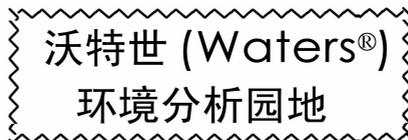


Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™



遵从限制危险物质 (RoHS) 的法规, 检测劳动保护用品中的未知污染物

溴化阻燃剂 (BFR) 化合物, 被用来阻止火灾或减弱火势. 这些化合物存在于电子器件、服装和家具等种类繁多的消费品中. 根据《限制危险物质 (RoHS) 指令》(2002/95/EC), 这些化合物被禁止应用于多种电子设备中. 这也与《废弃电气电子设备指令》(WEEE, 2002/96/EU) 密切相关; WEEE 是一项旨在解决大量有毒电子废弃物问题的立法倡议.

溴代阻燃剂最常采用单离子 (SIR) 或多离子 (MRM) 选择离子模式的 GC/MS 方法来分析. 选择离子模式的方法存在的问题是它忽视了其它相关化合物或基质背景. 沃特世 Xevo TQ-S MS 系统可开启 RADAR 功能, 允许在一次采集过程中, 同时收集多反应监测 (MRM) 和全扫描质谱 (RADAR™ 采集) 的数据.

1 解决方案

Xevo TQ-S MS 系统, 使用 APGC 源与气相色谱仪相连接, 并在 RADAR 模式下分析一组多溴联苯醚 (PBDE). 每种母离子选定两种子离子的 MRM, 同时, 采集 50—1050 Da 质量范围的质谱扫描数据. 对 2006 年 7 月立法禁止溴化阻燃剂之前生产的一份计算机键盘样品的萃取液, 进行了 PBDE 分析.

采集得到的 MRM 数据, 用于对样品中的 PBDE 定量. 质谱扫描可以获取相关化合物或可能干扰物的信息. 图 1 显示出一幅 MRM 离子流图以及一幅质谱扫描数据的 BPI 离子流图. 图 1 中的质谱扫描图, 数据密集且非常复杂. MassLynx™ 软件内的动态/静态功能, 可提取多对选择离子, 分离窗口在 2 Da 以内, 并标出卤化同位素模型. 用 NIST08 质谱库查找样本中具有这种性质的可能化合物. 图 2 显示了 11.43 min 处色谱峰的光谱, 并对分子离子簇进行了放大. 此外, 也显示了从疑似峰提取到的同位素图与 $C_{14}H_8Br_6O_2$ 理论同位素模型进行比较的结果.

建议的分子式与化合物三溴苯氧乙烷的相符, 而后者是商品 FireMaster 680 的活性成分. 而且, 碎片簇 (m/z 357 和 359) 表明该分子离子出现了裂解 ($C_6H_2Br_3 + CH_3$ 丢失), 这进一步支持了该假设. 后续工作需要更深入地确认化合物.

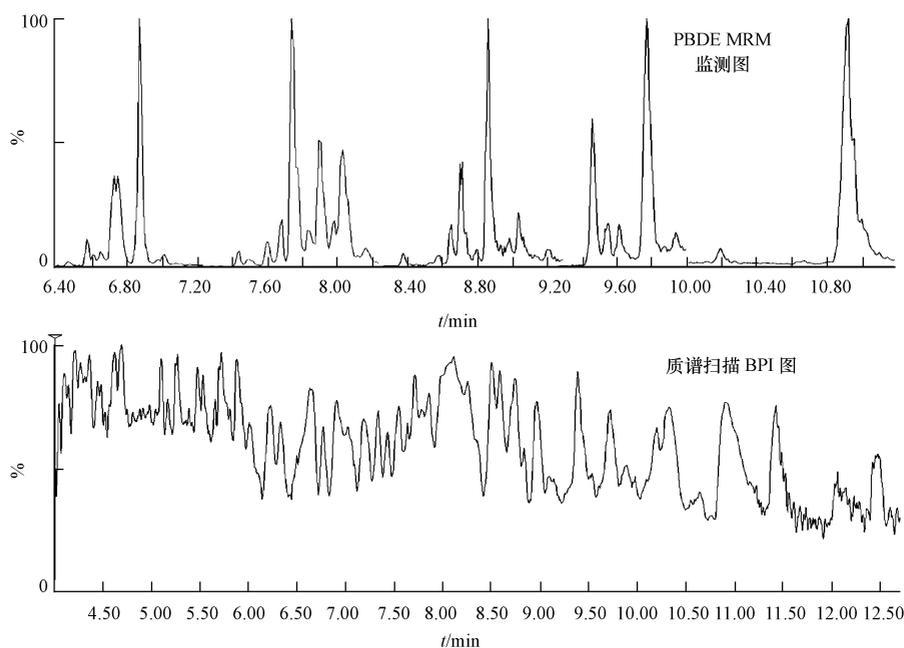


图 1 MRM 跃迁的叠加描记图(上)与质谱扫描数据的 BPI 描记图(下)

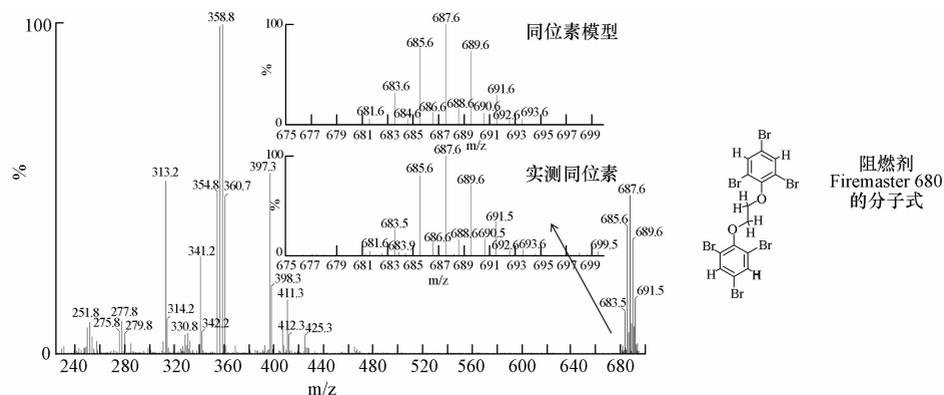


图2 保留时间 11.43 min 峰的质谱图(放大了分子离子簇),并将实际得到的同位素模型与理论模型相比较

2 总结

(1) 配有 APCI 源的 Xevo TQ-S 通过 RADAR 功能,对一份从计算机键盘样本的萃取液分析,成功地采集了用于进行 PBDE 分析的 MRM 和全扫描数据.

(2) RADAR 可对目标化合物进行准确定量,同时也能采集用以监测基质组分或其它化合物的质谱扫描数据.这一点可在极少影响或不影响 MRM 数据的情况下实现.

(3) 一种非目标阻燃化合物可在使用质谱扫描功能获取数据后得到初步鉴定.

(4) 之所以能使用 RADAR 功能,是因为该仪器能在 MS 和 MS/MS 模式之间进行不损害性能的快速转换.