



中华人民共和国国家标准

GB/T 28599—2020
代替 GB/T 28599—2012

化妆品中邻苯二甲酸酯类物质的测定

Determination of phthalate esters in cosmetics

2020-09-29 发布

2021-01-01 实施

国家市场监督管理总局 发布
国家标准化管理委员会

前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准代替 GB/T 28599—2012《化妆品中邻苯二甲酸酯类物质的测定》，与 GB/T 28599—2012 相比，主要技术变化如下：

- 修改了标准的适用范围，完善了三种测定方法适用的化妆品的基质类型，第二法（高效液相色谱法）去掉了指甲油类化妆品基质；另外，第一法（气相色谱-质谱联用法）和第二法（高效液相色谱法）目标物质的测定由 22 种增加到 24 种，第三法（气相色谱法）目标物质的测定由 18 种增加到 24 种；
- 修改了标准分析步骤中试样制备过程和测定条件；
- 修改了标准第一法（气相色谱-质谱联用法）的检出限和定量限，统一了第二法（高效液相色谱法）不同化妆品基质的检出限和定量限。

本标准由全国质量监管重点产品检验方法标准化技术委员会(SAC/TC 374)提出并归口。

本标准起草单位：北京市食品安全监控和风险评估中心(北京市食品检验所)/国家化妆品质量监督检验中心(北京)、中检华纳(北京)质量技术中心有限公司、华纳通标(北京)认证有限公司、上海市质量监督检验技术研究院、广州质量监督检测研究院、御家汇股份有限公司、广州锦同生物科技有限公司、完美(广东)日用品有限公司。

本标准主要起草人：周相娟、穆同娜、陈江龙、潘红艳、杨红梅、陆志芸、郭新东、孟杰、许华、戴跃锋、胡守江、侯向昶、孔令超、卢征、席广成、黄瑞娟、邵明媛、张庆、郑存哲。

本标准所代替标准的历次版本发布情况为：

- GB/T 28599—2012。

化妆品中邻苯二甲酸酯类物质的测定

1 范围

本标准规定了化妆品中邻苯二甲酸酯类物质的气相色谱-质谱联用(GC/MS)、高效液相色谱(HPLC)和气相色谱(GC)测定方法。

本标准适用于化妆品中邻苯二甲酸酯类物质的含量测定,其中第一法气相色谱-质谱联用法适用于水剂、香水、膏霜、乳液、凝胶、精油、指甲油、固体化妆品中 24 种邻苯二甲酸酯类物质的测定,为仲裁法;第二法高效液相色谱法适用于水剂、香水、膏霜、乳液、凝胶、精油、固体化妆品中 24 种邻苯二甲酸酯类物质的测定;第三法气相色谱法适用于水剂、香水、膏霜、乳液、凝胶、精油、指甲油、固体化妆品中 24 种邻苯二甲酸酯类物质的测定。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件,仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

GB/T 6682 分析实验室用水规格和试验方法

3 第一法 气相色谱-质谱联用法(GC/MS 法)(仲裁法)

3.1 原理

化妆品提取、净化后经气相色谱-质谱联用仪进行测定。采用选择离子监测模式(SIM)扫描,以保留时间和碎片的丰度比定性,外标法定量。

3.2 试剂和材料

除非另有规定,仅使用色谱纯试剂。试验中所用容器及转移器具应避免使用塑料材质。

3.2.1 水,GB/T 6682,一级。

3.2.2 正己烷。

3.2.3 甲醇。

3.2.4 二氯甲烷。

3.2.5 乙酸乙酯。

3.2.6 24 种邻苯二甲酸酯类物质标准品:邻苯二甲酸二甲酯、邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯、邻苯二甲酸二乙酯、邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯、邻苯二甲酸二烯丙酯、邻苯二甲酸二异丙酯、邻苯二甲酸二丙酯、邻苯二甲酸二苯酯、邻苯二甲酸二苄酯、邻苯二甲酸丁基苄基酯、邻苯二甲酸二异丁酯、邻苯二甲酸二丁酯、邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯、邻苯二甲酸二戊酯、邻苯二甲酸二异戊酯、邻苯二甲酸正戊基异戊酯、邻苯二甲酸二环己酯、邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯、邻苯二甲酸二己酯、邻苯二甲酸二庚酯、邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯、邻苯二甲酸二正辛酯、邻苯二甲酸二壬酯、邻苯二甲酸二癸酯,纯度均大于 99%,或具有标准物质证书的混合标准溶液。邻苯二甲酸酯类物质标准品英文名称及 CAS 号见附录 A。

3.2.7 标准储备溶液:准确称取各邻苯二甲酸酯类物质标准品 50 mg(精确到 0.000 1 g),于同一烧杯

瓶中,用正己烷(3.2.2)溶解,定容至 10 mL 容量瓶中,配制成 5 000 mg/L 的储备溶液,于 4 ℃冰箱中避光保存,有效期 6 个月。

3.2.8 标准工作溶液:将标准储备溶液(3.2.7)用正己烷(3.2.2)稀释成浓度为 0.05 mg/L、0.10 mg/L、0.20 mg/L、0.50 mg/L、1.00 mg/L 的系列标准工作溶液待用。此系列标准工作液应现用现配。

3.2.9 有机滤膜:0.45 μm。

3.3 仪器

3.3.1 气相色谱-质谱联用仪:配有电子轰击源(EI)。

3.3.2 玻璃 Silica/PSA 固相萃取柱(6 mL,1 000 mg)或相当者。

3.3.3 分析天平:感量 0.000 1 g。

3.3.4 离心机:转速不低于 4 000 r/min。

3.3.5 超声波清洗器。

3.3.6 涡旋混合器。

3.3.7 氮吹仪。

3.3.8 固相萃取(SPE)装置。

3.4 分析步骤

3.4.1 试样制备

3.4.1.1 水剂类化妆品、香水

称取混匀试样约 0.5 g(精确至 0.000 1 g)于具塞玻璃刻度比色管中,加入正己烷(3.2.2)定容至 10.0 mL,涡旋混匀 2 min 后,4 000 r/min 离心 3 min。上清液过 0.45 μm 有机滤膜后,滤液进行 GC/MS 分析。

3.4.1.2 膏霜、乳液、凝胶、精油、指甲油类化妆品

称取混匀试样约 0.5 g(精确至 0.000 1 g)于具塞玻璃刻度比色管中,加入甲醇(3.2.3)定容至 10.0 mL,涡旋混匀 2 min 后超声提取 20 min,2 000 r/min 离心 5 min,取 5.0 mL 上清液净化。依次用 5 mL 二氯甲烷(3.2.4)、5 mL 甲醇(3.2.3)活化固相萃取柱(3.3.2),弃去流出液,将待净化液加入固相萃取柱,收集流出液,再加入 3 mL 甲醇(3.2.3),收集流出液,合并两次收集的流出液于 40 ℃氮吹至近干,准确加入 5.0 mL 正己烷(3.2.2)溶解。过 0.45 μm 有机滤膜后,滤液进行 GC/MS 分析。

3.4.1.3 固体类化妆品

称取试样约 0.5 g(精确至 0.000 1 g)于具塞玻璃刻度比色管中,准确加入 2.0 mL 乙酸乙酯(3.2.5)涡旋使其溶解,必要时用玻璃棒研碎试样,再加入甲醇(3.2.3)定容至 10.0 mL,涡旋混匀 2 min 后超声提取 20 min,2 000 r/min 离心 5 min,取 5.0 mL 上清液净化,净化方法同 3.4.1.2。过 0.45 μm 有机滤膜后,滤液进行 GC/MS 分析。

3.4.2 空白试验

除不称取样品外,分别按 3.4.1 的步骤制作相应的空白样液。

3.4.3 测定条件

3.4.3.1 色谱条件

由于实验室仪器设备的多样性,因此不可能给出分析条件的普遍参数,采用下列操作条件已被证明

对测试是合适的：

- a) 色谱柱：5%苯基-甲基聚硅氧烷石英毛细管柱，30 m×0.25 mm(i.d)×0.25 μm 或相当型号色谱柱；
- b) 进样口温度：280 ℃；
- c) 升温程序：初始柱温 60 ℃，保持 1 min；以 20 ℃/min 升温至 220 ℃，保持 4 min；以 5 ℃/min 升温至 250 ℃，保持 1 min；以 20 ℃/min 升温至 290 ℃，保持 5 min；
- d) 载气：氦气，纯度大于或等于 99.999%；
- e) 流速：1.0 mL/min；
- f) 进样方式：不分流进样；
- g) 进样量：1.0 μL。

3.4.3.2 质谱条件

由于测试结果取决于所使用的仪器，因此不可能给出分析条件的普遍参数，采用下列操作条件已被证明对测试是合适的：

- a) 色谱与质谱接口温度：280 ℃；
- b) 电离方式：电子轰击源(EI)；
- c) 监测方式：选择离子监测模式(SIM)；
- d) 电离能量：70 eV；
- e) 溶剂延迟：5 min。

邻苯二甲酸酯类物质参考保留时间、定量和定性选择离子表参见附录 B。

3.4.4 标准工作曲线绘制

将标准工作溶液(3.2.8)按照 3.4.3 的测定条件由低至高浓度进样检测，以各邻苯二甲酸酯类物质的标准溶液浓度为横坐标，各自的定量离子的峰面积为纵坐标，建立标准工作曲线。

24 种邻苯二甲酸酯类物质的气相色谱-质谱选择离子色谱图参见附录 C。

3.4.5 定性确证

在测定条件(3.4.3)下，试样待测液和标准品的选择离子色谱峰在相同保留时间处(±0.5%)出现，并且对应质谱碎片离子的质荷比与标准品一致，其丰度比与标准品相比应符合表 1 的要求，则可定性确证目标分析物。

表 1 定性确证时离子相对丰度的最大允许偏差

相对离子丰度 %	允许的最大偏差 %
>50	±20
>20~≤50	±25
>10~≤20	±30
≤10	±50

3.4.6 定量分析

将试样待测液(3.4.1)按 3.4.3 的测定条件进行测定，以试样定量离子的峰面积与标准曲线比较得

到相应的质量浓度。

试样待测液中的被测物的响应值均应在仪器测定的线性范围之内,若试样待测液的质量浓度过高,应适当稀释后测定。

3.4.7 平行试验

按 3.4.1 至 3.4.6 步骤,对同一样品进行平行试验测定。

3.4.8 结果计算

样品中邻苯二甲酸酯类物质的含量按式(1)进行计算:

$$X_i = \frac{(\rho_i - \rho_0) \times V \times K \times 1\,000}{m \times 1\,000} \dots\dots\dots(1)$$

式中:

X_i ——试样中某种邻苯二甲酸酯的含量,单位为毫克每千克(mg/kg);

ρ_i ——试样中某种邻苯二甲酸酯峰面积对应的质量浓度,单位为毫克每升(mg/L);

ρ_0 ——空白样液中某种邻苯二甲酸酯的质量浓度,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。

3.5 检出限与定量限

本方法每种邻苯二甲酸酯类物质的检出限均为 1.0 mg/kg,定量限均为 2.5 mg/kg。

3.6 精密度

在同一实验室,由同一操作者使用相同仪器设备,按相同的测试方法,并在短时间内对同一被测对象相互独立进行测试获得的两次独立测试结果的绝对差值不大于这两个测定值的算术平均值的 15%。

4 第二法 高效液相色谱法(HPLC 法)

4.1 原理

化妆品经提取、净化、过滤后,经配有二极管阵列检测器的高效液相色谱仪测定,根据保留时间和紫外吸收光谱图定性,外标法定量。

4.2 试剂和材料

除非另有规定,仅使用色谱纯试剂。试验中所用容器及转移器具应避免使用塑料材质。

4.2.1 水,GB/T 6682,一级。

4.2.2 甲醇。

4.2.3 二氯甲烷。

4.2.4 氯化钠:分析纯。

4.2.5 海砂:化学纯,60 目~80 目,丙酮浸泡 1 h,正己烷淋洗,晾干备用。

4.2.6 24 种邻苯二甲酸酯类物质标准品,同 3.2.6。

4.2.7 混合标准储备溶液(1 000 mg/L):准确称取每种邻苯二甲酸酯类物质标准品各 10 mg(精确到 0.000 1 g)于同一烧杯中,用甲醇(4.2.2)溶解定容至 10 mL,配制成 1 000 mg/L 的混合标准储备溶液,

于 4℃ 冰箱中避光保存,有效期 6 个月。

4.2.8 混合标准工作溶液(100 mg/L):量取标准储备溶液(4.2.7)1.0 mL 于 10 mL 容量瓶中,用甲醇(4.2.2)定容至刻度,配制成 100 mg/L 的混合标准工作溶液,于 4℃ 冰箱中避光保存,有效期 1 个月。

4.2.9 有机滤膜:0.45 μm。

4.3 仪器

4.3.1 高效液相色谱仪,配二极管阵列检测器。

4.3.2 玻璃 Silica/PSA 固相萃取柱(6 mL,1 000 mg)或相当者。

4.3.3 分析天平:感量 0.000 1 g。

4.3.4 离心机:转速不低于 4 000 r/min。

4.3.5 超声波清洗器。

4.3.6 涡旋混合器。

4.3.7 氮吹仪。

4.3.8 固相萃取(SPE)装置。

4.4 分析步骤

4.4.1 试样制备

4.4.1.1 水剂类化妆品、香水

称取试样 1.0 g(精确至 0.000 1 g)于具塞玻璃刻度比色管中,加入甲醇(4.2.2)定容至 10.0 mL,涡旋 1 min,提取液过 0.45 μm 滤膜后测定。必要时可以用甲醇(4.2.2)稀释后进行分析。

4.4.1.2 精油类化妆品

称取混匀试样约 0.5 g(精确至 0.000 1 g)于具塞玻璃刻度比色管中,加入甲醇(4.2.2)定容至 10.0 mL,涡旋混匀 2 min 后超声提取 20 min,2 000 r/min 离心 5 min,取 5.0 mL 上清液净化。依次用 5 mL 二氯甲烷(4.2.3)、5 mL 甲醇(4.2.2)活化固相萃取柱(4.3.2),弃去流出液,将待净化液加入固相萃取柱,收集流出液,再加入 3 mL 甲醇(4.2.2),收集流出液,合并两次收集的流出液于 40℃ 氮吹至近干,准确加入 2.5 mL 甲醇(4.2.2)溶解。过 0.45 μm 有机滤膜后测定。必要时可以用甲醇(4.2.2)稀释后进行分析。

4.4.1.3 膏霜、乳液、凝胶类化妆品

称取混匀试样 1.0 g(精确至 0.000 1 g)于具塞玻璃刻度比色管中,加入甲醇(4.2.2)定容至 10.0 mL,涡旋 1 min,加入氯化钠(4.2.4)2 g,剧烈振荡以分散样品,超声提取 10 min,4 000 r/min 离心 10 min,上清液过 0.45 μm 滤膜后测定。必要时可以用甲醇(4.2.2)稀释后进行分析。

4.4.1.4 固体类化妆品

4.4.1.4.1 眉笔、粉类化妆品

称取混匀试样 1.0 g(精确至 0.000 1 g)于具塞刻度玻璃试管中,加入甲醇(4.2.2)定容至 10.0 mL,涡旋 1 min,必要时用玻璃棒研碎试样,剧烈振荡以分散试样,超声提取 10 min,4 000 r/min 离心 10 min,上清液过 0.45 μm 滤膜后测定。必要时可以用甲醇(4.2.2)稀释后进行分析。

4.4.1.4.2 唇膏类化妆品

称取混匀试样 1.0 g(精确至 0.000 1 g)于研钵中,加入海砂(4.2.5)5 g,研磨均匀,全部转移至 50 mL 具

塞刻度玻璃试管中,加入甲醇(4.2.2)定容至 10.0 mL,超声提取 10 min,上清液过 0.45 μm 滤膜后测定。必要时可以用甲醇(4.2.2)稀释后进行分析。

4.4.2 空白试验

除不称取样品外,分别按 4.4.1 的步骤制作相应的空白样液。

4.4.3 测定条件

4.4.3.1 液相色谱条件

由于实验室仪器设备的多样性,因此不可能给出分析条件的普遍参数,采用下列操作条件已被证明对测试是合适的:

- a) 色谱柱:XDB C₁₈柱,250 mm×4.6 mm(i.d),5 μm,或相当者;
- b) 流动相:A相:甲醇:乙腈(1:1,体积比);B相:水。梯度程序见表 2;
- c) 流速:1.0 mL/min;
- d) 柱温:40 ℃;
- e) 进样量:20.0 μL;
- f) 检测波长:240 nm。

表 2 流动相梯度

时间 min	A 相 %	B 相 %
0	40	60
2	52	48
10	62	38
12	78	22
20	78	22
31	100	0
45	100	0
45.5	40	60
50	40	60

4.4.3.2 标准工作曲线绘制

用初始流动相将混合标准工作溶液(4.2.8)逐级稀释,配制质量浓度为 0.5 mg/L、1.0 mg/L、5.0 mg/L、10.0 mg/L、20.0 mg/L、50.0 mg/L 的系列标准溶液,质量浓度由低到高进样检测,以峰面积为纵坐标,质量浓度为横坐标作图,绘制标准曲线,得到回归方程。

24 种邻苯二甲酸酯类物质的高效液相色谱图参见附录 D。

4.4.3.3 试样测定

将试样待测液(4.4.1)注入高效液相色谱仪中,按色谱条件(4.4.3.1)进行测定,记录色谱峰的保留时间和峰面积,根据保留时间和紫外吸收光谱图定性,由色谱峰的峰面积可从标准曲线上得到相应的质量浓度。试样待测液中的被测物的响应值均应在仪器测定的线性范围之内,若试样待测液的质量浓度

过高,应适当稀释后测定。
对于杂质干扰严重的样品或阳性结果,可采用本标准中第一法气相色谱-质谱联用法进行确证。

4.4.4 平行试验

按 4.4.1 至 4.4.3 步骤,对同一样品进行平行试验测定。

4.4.5 结果计算

样品中邻苯二甲酸酯类物质的含量按式(2)进行计算:

$$X_i = \frac{(\rho_i - \rho_0) \times V \times K \times 1\,000}{m \times 1\,000} \dots\dots\dots (2)$$

式中:
 X_i ——试样中某种邻苯二甲酸酯的含量,单位为毫克每千克(mg/kg);
 ρ_i ——试样中某种邻苯二甲酸酯峰面积对应的质量浓度,单位为毫克每升(mg/L);
 ρ_0 ——空白试液中某种邻苯二甲酸酯的质量浓度,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。

4.5 检出限与定量限

本方法各种化妆品中每种邻苯二甲酸酯类物质的检出限均为 3.0 mg/kg,定量限均为 10.0 mg/kg。

4.6 精密度

在同一实验室,由同一操作者使用相同仪器设备,按相同的测试方法,并在短时间内对同一被测对象相互独立进行测试获得的两次独立测试结果的绝对差值不大于这两个测定值的算术平均值的 15%。

5 第三法 气相色谱法(GC 法)

5.1 原理

化妆品中邻苯二甲酸酯类物质经有机溶剂提取、净化后,由气相色谱仪进行测定,采用氢火焰离子化检测器(FID)分析,外标法定量。

5.2 试剂与器具

除非另有规定,仅使用色谱纯试剂。试验中所用容器及转移器具应避免使用塑料材质。

- 5.2.1 水,GB/T 6682,一级。
- 5.2.2 正己烷。
- 5.2.3 24 种邻苯二甲酸酯类物质标准品,同 3.2.6。
- 5.2.4 标准储备溶液:准确称取各邻苯二甲酸酯类物质标准品 50 mg(精确到 0.000 1 g),于同一烧杯中,用正己烷(5.2.2)溶解,定容至 10 mL 容量瓶中,配制成 5 000 mg/L 的标准储备溶液,于 4 ℃冰箱中避光保存,有效期 6 个月。
- 5.2.5 标准工作溶液:将标准储备溶液(5.2.4)用正己烷(5.2.2)稀释成质量浓度为 1.0 mg/L、2.0 mg/L、5.0 mg/L、10.0 mg/L、20.0 mg/L 的系列标准工作溶液待用。此系列标准工作液应现用现配。

5.2.6 气相色谱仪：配 FID 检测器。

5.3 分析步骤

5.3.1 试样制备

同 3.4.1。

5.3.2 空白试验

除不称取样品外，分别按 5.3.1 的步骤制作相应的空白样液。

5.3.3 测定条件

由于实验室仪器设备的多样性，因此不可能给出分析条件的普遍参数，采用下列操作条件已被证明对测试是合适的：

- a) 色谱柱：5% 苯基-甲基聚硅氧烷石英毛细管柱，30 m×0.25 mm(i.d)×0.25 μm 或相当型号色谱柱；
- b) 进样口温度：280 ℃；
- c) 升温程序：初始柱温 60 ℃，保持 1 min；以 20 ℃/min 升温至 220 ℃，保持 4.5 min；再以 5 ℃/min 升温至 250 ℃，保持 1 min；再以 15 ℃/min 升温至 290 ℃，保持 5 min；
- d) 检测器温度：280 ℃；
- e) 载气：氮气，纯度大于或等于 99.999%；
- f) 流速：1.0 mL/min；
- g) 进样方式：不分流进样；
- h) 进样量：1.0 μL。

注：载气、空气、氢气流速随仪器而异，操作者可根据仪器及色谱柱等差异，通过试验选择最佳操作条件，使邻苯二甲酸酯类物质与化妆品中其他组分峰获得完全分离。

5.3.4 标准工作曲线绘制

将标准工作溶液(5.2.5)按照 5.3.3 的测定条件由低至高质量浓度进样检测，以各邻苯二甲酸酯的标准溶液质量浓度为横坐标，各自的峰面积为纵坐标，作标准曲线，得到线性回归方程。

5.3.5 定量分析

将试样待测液(5.3.1)注入气相色谱仪中，按 5.3.3 的测定条件进行测定，得到试样中邻苯二甲酸酯的峰面积，从标准曲线上得到相应的质量浓度。

24 种邻苯二甲酸酯类物质的气相色谱图参见附录 E。

对于干扰严重无法定量的样品或阳性结果，可采用本标准中第一法气相色谱-质谱法进行确证。

5.3.6 平行试验

按 5.3.1 至 5.3.5 步骤，对同一样品进行平行试验测定。

5.3.7 结果计算

样品中邻苯二甲酸酯类物质的含量按式(3)进行计算：

$$X_i = \frac{(\rho_i - \rho_0) \times V \times K \times 1\,000}{m \times 1\,000} \dots\dots\dots (3)$$

式中：

- X_i ——试样中某种邻苯二甲酸酯含量,单位为毫克每千克(mg/kg);
- ρ_i ——试样中某种邻苯二甲酸酯峰面积对应的质量浓度,单位为毫克每升(mg/L);
- ρ_0 ——空白试液中某种邻苯二甲酸酯的质量浓度,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。

5.4 检出限与定量限

本方法每种邻苯二甲酸酯类物质的检出限均为 10.0 mg/kg,定量限均为 25.0 mg/kg。

5.5 精密度

在同一实验室,由同一操作者使用相同仪器设备,按相同的测试方法,并在短时间内对同一被测对象相互独立进行测试获得的两次独立测试结果的绝对差值不大于这两个测定值的算术平均值的 15%。

附 录 A
(规范性附录)

邻苯二甲酸酯类物质中文名称、英文名称、CAS 号及分子式信息

邻苯二甲酸酯类物质中文名称、英文名称、CAS 号及分子式信息见表 A.1。

表 A.1 邻苯二甲酸酯类物质中文名称、英文名称、CAS 号及分子式

序号	中文名称	英文名称	英文缩写	CAS 号	化学分子式
1	邻苯二甲酸二甲酯	Dimethyl phthalate	DMP	131-11-3	C ₁₀ H ₁₀ O ₄
2	邻苯二甲酸二乙酯	Diethyl phthalate	DEP	84-66-2	C ₁₂ H ₁₄ O ₄
3	邻苯二甲酸二异丙酯	Diisopropyl phthalate	DIPP	605-45-8	C ₁₄ H ₁₈ O ₄
4	邻苯二甲酸二烯丙酯	Diallyl phthalate	DAP	131-17-9	C ₁₄ H ₁₄ O ₄
5	邻苯二甲酸二丙酯	Dipropyl phthalate	DPRP	131-16-8	C ₁₄ H ₁₈ O ₄
6	邻苯二甲酸二异丁酯	Diisobutyl phthalate	DIBP	84-69-5	C ₁₆ H ₂₂ O ₄
7	邻苯二甲酸二丁酯	Dibutyl phthalate	DBP	84-74-2	C ₁₆ H ₂₂ O ₄
8	邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯[又名邻苯二甲酸双(2-甲氧乙基)酯]	bis(2-Methoxyethyl) phthalate	DMEP	117-82-8	C ₁₄ H ₁₈ O ₆
9	邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯	bis(4-Methyl-2-pentyl) phthalate	BMPP	146-50-9	C ₂₀ H ₃₀ O ₄
10	邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯	bis(2-Ethoxyethyl) phthalate	DEEP	605-54-9	C ₁₆ H ₂₂ O ₆
11	邻苯二甲酸二戊酯 (又名双正戊基邻苯二甲酸酯)	Dipentyl phthalate	DPP	131-18-0	C ₁₈ H ₂₆ O ₄
12	邻苯二甲酸二异戊酯 (又名双异戊基邻苯二甲酸酯)	Diisopentyl phthalate	—	605-50-5	C ₁₈ H ₂₆ O ₄
13	邻苯二甲酸正戊基异戊酯 (又名正戊基异邻苯二甲酸酯)	Di- <i>n</i> -iso-pentyl phthalate	DnIPP	84777-06-0	C ₁₈ H ₂₆ O ₄
14	邻苯二甲酸二己酯	Dihexyl phthalate	DHXP	84-75-3	C ₂₀ H ₃₀ O ₄
15	邻苯二甲酸丁基苄基酯 (又名苯基丁基邻苯二甲酸酯)	Benzyl butyl phthalate	BBP	85-68-7	C ₁₉ H ₂₀ O ₄
16	邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯	bis(2-Butoxyethyl) phthalate	DBEP	117-83-9	C ₂₀ H ₃₀ O ₆
17	邻苯二甲酸二环己酯	Dicyclohexyl phthalate	DCHP	84-61-7	C ₂₀ H ₂₆ O ₄
18	邻苯二甲酸二庚酯	Di- <i>n</i> -heptyl phthalate	DHP	3648-21-3	C ₂₂ H ₃₄ O ₄
19	邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯[又名邻苯二甲酸(2-乙基己基)酯]	bis(2-Ethylhexyl) phthalate	DEHP	117-81-7	C ₂₄ H ₃₈ O ₄

表 A.1（续）

序号	中文名称	英文名称	英文缩写	CAS 号	化学分子式
20	邻苯二甲酸二苯酯	Diphenyl phthalate	—	84-62-8	$C_{20}H_{14}O_4$
21	邻苯二甲酸二正辛酯	Di- <i>n</i> -octyl phthalate	DNOP	117-84-0	$C_{24}H_{38}O_4$
22	邻苯二甲酸二苄酯	Dibenzyl phthalate	—	523-31-9	$C_{22}H_{18}O_4$
23	邻苯二甲酸二壬酯	Di- <i>n</i> -nonyl phthalate	DNP	84-76-4	$C_{26}H_{42}O_4$
24	邻苯二甲酸二癸酯	Di- <i>n</i> -decyl phthalate	DDP	84-77-5	$C_{28}H_{46}O_4$



附 录 B
(资料性附录)

邻苯二甲酸酯类物质参考保留时间、定量和定性选择离子表(GC/MS)

邻苯二甲酸酯类物质参考保留时间、定量和定性选择离子表(GC/MS)见表 B.1。

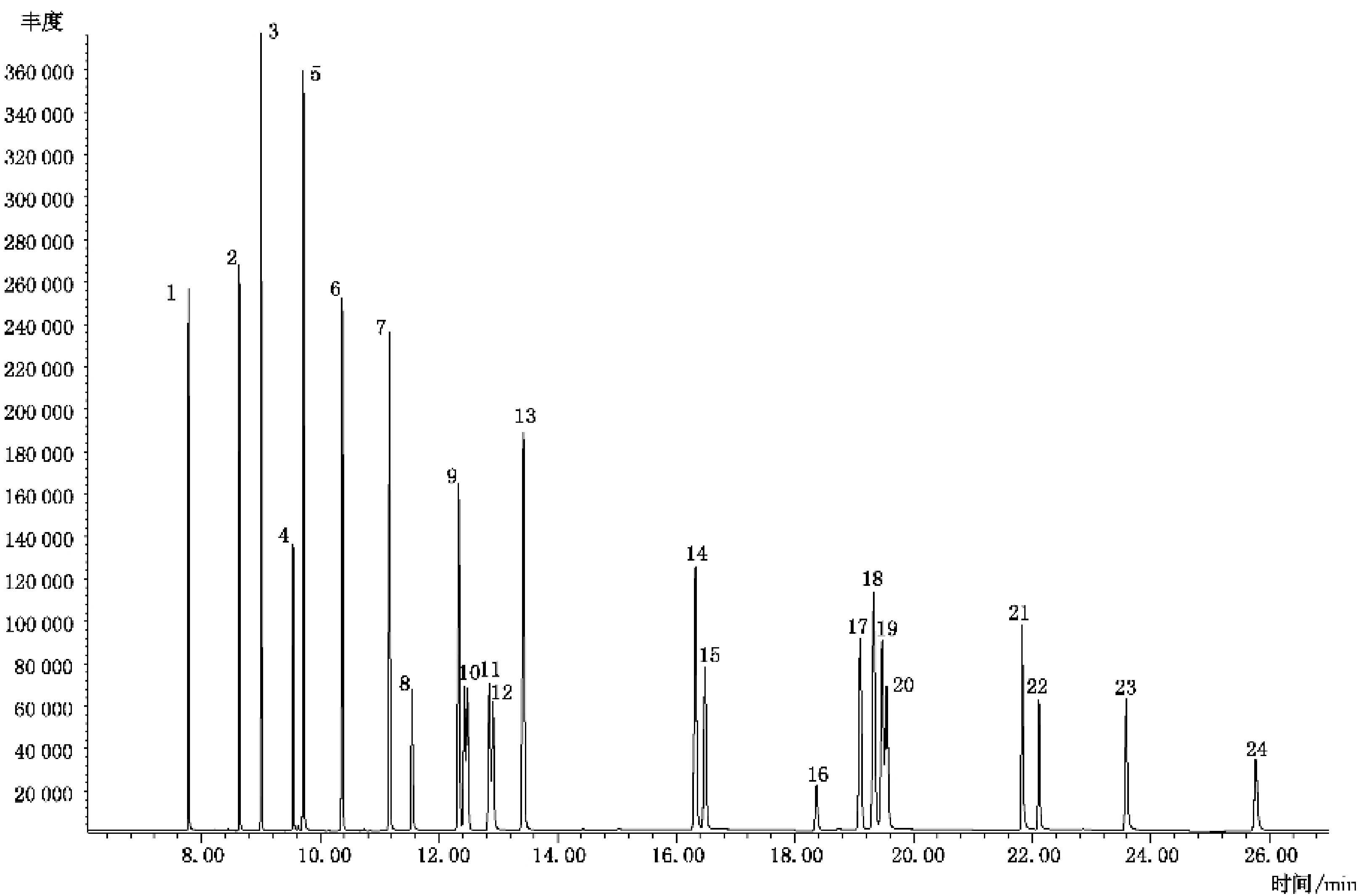
表 B.1 邻苯二甲酸酯类物质参考保留时间、定量和定性选择离子表(GC/MS)

序号	名称	保留时间 min	特征离子	
			定性	定量
1	邻苯二甲酸二甲酯(DMP)	7.786	163;77;135;194	163
2	邻苯二甲酸二乙酯(DEP)	8.643	149;177;121;222	149
3	邻苯二甲酸二异丙酯(DIPP)	9.015	149;167;192;209	149
4	邻苯二甲酸二烯丙酯(DAP)	9.557	149;41;189;132	149
5	邻苯二甲酸二丙酯(DPRP)	9.726	149;104;191;209	149
6	邻苯二甲酸二异丁酯(DIBP)	10.382	149;223;205;167	149
7	邻苯二甲酸二丁酯(DBP)	11.183	149;223;205;121	149
8	邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯(DMEP)	11.568	59;149;104;207	59
9	邻苯二甲酸二异戊酯	12.36	149;237;207	149
10	邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯(BMPP)	12.503	149;251;167;85	149
11	邻苯二甲酸正戊基异戊酯(DnIPP)	12.881	149;237;207	149
12	邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯(DEEP)	12.937	45;72;149;104	149
13	邻苯二甲酸二戊酯(DPP)	13.459	149;237;219;104	149
14	邻苯二甲酸二己酯(DHXP)	16.361	149;43;251;104	149
15	邻苯二甲酸丁基苄基酯(BBP)	16.529	149;91;206;104	149
16	邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯(DBEP)	18.407	149;101;193;176	149
17	邻苯二甲酸二环己酯(DCHP)	19.143	149;167;83;249	149
18	邻苯二甲酸二庚酯(DHP)	19.372	149;265;57;150	149
19	邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯(DEHP)	19.516	149;167;279;113	149
20	邻苯二甲酸二苯酯	19.601	225;77;153;197	225
21	邻苯二甲酸二正辛酯(DNOP)	21.854	149;279;167;261	149
22	邻苯二甲酸二苳酯	22.141	91;107;149;65	91
23	邻苯二甲酸二壬酯(DNP)	23.616	149;293;167;71	149
24	邻苯二甲酸二癸酯(DDP)	25.821	 149;307;43;167	149

附 录 C
(资料性附录)

邻苯二甲酸酯类物质标准品的气相色谱-质谱选择离子色谱图

邻苯二甲酸酯类物质标准品的气相色谱-质谱选择离子色谱图见图 C.1。



说明：

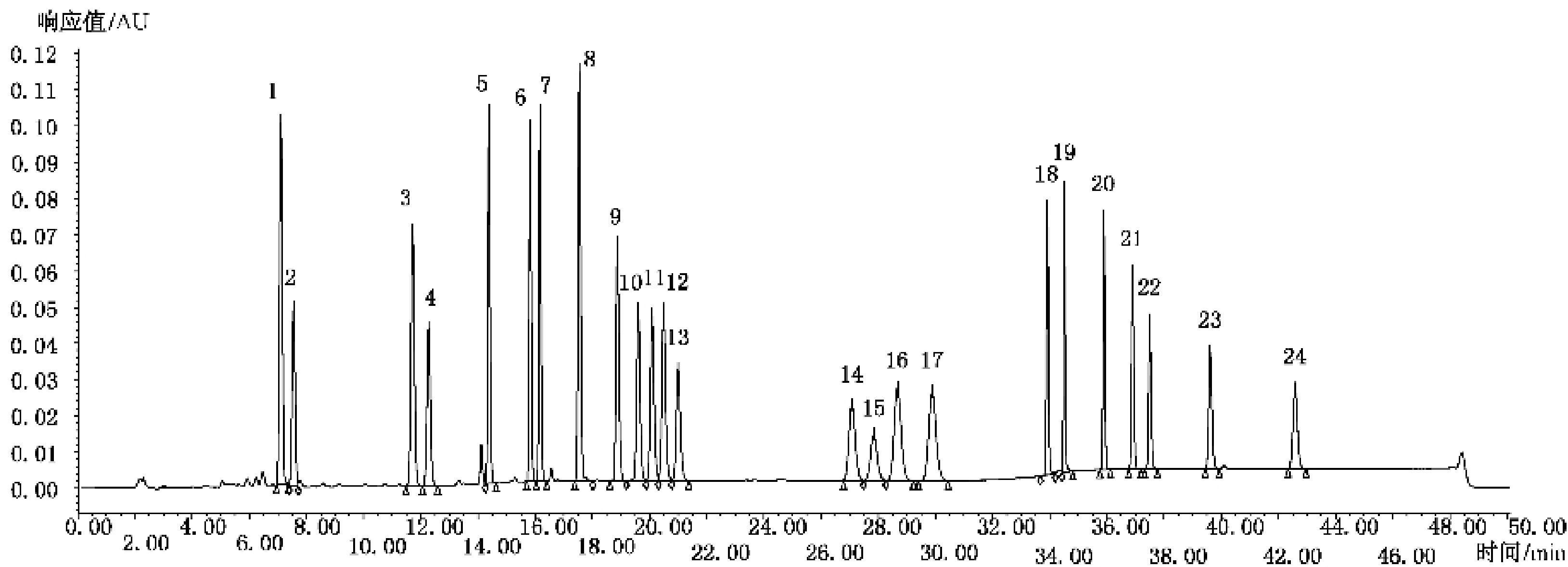
- | | |
|-----------------------------------|--------------------------------|
| 1 ——邻苯二甲酸二甲酯(DMP),7.78 min; | 13——邻苯二甲酸二戊酯(DPP),13.45 min; |
| 2 ——邻苯二甲酸二乙酯(DEP),8.64 min; | 14——邻苯二甲酸二己酯(DHXP),16.34 min; |
| 3 ——邻苯二甲酸二异丙酯(DIPP),9.01 min; | 15——邻苯二甲酸丁基苄基酯(BBP),16.51 min; |
| 4 ——邻苯二甲酸二烯丙酯(DAP),9.55 min; | 16——邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯(DBEP), |
| 5 ——邻苯二甲酸二丙酯(DPRP),9.72 min; | 18.38 min; |
| 6 ——邻苯二甲酸二异丁酯(DIBP),10.37 min; | 17——邻苯二甲酸二环己酯(DCHP),19.15 min; |
| 7 ——邻苯二甲酸二丁酯(DBP),11.17 min; | 18——邻苯二甲酸二庚酯(DHP),19.37 min; |
| 8 ——邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯(DMEP), | 19——邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯(DEHP), |
| 11.55 min; | 19.51 min; |
| 9 ——邻苯二甲酸二异戊酯,12.34 min; | 20——邻苯二甲酸二苯酯,19.59 min; |
| 10——邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯(BMPP), | 21——邻苯二甲酸二正辛酯(DNOP),21.84 min; |
| 12.51 min; | 22——邻苯二甲酸二苄酯,22.13 min; |
| 11——邻苯二甲酸正戊基异戊酯(DnIPP),12.89 min; | 23——邻苯二甲酸二壬酯(DNP),23.60 min; |
| 12——邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯(DEEP), | 24——邻苯二甲酸二癸酯(DDP),25.80 min。 |
| 12.94 min; | |

图 C.1 24 种邻苯二甲酸酯类物质标准品的气相色谱-质谱选择离子色谱图

附 录 D
(资料性附录)

邻苯二甲酸酯类物质标准品的高效液相色谱图

邻苯二甲酸酯类物质标准品的高效液相色谱图见图 D.1。



说明：

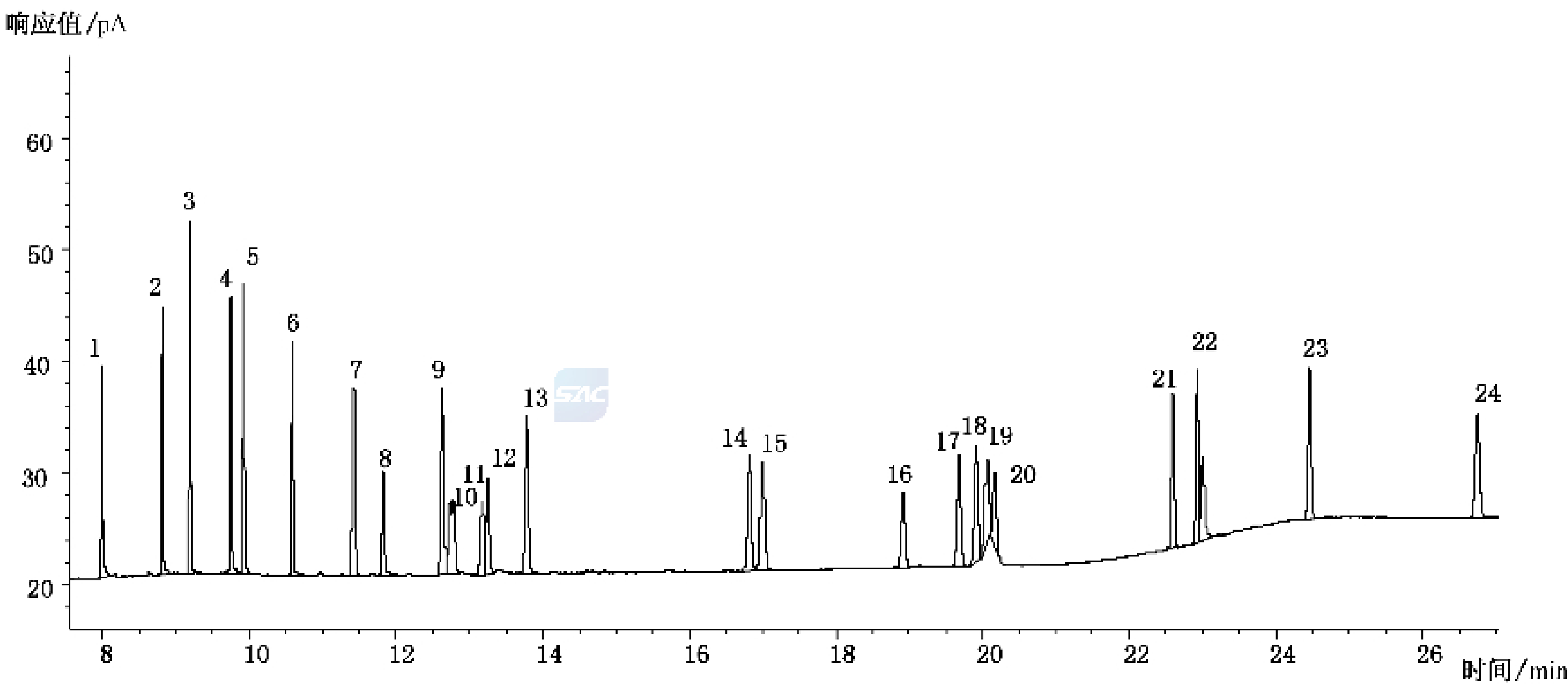
- | | |
|--|---|
| 1 —— 邻苯二甲酸二甲酯(DMP), 7.0 min; | 14 —— 邻苯二甲酸二异戊酯, 26.9 min; |
| 2 —— 邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯(DMEP), 7.4 min; | 15 —— 邻苯二甲酸正戊基异戊酯(DnIPP), 27.7 min; |
| 3 —— 邻苯二甲酸二乙酯(DEP), 11.6 min; | 16 —— 邻苯二甲酸二戊酯(DPP), 28.5 min; |
| 4 —— 邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯(DEEP), 12.1 min; | 17 —— 邻苯二甲酸二环己酯(DCHP), 29.8 min; |
| 5 —— 邻苯二甲酸二烯丙酯(DAP), 14.2 min; | 18 —— 邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯(BMPP), 33.8 min; |
| 6 —— 邻苯二甲酸二异丙酯(DIPP), 15.7 min; | 19 —— 邻苯二甲酸二己酯(DHXP), 34.4 min; |
| 7 —— 邻苯二甲酸二丙酯(DPRP), 16.0 min; | 20 —— 邻苯二甲酸二庚酯(DHP), 35.7 min; |
| 8 —— 邻苯二甲酸二苯酯, 17.4 min; | 21 —— 邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯(DEHP), 36.7 min; |
| 9 —— 邻苯二甲酸二苄酯, 18.7 min; | 22 —— 邻苯二甲酸二正辛酯(DNOP), 37.4 min; |
| 10 —— 邻苯二甲酸丁基苄基酯(BBP), 19.5 min; | 23 —— 邻苯二甲酸二壬酯(DNP), 39.5 min; |
| 11 —— 邻苯二甲酸二异丁酯(DIBP), 20.0 min; | 24 —— 邻苯二甲酸二癸酯(DDP), 42.4 min。 |
| 12 —— 邻苯二甲酸二丁酯(DBP), 20.4 min; | |
| 13 —— 邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯(DBEP), 20.9 min; | |

图 D.1 24 种邻苯二甲酸酯类物质标准品的高效液相色谱图

附 录 E
(资料性附录)

邻苯二甲酸酯类物质标准品的气相色谱图

邻苯二甲酸酯类物质标准品的气相色谱图见图 E.1。



说明：

- | | |
|--------------------------------------|-----------------------------------|
| 1 —— 邻苯二甲酸二甲酯(DMP), 7.99 min; | 13 —— 邻苯二甲酸二戊酯(DPP), 13.78 min; |
| 2 —— 邻苯二甲酸二乙酯(DEP), 8.82 min; | 14 —— 邻苯二甲酸二己酯(DHXP), 16.82 min; |
| 3 —— 邻苯二甲酸二异丙酯(DIPP), 9.19 min; | 15 —— 邻苯二甲酸丁基苄基酯(BBP), 17.00 min; |
| 4 —— 邻苯二甲酸二烯丙酯(DAP), 9.75 min; | 16 —— 邻苯二甲酸二(2-丁氧基)乙酯(DBEP), |
| 5 —— 邻苯二甲酸二丙酯(DPRP), 9.92 min; | 18.91 min; |
| 6 —— 邻苯二甲酸二异丁酯(DIBP), 10.60 min; | 17 —— 邻苯二甲酸二环己酯(DCHP), 19.68 min; |
| 7 —— 邻苯二甲酸二丁酯(DBP), 11.43 min; | 18 —— 邻苯二甲酸二庚酯(DHP), 19.91 min; |
| 8 —— 邻苯二甲酸二(2-甲氧基)乙酯(DMEP), | 19 —— 邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯(DEHP), |
| 11.83 min; | 20.05 min; |
| 9 —— 邻苯二甲酸二异戊酯, 12.64 min ; | 20 —— 邻苯二甲酸二苯酯, 20.16 min; |
| 10 —— 邻苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯(BMPP), | 21 —— 邻苯二甲酸二正辛酯(DNOP), 22.58 min; |
| 12.74 min; | 22 —— 邻苯二甲酸二苄酯, 22.92 min; |
| 11 —— 邻苯二甲酸正戊基异戊酯(DnIPP), 13.18 min; | 23 —— 邻苯二甲酸二壬酯(DNP), 24.45 min; |
| 12 —— 邻苯二甲酸二(2-乙氧基)乙酯(DEEP), | 24 —— 邻苯二甲酸二癸酯(DDP), 26.73 min。 |
| 13.24 min; | |

图 E.1 24 种邻苯二甲酸酯类物质标准品的气相色谱图