



简述气相色谱 - 质谱联用技术在水质污染物检测中的应用与实践

卢鹏澄

广州市水务科学研究院有限公司 广州 511490

摘要: 气相色谱 - 质谱联用 (GC-MS) 技术兼具气相色谱的高效分离能力和质谱的高精度鉴定优势, 已成为水中有机污染物定性定量分析的重要手段。本文综述了 GC-MS 技术的工作原理、技术优势及适用范围, 并结合典型应用案例, 对比分析了直接测定法与间接测定法的选择依据, 探讨了技术改进方向与未来发展趋势, 为水环境监测领域的方法优化与技术创新提供参考。

关键词: 气相色谱 - 质谱联用; 水质检测; 挥发性有机物; 半挥发性有机物

中图分类号: X832 **文章编号:** 1671-9212(2025)04-0082-05

文献标识码: A **DOI:** 10.19451/j.cnki.issn1671-9212.2025.04.011

水体污染已成为全球环境治理的重要挑战。我国《地表水环境质量标准》(GB 3838-2002)、《地下水环境质量标准》(GB/T 14848—2017)与《生活饮用水卫生标准》(GB 5749—2022)等多项标准明确要求加强水中痕量有机物监测, 水质检测技术显得尤为重要。天然水体中富含的有机物主要包括腐殖质、蛋白质、碳水化合物、脂类等, 成分复杂、结构多样, 且易受环境因素影响而转化或迁移形成复合污染。传统检测方法存在特异性差、灵敏度不足等问题。气相色谱 - 质谱联用 (GC-MS) 技术凭借高分离效率、高灵敏度和良好选择性等优势, 已成为水环境有机污染物监测的重要方法。本文基于 GC-MS 技术原理, 系统梳理了其在水质检测中的应用现状与技术进展, 以期对相关领域的研究与实践提供一定参考。

1 GC-MS 核心组成与工作原理

GC-MS 主要由气相色谱和质谱两部分组成, 该技术的分析流程为: 样品混合物经气相色谱柱实现组分分离后, 依次导入质谱仪进行检测。其技术

核心组成包括 3 个部分, 分别是气相色谱单元、质谱单元和接口技术。

(1) 气相色谱单元: 试样气体由载气带动进入色谱柱, 由于各组分在性质和结构上的差异, 与固定相发生作用的强弱也有差异, 导致其在色谱柱中的滞留时间不同, 从而按先后顺序从固定相中流出, 实现分离。色谱柱作为核心部件, 主要分为填充柱 (内径 2 ~ 4 mm, 长 1 ~ 10 m, 固定相为颗粒吸附剂) 和毛细管柱 (内径 0.1 ~ 0.7 mm, 长 25 ~ 100 m, 固定相为内壁液膜)^[1]。根据固定相极性, 又可分为非极性、弱极性、中极性和强极性 4 类。分离过程受热力学因素 (组分在两相间的分配系数) 和动力学因素 (传质阻力) 共同影响^[2], 实际应用中需综合考虑目标物的物理性质、基质特性和检测器匹配性等来选择合适的色谱柱。

(2) 质谱单元: 经气相色谱单元分离后的组分进入质谱, 通过电子轰击 (EI) 或化学离子化 (CI) 等方式离子化, 离子在质量分析器 (如四极杆、离子阱、飞行时间等) 中按质荷比 (m/z) 分离, 分离后的离子被检测器 (如电子倍增器) 捕获并转换为电信号。其中, 离子源是质谱仪的心脏, 它决

[收稿日期] 2025-07-08

[作者简介] 卢鹏澄, 女, 1995 年生, 硕士, 主要从事环境中有机污染物分析和研究, E-mail: 1119533427@qq.com。



定离子碎片的种类和数量,离子碎片是后续化合物结构解析和鉴定的基石。GC-MS 常见的离子源包括电子轰击离子源、化学电离源,前者适用于小分子和较稳定的化合物,且广泛适用于挥发性有机物的分析,后者适用于大分子、热不稳定或容易断裂的化合物的分析。

(3) 接口技术:GC-MS 的接口技术是连接气相色谱(近常压)与质谱(高真空)的关键部件,其核心作用是解决压力匹配、高效传输组分并维持色谱分离效果^[3]。接口技术通常分为直接导入型、分流型、喷射型、膜分离型^[4]。其中,直接导入接口是现在众多 GC-MS 的主流选择,其他接口主要用于特殊应用或科研场景。

2 GC-MS 的技术特点

2.1 高灵敏度检测与抗干扰保障

GC-MS 技术能够准确识别并定量水样中浓度极低的化合物,在痕量分析中具有极大优势。以《生活饮用水标准检验方法》(GB/T 5750—2023)为例,其对臭味化合物 2-甲基异莰醇和土臭素(定量限分别达到 2.2 ng/L 和 3.8 ng/L)的检测展现了优异的痕量物质捕获能力。该技术的优势主要源于 4 重技术保障:(1) 高效毛细管柱提供初步分离基础;(2) 高能离子源确保痕量物质的高效电离;(3) 高精度质量分析器通过精确筛选特定质荷离子克服基质干扰;(4) 多级质量扫描功能保障宽浓度范围的定量准确性。这些特性共同构成了 GC-MS 技术在水质检测中对复杂化合物分析的技术优势,为痕量污染物的精准检测提供了可靠解决方案。

2.2 多组分同步分析

GC-MS 技术对复杂体系具有并行分析的能力,从而提高检测效率,主要体现在 3 个方面:(1) 在单位时间内可以完成多种化合物的检测,比如《水质 挥发性有机物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法》(HJ 639—2012)方法中表示仅 30 min 就能完成 62 种化合物(包括内标和替代物)的测定;(2) GC-MS 技术通常可以对多个样品进行连续分

析,尤其在顶空、固相微萃取、吹扫捕集等 3 种进样方式上还可以利用前一个样品的分析时间去完成下一个样品的前处理,进一步提高工作效率;

(3) 样品完成检测后利用配套软件可以快速进行定性和定量分析。这种高效性使其在环境突发事件(如化工泄漏、水体污染事故)中能够快速锁定污染物种类与浓度,为应急决策提供关键数据支撑,显著提升环境风险防控的响应速度。

2.3 定性与定量同步分析

传统气相色谱技术仅能通过保留时间匹配和单标样品比对实现化合物鉴定,然而复杂水质样品中组分共流出现象普遍,重叠峰的定性和定量难以解决,方法特异性不足^[5]。而 GC-MS 技术通过“色谱分离-质谱检测”协同机制,实现了定性与定量的同步高效分析。其中,色谱系统借助保留行为差异完成目标物的初步分离,为后续定量提供基础;质谱系统则通过电子轰击源(EI)产生的特征碎片离子、同位素分布及分子离子峰等“指纹信息”,结合美国国家标准技术研究所标准谱库匹配,可实现未知物的初步定性和积分定量,无需单标也无需色谱峰完全分离,且通过选择离子监测(SIM)定量测定,能有效排除基质干扰,进一步提升定量准确性。GC-MS 技术通过“质谱指纹定性-色谱响应定量”同步分析,突破了传统色谱定性依赖标样、定量受重叠峰干扰的局限,在复杂水质分析中展现出独特优势,为复杂水质中痕量污染物的精准识别与含量测定提供了更高效的技术手段。

2.4 多领域应用与智能化发展

GC-MS 技术凭借其卓越的分离能力和精准的检测性能,在环境监测、食品安全、化工生产、材料科学、能源开发以及生命科学等多个关键领域发挥着不可替代的作用。如在环境监测领域中,它能够高效检测水体、土壤和大气中的有机污染物,如多环芳烃和农药残留,为污染治理提供可靠依据^[6];在食品安全领域,其高灵敏度特性可精准分析食品添加剂、农药残留及非法添加物,保障消费者健康^[1];在化工生产领域,可优化化工生产工艺流程,提高产品质量等^[7]。随着质谱谱库建设持续扩充与智能化数据处理系统深度融合,



GC-MS 技术正逐步向“全自动分析”升级,通过机器学习算法和自动化分析流程的优化,在污染物的精准识别方面可发挥重要价值,这种“硬件性能+软件赋能”的协同发展,将为科学研究和产业创新提供更强大的分析保障。

3 水质检测中 GC-MS 技术适用的污染物类型

GC-MS 技术进样系统和分离系统对样品有两个要求:(1)样品及其目标物质容易气化;(2)目标物质有较好的热稳定性,不容易被加热分解。因此,GC-MS 技术适用于挥发性和半挥发性有机物,以及部分高温稳定的具有较大分子结构的有机物,这类有机物的具体定义及其相关化合物如下。

3.1 挥发性有机物(VOCs)

VOCs 是指标准大气压下沸点在 $50 \sim 260\text{ }^{\circ}\text{C}$ 之间的低分子量有机物的总称,这类有机物化学性质稳定、不易分解、易挥发至空气,也易渗入水层,具有迁移性、持久性和毒性^[8, 9]。通常分为卤代烃(二氯甲烷、四氯化碳、三氯乙烯等),非甲烷碳氢化合物(烷烃、烯烃、炔烃、芳香烃等),含氧有机化合物(酮类、醇类、醚类、酯类、呋喃类等),含氮有机化合物(腈类、胺类等),含硫有机化合物(硫醇类、硫醚类等),有机金属化合物(四乙基铅、二甲基汞、三丁基锡等)等几大类^[8, 10]。

3.2 半挥发性有机物(SVOCs)

SVOCs 是指标准大气压下沸点一般在 $240 \sim 400\text{ }^{\circ}\text{C}$ 之间、蒸汽压在 $10^{-9} \sim 10\text{ Pa}$ 的有机物总称,由于分类依据模糊,经常与 VOCs 有交叉^[8, 10]。SVOCs 主要包括多环芳烃类、多氯联苯类、有机氯农药类、有机磷农药类、硝基苯类、酚类、邻苯二甲酸酯类、二噁英类、多溴联苯类等^[11]。

3.3 特殊污染物

特殊污染物是指沸点在 $300 \sim 500\text{ }^{\circ}\text{C}$ 之间、高温稳定的具有较大分子结构的有机物,这类有机物同样适用 GC-MS 技术,如长链烷烃(四十烷以下)、多环芳烃、三苯基锡、全氟化合物、溴代阻燃剂等,这些特殊的非易挥发性有机物通常需要搭配高温色谱柱或热裂解前处理模块。

4 GC-MS 技术在水质污染物检测中的应用实践

4.1 GC-MS 技术直接测定法的应用实践

热稳定性良好的 VOCs 和 SVOCs 通常可以采用直接进样方式,无需进行衍生化处理。江阳等^[12]建立全自动在线顶空固相微萃取-GC-MS 分析方法,可同时测定生活饮用水中 2-氯酚、2,4-二氯酚、2,4,6-三氯酚和五氯酚,4 种酚类浓度-响应线性关系良好,方法检出限达到 $0.015 \sim 0.060\text{ }\mu\text{g/L}$,平均回收率为 $90.4\% \sim 115\%$ 。王璐等^[8]建立一种吹扫捕集-GC-MS 分析方法,可在 30 min 内完成生活饮用水中 82 种挥发性有机物的测定,方法检出限为 $0.02 \sim 2.69\text{ }\mu\text{g/L}$,相对标准偏差为 $0.29\% \sim 11.48\%$ 。周宇齐等^[11]以二氯甲烷和正己烷为萃取溶剂,建立一种液液萃取-GC-MS 分析方法,可同时测定地下水中 32 种 SVOCs,方法检出限为 $0.001 \sim 0.006\text{ }\mu\text{g/L}$,相对标准偏差为 $2.3\% \sim 14.1\%$ 。

4.2 GC-MS 技术间接测定法的应用实践

在高温下可能发生分解、分子的特殊官能团易与色谱柱固定相发生氢键作用,导致峰型不佳、碎片离子特征性不强的少部分 VOCs 和 SVOCs 需进行衍生化处理,再进样分析。下面以氯代乙酸类消毒副产物、丙烯酰胺、烷基汞测定为例。

(1)氯代乙酸类消毒副产物:二氯乙酸和三氯乙酸是饮用水源中常见的消毒副产物,分子具有强极性羧基,易与色谱柱活性位点相互作用,且羧基属于高活性基团,经过高温进样口可能会发生分解,因此常规分析手段是衍生化处理后进样。郑建峰等^[13]采用液液萃取衍生化技术对饮用水中的二氯乙酸和三氯乙酸进行前处理,用 GC-MS 技术进行分析:先用甲基叔丁基醚溶解水样中的二氯乙酸和三氯乙酸,并加入氯化钠饱和溶液和浓硫酸优化萃取条件,以硫酸甲醇为衍生剂经过水浴加热使二氯乙酸和三氯乙酸与甲醇反应生成更易于检测的衍生物,方法检出限分别为 $0.1\text{ }\mu\text{g/L}$ 和 $0.2\text{ }\mu\text{g/L}$ 。

(2)丙烯酰胺:丙烯酰胺是水处理剂聚丙烯酰胺的原料,分子具有强极性氨基和酰胺基,电子云分布高度不对称,容易吸附于色谱柱固定相而导



致拖峰。丙烯酰胺在一定温度下还会转化为丙烯腈，热稳定性较差。吕康乐等^[14]采用溴化衍生-液液萃取法处理地表水中丙烯酰胺，用三重四极杆 GC-MS 技术测定衍生物 α ， β -二溴丙烯酰胺：在酸性和低温条件下以溴化钾和溴酸钾为溴源发生溴加成反应，生成 α ， β -二溴丙烯酰胺，最后用乙酸乙酯萃取，方法检出限为 0.08 $\mu\text{g/L}$ 。

(3) 烷基汞：汞及其化合物广泛应用于传统和现代工业、化学药物和电子电器，产生的废气、废水和废渣都会将汞污染带到环境中，与其他重金属不同的是无机汞在自然界中可转化为毒性更强的有机汞（主要是甲基汞和乙基汞）。水中烷基汞常以氯化烷基汞的形式存在，氯化烷基汞若采用直接进样方式测定，其气相色谱行为和响应效果都不太好，存在系统吸附和比较严重的峰拖尾现象^[15]，另外无法适应复杂水样分析，归因于质谱响应差，氯化烷基汞直接电离后可能仅产生非特异性碎片，如 $m/z=35/37$ 或 $m/z=215/217$ ，因此用 GC-MS 技术测定烷基汞时需要进行衍生化处理。杨丽莉等^[15]用四丙基硼化钠与烷基汞发生衍生反应，衍生物经正己烷提取后采用 GC-MS 技术进行检测，以 4-溴氟苯为内标定量，该方法在 2 ~ 200 ng/L 范围内线性良好，1 L 水样中甲基汞和乙基汞的检出限可达 1 ng/L 以下。

5 GC-MS 技术在水质污染物检测中的应用展望

随着“双碳”战略与生态环境保护协同推进，水环境监测对检测技术的灵敏度、效率及场景适应性提出了更高要求。GC-MS 技术作为水质有机污染物检测的核心手段，其发展将聚焦三大方向，进一步强化“精准监测—快速响应—风险预警”的全链条支撑能力。

5.1 分析技术的优化整合

多维联用技术通过结合互补性分离与检测技术，利用正交分离提升峰容量，显著增强复杂体系的分析能力。以液相色谱-GC-MS 为例，该技术整合了液相色谱预分离与气相色谱高分辨率的特点，实现了氯氰菊酯 8 种异构体的高效分类^[16, 17]，为

水质中结构相似污染物的区分提供了关键方法。针对水体中痕量污染物[如全氟化合物(PFAS)、内分泌干扰物(EDCs)和药品及个人护理品(PPCPs)]，多维联用技术可克服结构相似性干扰，精准定性定量，大幅提升检测效率。

5.2 仪器性能的突破性升级

微型化便携 GC-MS 设备的技术突破是实现水质污染快速响应的重要方向。当前，便携式 GC-MS 设备的核心挑战在于质谱单元的简化，导致了分辨率与扫描速率下降，难以满足复杂水质中低浓度污染物的检测需求。目前商业化产品虽较少，但已展现应用潜力。典型代表为美国 Inficon 的 HAPSITE ER（重量 42 kg，动态范围达 7 个数量级），可在突发水污染事件中实现现场快速筛查，适用于水污染应急监测与污染溯源^[4]。未来，随着微型离子源（如微型电子轰击源、光电离源）与轻量化真空系统的研发，便携设备将突破“体积—性能”瓶颈，实现 ppb 级污染物的现场精准检测，成为流域巡查、跨境水质监测等场景的常备化工具。

5.3 智能化与自动化深度整合

随着自动化和智能化的深度融合，正推动 GC-MS 技术迈向新高度。一方面全自动前处理与检测系统的整合实现“样品进样—数据输出”的全流程无人化操作，单个样品处理效率显著提升 3 ~ 5 倍，批量检测精度显著优化；另一方面，人工智能技术赋能谱图解析，大幅提升未知污染物识别能力。这种“自动化检测+智能解析”双轮驱动模式，为水质污染的早期预警、趋势预测提供了高效精准的技术支撑，推动水环境监测从“被动响应”向“主动防控”转型。

参考文献

- [1] 邢倩倩, 刘振民, 洪青, 等. 气相色谱-质谱联用技术在食品分析方面的应用进展[J]. 食品与机械, 2023, 39(6): 234 ~ 240.
- [2] 胡坪, 王氢. 仪器分析(第五版)[G]. 北京: 高等教育出版社, 2019.
- [3] 黄超, 张建超, 汪燕, 等. 用于气相色谱-飞行时间



- 质谱联用分析系统的电子轰击源及传输接口研制[J]. 真空科学与技术学报, 2010, 30(5): 524 ~ 528.
- [4] 李晓旭, 刘立鹏, 马乔, 等. 便携式气相色谱-质谱联用仪的研制及应用[J]. 分析化学, 2011, 39(10): 1476 ~ 1481.
- [5] 陈志, 李倩倩, 孙加燕, 等. 色谱图中拖尾峰峰宽及分离度的新计算方法及其应用[J]. 中国医药工业杂志, 2023, 54(9): 1374 ~ 1381.
- [6] 张大为. 新型全自动样品前处理/气相色谱质谱法测定地下水中的 16 种多环芳烃[J]. 广东化工, 2022, 49(17): 190 ~ 194.
- [7] 梁富英. 色谱-质谱联用技术在化工分析中的应用研究[J]. 中国石油和化工标准与质量, 2024, 44(23): 178 ~ 180.
- [8] 王璐, 蔡德玲, 梁宁, 等. 吹扫捕集-气相色谱-质谱法快速测定生活饮用水中 82 种挥发性有机物[J]. 环境卫生学杂志, 2024, 14(6): 514 ~ 519.
- [9] Sarigiannis D A, Karakitsios S P, Gotti A, et al. Exposure to major volatile organic compounds and carbonyls in European indoor environments and associated health risk[J]. Environment International, 2011, 37(4): 743 ~ 765.
- [10] 苏欣, 郑巧鑫, 刘利容, 等. 吹扫捕集-气相色谱-质谱法测定生活用水及塑料水管中 20 种挥发性有机物的含量[J]. 理化检验-化学分册, 2023, 59(6): 720 ~ 725.
- [11] 周宇齐, 杨杰, 宋洲, 等. 液液萃取-气相色谱-质谱法测定地下水中 32 种半挥发性有机化合物[J]. 化学分析计量, 2021, 30(12): 6 ~ 12.
- [12] 江阳, 李九龙, 袁悦, 等. 基于全自动在线顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用技术测定生活饮用水中 4 种氯酚[J]. 环境化学, 2025, 44(1): 131 ~ 139.
- [13] 郑建峰, 郑亚萍. 气相色谱-质谱联用技术测定饮用水中的二氯乙酸和三氯乙酸[J]. 实验室检测, 2024, 2(8): 4 ~ 7.
- [14] 吕康乐, 宋俊密. 溴化衍生-三重四极杆气质联用法测定地表水中丙烯酰胺[J]. 环境监测管理和技术, 2016, 28(2): 55 ~ 56.
- [15] 杨丽莉, 王美飞, 胡恩宇, 等. 衍生化-溶剂提取-气质联用法测定水中痕量烷基汞[J]. 中国测试, 2021, 47(12): 73 ~ 78.
- [16] 陈志凌, 胡家祥, 曹磊. 多维气相色谱-质谱法高灵敏度测定汽油中的含氧化合物[J]. 中国仪器仪表, 2008(9): 79 ~ 81.
- [17] 戚燕, 张楠, 赵旭东, 等. 液相色谱-气相色谱质谱联用法分析氯氰菊酯农药手性异构体[J]. 首都公共卫生, 2024, 18(4): 217 ~ 221.

新成果：一锅法制备腐植酸基抗冻水凝胶

2025 年 1 月, 鲁东大学陈厚教授团队在国际期刊《化学工程杂志》(Chemical Engineering Journal)上发表了一项最新研究成果《基于腐植酸与功能化纤维素纳米晶的抗冻自修复水凝胶柔性传感器》(Humic acid-based anti-freezing and self-healing hydrogel flexible sensors with functional cellulose nanocrystals), 首次将腐植酸天然有机分子与纳米纤维素材料结合, 成功解决了传统水凝胶在极端低温环境下的应用瓶颈, 为腐植酸基功能材料在柔性电子领域的拓展提供关键技术支撑。该研究通过一锅法成功制备了腐植酸基抗冻水凝胶(命名为 P-HPCB 水凝胶)。该水凝胶通过冻融循环将改性纤维素纳米晶(CNCs@BSA)、天然有机腐植酸(HA)、生物质组分 L-脯氨酸(L-P)和聚乙烯醇(PVA)复合。HA 和 L-P 中的 -OH 基团与游离水分子结合, 将水凝胶的凝固点降至 -35.7 °C, 有效解决了低温冻结问题。同时, CNCs@BSA 的加入将 P-HPCB 水凝胶的最大拉伸应力提升至 3.6 MPa, 实现了 86.1% 的自修复效率。该研究为严寒条件下水凝胶柔性传感器的应用提供了理论参考。

(2025 年 7 月 3 日中腐协秘书处 供稿)