

应用气相串联四极杆质谱分析 Ayurvedic Churna 中的多种农药残留

Manoj Surwade¹, Sunil T Kumar¹, Aarti Karkhanis¹, Manish Kumar¹, Soma Dasgupta¹, Hans-Joachim Huebschmann²,
¹Thermo Fisher Scientific, Mumbai, India; ²Thermo Fisher Scientific, Singapore

关键词

传统植物药；快速液/液萃取；QuEChERS；智能定时扫描（timed-SRM）；保留时间校准；MRM；离子比例确证；应用 TraceFinder 处理数据

前言

Ayurveda 是一个梵语词汇，由“ayus”和“veda.”两个词根组成，分别表示生命和科学，即生命的科学。由多种植物磨粉后混合而成的混合物称为“churna”。混合物配方依据其特定的应用目的（如医疗、美容或烹调）而变化。Avipittakara churna 是一种广泛应用于预防代谢系统损伤；帮助消化系统去噪，预防消化不良、便秘、呕吐、厌食的日常用药。对于此类样本的分析，最大的挑战来自于添加多种草药而引入的糖类和植物天然色素所可能造成的干扰。^[1]

干燥植物叶片经样本前处理获得包括活性成分、挥发油以及高温烹煮产生的天然聚合物在内的复杂样本提取物。由于在草药养殖生长过程中使用农药，“churna”中可能含有多种农药残留。对于此类样本中农药残留的测试分析至关重要并由政府法规管控。^[2]通过严格限制多种质量参数以保证“churna”的质量和有效性。

样品前处理

简而言之，QuEChERS 样品前处理（见表 1）是 15 g Avipittakara churna 粉末样本加入 15 mL 乙腈（含 1% 冰醋酸）及 3 g 硫酸镁、1.5 g 醋酸钠和 1 g 氯化钠。离心后取上层清液（1 mL），通过 200 mg PSA 和 10 mg GCB 吸附剂进行固相分散处理。提取物 10000 rpm 离心 5 分钟，由自动进样器取上清液 3 μ L 进行测试分析。回收率和方法学验证实验通过测试 15 g “churna”加入适量的农药标准混合物完成。

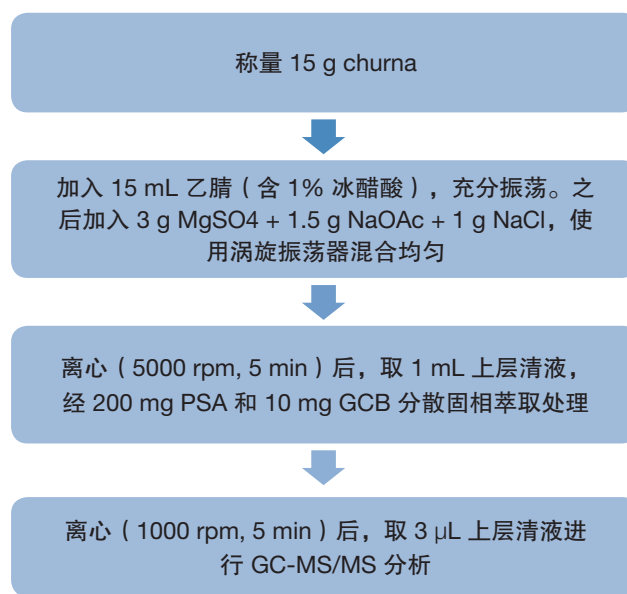


图 1. 检测 Avipittakara churna 中农药成分的样品制备过程

线性校准曲线

每种农药化合物分别称量 10 ± 0.1 mg 溶于 10 mL 乙腈制得标准储备液，并储存于棕色玻璃容器中，置 -20°C 冷藏。通过稀释适量各化合物的标准储备液，获得 10 份浓度为 10 mg/L 的混合标准溶液（每份含有 15–20 种化合物）。将以上混合标准溶液各取适量，以乙腈稀释配得工作标准溶液（1 mg/L），置 -20°C 冷藏。用于建立标准曲线的标准溶液浓度分别为 2.5、5、10、25 和 50 $\mu\text{g/L}$ ，每次使用前新鲜配制。所有化合物的标准曲线图（五个点）均结合单个峰面积与相应标准溶液浓度计算而得。

仪器参数及方法设置

本次样品分析应用了 Thermo Scientific™ TriPlus™ RSH 液体自动进样器，配备程序升温 PTV 进样口的 Thermo Scientific™ TRACE™ 1300 系列气相色谱以及 Thermo Scientific™ TSQ 8000™ 三重四极杆 GC-MS/MS 质谱系统。具体仪器方法参数见表 1。

表 1. 仪器方法参数

TRACE™ 1310 气相色谱仪器参数	
载气	氦气
进样口	PTV
进样模式	不分流
不分流时间	3 min, 分流流速: 30 mL/min
PTV 程序	87 $^{\circ}\text{C}$, 0.3 min (注射) 14.5 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 285 $^{\circ}\text{C}$ (转移) 285 $^{\circ}\text{C}$, 2.5 min (转移) 14.5 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 290 $^{\circ}\text{C}$ (清洁) 290 $^{\circ}\text{C}$, 20 min (清洁)
色谱柱	Thermo Scientific TraceGOLD™ TG-5 SiIMS 30 m \times 0.25 mm \times 0.25 μm (p/n 10177894)
载气流速	1.2 mL/min, 恒定流速
升温程序	70 $^{\circ}\text{C}$, 2 min 10 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 200 $^{\circ}\text{C}$ 200 $^{\circ}\text{C}$, 2 min 10 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 285 $^{\circ}\text{C}$ 285 $^{\circ}\text{C}$, 8.5 min
液体进样	通过 TriPlus RSH 自动进样器进样 3 μL

方法设置和数据处理均使用 Thermo Scientific™ TraceFinder™ 软件。TraceFinder 软件中内置超过 800 种农药化合物数据库，其中包括了分析各化合物所需要的所有分析参数，例如色谱保留时间以及用于数据采集、处理的经过优化的 SRM 反应信息。该软件的优势可应用于建立大规模农药化合物筛查实验。

在所有的多反应监测 (MRM) 分析中，每个农药化合物均有两个 SRM 离子对分析通道。其中，强度最大的离子对通道作为定量；在使用 TraceFinder 软件进行数据处理时，通过第二对离子对与第一对离子对的离子强度比例以对化合物进行定性确证。软件可通过处理标准溶液样品测试数据，对测试方法中智能定时扫描 (timed-SRM) 数据采集方法进行校准，以锁定所有待测化合物的色谱保留时间，消除样本中生物基质所带来的影响，确保仪器的耐用性。

TSQ 8000 MS/MS 参数

离子源温度	230 $^{\circ}\text{C}$
传输线温度	285 $^{\circ}\text{C}$
离子化模式	EI
电离能量	70 eV
MRM 检测方式	Timed SRM 模式 (见图 1)
采集速率	500 ms
MRM 参数	见表 1

TSQ 8000 质谱仪所采用的 timed-SRM 数据采集方式可有效避免实验人员耗费大量时间精力进行分段采集时间的方法设置。待测化合物每个离子对监测时间根据指定的循环时间由工作站自动计算而得，这样可以保证在同一个循环时间内采集到所有离子对数据，无需通过扫描时间和单个离子流色谱峰中的扫描点个数进行参数优化。数据采集的驻留时间可根据 MRM 方法中化合物的数量而自动优化。表 2 列出了本次测试仪器方法中所有化合物的 MRM 参数。

TraceFinder 软件可同步数据处理和采集方法设定两个模块以实现方法中所有化合物色谱保留时间锁定。

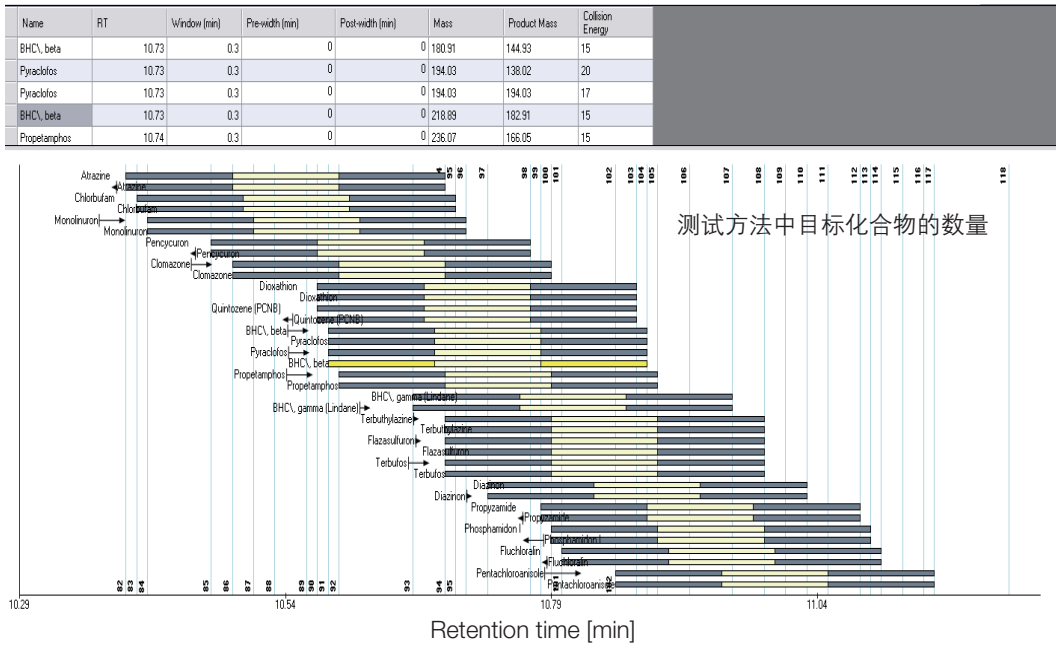


图2. TSQ 8000 方法中 timed-SRM 采集设定的原理。中间的白色区域显示了以化合物保留时间为中心的峰宽，前后的灰色区域为时长 0.3 min 的整个 SRM 采集窗口。

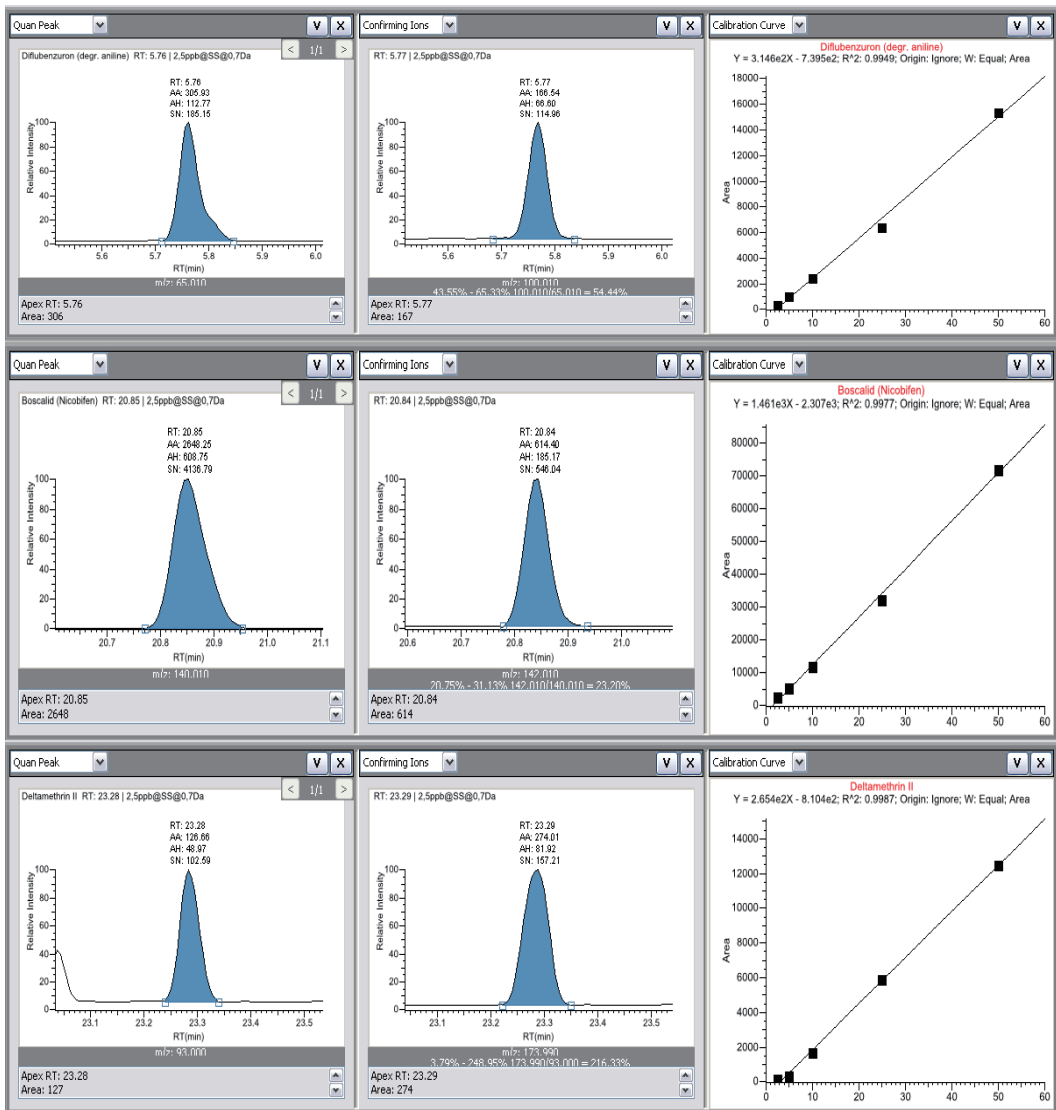


图 3. 特定农药化合物在 2.5 ng/g 浓度下的离子流色谱图及其标准曲线

测试结果

本次测试使用液液萃取和 TSQ 8000 气相三重四极杆联用系统对 Ayurvedic churnas 中的多种农药残留进行了常规检测和定量分析。TraceFinder 软件对测试中所有标准样品和待测样品实现了快速、高通量分析。所有待测化合物标准曲线在 2.5 至 50 ng/g 范围内线性相关系数均大于 0.99, 详见图 3。加标回收率均在 70–120% 之间, 相应 RSD 小于 20%。

样品分析

本次采用的常规筛查方法在约 28 分钟的运行时间内完成了约 200 种农残的检测。依据上文所建立的方法对地区市场的样本进行测试。市购样本测试结果见图 4。

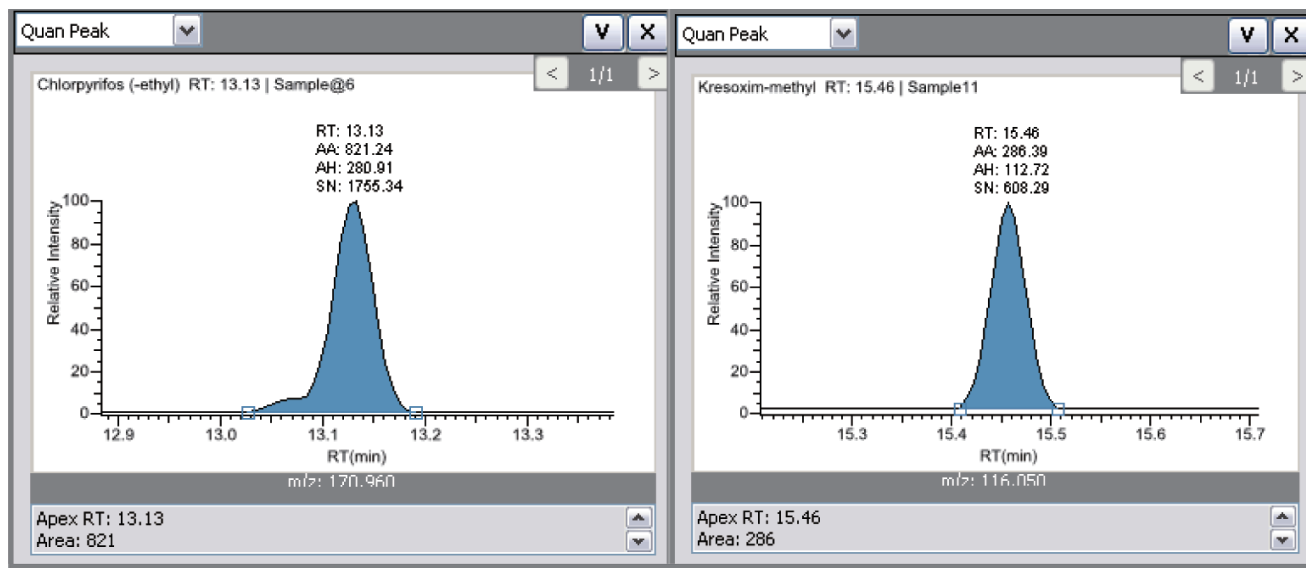


图 4. 在市购样本中检测到乙基毒死蜱和苯氧菌酯的浓度分别为 2.3 $\mu\text{g}/\text{kg}$ 和 2.7 $\mu\text{g}/\text{kg}$

结论

针对多种农药建立一种快速、灵敏的定量方法是每一个农残分析实验室的主要目标。采用上文建立的农残测试方法, 可在 28 分钟内对 200 余种农药化合物完成筛查和定量分析。QuEChERS 前处理方法具备高回收率和良好的重复性。配有 TRACEGuard 的 TR-5MS 色谱柱可有效分离所有目标化合物。三重四极杆质谱仪 TSQ 8000 GC-MS/MS 与 TraceFinder™ 软件联合使用, 有效节省数据处理时间, 从而实现了高通量检测。在待测样本进行前处理的短暂时间内即可完成方法线性、专属性、回收率和重复性测试。TSQ 8000 系统具备超高灵敏度, 即使是对经过 QuEChERS 快速处理的复杂样品基质仍能实现高灵敏检测和可信定量。本方法可应用于如混合植物药等复杂基质样本中痕量农药残留的检测和确证。最低检测限可低至 2.5 ng/g。依据现行的指导规范, 本次测试的农残浓度 (0.0023 和 0.0027 mg/kg) 已低于尤纳尼测试指南所规定限值。^[3]

参考文献

- [1] Narayanaswamy, V., Origin and Development of Ayurveda (A Brief History), *Anc. Sci. Life*, Jul-Sep 1(1) (1981) 1–7.
- [2] The Pesticides Compound Database, Thermo Fisher Scientific, Austin, TX, USA, 2013.
- [3] Lohar, D.R., Protocol for testing guideline for Ayurvedic, Siddha and Unani medicines Chapter 2.5.1, Government of India, Department of AYUSH, Ministry of Health & Family Welfare, Pharmacopoeial Laboratory for Indian Medicines, Ghaziabad, see http://www.plimism.nic.in/Protocol_For_Testing.pdf

表 2. 待测农药化合物的 MRM 参数

编号	化合物名称	色谱保留时间 [min]	定量离子对 m/z	碰撞能量 [V]	定性离子对 m/z	碰撞能量 [V]	线性回归系数 R^2
1	除虫脲 (氰酸盐)	5.24	153.02 > 90.01	20	153.02 > 125.01	20	0.9969
2	除虫脲 (苯胺盐)	5.75	127.01 > 65.01	30	127.01 > 100.01	30	0.9949
3	甲胺磷	5.87	141.00 > 95.00	10	141.00 > 126.00	5	0.9930
4	敌敌畏	5.94	184.95 > 92.98	17	219.95 > 184.95	10	0.9960
5	敌草腈	6.82	135.97 > 99.98	10	170.96 > 135.97	15	0.9960
6	速灭磷	7.39	127.03 > 109.02	10	192.04 > 127.03	12	0.9964
7	乙酰甲胺磷	7.50	136.01 > 42.00	10	136.01 > 94.01	15	0.9904
8	3,5-二氯苯胺	7.61	160.98 > 89.99	25	160.98 > 98.99	25	0.9989
9	草达灭	8.58	126.07 > 55.03	10	187.10 > 126.07	10	0.9941
10	敌百虫	8.60	263.06 > 179.04	15	263.06 > 235.06	5	0.9946
11	氧化乐果	9.00	110.01 > 79.01	15	156.02 > 110.01	10	0.9969
12	仲丁威	9.11	121.07 > 77.05	15	150.09 > 121.07	10	0.9977
13	残杀威	9.13	110.06 > 64.03	10	152.08 > 110.06	10	0.9981
14	毒草安	9.16	176.06 > 120.04	10	196.07 > 120.04	10	0.9980
15	灭线磷	9.38	158.00 > 80.90	15	158.00 > 114.00	5	0.9949
16	氟乐灵	9.58	264.09 > 160.05	15	306.10 > 264.09	15	0.9944
17	氯苯胺灵	9.62	213.00 > 127.00	5	213.00 > 171.00	5	0.9981
18	氟草胺	9.63	292.10 > 160.05	21	292.10 > 264.09	10	0.9923
19	治螟磷	9.70	322.02 > 202.01	15	322.02 > 294.09	10	0.9943
20	恶虫威	9.72	166.06 > 151.06	15	166.06 > 166.06	15	0.9996
21	久效磷	9.80	127.03 > 95.03	20	127.03 > 109.03	25	0.9971
22	噻草隆	9.82	164.05 > 136.04	12	164.05 > 164.05	10	0.9974
23	α -六氯环己烷	10.15	180.91 > 144.93	15	218.89 > 182.91	15	0.9970
24	苯噻草酮	10.36	202.09 > 174.07	5	202.09 > 186.08	10	0.9969
25	莠去津	10.54	215.05 > 173.08	10	215.09 > 200.09	10	0.9945
26	戊菌隆	10.62	125.05 > 89.04	12	180.07 > 125.05	12	0.9914
27	敌杀磷	10.72	125.00 > 97.00	15	125.00 > 141.00	15	0.9936
28	β -六氯环己烷	10.73	180.91 > 144.93	15	218.89 > 182.91	15	0.9933
29	烯虫磷	10.74	236.07 > 166.05	15	236.07 > 194.06	5	0.9918
30	γ -六氯环己烷 (林丹)	10.81	180.91 > 144.93	15	218.89 > 180.91	5	0.9939
31	特丁津	10.84	214.10 > 132.06	10	229.11 > 173.08	10	0.9935
32	二嗪农	10.88	137.05 > 84.03	10	304.10 > 179.06	15	0.9987
33	拿草特	10.93	173.01 > 145.01	15	175.02 > 147.01	15	0.9939
34	氟消草	10.95	264.04 > 206.03	10	306.05 > 264.04	10	0.9967
35	咯嗉酮	11.07	173.08 > 130.06	20	173.08 > 145.07	20	0.9974

编号	化合物名称	色谱保留时间 [min]	定量离子对 m/z	碰撞能量 [V]	定性离子对 m/z	碰撞能量 [V]	线性回归系数 R^2
36	嘧霉胺	11.11	198.11 > 158.09	30	198.11 > 183.10	15	0.9953
37	七氟菊酯	11.16	177.02 > 127.02	20	197.03 > 141.02	15	0.9991
38	乙嘧硫磷	11.29	292.06 > 153.03	10	292.06 > 181.04	10	0.9935
39	抗蚜威	11.50	166.10 > 96.06	10	238.14 > 166.10	15	0.9937
40	δ -六氯环己烷	11.54	180.91 > 144.93	15	204.07 > 91.03	15	0.9949
41	异稻瘟净	11.54	204.07 > 122.04	15	218.89 > 182.91	15	0.9997
42	安果	11.74	126.00 > 93.00	8	172.00 > 93.00	5	0.9982
43	磷胺II	11.83	227.05 > 127.03	15	264.06 > 193.04	15	0.9977
44	除线磷	11.90	222.98 > 204.98	10	278.97 > 222.98	15	0.9946
45	克草胺	11.94	197.08 > 148.06	10	199.08 > 148.06	10	0.9992
46	二甲酚草胺	11.95	230.06 > 154.04	10	232.06 > 154.04	10	0.9953
47	扑灭津	12.02	214.09 > 172.08	12	214.92 > 14.09	10	0.9970
48	敌稗	12.06	217.01 > 161.00	10	219.01 > 163.00	10	0.9934
49	马拉氧磷	12.07	127.02 > 99.02	10	127.02 > 109.02	20	0.9978
50	甲基毒死蜱	12.08	124.96 > 78.97	10	285.91 > 92.97	20	0.9945
51	噻草酮	12.13	198.08 > 82.03	20	198.08 > 110.05	20	0.9997
52	禾菌胺	12.15	100.09 > 58.05	15	100.09 > 72.06	15	0.9909
53	乙烯菌核利	12.16	212.00 > 172.00	15	285.00 > 212.00	15	0.9957
54	3-羟基克百威	12.21	137.06 > 81.03	18	180.08 > 137.06	15	0.9974
55	甲基对硫磷	12.22	263.00 > 109.00	15	263.00 > 246.00	15	0.9966
56	甲草胺	12.23	161.07 > 146.06	12	188.08 > 160.07	10	0.9997
57	甲基立枯磷	12.25	264.96 > 92.99	20	264.96 > 249.96	15	0.9932
58	氯草酰胺	12.31	162.08 > 144.07	10	223.11 > 147.07	10	0.9983
59	甲霜灵	12.37	249.13 > 190.10	10	249.13 > 249.13	5	0.9911
60	甲萘威	12.41	144.06 > 115.05	20	144.06 > 116.05	20	0.9919
61	麦穗宁	12.41	183.80 > 156.10	10	183.80 > 183.10	20	0.9902
62	皮蝇磷(乐乃松)	12.47	284.91 > 269.92	13	286.91 > 271.91	20	0.9994
63	苜草丹	12.63	100.00 > 72.00	10	128.00 > 43.10	5	0.9938
64	甲基嘧啶磷	12.66	290.09 > 233.07	10	305.10 > 290.09	15	0.9911
65	禾菌胺 II	12.75	100.09 > 58.05	15	100.08 > 72.06	15	0.9916
66	乙炔草黄	12.80	207.08 > 161.06	10	277.02 > 109.01	8	0.9907
67	杀螟硫磷 确证1	12.80	277.02 > 260.02	10	286.11 > 207.08	12	0.9997
68	甲硫威	12.84	168.06 > 109.04	15	168.06 > 153.06	15	0.9971
69	马拉硫磷	12.92	127.01 > 99.01	10	173.02 > 127.01	10	0.9951
70	抑菌灵	12.95	223.97 > 122.99	15	225.97 > 122.99	15	0.9971
71	甲拌磷砒	13.01	153.00 > 125.00	5	199.00 > 143.00	10	0.9942

编号	化合物名称	色谱保留时间 [min]	定量离子对 <i>m/z</i>	碰撞能量 [V]	定性离子对 <i>m/z</i>	碰撞能量 [V]	线性回归 系数 R ²
72	异丙净	13.02	241.90 > 149.80	20	254.90 > 180.30	20	0.9906
73	乙基毒死蜱	13.12	198.96 > 170.96	15	313.93 > 285.94	12	0.9995
74	倍硫磷氧化物	13.22	277.80 > 109.10	25	329.60 > 298.90	10	0.9927
75	氯酞酸甲酯	13.24	300.91 > 300.91	15	331.90 > 300.91	15	0.9986
76	氟唑草胺	13.26	211.04 > 123.02	10	211.04 > 183.03	10	0.9959
77	α-硫丹 I	13.43	240.89 > 205.91	20	264.88 > 192.91	22	0.9942
78	咪草烟	13.49	201.9 > 133.00	15	252.00 > 145.90	20	0.9944
79	丁乐灵	13.50	266.14 > 190.10	15	266.14 > 220.11	15	0.9996
80	乙基虫螨磷	13.54	304.12 > 168.06	15	333.13 > 318.12	15	0.9992
81	二甲戊乐灵	13.86	252.12 > 162.08	12	252.12 > 191.09	12	0.9912
82	氟虫腈	13.87	212.97 > 177.98	16	366.95 > 212.97	25	0.9938
83	啞菌环胺	13.91	224.13 > 208.12	20	225.13 > 210.12	18	0.9959
84	吡草胺	13.92	133.05 > 117.04	20	209.07 > 132.05	12	0.9939
85	戊菌唑	14.01	248.06 > 157.04	25	248.06 > 192.04	15	0.9977
86	对甲抑菌灵	14.05	137.05 > 91.03	20	238.09 > 137.05	15	0.9922
87	Z-毒虫畏	14.05	266.98 > 158.99	15	322.97 > 266.98	15	0.9904
88	丙烯菊酯	14.06	123.08 > 81.05	10	136.08 > 93.06	10	0.9923
89	灭蚜磷	14.09	226.04 > 198.03	5	329.05 > 160.03	10	0.9979
90	稻丰散	14.18	146.01 > 118.01	10	274.03 > 246.02	10	0.9951
91	地胺磷	14.20	196.02 > 140.02	15	196.02 > 168.02	10	0.9973
92	啞硫磷	14.21	146.03 > 118.02	15	157.03 > 129.02	13	0.9943
93	氟菌唑	14.31	179.04 > 144.04	15	206.05 > 179.04	15	0.9925
94	腐霉利	14.31	283.02 > 96.01	15	283.02 > 255.02	10	0.9983
95	乙基溴硫磷	14.50	358.89 > 302.91	20	358.89 > 330.90	10	0.9985
96	杀扑磷	14.60	124.98 > 98.99	22	144.98 > 84.99	10	0.9945
97	顺式-α-氯丹	14.62	372.81 > 265.87	18	374.81 > 267.87	15	0.9967
98	o,p-滴滴伊	14.63	245.95 > 175.97	25	317.94 > 245.95	20	0.9946
99	草克死	14.68	188.02 > 132.02	22	188.02 > 160.02	16	0.9945
100	多效唑	14.72	236.10 > 125.06	15	236.10 > 167.07	15	0.9926
101	乙拌磷砷	14.74	213.01 > 125.01	10	213.01 > 153.01	5	0.9912
102	啞氧菌酯	14.77	303.09 > 157.04	20	335.09 > 303.09	10	0.9937
103	β-硫丹 II	14.88	271.88 > 236.89	18	338.85 > 265.88	15	0.9973
104	啞菌胺	14.89	222.11 > 207.10	15	223.11 > 208.10	15	0.9965
105	反式-γ-氯丹	14.89	372.81 > 265.87	18	374.81 > 267.87	15	0.9991
106	粉唑醇	14.97	123.04 > 75.03	15	219.07 > 123.04	15	0.9915
107	敌草胺	15.00	128.07 > 72.04	10	271.16 > 128.07	5	0.9972

编号	化合物名称	色谱保留时间 [min]	定量离子对 <i>m/z</i>	碰撞能量 [V]	定性离子对 <i>m/z</i>	碰撞能量 [V]	线性回归系数 R ²
108	纹枯胺	15.03	173.06 > 145.05	15	173.06 > 173.06	15	0.9988
109	丙草胺	15.13	162.09 > 147.08	15	216.05 > 174.04	20	0.9935
110	己唑醇 确证2	15.13	231.06 > 175.04	10	262.14 > 202.11	15	0.9962
111	稻瘟灵	15.14	290.06 > 118.03	15	290.06 > 204.05	15	0.9961
112	丙溴磷	15.21	138.98 > 96.98	8	338.94 > 268.95	20	0.9939
113	恶草酮	15.26	258.05 > 175.04	10	304.06 > 260.05	10	0.9927
114	p,p'-滴滴伊	15.32	245.95 > 175.97	25	317.94 > 245.95	20	0.9964
115	腈菌唑	15.40	179.07 > 125.05	15	179.07 > 152.06	15	0.9912
116	噻嗪酮	15.43	172.09 > 57.03	10	249.13 > 193.10	10	0.9906
117	甲氧胺菌灵	15.44	206.09 > 116.05	15	206.09 > 131.06	15	0.9921
118	o,p'-滴滴涕	15.47	234.94 > 164.96	15	234.97 > 164.98	20	0.9935
119	o,p'-滴滴涕 确证1	15.47	236.94 > 164.96	20	236.97 > 164.98	20	0.9963
120	杀螨特-1	15.48	185.06 > 63.02	15	319.10 > 185.06	15	0.9959
121	杀螨特-2	15.69	185.06 > 63.02	15	319.10 > 185.06	15	0.9971
122	环丙酰菌胺	15.78	139.00 > 103.10	10	222.00 > 125.00	18	0.9982
123	环丙唑醇	15.79	222.09 > 125.05	20	224.09 > 127.05	20	0.9989
124	除草醚	15.85	201.99 > 138.99	21	282.98 > 252.98	15	0.9997
125	乙酯杀螨醇	15.98	251.02 > 139.01	20	253.03 > 141.01	15	0.9978
126	氯炔草酮	15.99	149.90 > 122.90	15	285.00 > 255.00	14	0.9963
127	倍硫磷亚砷	16.05	279.01 > 153.01	15	294.02 > 279.01	8	0.9958
128	烯唑醇	16.11	268.06 > 232.05	15	270.06 > 234.05	15	0.9949
129	乙硫磷	16.12	230.99 > 202.99	15	383.99 > 230.99	10	0.9973
130	恶霜灵	16.16	132.06 > 117.05	15	163.07 > 132.06	10	0.9985
131	p,p'-滴滴涕	16.20	234.94 > 164.96	20	234.94 > 164.96	20	0.9979
132	p,p'-滴滴涕	16.20	234.97 > 164.98	20	236.97 > 164.98	20	0.9959
133	虫螨磷 1	16.20	324.96 > 268.97	15	324.96 > 296.97	10	0.9969
134	炔咪菊酯	16.36	123.00 > 81.00	5	324.90 > 269.20	14	0.9967
135	担菌宁	16.45	269.14 > 119.06	10	269.14 > 210.11	10	0.9945
136	三唑磷	16.46	161.03 > 134.03	10	257.05 > 162.03	10	0.9936
137	甲呋酰胺	16.58	186.05 > 158.05	10	232.07 > 186.05	10	0.9973
138	氟草唑酯	16.59	330.03 > 310.03	20	340.03 > 312.03	10	0.9919
139	苯霜灵	16.63	234.12 > 174.09	10	266.14 > 148.08	10	0.9951
140	氟菌平	16.65	116.04 > 89.03	15	190.06 > 130.04	10	0.9962
141	丙环唑, 峰1	16.77	259.02 > 69.01	20	259.02 > 173.02	20	0.9989
142	克瘟散	16.78	173.01 > 109.01	15	310.03 > 173.01	10	0.9904
143	啶氧灵	16.84	272.00 > 237.00	20	307.00 > 272.00	10	0.9982

编号	化合物名称	色谱保留时间 [min]	定量离子对 m/z	碰撞能量 [V]	定性离子对 m/z	碰撞能量 [V]	线性回归系数 R^2
144	硫丹硫酸盐	16.85	271.88 > 236.89	15	273.88 > 238.89	15	0.9929
145	炔草酯	16.87	349.05 > 238.04	15	349.05 > 266.04	15	0.9991
146	氟吡菌胺	16.90	208.80 > 182.00	20	261.00 > 175.00	24	0.9988
147	环嗪酮	17.02	171.00 > 71.00	10	171.00 > 85.00	10	0.9998
148	克螨特	17.16	135.06 > 107.05	15	350.16 > 201.09	10	0.9991
149	吡氟草胺	17.21	266.05 > 246.05	10	394.07 > 266.05	10	0.9981
150	磷酸三苯酯	17.26	325.07 > 169.04	25	326.07 > 325.07	10	0.9995
151	异菌脲	17.65	187.02 > 124.01	20	187.02 > 159.02	40	0.9979
152	联苯菊酯	17.77	181.05 > 153.05	6	181.05 > 166.05	15	0.9922
153	吡氟苯草胺	17.90	376.08 > 238.05	15	376.08 > 239.05	15	0.9981
154	溴螨酯	17.91	184.98 > 156.98	20	342.96 > 184.98	20	0.9967
155	双氧威	17.93	186.08 > 186.08	10	255.11 > 186.08	10	0.9933
156	甲氧菊酯	18.01	181.09 > 152.07	23	265.13 > 210.10	15	0.9956
157	咪菌灭	18.10	238.08 > 237.08	20	268.09 > 180.06	20	0.9994
158	吡螨胺	18.11	276.13 > 171.08	15	333.16 > 276.13	10	0.9997
159	啶螨唑	18.23	145.08 > 117.07	15	160.09 > 117.07	20	0.9951
160	烯菌灵	18.25	173.03 > 145.02	20	215.04 > 173.03	15	0.9954
161	呋线威	18.27	163.07 > 107.04	10	325.13 > 194.08	10	0.9989
162	呋草酮	18.38	199.06 > 157.05	20	333.10 > 120.04	15	0.9945
163	三氯杀螨砜	18.46	226.93 > 198.94	18	353.88 > 158.95	15	0.9973
164	伏杀硫磷	18.54	181.99 > 111.00	15	181.99 > 138.00	10	0.9985
165	戊苄菌唑	18.57	217.09 > 182.07	10	235.10 > 217.09	10	0.9945
166	灭幼醚	18.68	136.06 > 78.03	15	136.06 > 96.04	15	0.9941
167	氰氟草酯	18.70	256.10 > 120.05	10	256.10 > 256.10	10	0.9969
168	肟草酮	18.80	137.00 > 57.20	10	181.04 > 152.03	23	0.9995
169	氯氟菊酯	18.80	197.04 > 141.03	15	234.90 > 217.20	15	0.9997
170	乳氟草灵	18.83	344.04 > 223.02	15	344.04 > 300.03	15	0.9975
171	丙硫克百威	19.03	164.08 > 149.07	10	190.09 > 144.07	10	0.9975
172	定菌磷	19.05	221.05 > 193.04	10	232.05 > 204.05	10	0.9930
173	氯苯嘧啶醇	19.15	139.01 > 111.01	15	219.02 > 107.01	15	0.9993
174	益棉磷	19.20	132.01 > 77.01	20	160.02 > 132.01	5	0.9944
175	高效唑禾草灵	19.41	288.03 > 260.03	10	361.04 > 288.03	10	0.9998
176	双苯唑菌醇 1	19.59	170.09 > 115.06	25	170.09 > 141.07	20	0.9993
177	氯菊酯, 峰1	19.68	183.04 > 165.03	15	183.04 > 168.03	15	0.9973
178	双苯唑菌醇 2	19.71	170.09 > 115.06	25	170.09 > 141.07	20	0.9993
179	氯菊酯, 峰2	19.81	183.04 > 165.03	15	183.04 > 168.03	15	0.9909

编号	化合物名称	色谱保留时间 [min]	定量离子对 m/z	碰撞能量 [V]	定性离子对 m/z	碰撞能量 [V]	线性回归系数 R^2
180	咪唑胺	19.88	180.01 > 138.01	15	310.03 > 268.02	10	0.9932
181	唑草胺	20.21	100.04 > 72.03	15	188.08 > 119.05	15	0.9991
182	氟氯氰菊酯, 峰1	20.26	163.02 > 91.01	12	163.02 > 127.02	10	0.9915
183	腈苯唑	20.34	129.04 > 102.03	15	198.07 > 129.04	10	0.9996
184	氯氰菊酯 I	20.65	163.03 > 127.02	10	181.03 > 152.03	25	0.9996
185	吡菌酰胺	20.84	342.03 > 140.01	15	344.03 > 142.01	15	0.9977
186	氟氰戊菊酯, 峰1	20.85	199.07 > 107.04	22	199.07 > 157.06	10	0.9958
187	啶禾灵	20.92	299.07 > 255.06	20	372.09 > 299.07	15	0.9969
188	醚菊酯	21.08	163.09 > 107.06	16	163.09 > 135.07	10	0.9987
189	氟氰戊菊酯, 峰2	21.12	199.07 > 107.04	22	199.07 > 157.06	10	0.9989
190	氰戊菊酯, 峰1	21.94	167.05 > 125.04	10	419.13 > 225.07	10	0.9978
191	氟胺氰菊酯, 峰1	22.09	250.06 > 200.05	20	252.06 > 200.05	20	0.9973
192	吡亚菌平	22.17	132.03 > 77.02	15	325.08 > 132.03	20	0.9936
193	氰戊菊酯, 峰2	22.20	250.06 > 200.05	20	252.06 > 200.05	20	0.9977
194	氰戊菊酯, 峰2	22.28	167.05 > 125.04	10	419.13 > 225.07	10	0.9996
195	苯醚甲环唑, 峰1	22.76	323.05 > 265.04	15	325.05 > 267.04	20	0.9995
196	茚虫威	22.95	203.03 > 106.01	20	203.03 > 134.02	20	0.9996
197	溴氰菊酯 II	23.28	252.99 > 93.00	18	252.99 > 173.99	18	0.9987
198	啉菌酯	23.63	344.10 > 329.10	20	388.11 > 345.10	15	0.9991
199	烯酰吗啉-1	23.91	301.10 > 165.05	10	387.12 > 301.10	12	0.9992
200	烯酰吗啉-2	24.60	301.10 > 165.05	10	387.12 > 301.10	12	0.9990



Orbitrap 组
学俱乐部



赛默飞小分子质
谱应用技术群

赛默飞世尔科技(中国)有限公司

www.thermoscientific.cn

全国服务热线: 800 810 5118
400 650 5118 (支持手机用户)

AN 10361_C_GCMSMS_201508Y

Thermo
SCIENTIFIC

A Thermo Fisher Scientific Brand