

# SPME-GCMS 法分析火场物品中的汽油残留物

## GCMS-511

**摘要：** 本文利用岛津 GCMS-QP2020 NX 气质联用仪，检测了 3 份火场中的疑有汽油残留物样品。通过固相微萃取器的纤维萃取头吸附样品中的残留物，经 GCMS 进样口解吸，色谱柱分离，对汽油残留物进行检测，并通过 NIST 谱库定性各化合物。该方法前处理简单，获得信息丰富，是分析火场中汽油残留物的有效手段。

**关键词：** 气相色谱质谱联用仪 汽油残留物 固相微萃取

### 技术特点：

- ❖ 利用固相微萃取方式，前处理简单、快速。
- ❖ 采用 GCMS 检测，抗干扰能力强。

在火案现场中，高温燃烧和灭火工作会破坏大部分的物证，给起火原因分析带来困难。在很多纵火案中，犯罪嫌疑人往往使用易燃液体焚烧现场。最常用的易燃液体为汽油，汽油挥发物可能会被吸附在未燃烧的物质中，而得以保存。相关分析检验可以为火案的分析、研判提供侦察的方向和证据。

目前，最适合进行汽油及其燃烧残留物分析的仪器为气相色谱质谱联用仪。

本文参考中华人名共和国公安部发布的《GA/T1515-2018 法庭科学 汽油残留物提取检验 固相微萃取 - 气相色谱 - 质谱法》，利用固相微萃取，结合岛津 GCMS-QP2020 NX 气质联用仪，建立了一套快速、准确分析火场物品中的汽油残留物的检测方法，该方法抗基质干扰能力强，为火场证物中的汽油残留物提取的检验提供依据。

## ■ 实验部分

### 1.1 仪器

岛津气质联用仪 GCMS-QP2020 NX

### 1.2 分析条件

SPME 参数：

SPME 纤维萃取头：聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 纤维萃取头 (100 μm)

平衡温度：60°C

进样口温度：250°C

平衡时间：30 min

解吸时间：1 min

GCMS 参数：

色谱柱：SH-I-1MS, 30 m × 0.25 mm × 0.25 μm

柱温程序：40°C (2 min)\_5°C /min\_80°C \_10°C /min\_280°C (5min)

进样口温度：250°C

离子化方式：EI

载气控制方式：色谱柱流量

离子源温度：230°C

色谱柱流量：1.0 mL/min

接口温度：230°C

进样方式：分流

采集方式：SCAN

分流比：10:1

扫描范围：40~400 amu

### 1.3 样品前处理

将样品装入 20 mL 的顶空瓶，放置在顶空加热炉 60°C，再把固相微萃取器针头插入顶空瓶内吸附 30 min 后，取出固相微萃取器针头，插入气相色谱质谱仪进样口解吸，1 min 后拔出，进行汽油残留物检测。

## ■ 结果讨论

### 2.1 对照品色谱图

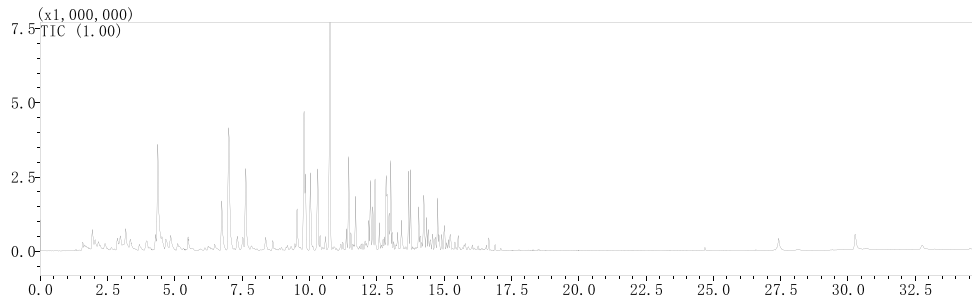


图 1 汽油对照品色谱图

按标准要求，对汽油对照品，提取质荷比为 78、91、105、119、134 等碎片离子。选择离子的色谱图如下：

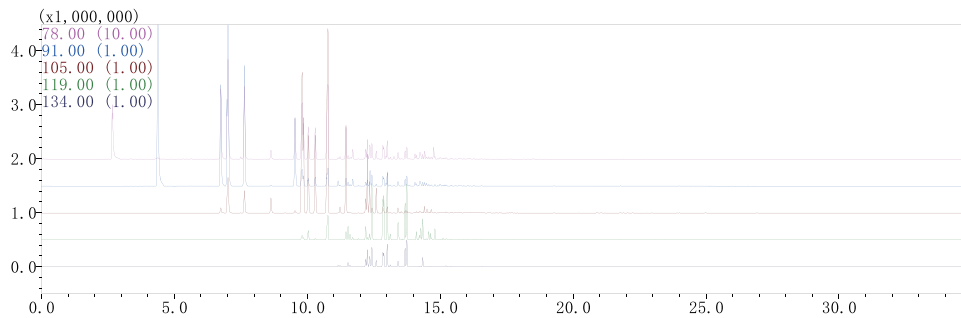


图 2 汽油对照品选择离子 (78、91、105、119、134) 色谱图

按标准要求，对汽油对照品，提取质荷比为 85、128、142 等碎片离子。选择离子的色谱图如下：

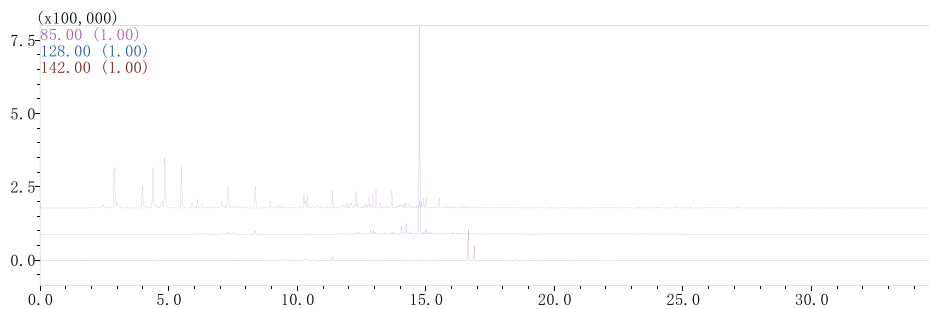


图 3 汽油对照品选择离子 (85、128、142) 色谱图

### 2.2 样品色谱图

对 3 个疑似样品进行分析，得到该 3 个样品色谱图如下。

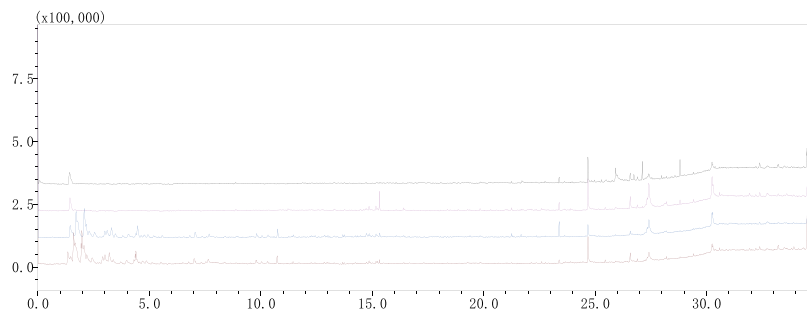


图 4 3 个火场疑有汽油残留物样品 (粉色、蓝色、棕色谱图) 和方法空白色谱图 (黑色谱图)

对 3 个疑似样品，提取质荷比为 78、91、105、119、134 等碎片离子。选择离子的色谱图如下：

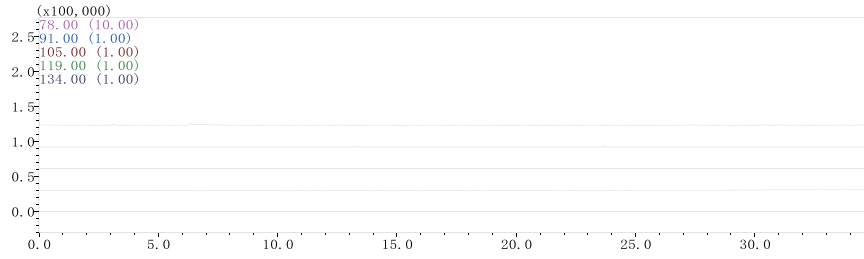


图 5 样品 1 选择离子 (78、91、105、119、134) 色谱图

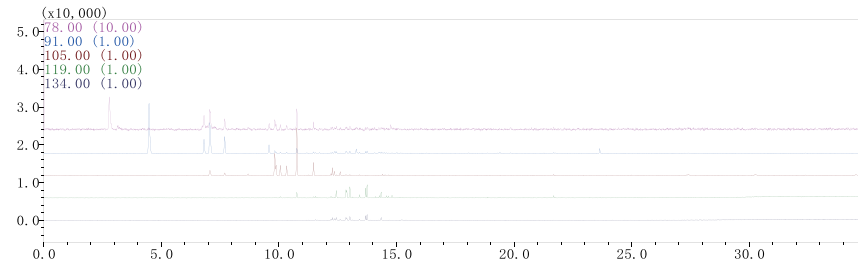


图 6 样品 2 选择离子 (78、91、105、119、134) 色谱图

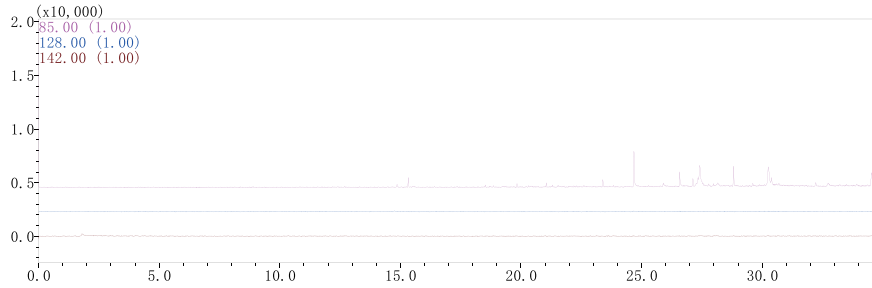


图 7 样品 3 选择离子 (78、91、105、119、134) 色谱图

对 3 个疑似样品，提取质荷比为 84、128、142 等碎片离子。选择离子的色谱图如下：

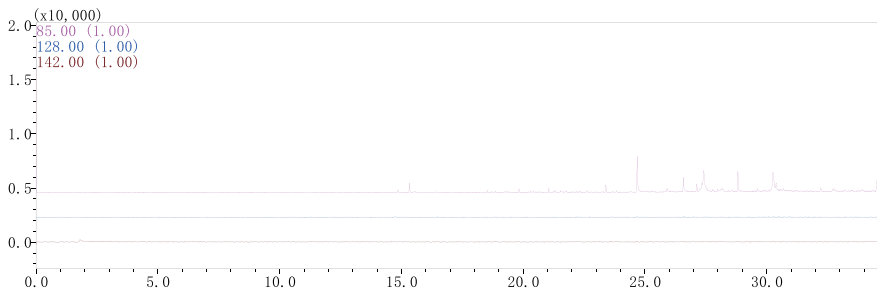


图 8 样品 1 选择离子 (85、128、142) 色谱图

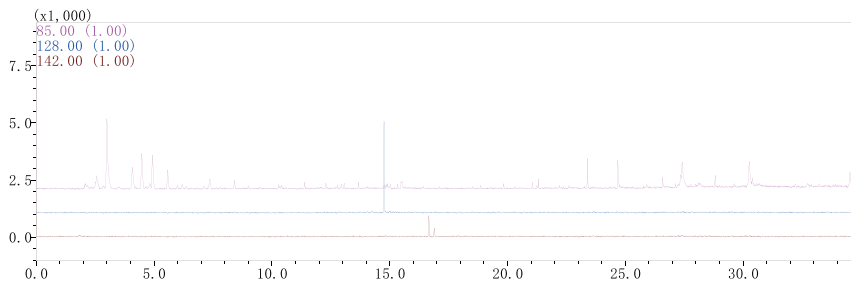


图 9 样品 2 选择离子 (85、128、142) 色谱图

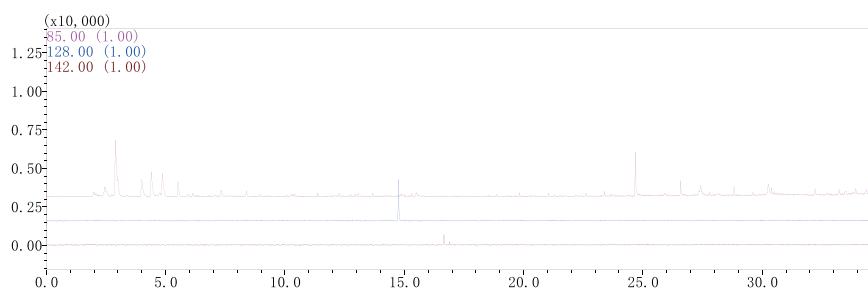


图 10 样品 3 选择离子 (85、128、142) 色谱图

### 2.3 定性分析结果

利用 NIST 谱库对汽油对照品和 3 个疑似样品进行定性, 结果如下表所示。

表 1 汽油对照品定性结果

No.	保留时间 (min)	化合物名称	CAS 号	相似度 (%)	峰面积	含量 (%)
1	1.962	1-Hepten-4-ol	3521-91-3	90	4040975	1.25
2	2.055	Pentane, 3-methyl-	96-14-0	96	1302852	0.40
3	2.883	Hexane, 2-methyl-	591-76-4	94	2934806	0.91
4	2.995	Hexane, 3-methyl-	589-34-4	96	3571405	1.11
5	3.188	Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8	98	3690100	1.14
6	3.361	Heptane	142-82-5	95	2684776	0.83
7	3.969	Pentane, 2,2-dimethyl-	590-35-2	93	3272056	1.01
8	4.295	Pentane, 2,3,4-trimethyl-	565-75-3	96	3370957	1.04
9	4.378	Toluene	108-88-3	94	29519032	9.15
10	4.530	Heptane, 4-methyl-	589-53-7	93	2252281	0.70
11	4.672	Heptane, 2-methyl-	592-27-8	96	3738753	1.16
12	4.847	Heptane, 3-methyl-	589-81-1	94	4767019	1.48
13	5.496	Undecane, 2,4-dimethyl-	17312-80-0	91	3316752	1.03
14	6.744	Ethylbenzene	100-41-4	98	12552767	3.89
15	7.016	Benzene, 1,3-dimethyl-	108-38-3	98	33654920	10.43
16	7.325	Undecane, 5-methyl-	1632-70-8	95	3597857	1.11
17	7.526	Octane, 3-methyl-	2216-33-3	97	1906665	0.59
18	7.638	o-Xylene	95-47-6	98	15884508	4.92
19	8.367	Nonane	111-84-2	95	2294118	0.71
20	8.631	Benzene, (1-methylethyl)-	98-82-8	97	1504357	0.47
21	9.537	Benzene, propyl-	103-65-1	98	5970227	1.85
22	9.805	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	97	21956878	6.80
23	9.857	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	611-14-3	98	8939448	2.77
24	10.039	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	97	10085515	3.13
25	10.302	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	94	11276056	3.49
26	10.393	Octane, 2,4,6-trimethyl-	62016-37-9	94	1639978	0.51
27	10.598	Nonane, 3-methyl-	5911-04-6	97	1335613	0.41

28	10.775	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	97	33374347	10.34
29	11.371	Decane	124-18-5	95	1840326	0.57
30	11.456	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	96	9544063	2.96
31	11.532	Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	527-84-4	93	1529440	0.47
32	11.708	Indane	496-11-7	97	5097699	1.58
33	12.197	Benzene, 1,2-diethyl-	135-01-3	98	2244435	0.70
34	12.262	Benzene, 1-methyl-3-propyl-	1074-43-7	95	6037297	1.87
35	12.348	2-Tolyloxirane	2783-26-8	90	4273454	1.32
36	12.429	Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	934-74-7	97	5647327	1.75
37	12.595	Benzene, 1-methyl-2-propyl-	1074-17-5	96	1987451	0.62
38	12.846	Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	933-98-2	86	6157408	1.91
39	12.880	Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	874-41-9	96	3146231	0.97
40	12.956	Indan, 1-methyl-	767-58-8	84	3654585	1.13
41	13.011	Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	1758-88-9	97	6377610	1.98
42	13.412	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	934-80-5	92	2503662	0.78
43	13.677	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	95-93-2	84	5286572	1.64
44	13.747	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	488-23-3	97	5462876	1.69
45	14.053	1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	874-35-1	91	2920409	0.90
46	14.239	1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	824-22-6	92	5526025	1.71
47	14.341	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	488-23-3	95	1979793	0.61
48	14.755	Naphthalene	91-20-3	92	3626563	1.12

表 2 样品 1 定性结果

No.	保留时间 (min)	化合物名称	CAS 号	相似度 (%)	峰面积	峰面积比
1	8.880	(R)-(-)-2,2-Dimethyl-1,3-dioxolane-4-methanol	14347-78-5	91	13731	4.91

表 3 样品 2 定性结果

No.	保留时间 (min)	化合物名称	CAS 号	相似度 (%)	峰面积	峰面积比
1	1.715	Butane, 2-methyl-	78-78-4	97	357698	9.42
2	1.775	Butane, 2-chloro-3-methyl-	631-65-2	87	410483	10.81
3	2.084	1-Hepten-4-ol	3521-91-3	89	494437	13.03
4	2.174	Pentane, 3-methyl-	96-14-0	95	200701	5.29
5	2.302	Hexane	110-54-3	95	138421	3.65
6	2.545	1-Octene, 2-methyl-	4588-18-5	93	133600	3.52
7	3.002	Hexane, 2-methyl-	591-76-4	93	102926	2.71
8	3.111	Hexane, 3-methyl-	589-34-4	89	134559	3.54
9	3.303	Pentane, 2,2,4-trimethyl-	540-84-1	98	190957	5.03
10	3.487	Heptane	142-82-5	91	67612	1.78
11	3.805	Cyclohexane, methyl-	108-87-2	87	27003	0.71
12	4.073	Octane, 2,4,6-trimethyl-	62016-37-9	91	65349	1.72

13	4.399	Pentane, 2,3,4-trimethyl-	565-75-3	92	56172	1.48
14	4.475	Toluene	108-88-3	87	171174	4.51
15	4.630	Heptane, 4-methyl-	589-53-7	88	24815	0.65
16	4.766	Heptane, 2-methyl-	592-27-8	86	35731	0.94
17	4.938	Heptane, 3-methyl-	589-81-1	92	47606	1.25
18	5.201	Hexane, 2,2,4-trimethyl-	16747-26-5	87	26667	0.70
19	5.577	Hexane, 2,4-dimethyl-	589-43-5	87	30303	0.80
20	6.820	Ethylbenzene	100-41-4	93	23818	0.63
21	7.057	o-Xylene	95-47-6	96	88161	2.32
22	7.381	Undecane, 5-methyl-	1632-70-8	87	17421	0.46
23	7.687	Benzene, 1,3-dimethyl-	108-38-3	93	33452	0.88
24	8.902	(R)-(-)-2,2-Dimethyl-1,3-dioxolane-4-methanol	14347-78-5	85	30658	0.81
25	9.819	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	95	44547	1.17
26	9.880	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	611-14-3	86	18109	0.48
27	10.059	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	93	24613	0.65
28	10.756	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	96	77714	2.05
29	11.385	Undecane	1120-21-4	84	19103	0.50
30	11.467	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	92	19651	0.52
31	12.271	Benzene, 1-methyl-3-propyl-	1074-43-7	84	16062	0.42
32	12.439	Benzene, 2-ethyl-1,3-dimethyl-	2870-04-4	90	18808	0.50
33	13.753	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	95-93-2	93	19441	0.51
34	14.865	Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	112-34-5	93	27106	0.71
35	15.333	1-Dodecene	112-41-4	93	34526	0.91
36	16.421	1-Decanol	112-30-1	86	14662	0.39

表 4 样品 3 定性结果

No.	保留时间 (min)	化合物名称	CAS 号	相似度 (%)	峰面积	含量 (%)
1	1.606	Butane, 2-methyl-	78-78-4	97	415520	9.01
2	1.675	Butane, 2-chloro-3-methyl-	631-65-2	89	643077	13.95
3	1.973	1-Hepten-4-ol	3521-91-3	89	576415	12.50
4	2.072	Pentane, 3-methyl-	96-14-0	96	361442	7.84
5	2.196	Hexane	110-54-3	95	248637	5.39
6	2.436	Cyclopentane, methyl-	96-37-7	92	138595	3.01
7	2.902	Hexane, 2-methyl-	591-76-4	92	106488	2.31
8	3.013	Hexane, 3-methyl-	589-34-4	94	167477	3.63
9	3.207	Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8	97	231376	5.02
10	3.717	Cyclohexane, methyl-	108-87-2	86	30135	0.65
11	3.994	Octane, 2,4,6-trimethyl-	62016-37-9	90	82019	1.78
12	4.314	Pentane, 2,3,4-trimethyl-	565-75-3	93	51602	1.12
13	4.396	Toluene	108-88-3	86	228775	4.96

14	4.697	Heptane, 2-methyl-	592-27-8	89	58517	1.27
15	4.867	Heptane, 3-methyl-	589-81-1	89	53796	1.17
16	5.129	Hexane, 2,2,4-trimethyl-	16747-26-5	88	23537	0.51
17	5.522	Undecane, 2,4-dimethyl-	17312-80-0	87	32479	0.70
18	6.766	Ethylbenzene	100-41-4	94	27311	0.59
19	7.015	Benzene, 1,3-dimethyl-	108-38-3	96	80682	1.75
20	7.339	Undecane, 5-methyl-	1632-70-8	85	22272	0.48
21	7.530	Octane, 3-methyl-	2216-33-3	88	19450	0.42
22	7.649	Benzene, 1,3-dimethyl-	108-38-3	93	47775	1.04
23	8.378	Nonane, 2,5-dimethyl-	17302-27-1	85	19347	0.42
24	9.797	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	96	30582	0.66
25	9.855	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	611-14-3	85	12079	0.26
26	10.043	Benzene, 1,3,5-trimethyl-	108-67-8	92	22058	0.48
27	10.740	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	96	71529	1.55
28	11.454	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	92	17767	0.39
29	13.009	Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	1758-88-9	92	12464	0.27
30	13.747	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	488-23-3	88	12135	0.26
31	14.757	Naphthalene	91-20-3	85	15203	0.33
32	14.862	Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	112-34-5	94	25293	0.55
33	15.248	Decanal	112-31-2	91	17960	0.39
34	15.329	Cyclopropane, nonyl-	74663-85-7	95	31374	0.68

## 2.4 结果分析

样品 1 的色谱图与方法空白差异不明显，也无明显汽油的特征离子的峰。判断该样品无汽油残留物。

样品 2 的色谱图与汽油对照品相似，选择离子（78、91、105、119、134）色谱图和选择离子（85、128、142）色谱图都有汽油的特征色谱峰，定性成分也有甲苯、二甲苯、三甲苯等汽油特征物质，且符合轻组分相对含量减少，重组分相对含量增加的汽油残留物分布规律，判断该样品含有汽油残留物。

样品 3 的色谱图与汽油对照品相似，选择离子（78、91、105、119、134）色谱图和选择离子（85、128、142）色谱图都有汽油的特征色谱峰，定性成分也有甲苯、二甲苯、三甲苯等汽油特征物质，且符合轻组分相对含量减少，重组分相对含量增加的汽油残留物分布规律，判断该样品含有汽油残留物。

## ■ 结论

本文参考中华人民共和国公安部发布的《GA/T 1515-2018 法庭科学 汽油残留物提取检验 固相微萃取 - 气相色谱 - 质谱法》。利用固相微萃取技术，结合岛津 GCMS-QP2020 NX 气质联用仪，检测了火场中 3 份疑有汽油残留物样品，通过汽油选择特征离子和轻重组分分布规律推断这几个样品是否含有汽油残留物。采用该方法，样品处理简单，获得信息丰富，是分析汽油残留物的一种有效手段。

岛津应用云

