

# 基于高分辨质谱技术的化妆品中禁限用组分高通量快速筛查方案

## High Throughput Analysis of Prohibited and Restricted Components in Cosmetics by High Resolution Mass Spectrometry

李广宁, 孙小杰, 杨总, 刘冰洁

Li Guangning, Sun Xiaojie, Yangzong, Liu Bingjie

SCIEX, 中国;

SCIEX, China;

**Key words:** Cosmetics, QTOF system, Prohibited and Restricted Components

自2015版《化妆品安全技术规范》实施以来,我国化妆品安全监管不断加强。近年来,国家药监局多次发布补充公告,更新禁限用成分目录,如2021年新增一百余项禁用组分,2023年新增本维莫德等禁用物质,2024年又新增比马前列素等禁用物质。这些举措使化妆品安全性进一步提升,保障了消费者健康。随着化妆品消费市场的快速发展,消费者对产品安全性、功效性要求提高。这就要求企业需严格遵守规范,加强研发,选用安全合规原料,开发更优质产品。同时也使监管部门不断加大执法力度,以确保市场秩序。

在检测技术方面,传统的检验方法多采用三重四极杆检测技术,存在检测化合物种类有限、检测时间长、成本高等问题。为应对这些挑战,我们依据《化妆品安全技术规范》(2015年版)及相关国家标准,基于高分辨质谱系统开发了一套高效的高通量筛查方案。该方案可同时检测化妆品中600余种禁限用成分,显著提升了检测效率和准确性,为化妆品安全监管提供了强有力的技术支持。

### 该方案具有以下特点:

- 高效便捷:**能够对600余种禁限用组分进行快速检测,真正实现化妆品禁用组分的高通量筛查,大幅提升检测效率。
- 覆盖全面:**检测范围广泛,涵盖常见染发剂、着色剂、常见皮肤科用药、抗感染药物、激素、香豆素类等多类禁限用组分,全方位满足监管需求。

- 精准可靠:**采用IDA采集方式,一针进样即可同时获取化合物的一级和二级信息。基于高分辨质量偏差、保留时间、同位素分布以及二级碎片谱匹配等四重条件,对化妆品禁限用成分进行精准定性,确保筛查结果准确可靠,为化妆品安全监管提供有力保障。

### 化妆品本地化数据库介绍:

基于2015版《化妆品安全技术规范》及其后续发布的补充公告,结合相关国家标准及化妆品安全案例,我们建立了601种化妆品禁限用组分的靶向筛查方案,方案基本囊括化妆品中常见的染发剂、防晒剂、着色剂、防腐类、激素类药物、抗感染药物、有机酸类及常见的皮肤科用药等十几种禁限用组分。客户可通过安装本地化的高分辨数据库,快速实现化妆品禁限用成分的筛查。

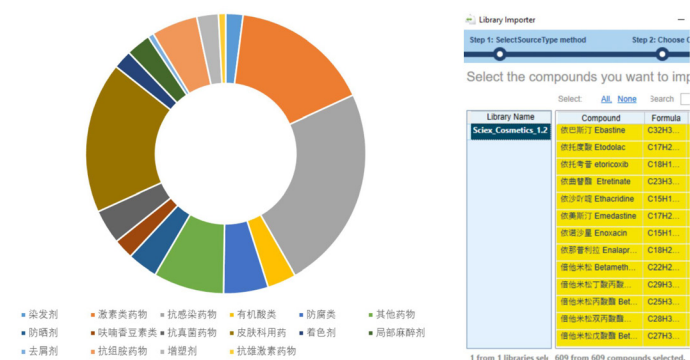


图1. SCIEX 化妆品本地化数据库的分类及快速安装

**色谱方法:**

色谱柱: C18 1.7  $\mu\text{m}$  100 mm  $\times$  2.1 mm。

正模式: A相水 (含0.1%甲酸+2 mmol/L甲酸铵), B相 甲醇 (含0.1%甲酸+2 mmol/L甲酸铵)。

负模式: A相 水, B相 乙腈。

梯度洗脱:

正模式:

| Time [min] | Flow [mL/min] | B[%] |
|------------|---------------|------|
| 0.00       | 0.3000        | 5    |
| 1.00       | 0.3000        | 5    |
| 15.00      | 0.3000        | 95   |
| 23.00      | 0.3000        | 95   |
| 23.10      | 0.3000        | 5    |
| 26.00      | 0.3000        | 5    |

负模式:

| Time [min] | Flow [mL/min] | B[%] |
|------------|---------------|------|
| 0.00       | 0.3000        | 5    |
| 1.00       | 0.3000        | 5    |
| 18.00      | 0.3000        | 95   |
| 23.00      | 0.3000        | 95   |
| 23.10      | 0.3000        | 5    |
| 26.00      | 0.3000        | 5    |

**质谱方法:**

扫描方式: IDA / SWATH® 采集模式

离子源: ESI

CDS自动校正

离子源参数:

IS电压: 5500V/-4500V

气帘气CUR: 30 psi

雾化气GS1: 45 psi

辅助气GS2: 60 psi

源温度TEM: 500°C

碰撞气CAD: 7

去簇电压 DP: ( $\pm$ )80V

碰撞能量CE  $\pm$  CES: ( $\pm$ )35  $\pm$  15V

**结果与讨论:**

1.采用SCIEX高分辨质谱,对每种禁限用组分进行了系统的方验证,获得保留时间信息。即便在缺乏标准品的情况下,也能参考保留时间进行辅助定性,确保检测结果的可靠性。此外,我们已成功建立了一套完整的靶向筛查方法,涵盖各化合物的分子式、CAS编号、加合方式、参考保留时间以及对应的二级质量谱库(详见表1及图3)。这一方法为化妆品禁限用成分的精准筛查提供了全面且高效的技术支持。

我们建立了完整的靶向筛查方法,包含各化合物相应的分子式,CAS 编号,加合方式,参考保留时间,以及其对应的二级质量谱库,见表2及图3。

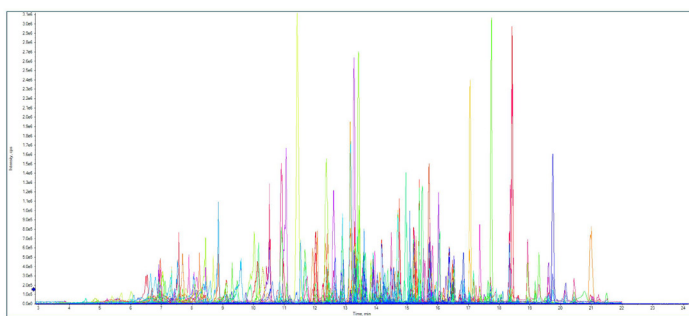


图2. 化妆品禁限用成分提取离子流色谱图

表2. 部分禁限用成分靶向筛查列表

| 中文名                 | 英文名                               | 分子式                                            | 加合方式               | 保留时间  | CAS No.  |
|---------------------|-----------------------------------|------------------------------------------------|--------------------|-------|----------|
| 1,3-萘二酚             | 1,3-DIHYDROXYNAPHTHALENE          | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>  | [M-H] <sup>-</sup> | 8.642 | 132-86-5 |
| 1,7-萘二酚             | 1,7-Naphthalenediol               | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>  | [M-H] <sup>-</sup> | 8.61  | 575-38-2 |
| 17 $\alpha$ -羟孕酮    | 17 $\alpha$ -Hydroxyprogesterone  | C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub> | [M+H] <sup>+</sup> | 14.03 | 68-96-2  |
| 19-羟基雄甾-4-烯-3,17-二酮 | 19-Hydroxy-4-androsten-3,17-dione | C <sub>19</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub> | [M+H] <sup>+</sup> | 11.74 | 510-64-5 |

表2. 部分禁限用成分靶向筛查列表（续）

| 中文名             | 英文名                                 | 分子式                                                             | 加合方式               | 保留时间   | CAS No.    |
|-----------------|-------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|--------------------|--------|------------|
| 1-甲基-5-氯-4-硝基咪唑 | 5-Chloro-1-methyl-4-nitroimidazole  | C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>   | [M+H] <sup>+</sup> | 5.948  | 4897-25-0  |
| 2,3-萘二酚         | 2,3-Naphthalenediol                 | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>                   | [M-H] <sup>-</sup> | 8.63   | 92-44-4    |
| 2-甲基-5-硝基咪唑     | 2-Methyl-5-nitroimidazole           | C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>     | [M-H] <sup>-</sup> | 2.94   | 88054-22-2 |
| 2-羟基丁酸          | Butanoic acid                       | C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>                    | [M-H] <sup>-</sup> | 1.01   | 600-15-7   |
| 2-苄基-4-氯苯酚      | Clorofene                           | C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> ClO                             | [M-H] <sup>-</sup> | 13.185 | 120-32-1   |
| 2-苯基苯酚          | 2-Phenylphenol                      | C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O                               | [M-H] <sup>-</sup> | 11.555 | 90-43-7    |
| 3-O-乙基抗坏血酸醚     | 3-O-Ethyl-L-ascorbic acid           | C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>                   | [M-H] <sup>-</sup> | 3.5    | 86404-04-8 |
| 4,4-二氨基二苯硫醚     | 4,4-Thiodianiline                   | C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> S                | [M+H] <sup>+</sup> | 8.332  | 139-65-1   |
| 4,4-二氨基二苯醚      | 4,4-Oxydianiline                    | C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O                | [M+H] <sup>+</sup> | 3      | 101-80-4   |
| 4-氯-3,5-二甲基苯酚   | 4-Chloro-3,5-dimethylphenol         | C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> ClO                               | [M-H] <sup>-</sup> | 11.185 | 88-04-0    |
| 4-硝基咪唑          | 4-Nitroimidazole                    | C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>     | [M-H] <sup>-</sup> | 1.94   | 3034-38-6  |
| 4-羟基苯甲酸丁酯       | Butyl 4-Hydroxybenzoate             | C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>                  | [M-H] <sup>-</sup> | 11.35  | 94-26-8    |
| 4-羟基苯甲酸乙酯       | 4-Hydroxy-Benzoicaciethylester      | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>                   | [M+H] <sup>+</sup> | 11.25  | 120-47-8   |
| 4-羟基苯甲酸甲酯       | Methyl 4-Hydroxybenzoate            | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>                    | [M+H] <sup>+</sup> | 9.82   | 99-76-3    |
| 5,5-二甲基乙内酰脲     | 5,5-Dimethylimidazolidine-2,4-dione | C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>     | [M-H] <sup>-</sup> | 2.114  | 77-71-4    |
| 6-甲基香豆素         | 6-Methylcoumarin                    | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>                   | [M+H] <sup>+</sup> | 11.43  | 92-48-8    |
| 6-硝基苯并咪唑        | 5-Nitrobenzimidazole                | C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>     | [M-H] <sup>-</sup> | 6.66   | 94-52-0    |
| 7-乙氧基-4-甲基香豆素   | Maraniol                            | C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>                  | [M+H] <sup>+</sup> | 12.794 | 87-05-8    |
| 7-甲氧基香豆素        | Herniarin                           | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>                   | [M+H] <sup>+</sup> | 10.85  | 531-59-9   |
| O-邻伞花烃-5-醇      | o-CYMEN-5-OL                        | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O                               | [M-H] <sup>-</sup> | 11.429 | 39660-61-2 |
| β-萘酚            | 2-Naphthol                          | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O                                | [M-H] <sup>-</sup> | 9.99   | 135-19-3   |
| 三氯卡班            | Triclocarban                        | C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O | [M+H] <sup>+</sup> | 14.92  | 101-20-2   |
| 三氯生             | Triclosan                           | C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub> O <sub>2</sub>   | [M-H] <sup>-</sup> | 14.385 | 3380-34-5  |

2. 利用高分辨质谱扫描速度快的特点（MSMS@（100-133）Hz），采用IDA（信息依赖采集，Information Dependent Acquisition）采集模式进行采集：质谱首先采集MS全扫描图谱，随后根据预设的触发条件，自动识别并选择特征性离子进行碎裂，采集对应的MS/MS谱图。这种模式能够在一次进样中同时获取高质量的一级和二级信息，极大地提高了检测效率。通过高分辨质量偏差、保留时间、同位素分布以及二级谱图匹配程度四大关键指标锁定目标化合物，确保定性结果的准确性和可靠性。SCIEX OS软件进一步简化了操作流程，允许用户快速设定这四大指标的阈值，并以红绿灯形式直观呈现结果（图4），使操作更加便

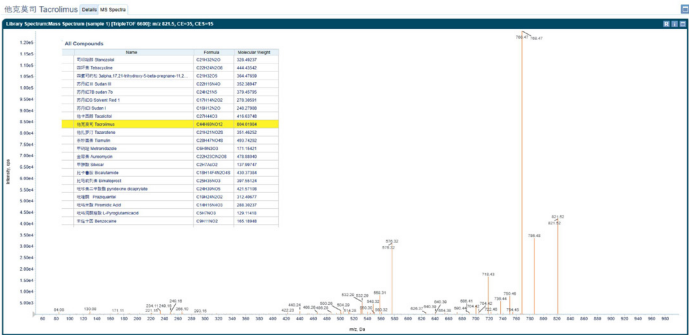


图3. 化妆品本地数据库二级谱库示例

捷高效。此外，结果表能够快速筛选阳性结果，帮助用户迅速发现阳性化合物（图5）。

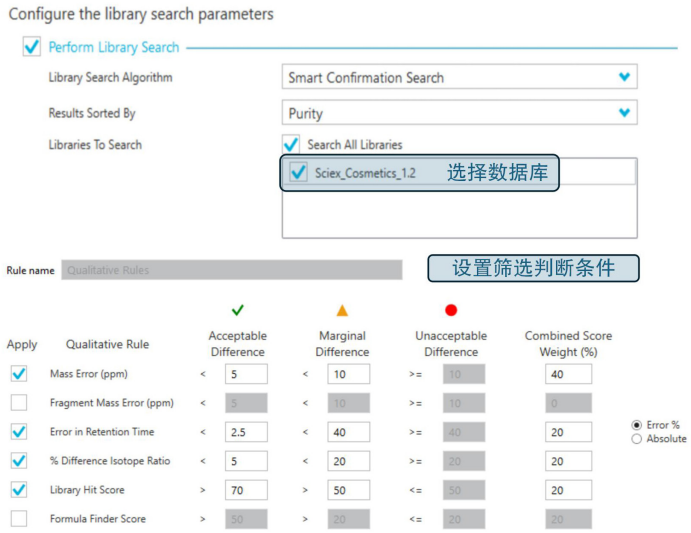


图4. 数据库选择及筛选判定条件设置



图5. 筛查结果验证

## 总结

基于SCIEX高分辨质谱系统，针对《化妆品安全技术规范》（2015年版）及相关化妆品标准要求，SCIEX开发了一套涵盖600余种禁限用组分的高通量筛查方案。结合SCIEX OS软件和化妆品非法添加专属谱库，该方案能够为化妆品监测提供简单、快速且完整的高通量检测解决方案，助力化妆品安全监管的高效实施。

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. 或在英国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2025 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. MKT-34665-A



### SCIEX中国

北京分公司  
北京市朝阳区酒仙桥中路24号院  
1号楼5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](https://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](https://www.sciex.com.cn)