

依据 ASTM D7504 标准分析单环芳烃溶剂中的痕量杂质

采用 Agilent 8860B 气相色谱仪进行双通道同步分析

作者

Jie Zhang
安捷伦科技（上海）有限公司

摘要

本研究介绍了采用双通道 Agilent 8860B 气相色谱 (GC) 系统，遵循美国材料与试验协会 (ASTM) D7504 标准分析单环芳烃溶剂中的杂质。方法学验证结果表明：色谱柱分离度、灵敏度以及定量准确度均满足标准要求。绝大多数杂质的质量浓度精密度 (RSDs) 低于 1%。两个通道所得结果表现出良好的一致性，且在 ASTM D7504 的重现性限值范围内。本应用简报介绍了使用氦气、氮气和氢气作为载气的三种方法，均满足 ASTM D7504 的要求。同时，借助 Agilent OpenLab CDS 软件，可轻松实现基于化合物有效碳数的归一化定量。8860B 气相色谱搭配 OpenLab CDS 系统，可为芳香族杂质分析提供一套完整、经过验证的解决方案，覆盖样品前处理、分离、检测直至最终报告生成的全部工作流程。

前言

高纯度单环芳烃（如苯、甲苯、乙苯和二甲苯，统称 BTEX）的生产是现代石油化工行业的基石。这些化合物是合成塑料、树脂和纺织品的重要原料。即便是痕量杂质，也会对下游化学反应与产品质量产生不利影响，因此必须开展严格的分析检测，确保这些中间产品满足严苛的商用规格指标。

ASTM D7504 是行业标准测试方法，采用配备火焰离子化检测器 (FID) 的气相色谱 (GC) 测定单环芳烃的纯度及其中的痕量杂质^[1]。该方法因简化的工作流程而备受青睐，它采用有效碳数 (ECN) 校正因子进行峰面积归一化。这消除了对每种杂质进行繁琐的多点校准的需要，使实验室能够以高精度计算纯度并定量痕量非芳烃与芳烃组分。

ASTM D7504 的适用范围涵盖多种芳烃液体，包括苯、甲苯、混合二甲苯和苯乙烯。为满足该方法严格的性能要求，气相色谱系统必须具备以下性能：

- **高灵敏度：**定量限 (LOQ) 至少为 0.0006%（质量分数）
- **良好的分离度：**关键组分分离（如对二甲苯和间二甲苯）的谷-峰比不超过 50%
- **优异的精密度：**峰面积重现性良好，保障纯度计算结果准确

在双通道 GC/FID 平台上执行 ASTM D7504 方法，即在同一台气相色谱柱温箱内，配置两套完全独立、进样器-色谱柱-检测器均相同的分析通道，可带来显著的操作优势：

1. **提升实验室通量：**两次进样可同步开展，单台仪器的样品处理能力直接翻倍，有效降低单次分析成本，大幅提高硬件投资回报率
2. **方法灵活性与冗余保障：**双通道配置允许实验室在同一个柱温箱运行周期内测定不同类型样品（例如前通道测甲苯，后通道测二甲苯）。此外，在常规维护期间，另一通道可直接作为“备用”通道，保障设备持续运行

一套可靠的系统，两个通道均必须满足 ASTM D7504 对灵敏度、分离度与精密度的全部要求。此外，对于同一样品，两个通道应得出一致的定量结果。将 ASTM D7504 实验室间测试中得出的重现性限值 (R) 用于评估两个通道之间结果的一致性。

ASTM D7504 推荐使用氮气和氢气作为载气。在中国，大型石化企业在开展高纯化工中间体出口检测时，其内部质控标准通常会直接参照 ASTM D7504。由于氮气在国内应用普遍，企业常会对 ASTM D7504 方法进行调整，改用氮气作为载气。

本应用简报展示了遵循 ASTM D7504 标准，在 Agilent 8860B GC 上进行双通道分析，使用三种不同载气，均可获得稳定、高精度的数据。

实验部分

Agilent 8860B GC 配置了双分流/不分流进样口和双火焰离子化检测器 (FIDs)。样品引入由两台 Agilent 7693A 自动液体进样器 (ALS) 完成，配备高密度样品盘（16 位样品瓶）。分析参数与消耗品信息汇总于表 1 和表 2。使用 Agilent OpenLab CDS 2.8 版执行数据采集和分析。

表 1. 三种载气下的系统分析参数

ALS 和进样口			
进样量	0.6 µL		
模式	分流，100:1		
温度	260 °C		
载气	氮气，2.1 mL/min	氢气，1.7 mL/min	氮气，1.2 mL/min
柱温箱温度			
	氮气方法	氢气方法	氮气方法
初始温度	60 °C	60 °C	60 °C
初始保持时间	10 min	10 min	15 min
温阶 1 速率	5 °C/min	5 °C/min	3.5 °C/min
温阶 1 设定值	150 °C	150 °C	150 °C
温阶 1 保持	0 min	0 min	0 min
温阶 2 速率	30 °C/min	30 °C/min	30 °C/min
温阶 2 设定值	220 °C	220 °C	220 °C
温阶 2 保持	8 min	8 min	8 min
后运行温度	0 °C	0 °C	0 °C
后运行时间	0 min	0 min	0 min
检测器			
温度	260 °C		
空气	400 mL/min		
氢气	30 mL/min		
尾吹气 (N ₂)	25 mL/min		

表 2. 色谱柱和消耗品

配置	
色谱柱	Agilent J&W HP-INNOWax, 60 m × 0.32 mm, 0.5 µm (部件号 19091N-2161)
消耗品	
进样口隔垫	安捷伦不粘连高级绿色隔垫（部件号 5183-4759）
进样口衬管*	安捷伦超高惰性低压降分流衬管，带玻璃毛（部件号 5190-2295）
ALS 进样针	安捷伦蓝色系列自动进样器进样针，5 µL，固定针头，23-26s/42/锥形针尖（部件号 G4513-80206）
色谱柱密封垫圈	用于 0.32 mm 色谱柱的短型石墨密封垫圈，10/包（部件号 5080-8853）

* 去活分流衬管（部件号 5183-4647）经过验证，同样可用于本应用

化学品与试剂

23 种化学品均购自上海安谱科技股份有限公司。以上物质均为单环芳烃溶剂中常见的杂质，溶于正己烷中，质量浓度约为 0.1%，用于各杂质的定性鉴定。将杂质混合溶液用于分析方法优化。对于色谱柱分离度和方法回收率的评估，对二甲苯校验标准品一号购自 AccuStandard Inc。

实验室自制的校验标准品含有苯、甲苯和对二甲苯中的常见污染物，并参照之前工作中的样品组成配制，用于精密度测试^[2]。另配制了含 0.0006% wt 苯的对二甲苯样品，用于评估系统灵敏度。详细的样品组成见表 3。

表 3. 测试标准品组成

化合物	苯校验标准品 (质量百分比)	甲苯校验标准品 (质量百分比)	对二甲苯校验标准品 (质量百分比)	对二甲苯标准品一号 (质量百分比)	LOD 测试标准品 (质量百分比)
n-C ₆	0.032	–	0.003	–	
n-C ₉	–	–	–	0.017	
苯	99.91	0.016	0.003	0.02	0.0006
甲苯	0.009	99.92	0.034	0.02	
1,4-二氧六环	0.002	–	–	–	
乙苯	–	0.027	0.245	0.1	
对二甲苯	0.005	0.013	99.23	99.62	
间二甲苯	0.005	0.016	0.376	0.101	
异丙苯	0.002	–	–	0.02	
邻二甲苯	0.004	0.0020	0.09	0.102	
正丙苯	0.018	0.0030	–	–	
丁基苯	0.009	–	0.009	–	
对二乙苯	–	–	–	0.02	

结果与讨论

氮气、氮气和氢气载气的方法开发

氮气载气和氢气载气方法采用了 ASTM D7504 推荐的柱温箱升温程序。氮气的色谱柱流速沿用了之前工作中的条件^[3]。氮气的柱流速经过优化，使 23 种单环芳烃溶剂典型杂质中的 19 种实现了基线分离。

氮气方法的柱温箱升温程序基于氢气方法，通过方法转换器开发。氢气方法的平均线速度为 29 cm/s。理论上，氮气的最佳线速度在 10 至 15 cm/s 之间。为兼顾分析速度与分离度，氮气方法平均线速度设为 20 cm/s，柱温箱升温速率约为氢气方法的 70%，见图 1。

为将氮气方法应用于 23 种杂质的混合物进行分离验证，对初始温度程序进行了微调：将 60 °C 的保持时间从 14.3 分钟延长至 15 分钟。此外，150 °C 至 220 °C 区间的升温速率提高至 30 °C/min，以加速非目标污染物的流出。调整后的方法随即用于 23 种杂质混合物的分析，进行分离效果验证。结果显示，使用氮气载气时，21 种化合物可实现基线分离。

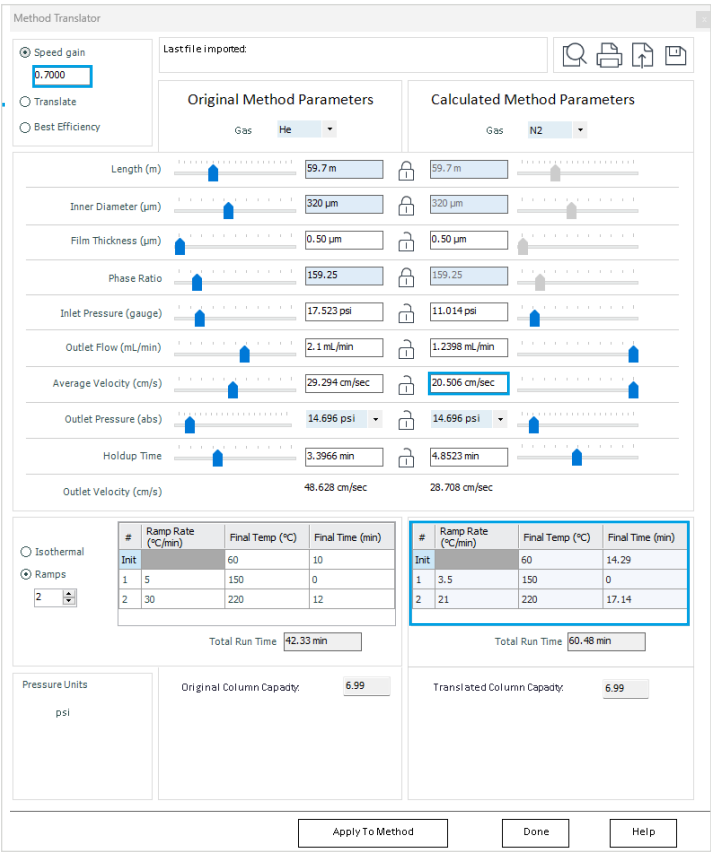


图 1. 使用方法转换工具将氮气方法转换为氮气方法

使用氦气、氮气和氢气载气时，23 种杂质的混合物在两个通道上的色谱图如图 2 所示。可将保留时间 (RT) 用于杂质定性 (保留时间信息见表 4)。

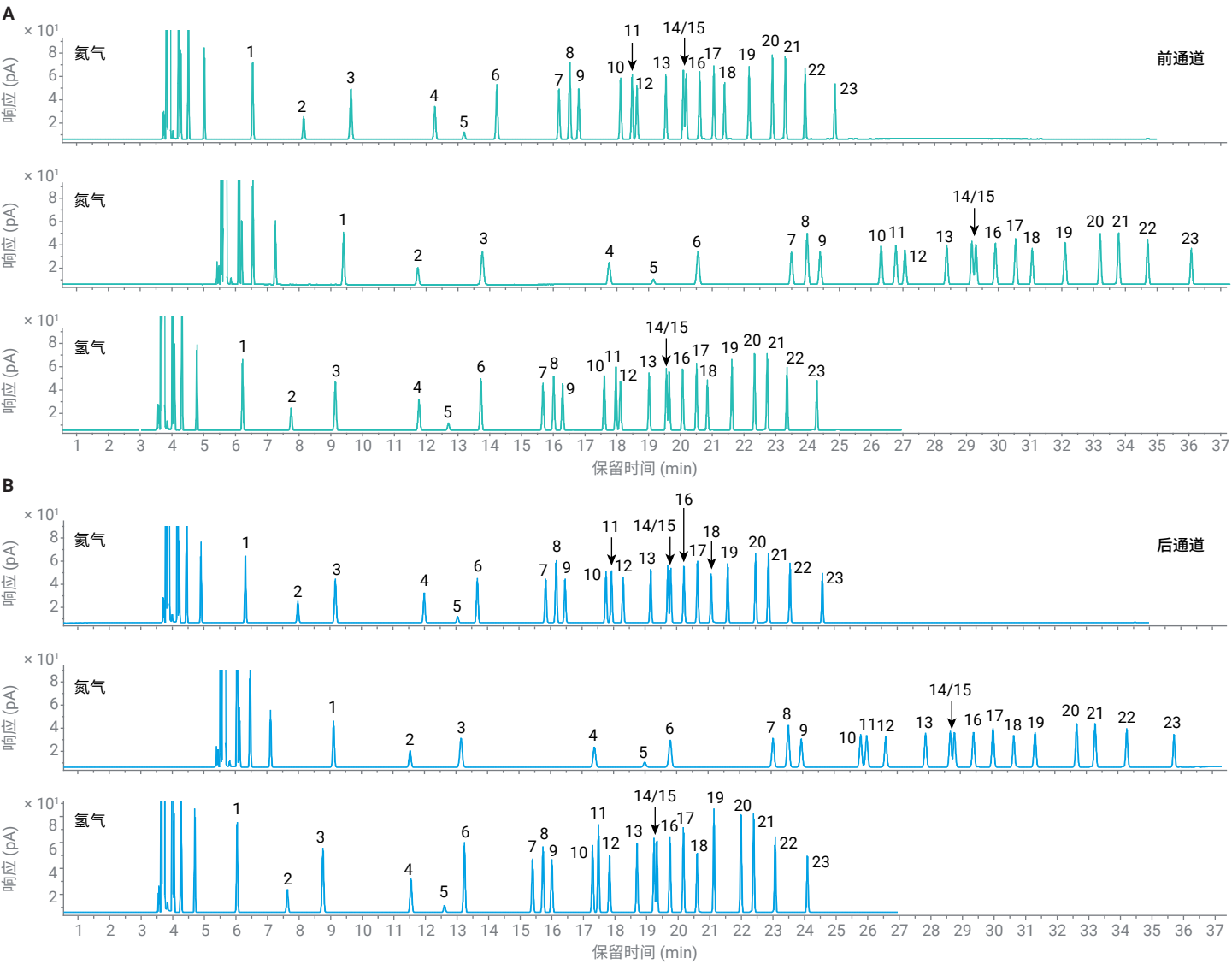


图 2. (A) 使用氦气、氮气和氢气载气时，23 种杂质的混合物在前通道上的色谱图。(B) 使用氦气、氮气和氢气载气时，23 种杂质的混合物在后通道上的色谱图

表 4. 使用三种载气时，23 种杂质在前通道和后通道上的保留时间

峰编号	化合物名称	RT-He-前 (min)	RT-He-后 (min)	RT-N ₂ -前 (min)	RT-N ₂ -后 (min)	RT-H ₂ -前 (min)	RT-H ₂ -后 (min)
1	正壬烷	6.541	6.318	9.403	9.116	6.222	6.038
2	苯	8.146	7.983	11.738	11.545	7.752	7.630
3	癸烷	9.634	9.173	13.768	13.161	9.142	8.764
4	甲苯	12.273	11.992	17.756	17.392	11.776	11.543
5	1,4-二氧六环	13.193	13.053	19.147	18.990	12.702	12.603
6	十一烷	14.226	13.678	20.554	19.799	13.723	13.233
7	乙苯	16.179	15.846	23.496	23.060	15.676	15.390
8	对二甲苯	16.519	16.179	23.989	23.542	16.013	15.721
9	间二甲苯	16.799	16.461	24.397	23.955	16.292	16.022
10	异丙苯	18.118	17.760	26.315	25.842	17.604	17.293
11	十二烷	18.482	17.934	26.779	26.030	17.97	17.478
12	邻二甲苯	18.632	18.301	27.064	26.635	18.111	17.827
13	正丙苯	19.544	19.179	28.38	27.898	19.107	18.698
14	对乙基甲苯	20.093	19.724	29.169	28.685	19.56	19.237
15	间乙基甲苯	20.18	19.813	29.296	28.813	19.646	19.326
16	叔丁基苯	20.607	20.232	29.912	29.418	20.07	19.742
17	仲丁基苯	21.052	20.664	30.549	30.038	20.508	20.167
18	苯乙烯	21.388	21.097	31.067	30.696	20.848	20.600
19	十三烷	22.162	21.621	32.102	31.373	21.62	21.133
20	1,3-二乙基苯	22.895	22.506	33.205	32.693	22.333	21.989
21	正丁基苯	23.301	22.912	33.788	33.277	22.731	22.389
22	α -甲基苯乙烯	23.922	23.598	34.701	34.283	23.353	23.069
23	苯乙炔	24.861	24.625	36.074	35.783	24.291	24.010

色谱柱分离度评估

将对二甲苯校验标准品一号用高纯度对二甲苯稀释至间二甲苯浓度约 0.03%，然后在三种方法下分别进行分离。以间二甲苯与对二甲苯的分离情况来评估色谱柱的分离度。ASTM D7504 要求两峰间谷底至基线的距离不得大于较低峰峰高的 50%。对于对二甲苯溶剂中的间二甲苯杂质，间二甲苯峰高与谷底至基线高度之比 (H/V) 应不小于 2:1。如色谱图 (图 3) 所示，所选的 Agilent J&W HP-INNOWax 色谱柱的 H/V 比值大于 5:1，轻松满足该分离度指标要求。

系统精密度

按照 ASTM D7504 要求，使用实验室自制的苯、甲苯和对二甲苯校验标准品评估系统精密度。在每种载气条件下，对校验标准品进行十次连续双通道同时进样。氮载气条件下两个分析通道的代表性色谱图如图 4 所示。

氮载气条件下，两个分析通道上峰响应和对应质量浓度的精密度表现优异，除 1,4-二氧六环和异丙苯（这两种化合物浓度较低）外，其余所有化合物的峰面积 %RSD 均低于 1.0%。在所有杂质中，苯中的 1,4-二氧六环在两个通道上的响应精密度最差 (2.9%–5.2%)。其质量浓度约为 0.0022%，意味着每次进入色谱柱用于检测的 1,4-二氧六环仅 0.11 ng。1,4-二氧六环的 ECN 为 3.07，表明其绝对响应因子（响应/质量）不足烃类及单环芳烃溶剂的三分之一。含量极低且本身响应灵敏度低，导致其峰面积较小，峰面积精密度不如其他化合物。

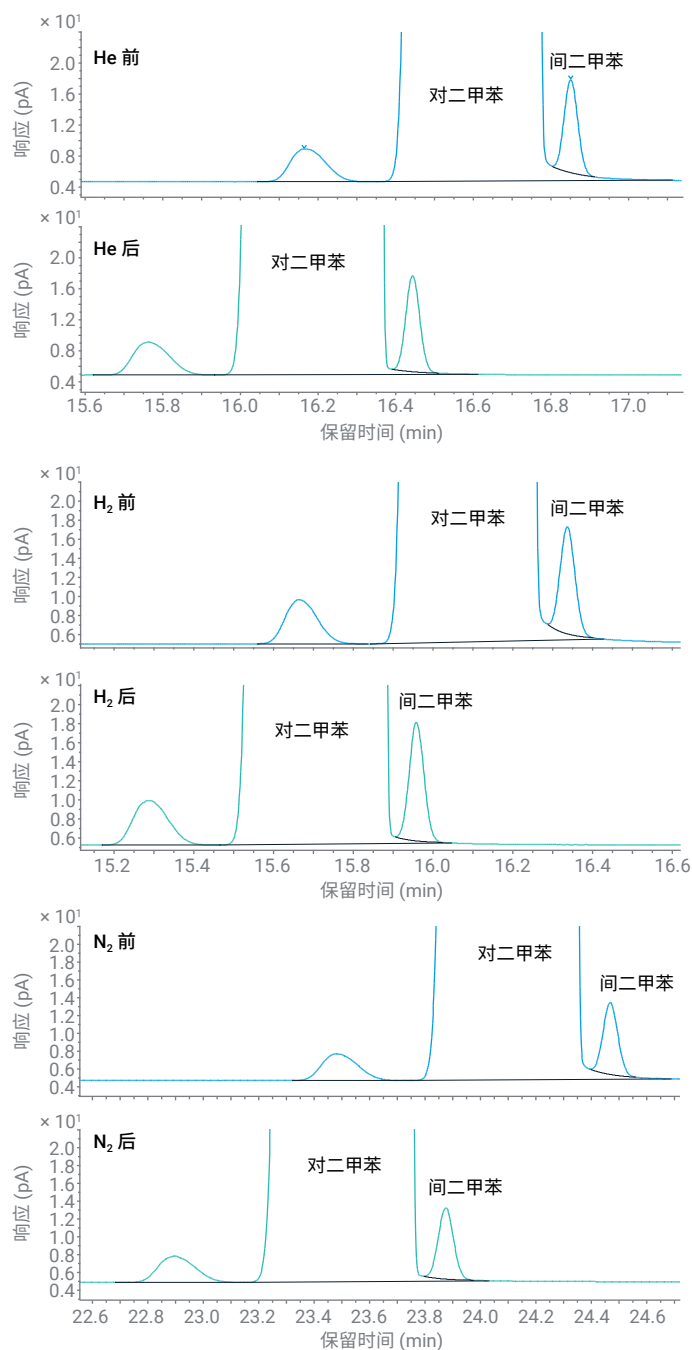


图 3. 使用三种方法时，对二甲苯与间二甲苯在两个通道上的分离情况

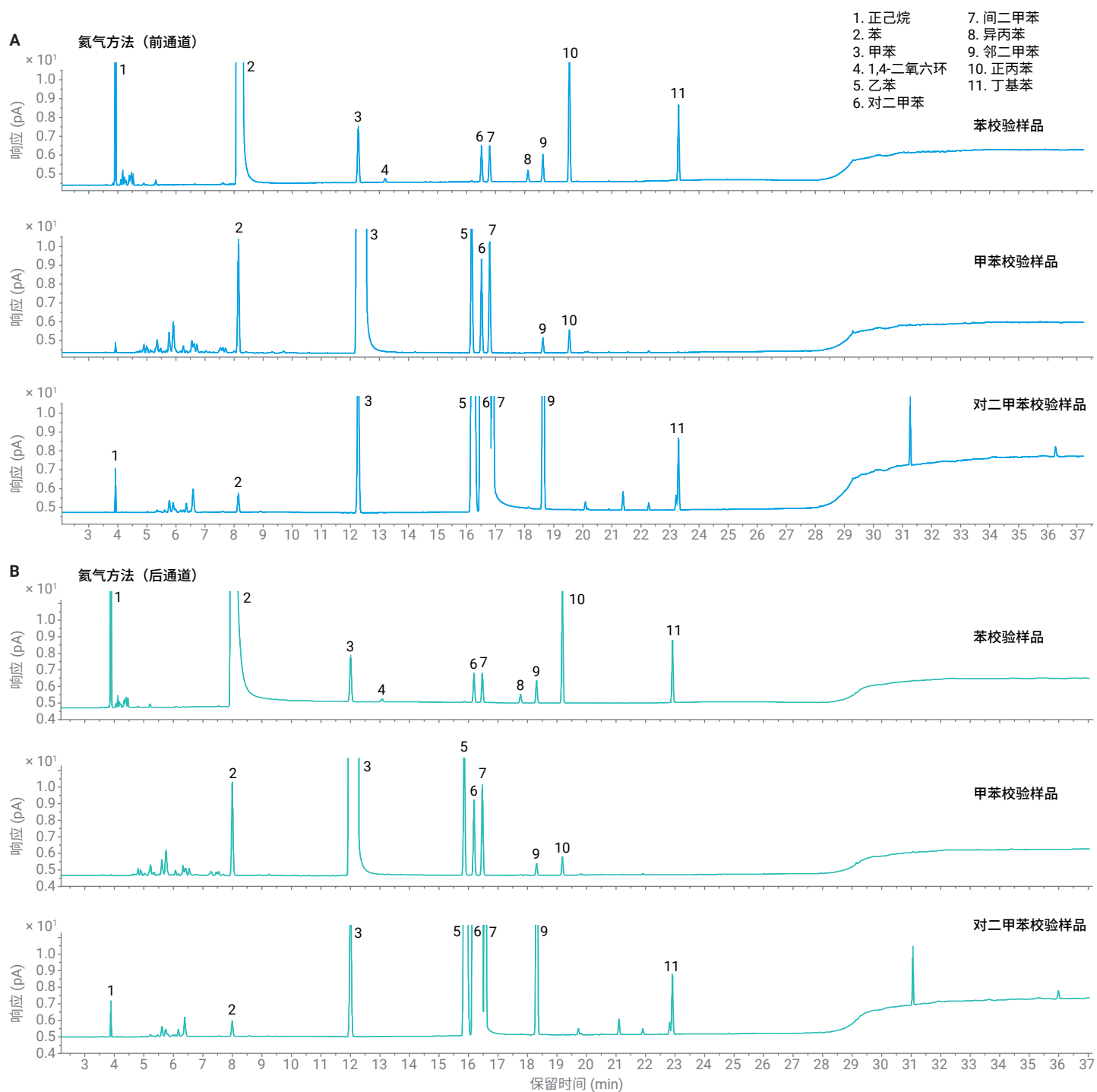


图 4. (A) 以氮气为载气时，苯、甲苯和对二甲苯校样标准品在前通道上的色谱图。(B) 以氮气为载气时，苯、甲苯和对二甲苯校样标准品在后通道上的色谱图

氮气方法下三种校验标准品的保留时间精密度见表 6。前通道的 RT %RSD 范围为 0.003%–0.015%，后通道为 0.003%–0.05%。

氮气、氢气方法的精密度结果与氮气方法相当。使用氮气和氢气载气获得的色谱图及精密度汇总数据见附录。

表 5. 使用氮气载气时，苯、甲苯和对二甲苯校验标准品中杂质的响应与定量精密度

苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值 (R)
	质量百分比	质量百分比 %RSD	峰面积	峰面积 %RSD	质量百分比	质量百分比 %RSD	峰面积	峰面积 %RSD		
n-C ₆	0.031794	0.408	36.974	0.402	0.031695	0.355	34.135	0.544	-9.9E-05	
苯	99.90796	0	127,747.027	0.454	99.913267	0	117,592.951	0.652	0.005307	0.0247
甲苯	0.008925	0.267	11.288	0.546	0.009076	0.346	10.631	0.632	0.000151	0.011
1,4-二氧六环	0.002144	3.349	0.81	3.559	0.00222	5.157	0.777	5.102	7.6E-05	
对二甲苯	0.004996	0.26	6.266	0.608	0.005084	0.642	5.943	0.934	8.8E-05	
间二甲苯	0.004998	0.313	6.27	0.645	0.005089	0.567	5.912	0.921	9.1E-05	
异丙苯	0.001592	1.62	1.985	1.73	0.001615	1.391	1.864	1.691	2.3E-05	
邻二甲苯	0.003677	0.512	4.613	0.737	0.003735	1.01	4.339	1.223	5.8E-05	
正丙苯	0.018387	0.365	22.92	0.656	0.018692	0.47	21.579	0.907	0.000305	
正丁基苯	0.009153	0.36	11.353	0.658	0.009249	0.503	10.624	0.951	9.6E-05	
甲苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值 (R)
	质量百分比	质量百分比 %RSD	峰面积	峰面积 %RSD	质量百分比	质量百分比 %RSD	峰面积	峰面积 %RSD		
苯	0.015738	0.131	18.12	0.436	0.015988	0.2	18.711	0.362	0.00025	0.0022
甲苯	99.924051	0	113979.546	0.397	99.923686	0	115961.321	0.361	-0.000365	0.0131
乙苯	0.026454	0.165	29.927	0.398	0.026501	0.136	30.424	0.374	4.7E-05	0.0029
对二甲苯	0.013029	0.22	14.727	0.39	0.01305	0.217	14.982	0.435	2.1E-05	0.0029
间二甲苯	0.01564	0.157	17.679	0.432	0.01567	0.246	17.99	0.41	3E-05	0.0037
邻二甲苯	0.002061	0.67	2.33	0.8	0.002074	0.878	2.381	1.037	0.000013	0.002
正丙苯	0.003027	0.618	3.401	0.745	0.00303	0.844	3.457	0.976	3E-06	0.0028
对二甲苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值 (R)
	质量百分比	质量百分比 %RSD	峰面积	峰面积 %RSD	质量百分比	质量百分比 %RSD	峰面积	峰面积 %RSD		
n-C ₆	0.002626	0.697	2.993	0.817	0.002631	0.971	2.818	1.043	5E-06	0.0043
苯	0.002712	0.744	3.398	0.725	0.002729	0.453	3.214	0.542	1.7E-05	0.0013
甲苯	0.033612	0.128	41.658	0.428	0.033803	0.181	39.379	0.416	0.000191	0.0027
乙苯	0.245836	0.025	305.307	0.484	0.246874	0.026	285.238	0.326	0.001038	0.001
对二甲苯	99.229175	0.001	121973.152	0.482	99.22707	0	114646.657	0.342	-0.002105	0.0173
间二甲苯	0.376303	0.123	462.555	0.548	0.377201	0.12	435.817	0.377	0.000898	0.0165
邻二甲苯	0.087991	0.042	108.159	0.505	0.088478	0.065	102.228	0.319	0.000487	0.0024
正丁基苯	0.008862	0.182	10.771	0.575	0.008878	0.224	10.143	0.297	1.6E-05	0.0017

表 6. 氦气方法中三种校验标准品的保留时间 (RT) 及 RT %RSD

苯校验标准品				
化合物	前通道		后通道	
	RT	RT RSD%	RT	RT RSD%
n-C ₆	3.916	0.008	3.884	0.006
苯	8.256	0.011	8.099	0.011
甲苯	12.273	0.009	12.010	0.008
1,4-二氧六环	13.198	0.014	13.073	0.010
对二甲苯	16.515	0.005	16.191	0.005
间二甲苯	16.796	0.006	16.473	0.005
异丙苯	18.114	0.005	17.769	0.004
邻二甲苯	18.627	0.004	18.311	0.004
正丙苯	19.539	0.004	19.187	0.004
正丁基苯	23.295	0.002	22.917	0.003
甲苯校验标准品				
化合物	前通道		后通道	
	RT	RT RSD%	RT	RT RSD%
苯	8.148	0.009	7.999	0.007
甲苯	12.505	0.010	12.240	0.010
乙苯	16.177	0.005	15.859	0.005
对二甲苯	16.517	0.004	16.190	0.004
间二甲苯	16.797	0.004	16.472	0.004
邻二甲苯	18.628	0.003	18.309	0.005
正丙苯	19.539	0.003	19.185	0.004
对二甲苯校验标准品				
化合物	前通道		后通道	
	RT	RT RSD%	RT	RT RSD%
n-C ₆	3.917	0.010	3.884	0.012
苯	8.148	0.015	7.995	0.047
甲苯	12.274	0.009	12.005	0.050
乙苯	16.212	0.014	15.891	0.037
对二甲苯	16.800	0.012	16.461	0.032
间二甲苯	16.903	0.009	16.568	0.031
邻二甲苯	18.638	0.006	18.315	0.026
正丁基苯	23.294	0.005	22.911	0.017

检出限和定量限

在三种载气条件下，于两条分析通道对浓度 0.0006% 的苯连续进样 10 次，以此评估方法灵敏度。利用苯的平均 SNR 计算 LOD (SNR 为 3:1) 与 LOQ (SNR 为 10:1)，结果见表 7。所得 LODs 和 LOQs 均优于 ASTM D7504 中相应的要求（分别为 0.0002% 和 0.0006%）。在同一方法下，两个测试通道的灵敏度非常接近。氦气方法的定量限表现最佳，因其峰形更尖锐（与氮气方法相比）且基线更干净（与氢气方法相比）。

表 7. 基于苯的平均信噪比计算得到的 LODs 与 LOQs

载气	氦气方法		氮气方法		氢气方法	
通道	前	后	前	后	前	后
平均 SNR	43:1	40.2:1	32.0:1	28.9:1	40:1	36:1
平均峰面积	0.838	0.818	0.722	0.725	0.758	0.717
峰面积 %RSD	2.336	2.623	2.464	4.779	3.973	3.895
LOD (质量百分比)	0.000042	0.000045	0.000056	0.000062	0.000045	0.00005
LOQ (质量百分比)	0.00014	0.00015	0.00019	0.00021	0.00015	0.00017

双通道同时进样的结果一致性

在两个通道之间，对三种实验室自制校验标准品中各杂质的定量一致性进行了比较。根据 ASTM D7504 标准，如果双通道结果的差异低于由 ASTM D7504 ILS 结果得到的重现性 (R) 阈值，则可以 95% 的概率确认双通道结果具有一致性。如表 5 所示，在氦气方法中，除对二甲苯中的乙苯外，各目标杂质在双通道间的定量差值（第 10 列）均低于统计 R 值（第 11 列）。实验室自制的对二甲苯校验标准品中乙苯质量浓度为 0.245%，在 ASTM D7504 ILS 研究结果中无对应的 R 值。D7504 标准给出：对二甲苯中 0.0085% 乙苯杂质的 R 值为 0.001%。杂质质量浓度越高，R 值越大。因此，0.245% 乙苯的 R 值应约为 0.001% 的数倍。这一推断可从 ASTM D7504 中甲苯中 0.0265% 乙苯的 R 值为 0.002% 得到印证。两个通道间 0.245% 乙苯的定量差值为 0.0011%，远小于 0.0265% 乙苯的 R 值，表明两个通道间乙苯的定量结果同样具有一致性。

在氮气和氢气方法下，对两个通道的结果一致性也进行了评估，结论与氮气方法相同，详见附录表 A1 和 A2。前后分析通道间优异的定量一致性，是将双通道同时分析模式应用于高通量样品分析，或在不使用校准标样的情况下将一个通道作为另一通道的备用通道的基础。

结果准确度

ASTM 并未推荐用于确定该检测方法偏差的标准物质。因此，采用加标回收率测试来评估所述系统的定量准确度。向杂质含量极低（近乎不含杂质）的高纯度对二甲苯溶剂中，加入准确称量的 8 种杂质组分，随后测定这些加标杂质。基于测定值得到的回收率结果处于 92%–105%，见表 8 与图 5。在三种方法中，与其他杂质相比，间二甲苯的回收率最低，这是由于间二甲苯杂质与对二甲苯溶剂未能实现基线分离所致。其余七种化合物在三种方法中均表现出优异且相当的回收率性能。ppm 级杂质的检测回收率令人满意，表明 8860B GC 系统是芳烃溶剂杂质准确质量控制的可靠平台。

表 8. 对二甲苯中加标杂质的回收率

化合物	加入的质量百分比	* 实测质量百分比			结果回收率 (%)		
		He	N ₂	H ₂	He	N ₂	H ₂
n-C ₉	0.0048	0.0048	0.0046	0.0045	98.9	96.2	92.9
苯	0.0048	0.0050	0.0048	0.0049	103.7	100.1	102.4
甲苯	0.0041	0.0042	0.0042	0.0042	103.9	102.9	103.1
乙苯	0.0233	0.0240	0.0240	0.0239	103.3	103.1	102.8
间二甲苯	0.0288	0.027	0.027	0.027	92.7	93.8	93.9
异丙苯	0.0052	0.005	0.005	0.005	99.0	100.6	98.6
邻二甲苯	0.0241	0.024	0.024	0.024	100.0	100.8	100.0
对二甲苯	0.0052	0.005	0.005	0.005	98.1	100.6	98.1

* 实测质量百分比是每种方法下双通道结果的平均值

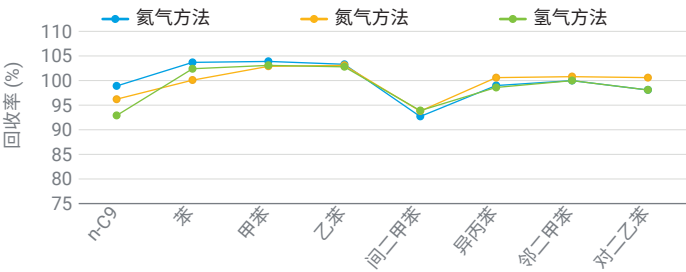


图 5. 对二甲苯中加标杂质的回收率图

OpenLab CDS 定量和报告

ASTM D7504 依据各组分 ECN，对每个峰校正后的响应进行归一化处理，完成样品杂质定量。OpenLab CDS 软件可通过预置方法处理原始数据，轻松实现峰面积校正、归一化及报告生成。数据处理方法中的关键设置包括：

- 在校准表中启用手动因子模式，利用各杂质的 ECN 进行响应校正

Name	Use in normalization	Mode	Manual factor
Toluene-B	☒	Manual factor	0.919500000
Toluene-F	☒	Manual factor	0.919500000
1,4-dioxane-B	☒	Manual factor	3.077400000
1,4-Dioxane-F	☒	Manual factor	3.077400000

- 在校准类型设置中启用归一化功能，并选择 **Apply correction factors to normalized concentrations**（将校正因子应用于归一化浓度），以实现基于校正后峰面积的归一化计算

☒ Normalize to %
☐ Include ISTD amount
☒ Apply correction factors to normalized concentrations

- 选择 **NormAmount** 模板或自定义模板，基于目标信号生成归一化报告

Report template
Report selected signals

完成上述方法设置并将方法与采集数据关联后，数据处理完毕即自动生成归一化报告。图 6 的示例为前通道上苯校验标准品的定量报告。

化合物与未知峰结果						
RT (min)	类型	名称	组名称	峰面积	含量	归一化含量 (%)
3.917	VB	n-C6		36.876	36.88	0.03189
8.257	BB	苯		127023.695	115528.05	99.90772
12.274	BB	甲苯		11.226	10.32	0.00893
13.202	BB	1,4-二氧六环		0.762	2.34	0.00203
16.515	BB	对二甲苯		6.207	5.75	0.00498
16.796	BB	间二甲苯		6.203	5.75	0.00497
18.114	BB	异丙苯		1.975	1.84	0.00159
18.627	BB	邻二甲苯		4.565	4.23	0.00366
19.538	BB	正丙苯		22.803	21.27	0.01840
23.295	BB	正丁基苯		11.288	10.58	0.00915
总和:						99.99
分组结果						
名称	组类型			总峰面积	含量	归一化含量
非芳烃	时间分组					
非芳烃	时间分组 (3.5 Min:16 Min)			7.734	7.73	0.00669

图 6. 苯校验标准品的定量报告（前通道）

结论

采用配置两个相同分析通道的 Agilent 8860B 气相色谱系统，使用三种载气对单环芳烃溶剂中的杂质进行了分析。根据 ASTM D7504 方法，对每个分析通道在分离度、灵敏度、定量精密度和回收率方面进行了评估，均获得了满意的结果。两个通道之间的定量结果一致。

- 对于 300 ppm 的间二甲苯-对二甲苯溶剂体系，色谱柱对目标化合物对的分离效果良好，H/V 不低于 5:1
- 各分析通道上苯的 LODs 小于 0.0001%，优于 ASTM D7504 要求的 0.0002% LOD
- 校验标准品中大多数杂质的响应和质量浓度精密度均优于 1%，达到或超过了 D7504 中的精密度要求
- 加标杂质的回收率表现优异，处于 93%–105% 之间，证明 8860B 气相色谱系统具备良好的定量准确度
- 所有测试杂质在两个通道之间的定量差异均小于重现性阈值 (R)，表明两个通道具有卓越的一致性

除出色的仪器性能外，Agilent OpenLab CDS 软件还可执行基于 ECN 的归一化计算，实现简便、快速的定量分析与报告生成。

8860B 双通道 GC 系统配合 OpenLab CDS 软件，能够对单环芳烃溶剂中的杂质进行准确、可靠的分析，且精密度令人满意。相较于单通道分析系统，可显著提升实验室效率。

参考文献

- ASTM D7504-23. Standard Test Method for Trace Impurities in Monocyclic Aromatic Hydrocarbons by Gas Chromatography and Effective Carbon Number. *ASTM International*, **2023**
- Scott, H. 基于 ASTM D7504 方法使用 Agilent 8850 气相色谱系统分析单环芳烃，*安捷伦科技公司应用简报*，5994-7409ZHCN，**2024**
- Zhang, Y. 使用 Agilent 8860 气相色谱系统和内置数据处理工具分析单环芳烃溶剂的通用方法，*安捷伦科技公司应用简报*，5994-1586ZHCN，**2022**

附录

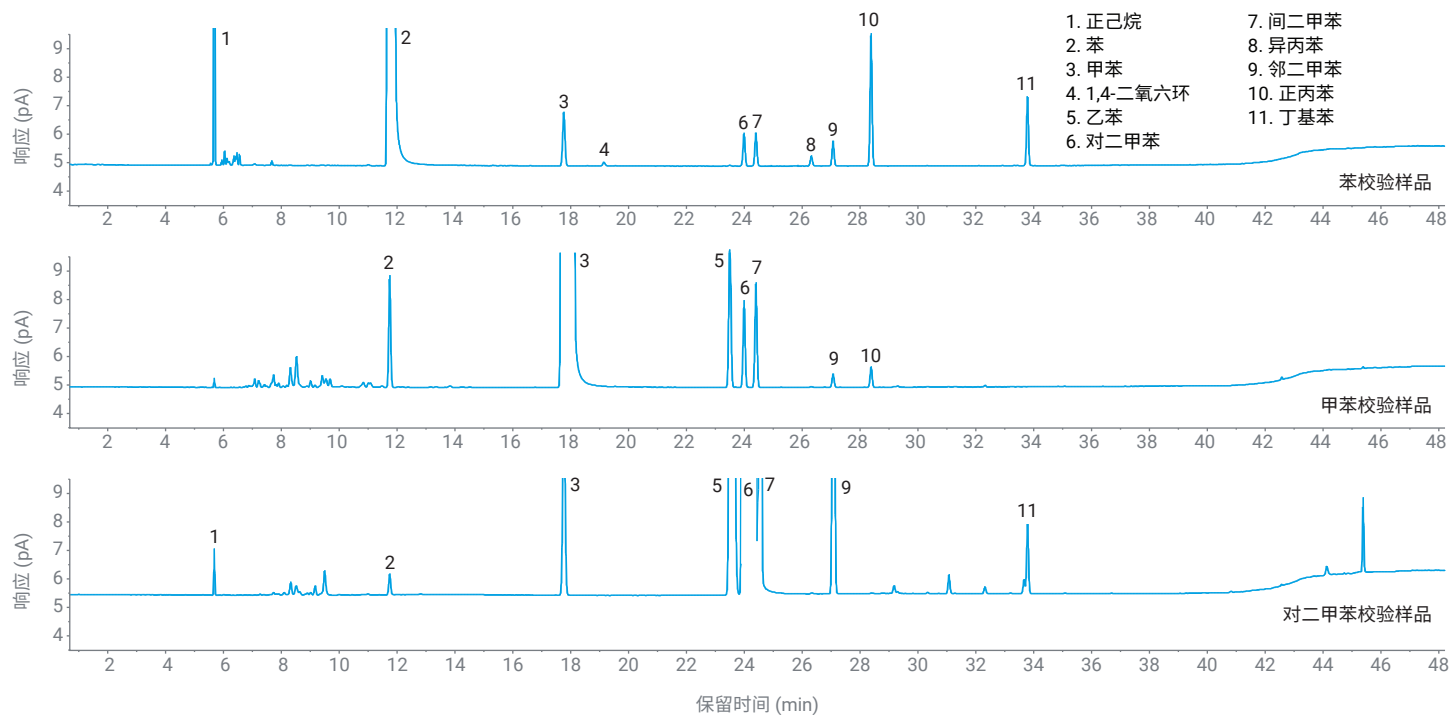


图 A1. 以氮气为载气时，苯、甲苯和对二甲苯校验标准品在前通道上的色谱图

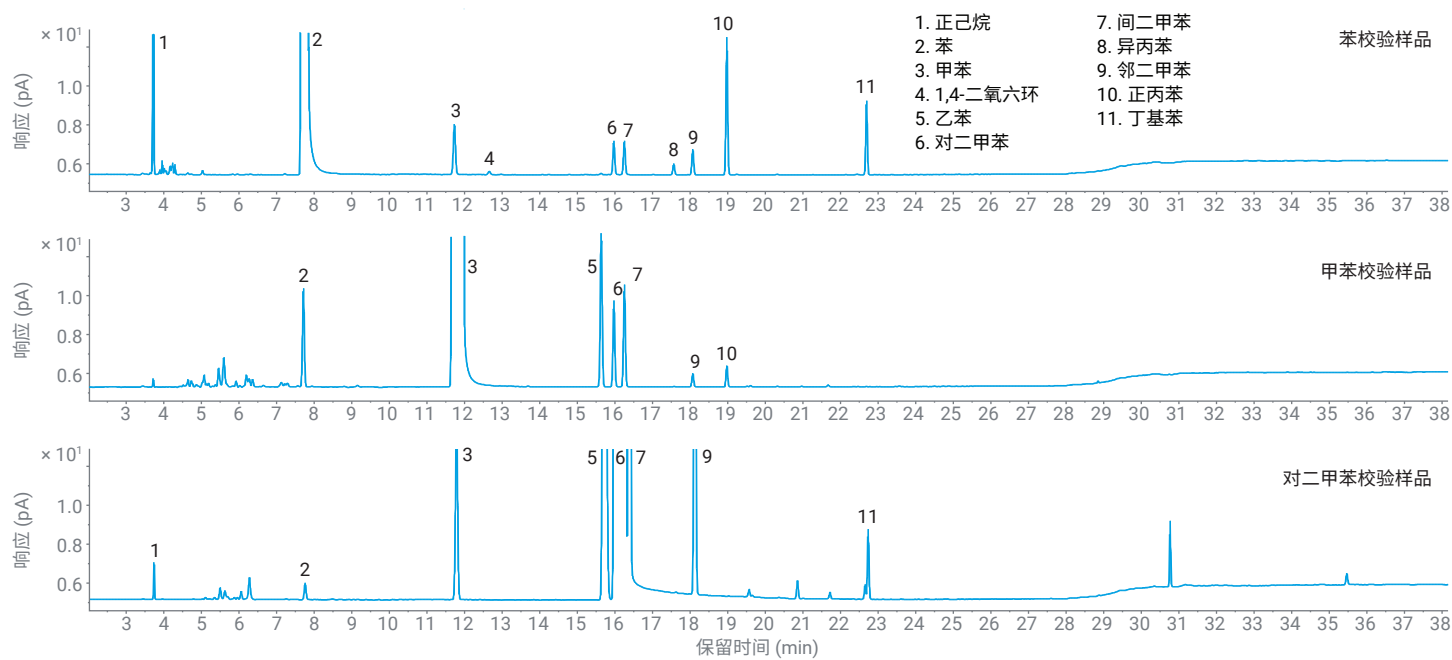


图 A2. 以氢气为载气时，苯、甲苯和对二甲苯校验标准品在前通道上的色谱图

表 A1. 使用氮气载气时，苯、甲苯和对二甲苯校验标准品中杂质的响应精密度

苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值(R)
	质量百分比	质量百分比RSD%	峰面积	峰面积 RSD%	质量百分比	质量百分比RSD%	峰面积	峰面积 RSD%		
n-C ₆	0.030945	0.657	33.124	0.683	0.031025	0.599	32.662	0.684	-8E-05	
苯	99.913267	0	117932.271	0.652	99.913796	0	115654.795	0.699	-0.000529	0.0247
甲苯	0.009157	0.504	10.66	0.89	0.009046	0.414	10.357	0.877	0.000111	0.011
1,4-二氧六环	0.002134	4.828	0.742	5.076	0.002093	3.639	0.716	3.771	4.1E-05	
对二甲苯	0.00518	0.476	5.981	0.95	0.005123	0.741	5.818	1.17	5.7E-05	
间二甲苯	0.005188	0.791	5.991	1.336	0.005129	0.737	5.824	0.858	0.000059	
异丙苯	0.001633	0.844	1.874	1.208	0.001639	1.403	1.85	1.441	-6E-06	
邻二甲苯	0.0038	0.599	4.387	1.028	0.003772	0.759	4.283	1.111	2.8E-05	
正丙苯	0.019166	0.556	21.992	0.95	0.018928	0.48	21.36	0.938	0.000238	
丁基苯	0.009529	0.607	10.879	1.006	0.00945	0.724	10.611	1.092	7.9E-05	
甲苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值(R)
	质量百分比	质量百分比RSD%	峰面积	峰面积 RSD%	质量百分比	质量百分比RSD%	峰面积	峰面积 RSD%		
苯	0.015697	0.2	18.12	0.419	0.015303	0.16	17.36	0.501	3.94E-04	0.0022
甲苯	99.923097	0	114391.735	0.471	99.922945	0	112292.422	0.524	1.52E-04	0.0131
乙苯	0.026886	0.108	30.357	0.532	0.027108	0.151	30.172	0.556	-0.000222	0.0029
对二甲苯	0.013231	0.164	14.94	0.561	0.013321	0.243	14.827	0.504	-9E-05	0.0029
间二甲苯	0.015919	0.215	17.974	0.562	0.016052	0.197	17.866	0.42	-0.000133	0.0037
邻二甲苯	0.002093	1.467	2.364	1.624	0.002121	1.626	2.361	1.884	-2.8E-05	0.002
正丙苯	0.003077	0.58	3.453	0.697	0.00315	0.858	3.485	1.155	-7.3E-05	0.0028
对二甲苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值(R)
	质量百分比	质量百分比RSD%	峰面积	峰面积 RSD%	质量百分比	质量百分比RSD%	峰面积	峰面积 RSD%		
n-C ₆	0.002571	0.879	2.718	0.794	0.002583	0.88	2.856	1.241	-1.20E-05	0.0043
苯	0.002684	0.51	3.121	0.74	0.00269	0.937	3.272	1.493	-6.00E-06	0.0013
甲苯	0.033585	0.218	38.62	0.851	0.033417	0.122	40.195	0.751	0.000168	0.0027
乙苯	0.247285	0.025	282.044	0.774	0.246304	0.031	293.827	0.706	0.000981	0.001
对二甲苯	99.238055	0.002	113187.456	0.791	99.234597	0	118381.161	0.718	0.003458	0.0173
间二甲苯	0.376102	0.543	428.981	1.243	0.377082	0.101	449.835	0.642	-0.00098	0.0165
邻二甲苯	0.088837	0.075	101.324	0.801	0.088327	0.053	105.368	0.682	0.00051	0.0024
正丁基苯	0.00902	0.3	10.173	0.817	0.008986	0.24	10.6	0.913	3.40E-05	0.0017

表 A2. 使用氢气载气时，苯、甲苯和对二甲苯校验标准品中杂质的响应精密度

苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值 (R)
	质量百分比	质量百分比 RSD%	峰面积	峰面积 RSD%	质量百分比	质量百分比 RSD%	峰面积	峰面积 RSD%		
n-C ₆	0.02997	0.621	31.931	1.237	0.029843	0.565	30.028	0.628	0.000127	
苯	99.904905	0.001	117028.727	0.736	99.907062	0	110530	0.359	-0.002157	0.0247
甲苯	0.009356	0.394	10.841	0.639	0.009212	0.395	10.081	0.48	0.000144	0.011
1,4-二氧六环	0.002477	2.937	0.847	2.989	0.002246	3.088	0.734	2.94	0.000231	
对二甲苯	0.005357	0.69	6.156	0.614	0.005266	0.508	5.716	0.653	9.1E-05	
间二甲苯	0.005377	0.617	6.179	0.559	0.005278	0.633	5.728	0.722	9.9E-05	
异丙苯	0.001722	1.144	1.967	1.295	0.001695	0.861	1.828	0.963	2.7E-05	
邻二甲苯	0.003959	0.629	4.55	0.679	0.00388	0.52	4.211	0.627	7.9E-05	
正丙苯	0.019965	0.736	22.799	0.639	0.019564	0.554	21.101	0.668	0.000401	
丁基苯	0.00996	0.946	11.317	0.96	0.009792	0.539	10.508	0.652	0.000168	
甲苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值 (R)
	质量百分比	质量百分比 RSD%	峰面积	峰面积 RSD%	质量百分比	质量百分比 RSD%	峰面积	峰面积 RSD%		
苯	0.015375	0.74	17.831	1.405	0.015102	0.752	16.678	0.823	2.73E-04	0.0022
甲苯	99.922293	0	114619.152	0.99	99.9226	0	109153	0.481	-3.07E-04	0.0131
乙苯	0.027282	0.357	31.038	1	0.027268	0.348	29.542	0.644	1.4E-05	0.0029
对二甲苯	0.01345	0.465	15.302	0.961	0.013394	0.336	14.512	0.582	5.6E-05	0.0029
间二甲苯	0.016169	0.341	18.395	1.026	0.016219	0.546	17.571	0.798	-5E-05	0.0037
邻二甲苯	0.002212	2.805	2.516	3.015	0.002186	2.964	2.368	2.833	0.000026	0.002
正丙苯	0.003219	1.264	3.639	1.115	0.003231	3.479	3.401	1.215	-1.2E-05	0.0028
对二甲苯校验标准品										
杂质	前通道				后通道				两个通道的差异	重现性限值 (R)
	质量百分比	质量百分比 RSD%	峰面积	峰面积 RSD%	质量百分比	质量百分比 RSD%	峰面积	峰面积 RSD%		
n-C ₆	0.002232	1.022	2.459	1.129	0.002407	0.489	2.398	1.076	-1.75E-04	0.0043
苯	0.002439	0.47	2.954	1.033	0.002565	0.538	2.81	1.195	-1.26E-04	0.0013
甲苯	0.032358	0.218	38.763	0.869	0.032849	0.16	35.597	0.972	-0.000491	0.0027
乙苯	0.248691	0.016	295.476	0.928	0.247325	0.071	265.823	1.039	0.001366	0.001
对二甲苯	99.225286	0.001	117891.859	0.933	99.215055	0.006	106636	1.088	0.010231	0.0173
间二甲苯	0.378024	0.197	449.142	1.032	0.390048	1.702	419.274	2.615	-0.012024	0.0165
邻二甲苯	0.090252	0.075	107.23	1.04	0.08917	0.063	95.839	1.04	0.001082	0.0024
正丁基苯	0.009438	0.153	11.087	0.982	0.009155	0.268	9.73	0.915	2.83E-04	0.0017

www.agilent.com

DE-015090

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，2026
2026 年 7 月 3 日，中国出版
5994-9316ZHCN

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

