



中华人民共和国国家标准

GB 31604.30—xxxx

食品安全国家标准

食品接触材料及制品 邻苯二甲酸酯的测定和迁移量的测定

(征求意见稿)

xxxx-xx-xx 发布

xxxx-xx-xx 实施

中华人民共和国国家卫生健康委员会
国家市场监督管理总局 发布

前 言

本标准代替GB 31604.30-2016《食品安全国家标准 食品接触材料及制品 邻苯二甲酸酯的测定和迁移量的测定》。

本标准与GB 31604.30-2016相比，主要变化如下：

- 增加了邻苯二甲酸二异癸酯的测定方法和迁移量的测定方法；
- 修改了检出限和定量限的相关表述；
- 第一部分，修改了试液制备方法，增加索氏抽提方法；
- 第二部分，修改了迁移量测定中含乙醇食品模拟物（体积分数 $\geq 50\%$ ）浸泡液前处理方法；
- 第二部分，增加了含油脂食品模拟物邻苯二甲酸酯迁移量测定方法；
- 第二部分，修改了计算公式。

食品安全国家标准

食品接触材料及制品 邻苯二甲酸酯的测定和迁移量的测定

1 范围

本标准规定了食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯的测定和迁移量的测定方法。

本标准适用于塑料食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯的测定以及食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯迁移量的测定。

第一部分 邻苯二甲酸酯的测定

2 原理

样品中邻苯二甲酸酯用正己烷超声提取或索氏提取后，用气相色谱-质谱法测定。采用特征选择离子监测扫描模式（SIM），以保留时间和碎片的丰度比定性，外标法定量。

3 试剂和材料

除非另有说明，本方法所用试剂均为色谱纯，水为GB/T 6682规定的一级水。试验过程中应避免使用塑料材质。

3.1 试剂

3.1.1 正己烷（ C_6H_{14} ）。

3.1.2 丙酮（ CH_3COCH_3 ）。

3.2 标准品

3.2.1 邻苯二甲酸酯标准品

19种邻苯二甲酸酯标准品（见附录A）：纯度 $\geq 95\%$ ，或经国家认证并授予标准物质证书的标准品。

3.3 标准溶液配制

3.3.1 19种邻苯二甲酸酯标准储备液（1000 $\mu g/mL$ ）：分别准确称取19种邻苯二甲酸酯标准品25 mg（实际称取质量按纯度折算，精确至0.1 mg），用正己烷溶解并准确定容至25 mL，混匀。将溶液转移至棕色玻璃容器中，于4°C冰箱中避光保存，保存期6个月。

3.3.2 17种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（10 $\mu g/mL$ ）：准确吸取1 mL除邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯外的17种邻苯二甲酸酯标准储备液（1000 $\mu g/mL$ ）至100 mL容量瓶中，加入正己烷定容至100 mL，混匀。将溶液转移至棕色玻璃容器中，于4°C冰箱中避光保存，保存期6个月。

3.3.3 2种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（100 $\mu g/mL$ ），准确吸取邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯标准储备液（1000 $\mu g/mL$ ）10 mL至100 mL容量瓶中，加入正己烷定容至100 mL，混匀。将溶液转移至棕色玻璃容器中，于4°C冰箱中避光保存，保存期6个月。

3.3.4 邻苯二甲酸酯系列标准工作溶液：于6个100 mL容量瓶中，分别准确吸取0.20 mL、0.50 mL、1.0 mL、2.0 mL、5.0 mL及10 mL 17种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（10 $\mu\text{g/mL}$ ）和0.20 mL、0.50 mL、1.0 mL、2.0 mL、5.0 mL及10 mL 2种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（100 $\mu\text{g/mL}$ ），用正己烷定容，混匀。配制成17种邻苯二甲酸酯混合标准工作液浓度为0.020 mg/L、0.050 mg/L、0.10 mg/L、0.20 mg/L、0.50 mg/L、1.0 mg/L和2种邻苯二甲酸酯浓度为0.20 mg/L、0.50 mg/L、1.0 mg/L、2.0 mg/L、5.0 mg/L、10 mg/L的混合标准工作液。临用现配。

4 仪器和设备

4.1 气相色谱-质谱仪（GC-MS）。

4.2 分析天平：感量0.0001 g和0.01 g。

4.3 超声波发生器。

4.4 玻璃器皿：洗净后，用水淋洗3次，丙酮浸泡1 h，在200 $^{\circ}\text{C}$ 下烘烤2 h，冷却至室温备用。

4.5 索式抽提装置。

4.6 旋转蒸发仪。

4.7 筛网：孔径0.2 cm。

5 分析步骤

5.1 样品前处理

5.1.1 试液制备

5.1.1.1 超声提取

取5 g样品（不含保鲜膜），剪碎或粉碎试样，过0.2 cm筛；或取5 g保鲜膜样品剪碎至单个碎片尺寸 ≤ 0.3 cm混合均匀。准确称取0.2 g~0.5 g试样（精确至0.0001 g）于具塞三角瓶中，加入20 mL正己烷，超声提取30 min后过滤，残渣再用20 mL正己烷重复提取1次，合并滤液于50 mL容量瓶中，用正己烷定容，供气相色谱-质谱仪测定。

5.1.1.2 索氏提取

对于无法粉碎或剪碎至尺寸 ≤ 0.2 cm的样品（不含保鲜膜），取5 g试样剪碎至单个碎片尺寸 ≤ 0.3 cm，混合均匀。称取0.2 g~0.5 g剪碎试样置于玻璃纤维滤纸筒或砂芯玻璃管中，放入索氏抽提器的抽提筒内，使用120 mL正己烷抽提样品，以回流次数6次/h~8次/h抽提6小时。提取液在45 $^{\circ}\text{C}$ 下减压旋转蒸发浓缩至约10 mL，转移至50 mL容量瓶，用正己烷定容，供气相色谱-质谱仪测定。

5.1.2 空白试验

除了不加入试样外，按与试液制备相同的操作，获得未对试样进行提取的试液，供气相色谱-质谱仪测定。

5.2 仪器参考条件

5.2.1 气相色谱参考条件

a) 色谱柱：5%苯基-甲基聚硅氧烷石英毛细管柱或性能相当者，柱长30.0 m，内径0.25 mm，膜厚0.25 μm ；

b) 进样口温度：260 $^{\circ}\text{C}$ ；

c) 升温程序：初始柱温60℃，保持1 min，以20℃/min升温至220℃，保持1 min，再以5℃/min，升温至250℃，保持1 min。再以20℃/min升温至290℃，保持7.5 min；

d) 载气：氦气，纯度≥99.999%；

e) 流速：1 mL/min；

f) 进样方式：不分流进样；

g) 进样量：1 μL。

5.2.2 质谱参考条件

a) 色谱与质谱接口温度：280℃；

b) 离子源温度：230℃；

c) 电离方式：电子轰击电离源（EI）；

d) 监测方式：选择离子扫描模式（SIM），监测离子见附录B中表B.1；

e) 电离能量：70 eV；

f) 溶剂延迟：7 min。

5.3 定性测定

按照仪器参考条件，判定样品中存在相应目标物应满足以下条件：1) 样品中检出邻苯二甲酸酯色谱峰保留时间与标准溶液中目标化合物色谱峰保留时间差异在±0.5%范围内；2) 选择至少3个离子，在扣除背景后的样品质谱图中，每个离子信噪比≥3；3) 定性离子对的相对丰度与浓度相当的标准溶液的相对丰度偏差不超过表1的规定。

表1 离子相对丰度比最大允许偏差

相对离子丰度，K/%	K≥50	20<K<50	10<K≤20	K≤10
允许的最大偏差 %	±20	±25	±30	±50

5.4 标准曲线的制作

将系列标准工作液分别注入气相色谱-质谱仪中，测定相应的邻苯二甲酸酯化合物的定量离子的峰面积，以标准工作液的浓度为横坐标，以各邻苯二甲酸酯化合物的定量离子的峰面积为纵坐标，绘制标准曲线。

5.5 试样溶液的测定

将试样溶液注入气相色谱-质谱仪中，得到各邻苯二甲酸酯化合物的定量离子的峰面积。根据标准曲线得到待测液中各邻苯二甲酸酯化合物的浓度。

试样溶液可根据具体情况进行稀释，使其测定值在标准曲线的线性范围内。

6 分析结果的表述

试样中邻苯二甲酸酯的含量按式（1）计算：

$$X_i = \frac{(c_i - c_{i0}) \times V \times k}{m} \dots\dots(1)$$

式中：

X_i ——试样中邻苯二甲酸酯含量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

c_i ——试样提取液中邻苯二甲酸酯峰面积对应的浓度，单位为毫克每升（mg/L）；

c_{i0} ——空白提取液中邻苯二甲酸酯峰面积对应的浓度，单位为毫克每升（mg/L）；

V ——试样定容体积，单位为毫升（mL）；

k ——稀释倍数；

m ——试样质量，单位为克（g）；

计算结果保留三位有效数字。

7 精密度

在重复性条件下获得的两次独立测定结果的绝对差值不得超过算术平均值的10%。

8 其他

当样品取样量为0.2 g，定容体积为50 mL时，本方法邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯的检出限为25 mg/kg，定量限为50 mg/kg；其余17种邻苯二甲酸酯的检出限为2.5 mg/kg，定量限为5.0 mg/kg。

第二部分 邻苯二甲酸酯迁移量的测定

9 原理

食品接触材料及制品采用食品模拟物浸泡。对于迁移至水性食品模拟物和含乙醇食品模拟物中的邻苯二甲酸酯，用正己烷提取后旋转蒸发浓缩；对于化学替代溶剂异辛烷，直接旋转蒸发浓缩；对于含油脂食品模拟物橄榄油，用乙腈提取后用固相萃取小柱净化。浓缩后的提取液经气相色谱-质谱测定。保留时间和特征离子定性，外标法定量。

10 试剂和材料

除非另有说明，本方法所用试剂均为色谱纯，水为GB/T 6682规定的一级水。试验过程中应避免使用塑料材质。

10.1 试剂

10.1.1 正己烷（ C_6H_{14} ）。

10.1.2 无水乙醇（ C_2H_5OH ）。

10.1.3 乙酸（ CH_3COOH ）。

10.1.4 乙腈（ CH_3CN ）。

10.1.5 二氯甲烷（ CH_2Cl_2 ）。

10.1.6 水性、酸性、含乙醇、含油脂食品模拟物、化学替代溶剂：所用试剂依据 GB 31604.1 的规定。

10.2 标准品

10.2.1 邻苯二甲酸酯标准品

同3.2.1。

10.3 标准溶液配制

10.3.1 19种邻苯二甲酸酯标准储备液（1000 $\mu\text{g/mL}$ ）：同3.3.1。

10.3.2 17种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（50 $\mu\text{g/mL}$ ）：准确吸取除邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯外的17种邻苯二甲酸酯标准储备液（1000 $\mu\text{g/mL}$ ）各5 mL至100 mL容量瓶中，加入正己烷定容至100 mL，混匀。将溶液转移至棕色玻璃容器中，于4℃冰箱中避光保存，保存期6个月。

10.3.3 17种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）：准确移取除邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯外的17种邻苯二甲酸酯标准中间液（50 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）20 mL至100 mL容量瓶中，加入正己烷定容至100 mL，混匀。将溶液转移至棕色玻璃容器中，于4℃冰箱中避光保存，保存期6个月。

10.3.4 2种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（100 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）：同3.3.3。

10.3.5 水性食品模拟物、含乙醇食品模拟物和化学替代溶剂邻苯二甲酸酯系列标准工作溶液：准确吸取适量17种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（50 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 或10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）或2种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（100 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ），用正己烷配制浓度为0.50 mg/L、1.0 mg/L、2.0 mg/L、5.0 mg/L、10 mg/L的17种邻苯二甲酸酯类物质混合标准工作液和浓度为5.0 mg/L、10 mg/L、20 mg/L、50 mg/L、100 mg/L的2种邻苯二甲酸酯类物质混合标准工作液。临用现配。

10.3.6 含油脂食品模拟物邻苯二甲酸酯系列标准工作溶液：分别称取5份5 g橄榄油，准确吸取0.05 mL、0.1 mL 17种邻苯二甲酸酯混合标准中间液（10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）及0.05 mL、0.1 mL、0.2 mL 17种邻苯二甲酸酯混合标准混合中间液（50 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ），涡旋混合均匀，制备17种邻苯二甲酸酯浓度相当于0.1 mg/kg、0.2 mg/kg、0.5 mg/kg、1.0 mg/kg和2.0 mg/kg含油脂食品模拟物17种邻苯二甲酸酯系列标准工作溶液。分别称取5份5 g橄榄油，准确移取0.05 mL、0.10 mL 2种邻苯二甲酸酯类物质混合标准储备液（100 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）以及0.025 mL、0.05 mL、0.1 mL 2种邻苯二甲酸酯类物质混合标准中间液（1000 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ），涡旋混合均匀，制备2种邻苯二甲酸酯类物质浓度相当于1.0 mg/kg、2.0 mg/kg、5.0 mg/kg、10.0 mg/kg、20.0 mg/kg的含油脂食品模拟物2种邻苯二甲酸酯系列标准工作溶液。而后按照12.2.4处理标准工作溶液。临用现配。

11 仪器和设备

11.1 气相色谱-质谱仪：带电子轰击源（EI）。

11.2 离心机。

11.3 涡旋振荡器。

11.4 固相萃取装置。

11.5 旋转蒸发器。

11.7 离心管。

11.8 容量瓶：量程100 mL。

11.9 玻璃器皿：洗净后，用水淋洗3次，丙酮浸泡1 h，在200℃下烘烤2 h，冷却至室温备用。

11.10 微量进样器。

11.11 固相萃取小柱：PSA/Silica复合填料玻璃柱（500 mg/500 mg，6 mL）或性能相当者。

12 分析步骤

12.1 浸泡液的制备

按照GB 5009.156及GB 31604.1的要求，对样品进行迁移试验，得到浸泡液。

12.2 试液的制备

12.2.1 水性、酸性、含乙醇食品模拟物（乙醇体积分数<50%）

准确移取10 mL浸泡液于25 mL离心管中，加入4 mL正己烷，振荡提取10 min，4000 r/min转

速下离心 5 min，取正己烷层。再重复提取两次，合并提取液于烧瓶中。在 45℃ 下减压旋转蒸发至干。加入 1 mL 正己烷，涡旋振荡复溶，取上清液供仪器检测。

12.2.2 含乙醇食品模拟物（50% ≤ 乙醇体积分数 < 95%）

准确移取 10 mL 浸泡液于 25 mL 离心管中，加入 10 mL 水，加入 4 mL 正己烷，振荡提取 10 min，4000 r/min 转速下离心 5 min，取正己烷层。再重复提取两次，合并提取液与烧瓶中。在 45℃ 下减压旋转蒸发至干。加入 1 mL 正己烷，涡旋振荡复溶，取上清液供仪器检测。

12.2.3 95%（体积分数）乙醇和异辛烷化学替代溶剂

准确移取 10 mL 浸泡液于烧瓶中，在 45℃ 下减压旋转蒸发至干。加入 1 mL 正己烷，涡旋振荡复溶，取上清液供仪器检测。

12.2.4 含油脂食品模拟物

称取 5 g（精确至 0.01 g）浸泡液于 50 mL 离心管中，加入 25 mL 乙腈，涡旋振荡提取 10 min，4000 r/min 转速下离心 10 min，取乙腈层。重复提取一次，合并提取液于烧瓶中。将合并的乙腈提取液在 45℃ 下减压旋转蒸发至约 5 mL，作为待净化液。在固相萃取小柱中依次加入 5 mL 二氯甲烷、5 mL 乙腈活化，弃去流出液；将待净化液加入固相萃取小柱，收集流出液；再加入 5 mL 乙腈，收集流出液，合并两次收集的流出液，在 45℃ 下减压旋转蒸发至干。加入 1 mL 正己烷，涡旋振荡复溶，取上清液供仪器检测。

12.3 空白试验

按 12.1 的操作获得未与食品接触材料接触的空白浸泡液，而后按 12.2 处理，进入气相色谱-质谱仪测定。

12.4 仪器参考条件

同 5.2。

12.5 定性测定

同 5.3。

12.6 标准溶液的制作

同 5.4。

12.7 试样溶液的测定

同 5.5。

13 分析结果的表述

13.1 浸泡液中邻苯二甲酸酯迁移量的计算

13.1.1 水性食品模拟物、含乙醇食品模拟物及化学替代溶剂

水性食品模拟物、含乙醇食品模拟物及化学替代溶剂中邻苯二甲酸酯迁移量，按式（2）计算：

$$X_1 = \frac{(c - c_0) \times V \times N}{V_0} \dots\dots (2)$$

式中：

X_1 ——食品模拟物中邻苯二甲酸酯迁移量，单位为毫克每升（mg/L）；

c ——试样浸泡液中邻苯二甲酸酯含量，单位为毫克每升（mg/L）；

c_0 ——空白浸泡液中邻苯二甲酸酯含量，单位为毫克每升（mg/L）；

V ——定容体积，单位为毫升；

V_0 ——取样量，单位为毫升；

N ——稀释倍数。

13.1.2 含油脂食品模拟物

含油脂食品模拟物中邻苯二甲酸酯迁移量，按式（3）计算：

$$X_1 = (c - c_0) \times N \quad \dots\dots (3)$$

式中：

X_1 ——含油脂食品模拟物中邻苯二甲酸酯迁移量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

c ——试样浸泡液中邻苯二甲酸酯含量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

c_0 ——空白浸泡液中邻苯二甲酸酯含量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

N ——稀释倍数。

13.2 食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯特定迁移量的计算

13.2.1 非密封制品类食品接触材料及制品邻苯二甲酸酯特定迁移量的计算（以mg/kg表示）

除了盖子、密封圈、连接件等密封制品（以下简称密封制品）以外的食品接触材料及制品，邻苯二甲酸酯特定迁移量以mg/kg表示时，按式（4）进行计算：

$$X_2 = X_1 \cdot \frac{V_1 \cdot S_0}{S_1 \cdot m_1} \quad \dots\dots (4)$$

式中：

X_2 ——食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯特定迁移量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

V_1 ——迁移试验中试样浸泡液体积或质量，单位为升（L）或千克（kg）；

S_1 ——迁移试验中试样与浸泡液接触的面积，单位为平方分米（dm²）；

m_1 ——食品接触材料及制品实际使用中接触固态食品质量或液体食品体积对应的质量，单位为千克（kg）；各种液态食品按密度为1 kg/L将体积换算为对应的质量。

S_0 ——食品接触材料及制品实际使用中接触食品的面积，单位为平方分米（dm²）；

结果至少保留2位有效数字。

13.2.2 密封制品类食品接触材料及制品邻苯二甲酸酯特定迁移量的计算（以mg/kg表示）

当预期用途已知时，密封制品类食品接触材料及制品，邻苯二甲酸酯特定迁移量以mg/kg表示时，按式（5）进行计算：

$$X_3 = X_1 \cdot \frac{V_1 \cdot S_0}{S_1 \cdot m_2} \quad \dots\dots (5)$$

式中：

X_3 ——食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯特定迁移量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

V_1 ——迁移试验中试样浸泡液体积或质量，单位为升（L）或千克（kg）；

S_1 ——迁移试验中试样与浸泡液接触的面积，单位为平方分米（dm²）；

m_2 ——食品接触材料及制品实际使用容器盛装固态食品质量或液体食品体积对应的质量，单位为千克（kg）；各种液态食品按密度为1 kg/L将体积换算为对应的质量。

S_0 ——密封制品实际使用中接触食品的面积，单位为平方分米（dm²）；

结果至少保留2位有效数字。

13.2.3 密封制品类食品接触材料及制品邻苯二甲酸酯特定迁移量的计算（以mg/件表示）

当预期用途未知时，密封制品类食品接触材料及制品，邻苯二甲酸酯特定迁移量以mg/件表示时，按式（6）进行计算，需注明采用的迁移试验方法、迁移试验中单个密封制品与食品模拟物接触的面积：

$$X_4 = X_1 \cdot \frac{V_1}{n} \quad \dots\dots (6)$$

式中：

X_4 ——食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯特定迁移量，单位为毫克每千克（mg/kg）；

V_1 ——试样浸泡液体积或质量，单位为升（L）或千克（kg）；

n ——浸泡用密封制品的数量，单位件。

结果至少保留2位有效数字。

14 精密度

在重复性条件下获得的两次独立测定结果的绝对差值不得超过算术平均值的15%。

15 其他

水性食品模拟物、含乙醇食品模拟物、异辛烷和95%（体积分数）乙醇中，邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯检出限为0.1 mg/L，定量限为1.0 mg/L；邻苯二甲酸二正丁酯和邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯检出限为0.05 mg/L、定量限为0.1 mg/L；其余15种邻苯二甲酸酯的检出限为0.01 mg/L、定量限为0.1 mg/L。

含油脂模拟物中，邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯的检出限为0.1 mg/kg，定量限为1.0 mg/kg；邻苯二甲酸二正丁酯和邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯检出限为0.05 mg/kg、定量限为0.1 mg/kg；其余15种邻苯二甲酸酯的检出限为0.01 mg/kg、定量限为0.1 mg/kg。

食品接触材料及制品中邻苯二甲酸酯迁移量的检出限与定量限，以食品模拟物中邻苯二甲酸酯方法检出限与定量限为基础，按第13节进行计算。

附录 A

19种邻苯二甲酸酯信息

19种邻苯二甲酸酯名称、缩写、CAS号、分子式见表A.1。

表A.1 19种邻苯二甲酸酯信息

序号	名称	缩写	CAS号	分子式
1	邻苯二甲酸二甲酯	DMP	131-11-3	C ₁₀ H ₁₀ O ₄
2	邻苯二甲酸二乙酯	DEP	84-66-2	C ₁₂ H ₁₄ O ₄
3	邻苯二甲酸二烯丙酯	DAP	131-17-9	C ₁₄ H ₁₄ O ₄
4	邻苯二甲酸二异丁酯	DIBP	84-69-5	C ₁₆ H ₂₂ O ₄
5	邻苯二甲酸二正丁酯	DBP	84-74-2	C ₁₆ H ₂₂ O ₄
6	邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯	DMEP	117-82-8	C ₁₄ H ₁₈ O ₆
7	邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯	BMPP	146-50-9	C ₂₀ H ₃₀ O ₄
8	邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯	DEEP	605-54-9	C ₁₆ H ₂₂ O ₆
9	邻苯二甲酸二戊酯	DPP	131-18-0	C ₁₈ H ₂₆ O ₄
10	邻苯二甲酸二己酯	DHXP	84-75-3	C ₂₀ H ₃₀ O ₄
11	邻苯二甲酸丁基苄基酯	BBP	85-68-7	C ₁₉ H ₂₀ O ₄
12	邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯	DBEP	117-83-9	C ₂₀ H ₃₀ O ₆
13	邻苯二甲酸二环己酯	DCHP	84-61-7	C ₂₀ H ₂₆ O ₄
14	邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯	DEHP	117-81-7	C ₂₄ H ₃₈ O ₄
15	邻苯二甲酸二苯酯	DPhP	84-62-8	C ₂₀ H ₁₄ O ₄
16	邻苯二甲酸二正辛酯	DNOP	117-84-0	C ₂₄ H ₃₈ O ₄
17	邻苯二甲酸二异壬酯	DINP	28553-12-0	C ₂₆ H ₄₂ O ₄
	邻苯二甲酸二-C8~C10支链烷基酯(C9富集)		68515-48-0	C _{8+2x} H _{6+4x} O ₄ (x=8~10)
18	邻苯二甲酸二异癸酯	DIDP	26761-40-0	C ₂₈ H ₄₆ O ₄
	邻苯二甲酸二-C9~C11支链烷基酯(C10富集)		68515-49-1	C _{8+2x} H _{6+4x} O ₄ (x=9~11)
19	邻苯二甲酸二壬酯	DNP	84-76-4	C ₂₆ H ₄₂ O ₄

附录 B

19种邻苯二甲酸酯定量和定性选择离子表

19种邻苯二甲酸酯的保留时间、定性和定量离子参数见表B.1。

表B.1 19种邻苯二甲酸酯定量和定性选择离子表

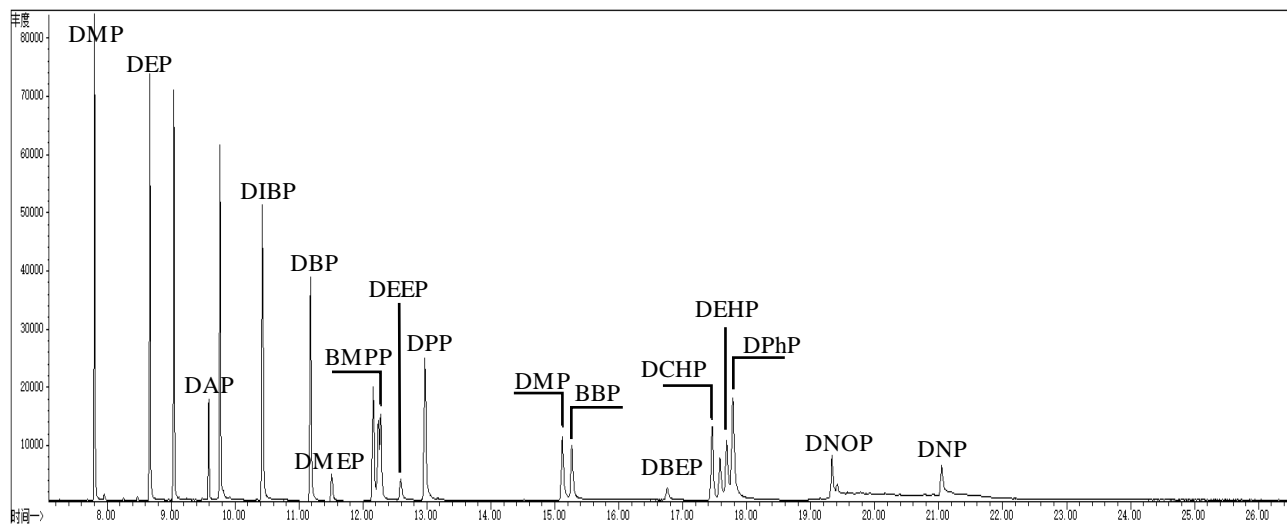
序号	化合物名称	保留时间 min	选择离子 m/z	丰度比
1	邻苯二甲酸二甲酯 (DMP)	7.80	163*,77,133,194	100:21:8:8
2	邻苯二甲酸二乙酯 (DEP)	8.67	149*,177,105,222	100:23:10:2
3	邻苯二甲酸二烯丙酯 (DAP)	9.59	41,149*,189,132	100:68:19:14
4	邻苯二甲酸二异丁酯 (DIBP)	10.43	149*,104,223,107	100:10:8:3
5	邻苯二甲酸二正丁酯 (DBP)	11.18	149*,223,205,104	100:6:5:4
6	邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯 (DMEP)	11.52	59,149*,104,176	100:23:22:5
7	邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯 (BMPP)	12.24	149*,167,85,251	100:51:32:13
8	邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯 (DEEP)	12.59	72,149*,104,193	100:91:32:32
9	邻苯二甲酸二戊酯 (DPP)	12.97	149*,237,219,104	100:11:5:2
10	邻苯二甲酸二己酯 (DHXP)	15.12	149*,251,104,233	100:11:4:2
11	邻苯二甲酸丁基苄基酯 (BBP)	15.27	149*,91,206,104	100:49:35:12
12	邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯 (DBEP)	16.76	149*,101,85,193	100:53:52:50
13	邻苯二甲酸二环己酯 (DCHP)	17.46	149*,167,249,104	100:40:9:4
14	邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯 (DEHP)	17.69	149*,167,279,113	100:38:14:9
15	邻苯二甲酸二苯酯 (DPhP)	17.79	225*,77,104,153	100:13:6:5
16	邻苯二甲酸二正辛酯 (DNOP)	19.30	149*,279,104,261	100:11:4:3
17	邻苯二甲酸二壬酯 (DNP)	21.05	149*,293,167,275	100:10:6:2
18	邻苯二甲酸二异壬酯 (DINP)	19.0-21.0	149,293*,127,167	100:18:13:9
19	邻苯二甲酸二异癸酯 (DIDP)	20.5-22.5	149,307*,141,167	100:24:11:10

注：*为定量离子

附录 C

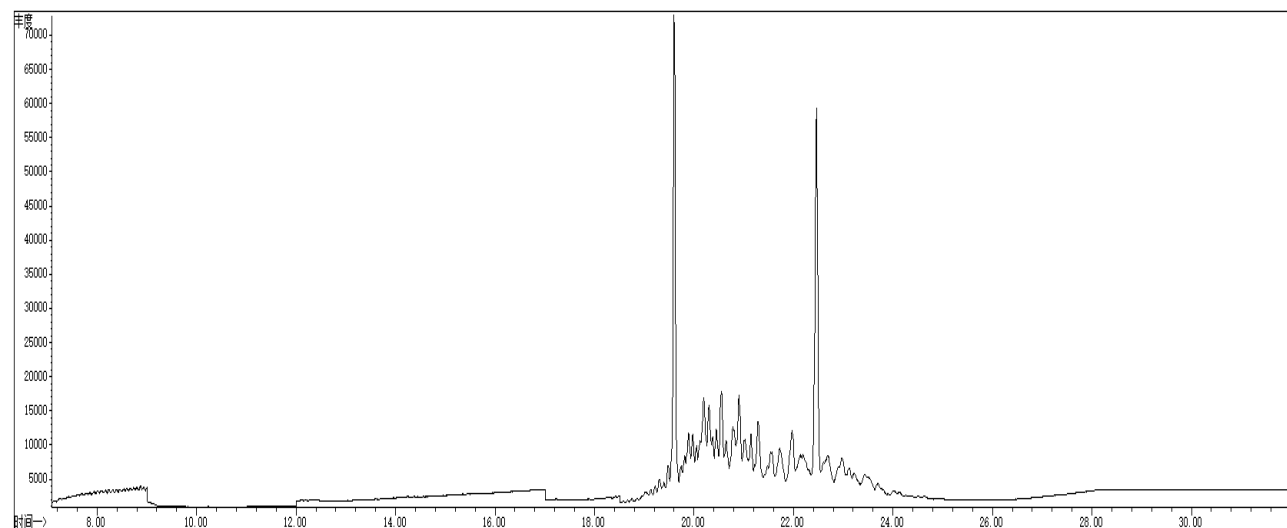
邻苯二甲酸酯标准样溶液气相色谱-质谱总离子流色谱图

17种邻苯二甲酸酯标准溶液气相色谱-质谱总离子流色谱图（0.1 $\mu\text{g/mL}$ ）见图C.1。



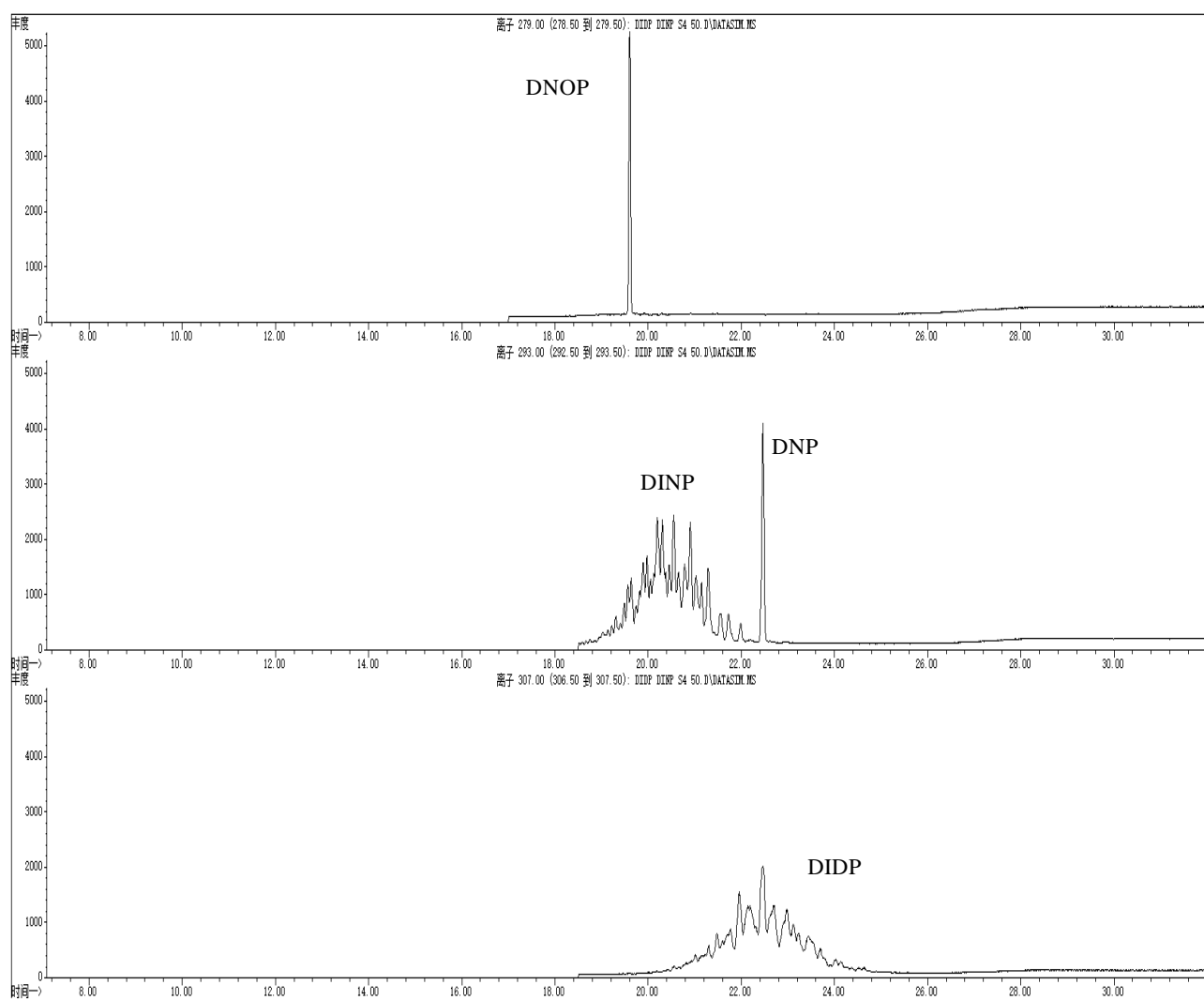
图C.1 17种邻苯二甲酸酯标准溶液气相色谱-质谱总离子流色谱图（TIC）（0.1 $\mu\text{g/mL}$ ）

邻苯二甲酸二正辛酯（DNOP，0.1 $\mu\text{g/mL}$ ）、邻苯二甲酸二壬酯（DNP，0.1 $\mu\text{g/mL}$ ）、邻苯二甲酸二异壬酯（DINP，1.0 $\mu\text{g/mL}$ ）和邻苯二甲酸二异癸酯（DIDP，1.0 $\mu\text{g/mL}$ ）标准溶液气相色谱-质谱总离子流图见图C.2。



图C.2 4种邻苯二甲酸酯标准溶液气相色谱-质谱总离子流色谱图（TIC）（0.1 或1.0 $\mu\text{g/mL}$ ）

同时测定邻苯二甲酸二正辛酯、邻苯二甲酸二壬酯、邻苯二甲酸二异壬酯和邻苯二甲酸二异癸酯四种化合物时，选择149作为定量离子时存在干扰，此时DNOP可以选择279作为定量离子，DINP和DNP可以选择293作为定量离子，DIDP可以选择307作为定量离子。见图C.3



图C.3 4种邻苯二甲酸酯标准溶液气相色谱-质谱选择离子 (m/z 279、293或307) 色谱图。