

X500R QTOF系统对新型杀虫剂乙唑螨腈在水培植物体内的代谢产物研究

Metabolites in the hydroponic-plant system of a new insecticide cyetpyrafen by using X500R QTOF system

李志远¹, 李如男², 孙小杰¹, 刘冰洁¹, 郭立海¹

Li Zhiyuan¹, Sun Xiaojie¹, Liu Bingjie¹, Guo Lihai¹

¹ SCIEX China

² 中国农业科学院植物保护研究所, 植物病虫害生物学国家重点实验室

Keywords: X500R QTOF, Molecule Profiler, cyetpyrafen, metabolites, new pesticide, hydroponic-plant system

引言

随着新型农药的不断的不断发展, 越来越多的新型农药进入到大众的视野中来, 在我国, 新型农药的登记有着严格的管理条例, 在2017年国务院修订的《农药管理条例》中, 关于《农药登记资料要求》中就明确提出了在残留报告中需要提供植物、动物及环境中代谢试验资料。这就意味着, 更多的科学研究会关注到植物对这些新型农药的吸收和代谢, 目的除了满足国家的农药登记规定以外, 也在于更好地评估它们在作物中的转运、积累以及其对人类暴露风险。

乙唑螨腈(如图1)作为一种新型杀虫剂, 目前还没有关于其在植物中的吸收和代谢研究。本实验首次通过水培实验对乙唑螨腈新型杀虫剂在两种模式作物(生菜和水稻)中的吸收和消除动力学和转化进行了评价。

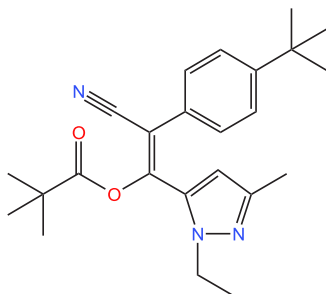


图1. 乙唑螨腈 (Cyetpyrafen) 结构信息



图2. X500R QTOF系统

X500R QTOF系统结合Molecule Profiler软件快速鉴定乙唑螨腈代谢产物

1. X500R QTOF系统(如图2)配备超快速的信息依赖型采集模式(Information Dependent Acquisition, IDA), 最快可以实现100 Hz的扫描速度(如图3), 结合动态背景扣除(Dynamic background subtraction, DBS)和多重质量亏损过滤采集方式(Multiple Mass Defect Filter, M MDF), 可以更多的获得代谢产物的MS/MS信息, X500R QTOF系统不但可以更多的获得代谢物的MS/MS信息, 并保证其具有较高的灵敏度。
2. Molecule Profiler软件(如图4)除了可以结合软件内置的多种峰查找算法来发现代谢产物, 快速对样品进行包括上百种常见的I相、II相代谢产物的峰提取, 结合多重质量亏损过滤、同位素模式匹配、和基于相同产物离子或中性丢失的代谢物查找等模

式，强大的软件算法可以快速检索到有效的代谢产物信息，再通过软件内部整合的二级碎片解析和结构编辑功能，对代谢产物进行分析，给出代谢产物的结构信息，鉴定过程举例如图5。

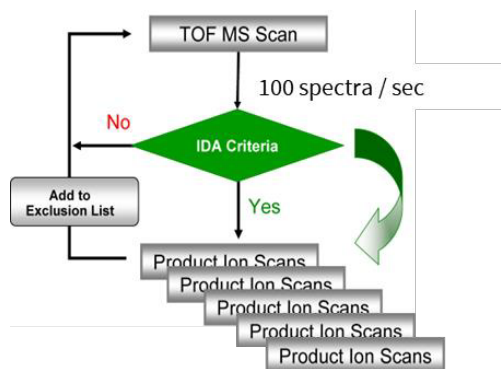


图3. 信息依赖型采集模式



图4. Molecule Profiler软件



图5. Molecule Profiler软件鉴定过程举例

Molecule Profiler软件快速鉴定乙唑螨腈代谢产物

通过Molecule Profiler软件基于乙唑螨腈母药结构信息，自动预测其潜在的代谢产物，软件可根据每个代谢产物相关的一级和二级数据推测代谢产物的结构，鉴定代谢产物举例^[1]如图6-1、6-2，详细鉴定结果如表1。

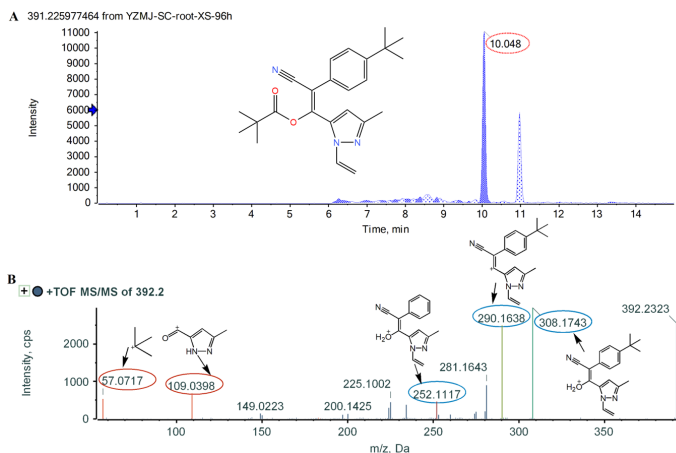


图6-1. 羟基化脱水反应代谢产物 (Hydroxylation, dehydration reaction), 分子式: $C_{24}H_{29}N_3O_2$

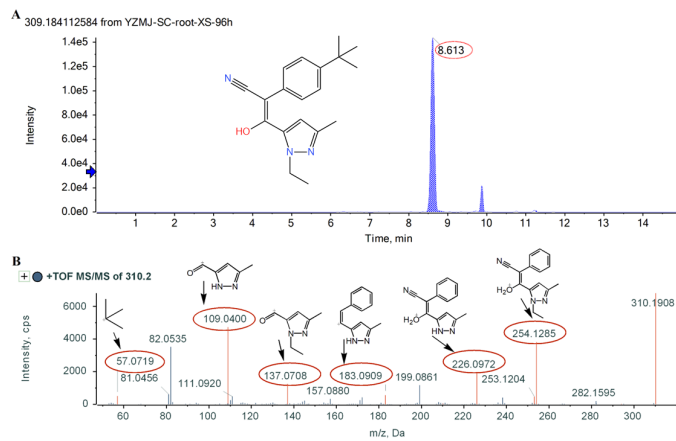


图6-2. 水解反应代谢产物 (Hydrolysis), 分子式: $C_{19}H_{23}N_3O$

表1. 乙唑螨腈代谢产物鉴定结果列表

名称	代谢反应	分子式
Cyetpyrafen	-	C ₂₄ H ₃₁ N ₃ O ₂
M-409-1/2	Hydroxylation	C ₂₄ H ₃₁ N ₃ O ₃
M-409-3	Hydroxylation	C ₂₄ H ₃₁ N ₃ O ₃
M-409-4	Hydroxylation	C ₂₄ H ₃₁ N ₃ O ₃
M-309	Hydrolysis	C ₁₉ H ₂₃ N ₃ O
M-391	Hydroxylation, elimination reaction	C ₂₄ H ₂₉ N ₃ O ₂
M-407	Hydroxylation, oxidation	C ₂₄ H ₂₉ N ₃ O ₃
M-325-1	Hydrolysis, hydroxylation	C ₁₉ H ₂₃ N ₃ O ₂
M-325-2	Hydrolysis, hydroxylation	C ₁₉ H ₂₃ N ₃ O ₂
M-471	Hydrolysis, glycosylation	C ₂₅ H ₃₃ N ₃ O ₆
M-264	Hydrolysis, glycosylation	C ₁₁ H ₂₀ N ₃ O ₇
M-102	Hydrolysis	C ₅ H ₁₀ O ₂
M-614	Hydrolysis, glutathione conjugation	C ₂₉ H ₃₈ N ₆ O ₇ S

总结

1. X500R QTOF系统具有100 Hz超快的扫描速度，通过IDA采集模式，结合DBS和MMDF，可以获得更多的代谢产物的MS/MS信息，尤其使得低灵敏度代谢产物的鉴定成为可能。
2. 通过Molecule Profiler软件的自动非靶向数据处理过程，在水培植物中快速鉴定了10个I相和3个II相代谢产物，包括例如羟基化、水解、脱氢、脱水等代谢途径（推测代谢途径如图7）。

参考文献：

- [1] R. Li et al. Insight into the uptake and metabolism of a new insecticide cyetpyrafen in plants. Environment International 169 (2022) 107522

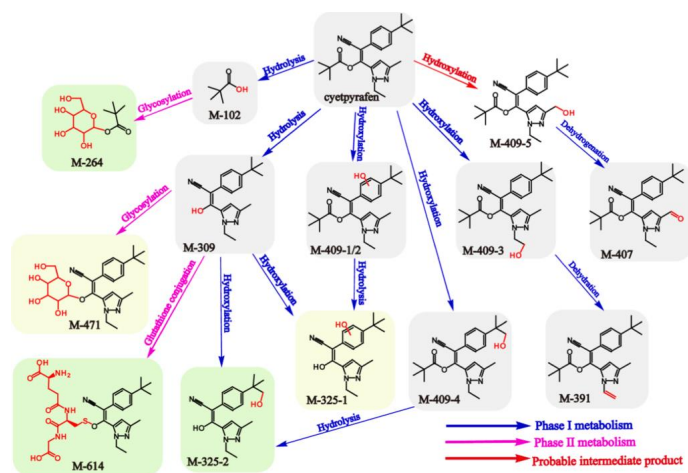


图7. 乙唑螨腈可能的代谢途径图^[1]

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. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-15385-ZH-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

广州办公室
广州国际生物岛星岛环北路1号
B2楼501、502单元
电话: 020-8842-4017

官方微信: [SCIEX-China](https://www.sciex.com.cn)