

양조 우수성: GC/MS/MS의 일관된 성능과 최대화된 가동 시간으로 홍차에 함유된 200종 이상의 농약 정량 분석



저자

Anastasia A. Andrianova 및
Limian Zhao
Agilent Technologies, Inc.

개요

이 응용 자료는 2세대 고효율 소스 2.0(HES 2.0)을 갖춘 **Agilent 7010D QQQ 질량 분석기** (GC/TQ)를 사용하여 홍차 추출물에 포함된 246종 농약을 고감도로 정확하게 정량 분석한 결과를 제시하여 복잡한 매트릭스에서 잔류 농약 분석 시 제기되는 과제를 해결합니다. 시료 전처리를 최적화하고 이온화원 기술 및 중간 컬럼 백플러싱을 포함한 첨단 GC/MS 하드웨어를 사용함으로써 낮은 ppb 수준에서 뛰어난 검량 성능과 감도를 실현했습니다. 이 분석법은 2ppb의 농약이 첨가된 홍차 추출물을 800회 연속 주입하는 과정에서 높은 정밀도와 낮은 RSD로 탁월한 견고성과 성능을 입증했으며 기기 가동 시간을 연장하고 처리량을 최대화했습니다. 입증된 정량 한계(LOQ)는 평가된 화합물의 1/3 이상에 대해 0.01ppb 정도로 낮았으며, SANTE 11312/2021 지침을 충족하면서 검량 범위가 최대 5차수 크기까지 확장되었습니다.

이 응용 자료에서는 고처리량 분석 결과에 대한 신뢰를 높여주는 조기 유지보수 피드백 및 기기 상태 대시보드와 같은 지능형 GC/TQ 기능을 집중적으로 소개합니다. 업데이트된 데이터 수집 플랫폼은 머무름 시간 고정 기능을 새롭게 구현하여 향상된 사용자 경험을 제공합니다.

소개

차는 전 세계적으로 소비되는 가장 일반적인 무알코올 음료 중 하나입니다. 많은 식품과 마찬가지로, 차 재배도 해충을 방제하기 위해 살충제 사용에 크게 의존하고 있으며, 이로 인해 살충제 잔류물에 대한 우려가 커지고 있습니다.¹

차의 농약 함량을 평가하는 것은 안전성 평가에 필수적이며 유럽 위원회 및 미국 환경 보호국을 포함한 많은 규제 기관에서 요구하는 사항입니다.^{2,3} 차의 농약 테스트를 위한 전체 워크플로에는 QuEChERS를 통한 시료 추출, 추출물 클린업, QQQ 질량 분석법과 결합된 액체 및 가스 크로마토그래피(LC/TQ 및 GC/TQ)를 사용한 후속 테스트가 포함됩니다.⁴ 우수한 워크플로는 분석법 감도, 검량 범위, 추출물 농약 회수율 및 정밀도에 도움을 줍니다. 감도 요구 사항은 최대 잔류 허용 기준(MRL)을 기준으로 설정됩니다. 이는 살충제가 올바르게 적용되었을 때 식품이나 사료에 법적으로 허용되는 가장 높은 수준의 살충제 잔류물을 의미합니다. 넓은 측정 범위에 걸쳐 검량할 수 있어야 상품에서 모니터링되는 개별 화합물에 대한 다양한 MRL(10ppb에서 100ppm까지 다양함)이 수용됩니다. 특정 농약에 확립된 MRL이 없을 경우 일반적으로 기본 한도인 10ppb가 적용됩니다. 추출 및 클린업의 효율성은 매트릭스 스파이크의 회수율로 표현되고, 정밀도는 반복 분석의 상대 표준편차(RSD)로 표현됩니다.

이 응용 자료는 홍차에 함유된 246종의 휘발성 및 반휘발성 농약에 대한 정확하고 신뢰할 수 있는 분석을 위한 완전한 GC/TQ 워크플로 솔루션을 제시합니다. 첨단 기술과 다음을 포함한 최적화된 방법론을 결합하여 워크플로에서 뛰어난 분석 성능을 얻을 수 있었습니다:

- QuEChERS 추출을 사용한 시료 전처리 후 Agilent Captiva EMR-GPD 카트리지를 사용한 EMR 혼합 모드 패스스루 클린업
- Agilent 8890 GC 하드웨어 및 GC 소모품
- HES 2.0을 이용한 새로운 전자 이온화(EI) 소스 기술
- 분석법 설정, 유지보수 및 시스템 상태 평가를 위한 내장형 GC/TQ MS 인텔리전스 및 새로운 소프트웨어 기능

제시된 워크플로를 통해 LOQ가 34%의 표적 물질에 대해 0.01ppb, 74%의 화합물에 대해 0.1ppb 미만, 96%에 대해 2ppb 미만으로 홍차의 246개 농약 잔류물을 정량화할 수 있었습니다. 매트릭스 일치 검량 결과, 복잡한 홍차 추출물의 0.01-1,000ppb에서 최대 5차수 크기에 이르는 넓은 측정 범위에 걸쳐 탁월한 정확도가 입증되었습니다. 2ppb로 첨가된 홍차 추출물에 대해 17일간 800회 연속 분석에 걸쳐 순차적으로 분석하면서 측정 정확도를 우수한 정밀도(176개 화합물에 대해 RSD < 20%)로 유지함으로써 분석법의 견고성이 입증되었습니다. 새로운 HES 2.0 이온화원에는 운반 가스 이온의 방향을 바꾸는 새로운 쌍극 무선 주파수(RF) 렌즈가 장착되어 있어 시스템 견고성이 향상되고 가동 시간이 극대화되는 동시에 우수한 분석 감도를 유지합니다.

실험

GC/TQ 분석

8890 GC 및 7010D GC/TQ 시스템(그림 1A)은 최고의 감도를 달성하고 넓은 검량 범위를 유지하며 가장 견고한 분석법 성능을 제공하도록 사용 및 구성되었습니다. GC는 Agilent 7693A 자동 액체 시료 주입기(ALS) 및 150 용량 트레이를 사용해 구성했습니다. 시스템에 온도 프로그래밍 비분할 주입 모드(냉각 비분할이라고도 함)에서 작동되는 멀티모드 주입구(MMI)가 사용되었습니다. 주입 파라미터는 교차 오염(carryover)을 제한하면서 감도를 최대화하도록 최적화되었습니다. 중간 컬럼 백플러시 기능은 두 개의 동일한 15m 컬럼과 Agilent 8890 기체역학 스위칭 장치(PSD) 모듈 사이에 설치한 Agilent Purged Ultimate Union (PUU)을 통해 제공했습니다(그림 1B). 기기 작동 파라미터는 표 1과 같습니다.

데이터는 자동으로 결정된 가장 효율적인 머무름 시간 분포를 통해 대규모 다중 분석물질 분석 기능과 좁은 피크의 정확한 정량을 제공하는 dMRM(dynamic MRM) 모드에서 수집되었습니다. dMRM 기능을 사용해 최대 64개의 동시 MRM과 총 749개의 MRM 전이를 포함해 246종의 다양한 농약을 성공적으로 분석할 수 있었습니다. 이뿐만 아니라 dMRM을 사용해 분석물질을 쉽게 추가하고 제거할 수도 있습니다. 수집 분석법은 **Agilent MassHunter 농약 및 환경 오염물질 MRM 데이터베이스(P&EP 4.0)**⁵의 머무름 시간과 일치하도록 고정된 머무름 시간이며, 이는 MS 분석법을 원활하게 생성하는 데 사용되었습니다. P&EP 4.0 사용으로 표적 dMRM 분석법 설정 속도와 편의성이 증가했습니다.

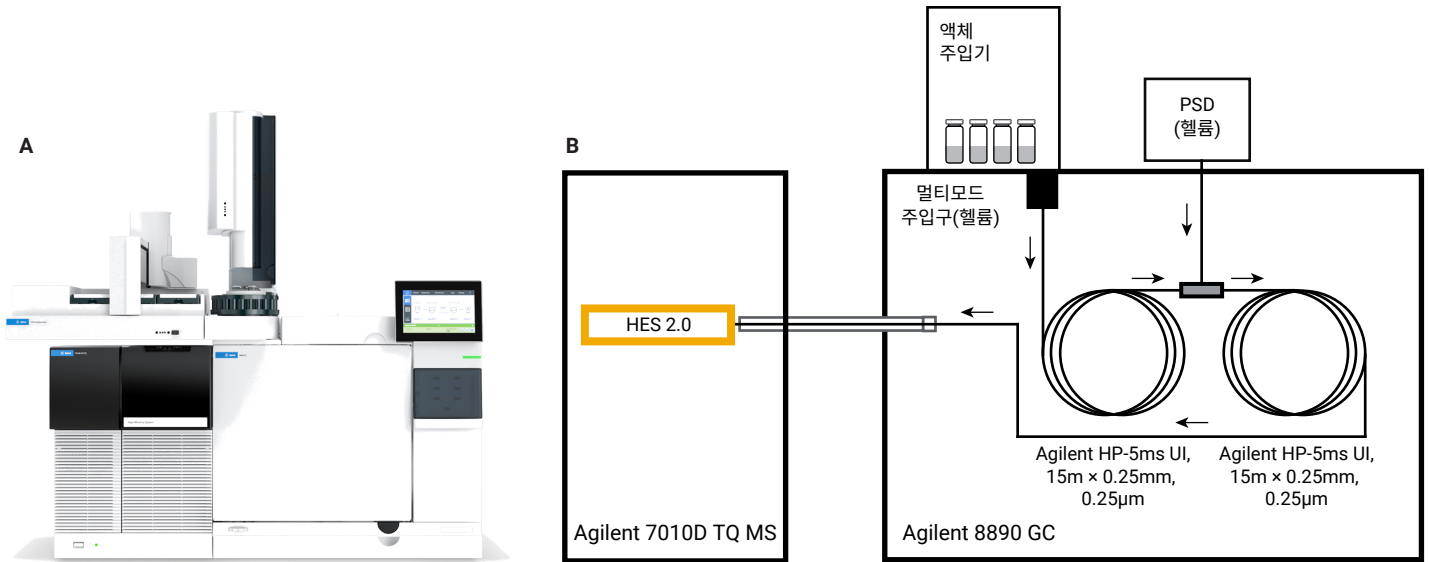


그림 1. Agilent 7010D GC/TQ 시스템을 갖춘 Agilent 8890 GC 시스템(A) 및 시스템 구성(B)

P&EP 4.0 데이터베이스의 각 화합물에 대해 사용 가능한 최대 9개의 전이 중에서 최고의 MRM 전이를 선택함으로써 동시 용출 매트릭스 성분이 있을 때 높은 분석법 선택성을 실현했습니다.

P&EP 4.0 데이터베이스에서는 세 가지 표적 물질(flonicamid, bioallethrin 및 cycloxydim)을 사용할 수 없었습니다. 이러한 화합물의 경우, '전체 스캔에서 시작' 모드에서 작동하는 GC/TQ용 Agilent MassHunter Optimizer를 사용하여 MRM 전이를 개발했습니다. 이 Optimizer는 GC/MS용 MassHunter Acquisition 13.0에 완전히 통합되어 있습니다 (그림 2).

수집 분석법은 P&EP 데이터베이스에 고정된 머무름 시간으로, chlorpyrifos-methyl 용출은 9.143분이었습니다. GC/MS용 MassHunter Acquisition 13.0에 통합된 **머무름 시간 고정** 기능은 사용자 친화적이고 직관적인 인터페이스로 업데이트되었습니다 (그림 3). 반자동 또는 수동 화합물 선택이 가능하고, 머무름 시간 고정 보정을 위해 3개 또는 5개의 포인트를 사용할 수 있으며, 검량선 피팅에 대한 시각적 및 정량적 평가 기능을 제공하는 동시에 컬럼 트리밍 후에도 뛰어난 머무름 정밀도를 유지하는 도구도 제공합니다.

매트릭스 추출물의 초기 스크리닝에 전체 스캔 데이터 수집 모드를 사용했습니다. 이 스크리닝을 사용해 소스 내 로딩을 평가하고 QuEChERS 추출 후 시료 클린업 절차의 효율성을 모니터링했습니다.

이 작업에는 GC/MS용 Agilent MassHunter Acquisition 13.0, MassHunter Quantitative Analysis 12.1 및 MassHunter Qualitative Analysis 12.0 패키지를 포함한 Agilent MassHunter Workstation 소프트웨어가 사용되었습니다.

표 1. 농약 분석을 위해 Agilent 7010D 가스 크로마토그래프 및 질량 분석기 조건을 갖춘 Agilent 8890 GC 시스템.

| 파라미터 | 값 |
|---------------|---|
| GC | 빠른 오븐, 자동 시료 주입기 및 트레이를 갖춘 Agilent 8890 |
| 주입구 | MMI |
| 모드 | 냉각 비분할 |
| 분할 배출구 퍼지 유속 | 3분에서 60mL/분 |
| 셉텀 퍼지 유속 | 3mL/분 |
| 셉텀 퍼지 유속 모드 | 전환됨 |
| 주입량 | 1.0µL |
| 주입 유형 | 역상 2단(L2, L1) |
| L1 에어 캡 | 0.2µL |
| L2 부피(ISTD) | 0.2µL |
| L2 에어 캡 | 0.2µL |
| 가스 절약 기능 | 5분 후 30mL/분에서 실행 |
| 주입구 온도 | 60°C에서 0.1분 유지, 600°C/분으로 280°C까지 승온, 5분 동안 유지, 600°C/분으로 325°C까지 승온 |
| 분석 후 주입구 온도 | 310°C |
| 분석 후 총 유속 | 25mL/분 |
| 운반 가스 | 헬륨 |
| 주입구 라이너 | Agilent Ultra Inert 2mm 딥플 라이너(품번 5190-2297) |
| 오븐 | |
| 오븐 프로그램 | 1분 동안 60°C; 40°C/분으로 170°C까지 승온; 0분 유지; 10°C/분으로 310°C까지 승온; 2.25분 유지 |
| 총 실행 시간 | 20분 |
| 분석 후 시간 | 1.5분 |
| 평형 시간 | 0.5분 |
| 컬럼 1 | |
| 유형 | Agilent HP-5ms UI, 15m × 0.25mm, 0.25µm (품번 19091S-431UI-KEY) |
| 제어 모드 | 일정 유속 |
| 유속 | 1.0mL/분(이후 머무름 시간 고정) |
| 주입구 연결 | MMI |
| 배출구 연결 | PSD(PUU) |
| PSD 퍼지 유속 | 5mL/분 |
| 분석 후 유속(백플러시) | -7.873 |

| 파라미터 | 값 |
|----------------------|---|
| 컬럼 2 | |
| 유형 | Agilent HP-5ms UI, 15m × 0.25mm, 0.25µm (품번 19091S-431UI-KEY) |
| 제어 모드 | 일정 유속 |
| 유속 | 1.2mL/분(이후 머무름 시간 고정) |
| 주입구 연결 | PSD(PUU) |
| 배출구 연결 | MSD |
| 분석 후 유속(백플러시) | 8.202 |
| MSD | |
| 모델 | Agilent 7010D |
| 소스 | HES 2.0 |
| 진공 펌프 | 고성능 터보 |
| 튠 파일 | atunes.eihs2.jtune.xml |
| 용매 지연 | 3.75분 |
| 사중극자 온도 (MS1 및 MS2) | 150°C |
| 이온화원 온도 | 280°C |
| 모드 | dMRM 또는 스캔 |
| He 퀴치 가스 | 2.25mL/분 |
| N ₂ 충돌 가스 | 1.5mL/분 |
| MRM 통계 | |
| 총 MRM(dMRM 모드) | 749 |
| 최소 측정 시간 | 5.42ms |
| 최소 주기 시간 | 85.01ms |
| 최대 동시 MRM | 64 |
| EM 전압 게인 모드 | 10 |
| 스캔 파라미터 | |
| 스캔 유형 | MS1 스캔 |
| 스캔 범위 | 45-450m/z |
| 스캔 시간(ms) | 220 |
| 단계 크기 | 0.1amu |
| 임계값 | 0 |
| EM 전압 게인 모드 | 1 |

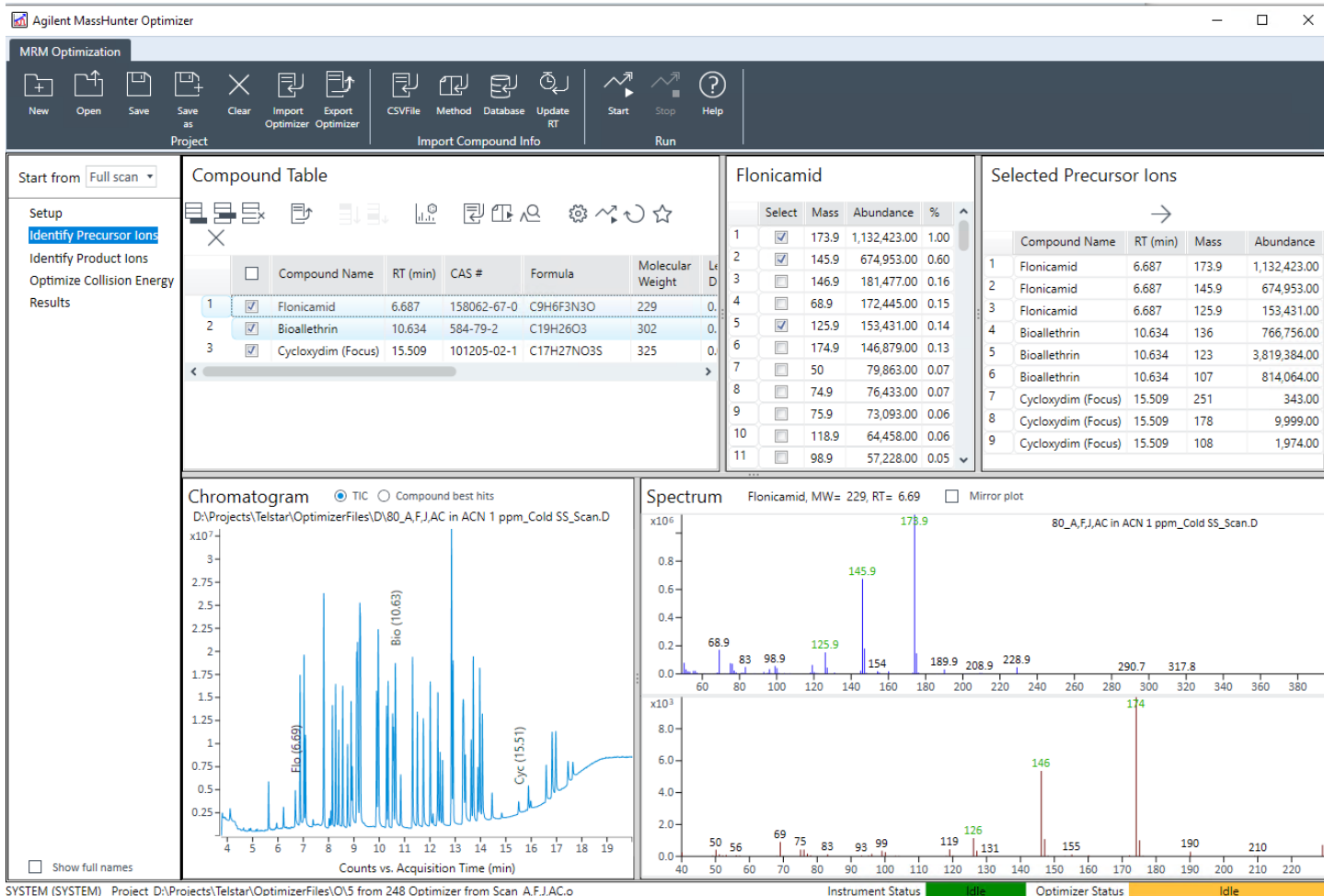


그림 2. 자동화된 MRM 전이 개발에 사용되는 GC/TQ용 Agilent MassHunter Optimizer 소프트웨어

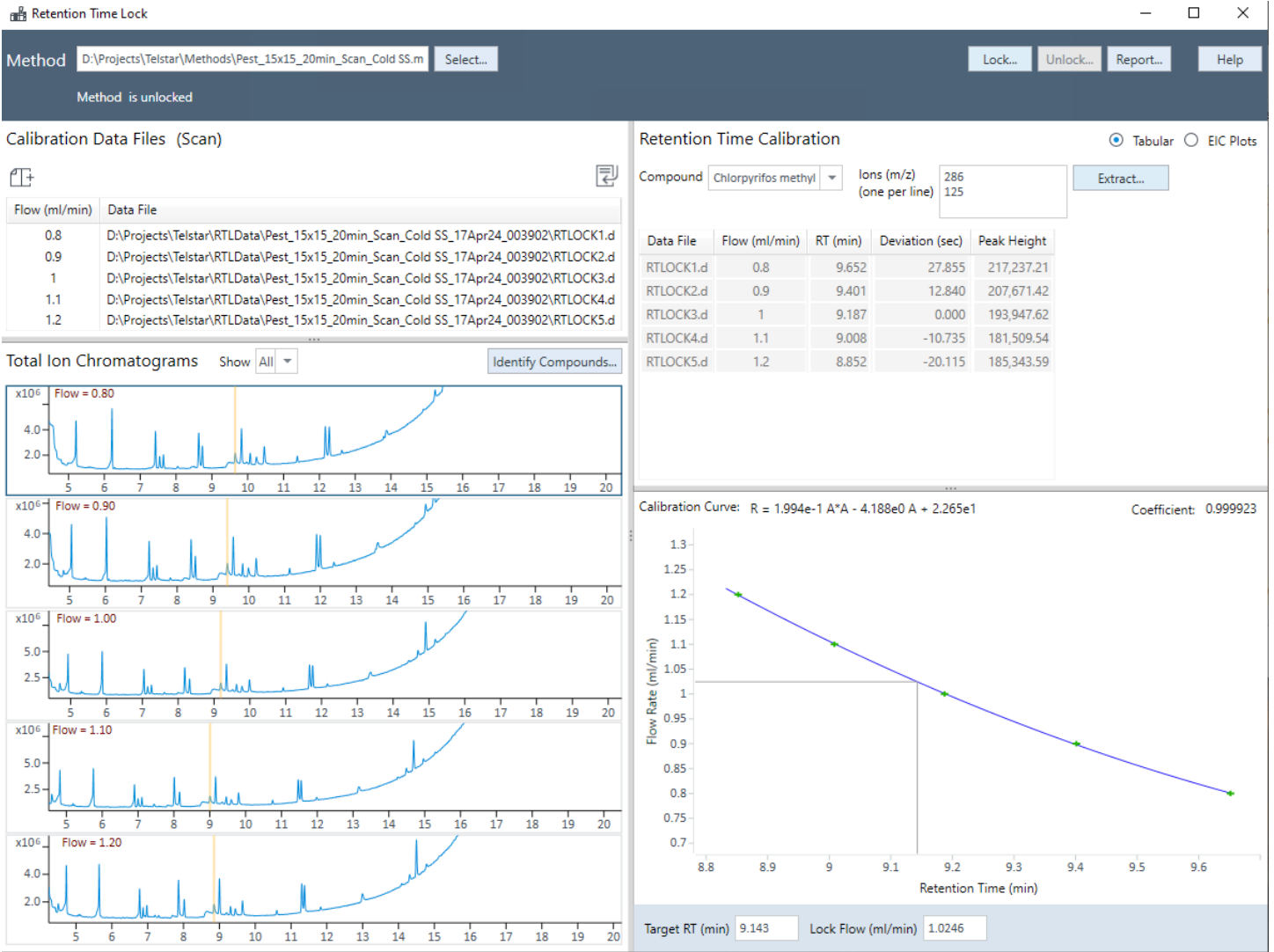


그림 3. GC/MS용 Agilent MassHunter Acquisition 13.0의 새로운 애질런트 머무를 시간 고정 소프트웨어

시료 전처리

홍차 분말은 지역 식료품점에서 구입했습니다. 2% 포름산 및 EN 추출 염을 포함하는 아세토니트릴(ACN)을 사용한 변형된 QuEChERS 추출로 홍차 분말(2g)을 추출했습니다. 이어서 추출물을 그 상태 그대로 2%의 산성 완충액과 혼합했습니다. 시료 혼합물은 Agilent Captiva EMR-GPD 6mL를 사용하여 EMR 혼합 모드 패스스루 클린업으로 세척했습니다. GC/MS/MS 분석 전 시료 용리액을 건조 MgSO₄로 건조하여 잔류물을 완전히 제거했습니다. 시료 전처리 절차 흐름도가 그림 4에 나와 있으며 자세한 내용은 별도의 응용 자료에서 확인하실 수 있습니다. 전체 시료 전처리 과정에서 희석률은 5x였습니다.

농약 표준물질

Agilent GC 농약 표준물질 1-12(부품 번호 PSM-100-A부터 L까지) 및 Agilent GC/LC 농약 표준물질 1, 2, 3(부품 번호 PSM-100-AA, PSM-100-AB, PSM-100-AC)을 매트릭스 일치 검량 표준물질을 준비하는 데 사용했습니다. 사용된 15종 표준물질을 조합하여 FDA, USDA 및 기타 전 세계 정부 기관에서 일반적으로 규제하는 246종의 농약을 혼합했습니다.

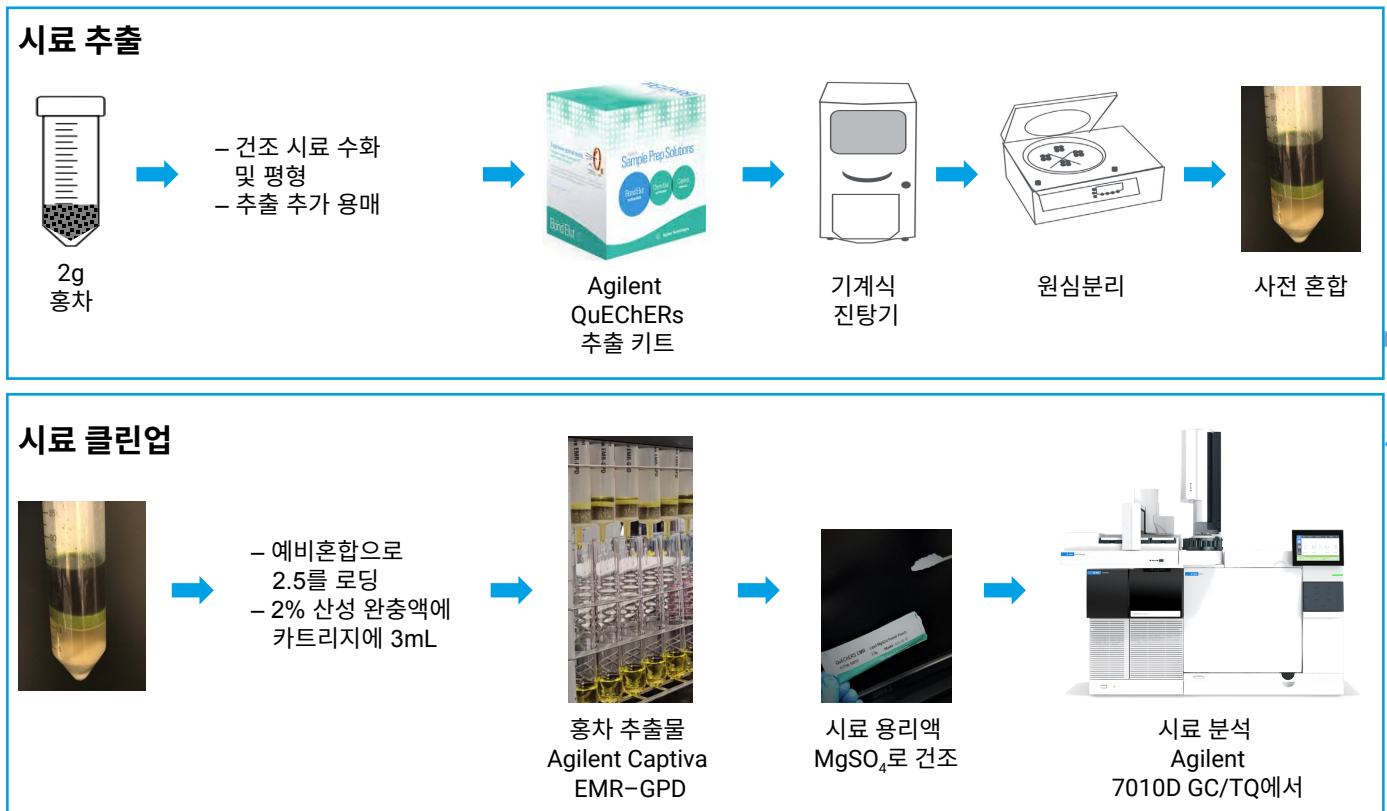


그림 4. 홍차의 QuEChERS 시료 전처리 및 클린업 분석법

매트릭스 일치 검량

0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1, 2, 5, 10, 50, 100, 200, 500 및 1,000ppb를 포함하여 0.01-1,000ppb 범위의 일련의 매트릭스 일치 검량 표준물질을 사용하여 검량 성능을 평가했습니다. 표준 parathion-d₁₀ (Agilent QuEChERS IS 표준물질 번호 6, 부품 번호 PPS-610-1)을 표적 농약 정량화를 위한 내부 표준물질로 사용했습니다. ALS를 사용한 역방향 샌드위치 주입을 통해 주입된 시료의 최종 농도가 10ppb가 되도록 0.2μL를 첨가했습니다.

상대 표준 오차(RSE)의 낮은 값에 따라 선형 또는 2차 곡선 중 적절한 검량 함수를 사용했습니다. 전체 검량 범위에서 정확도를 유지하기 위해 1/x의 가중치를 적용했습니다. 해당 영역의 검량선을 사용하여 계산된 검량 표준물질의 역산 농도와 실제 농도의 편차는 ±20%를 초과하지 않았습니다.

ppb(w:v)로 표시된 농도는 주입된 시료의 농약 농도에 해당합니다. 시료 전처리 섹션에 설명된 QuEChERS 시료 전처리 절차의 결과적인 희석 계수는 5였습니다. 따라서 주입된 시료에서 측정된 농도는 홍차 시료의 해당 농도(μg/kg로 표시)보다 5x 낮았습니다.

이 연구에서는 분석물질 보호제를 사용하지 않았습니다. 사전 조사에서는 풍부하고 복잡한 홍차 매트릭스에서 분석할 때 분석물질 보호제가 대부분의 화합물에 대해 반응을 향상시키는 효과를 나타내지 않는 것으로 나타났습니다. 동료 검토 문헌에 자세히 설명된 바와 같이 분석물질 보호제는 표적 분석물질 반응 및 안정성을 크게 향상시키는 경우가 많습니다.⁶

회수율 평가

회수율 연구를 수행하여 시료 전처리의 효율성을 평가했습니다. 대용 홍차 매트릭스를 10ppb와 50ppb의 두 가지 수준으로 첨가했으며 각 수준에서 6번 반복 실험이 이루어졌습니다. 시료를 추출하여 클린업했습니다. 100% 회수율을 가정하면 사전 스파이크된 시료의 농약 농도는 5x 희석률로 인해 2ppb와 10ppb가 될 것으로 예상되었습니다. 바탕시료 홍차 추출물에 농약 표준물질을 사후 첨가하여 최종 농도 2 및 10ppb를 얻었습니다. 사전 첨가된 시료와 사후 첨가된 시료를 분석하고 반응 영역을 비교했습니다. 회수율은 사전 첨가된 시료의 농약 피크 면적과 사후 첨가된 시료의 면적 비율로 측정되었습니다.

결과 및 토의

최신 GC/MS 기술이 계속 발전함에 따라 높은 시료 처리량, 직관적이고 사용자 친화적인 시스템 설정 및 구성, 간소화된 유지보수에 대한 기대도 높아지고 있습니다. 농약 잔류물 분석 및 식품 안전에 대한 규정이 까다로워짐에 따라 향상된 분석 성능에 대한 요구도 생성되고 있습니다.

농약 잔류물 분석에서 최고의 GC/TQ 성능을 달성하기 위한 몇 가지 모범 사례가 애질런트 응용 자료 5994-4965KO에 설명되어 있습니다.⁷ 이 연구에서는 앞서 설명한 모범 사례를 구현하고 추가적인 분석법과 기술 향상을 제공하는 동시에 홍차에 포함된 246종의 농약을 분석하기 위한 완전한 워크플로를 제시합니다. 혁신적인 HES 2.0은 복합 홍차 추출물을 800회 연속 주입하여 2ppb의 낮은 농도에서 정확한 결과를 통해 향상된 GC/TQ 성능 안정성을 입증했습니다.

높은 처리량 설정에서 안정적이고 신뢰할 수 있는 결과를 보장하는 동시에 탁월한 GC/TQ 성능을 가능하게 하는 기술 및 분석법 향상이 이 응용 자료에 설명되어 있으며, 이는 시료 전처리, GC 기기 및 소모품, MS 전자 이온화 기술 발전, 그리고 기기 인텔리전스와 소프트웨어 기능의 네 가지 범주로 분류됩니다.

효과적인 매트릭스 클린업

시료 전처리는 성공적인 농약 분석을 수행하기 위한 핵심 요소입니다. QuEChERS 추출로 준비된 시료 분석을 수행하는 경우, 특히 적절한 클린업 없이 홍차와 같은 복잡한 색소 시료를 분석하는 경우 시스템 유지보수가 늘어날 수 있습니다. 적절한 시료 클린업이 없으면 영향을 받는 시스템 부분에는 라이너 교체, GC 컬럼 트리밍, 주입구 및 MS 소스 세척 등이 포함됩니다. 결과적으로 처리량이 감소합니다. 또한, 다량의 매트릭스가 존재하면 결과의 정확성에 영향을 미칠 수 있으며, 분석하기 어려운 농약 분석에서 가장 명확하게 나타납니다. Carbon S 카트리지와 함께 Captiva EMR을 사용하는 EMR 혼합 모드 패스스루 클린업은 시료 매트릭스 제거와 표적 물질의 전반적인 회수율과 재현성에 대한 개선을 보여주는 간소화된 절차입니다. 그림 5에서 볼 수 있듯이, 전체 스캔 데이터 수집 모드에서 TIC 신호의 존재비는 클린업 전 원래 상태의 추출물과 비교할 때 클린업 후 홍차 추출물에서 눈에 띄게 감소했습니다.

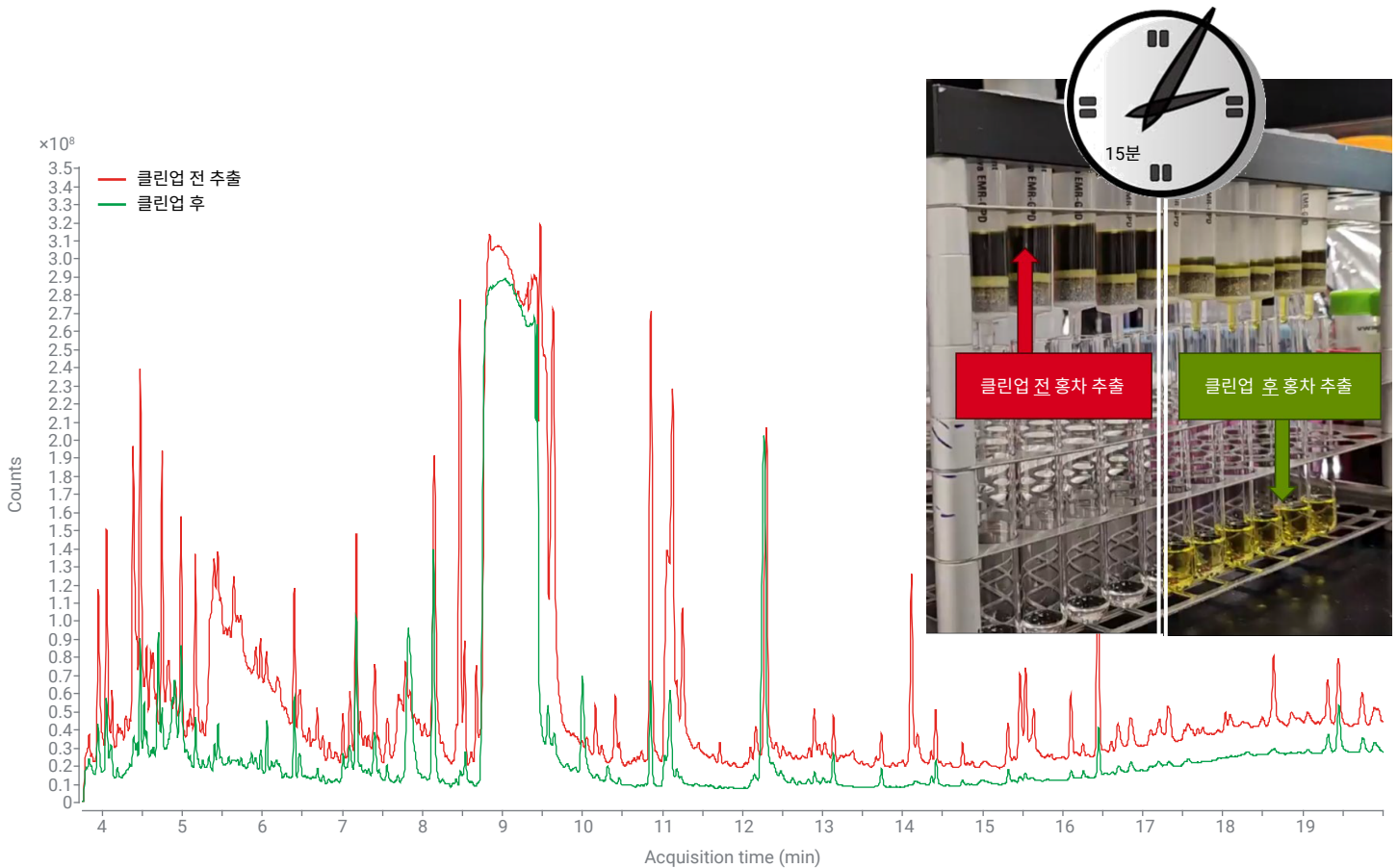


그림 5. 홍차 추출물의 스캔 TIC. 녹색 트레이스는 Agilent Captiva-EMR 클린업이 적용된 매트릭스 시료에 해당하고, 빨간색 트레이스는 클린업이 수행되지 않은 매트릭스 시료에 해당합니다

그림 5에 표시된 것처럼 전체 스캔 데이터 수집 모드에서 매트릭스 스크리닝을 수행하면 5994-4965K0에 설명된 대로 소스 내 매트릭스 로딩의 평가가 용이해집니다.⁷ 모든 MS 소스에는 최적의 성능을 유지하기 위해 어느 시점에서나 소스에 존재하는 물질의 양에 대한 제한이 있습니다. 소스에 매트릭스가 과부하되면 정량 분석의 정확도가 크게 떨어질 수도 있습니다.

따라서 TIC를 평가하고 최적의 GC/TQ 성능을 유지하기 위해 전체 스캔 모드에서 매트릭스를 분석해야 합니다. HES 2.0 소스에서 최상의 성능을 얻으려면 EM 계인을 1로 설정하여 분석할 때 TIC 전체 스캔 존재비를 7×10^7 카운트 미만으로 유지하는 것이 좋습니다. 그림 5에서 볼 수 있듯이 홍차 추출물은 풍부한 매트릭스 성분을 특징으로 하는 복합체입니다. 추출물의 클린업은 매트릭스 배경을 낮추어 소스 내 로딩을 적절하게 유지하고, 선택도와 감도를 향상시키며, 측정 범위를 넓히고, 시스템 유지보수 빈도를 줄여 생산 가동 시간을 늘리는 데 핵심입니다.

GC 기기 및 소모품

중간 컬럼 백플러시: Agilent 8890 GC는 사용하기 쉬운 중간 컬럼 백플러시 기능을 제공하여 분석 시간을 단축하고 컬럼 유지보수 빈도를 줄임으로써 시료 처리량을 높입니다.

중간 컬럼 백플러시를 사용하면 고비점 매트릭스를 MS로 용출하지 않고도 더 짧은 시간에 컬럼에서 고비점 매트릭스 성분을 용출할 수 있습니다. 중간 컬럼 백플러시는 마지막 분석물질이 컬럼에서 빠져나오고 모든 MS 데이터가 수집된 후 운반 가스 흐름을 역전시키는 기술입니다. 그 후 오븐은 분석 후 실행 모드에서 최종 온도로 유지되며, 첫 번째 컬럼의 운반 가스 흐름을 역전합니다. 고비점 물질은 컬럼 헤드에서 다시 분할 배출구 트랩으로 용출됩니다. 흐름을 역전하는 기능은 PUU에 의해 제공됩니다. 이 경우, PUU는 두 개의 동일한 15m 컬럼 사이에 삽입되는 티(tee)입니다. 분석 중 8890 PSD에서 나온 소량의 운반 가스 보충 흐름이 연결을 배출하는 데 사용됩니다. 백플러시

동안에는 PSD의 보충 가스 흐름을 매우 높은 값으로 올려, 첫 번째 컬럼은 역방향으로 고비점 물질을 스위핑하고, 동시에 두 번째 컬럼에서는 정방향으로 흐름을 제공합니다. 이 응용의 구성에서 백플러시 시간은 1.5분입니다. Agilent 8890 GC 시스템에서 백플러시에 PSD 사용에 대한 자세한 내용은 애질런트 응용 자료 5994-0550KO[®]에서 확인할 수 있습니다.

그림 6은 홍차 매트릭스의 교차 오염(Carryover) 없이 주기 시간을 줄이는 백플러시 기술의 효과를 보여줍니다. 주기 시간은 50% 감소했고 컬럼을 연장된 시간 동안 더 높은 베이크아웃 온도에 노출할 필요가 없었습니다. 백플러시를 사용하면 과도한 컬럼 블리딩을 방지하고 무거운 잔류물이 MSD에 유입되지 않으므로 이온화원 오염을 줄일 수 있습니다.

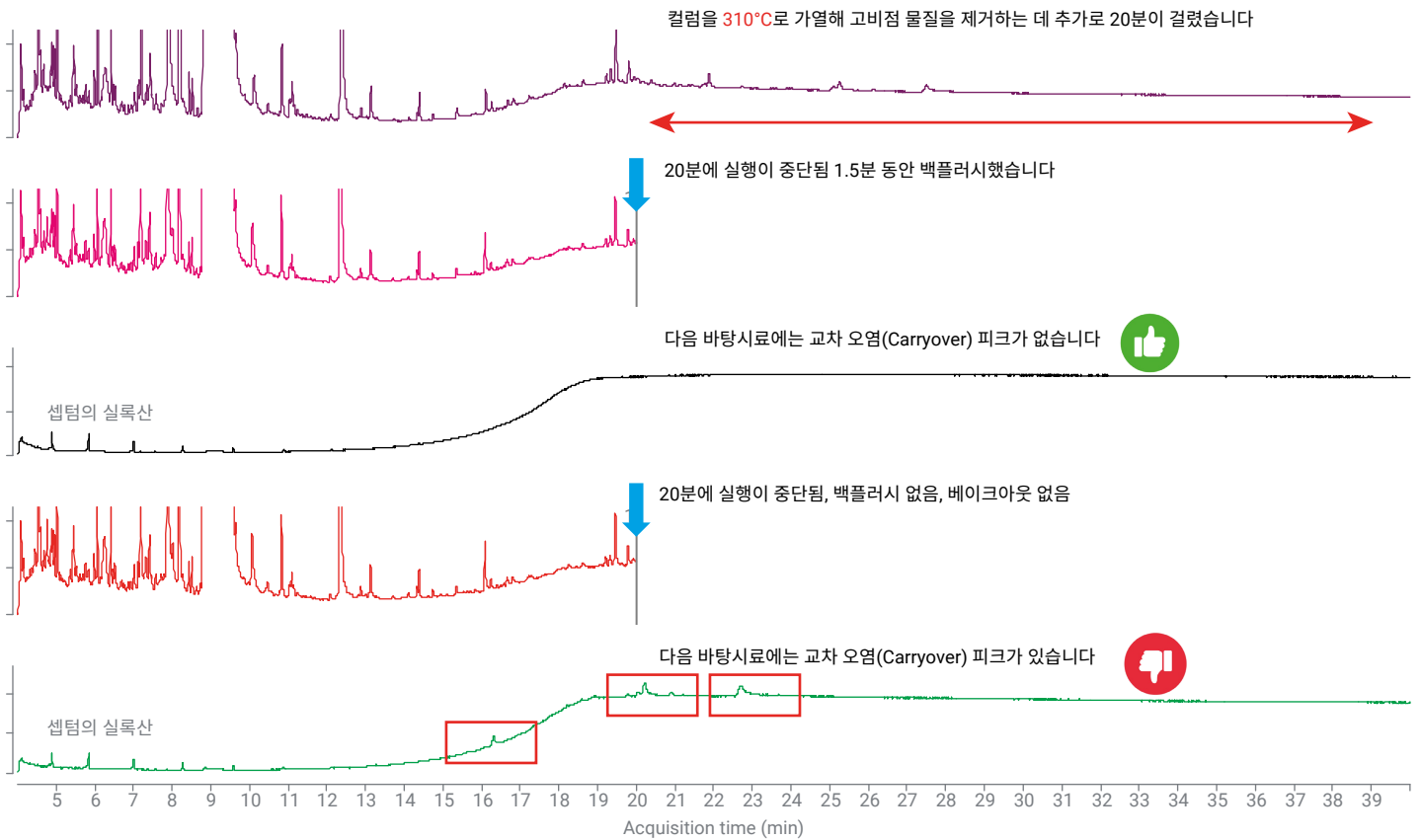


그림 6. 홍차 추출물 TIC 스캔 크로마토그램, 이후 컬럼 베이크아웃 사용, 백플러시 사용, 백플러시 또는 베이크아웃 미사용 조건에서 기기 바탕시료 분석

캐필러리 흐름 기술(CFT)을 쉽게 연결할 수 있는 새로운 도구의 도입으로 백플러시 설정 프로세스가 간소화되었습니다. 이러한 도구에는 그림 7에 나타낸 Gold-plated Flexible Metal 페룰(부품 번호 G2855-28501)과 캐필러리 흐름 기술 장치에 연성 금속 페룰을 연결하기 위한 GC 컬럼 설치 사전 스웨이징 도구(부품 번호 G3440-80227)가 포함됩니다.

또한 GC/MS용 MassHunter Acquisition 13.0은 백플러시 설정 및 검토를 위한 직관적인 가이드를 제공합니다. 그림 8은 GC/MS용 MassHunter Acquisition 13.0의 GC 분석법 편집기에 있는 백플러시 개요 탭을 보여줍니다.

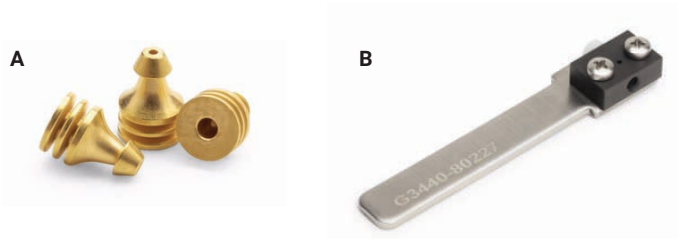


그림 7. Flexible metal 페룰(부품 번호 G2855-28501) (A) 및 캐필러리 흐름 기술 장치에 Flexible metal 페룰을 연결하기 위한 GC 컬럼 설치 사전 스웨이징 도구(부품 번호 G3440-80227) (B)

8890 GC Links
[Help & Information](#)
[Browser Interface](#)

- ▼ ALS
 - Back Injector
 - Tray / Other
- ▼ Inlets
 - SSL - Front
 - MMI - Back
- Columns
- Oven
- Detectors
- Aux Heaters
- Events
- Signals
- ▼ GC Performance
 - Blank Evaluation
 - Detector Evaluation
- ▼ Configuration
 - Miscellaneous
 - Columns
 - Modules
 - ALS
- ▼ Backflush
 - Summary**
 - Post Run - Back
 - Readiness
 - GC Calculators

Back Inlet Flowpath

Backflush Techniques

Post-Column Backflush

Post-Column Details

| | |
|---------------------------|-----------|
| Backflush Start Time: | 20.00 min |
| Postrun Duration: | 1.50 min |
| Oven Temperature: | 310 °C |
| Restrictor Temperature: | 310 °C |
| Void Volumes Backflushed: | 10.0 |

Inlet Pressure
 2 psi

Column Flow
 -9.690 mL/min

Aux Pressure
 67.779 psi

Column Flow
 10.104 mL/min

Detector Pressure
 MSD

그림 8. GC/MS용 Agilent MassHunter Acquisition 13.0의 백플러시 요약

GC 주입 최적화: GC 주입구에서 시료를 효과적으로 휘발하는 것은 성공적인 GC/MS 분석에 매우 중요한 부분입니다. 다양한 시료 도입 기술은 열에 민감하고 활성적인 화합물을 보존하는 것을 목표로 합니다. 이 연구에서는 냉각 비분할 및 용매 배출 주입 모드를 평가했습니다.

그림 9의 왼쪽에 표시된 것처럼 홍차 추출물 분석에 용매 배출 모드를 사용하면 후속 분석에서 매우 많은 양의 카페인이 교차 오염(Carryover)되는 결과로 이어졌습니다. 카페인 교차 오염(carryover)을 줄이기 위해 냉각 비분할 주입 모드가 사용되었습니다(그림 9, 오른쪽). 비분할 퍼지 시간을 3분으로 늘린 결과, 표적 물질의 크로마토그래피 피크 모양을 저하시키지 않으면서 분석법 감도가 향상되었습니다.

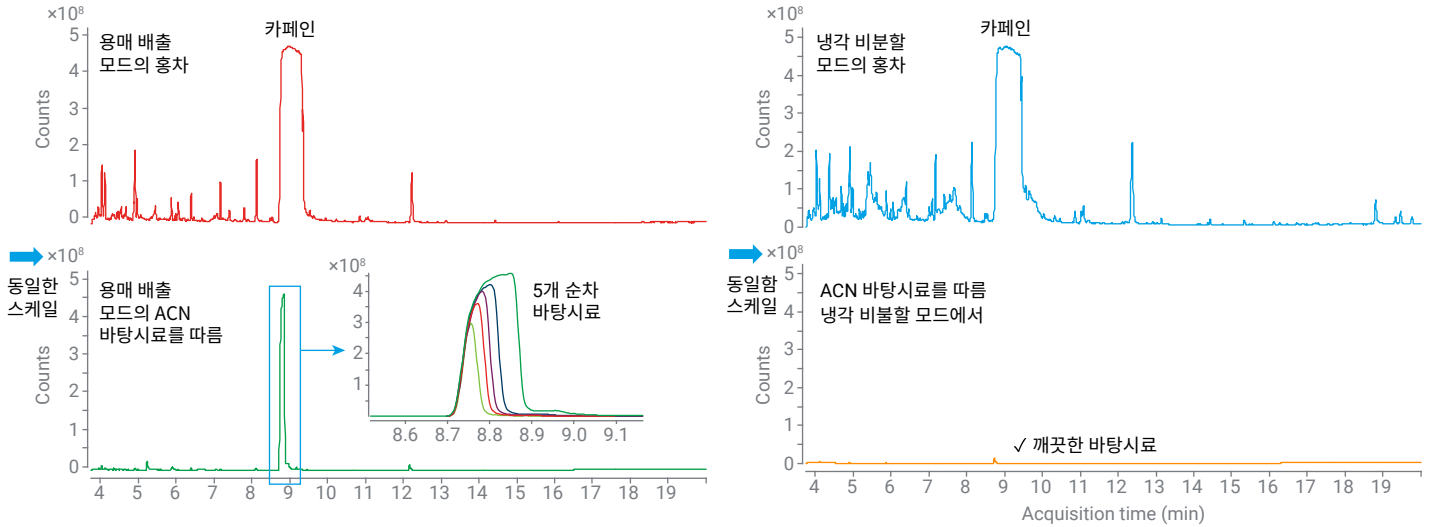


그림 9. 홍차 분석을 위한 주입 최적화: 냉각 비분할(오른쪽)은 용매 배출 모드(왼쪽)에 비해 카페인의 교차 오염(carryover)을 줄입니다

HES 2.0: 새로운 전자 이온화(EI) 소스 기술

새로운 HES 2.0 EI 소스를 탑재한 7010D는 농약을 분석할 때 극미량 수준의 검출이 가능한 감도를 입증했습니다. 새로운 HES 2.0 이온화원에는 운반 가스 이온의 방향을 바꾸는 새로운 쌍극 무선 주파수(RF) 렌즈가 장착되어 있어 시스템 견고성이 향상되고 우수한 분석 감도가 유지됩니다.

그림 10은 홍차 추출물에 포함된 0.01ppb 농도의 선택된 농약에 대한 MRM 크로마토그램을 보여줍니다. 중첩된 크로마토그램은 7회 반복 주입에 대한 재현성을 보여주며 반응 RSD%는 정밀도의 척도로 사용됩니다. 부록 표 1은 분석된 모든 농약에 대한 LOQ를 보여줍니다. 34%의 표적 물질에서 0.01ppb의 낮은 LOQ가 관찰되었고, 74%의 화합물에서 0.1ppb 미만, 96%에서 2ppb 미만이 관찰되었습니다. 퍼센트로 표현된 화합물의 수와 해당 LOQ가 그림 11에 나와 있습니다.

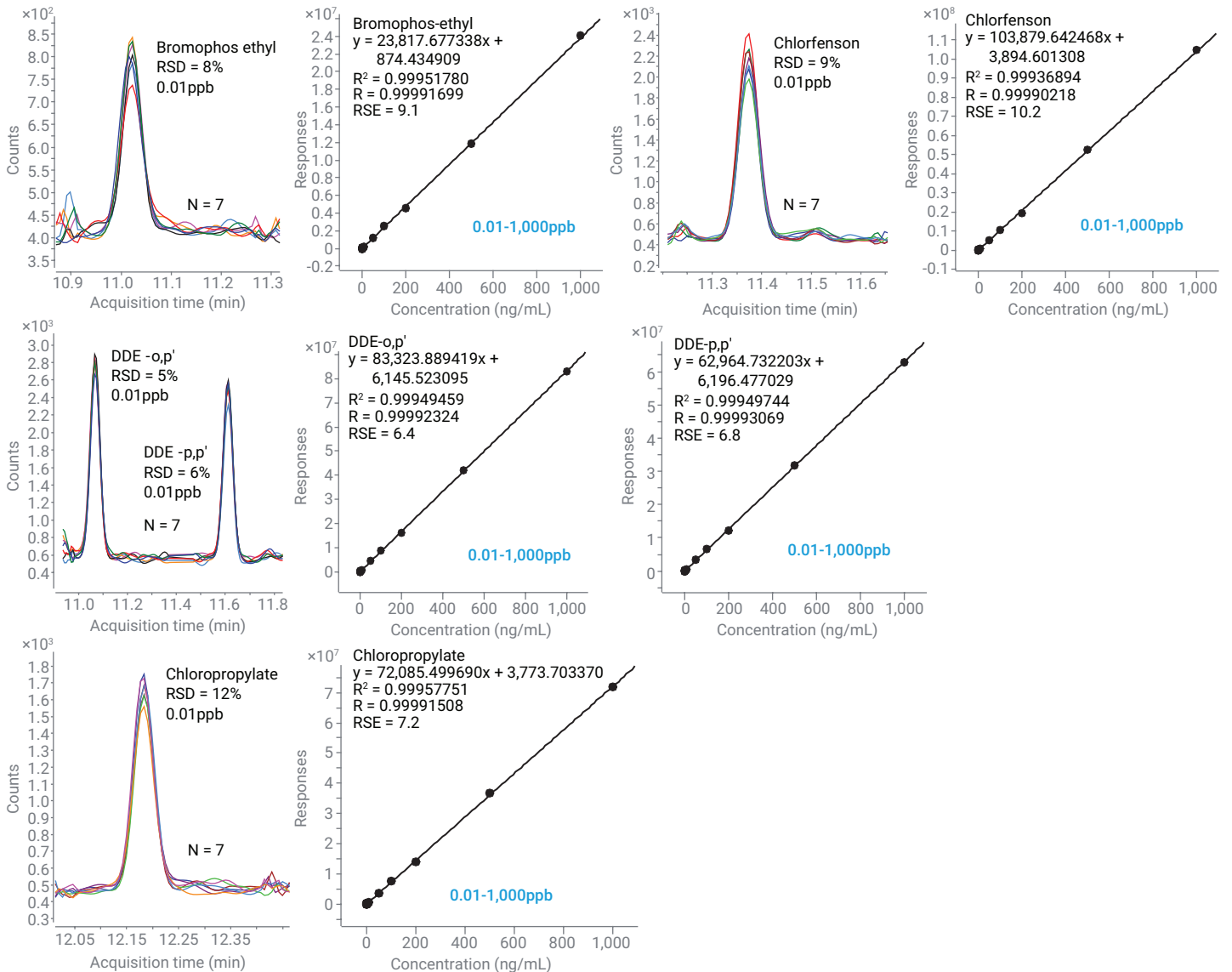


그림 10. 홍차 추출물의 LOQ 0.01ppb에서 선택된 농약에 대해 7번 반복 주입한 MRM 크로마토그램과 검량선

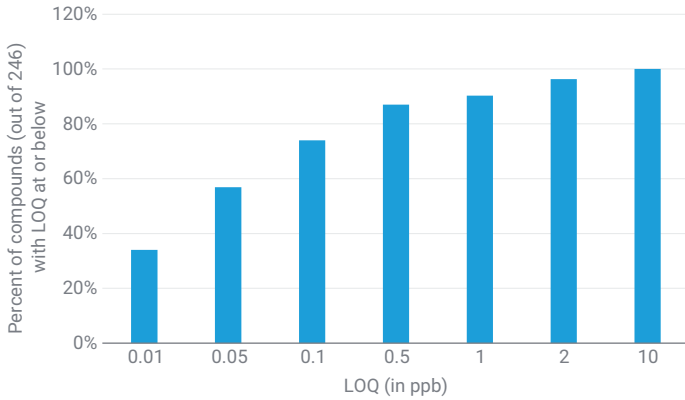


그림 11. 홍차 추출물에서 각각의 LOQ 수준(ppb)과 함께 나타낸 화합물의 백분율

그림 10은 또한 0.01-1,000ppb 범위의 5차수 크기 이상으로 뛰어난 직선성이 유지되는 홍차 추출물의 매트릭스 일치 검량 성능을 보여줍니다. 모든 검량선을 검사하고 필요한 경우 SANTE 11312/2021 지침을 준수하기 위해 트리밍했습니다.² 부록 표 1은 모든 화합물에 대한 검량 범위 및 검량 품질에 대한 정보를 제공합니다. 모든 표적 물질에 대한 R^2 상관 계수는 > 0.99 였습니다. RSE는 검량선 품질을 입증하기 위한 추가 기준으로 사용되었습니다. RSE는 모든 곡선 피팅 유형의 평가에서 일관되므로 검량선 평가를 위한 향상된 기준을 제공합니다.⁹ 이 연구에서 모든 화합물의 검량선은 RSE 값이 20 미만이었습니다.

2차 검량 피팅이 사용된 화합물의 경우, 검량 범위를 좁히는 대신 선형 검량선 피팅을 대신 사용할 수 있습니다. 예를 들어, oxyfluorfen은 $R^2 = 0.9995$ 및 $RSE = 14$ 의 2차 검량 피팅을 사용하여 0.01-1,000ppb 5차수 크기 이상으로 검량할 수 있습니다. 또는 $R^2 = 0.9960$ 및 $RSE = 26$ 의 0.01-500ppb 검량 범위에서 선형 검량 피팅을 적용할 수 있습니다. 검량선 피팅은 낮은 RSE 값에 따라 결정되었습니다.

일부 농약은 분석에 특별한 어려움을 초래하는 것으로 알려져 있습니다. EURL 분석 관찰 보고서¹⁰에 명시된 바와 같이 captan과 folpet은 LC/TQ에서 잘 분석되지 않고 용액과 GC 주입구 모두에서 분해되는 경향이 있기 때문에 분석하기가 가장 까다로운 농약 중 하나입니다. 그림 12는 captan과 folpet이 각각 2ppb와 0.5ppb의 낮은 LOQ에서 매우 정확하게 정량화될 수 있음을 보여줍니다. 새로 희석된 표준물질, 산성화된 시료 추출물, 그리고 냉각 비분할 주입을 통한 최적화된 주입 조건은 captan 및 folpet 분석에서 높은 회수율과 정밀도를 얻는 데 주요 요소입니다. 합성 피레스로이드인 Deltamethrin은 크로마토그래피 실행이 끝날 때 용출되며 GC/MS 분석에도 어려운 것으로 알려져 있습니다.¹¹ 그림 12에 표시된 것처럼 개발된 분석법을 사용하면 Deltamethrin을 0.5ppb까지 안정적으로 정량할 수 있습니다. 그림 12에 표시된 다른 화합물에는 유기염소 농약인 aldrin, dieldrin 및 endrin과 가장 널리 사용되는 두 가지 다목적 피레스로이드인 cypermethrin과 cyfluthrin이 포함되며, 넓은 측정 범위에 걸쳐 매우 정밀하고 뛰어난 직선성으로 정량됩니다.

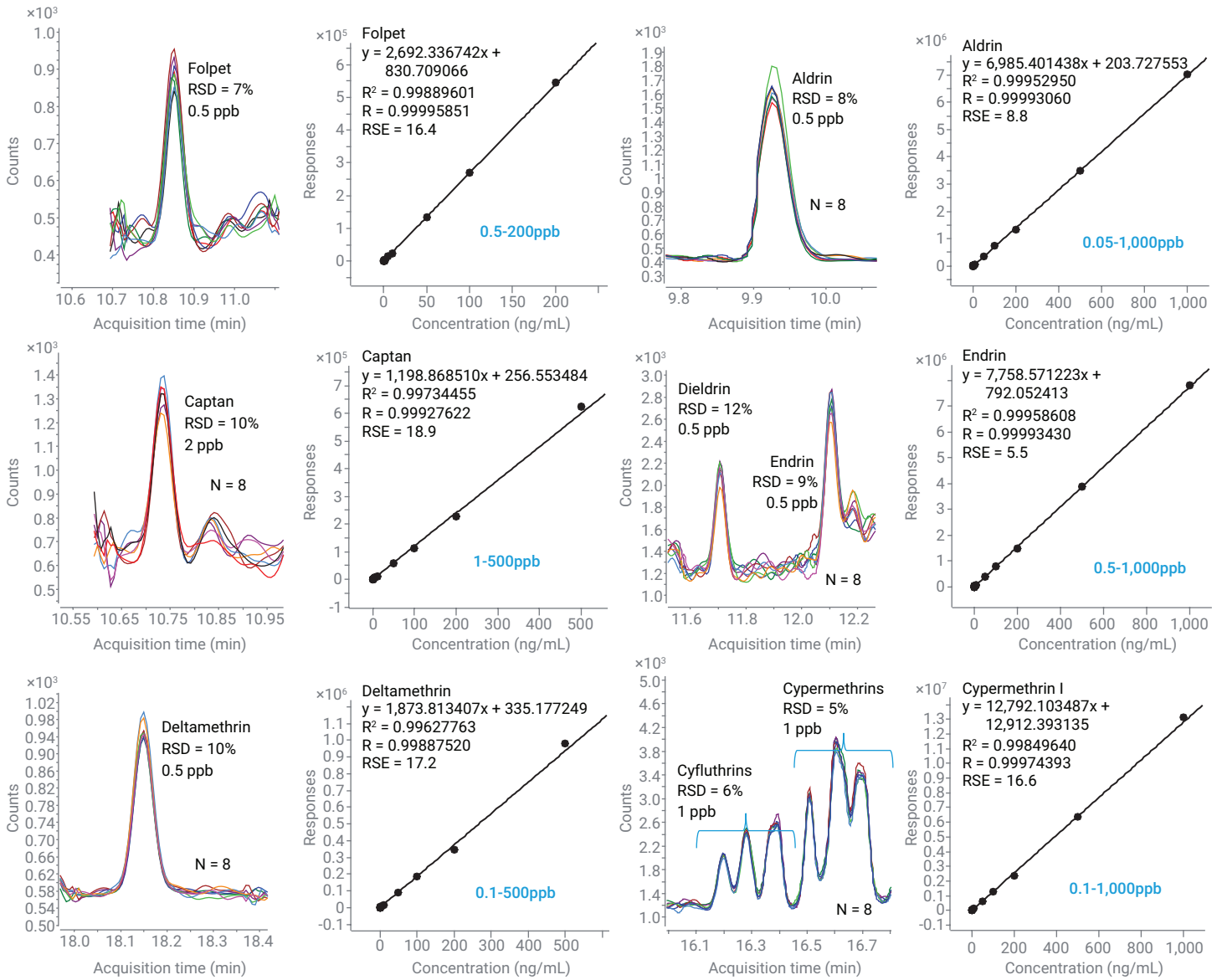


그림 12. 선별된 까다로운 농약에 대해 8회 반복 주입에서 얻은 MRM 크로마토그램. LOQ 수준과 해당 검량선이 포함되어 있습니다

회수율 및 정밀도

전체 워크플로 솔루션을 검증하고 향상된 매트릭스 클린업이 농약 회수율에 부정적인 영향을 미치지 않도록 하기 위해 회수율 및 정밀도 평가를 목표로 하는 연구가 수행되었습니다. 이 연구를 위해 건조 홍차에서 두 가지 농도(10 및 50ng/g)가 선택되었으며, 5x 희석률로 인해 최종 추출물에서 2ppb와 10ppb가 얻어졌습니다. 그림 13은 홍차에서 10 및 50ng/g의 목표 결과로, 평면형 및 불안정성 등 흔히 문제가 되는 농약에 대해서도 대부분의 농약에 대해 허용 가능한 회수율이 얻어졌음을 보여줍니다.

확실한 지속성 연장 및 처리량 극대화

2ppb의 농약을 첨가한 까다로운 홍차 추출물을 분석하여 분석의 견고성을 입증했습니다. 분석물질 영역을 800회 연속 주입을 통해 모니터링하였습니다. 내부 표준물질(ISTD)로 정규화한 분석물질 반응은 400시간 이상의 연속 실행에 걸쳐 800회 주입에서 일관되게 유지되었고, 176개 화합물에 대한 RSD는 20% 미만이었습니다. 그림 14는 ISTD와 각 분석물질의 평균 반응으로 정규화한 60개 화합물에 대한 반응을 보여줍니다.

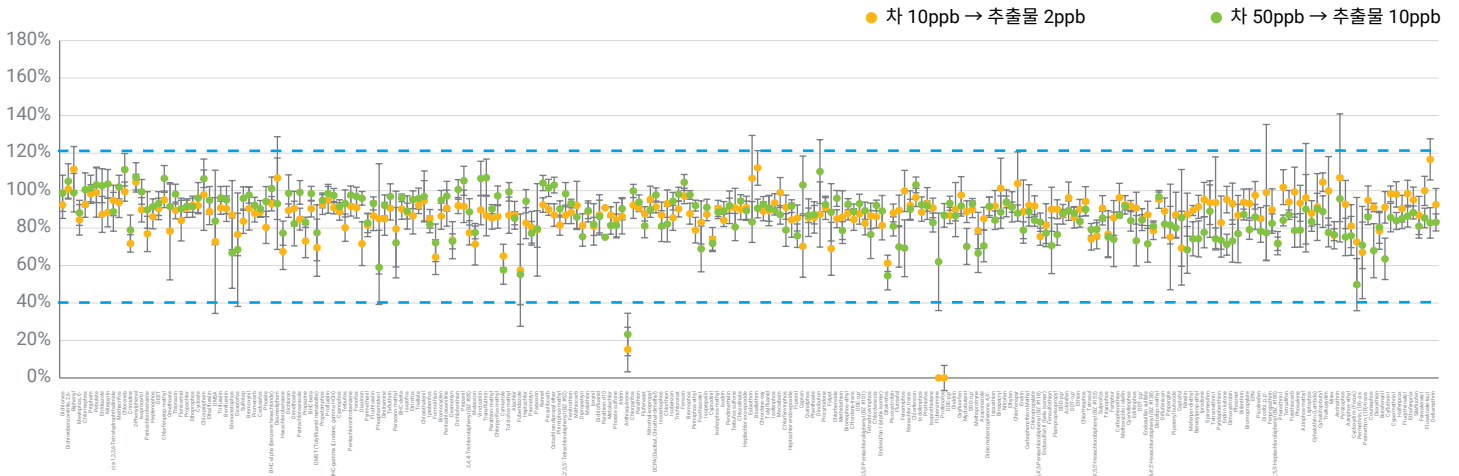


그림 13. 모든 244개 농약에 대해 10 및 50ppb에서 홍차의 농약 회수율이 표시됩니다

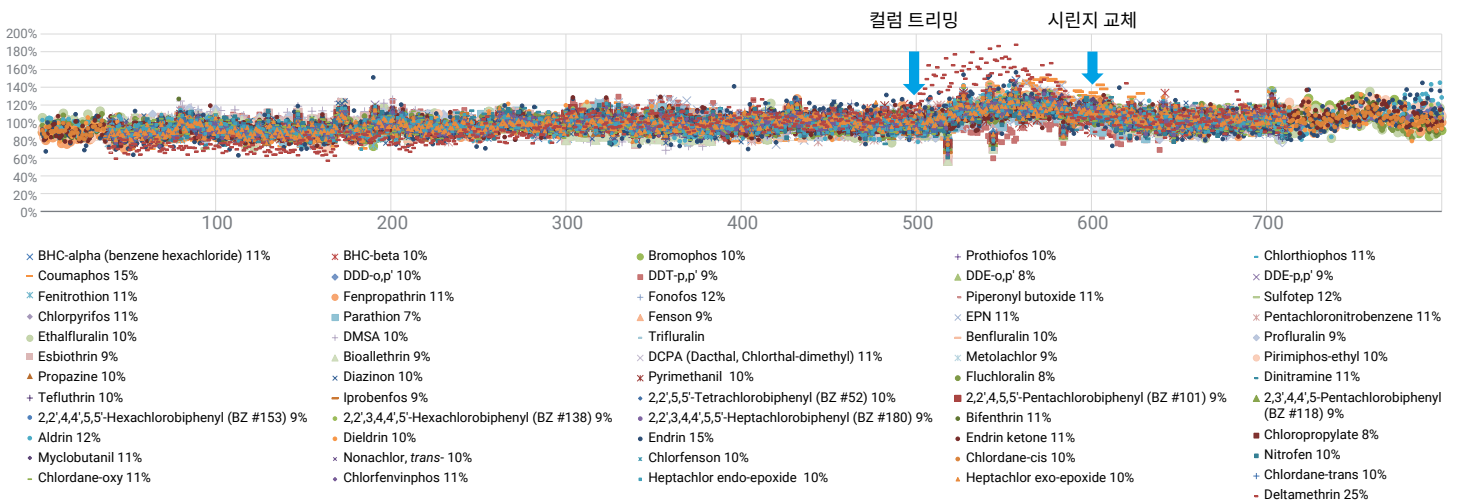


그림 14. Agilent 8890 GC 및 7010D GC/TQ 시스템을 사용한 800회 연속 주입에서 ISTD와 평균 반응으로 정규화했을 때 홍차 추출물에 2ppb로 첨가된 농약의 피크 면적 안정성

이 그래프는 17일 연속 분석 기간 동안 분석물질 반응이 안정적이고 80-120% 이내임을 보여줍니다. 각 표적 물질 반응에 대한 RSD는 그림 14의 범례에 표시되어 있으며 대부분은 12% 미만입니다. 피크 면적에 대한 절대 반응도 지속성 연구 전반에 걸쳐 일관되게 유지되었습니다. 예를 들어, 조기 용출 BHC-beta, 중간 범위 용출 fenon, 후기 용출 coumaphos에 대한 800회 주입에서 피크 면적에 대한 RSD는 각각 9%, 10%, 16%였습니다.

견고성 테스트 과정에서 수행한 유지보수는 매 100회 주입당 셉텀과 라이너 교체였습니다. 중간 컬럼 백플러시 구성과 온도 프로그래밍된 MMI 주입구를 사용하면 주입구 라이너와 셉텀 교체를 4분 이내에 수행할 수 있어 워크플로의 생산성이 향상됩니다.

500회 주입 후 2인치 GC 컬럼 헤드를 트리밍했습니다. 복잡한 홍차 추출물을 분석할 때 백플러싱을 사용하면 컬럼 헤드 유지보수까지의 주입 횟수를 상당히 늘릴 수 있었습니다. GC 주입구 유지보수와 유사하게 컬럼 트리밍을 짧은 시간(5-10분) 내에 효율적으로 수행할 수 있었고 온도 프로그래밍된 MMI와 결합된 중간 컬럼 구성으로 인해 MS 냉각 및 배출이 필요하지 않았습니다.

그림 14에 표시된 대로 지속성 연구에서 자동 주입기 시린지는 600회 주입 후 교체했으며, 이 시린지로 총 1,000회 주입이 이루어졌습니다. 표적 및 ISTD 반응의 높은 변동성으로 인해 측정 정밀도가 감소하면 시린지를 교체합니다. 교체 절차는 7693A ALS 사용자 설명서의 지침에 따라 수행되었습니다.¹² 시린지 교체 후 측정 정밀도가 회복되었습니다. 결과적으로, 그림 14의 그래프는 500회와 600회 주입 사이에서 반응 변동성이 증가한 것을 보여줍니다. 이 효과는 deltamethrin에서 특히 명확하게 나타나는데, 이로 인해 낮은 농도에서 우수한 정밀도를 얻기가 어려울 수 있습니다. 시린지 니들 지지대 세척은 교차 오염(carryover)을 최소화하고 정밀도를 보장하기 위해 까다로운 시료를 분석할 때 고려해야 할 추가적인 자동 주입기 유지보수 절차입니다.

검량 평가, 정밀도 및 회수율 연구를 포함하여 1,000회 주입에 걸친 전체 연구 기간 동안 GC 주입구 또는 MS 소스 세척을 수행할 필요가 없습니다.

이 연구에서 확인된 우수한 분석법 견고성은 다음을 통해 실현될 수 있었습니다.

- 이 응용 자료와 다른 응용 자료에 설명된 성공적인 농약 분석 방식을 따름⁷
- 효과적인 시료 전처리 및 클린업 수행
- 8890 및 7010D GC/TQ 시스템에서 첨단 GC 및 MS 기술 사용

GC/TQ 인텔리전스 및 새로운 소프트웨어 기능

GC/MS용 MassHunter Acquisition 13.0의 조기 유지보수 피드백 기능을 사용하여 지속성 연구 내내 GC/TQ 시스템의 상태를 지속적으로 모니터링했습니다. 그림 15A는 마지막 조정 시 전자 증배기(EM) 전압, 필라멘트 지속성, 펌프 유지보수 일정 및 소스 세척 후 시간 등이 포함되어 있는 MS 상태 스크린샷을 보여줍니다. 이 대시보드를 통해 필수 유지보수 절차를 신속하게 추적할 수 있으며 사용자에게 적시에 유지보수를 수행할 수 있습니다. 대시보드 보기 외에도 7010D GC/TQ 시스템에 내장된 지능형 기능을 통해 시간 경과에 따른 조정 관련 파라미터를 표시하여 티 소스 상태와 성능을 추적할 수 있습니다. EM 전압에 대한 플롯이 그림 15B에 나와 있습니다. 키워드를 통해 시퀀스 테이블에 구축할 수 있는 일상적인 튜닝 확인 절차는 EM 게인 곡선을 업데이트해야 하는 시기를 안내하는 데 도움이 됩니다. 이 절차를 통해 EM 전압을 조정하여 안정적인 반응을 유지하면서 조정 파라미터와 이온 비율을 변경하지 않고 MS 튜닝과 분석법 검량 유효성을 유지할 수 있습니다.

A

The screenshot shows the 'Early Maintenance' window in the Instrument Control software. The 'Mass Spec' component is selected, and its feedback counters are displayed. The 'EMV at last tune' is 1288.2 volts. Other counters include Filament 1 change, Filament 2 change, Pump maintenance, and Time since source cleaned, all showing 2 weeks and 6 days remaining. The interface includes buttons for 'Add User Defined Counter', 'Hide selected counters on this page', 'Show all hidden counters', 'Print', and 'Options'.

B

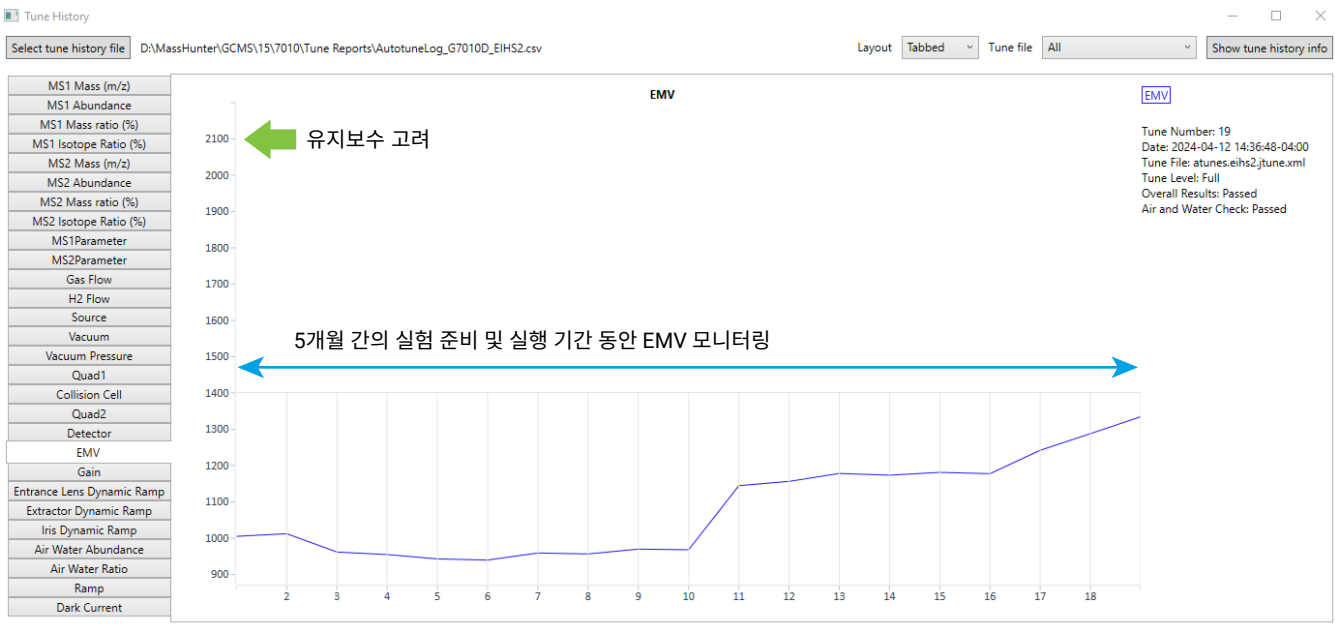


그림 15. GC/MS용 Agilent MassHunter Acquisition 13.0에 표시된 GC/TQ에 대한 초기 유지보수 대시보드(A) 및 조정 내역에 대한 EM 전압 플롯(B)

결론

이 응용 자료에서는 새로운 7010D GC/TQ를 사용하여 홍차의 농약을 분석하기 위한 워크플로 솔루션을 제시했습니다. 이를 통해 표적 물질의 34%에 대해 0.01ppb, 화합물의 74%에 대해 0.1ppb 미만, 96%에 대해 2ppb 미만의 낮은 LOQ로 미량 수준에서 246종의 농약 잔류물을 정량할 수 있었습니다. 매트릭스 일치 검량을 통해 복잡한 홍차 추출물의 0.01-1,000ppb 범위에 걸쳐 최대 5차수까지 넓은 측정 범위에서 탁월한 정확도를 얻을 수 있었습니다. 2ppb로 첨가된 홍차 추출물에 대해 17일간 800회 연속 분석에 걸쳐 순차적으로 분석하면서 측정 정확도를 우수한 정밀도(176개 화합물에 대해 RSD < 20%)로 유지함으로써 분석법의 견고성이 입증되었습니다. 강력한 워크플로를 위한 주요 구성 요소에는 효율적인 시료 전처리와 클린업, Agilent 8890 GC 하드웨어, 기능 및 GC 소모품, HES 2.0을 갖춘 새로운 TI 소스 기술, 그리고 마지막으로 내장된 GC/TQ 인텔리전스 및 새로운 소프트웨어 기능이 포함됩니다.

참고 문헌

1. Mehri, A.; Taleb, R.; Elaridi, J.; Hassan, H. F. Analytical Methods Used to Determine Pesticide Residues in Tea: A Systematic Review. *Appl. Food Res.* **2022**, *2(1)*, 100131.
2. Analytical Quality Control and Method Validation Procedures for Pesticide Residues Analysis in Food and Feed. SANTE 11312/2021, **2021**.
3. Tolerances and Exemptions for Pesticide Chemical Residues in Food. Title 40 U.S. Code of Federal Regulations, US EPA.
4. Lozano, A.; Rajska, L.; Belmonte-Valles N.; Uclés, A.; Uclés, S.; Mezcuca, M.; Fernández-Alba, A. Pesticide Analysis in Teas and Chamomile by Liquid Chromatography and Gas Chromatography Tandem Mass Spectrometry Using a Modified QuEChERS Method: Validation and Pilot Survey in Real Samples. *J. Chrom. A* **2012**, *1268*, 109-122.
5. Agilent MassHunter 농약 및 환경 오염물질 MRM 데이터베이스(P&EP 4.0). G9250AA. <https://www.agilent.com/ko-kr/product/gas-chromatography-mass-spectrometry-gc-ms/gc-ms-application-solutions/pesticides-environmental-pollutants-4-0-mrm-database>
6. Maštovská, K.; Lehotay, S. J.; Anastassiades, M. Combination of Analyte Protectants to Overcome Matrix Effects in Routine GC Analysis of Pesticide Residues in Food Matrixes. *Anal. Chem.* **2005**, *77*, 8129–8137
7. GC/MS/MS로 까다로운 식품 매트릭스 속 200여 개의 농약 성분을 분석할 때 최고의 성능을 발휘하기 위한 5가지 중요 사항. *Agilent Technologies 응용 자료* 5994-4965KO, **2022**.
8. Agilent 8890 GC 시스템에서 백플러시를 위한 PSD 이용. *Agilent Technologies 응용 자료*, 발행 번호 5994 0550KO, **2018**.
9. Burrows, R. Parr, R. Evaluating the Goodness of Instrument Calibration for Chromatography Procedures. *LCGC Supplements Special Issues* **2020** 11-01-20, *38(11)*, 35–38.
10. EURL-SRM – Analytical Observation Report. Quantification of Residues of Folpet and Captan in QuEChERS Extracts Version 3.1 (last update: 06.04.17).
11. Kim, L.; Baek, S.; Son, K.; Kim, E.; Noh, H. H.; Kim, D.; Oh, M.; Moon, B.; Ro, J.-H. Optimization of a Simplified and Effective Analytical Method of Pesticide Residues in Mealworms (*Tenebrio molitor* Larvae) Combined with GC–MS/MS and LC–MS/MS. *Mol.* **2020**, *25(15)*, 3518.
12. Agilent 7693A 자동 액체 시료 주입기. 설치, 작동 및 유지보수. *Agilent Technologies*, **2023**.

부록 표 1. Agilent High-Efficiency Source(HES) 2.0이 장착된 Agilent 7010D GC/TQ를 사용하여 흉차에 들어 있는 246종 농약에 대해 얻은 검량 성능.

| 명칭 | RT | 전이 | 검량 범위(ppb) | | | CF | CF R ² | 상대 표준 오차 |
|-----------------------------------|-------|---------------|------------|---|-------|----|-------------------|----------|
| Methamidophos | 4.520 | 141.0 → 64.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 7.5 |
| Dichlorvos | 4.643 | 184.9 → 93.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9988 | 11.2 |
| Dichlorobenzonitrile, 2,6- | 5.210 | 171.0 → 100.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9990 | 10.4 |
| Biphenyl | 5.390 | 154.1 → 153.1 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9991 | 11.8 |
| Mevinphos, E- | 5.578 | 127.0 → 94.9 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 7.9 |
| Acephate | 5.679 | 136.0 → 94.0 | 5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9990 | 8.1 |
| Chlormephos | 5.687 | 153.9 → 121.1 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9979 | 5.0 |
| Propham | 5.740 | 178.9 → 137.1 | 1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 9.6 |
| Pebulate | 5.774 | 128.0 → 57.1 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9983 | 6.6 |
| Etridiazole | 5.798 | 213.1 → 185.0 | 0.1 | - | 500 | 선형 | 0.9986 | 10.7 |
| Nitrapyrin | 5.804 | 194.0 → 158.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9994 | 8.7 |
| cis-1,2,3,6-Tetrahydrophthalimide | 5.956 | 151.1 → 80.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 6.1 |
| Methacrifos | 6.027 | 207.9 → 180.1 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 11.4 |
| Chloroneb | 6.110 | 191.0 → 113.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 8.2 |
| Crimidine | 6.212 | 170.9 → 142.1 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 10.4 |
| 2-Phenylphenol | 6.213 | 169.1 → 115.1 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 5.6 |
| Isoprocab I | 6.295 | 136.0 → 121.1 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 9.3 |
| Pentachlorobenzene | 6.311 | 251.9 → 217.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9984 | 11.4 |
| Heptenophos | 6.585 | 124.0 → 89.0 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9990 | 12.5 |
| DEET | 6.600 | 191.0 → 190.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9981 | 11.5 |
| Chlorfenprop-methyl | 6.696 | 165.0 → 102.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9989 | 14.0 |
| Omethoate | 6.773 | 110.0 → 47.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 8.8 |
| Thionazin | 6.781 | 143.0 → 79.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 9.5 |
| Flonicamid | 6.859 | 173.9 → 68.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 11.5 |
| Propachlor | 6.865 | 176.1 → 57.1 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 8.5 |
| Ethoprophos | 6.996 | 157.9 → 97.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 8.2 |
| Cycloate | 7.017 | 154.1 → 83.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9991 | 16.2 |
| Chlorpropham | 7.080 | 171.0 → 127.1 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9993 | 13.7 |
| Ethalfuralin | 7.109 | 275.9 → 202.1 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 11.4 |
| DMSA | 7.169 | 200.0 → 108.0 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9963 | 17.5 |
| Trifluralin | 7.217 | 306.1 → 264.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 11.8 |
| Benfluralin | 7.251 | 292.0 → 264.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 12.0 |
| Monocrotophos | 7.258 | 192.0 → 127.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 7.4 |
| Dicrotofos | 7.264 | 193.0 → 127.1 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 10.1 |
| Sulfotep | 7.349 | 321.8 → 201.9 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 10.4 |
| Bromoxnyl | 7.395 | 276.8 → 88.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 7.1 |
| Promecarb | 7.399 | 135.1 → 115.1 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9967 | 16.1 |
| Cadusafos | 7.405 | 158.8 → 97.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 13.1 |
| Phorate | 7.475 | 121.0 → 47.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9983 | 11.1 |
| BHC-alpha (Benzene Hexachloride) | 7.609 | 218.9 → 183.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 9.9 |
| Desmedipham | 7.690 | 181.0 → 122.0 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9985 | 11.8 |
| Hexachlorobenzene | 7.741 | 283.8 → 213.9 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 10.7 |
| Dichloran | 7.771 | 160.1 → 124.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 6.7 |
| Dimethoate | 7.781 | 87.0 → 46.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9997 | 11.8 |
| Pentachloroanisole | 7.797 | 279.9 → 236.8 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 8.0 |

| 명칭 | RT | 전이 | 검량 범위(ppb) | | | CF | CF R ² | 상대 표준 오차 |
|-----------------------------------|-------|---------------|------------|---|-------|----|-------------------|----------|
| Propazine | 7.933 | 229.1 → 58.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9988 | 13.5 |
| BHC-beta | 8.010 | 218.9 → 183.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 12.2 |
| DMST (Tolylfluaniid Metabolite) | 8.032 | 214.0 → 106.0 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9954 | 17.7 |
| Propetamphos | 8.079 | 138.0 → 64.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9988 | 6.9 |
| Profluralin | 8.087 | 318.1 → 199.1 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 12.7 |
| BHC-gamma(Lindane, Gamma HCH) | 8.119 | 216.9 → 181.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9981 | 15.6 |
| Cyanophos | 8.135 | 242.9 → 109.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 12.8 |
| Terbufos | 8.137 | 230.9 → 129.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 12.5 |
| Pentachloronitrobenzene | 8.195 | 141.9 → 106.9 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 9.4 |
| Fonofos | 8.223 | 246.1 → 109.0 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9981 | 11.9 |
| Diazinon | 8.264 | 137.1 → 84.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 17.0 |
| Pyrimethanil | 8.269 | 198.0 → 118.1 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9990 | 12.6 |
| Fluchloralin | 8.299 | 325.8 → 62.9 | 0.05 | - | 500 | 2차 | 0.9995 | 13.5 |
| Phosphamidon I | 8.339 | 127.0 → 95.0 | 0.5 | - | 500 | 선형 | 0.9981 | 17.4 |
| Dinitramine | 8.382 | 260.7 → 241.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 11.6 |
| Tefluthrin | 8.400 | 177.1 → 127.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 16.0 |
| Paraoxon-methyl | 8.411 | 229.9 → 106.1 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9947 | 18.3 |
| BHC-delta | 8.489 | 219.0 → 183.1 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 16.5 |
| Isazofos | 8.504 | 256.9 → 162.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 13.8 |
| Etrimfos | 8.523 | 292.0 → 153.1 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9985 | 16.7 |
| Triallate | 8.540 | 268.0 → 184.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 10.8 |
| Chlorothalonil | 8.568 | 265.9 → 168.0 | 0.1 | - | 500 | 2차 | 0.9971 | 10.7 |
| Iprobenfos | 8.673 | 203.9 → 91.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 13.9 |
| Formothion | 8.763 | 124.9 → 47.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 16.0 |
| Bromocyclen | 8.764 | 271.8 → 236.9 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 8.6 |
| Pentachloroaniline | 8.897 | 158.0 → 123.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 14.7 |
| Desmetryn | 8.916 | 213.0 → 58.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9972 | 11.7 |
| Dichlofenthion | 8.961 | 279.0 → 223.0 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9975 | 11.4 |
| Propanil | 8.980 | 161.0 → 99.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9983 | 16.8 |
| 2,4,4'-Trichlorobiphenyl (BZ #28) | 9.030 | 256.0 → 186.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9981 | 11.7 |
| Malaoxon | 9.103 | 126.9 → 99.0 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9989 | 15.0 |
| Vinclozolin | 9.128 | 187.0 → 124.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9962 | 15.8 |
| Transfluthrin | 9.129 | 163.1 → 143.1 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9972 | 14.3 |
| Parathion-methyl | 9.151 | 262.9 → 109.0 | 0.5 | - | 500 | 2차 | 0.9991 | 18.2 |
| Chlorpyrifos-methyl | 9.151 | 288.0 → 93.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 12.0 |
| Cymiazole | 9.213 | 218.0 → 144.1 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 12.3 |
| Tolclofos-methyl | 9.242 | 267.0 → 93.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9987 | 12.8 |
| Alachlor | 9.280 | 237.0 → 160.1 | 1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9969 | 12.2 |
| Fuberidazole | 9.306 | 184.0 → 156.2 | 5 | - | 500 | 선형 | 0.9921 | 19.5 |
| Heptachlor | 9.330 | 271.7 → 236.9 | 0.1 | - | 200 | 선형 | 0.9990 | 15.4 |
| Prometryn | 9.339 | 241.0 → 58.2 | 5 | - | 200 | 2차 | 0.9967 | 19.4 |
| Paraoxon | 9.383 | 148.9 → 119.0 | 50 | - | 1,000 | 2차 | 0.9982 | 11.3 |
| Ronnel | 9.411 | 286.9 → 272.0 | 1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9989 | 11.7 |
| Prosulfocarb | 9.424 | 251.0 → 128.2 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 14.9 |
| Octachlorodipropyl Ether | 9.431 | 129.9 → 94.9 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 10.0 |
| Pirimiphos-methyl | 9.610 | 290.0 → 125.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 9.3 |

| 명칭 | RT | 전이 | 검량 범위(ppb) | | | CF | CF R ² | 상대 표준 오차 |
|--|--------|---------------|------------|---|-------|----|-------------------|----------|
| 2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl (BZ #52) | 9.617 | 289.9 → 219.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9997 | 11.9 |
| Fenitrothion | 9.622 | 125.1 → 47.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 11.3 |
| Methiocarb | 9.628 | 168.0 → 109.1 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 11.3 |
| Dipropetryn | 9.748 | 255.1 → 222.1 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9982 | 13.5 |
| Malathion | 9.759 | 172.9 → 99.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 12.1 |
| Ioxynil | 9.780 | 370.8 → 117.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9982 | 12.2 |
| Dichlofluanid | 9.785 | 167.0 → 97.0 | 1 | - | 500 | 2차 | 0.9991 | 13.8 |
| Metolachlor | 9.913 | 238.0 → 162.2 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 12.5 |
| Phorate Sulfone | 9.914 | 199.0 → 97.0 | 0.1 | - | 500 | 선형 | 0.9975 | 11.7 |
| Aldrin | 9.932 | 254.9 → 220.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 8.8 |
| Anthraquinone | 9.941 | 208.0 → 152.2 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9990 | 19.1 |
| Chlorpyrifos | 9.968 | 313.8 → 257.8 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 11.7 |
| Parathion | 9.983 | 291.0 → 109.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9985 | 15.2 |
| Flufenacet | 10.004 | 151.0 → 95.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 11.9 |
| Nitrothal-isopropyl | 10.057 | 254.0 → 212.0 | 0.5 | - | 500 | 선형 | 0.9967 | 16.3 |
| DCPA(Dacthal, Chlorthal-dimethyl) | 10.068 | 298.9 → 221.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 14.1 |
| Isocarbophos | 10.114 | 136.0 → 69.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9985 | 13.1 |
| Chlorthion | 10.156 | 125.1 → 47.1 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 14.7 |
| Isobenzan | 10.186 | 274.7 → 240.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9992 | 11.2 |
| Trichloronat | 10.199 | 296.8 → 268.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9987 | 14.5 |
| Fenson | 10.210 | 141.0 → 77.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 6.7 |
| Bromophos | 10.294 | 330.9 → 315.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 15.8 |
| Pirimiphos-ethyl | 10.294 | 318.1 → 166.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9977 | 14.8 |
| Fosthiazate I | 10.299 | 195.0 → 103.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 12.1 |
| Isopropalin | 10.350 | 280.1 → 238.1 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9975 | 16.4 |
| Cyprodinil | 10.413 | 225.2 → 224.3 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9990 | 14.4 |
| Isofenphos-methyl | 10.420 | 199.0 → 121.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 9.9 |
| Isodrin | 10.442 | 193.0 → 123.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9985 | 10.9 |
| Pendimethalin | 10.522 | 251.8 → 162.2 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 11.5 |
| Terbufos Sulfone | 10.573 | 264.0 → 199.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 8.7 |
| Chlozolate | 10.586 | 186.0 → 109.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 8.6 |
| Heptachlor Exo-epoxide | 10.616 | 354.8 → 264.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 15.3 |
| Esbiothrin | 10.622 | 123.0 → 93.0 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9975 | 15.2 |
| Bioallethrin | 10.629 | 123.0 → 81.0 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9924 | 12.2 |
| Chlordane-oxy | 10.629 | 114.9 → 51.1 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 3.8 |
| Tolylfluanid | 10.639 | 238.0 → 137.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 14.6 |
| Isofenphos | 10.674 | 212.9 → 121.1 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9994 | 10.7 |
| Mecarbam | 10.675 | 130.9 → 86.0 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9992 | 13.0 |
| Chlorfenvinphos | 10.679 | 266.9 → 159.0 | 0.01 | - | 200 | 선형 | 0.9986 | 11.0 |
| Heptachlor Endo-epoxide | 10.683 | 135.0 → 99.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 6.6 |
| Fipronil | 10.698 | 366.8 → 212.8 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 8.8 |
| Captan | 10.738 | 149.0 → 70.0 | 1 | - | 500 | 선형 | 0.9973 | 18.9 |
| Quinalphos | 10.738 | 298.0 → 156.0 | 0.01 | - | 500 | 2차 | 0.9992 | 17.6 |
| Phenthoate | 10.741 | 274.0 → 125.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9988 | 8.1 |
| Dinobuton | 10.743 | 211.0 → 163.0 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9999 | 9.0 |
| Procymidone | 10.850 | 282.8 → 96.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 8.3 |

| 명칭 | RT | 전이 | 검량 범위(ppb) | | | CF | CF R ² | 상대 표준 오차 |
|---|--------|---------------|------------|---|-------|----|-------------------|----------|
| Folpet | 10.851 | 259.8 → 130.1 | 0.5 | - | 200 | 선형 | 0.9989 | 16.4 |
| Chlorbenside | 10.904 | 125.0 → 89.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 8.2 |
| Methodathion | 11.007 | 125.0 → 47.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 16.2 |
| Bromophos-ethyl | 11.022 | 358.7 → 302.8 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 9.1 |
| Chlordane-trans | 11.024 | 271.7 → 236.9 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 8.4 |
| DDE-o,p' | 11.073 | 246.0 → 176.2 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 6.4 |
| 2,2',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl (BZ #101) | 11.111 | 325.9 → 255.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 7.7 |
| Tetrachlorvinphos | 11.166 | 329.0 → 108.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9972 | 16.9 |
| Chlordane-cis | 11.288 | 372.8 → 265.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 15.4 |
| Endosulfan I (Alpha Isomer) | 11.290 | 194.9 → 160.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 14.8 |
| Ditalimfos | 11.299 | 242.9 → 148.1 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9977 | 14.8 |
| Picoxystrobin | 11.307 | 145.0 → 102.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 14.1 |
| Flutriafol | 11.335 | 123.1 → 75.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 11.9 |
| Fenamiphos | 11.360 | 303.0 → 154.0 | 0.1 | - | 500 | 선형 | 0.9959 | 17.1 |
| Nonachlor, trans- | 11.369 | 406.8 → 299.8 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 11.9 |
| Chlorfenson | 11.374 | 175.0 → 111.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 10.2 |
| Iodofenphos | 11.466 | 376.8 → 361.8 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 12.4 |
| Prothiofos | 11.488 | 308.9 → 238.9 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9975 | 16.8 |
| Isoprothiolane | 11.498 | 162.1 → 85.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 13.4 |
| Flubenzimine | 11.538 | 186.0 → 69.0 | 2 | - | 500 | 2차 | 0.9974 | 10.5 |
| Profenofos | 11.544 | 207.9 → 63.0 | 0.1 | - | 200 | 선형 | 0.9984 | 12.4 |
| DDE-p,p' | 11.613 | 246.1 → 176.2 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9995 | 6.8 |
| Dieldrin | 11.713 | 262.9 → 193.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9990 | 13.8 |
| Oxyfluorfen | 11.721 | 252.0 → 146.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 14.0 |
| Myclobutanil | 11.750 | 179.0 → 125.1 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 12.6 |
| DDD-o,p' | 11.783 | 235.0 → 165.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 12.7 |
| Methoprotryne | 11.788 | 256.0 → 212.1 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 12.6 |
| Azaconazole | 11.865 | 217.0 → 173.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 11.4 |
| Dibromobenzophenone, 4,4'- | 11.913 | 340.0 → 183.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 7.6 |
| Isoxathion | 11.941 | 313.0 → 177.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9993 | 14.9 |
| Binapacryl | 12.003 | 100.0 → 82.0 | 5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9988 | 18.9 |
| Nitrofen | 12.011 | 282.9 → 253.0 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9963 | 14.5 |
| Ethylan | 12.041 | 223.1 → 193.1 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9976 | 14.7 |
| Chlorfenapyr | 12.051 | 328.0 → 247.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9983 | 14.8 |
| Endrin | 12.108 | 262.8 → 193.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 5.5 |
| Carbophenothion-methyl | 12.167 | 125.0 → 47.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9986 | 19.2 |
| Chloropropylate | 12.187 | 139.0 → 75.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 7.2 |
| 2,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl (BZ #118) | 12.222 | 325.9 → 255.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 7.6 |
| Endosulfan II (Beta Isomer) | 12.274 | 206.9 → 172.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9989 | 13.0 |
| Fensulfothion | 12.284 | 293.0 → 97.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9978 | 14.8 |
| Flamprop-isopropyl | 12.305 | 276.0 → 105.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9991 | 10.4 |
| DDD-p,p' | 12.369 | 237.0 → 165.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 13.7 |
| Aclonifen | 12.397 | 264.1 → 194.2 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 10.3 |
| DDT-o,p' | 12.430 | 235.0 → 199.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9974 | 19.4 |
| Ethion | 12.431 | 231.0 → 129.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9962 | 19.9 |

| 명칭 | RT | 전이 | 검량 범위(ppb) | | | CF | CF R ² | 상대 표준 오차 |
|--|--------|---------------|------------|---|-------|----|-------------------|----------|
| Chlorthiophos | 12.484 | 268.9 → 205.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9983 | 13.9 |
| Tetrasul | 12.572 | 321.7 → 252.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9987 | 11.5 |
| 2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl (BZ #153) | 12.610 | 359.9 → 289.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9992 | 10.9 |
| Sulprofos | 12.650 | 322.0 → 156.0 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9975 | 12.5 |
| Triazophos | 12.662 | 161.2 → 134.2 | 1 | - | 500 | 2차 | 0.9995 | 15.0 |
| Famphur | 12.810 | 218.0 → 109.0 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9982 | 14.6 |
| Carbophenothion | 12.826 | 342.0 → 157.0 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9974 | 14.5 |
| Methoxychlor Olefin | 12.837 | 308.0 → 238.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9984 | 13.5 |
| Cyanofenphos | 12.906 | 169.0 → 77.1 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9988 | 10.7 |
| Edifenphos | 12.940 | 309.9 → 172.9 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9998 | 13.3 |
| DDT-p,p' | 13.027 | 235.0 → 165.2 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9976 | 19.9 |
| Endosulfan Sulfate | 13.032 | 271.9 → 237.0 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 18.2 |
| 2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl (BZ #138) | 13.118 | 359.9 → 289.9 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9996 | 6.5 |
| Diclofop-methyl | 13.284 | 339.9 → 252.9 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9973 | 13.1 |
| Diflufenican | 13.310 | 266.0 → 246.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9971 | 18.7 |
| Propargite | 13.327 | 231.0 → 135.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9993 | 13.7 |
| Piperonyl Butoxide | 13.380 | 176.1 → 103.1 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 9.0 |
| Captafol | 13.440 | 310.8 → 78.8 | 10 | - | 1,000 | 2차 | 0.9987 | 19.3 |
| Nitralin | 13.551 | 315.9 → 274.0 | 0.1 | - | 500 | 2차 | 0.9993 | 13.9 |
| Mefenpyr-diethyl | 13.608 | 253.0 → 189.0 | 0.01 | - | 500 | 2차 | 0.9989 | 15.8 |
| Benzoylprop-ethyl | 13.699 | 292.0 → 105.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9991 | 11.8 |
| Iprodione | 13.721 | 313.8 → 55.9 | 0.1 | - | 500 | 선형 | 0.9984 | 12.4 |
| Spiromesifen | 13.722 | 272.0 → 254.2 | 0.1 | - | 500 | 2차 | 0.9994 | 15.7 |
| Tetramethrin I | 13.814 | 164.0 → 77.1 | 5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9990 | 17.1 |
| Pyridaphenthion | 13.822 | 340.0 → 199.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 12.9 |
| Endrin Ketone | 13.876 | 316.9 → 101.0 | 0.01 | - | 500 | 2차 | 0.9993 | 13.6 |
| Dimoxystrobin | 13.880 | 205.0 → 58.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 8.4 |
| Phosmet | 13.917 | 160.0 → 77.1 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9993 | 10.6 |
| Bifenthrin | 13.922 | 181.2 → 165.2 | 0.1 | - | 500 | 2차 | 0.9990 | 13.8 |
| Bromopropylate | 13.928 | 338.8 → 182.9 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9993 | 10.7 |
| EPN | 13.935 | 169.0 → 77.1 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9991 | 13.3 |
| Picolinafen | 13.958 | 376.0 → 238.1 | 0.01 | - | 200 | 선형 | 0.9978 | 17.1 |
| Bifenazate | 13.975 | 168.1 → 61.9 | 10 | - | 1,000 | 2차 | 0.9990 | 6.6 |
| Dicofol, p, p'- | 13.976 | 183.9 → 141.2 | 1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9972 | 18.8 |
| Fenpropathrin | 14.056 | 265.0 → 89.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 13.5 |
| 2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorobiphenyl (BZ #180) | 14.299 | 393.8 → 323.8 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9992 | 12.2 |
| Phenothrin I | 14.399 | 122.9 → 81.1 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9987 | 11.5 |
| Tetradifon | 14.424 | 158.9 → 111.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9992 | 7.4 |
| Furathiocarb | 14.437 | 163.1 → 135.1 | 2 | - | 1,000 | 선형 | 0.9992 | 6.1 |
| Phosalone | 14.590 | 182.0 → 75.0 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9958 | 19.2 |
| Azinphos-methyl | 14.626 | 160.0 → 77.0 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9993 | 11.4 |
| Leptophos | 14.638 | 171.0 → 51.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 12.4 |
| Cyhalothrin (Lambda) | 14.698 | 181.1 → 152.1 | 5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9979 | 12.9 |
| Cyhalofop-butyl | 14.703 | 357.1 → 229.1 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9958 | 16.1 |

| 명칭 | RT | 전이 | 검량 범위(ppb) | | | CF | CF R ² | 상대 표준 오차 |
|-------------------------|--------|---------------|------------|---|-------|----|-------------------|----------|
| Tralkoxydim | 14.830 | 137.0 → 57.0 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9990 | 7.9 |
| Mirex | 14.865 | 271.8 → 236.8 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9994 | 13.5 |
| Acrinathrin | 15.045 | 247.0 → 68.0 | 1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 12.8 |
| Pyrazophos | 15.144 | 221.0 → 149.0 | 0.01 | - | 1,000 | 2차 | 0.9994 | 14.1 |
| Azinphos-ethyl | 15.228 | 160.0 → 77.1 | 0.5 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 12.4 |
| Cycloxydim (Focus) | 15.500 | 178.0 → 80.9 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9997 | 8.0 |
| Permethrin, (1R)-cis- | 15.622 | 163.0 → 91.0 | 2 | - | 1,000 | 2차 | 0.9978 | 18.4 |
| Permethrin, (1R)-trans- | 15.744 | 163.0 → 127.0 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9990 | 12.0 |
| Coumaphos | 15.880 | 361.9 → 109.0 | 0.05 | - | 500 | 선형 | 0.9972 | 16.0 |
| Dioxathion | 15.963 | 271.0 → 96.9 | 0.1 | - | 500 | 선형 | 0.9969 | 19.8 |
| Butafenacil | 15.988 | 331.0 → 180.0 | 0.01 | - | 500 | 선형 | 0.9973 | 14.4 |
| Cyfluthrin I | 16.202 | 163.0 → 127.0 | 0.5 | - | 1,000 | 선형 | 0.9980 | 15.8 |
| Cypermethrin I | 16.510 | 163.0 → 127.0 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9985 | 16.6 |
| Halfenprox | 16.565 | 262.9 → 169.0 | 0.05 | - | 1,000 | 2차 | 0.9994 | 11.9 |
| Flucythrinate I | 16.725 | 156.9 → 107.1 | 0.01 | - | 1,000 | 선형 | 0.9992 | 13.7 |
| Ethofenprox | 16.798 | 163.0 → 107.1 | 0.1 | - | 1,000 | 선형 | 0.9989 | 14.3 |
| Silafluofen | 16.944 | 286.0 → 207.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9995 | 9.7 |
| Fenvalerate I | 17.428 | 167.0 → 125.1 | 0.05 | - | 1,000 | 선형 | 0.9988 | 12.6 |
| Fluvalinate-tau I | 17.601 | 250.0 → 200.0 | 0.1 | - | 1,000 | 2차 | 0.9996 | 15.2 |
| Deltamethrin | 18.152 | 252.9 → 174.0 | 0.1 | - | 500 | 선형 | 0.9963 | 17.2 |

www.agilent.com

DE28615044

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2024
2024년 5월 16일 한국에서 발행
5994-7436KO

한국에질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com