

# LCMS-IT-TOF 分析 4 种具有三苯甲烷基团的人造色素

色素是一类十分重要的食品添加剂。现代食品工业为改善食品色泽及感官性质，在食品加工过程中经常添加色素。目前常用的食品色素包括天然色素与人工合成色素。人工合成色素主要是以煤焦油中分离得到的苯胺燃料为原料以化学合成的方法制成。现代研究表明，几乎所有的合成色素都不能向人

体提供营养物质，而部分合成色素甚至会危害人体健康。

本实验对亮蓝、绿色 S、牢固绿 FCF 和专利蓝 V 等 4 种人造色素进行多级质谱的系统分析，其中亮蓝和绿色 S 是在食品工业中禁止使用的两种人工色素。

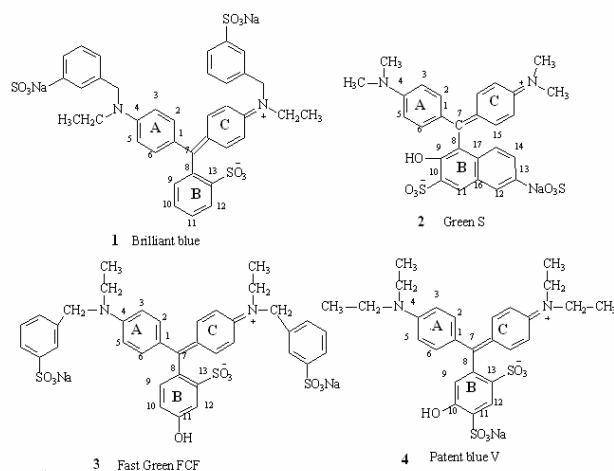


Figure 1 the structure of compounds 1-4

## ■ 分析结果

将亮蓝、绿色 S、牢固绿 FCF 和专利蓝 V 对照品分别配制为浓度为 1 $\mu$ g/mL 的供试溶液。使用 LCMS-IT-TOF 系统分别对 4 种人工色素进行系统分析。

采用电喷雾电离方式，在正离子模式下

分别获得 4 种合成色素的 MS<sup>1</sup> 至 MS<sup>5</sup> 多级碎片。结合分子式预测软件对每一级产生的碎片进行分析，推测其可能结构，得到具有三苯甲烷基团的人工色素的裂解规律，确认这 4 种化合物的特征裂解离子。

## ■ 分析意义

含有三苯甲烷基团的人工色素的裂解规律，确立了 4 种合成色素的多级裂解特征，提高了实际样品中亮蓝、绿色 S、牢

固绿 FCF 和专利蓝 V 四种色素检测、鉴定结果的可靠性。同时，也为鉴别其它同类结构色素提供可信的参考依据。

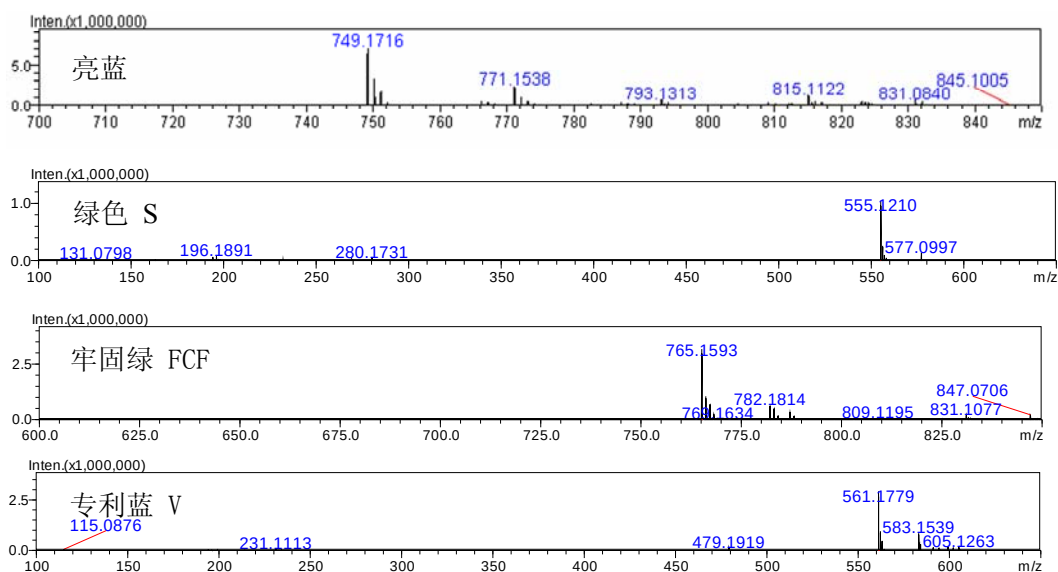
## ■ 分析参数

液相色谱：所有样品溶解于甲醇中，LCMS-IT-TOF 使用 SIL-20AC 直接进样，体积 1 $\mu$ L，流动相为乙腈:水=50:50，LC-20AD 泵，流速 0.1mL/min

质谱：ESI<sup>+</sup>，喷雾电压 4.4kv，CDL 温度 200 $^{\circ}$ C，加热块 200 $^{\circ}$ C，化合物碰撞能量范围 20-50%，质量范围 m/z 50-300

## ■ 结果与讨论

四种人造色素的MS<sup>1</sup>谱图



四种人工色素部分 MS<sup>n</sup> 数据

| 化合物        | 分子离子<br>[M+N]                    | 理论值      | MS <sup>n</sup> | 离子 | 归属                     | 元素组成                         | 实测值<br>(m/z) |
|------------|----------------------------------|----------|-----------------|----|------------------------|------------------------------|--------------|
| 亮蓝         | $C_{37}H_{35}N_2Na_2O_9S_3^+$    | 793.1290 | MS <sup>1</sup> | a  | $[(M-2Na+2H)+H]$       | $C_{37}H_{37}N_2O_9S_3^+$    | 749.1614     |
|            |                                  |          | MS <sup>2</sup> | b  | a- $C_{15}H_{17}NO_3S$ | $C_{22}H_{20}NO_6S_2^+$      | 458.0729     |
|            |                                  |          | MS <sup>3</sup> | c  | c- $C_6HO_3S$          | $C_{16}H_{19}NO_3S^+$        | 306.1173     |
| 牢固绿<br>FCF | $C_{37}H_{35}N_2Na_2O_{10}S_3^+$ | 809.1240 | MS <sup>1</sup> | a  | $[(M-2Na+2H)+H]$       | $C_{37}H_{37}N_2O_{10}S_3^+$ | 765.1593     |
|            |                                  |          | MS <sup>2</sup> | b  | a- $C_{15}H_{17}NO_3S$ | $C_{22}H_{20}NO_7S_2^+$      | 474.0663     |
|            |                                  |          | MS <sup>3</sup> | c  | c- $C_6HO_3S$          | $C_{16}H_{19}NO_3S^+$        | 306.1189     |
| 专利蓝V       | $C_{27}H_{32}N_2NaO_7S_2^+$      | 583.1543 | MS <sup>1</sup> | a  | $[(M-Na+H)+H]$         | $C_{27}H_{33}N_2O_7S_2^+$    | 561.1739     |
|            |                                  |          | MS <sup>2</sup> | b  | a- $SO_3H_2$           | $C_{27}H_{31}N_2O_4S^+$      | 479.2021     |
|            |                                  |          | MS <sup>3</sup> | c  | b- $SO_3$              | $C_{27}H_{31}N_2O^+$         | 399.2456     |
| 绿色S        | $C_{27}H_{26}N_2NaO_7S_2^+$      | 577.1082 | MS <sup>1</sup> | a  | $[(M-Na+H)+H]$         | $C_{27}H_{27}N_2O_7S_2^+$    | 555.1240     |
|            |                                  |          | MS <sup>2</sup> | b  | a- $S_2O_6H_2$         | $C_{27}H_{24}N_2O^{+}$       | 392.1876     |
|            |                                  |          | MS <sup>3</sup> | c  | b- $CH_4$              | $C_{26}H_{20}N_2O^{+}$       | 376.1559     |

注：数据出自中国检验检疫科学研究院