

# 5977 시리즈 MSD와 8890 GC의 펄스 분할 주입 및 머무름 시간 고정을 이용한 EPA 8270E 분석

## 저자

Rachael Ciotti  
Agilent Technologies, Inc

## 개요

미국 환경 보호국(US EPA) 8270 분석법은 가스 크로마토그래피/질량 분석기(GC/MS)를 이용한 준휘발성 유기 화합물(SVOC) 200종 이상에 대한 분석 조건을 제공합니다. 본 응용 자료는 Agilent 5977 시리즈 GC/MSD와 결합한 Agilent 8890 GC 시스템으로 최근 개정된 EPA 8270E에 대한 시스템 최적화, 검량 및 분석법의 성능을 입증합니다. 펄스 분할 주입과 9mm extractor 렌즈를 사용하여 시료를 신속하게 전달하고 측정 범위를 넓히며, 유지보수 이후의 피크 식별이 용이하도록 애질런트의 고유한 머무름 시간 고정(RTL) 기능을 사용했습니다. 마지막으로, EPA 분석법 8270E에 업데이트된 튠 기준에 따르는 DFTPP 튠에 대한 평가도 다룹니다.

## 서론

GC/MS를 이용한 SVOC 분석은 넓은 분자량과 비점 범위의 염기, 중성 및 산을 비롯한 표적 분석물질의 집합으로 매우 어렵습니다. EPA 분석법 8270은 성공적인 SVOC 분석을 용이하게 하기 위한 분석 조건 및 품질 관리 검사에 대한 지침을 제공합니다.<sup>1</sup> 불규칙한 피크 모양을 제거하고 페놀 및 니트로 작용기를 가진 화합물과 같은 분석이 어려운 화합물에 대한 충분한 감응을 얻기 위해서는 시스템의 청결과 적절한 컬럼 설치가 필수적입니다. 고분자량 다환 방향족 탄화수소(PAH)와 프탈레이트로 인한 포화가 발생하지 않도록 검출기 조건을 최적화해야 합니다. 바람직한 시스템 구성은 분석법 검출 한계를 충족하는 충분한 시료를 도입할 수 있으면서, 과도한 유지보수를 제거하고 모든 분석물질에 대한 넓은 선형 측정 범위를 제공해야 합니다. 또한, 넓은 측정 범위의 검량은 실험실의 생산성을 높이고 시료 재작업을 줄입니다.

이전에는 EPA 8270E의 낮은 분석 검출 한계를 달성하기 위해 비분할 주입을 사용해야 했습니다.<sup>2</sup> 그러나, 최신 질량 분석기는 매우 고감도이며, 점점 더 적은 주입량으로 더 낮은 검출 한계에 도달할 수 있어 분할 주입을 가능하게 합니다. 분할 주입은 시료 전달 속도를 높여 민감하고 열에 불안정한 화합물이 GC 주입구 또는 기타 잠재적인 활성 부위와 상호작용하는 시간을 단축하며 분석 컬럼의 헤드에 비휘발성 매트릭스 물질의 침적을

줄입니다. 주입 직전과 주입 동안에 GC 주입구 압력이 증가하는 압력 펄스는 시료 증기의 부피를 압축하고, 주입구에서의 체류 시간을 단축하여 분석물질의 분해 가능성을 더욱 줄입니다. 지정된 펄스 시간이 지나면 주입구의 압력은 선택한 유속 프로그램을 유지하는데 필요한 설정 값으로 되돌아갑니다. 8890 GC는 재현 가능한 펄스 분할 주입과 RTL의 구현을 가능하게 하는 매우 정밀한 기체역학 모듈을 갖추고 있어 컬럼 유지보수 후에 머무름 시간을 조정할 필요가 없습니다.

본 응용 자료는 분할 주입을 사용하여 이전의 SVOC에 대한 작업을 확장합니다.<sup>3</sup> 또한, 8890 시리즈 GC 시스템을 이용한 시스템 적합성, 분석법 최적화 및 성능에 대한 상세한 연구와 최근 개정된 EPA 분석법 8270E에 명시된 품질 관리 파라미터에 대한 평가를 다룹니다. 이 외에, 컬럼 유지보수 후에도 넓은 측정 범위와 우수한 재현성을 보장하기 위한 전략에 대해 논의합니다.

## 실험

### 시약 및 표준물질

Decafluorotriphenylphosphine(DFTPP), benzidine, pentachlorophenol 및 4,4'-dichlorodiphenyltrichloroethane (4,4'-DDT)를 각각 공칭 농도 1,000µg/mL로 포함한 준휘발성 GC/MS 튜닝 표준물질 (애질런트 P/N GCM-150)을 dichloromethane에 25ng/µL 농도로 희석했습니다.

Restek(펜실베이니아, 벨레폰테)에서 구입한 dichloromethane에 일반적으로 분석되는 SVOC 76종을 포함 표준물질 원액 1,000µg/mL로 dichloromethane의 작업 표준물질 10µg/mL을 제조했습니다. Dichloromethane에 중수소화된 분석물질 6종을 포함하는 준휘발성 내부 표준물질 원액 2,000µg/mL도 Restek에서 구입했습니다. 초기 검량선 표준물질은 dichloromethane에 원액과 작업 표준물질을 희석하여 제조했으며 준휘발성 내부 표준물질 4µg/mL을 포함합니다. 13가지 검량 레벨은 다음의 농도로 제조했습니다: 0.2, 0.4, 0.5, 0.8, 1, 2, 4, 10, 25, 50, 75, 100 및 160µg/mL. 표 1은 머무름 시간 순서로 표적 분석물질에 번호를 매긴 목록입니다. 내부 표준물질은 마지막에 나열하였습니다. 3-, 4-methyl phenol 이성질체는 분리되지 않으므로 그 결과를 합하여 보고합니다.

### 기기

표 2와 표 3은 시스템 구성과 분석법 조건의 요약입니다. Agilent 8890 GC는 빠른 분석 시간을 위해 필름 두께가 0.25µm인 30 × 0.25m DB-UI 8270 컬럼으로 구성하였습니다. 이 컬럼은 9mm 구경 추출 렌즈를 포함한 extractor EI 이온화원이 장착된 5977 GC/MSD에 연결했습니다. 분석 실행 시간은 21.6분이었습니다. 데이터의 수집과 분석에 Agilent MassHunter Workstation 소프트웨어를 사용했습니다.

표 1. 표적 분석물질 및 내부 표준물질

번호	화합물	번호	화합물	번호	화합물	번호	화합물
1	N-Nitrosodimethylamine	22	1,2,4-Trichlorobenzene	43	4-Nitrophenol	64	Butylbenzylphthalate
2	Pyridine	23	Naphthalene	44	2,4-Dinitrotoluene	65	Bis(2-ethylhexyl)adipate
3	Phenol	24	4-Chloroaniline	45	Dibenzofuran	66	Benzo[a]anthracene
4	Aniline	25	Hexachlorobutadiene	46	2,3,5,6-Tetrachlorophenol	67	Chrysene
5	bis(2-Chloroethyl) ether	26	4-Chloro-3-methylphenol	47	2,3,4,6-Tetrachlorophenol	68	Bis(2-ethylhexyl) phthalate
6	2-Chlorophenol	27	2-Methylnaphthalene	48	Diethyl phthalate	69	Di- <i>n</i> -octyl phthalate
7	1,3-Dichlorobenzene	28	1-Methylnaphthalene	49	Fluorene	70	Benzo[b]fluoranthene
8	1,4-Dichlorobenzene	29	Hexachlorocyclopentadiene	50	4-Chlorophenyl-phenyl ether	71	Benzo[k]fluoranthene
9	Benzyl alcohol	30	2,4,6-Trichlorophenol	51	4-Nitroaniline	72	Benzo[a]pyrene
10	1,2-Dichlorobenzene	31	2,4,5-Trichlorophenol	52	4,6-Dinitro-2-methylphenol	73	Indeno[1,2,3-cd]pyrene
11	2-Methylphenol	32	2-Chloronaphthalene	53	Diphenylamine	74	Dibenz[a,h]anthracene
12	2,2'-Oxybis(1-chloropropane)	33	2-Nitroaniline	54	Azobenzene	75	Benzo[ghi]perylene
13	N-Nitrosodi- <i>n</i> -propylamine	34	1,4-Dinitrobenzene	55	4-Bromophenyl phenyl ether	76	1,4-Dichlorobenzene-d <sub>4</sub> (IS)
14	3/4-Methylphenol	35	Dimethyl phthalate	56	Hexachlorobenzene	77	Naphthalene-d <sub>8</sub> (IS)
15	Hexachloroethane	36	1,3-Dinitrobenzene	57	Pentachlorophenol	78	Acenaphthene-d <sub>10</sub> (IS)
16	Nitrobenzene	37	2,6-Dinitrotoluene	58	Phenanthrene	79	Phenanthrene-d <sub>10</sub> (IS)
17	Isophorone	38	1,2-Dinitrobenzene	59	Anthracene	80	Chrysene-d <sub>12</sub> (IS)
18	2-Nitrophenol	39	Acenaphthylene	60	Carbazole	81	Perylene-d <sub>12</sub> (IS)
19	2,4-Dimethylphenol	40	3-Nitroaniline	61	Di- <i>n</i> -butylphthalate		
20	bis(2-Chloroethoxy) methane	41	Acenaphthene	62	Fluoranthene		
21	2,4-Dichlorophenol	42	2,4-Dinitrophenol	63	Pyrene		

표 2. 시스템 구성 및 소모품

파라미터	값
<b>자동 시료 주입기</b>	
	Agilent 7693 자동 시료 주입기와 트레이
시린지	Agilent Blue Line 10 µL tapered syringe with PTFE tipped plunger (P/N G4513-80203)
바이알	Agilent A-Line certified 2 mL amber screw top vials (P/N 5182-0716)
바이알 인서트	Agilent vial insert, 250 µL, deactivated glass with polymer feet (P/N 5181-8872)
바이알 스크루 캡	Agilent screw cap, blue, certified, PTFE/silicone/PTFE septa (P/N 5182-0723)
<b>가스 크로마토그래피</b>	
	분할/비분할 주입구를 갖춘 Agilent 8890A GC
컬럼	Agilent DB -UI 8270D, 30m x 0.25mm, 0.25µm(P/N 122-9732)
라이너	Agilent Ultra Inert, split liner with low pressure drop and glass wool (P/N 5190-2295)
셉텀	Agilent Advanced Green, nonstick 11 mm septum (P/N 5183-4759)
<b>질량 분석기</b>	
	Extractor 이온화원을 갖춘 Agilent 5977A MSD
Extraction 렌즈	9mm(P/N G3870-20449)

## 결과 및 토의

### 튜닝 및 시스템 성능 검증

시스템 성능 검증 시료를 주입하기 전에 autotune(Atune) 튜닝 알고리즘과 perfluorotributylamine(PFTBA) 검량 용액으로 5977 MS를 튜닝했습니다. 튜닝 알고리즘이 완료되면, 상기에 언급한 분석법 파라미터를 사용하여 DFTPP, pentachlorophenol, benzidine 및 4,4'-DDT를 각 25ng/μL 포함한 준휘발성 튜닝 용액 1μL을 주입했습니다. 그림 1은 주석을 단 시스템 적합성 결과와 총 이온 크로마토그램(TIC)입니다.

EPA 분석법 8270E에 따라, DFTPP 이온 존재비 기준이 표 4에 나타난 것과 일치하도록 질량 분석기를 튜닝해야 합니다. EPA 분석법 525.3에 명시된 것과 일치하도록 이온 존재비 기준을 업데이트하였으며, 최근에 EPA 분석법 8270E는 초기 검량 전의 DFTPP 튜닝을 이용한 확인 빈도를 1회로 줄였습니다.

표 3. 기기 조건.

Agilent 8890 가스 크로마토그래피 파라미터	
주입량	1μL
주입구	280°C, 펄스 분할 모드, 4:1 0.6분까지 주입 펄스 압력 30psi
운반 가스	헬륨, 1.2mL/분, 일정 유속 모드
오븐	40°C, 0.5분 유지 10°C/분으로 100°C까지, 0분 유지 25°C/분으로 260°C까지, 0분 유지 5°C/분으로 280°C까지, 0분 유지 15°C/분으로 320°C까지, 2분 유지
이송 라인 온도	320°C
Agilent 5977 질량 분석기 파라미터	
이온화원 온도	300°C
사중극자 온도	150°C
스캔 모드	티 전체 스캔 모드, m/z 35~500
EMV 모드	게인 계수
게인 계수	0.4
용매 지연	2.75분

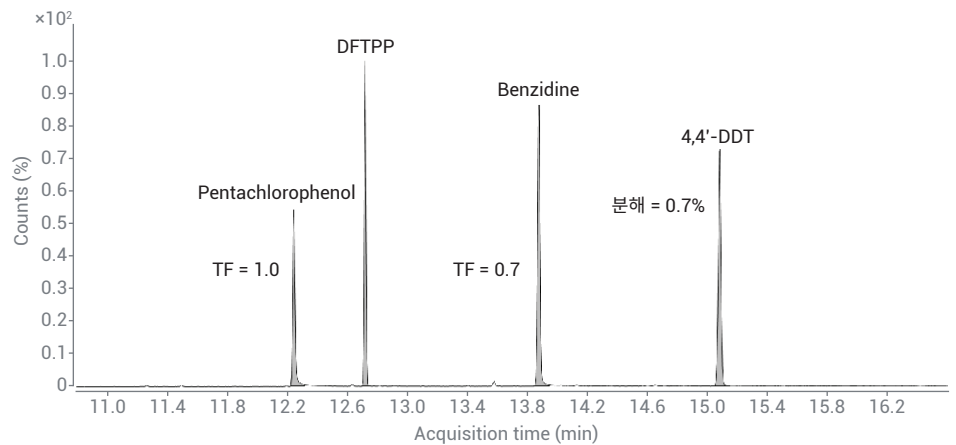


그림 1. 준휘발성 튜닝 검사 용액 25ng/μL에 대한 총 이온 크로마토그램

표 4. 미국 EPA 8270E DFTPP 이온 존재비 기준

질량(m/z)	이온 존재비 기준
68	m/z 69의 2% 미만
69	Present
70	m/z 69의 2% 미만
197	m/z 198의 2% 미만
198	Present의 기본 피크
199	m/z 198의 5~9%
365	기본 피크의 1% 초과
441	m/z 443의 150% 미만
442	기본 피크 또는 Present
443	m/z 442의 15~24%

이 연구에서는 Agilent MassHunter Environmental Quantitative Analysis 소프트웨어의 튠 평가 프로그램을 사용하여 시스템 성능을 자동으로 평가했습니다. 업데이트된 이온 존재비 기준을 입력하고 분석법에 저장했습니다. 모든 DFTPP 이온 존재비 기준은 그림 2와 같이 명시된 목표 내에 있었습니다.

4,4'-DDT 성분은 열적으로 불안정한 염화 살충제로, 시스템 비활성에 대한 프로브로 일반적으로 사용됩니다. 4,4'-DDT는 고온 GC 주입구의 활성 부위에 노출되면 4,4'-dichlorodiphenyldichloroethylene (4,4'-DDE) 및 4,4'-dichlorodiphenyldichloroethane (4,4'-DDD)으로 쉽게 분해됩니다. EPA 분석법 8270E에 따르면, 4,4'-DDE 및 4,4'-DDD로 분해되는 4,4'-DDT은 공식 1로 계산하여 20%를 초과하지 않아야 합니다. 이 연구에서 DDT의 분해는 0.7%이었습니다.

또한, 크로마토그래피 유동 경로에 비휘발성 물질이 축적되면, 테일링이 발생할 수 있어 Pentachlorophenol 및 benzidine은 시스템 활성에 대한 프로브로 사용됩니다. EPA 분석법 8270E는 pentachlorophenol 및 benzidine 테일링 계수(TF)가 10% 높지에서 계산했을 때 2의 값을 초과하지 않아야 한다고 명시하고 있습니다. 튠 평가 프로그램은 각각 1.0과 0.7에서 pentachlorophenol 및 benzidine의 피크 테일링 계수를 계산했습니다.

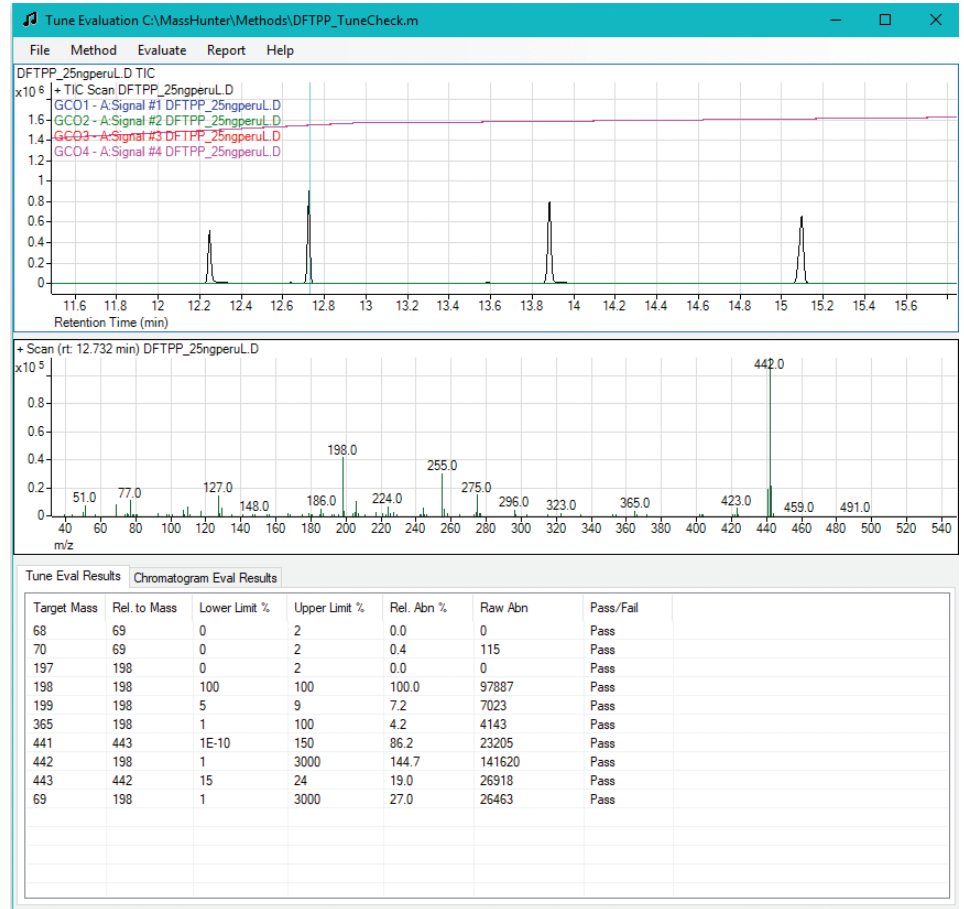


그림 2. DFTPP 튠 평가 결과

$$\% \text{ DDT 분해} = \frac{(\text{피크 면적}_{\text{DDE}} + \text{피크 면적}_{\text{DDD}})}{(\text{피크 면적}_{\text{DDE}} + \text{피크 면적}_{\text{DDD}} + \text{피크 면적}_{\text{DDT}})} \times 100$$

공식 1. DDT 분해율 계산

### 시스템 최적화

초기 검량 이전, 시스템은 최고 감응 피크에 대한 검출기 선형 범위에서 최고의 감응을 얻기 위해 게인 설정을 측정하여 시스템을 최적화했습니다. 이는 사용자에게 시스템에 대한 가장 넓은 작업 범위를 제공하며, 시간 경과에 따른 화합물의 감응 안정성을 보장합니다. GC/MS 검출기의 게인 최적화에 대한 절차 개요가 발표되었습니다.<sup>4</sup> 이상적인 게인 계수는 공식 2를 사용하여 계산할 수 있습니다. 이전 연구에서 EPA 분석법 8270의 게인 계수 조정은 SQ 질량 분석기의 기본 피크 크로마토그램(BPC)에서 가장 높은 피크의 피크 높이가  $3 \sim 5 \times 10^6$  세기가 되도록 수행해야 한다고 명시하고 있습니다.<sup>3</sup> 본 연구에서는 1.0의 예비 게인 계수를 사용하여 최고 농도의 검량 표준물질 ( $160\mu\text{g/mL}$ )을 획득하여 검출기 게인을 최적화했습니다. 또는, 예기치 않은 검출기 포화로 인한 잘못된 피크 높이의 특성 규명을 방지하기 위해 보다 낮은 초기 게인 계수로 시작하여 점차 계수를 높여가는 방법으로 시스템을 최적화할 수 있습니다. 생성된 TIC를 MassHunter Qualitative Analysis 소프트웨어에 로드하고, BPC를 추출하고 적분했습니다. 가장 높은 피크(13.043분, di-*n*-butylphthalate)의 높이는 그림 3과 같이 대략  $7.8 \times 10^6$  세기였습니다. 제안된 신호 범위의 하한을 목표로 하여 약 0.4의 새로 계산된 게인 계수를 얻었습니다. 새로운 게인 계수로 검량 표준물질  $160\mu\text{g/mL}$ 를 다시 얻었으며, 결과적으로 BPC는 약  $4.8 \times 10^6$  세기의 목표 범위에서 피크 높이를 산출했습니다.

$$\frac{\text{Present 피크 높이}}{\text{Present 게인 계수}} = \frac{\text{표적 피크 높이}}{\text{새로운 게인 계수}}$$

$$\frac{7.8 \times 10^6 \text{ 세기}}{1.0} = \frac{3 \times 10^6 \text{ 세기}}{\text{새로운 게인 계수}}$$

새로운 게인 계수 = ~0.4

공식 2. 최적의 게인 계수 계산

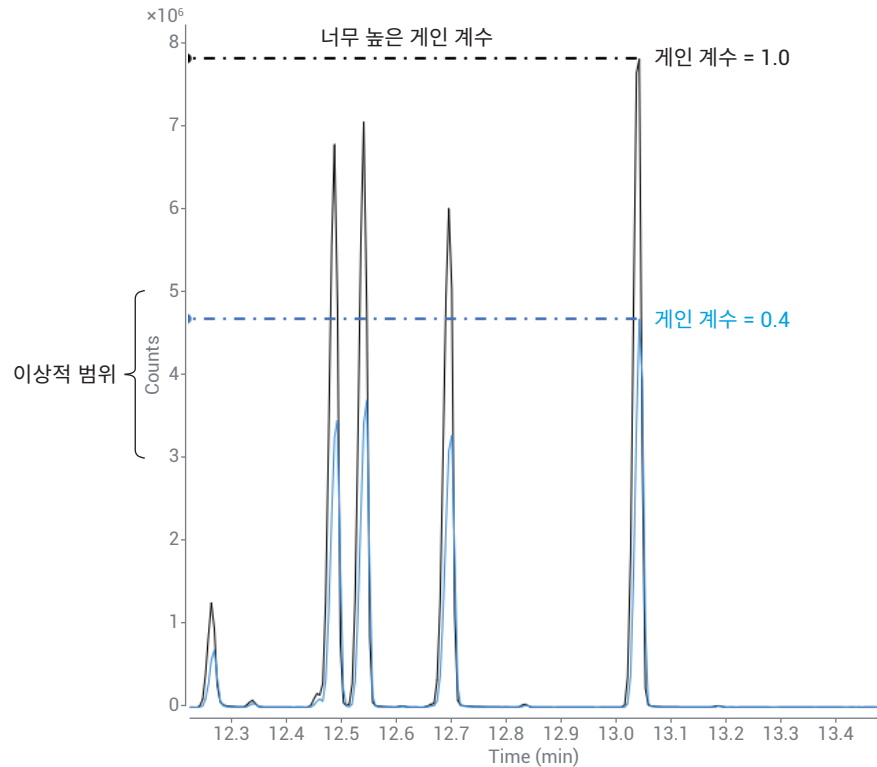


그림 3. 게인 계수 1.0(검은 실선) 및 0.4(파란 실선)로 수집한 표준물질  $160\mu\text{g/mL}$ 에 대한 기본 피크의 크로마토그래피 오버레이

### 초기 검량

초기 검량은 0.2~160µg/mL의 농도 범위에 걸쳐 13개 농도로 구성하였으며 최적화된 시스템에서 실행했습니다. 그림 4는 22분의 분석에서 표적 분석물질과 내부 표준물질의 분리를 보여줍니다.

여러 이성질체 쌍 사이의 분리를 평가하여 크로마토그래피의 품질을 평가했습니다. EPA 분석법 8270E는 중간 농도 표준물질의 피크가 최소 50% 분리되면 이성질체가 분리된 것으로 간주합니다. MassHunter MS Quantitative Analysis에서 피크 분리능 이상치 한계 값은 그림 5에서 확인되는 공식인 기본 분리능 계산 값을 사용하여 분석법에서 50%로 지정했습니다. 여러 이성질체 쌍의 분리는 그림 6과 같습니다. 주요 구조 이성질체 쌍인 benzo(b)fluoranthene과 benzo(k)fluoranthene에 대한 분리능은 중간 농도 표준물질에서 90.0%였으며, 전체 검량 범위에서는 80~90% 범위였습니다. 이성질체 쌍인 phenanthrene/anthracene 및 benz[a]anthracene/chrysene에 대한 분리능은 각각 100과 97.8%였습니다.

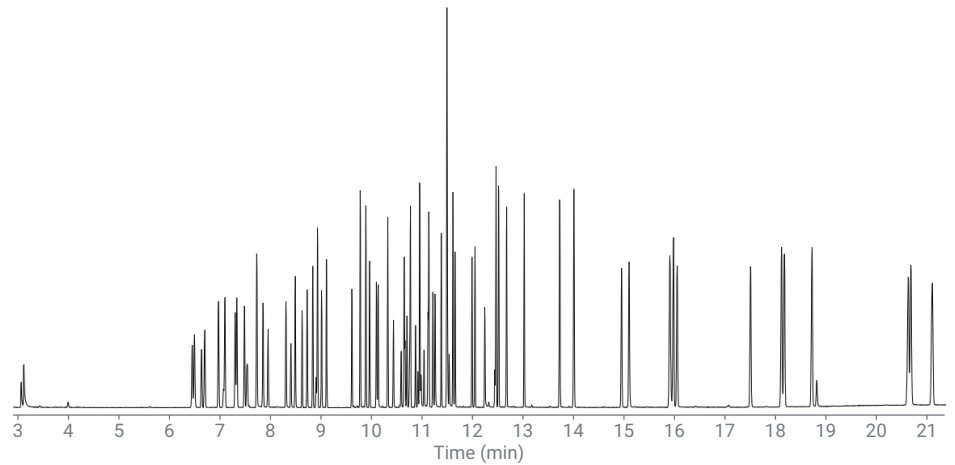


그림 4. SVOC 검량 표준물질 25µg/mL에 대한 총 이온 크로마토그램

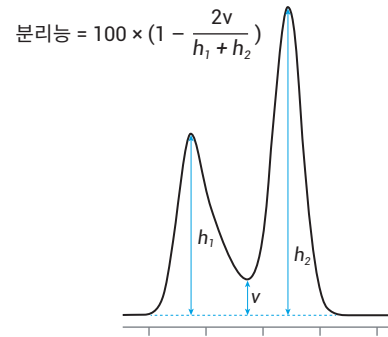


그림 5. Agilent MassHunter 기본 분리능 계산

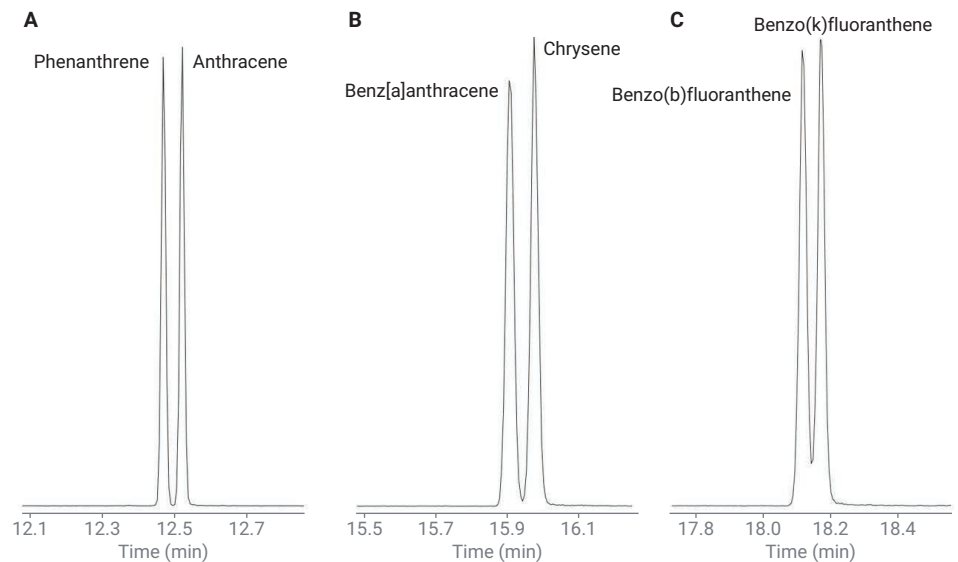


그림 6. 이성질체 쌍에 대한 중간 농도 표준물질(4µg/mL)의 추출 이온 크로마토그램: (A) phenanthrene 및 anthracene,  $m/z$  178; (B) benz[a]anthracene 및 chrysene,  $m/z$  228; (C) benzo(b)- 및 benzo(k)fluoranthene,  $m/z$  252.

SVOC의 검량은 어려울 수 있지만, EPA 분석법 8270E은 검량 기법의 유연성으로 각각의 실험실 프로젝트를 충족할 수 있습니다. 적합한 검량 모델로 각 분석물질의 감응 및 농도를 내부 표준물질의 감응 및 농도와 비교하여 상대 감응 계수(RRF)를 결정합니다. 각 분석물질에 대한 검량 범위의 평균 감응 계수를 계산해야 합니다; 상대 표준 편차(RSD)는  $\leq 20\%$ 여야 합니다. 그러나, 일부 SVOC는 불규칙적인 크로마토그래피 감응을 보이기 쉬우며 농도에 따라 감응 계수가 변할 수 있습니다. 이러한 화합물의 특성을 보다 잘 규명하기 위해, 최소 제곱 회귀로 검량을 수행할 수 있습니다. 선형 회귀는 최소 5개의 포인트가

필요하지만, 비선형 회귀는 검량선의 올바른 특성 규명을 위해 최소 6개의 포인트가 필요합니다. 회귀 수용 기준은 결정 계수  $R^2$ 가  $\geq 0.99$ 여야 합니다. 각 검량 농도는 검량선을 사용하여 다시 계산해야 합니다. 최저 농도인 표준물질의 계산 농도는 실제 값의  $\pm 50\%$  내에 있어야 하고, 다른 모든 농도는 실제 값의  $\pm 30\%$  내에 있어야 합니다. 더 낮은 검량 농도에서의 검량선을 개선하기 위해 가중 계수를 사용할 수도 있습니다.

이 연구에서 90% 이상의 분석물질이 0.2~160 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 의 측정 범위를 달성했습니다. 분석물질 6종의 경우, 가장 낮은 데이터 포인트에 대한 50% 정확도 요건을 준수하기 위해 검량선에서 가장 낮은

포인트는 떨어뜨렸습니다. 그림 7과 같이 RRF를 사용하여 거의 95%의 분석물질을 검량했으며, 이 71종 화합물에 대한 평균 RF RSD는 6.4%였습니다. 가장 최소 제곱 회귀가 필요한 네 가지 예외가 있었습니다: 분석물질 2종(4-nitrophenol 및 pentachlorophenol)은 선형 회귀로 검량했고, 또 다른 분석물질 2종(2,4-dinitrophenol 및 4,6-dinitro-2-methylphenol)은 2차 피팅이 필요했습니다. 각각의 검량선에  $1/x$  가중 계수를 사용하여,  $>0.997$ 의  $R^2$  값을 얻었습니다. 개별 화합물의 RRF, 각각의 %RSD 및 측정 범위에 대한 자세한 정보는 부록을 참조하십시오.

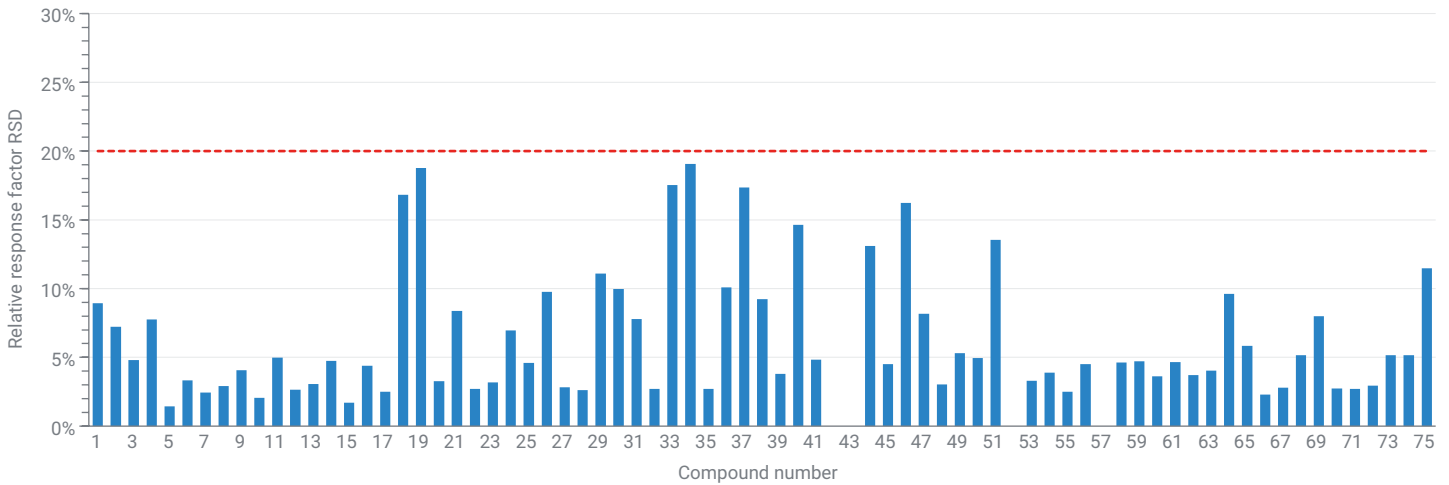
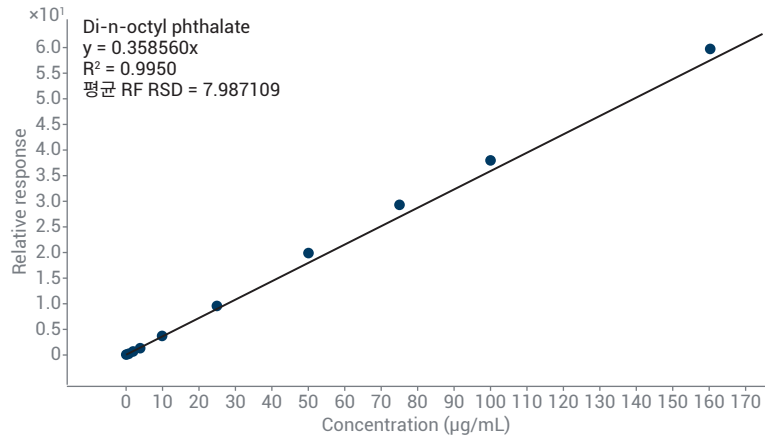


그림 7. 검량 범위에서 각 검량 화합물의 평균 RRF에 대한 RSD. 빨간 점선은 허용 가능한 RRF 검량에 대한 EPA 분석법 8270E의 한계를 나타냅니다.



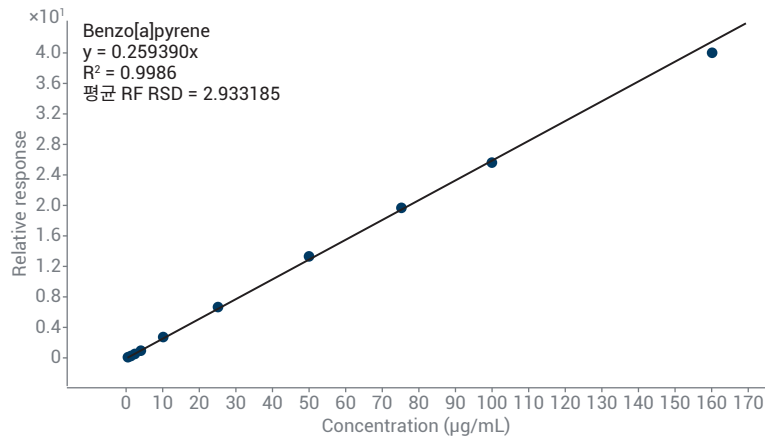
고분자량 프탈레이트와 PAH<sup>s</sup>는 기화하기 어려울 수 있고 유동 경로를 따라 표면에 쉽게 부착될 수 있습니다. 적절한 피크 모양과 감응을 보장하려면 표면적을 최소화하고 고온을 사용하는 것이 중요합니다. 300°C로 가열된 9mm 추출 렌즈와 펄스 분할 주입으로 그림 8과 9와 같이 두 종의 분석 물질인 di-n-octyl phthalate 및 benzo[a]pyrene에 대해 전체 검량 범위에서 100.0%의 우수한 평균 정확도를 얻었습니다.

0.8µg/mL 검량 표준물질을 10회 반복 주입하고 각 분석물질에 대한 RRF를 확인하여 분석법의 반복성을 평가했습니다. 그림 10은 분석물질 75종에 대한 전반적인 RSD가 3.5%로 측정되어 탁월한 감응 계수의 정밀도를 달성하였음을 보여줍니다. 각 분석물질의 각 반복 주입에 대한 개별 평균 감응 계수는 부록 표 5에서 확인할 수 있습니다.



농도 (µg/mL)	정확도 (%)
0.2	89.0
0.4	87.3
0.5	91.1
0.8	93.2
1	97.6
2	98.0
4	100.3
10	105
25	107.7
50	111.1
75	108.9
100	106.3
160	104.3

그림 8. Di-n-octyl phthalate의 검량과 정확도.



농도 (µg/mL)	정확도 (%)
0.2	99.6
0.4	97.1
0.5	96.1
0.8	96.9
1	99.5
2	100.4
4	102.9
10	103.9
25	104.6
50	102.7
75	101.4
100	98.6
160	96.3

그림 9. Benzo[a]pyrene의 검량과 정확도.

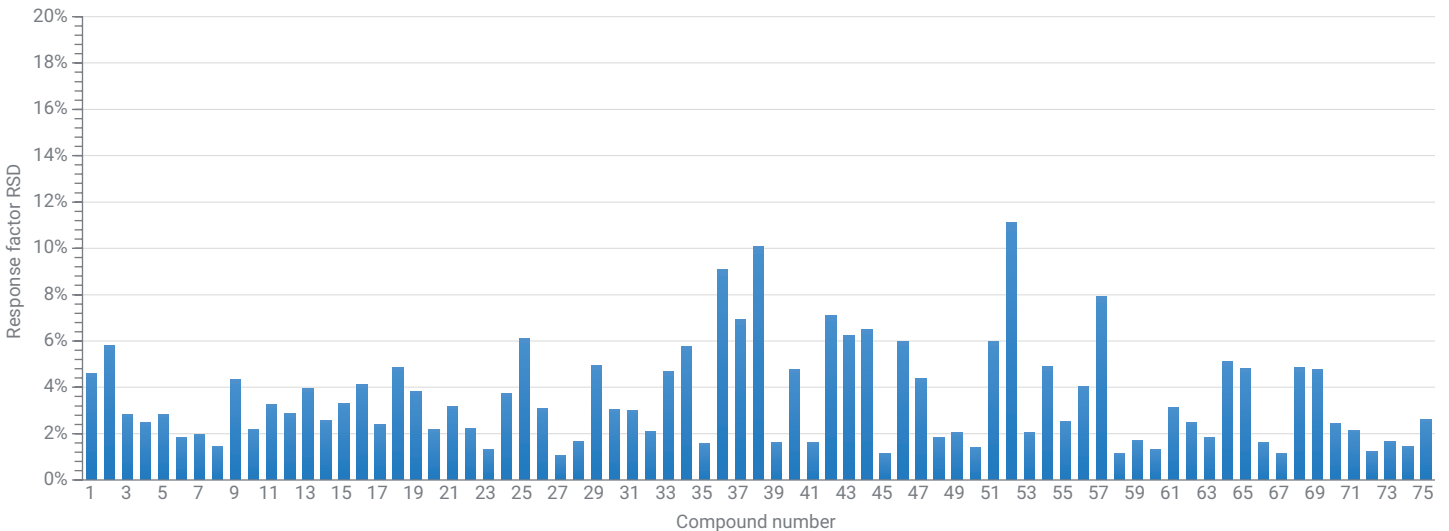


그림 10. 표준물질 0.8µg/mL을 10회 반복 주입한 각 검량 화합물의 감응 계수에 대한 RSD.

## 머무름 시간 고정

애질런트 RTL 기능은 해당 기기에 대한 장기적인 반복성을 제공하며 컬럼 유지보수 후에 분석물질에 대한 머무름 시간을 조정해야 할 필요를 제거합니다.<sup>6</sup> 분석법을 다른 GC로 옮긴 후에도 동일한 머무름 시간을 유지할 수 있어, 분석법 이전이 쉬워지고 실험실 간의 비교를 간단하게 합니다. RTL은 일련의 참조 분석 동안, 해당 분석물질에 대한 컬럼 유속과 머무름 시간 간의 관계를 연구하여 특정 화합물의 머무름 시간을 정확하게 매치하고 고정합니다. 그 결과를 사용하여 시스템을 캘리브레이션하고 분석법 파일에 이 관계를 저장합니다. 무거운 매트릭스 시료를 빈번하게 주입하고 일반적인 실험실 프로젝트로서 다양한 표적 화합물을 분석해야 하는 EPA 분석법 8270E는 RTL

적용에 이상적입니다. 이는 컬럼 유지보수 후에 머무름 시간을 재정렬하는 번거로운 작업을 제거할 수 있기 때문입니다.

이 연구에서는 10µg/mL 검량 표준물질과  $m/z$  164를 사용하여 내부 화합물 acenaphthene에 시스템을 RTL했습니다. MassHunter GC/MS Acquisition으로 RTL 검량을 시작했으며, 1.2mL/분의 일정 유속과 각각  $\pm 10\%$  및  $\pm 20\%$  유속의 분석 설정 값으로 5회 분석을 자동 스케줄링했습니다. Cleanout 실행 후, 5개의 유속 설정 값 각각에서 표준물질 10µg/mL을 수집하고, 그림 11과 같이 각 설정 값에서 acenaphthene-d<sub>10</sub>의 머무름 시간에 대한 검량선을 생성했습니다. RTL 검량 실행의 결정 계수는 0.999로, 6세대 8890 기체역학 모듈의 성능에 대한 탁월한 정밀도를 나타냅니다.

분석법을 고정한 후, 분석 컬럼의 헤드를 0.5m가량 트리밍하여 유지보수를 수행했습니다. 이어서, 일정 유속 1.2mL/분의 원래 분석 설정 값으로 유지보수 이후의 머무름 시간 이동 정도를 검토했습니다. 트리밍 이후, 검량 화합물 76종과 내부 표준물질 6종에 대한 평균 머무름 시간 이동은 원래 머무름 시간보다 0.097분 빨랐습니다. 그런 다음, MassHunter GC/MS Acquisition으로 다시 고정 작업을 시작했습니다. 트리밍 이후, Acenaphthene-d<sub>10</sub>에 대한 머무름 시간을 저장된 RTL 검량선과 비교한 후, 소프트웨어는 새로운 유속을 1.108mL/분으로 자동 결정하여 원래 머무름 시간과 일치하도록 프로그래밍했습니다. 표준물질 10ppm을 다시 주입하여 고정된 분석법의 유효성 테스트하고, 다시 고정된 머무름

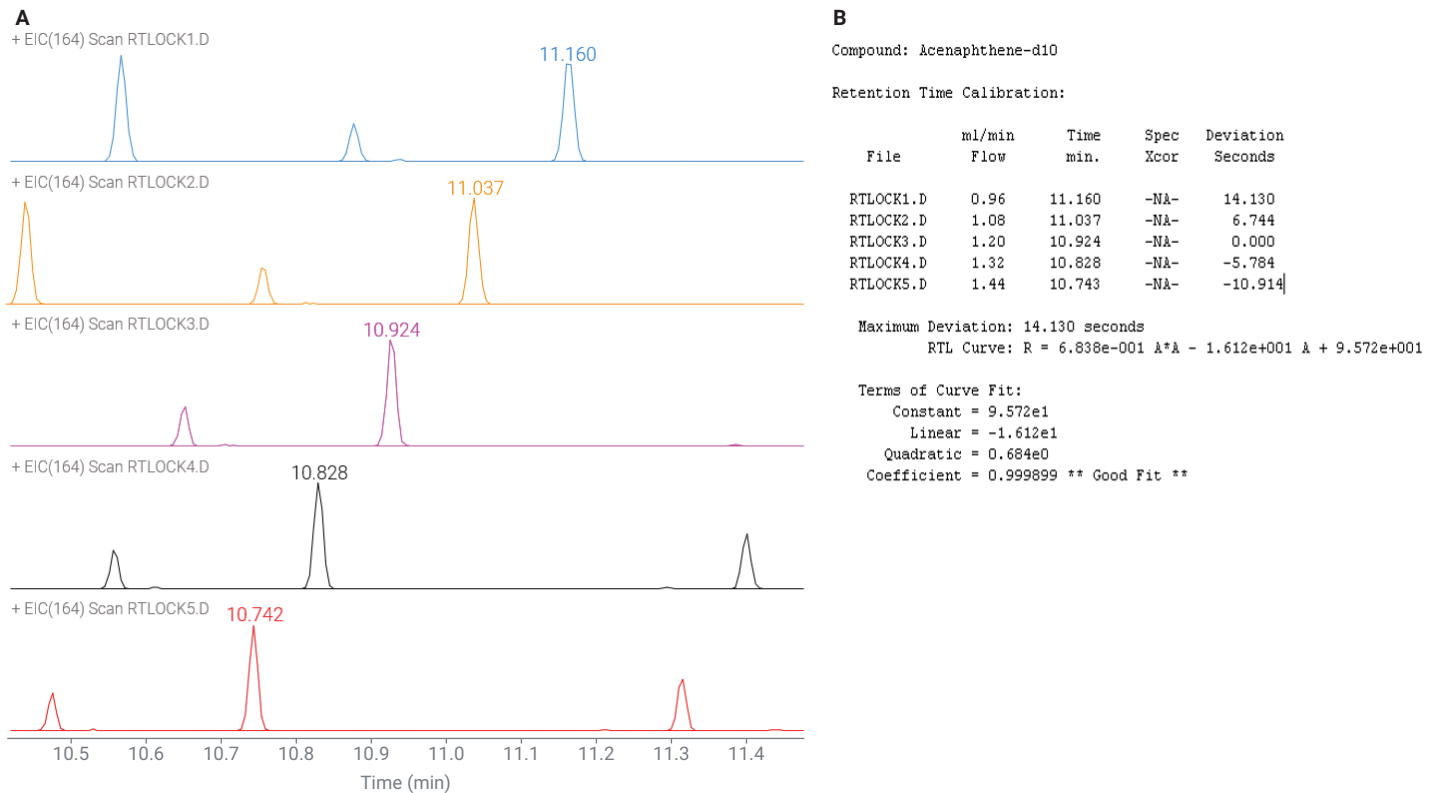


그림 11. (A) Acenaphthene-d<sub>10</sub>,  $m/z$  164에 대한 추출 이온 크로마토그램과 (B) 5개의 유속 설정 값으로 수집한 RTL 실행의 검량 결과 0.8µg/mL 표준물질 주입.

시간을 원래 머무름 시간과 비교했습니다. 전체 평균 델타는 0.003분으로 컬럼 유지보수 이전 화합물의 원래 머무름 시간과 단지 0.17초 차이였습니다. 그림 12는 18분 주변에서 선택한 분석물질에 대한 머무름의 변화와 피크가 다시 식별할 수 있는 범위로 되돌아온 RTL의 효과적인 활용을 보여줍니다. 이로써, 보다 정확한 분석물질의 식별이 가능하며 머무름 범위를 조정해야 할 필요가 없어집니다. 재고정 전과 후의 전체 분석물질 목록에 대한 개별 머무름 시간은 부록에서 확인할 수 있습니다.

## 결론

펄스 분할 주입, 9mm extractor 렌즈와 게인 최적화 검출기를 사용하는 Agilent 5977 MSD 시스템과 Agilent 8890 GC는 일반적으로 분석하는 SVOC의 넓은 측정 범위에서 탁월한 감응 계수의 정밀도를 제공합니다. 이 연구에서 초기 검량선은 미국 EPA 분석법 8270E에 명시된 모든 주요 품질 관리 파라미터를 충족했으며, 모든 감응 계수의 RSD는 매우 낮았습니다. 마지막으로, 8890 GC에서 RTL 분석법을 구현하면 컬럼 유지보수 이후에도 머무름 시간의 반복성을 유지하여 데이터 처리 시간과 가동 중단 시간을 단축할 수 있습니다.

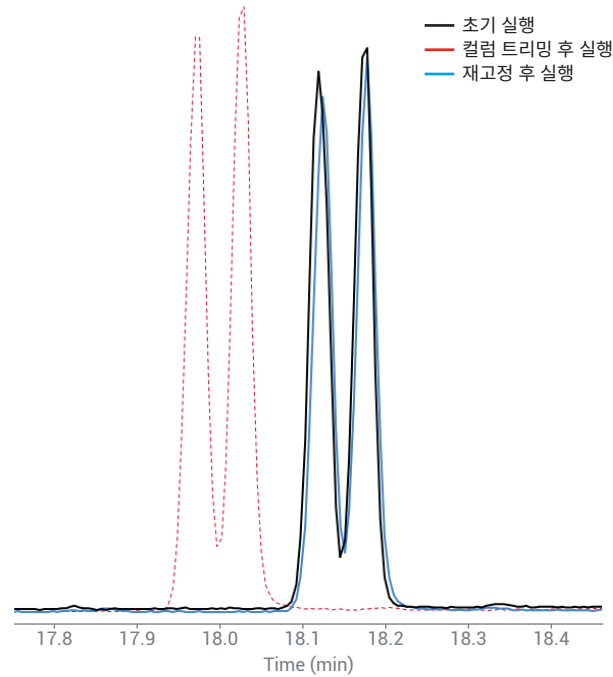


그림 12. 크로마토그래피 오버레이: 초기 검량 실행(검정 실선), 컬럼 앞쪽을 0.5m 잘라낸 이후의 머무름 시간 변화(빨간 점선)와 분석법을 재고정한 후 머무름 시간의 일관성 유지(파란 실선)

## 참고문헌

1. Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS); Method 8270E; *United States Environmental Protection Agency*, Revision 4, June **2018**.
2. EPA Method 8270 for SVOC Analysis on the 5977A Series GC/MSD, *Agilent Technologies*, publication number 5991-2153EN, **2013**.
3. EPA 8270 Re-optimized for Widest Calibration Range on the 5977 Inert Plus GC/MSD, *Agilent Technologies*, publication number 5994-0350EN, **2018**.
4. A Quick Start to Optimizing Detector Gain for GC/MSD, *Agilent Technologies*, publication number 5991-2105EN, **2013**.
5. 까다로운 매트릭스에서 PAH에 최적화된 GC/MS 분석, *Agilent Technologies*, 발행 번호 5994-0499KO, **2019**.
6. Retention Time Locking with the MSD Productivity ChemStation, *Agilent Technologies*, publication number 5989-8574EN, **2008**.

# 부록

표 5. EPA 분석법 8270E로 측정된 화합물 75종에 대한 검량 데이터

번호	화합물	RT(분)	농도( $\mu\text{g/mL}$ )에 따른 감응 계수													평균 RF	%RSD
			0.2	0.4	0.5	0.8	1	2	4	10	25	50	75	100	160		
1	N-Nitrosodimethylamine	3.062	0.565	0.555	0.544	0.495	0.504	0.563	0.571	0.574	0.592	0.623	0.644	0.650	0.654	0.580	8.9
2	Pyridine	3.121		0.919	0.945	0.939	0.945	0.971	0.991	0.936	1.038	1.058	1.087	1.119	1.101	1.004	7.2
3	Phenol	6.453	1.337	1.320	1.295	1.317	1.355	1.347	1.401	1.413	1.426	1.440	1.459	1.485	1.491	1.391	4.8
4	Aniline	6.496	1.497	1.424	1.569	1.581	1.635	1.686	1.721	1.777	1.753	1.785	1.813	1.822	1.807	1.682	7.8
5	bis(2-Chloroethyl) ether	6.640	1.109	1.136	1.100	1.094	1.133	1.120	1.120	1.134	1.131	1.130	1.146	1.147	1.131	1.125	1.4
6	2-Chlorophenol	6.704	1.207	1.246	1.253	1.254	1.285	1.264	1.312	1.332	1.324	1.329	1.337	1.338	1.316	1.292	3.3
7	1,3-Dichlorobenzene	6.977	1.436	1.434	1.384	1.431	1.476	1.463	1.476	1.507	1.490	1.489	1.505	1.481	1.437	1.462	2.4
8	1,4-Dichlorobenzene	7.100	1.553	1.396	1.440	1.445	1.469	1.472	1.496	1.544	1.504	1.501	1.506	1.491	1.450	1.482	2.9
9	Benzyl alcohol	7.309	0.737	0.754	0.757	0.723	0.744	0.753	0.795	0.788	0.793	0.799	0.810	0.818	0.807	0.775	4.1
10	1,2-Dichlorobenzene	7.341	1.385	1.421	1.444	1.375	1.388	1.400	1.430	1.435	1.420	1.404	1.421	1.395	1.337	1.404	2.1
11	2-Methylphenol	7.490	0.927	0.983	0.998	1.009	1.044	1.044	1.075	1.102	1.088	1.083	1.082	1.093	1.066	1.046	5.0
12	2,2'-Oxybis(1-chloropropane)	7.549	1.110	1.029	1.088	1.009	1.072	1.053	1.069	1.067	1.045	1.035	1.039	1.042	1.023	1.052	2.7
13	N-Nitrosodi-n-propylamine	7.731	0.607	0.673	0.660	0.690	0.684	0.664	0.674	0.685	0.670	0.669	0.676	0.676	0.677	0.670	3.1
14	3/4-Methylphenol	7.737	1.016	1.013	0.985	1.061	1.038	1.088	1.119	1.120	1.118	1.123	1.122	1.127	1.112	1.080	4.7
15	Hexachloroethane	7.860	0.550	0.523	0.543	0.540	0.547	0.549	0.556	0.556	0.552	0.553	0.552	0.554	0.537	0.547	1.7
16	Nitrobenzene	7.961	0.296	0.269	0.275	0.275	0.289	0.284	0.294	0.292	0.302	0.302	0.303	0.307	0.307	0.292	4.4
17	Isophorone	8.314	0.531	0.505	0.527	0.529	0.531	0.537	0.543	0.543	0.551	0.546	0.550	0.553	0.549	0.538	2.5
18	2-Nitrophenol	8.410	0.120	0.121	0.126	0.125	0.136	0.146	0.154	0.160	0.174	0.178	0.180	0.186	0.186	0.153	16.8
19	2,4-Dimethylphenol	8.496		0.181	0.185	0.231	0.238	0.251	0.277	0.291	0.310	0.312	0.312	0.317	0.315	0.268	18.8
20	bis(2-Chloroethoxy) methane	8.635	0.354	0.343	0.345	0.344	0.361	0.361	0.372	0.362	0.369	0.373	0.370	0.377	0.371	0.362	3.3
21	2,4-Dichlorophenol	8.737	0.259	0.239	0.234	0.250	0.253	0.278	0.284	0.288	0.295	0.295	0.290	0.295	0.292	0.273	8.4
22	1,2,4-Trichlorobenzene	8.849	0.311	0.304	0.315	0.312	0.322	0.331	0.332	0.327	0.327	0.326	0.321	0.324	0.314	0.320	2.7
23	Naphthalene	8.940	0.973	0.924	0.962	0.952	0.981	0.984	1.010	0.997	1.002	0.979	0.957	0.952	0.901	0.967	3.2
24	4-Chloroaniline	9.020	0.352	0.349	0.338	0.372	0.386	0.389	0.406	0.405	0.415	0.412	0.407	0.415	0.405	0.389	7.0
25	Hexachlorobutadiene	9.116	0.187	0.161	0.183	0.171	0.187	0.188	0.191	0.188	0.190	0.187	0.184	0.184	0.178	0.183	4.6
26	4-Chloro-3-methylphenol	9.619	0.210	0.229	0.202	0.231	0.231	0.248	0.255	0.259	0.264	0.267	0.267	0.274	0.274	0.247	9.8
27	2-Methylnaphthalene	9.785	0.665	0.629	0.623	0.650	0.649	0.663	0.670	0.673	0.674	0.662	0.650	0.652	0.620	0.652	2.8
28	1-Methylnaphthalene	9.897	0.628	0.599	0.593	0.612	0.606	0.619	0.629	0.623	0.623	0.616	0.602	0.605	0.573	0.610	2.6
29	Hexachlorocyclopentadiene	9.972	0.358	0.379	0.415	0.383	0.423	0.424	0.471	0.486	0.491	0.493	0.499	0.480	0.471	0.444	11.1
30	2,4,6-Trichlorophenol	10.106	0.313	0.311	0.300	0.341	0.352	0.356	0.378	0.398	0.391	0.395	0.393	0.393	0.389	0.362	10.0
31	2,4,5-Trichlorophenol	10.143	0.329	0.347	0.362	0.372	0.380	0.393	0.411	0.413	0.413	0.420	0.425	0.408	0.411	0.391	7.8
32	2-Chloronaphthalene	10.331	1.183	1.152	1.201	1.192	1.194	1.205	1.225	1.245	1.199	1.199	1.176	1.156	1.121	1.188	2.7
33	2-Nitroaniline	10.443	0.254	0.242	0.293	0.295	0.305	0.325	0.345	0.375	0.382	0.395	0.404	0.404	0.417	0.341	17.5
34	1,4-Dinitrobenzene	10.593	0.096	0.103	0.099	0.104	0.107	0.110	0.124	0.136	0.140	0.146	0.155	0.156	0.161	0.126	19.1
35	Dimethyl phthalate	10.652	1.337	1.260	1.234	1.308	1.301	1.337	1.341	1.355	1.290	1.291	1.324	1.301	1.271	1.304	2.7
36	1,3-Dinitrobenzene	10.668	0.081	0.072	0.076	0.086	0.078	0.089	0.084	0.094	0.086	0.093	0.098	0.097	0.099	0.087	10.1
37	2,6-Dinitrotoluene	10.710	0.206	0.194	0.208	0.222	0.222	0.250	0.273	0.298	0.294	0.297	0.307	0.309	0.315	0.261	17.4
38	1,2-Dinitrobenzene	10.753	0.117	0.109	0.110	0.123	0.127	0.127	0.137	0.138	0.138	0.139	0.144	0.140	0.140	0.130	9.2
39	Acenaphthylene	10.780	1.946	1.841	1.834	1.853	1.871	1.893	1.937	1.947	1.896	1.867	1.839	1.771	1.694	1.861	3.8
40	3-Nitroaniline	10.876	0.223	0.246	0.234	0.262	0.252	0.282	0.304	0.320	0.312	0.327	0.338	0.340	0.336	0.290	14.6
41	Acenaphthene	10.962	1.106	1.033	1.103	1.060	1.088	1.102	1.144	1.178	1.155	1.150	1.081	1.029	1.006	1.095	4.8
42	2,4-Dinitrophenol	10.989															R <sup>2</sup> 0.9977
43	4-Nitrophenol	11.047															R <sup>2</sup> 0.9984

표 5. EPA 분석법 8270E로 측정된 화합물 75종에 대한 검량 데이터(계속).

번호	화합물	RT(분)	농도(µg/mL)에 따른 감응 계수													평균 RF	%RSD
			0.2	0.4	0.5	0.8	1	2	4	10	25	50	75	100	160		
44	2,4-Dinitrotoluene	11.122	0.209	0.212	0.208	0.229	0.221	0.258	0.266	0.276	0.277	0.289	0.293	0.286	0.282	0.254	13.1
45	Dibenzofuran	11.144	1.712	1.593	1.642	1.632	1.682	1.687	1.715	1.762	1.671	1.648	1.624	1.560	1.474	1.646	4.5
46	2,3,5,6-Tetrachlorophenol	11.224	0.208	0.232	0.230	0.251	0.256	0.288	0.305	0.322	0.323	0.329	0.335	0.334	0.338	0.288	16.2
47	2,3,4,6-Tetrachlorophenol	11.267	0.273	0.275	0.289	0.287	0.282	0.325	0.319	0.337	0.325	0.331	0.333	0.335	0.333	0.311	8.2
48	Diethyl phthalate	11.384	1.319	1.227	1.242	1.289	1.275	1.309	1.332	1.316	1.298	1.297	1.272	1.227	1.218	1.279	3.0
49	Fluorene	11.497	1.384	1.275	1.245	1.280	1.326	1.328	1.346	1.363	1.290	1.263	1.241	1.195	1.143	1.283	5.3
50	4-Chlorophenyl-phenyl ether	11.502	0.628	0.616	0.611	0.592	0.642	0.654	0.646	0.658	0.627	0.616	0.599	0.575	0.556	0.617	4.9
51	4-Nitroaniline	11.507	0.220	0.227	0.255	0.264	0.274	0.300	0.321	0.330	0.333	0.284	0.306	0.315	0.334	0.289	13.5
52	4,6-Dinitro-2-methylphenol	11.544	2차 회귀, 가중 계수 1/x													R <sup>2</sup> 0.9984	
53	Diphenylamine	11.620	0.621	0.593	0.593	0.606	0.636	0.611	0.638	0.637	0.621	0.622	0.619	0.610	0.568	0.613	3.3
54	Azobenzene	11.662	0.171	0.169	0.178	0.175	0.192	0.187	0.185	0.187	0.185	0.186	0.189	0.187	0.183	0.183	3.9
55	4-Bromophenyl phenyl ether	11.999	0.240	0.225	0.226	0.230	0.224	0.230	0.237	0.240	0.235	0.232	0.234	0.236	0.224	0.232	2.5
56	Hexachlorobenzene	12.058	0.256	0.245	0.264	0.266	0.292	0.276	0.285	0.278	0.277	0.276	0.275	0.277	0.267	0.272	4.5
57	Pentachlorophenol	12.251	선형 회귀, 가중 계수 1/x													R <sup>2</sup> 0.9991	
58	Phenanthrene	12.470	1.107	1.053	1.068	1.075	1.081	1.090	1.106	1.095	1.095	1.060	1.030	0.992	0.938	1.061	4.6
59	Anthracene	12.524	1.105	1.015	1.079	1.079	1.103	1.103	1.134	1.129	1.117	1.085	1.052	1.030	0.956	1.076	4.7
60	Carbazole	12.679	0.940	0.924	0.938	0.944	0.988	0.996	1.007	1.025	0.980	0.939	0.936	0.943	0.917	0.960	3.6
61	Di-n-butylphthalate	13.032	1.208	1.118	1.139	1.146	1.149	1.196	1.230	1.242	1.274	1.255	1.241	1.212	1.109	1.194	4.6
62	Fluoranthene	13.732	1.135	1.082	1.105	1.101	1.151	1.148	1.187	1.211	1.201	1.186	1.184	1.159	1.100	1.150	3.7
63	Pyrene	14.011	1.297	1.259	1.263	1.324	1.310	1.328	1.315	1.333	1.334	1.297	1.258	1.213	1.160	1.284	4.0
64	Butylbenzylphthalate	14.957	0.492	0.485	0.476	0.496	0.510	0.537	0.554	0.579	0.592	0.608	0.611	0.604	0.606	0.550	9.6
65	bis(2-Ethylhexyl)adipate	15.107	0.526	0.486	0.486	0.500	0.511	0.527	0.528	0.545	0.554	0.580	0.570	0.559	0.557	0.533	5.8
66	Benzo[a]anthracene	15.909	1.274	1.186	1.192	1.192	1.206	1.204	1.213	1.228	1.235	1.243	1.211	1.185	1.176	1.211	2.3
67	Chrysene	15.979	1.182	1.147	1.143	1.200	1.177	1.223	1.215	1.238	1.221	1.211	1.179	1.134	1.176	1.188	2.8
68	bis(2-Ethylhexyl) phthalate	16.054	0.810	0.785	0.780	0.809	0.841	0.839	0.837	0.877	0.897	0.917	0.896	0.873	0.858	0.848	5.2
69	Di-n-octyl phthalate	17.509	1.276	1.252	1.307	1.337	1.400	1.406	1.439	1.506	1.545	1.593	1.562	1.525	1.496	1.434	8.0
70	Benzo[b]fluoranthene	18.118	1.022	0.990	1.011	1.041	1.039	1.049	1.076	1.078	1.076	1.071	1.073	1.027	1.028	1.045	2.7
71	Benzo[k]fluoranthene	18.177	1.113	1.081	1.040	1.081	1.076	1.100	1.101	1.100	1.107	1.079	1.075	1.027	1.028	1.078	2.7
72	Benzo[a]pyrene	18.717	1.034	1.008	0.997	1.005	1.032	1.042	1.068	1.078	1.085	1.065	1.052	1.024	1.000	1.038	2.9
73	Indeno[1,2,3-cd]pyrene	20.627	0.995	0.973	0.973	0.982	0.999	1.038	1.058	1.074	1.078	1.028	0.984	0.944	0.901	1.002	5.2
74	Dibenz[a,h]anthracene	20.680	1.006	0.983	1.029	1.047	1.042	1.065	1.112	1.113	1.097	1.076	1.048	0.993	0.930	1.042	5.1
75	Benzo[ghi]perylene	21.103	1.064	1.049	1.049	1.063	1.089	1.101	1.130	1.117	1.098	1.002	0.920	0.832	0.747	1.020	11.5

표 6. 0.8µg/mL시료의 분석물질 75종 에 대한 10회 반복 측정의 감응 계수.

화합물	반복 주입 횟수										통계	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	평균	%RSD
N-Nitrosodimethylamine	0.444	0.405	0.405	0.415	0.400	0.406	0.396	0.369	0.393	0.408	0.404	4.6
Pyridine	0.707	0.727	0.766	0.714	0.764	0.777	0.707	0.687	0.659	0.663	0.717	5.8
Phenol	1.160	1.106	1.117	1.106	1.144	1.116	1.090	1.049	1.080	1.099	1.107	2.8
Aniline	1.387	1.409	1.419	1.408	1.439	1.347	1.406	1.382	1.397	1.322	1.392	2.5
bis(2-Chloroethyl) ether	1.036	0.953	1.020	1.020	1.052	0.982	1.004	0.987	0.992	1.005	1.005	2.8
2-Chlorophenol	1.113	1.073	1.120	1.117	1.115	1.123	1.115	1.064	1.098	1.096	1.103	1.8
1,3-Dichlorobenzene	1.435	1.392	1.465	1.391	1.459	1.431	1.430	1.396	1.393	1.413	1.420	2.0
1,4-Dichlorobenzene	1.468	1.475	1.457	1.467	1.481	1.497	1.512	1.436	1.470	1.490	1.475	1.4
Benzyl alcohol	0.625	0.630	0.624	0.637	0.633	0.645	0.625	0.606	0.554	0.593	0.617	4.3
1,2-Dichlorobenzene	1.411	1.342	1.399	1.384	1.451	1.411	1.357	1.382	1.378	1.384	1.390	2.2
2-Methylphenol	0.903	0.827	0.897	0.878	0.897	0.861	0.841	0.845	0.834	0.861	0.864	3.2
2,2'-Oxybis(1-chloropropane)	0.888	0.847	0.858	0.836	0.903	0.859	0.857	0.884	0.823	0.853	0.861	2.9
N-Nitrosodi-n-propylamine	0.571	0.509	0.511	0.539	0.536	0.539	0.518	0.508	0.503	0.522	0.526	3.9
3/4-Methylphenol	0.934	0.870	0.918	0.887	0.901	0.902	0.862	0.900	0.868	0.883	0.892	2.6
Hexachloroethane	0.492	0.501	0.505	0.497	0.537	0.509	0.476	0.510	0.484	0.496	0.501	3.3
Nitrobenzene	0.246	0.230	0.226	0.229	0.225	0.227	0.213	0.217	0.231	0.218	0.226	4.1
Isophorone	0.431	0.443	0.428	0.419	0.431	0.422	0.415	0.411	0.411	0.424	0.423	2.4
2-Nitrophenol	0.108	0.109	0.107	0.101	0.105	0.105	0.094	0.102	0.099	0.097	0.103	4.9
2,4-Dimethylphenol	0.181	0.178	0.180	0.188	0.184	0.177	0.174	0.167	0.167	0.175	0.177	3.8
bis(2-Chloroethoxy) methane	0.310	0.313	0.311	0.298	0.309	0.312	0.293	0.303	0.303	0.304	0.305	2.2
2,4-Dichlorophenol	0.249	0.226	0.240	0.225	0.236	0.232	0.227	0.238	0.236	0.233	0.234	3.2
1,2,4-Trichlorobenzene	0.339	0.339	0.336	0.328	0.343	0.332	0.333	0.322	0.341	0.347	0.336	2.2
Naphthalene	0.967	0.962	0.941	0.967	0.962	0.954	0.937	0.936	0.966	0.949	0.954	1.3
4-Chloroaniline	0.341	0.347	0.339	0.322	0.337	0.319	0.319	0.325	0.312	0.343	0.330	3.7
Hexachlorobutadiene	0.171	0.200	0.195	0.199	0.202	0.200	0.193	0.175	0.198	0.207	0.194	6.1
4-Chloro-3-methylphenol	0.193	0.195	0.186	0.191	0.182	0.179	0.185	0.186	0.178	0.182	0.186	3.1
2-Methylnaphthalene	0.637	0.626	0.629	0.627	0.619	0.617	0.618	0.621	0.630	0.631	0.625	1.0
1-Methylnaphthalene	0.572	0.595	0.579	0.585	0.587	0.565	0.576	0.591	0.595	0.582	0.583	1.7
Hexachlorocyclopentadiene	0.399	0.378	0.394	0.393	0.365	0.397	0.393	0.343	0.394	0.364	0.382	4.9
2,4,6-Trichlorophenol	0.300	0.293	0.295	0.282	0.282	0.297	0.278	0.286	0.277	0.277	0.287	3.0
2,4,5-Trichlorophenol	0.337	0.321	0.339	0.336	0.334	0.325	0.327	0.310	0.322	0.315	0.327	3.0
2-Chloronaphthalene	1.182	1.161	1.205	1.165	1.193	1.179	1.133	1.169	1.159	1.126	1.167	2.1
2-Nitroaniline	0.231	0.235	0.220	0.224	0.222	0.218	0.213	0.225	0.200	0.209	0.220	4.7
1,4-Dinitrobenzene	0.095	0.089	0.088	0.090	0.094	0.089	0.082	0.087	0.078	0.085	0.088	5.8
Dimethyl phthalate	1.261	1.252	1.247	1.202	1.223	1.224	1.214	1.248	1.242	1.252	1.237	1.6
1,3-Dinitrobenzene	0.114	0.106	0.118	0.117	0.105	0.093	0.097	0.111	0.093	0.099	0.105	9.1
2,6-Dinitrotoluene	0.212	0.183	0.195	0.177	0.186	0.183	0.167	0.174	0.177	0.177	0.183	6.9
1,2-Dinitrobenzene	0.074	0.078	0.085	0.073	0.082	0.072	0.075	0.076	0.060	0.064	0.074	10.1
Acenaphthylene	1.726	1.712	1.746	1.677	1.747	1.718	1.688	1.716	1.763	1.690	1.718	1.6
3-Nitroaniline	0.205	0.186	0.201	0.196	0.188	0.206	0.191	0.185	0.197	0.178	0.193	4.8
Acenaphthene	1.048	1.036	1.068	1.038	1.072	1.085	1.070	1.077	1.055	1.048	1.059	1.6
2,4-Dinitrophenol	0.036	0.032	0.032	0.037	0.035	0.030	0.036	0.031	0.033	0.033	0.033	7.1
4-Nitrophenol	0.115	0.099	0.112	0.103	0.102	0.102	0.100	0.103	0.106	0.092	0.103	6.3
2,4-Dinitrotoluene	0.237	0.211	0.211	0.193	0.211	0.195	0.192	0.203	0.206	0.195	0.205	6.5
Dibenzofuran	1.692	1.684	1.711	1.661	1.711	1.721	1.686	1.703	1.691	1.665	1.692	1.2

표 6. 0.8µg/mL 시료의 분석물질 75종에 대한 10회 반복 측정의 감응 계수(계속).

화합물	반복 주입 횟수										통계	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	평균	%RSD
2,3,5,6-Tetrachlorophenol	0.243	0.230	0.205	0.213	0.213	0.231	0.208	0.204	0.213	0.210	0.217	6.0
2,3,4,6-Tetrachlorophenol	0.273	0.263	0.257	0.241	0.263	0.235	0.252	0.255	0.253	0.245	0.254	4.4
Diethyl phthalate	1.172	1.177	1.147	1.134	1.161	1.162	1.124	1.126	1.173	1.128	1.150	1.8
Fluorene	1.254	1.269	1.322	1.241	1.256	1.260	1.224	1.250	1.269	1.246	1.259	2.0
4-Chlorophenyl-phenyl ether	0.668	0.657	0.645	0.658	0.647	0.661	0.642	0.651	0.641	0.660	0.653	1.4
4-Nitroaniline	0.231	0.208	0.216	0.215	0.226	0.213	0.204	0.217	0.202	0.186	0.212	6.0
4,6-Dinitro-2-methylphenol	0.038	0.041	0.040	0.040	0.034	0.041	0.046	0.036	0.032	0.033	0.038	11.1
Diphenylamine	0.575	0.559	0.570	0.553	0.552	0.557	0.549	0.545	0.544	0.539	0.554	2.0
Azobenzene	0.165	0.174	0.165	0.155	0.162	0.174	0.162	0.169	0.151	0.154	0.163	4.9
4-Bromophenyl phenyl ether	0.230	0.236	0.221	0.220	0.230	0.220	0.229	0.235	0.227	0.231	0.228	2.5
Hexachlorobenzene	0.276	0.305	0.306	0.291	0.293	0.304	0.311	0.305	0.292	0.279	0.296	4.0
Pentachlorophenol	0.084	0.086	0.084	0.079	0.070	0.083	0.076	0.084	0.086	0.069	0.080	7.9
Phenanthrene	1.044	1.072	1.075	1.065	1.055	1.068	1.069	1.049	1.044	1.069	1.061	1.1
Anthracene	1.012	1.021	1.014	1.014	0.975	1.016	1.011	0.983	0.981	1.013	1.004	1.7
Carbazole	0.868	0.871	0.842	0.857	0.858	0.859	0.851	0.842	0.859	0.837	0.854	1.3
Di-n-butylphthalate	0.931	0.924	0.867	0.884	0.870	0.889	0.882	0.856	0.855	0.852	0.881	3.1
Fluoranthene	1.048	1.084	1.018	1.042	1.056	1.034	1.042	1.051	0.998	1.003	1.038	2.5
Pyrene	1.264	1.228	1.291	1.262	1.243	1.282	1.269	1.291	1.291	1.240	1.266	1.8
Butylbenzylphthalate	0.354	0.328	0.333	0.311	0.326	0.313	0.303	0.307	0.303	0.312	0.319	5.1
bis(2-Ethylhexyl)adipate	0.302	0.284	0.275	0.278	0.274	0.266	0.281	0.262	0.254	0.269	0.275	4.8
Benzo[a]anthracene	1.068	1.050	1.064	1.056	1.062	1.047	1.023	1.074	1.027	1.040	1.051	1.6
Chrysene	1.242	1.216	1.209	1.216	1.225	1.208	1.189	1.212	1.200	1.211	1.213	1.2
bis(2-Ethylhexyl) phthalate	0.517	0.518	0.493	0.502	0.474	0.458	0.468	0.480	0.462	0.455	0.483	4.9
Di-n-octyl phthalate	0.743	0.708	0.659	0.668	0.659	0.649	0.642	0.664	0.664	0.639	0.669	4.8
Benzo[b]fluoranthene	0.982	0.968	0.934	0.970	0.924	0.975	0.955	0.929	0.932	0.984	0.955	2.5
Benzo[k]fluoranthene	1.023	1.017	1.067	1.086	1.052	1.053	1.044	1.035	1.053	1.015	1.044	2.2
Benzo[a]pyrene	0.895	0.897	0.885	0.893	0.903	0.883	0.875	0.888	0.902	0.911	0.893	1.2
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	0.842	0.845	0.827	0.839	0.817	0.834	0.866	0.840	0.857	0.842	0.841	1.7
Dibenz[a,h]anthracene	0.918	0.926	0.940	0.921	0.936	0.922	0.921	0.944	0.957	0.950	0.934	1.5
Benzo[ghi]perylene	0.979	1.041	1.052	1.031	1.046	1.065	1.003	1.005	1.044	1.016	1.028	2.6

표 7. 분석 컬럼의 0.5m를 트리밍하기 전과 후의 분석물질 75종에 대한 RTL 데이터.

번호	화합물	초기 RT(분)	트리밍 후 RT(분)	재고정한 RT(분)
1	N-Nitrosodimethylamine	3.062	2.960	3.056
2	Pyridine	3.121	3.019	3.115
3	Phenol	6.453	6.341	6.458
4	Aniline	6.496	6.378	6.501
5	bis(2-Chloroethyl) ether	6.64	6.522	6.640
6	2-Chlorophenol	6.704	6.587	6.704
7	1,3-Dichlorobenzene	6.977	6.865	6.977
8	1,4-Dichlorobenzene	7.1	6.999	7.105
9	Benzyl alcohol	7.309	7.207	7.309
10	1,2-Dichlorobenzene	7.341	7.239	7.341
11	2-Methylphenol	7.49	7.394	7.496
12	2,2'-Oxybis(1-chloropropane)	7.549	7.442	7.549
13	N-Nitrosodi-n-propylamine	7.731	7.640	7.737
14	3/4-Methylphenol	7.737	7.646	7.737
15	Hexachloroethane	7.86	7.763	7.865
16	Nitrobenzene	7.961	7.865	7.961
17	Isophorone	8.314	8.223	8.314
18	2-Nitrophenol	8.41	8.325	8.416
19	2,4-Dimethylphenol	8.496	8.416	8.501
20	bis(2-Chloroethoxy) methane	8.635	8.550	8.635
21	2,4-Dichlorophenol	8.737	8.651	8.737
22	1,2,4-Trichlorobenzene	8.849	8.764	8.849
23	Naphthalene	8.94	8.855	8.945
24	4-Chloroaniline	9.02	8.940	9.026
25	Hexachlorobutadiene	9.116	9.036	9.122
26	4-Chloro-3-methylphenol	9.619	9.545	9.625
27	2-Methylnaphthalene	9.785	9.705	9.790
28	1-Methylnaphthalene	9.897	9.817	9.903
29	Hexachlorocyclopentadiene	9.972	9.892	9.978
30	2,4,6-Trichlorophenol	10.106	10.026	10.111
31	2,4,5-Trichlorophenol	10.143	10.063	10.143
32	2-Chloronaphthalene	10.331	10.251	10.336
33	2-Nitroaniline	10.443	10.363	10.443
34	1,4-Dinitrobenzene	10.593	10.513	10.598
35	Dimethyl phthalate	10.652	10.571	10.652
36	1,3-Dinitrobenzene	10.668	10.593	10.673
37	2,6-Dinitrotoluene	10.71	10.630	10.710
38	1,2-Dinitrobenzene	10.753	10.678	10.759
39	Acenaphthylene	10.78	10.694	10.780
40	3-Nitroaniline	10.876	10.796	10.882
41	Acenaphthene	10.962	10.882	10.967

42	2,4-Dinitrophenol	10.989	10.908	10.989
43	4-Nitrophenol	11.047	10.967	11.047
44	2,4-Dinitrotoluene	11.122	11.047	11.128
45	Dibenzofuran	11.144	11.064	11.144
46	2,3,5,6-Tetrachlorophenol	11.224	11.144	11.229
47	2,3,4,6-Tetrachlorophenol	11.267	11.187	11.272
48	Diethyl phthalate	11.384	11.310	11.390
49	Fluorene	11.497	11.417	11.502
50	4-Chlorophenyl-phenyl ether	11.502	11.422	11.502
51	4-Nitroaniline	11.507	11.427	11.507
52	4,6-Dinitro-2-methylphenol	11.544	11.459	11.545
53	Diphenylamine	11.62	11.540	11.620
54	Azobenzene	11.662	11.582	11.662
55	4-Bromophenyl phenyl ether	11.999	11.919	11.999
56	Hexachlorobenzene	12.058	11.973	12.058
57	Pentachlorophenol	12.251	12.171	12.256
58	Phenanthrene	12.47	12.390	12.475
59	Anthracene	12.524	12.438	12.524
60	Carbazole	12.679	12.599	12.684
61	Di-n-butylphthalate	13.032	12.952	13.032
62	Fluoranthene	13.732	13.631	13.732
63	Pyrene	14.011	13.909	14.016
64	Butylbenzylphthalate	14.957	14.834	14.957
65	bis(2-Ethylhexyl)adipate	15.107	14.984	15.102
66	Benzo[a]anthracene	15.909	15.770	15.915
67	Chrysene	15.979	15.835	15.984
68	bis(2-Ethylhexyl) phthalate	16.054	15.915	16.054
69	Di-n-octyl phthalate	17.509	17.359	17.509
70	Benzo[b]fluoranthene	18.118	17.974	18.124
71	Benzo[k]fluoranthene	18.177	18.028	18.177
72	Benzo[a]pyrene	18.717	18.578	18.723
73	Indeno[1,2,3-cd]pyrene	20.627	20.467	20.638
74	Dibenz[a,h]anthracene	20.68	20.520	20.686
75	Benzo[ghi]perylene	21.103	20.927	21.114
76	1,4-Dichlorobenzene-d <sub>4</sub> (ISTD)	7.073	6.966	7.079
77	Naphthalene-d <sub>8</sub> (ISTD)	8.913	8.828	8.919
78	Acenaphthene-d <sub>10</sub> (ISTD)	10.924	10.844	10.930
79	Phenanthrene-d <sub>10</sub> (ISTD)	12.449	12.363	12.449
80	Chrysene-d <sub>12</sub> (ISTD)	15.931	15.786	15.931
81	Perylene-d <sub>12</sub> (ISTD)	18.819	18.680	18.824

www.agilent.com/chem

DE.4455439815

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2020  
2020년 5월 6일, 한국에서 인쇄  
5994-1500KO

한국애질런트테크놀로지스(주)  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
A+ 에셋타워 9층, 06621  
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)  
팩스: 82-2-3452-2451  
이메일: korea-inquiry\_lsca@agilent.com

