

Идентификация большего количества пестицидов с высокоэффективным источником Agilent

ГХ-МСД анализатор Agilent для скрининга пестицидов с DRS

Рекомендации по применению

Испытания пищевых продуктов и сельское хозяйство

Авторы

Мелисса Черли (Melissa Churley) и
Брюс Куимби (Bruce Quimby)
Agilent Technologies, Inc.

ГХ-МСД анализатор Agilent для скрининга пестицидов с DRS на основе ГХ Agilent 7890 и ГХ-МСД Agilent 5977В обеспечивает быстрый скрининг и количественный анализ большого количества пестицидов и эндокринных разрушителей в рамках одного анализа. Программное обеспечение для отчета по процедуре деконволюции и база данных пестицидов и эндокринных разрушителей с фиксацией времени удерживания ускоряют создание отчетов и увеличивают количество целевых веществ скрининга. Если конфигурация анализатора включает ГХ-МСД 5977В и высокоэффективный источник (HES), то он определяет большее количество пестицидов за короткое время анализа.



Agilent Technologies

Идентификация большего количества пестицидов с высокоэффективным-источником

Рутинный анализ остаточных количеств веществ в пробах из окружающей среды и пищевых продуктах требует надежной идентификации и обнаружения при низких концентрациях за короткое время анализа. Анализатор пестицидов ГХ-МСД выполняет все эти требования за счет программного обеспечения отчетности о деконволюции (DRS), использующего программу AMDIS с библиотекой NIST [1]. База данных пестицидов и эндокринных разрушителей [2] сокращает время создания отчетов и увеличивает количество целевых веществ скрининга. Кроме того, запатентованная обратная продувка колонки с технологией капиллярных потоков сокращает время цикла, снижает фон и оптимизирует продолжительность.

ГХ-МСД 5977В и HES повышают производительность скрининга за счет увеличения количества ионов, образующихся в источнике и переносимых в квадрупольный анализатор ионов. Большее количество ионов улучшает сигнал, и как следствие, повышает чувствительность. Это повышение в свою очередь позволяет обнаружить большее количество целевых веществ во время скрининга по совпадениям с данными библиотеки. Положительная идентификация в пищевых пробах при пределах обнаружения 10 нг/г теперь возможна с применением режима сканирования в полном диапазоне.

Мы продемонстрировали это анализом с помощью DRS томатного экстракта с добавлением 200 пестицидов при концентрациях 10 и 100 нг/г. Это равносильно вводу 10 и 100 пг каждого пестицида соответственно. При концентрации 10 нг/г были идентифицированы 38 целевых соединений с применением HES, а при использовании источника ионизации с экстракционной линзой, для сравнения, ни одного. При концентрации 100 нг/г было определено почти в два раза больше целевых веществ (Таблица 1). На рисунке 1 представлен пример анализа с применением программного обеспечения AMDIS для целевого вещества флусилазола, включая исходный и выделенный спектры с совпадениями по компоненту в библиотеке.

Выводы

ГХ-МСД анализатор Agilent для скрининга пестицидов с DRS обеспечивает более быстрый и точный скрининг пестицидов, если его конфигурация включает ГХ-МСД 5977В и высокоэффективный источник. В сочетании с программным обеспечением для отчета по процедуре деконволюции возможна положительная идентификация в режиме сканирования в полном диапазоне для многих целевых веществ.

Таблица 1. Количество целевых веществ, идентифицированных в томате с добавлением пестицидов в концентрациях 10 и 100 нг/г с использованием источника ионизации с экстракционной линзой и высокоэффективного источника (MMF = 80). Объем ввода пестицидов составил 10 и 100 пг соответственно. При концентрации 10 нг/г были идентифицированы 38 целевых соединений с применением ВЭИ, а при использовании источника ионизации с экстракционной линзой, для сравнения, ни одного. При концентрации 100 нг/г было определено почти в два раза больше целевых веществ (Таблица 1). Анализ количества совпадений по NIST (распределение) представлен для категорий: 1-е, 2-е и ≥ 3 -е совпадение. Также приведены идентифицированные целевые вещества, которые не добавлялись в томаты, но получили коэффициенты совпадения с библиотекой AMDIS ≥ 80 и количество совпадений с библиотекой NIST ≤ 3 . Условия настройки заключены в скобки.

	Экстракционная линза (настройка <i>atune</i>)		ВЭИ (автоматическая настройка)	
	10 нг/г	100 нг/г	10 нг/г	100 нг/г
Количество целевых веществ с коэффициентом AMDIS ≥ 80	0	91	38	164
Распределение совпадений по NIST				
1-е совпадение	0	63	26	144
2-е совпадение	0	12	7	14
≥ 3 -е совпадение	0	16	5	6
Без добавления, ≤ 3 -е совпадение	2*	4**	2*	8***

* Диэтил фталат и бензофенон

** Бензиламид, бензофенон, метаболит квинтозена (пентахлорфенил-метилсульфид) индоксакарб и продукт разложения диоксакарба [фенол, 2-1,3-диоксолан-2-ил]

*** Диэтил фталат, бензофенон, фонофос, фенол, фталевая кислота, ди(окт-3-ил) эфир, фталимид, метаболит квинтозена (пентахлорфенил-метилсульфид) индоксакарб и продукт разложения диоксакарба [фенол, 2-1,3-диоксолан-2-ил]

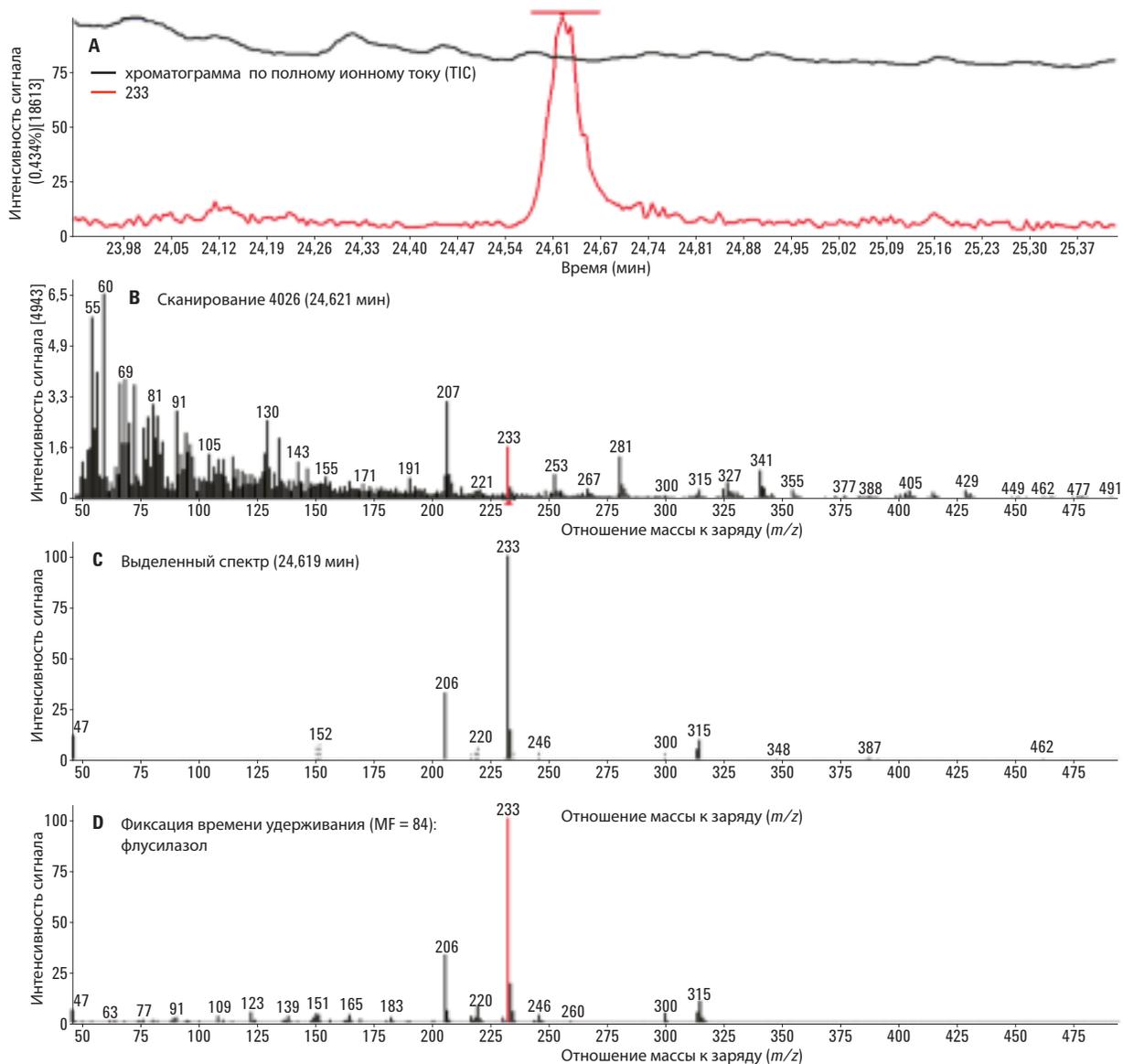


Рис. 1. Анализ 10 пг флусилазола в томате с применением программы AMDIS. А) Наложение выделенного иона m/z 233 и общей ионной хроматограммы (черным); В) исходный спектр; С) выделенный спектр компонента; D) спектр библиотеки, коэффициент совпадения по AMDIS = 84. Полученный обратный коэффициент совпадения по NIST составляет 73.

Благодарности

Авторы выражают благодарность Нэйтану Контино.

Литература

1. Anon. NIST Standard Reference Database 1A, NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library (NIST 14) and NIST Mass Spectral Search Program (Version 2.2), User's Guide. National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce, Gaithersburg, MD, USA.
<http://www.nist.gov/srd/upload/NIST1aVer22Man.pdf>
2. Wylie, P. L. *Screening for 926 Pesticides and Endocrine Disruptors by GC/MS with Deconvolution Reporting Software and a New Pesticide Library*; Application note, Agilent Technologies, Inc. Publication number 5989-5076EN, **2006**.

Дополнительная информация

Представленные данные являются стандартными значениями. Для получения дополнительной информации о наших продуктах и услугах посетите наш веб-сайт по адресу: www.agilent.com/chem.

www.agilent.com/chem

Компания Agilent не несет ответственности за возможные ошибки в настоящем документе, а также за убытки, связанные или являющиеся следствием получения настоящего документа, ознакомления с ним и его использования.

Информация, описани и спецификации в настоящем документе могут быть изменен без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2015
Напечатано в США
19 октября 2015 г.
5991-6355RU



Agilent Technologies