附件3

化妆品中丙烯酸乙酯等40种原料的检验方法

Determination of ethyl acrylate and other 39 kinds of components in cosmetics

1 范围

本方法规定了气相色谱-质谱方法测定化妆品中丙烯酸乙酯等40种香料组分的含量。

本方法适用于液态水基类、膏霜乳液类、粉类、香水类、蜡基类化妆品中丙烯酸乙酯等40种香料组分含量的测定。

本方法所指的丙烯酸乙酯等40种香料组分包括丙烯酸乙酯、反式-2-丁烯酸甲基酯、5-甲基-2,3-己二酮、苧烯、反式-2-庚烯醛、烯丙基芥子油、芳樟醇、2-辛炔酸甲酯、柠檬醛、二甲基柠康酸酯、马来酸二乙酯、香茅醇、香叶醇、α-异甲基紫罗兰酮、苯甲醇、苄基氰、羟基香茅醛、肉桂醛、丁苯基甲基丙醛、4-苯基丁-3-烯-2-酮、丁香酚、戊基肉桂醛、茴香醇、肉桂醇、4-叔丁基苯酚、金合欢醇、异丁香酚、己基肉桂醛、对羟基茴香醚、4-乙氧基苯酚、香豆素、新铃兰醛、戊基肉桂醇、葵子麝香、二苯胺、苯甲酸苄酯、水杨酸苄酯、7-甲氧基香豆素、肉桂酸苄酯、7-乙氧基-4-甲基香豆素。

2 方法提要

样品以乙酸乙酯为溶剂提取，采用气相色谱-质谱法测定，以选择离子监测模式进行测定，根据保留时间和特征离子的相对丰度比定性、定量离子峰面积定量，以内标法计算含量。

本方法对丙烯酸乙酯等40种香料组分的检出限、定量下限及取样量为0.5 g时的检出浓度及最低定量浓度见表1。

表1 各原料的检出限、定量下限、检出浓度和最低定量浓度

| 编号 | 原料名称 | 检出限  (ng) | 定量下限  (ng) | 检出浓度  (μg/g) | 最低定量  浓度(μg/g) |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 丙烯酸乙酯 | 0.05 | 0.15 | 1.0 | 3.3 |
| 2 | 反式-2-丁烯酸甲基酯 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 3 | 5-甲基-2,3-己二酮 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 4 | 苧烯 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 5 | 反式-2-庚烯醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 6 | 烯丙基芥子油 | 0.05 | 0.15 | 1.0 | 3.3 |
| 7 | 芳樟醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 8 | 2-辛炔酸甲酯 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 9 | 柠檬醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 10 | 二甲基柠康酸酯 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 11 | 马来酸二乙酯 | 0.05 | 0.15 | 1.0 | 3.3 |
| 12 | 香茅醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 13 | 香叶醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 14 | α-异甲基紫罗兰酮 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 15 | 苯甲醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 16 | 苄基氰 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 17 | 羟基香茅醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 18 | 肉桂醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 19 | 丁苯基甲基丙醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 20 | 4-苯基丁-3-烯-2-酮 | 0.05 | 0.15 | 1.0 | 3.3 |
| 21 | 丁香酚 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 22 | 戊基肉桂醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 23 | 茴香醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 24 | 肉桂醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 25 | 4-叔丁基苯酚 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 26 | 金合欢醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 27 | 异丁香酚 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 28 | 己基肉桂醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 29 | 对羟基茴香醚 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 30 | 4-乙氧基苯酚 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 31 | 香豆素 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 32 | 新铃兰醛 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 33 | 戊基肉桂醇 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 34 | 葵子麝香 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 35 | 二苯胺 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 36 | 苯甲酸苄酯 | 0.05 | 0.15 | 1.0 | 3.3 |
| 37 | 水杨酸苄酯 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 38 | 7-甲氧基香豆素 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 39 | 肉桂酸苄酯 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |
| 40 | 7-乙氧基-4-甲基香豆素 | 0.15 | 0.45 | 3.0 | 10 |

3 试剂和材料

除另有规定外，本方法所用试剂均为分析纯或以上规格。

3.1 乙酸乙酯，色谱纯。

3.2 无水硫酸钠，优级纯。

3.3 对照品储备溶液

分别称取丙烯酸乙酯等40种香料组分对照品100 mg（精确到0.0001 g）于100 mL容量瓶中，以乙酸乙酯（3.1）溶解并定容至刻度，配成约1000 μg/mL的对照品储备溶液。

3.4 内标溶液

分别称取1,4-二溴苯和4,4-二溴联苯100 mg（精确到0.0001 g）于100 mL容量瓶中，以乙酸乙酯（3.1）溶解并定容至刻度，配成约1000 μg/mL的内标溶液。

4 仪器和设备

4.1 气相色谱-质谱联用仪，配EI源。

4.2 分析天平。

4.3 超声波清洗器。

4.4 离心机。

4.5 涡旋混合仪。

5 分析步骤

5.1 混合标准系列溶液的制备

分别移取适量的对照品储备溶液（3.3）于10 mL容量瓶，用乙酸乙酯（3.1）稀释至刻度，得到100 μg/mL混合标准溶液。分别准确移取适量混合标准溶液，同时准确移取0.1 mL浓度为1000 μg/mL的内标溶液（3.4）至同一容量瓶，用乙酸乙酯（3.1）稀释，配制成浓度为0.50 μg/mL、1.0 μg/mL、2.0 μg/mL、5.0 μg/mL和10 μg/mL的混合标准系列溶液。

5.2 样品处理

称取0.5 g试样（蜡基类可减至0.25 g），精确至0.001 g，于10 mL具塞比色管中，准确移取0.1 mL浓度为1000 μg/mL的内标溶液（3.4），加入乙酸乙酯（3.1）8 mL，涡旋振荡2 min，使试样与提取溶剂充分混匀，冰浴超声提取15 min（工作频率20～43 KHz，200 W），用乙酸乙酯（3.1）稀释至刻度，摇匀，必要时以10000 r/min离心15 min。上清溶液加入2 g无水硫酸钠（3.2）脱水，经0.45 μm滤膜过滤，滤液作为待测溶液备用（供试品溶液可根据实际浓度进行适当再稀释）。

5.3 参考色谱条件

5.3.1 参考色谱条件

色谱柱：聚乙二醇20000（PEG-20M）毛细管柱（30 m×0.32 mm，0.50 μm），或等效色谱柱；

程序升温：初始温度40 ℃，保持2 min，以每分钟5 ℃升至240 ℃，保持18 min；

载气：氦气，纯度 ≥ 99.999%；

流速：2.0 mL/min；

进样口温度：250 ℃；

进样方式：不分流进样；

进样量：1 μL；

5.3.2 参考质谱条件

电离方式：电子轰击电离源（EI）；

电离能量：70 eV；

传输线温度：250 ℃；

离子源温度：230 ℃；

监测方式：选择离子监测（SIM）。

丙烯酸乙酯等40种香料组分的监测离子及相关参数设定见表2，可根据仪器实际情况选择监测离子。

表2 各原料的监测离子及相关参数设定表

| 编号 | 原料名称 | 保留时间  （min） | 特征离子  （m/z） | | | 推荐使用  内标 |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 丙烯酸乙酯 | 4.616 | 55 | 99 | 73 | 1 |
| 2 | 反式-2-丁烯酸甲基酯 | 7.261 | 69 | 85 | 100 | 1 |
| 3 | 5-甲基-2,3-己二酮 | 8.446 | 57 | 43 | 85 | 1 |
| 4 | 苧烯 | 9.554 | 93 | 121 | 136 | 1 |
| 5 | 反式-2-庚烯醛 | 13.120 | 55 | 83 | 70 | 1 |
| 6 | 烯丙基芥子油 | 14.273 | 99 | 72 | 100 | 1 |
| 7 | 芳樟醇 | 18.955 | 71 | 93 | 121 | 1 |
| 8 | 2-辛炔酸甲酯 | 21.500 | 95 | 123 | 111 | 1 |
| 9a | \*柠檬醛 | 22.222 | 69 | 94 | 109 | 1 |
| 10 | 二甲基柠康酸酯 | 22.643 | 127 | 99 | 59 | 1 |
| 9b | 柠檬醛 | 23.394 | 69 | 84 | 137 | 1 |
| 11 | 马来酸二乙酯 | 24.093 | 99 | 127 | 100 | 1 |
| 12 | 香茅醇 | 24.102 | 69 | 95 | 123 | 1 |
| 13 | 香叶醇 | 25.896 | 69 | 93 | 81 | 1 |
| 14 | α-异甲基紫罗兰酮 | 25.935 | 135 | 107 | 150 | 1 |
| 15 | 苯甲醇 | 26.679 | 79 | 108 | 107 | 1 |
| 16 | 苄基氰 | 27.804 | 117 | 90 | 116 | 1 |
| 17 | 羟基香茅醛 | 27.943 | 59 | 71 | 96 | 1 |
| 18 | 肉桂醛 | 30.014 | 131 | 132 | 103 | 1 |
| 19 | 丁苯基甲基丙醛 | 30.023 | 189 | 147 | 204 | 1 |
| 20 | 4-苯基丁-3-烯-2-酮 | 31.502 | 131 | 145 | 146 | 1 |
| 21 | 丁香酚 | 32.457 | 164 | 131 | 103 | 1 |
| 22 | 戊基肉桂醛 | 34.026 | 129 | 117 | 145 | 1 |
| 23 | 茴香醇 | 34.513 | 138 | 109 | 121 | 1 |
| 24 | 肉桂醇 | 34.599 | 92 | 134 | 115 | 1 |
| 25 | 4-叔丁基苯酚 | 34.697 | 135 | 107 | 150 | 1 |
| 26a | \*金合欢醇 | 35.184 | 69 | 81 | 41 | 1 |
| 27 | 异丁香酚 | 35.730 | 164 | 131 | 137 | 1 |
| 26b | 金合欢醇 | 35.665 | 136 | 161 | 179 | 1 |
| 28 | 己基肉桂醛 | 35.812 | 129 | 117 | 216 | 1 |
| 29 | 对羟基茴香醚 | 36.673 | 109 | 124 | 81 | 1 |
| 30 | 4-乙氧基苯酚 | 37.148 | 110 | 138 | 109 | 2 |
| 31 | 香豆素 | 37.567 | 146 | 118 | 90 | 2 |
| 32 | 新铃兰醛 | 37.858 | 136 | 107 | 192 | 2 |
| 33 | 戊基肉桂醇 | 38.815 | 133 | 115 | 148 | 2 |
| 34 | 葵子麝香 | 39.499 | 253 | 268 | 223 | 2 |
| 35 | 二苯胺 | 40.083 | 169 | 167 | 141 | 2 |
| 36 | 苯甲酸苄酯 | 40.419 | 105 | 194 | 212 | 2 |
| 37 | 水杨酸苄酯 | 42.926 | 91 | 228 | 92 | 2 |
| 38 | 7-甲氧基香豆素 | 46.017 | 176 | 133 | 148 | 2 |
| 39 | 肉桂酸苄酯 | 51.945 | 192 | 193 | 238 | 2 |
| 40 | 7-乙氧基-4-甲基香豆素 | 52.281 | 148 | 204 | 176 | 2 |
| 内标1 | 1,4-二溴苯（内标） | 23.318 | 236 | 234 | 155 | / |
| 内标2 | 4,4-二溴联苯（内标） | 46.736 | 312 | 152 | 310 | / |

注：带“\*”的为同分异构体，之和即为其含量。

5.4 定性

在“5.3”分析条件下，取待测溶液（5.2）与标准溶液（5.1）在相同分析条件下测定，样品中如呈现特征离子的色谱峰，被测成分的特征离子峰保留时间与标准溶液对应的保留时间一致，且选择的特征离子的相对丰度比与相当浓度标准品溶液的特征离子的相对丰度比的最大偏差不超过表3的规定，则可以判定样品中存在对应的香料成分。

表3 定性测定时离子相对丰度的最大允许偏差

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 相对离子丰度(k) | k>50% | 50%≥k>20% | 20%≥k>10% | k≤10% |
| 允许的最大偏差 | ±20% | ±25% | ±30% | ±50% |

5.5 定量

在“5.3”分析条件下，取混合标准系列溶液（5.1）依次测定，以待测原料的系列浓度与内标的浓度比为横坐标，待测原料与内标的峰面积比为纵坐标，进行线性回归，建立标准曲线，其线性相关系数应不小于0.99。取“5.2”项下的待测溶液进样，测得定量离子色谱峰面积，根据标准曲线得到待测溶液中各成分的浓度，按“6”计算样品中各原料的含量。

6 分析结果的表述

6.1 计算

按下式（1）建立标准曲线，根据标准曲线得到待测溶液中各原料的浓度，按式（2）计算样品中各原料的含量：

样品结果计算： （1）

 （2）

式中：*AR*——待测原料的峰面积；

*AS*——内标的峰面积；

*CR*——待测原料的系列浓度，μg/mL；

*CS*——内标的浓度，μg/mL；

*f*——内标校正的标准曲线；

*ω*——样品中原料的质量分数，μg/g；

*ρ*——从内标校正的标准曲线得到待测组分的质量浓度，μg/mL；

*V*——样品稀释体积，本方法为10 mL；

*m*——样品取样量，g；

*D*——再稀释倍数（如未再稀释则为1）。

在重复性条件下获得的两次独立测试结果的绝对差值不得超过算术平均值的10 %。

6.2 回收率和精密度

40种原料的回收率在80.5%-119.5%之间，相对标准偏差小于10%（n=6）。



1. 标准溶液色谱图
2. 丙烯酸乙酯，2. 反式-2-丁烯酸甲基酯，3. 5-甲基-2,3-己二酮，4. 苧烯，5. 反式-2-庚烯醛，6. 烯丙基芥子油，7. 芳樟醇，8. 2-辛炔酸甲酯，9a. 柠檬醛峰1，10. 二甲基柠康酸酯，9b. 柠檬醛峰2，11. 马来酸二乙酯，12. 香茅醇，13. 香叶醇，14. α-异甲基紫罗兰酮，15. 苯甲醇，16. 苄基氰，17. 羟基香茅醛，18. 肉桂醛，19. 丁苯基甲基丙醛，20. 4-苯基丁-3-烯-2-酮，21. 丁香酚，22. 戊基肉桂醛，23. 茴香醇，24. 肉桂醇，25. 4-叔丁基苯酚，26a. 金合欢醇峰1，27. 异丁香酚，26b. 金合欢醇峰2，28. 己基肉桂醛，29. 对羟基茴香醚，30. 4-乙氧基苯酚，31. 香豆素，32. 新铃兰醛，33. 戊基肉桂醇，34. 葵子麝香，35. 二苯胺，36. 苯甲酸苄酯，37. 水杨酸苄酯，38. 7-甲氧基香豆素，39. 肉桂酸苄酯，40. 7-乙氧基-4-甲基香豆素，ISTD1. 1,4-二溴苯，ISTD2. 4,4-二溴联苯

附录 A（规范性附录）

表1 丙烯酸乙酯等40种原料信息

| 编号 | 原料名称 | 纯度要求 | 化学式 | CAS号 | 相对分子量 |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 丙烯酸乙酯 | ≥98% | C5H8O2 | 140-88-5 | 100.12 |
| 2 | 反式-2-丁烯酸甲基酯 | ≥98% | C5H8O2 | 623-43-8 | 100.12 |
| 3 | 5-甲基-2,3－己烷二酮 | ≥98% | C7H12O2 | 13706-86-0 | 128.17 |
| 4 | 苧烯 | ≥95% | C10H16 | 5989-27-5 | 136.24 |
| 5 | 反式-2-庚烯醛 | ≥95% | C7H12O | 18829-55-5 | 112.17 |
| 6 | 烯丙基芥子油 | ≥98% | C4H5NS | 57-06-7 | 99.15 |
| 7 | 芳樟醇 | ≥98% | C10H18O | 78-70-6 | 154.25 |
| 8 | 2-辛炔酸甲酯 | ≥98% | C9H14O2 | 111-12-6 | 154.21 |
| 9 | 柠檬醛 | ≥98% | C10H16O | 5392-40-5 | 152.24 |
| 10 | 二甲基柠康酸酯 | ≥98% | C7H10O4 | 617-54-9 | 158.15 |
| 11 | 马来酸二乙酯 | ≥95% | C8H12O4 | 141-05-9 | 172.18 |
| 12 | 香茅醇 | ≥95% | C10H20O | 106-22-9 | 156.27 |
| 13 | 香叶醇 | ≥98% | C10H18O | 106-24-1 | 154.25 |
| 14 | α-异甲基紫罗兰酮 | ≥70% | C14H22O | 127-51-5 | 206.32 |
| 15 | 苯甲醇 | ≥98% | C7H8O | 100-51-6 | 108.14 |
| 16 | 苄基氰 | ≥98% | C8H7N | 140-29-4 | 117.15 |
| 17 | 羟基香茅醛 | ≥98% | C10H20O2 | 107-75-5 | 172.26 |
| 18 | 肉桂醛 | ≥98% | C9H8O | 104-55-2 | 132.16 |
| 19 | 丁苯基甲基丙醛 | ≥98% | C14H20O | 80-54-6 | 204.31 |
| 20 | 4-苯基丁-3-烯-2-酮 | ≥98% | C10H10O | 122-57-6 | 146.19 |
| 21 | 丁香酚 | ≥98% | C10H12O2 | 97-53-0 | 164.20 |
| 22 | 戊基肉桂醛 | ≥95% | C14H18O | 122-40-7 | 202.29 |
| 23 | 茴香醇 | ≥98% | C8H10O2 | 105-13-5 | 138.16 |
| 24 | 肉桂醇 | ≥98% | C9H10O | 104-54-1 | 134.18 |
| 25 | 4-叔丁基苯酚 | ≥98% | C10H14O | 98-54-4 | 150.22 |
| 26 | 金合欢醇 | ≥95% | C15H26O | 4602-84-0 | 222.37 |
| 27 | 异丁香酚 | ≥98% | C10H12O2 | 97-54-1 | 164.20 |
| 28 | 己基肉桂醛 | ≥98% | C15H20O | 101-86-0 | 216.32 |
| 29 | 对羟基茴香醚 | ≥98% | C7H8O2 | 150-76-5 | 124.14 |
| 30 | 4-乙氧基苯酚 | ≥98% | C8H10O2 | 622-62-8 | 138.16 |
| 31 | 香豆素 | ≥98% | C9H6O2 | 91-64-5 | 146.14 |
| 32 | 新铃兰醛 | ≥95% | C13H22O2 | 31906-04-4 | 210.31 |
| 33 | 戊基肉桂醇 | ≥95% | C14H20O | 101-85-9 | 204.31 |
| 34 | 葵子麝香 | ≥98% | C12H16N2O5 | 83-66-9 | 268.27 |
| 35 | 二苯胺 | ≥98% | C12H11N | 122-39-4 | 169.23 |
| 36 | 苯甲酸苄酯 | ≥98% | C14H12O2 | 120-51-4 | 212.24 |
| 37 | 水杨酸苄酯 | ≥98% | C14H12O3 | 118-58-1 | 228.25 |
| 38 | 7-甲氧基香豆素 | ≥98% | C10H8O3 | 531-59-9 | 176.17 |
| 39 | 肉桂酸苄酯 | ≥98% | C16H14O2 | 103-41-3 | 238.28 |
| 40 | 7-乙氧基-4-甲基香豆素 | ≥98% | C12H12O3 | 87-05-8 | 204.23 |
| 内标1 | 1,4-二溴苯 | ≥98% | C6H4Br2 | 106-37-6 | 235.91 |
| 内标2 | 4,4-二溴联苯 | ≥98% | C12H8Br2 | 92-86-4 | 312.00 |

附录B（资料性附录）

丙烯酸乙酯等40种原料的结果确证

如GC-MS方法中检出结果存在不确定因素，实验室可根据自身条件和需求采用GC-MS/MS方法进行确证。在相同的试验条件下，如样品中检出的色谱峰的保留时间与标准溶液中对应成分一致，所选择的监测离子对的相对丰度比与相当浓度标准溶液的离子对相对丰度比的偏差不超过表1规定范围，则可判断样品中存在对应的待测原料。

表1结果确证时相对离子丰度比的最大允许偏差

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 相对离子丰度(k) | k>50% | 50%≥k>20% | 20%≥k>10% | k≤10% |
| 允许的最大偏差 | ±20% | ±25% | ±30% | ±50% |

参考色谱条件

色谱柱：聚乙二醇20000（PEG-20M）毛细管柱（30 m×0.32 mm，0.50 μm），或等效色谱柱；

程序升温：初始温度40 ℃，保持2 min，以每分钟5 ℃升至240 ℃，保持18 min；

载气：氦气，纯度 ≥ 99.999%；

流速：2.0 mL/min；

进样口温度：250 ℃；

进样方式：不分流进样；

进样量：1 μL；

参考质谱条件

电离方式：电子轰击电离源（EI）；

电离能量：70 eV；

传输线温度：250 ℃；

离子源温度：230 ℃；

监测方式：多反应监测（MRM）；

丙烯酸乙酯等40种香料组分的MRM参数对见表2，可根据仪器实际情况选择监测离子对。

表2各原料的MRM参数

| **编号** | **原料名称** | **特征离子对** | **碰撞能量/V** | **特征离子对** | **碰撞能量/V** | **特征离子对** | **碰撞能量/V** |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 丙烯酸乙酯 | 99.00>53.10 | 19 | 99.00>71.10 | 16 | 99.00>81.10 | 16 |
| 2 | 反式-2-丁烯酸甲基酯 | 69.00>66.90 | 40 | 85.00>53.00 | 16 | 69.00>67.00 | 40 |
| 3 | 5-甲基-2,3-己二酮 | 85.00>57.10 | 16 | 57.00>55.00 | 16 | 85.00>55.00 | 22 |
| 4 | 苧烯 | 93.00>77.10 | 16 | 93.00>51.00 | 25 | 93.00>91.10 | 16 |
| 5 | 反式-2-庚烯醛 | 83.00>55.10 | 16 | 70.00>55.00 | 19 | 83.00>53.00 | 16 |
| 6 | 烯丙基芥子油 | 99.00>71.00 | 16 | 99.00>54.10 | 19 | 99.00>67.10 | 16 |
| 7 | 芳樟醇 | 93.00>77.10 | 16 | 93.00>51.00 | 25 | 93.00>91.10 | 16 |
| 8 | 2-辛炔酸甲酯 | 95.00>55.10 | 16 | 95.00>67.10 | 16 | 123.00>55.10 | 16 |
| 9' | \*柠檬醛 | 94.00>79.10 | 16 | 94.00>77.10 | 22 | 94.00>51.10 | 28 |
| 10 | 二甲基柠康酸酯 | 127.00>59.00 | 16 | 127.00>99.10 | 16 | 127.00>69.00 | 16 |
| 9 | 柠檬醛 | 84.00>55.10 | 16 | 69.00>53.10 | 16 | 84.00>53.10 | 19 |
| 11 | 马来酸二乙酯 | 99.00>71.00 | 16 | 127.00>99.00 | 16 | 127.00>71.10 | 16 |
| 12 | 香茅醇 | 95.00>55.10 | 16 | 95.00>67.10 | 16 | 95.00>53.10 | 19 |
| 13 | 香叶醇 | 93.00>77.10 | 16 | 93.00>51.00 | 25 | 93.00>91.10 | 16 |
| 14 | α-异甲基紫罗兰酮 | 135.00>91.10 | 16 | 135.00>79.10 | 16 | 150.00>91.10 | 19 |
| 15 | 苯甲醇 | 108.00>79.10 | 16 | 79.00>77.10 | 16 | 79.00>51.10 | 19 |
| 16 | 苄基氰 | 117.00>90.10 | 16 | 90.00>63.00 | 22 | 117.00>64.10 | 25 |
| 17 | 羟基香茅醛 | 71.00>53.10 | 16 | 59.00>57.00 | 19 | 71.00>55.00 | 28 |
| 18 | 肉桂醛 | 131.00>77.00 | 25 | 131.00>103.10 | 16 | 132.00>103.10 | 19 |
| 19 | 丁苯基甲基丙醛 | 189.00>131.10 | 16 | 189.00>91.10 | 19 | 147.00>117.10 | 19 |
| 20 | 4-苯基丁-3-烯-2-酮 | 145.00>115.10 | 22 | 146.00>103.10 | 19 | 145.00>91.10 | 25 |
| 21 | 丁香酚 | 164.00>103.10 | 22 | 164.00>77.10 | 28 | 164.00>149.10 | 16 |
| 22 | 戊基肉桂醛 | 117.00>91.10 | 19 | 117.00>115.10 | 16 | 129.00>127.10 | 19 |
| 23 | 茴香醇 | 109.00>77.00 | 16 | 138.00>109.10 | 16 | 109.00>94.10 | 16 |
| 24 | 肉桂醇 | 134.00>91.10 | 19 | 92.00>65.10 | 25 | 134.00>78.00 | 16 |
| 25 | 4-叔丁基苯酚 | 135.00>107.10 | 16 | 107.00>77.00 | 16 | 135.00>77.10 | 25 |
| 26' | \*金合欢醇 | 81.00>79.10 | 16 | 81.00>53.10 | 16 | 81.00>77.10 | 19 |
| 27 | 异丁香酚 | 164.00>149.10 | 16 | 164.00>77.10 | 28 | 164.00>55.00 | 19 |
| 26 | 金合欢醇 | 136.00>93.10 | 16 | 136.00>121.10 | 16 | 136.00>77.00 | 25 |
| 28 | 己基肉桂醛 | 129.00>127.10 | 19 | 216.00>129.10 | 16 | 129.00>77.10 | 28 |
| 29 | 对羟基茴香醚 | 124.00>109.00 | 16 | 109.00>81.10 | 16 | 124.00>81.10 | 19 |
| 30 | 4-乙氧基苯酚 | 138.00>110.10 | 16 | 110.00>81.10 | 19 | 110.00>53.10 | 22 |
| 31 | 香豆素 | 146.00>118.10 | 16 | 118.00>89.10 | 19 | 146.00>90.10 | 22 |
| 32 | 新铃兰醛 | 136.00>79.10 | 16 | 136.00>77.10 | 25 | 136.00>105.10 | 16 |
| 33 | 戊基肉桂醇 | 133.00>55.00 | 16 | 133.00>115.10 | 16 | 148.00>91.10 | 19 |
| 34 | 葵子麝香 | 253.00>91.10 | 25 | 253.00>106.10 | 16 | 253.00>79.10 | 19 |
| 35 | 二苯胺 | 169.00>167.10 | 22 | 169.00>66.10 | 22 | 167.00>139.10 | 25 |
| 36 | 苯甲酸苄酯 | 105.00>77.10 | 16 | 105.00>51.10 | 28 | 105.00>95.10 | 16 |
| 37 | 水杨酸苄酯 | 91.00>65.10 | 19 | 91.00>63.00 | 22 | 91.00>51.00 | 25 |
| 38 | 7-甲氧基香豆素 | 176.00>133.00 | 19 | 176.00>148.10 | 16 | 133.00>77.10 | 16 |
| 39 | 肉桂酸苄酯 | 193.00>115.10 | 16 | 193.00>178.10 | 16 | 192.00>189.10 | 31 |
| 40 | 7-乙氧基-4-甲基香豆素 | 204.00>148.10 | 16 | 148.00>91.10 | 25 | 148.00>119.10 | 19 |

注：带“\*”的为同分异构体，组分之和即为其含量。