

土壤污染物的全面表征

GC-Orbitrap 使样品通量提高了四倍

作者

Aaron Lamb、Dominic Roberts 和 Cristian Cojocariu
Thermo Fisher Scientific, Runcorn, UK

关键词

分析环境测试, 多氯联苯 (PCBs), 多环芳烃 (PAHs), 持久性有机污染物 (POPs), QuEChERS, 靶向定量, 筛查, 未知物, 气相色谱, 高分辨质谱, 全扫描 (FS), 灵敏度, Orbitrap Exploris GC, 电子电离 (EI), 化学电离 (CI), Chromeleon, Compound Discoverer

目的

本研究的目的是评估 Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris™ GC 用于 PAHs 和 PCBs 的定量性能和优势, 筛查未知土壤污染物。



前言

多氯联苯 (PCBs) 和多环芳烃 (PAHs) 为有毒有机化合物, 自然和人为过程均会导致土壤、空气、沉积物和水污染。PCBs 和 PAHs 不易降解, 可以远距离运输。此外, 由于这些化学物具有亲脂性, 因此会在食物链中发生生物富集和蓄积, 对人类构成重大健康风险。因其毒性较强, 即使浓度非常低, 也需要进行监测, 以将摄入食物链及人体内的风险降至最低。

最近研究表明，与非取代物相比，PAHs 的氧化和取代衍生物（如氧基和甲基 PAHs）的毒性类似，甚至更强；因此，各国政府已开始对土壤和颗粒物进行监测。^{1,2} 含氮、硫和氧的多环芳烃（NSO-PAHs）为另一类化合物，因广泛存在于环境中而受到关注，但缺乏相关毒性数据。^{2,3}

PCBs 和 PAHs（及其衍生物）通常使用气相色谱（GC）质谱（MS）联用技术进行分析。PAHs 和 PCBs 所面临的分析挑战是复杂且昂贵样品的制备（如索氏提取）。样品通常需要较长的色谱分离时间（每个样品 >40 min），导致分析通量较低，成本较高。

为了全面表征环境样品，可以采用多种方法对这些化合物进行样品制备和 GC-MS 分析。然而，同一样品使用多种色谱方法增加了对分析人员和仪器的要求。采用多种方法并由多位化学家来审查分析过程并报告数据，同时增加了分析时间和成本。

本应用使用高灵敏度 HRMS 仪器，建立了一种兼具高效且经济的综合方法对土壤样品中的 16 种 EPA PAHs，7 种标记 PCBs，3 种 oxyPAHs，10 种甲基 PAHs 和 9 种 NSO-PAHs 分析。为此，开发了一种改良的 QuEChERS 样品萃取和净化方法。此外，对目标化合物的色谱分离进行了优化，获得了一种每个样品 <20 min 的分析方法，并使用 Orbitrap Exploris GC 系统进行检测。

系统耐用性评估及 PAHs 和 PCBs GC-MS 分析方法适用性评估不在本应用范围内，相关讨论参见支持性技术文档（TN10728）。

实验

样品制备

校正标样包括 45 种 PCBs、PAHs、甲基 PAHs、oxyPAHs、PANHs、PASHs 和 PAOHs，共有十二个浓度水平（附录 1- 表 1）。校正标样和 14 种（¹³C 标记）内标（附录 2- 表 2）均购自 Fisher Scientific, AccuStandards 和 Wellington Laboratories Inc. (Ontario, Canada)。

对 QuEChERS 土壤萃取物加标 0.5、1.0、1.5、2.5 和 5.0 pg/μL，用于计算 MDL 和 LOQ。使用改良的 QuEChERS 萃取和净化方法处理之前，将土壤冷冻干燥、均质化并过筛。QuEChERS 方法总结参见最近发布的应用文档（AN10720）。

GC-MS 分析

使用 Orbitrap Exploris GC 仪器（配置 ExtractaBrite™ 离子源）进行分析。与传统放空方法（长达 4 个小时）相比，该系统可在 2 分钟内完成无需放空质谱进行色谱柱更换和离子源维护，节省了 98% 的时间。该系统采用最先进的 NeverVent 技术，帮助用户实现了这一点，并通过尽可能减少仪器停机时间，提高了实验室分析效率。

使用 Thermo Scientific™ TriPlus™ RSH 系列自动进样器对样品萃取物进行液体进样，并使用 Thermo Scientific™ TraceGOLD™ TG-5 SilMS 30 m × 0.25 mm i.d. × 0.25 μm 膜（P/N 26096-1420）毛细管柱进行色谱分离。其他仪器参数见表 1 和表 2。所使用耗材的完整详细信息参见 Thermo Scientific™ AppsLab™ 库。

表 1. GC 条件。耗材和仪器的完整列表参见 AppsLab 库。

Trace 1310 GC 参数	
进样量 (μL)	1.0
衬管	单鹅颈, 含玻璃棉 LinerGOLD™ (P/N 453A1925-UI)
进样口温度 (°C)	300
进样口模块和进样模式	SSL, 不分流
不分流时间 (min)	1.0
分流流量 (mL/min)	50.0
隔垫吹扫流速 (mL/min)	5.0
载气, 流速 (mL/min)	氦气, 1.2
柱温箱升温程序	
温度 1 (°C)	40
保持时间 (min)	1.0
温度 2 (°C)	285
升温速率 (°C/min)	28
保持时间 (min)	0
温度 3 (°C)	305
升温速率 (°C/min)	3
保持时间 (min)	0
温度 4 (°C)	350
升温速率 (°C/min)	30
保持时间 (min)	5
GC 总运行时间 (min)	20

表 2. 质谱仪条件

Orbitrap Exploris GC EI GC-MS 参数	
传输线温度 (°C)	320
离子源 (电离类型)	ExtractaBrite (EI)
离子源温度 (°C)	350
电离能量 (eV)	70
发射电流 (μA)	50
采集模式	全扫描 (FS)
质量数范围 (m/z)	50-550
质量数分辨率	60,000 (FWHM @ m/z 200, 扫描速度 7.4 Hz) :
锁定质量模式 (m/z)	207.03235
传输线温度 (°C)	320
离子源 (电离类型)	ExtractaBrite (PCI)
反应气类型	甲烷 (含 10% 氨)
流速 (mL/min)	0.6
离子源温度 (°C)	190
电离能量 (eV)	70
发射电流 (μA)	100
采集模式	全扫描 (FS)
质量数范围 (m/z)	65-690
质量数分辨率 (FWHM @ m/z 200)	60,000 (扫描速度 7.4 Hz)
锁定质量模式	无

数据处理

使用全扫描 (FS) 模式采集数据, 然后使用 Thermo Scientific™ Chromeleon™ 7.3 色谱数据系统 (CDS) 处理和报告数据。同时使用 Compound Discover 软件对样品中其他未知物进行筛查。此外, Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 软件 (3.2 版) 还可用于质谱解卷积、NIST 库搜索以及基于 EI 和 CI 数据进行化合物识别。

结果与讨论

使用溶剂标样对色谱分离、方法选择性和线性进行评估。使用上述改良的 QuEChERS 方法处理土壤样品, 然后进行灵敏度 (作为基质检测限和定量限)、回收率和方法选择性进行评估。

色谱法

在 <20 min 时间内完成所有化合物的分析, 16 种 EPA PAH 标准品 (i) 菲 / 葱、(ii) 苯并 (a) 葱 / 屈、(iii) 苯并 (b) 荧葱 / 苯并 (k) 荧葱均得到完全分离 (图 1, A-D)。正如预期, 快速多残留方法确实发生了共洗脱, 在这种情况下, 报告数据为峰面积总和, 例如包含 (i) 1- 乙基萘二烯 / 2- 乙基萘、(ii) 1,3 - 二甲基萘 / 1, 6- 二甲基萘。TraceGOLD 硅亚苯基色谱柱具有出色的惰性, 为强碱性化合物喹啉等所有物质提供出色的峰形, 其欧洲药典 (EP) 不对称值为 1.0³。

由于样品基质具有不同程度的复杂性, 因此可能为土壤 GC-MS 分析的选择性带来挑战。样品复杂性示例见图 1, E-F 为超声处理未加标 QuEChERS 土壤萃取物 (顶部色谱图) TIC EI 全扫描谱图和 目标物的 FS XIC (底部色谱图) 的叠加图。

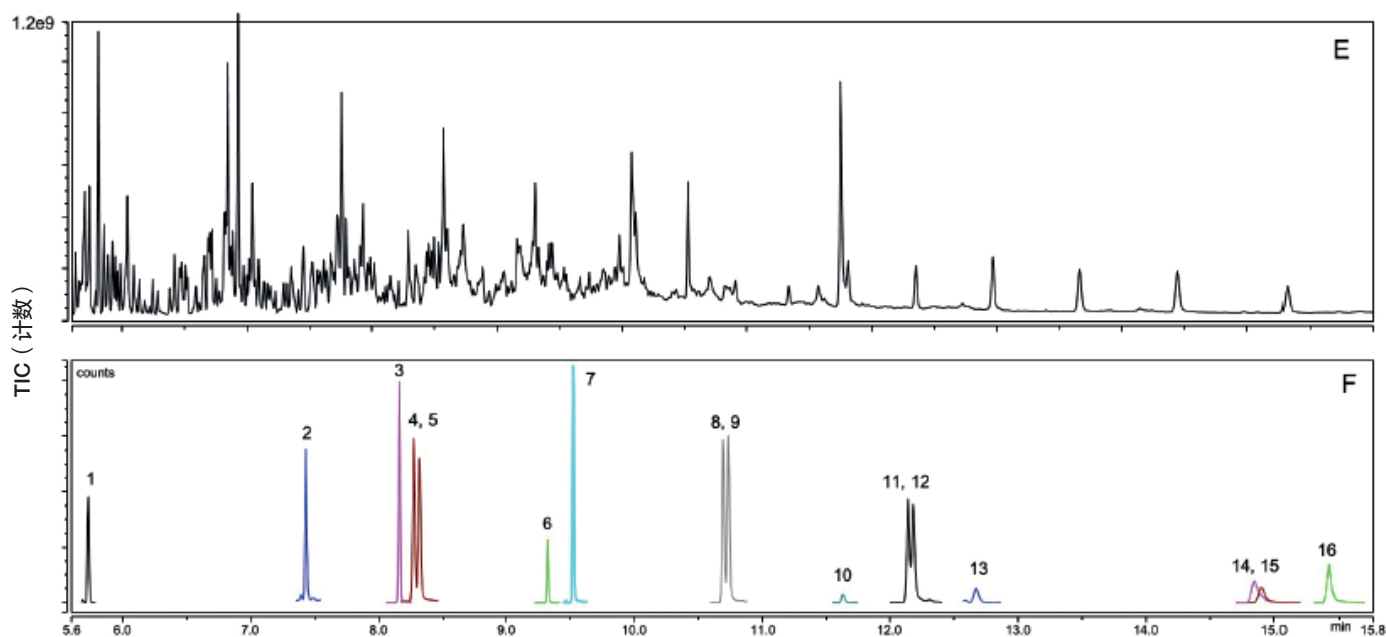
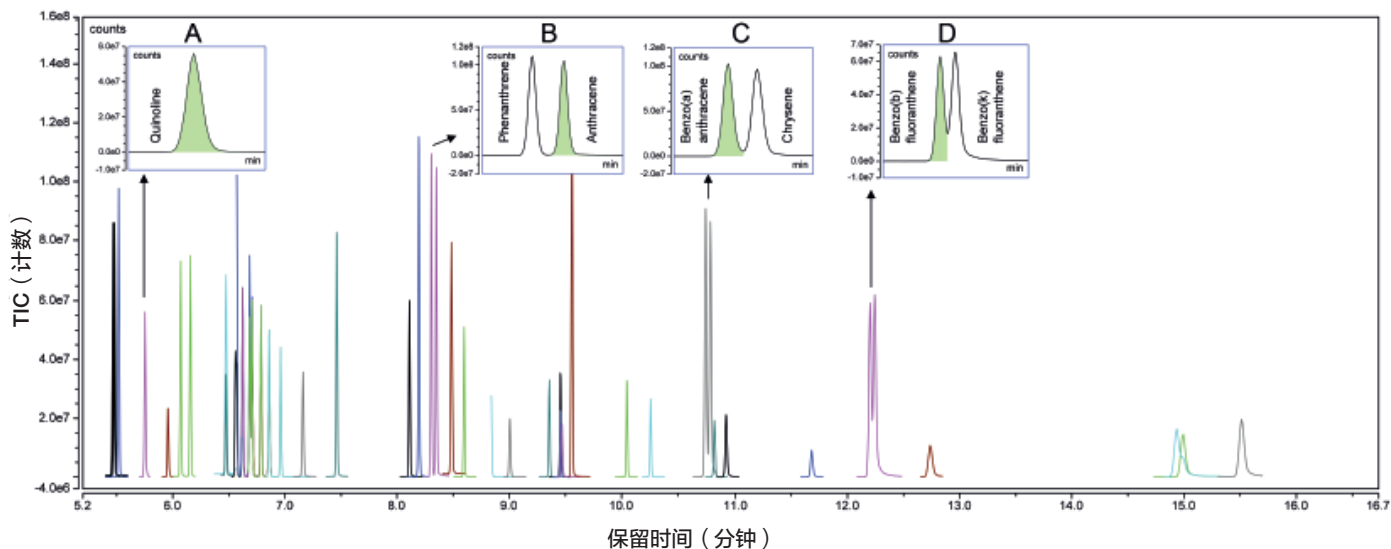


图 1. 示例色谱图显示了 50 pg/ μ L (50 pg 柱上进样量 (OC)) 溶剂标样 (溶剂为正己烷) 中 PAHs 和 PCBs 的 FS XIC 谱图的叠加图, 所有化合物在 <20 min 内均呈现出出色的色谱峰形。A) 含氮多环芳烃杂环喹啉的峰不对称度为 1.0; (B) 关键组分菲和蒽的 EP 分离度为 1.5; (C) 关键组分苯并 (a) 蒽和屈的分离度为 1.3; (D) 关键组分苯并 (b) 荧蒽和苯并 (k) 荧蒽的 EP 分离度为 1.0。(E) QuEChERS 未加标土壤萃取物, FS, $m/z = 50-550$; (F) QuEChERS 未加标土壤萃取物, 天然残留物的 XIC 图; 化合物: 1= 喹啉, 2= 芴, 3= 二苯并噻吩, 4、5= 菲 / 蒽, 6= 荧蒽, 7= 芘, 8、9 = 苯并 [a] 蒽、屈, 10 = 5,12- 萘并蒽, 11、12 = 苯并 [b/k] 荧蒽, 13 = 苯并 [a] 芘, 14 = 茚并 [1,2,3-cd] 芘, 15 = 二苯并 [a, h] 蒽, 16 = 苯并 [ghi] 花。图中未显示 C^{13} 标记的内标。

灵敏度：方法检测限 (MDL) 的测定

为了真实评价 MDL，使用浓度分别为 0.5、1.0、2.5 pg/ul 的基质匹配标样进行重复进样 (n=18)，峰面积 % RSD <15%。然后，结合进样量、峰面积 % RSD 和 t 分数 2.567 (相当于 99% 置信度下的自由度 17 (n-1)) 计算 MDL 值 (图 2)。计算得到的 MDL 值为 118-475 fg 柱上进样量 (样品浓度相当于 0.1-0.5 μg/kg)。

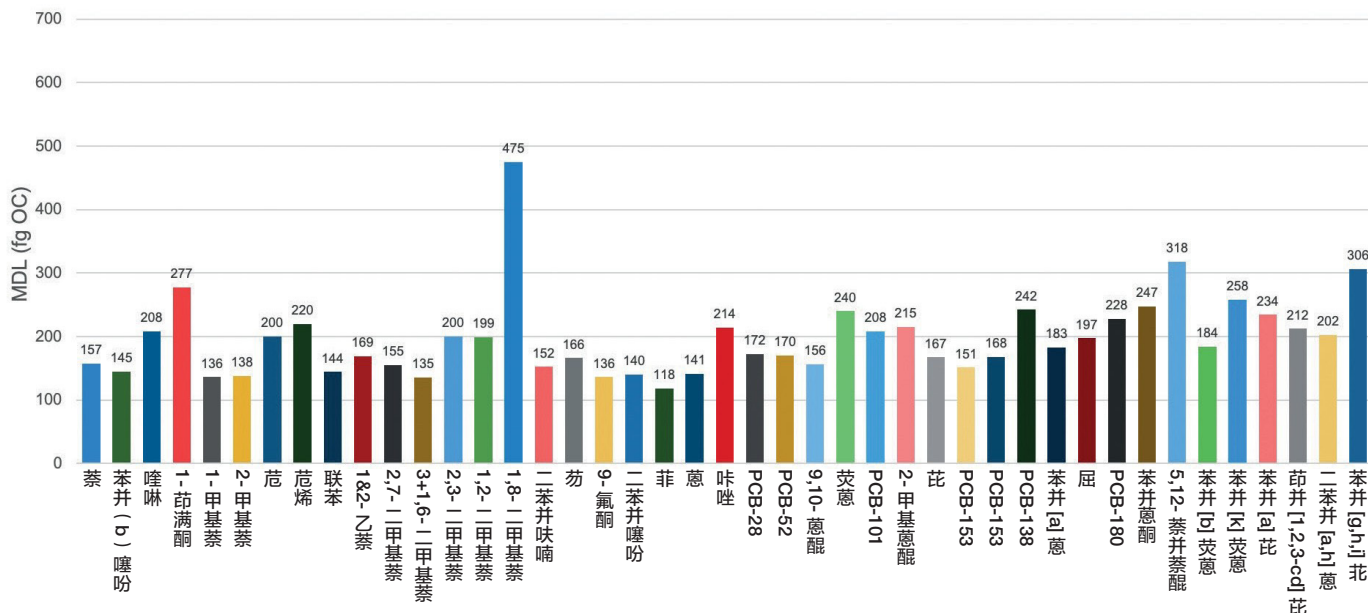


图 2. 该图显示了使用最低浓度基质匹配标样进行 n=18 次重复进样测得的 45 种天然 PCB、PAH、methyl PAH、oxyPAH 和 NSO-PAH 的 MDL (可检出的 fg 上柱量)。*1,8-二甲基萘 1.0 pg 上柱量的峰面积 % RSD > 15%，因此使用最接近的 2.5 pg 标样柱上进样量可得到更高的 MDL；但是，使用较低柱上进样量 (~ 1.5 pg)，真实 MDL 预期值可能更低。

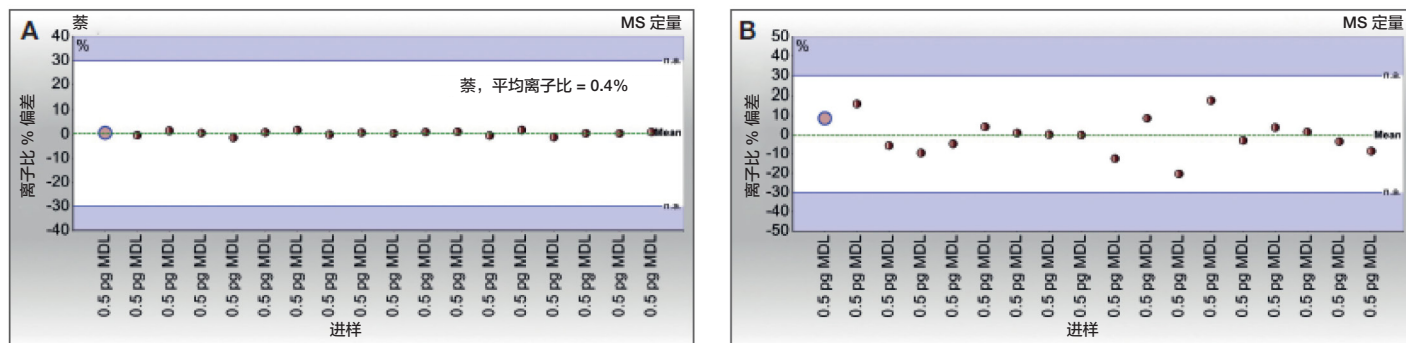


图 3. 该图显示了所选 PAHs 和 PCBs 的离子比一致性。(A) 萘；(B) PCB 118，使用 LOQ 浓度重复进样 18 次 (n=18)。中间绿色虚线显示根据校正范围计算得到的平均离子比 % 偏差。此外，还规定了 ±30% 离子比容差上限和下限。所有 PAHs 和 PCBs 的进样离子比 % 偏差均在该规定范围内。其也展示了如何使用 Chromeleon CDS 交互式图表帮助用户轻松处理和解析 MS 数据。

灵敏度：定量限 (LOQ) 的测定

使用 0.5、1.0、2.5 和 5.0 pg/μL 的基质匹配标样计算方法 LOQ。每种标样重复进样 18 次 (n=18)，浓度范围为 0.5 pg/μL-5.0 pg/μL，样品浓度相当于 0.5-5.0 μg/kg (附录 3-表 3)。

LOQ 值评估标准：

- 离子比在预期值的 ±30% 范围内，该预期值为 0.1-500 pg/μL (样品浓度相当于 0.1-500 μg/kg，图 3) 范围内的校正曲线计算得出的平均值

线性

使用 0.1-500 pg/ μ L 溶剂标样测定线性范围。每种浓度水平三次进样后，使用 Chromeleon CDS (AvCF) 中的线性 / 平均校正因子函数对每种化合物进行校正 (图 4)。

所有化合物均呈现出出色的线性，相关系数 $R^2 \geq 0.995$ ，整个校正范围内的平均校正因子 % RSD < 13%。 R^2 为 0.9951-1.0000，平均为 0.999。(附录 4 - 表 4)。

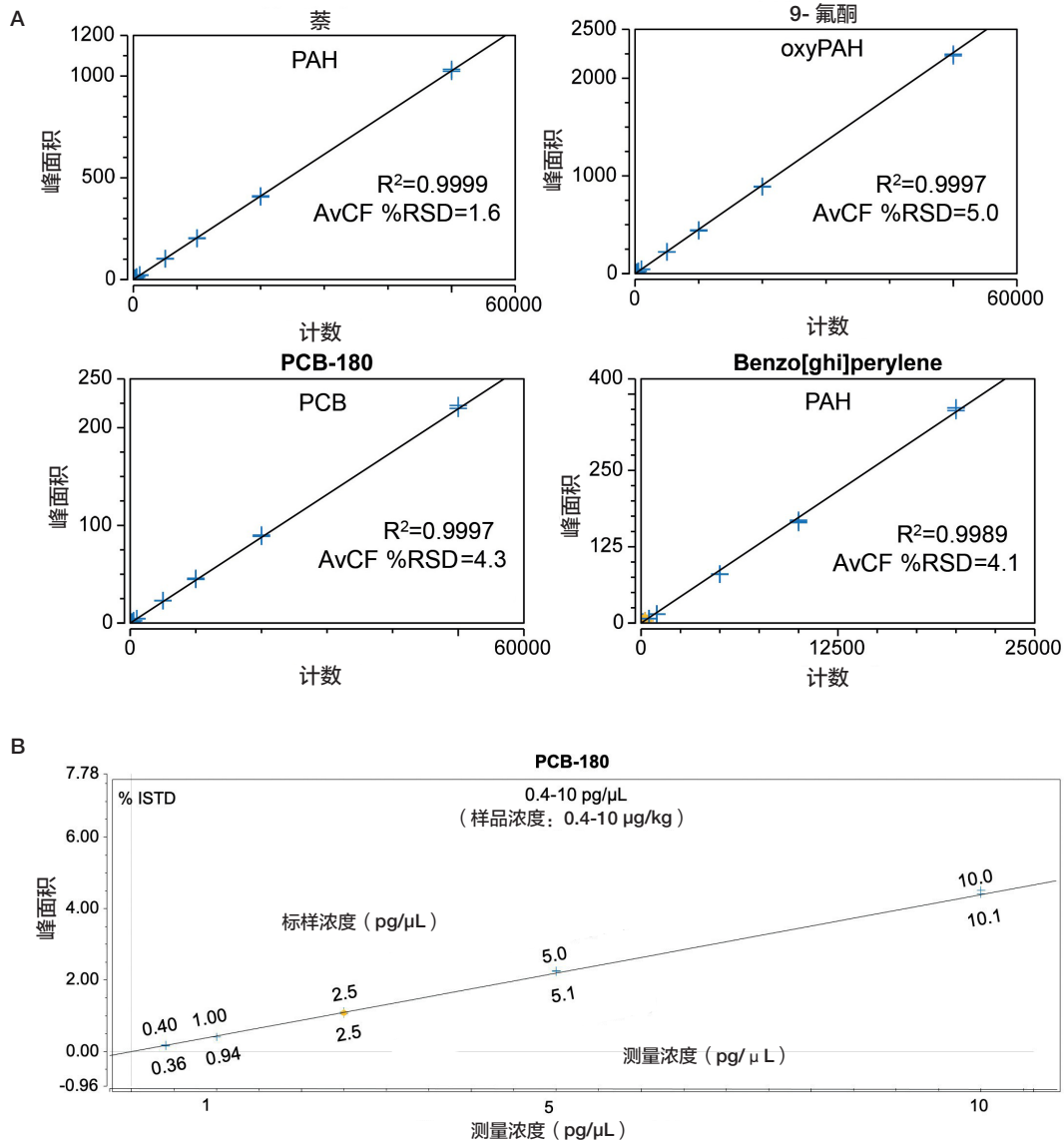
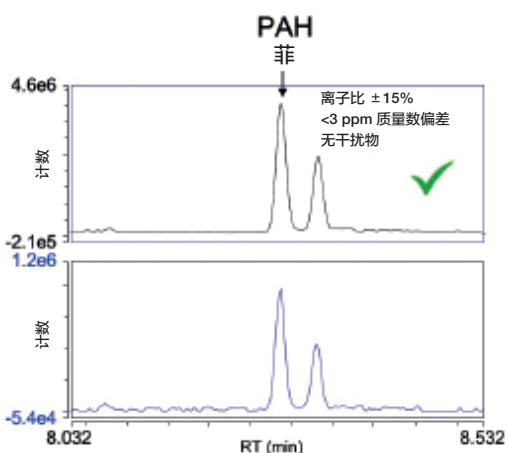


图 4. (A) 使用 0.1-500 pg/ μ L (样品浓度相当于 0.1-500 μ g/kg) 溶剂标样校正范围对 PAH 和 PCB 的线性进行分析的示例。在 Chromeleon CDS 中使用平均校正因子 (AvCF)，每种浓度重复进样三次并执行内标校正。图中显示了测定系数 (R^2) 和平均校正因子值 (AvCF % RSD)。(B) 显示了 PCB 180 校正曲线线性范围的放大图，线性范围: 0.4-10 pg/ μ L (样品浓度相当于 0.4-500 μ g/kg)，每个点重复进样三次，均呈现出出色的精密度和准确度。

回收率

使用七份重复的 QuEChERS 土壤萃取物评估化合物回收率，样品提取前使用氘代内标进行加标处理（50 ng/g）。有关样品制备的详细信息，参见最近发布的应用文档（AN10720）。样品萃取后，加入磷酸三苯酯（100 ng/g）用作内标以调节可能出现的进样变异性（附录 5-表 5）。所有化合物均具有良好的回收率，平均值为 79%（附录 5-表 5）。较低沸点的化合物（例如萘-d8）具有较低的回收率，这是因为溶剂蒸发阶段存在损失。尽管此类化合物的回收率较低，但所有化合物在 n=7 次重复提取后的测量精度均 <15% RSD，且大多数 <5%。

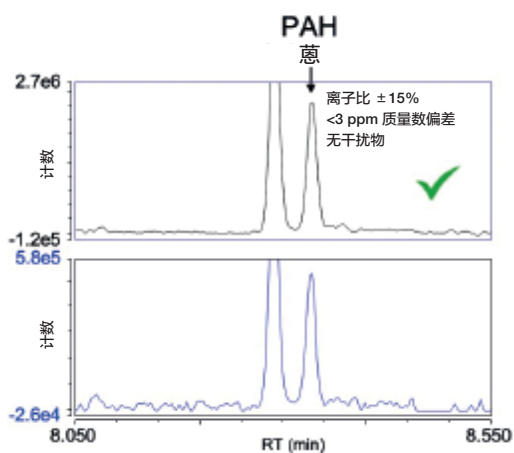


样品中的含量	1.3 µg/kg
离子比 % 偏差	0.1%
测量质量数 (m/z)	178.07771
理论质量数 (m/z)	178.07770
化学分子式	C ₁₄ H ₁₀
质量偏差 (ppm)	0.1

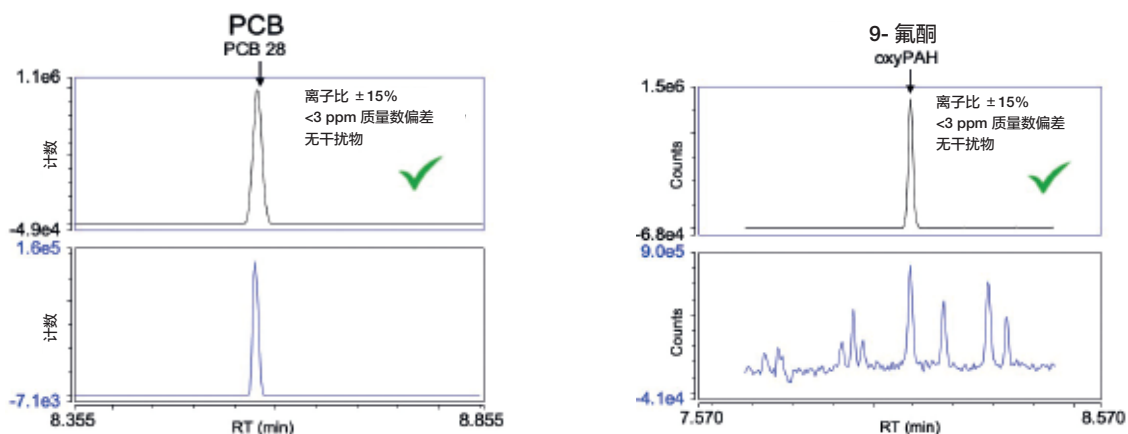
结果表明，QuEChERS 萃取和 dSPE 方法具有很高的重现性，适用于分析测试实验室。样品制备总时间小于 2 小时，与经典索氏提取法（24-48 小时）相比，节省了 10-20 倍时间（和成本）。

QuEChERS 土壤萃取物中 PAHs 和 PCBs 的定量

按照 AN10720 中描述的方法萃取土壤样品，分析其天然残留物。以下内容重点展示了该方法的定量性能（灵敏度和选择性），包括少量天然残留物示例（图 5）。



样品中的含量	0.7 µg/kg
离子比 % 偏差	5.6%
测量质量数 (m/z)	178.07779
理论质量数 (m/z)	178.07770
化学分子式	C ₁₄ H ₁₀
质量偏差 (ppm)	0.5



样品中的含量	0.6 µg/kg
离子比 % 偏差	0.7%
测量质量数 (m/z)	255.96074
理论质量数 (m/z)	255.96078
化学分子式	C ₁₂ H ₇ C ₁₃
质量偏差 (ppm)	0.2

样品中的含量	0.8 µg/kg
离子比 % 偏差	4.8%
测量质量数 (m/z)	180.05698
理论质量数 (m/z)	180.05697
化学分子式	C ₁₃ H ₈ O
质量偏差 (ppm)	0.1

图 5. FS XIC 色谱图示例 (黑色为定量离子, 蓝色为确认离子), 分别用于分析土壤中的菲 (左上图)、蒽 (右上图)、PCB-28 (左下图) 和 9- 芴酮 (右下图)。每个 FS XIC 色谱图下方标注以下内容: (i) 样品中的含量 (µg/kg); (ii) 与校正平均值的离子比偏差, (iii) 测量质量数 (m/z), (iv) 理论质量数 (m/z), (v) 化学分子式, 以及 (vi) 质量偏差 (ppm)。

总之, 实验结果表明, 该分析方法 (基于改良的 QuEChERS 样品制备方法) 可用于定量土壤中的 PAHs 和 PCBs。对于 PCB-28, 检出并定量了低残留物 (0.6 µg/kg), 与校正均值的离子比偏差仅为 0.7%, 理论准确质量数的质量偏差为 0.2 ppm, 并且全扫描谱图始终保持最低基质干扰。

筛查其他土壤污染物

利用高分辨和高质量精度的全扫描采集的优势, 对样品进行了回顾性分析以及其他未知污染物筛查 (通过化学电离 (CI) 法进行确认)。Compound Discoverer 平台包含用于 GC EI 数据的简化工作流程, 适用于峰提取、解卷积和基于质谱库匹配 (NIST 2017) 识别未知物。该软件首先使用自定义信噪比 (S/N) 执行质谱解卷积, 然后进行化合物检测和分组, 考察相同保留时间下 (± 6s 窗口内) 洗脱的化合物。

然后, 基于质谱库 (例如 NIST) 搜索解卷积谱图, 并基于库检索索引 (SI) 得分和分子离子存在 / 不存在以及根据 NIST 元素组成可以进行解释的碎片离子的百分比得出总分数对搜索结果进行评分。使用与样品分析相同的条件获得保留指数, 增加了化合物识别的可靠性。NIST SI 分数 >750 的化合物见图 6A。借助 Compound Discoverer, 将 10.95 min (m/z 136.07579) 下洗脱峰的重叠 XIC 图识别为最佳结果 (基于 NIST), 见图 6B。该峰经确认为吡丙醚, SI 值为 953; 但是, 未观察到分子离子 m/z 321.135945, 这说明需要进一步进行化学电离并确认分子离子的质量精度。解卷积数据 EI NIST 匹配的完整结果见附录 6- 表 6。

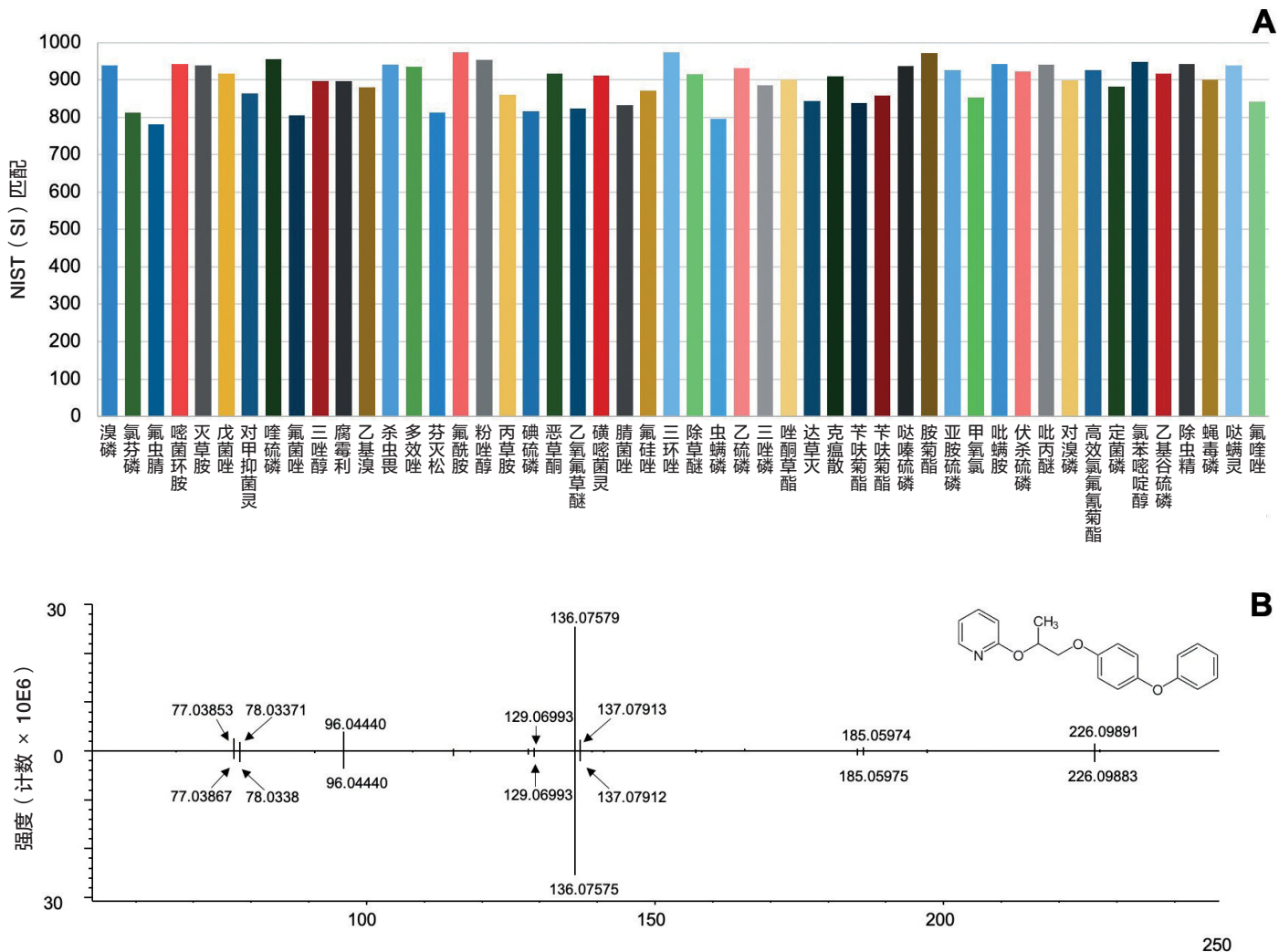


图 6. (A) QuEChERS 土壤萃取物 (加标浓度为 100 pg/ μ L) 解卷积 EI 质谱图中检测到的化合物的 NIST SI 匹配分数示例。(B) 加标 QuEChERS 土壤萃取物的 Compound Discoverer 软件 EI 质谱图 -10.95 min (m/z 136.07579) 洗脱峰的解卷积谱图 (NIST 库), 以及结果表中最高 SI 匹配化合物吡丙醚的结构式。

使用 Compound Discoverer 3.2 软件分析空白和 QuEChERS 加标土壤萃取物 (100 pg/ μ L) 的全扫描数据并进行峰识别。识别流程为, 根据解卷积 EI 质谱图, 基于检索索引分数 (SI) 和相应分子离子和 / 或加合物的确认结果 (使用正离子化学电离进行确认)。使用 Chromeleon 7.3 在 EI 和 PCI 模式下以 60,000 FWHM 分辨率采集全扫描数据, 然后导入 Compound Discoverer 3.2 软件。该软件用于对峰进行解卷积、对齐和过滤, 根据质谱库匹配 (NIST 17) 推定化合物。当叠加 FS TIC 和解卷积质谱图时, 解卷积算法的功能愈发清晰可见 (图 7)。

使用正离子化学电离确认可疑污染物

可以通过 PCI 质谱图查看常见加合物, 识别母离子的元素组成。化合物识别结果得到了进一步确认。在使用甲烷作为反应气的 PCI 实验中, 通常可以观察到三种加合物: $[M+H]^+$ 、 $[M+C_2H_5]^+$ 和 $[M+C_3H_5]^+$ 。示例为 9.44 min 处的色谱峰, 经 NIST 库识别为氟酰胺; 但是, 分子离子 m/z 323.11276 未见明显响应 (图 8A)。当查看该化合物的 PCI 数据时, 分子离子的响应明显增强, 质量数误差低至 0.09 ppm (图 13B)。此外, 还观察到另外两个加合物 $[M+H]^+$ 和 $[M+C_2H_5]^+$, 质量数误差分别为 -0.1 和 -0.03 ppm。PCI 确认的完整结果见附录 7- 表 7。

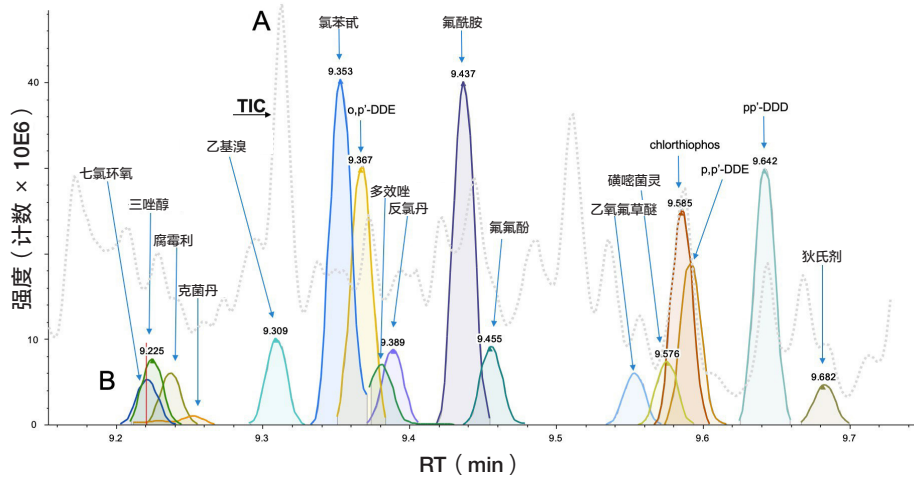


图 7. (A) QuEChERS 加标土壤萃取物 (100 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$) 的农残重叠 FS ($m/z = 50-550$) TIC 图。(B) 使用 Compound Discoverer 3.2 软件解卷积得到的 deconvolution 谱图, 显示出了不同化合物保留时间非常接近。

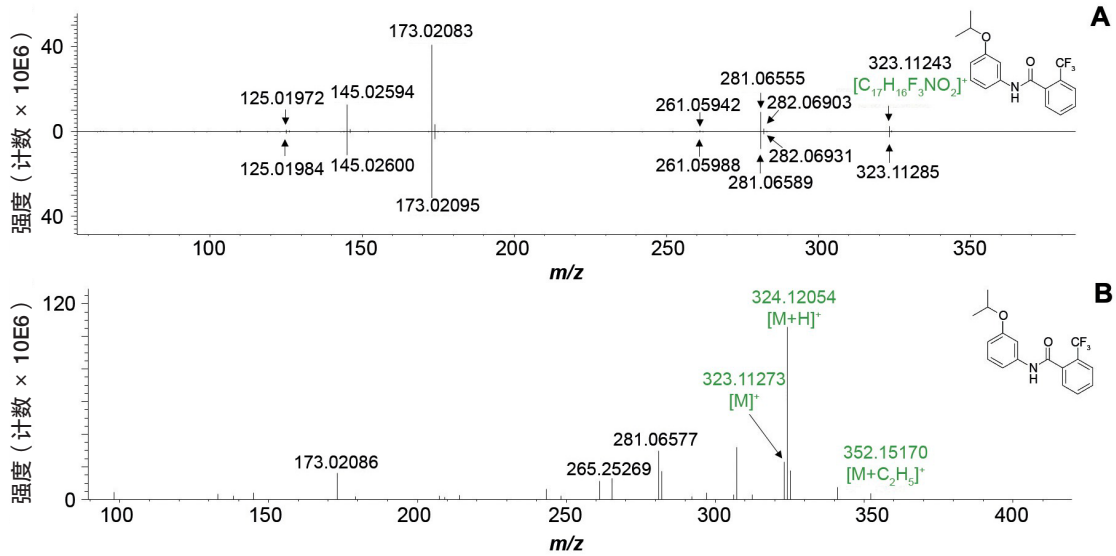


图 8. (A) QuEChERS 加标土壤萃取物的 Compound Discoverer 软件 EI 质谱图-9.437 min (m/z 323.11243) 洗脱峰的解卷积谱图 (基于 NIST 库), 以及结果表中最高 SI 匹配化合物氟酰胺的结构式。(B) 氟酰胺的 EI 质谱图, 显示了加合物 $[\text{M}+\text{H}]^+$ 和 $[\text{M}+\text{C}_2\text{H}_5]^+$, 用于结合 EI 数据确认化合物。

结论

以上结果表明, QuEChERS 改良方法、TriPlus RSH 自动进样器与 Orbitrap Exploris GC 结合使用, 为希望提高分析效率并获得可靠结果的分析测试实验室提供了理想的解决方案。

- 该分析方法在不到 20 min 的时间内即可完成土壤中 PAH 和 PCB 的分析, 同时得到较好的方法学性能指标。
- 与传统索氏提取方法相比, QuEChERS 改良方法的分析通量提高了高达 20 倍, 节省了成本和时间。
- 计算了 45 种天然化合物在 115-475 fg 柱上进样量范围内 (样品浓度相当于 0.1-0.5 $\mu\text{g}/\text{kg}$) 的 MDL 值。Orbitrap Exploris GC 系统实现了飞克级灵敏度。
- 使用最低浓度基质匹配标样重复进样 $n=18$ 次, 测得土壤样品的 LOQ 范围为 0.5-5.0 $\mu\text{g}/\text{kg}$, 满足以下标准限度要求:
 - 离子比在预期值的 $\pm 30\%$ 范围内, 该预期值为 0.1-500 $\text{pg}/\mu\text{L}$ (样品浓度相当于 0.4-5.0 $\mu\text{g}/\text{kg}$) 范围内的校正曲线计算得出的平均值
 - 峰面积重复性 $<15\%$ RSD
- 在 0.1-500 $\text{pg}/\mu\text{L}$ (土壤浓度相当于 0.1-500 $\mu\text{g}/\text{kg}$) 的校正范围内呈线性, 测量系数 $R^2 \geq 0.995$, 残留物 $<13\%$ 。
- 所有化合物总体具有良好的回收率, 平均内标回收率为 79%, 重现性试验的精密度 $<5\%$ RSD ($n=7$)。
- 当用于确认土壤中的低浓度残留物 (如 PAHs、PCBs 和 oxyPAHs) 时, 离子比的接近程度和质量偏差 (与预期值相比) 结果证实, 土壤样品的定量性能非常好。
- 系统可将 EI (用于谱库搜索) 快速切换为软电离方式, 例如 PCI (用于使用加合物信息确认分子离子)。
- Compound Discoverer 软件内置简化的 GC-EI 数据处理工作流程, 有助于快速提取、解卷积和识别未知化合物。

参考文献

1. S.R. CEN/TR 16998:2016 ambient air –report on nitro- and oxy-PAHs - origin, toxicity, concentrations and measurement methods.
2. Sun, Z.; Zhu, Y.; Zhuo, S.; Liu, W, Z.; Zheng, E.Y.; Wang, X.; Xing, B.; Tao, S Occurrence of nitro- and oxy-PAHs in agricultural soils in eastern China and excess lifetime cancer risks from human exposure through soil ingestion. *Environ Int.* 2017, 108, 261-270.
3. Anderson, J.T.; Achten, C. Time to say Goodbye to the 16 EPA PAHs? Toward an up-to-date use of PACs for environmental purposes. *Polycyclic Aromatic Compounds* 2015, 35, 330-354.
4. Thermo Fisher Scientific (2017) Application note 21736: Ultra-inert low bleed GC columns with advanced silphenylene polymer technology. <https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/CMD/Application-Notes/an-21735-gc-ms-ultra-inert-columns-an21735-en.pdf>
5. Hites, R.A. Polybrominated diphenyl ethers in the environment and in people: a meta- analysis of concentrations. *Environ. Sci. Technology* 2004, 38, 945.
6. Guidance for the inventory of polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) listed under the Stockholm Convention on POPs. [Online] <http://chm.pops.int/Implementation/NationalImplementationPlans/Guidance/GuidancefortheinventoryofPBDEs/tabid/3171/Default.aspx> (accessed May 8, 2018).
7. Fernandes, A.; White, S.; D' Silva, K.; Rose, M. Simultaneous determination of PCDDs, PCDFs, PCBs and PBDEs in food. *Talanta* 2004, 63, 1147-1155.
8. Thermo Fisher Scientific (2009) Technical note 51797: Timed SRM: improved capabilities for multi-target compound analysis. <https://tools.thermofisher.com/content/sfs/brochures/AN51797-TimedSRM-Multitarget-Compound-Analysis.pdf>

附录 1 – 表 1. 45 种天然化合物的详细信息，包括化合物类型、CAS 号和校正范围

天然标准品	化合物类型	CAS 号	校正范围 (ng/mL)
萘	PAH	91-20-3	0.1-500
苯并 (b) 噻吩	PASH	95-15-8	
喹啉	PANH	91-22-5	
1- 茚满酮	PAOH	83-33-0	
2- 甲基萘	甲基 PAH	91-57-6	
1- 甲基萘	甲基 PAH	90-12-0	
联苯	芳香族	92-52-4	
萘烯	PAH	208-96-8	
1- 乙萘	甲基 PAH	1127-76-0	
2- 乙萘	甲基 PAH	939-27-5	
芴	PAH	83-32-9	
2,7- 二甲基萘	甲基 PAH	582-16-1	
1,3- 二甲基萘	甲基 PAH	575-41-7	
1,6- 二甲基萘	甲基 PAH	575-43-9	
2,3- 二甲基萘	甲基 PAH	581-40-8	
1,2- 二甲基萘	甲基 PAH	573-98-8	
1,8- 二甲基萘	甲基 PAH	569-41-5	
二苯并呋喃	PAOH	132-64-9	
芴	PAH	86-73-7	
9- 氟酮	oxyPAH	486-25-9	
二苯并噻吩	PASH	132-65-0	
菲	PAH	85-01-8	
蒽	PAH	120-12-7	
咔唑	PAOH	86-74-8	
PCB-28	PCB	7012-37-5	
PCB-52	PCB	35693-99-3	
9,10- 蒽醌	PAOH	84-65-1	
荧蒽	PAH	206-44-0	
PCB-101	PCB	37680-73-2	
2- 甲基蒽醌	PAOH	84-54-8	
芘	PAH	129-00-0	
PCB-118	PCB	31508-00-6	
PCB-153	PCB	35065-27-1	
PCB-138	PCB	35065-28-2	
苯并 [a] 蒽	PAH	56-55-3	
屈	PAH	218-01-9	
PCB-180	PCB	35065-29-3	
苯并蒽酮	oxyPAH	82-05-3	
5,12- 萘并萘醌	oxyPAH	1090-13-7	
苯并 [b] 荧蒽	PAH	205-99-2	
苯并 [k] 荧蒽	PAH	207-08-9	
苯并 [a] 芘	PAH	50-32-8	
茚并 [1,2,3-cd] 芘	PAH	193-39-5	
二苯并 [a,h] 蒽	PAH	53-70-3	
苯并 [g,h,i] 芘	PAH	191-24-2	

附录 2 – 表 2.14 种内标的详细信息，包括化合物类型、CAS 号和浓度（后缀“L”表示标记质量数）

内标	化合物类型	CAS 号	浓度 (ng/mL)
萘-d-8	PAH	1146-65-2	
二苯并呋喃-d8	PAOH	93952-04-6	
9- 氟酮-d8	oxyPAH	137219-34-2	
芘-d-10	PAH	1718-52-1	
PCB-28L	PCB	7012-37-5	
PCB-52L	PCB	35693-99-3	
PCB-101L	PCB	37680-73-2	
PCB-118L	PCB	31508-00-6	100
PCB-153L	PCB	35065-27-1	
PCB-138L	PCB	35065-28-2	
PCB-180L	PCB	35065-29-3	
喹啉-d7	PANH	34071-94-8	
邻三联苯	芳香族	84-15-1	
芘-d-12	PAH	1520-96-3	

附录 3 – 表 3. 使用最低浓度 QuEChERS 加标稀释萃取液测得的方法 LOQ 值，样品制备方法详见实验部分，LOQ 符合标准要求。每种稀释标样重复进样 18 次，浓度范围为 0.5 pg/μL-5.0 pg/μL。LOQ 评估标准为：(i) 与根据校正范围计算得到的平均离子比（目标离子比）相比，测得的离子比（IR）范围为 ±30%；(ii) 峰面积 <15% RSD。

化合物	进样量 (pg OC)	最小 IR 偏差 %	最大 IR 偏差 %	平均 IR 偏差 %	峰面积 RSD%	LOQ (pg OC)	LOQ (μg/kg)
萘	0.5	-1.4	1.7	0.4	4.5%	0.5	0.5
苯并(b) 噻吩	1.0	-0.8	-13.3	1.0	5.7%	1.0	1.0
喹啉	1.0	10.9	-0.7	1.0	8.1%	1.0	1.0
1- 茚满酮	2.5	-10.9	13.0	2.6	6.2%	2.5	2.5
1- 甲基萘	0.5	6.9	10.3	8.8	2.2%	0.5	0.5
2- 甲基萘	0.5	4.6	7.3	6.0	2.2%	0.5	0.5
芴	0.5	-5.8	13.5	4.4	5.6%	0.5	0.5
芴烯	0.5	-10.2	14.7	2.8	6.6%	0.5	0.5
联苯	0.5	-12.0	1.6	-5.2	3.6%	0.5	0.5
1 & 2- 乙萘	0.5	-9.1	9.9	3.0	2.9%	0.5	0.5
2, 7- 二甲基萘	0.5	5.6	14.7	10.0	2.2%	0.5	0.5
1,3 & 1,6- 二甲基萘	0.5	10.4	17.5	13.7	3.3%	0.5	0.5
2,3- 二甲基萘	0.5	-13.3	13.2	0.3	10.2%	0.5	0.5
1,2- 二甲基萘	0.5	-24.2	16.1	-12.1	5.8%	0.5	0.5
1,8- 二甲基萘	2.5	-12.5	11.3	-3.1	3.2%	2.5	2.5
二苯并呋喃	0.5	-13.9	2.1	-5.4	2.0%	0.5	0.5
芴	1.0	11.1	5.4	1.0	6.5%	1.0	1.0
9- 氟酮	1.0	9.1	-2.3	1.0	5.3%	1.0	1.0
二苯并噻吩	1.0	9.7	-4.4	1.0	5.4%	1.0	1.0
菲	0.5	-13.3	2.9	-5.6	2.6%	0.5	0.5
蒽	1.0	11.5	0.8	1.0	5.5%	1.0	1.0
咔唑	1.0	11.3	-1.0	1.0	8.3%	1.0	1.0
PCB-28	2.5	-11.7	9.5	-3.6	3.7%	2.5	2.5
PCB-52	1.0	12.1	0.4	1.0	6.6%	1.0	1.0

附录 3 – 表 3(续). 使用最低浓度 QuEChERS 加标稀释萃取液测得的方法 LOQ 值, 样品制备方法详见实验部分, LOQ 符合标准要求。每种稀释标样重复进样 18 次, 浓度范围为 0.5 pg/μL-5.0 pg/μL。LOQ 评估标准为: (i) 与根据校正范围计算得到的平均离子比 (目标离子比) 相比, 测得的离子比 (IR) 范围为 ±30%; (ii) 峰面积 <15% RSD。

化合物	进样量 (pg OC)	最小 IR 偏差 %	最大 IR 偏差 %	平均 IR 偏 差 %	峰面积 RSD%	LOQ (pg OC)	LOQ (μg/kg)
9,10- 蒽醌	1.0	14.6	8.8	1.0	6.1%	1.0	1.0
荧蒽	0.5	-11.3	13.7	4.5	6.7%	0.5	0.5
PCB-101	0.5	-27.9	15.3	-12.9	8.3%	0.5	0.5
2- 甲基蒽醌	1.0	13.5	-1.4	1.0	8.4%	1.0	1.0
芘	0.5	-12.2	2.6	-4.1	3.6%	0.5	0.5
PCB-118	0.5	-20.4	17.8	-0.3	7.0%	0.5	0.5
PCB-153	1.0	19.5	1.5	1.0	6.6%	1.0	1.0
PCB-138	1.0	13.2	1.2	1.0	9.4%	1.0	1.0
苯并 [a] 蒽	1.0	6.8	-0.6	1.0	7.1%	1.0	1.0
屈	1.0	10.7	0.0	1.0	7.7%	1.0	1.0
PCB-180	0.5	-24.2	24.7	-4.5	9.5%	0.5	0.5
苯并蒽酮	2.5	-12.3	12.0	1.3	6.3%	2.5	2.5
5, 12- 萘并萘醌	2.5	-12.2	12.8	0.4	8.1%	2.5	2.5
苯并 [b] 荧蒽	1.0	6.3	-2.7	1.0	7.2%	1.0	1.0
苯并 [k] 荧蒽	1.0	7.6	-3.9	1.0	10.1%	1.0	1.0
苯并 [a] 芘	1.0	8.3	-3.1	1.0	9.1%	1.0	1.0
茚并 [1,2,3-cd] 芘	1.0	-7.8	-14.6	1.0	8.3%	1.0	1.0
二苯并 [a,h] 蒽	2.5	-6.4	9.6	1.4	4.6%	2.5	2.5
苯并 [g,h,i] 芘	2.5	-9.9	11.8	-0.2	3.0%	2.5	2.5

附录 4 – 表 4. 相关系数 (R²) 和残留平均响应因子 (RSD%)

化合物	化合物类型	R ²	AVCF % RSD
萘	PAH	0.9999	1.6
萘烯	PAH	0.9987	5.4
蒎	PAH	0.9995	4.0
联苯	PAH	0.9998	2.6
芴	PAH	0.9981	9.0
菲	PAH	0.9995	3.8
蒽	PAH	0.9981	4.3
荧蒽	PAH	0.9998	3.0
芘	PAH	0.9997	3.2
苯并 [a] 蒽	PAH	0.9999	1.7
屈	PAH	0.9997	3.1
苯并 [b] 荧蒽	PAH	0.9998	2.6
苯并 [k] 荧蒽	PAH	0.9994	4.5
苯并 [a] 芘	PAH	0.9987	5.4
茚并 [1,2,3-cd] 芘	PAH	0.9964	9.3
二苯并 [a,h] 蒽	PAH	0.9978	7.3
苯并 [g,h,i] 芘	PAH	0.9989	5.1
1- 甲基萘	甲基 PAH	1.0000	1.1
2- 甲基萘	甲基 PAH	0.9999	1.8

附录 4 – 表 4 (续). 相关系数 (R^2) 和残留平均响应因子 (RSD%)

化合物	化合物类型	R^2	AVCF % RSD
2, 7- 二甲基萘	甲基 PAH	0.9999	1.5
1,3 & 1,6- 二甲基萘	甲基 PAH	0.9999	2.0
2,3- 二甲基萘	甲基 PAH	0.9999	1.8
1,2- 二甲基萘	甲基 PAH	0.9993	4.5
1,8- 二甲基萘	甲基 PAH	0.9998	2.6
PCB-28	PCB	0.9997	2.5
PCB-52	PCB	0.9991	2.8
PCB-101	PCB	0.9998	3.2
PCB-118	PCB	0.9998	3.7
PCB-153	PCB	0.9998	1.6
PCB-138	PCB	0.9991	2.8
PCB-180	PCB	0.9997	4.3
苯并 (b) 噻吩	PASH	0.9998	3.2
二苯并噻吩	PASH	0.9988	3.7
1 & 2- 乙萘	ethylPAH	0.9996	3.7
喹啉	PANH	0.9988	4.0
1- 茚满酮	PAOH	0.9993	4.7
二苯并呋喃	PAOH	0.9993	5.3
咔唑	PAOH	0.9980	4.7
9,10- 蒽醌	PAOH	0.9951	12.9
2- 甲基蒽醌	PAOH	0.9981	6.5
9- 氟酮	oxyPAH	0.9997	5.0
苯并蒽酮	oxyPAH	0.9985	6.0
5, 12- 萘并萘醌	oxyPAH	0.9963	9.6
	最小值	0.9951	1.1
	最大值	1.0000	12.9
	平均值	0.9991	4.2

附录 5 – 表 5. QuEChERS 土壤萃取物 IS% 回收率数据

化合物	萃取内标加标回收率%							平均值	STDEV	RSD%
	1	2	3	4	5	6	7			
萘 d8	70.6	69.3	68.4	69.1	69.1	71.0	64.8	69	2.015	2.9%
喹啉 d7	72.0	71.7	69.9	74.8	72.4	71.9	69.3	72	1.792	2.5%
二苯并呋喃 d8	82.0	82.8	80.4	80.7	79.8	82.4	77.4	81	1.847	2.3%
9- 氟酮 d8	81.8	81.4	78.2	82.5	79.1	79.9	78.7	80	1.676	2.1%
PCB 28L	89.2	89.5	90.9	93.7	86.0	92.7	91.2	91	2.546	2.8%
PCB 52L	89.7	88.5	87.0	85.2	85.1	86.5	83.8	87	2.063	2.4%
PCB 101L	85.2	82.6	82.7	78.0	81.6	79.5	80.3	81	2.375	2.9%
芘 d10	92.9	91.0	90.0	86.7	88.7	86.0	85.7	89	2.734	3.1%
PCB 118L	83.9	82.1	80.0	78.8	80.0	79.3	77.8	80	2.067	2.6%
PCB 153L	83.0	82.1	78.2	76.9	79.0	77.0	76.1	79	2.685	3.4%
PCB 138L	84.9	83.5	82.6	78.1	82.2	81.9	80.5	82	2.168	2.6%
PCB 180L	75.2	73.8	71.3	68.8	71.9	72.3	70.8	72	2.0735	2.9%
芘 d12	63.6	63.6	62.3	64.4	66.7	70.4	68.1	66	2.9116	4.4%

附录 6 – 表 6. Compound Discoverer 3.2 软件 QuEChERS 土壤萃取物解卷积 EI 数据 NIST 检索索引

化合物名称	RT 参考值 [min]	实测值 (m/z)	NIST 分子式	NIST 理论值 (m/z)	质量数误差 (ppm)	峰面积	RI 计算值	RI 差值	NIST 分子式	分数	SI	RSI
苯甲醇	4.466	79.05409	C ₆ H ₇	79.05423	1.78	16069986	1039	5	C ₇ H ₈ O	95.7	937	987
速灭磷	6.543	127.01549	C ₂ H ₆ O ₄ P	127.01547	0.13	17076195	1429	16	C ₇ H ₁₃ O ₆ P	99	960	962
克草猛	6.729	128.10695	C ₇ H ₁₄ NO	128.10699	0.32	8595860	1469	0	C ₁₀ H ₂₁ NOS	95.2	895	936
邻苯二甲酰亚胺	6.788	147.03149	C ₈ H ₅ NO ₂	147.03148	0.10	1242332	1482	0	C ₈ H ₅ NO ₂	99.4	968	968
虫螨畏	6.874	180.00058	C ₅ H ₉ O ₃ PS	180.00045	0.71	6569371	1501	6	C ₇ H ₁₃ O ₅ PS	98.5	931	932
氟甲氧苯	6.945	190.96625	C ₇ H ₅ Cl ₂ O ₂	190.96611	0.72	17004439	1517	0	C ₈ H ₈ Cl ₂ O ₂	98.2	960	981
苯, 五氯 -	7.084	249.84847	C ₆ HCl ₅	249.84859	0.50	24762934	1549	0	C ₆ HCl ₅	94.2	943	973
四氯硝基苯	7.384	202.87970	C ₆ HCl ₄	202.87974	0.18	4337238	1609	0	C ₆ HCl ₄ NO ₂	94.3	975	988
毒草安	7.411	120.08082	C ₈ H ₁₀ N	120.08078	0.36	9254651	1612	0	C ₁₁ H ₁₄ CINO	97.2	938	964
二苯胺	7.501	169.08841	C ₁₂ H ₁₁ N	169.0886	1.13	24878507	1624	2	C ₁₂ H ₁₁ N	95.6	954	983
农药草灭特	7.537	83.08540	C ₆ H ₁₁	83.08553	1.48	12902977	1628	8	C ₁₁ H ₂₁ NOS	96.4	859	874
氟苯胺灵	7.587	127.01830	C ₈ H ₆ CIN	127.01833	0.20	9390559	1634	0	C ₁₀ H ₁₂ CINO ₂	97.9	953	976
氟乐灵	7.590	264.02240	C ₈ H ₅ F ₃ N ₃ O ₄	264.02267	1.01	10518127	1635	0	C ₁₃ H ₁₆ F ₃ N ₃ O ₄	96.9	855	860
氟草胺	7.612	292.05356	C ₁₀ H ₉ F ₃ N ₃ O ₄	292.05397	1.40	11572988	1637	0	C ₁₃ H ₁₆ F ₃ N ₃ O ₄	98.3	915	924
硫特普	7.640	293.99060	C ₆ H ₁₆ O ₅ P ₂ S ₂	293.99089	0.98	5705056	1641	0	C ₈ H ₂ O ₅ P ₂ S ₂	98.9	945	948
甲拌磷	7.764	75.02623	C ₃ H ₇ S	75.0263	0.89	9945770	1656	0	C ₇ H ₁₇ O ₂ PS ₃	93.4	858	914
五氯苯甲醚	7.934	264.83575	C ₆ Cl ₅ O	264.83568	0.28	10759890	1677	0	C ₇ H ₂ Cl ₅ O	98.6	950	954
氯硝胺	7.936	123.99490	C ₆ H ₃ CIN	123.99485	0.35	2725458	1677	0	C ₆ H ₄ Cl ₂ N ₂ O ₂	96	886	907
阿特拉津	7.963	200.06975	C ₇ H ₁₁ CIN ₅	200.06975	0.00	8074011	1681	67	C ₈ H ₁₄ CIN ₅	97.5	947	948
异恶草酮	8.022	125.01531	C ₇ H ₆ Cl	125.01525	0.41	24300346	1688	0	C ₁₂ H ₁₄ CINO ₂	95.9	884	907
特丁津	8.073	214.08533	C ₈ H ₁₃ CIN ₅	214.0854	0.34	9737849	1694	82	C ₉ H ₁₆ CIN ₅	98.5	969	969
二嗪酮	8.102	137.07097	C ₇ H ₉ N ₂ O	137.07094	0.22	13998989	1698	90	C ₁₂ H ₂₁ N ₂ O ₃ PS	98.5	924	926
拿草特	8.113	172.95569	C ₇ H ₃ Cl ₂ O	172.95555	0.82	17602860	1699	85	C ₁₂ H ₁₁ Cl ₂ NO	98.2	942	944
地虫硫磷	8.148	108.98717	C ₂ H ₆ OPS	108.98715	0.17	23490821	1708	73	C ₁₀ H ₁₅ OPS ₂	98.3	950	956
噁霉胺	8.177	198.10248	C ₁₂ H ₁₂ N ₃	198.10257	0.48	45520948	1715	0	C ₁₂ H ₁₃ N ₃	94.9	918	978
氯唑磷	8.203	118.98820	C ₂ H ₂ CIN ₃ O	118.98809	0.90	9010911	1722	0	C ₉ H ₁₇ CIN ₃ O ₃ PS	98.1	905	915
乙拌磷	8.221	88.03407	C ₄ H ₈ S	88.03412	0.56	8860789	1727	0	C ₈ H ₁₉ O ₂ PS ₃	97.2	921	951
百菌清	8.239	265.87787	C ₈ Cl ₄ N ₂	265.87806	0.72	19236284	1732	0	C ₈ Cl ₄ N ₂	97.1	966	971
葱	8.252	178.07787	C ₁₄ H ₁₀	178.0777	0.93	764555	1736	70	C ₁₄ H ₁₀	97.8	909	914
野麦畏	8.287	268.03238	C ₁₀ H ₁₆ Cl ₂ NOS	268.03242	0.14	6379150	1745	80	C ₁₀ H ₁₆ Cl ₃ NOS	97.4	896	897
驱虫特	8.386	149.02332	C ₈ H ₅ O ₃	149.02332	0.03	5881147	1772	181	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	98.1	915	916
敌稗	8.464	160.97940	C ₆ H ₅ Cl ₂ N	160.97936	0.28	19471408	1793	0	C ₉ H ₉ Cl ₂ NO	98.7	955	960
甲基毒死蜱	8.514	285.92539	C ₇ H ₇ Cl ₂ NO ₃ PS	285.92558	0.69	20128971	1807	72	C ₇ H ₇ Cl ₃ NO ₃ PS	97.9	940	941
四氟苯菊酯	8.523	163.01637	C ₇ H ₃ F ₄	163.01654	1.02	11807916	1809	0	C ₁₅ H ₁₂ Cl ₂ F ₄ O ₂	97.3	897	927
农利灵	8.526	212.00269	C ₁₀ H ₈ Cl ₂ N	212.00283	0.68	3926786	1810	0	C ₁₂ H ₉ Cl ₂ NO ₃	97.6	921	942
甲草胺	8.561	160.11224	C ₁₁ H ₁₄ N	160.11208	1.05	8630775	1820	74	C ₁₄ H ₂ OCINO ₂	92.8	849	907
甲基立枯磷	8.570	264.98505	C ₉ H ₁₁ ClO ₃ PS	264.98496	0.34	30985887	1822	74	C ₉ H ₁₁ Cl ₂ O ₃ PS	97	848	848
皮蝇磷	8.643	284.93015	C ₈ H ₆ Cl ₂ O ₃ PS	284.93033	0.66	22859648	1843	0	C ₈ H ₆ Cl ₃ O ₃ PS	97.4	887	973
甲基嘧啶磷	8.682	290.07211	C ₁₀ H ₁₇ N ₃ O ₃ PS	290.07228	0.56	12041239	1853	79	C ₁₁ H ₂ ON ₃ O ₃ PS	98.1	913	914
杀螟松	8.726	260.01404	C ₉ H ₁₁ NO ₄ PS	260.01409	0.20	6776685	1866	0	C ₉ H ₁₂ NO ₃ PS	97.7	911	918
马拉硫磷	8.755	124.98213	C ₂ H ₆ O ₂ PS	124.98206	0.55	9227531	1874	0	C ₁₀ H ₁₉ O ₆ PS ₂	99	953	954
利谷隆	8.786	61.05217	C ₂ H ₇ NO	61.05222	0.67	996941	1882	0	C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	93.7	754	767
抑菌灵	8.801	123.01375	C ₆ H ₅ NS	123.01372	0.22	10765859	1886	71	C ₉ H ₁₁ Cl ₂ FN ₂ O ₂ S ₂	98.3	923	924

附录 6 – 表 6 (续) . Compound Discoverer 3.2 软件 QuEChERS 土壤萃取物解卷积 EI 数据 NIST 检索索引

化合物名称	RT 参考值 [min]	实测值 (m/z)	NIST 分子式	NIST 理论值 (m/z)	质量数误差 (ppm)	峰面积	RI 计算值	RI 差值	NIST 分子式	分数	SI	RSI
甲基五氯苯基硫	8.839	295.83633	C ₇ H ₃ Cl ₅ S	295.83631	0.08	10450278	1897	58	C ₇ H ₃ Cl ₅ S	98.1	937	954
对硫磷	8.894	96.95074	H ₂ O ₂ PS	96.95076	0.27	4484103	1913	75	C ₁₀ H ₁₄ NO ₅ PS	97.9	907	912
DCPA	8.901	300.87985	C ₉ H ₆ Cl ₄ O ₃	300.88013	0.93	23819724	1915	72	C ₁₀ H ₆ Cl ₄ O ₄	98.5	944	947
三唑酮	8.918	208.02710	C ₉ H ₇ ClN ₃ O	208.02722	0.56	4235155	1919	77	C ₁₄ H ₁₆ ClN ₃ O ₂	97.7	896	898
9,10- 蒽醌	8.949	208.05202	C ₁₄ H ₈ O ₂	208.05188	0.65	8399424	1928	55	C ₁₄ H ₈ O ₂	97.5	903	919
噻啉磷	8.956	168.05891	C ₇ H ₁₀ N ₃ S	168.05899	0.48	9261908	1930	0	C ₁₃ H ₂₄ N ₃ O ₃ PS	98.4	928	945
异乐灵	9.011	238.08212	C ₁₀ H ₁₂ N ₃ O ₄	238.08223	0.46	11131988	1946	0	C ₁₅ H ₂₃ N ₃ O ₄	97.8	892	902
溴磷	9.027	330.87711	C ₈ H ₈ BrClO ₃ PS	330.87687	0.72	18301347	1951	68	C ₈ H ₈ BrClO ₃ PS	97.9	938	949
氟芬磷	9.060	266.93747	C ₈ H ₆ Cl ₂ O ₄ P	266.93753	0.22	423034	1960	0	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₃ O ₄ P	94.6	813	831
氟虫腴	9.080	366.94272	C ₁₁ H ₄ Cl ₂ F ₃ N ₄ OS	366.94295	0.62	1478777	1966	0	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ OS	95.6	781	781
噻菌环胺	9.093	224.11832	C ₁₄ H ₁₄ N ₃	224.11822	0.41	40372063	1969	0	C ₁₄ H ₁₅ N ₃	97.3	943	971
灭草胺	9.117	132.08084	C ₉ H ₁₀ N	132.08078	0.50	11264282	1976	68	C ₁₄ H ₁₆ ClN ₃ O	98.6	939	941
戊菌唑	9.137	158.97646	C ₇ H ₅ Cl ₂	158.97628	1.09	18713951	1982	74	C ₁₃ H ₁₅ Cl ₂ N ₃	98.3	917	918
对甲抑菌灵	9.161	137.02948	C ₃ H ₁₂ Cl ₂ F	137.02946	0.15	13660572	1989	74	C ₁₀ H ₁₃ Cl ₂ FN ₂ O ₂ S ₂	96.6	864	894
噻硫磷	9.201	146.04755	C ₈ H ₆ N ₂ O	146.04746	0.56	10014184	2000	77	C ₁₂ H ₁₅ N ₂ O ₃ PS	98.4	956	959
氟菌唑	9.214	205.99829	C ₈ H ₄ ClF ₃ N	205.99789	1.96	3132804	2004	83	C ₁₅ H ₁₅ ClF ₃ N ₃ O	96	805	806
三唑醇	9.225	112.05049	C ₄ H ₆ N ₃ O	112.05054	0.42	8170623	2008	78	C ₁₄ H ₁₈ ClN ₃ O ₂	97.9	897	897
腐霉利	9.238	96.05702	C ₆ H ₆ O	96.05697	0.58	6299842	2012	0	C ₁₃ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	96.9	897	916
乙基溴	9.309	302.84604	C ₇ H ₄ BrCl ₂ O ₂ S	302.84574	0.97	10486942	2034	0	C ₁₀ H ₁₂ BrCl ₂ O ₃ PS	96.8	880	888
杀虫畏	9.342	328.92981	C ₁₀ H ₉ Cl ₃ O ₄ P	328.92985	0.13	8515425	2044	0	C ₁₀ H ₉ Cl ₄ O ₄ P	97.8	940	952
多效唑	9.382	125.01531	C ₇ H ₆ Cl	125.01525	0.41	7793995	2057	0	C ₁₅ H ₂₀ ClN ₃ O	98.5	935	979
芬灭松	9.417	55.05417	C ₄ H ₇	55.05423	1.11	8959158	2068	0	C ₁₃ H ₂₂ NO ₃ PS	93.4	813	896
氟酰胺	9.437	173.02083	C ₈ H ₄ F ₃ O	173.02088	0.27	42560841	2074	0	C ₁₇ H ₁₆ F ₃ NO ₂	99.5	974	976
粉唑醇	9.455	123.02410	C ₇ H ₄ FO	123.02407	0.26	9903083	2080	50	C ₁₆ H ₁₃ F ₂ N ₃ O	98.5	953	960
丙草胺	9.508	162.12763	C ₁₁ H ₁₆ N	162.12773	0.62	10905234	2096	0	C ₁₇ H ₂₆ ClNO ₂	95.3	860	902
碘硫磷	9.510	376.86569	C ₈ H ₆ ClIO ₃ PS	376.86595	0.68	21511075	2097	61	C ₈ H ₆ Cl ₂ IO ₃ PS	93.1	816	857
恶草酮	9.530	174.95873	C ₈ H ₃ Cl ₂ NO	174.95862	0.60	11688803	2103	0	C ₁₅ H ₁₈ Cl ₂ N ₂ O ₃	98.3	916	918
乙氧氟草醚	9.554	252.03917	C ₁₃ H ₇ F ₃ O ₂	252.03927	0.38	6287263	2111	85	C ₁₅ H ₁₁ ClF ₃ NO ₄	95.9	824	826
磺啉菌灵	9.576	208.14444	C ₁₁ H ₁₈ N ₃ O	208.14444	0.01	7679148	2118	0	C ₁₃ H ₂₄ N ₄ O ₃ S	98.2	911	915
腈菌唑	9.583	179.02463	C ₈ H ₆ ClN ₃	179.02448	0.85	7298452	2120	0	C ₁₅ H ₁₇ ClN ₄	96.1	832	891
氟硅唑	9.592	233.05919	C ₁₃ H ₁₁ F ₂ Si	233.05926	0.30	20153005	2123	73	C ₁₆ H ₁₅ F ₂ N ₃ Si	90.3	871	891
三环唑	9.614	189.03554	C ₉ H ₇ N ₃ S	189.03552	0.10	3484770	2129	43	C ₉ H ₇ N ₃ S	97.1	973	981
除草醚	9.759	282.97965	C ₁₂ H ₇ Cl ₂ NO ₃	282.97975	0.37	4113285	2175	60	C ₁₂ H ₇ Cl ₂ NO ₃	97	915	922
虫螨磷	9.782	268.92563	C ₇ H ₇ ClO ₃ PS ₂	268.92573	0.36	4905455	2182	0	C ₁₁ H ₁₅ Cl ₂ O ₃ PS ₂	95.5	796	815
乙硫磷	9.837	230.97318	C ₅ H ₁₂ O ₂ PS ₃	230.97315	0.09	17039535	2199	73	C ₉ H ₂₂ O ₄ P ₂ S ₄	98.1	932	970
三唑磷	9.934	162.06630	C ₈ H ₈ N ₃ O	162.06619	0.68	4817402	2229	75	C ₁₂ H ₁₆ N ₃ O ₃ PS	97.6	886	887
唑啉草酯	9.974	312.05896	C ₁₃ H ₉ F ₃ N ₃ O ₃	312.05905	0.29	7221687	2242	0	C ₁₅ H ₁₄ Cl ₂ F ₃ N ₃ O ₃	97.9	900	922
达草灭	10.055	303.03787	C ₁₂ H ₉ ClF ₃ N ₃ O	303.03808	0.67	5679397	2267	0	C ₁₂ H ₉ ClF ₃ N ₃ O	96.9	843	845
三硫磷	10.062	156.98746	C ₆ H ₆ OPS	156.98715	1.97	11686197	2269	62	C ₁₁ H ₁₆ ClO ₂ PS ₃	98.4	941	946
克瘟散	10.102	109.01067	C ₆ H ₅ S	109.01065	0.17	11653922	2282	0	C ₁₄ H ₁₅ O ₂ PS ₂	94.3	910	920
苜咪菊酯	10.214	128.06212	C ₁₀ H ₈	128.06205	0.53	3084053	2315	0	C ₂₂ H ₂₆ O ₃	96.4	838	852
噻啉硫磷	10.422	199.08656	C ₁₂ H ₁₁ N ₂ O	199.08659	0.13	4151296	2375	0	C ₁₄ H ₁₇ N ₂ O ₄ PS	98.8	937	942
胺菊酯	10.481	164.07062	C ₉ H ₁₀ NO ₂	164.07061	0.08	16344579	2392	0	C ₁₉ H ₂₅ NO ₄	99.4	972	976
亚胺硫磷	10.539	160.03935	C ₉ H ₆ NO ₂	160.0393	0.30	28822343	2408	0	C ₁₁ H ₁₂ NO ₄ PS ₂	98.4	926	986

附录 6 – 表 6 (续) . Compound Discoverer 3.2 软件 QuEChERS 土壤萃取物解卷积 EI 数据 NIST 检索索引

化合物名称	RT 参考值 [min]	实测值 (m/z)	NIST 分子式	NIST 理论值 (m/z)	质量数误差 (ppm)	峰面积	RI 计算值	RI 差值	NIST 分子式	分数	SI	RSI
甲氧氯	10.574	227.10657	C ₁₅ H ₁₅ O ₂	227.10666	0.39	20536768	2417	69	C ₁₆ H ₁₅ Cl ₃ O ₂	94.2	852	895
吡唑啉	10.609	171.03200	C ₆ H ₈ N ₂ O ₂ P	171.03179	1.22	13061973	2426	76	C ₁₈ H ₂₄ ClN ₃ O	96.7	942	956
伏杀硫磷	10.852	182.00035	C ₈ H ₅ ClNO ₂	182.00033	0.10	11687589	2490	0	C ₁₂ H ₁₅ ClNO ₄ PS ₂	97	922	938
吡丙醚	10.883	136.07579	C ₈ H ₁₀ NO	136.07569	0.73	30668503	2498	71	C ₂₀ H ₁₉ NO ₃	97.9	940	953
对溴磷	10.885	171.00285	C ₇ H ₈ OPS	171.0028	0.32	13220533	2499	51	C ₁₃ H ₁₀ BrCl ₂ O ₂ PS	95.6	899	913
高效氯氟菊酯	10.921	181.06485	C ₁₃ H ₉ O	181.06479	0.33	12337809	2507	85	C ₂₃ H ₁₉ ClF ₃ NO ₃	98.2	925	928
定菌磷	11.064	221.07954	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃	221.07949	0.24	6802604	2540	0	C ₁₄ H ₂₀ N ₃ O ₅ PS	97.6	881	923
氯苯嘧啶醇	11.177	138.99460	C ₇ H ₄ ClO	138.99452	0.57	7620002	2567	52	C ₁₇ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O	97.9	947	950
乙基谷硫磷	11.214	132.04440	C ₈ H ₆ NO	132.04439	0.10	6897902	2575	0	C ₁₂ H ₁₆ N ₃ O ₃ PS ₂	97.7	916	960
除虫精	11.503	183.08044	C ₁₃ H ₁₁ O	183.08044	0.02	14135701	2639	0	C ₂₁ H ₂₀ Cl ₂ O ₃	98.8	942	952
吡啶灵	11.578	147.11690	C ₁₁ H ₁₅	147.11683	0.48	25077978	2655	0	C ₁₉ H ₂₅ ClN ₂ OS	98.5	938	944
氟唑啉	11.583	340.03946	C ₁₆ H ₈ ClFN ₅ O	340.03959	0.39	19132298	2656	62	C ₁₆ H ₈ Cl ₂ FN ₅ O	87.6	842	941

附录 7 – 表 7. Compound Discoverer 3.2 软件 QuEChERS 土壤萃取物 PCI 确认数据 ([M⁺]、[M+H]、[M±C₂H₅] 和 [C₃H₅]) 及相关质量偏差 (ppm) (若可用)

化合物名称	RT 参考值 [min]	实测值 (m/z)	NIST 分子式	NIST 理论值 (m/z)	质量数误差 (ppm)	峰面积	RI 计算值	RI 差值	NIST 分子式	分数
苯甲醇	4.466	C ₇ H ₈ O	108.05697	0.83	109.06534	0.88	137.09664	0.19	149.09664	0.04
速灭磷	6.543	C ₇ H ₁₃ O ₆ P	224.04443		225.05280	-0.16	253.08410	-1.36	265.08410	
克草猛	6.729	C ₁₀ H ₂₁ NOS	203.13384		204.14221	0.68	232.17351	0.33	244.17351	
邻苯二甲酰亚胺	6.788	C ₈ H ₅ NO ₂	147.03148		148.03986	-0.22	176.07116		188.07116	
虫螨畏	6.874	C ₇ H ₁₃ O ₅ PS	240.02158	0.06	241.02996	0.15	269.06126	-0.25	281.06126	-0.2
氯甲氧苯	6.945	C ₈ H ₈ Cl ₂ O ₂	205.98959	0.5	206.99796	1.42	235.02926	-0.26	247.02926	
苯, 五氯 -	7.084	C ₆ HCl ₅	247.85154	0.21	248.85992	2.63	276.89122		288.89122	
四氯硝基苯	7.384	C ₆ HCl ₄ NO ₂	258.87559	0.53	259.88397	0.74	287.91527		299.91527	
毒草安	7.411	C ₁₁ H ₁₄ ClNO	211.07584	0.39	212.08422	0.24	240.11552	0.50	252.11552	-1.15
二苯胺	7.501	C ₁₂ H ₁₁ N	169.08860	0.65	170.09698	0.19	198.12828	0.50	210.12828	0.57
农药草灭特	7.537	C ₁₁ H ₂₁ NOS	215.13384		216.14221	0.45	244.17351	0.13	256.17351	
氯苯胺灵	7.587	C ₁₀ H ₁₂ ClNO ₂	213.05511	0.21	214.06348	1.39	242.09478		254.09478	
氟乐灵	7.590	C ₁₃ H ₁₆ F ₃ N ₃ O ₄	335.10874	-0.34	336.11712	-0.14	364.14842		376.14842	
氟草胺	7.612	C ₁₃ H ₁₆ F ₃ N ₃ O ₄	335.10874	-0.34	336.11712	-0.14	364.14842		376.14842	
硫特普	7.640	C ₈ H ₂₀ O ₅ P ₂ S ₂	322.02219	-0.02	323.03057	-0.46	351.06187	-0.25	363.06187	-0.04
甲拌磷	7.764	C ₇ H ₁₇ O ₂ PS ₃	260.01228	-0.24	261.02066	0.10	289.05196		301.05196	
五氯苯甲醚	7.934	C ₇ H ₃ Cl ₅ O	277.86210	-0.02	278.87048	2.27	306.90178		318.90178	
氯硝胺	7.936	C ₆ H ₄ Cl ₂ N ₂ O ₂	205.96443	0.34	206.97281	0.94	235.00411		247.00411	
阿特拉津	7.963	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	215.09322	0.46	216.10160	0.44	244.13290	-0.01	256.13290	0.45
异恶草酮	8.022	C ₁₂ H ₁₄ ClNO ₂	239.07076		240.07913	0.11	268.11043	0.43	280.11043	-1.17
特丁津	8.073	C ₉ H ₁₆ ClN ₅	229.10887	0.34	230.11725	0.10	258.14855	-0.37	270.14855	-0.27
二嗪酮	8.102	C ₁₂ H ₂₁ N ₂ O ₃ PS	304.10050	-0.09	305.10888	-0.84	333.14018	-0.37	345.14018	-0.62
拿草特	8.113	C ₁₂ H ₁₁ Cl ₂ NO	255.02122	0.43	256.02960	-0.02	284.06090	0.84	296.06090	-1.29
地虫硫磷	8.148	C ₁₀ H ₁₅ OPS ₂	246.02964	-0.11	247.03802	-0.26	275.06932	-0.40	287.06932	-0.41
啉霉胺	8.177	C ₁₂ H ₁₃ N ₃	199.11040	0.99	200.11878	0.17	228.15008	-0.11	240.15008	-0.28

附录 7 - 表 7 (续). Compound Discoverer 3.2 软件 QuEChERS 土壤萃取物 PCI 确认数据 ([M⁺], [M+H], [M+C₂H₅] 和 [C₃H₅]) 及相关质量偏差 (ppm) (若可用)

化合物名称	RT 参考值 [min]	实测值 (m/z)	NIST 分子式	NIST 理论值 (m/z)	质量数误差 (ppm)	峰面积	RI 计算值	RI 差值	NIST 分子式	分数
氯唑磷	8.203	C ₉ H ₁₇ ClN ₃ O ₃ PS	313.04113	-0.09	314.04950	-0.37	342.08080	-0.17	354.08080	-0.17
乙拌磷	8.221	C ₈ H ₁₉ O ₂ PS ₃	274.02793	-0.74	275.03631	-0.28	303.06761		315.06761	
百菌清	8.239	C ₈ Cl ₄ N ₂	263.88101	-0.22	264.88939	1.09	292.92069	-0.58	304.92069	
葱	8.252	C ₁₄ H ₁₀	178.07770	0.03	179.08608	-0.18	207.11738		219.11738	
野麦畏	8.287	C ₁₀ H ₁₆ Cl ₃ NOS	303.00127		304.00965	-0.33	332.04095	-0.07	344.04095	
驱虫特	8.386	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.15126		279.15964	-0.06	307.19094		319.19094	
敌稗	8.464	C ₉ H ₉ Cl ₂ N ₀	217.00557	0.06	218.01395	0.21	246.04525	-0.82	258.04525	
甲基毒死蜱	8.514	C ₇ H ₇ Cl ₃ NO ₃ PS	320.89443	0.46	321.90281	-0.29	349.93411	-0.20	361.93411	0.03
四氟苯菊酯	8.523	C ₁₅ H ₁₂ Cl ₂ F ₄ O ₂	370.01450	-0.04	371.02288	-0.40	399.05418	0.74	411.05418	
农利灵	8.526	C ₁₂ H ₉ Cl ₂ NO ₃	284.99540	-0.55	286.00378	1.29	314.03508	-0.34	326.03508	
甲草胺	8.561	C ₁₄ H ₂ OCINO ₂	269.11771	0.16	270.12608	0.20	298.15738	0.21	310.15738	
甲基立枯磷	8.570	C ₉ H ₁₁ Cl ₂ O ₃ PS	299.95381		300.96218	-0.21	328.99349	-0.28	340.99349	-0.27
皮蝇磷	8.643	C ₈ H ₆ Cl ₃ O ₃ PS	319.89919		320.90756	0.10	348.93886	-0.27	360.93886	0.08
甲基嘧啶磷	8.682	C ₁₁ H ₂₀ N ₃ O ₃ PS	305.09575	0.41	306.10413	-0.16	334.13543	0.22	346.13543	0.32
杀螟松	8.726	C ₉ H ₁₂ NO ₃ PS	277.01683	0.42	278.02521	0.25	306.05651	0.30	318.05651	
马拉硫磷	8.755	C ₁₀ H ₁₉ O ₆ PS ₂	330.03552		331.04389	0.02	359.07519	-0.50	371.07519	
利谷隆	8.786	C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	248.01138	0.08	249.01976	0.48	277.05106		289.05106	
抑菌灵	8.801	C ₉ H ₁₁ Cl ₂ FN ₂ O ₂ S ₂	331.96175	-0.08	332.97013	0.39	361.00143		373.00143	
甲基五氟苯基硫	8.839	C ₇ H ₂ Cl ₅ S	293.83926	0.23	294.84764	1.63	322.87894	0.30	334.87894	-0.4
对硫磷	8.894	C ₁₀ H ₁₄ NO ₃ PS	291.03248	0.27	292.04086	0.35	320.07216		332.07216	
DCPA	8.901	C ₁₀ H ₆ Cl ₄ O ₄	329.90147	0.33	330.90985	0.37	358.94115	-0.89	370.94115	
三唑酮	8.918	C ₁₄ H ₁₆ ClN ₃ O ₂	293.09256		294.10093	-0.06	322.13223	2.74	334.13223	
9,10- 葱醌	8.949	C ₁₄ H ₈ O ₂	208.05188	0.71	209.06026	0.86	237.09156	0.33	249.09156	
嘧啶磷	8.956	C ₁₃ H ₂₄ N ₃ O ₃ PS	333.12705	0.24	334.13543	-0.34	362.16673	0.27	374.16673	-0.1
异乐灵	9.011	C ₁₅ H ₂₃ N ₃ O ₄	309.16831		310.17668	0.45	338.20798		350.20798	
溴磷	9.027	C ₈ H ₈ BrCl ₂ O ₃ PS	363.84867		364.85705	0.54	392.88835	0.33	404.88835	0.92
氯芬磷	9.060	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₃ O ₄ P	357.96898		358.97736	-0.11	387.00866		399.00866	
氟虫腈	9.080	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ OS	435.93816		436.94653	-0.10	464.97783		476.97783	
噻菌环胺	9.093	C ₁₄ H ₁₅ N ₃	225.12605	1.74	226.13443	0.40	254.16573	-0.07	266.16573	0.2
灭草胺	9.117	C ₁₄ H ₁₆ ClN ₃ O	277.09764	0.86	278.10602	-0.23	306.13732		318.13732	
戊菌唑	9.137	C ₁₃ H ₁₅ Cl ₂ N ₃	283.06375		284.07213	-0.10	312.10343		324.10343	
对甲抑菌灵	9.161	C ₁₀ H ₁₃ Cl ₂ FN ₂ O ₂ S ₂	345.97740	-1.96	346.98578	-0.07	375.01708		387.01708	
唑硫磷	9.201	C ₁₂ H ₁₅ N ₂ O ₃ PS	298.05355	-0.05	299.06193	-0.10	327.09323	-0.16	339.09323	-0.31
氟菌唑	9.214	C ₁₅ H ₁₅ ClF ₃ N ₃ O	345.08503		346.09340	-0.31	374.12470		386.12470	
三唑醇	9.225	C ₁₄ H ₁₈ ClN ₃ O ₂	295.10821		296.11658	-0.77	324.14788		336.14788	
腐霉利	9.238	C ₁₃ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	283.01614	-0.08	284.02451	-0.17	312.05581	-0.39	324.05581	-0.16
乙基溴	9.309	C ₁₀ H ₁₂ BrCl ₂ O ₃ PS	391.87997		392.88835	0.04	420.91965	0.36	432.91965	1.75
杀虫畏	9.342	C ₁₀ H ₉ Cl ₄ O ₄ P	363.89871		364.90708	-0.21	392.93838		404.93838	
多效唑	9.382	C ₁₅ H ₂₀ ClN ₃ O	293.12894		294.13732	-0.13	322.16862		334.16862	
芬灭松	9.417	C ₁₃ H ₂₂ NO ₃ PS	303.10525	-0.3	304.11363	1.41	332.14493	1.84	344.14493	
氟酰胺	9.437	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ NO ₂	323.11276	0.09	324.12114	-0.09	352.15244	0.03	364.15244	
粉唑醇	9.455	C ₁₆ H ₁₃ F ₂ N ₃ O	301.10212		302.11050	-0.37	330.14180		342.14180	
丙草胺	9.508	C ₁₇ H ₂₆ ClNO ₂	311.16466	-0.66	312.17303	-0.06	340.20434	0.50	352.20434	0.62
碘硫磷	9.510	C ₈ H ₈ Cl ₂ IO ₃ PS	411.83480		412.84318	-0.04	440.87448	-0.26	452.87448	-0.01
恶草酮	9.530	C ₁₅ H ₁₈ Cl ₂ N ₂ O ₃	344.06890	0.02	345.07728	-0.12	373.10858	1.81	385.10858	
乙氧氟草醚	9.554	C ₁₅ H ₁₁ ClF ₃ NO ₄	361.03232	-1.34	362.04070	-0.02	390.07200		402.07200	

附录 7 - 表 7 (续) . Compound Discoverer 3.2 软件 QuEChERS 土壤萃取物 PCI 确认数据 ([M⁺]、[M+H]、[M+C₂H₅] 和 [C₃H₅]) 及相关质量偏差 (ppm) (若可用)

化合物名称	RT 参考值 [min]	实测值 (m/z)	NIST 分子式	NIST 理论值 (m/z)	质量数误差 (ppm)	峰面积	RI 计算值	RI 差值	NIST 分子式	分数
磺胺菌灵	9.576	C ₁₃ H ₂₄ N ₄ O ₃ S	316.15636	0.13	317.16474	-0.03	345.19604	-0.51	357.19604	-0.47
腈菌唑	9.583	C ₁₅ H ₁₇ ClN ₄	288.11363		289.12200	-0.26	317.15330		329.15330	
氟硅唑	9.592	C ₁₆ H ₁₅ F ₂ N ₃ Si	315.09978	0.35	316.10816	0.20	344.13946	1.59	356.13946	
三环唑	9.614	C ₉ H ₇ N ₃ S	189.03552	0.96	190.04390	0.70	218.07520		230.07520	
除草醚	9.759	C ₁₂ H ₇ Cl ₂ NO ₃	282.97975	-0.57	283.98813	-1.32	312.01943		324.01943	
虫螨磷	9.782	C ₁₁ H ₁₅ Cl ₂ O ₃ PS ₂	359.95718	0.17	360.96556	0.28	388.99686	0.22	400.99686	-0.33
乙硫磷	9.837	C ₉ H ₂₂ O ₄ P ₂ S ₄	383.98707	0.19	384.99544	0.29	413.02674		425.02674	
三唑磷	9.934	C ₁₂ H ₁₆ N ₃ O ₃ PS	313.06445	-1.35	314.07283	0.18	342.10413	0.02	354.10413	
唑啉草酯	9.974	C ₁₅ H ₁₄ Cl ₂ F ₃ N ₃ O ₃	411.03588	0.16	412.04426	0.15	440.07556	2.15	452.07556	
达草灭	10.055	C ₁₂ H ₉ ClF ₃ N ₃ O	303.03808	0.52	304.04645	0.41	332.07775	-0.37	344.07775	
克瘟散	10.102	C ₁₄ H ₁₅ O ₂ PS ₂	310.02456	-0.21	311.03294	0.33	339.06424		351.06424	
苜蓿菊酯	10.214	C ₂₂ H ₂₆ O ₃	338.18765	0.5	339.19602	0.40	367.22732		379.22732	
苜蓿菊酯	10.258	C ₂₂ H ₂₆ O ₃	338.18765	0.5	339.19602	0.40	367.22732		379.22732	
哒嗪硫磷	10.422	C ₁₄ H ₁₇ N ₂ O ₄ PS	340.06412	-0.63	341.07249	-0.09	369.10379	-0.99	381.10379	
胺菊酯	10.481	C ₁₉ H ₂₅ NO ₄	331.17781		332.18619	-0.34	360.21749		372.21749	
亚胺硫磷	10.539	C ₁₁ H ₁₂ NO ₄ PS ₂	316.99399		318.00236	-0.14	346.03366		358.03366	
甲氧氯	10.574	C ₁₆ H ₁₅ Cl ₃ O ₂	344.01321		345.02159	0.14	373.05289	0.86	385.05289	0.23
吡螨胺	10.609	C ₁₈ H ₂₄ ClN ₃ O	333.16024	0.15	334.16862	0.22	362.19992	-0.37	374.19992	
伏杀硫磷	10.852	C ₁₂ H ₁₅ ClNO ₄ PS ₂	366.98632	-0.29	367.99469	0.32	396.02599		408.02599	
吡丙醚	10.883	C ₂₀ H ₁₉ NO ₃	321.13595		322.14432	-0.09	350.17562		362.17562	
对溴磷	10.885	C ₁₃ H ₁₀ BrCl ₂ O ₂ PS	409.86941		410.87778	0.22	438.90908	0.15	450.90908	
高效氯氟氰菊酯	10.921	C ₂₃ H ₁₉ ClF ₃ NO ₃	449.10001		450.10838	-0.05	478.13968		490.13968	
定菌磷	11.064	C ₁₄ H ₂₀ N ₃ O ₅ PS	373.08558	-1.03	374.09396	0.10	402.12526	0.09	414.12526	
氯苯嘧啶醇	11.177	C ₁₇ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O	330.03212	-1.22	331.04050	-0.52	359.07180		371.07180	
乙基谷硫磷	11.214	C ₁₂ H ₁₆ N ₃ O ₃ PS ₂	345.03652		346.04490	-0.31	374.07620		386.07620	
除虫精	11.503	C ₂₁ H ₂₀ Cl ₂ O ₃	390.07840		391.08678	0.07	419.11808		431.11808	
蝇毒磷	11.563	C ₁₄ H ₁₆ ClO ₃ PS	362.01391	0.55	363.02229	0.56	391.05359	-0.88	403.05359	
哒螨灵	11.578	C ₁₉ H ₂₅ ClN ₂ OS	364.13706	-1.4	365.14544	0.55	393.17674		405.17674	
氟啶唑	11.583	C ₁₆ H ₈ Cl ₂ FN ₅ O	375.00845		376.01682	0.86	404.04812	-0.67	416.04812	
氟菌唑	9.214	C ₁₅ H ₁₅ ClF ₃ N ₃ O	345.08503		346.09340	-0.31	374.12470		386.12470	
三唑醇	9.225	C ₁₄ H ₁₈ ClN ₃ O ₂	295.10821		296.11658	-0.77	324.14788		336.14788	
腐霉利	9.238	C ₁₃ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	283.01614	-0.08	284.02451	-0.17	312.05581	-0.39	324.05581	-0.16
乙基溴	9.309	C ₁₀ H ₁₂ BrCl ₂ O ₃ PS	391.87997		392.88835	0.04	420.91965	0.36	432.91965	1.75
杀虫畏	9.342	C ₁₀ H ₉ Cl ₄ O ₄ P	363.89871		364.90708	-0.21	392.93838		404.93838	
多效唑	9.382	C ₁₅ H ₂₀ ClN ₃ O	293.12894		294.13732	-0.13	322.16862		334.16862	
芬灭松	9.417	C ₁₃ H ₂₂ NO ₃ PS	303.10525	-0.3	304.11363	1.41	332.14493	1.84	344.14493	
氟酰胺	9.437	C ₁₇ H ₁₆ F ₃ NO ₂	323.11276	0.09	324.12114	-0.09	352.15244	0.03	364.15244	
粉唑醇	9.455	C ₁₆ H ₁₃ F ₂ N ₃ O	301.10212		302.11050	-0.37	330.14180		342.14180	



赛默飞
官方微信



赛默飞
官方网站

热线 800 810 5118
电话 400 650 5118
www.thermofisher.com

ThermoFisher
SCIENTIFIC