

涂料添加剂胶粉的高分辨质谱表征

Analysis of Coating Additives Redispersible Powders with High Resolution Mass Spectrometry

李广宁, 孙小杰, 杨总, 刘冰洁

Li Guangning, Sun Xiaojie, Yangzong, Liu Bingjie

Key words: Coating, Redispersible Polymer Powders, SCIEX TripleTOF system

引言

建筑涂料（特别是干粉砂浆、腻子、外墙保温系统等）中使用的“胶粉”，通常指可再分散乳胶粉（Redispersible Polymer Powder, RDP）。作为关键的功能性添加剂，RDP并非简单的“粘合剂”，而是一种集成膜、增韧、施工优化与环保增效于一体的多效复合组分，对涂料整体性能的跃升起着决定性作用。

市售可再分散乳胶粉（Redispersible Polymer Powder, RDP）是以水溶性可再分散粉末形式存在的核心原料，主要类型包括乙烯-醋酸乙烯酯共聚物（EVA）、醋酸乙烯酯-叔碳酸乙烯酯共聚物（VA/VeoVa）及丙烯酸酯共聚物等。由于不同类别产品在成本与性能参数上存在显著差异，生产企业在原料筛选过程中常面临选择困境。我们利用SCIEX高分辨质谱技术，对三种市场主流品牌乳胶粉进行组分表征，并基于液相色谱-质谱联用（LC-MS）分析方法，系统解析其性能差异的形成机制。

该实验具有以下特点：

1. 采用靶向及非靶向筛查策略，耦合SCIEX本地化E&L数据库，实现对胶粉中关键聚合物的精准、高效鉴定。
2. 借助SCIEX OS软件高效且用户友好的拟靶向筛选功能，基于特征碎片离子与中性丢失扫描的筛选策略，可快速识别具有相似结构特征的同类化合物群集，从而显著提升鉴定结果的全面性与可靠性。



SCIEX X500R 系统

1 实验方法

1.1 液相色谱条件

色谱柱：C18 色谱柱 (2.1 × 100mm, 1.7 μm)

流速：0.4 mL/min

柱温：40°C

A相：水 (2 mM 甲酸铵 + 0.01% 甲酸)

B相：乙腈

Time [min]	Flow [mL/min]	B.Conc [%]
0.0	0.4	2
1.0	0.4	2
6.0	0.4	30
12.0	0.4	98
18.0	0.4	98
18.1	0.4	2
21.0	0.4	2

1.2 质谱条件

扫描模式：正模式

离子源：ESI

源温：550 °C

质谱参数：

Parameter	TOF MS (Survey)	CID MS/MS
Start Mass	80	50
Stop Mass	1250	1250
Accumulation time (sec)	0.1	0.05
Maximum IDA Candidates	-	15
CE (volts)	10	35

1.3 样品处理

取适量样品分别使用甲醇，乙腈，二氯甲烷萃取后，挥干试剂后甲醇复溶，上机分析。

2 结果与讨论

2.1 三种不同品牌胶粉的色谱表现差异

使用LCMS对三种不同品牌的进行分离分析，从色谱图表现来看，品牌A, B 两种胶粉在保留时间1, 2两段色谱峰基本一致，品牌A, C两种胶粉在保留时间2, 3段一致，但其质谱响应有较大差异。

2.2 胶粉主要成分的鉴定分析

使用SCIEX高分辨质谱结合SCIEX E&L数据库针对三种不同胶粉产品进行靶向分析，共鉴定到17种聚乙烯醇（PVA）类聚合物，14种聚乙二醇类结构类似物，所有化合物质量偏差均在1 ppm以内（表1）。结果显示，A,B两种品牌PVA类聚合物含量远高于C品牌，而C品牌中含有聚乙二醇类似物则含量较高（图2），这可能是其粘性性能差异较大的一个主要因素。

通过SCIEX OS软件对保留时间3段进行分析，发现其主要为带双电荷或3电荷的高聚合物（图3），且其二级碎片具有m/z 59.05, 117.09, 175.13等特征碎片，这些碎片均为聚丙二醇类化合物的典型碎片，利用SCIEX OS的拟靶向分析功能（图4），可快速发现此类具有相似结构特征的结构类似物，并对其进行鉴定。

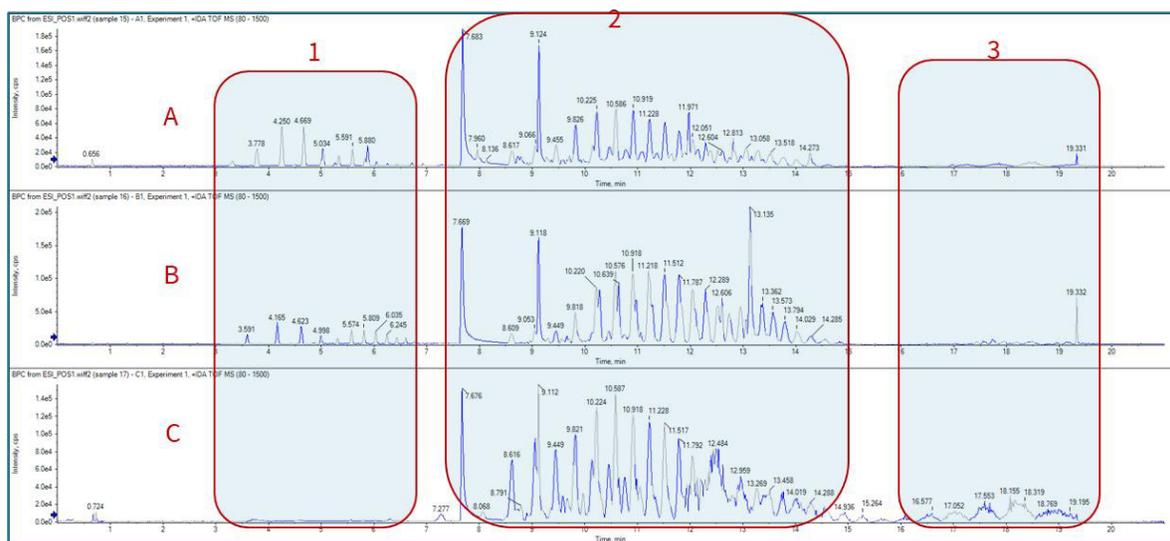


图1. 三种不同品牌胶粉的色谱表现差异

表1. 胶粉中化合物鉴定结果及其可能结构

保留时间 段 1	化合物	分子式	加合方式	理论质荷比	质量偏差 (ppm)
		PVA4	$H(CH_2CH(OH))_4OH$	$[M+H]^+$	195.1227
	PVA5	$H(CH_2CH(OH))_5OH$	$[M+H]^+$	239.1489	0.5
	PVA6	$H(CH_2CH(OH))_6OH$	$[M+H]^+$	283.1751	0.8
	PVA7	$H(CH_2CH(OH))_7OH$	$[M+H]^+$	327.2013	1
	PVA8	$H(CH_2CH(OH))_8OH$	$[M+NH_4]^+$	388.2541	0.5
	PVA9	$H(CH_2CH(OH))_9OH$	$[M+NH_4]^+$	432.2803	1
	PVA10	$H(CH_2CH(OH))_{10}OH$	$[M+NH_4]^+$	476.3065	0.7
	PVA11	$H(CH_2CH(OH))_{11}OH$	$[M+NH_4]^+$	520.3328	0.7
	PVA12	$H(CH_2CH(OH))_{12}OH$	$[M+NH_4]^+$	564.359	1.2
	PVA13	$H(CH_2CH(OH))_{13}OH$	$[M+NH_4]^+$	608.3852	0.3
	PVA14	$H(CH_2CH(OH))_{14}OH$	$[M+NH_4]^+$	652.4114	0.5
	PVA15	$H(CH_2CH(OH))_{15}OH$	$[M+NH_4]^+$	696.4376	0.9
	PVA16	$H(CH_2CH(OH))_{16}OH$	$[M+NH_4]^+$	740.4638	-0.6
	PVA17	$H(CH_2CH(OH))_{17}OH$	$[M+NH_4]^+$	784.49	0.3
	PVA18	$H(CH_2CH(OH))_{18}OH$	$[M+NH_4]^+$	828.5163	-0.1
	PVA19	$H(CH_2CH(OH))_{19}OH$	$[M+NH_4]^+$	872.5425	0.5
	PVA20	$H(CH_2CH(OH))_{20}OH$	$[M+2NH_4]^{2+}$	467.3013	0.7

保留时间 段 2	化合物	分子式	加合方式	理论质荷比	质量偏差 (ppm)	
		PPG6	$H(OCHCH_3CH_2)_6OH$	$[M+NH_4]^+$	384.296	0.4
	PPG7	$H(OCHCH_3CH_2)_7OH$	$[M+NH_4]^+$	442.337	0.9	
	PPG8	$H(OCHCH_3CH_2)_8OH$	$[M+NH_4]^+$	500.379	0.7	
	PPG9	$H(OCHCH_3CH_2)_9OH$	$[M+NH_4]^+$	558.421	0.6	
	PPG10	$H(OCHCH_3CH_2)_{10}OH$	$[M+NH_4]^+$	616.463	0.8	
		$(OCHCH_3CH_2)_7$	$(OCHCH_3CH_2)_7$	$[M+NH_4]^+$	424.327	0.8
		$(OCHCH_3CH_2)_8$	$(OCHCH_3CH_2)_8$	$[M+NH_4]^+$	482.369	0.9
		$(OCHCH_3CH_2)_9$	$H(OCHCH_3CH_2)_{10}OH$	$[M+NH_4]^+$	616.463	0.8
		$(OCHCH_3CH_2)_{10}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{11}OH$	$[M+NH_4]^+$	674.505	0.8
		$(OCHCH_3CH_2)_{11}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{12}OH$	$[M+NH_4]^+$	732.547	0.8
		$(OCHCH_3CH_2)_{12}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{13}OH$	$[M+NH_4]^+$	790.589	0.3
		$(OCHCH_3CH_2)_{13}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{14}OH$	$[M+NH_4]^+$	848.63	0.2
		$(OCHCH_3CH_2)_{14}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{15}OH$	$[M+NH_4]^+$	906.672	-0.1
		$(OCHCH_3CH_2)_{15}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{16}OH$	$[M+NH_4]^+$	964.714	-0.3
		$(OCHCH_3CH_2)_{16}$	$H(OCHCH_3CH_2)_{17}OH$	$[M+NH_4]^+$	1022.756	0

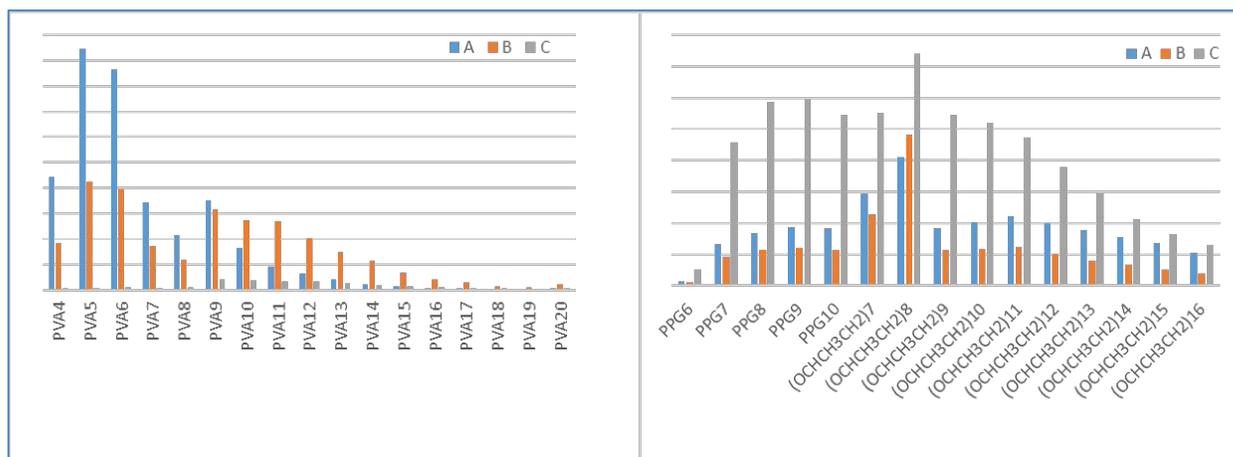


图2. 不同品牌胶粉鉴定到的聚乙烯醇及聚乙二醇类物质的含量差异

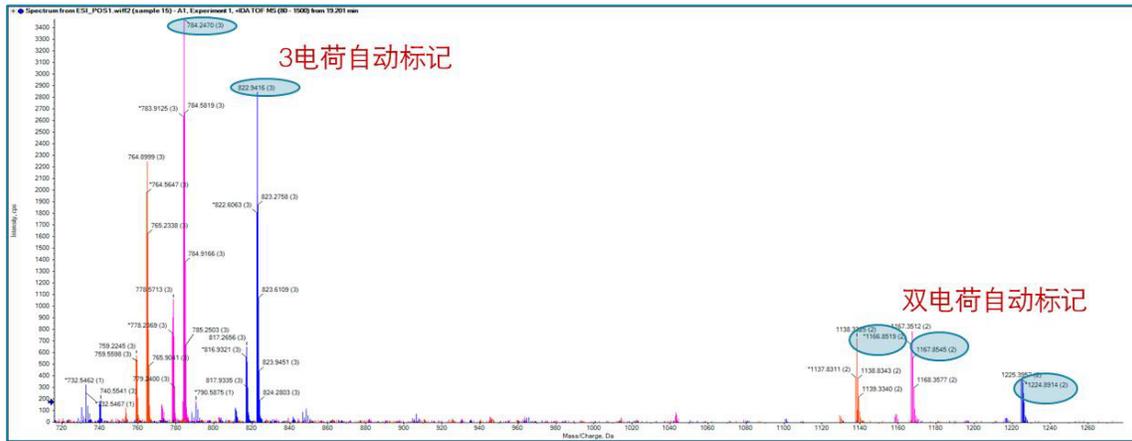


图3. 保留时间段3均为含有相似结构的多电荷聚丙二醇类化合物

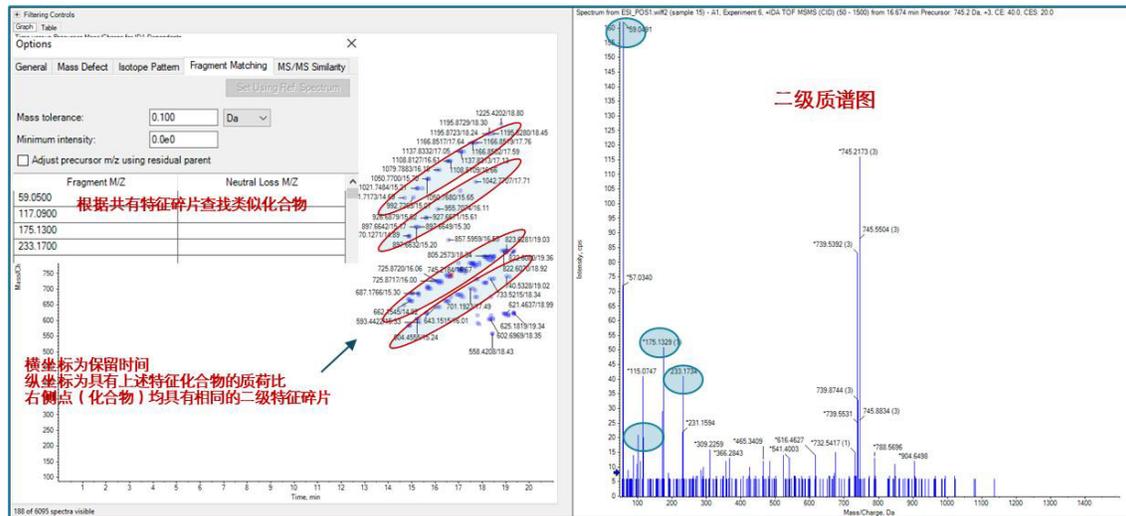


图4. 利用SCIEX OS拟靶向分析功能快速筛选结构类似物

3 小结

可再分散乳胶粉 (Redispersible Polymer Powder, RDP) 作为涂料体系的关键添加剂, 对其粘结强度、断裂韧性及柔韧性等核心性能具有决定性影响。基于高分辨质谱 (HRMS) 的成分表征可系统解析不同品牌产品的性能差异机制。本研究采用SCIEX高分辨质谱

平台对三种品牌RDP进行深度分析, 结合SCIEX E&L数据库开展靶向-拟靶向联合筛查, 为下游厂商提供基于分子组成特征的原料筛选依据。

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息, 请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标, 也包括相关的标识、标志的所有权, 归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美利和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2025 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. MKT-36231-A



SCIEX中国

北京分公司
北京市昌平区生命科学园科学园路
18号院A座一层
电话: 010-5808-1388
传真: 010-5808-1390
全国咨询电话: 800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心
上海市长宁区福泉北路518号
1座502室
电话: 021-2419-7201
传真: 021-2419-7333
官网: sciex.com.cn

广州办公室
广州国际生物岛星岛环北路1号
B2栋501、502单元
电话: 020-8842-4017
官方微信: SCIEX-China