

## HJ810-2016에 따른 수중 휘발성 유기 화합물 분석

Agilent 8860 GC 시스템 및 5977B MSD에서 Agilent 8697 헤드스페이스 샘플러 -XL 트레이 사용

### 저자

Zhang Jie  
Agilent Technologies  
(Shanghai) Co. Ltd.

### 개요

Agilent 8860 가스 크로마토그래프(GC) 및 Agilent 5977B Single Quadrupole 질량 분석기(MSD) 시스템에서 Agilent 8697 헤드스페이스 -XL 트레이를 이용해 수중에 있는 55개의 대표적인 휘발성 유기 화합물(VOC) 그룹을 분석했습니다. HJ810-2016 분석법에 따라 시스템 반복성, 선형성 및 검출 능력을 평가했습니다. 그 결과, HJ810 표준 요구 사항을 충족하거나 능가하는 우수한 시스템 성능이 입증되었습니다.

## 소개

수질을 보장하는 일은 현대 사회가 직면한 큰 해결 과제입니다. 수질은 자연 현상뿐만 아니라 인간의 활동에 의해서도 영향을 받습니다. 수질은 물리적, 화학적, 생물학적 특성을 포함하는 물의 상태로 설명됩니다. VOC는 수질을 나타내는 주요 화학 지표 중 하나입니다. VOC는 증기압이 높고 수용해도가 낮은 유기 화합물입니다. 대부분의 VOC는 산업 폐기물, 누출 또는 유출에 의해 수역으로 유입됩니다. 일부 VOC는 소독 처리의 부산물이며 물에서 쉽게 증발합니다. 이 증발 현상은 헤드스페이스의 작동 원리로, 헤드스페이스 기술은 식별 및 정량화를 위해 물에서 GC 또는 가스 크로마토그래피/질량 분석기(GC/MSD)로 VOC를 추출하고 도입하는 이상적인 접근 방식입니다. P&T(purge and trap)는 수질 분석에 널리 사용되는 또 다른 VOC 도입 기술입니다. P&T는 물 시료에서 VOC를 스위핑하여 분석에 적합하게 농축합니다. P&T는 VOC를 보다 철저하게 추출하여 헤드스페이스 기술에 비해 훨씬 더 높은 감도를 만들어냅니다. 그러나 P&T 기기는 설계가 복잡하고 기기를 사용하고 유지보수하기 위해 세심한 주의와 전문 지식이 필요합니다.<sup>1</sup> 반면에 헤드스페이스 샘플러는 사용과 유지보수가 훨씬 쉽습니다. 중국과 유럽에서는 헤드스페이스 샘플러가 수중 VOC 분석에 널리 적용됩니다.<sup>2,3</sup>

8697 헤드스페이스 샘플러는 2세대 애질런트 헤드스페이스 제품입니다. 8697 및 8697-XL 트레이의 두 가지 모델이 있으며 주된 차이점은 시료 처리량(48 바이알 대 120 바이알)과 바이알 냉각 기능입니다. 두 모델 모두 지능형 플랫폼에서 개발되었습니다. 사용자 안내식 유지보수, 가스 공급 압력 점검, 이송 라인 제한 및 누출 테스트, 사용자 바이알 누출 테스트 등과 같은 여러 스마트 기능에 쉽게 접근하고 실행하도록 개발되었습니다. 이러한 지능형 유지보수 및 진단 테스트는 헤드스페이스 사용 중 대표적인 고객 문제와 고충을 수렴하고 평가한 결과를 바탕으로 설계되었습니다. 테스트를 통해 사용자는 기기 상태를 파악하고, 오작동 영역을 빠르고 정확하게 파악하며, 적시에 효과적인 방식으로 기기를 유지보수할 수 있습니다.

이 응용 자료에서는 8860 GC 및 5977B MSD 시스템과 결합된 8697-XL 트레이를 이용해 중국 HJ810-2016 분석법에 따라 수중 VOC 분석을 수행했습니다.<sup>4</sup> 반복성, 선형성, 검출 한계(LOD), 정량 한계(LOQ) 및 분석법 회수율에 대해 시스템 성능을 평가했습니다.

## 실험

### 화학물질 및 표준물질

모든 화학물질과 표준물질은 Alta Scientific Co. Ltd.에서 구입했습니다. 이러한 화학물질에는 1,000mg/L VOC 함유 메탄올 용액, 플루오로벤젠 내부 검량 표준물질(IS) 1,000mg/L 및 1,4-dichlorobenzene-d<sub>4</sub>(메탄올 용액), 및 염화나트륨(분석 등급)이 포함되었습니다.

### VOC 표준 작업 용액

VOC 원액을 메탄올에 섞어 100 및 10mg/L로 희석했습니다. IS 원액은 나중에 사용하기 위해 메탄올에 섞어 200 및 25mg/L로 희석했습니다.

### 검량 표준물질 및 물 시료 준비

우선, NaCl 염 4g을 20mL 헤드스페이스 바이알에 칭량하여 넣은 다음 탈이온수 10mL를 첨가합니다. VOC 표준물질과 IS 작업 용액을 염 용액에 스파이킹한 후 바이알을 즉시 마개로 막고 10~20초 동안 격렬하게 볼테싱 처리했습니다.

MSD 스캔 모드로 분석한 검량 표준물질은 내부 표준물질이 200µg/L인 약 10, 20, 40, 100, 200 및 400µg/L의 6가지 보정 수준으로 준비했습니다. 선택적 이온 모니터링(SIM) 모드 분석을 위해 20µg/L IS의 1~40µg/L(즉, 1, 2, 4, 10, 20, 40µg/L) 범위 검량 표준물질을 준비했습니다. 각 검량액 세트에 대해 반복성 테스트를 위해 3가지 다른 검량 수준에서 6번 반복했습니다. 스캔 및 SIM 모드에서 LOQ 평가를 위해 4 및 0.5µg/L 표준물질을 8회 반복했습니다.

물 시료는 HJ810-2016에 설명된 시료 수집/준비 절차에 따라 지역 호수에서 수집하여 준비했습니다. 실제 물 시료는 회수율 테스트를 위해 중농도와 고농도 수준에서 스파이킹했습니다.

## 기기 및 분석 조건

분석을 위해 8697 -XL 트레이를 8860/5977B GC/MSD 시스템에 결합시켰습니다(그림 1). 추출 이온 소스는 6mm drawout 렌즈와 함께 사용했습니다. VOC 분리에는 Agilent J&W DB-624 GC 컬럼(60m x 250 $\mu$ m, 1.4 $\mu$ m)을 사용했습니다.

헤드스페이스 및 GC/MSD 테스트 파라미터가 표 1에 나와 있습니다. 이 실험은 HJ810-2016 권장 사항을 따랐으며 결과를 다음 그림에 보고되어 있습니다.

GC/MS 시스템용 Agilent MassHunter Acquisition 소프트웨어 버전 10.0을 데이터 수집에 사용했습니다. 데이터 분석에는 MassHunter Qualitative Analysis 버전 10.0 소프트웨어와 MassHunter Quantitative Analysis 버전 10.0 소프트웨어를 사용했습니다. 스캔 및 SIM 분석법에 대한 정량화는 동일한 대상 이온 세트를 기반으로 합니다.

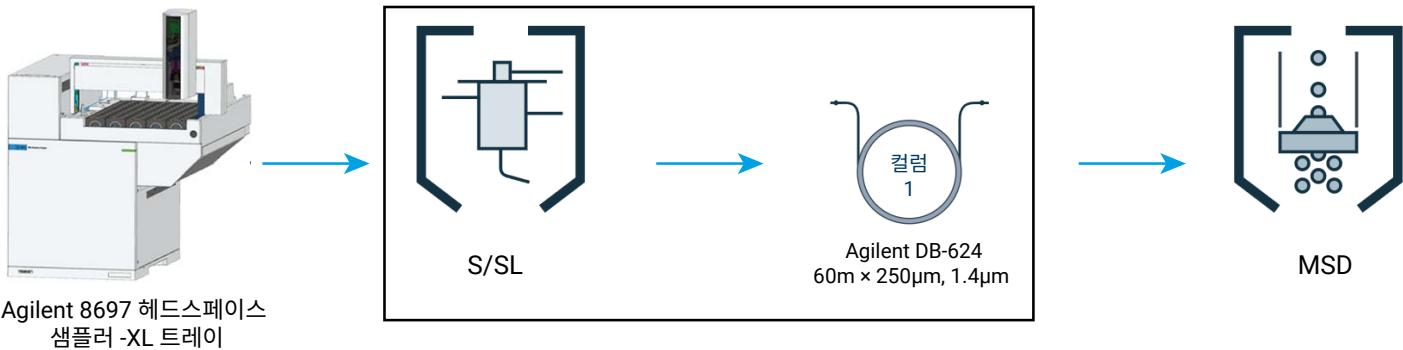


그림 1. Agilent 8697 -XL 트레이 및 Agilent 8860/5977B GC/MSD 시스템의 개략도

표 1. Agilent 8697 -XL 트레이 및 Agilent 8860/5977B GC/MSD 시스템의 분석 조건.

불활성 추출 이온 소스가 포함된 Agilent 8860 GC 및 5977B MSD 시스템	
파라미터	설정 값
주입구 온도	250°C
라이너	비활성화 석영 라이너, 비분할, 2mm 내경 (품번 5181-8818)
운반 가스	헬륨
컬럼 유속	정유량 모드, 1.2mL/분
분할비	5:1
오븐 프로그램	40°C(2분 유지), 5°C/분의 속도로 120°C까지 승온(3분 유지), 10°C/분의 속도로 230°C까지 승온(4분 유지)
컬럼	Agilent J&W DB-624 GC 컬럼, 60m x 0.25mm, 1.4 $\mu$ m(품번 121-1364)
MSD 이송 라인	250°C
MS 이온화원	280°C
MS Quad	150°C
스캔 범위	35~350Da
SIM 분석법에서 이온의 머무름 시간	20ms
개인 계수	0.4
드로아웃 플레이트	6mm, 불활성(품번 G2589-20045)

Agilent 8697 헤드스페이스 샘플러 -XL 트레이	
파라미터	설정 값
8697 루프 크기	1mL
바이알 가압 가스	N <sub>2</sub>
Hs 오븐 온도	65°C
Hs 루프 온도	80°C
Hs 이송 라인 온도	120°C
바이알 평형 시간	40분
바이알 크기	20mL, PTFE/실리콘 셱팅(품번 8010-0413)
바이알 진탕	레벨 7, 530cm/s <sup>2</sup> 가속으로 분당 136회 진탕
바이알 채우기 모드	기본 설정
바이알 채우기 압력	15psi
루프 채우기 모드	맞춤형
루프 가압 속도	20psi/분
루프 최종 압력	3psi
루프 평형 시간	0.1분
운반 가스 제어 모드	GC 운반 가스 제어
추출 후 배기	겹

## 결과 및 토의

### 사용자 바이알 누출 테스트

바이알 누출이 있으면 반응 반복성이 저하됩니다. 누출이 전혀 없는 바이알은 없습니다. 바이알 누출률을 적절한 수준으로 제어하는 것이 정밀한 결과를 얻는 데 매우 중요합니다. 8697 헤드스페이스 샘플러는 5개의 캐핑된 바이알을 대상으로 바이알 누출 테스트를 자동화할 수 있으며 통계적 결과를 기반으로 허용되는 누출률 임계값을 권장합니다. 그러면 테스트 분석법에 권장 임계값을 설정하고 후속 분석에서 실시간 시스템 누출 검사에 사용할 수 있습니다. 누출 검사를 통과하면 바이알이 효과적으로 밀봉되었음을 의미합니다. 누출 검사에 실패하면 중단, 계속 또는 건너뛰기를 포함하여 미리 설정된 작업이 테스트 바이알에서 자동으로 실행됩니다. 중단 또는 건너뛰기가 실행되면 귀중한 시료를 보존하고 나중에 누출 문제가 해결된 후 분석할 수 있습니다. 바이알 누출 테스트는 특정 적용 조건을 기반으로 적절한 누출 임계값을 찾는 데 도움을 주어 분석 정밀도를 보장하고 누출

검사 실패 위험을 줄입니다. 이 테스트는 때로 테스트 결과가 좋았음에도 불구하고 누출 테스트 실패 메시지가 나타난다고 불만을 토로하는 규정 준수 실험실에 중요합니다. 누출률 임계값을 부적절하게 설정하여 누출 테스트 실패 팝업 메시지가 나타나면 분석 작업자가 비준수 문제를 해결하는 데 시간을 낭비하게 될 수 있습니다. 바이알 누출 테스트 기능으로 이러한 경우를 크게 줄일 수 있습니다.

본 연구에서는 표 1에 설명된 분석 조건에서 캐핑된 40 $\mu$ g/L 검량 시료 5개를 테스트했습니다. 5개 시료의 반응 및 정밀도는 분석 요구 사항을 충족했습니다. 그런 다음 8860 GC 브라우저 사용자 인터페이스에서 사용자 바이알 누출 테스트를 시작하여 캐핑된 5개의 다른 시료 세트에서 사용자 바이알 누출 테스트를 자동으로 실행했습니다.

테스트가 완료되고 0.2mL/분의 누출률 임계값이 권장되었습니다. 이 권장값은 분석법에 저장되었습니다. 이 누출률 임계값에서 후속 분석을 수행했습니다. 누출 테스트 실패 팝업 메시지 없이 만족스러운 결과를 얻었습니다.

The screenshot shows the 'Diagnostic Tests' section of the Agilent 8860 GC Browser. The left sidebar lists various diagnostic categories: Warnings and Errors, System Health Report, Detector Evaluation Reports, Blank Evaluation Reports, Gather Logs, Gas and Power Usage, and Diagnostic Data Collection. The main panel displays a list of tests under 'Front Inlet SS\_EPC (4)'. These include: Leak and Restriction Test, Method Pressure Check, Pressure Decay Test, and Split Vent Restriction Test. Below this is a section for 'HeadspaceHCV2 (7)' which includes: Crossport Leak Test, Gas Supply Pressure Check, Manual Operations, Restriction and Pressure Decay Test, Six Port Rotor Orientation Test, Transferline Leak and Restriction Test, and User Vial Leak Test. The 'User Vial Leak Test' is highlighted with a blue box. At the bottom of the main panel, there is a section titled 'Instrument (1)' containing the ELVDS Loopback Test. A dark grey bar at the very bottom of the screen has the text 'Advanced Options'.

그림 2. 브라우저 사용자 인터페이스에서 실행한 사용자 바이알 누출 테스트

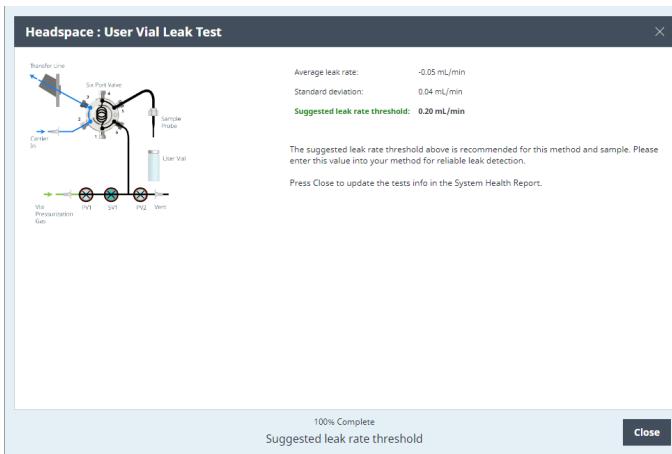


그림 3. 사용자 바이알 누출 테스트에서 권장하는 누출률 임계값

## MSD 성능 평가

HJ810-2016에 따르면 MS 데이터의 유효성과 신뢰성을 보장하기 위해 실제 시료의 각 배치를 실행하기 전에 MSD 성능을 확인해야 합니다. MSD는 Etune 방식을 선택하여 자율적으로 튜닝했습니다. 그런 다음 25 $\mu$ g/mL BFB 시료 20 $\mu$ L를 VOC가 없는 10mL 물에 첨가하고 캡을 씌운 다음 분석했습니다. 표 2는 BFB에 대한 튜닝 평가 결과입니다.

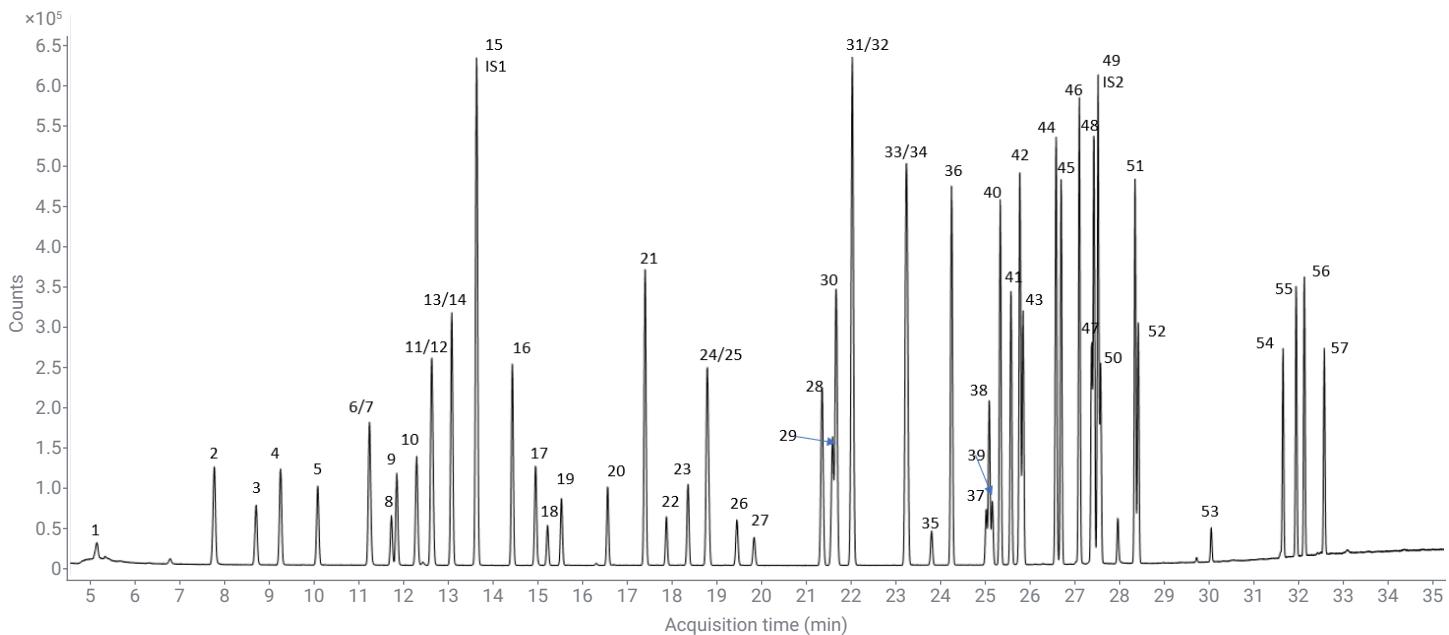


그림 4. 스캔 모드에서 얻은 40 $\mu$ g/L VOC 표준의 TIC

표 2. MSD E튠 결과 적합성 평가

표적 질량	상대 질량	하한 %	상한 %	상대 존재비 %	원시 존재비	통과/실패
95	95	100	100	100.0	10,603	통과
96	95	5	9	5.8	617	통과
173	174	0	2	0.0	0	통과
174	95	50	100	74.8	7,936	통과
175	174	5	9	7.0	553	통과
176	174	95	105	95.1	7,550	통과
177	176	5	10	6.2	466	통과

HJ810-2016에 설명된 대로 MSD 스캔 모드는 수질 VOC 분석을 위한 기본 검출 모드입니다. 감도가 대상 VOC 검출에 적합하지 않은 경우 SIM 모드 기반 검출이 사용됩니다. 본 연구에서는 두 세트의 검량 표준물질을 기반으로 두 가지 MSD 검출 모드에서 포괄적인 성능 평가를 수행했습니다.

## 스캔 결과

40 $\mu$ g/L 검량 표준물질의 총 이온 크로마토그램(TIC)이 그림 4에 나와 있습니다. 대부분의 화합물에서 기준선 분리를 얻었습니다. 6쌍의 화합물이 함께 용출되었습니다(부록 표 A1에 위첨자로 레이블이 지정되어 있음). 이러한 동시 용출 화합물은 고유한 정성자 및 정량자 이온으로 식별 및 정량화되었습니다. 용출 순서에 따른 피크 ID가 표 A1에 나열되어 있습니다.

시스템 반복성은 분석물의 절대 반응을 기초로 평가했습니다. 각 화합물의 정량화는 표적 이온의 EIC를 기초로 했습니다(표 A1에 나열된 바와 같음). 10, 40 및 200 $\mu$ g/L 검량액을 6번 반복 분석했습니다. 55개 VOC의 평균 반응 %RSD는 0.8~6.2%

범위에서 1.8%였습니다(그림 5). 세 가지 검량 수준에서 200 $\mu$ g/L fluorobenzene(IS1) 및 1,4-dichlorobenzene-d<sub>4</sub>(IS2)에 대한 평균 반응 RSD%는 1.5 및 2.9%였습니다. 반복성 성능은 샘플링 및 검출 정밀도가 우수함을 보여주었습니다.

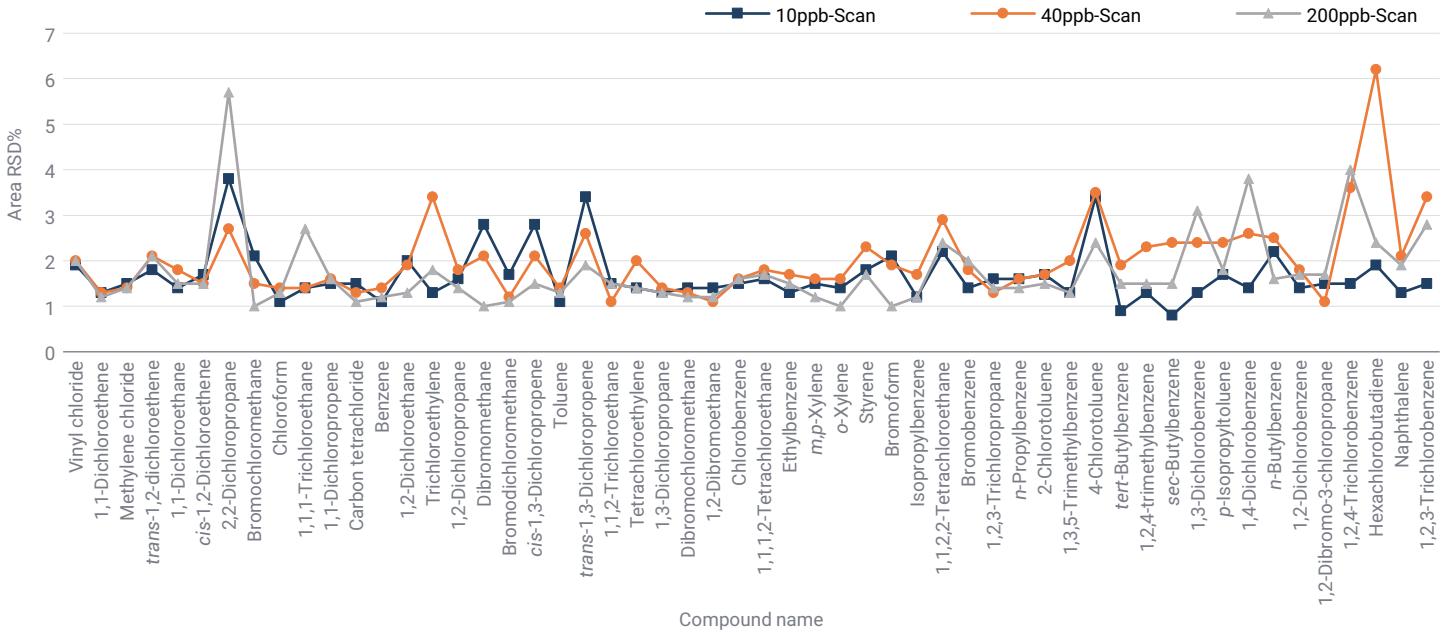


그림 5. 스캔 모드를 이용해 서로 다른 농도 수준에서 얻은 55개 VOC의 면적 %RSD

선형성은 10~400 $\mu\text{g}/\text{L}$ 의 테스트 농도 범위에 걸쳐 내부 표준물질에 대한 각 분석물의 상대적 반응을 기반으로 평가했습니다. 표적 분석물의 상관계수  $R^2$ 는 0.9947~0.9999로 평균 0.9990이었습니다. 그 중  $R^2$ 가 0.9950 미만인 화합물은 2,2-dichloropropane 한 가지뿐이었습니다. 선형성 성능은  $R^2 \geq 0.990$ 의 HJ810-2016 요구 사항을 충족했습니다. 네 가지 대표적인 화합물의 선형성 플롯이 그림 6에 나와 있습니다. 각 분석물에 대한 상대 반응 계수(RRF)의 %RSD도 6개 검량 수준에서 계산했습니다. 평균 RRF %RSD는 0.98~12.7% 범위에서 5.2%였으며, 이는 HJ810-2016 RRF %RSD 임계값인 20% 내에 있습니다(자세한 RRF %RSD 결과는 표 A1에 나타냄).

4 $\mu\text{g}/\text{L}$  표준물질의 8가지 시험 분석에 수식 1에 나타낸 공식을 적용하여 55개의 표적 VOC에 대한 MDL을 계산했습니다. MDL

범위는 0.132~1.105 $\mu\text{g}/\text{L}$ 였습니다(실제 물 시료의  $\mu\text{g}/\text{kg}$ 에 해당). LOQ는 0.44~3.68 $\mu\text{g}/\text{L}$ 였습니다.

수식 1. MDL 계산 공식.

$$\text{MDL} = S \times t (n - 1, 1 - \alpha = 99)$$

n: 시험 횟수( $n = 8$ )

S: n회 시험의 표준편차

t: 자유도가  $n - 1$ 인 99% 신뢰 수준에 대한 t-값( $n = 8$ 일 때,  $t = 2.998$ )

40 및 100 $\mu\text{g}/\text{L}$ 의 스파이크한 호숫물 시료에 대해 분석법 회수율을 평가했습니다. 40 $\mu\text{g}/\text{L}$  스파이크 시료의 회수율은 90.8~122.3%, 100 $\mu\text{g}/\text{L}$  시료의 회수율은 90.9~105.7%였습니다. 회수율 성능은 HJ810-2016 분석법에서 입증된 참조 회수율 결과와 비슷했습니다.

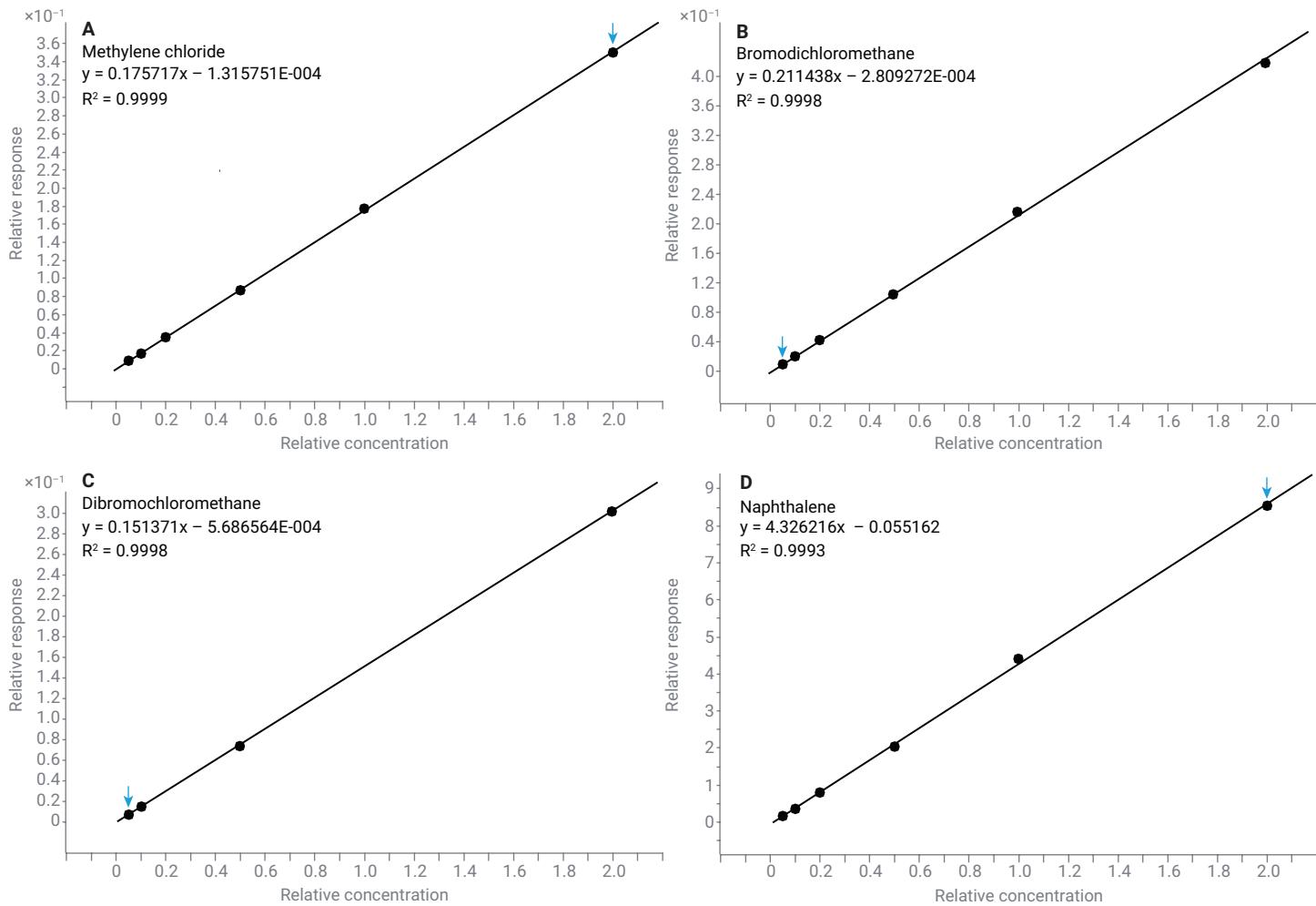


그림 6. 크로마토그램의 초기, 중반 및 후반에 용출되는 4가지 화합물의 스캔 모드(10~400 $\mu\text{g}/\text{L}$ ) 선형 검량선, CF 가중치: 1/x. 화합물: (A) methyl chloride,  $R^2$  0.9999; (B) bromodichloromethane,  $R^2$  0.9998; (C) chlorodibromomethane,  $R^2$  0.9998; (D) naphthalene,  $R^2$  0.9993

## SIM 결과

4, 10 및 40 $\mu\text{g}/\text{L}$  보정액을 6번 반복 분석하여 SIM 검출로 얻어지는 반응 반복성을 평가했습니다. 각 화합물의 정량화는 부록 표 A2에 기재된 정량자 이온을 기초로 했습니다. 55개 VOC의 반응 %RSD는 0.6~4.8% 범위였습니다(그림 8). 세 가지 검량 수준에서 20 $\mu\text{g}/\text{L}$  fluorobenzene(IS1) 및 1,4-dichlorobenzene-d<sub>4</sub>(IS2)에 대한 평균 반응 %RSD는 각각 2.3 및 3.8%였습니다.

SIM 모드 검량 결과를 표 A2에 나열되어 있습니다. SIM은 평균  $R^2$ 가 0.9996으로, 1~40 $\mu\text{g}/\text{L}$  범위의 모든 화합물에 대해 뛰어난 검량 선형성을 제공했습니다. 55개 분석물의 평균 상대 반응 계수(RRF) %RSD는 0.86~17.15% 범위에서 평균 5.5%였으며, 이는 HJ810-2016 분석법에 지정된 20% 임계값 내에 있습니다.

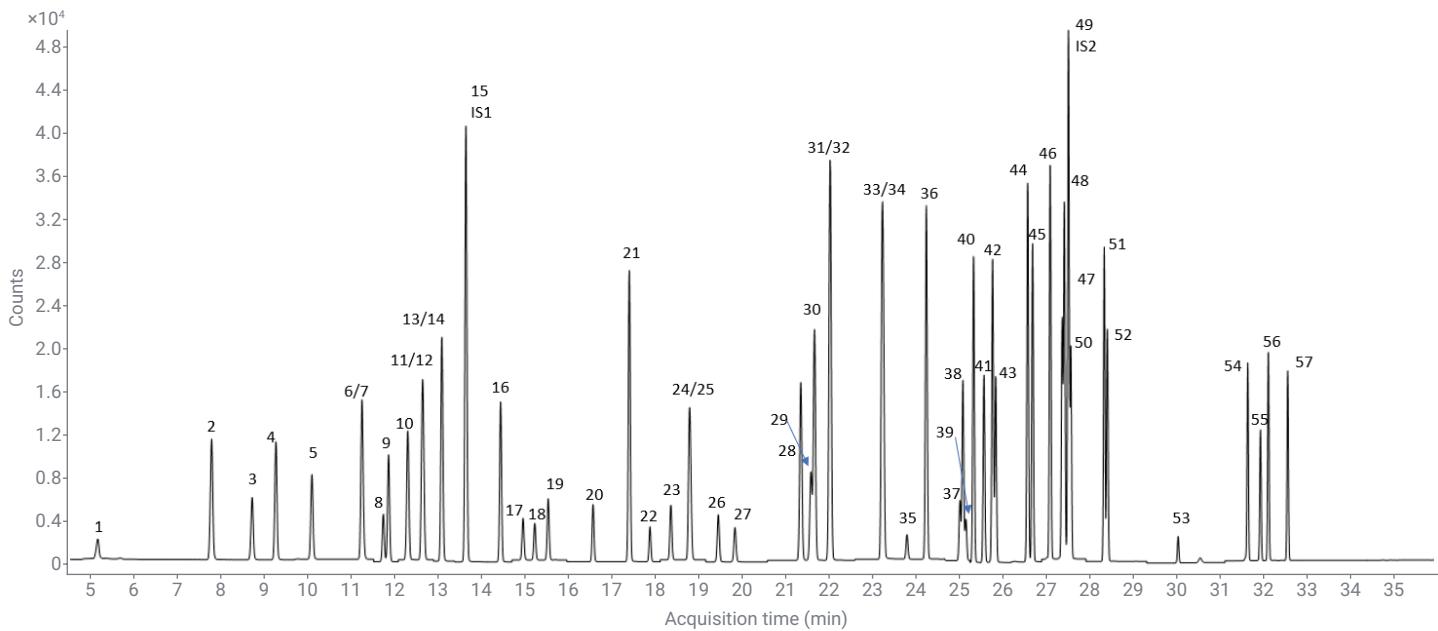


그림 7. SIM 모드에서 획득한 4 $\mu\text{g}/\text{L}$  VOC 검량 시료의 총 이온 크로마토그램

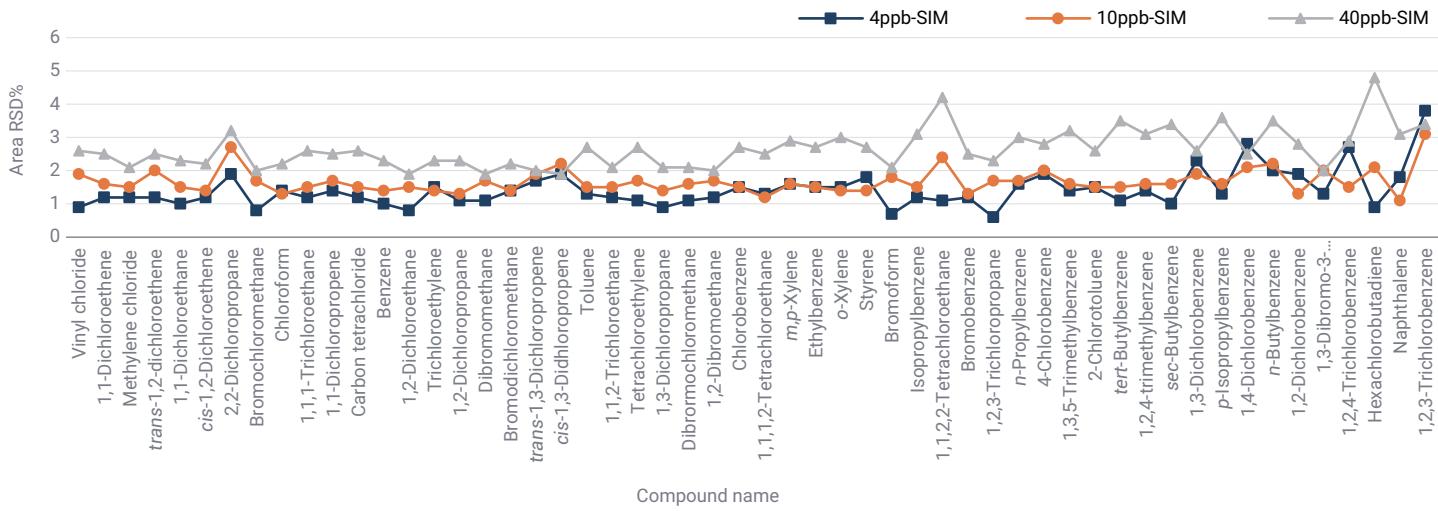


그림 8. SIM 모드를 이용해 4, 10 및 40 $\mu\text{g}/\text{L}$ 에서 얻은 55개 VOC의 절대 반응 정밀도

SIM 모드의 MDL은 0.5 $\mu\text{g}/\text{L}$  표준물질을 8번 반복 분석하여 계산했습니다. MDL 범위는 0.007~0.073 $\mu\text{g}/\text{L}$ 였습니다(실제 물 시료의  $\mu\text{g}/\text{kg}$ 에 해당). LOQ 범위는 0.0229~0.243 $\mu\text{g}/\text{L}$ 로, HJ810-2016 요구 사항보다 훨씬 뛰어났습니다.

두 가지 농도 수준에서 스파이크한 지역 호수물 시료에 대해 SIM 분석법 회수율도 테스트했습니다. 회수율은 20 $\mu\text{g}/\text{L}$  스파이크 시료의 경우 93.6~113.5%, 4 $\mu\text{g}/\text{L}$  스파이크 시료의 경우 90.5~110.3%였습니다.

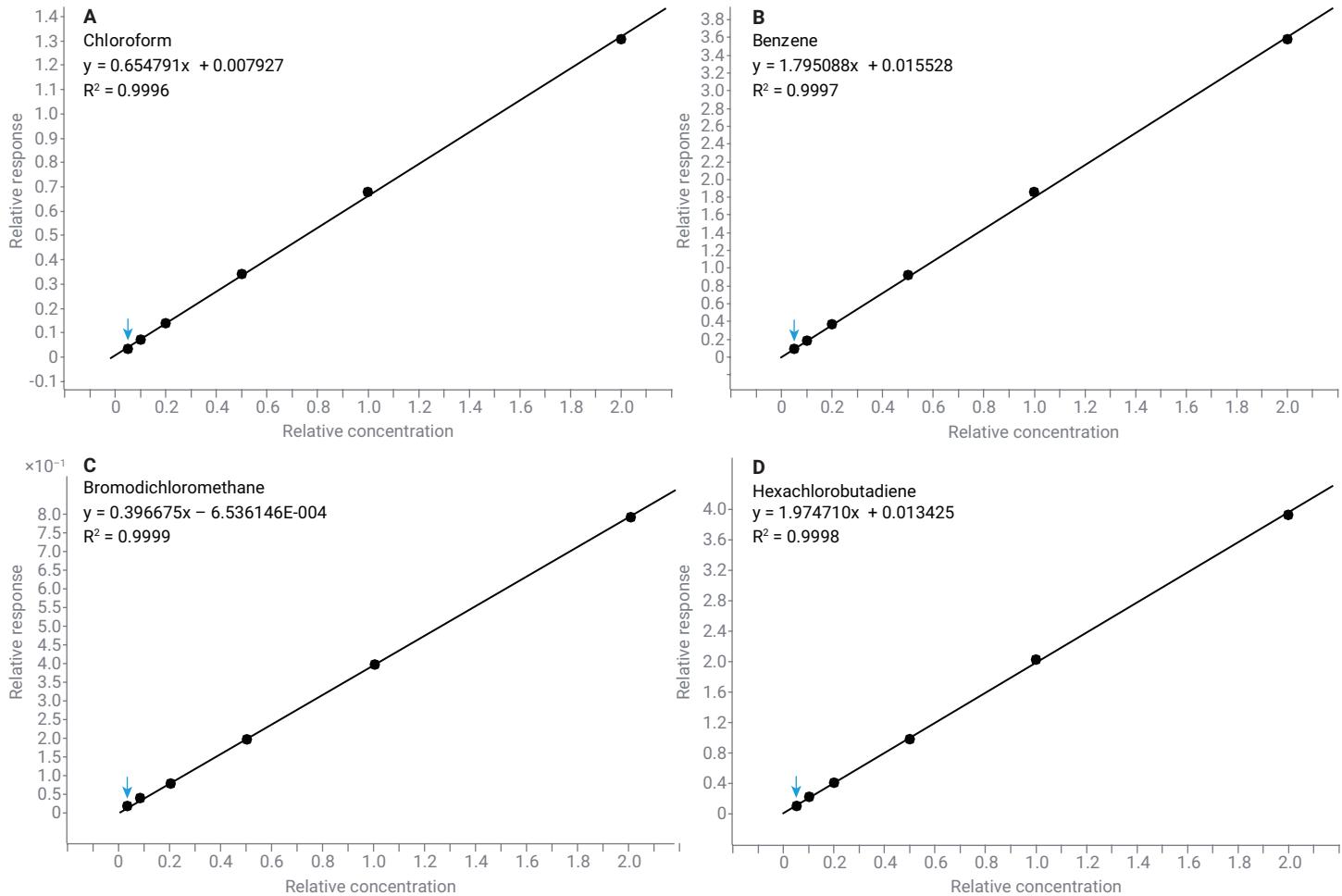


그림 9. SIM 모드에서 4개의 대표적인 분석물(1~40 $\mu\text{g}/\text{L}$ )에 대한 선형 검량선, CF 가중치: 없음. 화합물: (A) chloroform,  $R^2$  0.9996; (B) benzene,  $R^2$  0.9997; (C) bromodichloromethane,  $R^2$  0.9999; (D) hexachlorobutadiene,  $R^2$  0.9998

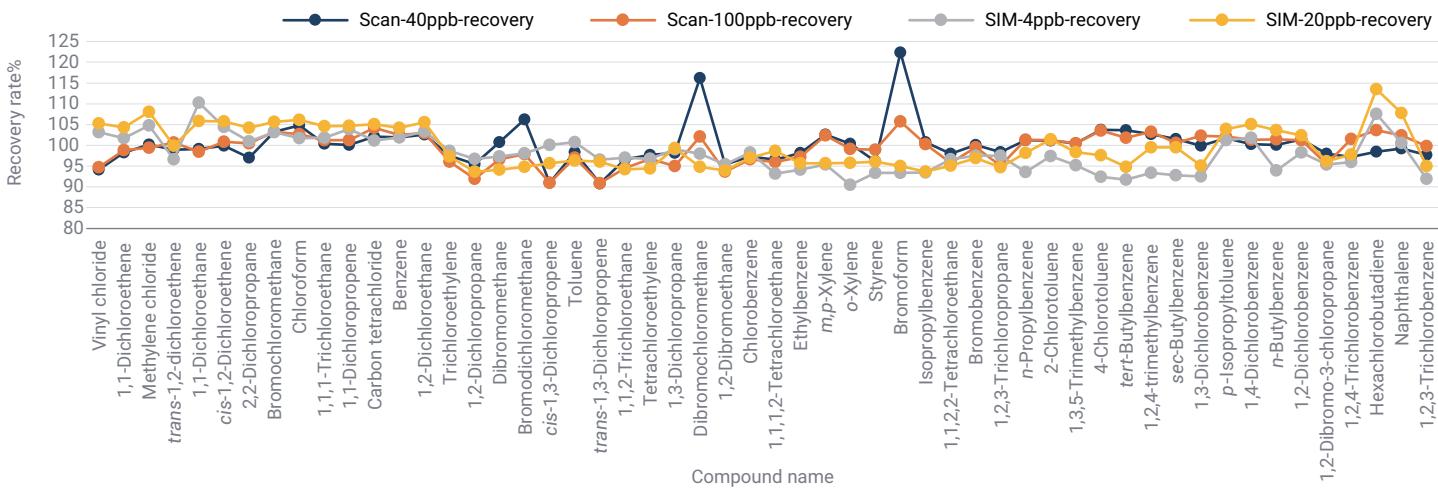


그림 10. 스캔 및 SIM 기반 분석법의 회수율 성능

## 결론

이 응용 자료에서는 8860/5977B GC/MSD 시스템과 결합된 8697-XL 트레이의 시스템 성능을 HJ810-2016 표준에 기반하여 수중 VOC 분석을 수행함으로써 평가했습니다. MSD 스캔 모드와 SIM 모드에서 얻은 반응 정밀도는 0.6~6.2% 범위였으며, 이는 헤드스페이스 샘플링과 GC/MSD 검출 반복성이 우수함을 나타냅니다. 테스트한 농도 범위에서 모든 표적 성분의 선형성은 선형 회귀 계수  $R^2 (\geq 0.99)$ 에 대한 HJ810 요구 사항보다 우수했습니다. 두 가지 MSD 검출 모드에서 모든 표적 화합물의 평균 RRF %RSD는 HJ810-2016 분석법에 지정된 20% 임계값 미만이었습니다. MSD 스캔 및 SIM 모드에서 얻은 LOQ는 각각 0.44~3.68 $\mu\text{g}/\text{L}$  및 0.0228~0.243 $\mu\text{g}/\text{L}$ 로, HJ810-2016 표준의 기준 LOQ보다 훨씬 뛰어났습니다. 스파이크된 지역 호수물 시료의 회수율은 90~125% 범위였습니다. 모든 테스트 결과에서 8697-XL 트레이가 물 매트릭스에서 GC/MSD 시스템으로 VOC를 효과적이고 재현 가능하게 추출하고 도입함으로써 높은 신뢰도로 안정적인 식별과 정확한 정량화를 뒷받침한다는 사실을 입증했습니다.

## 참고 문헌

1. Szelewski, M. Environmental Volatiles using an Agilent 7697A Headspace Sampler, an Agilent 7890B GC and an Agilent 5977A series GC/MSD. *Agilent Technologies application note*, publication number 5991-2108EN, 2013.
2. Quimby, B. D.; Andrianova, A. A. Volatile Organic Compounds Analysis in Drinking Water with Headspace GC/MSD Using Hydrogen Carrier Gas and HydroInert Source. *Agilent Technologies application note*, publication number 5994-4963EN, 2022.
3. Rothweiler, B. Analysis of Volatile Organic Compounds in Environmental Waters Using the Agilent 7697A Headspace and 7890B/5977A GC/MS, *Agilent Technologies application note*, publication number 5991-3927EN, 2014.
4. Water quality—Determination of Volatile Organic Compounds—Headspace/Gas Chromatography Mass Spectrometry, HJ 810-2016, published by Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. 2016-10-01.

## 부록

표 A1. 스캔 기반 분석법의 RT, 선형성, LOD 및 LOQ(동시 용출된 화합물을 동일한 위첨자로 표시함).

피크 번호	이름	RT	CF R <sup>2</sup>	CF 공식	평균 RRF RSD	LOD ( $\mu\text{g}/\text{L}$ )	LOQ ( $\mu\text{g}/\text{L}$ )	EIC 정량화를 위한 표적 이온	IS
1	Vinyl chloride	5.135	0.9999	$y = 0.126972x + 3.503640E-004$	1.42	0.325	1.083	62	IS1
2	1,1-Dichloroethene	7.760	1.0000	$y = 0.287535x - 6.883461E-004$	1.77	0.378	1.260	96	
3	Methylene chloride	8.695	0.9999	$y = 0.175717x - 1.315751E-004$	1.07	0.288	0.959	84	
4	<i>trans</i> -1,2-Dichloroethene	9.238	1.0000	$y = 0.290481x - 4.032902E-004$	1.28	0.366	1.219	96	
5	1,1-Dichloroethane	10.069	0.9997	$y = 0.370494x + 0.001974$	2.70	0.355	1.184	63	
6	<i>cis</i> -1,2-Dichloroethene <sup>1</sup>	11.215	1.0000	$y = 0.262305x - 5.676062E-004$	1.78	0.320	1.068	96	
7	2,2-Dichloropropane <sup>1</sup>	11.237	0.9947	$y = 0.229538x + 2.058373E-005$	7.79	1.012	3.372	77	
8	Bromochloromethane	11.713	0.9998	$y = 0.108911x + 1.088656E-004$	1.42	0.598	1.993	128	
9	Chloroform	11.827	0.9997	$y = 0.351395x + 7.031272E-004$	1.23	0.306	1.020	83	
10	1,1,1-Trichloroethane	12.278	0.9998	$y = 0.349041x + 4.844261E-004$	0.98	0.278	0.926	97	
11	1,1-Dichloropropene <sup>2</sup>	12.603	0.9994	$y = 0.354595x - 1.713302E-005$	2.41	0.215	0.717	75	
12	Carbon tetrachloride <sup>2</sup>	12.629	0.9993	$y = 0.317708x + 7.545995E-004$	2.15	0.395	1.317	117	
13	Benzene <sup>3</sup>	13.056	0.9989	$y = 0.975904x + 0.004011$	2.53	0.258	0.860	78	
14	1,2-Dichloroethane <sup>3</sup>	13.064	0.9979	$y = 0.119321x + 0.001719$	6.86	0.444	1.481	62	
15	Fluorobenzene (IS1)	13.613						96	
16	Trichloroethylene	14.409	0.9997	$y = 0.332354x + 7.836946E-004$	1.47	0.582	1.940	95	IS1
17	1,2-Dichloropropane	14.926	0.9998	$y = 0.207195x + 7.853720E-004$	2.10	0.261	0.870	63	
18	Dibromomethane	15.193	0.9999	$y = 0.080913x - 2.946909E-004$	3.15	0.949	3.163	93	
19	Bromodichloromethane	15.508	0.9998	$y = 0.211438x - 2.809272E-004$	1.41	0.318	1.060	83	
20	<i>cis</i> -1,3-Dichloropropene	16.539	0.9990	$y = 0.271367x - 0.003129$	6.91	0.644	2.146	75	
21	Toluene	17.372	0.9987	$y = 1.218899x - 6.724743E-004$	4.40	0.209	0.698	91	
22	<i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	17.849	0.9991	$y = 0.171387x - 0.001696$	6.17	0.877	2.924	75	
23	1,1,2-Trichloroethane	18.333	0.9998	$y = 0.148842x - 4.405210E-005$	1.83	0.447	1.491	83	
24	Tetrachloroethylene <sup>4</sup>	18.758	0.9998	$y = 0.375692x + 7.865872E-004$	1.41	0.534	1.778	166	
25	1,3-Dichloropropane <sup>4</sup>	18.788	0.9994	$y = 0.213894x + 4.938890E-004$	1.94	0.235	0.782	76	
26	Dibromochloromethane	19.427	0.9998	$y = 0.151371x - 5.686564E-004$	2.75	0.341	1.137	129	
27	1,2-Dibromoethane	19.805	0.9996	$y = 0.118271x - 7.610758E-004$	4.17	0.318	1.060	107	

피크 번호	이름	RT	CF R <sup>2</sup>	CF 공식	평균 RRF RSD	LOD ( $\mu\text{g/L}$ )	LOQ ( $\mu\text{g/L}$ )	EIC 정량화를 위한 표적 이온	IS
28	Chlorobenzene	21.322	0.9992	$y = 3.361692x - 0.050788$	9.43	0.396	1.320	112	IS2
29	1,1,2-Tetrachloroethane	21.561	0.9988	$y = 1.031673x - 0.016123$	9.48	0.638	2.128	131	
30	Ethylbenzene	21.642	0.9997	$y = 5.796045x - 0.095480$	12.66	0.323	1.076	91	
31/32	<i>m,p</i> -Xylene <sup>5</sup>	22.000	0.9982	$y = 8.881587x - 0.028249$	7.06	0.353	1.176	106	
33	<i>o</i> -Xylene <sup>6</sup>	23.198	0.9995	$y = 4.482819x - 0.052524$	9.89	0.407	1.355	106	
34	Styrene <sup>6</sup>	23.227	0.9995	$y = 3.494952x - 0.046133$	11.34	0.318	1.061	104	
35	Bromoform	23.766	0.9981	$y = 0.372236x - 0.006807$	11.25	0.771	2.570	173	
36	Isopropylbenzene	24.215	0.9996	$y = 6.061658x - 0.076808$	10.45	0.510	1.700	105	
37	1,1,2,2-Tetrachloroethane	24.986	0.9985	$y = 0.890392x - 0.012181$	8.16	0.719	2.397	83	
38	Bromobenzene	25.050	0.9993	$y = 1.281626x - 0.012817$	5.72	0.466	1.555	156	
39	1,2,3-Trichloropropane	25.125	0.9990	$y = 0.591367x - 0.004143$	4.42	0.520	1.733	75	
40	<i>n</i> -Propylbenzene	25.303	0.9992	$y = 6.827220x - 0.067985$	10.01	0.419	1.395	91	
41	2-Chlorotoluene	25.540	1.0000	$y = 1.500561x - 0.012329$	6.49	0.298	0.992	91	
42	1,3,5-Trimethylbenzene	25.740	0.9997	$y = 2.688176x - 0.028858$	9.49	0.464	1.546	105	
43	4-Chlorotoluene	25.809	0.9989	$y = 4.029700x - 0.004739$	4.80	1.035	3.450	91	
44	<i>tert</i> -Butylbenzene	26.548	0.9997	$y = 4.668966x - 0.049583$	9.40	0.465	1.550	119	
45	1,2,4-Trimethylbenzene	26.658	0.9987	$y = 5.240525x - 0.017612$	6.62	0.439	1.464	105	
46	<i>sec</i> -Butylbenzene	27.065	0.9999	$y = 1.477040x - 0.013188$	7.16	0.583	1.942	105	
47	1,3-Dichlorobenzene	27.344	1.0000	$y = 2.640657x - 0.003993$	1.50	0.506	1.687	146	
48	<i>p</i> -Isopropyltoluene	27.393	0.9997	$y = 1.603523x - 0.010740$	6.78	0.612	2.041	119	
49	1,4-Dichlorobenzene-D4 (IS2)	27.485						115	IS2
50	1,4-Dichlorobenzene	27.542	1.0000	$y = 2.442603x + 0.007424$	2.19	0.302	1.006	146	
51	<i>n</i> -Butylbenzene	28.310	0.9999	$y = 1.549466x - 0.013981$	6.34	0.678	2.259	91	
52	1,2-Dichlorobenzene	28.379	0.9999	$y = 2.374979x + 0.003092$	1.75	0.586	1.955	146	
53	1,2-Dibromo-3-chloropropane	30.012	0.9971	$y = 0.185372x - 0.002942$	9.57	0.704	2.346	157	
54	1,2,4-Trichlorobenzene	31.613	0.9990	$y = 1.919704x - 0.016428$	4.64	0.526	1.754	180	
55	Hexachlorobutadiene	31.909	0.9970	$y = 0.714420x - 0.011222$	8.84	0.800	2.666	225	
56	Naphthalene	32.093	0.9993	$y = 4.326216x - 0.055162$	9.10	0.282	0.939	128	
57	1,2,3-Trichlorobenzene	32.538	0.9990	$y = 1.680303x - 0.011443$	3.79	0.405	1.349	180	

표 A2. SIM 기반 분석법의 RT, 선형성, LOD 및 LOQ.

피크 번호	이름	RT	CF R <sup>2</sup>	CF 공식	평균 RRF %RSD	LOD ( $\mu\text{g/L}$ )	LOQ ( $\mu\text{g/L}$ )	정량자 ( <i>m/z</i> )	정성자 ( <i>m/z</i> )	IS
1	Vinyl chloride	5.133	0.9999	$y = 0.281442x - 2.687199E-004$	1.54	0.0366	0.1221	62	64	IS1
2	1,1-Dichloroethene	7.754	0.9998	$y = 0.648000x + 0.002310$	1.29	0.0139	0.0464	96	61.63	
3	Methylene chloride	8.689	0.9999	$y = 0.342324x + 0.002340$	2.92	0.0164	0.0547	84	86.49	
4	<i>trans</i> -1,2-Dichloroethene	9.238	0.9994	$y = 0.609515x + 0.007889$	2.66	0.0156	0.052	96	61.98	
5	1,1-Dichloroethane	10.067	0.9995	$y = 0.723088x + 0.008328$	2.31	0.0105	0.0352	63	65.83	
6	<i>cis</i> -1,2-Dichloroethene <sup>1</sup>	11.217	0.9997	$y = 0.535136x + 0.004580$	1.92	0.0069	0.0229	96	61.98	
7	2,2-Dichloropropane <sup>1</sup>	11.235	1.0000	$y = 0.413206x + 0.001122$	2.14	0.0401	0.1336	77	41.97	
8	Bromochloromethane	11.715	0.9996	$y = 0.216656x + 0.002607$	3.28	0.0119	0.0396	128	49.130	
9	Chloroform	11.833	0.9996	$y = 0.654791x + 0.007927$	3.17	0.0094	0.0315	83	85.47	
10	1,1,1-Trichloroethane	12.28	0.9998	$y = 0.657788x + 0.005203$	1.86	0.01	0.0332	97	99.61	
11	1,1-Dichloropropene <sup>2</sup>	12.601	1.0000	$y = 0.635295x - 0.001033$	1.13	0.0171	0.0571	75	110.77	
12	Carbon tetrachloride <sup>2</sup>	12.633	0.9996	$y = 0.628067x + 0.007055$	2.79	0.0107	0.0355	117	119.121	
13	Benzene <sup>3</sup>	13.054	0.9997	$y = 1.795088x + 0.015528$	1.95	0.0074	0.0246	78	77.51	
14	1,2-Dichloroethane <sup>3</sup>	13.066	0.9991	$y = 0.229826x + 0.005075$	6.23	0.0155	0.0518	62	64.98	
15	Fluorobenzene (IS1)	13.613		NA				96	77	

피크 번호	이름	RT	CF R <sup>2</sup>	CF 공식	평균 RRF %RSD	LOD (µg/L)	LOQ (µg/L)	정량자 (m/z)	정성자 (m/z)	IS
16	Trichloroethylene	14.412	0.9997	y = 0.625227x + 0.005265	2.15	0.0176	0.0587	95	130.132	IS1
17	1,2-Dichloropropane	14.932	0.9999	y = 0.393225x + 6.140449E-004	0.97	0.0107	0.0358	63	41.112	
18	Dibromomethane	15.191	1.0000	y = 0.121111x + 1.503549E-004	1.56	0.0192	0.064	93	95.174	
19	Bromodichloromethane	15.508	1.0000	y = 0.396675x - 6.536146E-004	0.98	0.0108	0.0358	83	85.127	
20	cis-1,3-Dichloropropene	16.539	0.9997	y = 0.446259x - 0.005669	3.92	0.0249	0.083	75	39.77	
21	Toluene	17.376	0.9998	y = 2.151509x - 0.013350	4.28	0.0452	0.1508	91	92	
22	trans-1,3-Dichloropropene	17.851	0.9997	y = 0.276712x - 0.003420	3.79	0.0233	0.0775	75	39.77	
23	1,1,2-Trichloroethane	18.329	1.0000	y = 0.280903x - 7.321405E-005	1.05	0.0212	0.0705	83	97.85	
24	Tetrachloroethylene <sup>4</sup>	18.758	0.9997	y = 0.699240x + 0.007796	3.05	0.0125	0.0416	166	168.129	
25	1,3-Dichloropropane <sup>4</sup>	18.79	1.0000	y = 0.391944x + 0.001236	1.36	0.0169	0.0564	76	41.78	
26	Dibromochloromethane	19.423	1.0000	y = 0.293262x - 2.788273E-004	1.03	0.0125	0.0417	129	127.131	
27	1,2-Dibromoethane	19.805	0.9999	y = 0.213981x - 0.001164	1.66	0.0264	0.088	107	109.188	
28	Chlorobenzene	21.328	0.9998	y = 5.624883x - 0.061726	3.62	0.0134	0.0446	112	77.114	
29	1,1,2-Tetrachloroethane	21.555	0.9999	y = 1.834390x - 0.003029	1.68	0.0149	0.0498	131	133.119	
30	Ethylbenzene	21.642	0.9992	y = 9.604301x - 0.254832	12.35	0.0203	0.0676	91	106	
31/32	m,p-Xylene <sup>5</sup>	22.006	0.9996	y = 15.927853x - 0.242611	13.36	0.0244	0.0813	106	91	
33	o-Xylene <sup>6</sup>	23.196	0.9995	y = 7.906416x - 0.190460	13.54	0.021	0.0699	106	91	
34	Styrene <sup>6</sup>	23.229	0.9994	y = 6.011384x - 0.156803	16.55	0.0119	0.0398	104	78.103	
35	Bromoform	23.77	1.0000	y = 0.624120x - 6.509101E-004	2.52	0.0286	0.0952	173	175.254	
36	Isopropylbenzene	24.215	0.9993	y = 10.764866x - 0.285476	14.26	0.0108	0.0361	105	120	
37	1,1,2,2-Tetrachloroethane	24.988	0.9997	y = 1.575668x - 0.016306	2.74	0.0466	0.1554	83	85.131	
38	Bromobenzene	25.056	0.9999	y = 3.204360x - 0.019287	2.97	0.0501	0.1671	156	77.158	
39	1,2,3-Trichloropropane	25.123	0.9988	y = 0.273946x + 0.004546	5.13	0.073	0.2432	75	77.110	
40	n-Propylbenzene	25.309	0.9994	y = 11.651015x - 0.284331	14.89	0.0274	0.0912	91	120	
41	2-Chlorotoluene	25.546	0.9998	y = 6.579881x - 0.093063	9.36	0.0217	0.0724	91	126	
42	1,3,5-Trimethylbenzene	25.74	0.9996	y = 9.412703x - 0.216021	16.06	0.0224	0.0748	105	120	
43	4-Chlorotoluene	25.811	0.9998	y = 7.059042x - 0.065293	9.27	0.0283	0.0945	91	126	
44	tert-Butylbenzene	26.552	0.9994	y = 8.436241x - 0.211647	14.96	0.0101	0.0338	119	91.134	
45	1,2,4-Trimethylbenzene	26.662	0.9997	y = 9.332961x - 0.181817	15.90	0.0298	0.0994	105	120	
46	sec-Butylbenzene	27.071	0.9996	y = 12.869653x - 0.281401	14.22	0.0124	0.0412	105	134	
47	1,3-Dichlorobenzene	27.344	0.9999	y = 4.738672x + 0.011042	0.86	0.0277	0.0922	146	111.148	
48	p-Isopropyltoluene	27.393	0.9995	y = 10.115025x - 0.221348	17.15	0.0156	0.052	119	134.91	
49	1,4-Dichlorobenzene-d <sub>4</sub> (IS2)	27.485		NA				115	150.152	
50	1,4-Dichlorobenzene	27.546	0.9999	y = 4.371155x + 0.018148	1.04	0.0301	0.1002	146	111.148	IS2
51	n-Butylbenzene	28.31	0.9994	y = 8.951068x - 0.218214	14.61	0.0134	0.0446	91	92.134	
52	1,2-Dichlorobenzene	28.385	0.9995	y = 4.289234x + 0.039700	1.77	0.0221	0.0738	146	111.148	
53	1,2-Dibromo-3-chloropropane	30.01	0.9998	y = 0.349032x - 0.003252	3.09	0.0533	0.1776	157	75.155	
54	1,2,4-Trichlorobenzene	31.619	0.9999	y = 3.312049x + 0.010646	1.18	0.0409	0.1365	180	182.145	
55	Hexachlorobutadiene	31.907	0.9998	y = 1.974710x + 0.013425	3.10	0.0652	0.2174	225	223.227	
56	Naphthalene	32.093	0.9997	y = 7.577165x - 0.127161	7.29	0.0445	0.1483	128		
57	1,2,3-Trichlorobenzene	32.54	0.9994	y = 2.998406x + 0.033306	2.45	0.0396	0.1318	180	182.145	

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

DE93552106

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2023

2023년 5월 08일 한국에서 발행

5994-6074KO

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

