

# 农残广靶筛查新工具：基于SCIEX质谱系统用于750余种农药及其代谢物的发现、鉴定和定量的整体解决方案

## A Wide-targeted Screening Method for the Analysis of over 750 Pesticides and Metabolites Using SCIEX LC-MS/MS

陈玉锟, 孙小杰, 杨总, 刘冰洁

Chen Yukun, Sun Xiaojie, Yang Zong, Liu Bingjie

SCIEX中国应用技术中心

**Key words:** Pesticides and metabolites, Wide-targeted screening, LC-MS/MS

### 引言

随着现代农业对农药使用的广泛依赖, 农药残留已成为备受关注的食品安全问题之一; 作为高毒性化学品, 农药既是中毒事件分析的重要对象, 也被列为重点管控的新污染物。农药残留直接影响到农产品质量安全、生态环境和公众健康, 因此, 建立一套简便、快速且准确的农药检测方案十分必要。

三重四极杆质谱凭借其高灵敏度、优异的选择性和稳定性, 已成为复杂基质中痕量多残留分析的主流工具。SCIEX QTRAP®质谱系统融合了三重四极杆质谱技术与线性离子阱技术, 其质量分析器可在两类质谱的工作模式之间进行瞬时切换, 不仅具有这两类质谱的所有扫描模式, 还提供多种独特的复合功能。应用QTRAP®质谱系统的MRM-IDA-EPI扫描模式, 可以实现一针进样, 同时进行定性或定量分析。

本方案旨在建立一套基于SCIEX质谱系统的分析方法, 实现对750余种农药及其代谢物的快速和准确地筛查与定量。该方案满足国内外相关法规要求, 能为农产品、环境和生物样本等多种复杂基质中农药残留的大规模监控提供关键技术支撑, 有效提升检测效率。

### 方案优势和特点

**1、覆盖广泛, 一法多用:** 覆盖750余种农药及其代谢物, 涉及除

草剂、杀虫剂、杀菌剂和植物生长调节剂等多个类别; 既能满足日常农产品农残检测需求, 又适用于农药中毒案件的快速分析, 还能适用于新污染物筛查。

**2、方案完整, 拿来即用:** 提供经过优化成熟的液相方法和质谱方法, 并附完整的化合物信息表, 包含化合物中英文名称、分类、CAS号、分子式、MRM离子对参数以及保留时间等, 方便快捷建立分段采集方法, 实现高效检测。

**3、QTRAP®技术加持, 定性更准确:** 依托QTRAP®系统特有的EPI(增强子离子扫描)功能及高质量二级谱库, 可实现一针进样, 同时采集MRM定量数据和EPI定性数据, 显著提升复杂基质中农药识别与定量的准确性。

**4、OS软件助力, 高效易用:** OS软件支持9种语言显示。中文版界面更友好, 且支持批量积分和搜库的功能, 可大大缩短数据处理时间, 提升整体检测效率, 降低操作门槛。

### 实验方法

#### 液相条件

液相色谱仪: SCIEX Exion LC™系统

色谱柱: T3 (1.8 μm, 2.1 × 100 mm)

流速: 0.3 mL/min

流动相A: 水 (2 mM 甲酸铵+0.01% 甲酸)

流动相B: 甲醇 (2 mM 甲酸铵+0.01% 甲酸)

柱温: 40°C

洗脱程序：梯度洗脱（如表1）

表1. 流动相洗脱程序。

Time (min)	A%	B%
0	97	3
1	97	3
1.5	85	15
2.5	50	50
18	30	70
23	2	98
27	2	98
27.1	97	3
30	97	3

## 质谱条件

质谱仪：SCIEX三重四极杆质谱系统/QTRAP®质谱系统

离子源：ESI源正离子/负离子模式

离子源参数：

气帘气 (CUR): 35 psi      碰撞气 (CAD): 7 psi

离子源温度 (TEM): 350°C      离子喷雾电压 (IS): 5500 V/-4500 V

雾化气 (GS1): 50 psi      辅助加热气 (GS2): 50 psi

## 结果与讨论

### 1. 化合物数目、种类丰富

这750余种农药按用途可分为除草剂、杀虫剂、杀菌剂、植物生长调节剂和代谢物5大类；按结构又可分为有机磷、新烟碱、拟除虫菊酯和氨基甲酸酯等约120个类别。

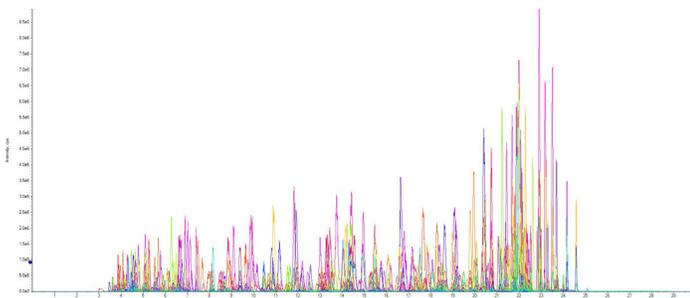


图1. 750余种农药总提取离子流图。

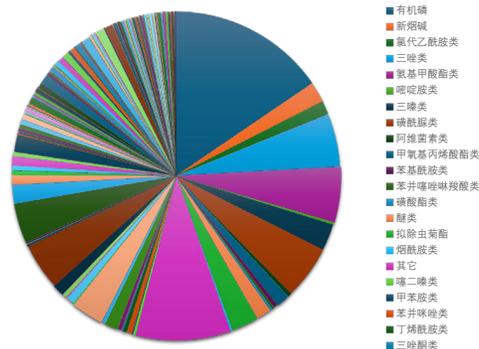


图2. 750余种农药按用途分类。

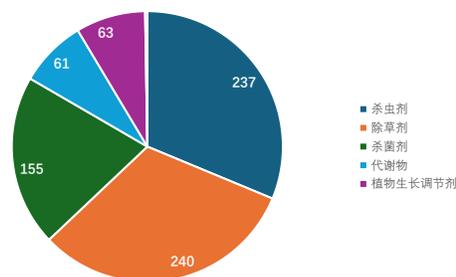


图3. 750余种农药按结构分类。

## 2. 方法优化

### 2.1 离子源参数优化

在优化离子源参数时，我们注意到部分目标农药具有特殊的质谱行为。有部分化合物容易在离子源内发生裂解，如甲基异柳磷等；部分化合物对高温较为敏感，例如丁氟螨酯等以热敏性较强的 $[M+NH_4]^+$ 的加合方式存在，高温条件易导致其响应下降。尽管提高温度可提升少数化合物的响应，但综合考虑易裂解与热敏感化合物的整体分析需求，本方案最终将离子源温度设定为350°C，以在检测灵敏度和化合物稳定性之间取得良好平衡。

### 2.2 化合物参数优化（特殊案例）

部分农药易发生源内裂解，因此针对此类化合物，利用其源内裂解碎片作为母离子或可达到更高的检测灵敏度。如：苯基硫代磷酸酯类杀虫剂，这类物质在正离子模式下，灵敏度偏低，尤其是甲基酯。由于裂解效率低导致质谱信号普遍较弱，灵敏度不

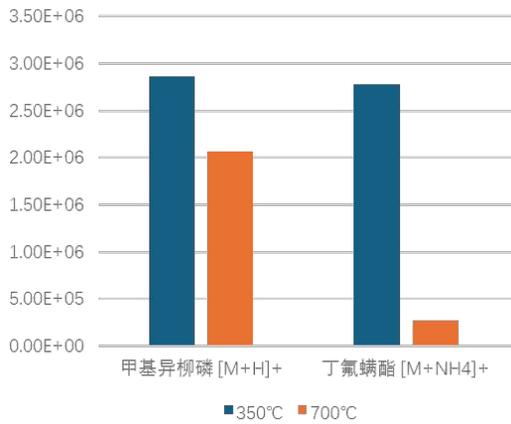


图4. 部分农药在不同离子源温度下的响应强度。

高。然而，在负离子模式下，该类物质容易在离子源内脱去与酯基直接相连的烷基，形成稳定的负离子。如图5所示，甲基对硫磷在负离子模式下，容易源内裂解脱去甲基，随后在Q2进一步发生碎裂，产生丰度较高的m/z 138和m/z 108碎片。在同一液相条件和离子源参数下，其在负离子模式下的响应强度较正离子模式提升约30倍（图6）。

### 3. QTRAP®加持，定性更准确

利用三重四级杆质谱进行筛查时，通常基于MRM的扫描模式，每个化合物选择两对离子对进行监测，因此容易产生假阳性/假阴性的结果。

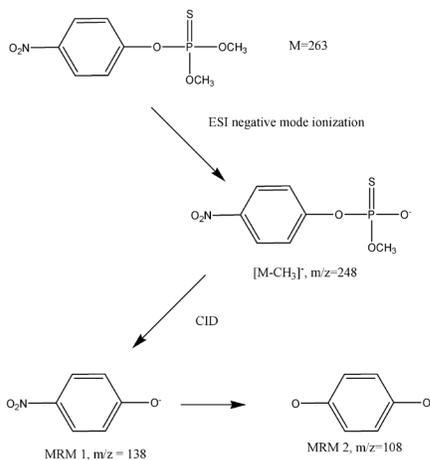


图5. 甲基对硫磷在负离子模式下的裂解路径。

SCIEX QTRAP®质谱系统独有的MRM-IDA-EPI的扫描模式，可实现一针进样，同时进行高灵敏度的定量分析及高准确度的定性分析。结合配套的OS软件，凭借其强大的数据处理功能，可以根据化合物的保留时间和二级碎片谱图进行目标化合物快速准确定性（图7），大幅提升数据处理的效率与结果的可靠性。

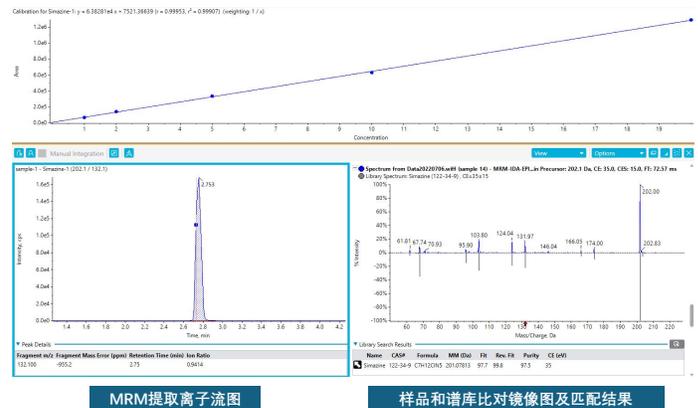


图6. 甲基对硫磷在正、负模式下的响应强度对比。

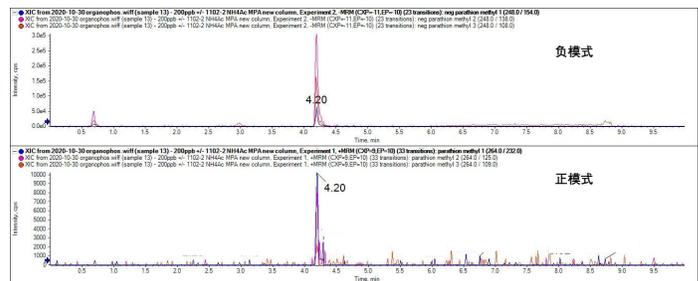


图7. 一针进样既有MRM定量数据，又有EPI定性图谱。

### 4. 应用案例

某单位接收到一批蔬果样品后，首先将其制备为混合样本，并采用本方案进行农药残留快速筛查。结果显示，西玛津的两个离子对在样本中均有出峰，保留时间一致，且该峰的二级谱图与西玛津的标准谱库匹配度高达97.5分（如图8）。该单位再根据筛查结果对阳性检出的化合物针对性进行定量分析，从而显著缩短了仪器分析时长。这一应用实例充分体现了本方案在实际检测中的高效性与实用性。



图8. 实际样本中检测到的西玛津的两个离子对的提取离子流图及二级谱图匹配情况。

## 总结

本方案使用SCIEX三重四极杆质谱系统建立了对750多种农药快速筛查的方法。该方法具有农药种类覆盖广、方案完整、方法经过优化且灵敏度高优势。借助QTRAP®质谱系统独有的MRM-IDA-EPI的扫描模式，可实现一针进样，同时进行高灵敏度的定量及高准确度的定性分析，显著提升了检测效率与结果可靠性。该方法不仅能满足日常农产品农残检测需求，还可用于农药中毒案件的快速分析及新污染物的筛查。

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。

© 2026 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. MKT-37357-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](http://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](https://www.sciex.com.cn)