

ICS 13.040.20

CCS Z10

团 体 标 准

T/ACEF 000—2000

环境大气半中等挥发性有机物测量技术规范 热脱附全二维气相色谱质谱法

Technical specification for measurement of atmospheric semi-volatile and intermediate volatility organic compounds (S/IVOCs)—Thermal desorption-comprehensive two-dimensional gas chromatography/mass spectrometry method

(征求意见稿)

2000-00-00发布

2000-00-00实施

中 华 环 保 联 合 会 发 布

目 次

前 言	I
1 适用范围	错误！未定义书签。
2 规范性引用文件	错误！未定义书签。
3 术语和定义	错误！未定义书签。
4 测量系统与方法	错误！未定义书签。
4.1 系统组成	错误！未定义书签。
4.2 系统功能	3
4.2.1 大气半/中等挥发性有机物采样系统	3
4.2.2 仪器分析系统	错误！未定义书签。
4.2.3 数据处理系统	错误！未定义书签。
4.3 测量方法	错误！未定义书签。
5 技术要求	4
5.1 采样要求	4
5.1.1 环境适应性要求	4
5.1.2 安全要求	5
5.1.3 性能要求	5
5.1.4 安装要求	6
5.2 仪器分析要求	6
5.2.1 热脱附要求	6
5.2.2 全二维气相色谱要求	6
5.2.3 质谱要求	7
5.3 数据分析要求	7
6 质量控制与质量保证)	8
6.1 采样的质量控制和质量保证	8
6.2 仪器分析的质量控制和质量保证	8
6.3 数据分析的质量控制和质量保证	10
附录 A (资料性) 常用的部分色谱柱示例	11
附录 B (资料性) 标准化合物示例	错误！未定义书签。

前 言

本文件按照 GB/T1.1-2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由北京大学提出。

本文件由中华环保联合会归口。

本文件起草单位：北京大学、北京大学深圳研究生院、中国环境监测总站、浙江省监测中心、南京信息工程大学、南京科略环境科技有限责任公司、上海市环境科学研究院。

本文件主要起草人：郭松、曾立民、陆思华、黄晓锋、刀胥、田旭东、王鸣、陈文泰、黄成、王红丽、宋锴、周琪琦、万子超、胡崑。

环境大气半中等挥发性有机物测量技术规范 热脱附全二

维气相色谱质谱法

1 适用范围

本文件规定了测量环境大气半/中等挥发性有机物的热脱附全二维气相色谱质谱法中，采样、仪器分析、数据处理过程的技术要求和质量控制。

本文件适用于测量环境大气半/中等挥发性有机物的热脱附全二维气相色谱质谱法中，采样系统、仪器分析系统和数据处理系统的应用。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

HJ 93 环境空气颗粒物（PM₁₀ 和 PM_{2.5}）采样器技术要求及检测方法

HJ 194 环境空气质量手工监测技术规范

HJ 583 环境空气 苯系物的测定 固体吸附/热脱附-气相色谱法

HJ 691 环境空气 半挥发性有机物采样技术导则

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

中等挥发性有机物 intermediate-volatility organic compounds

饱和蒸汽浓度在 $10^{2.5} - 10^{6.5} \mu\text{g m}^{-3}$ 之间的有机物统称，其挥发性区间大致相当于 C₁₂ -

C22 正构烷烃。

3.2

半挥发性有机物 semi-volatile organic compounds

饱和蒸汽浓度在 $10^{-0.5} - 10^{2.5} \mu\text{g m}^{-3}$ 之间的有机物统称，其挥发性区间大致相当于 C23 – C32 正构烷烃。

3.3

冷进样系统 cooled injection system

通过制冷（如液氮或电子制冷）将热脱附后的化合物低温聚焦在色谱柱前端的捕集阱，随后再迅速升温脱附形成窄带进样的系统。

3.4

热调制解调器 thermo modulator

通过周期性升温/冷却（调制）将一维色谱柱流出的馏分切割、聚焦并脉冲式注入二维色谱柱实现正交分离的器件。

3.5

老化 thermal conditioning

在载气气流（如 N_2/He ）中将热脱附管程序升温加热至老化温度，使得吸附在填料上的有机物或者与本体键合不稳定的填料分子在高温下解离出来并脱离热吸附管，从而使得填料重新暴露出干净且热稳定的表面用于样品吸附采集。

4 测量系统与方法

4.1 系统组成

大气半/中等挥发性有机物测量系统由采样系统、仪器分析系统和数据处理系统组成。其中：

1) 采样系统由进样系统、颗粒物采集系统、气体采集系统、气路控制系统、数据采集

系统和散热系统组成。颗粒物采集系统由采样膜组成，气体采集系统由吸附管组成。

2) 仪器分析系统由热脱附系统、全二维气相色谱和质谱三部分组成。热脱附系统由热脱附装置、传输线和冷进样系统组成，全二维气相色谱由两维色谱柱和调制解调器组成，质谱由真空系统、离子源、质量检测器和数据采集装置组成。

3) 数据处理系统由积分数据处理单元组成。

4.2 系统功能

4.2.1 大气半/中等挥发性有机物采样系统

大气半/中等挥发性有机物采样系统是实现颗粒态和气态半/中等挥发性有机物同步采集的装置，具有记录采样流量、环境温度和湿度、采样时长等功能，能分别通过石英膜、装填有吸附剂的吸附管分别采集颗粒态和气态组分。采样系统可通过远程控制，在无人值守的情况下自动进行、停止或切换流路采样并记录流量、环境温度和湿度、采样时长等。采样系统设计串联/并联易改装流路。并联流路可实现不间断采集的需求，也可设定采用时间程序固定采集确定时段的样品，串联流路可用于检漏或脱附管的穿透测定。

4.2.2 仪器分析系统

大气半/中等挥发性有机物仪器分析系统是热脱附系统与全二维气相色谱-质谱的耦合系统，能够对环境复杂半/中等挥发性有机物样品进行分离检测。其中热脱附系统能够对捕集于石英膜或吸附剂的有机物进行热脱附，经冷进样系统后导入气相色谱柱。两维气相色谱柱能够对组分进行分离后，随后将其导入质谱电离并检测。

4.2.3 数据处理系统

大气半/中等挥发性有机物数据处理系统主要由积分处理单元组成。积分处理单元是对色谱-质谱数据进行定性定量分析的单元，能够结合色谱、质谱信息进行非靶向和靶向数据分析。

4.3 测量方法

环境大气半/中等挥发性有机物测量方法如下：

1) 将环境大气样品引入采样管路后采用双通道模式进行样品采集，颗粒态采样通道使

用石英膜捕集颗粒态组分，气态采样通道中，气体组分经过特氟龙膜后被吸附管采集。系统采用微机记录采样流量、环境温度和湿度、采样时长等，通过积分自动导出采样体积；

- 2) 样品随后放入热脱附系统的托盘进行热解吸后经冷进样系统后导入全二维气相色谱-质谱系统，被二维气相色谱柱分离后进入质谱电离并被检测。其中气相样品直接被吸附管采样，可直接放入托盘；颗粒相样品用金属铈切成小片后，根据样品污染程度在空管中放入一定数量的小片然后直接上机分析；
- 3) 样品分析结束后通过数据处理系统对色谱-质谱数据进行靶向和非靶向解析，通过色谱的两维保留时间与质谱图进行非靶向和靶向数据的定性定量分析。得到的各有机物质量数据除于该时段采样体积即可换算为该时段该化合物在实际大气中的质量浓度。

5 技术要求

5.1 采样要求

5.1.1 环境适应性要求

大气半/中等挥发性有机物采样系统应能够在以下条件中正常工作：

- 1) 使用环境：室外环境；
- 2) 工作温度：-15 °C – 45 °C；
- 3) 相对湿度：≤ 85%；
- 4) 大气压：60 kPa – 106 kPa；
- 5) 海拔高度：能够在小于或等于 4000 m 海拔下正常工作；
- 6) 供电电压：AC 220 ± 22 V，50 ± 1 Hz；
- 7) 振动：振动幅度 1 mm，振动频率 5 Hz– 150 Hz。

5.1.2 安全要求

大气半/中等挥发性有机物采样系统应设置集成化电源箱，并设有漏电保护装置。

5.1.3 性能要求

5.1.3.1 进样系统

采样不锈钢管需要进行硅烷化惰性处理，采样切割器的性能参数指标应满足 HJ 93、HJ 691 的要求。石英膜后各接头和管路均采用特氟龙（聚四氟乙烯）材质。

5.1.3.2 颗粒物采集系统

颗粒物采集系统需配适石英膜，除钢托内衬外材质均为全特氟龙。

5.1.3.3 气体采集系统

气体采集系统配适填充有固体吸附剂的吸附管，建议内填不少于 200mg 的 2,6-二苯吡喃多孔聚合物 Tenax-TA（60–80 目）吸附剂（或其他等效吸附剂），除吸附管外材质均为全特氟龙。

5.1.3.4 气路控制系统

气路控制模块应满足不同采样流量下的流量波动与流量校准要求，见 HJ 691。并保证气路流量计对水汽应耐受，或配备除水系统。

5.1.3.5 散热系统

散热系统应使样品采集装置温度与室外温度接近，整体温度偏差在 $\pm 5^{\circ}\text{C}$ 以内。

5.1.3.6 数据采集系统

数据采集系统应满足以下要求：

- 1) 能够记录采样温度、湿度、采样时间和其他必要气象参数，具体参见 HJ 194；
- 2) 具有能够实时储存、记录和整理数据的接口；
- 3) 具有能够与远程设备、终端建立连接，实现远程控制和监控及数据传输的接口。

5.1.4 安装要求

大气半/中等挥发性有机物采样系统的安装位置与周围环境要求参见 HJ 691。采样系统采用螺纹旋紧或卡扣紧固的接口固定，同时系统结构应有足够的强度和刚度。

5.2 仪器分析要求

5.2.1 热脱附要求

热脱附应满足以下要求：

- 1) 具有程序升温的热脱附系统（Thermal Desorption System, TDS）单元，热解吸温度应保证使有机物尽可能完全脱附，建议不低于 280 °C，同时温度不宜过高而导致填料的快速流失；
- 2) 具有冷进样系统（CIS），为了减少水汽凝结、进入分离体系，建议冷阱温度设置在零上，衬管充填 Tenax-TA、石英棉或其他等效吸附剂；
- 3) CIS 具有分流/不分流进样口和快速升温功能，在保证最高温度高于热脱附过程中最高温度的情况下，使用尽可能高的升温速率；
- 4) 配备自动进样装置；

5.2.2 全二维气相色谱要求

全二维气相色谱应满足以下要求：

- 1) 具有两根串联的极性不同的色谱柱，建议使用一维非极性/弱极性色谱柱+二维中等极性/极性色谱柱体系（NP 体系），常见色谱柱选择见附录 A；
- 2) 具有程序升温的柱温箱，或配有二维柱专用柱温箱；
- 3) 普通升温方法升温速率通常在 3 – 5 °C min⁻¹，色谱柱最高温建议不低于 280 °C，同时温度不宜过高而导致填料的快速流失；
- 4) 选用液氮或电子制冷，具有热调制解调器，热喷加热模块温度为 350 °C – 450 °C，推荐调制周期为 6 s；

5.2.3 质谱要求

质谱应满足以下要求：

- 1) 具有稳定的接口、真空控制系统、离子源、检测器和数据采集系统；
- 2) 气相色谱和质谱接口的温度建议不低于 280℃；
- 3) 选用电子轰击（EI）做离子源，便于和质谱数据库进行比对，推荐能量为 70 eV；
- 4) 扫描模式为全扫（SCAN）模式，推荐质谱数据扫描范围为 33 –500 amu。

5.3 数据分析要求

数据分析应满足以下要求：

1) 配备 ChromaTOF/GC Image/ChromSpace，或是其他具备谱图预处理与积分处理功能的软件，以及 NIST（National Institute of Standards and Technology）谱库 17 以上版本；

2) 全色谱图段化合物解析基于“四步定性法”：第一步为利用已有标样，将标样两维保留时间和质谱图与样品位置基本相近的化合物进行比对。第二步为根据标准品及其同系物的色谱和质谱行为规律，通过各类化合物在 70 eV 下的断键生成的特征离子碎片，以及该特征离子随着取代基延长的质谱变化规律定性标准品的同系物。第三步为将各个峰的质谱图与 NIST 谱库进行正反向对比，筛选出质谱图反向匹配率大于 700，保留指数偏差小于 100 的化合物作为精确识别的化合物。第四步为对于 NIST 谱库中无法鉴定的物种，若难于通过普通提取离子方法进行鉴别，则根据质谱碎片直接进行有机物类别的划分；

3) 化合物的定量基于（内）外标校准曲线法。对于标准物质，根据定量离子峰体积建立线性方程进行计算；对于（非靶向）半定量物质，使用标准物质中保留时间位置接近且含有相同官能团的标样化合物做替代物，根据替代物的总离子流体积建立线性方程进行计算。

4) 对于所识别出的化合物，根据以下公式实现实际大气浓度的计算：

$$c_i = \frac{R_i - I_i}{S_i \times V} \quad (1)$$

其中， c_i 为实际大气中化合物 i 的浓度(ng/m³)， R_i 为化合物 i 在质谱中的响应值， I_i 和 S_i 分别为化合物 i 定量所选用对应化合物校准曲线的截距和斜率， V 为对应采样时段的采样体积(m³)。

6 质量控制与质量保证

6.1 采样的质量控制和质量保证

采样的质量控制和质量保证主要包括采样流量的校准、采样介质的准备以及样品的采集、保存：

- 1) 采样器气密性良好，定期测试系统气密性；
- 2) 采样器使用前需进行流量校准，具体要求见 HJ 691；
- 3) 定期采集平行样品进行对比，平行样品采集数量见 HJ 691，平行样品偏差在 $\pm 10\%$ 以内；
- 4) 采样前后采集现场空白，现场空白应在定量环节予以扣除；
- 5) 采样管需要在使用前用老化仪完成填料的老化。老化温度应高于样品解吸温度的 20°C 以上，但不能过高而导致填料快速流失。老化为逆采样气流方向，时长为 $1\text{ h} - 2\text{ h}$ ，老化完成后应缓慢降至室温，每批老化样品中需随机抽检 1 根测试老化效果。石英膜应于 550°C 灼烧 5.5 h ，老化后的采样管和灼烧后的石英膜储存于 -20°C 冰箱中；
- 6) 采样管填料压降位于正常范围，填料未失效，定期测试吸附管压降；
- 7) 采样时间的选择应根据采样流量与采样效率决定。对于不同填料的吸附管，在保证足够采样量的同时应控制采样时长避免吸附管的穿透。必要时可串联两根吸附管进行采样，具体串联采样要求见 HJ 583。

6.2 仪器分析的质量控制和质量保证

6.2.1 热脱附

热脱附的质量控制和质量保证主要包括热脱附系统的清理、活化：

- 1) 热脱附系统需要定期使用二氯甲烷清洗后用氮气吹干；
- 2) 铜传输线应定期更换；
- 3) 冷进样系统处的 Tenax TA 衬管使用前需活化至不出杂峰，而后每 $60 - 100$ 个样品需

对衬管进行更换或清洗；

4) 当捕集阱过载或样品污染严重时，需要加热活化。

6.2.2 全二维气相色谱-质谱

全二维气相色谱-质谱的质量控制和质量保证主要包括标定的方式与系统的维护：

1) 全二维气相色谱-质谱系统可使用外标法或内标法实现定量，一般使用内标物定期检查仪器状态的变化，若内标物偏差超过 10%，则需要重新标定；

2) 标样选择应具有代表性和适用性，标样中所含化合物应尽可能涵盖环境大气中半/中等挥发性有机物的化学类别和挥发性范围，确保能够覆盖实际样品中可能存在的化合物，此外标样应当与热脱附-气相色谱质谱联用的分析方法兼容，标样所含化合物示例见附录 B；

3) 标样浓度梯度应覆盖仪器的线性响应范围并与实际大气样品中化合物的浓度范围相匹配，确保在不同浓度下的定量准确性，建议设置至少 5 个浓度梯度，标准曲线各物质回归系数 R^2 应不小于 0.95；

4) 在标准曲线的基础上，应定期进行加标回收率、精密度和仪器检出限的计算，使用不同浓度的标样进行至少 2–3 次平行进样，计算所得的化合物回收率应在 80%–120%之间，相对标准偏差不高于 10%，各物质的质量检出限换算为实际大气浓度不应过高；

5) 标样进样推荐使用填料进样法，将一定量的标样注射于热吸附管填料，使用氮气顺气流方向吹溶剂 10 min 后上机分析。如未吹走溶剂将影响低沸点化合物的峰形；

6) 色谱-质谱联用系统在热脱附系统维护、质谱关机、断电或重启等情况下需要重新标定；

7) 当判断色谱柱有污染情况时，需在升温程序中色谱柱最高柱温以上 20°C（低于色谱柱最高使用温度）下烘烤色谱柱直至去除杂峰；

8) 当二维色谱柱分离效果较差时需要更换二维色谱柱；

9) 质谱部分定期进行维护，灯丝将耗尽时及时停机更换；

10) 整机检测自动进样器、TDS、CIS、热喷加热模块、灯丝、检测器和真空泵的使用寿命和功能状态，并自动记录机时；

11) 对强极性物质（如酸类、硝基胺类物质）的检测，必要时可在热脱附时进行原位衍生化，如在热脱附时选用饱和有衍生剂（如 N-甲基-N-(三甲基硅烷基)三氟乙酰胺）的氦气作为载气。

6.3 数据分析的质量控制和质量保证

数据分析的质量控制和质量保证主要包括定性中的参数要求、定量中的响应值转换：

1) 进行全色谱图段化合物解析时，筛选出质谱图反向匹配率大于 700，保留指数偏差小于 100 的化合物作为精确识别的化合物；

2) 对于半定量的化合物，若该化合物能够精确识别，则在标准化合物中选择含有相同官能团的，且保留时间最接近的化合物作为替代物；若无法精确识别化合物，则选择标准物质中保留时间位置接近且的化合物做替代物；

2) 对于半定量的化合物，若产生共流出现象，需要根据下式进行总离子流的换算：

$$\text{TIC}_{\text{sample, deduced}} = \frac{R_{\text{quantifier, sample}}}{R_{\text{quantifier, NIST}}/\text{TIC}_{\text{NIST}}} \quad (2)$$

其中 $R_{\text{quantifier, sample}}$ 是该物质所测得的特征离子峰强度， $R_{\text{quantifier, NIST}}/\text{TIC}_{\text{NIST}}$ 是 NIST 谱库中该物质特征离子峰强度在总离子流中的占比。将换算后得到的总离子流代入标准曲线进行定量；

3) 在定性、定量时需要扣除 Tenax-TA 填料和柱流失。

附录 A

(资料性)

常用的部分色谱柱示例

热脱附全二维气相色谱质谱法测定环境大气半/中等挥发性有机物中，常用的部分一维色谱柱和二维色谱柱示例见表 A.1。

表 A.1 常用的部分一维色谱柱和二维色谱柱示例

色谱柱极性	填料
一维色谱柱	
非极性	100% 聚甲基硅氧烷
弱极性	95%聚甲基硅氧烷/ 5% 聚苯基硅氧烷
中等极性	6%聚氰丙基苯基硅氧烷/94%聚甲基硅氧烷
中等极性	14%聚氰丙基苯基硅氧烷/ 86%聚甲基硅氧烷
极性	100%聚乙二醇(PEG)
二维色谱柱	
非极性	100% 聚甲基硅氧烷
中等极性	50%聚甲基硅氧烷/50%聚苯基硅氧烷
极性	100%聚乙二醇(PEG)

附 录 B
(资料性)
标准化合物示例

环境大气半/中等挥发性有机物测定选用的部分标准化合物示例见表 B.1, 样品英文命名为 NIST Chemistry WebBook 库中英文名。

表 B.1 环境大气半/中等挥发性有机物测定选用的部分标准化合物示例

化合物英文名	化合物中文名	类别	CAS 号
Benzoic acid	苯甲酸	酸	65-85-0
Heptanoic acid	庚酸	酸	111-14-8
Phthalic anhydride	邻苯二甲酸酐	酸	85-44-9
Undecanoic acid	十一酸	酸	112-37-8
Octanal	辛醛	醛	124-13-0
Nonanal	壬醛	醛	124-19-6
Decanal	癸醛	醛	112-31-2
Citral	柠檬醛	醛	5392-40-5
Dodecanal	十二醛	醛	112-54-9
Benzyl alcohol	苯甲醇	醇	100-51-6
1-Hexanol, 2-ethyl-	2-乙基-1-己醇	醇	104-76-7
Phenylethyl Alcohol	苯乙醇	醇	60-12-8
1-Dodecanol	十二醇	醇	112-53-8
Linalool	芳樟醇	醇	78-70-6
Citronellol	香茅醇	醇	106-22-9
Caprolactam	己内酰胺	酰胺	105-60-2
Hexadecanamide	十六酰胺	酰胺	629-54-9
Acetic acid, hexyl ester	乙酸己酯	酯	142-92-7
Acetic acid, phenylmethyl ester	乙酸苄酯	酯	140-11-4
Benzeneacetic acid, ethyl ester	苯乙酸乙酯	酯	101-97-3
Acetic acid, 2-phenylethyl ester	乙酸苯乙酯	酯	103-45-7
Linalyl acetate	乙酸芳樟酯	酯	115-95-7
Dimethyl phthalate	邻苯二甲酸二甲酯	酯	131-11-3
Diethyl Phthalate	邻苯二甲酸二乙酯	酯	84-66-2
Benzyl Benzoate	苯甲酸苄酯	酯	120-51-4
Dibutyl phthalate	邻苯二甲酸二丁酯	酯	84-74-2
Benzyl butyl phthalate	邻苯二甲酸丁苄酯	酯	85-68-7
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	己二酸二(2-乙基己基)酯	酯	103-23-1

续表 B.1 环境大气半/中等挥发性有机物测定选用的部分标准化合物示例

化合物英文名	化合物中文名	类别	CAS 号
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯	酯	117-81-7
Di-N-octyl phthalate	邻苯二甲酸二正辛酯	酯	117-84-0
5-Hepten-2-one, 6-methyl-	6-甲基-5-庚烯-2-酮	酮	110-93-0
Acetophenone	苯乙酮	酮	98-86-2
Isophorone	异佛尔酮	酮	78-59-1
Camphor	樟脑	酮	76-22-2
Quinoline	喹啉	酮	91-22-5
C10	正癸烷	烷烃	124-18-5
C11	正十一烷	烷烃	1120-21-4
C12	正十二烷	烷烃	112-40-3
C13	正十三烷	烷烃	629-50-5
C14	正十四烷	烷烃	629-59-4
C15	正十五烷	烷烃	629-62-9
C16	正十六烷	烷烃	544-76-3
C17	正十七烷	烷烃	629-78-7
C18	正十八烷	烷烃	593-45-3
C19	正十九烷	烷烃	629-92-5
C20	正二十烷	烷烃	112-95-8
C21	正二十一烷	烷烃	629-94-7
C22	正二十二烷	烷烃	629-97-0
C23	正二十三烷	烷烃	638-67-5
C24	正二十四烷	烷烃	646-31-1
C25	正二十五烷	烷烃	629-99-2
C26	正二十六烷	烷烃	630-01-3
C27	正二十七烷	烷烃	593-49-7
C28	正二十八烷	烷烃	630-02-4
C29	正二十九烷	烷烃	630-03-5
C30	正三十烷	烷烃	638-68-6
C31	正三十一烷	烷烃	630-04-6
C32	正三十二烷	烷烃	544-85-4
Cyclohexane, octyl-3-Carene	辛基环己烷	烷烃	1795-15-9
	3-蒈烯	烯烃	13466-78-9
1-Propanamine, N-nitroso-N-propyl-	N-亚硝基-N-丙基丙胺	含氮有机物	621-64-7
Benzene, nitro-	硝基苯	含氮有机物	98-95-3
Indole	吲哚	含氮有机物	120-72-9
Carbazole	咔唑	含氮有机物	86-74-8
Benzonitrile	苯甲腈	含氮有机物	100-47-0
Naphthalene	萘	多环芳烃	91-20-3

续表 B.1 环境大气半/中等挥发性有机物测定选用的部分标准化化合物示例

化合物英文名	化合物中文名	类别	CAS 号
Naphthalene, 2-methyl-	2-甲基萘	多环芳烃	91-57-6
Acenaphthylene	茈烯	多环芳烃	208-96-8
Acenaphthene	茈	多环芳烃	83-32-9
Fluorene	芴	多环芳烃	86-73-7
Azobenzene	偶氮苯	多环芳烃	103-33-3
Phenanthrene	菲	多环芳烃	85-01-8
Anthracene	蒽	多环芳烃	120-12-7
Fluoranthene	荧蒽	多环芳烃	206-44-0
Pyrene	芘	多环芳烃	129-00-0
Benz[a]anthracene	苯并[a]蒽	多环芳烃	56-55-3
Chrysene	蒽	多环芳烃	218-01-9
Benzo[b]fluoranthene	苯并[b]荧蒽	多环芳烃	205-99-2
Benzo[k]fluoranthene	苯并[k]荧蒽	多环芳烃	207-08-9
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	茚并[1,2,3-cd]芘	多环芳烃	193-39-5
Benzo[ghi]perylene	苯并[ghi]芘	多环芳烃	191-24-2
Phenol	苯酚	酚	108-95-2
Phenol, 2-methyl-	2-甲基苯酚	酚	95-48-7
Phenol, 3-methyl-	3-甲基苯酚	酚	108-39-4
Phenol, 2,6-dimethyl-	2,6-二甲基苯酚	酚	576-26-1
Resorcinol	间苯二酚	酚	108-46-3
1-Naphthalenol	1-萘酚	酚	90-15-3
2-Naphthalenol	2-萘酚	酚	135-19-3
2,2,4-Trimethyl-1,3-pentane diol diisobutyrate	2,2,4-三甲基-1,3-戊二醇二异丁酸酯	VCPs	6846-50-0