

使用SCIEX Triple Quad 5500⁺ - QTRAP Activated液质联用系统和SCIEX OS-Q软件测定水中污染物

全新的QTRAP平台和定量软件结合，提高定性确证可信度

KC Hyland

SCIEX, 红木城, 加利福尼亚州, 美国

问题：检测实验室在确认环境样品中的污染物时通常需要更多的信息。在复杂基质中，基质干扰会使数据结果变复杂导致假阳性的结果或者报告的污染物水平受到质疑。通过将QTRAP技术的速度和灵敏度与和SCIEX OS-Q相结合，可以有目标的采集水样中人为污染物的全扫描MS/MS谱图。这些MS/MS数据随后可在经过SCIEX验证的库中进行搜索，以对农药检测物及其ID进行确证。

解决方案：这个MS方法包含一些目标性的PPCPs和农药，MRM离子对超过200个。IDA（信息依赖采集）设定当MRM信号强度超过2000 cps阈值时将触发增强子离子（EPI）扫描。除了MRM信号（图1）外，这种数据采集方式还采集了MS/MS谱图。我们测试了从环境中采集的地表水样品。数据在SCIEX OS-Q中进行处理，用MRM进行定量，并用MS/MS谱图与谱库匹配进行定性。图2展示

了通过结合MS/MS谱图匹配度和保留时间对乙酰甲胺磷进行确认。增加一个更严格的化合物确认方式有助于防止报告假阳性，并帮助用户对定性和定量结果更有信心。

Index	Sample T...	Component...	Area	Retent... Time	Signal A...	Pressure Mass	RT Coef.	Library Coef.	Library Hit	Libra... Score
763	Unknown	Thiacloprid-1	1.143e6	4.14	979.4	253.200	✓	✓	Thiacloprid	99.0
637	Unknown	Oxthiazidin-1	2.501e7	3.58	2109.7	250.123	✓	✓	Oxthiazidin	98.2
186	Unknown	Chlorpyrifos-1	4.013e3	6.34	4.0	350.000	✓	✓	Chlorpyrifos-pmpargyl	97.2
704	Unknown	Thiamethoxam-1	6.197e5	3.18	139.6	292.000	✓	✓	Thiamethoxam	96.8
608	Unknown	methinphos-1	5.775e7	3.81	2356.4	225.000	✓	✓	Methinphos	96.6
595	Unknown	Flonicamid-1	2.005e7	3.11	1449.7	250.000	✓	✓	Flonicamid	95.6
697	Unknown	Acetamiprid-1	1.103e6	3.84	219.6	223.200	✓	✓	Acetamiprid	95.3
632	Unknown	Thiacloprid-1	7.949e6	4.19	25382.2	253.200	✓	✓	Thiacloprid	95.1
618	Unknown	Prallethrin-1	1.206e5	6.05	29.9	301.000	✓	✓	Bifenazate	94.2
738	Unknown	Methoprene-1	6.913e3	6.76	2.8	279.000	✓	✓	Methoxyfenozide	88.5
448	Unknown	Chlorpyrifos-1	2.833e3	6.16	4.6	350.000	✓	✓	Chlorpyrifos-pmpargyl	87.8
773	Unknown	Fenitrothion-1	2.023e4	5.15	3.0	279.074	✓	✓	Oxadiazyl	87.1
790	Unknown	Caffeine-1	2.239e6	3.46	18.8	195.100	✓	✓	Totoufuluron BH 635-5	87.1
551	Unknown	Sulfamethazine-1	3.808e3	3.35	3.1	279.000	✓	✓	Oxadiazyl	87.0
613	Unknown	Faclobutrazol-1	6.285e4	5.24	848.0	294.100	✓	✓	Faclobutrazol	86.7
4	Unknown	Caffeine-1	1.337e8	3.46	241.7	195.100	✓	✓	Totoufuluron BH 635-5	86.4
83	Unknown	Methoprene-1	3.298e3	6.16	2.6	279.000	✓	✓	Oxadiazyl	85.9
695	Unknown	Acephate-1	5.653e5	2.65	384.9	184.100	✓	✓	Acephate	84.9
205	Unknown	Acetamiprid-1	9.103e3	4.67	3.4	343.000	✓	✓	Thiobenzothiazol	84.6

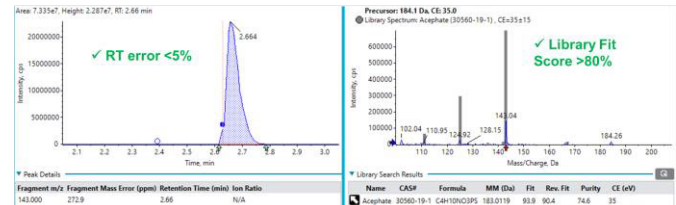


图2. 使用MS/MS和SCIEX OS-Q软件可以提高阳性检测的可信度。利用MRM色谱峰结合离子阱采集的MS/MS谱图，可以同时实现定量和污染物确证。MS/MS谱图结合保留时间证实所检测到的峰为乙酰甲胺磷。当峰的二级质谱图与谱库匹配度>80%，SCIEX OS-Q在结果表的置信栏中就会使用符合视觉特征绿色✓号进行标注。置信栏具有可过滤性和可排序性，可快速找到匹配或可能匹配的结果，使快速评估大批量样本成为可能，最终提高了数据处理效率，并提高了在水样污染物结果报告过程中对定性检测结果的信心。

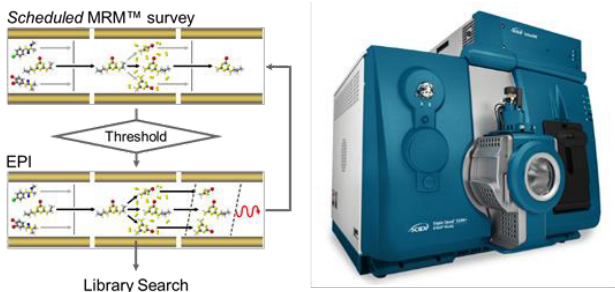


图1. SCIEX Triple Quad 5500⁺ - QTRAP Activated液质联用系统进行MRM-MS/MS采集。在MRM模式下，利用了QTRAP系统功能，对目标农药进行信号触发的EPI扫描。得到的MS/MS图与谱库进行匹配以进行确证。

For Research Use Only. Not for use in Diagnostics Procedures.

AB Sciex is operating as SCIEX.

© 2019. AB Sciex. The trademarks mentioned herein are the property of AB Sciex Pte.

Ltd. or their respective owners. AB SCIEX™ is being used under license.

RUO-MKT-02-9649-ZH-A



SCIEX中国公司

北京分公司
地址：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
全国免费垂询电话：800 820 3488, 400 821 3897

上海公司及亚太区应用支持中心
地址：上海市长宁区福泉北路518号
1座502室
电话：021-2419 7200
传真：021-2419 7333
网址：www.sciex.com.cn

广州分公司
地址：广州市天河区珠江江西路15号
珠江城1907室
电话：020-8510 0200
传真：020-3876 0835
微博：@SCIEX