

点痘水挥发性成分的 GC-MS 分析

1 实验部分

1.1 仪器与设备

气质联用仪 GC-MS3100 (北京东西分析仪器有限公司), 10 μ L 微量注射器

样品：某种市售点痘水

1.2 分析条件

色谱条件：Equity-5(30m \times 0.25mm \times 0.25 μ m)石英毛细管柱，进样口：280 $^{\circ}$ C，分流进样，进样量：0.2 μ L，分流比：60：1，柱压：100KPa，吹扫流量：2ml/min，柱温：80 $^{\circ}$ C 保持 1min，以 10 $^{\circ}$ C/min 速率升至 280 $^{\circ}$ C，保持 10min。

质谱条件：EI 源，离子源温度：200 $^{\circ}$ C，电子能量：70eV，扫描方式：全扫描定性，扫描范围：25u~400u，接口温度：280 $^{\circ}$ C，倍增器高压：1100。

2 结果与讨论

用 GC-MS3100 分析了某种市售点痘水的组成成分；图 1 为某品牌点痘水全扫描 TIC 图；经 NIST 标准谱库检索结合人工分析，共检测出 14 种组分（见表 1），其中主要成分是右旋樟脑、薄荷醇、水杨酸等，其中乙醇应该为溶剂；绝大部分组分匹配度大于 80%。

由于本实验使用的弱极性的毛细柱，因此样品中的个别极性较强的组分峰型不太理想，如果使用强极性柱子极性组分的峰型会更好些。

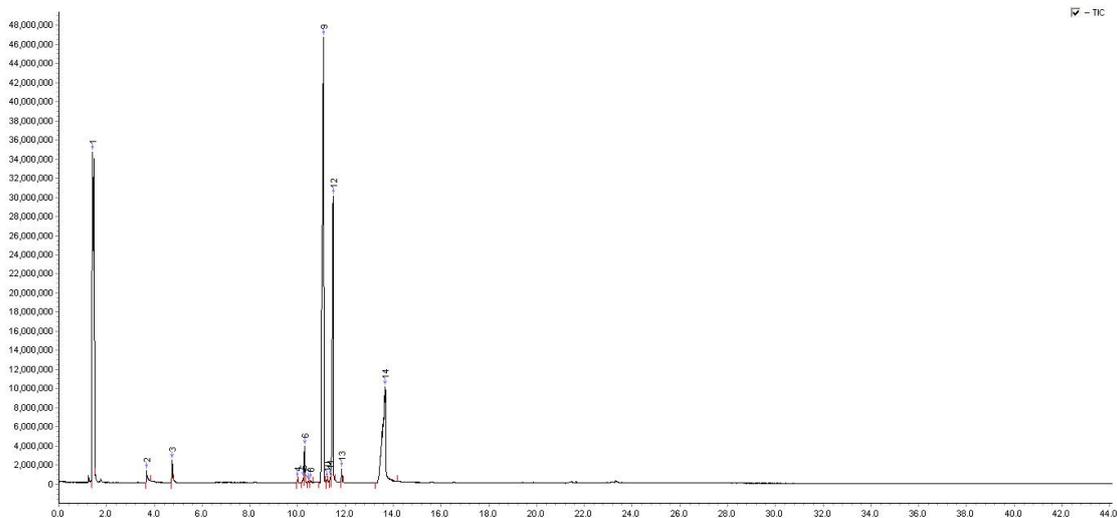


图 1 某种点痘水样品测定谱图

表 1 点痘水组分分析结果

峰号	保留 时间 min	中文名称	英文名称	分子式	CAS 号	相似度 /%
1	1.4 1	乙醇	Ethanol	C ₂ H ₆ O	64-17-5	93
2	3.67	1,2-丙二醇	Propylene Glycol	C ₃ H ₈ O ₂	57-55-6	91
3	4.74	乳酸乙酯	Propanoic acid, 2-hydroxy-, ethyl ester, (S)-	C ₅ H ₁₀ O ₃	687-47-8	88
4	9.99	1,3,3-三甲基-二环 [2.2.1]庚-2-酮	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,3,3-trimethyl-	C ₁₀ H ₁₆ O	1195-79-5	86
5	10.2 3	3,7,7-三甲基-二环 [4.1.0]庚-3-醇	Bicyclo[4.1.0]heptan-3-ol, 3,7,7-trimethyl-, (1S,3R,6R)-(+)-	C ₁₀ H ₁₈ O	4017-79-2	77
6	10.2 9	(E)-(3,3-二甲基环 己亚基)-乙醛	Acetaldehyde, (3,3-dimethylcyclohexylidene)-, (E)-	C ₁₀ H ₁₆ O	26532-25- 2	82
7	10.4 3	1,5,5-三甲基-二环 [2.2.1]庚-2-醇	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,5,5-trimethyl-	C ₁₀ H ₁₈ O	6168-62-3	72
8	10.5 4	2-茨酮	Camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	76-22-2	70
9	11.0 0	右旋樟脑	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1R)-	C ₁₀ H ₁₆ O	464-49-3	95
10	11.2 2	异龙脑	Isoborneol	C ₁₀ H ₁₈ O	124-76-5	83
11	11.3 5	龙脑	Borneol	C ₁₀ H ₁₈ O	507-70-0	85
12	11.4 8	薄荷醇	Menthol	C ₁₀ H ₂₀ O	1490-04-6	95
13	11.8 4	左旋樟脑	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1S)-	C ₁₀ H ₁₆ O	464-48-2	83
14	13.6 7	水杨酸	Salicylic Acid	C ₇ H ₆ O ₃	69-72-7	91

3 部分组分质谱图

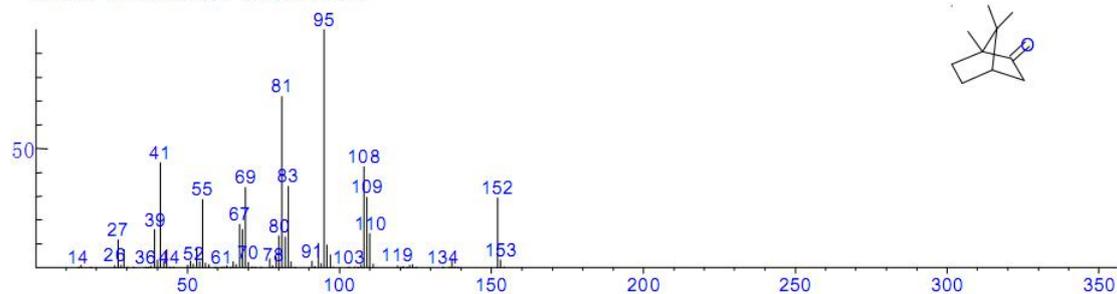
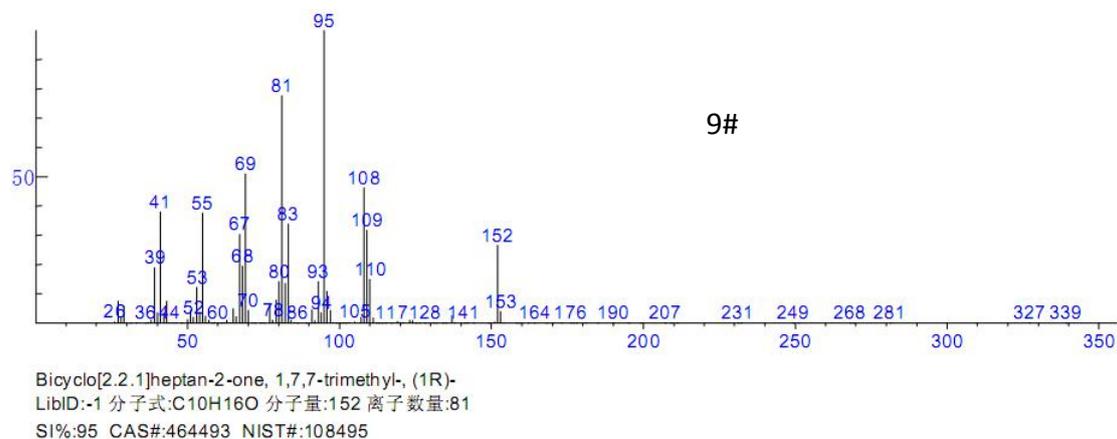


图 2 9 号峰质谱图及检索结果

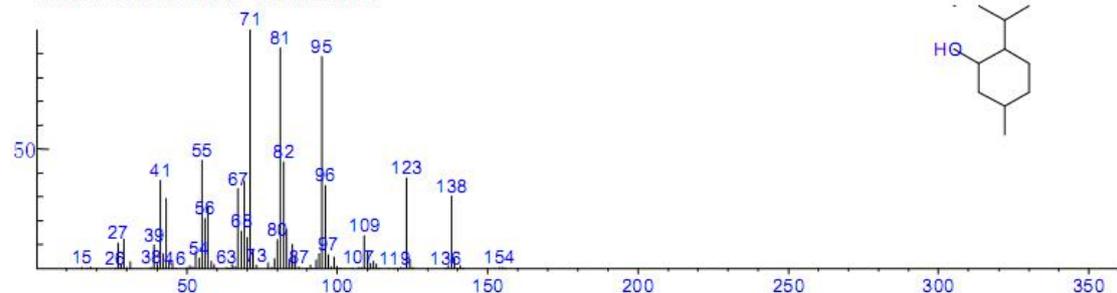
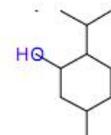
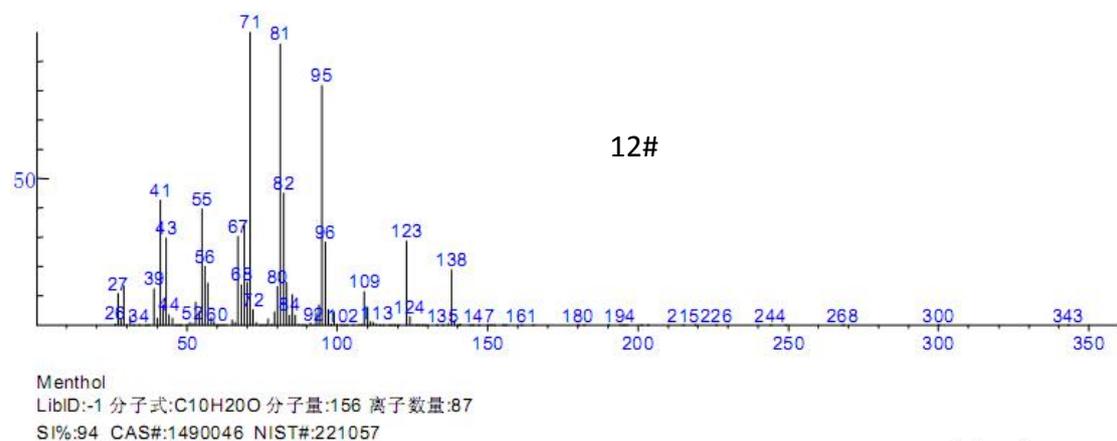


图 3 12 号峰质谱图及检索结果