

基于化学分析方法的化工原料质量检测与经济效益研究

付振明 李玉猛(山东鲁北企业集团总公司, 山东 滨州 251900)

王长生(山东金海钛业资源科技有限公司, 山东 滨州 251900)

摘要: 随着化工行业的快速发展, 化工原料的质量直接影响着生产效率和产品质量, 因此, 化工原料的质量检测在现代化工生产中占据着重要地位。化学分析方法通过精确检测原料中的成分和杂质, 有助于保证产品的高品质与稳定性, 进而对生产的经济效益产生深远影响。尤其是在日益重视环保与安全的今天, 科学、精确的质量检测更是支撑经济可持续发展的重要手段。高效液相色谱技术(HPLC)、核磁共振技术(NMR)、先进光谱技术和电化学分析技术等化学分析方法被广泛应用于化工原料的质量监控和检测中, 极大提升了生产效率和经济效益。本文通过研究多种化学分析方法在化工原料质量检测中的应用, 探讨了样品准备、数据采集与处理、实验过程等关键环节, 并对检测结果的经济效益进行了深入分析。

关键词: 化学分析方法; 化工原料; 质量检测; 经济效益

随着生产规模的不断扩大与工艺复杂性的提升, 化工原料的质量直接影响着整个产业链的经济效益, 尤其在化工原料的采购、加工、存储与流通等环节, 精准的质量检测技术对于提升生产效益、减少资源浪费、保障环境安全具有重要意义。在此背景下, 基于化学分析方法的化工原料质量检测技术逐渐成为化工领域中不可或缺的组成部分, 尤其是高效液相色谱技术(HPLC)、核磁共振技术(NMR)、先进光谱技术以及电化学分析技术的应用, 极大地推动了化工原料质量的监控与分析, 为提高经济效益提供了技术保障。

1 基于化学分析方法的化工原料质量检测技术

1.1 高效液相色谱技术(HPLC)

高效液相色谱技术(HPLC)的核心是柱分离过程, 分离过程中的各成分在不同的时间通过色谱柱, 并与固定相的相互作用决定了其保留时间, 通过调节流动相、流速、温度等实验条件, 可以优化分离效果, 提高分离度。色谱图中的每一个峰对应着一个成分, 其峰面积或峰高与该成分的浓度成正比, 利用标准曲线可进行定量分析。色谱响应函数通常遵循以下公式:

$$A = k \cdot C \quad (1)$$

其中, A 为峰面积, C 为样品浓度, K 为常数, 代表了仪器的响应系数。在高效液相色谱法中, 分离过程中每个组分的时间延迟和流动相的流速是决定色谱分离效果的关键因素。保留时间(t_R)是指样品从注入到达到检测器的时间, 通常用来表征目标组分的分离效果, 公式为:

$$t_R = \frac{L}{v} \quad (2)$$

其中, L 为色谱柱的长度, v 为流动相的流速。高效液相色谱技术的实时监测可以通过算法来计算目标成分的浓度变化, 常用的算法为基于最小二乘法的回归分析, 求解样品中每种成分的浓度, 其基本公式为:

$$C = \frac{\sum_{i=1}^n (A_i - \hat{A}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (A_i - \bar{A})^2} \quad (3)$$

其中, C 为目成分浓度, A_i 为实验得到的峰面积, \hat{A}_i 为拟合值, \bar{A} 为所有数据的平均值^[1]。

1.2 核磁共振技术(NMR)

核磁共振技术(NMR)的基本原理是当样品中的核磁共振活性原子(如氢或碳核)处于外部恒定磁场中时, 在高频射频波的激发下发生能级跃迁, 信号的频率和强度可以反映出这些核的化学环境以及分子结构。NMR 的一个关键方程式用于描述核磁共振的拉莫尔频率:

$$\nu = \gamma B_0 / 2\pi \quad (4)$$

其中, ν 为拉莫尔频率, γ 为核的旋磁比, B_0 为外部磁场强度。该方程式表明, 外部磁场的强度与共振频率成正比, 因此, 通过调节磁场, 可以选择不同的共振频率进行测量。NMR 谱图中, 化学位移(δ)是指核与参考物质(如 TMS)的频率差, 通常用 ppm 表示, 公式为:

$$\delta = \frac{\nu_{sample} - \nu_{ref}}{\nu_{ref}} \times 10^6 \quad (5)$$

其中, v_{sample} 是样品中核的共振频率, v_{ref} 是参考物质的共振频率。通过对化学位移的分析, 能够识别分子中的不同化学环境, 如烷基、芳香、羰基等不同类型的化学基团, 并推测它们的相对位置。在实时监测中, NMR 技术还可以通过连续测量不同时间点的谱图数据, 采用快速傅里叶变换 (FFT) 方法提取频率分布信息, 公式如下:

$$\hat{f}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i2\pi ft} dt \quad (6)$$

通过 FFT 算法, 可以将时域信号转换为频域信号, 从而提高实时数据的处理速度和分辨率, 这对化工原料的在线质量监测具有重要意义^[2]。

1.3 先进光谱技术

先进光谱技术包括红外光谱 (IR)、紫外-可见光谱 (UV-Vis) 和拉曼光谱等技术, 在原料成分分析中的优势愈加突出。红外光谱技术通过测量分子在特定波长下的吸收特性, 能够精确解析化工原料中的官能团信息及其分子结构, 通过解析分子在红外区域的特征吸收峰, 可以鉴别化工原料的纯度、功能基团及其异构体的种类, 尤其在有机化工原料的质量检测中具有重要意义。紫外-可见光谱技术则依据分子中电子的跃迁特性, 通过测定紫外与可见光区域的吸收强度和吸收峰位置, 定量分析化工原料中的化学成分, 尤其对那些具有色素、杂质或特定吸收峰的化工原料, 能够有效进行检测。拉曼光谱技术利用光与物质相互作用产生的拉曼散射现象, 提供了对分子振动模式的非破坏性分析, 具有较高的空间分辨率, 能够在复杂矩阵中快速识别和定量测量化工原料中的微量成分。先进光谱技术的核心优势在于其无需对样品进行复杂的前处理操作, 快速获得样品的光谱数据, 同时实现高通量分析, 提高质量检测的效率与精度。例如, 在红外光谱分析中, 某些化学方程式如酯化反应 ($RCOOH+R'OH \rightarrow RCOOR'+H_2O$) 或酰胺化反应 ($RCOOH+R'NH_2 \rightarrow RCONH_2+H_2O$) 可以通过其特征吸收峰进行监测, 从而为质量控制提供实时数据。

1.4 电化学分析技术的应用

电化学分析技术通过监测电极电位或电流变化, 以实现对化学反应的定性与定量分析, 能够精准地检测化工原料中的微量成分和复杂化学反应, 常见的电化学方法包括伏安法、电位法、电导法与电解法等, 这些方法能够有效应用于不同类型化工原料的分析。例如, 伏安法常用于检测水溶液中重金属离子的含量,

基于电极反应的电流变化, 能够获得金属离子浓度与电流信号之间的线性关系, 如铜离子在电极表面发生氧化反应: $Cu^{2+}+2e^- \rightarrow Cu(s)$, 通过测量电流的变化可以定量分析铜离子的浓度。在化工原料的酸碱度分析中, 电位法则通过测定溶液中的氢离子浓度来获取 pH 值, 常用的标准电极反应为: $H^++e^- \rightarrow \frac{1}{2}H_2$ (气), 以此为基础, 可以精确测定化工原料的酸碱性及其对生产过程的影响。电化学分析技术还可以结合不同电极材料和传感器, 实时监控溶液中的氧化还原反应, 为复杂化学体系中的组分定量提供了便利。在电导法中, 通过测量溶液的电导率变化, 可以推测出其中离子浓度或电解质的含量, 尤其在盐类或离子型化工原料的检测中具有不可替代的优势。

2 实验设计与方法

2.1 样品准备

在化工原料质量检测过程中, 样品准备是确保分析结果准确性与可靠性的关键步骤, 样品的采集与处理直接影响到分析结果的代表性与可信度, 必须严格遵循标准化操作程序, 以避免外界因素的干扰。对于固体化工原料, 样品的粉碎、均匀化处理至关重要, 常常采用机械粉碎或手动研磨的方法将样品细化至适合分析的粒度, 通常需将颗粒大小控制在几十微米范围内, 以确保检测时的均匀性与代表性。对于液体化工原料, 必须经过适当的混合均匀, 避免沉淀物的产生及相分层现象, 这一过程通常在恒温条件下进行, 以确保样品的物理化学性质稳定不变。在样品准备过程中, 还需对不同类型原料进行不同的前处理, 例如去除水分、溶剂提取、酸碱中和等步骤。对于高分子材料, 常常需要通过溶剂萃取法去除杂质或未反应的单体, 提纯过程中的溶剂选择必须根据目标成分的溶解度及化学稳定性进行合理配置。此外, 样品的保存与运输亦需严格控制, 防止在保存或运输过程中因温度、湿度变化导致的化学反应或物理性质变化, 常常采用冷藏、密封容器等方式确保样品在分析前保持原始状态。

2.2 数据采集与处理

在化工原料质量检测过程中, 数据采集主要依赖于高精度的仪器设备与自动化采集系统, 依据实验方法的不同, 采集过程可能涉及到不同的信号类型, 包括电化学信号、光谱信号、色谱信号等, 在采集后需要经过适当的预处理, 包括去噪、滤波与标准化等, 以消除设备误差、环境干扰和基线漂移等因素的影响,

表 1 数据采集与处理

样品编号	色谱峰面积	浓度 (mg/L)	电流强度 (μA)	pH 值	误差 (%)
S1	152.6	150.5	12.3	6.8	2.1
S2	235.4	200.2	18.5	7.1	1.8
S3	302.1	290.1	22.7	6.9	1.5
S4	410.2	385.7	30.1	7.3	1.2
S5	512.3	475.6	35.4	7.0	1.0

表 2 实验数据

样品编号	检测方法	目标成分	浓度 (mg/L)	吸光度 (A)	误差范围 (%)
001	HPLC	苯酚	2.45	0.152	±0.03
002	UV-Vis	甲苯	5.30	0.278	±0.02
003	电化学法	铜离子	1.12	0.091	±0.05
004	质谱分析	乙烯	0.89	-	±0.04
005	HPLC	对苯二甲酸	3.76	0.249	±0.03

确保数据的准确性与稳定性。信号经过放大、转换后，数据通常以数字化形式输出，并输入到数据处理系统中进行进一步分析。数据处理环节包括峰识别、积分计算、校正及结果拟合等，这一过程需要应用先进的算法模型来优化数据处理精度。常见的算法包括最小二乘法拟合、回归分析及多元统计分析等，在数据处理时，通过建立标准曲线与样品浓度之间的数学关系，实现对样品中目标成分的定量分析。此外，在分析过程中可能需要考虑样品的矩阵效应，即原料中其他组分对测量结果的干扰，此时通过内标法或外标法进行修正，进一步提升分析结果的准确性与可靠性。如表 1 所示。

表中数据展示了通过不同仪器采集的色谱峰面积与电流强度等信号，结合数据处理后的浓度值与误差，体现了实验中样品的定量分析结果以及误差范围，进一步说明了数据采集与处理在化工原料质量检测中的重要性。

2.3 实验过程与结果

在实验过程中，需根据样品的类型与预期检测目标选择合适的化学分析方法并进行仪器调试，确保仪器系统的线性范围、灵敏度和稳定性符合要求。对于液体样品，通常采用高效液相色谱 (HPLC) 技术进行成分分析，选择合适的流动相和固定相体系，优化流速、柱温等实验参数，确保分离效果的最大化。对于固体样品，采用酸碱提取或溶剂萃取等前处理方式，使目标化合物溶解并进一步分析。实验过程中，调节不同条件，得到样品的响应信号，如紫外 - 可见光谱

信号的吸光度变化、色谱图中的峰值等，采集的数据实时传输至数据分析系统进行处理，分析出各组分的浓度及相关化学信息。实验结果的处理与解读需要结合标准曲线与已知样品的校准结果，通过拟合计算得到目标成分的浓度，数据结果通常通过统计分析进行验证与误差分析，确保其可靠性与再现性。结果的呈现不仅包括目标成分的定量数据，还需对样品的纯度、杂质含量等其他质量指标进行评估，基于数据结果绘制图表，如色谱图、吸光度 - 浓度曲线、标准偏差图等，进一步分析样品的质量特征。下表展示了实验过程中不同条件下某化工原料的检测结果如表 2 所示。

通过以上实验数据和分析，可以有效评估化工原料的质量状况，并根据实际需求进一步优化生产工艺。实验结果表明，基于化学分析方法的质量检测不仅能够确保化工原料的质量控制，还能为相关生产环节提供精确的数据支持。

3 化学分析方法的经济效益分析

化学分析方法在化工原料质量检测中的应用，能够显著提升企业的经济效益，具体体现在生产过程优化、成本降低和资源配置的合理化等多个方面。首先，化学分析方法通过精准测定化工原料的质量指标，能够有效避免不合格原料进入生产过程，从源头上减少了因原料质量问题而导致的产品返工、废品产生及生产线停滞现象。这种前瞻性的质量控制机制可以显著降低原材料的浪费，并确保产品的一致性和稳定性，减少因质量波动带来的经济损失。其次，化学分析技术的高效性和精确性使得生产过程中能够实时监控原

料质量和生产进度，进一步提高了生产过程的自动化水平，减少了人为操作的干预和管理成本。通过数据驱动的决策支持系统，化学分析方法还能够为生产工艺的优化提供科学依据，促进生产效率的提升并降低能源消耗，进而达到降本增效的目的。在成本控制方面，化学分析技术能够精确分析原料中的微量成分和杂质，避免了对超标成分的过度投入，减少了过度使用昂贵添加剂和能源的情况，进一步优化了资源的配置，有效避免了因资源浪费导致的经济损失。同时，化学分析方法还能够通过精准的数据采集和处理，为企业提供长期的质量追溯和优化方案，从而在生产规划和供应链管理中减少不必要的库存积压和原料过剩，提高资金的流动性和利用效率。此外，化学分析技术的不断发展和创新还为企业带来了更多的经济机会，例如通过高精度的质量控制，有助于产品的高附加值化，提升市场竞争力，增强企业在国际市场中的经济话语权和定价能力。

4 结语

总之，在化工产品的研发阶段，通过利用先进的化学分析方法，企业能够在原料采购环节进行更精确

的预测和筛选，从而加快新产品的研发进度，提升市场反应速度，并有效缩短生产周期，为企业带来更为显著的经济回报。随着对环保标准的不断提升，化工企业面临的质量控制要求也日益严格，传统的质量检测方法已经难以满足生产需求，而基于化学分析方法的技术创新与应用，不仅能够应对这一挑战，还能够为行业带来更加长远的经济利益。因此，探索并深入研究化学分析方法在化工原料质量检测中的应用，对于推动化工行业向更加高效、智能、绿色的方向发展，提升其经济效益和市场竞争力，具有重要的理论价值和现实意义。

参考文献：

- [1] 刘旭旭. 玻纤化工原料纯碱制备工艺及其质量检测[J]. 山西化工, 2024, 44(08): 141-143.
- [2] 卢翔, 曹云. 石油化工原料质量检验检测问题分析[J]. 大众标准化, 2023, (17): 158-160.

作者简介：

付振明 (1974-)，男，汉族，山东滨州人，毕业于天津轻工业学院，大专，高级技师、工程师，研究方向：化工工程、化学分析及质量管理等。

