

# 使用 SPME ARROW-GC/MS/MS 平台 对水中的异味化合物进行筛查和定量 分析

## 作者

孔晔、曹喆

安捷伦科技（中国）有限公司

## 摘要

本文介绍了一种新型 SPME ARROW 专利技术，并将该技术与安捷伦独有的异味物质数据库相结合，对生活饮用水中的异味物质进行筛查和定量分析。其中利用 Agilent PAL RTC 全自动样品前处理平台，结合 Agilent 7890B/7000D 三重四极杆气质联用系统，实现水样的在线萃取、富集、进样等整个流程的自动化，无需人工干预。可降低有机溶剂的消耗，提高操作人员的安全性，并大幅提升分析稳定性。该方法与常规检测方法相比，检测限下降一个数量级；准确度高，所有化合物的线性相关系数高于 0.99；具有优异的重现性，加标浓度为 10 ng/L 的实际水样重复测定 10 次所得到的所有化合物的 RSD 值均小于 20%，且 90% 以上化合物的 RSD 小于 10%。本方法的各项性能均满足生活饮用水异味物质的检测要求，并在实际水样检测中不受基质干扰。

## 前言

水体富营养化导致水体异味 (off-flavor) 是一个严重且普遍存在的环境问题。异味将直接对饮用水和水产品的质量造成影响，并最终危害到饮用水和水产品的品质，造成消费者不安全感 and 渔业经济损失。因此水体中的异味物质研究受到越来越多的关注。水体中最常见的两种异味物质是土臭素 (Geosmin) 和 2-甲基异莰醇 (2-Methylisoborneol, 2-MIB)，这两种物质已经得到广泛研究，在生活饮用水卫生标准 [1] 当中也规定了限值。但随着工业的发展和各种环境问题的爆发，其他水体异味（如土霉味、氯味、草木味、沼气味、芳香味、鱼腥味、药水味及化学品味等）也需要引起关注。了解水体中异味物质的种类、分布和浓度水平是判断异味物质来源、采取针对性控制措施的基础，因此建立准确可靠并且可同时分析多种异味物质的方法十分必要。

针对这一研究课题，安捷伦公司开发出异味物质 MRM 数据库，其中包含 251 种异味物质的基本信息和 MRM 采集信息。利用安捷伦特有的保留时间锁定功能，能够使保留时间得到很好的重现，直接一键操作建立 251 种异味物质的 MRM 采集方法，通过一针进样即可对样品中的两百多种异味物质进行筛查分析。

另外，由于异味物质的嗅觉阈值极低，因此需要高灵敏度检测方法。2016 年颁布的国家标准检测方法《GB/T 32470-2016 生活饮用水臭味物质 土臭素和 2- 甲基异莰醇检验方法》[2] 规定，采用固相微萃取技术吸附样品中的土臭素和 2- 甲基异莰醇，经顶空富集后用气质联用仪进行分离和测定。但是该方法使用手动固相萃取，耗时长，无法实现自动化，特别不利于大批量样品的检测。并且固相微萃取纤维头采用石英纤维，极易折断，寿命较短。为克服以上困难，本研究使用 PAL RTC 全自动样品处理平台，采用新型 SPME ARROW 专利技术取代传统的 SPME 纤维头进行全自动的固相微萃取富集和脱附。

SPME ARROW（图 1 和图 2）是一项全新的专利技术，该技术基于对 SPME 纤维头的改进。其采用金属材质，机械性能大大增强；前端采用箭型端头，更容易插入样品瓶垫和进样口隔垫中；采用更长、更厚的涂层，增加了吸附容量，从而大大提高了检测灵敏度。与 PAL RTC 全自动样品处理平台相结合，能够实现样品的全自动检测，具有省时省力、萃取效率高、无溶剂消耗、取样量少、受基质干扰小、易实现全自动检测等优点。

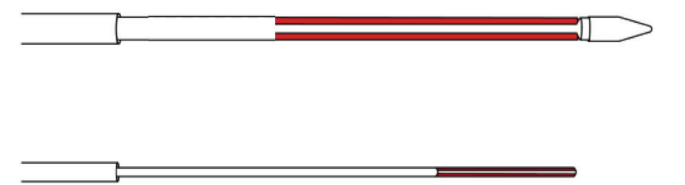


图 1. 图 1. SPME ARROW (上图) 与 SPME 纤维头 (下图)



图 2. 不同颜色的 SPME ARROW

## 实验部分

### 试剂和样品

标准品：化合物纯品或溶液均购自上海安谱实验科技股份有限公司，具体列表详见表 1。

氯化钠：为优级纯，购自国药集团化学试剂有限公司，在 450 °C 下烘烤 2 h 备用。

甲醇：色谱纯，购自 Merck。

所用实验用水为现配的超纯水。

表 1. 化合物标准品清单

编号	化合物名称	CAS 号	名称	规格
1	正戊醛	110-62-3	戊醛，≥ 95.0%	5 mL
2	4- 溴苯酚	106-41-2	4- 溴苯酚，≥ 98.0%	5 g
3	丁酸甲酯	623-42-7	丁酸甲酯 (C4:0) 标准品	1 g
4	α- 紫罗兰酮	127-41-3	α- 紫罗兰酮，≥ 90.0%	5 g
5	桉叶油醇	470-82-6	1,8- 桉树脑，≥ 98.0%	5 mL
6	二氢茉莉酮酸甲酯	24851-98-7	二氢茉莉酮酸甲酯（顺反异构体混合物），≥ 95.0%	2 mL
7	异松油烯	586-62-9	萜品油烯，≥ 85.0%	5 mL
8	吡嗪	290-37-9	吡嗪，≥ 98.0%	5 g
9	噻啉	289-95-2	噻啉自由基，≥ 98.0%	1 g
10	戊酸戊酯	2173-56-0	戊酸戊酯，≥ 98.0%	5 mL
11	对伞花烃	99-87-6	4- 异丙基甲苯标准品	1 mL
12	苯甲酸苄酯	120-51-4	苯甲酸苄酯标准品	5000 ng/μL，溶于正己烷中，1 mL
13	吡啶	110-86-1	吡啶标准品	1000 mg/L，溶于二氯甲烷中，1 mL
14	β- 蒎烯	127-91-3	β- 蒎烯	20 mg
15	L- 薄荷醇	2216-51-5	L- 薄荷醇	20 mg
16	萘	91-20-3	萘标准品	100 mg/L，溶于甲醇中，1 mL
17	芳樟醇	78-70-6	芳樟醇	20 mg
18	香兰素	121-33-5	香兰素	20 mg
19	1- 溴丙烷	106-94-5	1- 溴丙烷，≥ 98.0%	5 g
20	对叔丁基甲苯	98-51-1	4- 叔丁基甲苯，≥ 95.0%	5 mL
21	叔戊基苯	2049-95-8	叔戊基苯，≥ 97.0%	5 mL
22	碳酸二乙酯	105-58-8	碳酸二乙酯，≥ 98.0%	5 g
23	异丙苯	98-82-8	异丙基苯 / 茴香素标准品	100 ng/μL，溶于甲醇中，1 mL
24	环己酮	108-94-1	环己酮标准品	100 mg/L，溶于甲醇中，1 mL
25	2,6- 二甲基苯酚	576-26-1	2,6- 二甲酚标准品，100 ng/μL，溶于甲醇中	100 ng/μL，溶于甲醇中，1 mL

编号	化合物名称	CAS 号	名称	规格
26	正丁基缩水甘油醚	2426-08-6	丁基缩水甘油醚, ≥ 98.0%	5 mL
27	丙酮基丙酮	110-13-4	丙酮基丙酮, ≥ 95.0%	5 mL
28	苯甲醚	100-66-3	苯甲醚, ≥ 99.0%	5 g
29	水杨酸乙酯	118-61-6	水杨酸乙酯 / 羟苯乙酯	1 g
30	1,2,3- 三甲苯	526-73-8	连三甲苯标准品, 100 ng/ μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
31	1- 丙硫醇	107-03-9	1- 丙硫醇标准品	2000 mg/L, 溶于甲 醇中, 1 mL
32	二甲基二硫	624-92-0	二甲基二硫标准品	纯品型, 1 mL
33	4- 乙基苯胺	589-16-2	4- 乙基苯胺, ≥ 99.0%	5 mL
34	乙酸异龙脑酯	125-12-2	乙酸异龙脑酯	20 mg
35	甲酸正戊酯	638-49-3	甲酸戊酯, ≥ 95.0%	5 mL
36	异戊基甲基酮	110-12-3	异戊基甲基酮, ≥ 98.0%	5 mL
37	反式 -2- 癸烯醛	3913-81-3	反式 -2- 癸烯醛, ≥ 93.0%	1 mL
38	1,3- 二乙基苯	141-93-5	1,3- 二乙基苯标准品	0.1 g
39	二环己胺	101-83-7	二环己胺, ≥ 99.0%	5 mL
40	N,N- 二甲基丙烯酰胺	2680-03-7	N, N- 二甲基丙烯酰胺, 含稳定剂 MEHQ, ≥ 99.0%	5 g
41	4- 氯 -3- 甲基苯酚	59-50-7	4- 氯 -3- 甲基酚标准品, 100 ng/μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
42	愈创木酚	90-05-1	愈创木酚	20 mg
43	肉桂酸甲酯	103-26-4	肉桂酸甲酯, ≥ 99.0%	5 g
44	(-) 紫苏醛	18031-40-8	紫苏醛	20 mg
45	2,3- 丁二酮	431-03-8	二乙酰, ≥ 98.0%	5 mL
46	2,5- 二甲基吡嗪	123-32-0	2,5- 二甲基吡嗪, ≥ 98.0%	5 mL
47	3- 乙氧基 -4- 羟基苯甲醛	121-32-4	乙基香兰素 ,3- 乙氧基 -4- 羟基苯甲醛, 98.0%	5 g
48	4- 乙基苯甲醛	4748-78-1	4- 乙基苯甲醛, ≥ 98.0%	5 mL
49	2,4,6- 三氯苯酚	88-06-2	2,4,6- 三氯酚标准品, 100 ng/μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
50	2,6- 二氯苯酚	87-65-0	2, 6- 二氯酚标准品, 100 ng/μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
51	2- 氯酚	95-57-8	2- 氯苯酚标准品, 100 ng/ μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
52	2- 甲基萘	91-57-6	2- 甲基萘标准品	1000 mg/L, 溶于二 氯甲烷中
53	2,4- 二氯苯酚	120-83-2	2, 4- 二氯酚标准品, 100 ng/μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
54	4- 氯苯酚	106-48-9	对氯苯酚标准品, 100 ng/ μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
55	土臭素	16423-19-1	土臭素标准品, 100 ng/ μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
56	2- 甲基异莰醇	2371-42-8	2- 甲基异莰醇标准品, 100 ng/μL, 溶于甲醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL
57	2- 异丁基 -3- 甲氧基吡嗪	24683-00-9	2- 异丁基 -3- 甲氧基吡嗪标 准品, 100 ng/μL, 溶于甲 醇中	100 ng/μL, 溶于甲 醇中, 1 mL

## 仪器和设备

Agilent PAL RTC 自动样品前处理平台, 配备孵化炉、SPME ARROW 老化模块、加热磁力搅拌模块。详见表 2。

Agilent 7890B/7000D 三重四极杆气质联用系统, 配备 EI 源。

表 2. PAL RTC 自动样品前处理平台及各模块部件号

安捷伦部件号	部件名称
G7370A	PAL RTC 120 系统, 包括: PAL RTC 120 主机, Park Station, D7/57 液体进样针组件, 样品盘, 标准清洗模块
G7377A	SPME Arrow 套装 包括 SPME ARROW 进样针组件、进样口组件、加热磁力搅拌模块、Arrow 老化模块、孵化炉、衬管、隔垫、标准溶液、Arrow 萃取头套装
5191-5861	SPME Arrow, 1.1 mm OD, DVB/CAR/PDMS, 首次使用前需置于老化装置中在 270 °C 下老化 1 h
G7370A#206	安装套件

## SPME ARROW 参数

取 5.0 mL 水样, 加入 20 mL 螺口顶空瓶中, 然后加入 1.0 g 氯化钠。旋紧瓶盖, 置于顶空样品盘中待测。

萃取前, 将样品置于 40 °C 下孵化 3.0 min, 然后将样品转移到加热磁力搅拌模块中, 将 SPME ARROW 伸入样品上方顶空气相中, 在 40 °C 下顶空萃取 30.0 min, 最后在进样口脱附 5.0 min。

## GC/MS 分析条件

色谱柱: Agilent DB-WAX UI 气相色谱柱, 30 m x 0.25 mm x 0.25 μm, 部件号 122-7032UI

多模式进样口: 不分流进样, 250 °C

载气类型及流速: He, 恒流模式, 流速 1 mL/min

炉温升温程序: 在 40 °C 下保持 3.0 min, 然后以 10.0 °C/min 的速率升至 250 °C 并保持 10.0 min

传输线温度: 280 °C

质谱离子源温度: 250 °C

检测模式: MRM 模式, 验证的目标物保留时间及定量离子对详见表 3。

## 结果与讨论

### 萃取条件的优化

固相微萃取技术中吸附效率的影响因素主要包括萃取头涂层（固定相）、萃取时间、萃取温度、样品 pH 值和离子强度等。本方案着重考察了萃取时间、萃取温度、样品 pH、进样口插入深度的影响。

### 萃取头种类

选用何种固定相应综合考虑分析组分在各相中的分配系数、极性与沸点。根据相似相溶原则，选取与被分析组分最匹配的固定相。常用的固定相有非极性 PDMS（聚二甲基硅氧烷）、极性 PA（聚丙烯酸酯）、CW（聚乙二醇）/DVB（二乙烯基苯）等。由于水中的异味物质既包括极性化合物，也包括弱极性或非极性化合物，因此一般选用极性和非极性的固定相相结合来满足不同极性化合物的萃取要求，例如 DVB/CAR/PDMS。ARROW 萃取头的长度为 2 cm，直径为 1.1 mm，比表面积大，吸附速度快，涂层体积大，灵敏度高。本研究选择 1.1 mm DVB/CAR/PDMS 作为萃取涂层，能够得到非常优异的结果。

### 萃取温度

萃取温度对固相微萃取有双重作用：温度升高时，可以加快待测物质的分子扩散速度，有利于尽快达到平衡；但是温度增加后，又使平衡分配系数  $K$  减小，涂层对待测物质的吸附量减少，导致灵敏度下降。本研究考察了萃取温度对目标物的影响，温度范围为 30 °C 至 70 °C。结果表明，对于保留时间在 21.0 min 之前的化合物，采用 40 °C 能够实现最优的萃取效果。当萃取温度高于 40 °C 后，随着萃取温度的升高，这些化合物的响应值逐渐降低，这是由于温度升高导致平衡分配系数减小（图 3）。而对于保留时间在 21.0 min 之后的化合物，随着萃取温度的升高，萃取效率不断升高。对于这些化合物而言，温度升高，分子扩散速度的增加更为明显。考虑到保留时间 21.0 min 之前的化合物占大多数，并且温度过高，水汽量会增加，对 ARROW 也存在不利影响，因此选择 40 °C 为本研究的萃取温度。

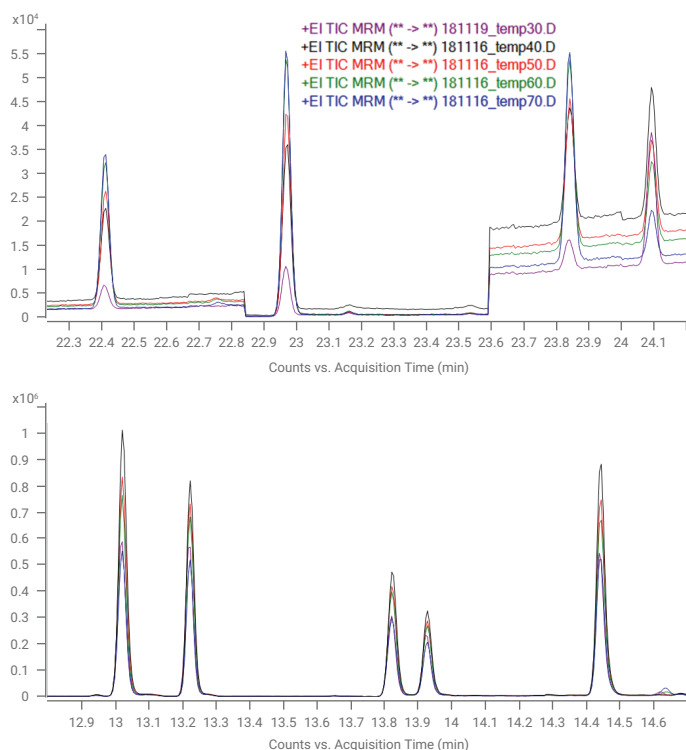


图 3. 萃取温度对萃取效率的影响，对不同化合物的影响不同，对沸点较低的化合物，40 °C 是最佳萃取温度，对沸点较高的化合物，随着温度的升高，萃取效率一直提高。

### 萃取时间

萃取时间即萃取达到平衡所需的时间，由待分析物的分配系数、物质的扩散速率、样品基质、样品体积、萃取头膜厚等因素决定。本研究考察了萃取时间对萃取效率的影响，时间范围为 10 min 至 60 min。结果表明，对于保留时间在 20.0 min 之前的化合物，采用 30.0 min 能够实现最优的萃取效果。而对于保留时间在 20.0 min 之后的化合物，随着萃取时间的延长，萃取效率不断升高。综合考虑化合物数量和实验效率等因素，本研究最终选择 30.0 min 作为萃取时间。

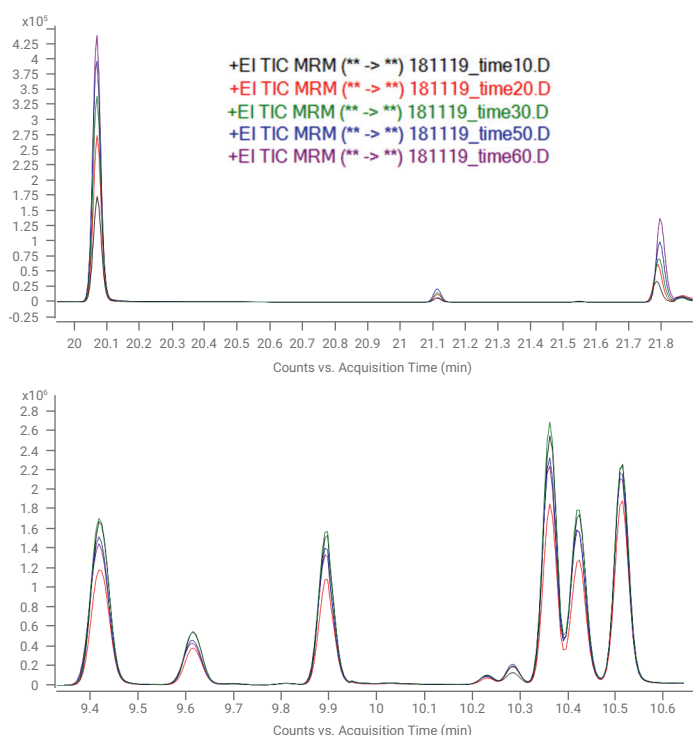


图 4. 萃取时间对萃取效率的影响，不同化合物的影响不同。对于沸点较低的化合物，萃取时间 30 min 达到萃取平衡，而对于沸点较高的化合物，随着萃取时间增加到 70 min，萃取效率一直在提高。

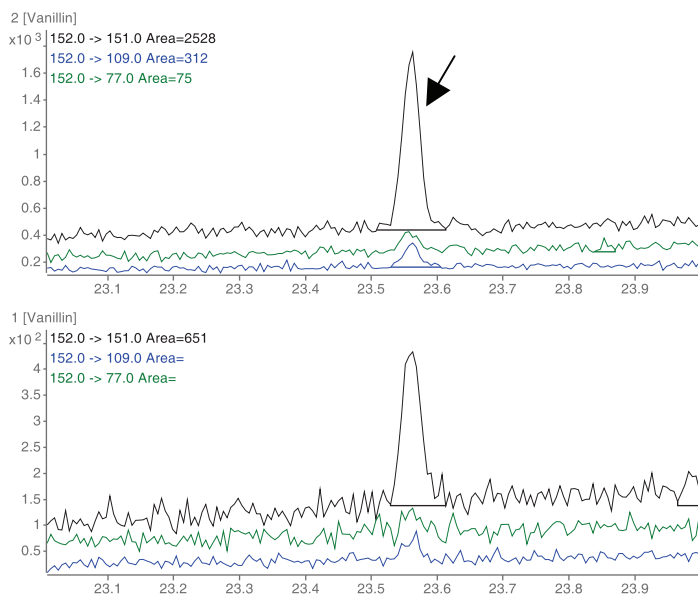
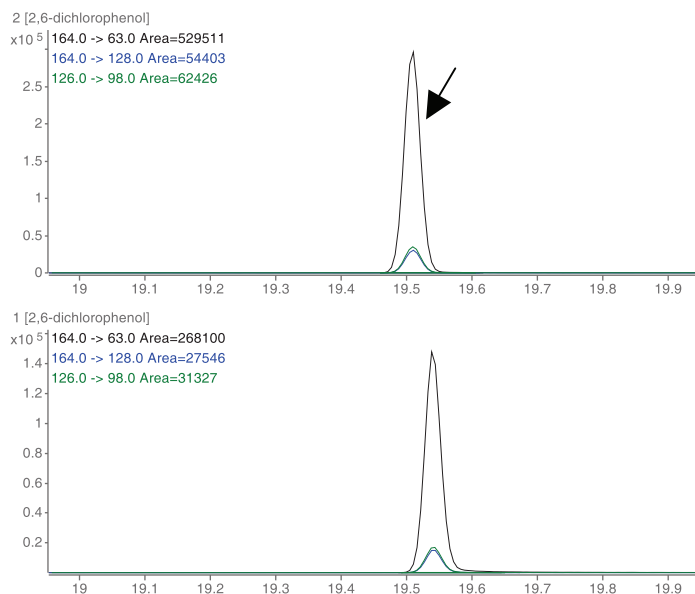


图 5. 酸性条件下萃取对部分化合物的促进作用，如上图所示，vanillin 的响应值提升约 4 倍，2, 6-dichlorophenol 的响应值提升约 2 倍（上图为酸性条件，下图为中性条件）

## 盐析效应和 pH 的影响

两者本质上相同，均影响基质的离子强度，从而影响待分析物在基质和涂层之间的分配系数。盐析是向待测样品中加入氯化钠或其他盐，使得溶液中的离子强度增加，从而减小了待测物在基质中的溶解度，使 K 值增大，从而提高了萃取效率。在本实验中，向待测溶液中加入 20% 氯化钠，增强离子强度，从而提高萃取效率。

pH 的影响表现在通过调节酸碱度影响溶液中的离子强度，从而改变待测物在基质中的溶解度。对于带羧基和羟基的化合物，酸性条件下萃取可以得到较好的萃取效果。而对于带氨基的化合物而言，在碱性条件下进行萃取能够获得理想的萃取效果。本研究考察了样品 pH 值对萃取效率的影响：在酸性条件下，对酚类、酸类等化合物的萃取具有明显的促进作用（图 5）；而碱性条件下，对胺类等碱性化合物的萃取具有明显的促进作用（图 6）。但最终实验为了兼顾所有化合物的萃取，实现一次萃取进样完成所有化合物的分析，选择中性萃取条件。



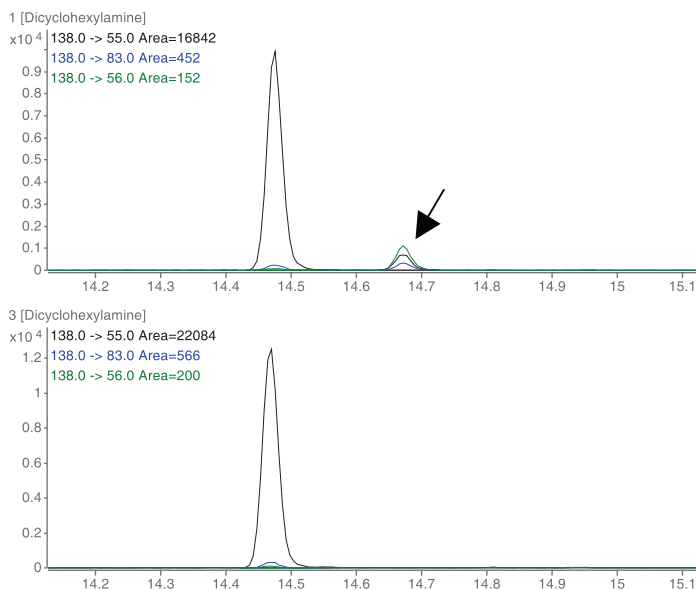
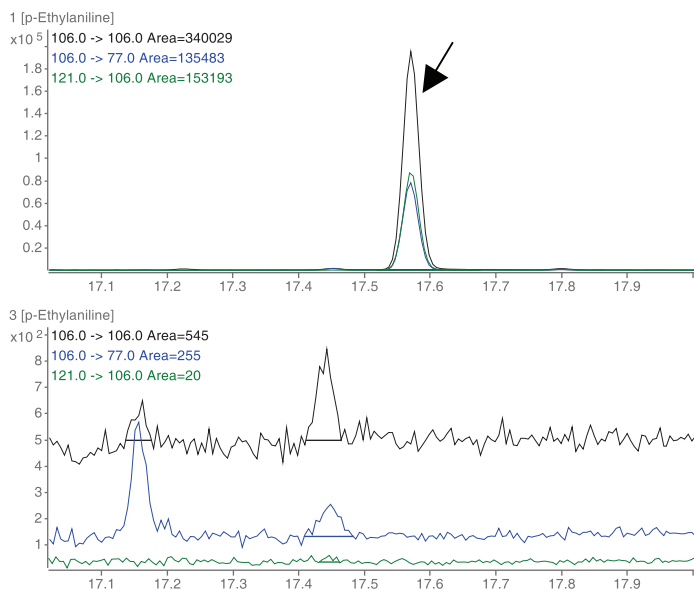


图 6. 碱性条件下萃取对部分化合物的促进作用，如上图所示，Dicyclohexylamine 和 p-Ethylaniline 两个化合物在中性溶液中萃取，几乎无响应，而碱性条件下萃取，峰响应非常明显，萃取效率得到显著提升（上图为碱性条件，下图为中性条件）



## 进样深度的影响

萃取头在气相进样口插入的深度对脱附的效率有比较大的影响。对于 MMI 进样口而言，衬管的中下部位置温度是比较高的区域，因此，ARROW 在进样口中的插入深度越深，脱附效率越高，脱附速度也越快。如图 7 所示。

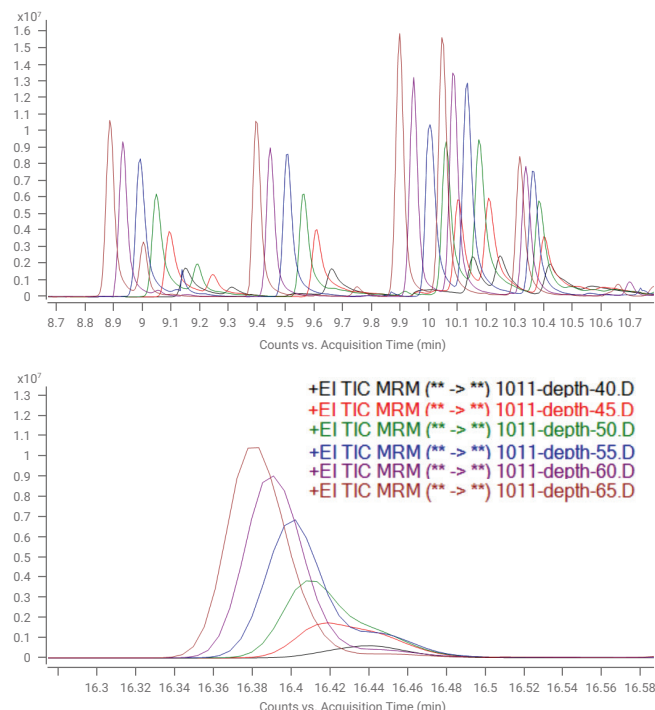


图 7. 进样口深度对化合物脱附的影响，进样口插入深度从 40 mm 到 65 mm，化合物的峰型变窄，响应变高，说明脱附的速度和效率均得到提升。

## 线性范围

配制浓度分别为 1.0、5.0、10.0、50.0、100 和 500 ng/L 的标准溶液，按照上述优化条件，分别进行萃取：加入氯化钠 (20%, m/m) 以增强离子强度，提高萃取效率；然后在 40 °C 下萃取 30.0 min，最后在进样口脱附 5.0 min。所得的 100 ng/L 标准溶液总离子流图如图 8 所示。绘制校准曲线，所有测试的目标物的线性相关系数均高于 0.99，如图 9 所示。

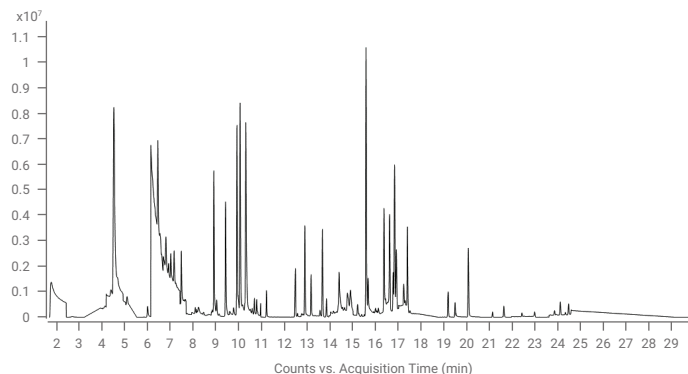


图 8. 100 ng/L 标准溶液经过 ARROW 萃取脱附后得到的 TIC 图



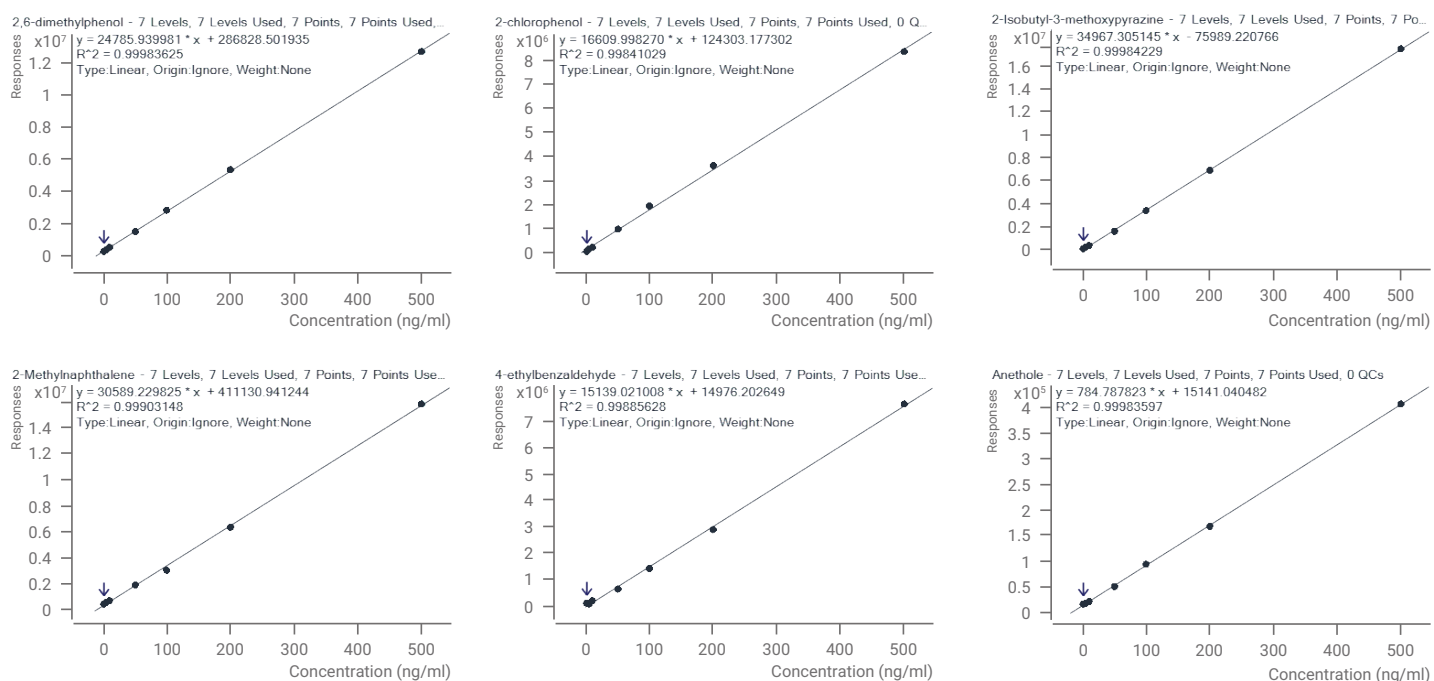
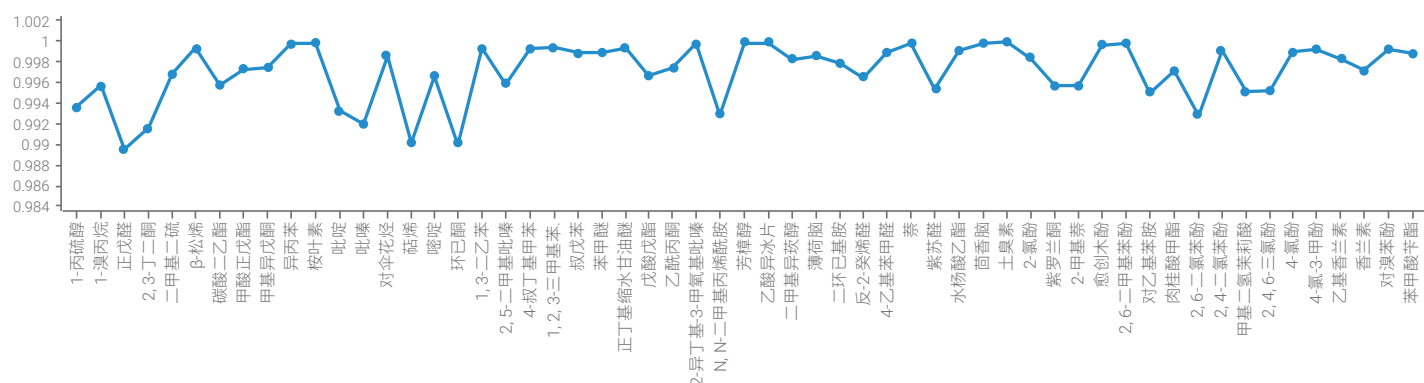


图 9. 代表性化合物的线性相关系数和校准曲线

## 重现性

空白水样加标水平 10 ng/L, 如图 10 所示, 化合物出峰状况良好, 峰型尖锐, 基本无干扰。重复萃取测定 10 次, 所测试的目标物中, 54 种化合物的 RSD 小于 10%; 两种酚类物质 (2,6-二氯酚和 2,4,6-三氯酚) 和吡啶的 RSD 值均大于 10%, 但小于 20% (图 11)。

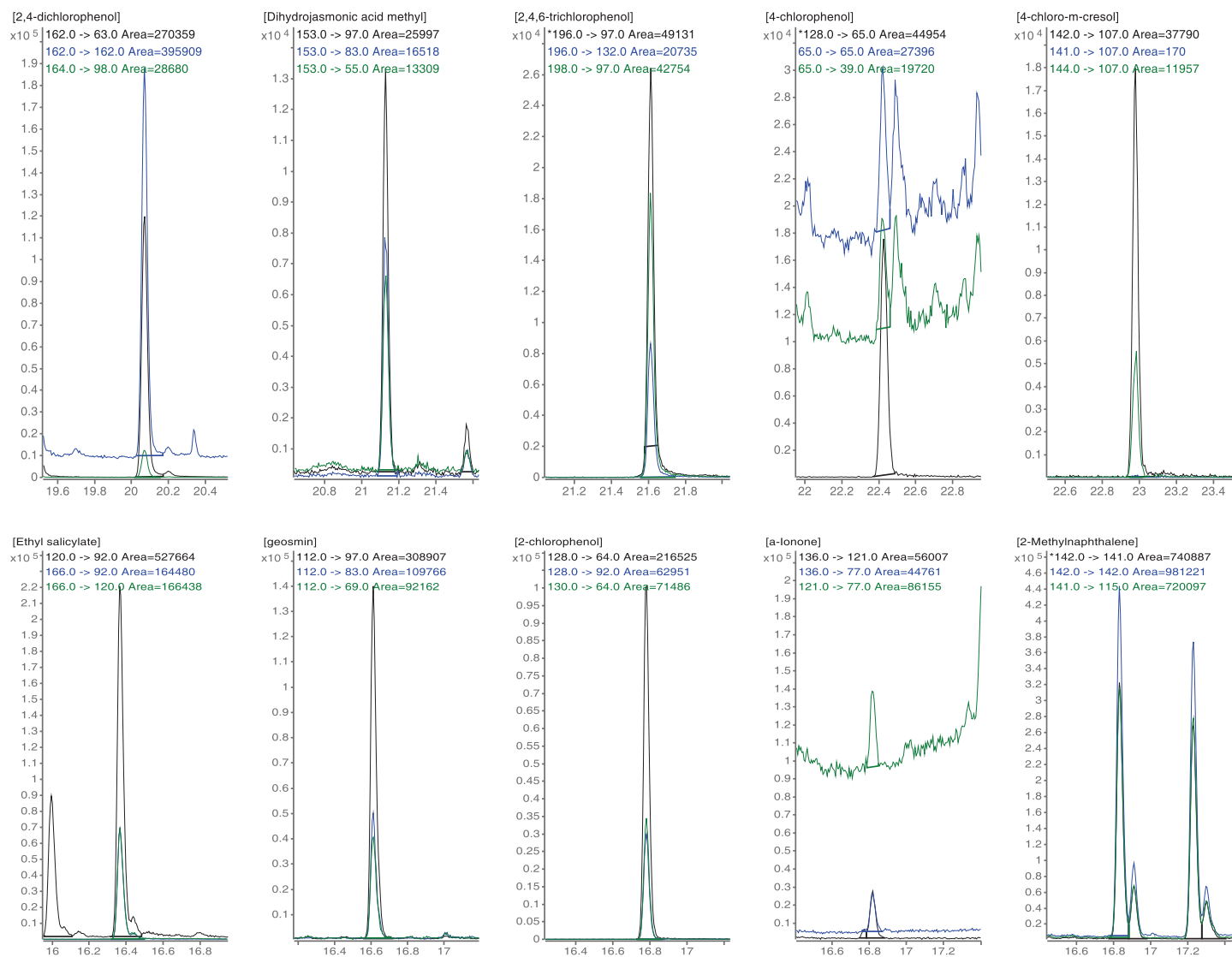


图 10. 加标浓度为 10 ng/L 的实际水样中部分化合物的提取离子流色谱图

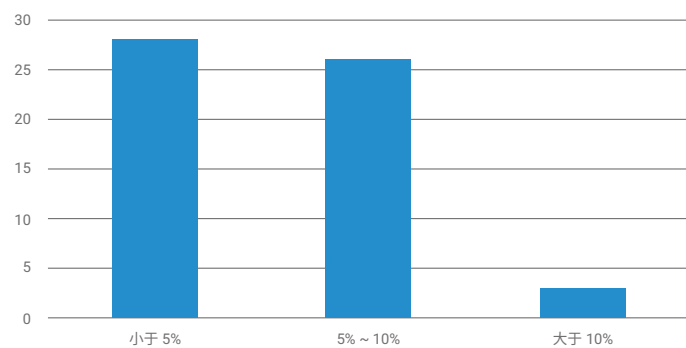


图 11. 加标浓度为 10 ng/L 的嗅味物质重复测定 10 次所得到的 RSD 分布结果



检测限

方法最低检测限 (MDL) 根据同一浓度的十次测定的精密度来确定。计算结果显示，所测试的目标物中，51 种化合物的检测限低于 5 ng/L, 仅 4 种化合物的方法检测限大于 10 ng/L（详见表 3）。

表 3. 测试目标物的保留时间、名称、定量离子、方法检测限

编号	保留时间 (min)	名称	中文名称	定量离子对	MDL (n g/L)
1	2.94	1-Propanethiol	1- 丙硫醇	76.0 -> 42.0	1.20
2	3.16	1-Bromopropane	1- 溴丙烷	122.0 -> 43.0	1.24
3	4.87	n-Valeric aldehyde	正戊醛	44.0 -> 43.0	2.90
4	4.47	2,3-butandione	2,3- 丁二酮	86.0 -> 43.0	2.96
5	6.20	Dimethyl disulfide	二甲基二硫	94.0 -> 79.0	0.49
6	6.63	β-Pinene	β- 松烯	93.0 -> 93.0	0.35
7	6.79	Diethyl carbonate	碳酸二乙酯	91.0 -> 63.0	1.02
8	6.81	n-amylformate	甲酸正戊酯	70.0 -> 42.0	1.43
9	7.20	Isoamyl methyl ketone	甲基异戊酮	43.0 -> 43.0	0.81
10	7.91	Cumene	异丙苯	105.0 -> 77.0	0.46
11	8.52	Cineole	桉叶素	139.0 -> 43.0	1.47
12	8.25	pyridine	吡啶	79.0 -> 52.0	5.75
13	8.63	pyrazine	吡嗪	80.0 -> 53.0	2.90
14	9.43	p-Cymene	对伞花烃	119.0 -> 119.0	0.73
15	9.62	Terpinolene	萜烯	136.0 -> 121.0	1.02
16	9.59	pyrimidine	嘧啶	80.0 -> 53.0	8.03
17	9.82	Cyclohexanone	环己酮	98.0 -> 55.0	3.34
18	9.90	1,3-Diethylbenzene	1,3- 二乙苯	105.0 -> 77.0	1.07
19	10.29	2,5-dimethylpyrazine	2,5- 二甲基吡嗪	108.0 -> 108.0	1.10
20	10.37	4-tert-Butyltoluene	4- 叔丁基甲苯	133.0 -> 105.0	1.96
21	10.42	1,2,3-Trimethyl benzene	1,2,3- 三甲基苯	105.0 -> 105.0	1.30
22	10.42	tert-Amylbenzene	叔戊苯	91.0 -> 91.0	1.48
23	10.51	Anisole	苯甲醚	108.0 -> 108.0	0.77
24	10.53	n-Butyl glycidyl ether	正丁基缩水甘油醚	57.0 -> 57.0	1.29
25	11.48	Pentyl valerate	戊酸戊酯	85.0 -> 57.0	0.82
26	12.61	Acetonylacetone	乙酰丙酮	99.0 -> 99.0	1.69
27	13.02	2-Isobutyl-3-methoxypyrazine	2- 异丁基 -3- 甲氧基吡嗪	124.0 -> 94.0	1.18
28	13.04	N,N-Dimethylacryl- amide	N,N- 二甲基丙烯酰胺	98.0 -> 42.0	204.80
29	13.23	Linalool	芳樟醇	93.0 -> 93.0	0.92
30	13.83	Isoborneol acetate	乙酸异冰片	136.0 -> 121.0	0.65
31	13.93	2-methylisoborneol	二甲基异莰醇	108.0 -> 93.0	0.89
32	14.44	L-Menthol	薄荷脑	81.0 -> 81.0	3.22
33	14.44	Dicyclohexylamine	二环己基胺	138.0 -> 55.0	3.26
34	14.45	trans-2-decenal	反 -2- 癸烯醛	55.0 -> 55.0	1.57
35	15.64	4-ethylbenzaldehyde	4- 乙基苯甲醛	134.0 -> 105.0	2.02
36	15.67	Naphthalene	萘	128.0 -> 128.0	2.98

编号	保留时间 (min)	名称	中文名称	定量离子对	MDL (n g/L)
37	16.31	perillaldehyde	紫苏醛	122.0 -> 79.0	0.65
38	16.44	Ethyl salicylate	水杨酸乙酯	120.0 -> 92.0	0.93
39	16.65	Anethole	茴香脑	148.0 -> 105.0	0.91
40	16.69	geosmin	土臭素	112.0 -> 97.0	0.22
41	16.79	2-chlorophenol	2- 氯酚	128.0 -> 64.0	0.77
42	16.87	a-Ionone	紫罗兰酮	121.0 -> 77.0	0.81
43	16.91	2-Methylnaphthalene	2- 甲基萘	142.0 -> 142.0	2.46
44	16.93	Guaiacol	愈创木酚	109.0 -> 81.0	1.41
45	17.42	2,6-dimethylphenol	2,6- 二甲苯酚	107.0 -> 77.0	1.88
46	17.53	p-Ethylaniline	对乙基苯胺	106.0 -> 106.0	10.00
47	19.19	Methyl cinnamate	肉桂酸甲酯	131.0 -> 103.0	1.41
48	19.51	2,6-dichlorophenol	2,6- 二氯苯酚	164.0 -> 63.0	3.44
49	20.07	2,4-dichlorophenol	2,4- 二氯苯酚	162.0 -> 162.0	1.43
50	21.12	Dihydrojasmonic acid methyl	甲基二氢茉莉酸	153.0 -> 97.0	3.53
51	21.81	2,4,6-trichlorophenol	2,4,6- 三氯酚	196.0 -> 97.0	2.87
52	22.41	4-chlorophenol	4- 氯酚	128.0 -> 65.0	2.40
53	22.97	4-chloro-m-cresol	4- 氯 -3- 甲酚	142.0 -> 107.0	1.09
54	23.16	ethyl vanillin	乙基香兰素	166.0 -> 137.0	25.70
55	23.53	Vanillin	香兰素	152.0 -> 151.0	76.41
56	23.83	p-Bromophenol	对溴苯酚	172.0 -> 65.0	1.85
57	24.09	Benzyl benzoate	苯甲酸苄酯	212.0 -> 105.0	0.48

结论

本研究基于安捷伦异味物质的 MRM 数据库，利用 SPME ARROW- 气相色谱 - 三重四极杆质谱联用平台，能够实现饮用水中 200+ 种异味物质的筛查，经过对部分代表性嗅味物质的实验验证，结果证明该方法不仅满足《生活饮用水卫生标准》(GB5749-2006) 中对饮用水和水源水的卫生检测要求，而且具有以下优点：

- 采用专利 SPME ARROW 技术，灵敏度高，定量快速且稳定；
- 无需使用有机溶剂，可减少环境污染，保护操作人员安全；
- 取样量少，受基质干扰小，容易实现在线监测；
- ARROW 寿命长，顶空萃取使用次数可达到 500 次以上。

参考文献

1. GB 5749-2006. 《生活饮用水卫生标准》

2. GB/T 32470-2016. 《生活饮用水臭味物质 土臭素和 2- 甲基异莰醇检验方法》

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://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](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)



微信搜一搜

安捷伦视界

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本文中的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2020  
2020 年 11 月，中国出版  
5994-0626ZHCN