应用简报

环境

Agilent

Trusted Answers

利用 8890 GC 与 5977 系列 MSD 联用系统的脉冲分流进样和保留时间锁定实施 EPA 8270E 方法

作者

Rachael Ciotti
安捷伦科技有限公司

摘要

美国国家环境保护局 (US EPA) 方法 8270 提供了使用气相色谱/质谱 (GC/MS) 分析 200 多种半挥发性有机化合物 (SVOCs) 的条件。本应用简报展示了在 Agilent 8890 气相色谱与 Agilent 5977 系列单四极杆质谱联用系统上实施最新修订的 EPA 8270E 方法的系统优化和校准过程以及方法性能。该系统使用脉冲分流进样和 9 mm 提取透镜来实现快速样品传输和宽动态范围。安捷伦独特的保留时间锁定 (RTL) 功能可在维护后轻松进行鉴定。此外，还介绍了根据 EPA 方法 8270E 中的最新调谐标准进行的 DFTPP 调谐评估。

前言

由于目标分析物种类繁多（包括碱性、中性和酸性物质），分子量和沸点范围较宽，因此使用 GC/MS 分析 SVOCs 面临着较大的挑战。EPA 方法 8270 提供了分析和质量控制检查指南，以促进成功的 SVOCs 分析[1]。系统清洁度和正确的色谱柱安装对于避免峰形不规则，以及确保难分析化合物（例如具有酚和硝基官能团的化合物）具有足够的响应至关重要。必须优化检测器条件以解决高分子量多环芳烃 (PAHs) 和邻苯二甲酸酯的饱和问题。理想的系统配置通过引入足够量的样品即可使所有分析物满足方法检测限，从而实现较宽的线性动态范围，同时无需大量维护。在较宽的动态范围内校准还能提高实验室分析效率，减少重复分析次数。

传统上，为了达到 EPA 8270E 方法中较低的检测限，需要使用不分流进样[2]。然而现代质谱仪具有更高的灵敏度，在不断减少进样量的情况下仍能达到低检测限，从而能够使用分流进样。分流进样可加快样品传输速度，缩短敏感化合物和热不稳定化合物在 GC 进样口或其他潜在活性位点相互作用的时间。此外还能减少非挥发性基质材料在分析柱柱头的沉积。压力脉冲可在进样前和进样过程中增加 GC 进样口的压力，压缩样品蒸气体积，减少样品在进样口的停留时间，从而进一步降低分析物分解的可能性。在指定的脉冲时间结束后，进样口压力会返回到维持所选流速程序所需的设定值。8890 气相色谱系统配备高度精确的气路模块，能够实现可重现的脉冲分流进样和 RTL，无需在色谱柱维护后调整保留时间。

本应用简报使用分流进样在之前的 SVOC 工作基础上开展了进一步研究[3]，详细考察了 8890 系列气相色谱系统的系统适用性、方法优化和性能，并根据最新修订的 EPA 方法 8270E 中指定的质量控制参数进行了评估。此外，还讨论了确保宽动态范围和出色重现性（即使色谱柱维护后）的策略。

实验部分

试剂与标准品

使用二氯甲烷将半挥发性化合物 GC/MS 调谐标样稀释至 25 ng/µL，该调谐标样含有十氟三苯基膦 (DFTPP)、联苯胺、五氯苯酚和 4,4'-二氯二苯基三氯乙烷 (4,4'-DDT)（安捷伦部件号 GCM-150），其标称浓度均为 1000 µg/mL。

包含 76 种常见 SVOCs 的 1000 µg/mL 标准储备溶液（溶剂为二氯甲烷）购自 Restek (Bellefonte, PA)，然后用二氯甲烷配制为 10 µg/mL 的工作标样。含有 6 种氘代分析物的 2000 µg/mL 半挥发性化合物内标储备液（溶剂为二氯甲烷）同样购自 Restek。使用二氯甲烷稀释储备液和工作标样，配制含有 4 µg/mL 半挥发性化合物内标的初始校准曲线标样。配制以下 13 个浓度的校准标样：0.2、0.4、0.5、0.8、1、2、4、10、25、50、75、100、160 µg/mL。表 1 按保留时间顺序列出了目标分析物，表最后列出了内标。无法分离 3-甲基苯酚和 4-甲基苯酚异构体进行定量，因此报告的结果为二者总和。

仪器

表 2 和表 3 汇总了系统配置和方法条件。Agilent 8890 气相色谱系统配置了膜厚度为 0.25 µm 的 30 × 0.25 m DB-UI 8270 色谱柱，以缩短运行时间。该色谱柱连接至配备有 Extractor EI 离子源（包含 9 mm 孔提取透镜）的 5977 单四极杆质谱仪。分析运行时间为 21.6 分钟。采用 Agilent MassHunter 工作站软件进行采集和数据分析。

表 1. 目标分析物和内标

编号	化合物
1	N-亚甲基二硝胺
2	吡啶
3	苯酚
4	苯胺
5	双(2-氯乙基)醚
6	2-氯苯酚
7	1,3-二氯苯
8	1,4-二氯苯
9	苯甲醇
10	1,2-二氯苯
11	2-甲基苯酚
12	2,2'-氧代双(1-氯丙烷)
13	N-亚硝基二正丙胺
14	3/4-甲基苯酚
15	六氯乙烷
16	硝基苯
17	异佛尔酮
18	2-硝基苯酚
19	2,4-二甲基苯酚
20	双(2-氯乙氧基)甲烷
21	2,4-二氯苯酚

编号	化合物
22	1,2,4-三氯苯
23	萘
24	4-氯苯胺
25	六氯丁二烯
26	4-氯-3-甲基苯酚
27	2-甲基萘
28	1-甲基萘
29	六氯环戊二烯
30	2,4,6-三氯苯酚
31	2,4,5-三氯苯酚
32	2-氯萘
33	2-硝基苯胺
34	1,4-二硝基苯
35	邻苯二甲酸二甲酯
36	1,3-二硝基苯
37	2,6-二硝基甲苯
38	1,2-二硝基苯
39	苊烯
40	3-硝基苯胺
41	苊
42	2,4-二硝基苯酚

编号	化合物
43	4-硝基苯酚
44	2.4-二硝基甲苯
45	二苯并呋喃
46	2,3,5,6-四氯苯酚
47	2,3,4,6-四氯苯酚
48	邻苯二甲酸二乙酯
49	芴
50	4-氯二苯醚
51	4-硝基苯胺
52	4,6-二硝基-2-甲基苯酚
53	二苯胺
54	偶氮苯
55	4-溴联苯醚
56	六氯苯
57	五氯苯酚
58	菲
59	蒽
60	咔唑
61	邻苯二甲酸二正丁酯
62	荧蒽
63	芘

编号	化合物
64	邻苯二甲酸丁苄酯
65	双(2-乙基己基)己二酸
66	苯并[a]蒽
67	䓛
68	双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯
69	邻苯二甲酸二正辛酯
70	苯并[b]荧蒽
71	苯并[k]荧蒽
72	苯并[a]芘
73	茚并[1,2,3-cd]芘
74	二苯并[a,h]蒽
75	苯并[ghi]苝
76	1,4-二氯苯-d_4 (IS)
77	萘-d_8 (IS)
78	苊-d_{10} (IS)
79	菲-d_{10} (IS)
80	䓛-d_{12} (IS)
81	苝-d_{12} (IS)

表 2. 系统配置和消耗品

参数	值
自动进样器	
	Agilent 7693 自动液体进样器，配备样品盘
进样针	安捷伦蓝色系列，10 µL，PTFE 头推杆锥形进样针（部件号 G4513-80203）
样品瓶	Agilent A-Line 样品瓶，经认证，2 mL，棕色螺口（部件号 5182-0716）
样品瓶内插管	安捷伦样品瓶内插管，250 µL，去活玻璃，带聚合物支脚（部件号 5181-8872）
样品瓶螺口盖	安捷伦螺口盖，蓝色，经认证，PTFE/硅橡胶/PTFE 隔垫（部件号 5182-0723）
气相色谱	
	Agilent 8890A GC，配备分流/不分流进样口
色谱柱	Agilent DB-UI 8270D, 30 m × 0.25 mm, 0.25 µm（部件号 122-9732）
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）
隔垫	安捷伦高级绿色隔垫，不粘连，11 mm（部件号 5183-4759）
质谱仪	
	配备 Extractor 离子源的 Agilent 5977A MSD
提取透镜	9 mm（部件号 G3870-20449）

结果与讨论

调谐和系统性能验证

在进样系统性能验证样品前，使用自动调谐 (Atune) 算法和全氟三丁胺 (PFTBA) 校准液对 5977 MS 进行调谐。调谐算法完成后，使用之前所述的方法参数进样 1 µL 半挥发性化合物调谐溶液，该溶液含有 DFTPP、五氯苯酚、联苯胺和 4,4'-DDT，浓度均为 25 ng/µL。图 1 显示了总离子流色谱图 (TIC)，并标注了系统适用性结果。

根据 EPA 方法 8270E，必须对质谱仪进行调谐，使 DFTPP 离子丰度标准符合表 4 所示的标准。除了更新离子丰度标准以符合 EPA 方法 525.3 中规定的标准外，EPA 方法 8270E 最近还将初始校准之前的 DFTPP 调谐校验频率降低了一倍。

表 3. 仪器条件

Agilent 8890 气相色谱参数	
进样量	1 µL
进样口	280 °C，脉冲分流模式，4:1 0.6 min 之前进样脉冲压力为 30 psi
载气	氦气，恒流模式，1.2 mL/min
柱温箱	40 °C 保持 0.5 分钟 以 10 °C/min 升至 100 °C，保持 0 分钟 以 25 °C/min 升至 260 °C，保持 0 分钟 以 5 °C/min 升至 280 °C，保持 0 分钟 以 15 °C/min 升至 320 °C，保持 2 分钟
传输线温度	320 °C
Agilent 5977 质谱仪参数	
离子源温度	300 °C
四极杆温度	150 °C
扫描模式	EI 全扫描模式，*m/z* 35 到 500
EMV 模式	增益因子
增益因子	0.4
溶剂延迟	2.75 分钟

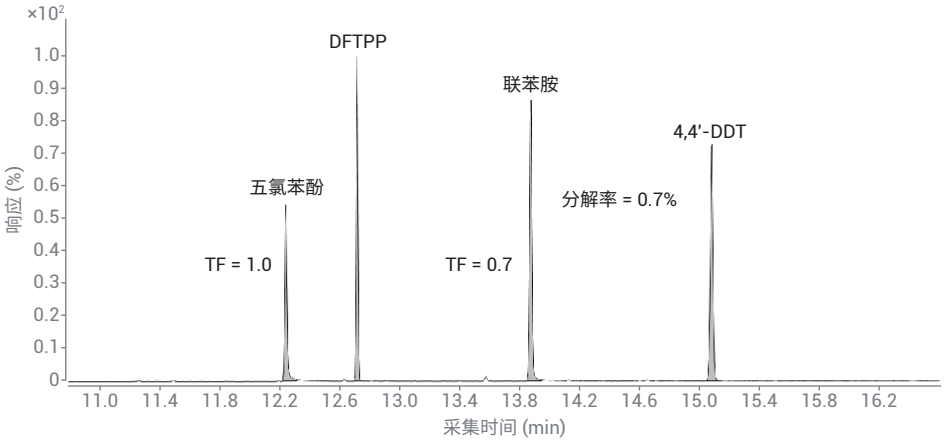


图 1. 25 ng/µL 半挥发性化合物调谐校验溶液的总离子流色谱图

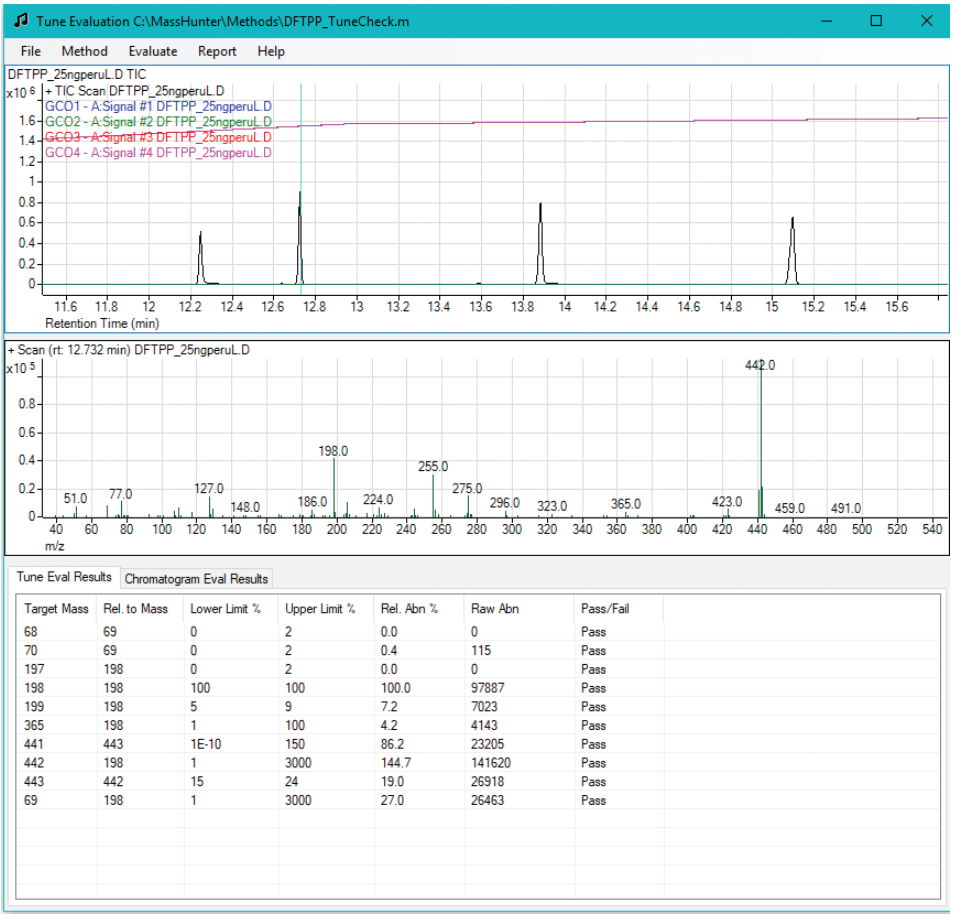
表 4. 美国 EPA 8270E DFTPP 离子丰度标准

质量数 (*m/z*)	离子丰度标准
68	小于 *m/z* 69 的 2%
69	存在
70	小于 *m/z* 69 的 2%
197	小于 *m/z* 198 的 2%
198	基峰或存在
199	*m/z* 198 的 5%–9%
365	大于基峰的 1%
441	小于 *m/z* 443 的 150%
442	基峰或存在
443	*m/z* 442 的 15%–24%

本研究使用了 Agilent MassHunter 环境定量分析软件中的调谐评估程序来自动评估系统性能。输入更新后的离子丰度标准并将其保存在方法中。所有 DFTPP 离子丰度标准均在指定的范围内，如图 2 所示。

4,4'-DDT 组分是一种热不稳定的氯代农药，通常用于检测系统惰性。当其暴露于高温 GC 进样口的活性位点时，很容易分解为 4,4'-二氯二苯基二氯乙烯 (4,4'-DDE) 和 4,4'-二氯二苯基二氯乙烷 (4,4'-DDD)。根据 EPA 方法 8270E，分解为 4,4'-DDE 和 4,4'-DDD 的 4,4'-DDT 不应超过 20%（根据公式 1 计算）。在本研究中，DDT 的分解率为 0.7%。

当色谱流路中发生非挥发性积聚时，五氯苯酚和联苯胺会出现拖尾，因此可用于检测系统活性。EPA 方法 8270E 规定，在 10% 峰高处，五氯苯酚和联苯胺的拖尾因子 (TF) 不得超过 2。调谐评估程序计算出的五氯苯酚和联苯胺的峰拖尾因子分别为 1.0 和 0.7。



Target Mass	Rel. to Mass	Lower Limit %	Upper Limit %	Rel. Abn %	Raw Abn	Pass/Fail
68	69	0	2	0.0	0	Pass
70	69	0	2	0.4	115	Pass
197	198	0	2	0.0	0	Pass
198	198	100	100	100.0	97887	Pass
199	198	5	9	7.2	7023	Pass
365	198	1	100	4.2	4143	Pass
441	443	1E-10	150	86.2	23205	Pass
442	198	1	3000	144.7	141620	Pass
443	442	15	24	19.0	26918	Pass
69	198	1	3000	27.0	26463	Pass

图 2. DFTPP 调谐评估结果

$$\text{DDT 分解率 (\%)} = \frac{(\text{峰面积}_{DDE} + \text{峰面积}_{DDD})}{(\text{峰面积}_{DDE} + \text{峰面积}_{DDD} + \text{峰面积}_{DDT})} \times 100$$

公式 1. DDT 分解率计算公式

系统优化

在进行初始校准之前，确定合适的增益设置，使最大响应峰能够在检测器线性范围内实现最大响应，以此来优化系统。这使用户能够获得最宽的系统工作范围，并确保化合物响应随时间的稳定性。GC/MS 检测器增益的优化程序概览现已发布[4]。使用公式 2 可以计算理想的增益因子。之前的工作表明，应针对 EPA 方法 8270 调整增益因子，使单四极杆质谱仪的基峰色谱图 (BPC) 的最高峰位于 3–5 × 10^6 之间[3]。本研究使用 1.0 的初始增益因子采集了最高浓度校准标样 (160 µg/mL) 的色谱图，以此来优化检测器增益。或者，为了避免意外的检测器饱和导致错误的峰高表征，可以从较低的初始增益因子开始并逐渐增大，以此进行系统优化。将获得的 TIC 加载到 MassHunter 定性分析软件中，然后从中提取 BPC 并积分。最高峰（13.043 分钟处的邻苯二甲酸二正丁酯）的响应值约为 7.8 × 10^6，如图 3 所示。针对建议的信号范围的下限，重新计算出的增益因子约为 0.4。用新的增益因子重新采集 160 µg/mL 校准标样的数据，得到的 BPC 中的峰高在目标范围内，约为 4.8 × 10^6。

$$\frac{\text{当前峰高}}{\text{当前增益因子}} = \frac{\text{目标峰高}}{\text{新的增益因子}}$$

$$\frac{7.8 \times 10^6 \text{ 响应值}}{1.0} = \frac{3 \times 10^6 \text{ 响应值}}{\text{新的增益因子}}$$

新的增益因子 = ~0.4

公式 2. 计算最佳增益因子

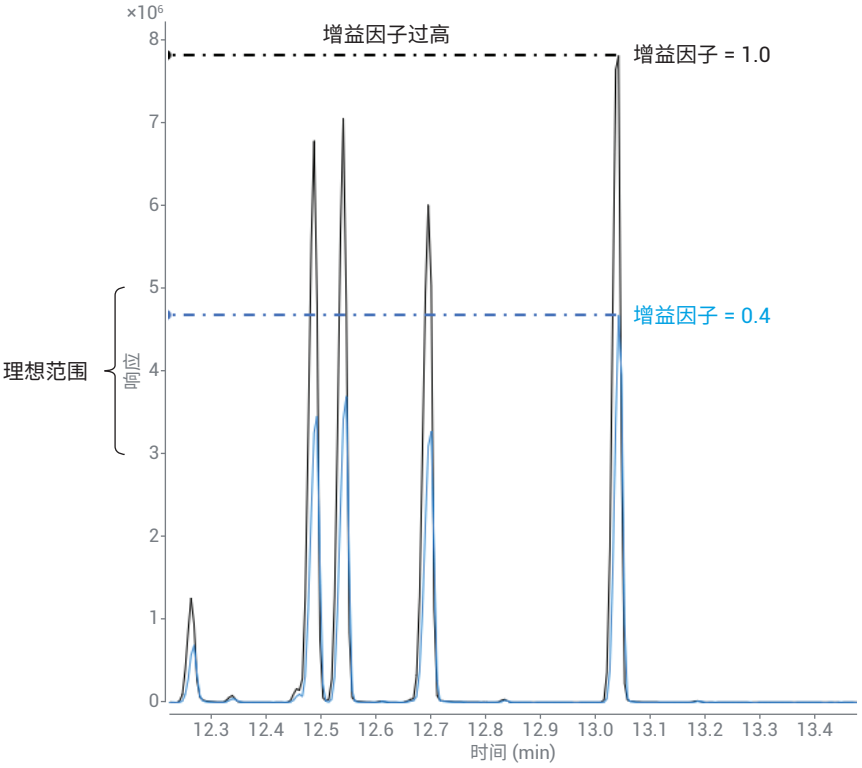


图 3. 在增益因子为 1.0（黑色迹线）和 0.4（蓝色迹线）时采集的 160 µg/mL 标样的基峰色谱图的叠加图

初始校准

初始校准在经优化的系统上进行，一共包括 13 个浓度（0.2–160 µg/mL）。图 4 展示了在 22 分钟的运行过程中目标分析物和内标的分离结果。

通过评价几对异构体的分离情况来评估色谱分析质量。根据 EPA 方法 8270E，对于中等浓度标样，如果峰分离度大于 50%，则认为异构体已分离。在 MassHunter MS 定量分析中，使用图 5 所示的默认分离度公式进行计算，将方法中的峰分离度异常值限值设定为 50%。几对异构体的分离情况如图 6 所示。在中等浓度标样中，关键结构异构体对苯并(b)荧蒽与苯并(k)荧蒽之间的分离度为 90.0%，在整个校准范围内，二者分离度介于 80% 至 90% 之间。异构体对菲和蒽、苯并[a]蒽和䓛的分离度分别为 100% 和 97.8%。

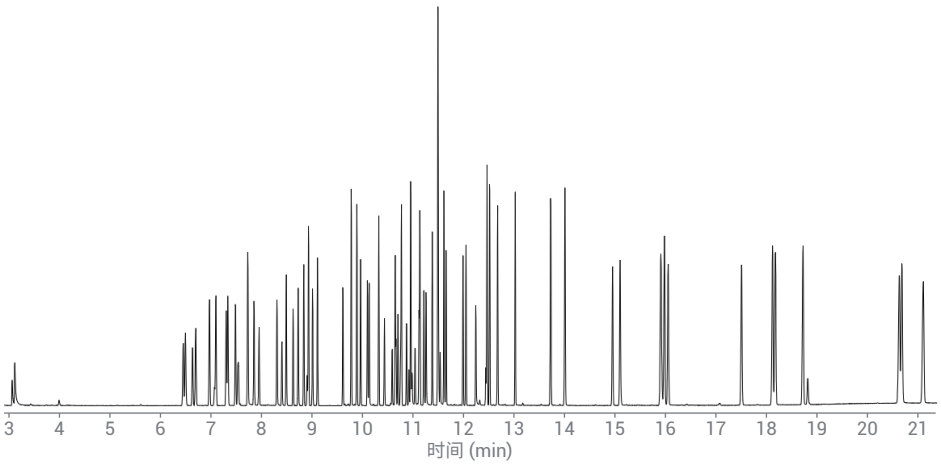


图 4. 25 µg/mL SVOC 校准标样的总离子流色谱图

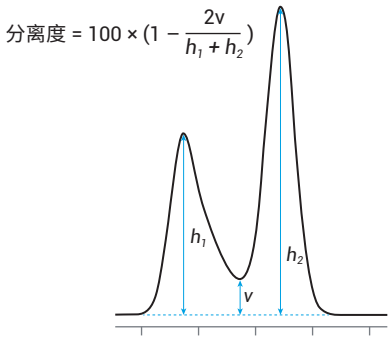


图 5. Agilent MassHunter 默认的分离度计算方法

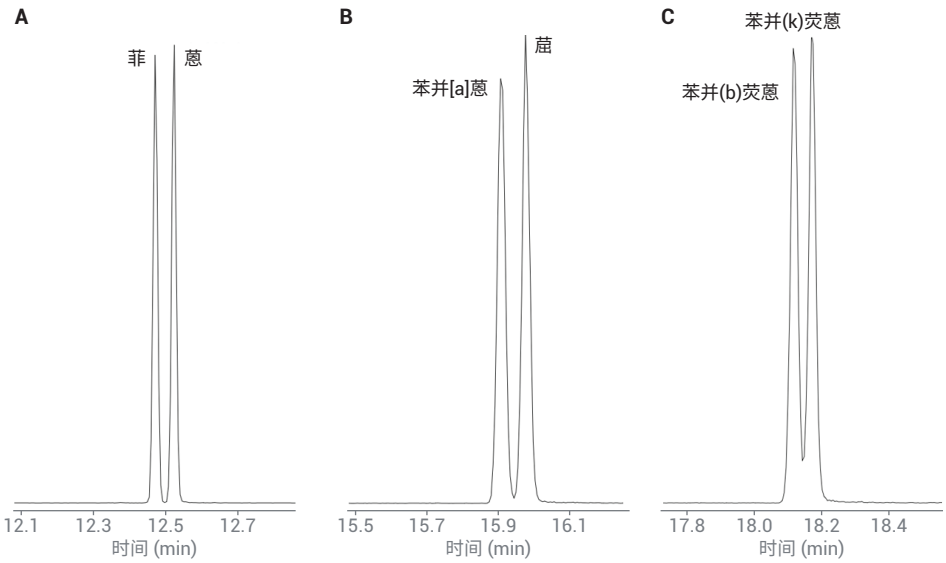


图 6. 中等浓度 (4 µg/mL) 下异构体对的提取离子色谱图：(A) 菲和蒽，*m/z* 178；(B) 苯并[a]蒽和䓛，*m/z* 228；(C) 苯并(b)荧蒽和苯并(k)荧蒽，*m/z* 252

虽然 SVOC 的校准具有挑战性，但 EPA 方法 8270E 允许采用灵活的校准技术来满足各个实验室项目的需求。选择合适的校准模型来比较每种分析物与内标的响应和浓度，以确定相对响应因子 (RRF)。计算每种分析物在校准范围内的平均响应因子；相对标准偏差 (RSD) 必须 ≤ 20%。但某些 SVOCs 的色谱行为可能不稳定，其响应因子可能会随浓度而变化。为了更好地表征这些化合物，可以通过最小二乘回归进行校准。线性回归至少需要 5 个点才能准确表征校准曲线，而非线性回归至少需要 6 个点。回归可接受标准规定，相关系数 R^2 必须 ≥ 0.99。每个校准浓度都必须使用校准曲线重新计算。最低浓度标样的计算浓度必须在其真实值的 ±50% 以内，所有其他标样的计算浓度必须在真实值的 ±30% 以内。可以使用加权因子在低校准浓度下更好地拟合曲线。

在本研究中，超过 90% 的分析物的动态范围达到了 0.2–160 µg/mL。有六种分析物删除了校准曲线低浓度端的数据点，以符合最低浓度数据点 50% 准确度的要求。如图 7 所示，我们使用 RRF 校准了近 95% 的分析物，这 71 种化合物的平均 RF RSD 为 6.4%。有 4 种分析物需要进行加权最小二乘回归：2 种分析物（4-硝基苯酚和五氯苯酚）需要通过线性回归进行校准，另 2 种分析物（2,4-二硝基苯酚和 4,6-二硝基-2-甲基苯酚）需要进行二次拟合。每个校准曲线均使用 1/x 作为加权因子，得到的 R^2 > 0.997。有关各个化合物的 RRF、各自的 %RSD 和动态范围的详细信息，请参见附录。

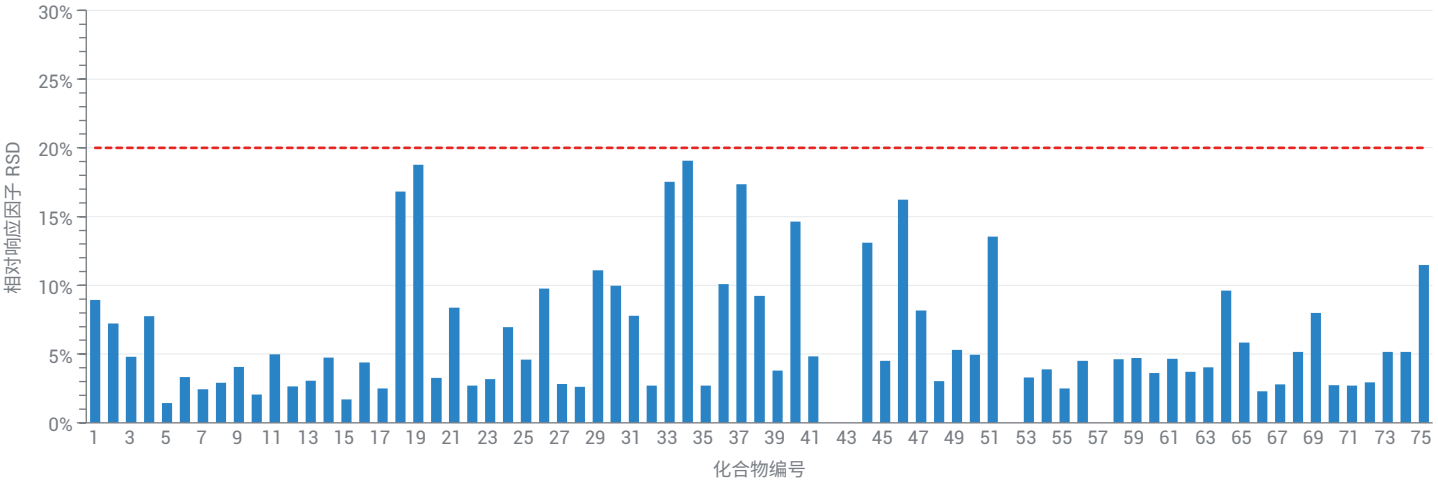
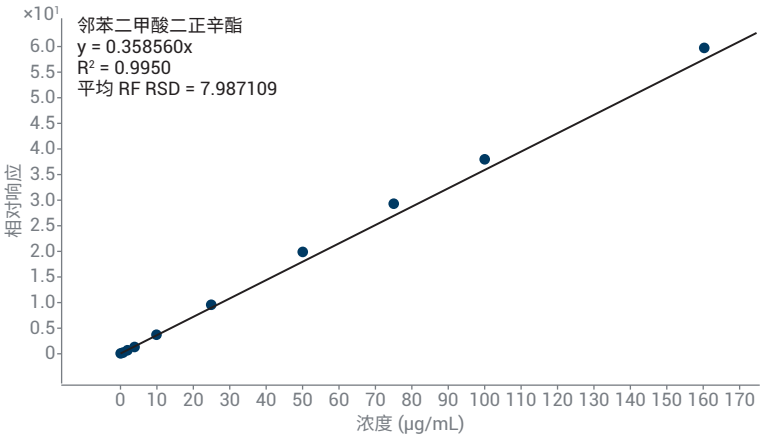


图 7. 每个校准化合物在其校准范围内的平均 RRF 的 RSD。红色虚线表示 EPA 方法 8270E 中 RRF 校准的可接受限值

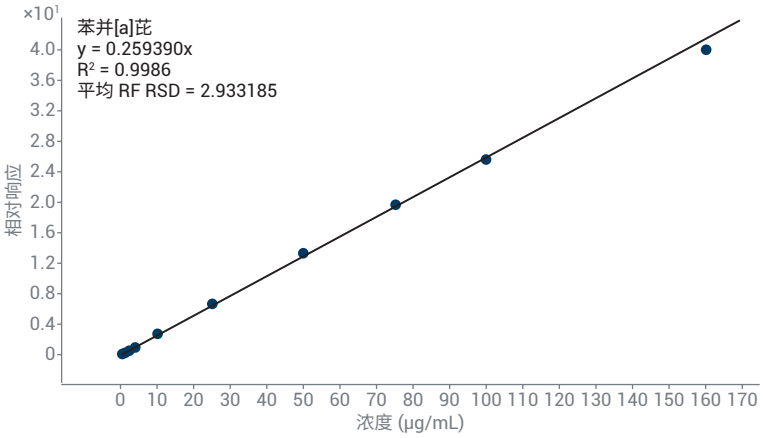
高分子量的邻苯二甲酸酯和 PAHs[5] 可能难以气化，容易粘附到流路的表面。最大程度减小表面积和使用高温对于确保出色的峰形和响应至关重要。使用脉冲分流进样和加热至 300 °C 的 9 mm 提取透镜，可以让两种分析物（邻苯二甲酸二正辛酯和苯并[a]芘）在整个校准范围内实现出色的平均准确度 (100.0%)，如图 8 和图 9 所示。

重复进样 10 次 0.8 µg/mL 的校准标样并考察每种分析物的 RRF，以此来评估方法的重现性。如图 10 所示，我们获得了出色的响应因子精度，75 种分析物的总体 RSD 为 3.5%。附录表 5 中列出了每种分析物每次重复进样的平均响应因子。



浓度 (µg/mL)	准确度 (%)
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

图 8. 邻苯二甲酸二正辛酯的校准情况和准确度



浓度 (µg/mL)	准确度 (%)
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

图 9. 苯并[a]芘的校准情况和准确度

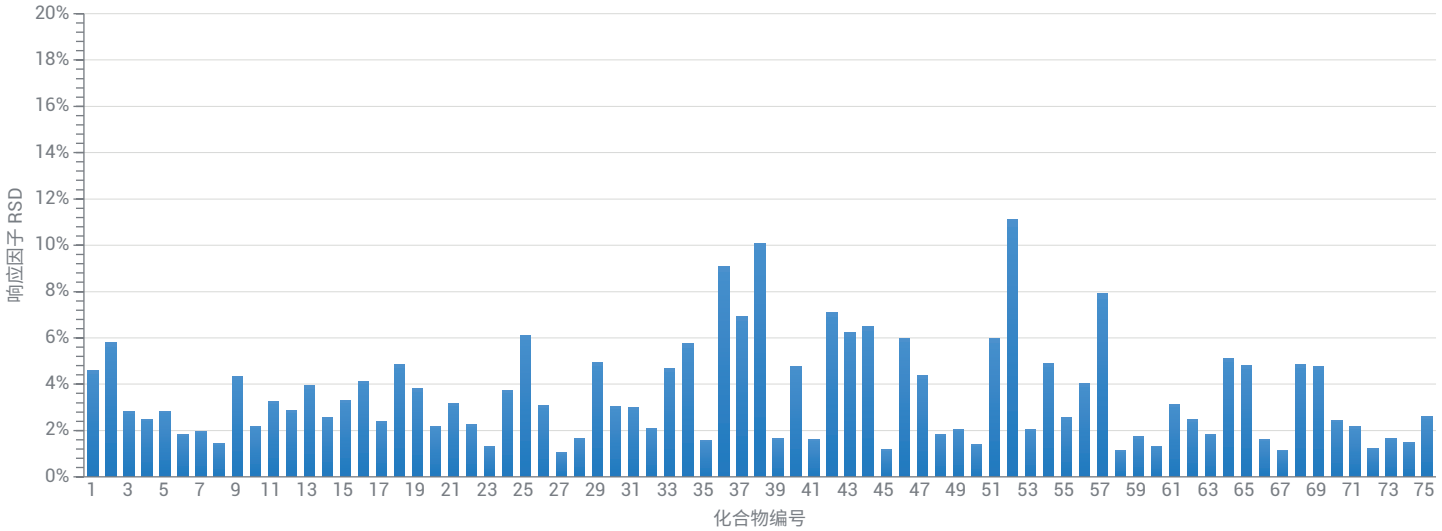


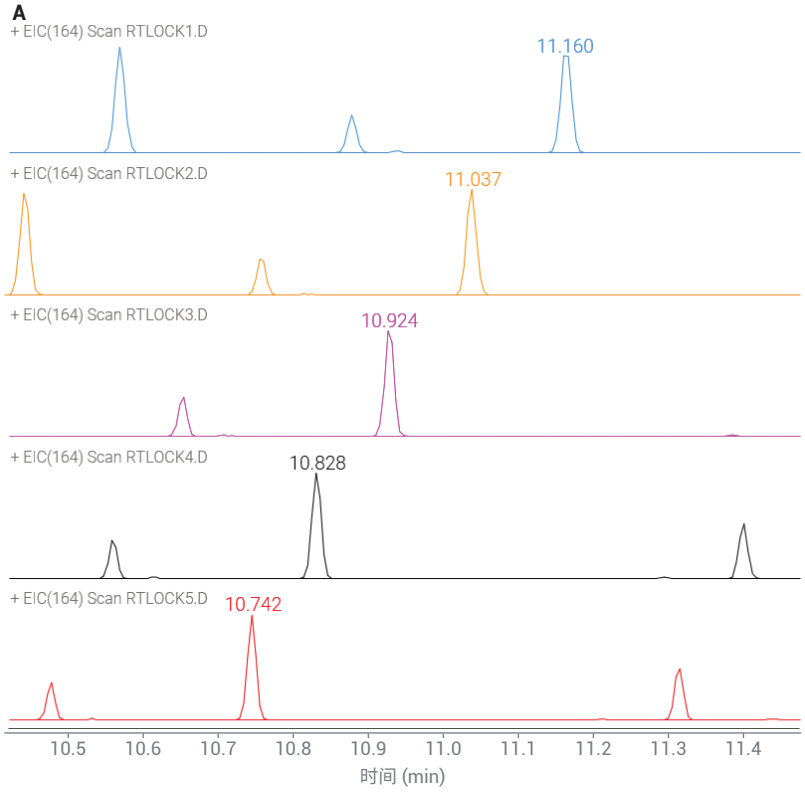
图 10. 重复进样 10 次 0.8 µg/mL 标样得到的每种校准化合物的响应因子的 RSD

保留时间锁定

安捷伦 RTL 功能可确保仪器实现长期重现性，无需在色谱柱维护后调整分析物保留时间[6]。将方法转移至其他 GC 后，使用 RTL 功能可以保持相同的保留时间，便于方法转移和比较不同实验室的结果。通过研究一系列参比运行中色谱柱流速与给定分析物的保留时间之间的关系，RTL 可正确匹配并锁定指定化合物的保留时间。其使用获得的结果来校准系统，并将这种关系存储在方法文件中。常规实验室项目中种类繁多的目标化合物以及高基质样品类型的频繁进样使 EPA 方法 8270E 成为了 RTL 的理想候选方案。这是因为使用该方法无需在色谱柱维护后重新校准保留时间。

本研究使用 10 µg/mL 校准标样和内标化合物苊 (*m/z* 164) 来对系统进行 RTL。采用 MassHunter GC/MS 采集软件进行 RTL 校准，该软件会在 1.2 mL/min 恒流以及 ±10% 和 ±20% 的方法流速设定值下自动运行 5 次分析。清洗运行后，在 5 个流速设定值下分别采集 10 µg/mL 标样的分析数据，并生成每个设定值下苊-d_{10} 保留时间的校准曲线，如图 11 所示。RTL 校准运行的相关系数为 0.999，这表明第六代 8890 气路模块具有出色的精度。

锁定方法后，在分析柱柱头切割约 0.5 m，进行分析柱维护。然后使用 1.2 mL/min 恒流的原始方法设定值考察维护后保留时间的偏移程度。色谱柱切割后，75 种校准化合物和 6 种内标的平均保留时间比原始保留时间早 0.097 分钟。然后，使用 MassHunter GC/MS 采集软件重新锁定。在将苊-d_{10} 的切割后保留时间与存储的 RTL 校准曲线进行比较后，该软件自动确定新流速为 1.108 mL/min 以匹配原始保留时间。重新进样 10 ppm 标样来测试重新锁定后的方法的有效性，并将重新锁定的保留时间与原始保留时间进行了比较。总体平均 δ 值为 0.003 分钟，或者与



B

Compound: Acenaphthene-d10

Retention Time Calibration:

File	ml/min Flow	Time min.	Spec Xcor	Deviation Seconds
RTLOCK1.D	0.96	11.160	-NA-	14.130
RTLOCK2.D	1.08	11.037	-NA-	6.744
RTLOCK3.D	1.20	10.924	-NA-	0.000
RTLOCK4.D	1.32	10.828	-NA-	-5.784
RTLOCK5.D	1.44	10.743	-NA-	-10.914

Maximum Deviation: 14.130 seconds
RTL Curve: R = 6.838e-001 A*A - 1.612e+001 A + 9.572e+001

Terms of Curve Fit:
Constant = 9.572e1
Linear = -1.612e1
Quadratic = 0.684e0
Coefficient = 0.999899 ** Good Fit **

图 11. (A) 苊-d_{10} (*m/z* 164) 的提取离子色谱图，(B) 在 5 个流速设定值下采集的 RTL 运行的校准结果。进样 0.8 µg/mL 的标样

色谱柱维护之前的原始化合物保留时间仅差 0.17 秒。图 12 展示了 18 分钟附近选定分析物的保留时间变化，以及有效利用 RTL 将峰移回鉴定窗口。这有助于更准确地鉴定分析物，并且无需调整保留时间窗口。附录中给出了分析物列表中所有分析物在重新锁定前后的保留时间。

结论

Agilent 8890 气相色谱系统与 Agilent 5977 MSD 系统联用，采用脉冲分流进样、9 mm 提取透镜和优化过增益的检测器，可在宽动态范围内为常见的 SVOCs 提供出色的响应因子精度。在本研究中，初始校准曲线满足美国 EPA 方法 8270E 规定的所有关键质量控制参数，并且所有响应因子的 RSD 都非常低。最后，在 8890 GC 上实施 RTL 方法可以提高色谱柱维护后保留时间的重现性，从而缩短数据处理时间和停机时间。

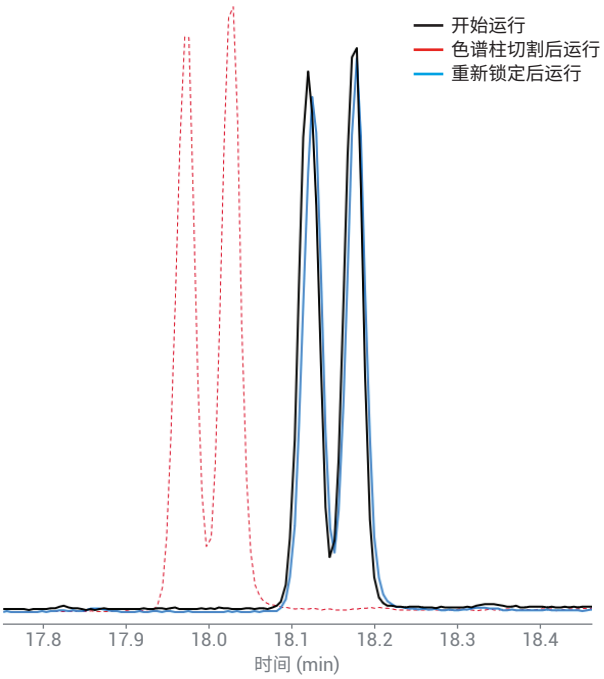


图 12. 叠加色谱图：初始校准运行（黑色迹线），从色谱柱前端切割 0.5 m 后的保留时间偏移（红色迹线），以及重新锁定方法后维持一致的保留时间（蓝色迹线）

参考文献

1. Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS); Method 8270E; *United Stated Environmental Protection Agency*, Revision 4, June **2018**
2. 使用 5977A 系列 GC/MSD 依据 EPA 8270 方法分析半挥发性有机化合物，*安捷伦科技公司*，出版号 5991-2153CHCN，**2013**
3. 采用 5977 惰性 Plus GC/MSD 重新优化 EPA 8270 方法实现最宽校准范围，*安捷伦科技公司*，出版号 5994-0350ZHCN，**2018**
4. A Quick Start to Optimizing Detector Gain for GC/MSD（优化 GC/MSD 检测器增益的快速入门指南），*安捷伦科技公司*，出版号 5991-2105EN，**2013**
5. 用于分析挑战性基质中 PAH 的优化的 GC/MS 方法，*安捷伦科技公司*，出版号 5994-0499ZHCN，**2019**
6. Retention Time Locking with the MSD Productivity ChemStation（使用 MSD 高效 ChemStation 实施保留时间锁定），*安捷伦科技公司*，出版号 5989-8574EN，**2008**

附录

表 5. 使用 EPA 方法 8270E 测定的 75 种化合物的校准数据

编号	化合物	RT (min)	各个浓度 (µg/mL) 下的响应因子													平均 RF	% RSD
			0.2	0.4	0.5	0.8	1	2	4	10	25	50	75	100	160		
1	N-亚甲基二硝胺	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	吡啶	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	苯酚	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	苯胺	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	双(2-氯乙基)醚	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-氯苯酚	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	1,3-二氯苯	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	1,4-二氯苯	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	苯甲醇	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	1,2-二氯苯	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-甲基苯酚	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'-氧代双(1-氯丙烷)	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-亚硝基二正丙胺	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-甲基苯酚	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	六氯乙烷	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	硝基苯	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	异佛尔酮	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-硝基苯酚	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	2,4-二甲基苯酚	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	双(2-氯乙氧基)甲烷	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	2,4-二氯苯酚	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	1,2,4-三氯苯	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	萘	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-氯苯胺	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	六氯丁二烯	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-氯-3-甲基苯酚	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-甲基萘	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-甲基萘	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	六氯环戊二烯	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	2,4,6-三氯苯酚	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	2,4,5-三氯苯酚	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-氯萘	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-硝基苯胺	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	1,4-二硝基苯	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	邻苯二甲酸二甲酯	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	1,3-二硝基苯	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	2,6-二硝基甲苯	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	1,2-二硝基苯	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	苊烯	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-硝基苯胺	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	苊	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	2,4-二硝基苯酚	10.989				二次回归，加权 1/x										R^2 0.9977	
43	4-硝基苯酚	11.047		线性回归，加权 1/x												R^2 0.9984	

表 5. 使用 EPA 方法 8270E 测定的 75 种化合物的校准数据（续）

编号	化合物	RT (min)	各个浓度 (µg/mL) 下的响应因子													平均 RF	% RSD
			0.2	0.4	0.5	0.8	1	2	4	10	25	50	75	100	160		
44	2.4-二硝基甲苯	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	二苯并呋喃	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	2,3,5,6-四氯苯酚	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	2,3,4,6-四氯苯酚	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	邻苯二甲酸二乙酯	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	芴	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-氯二苯醚	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-硝基苯胺	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	4,6-二硝基-2-甲基苯酚	11.544		二次回归，加权 1/x												R^2 0.9984	
53	二苯胺	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	偶氮苯	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-溴联苯醚	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	六氯苯	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	五氯苯酚	12.251		线性回归，加权 1/x												R^2 0.9991	
58	菲	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	蒽	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	咔唑	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	邻苯二甲酸二正丁酯	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	荧蒽	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	芘	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	邻苯二甲酸丁苄酯	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	双(2-乙基己基)己二酸	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	苯并[a]蒽	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	䓛	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	双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	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	邻苯二甲酸二正辛酯	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	苯并[b]荧蒽	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	苯并[k]荧蒽	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	苯并[a]芘	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	茚并[1,2,3-cd]芘	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	二苯并[a,h]蒽	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	苯并[ghi]苝	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

表 6. 重复进样 10 次 0.8 µg/mL 样品得到的 75 种分析物的响应因子

化合物	重复进样编号										统计数据	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均	%RSD
N-亚甲基二硝胺	0.444	0.405	0.405	0.415	0.400	0.406	0.396	0.369	0.393	0.408	0.404	4.6
吡啶	0.707	0.727	0.766	0.714	0.764	0.777	0.707	0.687	0.659	0.663	0.717	5.8
苯酚	1.160	1.106	1.117	1.106	1.144	1.116	1.090	1.049	1.080	1.099	1.107	2.8
苯胺	1.387	1.409	1.419	1.408	1.439	1.347	1.406	1.382	1.397	1.322	1.392	2.5
双(2-氯乙基)醚	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-氯苯酚	1.113	1.073	1.120	1.117	1.115	1.123	1.115	1.064	1.098	1.096	1.103	1.8
1,3-二氯苯	1.435	1.392	1.465	1.391	1.459	1.431	1.430	1.396	1.393	1.413	1.420	2.0
1,4-二氯苯	1.468	1.475	1.457	1.467	1.481	1.497	1.512	1.436	1.470	1.490	1.475	1.4
苯甲醇	0.625	0.630	0.624	0.637	0.633	0.645	0.625	0.606	0.554	0.593	0.617	4.3
1,2-二氯苯	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-甲基苯酚	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'-氧代双(1-氯丙烷)	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-亚硝基二正丙胺	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-甲基苯酚	0.934	0.870	0.918	0.887	0.901	0.902	0.862	0.900	0.868	0.883	0.892	2.6
六氯乙烷	0.492	0.501	0.505	0.497	0.537	0.509	0.476	0.510	0.484	0.496	0.501	3.3
硝基苯	0.246	0.230	0.226	0.229	0.225	0.227	0.213	0.217	0.231	0.218	0.226	4.1
异佛尔酮	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-硝基苯酚	0.108	0.109	0.107	0.101	0.105	0.105	0.094	0.102	0.099	0.097	0.103	4.9
2,4-二甲基苯酚	0.181	0.178	0.180	0.188	0.184	0.177	0.174	0.167	0.167	0.175	0.177	3.8
双(2-氯乙氧基)甲烷	0.310	0.313	0.311	0.298	0.309	0.312	0.293	0.303	0.303	0.304	0.305	2.2
2,4-二氯苯酚	0.249	0.226	0.240	0.225	0.236	0.232	0.227	0.238	0.236	0.233	0.234	3.2
1,2,4-三氯苯	0.339	0.339	0.336	0.328	0.343	0.332	0.333	0.322	0.341	0.347	0.336	2.2
萘	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-氯苯胺	0.341	0.347	0.339	0.322	0.337	0.319	0.319	0.325	0.312	0.343	0.330	3.7
六氯丁二烯	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-氯-3-甲基苯酚	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-甲基萘	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-甲基萘	0.572	0.595	0.579	0.585	0.587	0.565	0.576	0.591	0.595	0.582	0.583	1.7
六氯环戊二烯	0.399	0.378	0.394	0.393	0.365	0.397	0.393	0.343	0.394	0.364	0.382	4.9
2,4,6-三氯苯酚	0.300	0.293	0.295	0.282	0.282	0.297	0.278	0.286	0.277	0.277	0.287	3.0
2,4,5-三氯苯酚	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-氯萘	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-硝基苯胺	0.231	0.235	0.220	0.224	0.222	0.218	0.213	0.225	0.200	0.209	0.220	4.7
1,4-二硝基苯	0.095	0.089	0.088	0.090	0.094	0.089	0.082	0.087	0.078	0.085	0.088	5.8
邻苯二甲酸二甲酯	1.261	1.252	1.247	1.202	1.223	1.224	1.214	1.248	1.242	1.252	1.237	1.6
1,3-二硝基苯	0.114	0.106	0.118	0.117	0.105	0.093	0.097	0.111	0.093	0.099	0.105	9.1
2,6-二硝基甲苯	0.212	0.183	0.195	0.177	0.186	0.183	0.167	0.174	0.177	0.177	0.183	6.9
1,2-二硝基苯	0.074	0.078	0.085	0.073	0.082	0.072	0.075	0.076	0.060	0.064	0.074	10.1
苊烯	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-硝基苯胺	0.205	0.186	0.201	0.196	0.188	0.206	0.191	0.185	0.197	0.178	0.193	4.8
苊	1.048	1.036	1.068	1.038	1.072	1.085	1.070	1.077	1.055	1.048	1.059	1.6
2,4-二硝基苯酚	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-硝基苯酚	0.115	0.099	0.112	0.103	0.102	0.102	0.100	0.103	0.106	0.092	0.103	6.3
2.4-二硝基甲苯	0.237	0.211	0.211	0.193	0.211	0.195	0.192	0.203	0.206	0.195	0.205	6.5
二苯并呋喃	1.692	1.684	1.711	1.661	1.711	1.721	1.686	1.703	1.691	1.665	1.692	1.2

表 6. 重复进样 10 次 0.8 µg/mL 样品得到的 75 种分析物的响应因子（续）

化合物	重复进样编号										统计数据	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均	%RSD
2,3,5,6-四氯苯酚	0.243	0.230	0.205	0.213	0.213	0.231	0.208	0.204	0.213	0.210	0.217	6.0
2,3,4,6-四氯苯酚	0.273	0.263	0.257	0.241	0.263	0.235	0.252	0.255	0.253	0.245	0.254	4.4
邻苯二甲酸二乙酯	1.172	1.177	1.147	1.134	1.161	1.162	1.124	1.126	1.173	1.128	1.150	1.8
芴	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-氯二苯醚	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-硝基苯胺	0.231	0.208	0.216	0.215	0.226	0.213	0.204	0.217	0.202	0.186	0.212	6.0
4,6-二硝基-2-甲基苯酚	0.038	0.041	0.040	0.040	0.034	0.041	0.046	0.036	0.032	0.033	0.038	11.1
二苯胺	0.575	0.559	0.570	0.553	0.552	0.557	0.549	0.545	0.544	0.539	0.554	2.0
偶氮苯	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-溴联苯醚	0.230	0.236	0.221	0.220	0.230	0.220	0.229	0.235	0.227	0.231	0.228	2.5
六氯苯	0.276	0.305	0.306	0.291	0.293	0.304	0.311	0.305	0.292	0.279	0.296	4.0
五氯苯酚	0.084	0.086	0.084	0.079	0.070	0.083	0.076	0.084	0.086	0.069	0.080	7.9
菲	1.044	1.072	1.075	1.065	1.055	1.068	1.069	1.049	1.044	1.069	1.061	1.1
蒽	1.012	1.021	1.014	1.014	0.975	1.016	1.011	0.983	0.981	1.013	1.004	1.7
咔唑	0.868	0.871	0.842	0.857	0.858	0.859	0.851	0.842	0.859	0.837	0.854	1.3
邻苯二甲酸二正丁酯	0.931	0.924	0.867	0.884	0.870	0.889	0.882	0.856	0.855	0.852	0.881	3.1
荧蒽	1.048	1.084	1.018	1.042	1.056	1.034	1.042	1.051	0.998	1.003	1.038	2.5
芘	1.264	1.228	1.291	1.262	1.243	1.282	1.269	1.291	1.291	1.240	1.266	1.8
邻苯二甲酸丁苄酯	0.354	0.328	0.333	0.311	0.326	0.313	0.303	0.307	0.303	0.312	0.319	5.1
双(2-乙基己基)己二酸	0.302	0.284	0.275	0.278	0.274	0.266	0.281	0.262	0.254	0.269	0.275	4.8
苯并[a]蒽	1.068	1.050	1.064	1.056	1.062	1.047	1.023	1.074	1.027	1.040	1.051	1.6
䓛	1.242	1.216	1.209	1.216	1.225	1.208	1.189	1.212	1.200	1.211	1.213	1.2
双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	0.517	0.518	0.493	0.502	0.474	0.458	0.468	0.480	0.462	0.455	0.483	4.9
邻苯二甲酸二正辛酯	0.743	0.708	0.659	0.668	0.659	0.649	0.642	0.664	0.664	0.639	0.669	4.8
苯并[b]荧蒽	0.982	0.968	0.934	0.970	0.924	0.975	0.955	0.929	0.932	0.984	0.955	2.5
苯并[k]荧蒽	1.023	1.017	1.067	1.086	1.052	1.053	1.044	1.035	1.053	1.015	1.044	2.2
苯并[a]芘	0.895	0.897	0.885	0.893	0.903	0.883	0.875	0.888	0.902	0.911	0.893	1.2
茚并[1,2,3-cd]芘	0.842	0.845	0.827	0.839	0.817	0.834	0.866	0.840	0.857	0.842	0.841	1.7
二苯并[a,h]蒽	0.918	0.926	0.940	0.921	0.936	0.922	0.921	0.944	0.957	0.950	0.934	1.5
苯并[ghi]苝	0.979	1.041	1.052	1.031	1.046	1.065	1.003	1.005	1.044	1.016	1.028	2.6

表 7. 将分析柱切割 0.5 m 前后 75 种分析物的 RTL 数据

编号	化合物	初始 RT (min)	切割后 RT (min)	重新锁定后 RT (min)
1	N-亚甲基二硝胺	3.062	2.960	3.056
2	吡啶	3.121	3.019	3.115
3	苯酚	6.453	6.341	6.458
4	苯胺	6.496	6.378	6.501
5	双(2-氯乙基)醚	6.64	6.522	6.640
6	2-氯苯酚	6.704	6.587	6.704
7	1,3-二氯苯	6.977	6.865	6.977
8	1,4-二氯苯	7.1	6.999	7.105
9	苯甲醇	7.309	7.207	7.309
10	1,2-二氯苯	7.341	7.239	7.341
11	2-甲基苯酚	7.49	7.394	7.496
12	2,2'-氧代双(1-氯丙烷)	7.549	7.442	7.549
13	N-亚硝基二正丙胺	7.731	7.640	7.737
14	3/4-甲基苯酚	7.737	7.646	7.737
15	六氯乙烷	7.86	7.763	7.865
16	硝基苯	7.961	7.865	7.961
17	异佛尔酮	8.314	8.223	8.314
18	2-硝基苯酚	8.41	8.325	8.416
19	2,4-二甲基苯酚	8.496	8.416	8.501
20	双(2-氯乙氧基)甲烷	8.635	8.550	8.635
21	2,4-二氯苯酚	8.737	8.651	8.737
22	1,2,4-三氯苯	8.849	8.764	8.849
23	萘	8.94	8.855	8.945
24	4-氯苯胺	9.02	8.940	9.026
25	六氯丁二烯	9.116	9.036	9.122
26	4-氯-3-甲基苯酚	9.619	9.545	9.625
27	2-甲基萘	9.785	9.705	9.790
28	1-甲基萘	9.897	9.817	9.903
29	六氯环戊二烯	9.972	9.892	9.978
30	2,4,6-三氯苯酚	10.106	10.026	10.111
31	2,4,5-三氯苯酚	10.143	10.063	10.143
32	2-氯萘	10.331	10.251	10.336
33	2-硝基苯胺	10.443	10.363	10.443
34	1,4-二硝基苯	10.593	10.513	10.598
35	邻苯二甲酸二甲酯	10.652	10.571	10.652
36	1,3-二硝基苯	10.668	10.593	10.673
37	2,6-二硝基甲苯	10.71	10.630	10.710
38	1,2-二硝基苯	10.753	10.678	10.759
39	苊烯	10.78	10.694	10.780
40	3-硝基苯胺	10.876	10.796	10.882
41	苊	10.962	10.882	10.967
42	2,4-二硝基苯酚	10.989	10.908	10.989
43	4-硝基苯酚	11.047	10.967	11.047
44	2.4-二硝基甲苯	11.122	11.047	11.128
45	二苯并呋喃	11.144	11.064	11.144
46	2,3,5,6-四氯苯酚	11.224	11.144	11.229
47	2,3,4,6-四氯苯酚	11.267	11.187	11.272
48	邻苯二甲酸二乙酯	11.384	11.310	11.390
49	芴	11.497	11.417	11.502
50	4-氯二苯醚	11.502	11.422	11.502
51	4-硝基苯胺	11.507	11.427	11.507
52	4,6-二硝基-2-甲基苯酚	11.544	11.459	11.545
53	二苯胺	11.62	11.540	11.620
54	偶氮苯	11.662	11.582	11.662
55	4-溴联苯醚	11.999	11.919	11.999
56	六氯苯	12.058	11.973	12.058
57	五氯苯酚	12.251	12.171	12.256
58	菲	12.47	12.390	12.475
59	蒽	12.524	12.438	12.524
60	咔唑	12.679	12.599	12.684
61	邻苯二甲酸二正丁酯	13.032	12.952	13.032
62	荧蒽	13.732	13.631	13.732
63	芘	14.011	13.909	14.016
64	邻苯二甲酸丁苄酯	14.957	14.834	14.957
65	双(2-乙基己基)己二酸	15.107	14.984	15.102
66	苯并[a]蒽	15.909	15.770	15.915
67	䓛	15.979	15.835	15.984
68	双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	16.054	15.915	16.054
69	邻苯二甲酸二正辛酯	17.509	17.359	17.509
70	苯并[b]荧蒽	18.118	17.974	18.124
71	苯并[k]荧蒽	18.177	18.028	18.177
72	苯并[a]芘	18.717	18.578	18.723
73	茚并[1,2,3-cd]芘	20.627	20.467	20.638
74	二苯并[a,h]蒽	20.68	20.520	20.686
75	苯并[ghi]苝	21.103	20.927	21.114
76	1,4-二氯苯-d_4 (ISTD)	7.073	6.966	7.079
77	萘-d_8 (ISTD)	8.913	8.828	8.919
78	苊-d_{10} (ISTD)	10.924	10.844	10.930
79	菲-d_{10} (ISTD)	12.449	12.363	12.449
80	䓛-d_{12} (ISTD)	15.931	15.786	15.931
81	苝-d_{12} (ISTD)	18.819	18.680	18.824

www.agilent.com

DE.4455439815

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，2020
2020 年 5 月 6 日，中国出版
5994-1500ZHCN

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

Agilent
Trusted Answers