

# 使用 Agilent 8890/5977 GC/MSD 通过罐采样分析环境空气中的 65 种 挥发性有机化合物

一种支持全扫描和 SIM 模式的方法，完全满足  
HJ 759-2023 标准的要求

## 作者

Youjuan Zhang 和 Yu-tian Xu  
安捷伦科技（上海）有限公司

Jun Lu

Markes International  
中国上海

## 摘要

本应用简报介绍了一种使用罐采样分析气体的方法。通过 Markes Multi-Gas 热脱附仪 (TD) 将样品进样至配备 Agilent 5977 单四极杆质量选择检测器 (MSD) 的 Agilent 8890 气相色谱仪 (GC)，分析大气或半导体洁净室中的挥发性有机化合物 (VOCs)。结果表明，线性、重现性和检出限均完全符合中国方法 HJ759-2023 的要求，该方法是环境实验室和半导体洁净室中广泛使用的参考方法。所有 65 种化合物的线性相关系数均大于 0.991，其中 86% 的化合物线性相关系数大于 0.999。全扫描 (scan) 模式下的重现性结果 (RSD) 在 0.3%–6.8% 之间，而 SIM 模式下的重现性结果 (RSD) 在 1.1%–6.7% 之间。取样体积为 300 mL 时，全扫描模式下的检出限为 0.013–0.113 nmol/mol，SIM 模式下的检出限为 0.002–0.013 nmol/mol。

前言

VOCs 是一类常见的有机污染物，具有较强的刺激性和危害性，对环境的影响较大。大气中的 VOCs 成分复杂，是空气中形成光化学烟雾的重要因素。近年来，VOCs 的研究已成为国内外关注的焦点，许多国家/地区都相继出台了一系列空气质量监测法规。在我国以及欧美等地，环境中 VOCs 的检测不仅是城市、地区或国家环境监测站的重要任务，同时也是一些生产企业的重点监测项目。以晶圆制造企业为例，这类企业对洁净室内 VOCs 的控制要求极为严格。随着半导体技术的飞速发展，芯片生产已迈入纳米级别，对生产环境的要求也随之提高。控制洁净室内的分子级空气污染物已成为当务之急，而 VOCs 正是其中需要重点管控的污染物之一。洁净室内 VOCs 的主要来源包括室内装修材料、设备材料、清洁剂以及室外空气等<sup>[1]</sup>。环境空气中的 VOC 污染物会造成半导体晶圆表面污染、连接线腐蚀等问题，直接影响产品质量。因此，VOC 污染物已成为影响晶圆产业发展及其良率的主要因素。

在环境空气的 VOCs 分析中，热脱附气质联用系统 (TD-GC/MSD) 是环境监测实验室和半导体行业洁净室中常用的检测方法。对于样品采集，一般有以下两种常见方法。第一种是使用吸附管进行样品采集和预富集，然后通过 TD-GC/MSD 系统进行分析。HJ 734-2014<sup>[2]</sup> 方法规定使用吸附管和 TD-GC/MSD 来检测 24 种 VOCs。Markes International 发布了一篇基于 HJ734 方法的应用简报，其中介绍了使用吸附管采样方法所获得的出色的性能结果<sup>[3]</sup>。另一种方法是采用预抽真空的采样罐来采集样品，并利用低温冷凝进行预富集。HJ759-2023<sup>4</sup> 标准详细介绍了采用罐采样测定环境空气中 65 种 VOCs 的方法。

本研究参考 HJ759-2023 方法，通过罐采样对 65 种 VOCs 进行了定性和定量分析，获得的结果具有出色的线性、高精度以及优异的重现性。这充分体现了整个 TD-GC/MSD 系统的全流程惰性、高灵敏度以及耐用性。

实验部分

本研究使用 8890 气相色谱与配备电子电离 (EI) 离子源的 5977 单四极杆 GC/MSD 的联用系统进行分析。采用 Markes Multi-Gas 热脱附进样和预富集系统进行进样和预处理，该系统包括以下三个模块：

- CIA Advantage-xr (CIA)：采样罐自动进样器
- Kori-xr：除水模块
- Unity-xr：热脱附仪

首先，通过 CIA 将三种内标 (ISTDs) 进样至 Unity 冷阱。然后，样品通过 CIA Advantage 的加热传输线进入 Kori 以去除水分。最后，样品流入 Unity 的聚焦冷阱进行预富集。最终，对 Unity 冷阱进行高温脱附，使 65 种 VOCs 和 3 种内标全部进入 GC/MSD 进行分析。图 1 为该组合系统的流路示意图。表 1 和表 2 列出了系统中使用的仪器条件和消耗品。

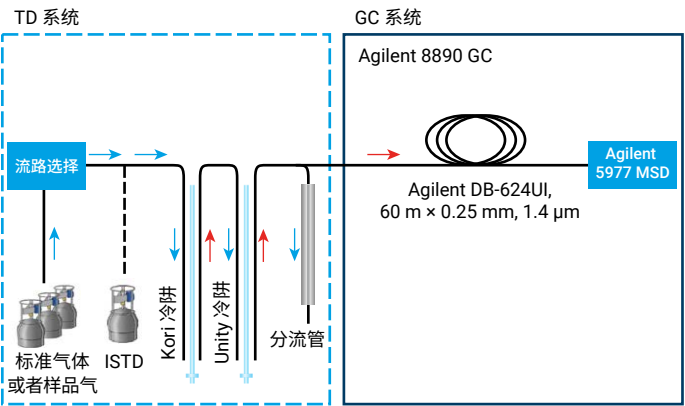


图 1. Markes TD 和 Agilent 8890/5977 GC/MSD 系统的流路示意图

表 1. TD 参数

参数	设定值
仪器	Multi-Gas UNITY-xr、Multi-Gas CIA Advantage xr、Kori-xr
冷阱	Markes HJ 759（部件号 U-HJ759-KXR）
常规参数	
流路温度	120 °C
样品输送线温度	120 °C
进样前	
样品吹扫时间	0.1 min
样品吹扫流量	50 mL/min
内标体积	30 mL
进样	
样品体积	30–300 mL
进样流速	20、50 mL/min
进样后吹扫	
进样后吹扫时间	4 min
进样后吹扫流量	50 mL/min
CIA 进样后吹扫流量	50 mL/min
Kori 设置	
Kori 冷阱低温	-30 °C
Kori 冷阱高温	300 °C
冷阱设置	
冷阱吹扫时间	1 min
冷阱升温吹扫温度	10 °C
冷阱吹扫流量	50 mL/min
冷阱低温	-25 °C
冷阱高温	250 °C
冷阱脱附时间	3 min
脱附分流流速	2 mL/min

表 2. 气相色谱条件

参数	设定值
Agilent 8890 GC	
色谱柱	Agilent DB-624 UI, 60 m × 0.25 mm, 1.4 µm（部件号 122-1364 UI）
载气	氮气，恒流，1 mL/min
柱温箱升温程序	35 °C (5 min)，以 5 °C/min 升至 150 °C (7 min)，以 10 °C/min 升至 200 °C (4 min)
Agilent 5977 MSD	
离子源温度	230 °C
四极杆温度	150 °C
调谐文件	Atune.u
采集类型	全扫描/SIM, <i>m/z</i> 扫描范围 35–500
增益因子	1
提取透镜	6 mm

本研究所用气体标准品均购自中测标准物质科技有限责任公司（中国成都）。其中一个气瓶含 65 种 VOCs 的混标，每种目标物浓度约为 1 µmol/mol。另一个气瓶含有四种化合物，其中三种是内标（溴氯甲烷：ISTD 1；1,4-二氟苯：ISTD 2；氯苯-d<sub>5</sub>：ISTD 3）；第四种化合物是 4-溴氟苯 (BFB)。所有化合物浓度均为 1 µmol/mol 左右。在调谐评估过程中需要进样 BFB，目的是了解整个系统（特别是质谱仪）是否在理想条件下运行。这两个标准气体瓶均采用氮气作为平衡气。

65 种 VOCs 标准气体的配制

在建立校准曲线之前，需要将 1 µmol/mol 标准气体分别稀释至 0.5、5 和 20 nmol/mol，并储存在采样罐中。按照 HJ 759 方法的要求，为了尽可能模拟真实样品，还需要对标准气体进行加湿处理。经最终稀释后，采样罐内标准气体的相对湿度应为 50%。因此，在清洗采样罐后，按照 HJ 759 附录 B 中的加湿方法，向采样罐中加入一定量的去离子水。然后通过静态稀释系统，以高纯氮气（纯度 99.999%）作为稀释气体，将 1 µmol/mol 标准气体稀释至目标浓度水平。如表 3 和表 4 所示，在全扫描模式下，目标浓度分别为 5 nmol/mol 和 20 nmol/mol。在 SIM 模式下，目标浓度分别为 0.5 nmol/mol 和 5 nmol/mol。然后，由 CIA 泵入不同体积的气体，获得不同的校准浓度。

表 3. 配制用于全扫描模式的 65 种 VOCs 校准混标

全扫描	5 nmol/mol			20 nmol/mol		
样品体积 (mL)	30	60	150	60	150	300
校准浓度 (nmol/mol)	0.5	1	2.5	4	10	20

表 4. 配制用于 SIM 模式的 65 种 VOCs 校准混标

SIM	0.5 nmol/mol			5 nmol/mol		
样品体积 (mL)	60	150	300	60	150	300
校准浓度 (nmol/mol)	0.1	0.25	0.5	1	2.5	5

## 内标气体的配制

用高纯氮气将 1  $\mu\text{mol/mol}$  内标直接稀释至 50  $\text{nmol/mol}$ 。根据 HJ 759 方法所述，泵入系统的样品的体积为 300 mL。通过 CIA 向系统中泵入 30 mL 内标气体，因此，300 mL 样品中内标的浓度为 5  $\text{nmol/mol}$ 。

HJ 759 方法要求使用采样罐来采集样品。在 65 种 VOCs 中，某些 VOCs 具有强极性，易被吸附，因此必须对采样罐进行惰性化处理。此外，使用采样罐采样前还必须对其进行严格的清洗，以减少其对极性 or 高沸点化合物的吸附。建议准备一个充满高纯度氮气的采样罐。每批样品分析前，应对采样罐和系统进行空白检验。

### 第 1 步 – 采样

样品通过干燥冷阱，选择性地除去大部分水分，然后分析物在聚焦冷阱上富集。

### 第 2 步 – 冷阱吹扫

聚焦冷阱的程序升温吹扫可以除去残留的水，同时保留所有被捕集的分析物。

### 第 3 步 – 脱附

聚焦冷阱在反向的载气流中快速加热，将分析物进样至气相色谱柱。与此同时，对干燥冷阱进行再生，以处理下一个样品。

## 结果与讨论

### TD 参数优化

为模拟真实样品的湿度，在配制过程中对标准气体同样进行 50% 的加湿处理。UNITY-CIA Advantage-xr Kori-xr 仪器采用 Dry Focus3 来高效控制气相样品的湿度，确保获得可靠结果，同时延长 GC 柱的寿命，降低 MSD 离子源的清洁频率。

Dry Focus3 是一个全自动的三阶段过程，用于对湿样品进行干燥、聚焦和进样，如图 2 所示。第 2 步利用冷阱的程序升温吹扫来去除聚焦冷阱中被强吸附剂吸附的样品中的少量水分。即使残留少量的水也会影响质谱仪的电离效率，尤其对与水共流出的目标化合物会有非常严重的影响。本研究在  $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$  下捕

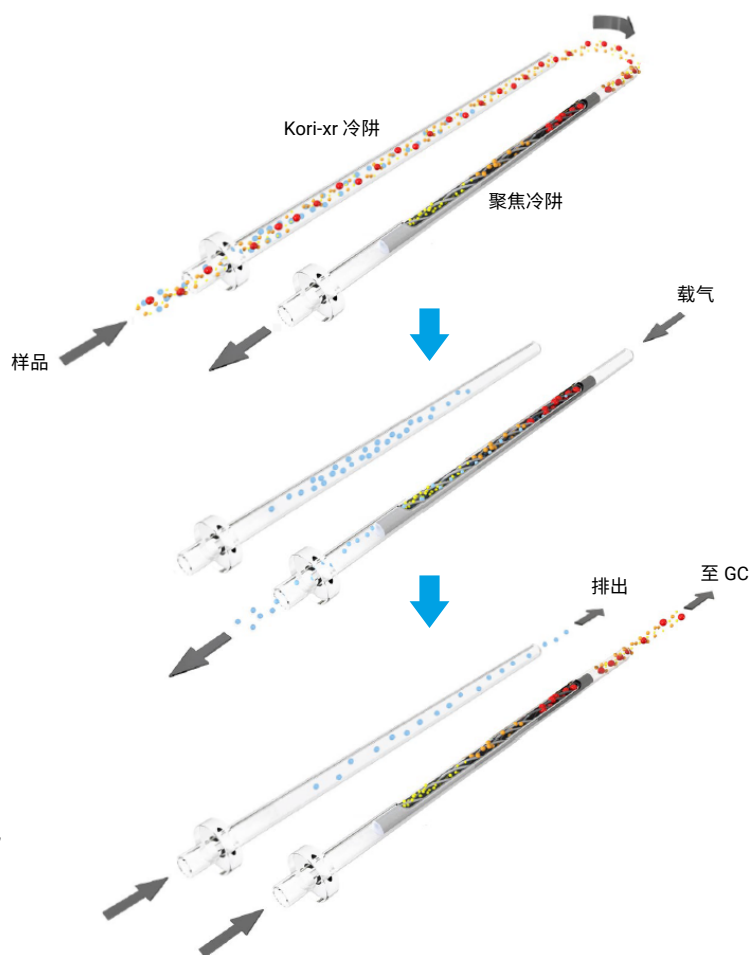


图 2. Dry Focus3 整个流程的示意图

集分析物，确保实现目标化合物的灵敏检测，同时通过优化升温吹扫来充分去除残留水分。如果吹扫温度过高、持续时间过长，则挥发性目标化合物难以在 Unity 冷阱中有效保留，会导致目标化合物损失。而如果吹扫温度太低或时间太短，则无法

有效除水。图 3 和图 4 显示了经优化的升温吹扫条件，即吹扫温度 10 °C、吹扫流量 50 mL/min，持续 1 分钟；在这一条件下，既能有效去除水分，又能避免挥发性目标分析物损失。

— 在 10 °C 冷阱升温吹扫温度下吹扫 1 分钟  
— 不采用冷阱升温吹扫温度

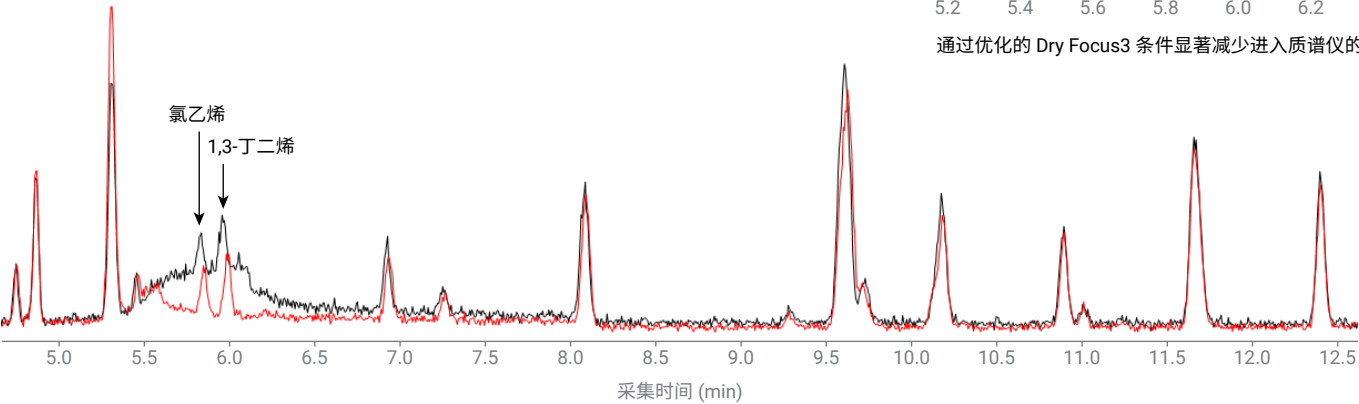


图 3. 全扫描模式（从  $m/z$  35 开始扫描）下，采用和不采用“enable elevated trap purge temperature”（启用冷阱升温吹扫温度）功能时的色谱图比较。对于水分的检测，需从  $m/z$  12 开始扫描

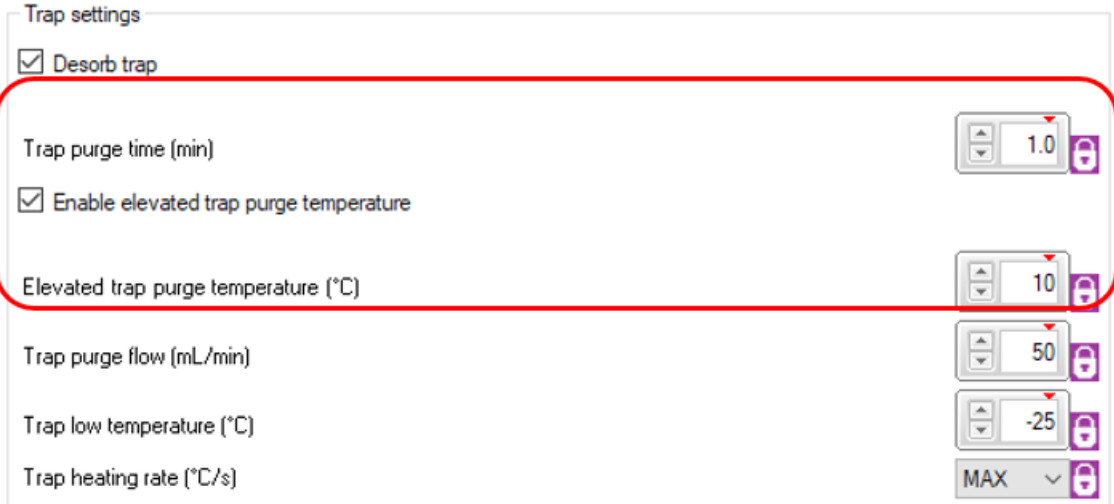


图 4. 在 TD 软件中启用“冷阱升温吹扫温度”功能

全扫描模式分析结果

全扫描模式可用于未知化合物的定性分析以及目标化合物的定量分析。利用谱库搜索功能，可以将未知峰的质谱图与谱库中的标准质谱图进行比对，以获得初步定性结果。图 5 为全扫描模式下，使用 2.5 nmol/mol 标准气体检测 65 种 VOCs 获得的总离子流色谱图 (TIC)。所有化合物的峰均窄而对称。对于 1,4-二氧六环和异丙醇等部分极性化合物，即使标准气体的相对湿度达到 50%，峰形仍然出色。大部分化合物实现了基线分离，少数化合物发生共流出。由于定量分析时可选择不同的定量离子，因此这不会影响定性和定量分析的准确性。在图 5 中，除 65 种 VOCs 和 3 种内标外，还有一个 BFB 峰。这是因为 BFB 与三种内标物同时混合在一个标准气体瓶中，因此在全扫描模式下可以看到 BFB 的峰。而在 SIM 模式下，由于只采集了目标物和内标的离子，因此在 SIM 模式下的 TIC 中找不到 BFB 峰（图 7）。

根据内标法，通过 0.5–20 nmol/mol 范围内的 6 个浓度水平绘制校准曲线。为了确保所有化合物获得理想的线性响应，我们使用了 6 mm 拉出透镜。在使用内标法时，针对每个校准浓度下的各组分，确定了平均相对响应因子 (RRF)。所有分析物 RRF 的相对标准偏差百分比 (%RSD) 均小于 28%。对于线性曲线拟合，每个组分的相关系数 ( $R^2$ ) 至少为 0.994，如表 5 所示。

通过计算 0.5 nmol/mol（低）、2.5 nmol/mol（中）和 10 nmol/mol（高）浓度下 8 次重复分析的峰面积相对标准偏差 (RSD)，评估了重复性（图 6）。表 5 给出了所有目标物的峰面积 %RSD (0.3%–6.8%)。在中高浓度水平下，大多数化合物的峰面积 %RSD 小于 3%。在低浓度下，由于峰面积较小，RSD 会略微增加，多数化合物的 %RSD 在 3%–4% 之间。

本研究使用 0.5 nmol/mol 标准气体进行 8 次重复检测，确定了方法检出限 (MDL)。用线性方程计算每种化合物的浓度，随后计算标准偏差，并乘以 3，确定 MDL。研究表明，65 种 VOCs 的检出限计算值在 0.013–0.113 nmol/mol 范围内，如表 5 所示。

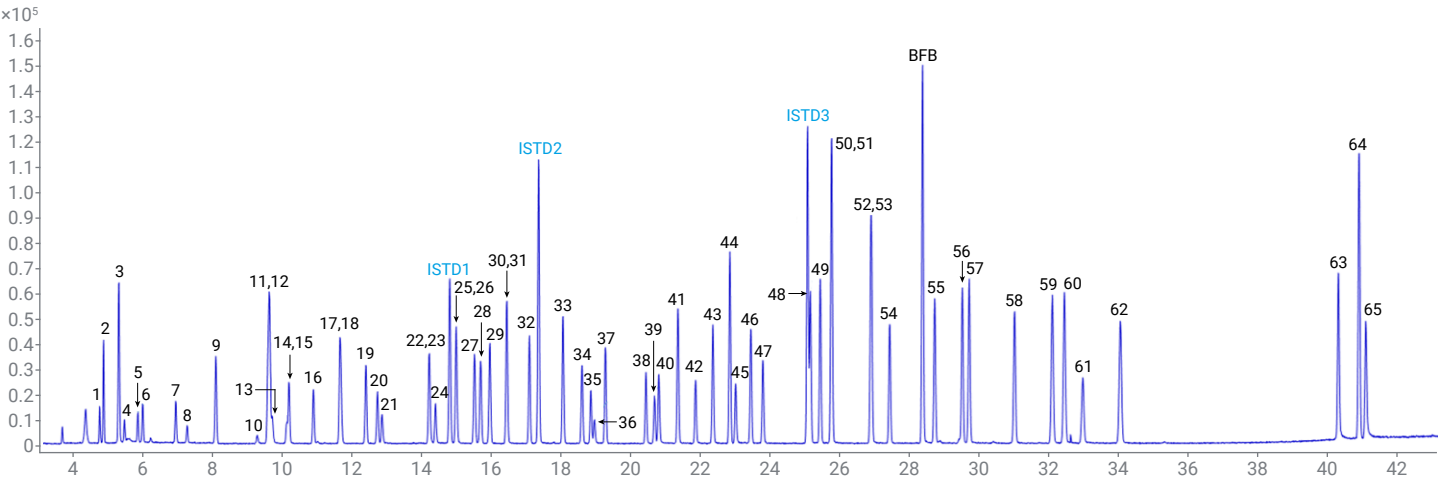


图 5. 全扫描模式下浓度为 2.5 nmol/mol 的 65 种 VOCs 的总离子流色谱图

表 5. 全扫描模式下 65 种 VOCs 的线性、重复性和 MDL 结果（下页续）

编号	名称	RT	m/z	RRF %RSD	CF R2	峰面积 %RSD			MDL (nmol/mol)	ISTD
						低	中	高		
1	丙烯	4.813	41	5.7	0.9984	1.9	1.5	1.5	0.039	1
2	二氯二氟甲烷	4.929	85	3.1	0.9996	2.9	0.9	0.6	0.032	1
3	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	5.36	134.9	3.3	0.9993	2.7	1.2	0.7	0.041	1
4	氯甲烷	5.515	50	8.1	0.9956	6.3	2.5	2.8	0.113	1
5	氯乙烯	5.921	62	3.4	0.9996	2.7	0.8	0.9	0.040	1
6	1,3-丁二烯	6.045	54	4.3	0.9997	5.1	1.9	1.7	0.072	1
7	溴甲烷	7.00	94	7.2	0.9941	5.1	0.8	1.1	0.069	1
8	氯乙烷	7.331	64	3.6	0.9997	4.4	1.7	0.5	0.056	1
9	三氯氟甲烷	8.134	101	3.6	0.9995	2.3	0.3	0.6	0.039	1
10	丙烯醛	9.325	56.1	8.6	0.9997	6.6	2	2.2	0.067	1
11	1,1-二氯乙烯	9.63	96	5.0	0.9997	3.6	1.4	1.4	0.050	1
12	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	9.671	150.9	2.8	0.9995	2.9	1.3	1.3	0.047	1
13	丙酮	9.762	58	2.2	0.9999	4.1	1.5	2	0.064	1
14	异丙醇	10.187	45	7.5	0.9988	4.6	1.3	1.9	0.056	1
15	二硫化碳	10.236	76	3.1	0.9997	2	0.8	0.6	0.023	1
16	二氯甲烷	10.937	84	3.8	0.9996	3.4	1.6	1	0.041	1
17	反式-1,2-二氯乙烯	11.693	96	4.3	0.9996	5.1	1.6	1.3	0.072	1
18	甲基叔丁基醚	11.73	73	9.0	0.9997	3.1	1.6	2.2	0.033	1
19	正己烷	12.435	57	6.1	0.9997	2.8	1.4	1.6	0.033	1
20	1,1-二氯乙烷	12.766	63	3.9	0.9995	2	1.4	1	0.039	1
21	乙酸乙烯酯	12.9	43	13.2	0.9996	4.3	1.3	2.2	0.044	1
22	顺式-1,2-二氯乙烯	14.246	96	4.1	0.9997	2	1.3	1.7	0.027	1
23	2-丁酮	14.272	72	8.6	0.9997	6.8	1.3	2.3	0.068	1
24	乙酸乙酯	14.433	43	10.1	0.9998	5.3	2	1.4	0.059	1
25	三氯甲烷	15.02	83	4.5	0.9998	1.7	0.7	0.8	0.041	2
26	四氢呋喃	15.038	72	12.3	0.9997	5.8	1.3	1.7	0.058	1
27	1,1,1-三氯乙烷	15.548	97	3.1	0.9998	3.3	0.7	2.4	0.048	2
28	环己烷	15.721	84	5.9	0.9997	2.8	1.9	3.3	0.027	2
29	四氯化碳	15.983	116.9	3.3	0.9997	3	1.1	3.2	0.031	2
30	1,2-二氯乙烷	16.471	62	4.4	0.9999	3.1	1.2	1	0.048	2
31	苯	16.471	78	5.3	0.9998	1.2	0.5	1.6	0.031	2
32	庚烷	17.117	43	6.8	0.9998	4.1	1.4	2.1	0.046	2
33	三氯乙烯	18.081	130	5.9	0.9999	2.9	1.1	1.6	0.042	2
34	1,2-二氯丙烷	18.627	63	2.7	0.9999	3.3	1.7	1.7	0.039	2
35	甲基丙烯酸甲酯	18.888	100.1	17.4	0.9991	4.8	1.7	2.8	0.058	2
36	1,4-二氧六环	18.995	88	11.3	0.9951	3.5	2.3	2	0.058	2
37	溴二氯甲烷	19.296	83	4.0	0.9999	3.1	1.1	1	0.041	2
38	顺式-1,3-二氯丙烯	20.459	75	6.7	0.9996	3	0.7	2	0.045	2
39	二甲基二硫醚	20.709	94	17.2	0.9978	3.8	2.1	3.1	0.027	2
40	甲基异丁基甲酮	20.839	43	8.6	0.9991	3.2	1.7	2.1	0.040	2
41	甲苯	21.376	91	4.4	0.9999	1.4	1.1	1.7	0.027	2
42	反式-1,3-二氯丙烯	21.882	75	8.5	0.9997	2.9	1.2	2.2	0.036	2
43	1,1,2-三氯乙烷	22.38	96.9	3.2	0.9997	1.7	1.1	1.4	0.032	2
44	四氯乙烯	22.863	165.8	5.6	0.9997	1.6	0.8	1.7	0.046	2
45	2-己酮	23.042	43	12.4	0.9989	3.7	1.2	1.9	0.047	2

编号	名称	RT	m/z	RRF %RSD	CF R2	峰面积 %RSD			MDL (nmol/mol)	ISTD
						低	中	高		
46	二溴氯甲烷	23.467	128.8	4.5	0.9998	1.7	1	1.6	0.029	2
47	1,2-二溴乙烷	23.815	106.9	3.9	0.9999	2.6	1.8	1.6	0.041	2
48	氯苯	25.169	112	3.2	0.9999	1.4	1.2	1.6	0.019	3
49	乙苯	25.455	91	6.9	0.9998	2.5	0.8	1.7	0.020	3
50、51	间二甲苯、对二甲苯	25.778	91	8.9	0.9998	2.4	0.8	1.4	0.013	3
52	邻二甲苯	26.898	91.1	9.3	0.9998	3.1	0.8	2.1	0.027	3
53	苯乙烯	26.924	104	15.3	0.9997	3.4	0.4	1.4	0.027	3
54	三溴甲烷	27.449	173	6.2	0.9997	3.2	1.3	2.1	0.036	3
55	1,1,2,2-四氯乙烷	28.735	83	6.4	0.9997	3.3	1.1	2.4	0.034	3
56	对乙基甲苯	29.528	105.1	17.6	0.9996	1.8	1.7	2.2	0.016	3
57	1,3,5-三甲苯	29.729	105.1	19.6	0.9997	3.1	1.7	1.9	0.024	3
58	1,2,4-三甲苯	31.029	105	22.3	0.9996	4.7	1.3	2.3	0.029	3
59	1,3-二氯苯	32.115	146	8.4	0.9998	3.4	1	1.8	0.032	3
60	1,4-二氯苯	32.46	146	9.3	0.9998	3.8	0.9	2.2	0.032	3
61	氯化苄	32.984	91	27.8	0.9988	3.2	1.4	2.6	0.024	3
62	1,2-二氯苯	34.065	145.9	10.3	0.9997	3.6	0.6	2.4	0.036	3
63	1,2,4-三氯苯	40.312	179.9	11.4	0.9992	4.7	2.6	2.3	0.054	3
64	六氯丁二烯	40.908	224.8	11.3	0.9996	4.6	1.4	1.6	0.046	3
65	萘	41.101	128	22.4	0.9986	4.9	2.4	2	0.042	3

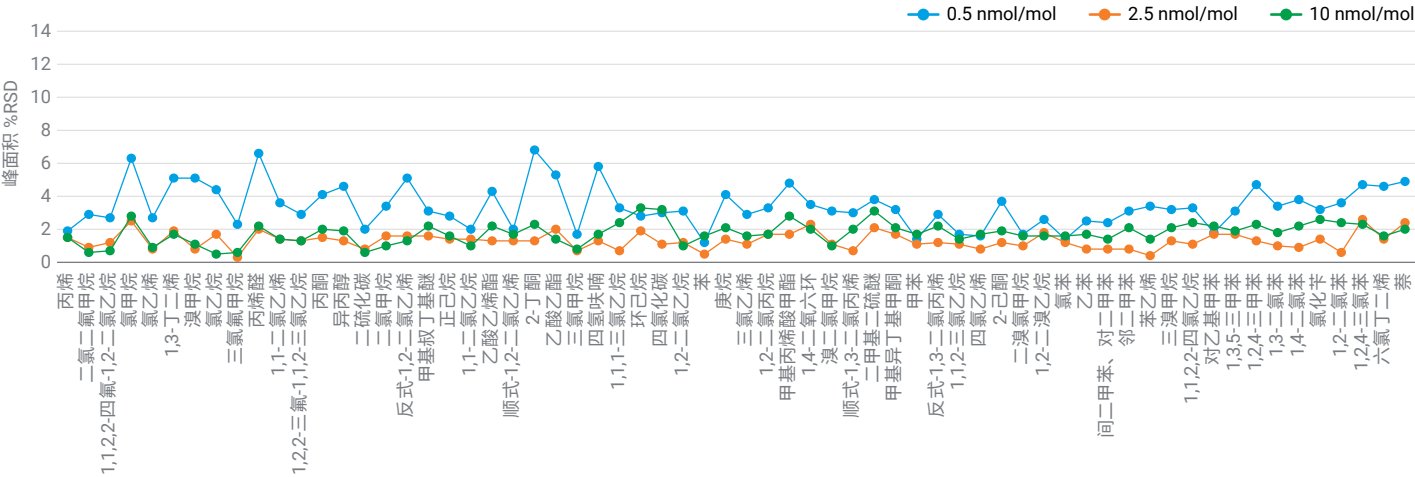


图 6. 全扫描模式下 65 种 VOCs 在低、中、高校准浓度下的重复性结果

SIM 模式分析结果

SIM 模式使用已确定的化合物列表进行灵敏的靶向分析。在 SIM 模式下，需要预先对目标物进行分组，并输入每个目标物的特征离子，以建立采集方法。图 7 为 SIM 模式下采集的 1 nmol/mol 标准气体的 TIC。由于只采集了目标离子，故而色谱图上只出现目标物的色谱峰。因此，与全扫描模式相比，SIM 模式下采集的数据干扰峰较少，而且看不到 BFB 峰。与全扫描模式数据类似，在 SIM 模式下，所有化合物峰均窄而对称，表明整个 TD/GC/MSD 系统具有出色的惰性，并且从 TD 到 GC 实现了快速进样。

本研究还在 SIM 模式下进行了全面的方法评估。SIM 模式下的浓度线性范围为 0.1–5 nmol/mol，约为全扫描模式下的 1/5。在此线性范围内，所有分析物的 RRF %RSD 均小于 22%。84% 的化合物相关系数大于 0.999，其余 16% 的化合物相关系数均大于 0.99，完全满足 HJ759-2023 方法的要求。为验证方法精度和仪器稳定性，对 0.1 nmol/mol（低）、0.5 nmol/mol（中）、2.5 nmol/mol（高）浓度的标准气体进行了 8 次测定。所有化合物的峰面积 %RSD 均小于 7%，平均 %RSD 为 2.3%，如图 8 所示。通过 0.1 nmol/mol 标准气体的 8 次重复分析结果确定了 MDL。在 SIM 模式下，所有化合物的 MDL 均在 0.002–0.013 nmol/mol 之间，表明系统具有超高灵敏度。所有性能结果如表 6 所示。

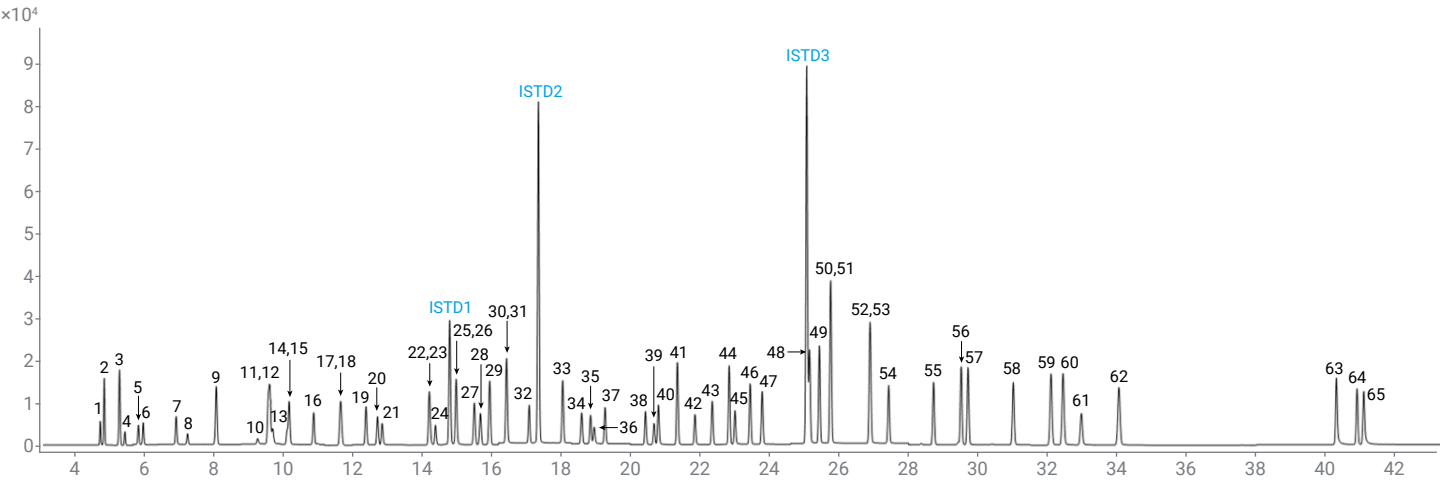


图 7. SIM 模式下浓度为 1 nmol/mol 的 65 种 VOCs 的总离子流色谱图

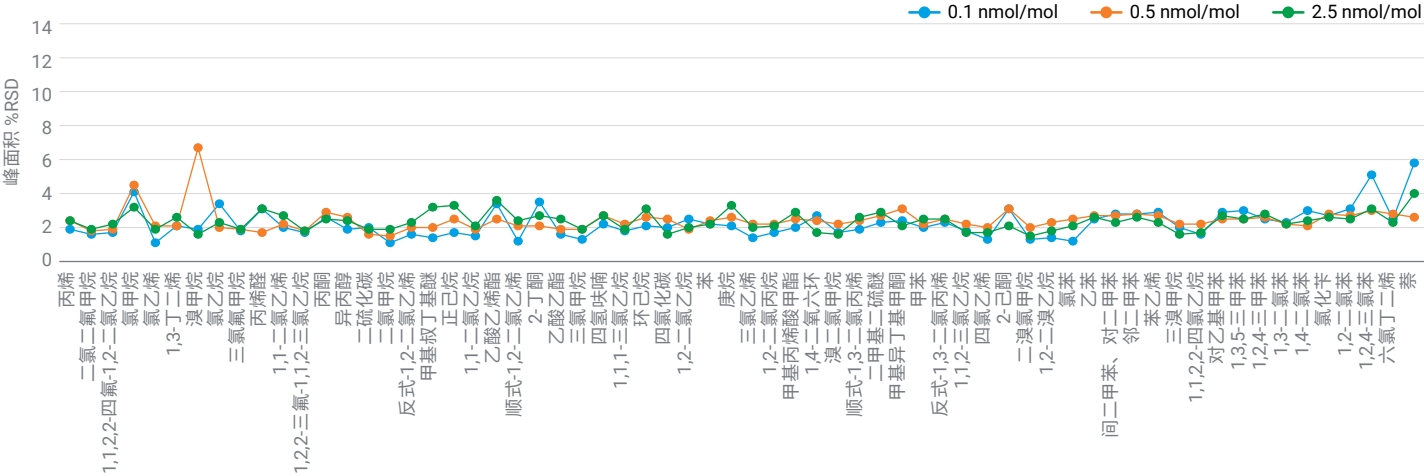


图 8. SIM 模式下 65 种 VOCs 在低、中、高校准浓度下的重复性结果

表 6. SIM 模式下 65 种 VOCs 的线性、重复性和 MDL 结果（下页续）

编号	名称	RT	RRF %RSD	CF2	峰面积 %RSD			MDL (nmol/mol)	ISTD
					低	中	高		
1	丙烯	4.618	5.0	0.9999	1.9	2.4	2.4	0.004	1
2	二氯二氟甲烷	4.729	3.1	0.9999	1.6	1.8	1.9	0.002	1
3	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	5.171	2.5	0.9999	1.7	1.9	2.2	0.002	1
4	氯甲烷	5.46	16.0	0.9989	4.1	4.5	3.2	0.013	1
5	氯乙烯	5.725	2.8	0.9999	1.1	2.1	1.9	0.003	1
6	1,3-丁二烯	5.865	2.9	0.9998	2.1	2.1	2.6	0.004	1
7	溴甲烷	6.824	7.0	0.9998	1.9	6.7	1.6	0.004	1
8	氯乙烷	7.149	3.0	0.9998	3.4	2	2.3	0.007	1
9	三氯氟甲烷	7.947	3.0	0.9998	1.8	1.9	1.9	0.003	1
10	丙烯醛	9.202	10.1	0.9998	3.1	1.7	3.1	0.012	1
11	1,1-二氯乙烯	9.5	3.4	0.9999	2	2.2	2.7	0.003	1
12	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	9.532	2.9	0.9997	1.7	1.8	1.8	0.004	1
13	丙酮	9.654	21.6	0.9999	2.6	2.9	2.5	0.009	1
14	异丙醇	10.081	9.3	0.9981	1.9	2.6	2.4	0.006	1
15	二硫化碳	10.105	5.8	0.9999	2	1.6	1.9	0.006	1
16	二氯甲烷	10.824	7.6	0.9998	1.1	1.5	1.9	0.004	1
17	反式-1,2-二氯乙烯	11.597	3.5	0.9999	1.6	2	2.3	0.003	1
18	甲基叔丁基醚	11.648	5.5	0.9996	1.4	2	3.2	0.003	1
19	正己烷	12.35	18.5	0.9999	1.7	2.5	3.3	0.007	1
20	1,1-二氯乙烷	12.689	4.0	0.9996	1.5	1.9	2.1	0.002	1
21	乙酸乙烯酯	12.827	7.9	0.9996	3.4	2.5	3.6	0.008	1
22	顺式-1,2-二氯乙烯	14.177	4.0	0.9998	1.2	2.1	2.4	0.003	1
23	2-丁酮	14.221	5.1	0.9996	3.5	2.1	2.7	0.011	1
24	乙酸乙酯	14.384	5.7	0.9997	1.6	1.9	2.5	0.005	1
25	三氯甲烷	14.966	3.4	0.9997	1.3	1.9	1.9	0.003	2

编号	名称	RT	RRF %RSD	CF2	峰面积 %RSD			MDL (nmol/mol)	ISTD
					低	中	高		
26	四氢呋喃	15.005	5.7	0.9996	2.2	2.7	2.7	0.007	1
27	1,1,1-三氯乙烷	15.495	2.5	0.9999	1.8	2.2	1.9	0.005	2
28	环己烷	15.665	3.5	0.9999	2.1	2.6	3.1	0.004	2
29	四氯化碳	15.932	2.7	0.9998	2	2.5	1.6	0.005	2
30	1,2-二氯乙烷	16.428	8.1	0.9998	2.5	1.9	2	0.007	2
31	苯	16.428	6.0	0.9996	2.2	2.4	2.2	0.005	2
32	庚烷	17.079	3.0	0.9997	2.1	2.6	3.3	0.003	2
33	三氯乙烯	18.041	3.4	0.9998	1.4	2.2	2	0.003	2
34	1,2-二氯丙烷	18.594	3.9	0.9998	1.7	2.2	2.1	0.004	2
35	甲基丙烯酸甲酯	18.867	6.7	0.9986	2	2.5	2.9	0.003	2
36	1,4-二氧六环	18.981	15.3	0.9913	2.7	2.4	1.7	0.008	2
37	溴二氯甲烷	19.265	3.4	0.9999	1.7	2.2	1.6	0.004	2
38	顺式-1,3-二氯丙烯	20.437	4.8	0.9998	1.9	2.4	2.6	0.002	2
39	二甲基二硫醚	20.684	10.0	0.9980	2.3	2.7	2.9	0.003	2
40	甲基异丁基甲酮	20.83	9.1	0.9992	2.4	3.1	2.1	0.004	2
41	甲苯	21.36	5.5	0.9999	2	2.2	2.5	0.004	2
42	反式-1,3-二氯丙烯	21.87	6.2	0.9998	2.3	2.5	2.5	0.005	2
43	1,1,2-三氯乙烷	22.362	4.5	0.9997	1.8	2.2	1.7	0.005	2
44	四氯乙烯	22.851	4.6	0.9997	1.3	2	1.7	0.003	2
45	2-己酮	23.04	9.7	0.9993	3.1	3.1	2.1	0.007	2
46	二溴氯甲烷	23.45	4.1	0.9999	1.3	2	1.5	0.003	2
47	1,2-二溴乙烷	23.801	4.1	0.9999	1.4	2.3	1.8	0.003	2
48	氯苯	25.161	4.4	0.9998	1.2	2.5	2.1	0.003	3
49	乙苯	25.447	5.4	0.9998	2.5	2.7	2.6	0.005	3
50、51	间二甲苯、对二甲苯	25.767	9.2	0.9997	2.8	2.7	2.3	0.004	3
52	邻二甲苯	26.897	8.9	0.9996	2.8	2.8	2.6	0.005	3
53	苯乙烯	26.921	13.1	0.9992	2.9	2.7	2.3	0.004	3
54	三溴甲烷	27.445	5.2	0.9999	2	2.2	1.6	0.004	3
55	1,1,2,2-四氯乙烷	28.731	3.3	0.9999	1.6	2.2	1.7	0.003	3
56	对乙基甲苯	29.528	11.7	0.9987	2.9	2.5	2.7	0.004	3
57	1,3,5-三甲苯	29.73	14.4	0.9988	3	2.5	2.5	0.005	3
58	1,2,4-三甲苯	31.03	13.4	0.9978	2.5	2.6	2.8	0.004	3
59	1,3-二氯苯	32.113	6.6	0.9999	2.3	2.2	2.2	0.003	3
60	1,4-二氯苯	32.459	7.6	0.9999	3	2.1	2.4	0.005	3
61	氯化苄	32.993	13.4	0.9978	2.7	2.8	2.6	0.004	3
62	1,2-二氯苯	34.07	5.9	0.9999	3.1	2.7	2.5	0.006	3
63	1,2,4-三氯苯	40.318	12.0	0.9992	5.1	3	3.1	0.013	3
64	六氯丁二烯	40.912	7.4	0.9997	2.5	2.8	2.3	0.006	3
65	萘	41.107	16.5	0.9978	5.8	2.6	4	0.012	3

图 9 给出了全扫描和 SIM 模式下计算出的 MDL 结果。SIM 模式下的灵敏度约为全扫描模式下的 10 倍，与预期一致。因此，如果需要对已知的痕量组分进行定量分析，则 SIM 是提高灵敏度的不错选择。

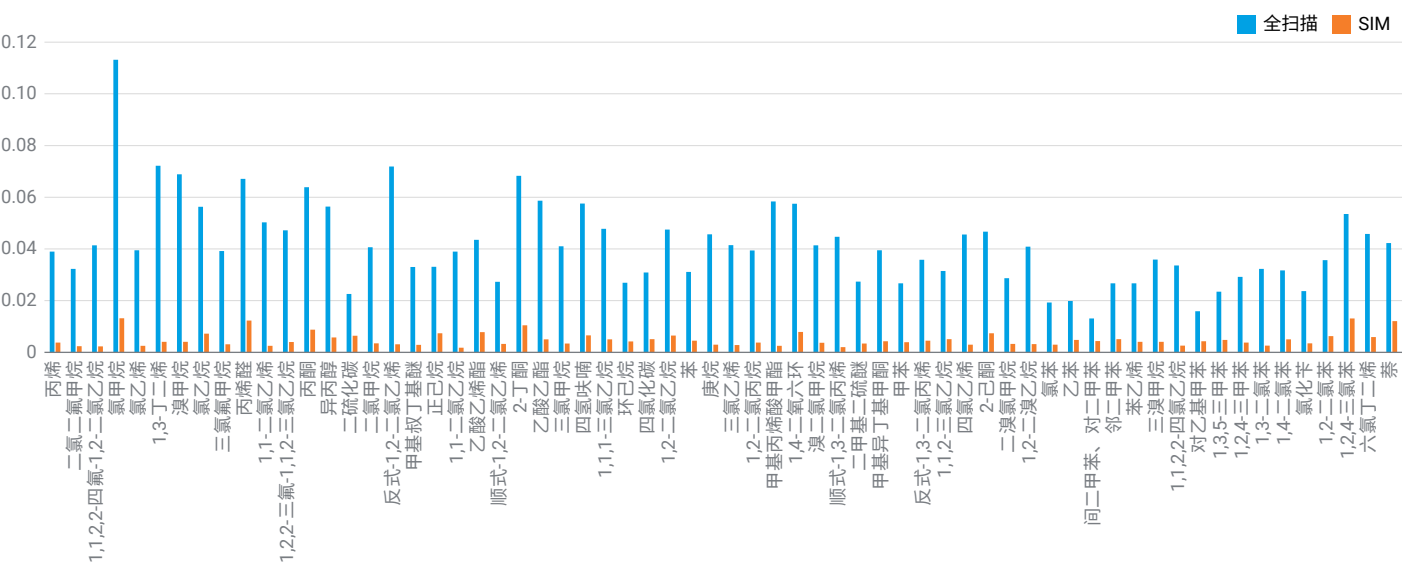


图 9. 全扫描模式和 SIM 模式下 65 种 VOCs 的 MDL 结果

## 结论

配备 Multi-Gas CIA Advantage-xr TD 的 Agilent 8890/5977 GC/MSD 系统为分析环境空气中的 65 种 VOCs 提供了一种可靠的分析方法。该系统为大气质量监测实验室和半导体洁净室同时分析多种 VOCs 提供了一种高效、高灵敏度的解决方案。用户可以根据不同的应用需求，选择使用全扫描模式或 SIM 模式采集数据，体现了安捷伦仪器的灵活性。该系统在全扫描模式和 SIM 模式下均获得了出色的分析性能，完全满足 HJ 759-2023 方法的各项要求。

## 参考文献

1. GB/T25915.8-2021 洁净室及相关受控环境 第 8 部分：按化学物浓度划分空气洁净度 (ACC) 等级
2. HJ 734-2014 固定污染源废气 挥发性有机物的测定 固相吸附-热脱附/气相色谱-质谱法
3. The Monitoring of Organic Waste Gas VOCs Emitted by Fixed Pollution Sources is Sampled With Adsorption Tubes and Analyzed by Thermal Desorption/Gas Chromatography-Mass Spectrometry Method, Which Complies with the Chinese Environmental Protection Standard HJ 734-2014 (监测固定污染源排放的有机废气 VOCs 时，采用吸附管采样并通过热脱附/气相色谱-质谱法进行分析，符合中国环境保护标准 HJ 734-2014)
4. HJ 759-2023 环境空气 65 种挥发性有机物的测定 罐采样/气相色谱-质谱法

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)

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

DE-000635

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, 2024, 2025  
2025 年 2 月 11 日, 中国出版  
5994-7723ZHCN