



# LCMS分析测定邻苯二甲酸酯

No.LCMS-003

**摘要：** 本文建立对五种邻苯二甲酸酯进行LCMS分析测定的方法，以电喷雾离子化方式正离子模式ESI(+)监测，各化合物的 $[M+Na]^+$ 作为定量分析用的选择性检测离子。

**关键词：** LCMS 电喷雾离子化 邻苯二甲酸酯 塑料增塑剂

邻苯二甲酸酯 (Phthalic Acid Esters, PAEs, 别名酞酸酯) 是一类广泛使用的塑料增塑剂。近年来由于PAEs的大量生产和广泛使用，导致其普遍存在于环境的大气，水体和土壤中。PAEs对大气的污染主要来源于喷涂涂料，塑料垃圾的焚烧和农用薄膜中塑料剂的挥发，如花卉棚，蔬菜棚等。邻苯二甲酸酯主要有邻苯二甲酸二

甲酯(Dimethyl Phthalate, DMP,  $C_{10}H_{10}O$ )，邻苯二甲酸二乙酯 (Diethyl Phthalate, DEP,  $C_{12}H_{14}O_4$ )，邻苯二甲酸丁基苄酯 (Benzyl butylphthalate, BBP,  $C_{19}H_{20}O_4$ )，邻苯二甲酸二丁酯(di-n-butyl phthalate, DBP,  $C_{16}H_{22}O_4$ )和邻苯二甲酸二异辛酯 (di(2-ethylhexyl) phthalate, DEHP,  $C_{24}H_{38}O_4$ )等。

## 分析条件

色谱柱: Shimadzu VP-ODS (2.0mmI.D. × 150mm, 5 μm)  
流动相A: 水  
流动相B: 甲醇  
梯度条件: 30%B (0 min)–100%B (10–20min)  
流速: 0.2mL/min

柱温: 40°C  
Probe voltage: 4.5kV (ESI-Positive mode)  
雾化气: 1.5L/min  
干燥气: 0.1MPa  
CDL voltage: -20V

## 分析结果

图1给出了五种化合物扫描模式下分析的总离子流色谱图。可以分别得到 DMP, DEP, BBP, DBP和DEHP的质谱图，见图2。

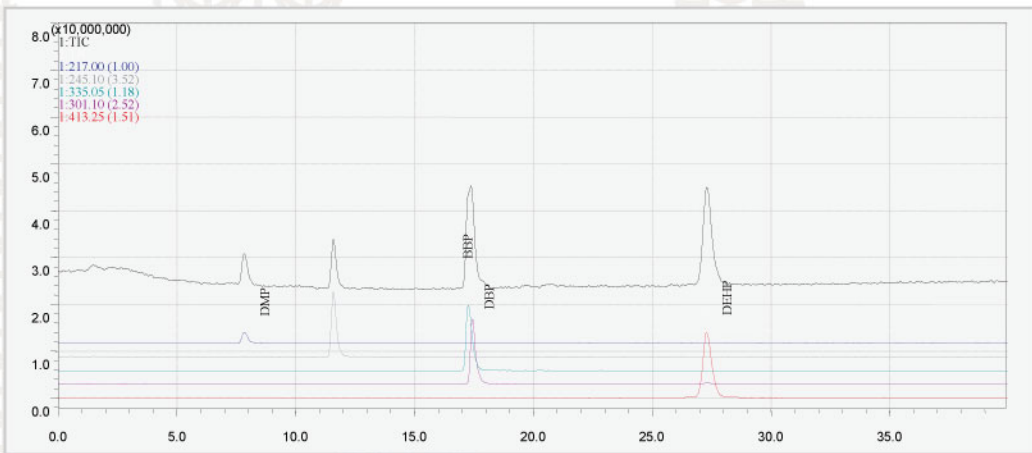


图 1 五种化合物总离子流色谱图

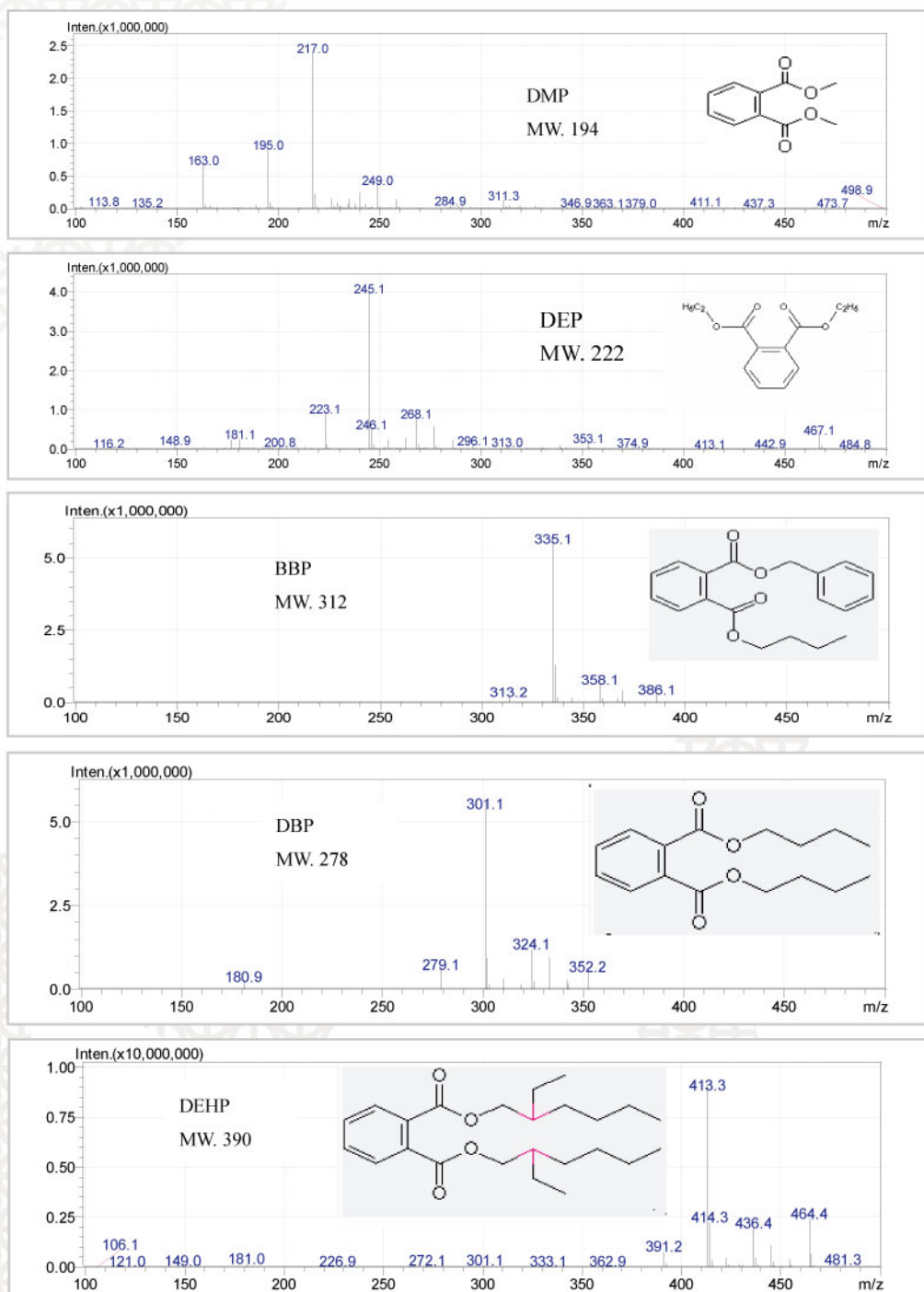


图 2 五种化合物质谱图

分别选择五种化合物的 $[M+Na]^+$ 作为SIM方式定量分析, 得到标准曲线方程: DMP m/z 217 ( $Y = 189.6880X - 1,856.630$ ), DEP m/z 245 ( $Y = 444.9772X + 3,440.778$ ), BBP m/z 301 ( $Y = 3,112.189X + 55,447.44$ ), DBPm/z 335 ( $Y = 2,558.016X + 1,231,878$ ), DEHPm/z 413 ( $Y = 9,129.741X + 2,568,845$ ).