

解决方案|气相色谱-质谱法测定样品中半挥发性有机物

在当今社会，环境污染问题日益严峻，成为了全球关注的焦点。各种化学物质的排放和泄漏，对生态系统和人类健康构成了潜在威胁。其中，半挥发性有机物（SVOCs）的存在尤为引人关注。这类化合物大多数呈油状液体，易持久存在于空气、水、土壤等环境中，能远距离传输，同时具备一定的毒性及生物累积性。它们主要包括二噁英类、多环芳烃、有机农药类、氯代苯类、多氯联苯类、吡啶类等。这些物质可能导致癌症、生殖系统损害、免疫系统紊乱等严重健康问题。例如，长期处于含有 SVOCs 的环境中，可能会增加患肺癌、乳腺癌等恶性肿瘤的风险。



准确测定样品中半挥发性有机物的含量和种类至关重要。这不仅有助于我们了解环境污染的程度和来源，为制定有效的治理策略提供依据，还能保障公众的健康和安全。本文介绍了气相色谱-质谱法测定样品中半挥发性有机物，并经过检测条件的优化，建立了东西分析 GC-MS 3200 型气质联用仪测定的方法，可供相关人员参考。



GC-MS 3200 型气相色谱-质谱联用仪

实验部分

仪器设备与试剂

GC-MS 3200 型气相色谱-质谱联用仪；

顶空进样器；

分析天平；

仪器条件

气相色谱仪条件

色谱柱：Equity-5（30m×0.25mm×0.25 μ m）毛细管柱；

载气：高纯氦气；

进样方式：恒流模式，柱流量：1mL/min，分流进样；

进样量：1 μ L；

分流比：30:1；

分流流量：30mL/min；

进样口：280℃；

柱箱温度：35℃保持 5min，以 20℃/min 升至 95℃保持 0.5min，再以 5℃/min 升至 205℃保持 0.5min,再以 10℃/min 升至 255 ℃保持 0.5min,再以 5℃/min 升至 300℃保持。

质谱仪条件

离子源：EI 源，电子能量:70eV，离子源:230℃，接口温度：290℃；

扫描方式：全扫描；

扫描范围：35u~450u；

溶剂峰时间：4min；

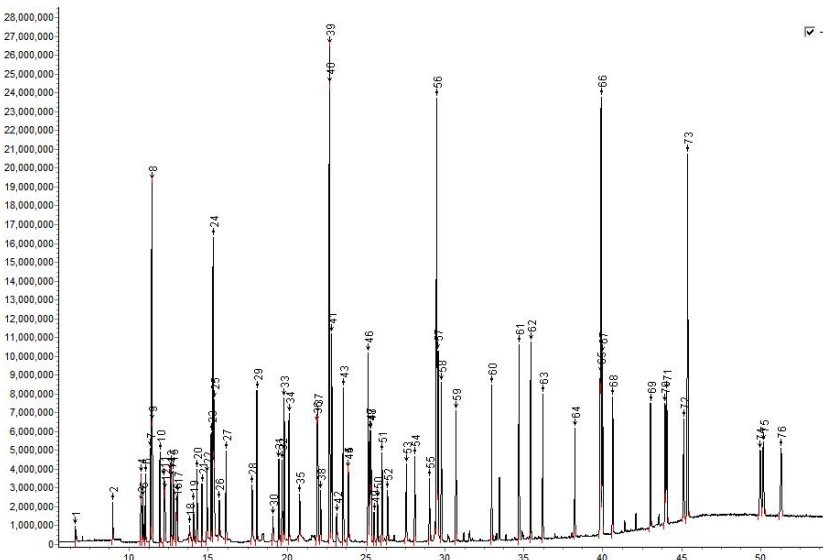
采集时间：4min-55min；

扫描周期：0.5s，倍增器高压：700V。

实验结果

样品谱图

半挥发性有机物样品全扫描谱图



半挥发性有机物样品 GC-MS 定性结果

序号	英文名称	中文名称	保留时间	CAS 号	相似度 /%	分子式
1	N-Nitrosodimethylamine	N-亚硝基二甲胺	6.6	62-75-9	93	C ₂ H ₆ N ₂ O
2	Phenol, 2-fluoro-	2-氟苯酚	8.97	367-12-4	92	C ₆ H ₅ FO
3	Phenol-d6-	苯酚-D6	10.72	13127-88-3	83	C ₆ D ₆ O
4	Phenol	苯酚	10.75	108-95-2	93	C ₆ H ₅ O
5	Bis(2-chloroethyl) ether	双（2-氯乙基）醚	10.87	111-44-4	93	C ₄ H ₈ Cl ₂ O
6	Phenol, 2-chloro-	2-氯苯酚	11.02	95-57-8	95	C ₆ H ₅ ClO
7	Benzene, 1,3-dichloro-	1,3-二氯苯	11.33	541-73-1	94	C ₆ H ₄ Cl ₂
8	1,4-Dichlorobenzene-D4	1,4-二氯苯-D4	11.43	3855-82-1	88	C ₆ D ₄ Cl ₂
9	Benzene, 1,4-dichloro-	1,4-二氯苯	11.46	106-46-7	93	C ₆ H ₄ Cl ₂
10	Benzene, 1,2-dichloro-	1,2-二氯苯	11.94	95-50-1	92	C ₆ H ₄ Cl ₂
11	Phenol, 2-methyl-	2-甲基苯酚	12.23	95-48-7	92	C ₇ H ₈ O
12	Bis(2-chloro-1-methylethyl) ether	二(2-氯异丙基)醚	12.26	108-60-1	85	C ₆ H ₁₂ Cl ₂ O
13	p-Cresol	4-甲基苯酚	12.63	106-44-5	94	C ₇ H ₈ O

序号	英文名称	中文名称	保留时间	CAS 号	相似度 /%	分子式
14	1-Propanamine, N-nitroso-N-propyl-	N-亚硝基二正丙胺	12.66	621-64-7	93	C ₆ H ₁₄ N ₂ O
15	Ethane, hexachloro-	六氯乙烷	12.8	67-72-1	89	C ₂ Cl ₆
16	Nitrobenzene-D5	硝基苯-D5	12.99	4165-60-0	88	C ₆ D ₅ NO ₂
17	Benzene, nitro-	硝基苯	13.04	98-95-3	96	C ₆ H ₅ NO ₂
18	Isophorone	异佛尔酮	13.81	78-59-1	89	C ₉ H ₁₄ O
19	Phenol, 2-nitro-	2-硝基苯酚	14.07	88-75-5	92	C ₆ H ₅ NO ₃
20	Phenol, 2,4-dimethyl-	2,4-二甲基苯酚	14.29	105-67-9	93	C ₈ H ₁₀ O
21	Methane, bis(2-chloroethoxy)-	二（2-氯乙氧基）甲烷	14.61	111-91-1	93	C ₅ H ₁₀ Cl ₂ O ₂
22	Phenol, 2,4-dichloro-	2,4-二氯苯酚	14.93	120-83-2	92	C ₆ H ₄ Cl ₂ O
23	Benzene, 1,2,4-trichloro-	1,2,4-三氯苯	15.19	120-82-1	92	C ₆ H ₃ Cl ₃
24	Naphthalene-D8	萘-D8	15.32	1146-65-2	89	C ₁₀ D ₈
25	Naphthalene	萘	15.38	91-20-3	96	C ₁₀ H ₈
26	p-Chloroaniline	4-氯苯胺	15.7	106-47-8	93	C ₆ H ₆ ClN
27	1,3-Butadiene, 1,1,2,3,4,4-hexachloro-	六氯丁二烯	16.14	87-68-3	91	C ₄ Cl ₆
28	Phenol, 4-chloro-3-methyl-	4-氯-3-甲基苯酚	17.79	59-50-7	90	C ₇ H ₇ ClO
29	Naphthalene, 2-methyl-	2-甲基萘	18.09	91-57-6	91	C ₁₁ H ₁₀
30	Hexachlorocyclopentadiene	六氯环戊二烯	19.1	77-47-4	87	C ₅ Cl ₆
31	Phenol, 2,4,6-trichloro-	2,4,6-三氯苯酚	19.47	88-06-2	93	C ₆ H ₃ Cl ₃ O
32	Phenol, 2,4,5-trichloro-	2,4,5-三氯苯酚	19.69	95-95-4	89	C ₆ H ₃ Cl ₃ O
33	1,1'-Biphenyl, 2-fluoro-	2-氟联苯	19.82	321-60-8	92	C ₁₂ H ₉ F
34	Naphthalene, 2-chloro-	2-氯萘	20.13	91-58-7	93	C ₁₀ H ₇ Cl
35	o-Nitroaniline	2-硝基苯胺	20.79	88-74-4	89	C ₆ H ₆ N ₂ O ₂
36	Dimethyl phthalate	邻苯二甲酸二甲酯	21.9	131-11-3	92	C ₁₀ H ₁₀ O ₄
37	Acenaphthylene	芴烯	21.94	208-96-8	94	C ₁₂ H ₈
38	Benzene, 2-methyl-1,3-dinitro-	2,6-二硝基甲苯	22.13	606-20-2	92	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄
39	Acenaphthene-d10	芴-D10	22.69	15067-26-2	81	C ₁₂ D ₁₀
40	m-Nitroaniline	3-硝基苯胺	22.69	99-09-2	75	C ₆ H ₆ N ₂ O ₂
41	Acenaphthene	芴	22.82	83-32-9	93	C ₁₂ H ₁₀
42	Phenol, 2,4-dinitro-	2,4-二硝基苯酚	23.15	51-28-5	90	C ₆ H ₄ N ₂ O ₅
43	Dibenzofuran	二苯并呋喃	23.56	132-64-9	93	C ₁₂ H ₈ O
44	Benzene, 1-methyl-2,4-dinitro-	2,4-二硝基甲苯	23.88	121-14-2	90	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄
45	Phenol, 4-nitro-	4-硝基苯酚	23.88	100-02-7	71	C ₆ H ₅ NO ₃
46	Fluorene	芴	25.14	86-73-7	89	C ₁₃ H ₁₀
47	Diethyl Phthalate	邻苯二甲酸二乙酯	25.24	84-66-2	90	C ₁₂ H ₁₄ O ₄
48	Benzene, 1-chloro-4-phenoxy-	4-氯苯苯基醚	25.31	7005-72-3	94	C ₁₂ H ₉ ClO
49	p-Nitroaniline	对硝基苯胺	25.51	100-01-6	89	C ₆ H ₆ N ₂ O ₂
50	Phenol, 2-methyl, 4,6-dinitro-	4,6-二硝基-2-甲基苯酚	25.72	534-52-1	91	C ₇ H ₆ N ₂ O ₅
51	Azobenzene	偶氮苯	26.01	103-33-3	93	C ₁₂ H ₁₀ N ₂
52	Phenol, 2,4,6-tribromo-	2,4,6-三溴苯酚	26.36	118-79-6	88	C ₆ H ₃ Br ₃ O
53	Benzene, 1-bromo-4-phenoxy-	4-溴二苯基醚	27.55	101-55-3	90	C ₁₂ H ₉ BrO
54	Benzene, hexachloro-	六氯苯	28.1	118-74-1	91	C ₆ Cl ₆
55	Phenol, pentachloro-	五氯苯酚	29.02	87-86-5	89	C ₆ HCl ₅ O
56	Phenanthrene-D10	菲-D10	29.48	1517-22-2	90	C ₁₄ D ₁₀
57	Phenanthrene	菲	29.56	85-01-8	89	C ₁₄ H ₁₀
58	Anthracene	蒽	29.77	120-12-7	90	C ₁₄ H ₁₀
59	Carbazole	咔唑	30.7	86-74-8	88	C ₁₂ H ₉ N
60	Dibutyl phthalate	邻苯二甲酸二正丁酯	32.96	84-74-2	94	C ₁₆ H ₂₂ O ₄
61	Fluoranthene	荧蒽	34.7	206-44-0	90	C ₁₆ H ₁₀
62	Pyrene	芘	35.44	129-00-0	89	C ₁₆ H ₁₀
63	p-Terphenyl-d14	4,4'-三联苯-d14	36.2	1718-51-0	86	C ₁₈ D ₁₄
64	Benzyl butyl phthalate	邻苯二甲酸丁基苄基酯	38.23	85-68-7	92	C ₁₉ H ₂₀ O ₄
65	Benz[a]anthracene	苯并（a）蒽	39.83	56-55-3	91	C ₁₈ H ₁₂
66	Chrysene-D12	屈-D12	39.89	1719-03-5	86	C ₁₈ D ₁₂
67	Chrysene	屈	39.97	218-01-9	88	C ₁₈ H ₁₂
68	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	邻苯二甲酸二（2-二乙基己基）酯	40.62	117-81-7	92	C ₂₄ H ₃₈ O ₄
69	Di-n-octyl phthalate	邻苯二甲酸二正辛酯	43.03	117-84-0	90	C ₂₄ H ₃₈ O ₄
70	Benzo[b]fluoranthene	苯并（b）荧蒽	43.94	205-99-2	92	C ₂₀ H ₁₂
71	Benzo[k]fluoranthene	苯并（k）荧蒽	44.04	207-08-9	94	C ₂₀ H ₁₂
72	Benzo[a]pyrene	苯并（a）芘	45.13	50-32-8	90	C ₂₀ H ₁₂
73	Perylene-D12	芘-D12	45.37	1520-96-3	84	C ₂₀ D ₁₂
74	Indeno[1,2,3-cd]pyrene	茚并（1,2,3-cd）芘	49.98	193-39-5	90	C ₂₂ H ₁₂
75	Dibenz[a,h]anthracene	二苯并（ah）蒽	50.17	53-70-3	89	C ₂₂ H ₁₄
76	Benzo[ghi]perylene	苯并（ghi）芘	51.31	191-24-2	89	C ₂₂ H ₁₂

注：详细定性结果见其定性报告

实验总结

本文利用国产 GC-MS3200 型气相色谱-质谱联用仪，建立了一种用于检测样品中半挥发性有机物的分析方法。通过应用 Equity-5（30m×0.25mm×0.25 μm）

毛细管柱进行组分分离,并借助 NIST 谱库进行检索定性,共识别出 76 种化合物。

结果显示,该方法具有良好的重复性和准确性,能够满足对样品中半挥发性有机物的检测需求。