

# Application News

GC-MS GCMS-QP2020 NX

## TVOC Calculation Tool 과 TD-GC/MS를 이용한 TVOC의 간소화 계산 방법

No. 01-00283-ENK

Simplifying the Calculation of TVOC Using TVOC Calculation Tool and Thermal Desorption GC-MS

### 사용자 활용 포인트

- ◆ Toluene 검량선에 적용하여 계산하는 TVOC를 Calculation Tool을 이용하여 간단하게 정량 계산을 할 수 있다.
- ◆ TD-GC/MS는 용매추출이 필요하지 않아 많은 양의 샘플을 효율적으로 분석 가능하다.
- ◆ TD-30R의 열탈착 시스템은 흡착관에서 1차 탈착을 위해 질소 가스를 사용하므로 헬륨 가스의 사용량을 줄일 수 있다.

### ■ 서론

공기 중의 유독 휘발성 유기화합물(VOCs)의 양은 대기 오염의 한 지표이며, 공장, 도시 지역, 실내 환경을 포함한 다양한 장소에서 모니터링된다. 이러한 VOCs를 정량하는 한 가지 방법은 Hexane(C<sub>6</sub>)에서 Hexadecane(C<sub>16</sub>)까지 용출되는 모든 화합물을 정량하고 Toluene 변환을 사용하여 총 휘발성 유기 화합물(TVOC)을 계산하는 것이다. TVOC가 기준값을 초과하는 경우, 각 물질을 정량하여 계산한다. TVOC 계산 방법 및 절차에 대한 자세한 내용은 ECA(EURAN Collaborative Action)의 절차를 참조한다. TVOC를 수동으로 계산하려면 각 물질에 대해 Toluene 변환을 사용한 계산 값, 총계 계산, 필요한 경우 정확한 정량값 계산이 필요하기 때문에 상당히 많은 노력이 필요하다. 그러나 TVOC Calculation Tool을 사용하면 계산을 빠르고 쉽게 수행할 수 있다. 또한 이 프로그램은 사용자가 지정한 개별 물질에 대한 정확한 정량값을 계산할 수 있다. 본 뉴스레터에서는 VOCs 분석 시 용매추출이 필요 없는 효율적인 열탈착 가스 크로마토그래프/질량분석기(TD-GC/MS) 시스템으로 분석결과 데이터 분석을 통해 실험실 공기 시료에서 검출된 TVOC를 쉽게 계산해주는 TVOC Calculation Tool 사용에 대해 설명한다.

### ■ TVOC Calculation Tool

TVOC Calculation Tool를 사용하여 검출된 정성 결과를 가져와 Toluene 변환 값을 자동으로 계산하고 보고서를 출력할 수 있다. 또한 용도에 따라 다음 [1]과 [2]를 전환하는 것만으로 농도를 재계산할 수 있다. 사용 방법에 대한 자세한 내용은 위 오른쪽 링크를 통해 확인 가능하다.

- 1 검출된 모든 물질은 Toluene 변환을 이용하여 정량한다.
- 2 표적 물질을 정확하게 정량하고, Toluene 변환을 이용하여 검출된 다른 물질을 정량하고 계산한다.

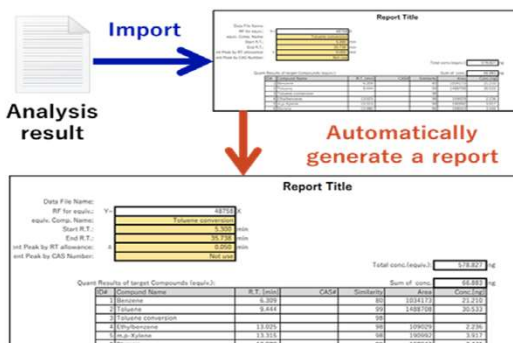


그림 1. TVOC Calculation Tool

### ■ 실험

본 뉴스레터에서는 표준 Toluene 시료 외에 Benzene, Ethylbenzene, *m,p,o*-Xylene, 1,4-Dichlorobenzene, Tetradecane 혼합 표준시료를 Methanol로 희석해 4 ppm, 10 ppm, 40 ppm, 100 ppm, 400 ppm 농도가 되도록 조제하여 검량선을 작성한다. 제조된 혼합표준시료는 TENAX-TA 흡착관에 1 μL씩 주입하여 분석하였다. 또한 100 ppm 농도의 Hexane과 Hexadecane의 혼합 표준시료를 사용하여 분석하였으며, 실제 시료의 경우 실험실 A의 공기를 분당 100 mL의 속도로 30분간 채취하였다. 수집 방법은 그림 2와 같으며, 분석 조건은 표 1과 같다.

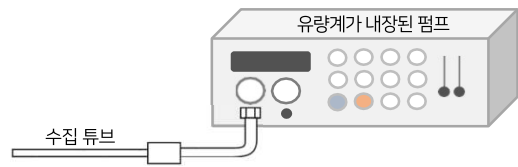


그림 2. 대기수집 방법

표 1. 분석 조건

Model	: GCMS-QP2020 NX
Autosampler	: TD-30R
[TD-30R]	
Tube Desorb Temp.	: 280 °C (10 min)
Tube Desorb Flow	: 60 mL/min
Trap Cooling Temp.	: -20 °C
Trap Desorb Temp.	: 280 °C (10 min)
Joint Temp.	: 250 °C
Valve Temp.	: 250 °C
Transfer Line Temp.	: 250 °C
[GC]	
Injection Mode	: Split
Split Ratio	: 10
Carrier Gas	: He
Carrier Gas Control	: Linear velocity (30 cm/min)
Column	: SH-I-1MS (P/N 227-36005-02) (60 m × 0.25 mm I.D., 0.25 μm)
Column Temp.	: 40 °C (5 min) - 5 °C/min - 250 °C (5 min)
[MS]	
Ion Source Temp.	: 200 °C
Interface Temp.	: 280 °C
Acquisition Mode	: Scan
Event Time	: 0.3 sec
m/z Range	: m/z = 35-350



### ■ TVOC 계산 (Toluene Conversion and Precise Quantitation)

그림 4는 실제 시료에 대한 TIC 크로마토그램을 나타낸다. 여기서 검출된 피크 중 Hexane(C<sub>6</sub>)과 Hexadecane(C<sub>16</sub>) 사이에 나온 피크는 VOC로 정의되며, 이 피크들을 사용하여 TVOC를 계산한다. 피크 적분 및 정성 분석 후 얻은 결과를 TVOC 계산 도구로 읽어 들었다. 이후 모든 피크의 농도에 대한 총 값을 자동으로 계산하여 그림 5(2)와 같이 TVOC 값이 표시되었다. 또한 각 피크를 Toluene 환산을 이용하여 구한 농도는 그림 5(3) 및 (4)와 같이 개별적으로 계산하여 그대로 보고서로 출력할 수 있어 효율성을 높인다. 예를 들어, (4)에서는 검출된 화합물 중 일부만 표시된다.

또한 그림 5(1)와 같이 [Show Result of equiv.](Toluene 환산 정량) 또는 [Show Result of precise quant](정밀 정량) 중 하나를 선택할 수 있다. 그림 6(3)에 나타낸 것과 같이 [Show Result of precise quant]를 선택하면 검량선을 생성하기 위해 측정된 표적 물질들 (Benzene, Toluene, Ethylbenzene, *m,p,o*-Xylene, Styrene, 1,4-Dichlorobenzene, Tetradecane)에 대한 정밀한 정량 값을 계산하기 위해 재계산을 수행한다. 분석 목적에 맞게 Toluene 변환을 이용한 정량과 정밀 정량을 클릭 한번으로 전환할 수 있다.

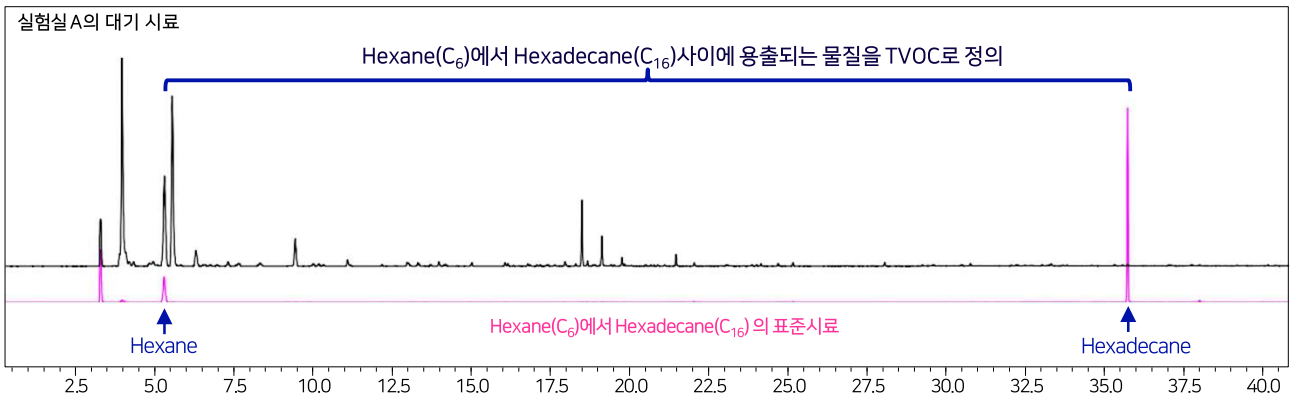


그림 4. Hexane/Hexadecane과 실험실 A에서 포함한 대기의 분석 결과 크로마토그램

피크 적분 및 정성 분석 후 Toluene 변환 프로그램으로 불러오기

(1)

Display mode: **Show Result of equiv.** Language: English RF for equiv.: Auto

Report Title

Data File Name: Data File.cdg

RF for equiv.: Y= 48758 X

equiv. Comp. Name: Toluene conversion

Start R.T.: 5.300 min

End R.T.: 35.738 min

Ident Peak by RT allowance: ± 0.050 min

Ident Peak by CAS Number: Not use

Total conc.(equiv.) 578.827 ng

Quant Results of target Compounds (equiv.): Sum of conc. 66.883 ng

ID#	Compound Name	R.T. [min]	CAS#	Similarity	Area	Conc.[ng]
1	Benzene	6.309		80	1034173	21.210
2	Toluene	9.444		99	1488708	30.533
3	Toluene conversion			98		
4	Ethylbenzene	13.025		98	109029	2.236
5	<i>m,p,o</i> -Xylene	13.315		98	190992	3.917
6	Styrene	13.980		96	168043	3.446
7	<i>o</i> -Xylene	14.169		93	108271	2.221
8	Benzene, 1,4-dichloro-	18.303		97	76143	1.562
9	Tetradecane	30.772		95	85709	1.758

Quant Results of TIC peaks (equiv.): Sum of conc. 511.944 ng

No	Compound Name	R.T. [min]	CAS#	Similarity	Area	Conc.[ng]
10	n-Hexane	5.312	110-54-3	91	6415428	131.577
11	Tetrahydrofuran	5.559	109-99-9	98	10097733	207.099
12	Cyclopentane, methyl-	5.830	96-37-7	89	58213	1.194
14	Cyclohexane	6.575	110-82-7	91	156421	3.208
15	Hexane, 2-methyl-	6.764	591-76-4	91	77825	1.596
16	Hexane, 3-methyl-	6.969	589-34-4	91	74181	1.521
17	Pentane, 2,2,4-trimethyl-	7.320	540-84-1	97	226002	4.635
18	Cyclopropanecarboxylic acid, methyl e	7.575	2868-37-3	74	42673	0.875
19	Heptane	7.664	142-82-5	95	215743	4.425

그림 5. 검출된 모든 물질에 대해 Toluene 변환을 이용한 정량

표준품을 측정하여 표적 물질의 검량선을 생성하여 정밀하게 정량

(1)

Report Title

Data File Name: DataFile.qdg

RF for equiv.: Y= 48758 X

equiv. Comp. Name: Toluene conversion

Start R.T.: 5.300 min

End R.T.: 35.738 min

Quant Peak by RT allowance: ± 0.050 min

Quant Peak by CAS Number: Not use

Total conc.: 570.609 ng

Sum of conc.: 58.665 ng

ID#	Compound Name	R.T. [min]	CAS#	Similarity	Area	Conc.[ng]
1	Benzene	6.315		80	336092	15.037
2	Toluene	9.444		99	613756	30.732
3	Toluene conversion	9.444		98	1529299	---
4	Ethylbenzene	12.982		98	30408	3.334
5	m,p-Xylene	13.315		98	65966	1.811
6	Styrene	13.983		96	54831	3.114
7	o-Xylene	14.170		93	13702	1.254
8	Benzene, 1,4-dichloro-	18.303		97	22147	2.139
9	Tetradecane	30.772		95	8091	1.243

Quant Results of TIC peaks (equiv.):

No	Compound Name	R.T. [min]	CAS#	Similarity	Area	Conc.[ng]
10	n-Hexane	5.312	110-54-3	91	6415428	131.577
11	Tetrahydrofuran	5.559	109-99-9	98	10097733	207.099
12	Cyclopentane, methyl-	5.830	96-37-7	89	58213	1.194
14	Cyclohexane	6.575	110-82-7	91	156421	3.208
15	Hexane, 2-methyl-	6.764	591-76-4	91	77825	1.596
16	Hexane, 3-methyl-	6.969	589-34-4	91	74181	1.521
17	Pentane, 2,2,4-trimethyl-	7.320	540-84-1	97	226002	4.635
18	Cyclopropanecarboxylic acid, methyl e	7.575	2868-37-3	74	42673	0.875
19	Heptane	7.664	142-82-5	95	215743	4.425

그림 6. Toluene 변환을 이용한 표적 물질의 정밀 정량 및 표적 물질 외 기타 검출 물질의 정량

■ 결론

본 뉴스레터에서는 TD-30R + GCMS QP2020 NX 를 사용하여 실험실 대기중에서 TVOC 를 측정하고 결과값을 Calculation Tool 에 적용하여 TVOC를 계산하는 간단히 계산하는 방법을 소개하였다. 표준품을 측정하여 만든 표적 물질의 검량선으로 얻은 정확한 정량값을 클릭 한 번으로 계산할 수 있어 효율성을 높일 수 있다. TVOC Calculation Tool는 TVOC 계산과 보고서 생성을 자동화하여 생산성을 높여준다.



그림 7. TD-30R + GCMS-QP2020 NX