

Laura Solé Domènech

---

**Determination of high production volume chemicals  
and polycyclic aromatic hydrocarbons in particulate  
matter by thermal desorption coupled to gas  
chromatography and mass spectrometry**

---

MASTER'S THESIS

Directed by Dr. Francesc Borrull Ballarín and Dr. Laura Vallecillos Marsal

Master's degree in Applied Chromatographic Techniques



UNIVERSITAT  
ROVIRA I VIRGILI  
Facultat de Química



Tarragona

2024



## Abstract

High production volume chemicals (HPVCs) and polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are two of the groups of semi-volatile organic compounds which can be adhered to the surface of particulate matter and enter the human bloodstream through its inhalation, leading to health problems such as an increase in cancer risk or respiratory damage. This work aims to study the viability of thermal desorption (TD) as a desorption technique for their determination in  $<10\ \mu\text{m}$  particulate matter ( $\text{PM}_{10}$ ) retained in quartz fibre filters (QFFs), as opposed to the popularly employed desorption techniques using organic solvents. A direct multi-residue TD-GC-MS method was developed and validated for the determination of HPVCs and PAHs in  $\text{PM}_{10}$ . The use of TD yielded similar sensitivity to the one obtained with organic solvent desorption techniques, although some of the originally targeted compounds could not be determined.  $\text{PM}_{10}$  samples collected in Constantí (Tarragona, Spain) were analysed, with the most abundant compounds being the phthalate esters (PAEs).

## Sinopsi

Els químics d'elevat volum de producció (HPVCs) i els hidrocarburs aromàtics policíclics (PAHs) són dos dels grups de compostos orgànics semi-volàtils que es poden adherir a la superfície de la matèria particulada i entrar al corrent sanguini humà a través de la seva inhalació, causant problemes de salut com un increment en el risc de càncer o danys respiratoris. Aquest treball estudia la viabilitat de la desorció tèrmica (TD) com a tècnica de desorció per la seva determinació en matèria particulada de menys de  $10\ \mu\text{m}$  ( $\text{PM}_{10}$ ) retinguda en filtres de fibra de quars (QFFs), en comparació amb altres tècniques de desorció que empren dissolvents orgànics. S'ha desenvolupat i validat un mètode directe multi-residu mitjançant TD-GC-MS per la determinació de HPVCs i PAHs en  $\text{PM}_{10}$ . L'ús de la TD ha resultat en una sensibilitat similar a l'obtinguda amb les tècniques de desorció amb dissolvents orgànics, tot i que alguns dels analits objectiu originals no s'han pogut determinar. S'han analitzat mostres de  $\text{PM}_{10}$  recollides a Constantí (Tarragona, Espanya), on els compostos més abundants han estat els èsters de ftalat (PAEs).