

SCIEX高分辨液质联用系统在动物源性食品中兽药残留筛查的应用

Simultaneous Screening of Veterinary Drugs in Animal -Derived Foods Samples Using LC-QTOF System

陈金梅¹, 徐敦明², 杨总¹, 刘冰洁¹
Chen Jinmei¹, Xu Dunming², Yang Zong¹, Liu Bingjie¹

¹ SCIEX China

² Xiamen Customs District

关键词: Veterinary Drugs, HRMS Screening, LC-QTOF System

前言

兽药 (Veterinary Drugs) 是指用于预防、治疗、诊断动物疾病, 或调节动物生理功能的药物, 包括抗生素、抗寄生虫药、激素、疫苗等。兽药的应用与畜牧业、水产养殖和宠物医疗的发展密切相关。动物源性食品中的兽药残留一直是受到重点关注的食品安全问题之一。基于高分辨系统建立动物源性食品中兽药残留的筛查方案是未来分析方法的趋势。

厦门团体标准T/XMSSAL 0070-2023《供厦食品 动物源性食品中 120 种兽药残留的筛查 液相色谱 - 高分辨质谱法》, 规定了供厦食品中动物源性食品的兽药残留筛查方法。该标准具有以下特点: 1. 筛查范围广: 覆盖120种兽药; 2. 适用复杂基质: 适用于动物肌肉、内脏、蛋奶的统一前处理流程; 3. 筛查结果准确: 通过实验室建立标准化兽药筛查数据库 (含筛查列表, 保留时间, 二级质谱图等), 结合高分辨仪器的高灵敏度, 高准确性的性能特点, 减少假阳性/假阴性风险。更全面保障食品的安全, 更好的实现兽药检测的高效性和准确性。

实验方案特点

- **抗污染能力强:** Turbo V™离子源和气帘气接口设计, 具有很强的抗污染能力, 从而保证复杂基质样品的重现性。
- **扫描速度快:** 确保即使在复杂基质中多化合物同时分析, 每个色谱峰也可以采集到足够多的数据点。



图1. SCIEX X500R QTOF系统基本组成

- **避免数据冗余, 保证数据有效性:** SCIEX专利技术的动态背景扣除功能可有效排除背景离子, 保证低水平化合物的MS/MS图谱采集。
- **完整方案, 拿来即用:** 成熟的液相方法和质谱方法, 完善的一级筛查列表 (包含保留时间、优化的加合离子及源内裂解分子式等) 和应用标品建立的二级谱库, 拿来即用。
- **数据具有回溯性:** 筛查列表随时可扩充, 适合于不断更新兽药的检测。
- **兼顾定性定量:** 利用SCIEX 高分辨液质联用系统进行兽药的测定, 既可定性又可定量。

实验方法

样品前处理

参考标准。

液相条件

液相色谱仪: SCIEX ExionLC™系统

色谱柱: C18色谱柱 (100×2.1 mm, 2.6 μm)

正离子模式流动相A: 0.2%甲酸水, 流动相B: 0.2% 甲酸乙腈

负离子模式流动相A: 水, 流动相B: 乙腈

质谱条件

扫描方式: IDA模式, DBS功能开启

离子源参数:

气帘气(CUR): 30 psi

离子源温度(TEM): 550 °C

离子喷雾电压 (IS): 5500 V, -4500V

雾化气(GS1): 50 psi

辅助加热气 (GS2): 55 psi

去簇电压(DP): 50 V

碰撞能(CE ± CES): ± 40 ± 20 V

配备超快速的信息依赖型采集模式 (Information Dependent Acquisition, IDA) 的SCIEX高分辨质谱, 最快可以实现超过100Hz的扫描速度, 可以保证一针进样时获得的高分辨一级数据同时每个化合物都能采集到足够的色谱峰点数, 同时获得120种兽药化合物的全部高质量的MS/MS信息, 这种超高的扫描速度更有利于数据采集的全面性从而更有利于高分辨筛查工作, 客户可以根据需求扩增化合物, 降低因目标化合物增多而采集不到二级质谱图的概率, 减少需要多次分析数据多次采集数据的困扰。

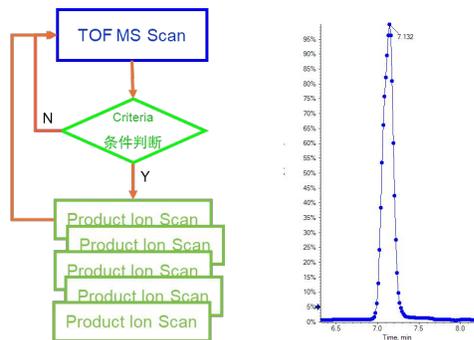
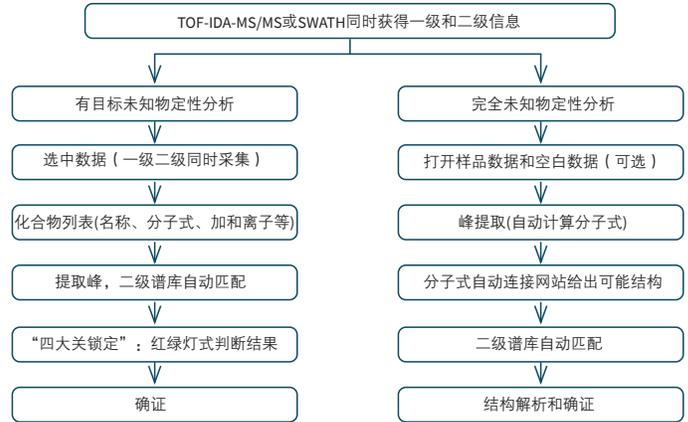


图2. 信息依赖型采集模式和色谱峰扫描点数展示

数据处理流程:



靶向筛查

建立120种完整的兽药靶向筛查方法, 包含化合物的分子式、CAS号、加合方式、参考保留时间, 以及其对应的二级谱库。SCIEX OS软件可自定义判定规则, 可以根据标准中的目标物鉴别和判定条件设定色谱峰信噪比阈值、保留时间偏差、一级质量误差、同位素分布、典型二级质量误差等判别条件如图3所示, 一步完成标准中要求的目标物鉴别和确认工作, “红绿灯” 标记

Component Name	Formula	Adduct Charge	Precursor Mass	RT Confidence	Mass Error Confidence	Isotope Confidence	Library Confidence	Fragment Mass Error Confidence
噻虫嗪	CBH10CIN5O3S	[M+H] ⁺	292.0266	✓	✓	✓	✓	■
噻虫嗪-碎片1	CBH10CIN5O3S	[M+H] ⁺	292.0266	✓	✓	✓	✓	✓
噻虫嗪-碎片2	CBH10CIN5O3S	[M+H] ⁺	292.0266	✓	✓	✓	✓	✓
噻虫嗪-碎片3	CBH10CIN5O3S	[M+H] ⁺	292.0266	✓	✓	✓	✓	✓

Mass Error (ppm)	Fragment Mass Error (ppm)	Retention Time Error (%)	Retention Time Delta (min)	Fragment Mass	Library Hit	Library Score
0.7	N/A	0.385	0.02	N/A	噻虫嗪 Thiamethoxam	90.1
0.0	1.4	0.107	0.00	211.0648	Thiamethoxam [Smart Conf...	90.7
0.7	-2.3	0.232	0.01	131.9669	Thiamethoxam [Smart Conf...	93.6
0.0	1.9	0.082	0.00	210.0570	Thiamethoxam [Smart Conf...	90.7

图3. 数据处理判别条件判断设置界面和结果表显示界面



图4. 数据结果表布局layout保存和引用界面

规则，直观展示匹配情况，满足设定判别条件的以绿色对钩显示，软件可以快速过滤阳性结果，提高数据处理效率、保证结果的准确性。结果表的显示界面可以根据客户习惯，设置显示的顺序和数字显示格式（科学计数法，有效数字，小数位数等），结

果表布局可以保存成layout，新处理数据时可以引用定制化的layout，如图4所示，简化筛查数据处理流程，效率大大提高。

方法筛查限

选取标准中三大类别基质中的典型基质做筛查限浓度加标实验进行筛查，不同基质中的定量限浓度的兽药可以被筛查出，满足标准要求。图5展示鸡蛋基质中筛查限浓度部分兽药筛查结果。

数据库建立流程

用户可随时根据筛查需求扩充化合物数据库，流程简单，只需要在相应化合物的MSMS谱图上右键点击，选择“Add spectrum to library”，选择已有数据库导入该谱图即可。

Sample Name	Component Name	Formula	Adduct / Charge	Precursor Mass	Mass Error	Confidence	Isotope Confidence	Library Confidence	Found At Mass	Mass Error (ppm)	Library Hit
jz_jidan	克伦特罗	C12H18Cl2N2O	[M+H] ⁺	277.0869		✓	✓	✓	277.0873	1.3	克伦特罗 clenbuterol
jz_jidan	羟甲基克伦特罗	C12H18Cl2N2O2	[M+H] ⁺	293.0818		✓	✓	✓	293.0824	2.0	羟甲基克伦特罗 Hydroxymethylclenbuterol
jz_jidan	妥布特罗	C12H18ClNO	[M+H] ⁺	228.1150		✓	✓	✓	228.1148	-0.5	妥布特罗 tulobuterol
jz_jidan	马布特罗	C13H18ClF3N2O	[M+H] ⁺	311.1133		✓	✓	✓	311.1133	0.1	马布特罗 Mabuterol
jz_jidan	洛美沙星	C17H19F2N3O3	[M+H] ⁺	352.1467		✓	✓	✓	352.1474	1.8	洛美沙星 Lomefloxacin
jz_jidan	班布特罗	C18H29N3O5	[M+H] ⁺	368.2180		✓	✓	✓	368.2178	-0.6	班布特罗 Bambuterol
jz_jidan	达氟沙星	C19H20FN3O3	[M+H] ⁺	358.1561		✓	✓	✓	358.1568	1.8	达氟沙星 Danofloxacinmesylate
jz_jidan	恩诺沙星	C19H22FN3O3	[M+H] ⁺	360.1718		✓	✓	✓	360.1721	0.9	恩诺沙星 Enrofloxacin
jz_jidan	甲睾酮	C20H30O2	[M+H] ⁺	303.2319		✓	✓	✓	303.2323	1.4	甲睾酮 17-Methyltestosterone
jz_jidan	醋酸氯地孕酮	C23H29ClO4	[M+H] ⁺	405.1827		✓	✓	✓	405.1835	1.9	醋酸氯地孕酮 Chlormadinoneacetate [M.
jz_jidan	异丙硝唑	C7H11N3O2	[M+H] ⁺	170.0924		✓	✓	✓	170.0923	-0.8	异丙硝唑 Iprnidazole

图5. 鸡蛋基质中筛查限浓度部分兽药筛查结果

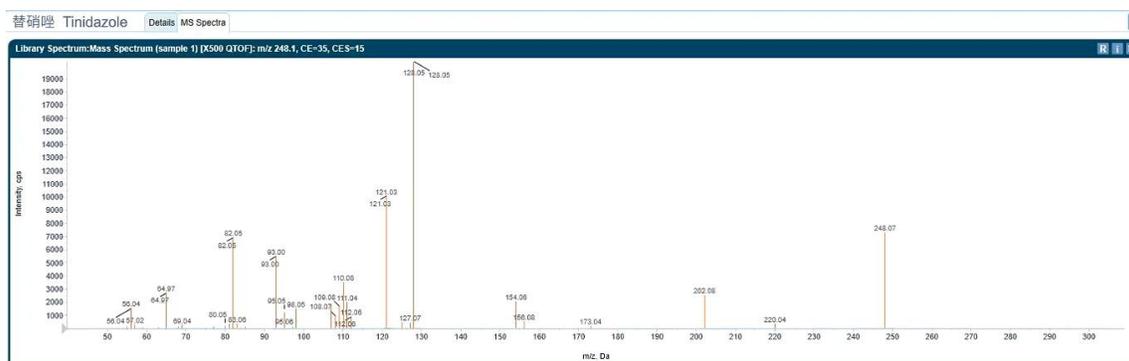
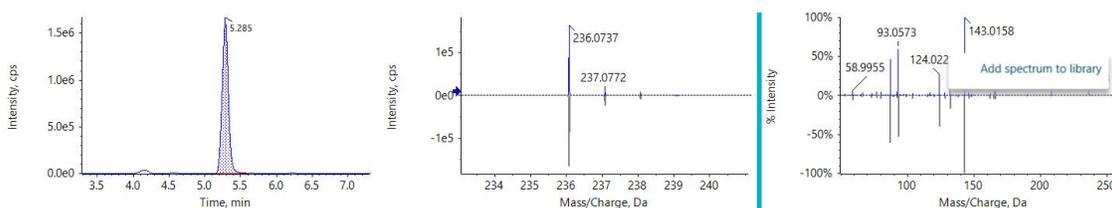


图6. 兽药标准品二级谱库示例

总结

基于SCIEX高分辨系统建立了动物源性食品中兽药残留的筛查方案。该方法样品前处理参考标准，方法筛查限满足标准要求。方案完整，包括一级化合物信息列表和二级谱库，拿来即用，可实现准确筛查。从靶向到非靶向的兽残筛查实验，均可无缝衔接，帮您更好更快的完成相应监测任务。

参考文献

- [1]. T/XMSSAL 0070-2023供厦食品动物源性食品中120种兽药残留的筛查液相色谱-高分辨质谱法

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。

© 2025 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. MKT-35511-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](#)