การแยกและตรวจวัดสารอินทรีย์ระเหยง่ายที่ประสานด้วย 3 เทคโนโลยี Gas Chromatography-Mass Spectrometry-Ion Mobility Spectrometry

ผู้จัดทำ : รติมาศ บุญล้อม

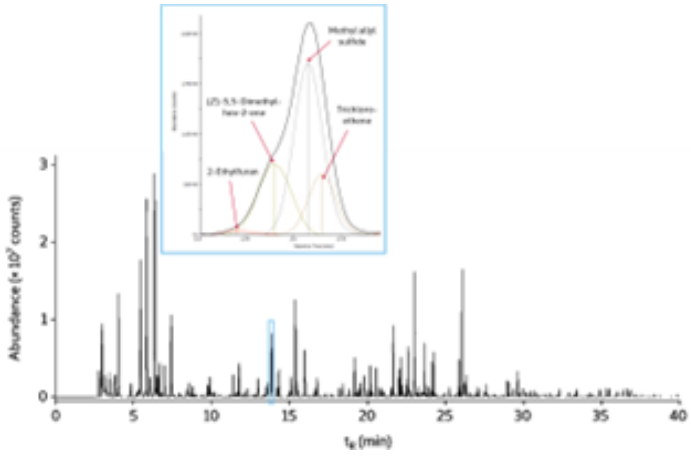
บทนำ

สารอินทรีย์ระเหยง่าย (Volatile Organic Compounds; VOCs) คือกลุ่มสารที่สามารถระเหยเป็นไอได้ง่าย พบได้ทั่วไปในชีวิตประจำวัน เช่น สารให้กลิ่นในอาหารและเครื่องดื่ม ตัวทำละลายในสี สารให้กลิ่นในสินค้าอุปโภคบริโภค ตลอดจนสารที่ถูกปลดปล่อยจากกระบวนการผลิตในโรงงานอุตสาหกรรม ทั้งที่มีกลิ่นและไม่มีกลิ่น ซึ่งล้วนจัดอยู่ในกลุ่ม VOCs ทั้งสิ้น สารเหล่านี้มีทั้งประโยชน์และโทษแตกต่างกันไป จึงจำเป็นต้องมีการตรวจวัดเพื่อศึกษาปริมาณ ความแตกต่างขององค์ประกอบ และควบคุมระดับในกรณีที่เป็นสารอันตราย

อย่างไรก็ตาม ความท้าทายของการตรวจวัด VOCs คือความหลากหลายและความซับซ้อนของสารในกลุ่มนี้ เนื่องจากมีหลายชนิด ทำให้การตรวจวัดพร้อมกันในครั้งเดียวทำได้ยาก จึงมีการพัฒนาเทคนิคการวิเคราะห์ที่หลากหลาย โดยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี (Gas Chromatography; GC) เป็นหนึ่งในวิธีที่เหมาะสมสำหรับการตรวจวัด VOCs เนื่องจากเป็นเทคนิคการแยกสารผสมในสถานะแก๊ส ซึ่งสอดคล้องกับคุณสมบัติของ VOCs ที่ระเหยง่ายและมักพบหลายชนิดในตัวอย่างเดียว

นอกจากเทคนิค GC ที่ใช้แยกสาร VOCs แล้ว เทคนิคที่นิยมใช้ร่วมกันอย่างแพร่หลายคือ แมสสเปคโตรมิตรี (Mass Spectrometry; MS) ซึ่งเป็นเทคนิคที่ตรวจวัดอัตราส่วนมวลต่อประจุ (mass-to-charge ratio; m/z) ที่มีความจำเพาะต่อสารแต่ละชนิด ทำให้สามารถระบุชนิดของสาร VOCs ได้ นอกเหนือจากการแยกสารผสม ดังนั้น เทคนิค GC-MS จึงเป็นวิธีที่ได้รับความนิยมในการวิเคราะห์ VOCs ทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ

อย่างไรก็ตาม GC-MS ยังมีข้อจำกัดบางประการที่อาจทำให้ไม่สามารถครอบคลุมสาร VOCs ได้ทั้งหมด เช่น สารในกลุ่มที่มีความระเหยสูงมาก (Very Volatile Organic Compounds; VVOCs) หรือสารที่มีขั้วสูง (polar compounds) ซึ่งการตรวจวัดด้วย GC-MS อาจครอบคลุมได้ไม่สมบูรณ์ นอกจากนี้ ในกรณีที่เป็นสาร VOCs ผสมที่มีจำนวนชนิดมาก การวิเคราะห์ด้วย GC-MS อาจไม่สามารถแยกสารออกจากกันได้อย่างมีประสิทธิภาพ ส่งผลให้การยืนยันชนิดของสารทำได้ยากยิ่งขึ้น ดังตัวอย่างโครมาโทแกรมที่แสดงในรูปที่ 1



รูปที่ 1 โครมาโทแกรมแสดงการวิเคราะห์สาร VOCs ด้วย GC-MS

จากรูปที่ 1 จะเห็นว่าการแยกสารผสม VOCs ด้วย GC เพียงอย่างเดียวอาจไม่เพียงพอในการแยกสารทั้งหมดออกจากกันได้อย่างสมบูรณ์ก่อนการตรวจวัดด้วย MS ดังนั้น การระบุชนิดของสารโดยอาศัยค่า m/z ที่จำเพาะ อาจเกิดความคลาดเคลื่อนได้ เนื่องจากการซ้อนทับของสัญญาณ m/z จากสารหลายชนิด ส่งผลให้ยากต่อการระบุชนิดและจำแนกความแตกต่างของตัวอย่าง

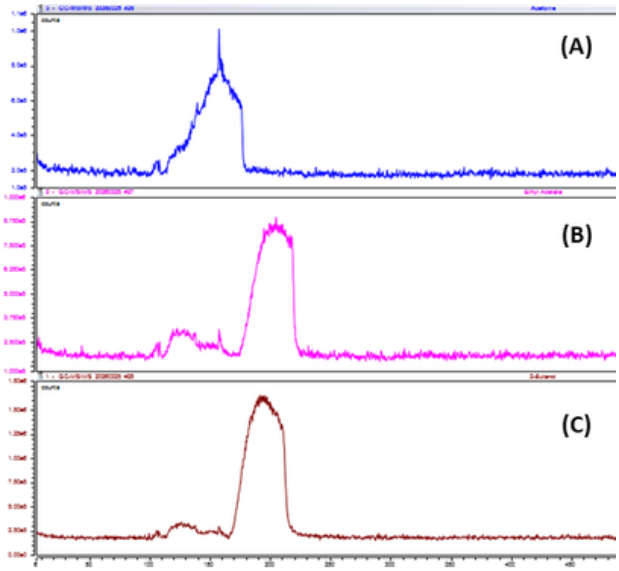
ดังนั้น การเพิ่มประสิทธิภาพในการแยกสารจึงมีความสำคัญ เนื่องจากช่วยเพิ่มความถูกต้องและความน่าเชื่อถือของผลการวิเคราะห์ หนึ่งในเทคนิคที่สามารถนำมาใช้เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการแยกสาร คือ เทคนิคไอออนโมบิลลิตี้สเปคโตรมิตรี (Ion Mobility Spectrometry; IMS) ซึ่งเป็นเทคนิคที่ใช้แยกไอออนของสารผสม โดยทำงานต่อเนื่องจากเทคนิค GC ทำให้เกิดระบบการแยกแบบสองมิติ และช่วยให้การแยกสารมีความสมบูรณ์มากยิ่งขึ้น

ในบทความนี้ ได้ทำการทดสอบการวิเคราะห์สาร VOCs ด้วยเทคนิค GC-MS-IMS เพื่อประเมินประสิทธิภาพของระบบในหลายด้าน ได้แก่ ความไวในการวิเคราะห์ ความสามารถในการแยกและระบุชนิดของสาร ตลอดจนการประยุกต์ใช้ผลการวิเคราะห์ในรูปแบบลักษณะเฉพาะ (fingerprint) ของตัวอย่างแต่ละชนิด เพื่อใช้ในการจำแนกแหล่งที่มา หรือประเมินคุณภาพของตัวอย่าง

การตรวจวัดสารที่มีขั้วสูงและสาร VVOCs

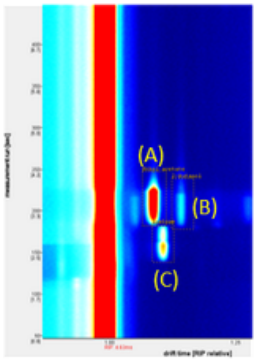
สารอะซิโตน (Acetone) และเอทิลอะซิเตท (Ethyl acetate) ถูกเลือกใช้เป็นสารตัวแทนในการทดสอบ โดยอะซิโตนเป็นสารที่มีขั้วสูง พบได้ทั่วไปในอุตสาหกรรมและสินค้าอุปโภคบริโภค รวมถึงสามารถพบได้ในสารคัดหลั่งของร่างกาย เช่น เลือด ปัสสาวะ และลมหายใจของมนุษย์ ขณะที่เอทิลอะซิเตทเป็นสารที่พบได้ในผลไม้หลายชนิด และมีการใช้งานอย่างแพร่หลายในอุตสาหกรรมเช่นกัน

สารทั้งสองชนิดนี้สามารถพบได้ในช่วงความเข้มข้นที่แตกต่างกัน หากมีเพียงสองสารผสมกัน GC สามารถแยกสารทั้งสองออกจากกันได้อย่างสมบูรณ์ อย่างไรก็ตาม เมื่อมีสารอื่นร่วมอยู่ในตัวอย่าง เช่น 2-butanol อาจทำให้เกิดการซ้อนทับของพีคได้ ดังแสดงในรูปที่ 2 ซึ่งเอทิลอะซิเตทและ 2-butanol ให้สัญญาณที่เวลา retention time เดียวกันบน GC



รูปที่ 2 โครมาโทแกรมจากการวิเคราะห์ด้วย GC-MS แสดงตำแหน่ง Retention Time (RT) ของสารอะซิโตน (A), เอทิลอะซิเตท (B) และ 2-บิวทานอล (C)

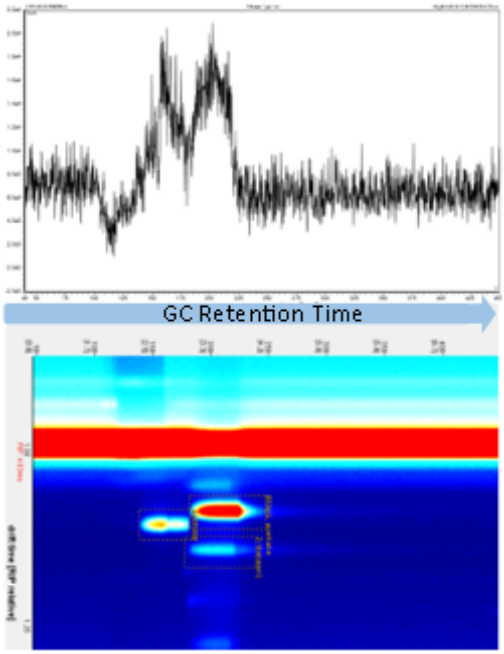
อย่างไรก็ตาม เมื่อใช้เทคนิค GC-IMS ในการวิเคราะห์ พบว่าสามารถแยกสารเอทิลอะซิเตทและ 2-บิวทานอลออกจากกันได้อย่างชัดเจน ดังแสดงในรูปที่ 3



รูปที่ 3 GC-IMS Topographic plot แสดงจุดตำแหน่งการแยกสารอะซิโตน (A), เอทิลอะซิเตท (B) และ 2-บิวทานอล (C)

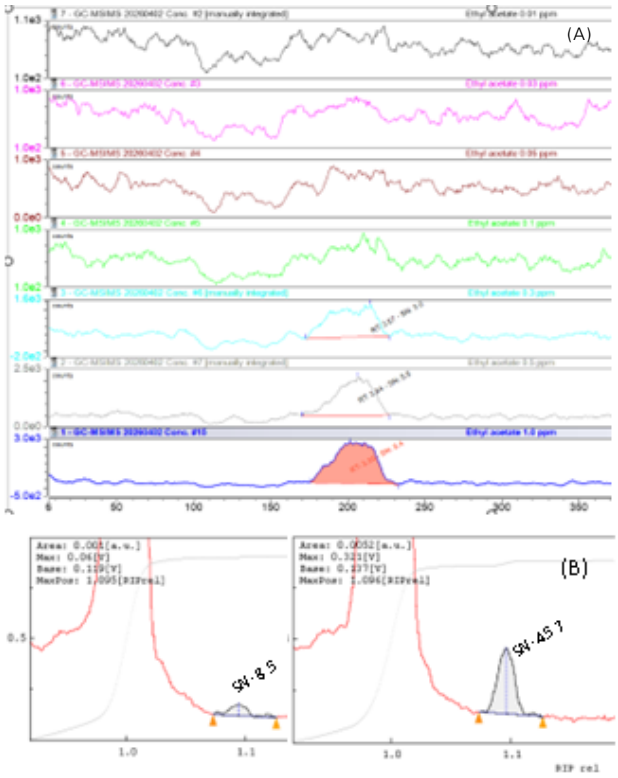
เมื่อเปรียบเทียบผลการแยกสารอะซิโตน เอทิลอะซิเตท และ 2-บิวทานอล ด้วยเทคนิค GC-MS/IMS ดังแสดงในรูปที่ 6 พบว่าผลการวิเคราะห์จาก GC-IMS ช่วยให้เห็นว่าพีกที่ปรากฏใน GC-MS มีการซ้อนทับของสารสองชนิด

ดังนั้น ในขั้นตอนการระบุชนิดของสารด้วยค่า m/z จึงสามารถทำได้ง่ายและมีความถูกต้องมากยิ่งขึ้น เนื่องจากมีข้อมูลจาก GC-IMS มาใช้ประกอบในการประมวลผล



รูปที่ 4 โครมาโทแกรมแสดงการแยกสารเปรียบเทียบระหว่าง GC/MS (บน)และ GC-IMS (ล่าง)

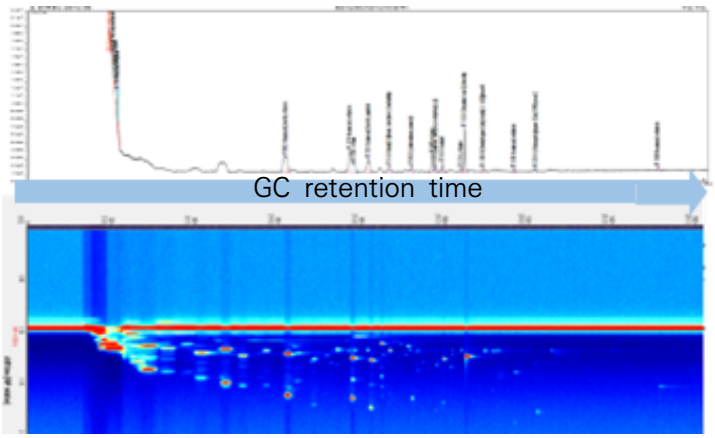
การเปรียบเทียบความไวในการตรวจวัด (Sensitivity) ดำเนินการโดยวิเคราะห์สารเอทิลอะซิเตทในช่วงความเข้มข้น 0.01–1.0 ppm ด้วยการเตรียมตัวอย่างแบบเฮดสเปซ (Headspace; HS) พบว่าการตรวจวัดด้วย GC-MS สามารถเริ่มตรวจวัดได้ที่ความเข้มข้น 0.3 ppm โดยมีค่า Signal-to-Noise ratio (S/N) เท่ากับ 3.0 ขณะที่การตรวจวัดด้วย GC-IMS สามารถเริ่มตรวจวัดได้ที่ความเข้มข้น 0.05 ppm โดยให้ค่า S/N เท่ากับ 8.5 ดังแสดงในรูปที่ 5 ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่า ตัวตรวจวัดชนิด IMS มีความไวในการตรวจวัดสาร VOCs ในระดับความเข้มข้นต่ำได้ดีกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับ MS



รูปที่ 6 แสดงค่า Signal-to-Noise ratio (S/N) ของการตรวจวัดสารเอทิลอะซิเตทในช่วงความเข้มข้น 0.3–1.0 ppm ด้วย GC-MS (A) และการตรวจวัดด้วย GC-IMS (B) ที่ความเข้มข้น 0.05 ppm (ซ้าย) และ 0.3 ppm (ขวา)

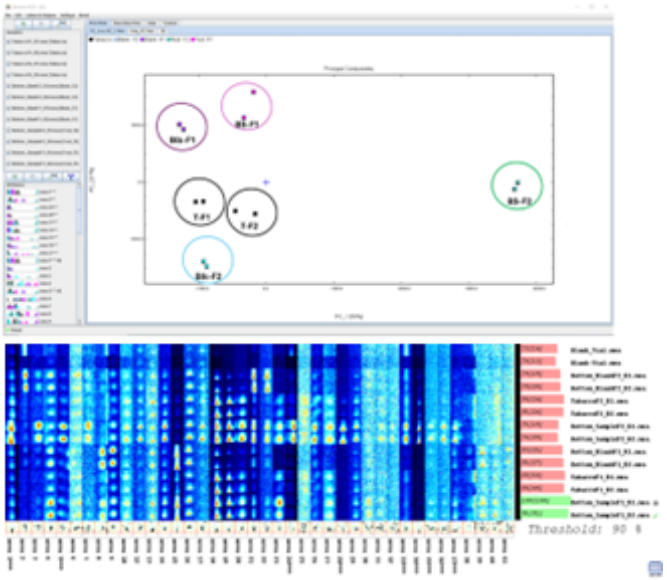
จากผลการทดสอบดังกล่าว แสดงให้เห็นว่าการผสานเทคนิค GC-MS-IMS เพื่อใช้ในการวิเคราะห์สาร VOCs สามารถเพิ่มประสิทธิภาพทั้งในด้านการแยกสารและความไวในการตรวจวัดได้อย่างมีนัยสำคัญ นอกจากนี้ เมื่อนำไปประยุกต์ใช้กับตัวอย่างจริง พบว่าสาร VOCs บางชนิดที่มีความเข้มข้นต่ำ หรือไม่สามารถตรวจวัดได้ด้วย MS เพียงอย่างเดียว สามารถตรวจวัดได้ด้วย IMS แทน

การผสานเทคนิคดังกล่าวจึงช่วยยกระดับศักยภาพของการวิเคราะห์ VOCs ทั้งในด้านประสิทธิภาพและขีดความสามารถของเครื่องมือ ดังแสดงในรูปที่ 7 ซึ่งแสดงผลการวิเคราะห์และการระบุชนิดของสารด้วย GC-MS ควบคู่กับการสร้างรูปแบบลักษณะเฉพาะ (profile) ของสาร VOCs ในตัวอย่างชาดอกไม้ โดยพบว่าสาร VOCs กลุ่มแรก ซึ่งคาดว่าเป็นสารในกลุ่ม VVOCs ไม่สามารถตรวจวัดได้ด้วย GC-IMS อาจเนื่องมาจากความเข้มข้นของสารไม่เพียงพอ อย่างไรก็ตาม ข้อมูลจาก GC-IMS สามารถใช้เป็นแนวทางในการวางแผนเพิ่มความเข้มข้นของตัวอย่างก่อนการวิเคราะห์ เพื่อให้ได้ผลการวิเคราะห์ที่สมบูรณ์ยิ่งขึ้น



รูปที่ 7 โครมาโทแกรมเปรียบเทียบการวิเคราะห์ชาดอกไม้ด้วยเทคนิค GC-MS และ GC-IMS ด้วยการวิเคราะห์ในคราวเดียวกัน

ผลการวิเคราะห์จาก GC-IMS นอกจากการพิจารณาสารรายชนิดแล้ว ยังสามารถนำข้อมูลมาแสดงในรูปแบบของ compound profile เพื่อใช้เปรียบเทียบความแตกต่างระหว่างตัวอย่าง สำหรับการจำแนกชนิด แหล่งที่มา หรือการจัดกลุ่มตัวอย่างเพิ่มเติมได้ ทั้งในรูปแบบของ PCA หรือการเปรียบเทียบเป็น %Match ดังแสดงในรูปที่ 8 ซึ่งสามารถประยุกต์ใช้ในการควบคุมคุณภาพของวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์ได้



รูปที่ 8 การนำข้อมูลจาก GC-IMS มาศึกษาความสัมพันธ์ในรูปแบบของ PCA หรือการดู %Match เพื่อจำแนกกลุ่มตัวอย่าง หรือควบคุมคุณภาพ

SciSpec
บริษัท ซายน์ สเปค จำกัด
10 ซอยกาญจนาภิเษก 0010 แยกสอง
เขตบางแค กทม. 10160
โทร 02 454 8533
thermo scientific
Authorized Distributor
scispec @scispec www.scispec.co.th