

## 使用安捷伦 VOC 应用解决方案优化挥发性有机物分析

环境分析



安捷伦 5975C 气相质谱仪是挥发性有机化合物分析的理想工具。  
安捷伦 VOC 解决方案为启动应用程序提供了所有的关键技术。

饮水质量是一个事关全球健康的焦点问题，几十年来，公共政策一直努力将饮水质量监测放在工作的最前沿。特别是由挥发性有机化合物（VOC）引起的污染已经是全球范围内环保机构高度优先重视的问题。挥发性有机化合物应用于燃料、个人护理用品、家居用品、工业产品等各种各样的材料中。对这些产品不恰当的使用、储存或者处理品都会潜在地将挥发性有机化合物引入到饮水水源中。这些物质的暴露会引起多种慢性和急性健康问题，这也充分证明了开发可靠、准确和灵敏的方法开展挥发性有机化合物检测是十分有必要的。

全球很多地区测定挥发性有机化合物的方法主要以 US EPA 524.2 和 8260B 为主。安捷伦 5975C 气相质谱仪成功应用这些方法的历史可以追溯到几十年前。随着仪器水平的提高，需要对许多常用的参数和方法条件进行重新优化。安捷伦的 VOC 解决方案优化了这些仪器条件，在满足方法所有质控元素的同时，也为分析提供了最大的灵敏度、耐用性和稳定性。安捷伦 VOC 应用组件（部件号 G7022A）详细阐明了仪器优化并介绍了一些确保分析顺利进行的小技巧。解决方案包括最新的软件、硬件和方法，已经在多个私有和政府的 VOC 实验室安装启用，并获得了巨大的成功。正如此应用组件一些早期的使用者所证明的那样：

“灵敏度、稳定性及分析线性都有了大幅度的提高。”

“我们发现，新的 BFB 自动调谐程序非常稳定而且易于使用，色谱图看起来棒极了，灵敏度也很不错。”

### 主要优点

- 更高的调谐稳定性可以允许调谐间隔更长的时间
- 524.2 方法的化合物列表中方法检出限中位数为 0.05 ug/L，详细信息参考表 1
- 8260B 方法的化合物列表中方法检出限中位数为 0.06 ug/L，详细信息参考表 2
- 所有校准都使用平均响应因子，524.2 方法的平均相对标准偏差为 8%，8260 方法的平均相对标准偏差为 6.1%



解决方案中一项主要的变动是在 ChemStation E.02.02 SP1 中使用了一种被称为 BFB 自动调谐的调谐算法。此调谐经特殊设计，稳定性更高，比之前版本的 BFB 调谐更灵敏。通过提高调谐的稳定性，谱图调谐评估的失败率下降了超过一半。除此之外，还在调谐过程中加入了内部自查，可以优先捕捉并预警系统中可能出现的问题。灵敏度的提高可以使一个或两个额外的 ICAL 水平低于已颁布方法的规定水平。另外，软件服务包中包含的新型 BFB 评估宏使调谐评估大幅提高。升级后的宏在 BFB 的识别和其在整个色谱峰范围内选择性进行谱图平均方面更胜一筹。

安捷伦 VOC 应用组件为准确、灵敏、稳定地进行 VOC 分析提供了强大的解决方案。

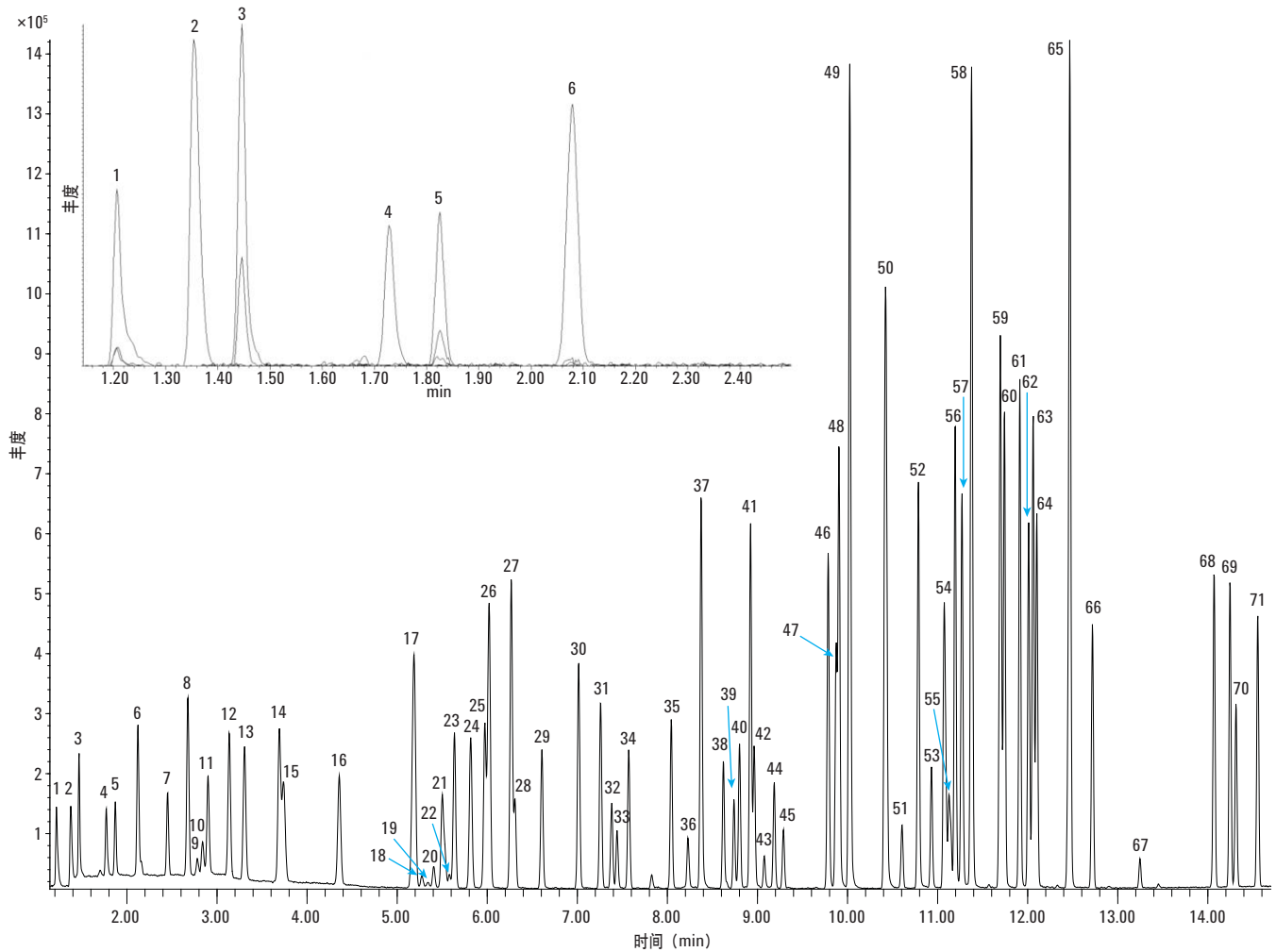


图 1. 方法 524.2 ICAL 标准的总离子流图。插图：气体的提取离子谱图，按流出顺序从左到右依次为：二氯二氟甲烷 (85 m/z)，一氯甲烷 (50 m/z)，氯乙烯 (62 m/z)，溴甲烷 (94 m/z)，氯乙烷 (64 m/z) 和三氯氟甲烷 (101 m/z)，峰编号与表 1 中的化合物一致

1. J.S. Hollis, H. Prest, 通过吹扫捕集技术分析挥发性有机化合物, 安捷伦应用手册, 5991-0029CHCN (2012)
2. J.W. Munch, T.A Bellar, J.W. Eichelberger, W.L. Budde, R.W. Slater, Jr., A. Alford-Stevens, Method 524.2 – Measurement of Purgeable Organic Compounds In Water by Capillary Column Gas Chromatography/Mass Spectrometry – Revision 4.1.

表 1. 方法 524.2 的方法检出限 (MDL) 和平均相对响应因子。括号内的数字分别对应图 1 中的色谱峰

	校准溶液			方法检出限		
	范围 (µg/L)	RRF 均值	% RSD	加标量 (µg/L)	均值 (µg/L)	MDL (µg/L)
二氯二氟甲烷 {1}	0.25–50	0.090	11.3	0.25	0.29	0.08
一氯甲烷 {2}	0.25–50	0.159	10.4	0.25	0.29	0.04
氯乙烯 {3}	0.25–50	0.153	7.3	0.25	0.26	0.06
溴甲烷 {4}	0.25–50	0.066	9.8	0.25	0.29	0.06
氯乙烷 {5}	0.25–50	0.083	5.0	0.25	0.24	0.06
三氯氟甲烷 {6}	0.25–50	0.169	9.2	0.25	0.27	0.05
乙醚 {7}	0.25–50	0.074	8.6	0.25	0.28	0.03
1,1- 二氯乙烯 {8}	0.25–50	0.181	7.5	0.25	0.28	0.06
丙酮 {9}	5–50	0.018	14.0	2.0	2.87	0.43
碘甲烷 {10}	0.25–50	0.066	15.0	0.25	0.24	0.15
二硫化碳 {11}	0.25–50	0.282	7.7	0.25	0.26	0.04
氯丙烯 {12}	0.25–50	0.198	4.2	0.25	0.26	0.05
二氯甲烷 {13}	0.25–50	0.157	9.5	0.25	0.29	0.07
反式 -1,2- 二氯乙烯 {14}	0.25–50	0.166	7.0	0.25	0.29	0.07
甲基叔丁基醚 (MTBE) {15}	0.25–50	0.244	12.5	0.25	0.27	0.03
1,1- 二氯乙烷 {16}	0.25–50	0.220	6.6	0.25	0.24	0.06
2,2- 二氯丙烷 {17}	0.25–50	0.165	10.4	0.25	0.18	0.16
顺式 -1,2- 二氯乙烯 {17}	0.25–50	0.200	4.3	0.25	0.28	0.06
2- 丁酮 (MEK) {18}	5–50	0.025	6.9	1.0	0.99	0.22
溴氯甲烷 {21}	0.25–50	0.086	6.2	0.25	0.3	0.06
氯仿 {23}	0.25–50	0.202	4.4	0.25	0.23	0.04
1,1,1- 三氯乙烷 {24}	0.25–50	0.180	4.5	0.25	0.25	0.05
1- 氯丁烷 {25}	0.25–50	0.253	5.9	0.25	0.28	0.05
四氯化碳 {26}	0.25–50	0.158	5.5	0.25	0.23	0.05
1,2- 二氯 -1- 丙烯 {26}	0.25–50	0.167	7.4	0.25	0.28	0.06
苯 {27}	0.25–50	0.494	4.1	0.25	0.29	0.02
1,2- 二氯乙烷 {28}	0.25–50	0.118	5.7	0.25	0.29	0.08
氟苯 (ISTD) {29}	N/A		4.0	N/A		
三氯乙烯 {30}	0.25–50	0.130	8.7	0.25	0.25	0.04
1,2- 二氯丙烷 {31}	0.25–50	0.129	9.3	0.25	0.34	0.11
二溴甲烷 {32}	0.25–50	0.049	3.8	0.25	0.25	0.06
溴二氯甲烷 {34}	0.25–50	0.148	4.8	0.25	0.23	0.03
顺式 -1,3- 二氯丙烯 {35}	0.25–50	0.173	6.8	0.25	0.25	0.04
4- 甲基 -2- 戊酮 (MIBK) {36}	5–50	0.077	4.0	0.25	0.32	0.16
甲苯 {37}	0.25–50	0.527	6.4	0.25	0.24	0.02
反式 -1,3- 二氯丙烯 {38}	0.25–50	0.128	9.2	0.25	0.25	0.07
1,1,2- 三氯乙烷 {40}	0.25–50	0.076	12.4	0.25	0.35	0.05
四氯乙烯 {41}	0.25–50	0.142	13.6	0.25	0.32	0.15
1,3- 二氯丙烷 {42}	0.25–50	0.132	8.8	0.25	0.29	0.04
2- 己酮 {43}	5–50	0.041	2.5	1.0	0.81	0.13
二溴氯甲烷 {44}	0.25–50	0.094	6.8	0.25	0.25	0.04

表 1. 方法 524.2 的方法检出限 (MDL) 和平均相对响应因子。括号内的数字分别对应图 1 中的色谱峰 (续表)

	校准溶液			方法检出限		
	范围 (µg/L)	RRF 均值	% RSD	加标量 (µg/L)	均值 (µg/L)	MDL (µg/L)
1,2- 二溴甲烷 (EDB) {45}	0.25–50	0.070	13.6	0.25	0.29	0.1
氯苯 {46}	0.25–50	0.311	5.6	0.25	0.24	0.02
1,1,1,2- 四氯乙烷 {47}	0.25–50	0.111	7.8	0.25	0.24	0.05
乙苯 {48}	0.25–50	0.571	6.3	0.25	0.25	0.04
间 / 对二甲苯 {49}	0.25–50	0.436	7.2	0.5	0.5	0.05
邻二甲苯 {50}	0.25–50	0.430	4.8	0.25	0.25	0.03
苯乙烯 {50}	0.25–50	0.331	4.8	0.25	0.37	0.05
三溴甲烷 {51}	0.25–50	0.052	10.6	0.25	0.28	0.07
异丙苯 {52}	0.25–50	0.479	7.3	0.25	0.26	0.05
溴氟苯 (SURR) {53}	0.25–50	0.330	2.9	1.0	1.03	0.06
溴苯 {54}	0.25–50	0.211	6.3	0.25	0.29	0.04
1,1,2,2- 四氯乙烷 {54}	0.25–50	0.095	14.0	0.25	0.3	0.05
1,2,3- 三氯丙烷 {55}	0.25–50	0.023	18.3	0.25	0.31	0.17
正丙基苯 {56}	0.25–50	0.375	6.0	0.25	0.28	0.04
2- 氯甲苯 {57}	0.25–50	0.377	6.5	0.25	0.27	0.02
1,3,5- 三甲基苯 {58}	0.25–50	0.460	9.0	0.25	0.26	0.02
4- 氯甲苯 {58}	0.25–50	0.432	8.6	0.25	0.26	0.04
叔丁基苯 {59}	0.25–50	0.446	9.2	0.25	0.25	0.05
1,2,4- 三甲基苯 {60}	0.25–50	0.452	7.7	0.25	0.26	0.03
仲丁基苯 {61}	0.25–50	0.604	11.5	0.25	0.28	0.03
1,3- 二氯苯 {62}	0.25–50	0.239	8.4	0.25	0.26	0.05
对 - 异丙基甲苯 {63}	0.25–50	0.472	12.7	0.25	0.27	0.02
1,4- 二氯苯 {64}	0.25–50	0.236	8.1	0.25	0.26	0.04
1,2- 二氯苯 -d4 (SURR) {65}	0.25–50	0.287	3.1	1.0	1.1	0.05
1,2- 二氯苯 {65}	0.25–50	0.207	8.5	0.25	0.3	0.04
正丁基苯 {65}	0.25–50	0.482	12.5	0.25	0.29	0.05
六氯乙烷 {66}	0.25–50	0.095	9.8	0.25	0.25	0.02
1,2- 二溴 -3- 氯丙烷 (DBCP) {67}	0.25–50	0.013	12.0	0.25	0.29	0.13
1,2,4- 三氯苯 {68}	0.25–50	0.158	11.5	0.25	0.28	0.04
六氯丁二烯 {69}	0.25–50	0.101	15.3	0.25	0.29	0.06
萘 {70}	0.25–50	0.252	13.1	0.25	0.32	0.04
1,2,3- 三氯苯 {71}	0.25–50	0.133	10.0	0.25	0.28	0.04

表 2. 方法 8260B 的方法检出限 (MDL) 和平均相对响应因子

	校准溶液			方法检出限		
	范围 (µg/L)	RRF 均值	% RSD	加标量 (µg/L)	均值 (µg/L)	MDL (µg/L)
1,1,1,2- 四氯乙烷	0.25-80	0.3638	4.1	0.25	0.269	0.061
1,1,1- 三氯乙烷	0.25-80	0.5747	5.6	0.25	0.246	0.06
1,1,2,2- 四氯乙烷	0.25-80	0.9389	4.5	0.25	0.264	0.067
1,1,2- 三氯乙烷	0.5-80	0.2912	6.4	0.25	0.269	0.045
1,1- 二氯乙烷	0.25-80	0.6702	5.3	0.25	0.248	0.071
1,1- 二氯乙烯	0.25-80	0.3236	8.3	0.25	0.257	0.094
1,1- 二氯丙烯	0.25-80	0.5417	9.8	0.25	0.254	0.077
1,2,3- 三氯苯	0.25-80	0.7801	9.0	0.25	0.238	0.081
1,2,3- 三氯丙烷	0.25-80	0.3245	8.1	0.25	0.279	0.072
1,2,4- 三氯苯	0.25-80	0.8484	8.3	0.25	0.245	0.095
1,2,4- 三甲基苯	0.25-80	2.5387	3.4	0.25	0.264	0.024
1,2- 二溴 -3- 氯丙烷	0.25-80	0.2728	13.7	0.25	0.31	0.168
1,2- 二溴甲烷	0.25-80	0.3503	3.5	0.25	0.257	0.083
1,2- 二氯苯	0.25-80	1.3153	2.5	0.25	0.246	0.039
1,2- 二氯乙烷	0.25-80	0.4572	5.2	0.25	0.249	0.062
1,2- 二氯乙烷 -d4	0.5-80	0.3790	8.1			
1,2- 二氯乙烯 (总)	0.25-80	0.3943	8.7			
1,2- 二氯丙烷	0.25-80	0.3547	3.5	0.25	0.262	0.053
1,3,5- 三甲基苯	0.25-80	2.6269	2.7	0.25	0.256	0.057
1,3- 二氯苯	0.25-80	1.4055	2.8	0.25	0.273	0.037
1,3- 二氯丙烷	0.25-80	0.5321	5.7	0.25	0.252	0.059
1,4- 二氯苯	0.25-80	1.4309	4.7	0.25	0.266	0.041
1,4- 二恶烷	0.5-60	0.0063	14.0	0.25	5.107	3.531
1- 氯己烷	0.5-80	0.5254	7.3	0.25	0.311	0.094
2,2- 二氯丙烷	0.25-80	0.5231	9.9	0.25	0.257	0.11
2- 丁酮	1-80	0.3475	11.7	0.25	0.558	0.197
2- 氯乙基乙烯基醚	0.25-80	0.2386	3.0	0.25	0.261	0.092
2- 氯甲苯	0.25-80	2.1159	2.7	0.25	0.27	0.036
2- 己酮	0.5-80	0.4861	8.7	0.25	0.283	0.064
4- 溴氟苯	0.5-80	0.4751	5.9			
4- 氯甲苯	0.25-80	2.4325	2.8	0.25	0.265	0.044
4- 甲基 -2- 戊酮	0.25-80	0.5944	6.3	0.25	0.248	0.081
丙酮	4-80	0.1953	4.0	2	2.38	0.509
丙烯腈	0.25-80	0.2351	3.7	2.5	2.371	0.388
苯	0.25-80	1.4414	3.5	0.25	0.246	0.029
溴苯	0.25-80	0.7458	3.7	0.25	0.268	0.059
溴氯甲烷	1-80	0.1922	5.7	0.25	0.276	0.093
一溴二氯甲烷	0.25-80	0.4627	4.9	0.25	0.242	0.049
三溴甲烷	0.25-80	0.3102	3.7	0.25	0.226	0.054
溴甲烷	0.5-80	0.2256	14.3	0.25	0.29	0.243
二硫化碳	0.25-80	1.0005	6.2	0.25	0.295	0.083

表 2. 方法 8260B 的方法检出限 (MDL) 和平均相对响应因子 (续表)

	校准溶液			方法检出限		
	范围 (µg/L)	RRF 均值	% RSD	加标量 (µg/L)	均值 (µg/L)	MDL (µg/L)
四氯化碳	0.25-80	0.5297	6.3	0.25	0.26	0.083
氯苯	0.25-80	0.9817	3.1	0.25	0.25	0.045
氯乙烷	0.25-80	0.2199	6.7	0.25	0.249	0.204
氯仿	0.5-80	0.6293	3.9	0.25	0.254	0.05
一氯甲烷	0.25-80	0.4123	11.2	0.25	0.231	0.099
顺式 -1,2- 二氯乙烯	0.25-80	0.4298	11.9	0.25	0.261	0.031
顺式 -1,3- 二氯丙烯	0.25-80	0.5437	7.3	0.25	0.234	0.028
二溴氯甲烷	0.25-80	0.3671	4.6	0.25	0.247	0.063
二溴氟甲烷	0.5-80	0.3620	8.7			
二溴甲烷	0.25-80	0.2397	9.7	0.25	0.24	0.055
二氯二氟甲烷	0.25-80	0.3762	11.5	0.25	0.189	0.059
乙苯	0.25-80	0.5501	7.2	0.25	0.262	0.03
六氯丁二烯	0.25-80	0.4819	7.6	0.25	0.244	0.156
异丙苯	0.25-80	1.7766	3.2	0.25	0.246	0.039
二氯甲烷	0.25-80	0.3450	5.8	0.25	0.28	0.124
甲基 -t- 丁基 - 醚	0.25-80	0.9668	5.5	0.25	0.253	0.041
萘	0.25-80	2.7184	6.3	0.25	0.244	0.081
正丁基苯	0.25-80	2.6290	4.3	0.25	0.245	0.054
正丙基苯	0.25-80	3.8186	2.5	0.25	0.262	0.043
对 - 异丙基甲苯	0.25-80	2.8715	4.7	0.25	0.255	0.033
仲丁基苯	0.25-80	3.4331	2.9	0.25	0.257	0.038
苯乙烯	0.25-80	1.0517	2.8	0.25	0.247	0.039
t- 丁酮	0.25-80	0.1255	8.7	6.25	6.191	1.033
t- 丁基苯	0.25-80	2.2963	4.0	0.25	0.258	0.05
四氯乙烯	0.25-80	0.4324	5.1	0.25	0.259	0.044
甲苯	0.25-80	0.8833	4.5	0.25	0.263	0.045
甲苯 -d8	0.5-80	1.3329	3.8			
反式 -1,2 - 二氯乙烯	0.25-80	0.3589	9.6	0.25	0.274	0.033
反式 -1,3- 二氯丙烯	0.25-80	0.4816	7.4	0.25	0.235	0.054
三氯乙烯	0.25-80	0.3991	3.7	0.25	0.257	0.066
三氯氟甲烷	0.25-80	0.5389	6.7	0.25	0.236	0.074
三氯三氟乙烷	0.25-80	0.3015	7.0	0.25	0.185	0.23
三氟甲苯	0.5-80	0.6530	6.3			
乙酸乙酯	0.5-80	0.7542	6.3	0.25	0.248	0.055
氯乙烯	0.25-80	0.3782	6.9	0.25	0.205	0.125
二甲苯 (邻)	0.25-80	0.6415	3.4	0.25	0.262	0.062
二甲苯 (间 / 对)	0.25-80	0.6775	2.2	0.5	0.513	0.067
二甲苯 (总)	0.5-80	0.6655	2.6			



更多信息：

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

Email:

[info\\_agilent@agilent.com](mailto:info_agilent@agilent.com)

联系本地客服中心：

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

本资料中的信息、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，2012  
2012年8月14日，中国印刷  
5991-0896CHCN



**Agilent Technologies**