

解决方案|气相色谱-质谱法测定合成染料中有机成分

合成染料广泛应用于纺织、印刷、塑料、食品和化妆品等行业。它们以鲜艳的色彩、良好的耐光性和耐洗性而受到青睐。合成染料种类繁多，包括偶氮染料、蒽醌染料、靛蓝染料等。在这些染料中，测定合成染料中的有机成分是一项至关重要的任务，因为它直接关系到染料的质量和应⽤效果。通过对有机成分的精确测定，可以确保染料的纯度、稳定性和色彩的持久性，从而满足不同工业领域对染料性能的具体要求。



了解染料中的有机成分组成还有助于评估其环境影响和安全性，确保在生产和使用过程中符合环保标准和健康规定。采用科学的方法和技术手段进行有机成分的测定，对于提升合成染料的整体品质和市场竞争力具有重要意义。气相色谱-质谱法（HS-GC-MS）作为一种高效、灵敏的分析方法，在测定合成染料中有机成分方面具有显著优势。该方法结合了气相色谱与质谱技术，能够实现对合成染料中有机成分的准确测定。本文建立了东西分析 GC-MS 3250 型气质联用仪测定合成染料中有机成分的方法，可供相关人员参考。



GC-MS 3250 型气质联用仪

实验部分

仪器设备与试剂

GC-MS 3250 型气质联用仪；

分析天平；

顶空进样器。

仪器条件

气相色谱仪条件

色谱柱：VF-624 (30m×0.25mm×1.4 μ m) 石英毛细管柱；

柱流量：1mL/min，不分流进样；

进样量：1 μ L；

进样口：250℃；

柱箱升温程序：50℃保持 0.5min, 以 8℃/min 速率升至 150℃保持 8.0min；再以 16℃/min 速率升至 230℃保持 10min；最后以 20℃/min 速率升至 260℃保持 2min。

质谱仪条件

离子源：EI 源；

源温：250℃，电子能量：70eV；

接口温度：250℃，采集时间：0-40min，

样品前处理

绿色染料：使用乙酸乙酯溶剂稀释 1000 倍，超声 30min，过滤，取 1 μ L 上机检测。

黄色染料：准确称取 0.103g 黄色染料，溶解于 10ml 甲醇试剂中，超声提取 30min，5000r/min 离心 5mim，取上清液过滤后，上机检测。

实验结果

图 1 绿色染料全扫描谱图

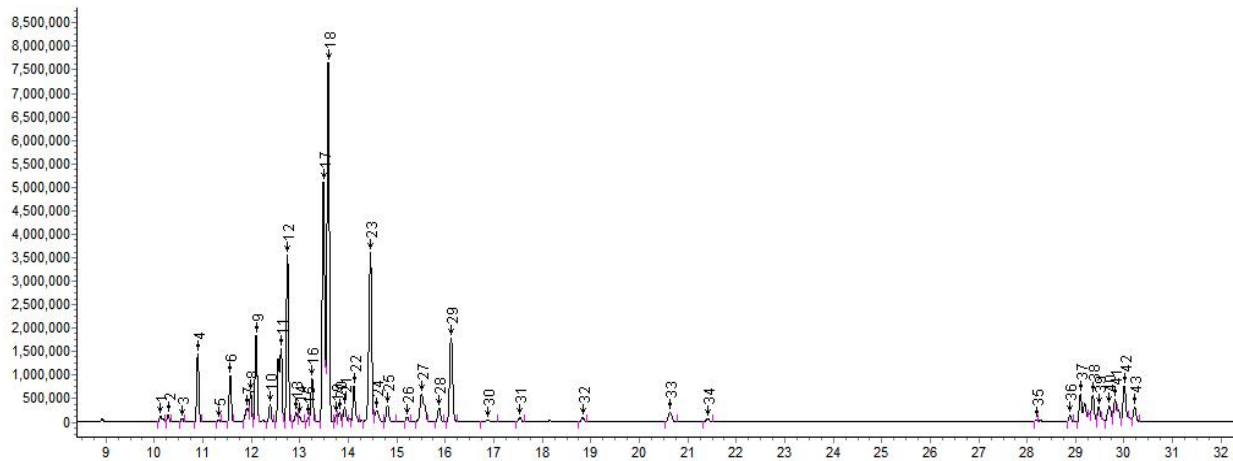


表 1 绿色染料成分检测结果

序号	英文名称	保留时间	CAS	相似度(%)	面积	面积(%)
1	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	10.12	526-73-8	81	985492	0.33
2	Mesitylene	10.29	108-67-8	79	800448	0.26
3	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	10.57	611-14-3	80	472942	0.16
4	Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	10.89	622-96-8	84	8851218	2.92
5	1-Pentanone, 1-(4-methylphenyl)-	11.32	1671-77-8	83	233054	0.08
6	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	11.56	620-14-4	83	6050907	2
7	Benzene, 1,2-diethyl-	11.92	135-01-3	82	1002566	0.33
8	Benzene, 1-methyl-3-propyl-	11.99	1074-43-7	82	2532649	0.84
9	Benzene, 1,4-diethyl-	12.1	105-05-5	81	11518881	3.8
10	Benzene, 1-methyl-4-propyl-	12.38	1074-55-1	85	2266143	0.75
11	Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	12.61	535-77-3	85	17884175	5.91
12	Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	12.75	874-41-9	85	21417400	7.07
13	1-Pentanone, 1-(4-methylphenyl)-	12.92	1671-77-8	85	1437456	0.47
14	Benzaldehyde, 4-(1-methylethyl)-	12.99	122-03-2	65	687883	0.23
15	Benzene, 1-ethyl-4-(1-methylethyl)-	13.17	4218-48-8	81	454196	0.15
16	Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	13.25	1758-88-9	84	6014705	1.99
17	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	13.49	95-93-2	84	34960098	11.54
18	Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	13.59	934-74-7	84	50941064	16.82
19	Benzene, (1,1-dimethylpropyl)-	13.75	2049-95-8	70	900936	0.3
20	Benzene, 1,4-diethyl-2-methyl-	13.82	13632-94-5	79	1458192	0.48
21	Benzene, 1,3-diethyl-5-methyl-	13.92	2050-24-0	78	2314179	0.76
22	Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-	14.12	27831-13-6	84	5961384	1.97
23	o-Cymene	14.45	527-84-4	77	29466104	9.73
24	Benzene, 1-ethyl-3-(1-methylethyl)-	14.58	4920-99-4	64	2572289	0.85
25	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-	14.81	1595-16-0	77	2647977	0.87
26	Benzene, pentamethyl-	15.21	700-12-9	76	716754	0.24
27	Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylethyl)-	15.5	4706-89-2	78	7483060	2.47
28	Benzene, 1-ethyl-4-(1-methylethyl)-	15.87	4218-48-8	79	2346546	0.77
29	Naphthalene	16.12	91-20-3	83	15349409	5.07
30	Benzene, 1,4-dimethyl-2-(1-methylethyl)-	16.87	4132-72-3	82	584270	0.19
31	1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1-dimethyl-	17.54	4912-92-9	76	799698	0.26
32	Ethanone, 1-(4-ethylphenyl)-	18.84	937-30-4	72	826454	0.27
33	Naphthalene, 2-methyl-	20.63	91-57-6	86	2243994	0.74
34	Naphthalene, 1-methyl-	21.41	90-12-0	82	709502	0.23
35	6-(4-Methoxyphenyl)hex-3-en-2-one	28.19	118790-84-4	78	186381	0.06
36	1,2-Bis(p-acetoxyphenyl)ethanedione	28.88	93655-79-9	68	941768	0.31
37	Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-	29.1	140-66-9	76	6079681	2.01
38	Phenol, 4-(1,1-dimethylpropyl)-	29.35	80-46-6	61	2990717	0.99
39	4-Methyl-2-tert-octylphenol	29.48	4979-46-8	63	1696092	0.56
40	Benzestrol	29.69	85-95-0	67	2210648	0.73
41	Phenol, 2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-	29.81	2219-84-3	67	1968379	0.65
42	p-Methoxybenzoic acid, 2-methylphenyl ester	30.01	7504-73-6	84	5098699	1.68
43	2-Methyl-4-hydroxybenzoxazole	30.22	51110-60-2	63	2009535	0.66

图 2 黄色染料全扫描谱图

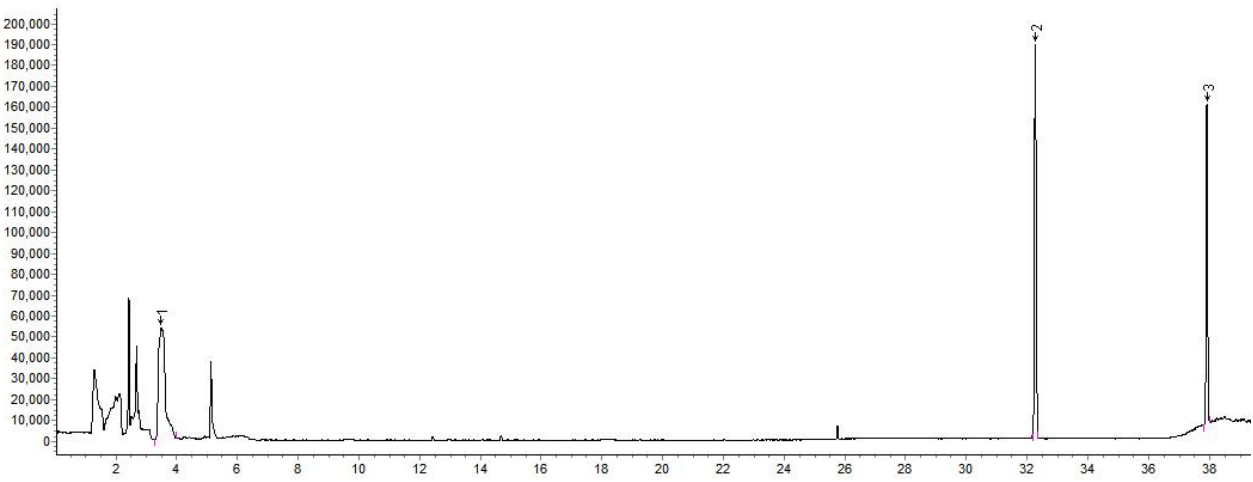


表 2 黄色染料检测结果

序号	英文名称	保留时间	CAS 号	相似度(%)	面积	面积(%)
1	Cyclobutanone	3.49	1191-95-3	84	695231	16.85
2	Hexadecanoic acid, methyl ester	32.27	112-39-0	78	1542974	37.4
3	Methyl stearate	37.92	112-61-8	74	1098851	26.63

实验总结

气相色谱-质谱法（HS/GC-MS）作为一种分析技术，在合成染料中有机成分

的测定领域得到了广泛的应用。经过系统的研究与实践验证，该方法已展现出高效、准确的测定效果，被证实为一种可靠的测定手段。在实际应用中，GC-MS 技术通过使用 GC-MS 3250 型气质联用仪，能够有效地分离和鉴定合成染料中的各种有机成分，从而为染料的质量控制和成分分析提供了强有力的技术支持。