

全二维气相色谱-飞行时间质谱法检测汽油中全组份分析报告

1 项目信息

项目名称：全二维气相色谱-飞行时间质谱法测定汽油样品组分

样品名称：汽油

2 实验部分

2.1 主要设备与试剂

东西分析 GC×GC-TOF MS 3300 型全二维气质联用仪、

冰箱、2.0 mL 离心试管、移液枪。

试剂：无

2.2 样品处理

从 10 mL 汽油样品中移取 2.0 mL 放入 2mL 离心试管中，混匀后取 0.1ul 上 GC×GC-TOF MS 分析。

2.4 分析条件

全二维色谱条件：正交二维柱系统由 DB-1 MS 毛细管色谱柱 (30m×0.25mm×0.25μm)、DB-17HT 高温气相色谱柱(3m×0.25mm×1μm) 两部分组成。载气为氦气，流速为 1 mL/min；进样量为 0.1μL，分流进样，分流比为 50:1；进样口温度 250 °C。

一维色谱柱：40°C (10 min) 1.5 °C /min 180°C (2min) 10 °C /min 280°C (5min)

二维色谱柱：50°C (10 min) 1.5 °C /min 190°C (2min) 10 °C /min 290°C (5min)

调制器恒定 250℃，调制器周期16.5s，热喷持续0.5 s。

飞行时间质谱条件：EI电离源，电离电压为70 eV；溶剂延迟时间0 min；离子源温度200℃；传输线温度250℃；质量监测范围为40~550 u，采集速率100谱/s，检测器电压1800 V。

3 实验结果

汽油样品经 GC×GC-TOF/MS 仪器检测，采集的数据由专门的数据后处理软件分析。

后处理软件设置适当的数据分析方法，共识别出汽油样品 TIC 图中 1100 个色谱峰，见图 1。

对识别出的所有色谱峰进行谱库检索匹配定性，定性 1100 个色谱峰，其中，Nist 谱库匹

配度大于 80%的化合物占 30.5%，匹配度大于 70%的化合物占 63.4%，匹配度大于 60%

的化合物占 86.9%，其中烷烃、烯烃、环烷烃及芳香烃共 721 种，含氧、含氮、含硫化合

物共 389 种。TIC 二维等高图见图 2，TIC 二维等高图中呈有规律的分布正构烷烃 C9-C17

标注见图 3，TIC 三维立体图见图 4。由于数据量较大，定性表见附件 excel 表格，归一定

量表见附件 excel 表格，文件名：汽油样品_哈尔滨_定性表_归一定量表_20160909.xls

(软件也可输出 PDF 数据格式)。

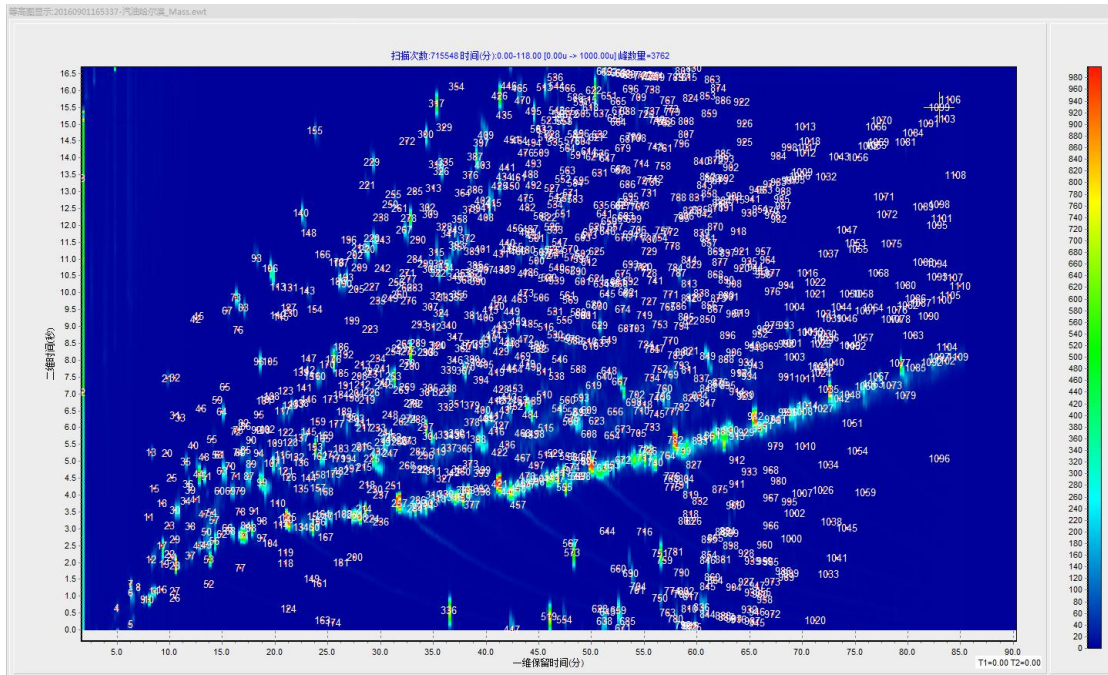


图1 汽油样品二维等高色谱图（已标注所有组分）

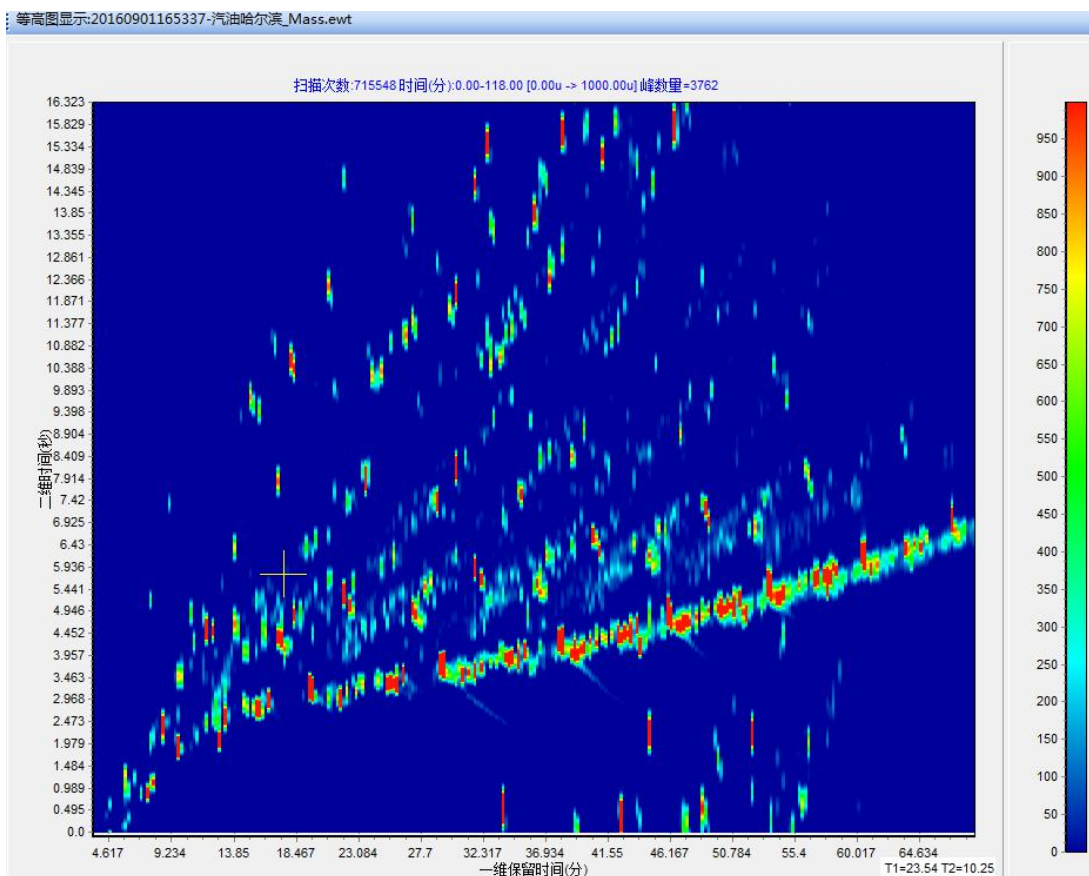


图2 汽油样品二维等高色谱图（设置水平基线在40000）

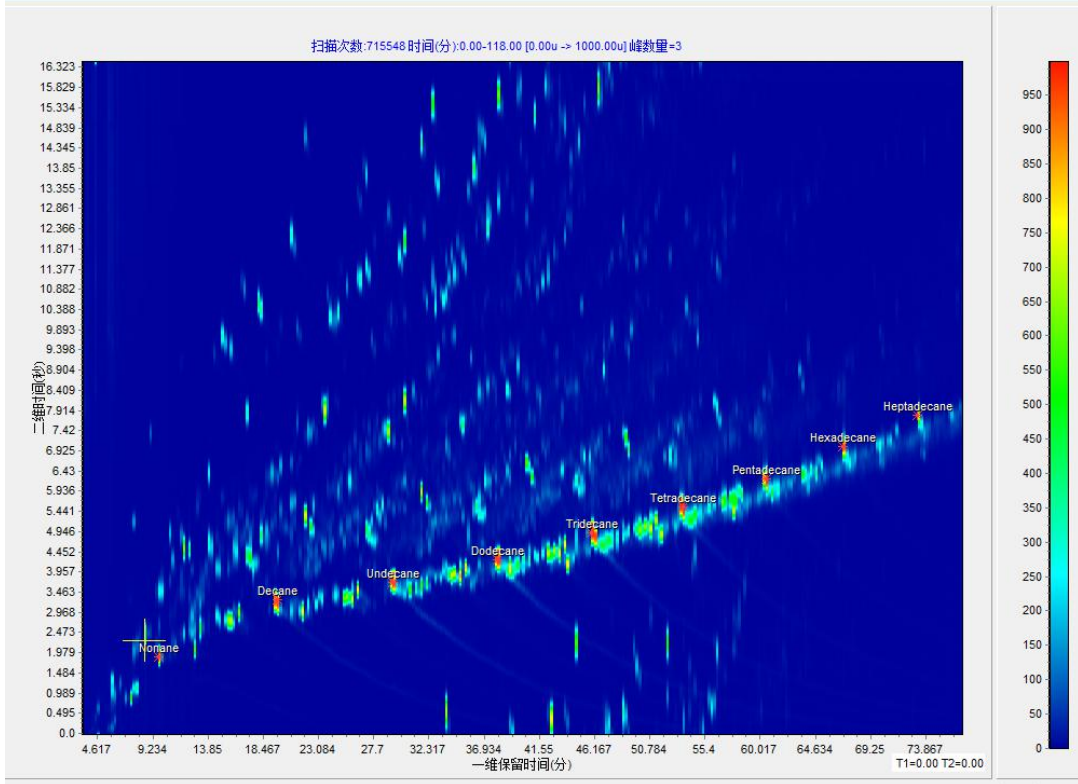


图3 汽油样品正构烷烃 C9-C17 二维等高图标注

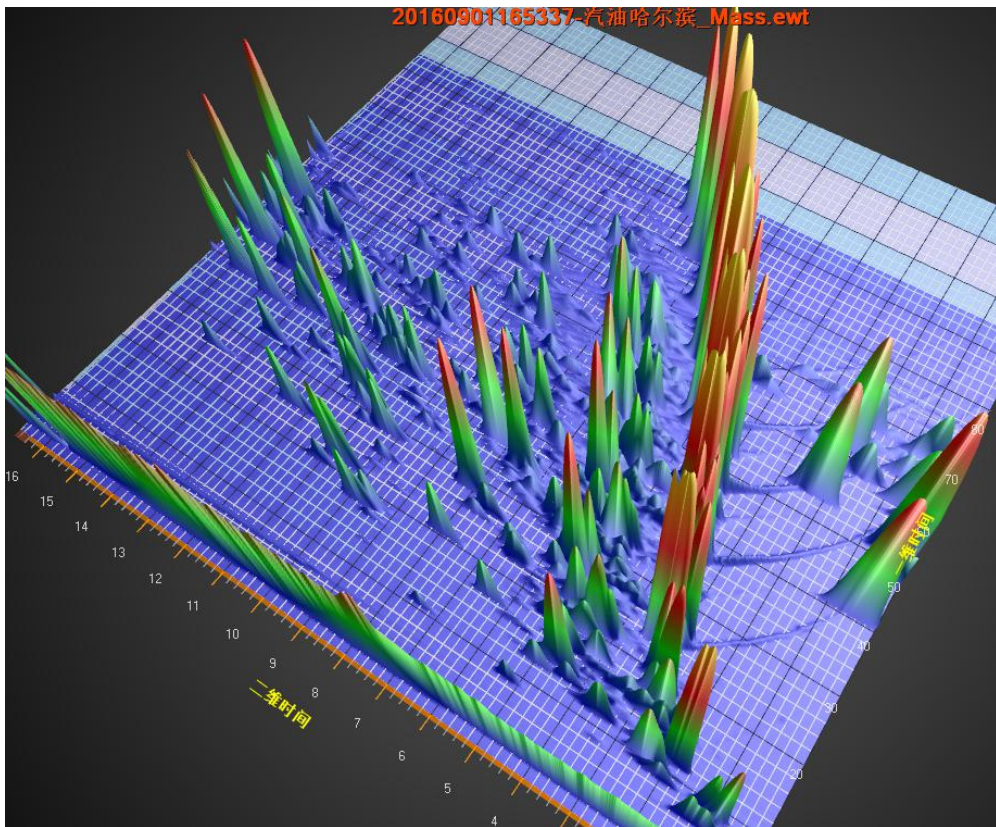


图4 汽油样品三维立体色谱图

4 结果讨论

运用东西分析仪器公司的全二维气相色谱飞行时间质谱分析汽油样品，数据处理软件自动搜索 1110 个组份，匹配度大于 60%的化合物占 86.9%，其中烷烃、烯烃、环烷烃及芳香烃共 721 种，含氧、含氮、含硫化合物共 389 种。组份可以达到基线分离，并在 TIC 谱图上则呈有规律的分布。本数据结果是系统默认的数据处理方法，可根据分析需求，设置不同的数据处理方法或人工识别，可得到相应满意结果。