

## 애질런트 고효율 소스(HES)를 이용하여 보다 신속하게 더 많은 농약 식별 애질런트 농약 DRS 스크리닝 GC/MSD 분석기

### 응용 자료

#### 식품 테스트 및 농업

#### 저자

Melissa Churley 및 Bruce Quimby  
Agilent Technologies, Inc.

Agilent 7890 GC와 Agilent 5977B GC/MSD에 기반한 애질런트 농약 DRS 스크리닝 GC/MSD 분석기는 한 번의 실행으로 보다 신속하게 수 많은 농약과 환경 호르몬(endocrine disruptors)을 스크리닝 및 정량화합니다. Deconvolution Reporting Software(DRS)와 농약 및 환경 호르몬의 머무름 시간 고정(RTL) 데이터베이스를 이용하여 결과 보고시간이 단축되고 스크리닝되는 표적물질 수가 증가합니다. 5977B GC/MSD 및 고효율 소스(HES)와 함께 사용할 때 분석기는 분석 시간을 단축하는 동시에 더 많은 농약을 식별합니다.



Agilent Technologies

## 고효율 소스(HES)를 이용해 더 많은 농약 식별

환경 및 식품 시료 중 잔류 농약의 일반 분석에는 빠른 보고 시간과 더불어 정확한 식별과 저농도 검출이 요구됩니다. GC/MSD 농약 분석기는 NIST AMDIS 프로그램[1]을 이용하는 Deconvolution Reporting Software(DRS)를 통해 이러한 요구를 충족시킵니다. 농약 및 환경 호르몬 데이터베이스[2]는 결과 보고시간을 단축시키고 스크리닝되는 표적물질 수를 늘려줍니다. 또한, 독점적인 Capillary Flow Technology(CFT) 컬럼 Backflush는 분석 주기를 단축하고, 화학적 노이즈 (background)를 줄이며 가동 시간을 최적화합니다.

5977B GC/MSD와 HES는 소스에서 생성되는 이온들의 수를 증가시키고, 사중극자(Quadrupole)로 전달되는 이온 수를 늘려 스크리닝 기능을 향상시킵니다. 이온이 많을수록 더 많은 신호를 생성하기에 감도도 따라서 높아집니다. 이러한 감응도의 증가로 스크리닝 과정에서 더 많은 표적물질을 확인하고 라이브러리 매칭의 신뢰성을 높여줍니다. 이제 전체 스캔모드(full-scan mode)를 이용하여 식품시료에서 10ng/g 농도 검출 물질의 확실한 물질 확인(positive identification)이 가능합니다.

우리는 이를 토마토 추출물의 DRS 분석을 통해 증명했습니다. 이 토마토 추출물에는 200종 이상의 농약이 10 및 100ng/g의 농도로 주입되었습니다. 이는 각 농약을 10 및 100pg씩 주입한 것에 해당합니다. HES를 이용하여 10ng/g 농도 수준에서 38개의 표적 화합물을 확인한 반면, extractor 소스를 이용할 경우 그 어떤 화합물도 확인되지 않았습니다. 100ng/g 농도 수준에서 거의 두 배에 달하는 표적물질이 확인되었습니다 (표 1). 그림 1은 표적 물질 flusilazole에 대한 AMDIS 분석의 예입니다. 성분의 라이브러리 매칭을 이용한 원본 스펙트럼과 추출 스펙트럼이 포함되어 있습니다.

## 결론

애질런트 농약 DRS 스크리닝 GC/MSD 분석기는 Agilent 5977B GC/MSD 및 HES와 함께 사용할 때 더 신속하고 정확한 농약 스크리닝을 제공합니다. Deconvolution Reporting Software와 함께 조합하면, 전체스캔모드(full-scan mode)를 이용하여 10ng/g 농도에서 식품 중의 수 많은 표적성분을 정확하게 확인할 수 있습니다.

표 1은 Extractor 소스(EXR) 및 HES(MMF = 80)를 이용해 10 및 100ng/g로 주입된 토마토 추출액에서 식별된 AMDIS 표적물질의 수를 나타냅니다. 농약 주입량은 각각 10 및 100pg이었습니다. HES를 이용하여 10ng/g 농도 수준에서 38개의 표적 화합물을 확인한 반면, extractor 소스를 이용할 경우 그 어떤 화합물도 식별되지 않았습니다. 100ng/g 농도 수준에서 거의 두 배에 달하는 표적물질이 확인되었습니다 (표 1). 표 1에서는 NIST Hit Number 내역(분포)인 카테고리 1st, 2nd, 및  $\geq 3$  hit를 나열했습니다. 확인된 표적물질은 토마토 추출물에 주입되지는 않았지만, 80 이상의 AMDIS Match Score와 3 이하의 NIST Hit Number를 가집니다. 괜히 안은 각 소스의 튜닝 조건입니다.

|                                  | EXR (atune) |          | HES (autotune) |          |
|----------------------------------|-------------|----------|----------------|----------|
|                                  | 10 ng/g     | 100 ng/g | 10 ng/g        | 100 ng/g |
| AMDIS score가 80 이상인 표적물질의 수      | 0           | 91       | 38             | 164      |
| <b>Distribution of NIST hits</b> |             |          |                |          |
| 1st hit                          | 0           | 63       | 26             | 144      |
| 2nd hit                          | 0           | 12       | 7              | 14       |
| $\geq 3$ rd hit                  | 0           | 16       | 5              | 6        |
| 주입되지 않음<br>$\leq 3$ rd hit       | 2*          | 4**      | 2*             | 8***     |

\* Diethyl phthalate 및 benzophenone

\*\* Benzilamide, benzophenone, quintozene metabolite(pentachlorophenyl methyl sulfide), indoxacarb 및 dioxacarb 분해 산물 [phenol, 2-(1,3-dioxolan-2-yl)-]

\*\*\* Diethyl phthalate, benzophenone, fonofos, phenol, phthalic acid, di(oct-3-yl) ester, phthalimide, quintozene metabolite (pentachlorophenyl methyl sulfide), indoxacarb 및 dioxacarb 분해 산물 [phenol, 2-(1,3-dioxolan-2-yl)-]

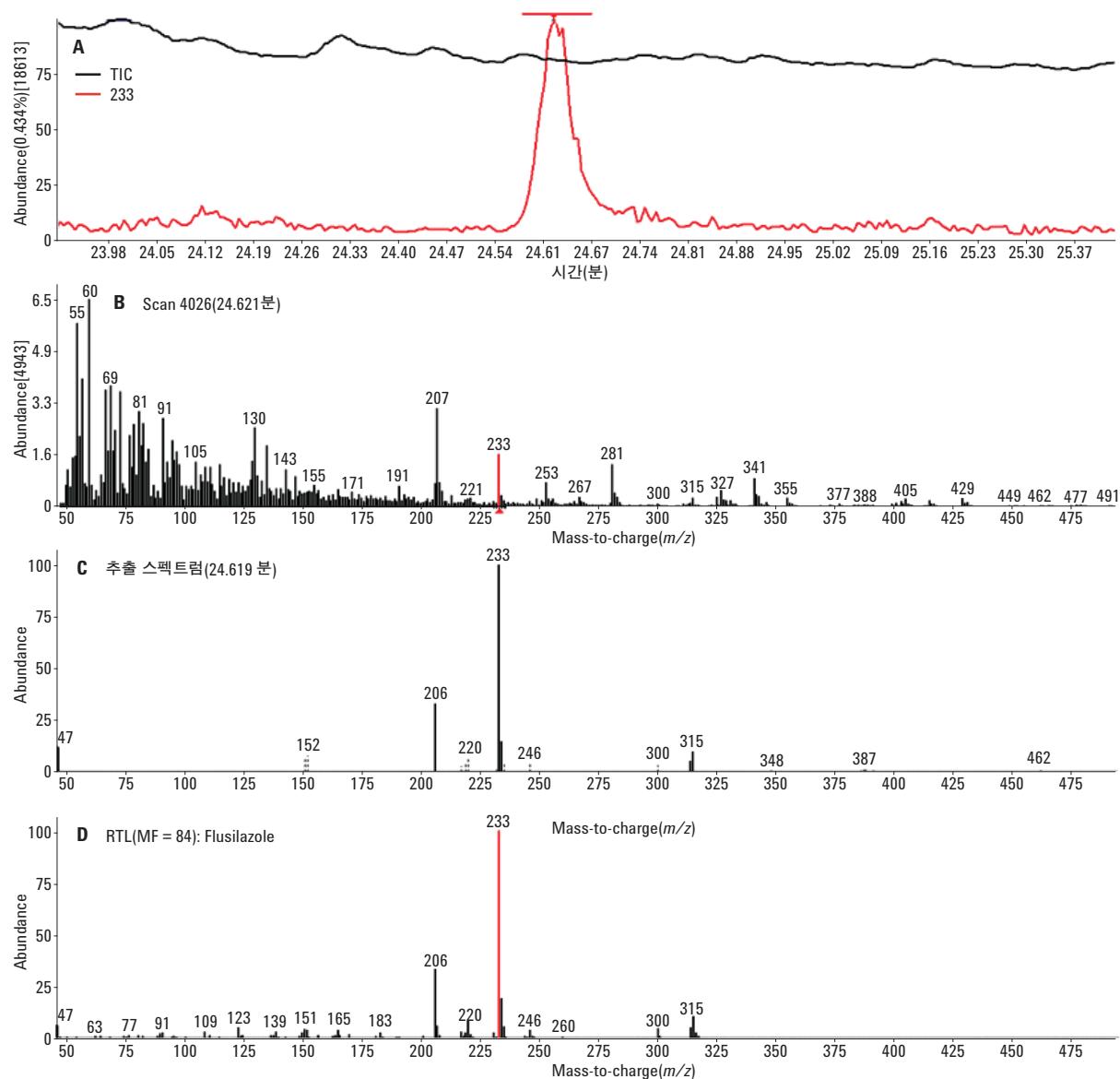


그림 1. AMDIS를 이용하여 토마토 추출물 중 10pg flusilazole 분석;

A) 추출 이온  $m/z$  233(빨간색)과 TIC(검정색)의 중첩도

B) 원본 스펙트럼

C) 성분의 추출 스펙트럼

D) 라이브러리 스펙트럼, AMDIS 매치 인수는 840이며 보고된 NIST Reverse Match score는 73입니다

## 감사의 글

저자는 Nathan Contino에게 감사 인사를 드리고자 합니다.

## 참조 문헌

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. Wyllie, 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.

## 추가 정보

이러한 데이터는 일반적인 결과를 나타냅니다.

애질런트 제품 및 서비스에 대한 더 자세한 정보는 웹 사이트 [www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)에서 확인하실 수 있습니다

[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)

애질런트는 이 문서에 포함된 오류나 이 문서의 제공, 이행 또는 사용과 관련하여 발생한 부수적인 또는 결과적인 손해에 대해 책임을 지지 않습니다.

이 발행물의 정보, 설명 및 사양은 사전 공지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc., 2015  
한국에서 발행  
2015년 10월 19일  
5991-6355KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 (우)04418  
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부  
고객지원센터 080-004-5090 [www.agilent.co.kr](http://www.agilent.co.kr)



Agilent Technologies