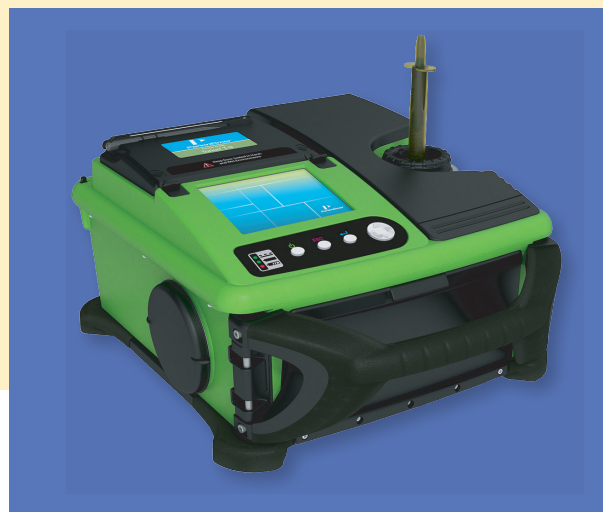


# 现场便携式 GC/MS 优势 介绍—用于饮用水所含土 臭素的快速采样与检测

## Gas Chromatography/ Mass Spectrometry



Torion T-9 Portable GC/MS

多年来，众多类型的分析仪器皆已采用简化设计，成为用于现场检验的便携式或手持式设备，如 XRF、LIBS、Raman、FT-IR 和 NIR 分析仪等。然而，在保持实验室分析性能的同时，将气相色谱仪 / 质谱仪 (GC/MS) 简化为现场便携式配置却是一项更大的挑战。以往的大多数研究都采用了直接进样的方法，这种方法无需任何类型的样品制备或进样配件。因此，如果样品需要复杂的前处理，或特殊的进样方式，那么现场便携式仪器的实际价值将会大打折扣。

本文介绍了利用新型现场便携式 GC/MS 系统 (Torion® T-9, PerkinElmer Inc., Shelton, CT) 快速识别和检测饮用水中土臭素的方法和结果，样品的一般分析时间不到 10 分钟。

### Torion T-9 GC/MS 技术

已有公开的文献资料<sup>1, 2</sup>就系统本身及其现场分析的适用性进行探讨。但在近期，该系统以低热质(使用直接接触式电阻加热)柱束替换常规毛细管柱，实现了一定程度的系统改善。色谱柱具有更均匀的受热，有效消除了传统色谱柱技术的冷却点，从而可以在高沸点化合物所需的高温 GC 运行条件下，促进半挥发性有机物的色谱分离。

质谱仪采用环形离子阱配置，相较于其他设计，这种设计更容易实现微型化改造。设计独特的离子阱使得捕获体积有所增大，离子计数得以升高，从而实现低噪声水平和良好的灵敏度。离子阱质量分析器经加热升温至 175~210 °C(具体取决于目标分析物)左右，并在真空环境下运行。电极可因此长时间保持清洁，减少了不必要的频繁维护。有关 Torion T-9 GC/MS 技术的详细说明，请参阅参考文献<sup>3</sup>。

### 样品前处理模块

通过使用电池供电的紧凑型采样配件 (SPS-3™, PerkinElmer Inc., Shelton, CT)，可以进一步加强 GC-MS 用于现场检测的能力<sup>4</sup>。快速采样模块的选择包括用于固体样品的固相微萃取 (SPME) 和加热顶空 (HS)；用于气体样品的动态针捕集 (NT)；用于液体样品的吹扫捕集 (P&T) 和热脱附 (TD)，以及添加内标 (IS) 的模块。在某一特定采样地点，样品前处理与分析可能存在各种不同的应用要求，多种多样的配制可以灵活应对各种应用场景。

现在让我们更加详细地了解饮用水中土臭素的测定方法。

## 分析饮用水所含的土臭素

土臭素是一种由各种微生物和细菌产生的有机化合物，具有独特的泥土芳香。土臭素还是甜菜产生土腥味，及下雨时空气中出现强烈泥土气味的主要原因。土臭素由几类微生物产生（如蓝细菌和放线菌），这些微生物死亡时便会释放出土臭素。在以地表水作为供水来源的地区，当地可能会定期出现饮用水口感不佳的情况，这是因为在细菌大量死亡时，土臭素将进入当地的供水体系<sup>5</sup>。从化学方面来看，土臭素是一种分子式为C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O的双环醇，作为萜烷的衍生物，其通常被称为十氢化萜。沸点大约为270℃<sup>6</sup>。

将20 ppt的土臭素加入500 mL水样中，在没有任何预处理步骤的情况下，于环境温度中通过真空泵产生25-35 mL/min的流速，然后在失活不锈钢固相萃取（SPE）吸附管中填充聚二甲基硅氧烷（PDMS）颗粒（尺寸：125~180 μm），借此捕集土臭素。随后通过仪器的热脱附系统将目标分析物转移至PDMS动态针捕集阱中。在200℃环境下，使用氦载气以6 mL/min的速率进行长达10分钟的脱附步骤。在270℃环境下，使用动态针捕集阱进行GC-TMS进样，时长60秒。进样方法的原理图如图1所示。

质谱仪和色谱分离条件分别如表1和2所示。色谱分离的总离子色谱图（TIC）与提取离子色谱图（RIC）如图2所示，展现了母体分子离子与相关土臭素片段的情况，具体由其依照的NIST标准谱图进行确认。反卷积色谱图与质谱图如图3所示，证明仪器的反卷积算法可以很好地分离20 ppt土臭素。根据土臭素校准的统计分析，检出限在ppt水平。

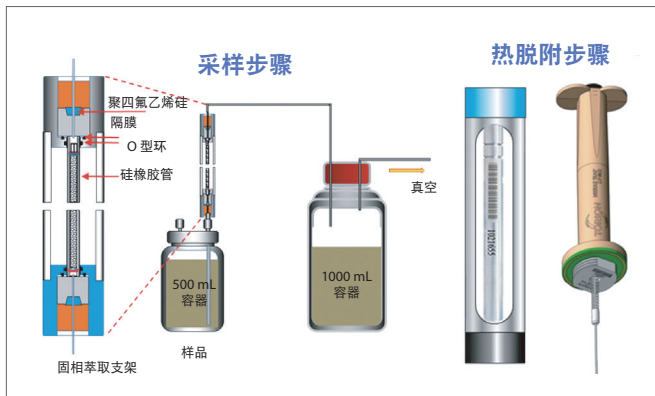


图1、GC/MS分析土臭素的采样程序和热脱附步骤

表1、水中土臭素的质谱仪参数

质谱仪操作条件	
质谱仪	环形离子阱
电离源	EI源
质谱仪操作温度	190℃
质量范围	45-500 amu
分辨率	< 0.5 m/z (300 amu)
质谱仪扫描速率	10-15次/秒
检测器	电子倍增器

表2、土臭素在水中的色谱分离条件

气相色谱分离条件	
进样方式	螺旋线圈注入
进样类型	分流/不分流
分流进样时间	
10:1分流开始	20 s
10:1分流结束	40 s
50:1分流开始	40 s
50:1分流结束	80 s
进样器温度	270℃
输送管线温度	250℃
阱温度	190℃
色谱柱技术 (Restek®, State College, PA)	MXT®-5: 低极性相二苯基二甲基聚硅氧烷; 5 m × 0.1 mm × 4 μm
初始温度/保温时间	50℃(10 s)
升温速率	1℃/s
最终温度/保温时间	300℃(10 s)
载气进口压力	26 psi

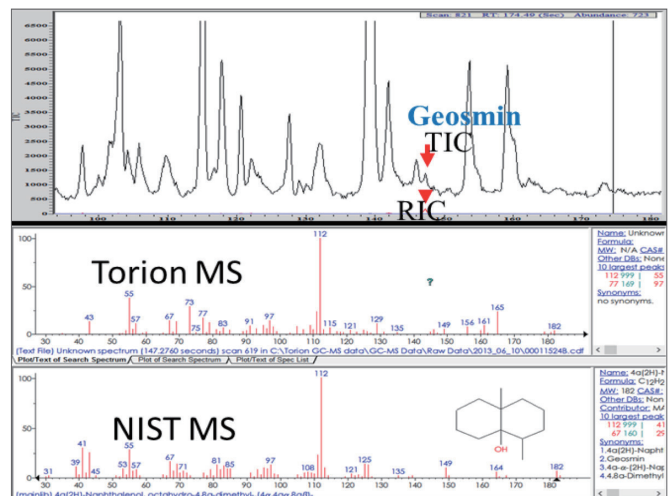


图2、土臭素及其质谱片段在某一水样中的总离子色谱图（TIC）与提取离子色谱图（RIC），由NIST标准谱图进行鉴定与确认。

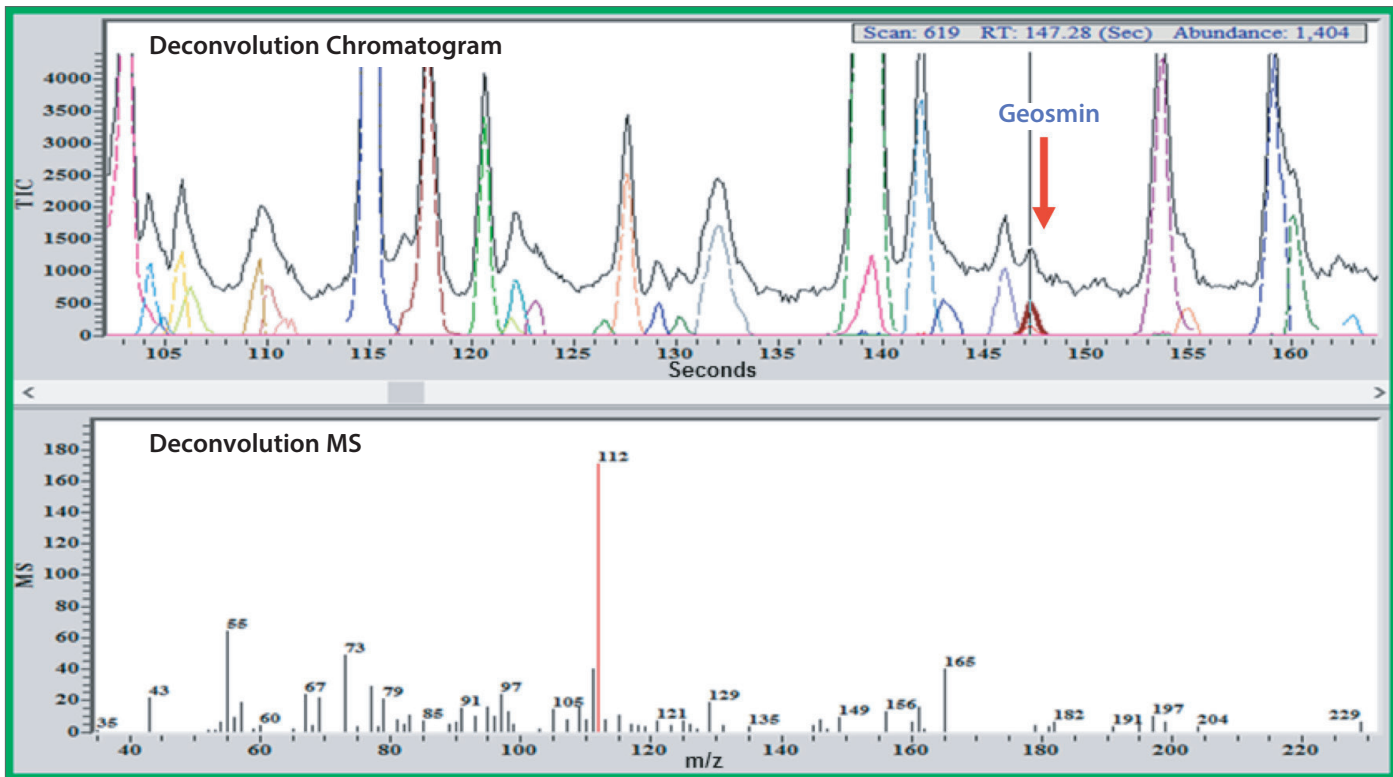


图 3、反卷积色谱图与质谱图，证明仪器的反卷积算法可以很好地分离土臭素。

lution algorithm.

## 结论

在偏远野外地点的恶劣条件下，针对空气、水和固体基质样品中的挥发性与半挥发性有机化合物，痕量水平分析的需求正日益增长。这项研究表明，通过便携式 GC/MS 与快速样品前处理 / 进样技术的结合，目前已可取得实验室级别的仪器性能。这种组合能够基于定量与定性筛选目的开展各类环境分析，为非技术或无经验现场操作人员提供快速、操作性强的解决方案。本文证明，Torion T-9 GC/MS 系统可在 10 分钟内检测并确认饮用水中土臭素的存在 (ppt 水平)。

## 参考文献

1. Hand-Portable Gas Chromatograph-Toroidal Ion Trap Mass Spectrometer (GC-TMS) for Detection of Hazardous Compounds; J. A. Contreras et al., Journal of American Society of Mass Spectrometry, Vol 19, Issue 10, p 1425-14, (2008).
2. Trace Analysis in the Field Using Gas Chromatography-Mass Spectrometry; T. V. Truong et al., Scientia Chromatographica, 6(1):13-26, (2014).
3. Torion T-9 Portable GC/MS Product Note, [https://www.perkinelmer.com/lab-solutions/resources/docs/PRD\\_Torion-T-9-GCMS\\_012311B\\_01.pdf](https://www.perkinelmer.com/lab-solutions/resources/docs/PRD_Torion-T-9-GCMS_012311B_01.pdf).
4. SPS-3 Sample Preparation Module for Torion T-9, [http://www.perkinelmer.com/lab-solutions/resources/docs/PRD\\_Sample\\_Preparation\\_Station\(013095\\_01\).pdf](http://www.perkinelmer.com/lab-solutions/resources/docs/PRD_Sample_Preparation_Station(013095_01).pdf).
5. Geosmin, an Earthy-Smelling Substance Isolated from Actinomycetes; N. N. Gerber and H. A. Lechevalier, Applied Microbiology, Vol. 13, No. 6, (1965).
6. Dehydration of 2-methylisoborneol and Geosmin in the Trace Analysis of Taste-Odorants in Water by Purge-and-Trap Sampling with Gas Chromatography (GC) -Mass Selective (MS) Detection; T. Manickum and W. John, Hydrology Current Research, Vol 2, Issue 3, (2012).

珀金埃尔默企业管理（上海）有限公司  
地址：上海张江高科技园区张衡路1670号  
邮编：201203  
电话：021-60645888  
传真：021-60645999  
[www.perkinelmer.com.cn](http://www.perkinelmer.com.cn)

查看完整的全球办事处名单，请访问[www.perkinelmer.com/ContactUs](http://www.perkinelmer.com/ContactUs)

©2017 PerkinElmer, Inc. 公司版权所有。保留所有权利。PerkinElmer® 是 PerkinElmer, Inc. 公司的注册商标。所有其他商标均为其各自所有者的财产。