

使用 Agilent 7000E 三重四极杆 GC/MS 分析 US EPA 8270E 方法当中的 半挥发性有机化合物



作者

Eric Fausett, Rachael Ciotti,
Dale Walker
安捷伦科技有限公司

摘要

本应用简报介绍了一种用于在 Agilent 7000E 三重四极杆 GC/MS 系统 (GC/TQ) 上分析半挥发性有机化合物 (SVOCs) 的灵敏方法。使用 GC/TQ 仪器分析 SVOCs 具有显著的优势。多反应监测 (MRM) 模式的出色选择性可消除基质干扰，不仅有利于对数据结果进行快速批量查看，而且提高了分析结果的可靠性。而当使用选择离子监测 (SIM) 或者全扫描模式时，这些干扰通常会带来不利影响。更高的灵敏度有助于减少提取体积，从而提高可持续性、减少浪费并降低与样品前处理、溶剂使用和废物处置相关的成本。本研究的主要目的是展示 GC/TQ 在保持宽动态范围的同时，依然可以检测低浓度 SVOCs，满足实验室的需求。

前言

SVOCs 的分析十分具有挑战性，因为目标分析物种类繁多，包括碱性、中性和酸性物质。这些分析物的分子量和沸点范围很广。美国国家环保局 (US EPA) 在方法 8270E 中发布了通过 GC/TQ 分析这些分析物的法规和指南。分析 SVOCs 的典型样品包括地表水或地下水以及固体样品。样品在分析之前需要进行提取。如果可以提高方法灵敏度，就有机会减少样品和提取物的体积，从而降低成本并提高实验室的可持续性。合适的分析方法还应具有较宽的动态范围，可以减少样品稀释和重新分析需求。

实验部分

样品前处理

2000 µg/mL SVOCs 储备液标样来自安捷伦 (订货号 US201-1)。使用二氯甲烷稀释储备液和工作标样，配制初始校准曲线标样。配制以下 11 个浓度的校准标样：0.005、0.01、0.025、0.05、0.1、0.25、0.5、1、2.5、5 和 10 µg/mL。2000 µg/mL 内标 (ISTD) 溶液也来自安捷伦 (订货号 ISM-560-1)。该溶液包含六个内标：1,4-二氯苯酚-d4、萘-d10、屈-d12、萘-d8、菲-d10 和蒽-d12。稀释该 ISTD 溶液并以 4 µg/mL 的浓度添加到校准样品瓶中。

仪器方法

Agilent 8890 GC 系统和 7693A 自动液体进样器 (ALS) 用于进样。8890 GC 配置分流/不分流 (SSL) 进样口。使用 **Agilent 7000E 三重四极杆质谱仪 (TQ/MS)** 作为检测器。

初始方法参数来自两份安捷伦应用简报^[1,2]。GC 和 MS 方法设置如下表所示。

采用以下关键技术提高了方法成功率：

- 使用 GC/TQ 为低浓度分析提供了更高的灵敏度，并且由于选择性更高，简化了数据处理

- 分流比为 5:1 的脉冲分流进样提供了出色的灵敏度，同时保留了分流进样的优势
- 9 mm 提取透镜增强了线性性能，并提高了复杂分析物的整体分析性能
- 保留时间锁定可防止丢失峰，否则峰可能会在色谱柱切割后偏离 MRM 分析窗口
- 动态 MRM (dMRM) 分析模式减少了同时监测的离子对数量，并简化了添加和去除分析物的过程

GC 设置	
分析柱	Agilent J&W DB-8270D UI, 30 m × 0.25 mm, 0.25 µm (部件号 122-9732)
进样量	1 µL
进样口温度	恒温 280 °C
进样模式	脉冲分流
分流比	5:1
进样脉冲压力	30 psi 持续 0.6 min
衬管	带玻璃毛的超高惰性低压降分流衬管 (部件号 5190-2295)
柱温箱升温程序	40 °C (保持 0.5 min) 以 25 °C/min 升至 260 °C, 保持 0 min 以 5 °C/min 升至 280 °C, 保持 0 min 以 25 °C/min 升至 320 °C, 保持 2 min
运行时间	16.9 min
平衡时间	1 min
载气	氮气, 恒流模式, 1.55 mL/min (通过保留时间锁定进行调整)
传输线温度	320 °C

MS 设置	
离子源	Extractor, 带 9 mm 透镜
离子源温度	300 °C
四极杆温度	150 °C
碰撞气体	氮气, 1.5 mL/min
淬灭气体	氦气, 2.25 mL/min
电离模式	EI
溶剂延迟	1.7 min
EMV 模式	增益因子
增益因子	3
扫描类型	动态 MRM

本文评估了几种进样技术，包括分流和不分流模式，脉冲和非脉冲进样。选择分流比为 5:1 的脉冲分流进样，因为它提供了出色的灵敏度，同时保留了分流进样的优势。分流进样可以更快地将样品从进样口转移到色谱柱。这种更快的传输可以提高热敏感分析物的性能，因为可以缩短它们在 GC 进样口的高温下停留的时间。分流进样还可减少非挥发性物质在 GC 柱头的沉积。

此外，该方法还在 MS 源中使用了 9 mm 直径的提取透镜（部件号 G3870-20449）。Anderson 等人已证明 9 mm 透镜可以显著提高多环芳烃和许多其他复杂分析物（如 2,4-二硝基苯酚）的方法性能^[3]。

使用保留时间锁定 (RTL) 功能是至关重要的，它可以确保在对进样口和色谱柱进行多次维护操作后，目标化合物的保留时间仍然不变。在维护期间切割色谱柱后，进行单次进样，以便 Agilent GCMS MassHunter 采集软件对 GC 色谱柱流量进行细微调整。这种调整重新对准了所有分析物的保留时间。该方法将保留时间锁定为 7.08 分钟的萘-d10。此技术可防止色谱柱维护后丢失峰，否则峰可能会偏离 dMRM 分析窗口。

该方法还使用了 dMRM 采集模式。这种模式给分析物的每一个监测离子对单独设立时间窗口，解决了之前使用时间分段采集模式分析大量化合物时，化合物必须分组带来的限制。此外，该方法还显著减少了在每次 MS 扫描期间监测的单个 MRM 离子对的数量^[4]。动态 MRM 模式简化了目标分析物的添加和去除。当在一个很短的时间窗口内有众多目标物紧密出峰，需要监测的时候，dMRM 模式比时间分段模式有显著的优势。

早期实验方法使用的柱箱升温程序从 40 °C 起始，以 25 °C/min 的升温速率升至 320 °C。修改柱温箱升温程序，使柱温箱从 260 °C 升至 280 °C 期间的升温速率降低为 5 °C/min。通过优化柱箱升温程序，苯并[b]荧蒽和苯并[k]荧蒽的色谱分离度得到了提高。如果两个异构体峰之间的峰谷高度小于两个峰高平均值的 50%，则认为异构体已分离^[5]。如图 1 所示，在 2.0 µg/mL 的浓度下获得了 88.6% 的分离度。茚并[1,2,3-cd]芘和二苯并[a,h]蒽也得到了可接受的分离，分离度为 62.6%，如图 2 所示。

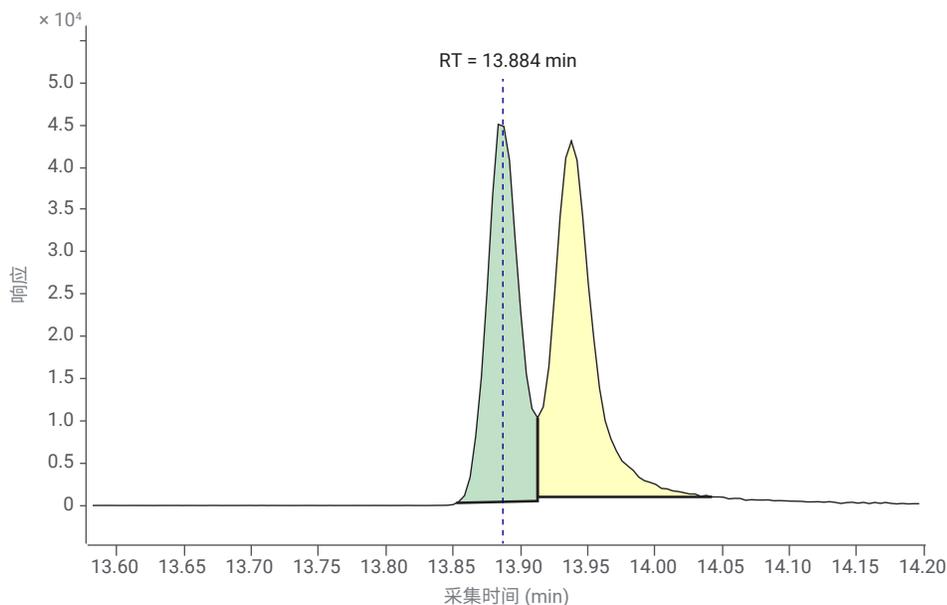


图 1. 苯并(b)荧蒽和苯并(k)荧蒽，浓度为 2.0 µg/mL (88.6% 分离度)

结果与讨论

制造商推荐的调谐

在单四极杆 MS 上，将用 DFTPP（十氟三苯基膦）溶液对仪器进行挑战性测试，以验证质量数准确度和分辨率。DFTPP 调谐校验不适用于串联质谱 MRM 模式。但是，在使用标准品建立标准曲线之前，实验室必须用全氟三丁胺 (PFTBA) 或者其他适当化学物质验证质谱系统采集的质量数准确度和分辨率是否满足了仪器生产商的标准。MS 调谐已使用制造商安捷伦推荐的 GC/TQ 调谐方案进行了验证。图 4 显示了校验调谐报告的内容。此步骤通过生成调谐评估测试和报告来帮助分析人员使用 GC/TQ，从而快速评估和记录 MS 系统的操作性。

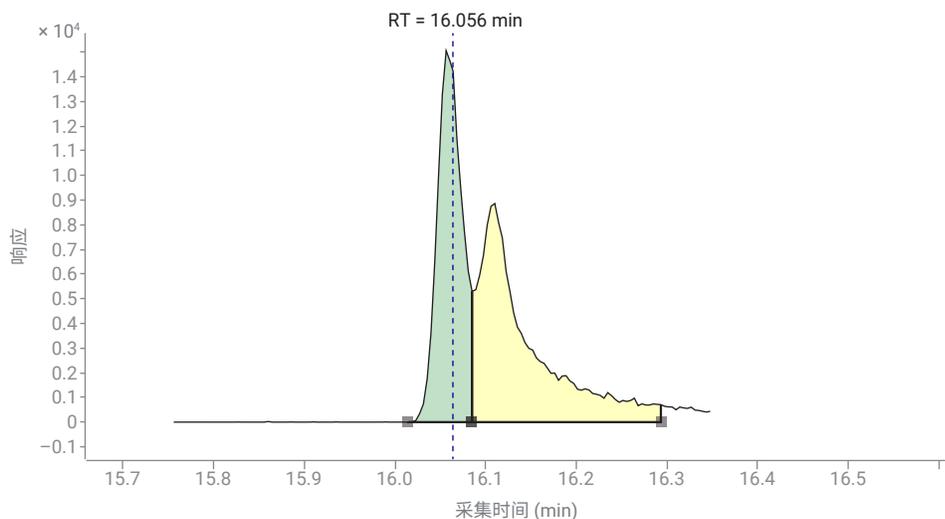


图 2. 茚并[1,2,3-cd]芘和二苯并[a,h]蒽，浓度为 2.0 $\mu\text{g/mL}$ (62.6% 分离度)

校准

初始校准包括 74 种分析物。3-甲基苯酚和 4-甲基苯酚异构体未实现分离，因此报告的结果为二者总和。通过在 0.005–10 $\mu\text{g/mL}$ 范围内引入超过三个数量级的 11 种不同校准溶液进行初始校准。使

用至少两个 MRM 离子对监测每种分析物，其中一个用于定量计算，另一个做为定性离子。部分分析物的浓度最高点或者最低点被舍弃，以满足 8270E 方法的要求。

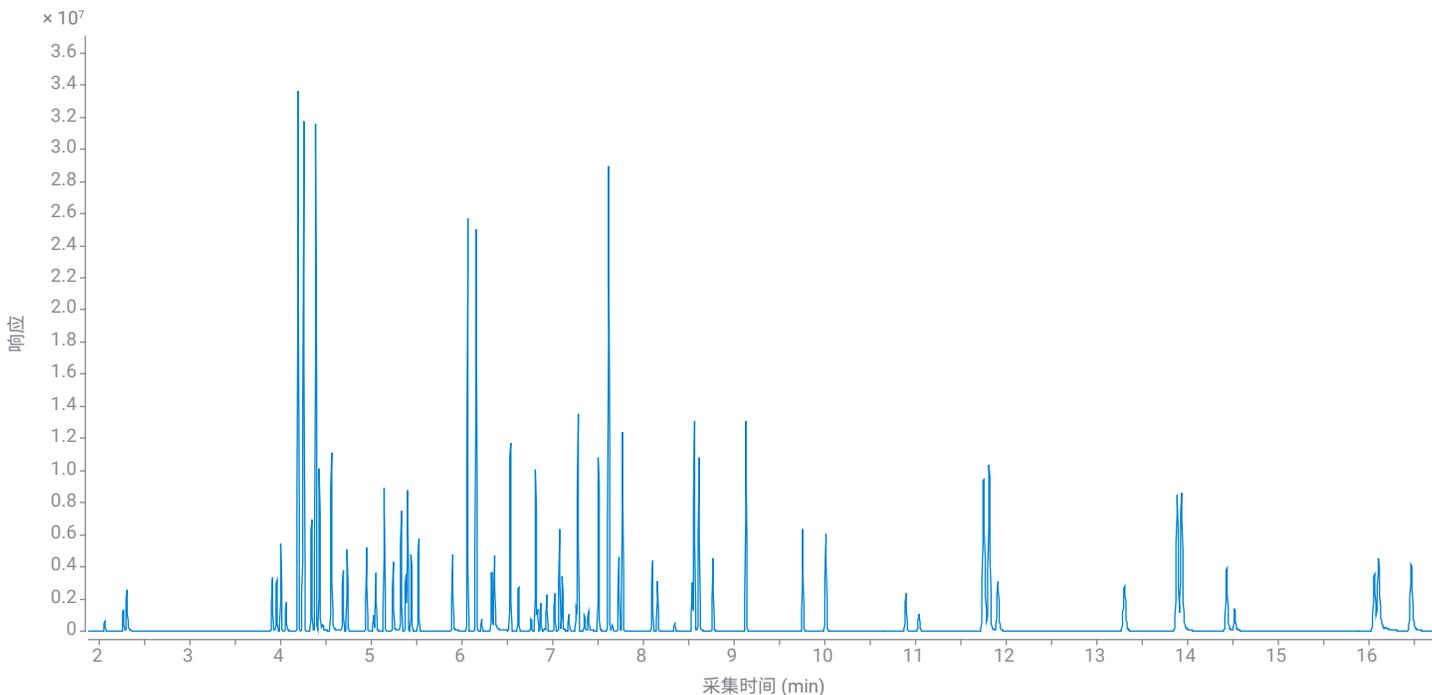


图 3. 16.9 分钟内所有 dMRM 离子对的总离子流图

三重四极杆 GC/MS 校验调谐报告



仪器信息				带 Extractor 离子源的 EI - 高灵敏度调谐			
MS 型号	G7000E	调谐时间	2022-03-30 11:30:51-04:00	离子源温度 (°C)	300	高真空 (Torr)	7.64E-5
仪器名		保存时间	2022-03-30 11:30:56-04:00	MS1 四极杆温度 (°C)	150	涡轮 1 速率 (%)	100.0
软件/固件版本		调谐文件	first.elex	MS2 四极杆温度 (°C)	150	涡轮 1 功率 (W)	0.0
		调谐水平	全自动调谐	传输线 (°C)	320		

仪器实际值							
发射电流 (µA)	35.1	粗真空 (mTorr)	1.04E+2	色谱柱 1 (mL/min)	1.550	离子源温度 (°C)	300
离子源温度 (°C)	300	高真空 (Torr)	7.64E-5	色谱柱 2 (mL/min)	0.000	MS1 四极杆温度 (°C)	150
MS1 四极杆温度 (°C)	150	涡轮 1 速率 (%)	100.0	碰撞池 (mL/min)	1.500	MS2 四极杆温度 (°C)	150
MS2 四极杆温度 (°C)	150	涡轮 1 功率 (W)	0.0	淬灭流速 (mL/min)	2.250	传输线 (°C)	320
传输线 (°C)	320						

MS1/MS2 四极杆校验调谐结果									
目标质量数 (m/z)	目标质量 (m/z)		MS1 丰度			MS2 丰度			
	MS1	MS2	丰度	比例 %	可接受度 %	丰度	比例 %	可接受度 %	可接受度 %
69.0	69.0	69.0	11924296	100.00	50.0-110.0	39580079	100.00	50.0-110.0	
219.0	219.0	219.0	10837233	90.88	70.0-110.0	15324358	38.72	10.0-40.0	
264.0	264.0	264.0	3749068	31.44	10.0-80.0	12500412	31.58	10.0-60.0	
414.0	414.0	414.0	952894	7.99	0.1-40.0	3333806	8.42	0.1-20.0	
502.0	502.0	502.0	560982	4.70	0.1-40.0	964475	2.44	0.1-12.0	

同位素 M+1 (m/z)	MS1 丰度			MS2 丰度		
	Iso M+1 丰度	Iso M+1 比例 %	可接受度 %	Iso M+1 丰度	Iso M+1 比例 %	可接受度 %
70.0	137009	1.15	0.63-1.72	545237	1.38	0.63-1.72
220.0	471869	4.35	2.94-6.42	687613	4.49	2.94-6.42
265.0	213584	5.70	4.09-8.37	731141	5.85	4.09-8.37
415.0	84401	8.86	7.29-12.08	294690	8.84	7.29-12.08
503.0	55587	9.91	8.75-12.88	94539	9.80	8.75-12.88

检测器校验调谐结果			
检测器校验调谐结果	值	推荐限值	
EMV (V)	1158	≤ 2900	
最大增益因子	100	≥ 100	

空气和水校验调谐结果			
空气/水	绝对丰富	相对丰度 (%)	推荐限值
PFTBA(69)	11357567	100	—
水	21511	0.19	≤ 20
氧气	22816	0.20	≤ 2.5
氮气*	85036	0.75	≤ 10

* 氮气值根据氧气丰度计算得出

8270 列表中的某些分析物的校准往往比较困难。这些分析物在 GC 进样口中可能不稳定或具有活性, 在较低浓度下更是如此。这可能表现为响应因子相对于分析物浓度的变化。8270 方法^[5] 的第 1.4.7 部分列出了几种此类分析物, 请注意, 它们可能会出现不稳定的色谱行为。2,4-二硝基苯酚是该列表中最具挑战性的一种物质, 校准如图 5 所示。响应因子随浓度适度增加, 但满足方法要求, 平均响应因子 (平均 RF) 相对标准偏差为 18.07%, 低于 20% 的要求。方法 8270 可以对某些分析物进行曲线拟合以解决这一难题, 前提是相关系数 (R²) 大于 0.99。2-4-二硝基苯酚的替代二次曲线拟合如图 6 所示, R² 为 0.9979。五氯苯酚是另一种列出的潜在复杂分析物, 校准曲线如图 8 所示。在这种情况下, 选择了 R² 值为 0.9966 的二次曲线拟合。这些校准曲线表明, 即使是低浓度的复杂分析物, 也可以满足校准标准。图 9 显示了一个更理想的 NDMA 校准曲线示例。如果色谱条件没有进行优化, 导致 NDMA 早早从色谱柱当中流出而没有与溶剂有效分离, NDMA 的检测就会变得非常困难。在本例中, NDMA 的平均 RF 相对标准偏差为 5.71%, 并在校准范围内展示了优异的线性。

图 4. 制造商推荐调谐的示例性校验调谐报告

表 1. 校准结果

化合物	曲线拟合	%RSE	R ²	低浓度标样 (ppm)	高浓度标样 (ppm)
				(默认浓度范围为 0.005–10 ppm)	
1,2,4-三氯苯	平均 RF	5.7			
1,2-二氯苯	平均 RF	5.3			
1,3-二氯苯	平均 RF	4.5			
1,3-二硝基苯	平均 RF	16.4		0.025	5
1,4-二氯苯	平均 RF	7.8			
1,4-二硝基苯	平均 RF	11.8		0.025	
1-甲基萘	平均 RF	6.8			
2,2'-氧代双[1-氯丙烷]	平均 RF	4.3		0.050	
2,3,4,6-四氯苯酚	平均 RF	14.1			
2,3,5,6-四氯苯酚	平均 RF	9.6		0.025	
2,4,5-三氯苯酚	平均 RF	8.2			
2,4,6-三氯苯酚	平均 RF	5.2			
2,4-二氯苯酚	平均 RF	4.2			
2,4-二甲基苯酚	平均 RF	3.4		0.010	
2,4-二硝基苯酚	平均 RF	18.1		0.050	5
2,4-二硝基甲苯	二次拟合	5.4	0.9967	0.025	
2,6-二硝基甲苯	二次拟合	8.3	0.9937	0.010	
2-氯萘	平均 RF	3.5			
2-氯酚	平均 RF	6.5			
2-甲基-4,6-二硝基苯酚	平均 RF	13.0		0.025	5
2-甲基萘	平均 RF	4.1			
2-甲基苯酚	平均 RF	6.7		0.010	
2-硝基苯胺	平均 RF	10.4			
2-硝基苯酚	平均 RF	7.8			
3+4-甲基苯酚	平均 RF	3.5			
3-硝基苯胺	平均 RF	14.7			5
4-溴联苯醚	平均 RF	3.9			
4-氯-3-甲基苯酚	平均 RF	4.9			
4-氯苯胺	平均 RF	3.0			
4-氯二苯醚	平均 RF	2.1			
4-硝基苯胺	二次拟合	7.0	0.9954		
4-硝基苯酚	平均 RF	11.9			5
萘	平均 RF	9.8		0.010	
萘烯	平均 RF	4.3		0.010	
苯胺	平均 RF	7.6		0.010	
蒽	平均 RF	5.2			
偶氮苯	平均 RF	3.9			
苯并[a]蒽	平均 RF	6.7			
苯并[a]芘	平均 RF	7.9			
苯并[b]荧蒽	平均 RF	7.2			
苯并[g,h,i]花	平均 RF	8.0			
苯并[k]荧蒽	平均 RF	8.7			
苯甲醇	平均 RF	2.7		0.010	
双(2-氯乙氧基)甲烷	平均 RF	3.2			

化合物	曲线拟合	%RSE	R ²	低浓度标样 (ppm)	高浓度标样 (ppm)
				(默认浓度范围为 0.005–10 ppm)	
双(2-氯乙基)醚	平均 RF	7.1			
双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	平均 RF	14.3		0.025	
邻苯二甲酸丁苄酯	平均 RF	10.3			
咪唑	平均 RF	5.0			
蒽	平均 RF	5.7			
二苯并[a,h]蒽	平均 RF	14.4			5
二苯并呋喃	平均 RF	5.0			
邻苯二甲酸二乙酯	平均 RF	7.6		0.100	
邻苯二甲酸二甲酯	平均 RF	4.1			
邻苯二甲酸二正丁酯	平均 RF	3.2		0.025	
邻苯二甲酸二正辛酯	二次拟合	6.2	0.9960		
二苯胺	平均 RF	4.9		0.025	
荧蒽	平均 RF	3.9			
芴	平均 RF	3.0			
六氯苯	平均 RF	7.1			
六氯丁二烯	平均 RF	3.7			
六氯环戊二烯	平均 RF	14.4		0.010	
六氯乙烷	平均 RF	2.6		0.010	
茚并[1,2,3-cd]芘	平均 RF	7.9			5
异佛尔酮	平均 RF	5.6			
萘	平均 RF	6.8			
NDMA	平均 RF	5.7		0.010	
硝基苯	平均 RF	10.9		0.010	
N-亚硝基二正丙胺	平均 RF	3.4		0.050	
五氯苯酚	二次拟合	6.7	0.9966	0.010	
菲	平均 RF	5.7			
苯酚	平均 RF	5.7			
芘	平均 RF	3.6			
吡啶	平均 RF	5.2		0.025	
	平均值 = 7.0				

在此数据集中，74 种分析物中的 69 种使用平均 RF 拟合进行校准，相对标准偏差小于或等于 20%。剩余 5 种分析物（2,4-二硝基甲苯、2,6-二硝基甲苯、4-硝基苯胺、邻苯二甲酸二正辛酯和五氯苯酚）使用加权最小二乘回归进行校准，二次拟合的 R² 值高于 0.99。计算每种分析

物的相对标准误差，发现每条校准曲线的相对标准误差小于或等于 20%。所有分析物的平均相对标准误差为 6.96%。此外，所有使用的校准点的准确性都在每个浓度理论值的 ±30% 以内。每条校准曲线至少使用 6 个数据点。

如果需要将校准范围扩展到包括更高浓度点，建议稀释样品或者增加脉冲分流进样的分流比。这种更改可以减少到达色谱柱和质谱检测器的样品基质，并在很大程度上降低维护频率。

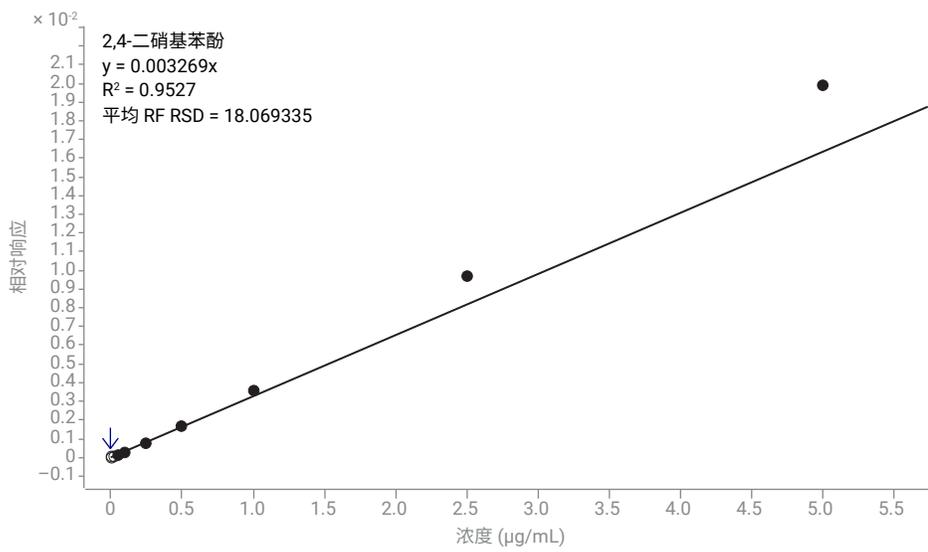


图 5. 复杂分析物 2,4-二硝基苯酚 0.05–5 µg/mL 的平均 RF 校准曲线。平均 RF RSD = 18.07。不包括校准点 1、2、3 和 11

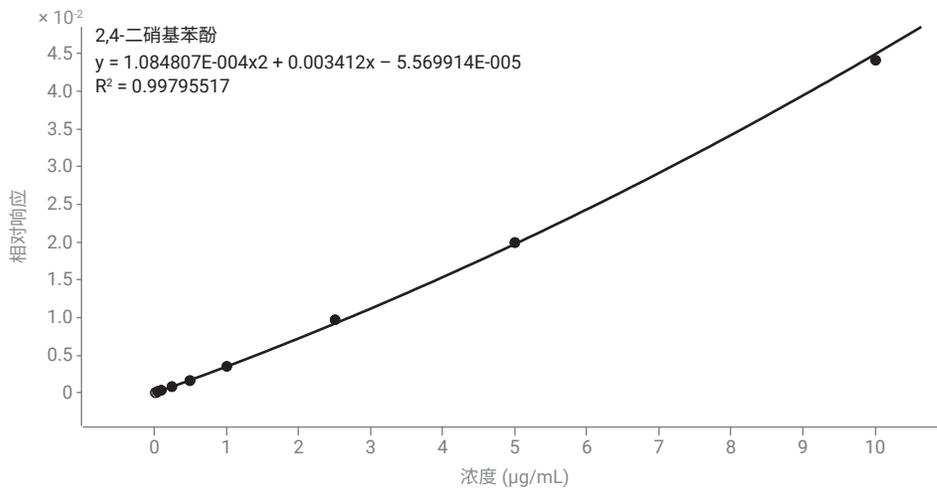


图 6. 2,4-二硝基苯酚的替代校准曲线，二次曲线拟合为 0.05–5 µg/mL。R² = 0.9979。不包括校准点 1、2、3 和 11

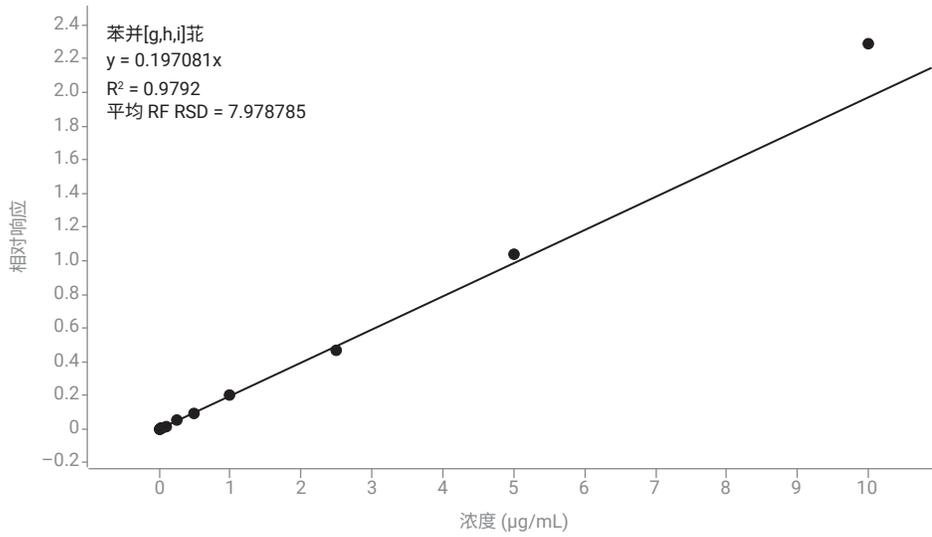


图 7. 苯并[g,h,i]花 0.005–10 µg/mL 的平均 RF 校准曲线。平均 RF RSD = 7.98

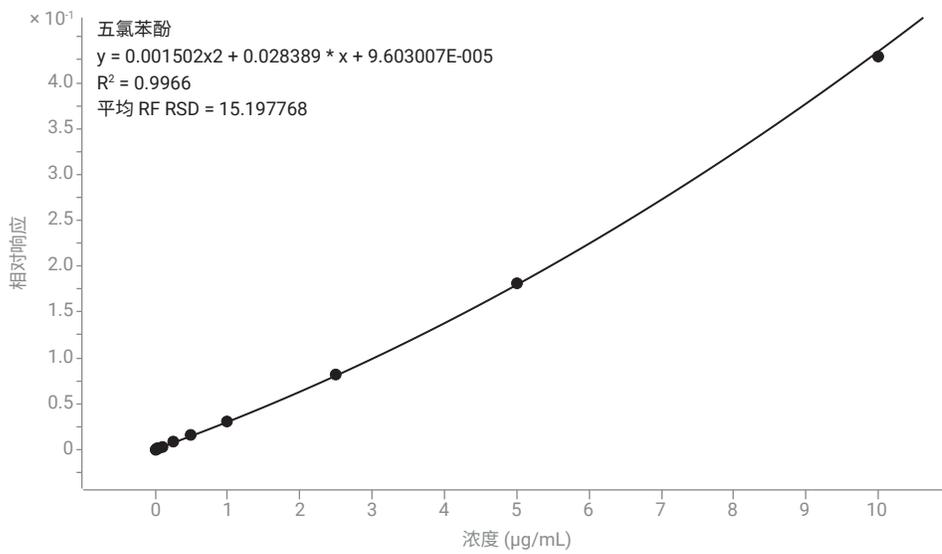


图 8. 五氯苯酚 0.01–10 µg/mL 的校准曲线。R² = 0.9966。不包括校准点 1

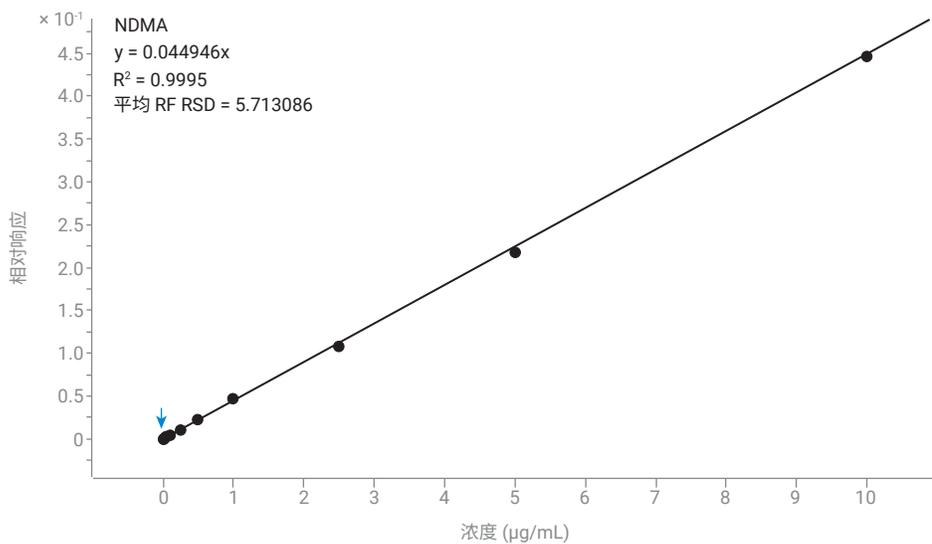


图 9. NDMA 的校准曲线。0.01–10 $\mu\text{g/mL}$ 。平均RF RSD = 5.71。不包括校准点 1

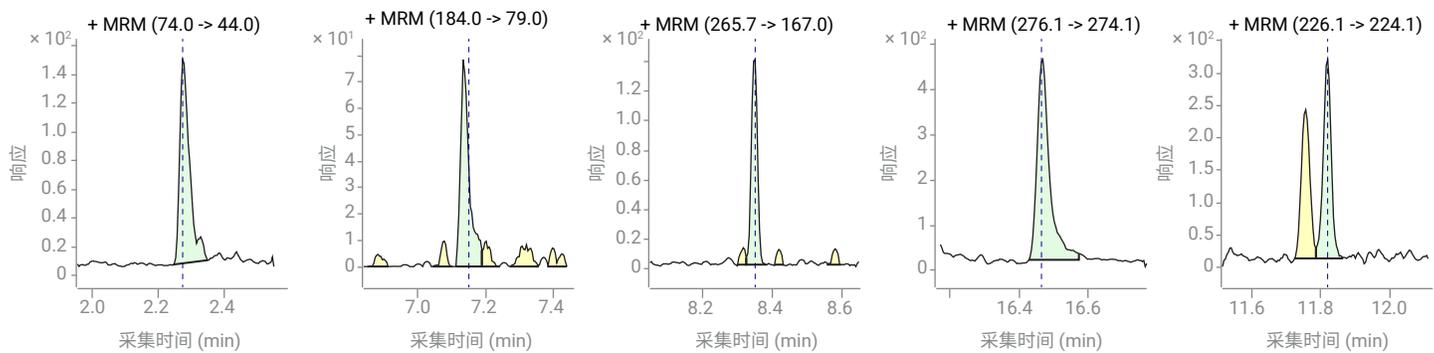


图 10. NDMA 0.01 $\mu\text{g/mL}$ 、2,4-二硝基苯酚 0.05 $\mu\text{g/mL}$ 、PCP 0.01 $\mu\text{g/mL}$ 、苯并[g,h,i]花 0.005 $\mu\text{g/mL}$ 和蒽 0.005 $\mu\text{g/mL}$

结论

本研究开发出一种灵敏的 SVOCs 分析方法，同时也展示了更宽的动态范围。多种分析物的工作校准范围十分宽，超过三个数量级，从 0.005 到 10 µg/mL。采集的数据按照 EPA 8270E 中概述的质量标准进行评估。

与单四极杆 GC/MSD 系统相比，GC/TQ 在 SVOCs 分析方面具有显著的优势：

- 由于消除了基质干扰，高选择性降低了数据的复杂性，从而实现分析结果批量快速查看
- 更高的灵敏度能够实现更少的样品量和更小的提取体积，从而能够：
 - 减少浪费，同时提高可持续性
 - 降低与样品运输、溶剂使用和废物处置相关的成本
- 动态 MRM 模式通常会减少每次 MS 扫描期间单个 MRM 离子对的数量。这改善了仪器性能，并简化了从方法中添加和删除分析物的过程
- 制造商推荐的调谐协议简化了 GC/TQ 的调谐验证

GC/MS 分析 SVOC 可改善结果，其关键技术如下

- 保留时间锁定，即使在色谱柱切割后也可以确保保留时间不发生变化，从而带来以下优势：
 - 无需在维护后手动调整保留时间
 - 使数据可在多个仪器和多个实验室之间互换
- 脉冲分流进样，与标准分流进样相比，它可以提高灵敏度，同时保持较宽的动态范围。
- 9 mm 提取透镜，可以为所有化合物提供出色的线性范围，同时为许多复杂分析物提供出色的灵敏度

参考文献

1. Churley, M. 等人，A Fast Method for EPA 8270 in MRM Mode Using the 7000 Series Triple Quadrupole GC/MS (采用 7000 系列三重四极杆气质联用系统在 MRM 模式下实现快速 EPA 8270 方法)，*安捷伦科技公司应用简报*，出版号 5991-0694EN，**2019**
2. M. Churley 等人，EPA 8270 Re-Optimized for Widest Calibration Range on the 5977 Inert Plus GC/MSD (采用 5977 惰性 Plus GC/MSD 重新优化 EPA 8270 方法实现更宽的校准范围)，*安捷伦科技公司应用简报*，出版号 5994-0349EN，**2018**

3. Anderson, Kim A. et al. Modified ion source triple quadrupole mass spectrometer gas chromatograph for polycyclic aromatic hydrocarbon analyses. *J. Chromatog. A* **2015**, 1419, 89–98. doi:10.1016/j.chroma.2015.09.054
4. Stone, P. 等人，New Dynamic MRM Mode Improves Data Quality and Triple Quad Quantification in Complex Analyses (利用新型动态多反应监测模式改善复杂分析的数据质量和三重四极杆的定量结果)，*安捷伦科技公司技术概述*，出版号 5990-3595，**2009**
5. Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS); Method 8270E Sections 1.4.7, 11.3.1.2, and 11.6.1.4; United States Environmental Protection Agency, Revision 4, June **2018**

免责声明

尽管参考 EPA 文件进行数据审查，但本出版物的内容未经 EPA 审查，作者的意见并不代表 EPA 政策。

附录

校准化合物和离子对列表如下表所示。

化合物名称	CAS 号	保留时间 (min)	母离子	子离子	左侧 ΔRT	右侧 ΔRT	CE
NDMA	62-75-9	2.25	74	44	0.3	0.3	6
NDMA	62-75-9	2.25	74	42	0.3	0.3	14
吡啶	110-86-1	2.4	79	52	0.3	0.5	25
吡啶	110-86-1	2.4	79	51	0.3	0.5	25
苯酚	108-95-2	3.92	94	66.1	0.3	0.3	15
苯酚	108-95-2	3.92	94	65.1	0.3	0.3	20
苯胺	62-53-3	3.96	93	66	0.3	0.3	10
苯胺	62-53-3	3.96	92	65	0.3	0.3	10
双(2-氯乙基)醚	111-44-4	4.01	95.1	65	0.3	0.3	5
双(2-氯乙基)醚	111-44-4	4.01	93.1	63	0.3	0.3	0
2-氯酚	95-57-8	4.06	128	64	0.3	0.3	30
2-氯酚	95-57-8	4.06	128	63	0.3	0.3	15
1,3-二氯苯	541-73-1	4.2	146	111	0.3	0.3	15
1,3-二氯苯	541-73-1	4.2	146	75	0.3	0.3	30
1,4-二氯苯-d4	3855-82-1	4.25	150	115	0.2	0.2	15
1,4-二氯苯-d4	3855-82-1	4.25	150	78	0.2	0.2	30
1,4-二氯苯	106-46-7	4.27	146	111	0.3	0.3	15
1,4-二氯苯	106-46-7	4.27	146	75	0.3	0.3	30
苯甲醇	100-51-6	4.35	108	79	0.3	0.3	15
苯甲醇	100-51-6	4.35	107	79	0.3	0.3	5
1,2-二氯苯	95-50-1	4.39	146	111	0.3	0.3	15
1,2-二氯苯	95-50-1	4.39	146	75	0.3	0.3	30
2-甲基苯酚	95-48-7	4.44	108	107	0.3	0.3	15
2-甲基苯酚	95-48-7	4.44	107	77	0.3	0.3	15
2,2'-氧代双[1-氯丙烷]	108-60-1	4.47	121	77	0.3	0.3	5
2,2'-氧代双[1-氯丙烷]	108-60-1	4.47	121	49	0.3	0.3	30
3+4-甲基苯酚	108-39-4	4.57	108	107.1	0.3	0.3	15
3+4-甲基苯酚	108-39-4	4.57	108	80	0.3	0.3	0
N-亚硝基二正丙胺	621-64-7	4.58	113.1	71	0.3	0.3	10
N-亚硝基二正丙胺	621-64-7	4.58	101	70	0.3	0.3	0
六氯乙烷	67-72-1	4.69	200.9	165.9	0.3	0.3	15
六氯乙烷	67-72-1	4.69	118.9	83.9	0.3	0.3	35
硝基苯	98-95-3	4.74	123	77	0.3	0.3	10
硝基苯	98-95-3	4.74	77	51	0.3	0.3	15
异佛尔酮	78-59-1	4.96	138	82	0.3	0.3	5
异佛尔酮	78-59-1	4.96	82	54	0.3	0.3	5
2-硝基苯酚	88-75-5	5.03	138.9	81	0.3	0.3	15
2-硝基苯酚	88-75-5	5.03	109	81	0.3	0.3	10
2,4-二甲苯酚	105-67-9	5.06	121	107	0.3	0.3	10
2,4-二甲苯酚	105-67-9	5.06	107.1	77.1	0.3	0.3	15
双(2-氯乙氧基)甲烷	111-91-1	5.15	95	65	0.3	0.3	5
双(2-氯乙氧基)甲烷	111-91-1	5.15	93	63	0.3	0.3	5

化合物名称	CAS 号	保留时间 (min)	母离子	子离子	左侧 ΔRT	右侧 ΔRT	CE
2,4-二氯苯酚	120-83-2	5.25	163.9	63	0.3	0.3	30
2,4-二氯苯酚	120-83-2	5.25	162	63	0.3	0.3	30
1,2,4-三氯苯	120-82-1	5.34	179.9	145	0.3	0.3	15
1,2,4-三氯苯	120-82-1	5.34	179.9	109	0.3	0.3	30
萘-d8	1146-65-2	5.39	136.1	108.1	0.2	0.2	20
萘-d8	1146-65-2	5.39	136.1	84.1	0.2	0.2	25
萘	91-20-3	5.41	128.1	102.1	0.3	0.3	20
萘	91-20-3	5.41	128.1	78.1	0.3	0.3	20
4-氯苯胺	106-47-8	5.46	127	92	0.3	0.3	15
4-氯苯胺	106-47-8	5.46	127	65	0.3	0.3	20
六氯-1,3-丁二烯	87-68-3	5.53	226.8	191.9	0.3	0.3	15
六氯-1,3-丁二烯	87-68-3	5.53	224.7	189.9	0.3	0.3	15
4-氯-3-甲基苯酚	59-50-7	5.91	142	107	0.3	0.3	15
4-氯-3-甲基苯酚	59-50-7	5.91	107	77	0.3	0.3	15
2-甲基萘	91-57-6	6.07	142	141	0.3	0.3	15
2-甲基萘	91-57-6	6.07	141	114.9	0.3	0.3	15
1-甲基萘	90-12-0	6.16	142	114.9	0.3	0.3	30
1-甲基萘	90-12-0	6.16	114.9	89	0.3	0.3	20
六氯环戊二烯	77-47-4	6.22	236.7	143	0.3	0.3	20
六氯环戊二烯	77-47-4	6.22	236.7	119	0.3	0.3	20
2,4,6-三氯苯酚	88-06-2	6.34	197.8	97	0.3	0.3	25
2,4,6-三氯苯酚	88-06-2	6.34	195.8	97	0.3	0.3	25
2,4,5-三氯苯酚	95-95-4	6.37	197.8	97	0.3	0.3	30
2,4,5-三氯苯酚	95-95-4	6.37	195.8	97	0.3	0.3	25
2-氯萘	91-58-7	6.54	162	126.9	0.3	0.3	20
2-氯萘	91-58-7	6.54	162	77	0.3	0.3	35
2-硝基苯胺	88-74-4	6.63	138	92	0.3	0.3	15
2-硝基苯胺	88-74-4	6.63	138	65	0.3	0.3	25
1,4-二硝基苯	100-25-4	6.77	168	75	0.2	0.2	20
1,4-二硝基苯	100-25-4	6.77	122	92	0.2	0.2	5
邻苯二甲酸二甲酯	131-11-3	6.82	163	92	0.3	0.3	30
邻苯二甲酸二甲酯	131-11-3	6.82	163	77	0.3	0.3	20
1,3-二硝基苯	99-65-0	6.84	168	75	0.3	0.3	20
1,3-二硝基苯	99-65-0	6.84	122	92	0.3	0.3	5
2,6-二硝基甲苯	606-20-2	6.87	165	90.1	0.3	0.3	15
2,6-二硝基甲苯	606-20-2	6.87	165	63	0.3	0.3	25
萘烯	208-96-8	6.94	151.9	102	0.3	0.3	30
萘烯	208-96-8	6.94	150.9	77	0.3	0.3	25
1,2-二硝基苯	528-29-0	6.95	168	78	0.3	0.3	5
1,2-二硝基苯	528-29-0	6.95	168	63	0.3	0.3	35
3-硝基苯胺	99-09-2	7.03	138	92	0.3	0.3	15
3-硝基苯胺	99-09-2	7.03	138	80	0.3	0.3	5
萘-d10	15067-26-2	7.08	164.1	162.1	0.5	0.5	15
萘-d10	15067-26-2	7.08	162.1	160.1	0.5	0.5	20
萘	83-32-9	7.11	153.9	127	0.3	0.3	40
萘	83-32-9	7.11	152.9	77	0.3	0.3	45

化合物名称	CAS号	保留时间 (min)	母离子	子离子	左侧 ΔRT	右侧 ΔRT	CE
2,4-二硝基苯酚	51-28-5	7.14	184	107	0.3	0.3	25
2,4-二硝基苯酚	51-28-5	7.14	184	79	0.3	0.3	25
4-硝基苯酚	100-02-7	7.19	138.9	109	0.3	0.3	5
4-硝基苯酚	100-02-7	7.19	109	81	0.3	0.3	10
2,4-二硝基甲苯	121-14-2	7.27	165	119	0.3	0.3	5
2,4-二硝基甲苯	121-14-2	7.27	165	63	0.3	0.3	45
二苯并呋喃	132-64-9	7.29	167.9	139.1	0.3	0.3	25
二苯并呋喃	132-64-9	7.29	138.9	63	0.3	0.3	35
2,3,5,6-四氯苯酚	935-95-5	7.36	232	167.9	0.2	0.2	15
2,3,5,6-四氯苯酚	935-95-5	7.36	230	165.9	0.2	0.2	15
2,3,4,6-四氯苯酚	58-90-2	7.4	231.9	167.9	0.3	0.3	15
2,3,4,6-四氯苯酚	58-90-2	7.4	230	165.9	0.3	0.3	15
邻苯二甲酸二乙酯	84-66-2	7.51	149	93	0.3	0.3	15
邻苯二甲酸二乙酯	84-66-2	7.51	149	65	0.3	0.3	20
4-氯二苯醚	7005-72-3	7.62	204	77	0.3	0.3	30
4-氯二苯醚	7005-72-3	7.62	141.1	115.1	0.3	0.3	20
芴	86-73-7	7.62	166	165.1	0.3	0.3	15
芴	86-73-7	7.62	164.9	163.1	0.3	0.3	35
4-硝基苯胺	100-01-6	7.64	138	108.1	0.3	0.3	5
4-硝基苯胺	100-01-6	7.64	108	80	0.3	0.3	15
4,6-二硝基-邻甲酚	534-52-1	7.66	198	167.9	0.3	0.3	5
4,6-二硝基-邻甲酚	534-52-1	7.66	198	121	0.3	0.3	10
二苯胺	122-39-4	7.75	170	169.2	0.3	0.3	15
二苯胺	122-39-4	7.75	167	166.2	0.3	0.3	20
偶氮苯	103-33-3	7.79	105	77.1	0.3	0.3	5
偶氮苯	103-33-3	7.79	77	51	0.3	0.3	15
4-溴联苯醚	101-55-3	8.1	250	141	0.3	0.3	20
4-溴联苯醚	101-55-3	8.1	248	141	0.3	0.3	20
六氯苯	118-74-1	8.16	283.7	213.8	0.3	0.3	30
六氯苯	118-74-1	8.16	248.7	214	0.3	0.3	15
五氯苯酚	87-86-5	8.35	265.7	167	0.3	0.3	25
五氯苯酚	87-86-5	8.35	165	130	0.3	0.3	25
菲-d10	1517-22-2	8.54	188.3	160.2	0.2	0.2	20
菲-d10	1517-22-2	8.54	188.3	158.2	0.2	0.2	35
菲	85-01-8	8.57	177.9	152	0.3	0.3	25
菲	85-01-8	8.57	175.9	149.9	0.3	0.3	25
蒽	120-12-7	8.62	178.1	151	0.3	0.3	30
蒽	120-12-7	8.62	177.9	152	0.3	0.3	25
咔唑	86-74-8	8.77	167	139	0.3	0.3	45
咔唑	86-74-8	8.77	167	89	0.3	0.3	60
邻苯二甲酸二正丁酯	84-74-2	9.13	149	121	0.3	0.3	15
邻苯二甲酸二正丁酯	84-74-2	9.13	149	65	0.3	0.3	25
荧蒽	206-44-0	9.76	201.9	151.9	0.3	0.3	30
荧蒽	206-44-0	9.76	200.9	199.9	0.3	0.3	15
芘	129-00-0	10.02	202.1	151	0.3	0.3	45
芘	129-00-0	10.02	201.1	200	0.3	0.3	15

化合物名称	CAS 号	保留时间 (min)	母离子	子离子	左侧 ΔRT	右侧 ΔRT	CE
邻苯二甲酸丁苄酯	85-68-7	10.9	149	65	0.3	0.3	25
邻苯二甲酸丁苄酯	85-68-7	10.9	91	65	0.3	0.3	15
苯并[a]蒽	56-55-3	11.75	228.1	226.1	0.3	0.3	30
苯并[a]蒽	56-55-3	11.75	226.1	224.1	0.3	0.3	35
蒽-d12	1719-03-5	11.77	240.2	236.2	0.3	0.3	35
蒽-d12	1719-03-5	11.77	236.1	232.1	0.3	0.3	40
蒽	218-01-9	11.81	226.1	224.1	0.3	0.3	40
蒽	218-01-9	11.81	113.1	112.1	0.3	0.3	10
双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	117-81-7	11.9	167	149	0.3	0.3	5
双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	117-81-7	11.9	149	65	0.3	0.3	25
邻苯二甲酸二正辛酯	117-84-0	13.29	149	93	0.3	0.3	20
邻苯二甲酸二正辛酯	117-84-0	13.29	149	65	0.3	0.3	25
苯并[b]荧蒽	205-99-2	13.88	252.1	250.1	0.3	0.3	35
苯并[b]荧蒽	205-99-2	13.88	126	113.1	0.3	0.3	10
苯并[k]荧蒽	207-08-9	13.93	252.1	250.1	0.3	0.3	30
苯并[k]荧蒽	207-08-9	13.93	126.1	113.1	0.3	0.3	10
苯并[a]芘	50-32-8	14.42	252.1	250.1	0.3	0.3	35
苯并[a]芘	50-32-8	14.42	125	124.1	0.3	0.3	10
芘-d12	1520-96-3	14.5	264.2	260.1	0.3	0.3	35
芘-d12	1520-96-3	14.5	260.1	256.1	0.3	0.3	40
茚并[1,2,3-cd]芘	193-39-5	16.05	276.1	274.1	0.3	0.3	40
茚并[1,2,3-cd]芘	193-39-5	16.05	137	136	0.3	0.3	15
二苯并[a,h]蒽	53-70-3	16.1	278.1	276.1	0.3	0.3	35
二苯并[a,h]蒽	53-70-3	16.1	125	124	0.3	0.3	10
苯并[g,h,i]芘	191-24-2	16.47	276.1	274.1	0.3	0.3	45
苯并[g,h,i]芘	191-24-2	16.47	138	137	0.3	0.3	15

消耗品	部件号
样品容器	
样品瓶, 螺口, 棕色, 去活, 2 mL, 100/包	5183-2072
瓶盖, 螺口, PTFE/硅橡胶隔垫, 100/包	5040-4681
样品瓶内插管, 250 μL, 去活, 100/包	5181-8872
仪器备件	
进样针, 蓝色系列, 10 μL, 固定式针头, 23-26s/42/锥形针尖, 6/包	G4513-80200
进样口隔垫, 高级绿色, 不粘连, 11 mm, 50/包	5183-4759
进样口衬管, 超高惰性, 分流, 低压降, 带玻璃毛	5190-2295
气相色谱仪进样口分流平板, 带垫圈, 超高惰性, 10/包	5190-6145
提取透镜, 9 mm	G3870-20449
分离	
J&W DB-8270D 超高惰性气相色谱柱, 30 m × 0.25 mm, 0.25 μm	122-9732

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE50589665

本文中的信息、说明和指标如有变更, 恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2022
2022年9月20日, 中国出版
5994-4964ZHCN

