

补充资料
(信息性)

色谱分析

以下参数已成功验证。

S1. 控制点标准溶液的浓度载于下表：

指标	浓度 (毫克 / 升)
桂皮醛	0.5
香茅醛	0.5
丁香酚	0.5
芳樟醇	0.5
乙酸芳樟酯	0.5
百里香酚	0.5

S2. 使用不同检测器的气相色谱条件示例

示例 1 配备质量选择检测器的气相色谱仪

气相色谱仪：	Thermo Scientific TRACE 1310 ¹⁾ 气相色谱仪， 配备 AS 1310 自动取样器
检测器：	Thermo Scientific TSQ 8000 EVO ¹⁾ 质谱仪
柱：	Restek Stabilwax-MS ²⁾ ，30 米 x 0.25 毫米 x 0.25 微米
载气：	氦气，纯度 99.999%
流速：	1.0 毫升 / 分钟
进样模式：	分流模式，分流比例 50:1
进样器温度：	220℃
检测器设定：	传输线温度：220℃ 离子化模式：电子离子化 离子源温度：200℃
进样量：	1 微升
升温程序：	初始 60℃，保持 10 分钟后，以每分钟 15℃ 升 至 180℃，保持 6 分钟；再以每分钟 40℃ 升至 220℃，保持 3 分钟

-
- 1) TRACE 1310 和 TSQ 8000 EVO 是 Thermo Fisher Scientific 提供的一款气相色谱仪的商品名称。本项信息仅为方便本方法的使用者而提供，并不构成卫生署对上述产品的认可。如能证明可以产生相同的结果，则亦可使用同等产品。
- 2) Restek Stabilwax-MS 是 Restek 提供的一款色谱柱的商品名称。本项信息仅为方便本方法的使用者而提供，并不构成卫生署对上述产品的认可。如能证明可以产生相同的结果，则亦可使用同等产品。

选择离子监测参数：

指标	选择离子监测模式—选定离子(m/z)		
	基峰	特征离子 1	特征离子 2
桂皮醛	131	132	103
香茅醛	69	41	95
丁香酚	164	149	103
芳樟醇	71	93	80
乙酸芳樟酯	93	80	121
百里香酚	135	150	91

对照保留时间：

指标	保留时间(分钟)
桂皮醛	20.85
香茅醛	15.11
丁香酚	22.73
芳樟醇	15.87
乙酸芳樟酯	15.99
百里香酚	22.99

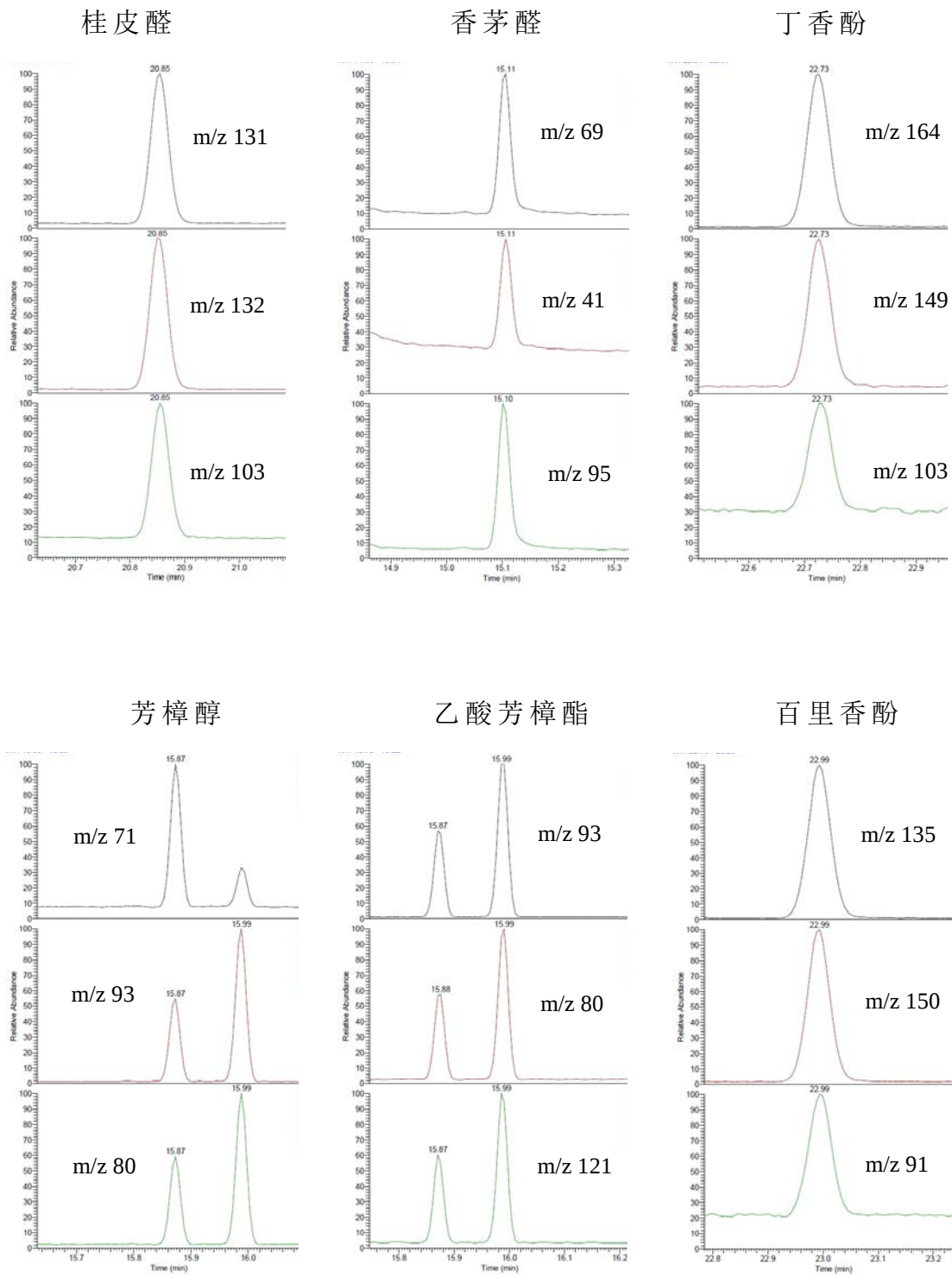


图 1 控制点标准溶液 Std-Ctrl 的对照色谱图

示例 2 配备串联质谱仪的气相色谱仪

气相色谱仪： Thermo Scientific TRACE 1310¹⁾气相色谱仪，
配备 AS 1310 自动取样器

检测器： Thermo Scientific TSQ 8000 EVO¹⁾质谱仪

柱： Restek Stabilwax-MS²⁾，30 米 x 0.25 毫米 x
0.25 微米

载气： 氦气，纯度 99.999%

流速： 1.0 毫升 / 分钟

进样模式： 分流模式，分流比例 50:1

进样器温度： 220℃

检测器设定： 传输线温度： 220℃
离子化模式： 电子离子化
离子源温度： 200℃

进样量： 1 微升

升温程序： 初始 60℃，保持 10 分钟后，以每分钟 15℃ 升
至 180℃，保持 6 分钟；再以每分钟 40℃ 升至
220℃，保持 3 分钟

多重反应监测参数：

指标	多重反应监测对		CE (eV)
	母离子 (m/z)	子离子 (m/z)	
桂皮醛	131	77	25
	131	103	10
香茅醛	95	55	15
	109	67	5
丁香酚	164	149	10
	164	131	10
芳樟醇	121	93	5
	121	77	20
乙酸芳樟酯	136	93	10
	136	121	10
百里香酚	135	91	15

	150	135	10
--	-----	-----	----

对照保留时间：

指标	保留时间(分钟)
桂皮醛	20.84
香茅醛	15.09
丁香酚	22.69
芳樟醇	15.86
乙酸芳樟酯	15.98
百里香酚	22.95

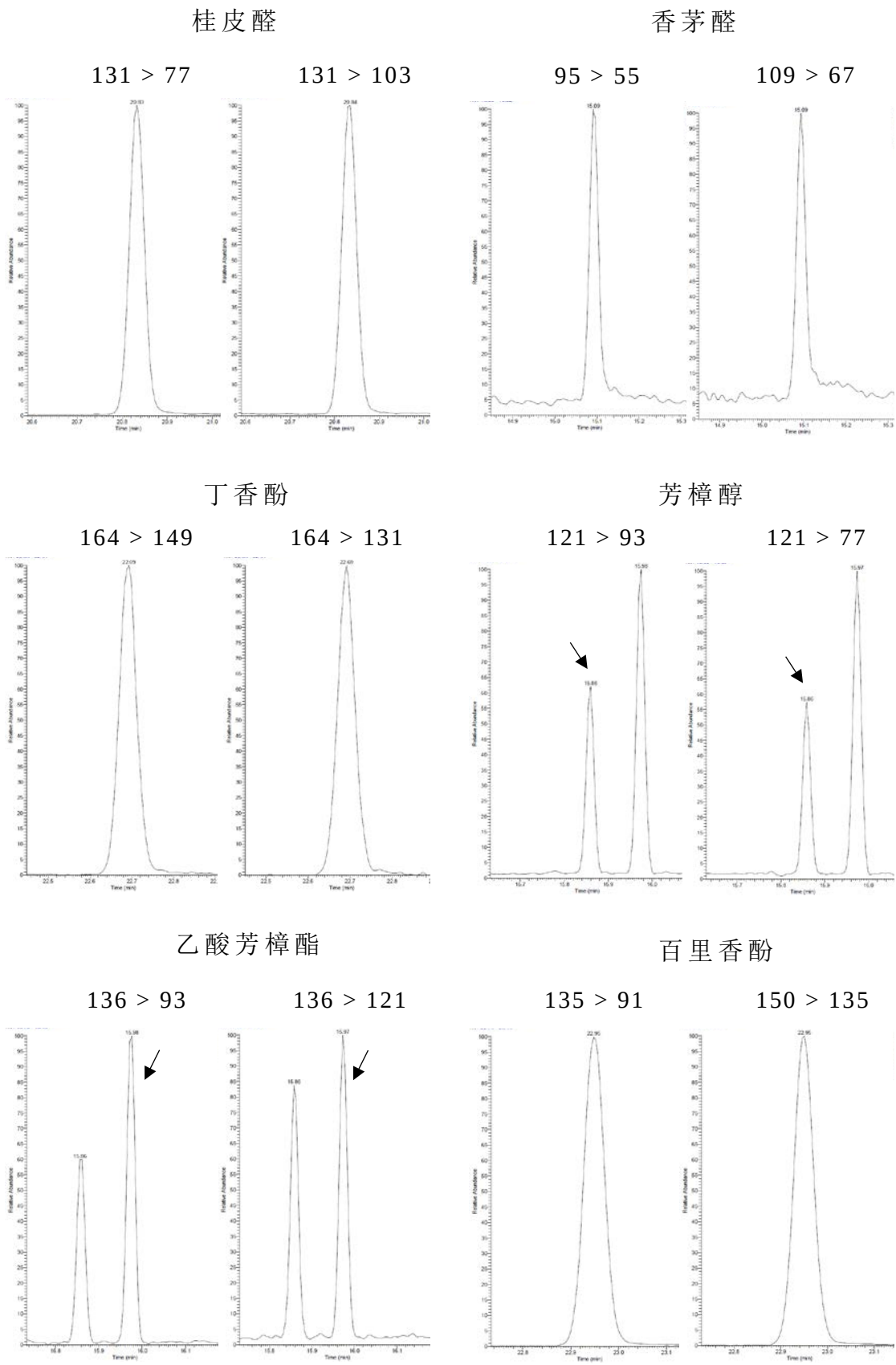


图 2 控制点标准溶液 Std-Ctrl 的对照色谱图

S3. 特异性—假阴性率

采用不同检测方法的假阴性率(即假阴性结果对照在研究的控制点水平加入的空白样本数量的比例)载于下表：

指标	假阴性率(%)	
	气相色谱质谱联用法	气相色谱串联质谱法
桂皮醛	0 (19)	0 (19)
香茅醛	0 (27)	0 (27)
丁香酚	0 (12)	0 (12)
芳樟醇	0 (10)	0 (10)
乙酸芳樟酯	0 (34)	0 (34)
百里香酚	0 (40)	0 (40)

括号中的数字为研究的样本总数。

S4. 方法的适用性

从市面上获得的 40 个样本分别以气相色谱质谱联用法和气相色谱串联质谱法分析后，并无发现受到明显的干扰，使用上述两种方法可取得一致的结果。