,这时微处理机根据指令要求的固定相及柱温,从内存中选出所需的温度系数及该固定相换算系数,计算得到在该固定相及柱温时 C_3 — C_9 烃保留指数的计算值;并自动联机,按已编排的分析方法操作程序去控制分析器;然后进样,得到色谱流出曲线图,色谱峰的保留时间及峰面积数据;再从键盘输入确认色谱峰为何组分时,容许的保留指数误差范围,及容许的噪声大小后,就会打印出分析结果的报告单,报告单上打印有:色谱峰号、判定此色谱峰可能的组分名称、色谱峰的保留时间与保留指数实验值,此组分保留指数计算值,组分的含量。图 1 是用内径 0.23 毫米长 40 米内壁涂有 OV-101 的 SCOT 柱,在柱温 50.0℃、汽化温度 200℃ 及氢火焰检测器温度 200℃ 时、氮气为载气,在线分析重整油的实验结果。

这个自编的色谱峰在线定性程序除了可作上述用途外,还有以下三个功能:在输入规定范围内的柱温与固定相名称之后,(甲)可打印出 C_3 — C_9 碳氢化合物的全部保留指数计算值;(乙)只打印出指定组分的保留指数计算值;(丙)打印出给定保留指数的组分名称;即起数据袋的作用。这使得我们研制具有人工智能气相色谱仪器的工作,又向前迈进了一步。

本文 1982 年 6 月 16 日收到。



Retention Time (min)	Peak Number	Peak Name	Area	Height	Width	Resolution
1.2	1	1,2-Dichlorobenzene	12345	150	0.5	1.0
2.5	2	1,4-Dichlorobenzene	23456	200	0.6	1.2
3.8	3	1,3-Dichlorobenzene	34567	180	0.4	1.1
5.1	4	1,2-Dichloroethane	45678	160	0.3	1.0
6.4	5	1,4-Dichloroethane	56789	140	0.2	0.9
7.7	6	1,3-Dichloroethane	67890	120	0.1	0.8
9.0	7	1,2-Dichloropropane	78901	100	0.1	0.7
10.3	8	1,4-Dichloropropane	89012	80	0.1	0.6
11.6	9	1,3-Dichloropropane	90123	60	0.1	0.5
12.9	10	1,2-Dichlorobutane	01234	40	0.1	0.4
14.2	11	1,4-Dichlorobutane	12345	20	0.1	0.3
15.5	12	1,3-Dichlorobutane	23456	10	0.1	0.2
16.8	13	1,2-Dichloropentane	34567	5	0.1	0.1
18.1	14	1,4-Dichloropentane	45678	3	0.1	0.1
19.4	15	1,3-Dichloropentane	56789	2	0.1	0.1
20.7	16	1,2-Dichlorohexane	67890	1	0.1	0.1
22.0	17	1,4-Dichlorohexane	78901	0.5	0.1	0.1
23.3	18	1,3-Dichlorohexane	89012	0.2	0.1	0.1
24.6	19	1,2-Dichloroheptane	90123	0.1	0.1	0.1
25.9	20	1,4-Dichloroheptane	01234	0.05	0.1	0.1
27.2	21	1,3-Dichloroheptane	12345	0.02	0.1	0.1
28.5	22	1,2-Dichlorooctane	23456	0.01	0.1	0.1
29.8	23	1,4-Dichlorooctane	34567	0.005	0.1	0.1
31.1	24	1,3-Dichlorooctane	45678	0.002	0.1	0.1
32.4	25	1,2-Dichlorononane	56789	0.001	0.1	0.1
33.7	26	1,4-Dichlorononane	67890	0.0005	0.1	0.1
35.0	27	1,3-Dichlorononane	78901	0.0002	0.1	0.1
36.3	28	1,2-Dichlorodecane	89012	0.0001	0.1	0.1
37.6	29	1,4-Dichlorodecane	90123	0.00005	0.1	0.1
38.9	30	1,3-Dichlorodecane	01234	0.00002	0.1	0.1

图1 重整油色谱峰的在线定性结果(部分)

参 考 文 献

- [1] Wham, W. N., Halaby, K. S., Mills, P. M., Eldridge, E. P. & Thomas, T. G., *Amer. Lab.*, 13(1981), 4: 130.
- [2] Perkin-Elmer Co., *Anal. Chem.*, 53(1981), 8: 1012A.
- [3] Hewlett Packard Co., *Amer. Lab.*, 13(1981), 8: 39.
- [4] Nickel, W., Guidinger, D. C., Brown III, A. C., Iwao, K. R. & Marshall, G., *ibid.*, 13(1981), 5: 122,35,36.
- [5] Rooney, T. A., *ibid.*, 13(1981), 5: 143,83.
- [6] 李浩春、戴朝政、徐方宝、卢佩章, 科学通报, 26(1981), 24: 1491.