

Technical Reoprt

提高大麻农药分析的投资回报率(ROI)

Bob Clifford 博士, Heather Reece, Jeff Dahl 博士,
 Vikki Johnson 岛津科学仪器有限公司, 哥伦比亚, MD 21046

继大麻素浓度分析（也称效力分析）之后，根据 Sdl 报告（“Pot of Gold...”报告18-025），农药检测是大麻实验室中最常进行的应用。各类检测的占比如下：效力占44%、农药占15%、微生物占14%、重金属占12%、萜烯占9%，残留溶剂占6%。由于大麻行业中的各个实验室均具有用于效力分析的 HPLC 大麻分析仪，因此本文将重点关注利用质谱仪进行农药分析的投资回报率(ROI)，即单个样品分析可带来的最大收益。

首要要考虑的问题是：应使用哪类质谱仪，是单级四极杆还是三重四极杆系统？对于大麻农药检测，建议使用三重四极杆质谱仪，以获得卓越的灵敏度和选择性。接下来要考虑，需要采用哪种技术：LC-MS/MS 还是 GC-MS/MS，抑或两者兼用。这通常取决于诸多因素，如化合物的分子量、极性、挥发性、热稳定性和电离效率。同时，随着该行业的发展，化合物添加越来越多，农药列表也越来越长。

例如，科罗拉多州开始使用15种农药；俄勒冈州将农药种类翻了两番，达到59；加利福尼亚州除了使用上述州所用农药外，还增加了其他农药，将数量增至66。加拿大除了使用美国上述州所用农药外，还使用了其他农药，将数量增至95。最终，AOAC International 决定针对这104种农药开发一种检测方法，其涵盖了美国各州和加拿大所使用的农药。此外，该方法指定的最高残留限量（MRL）是目前列出的一半，这使分析更加困难。

图1的文氏图分别显示了最容易通过 LC-MS/MS 或 GC-MS/MS 分析的农药，以及它们的重叠区域。文氏图上的蓝色圆圈越暗，表示用 LC-MS/MS 分析越容易；相反，较深的红色圆圈表示用 GC-MS/MS 分析更容易。从图中可以看出，通过 LC-MS/MS 分析吡虫啉具有高灵敏度，而通过 GC-MS/MS 分析硫丹具有高灵敏度。此外，可以通过任何一种技术检测氟氯氰菊酯。

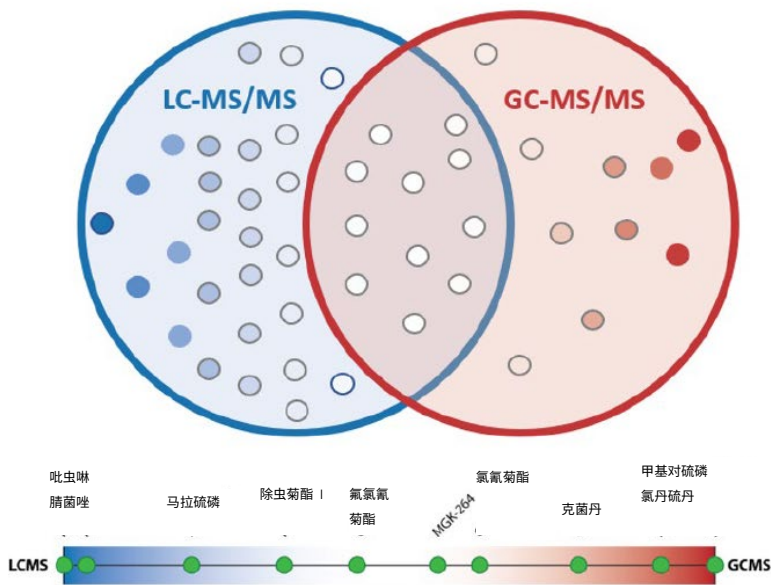


图 1: 通过 LC-MS/MS 和 GC-MS/MS 法分析农药的文氏图

高通量合同实验室希望获得最大的经济利益，同时为消费者带来益处，尤其是保护免疫低下的患者免受农药等污染物的侵害。一些实验室希望仅使用 LC-MS/MS 方法分析整个加州的农药清单，以最大限度地节省初始资本设备成本，但这是不是提高投资回报率(ROI)最有效的方式呢？

想要通过 LC-MS/MS 进行这类分析，需要选配一个双电离源平台，但其电喷雾电离(ESI)仅能用于“适用于 LC-MS/MS 的农药”。大气压化学电离(APCI)源会产生额外的成本，能够用于适合 GC-MS/MS 分析的农药。需要依次分析双电离源的测量结果，即19分钟的 ESI 测量运行时间，接着是6分钟的 APCI 测量时间，总分析时间为25分钟。所以序列分析是一个瓶颈。

另一种方法是使用 LC-MS/MS 和 GC-MS/MS 同步进行分析。LC-MS/MS 的分析时间是15分钟，而 GC-MS/MS 的分析仅需6分钟，因为它仅分析了少量农药。因此，与仅使用 LC-MS/MS 相比（25分钟），联用两种仪器可在15分钟内完成所有检测。

表1显示了两种联用方式的 ROI。LC-MS/MS 的每天收益为12,825美元，而联用 LC-MS/MS 和 GC-MS/MS 的收益为21,600美元，双仪器法可以增加8,775美元的收益。根据表1，双仪器法的资本成本更高，但仅用 LC-MS/MS 法的支付天数为31天，而双仪器法的支付天数为23天。因此，双仪器法的投资回报率少了8天。在支付仪器款项后，这两种仪器每天将继续收益8,775美元。与单一仪器、双电离源 LC-MS/MS 相比，双仪器法一年可以增加3,202,875美元的收益。

表 1：使用两种方法进行农药分析的投资回报率(ROI)

方法	农药分析	
	LC-MS/MS (ESI) + GC-MS/MS	LC-MS/MS (ESI + APCI)
仪器成本	\$500,000	\$400,000
差价	\$100,000	(\$100,000)
ESI 时间 (分钟)	15	19
APCI (分钟)	X	6
GC-MS/MS (分钟)	6	X
时间 (最大)	15	25
收益/样品	\$225	\$225
分钟/天	1440	1440
样品/天	96	57
收益/天	\$21,600	\$12,825
额外收益	\$8,775	(\$8,775)
收支相抵 (天数)	23	31
年利润 (365 天)	\$7,884,000	\$4,681,125
利润差/年	\$3,202,875	(\$3,202,875)

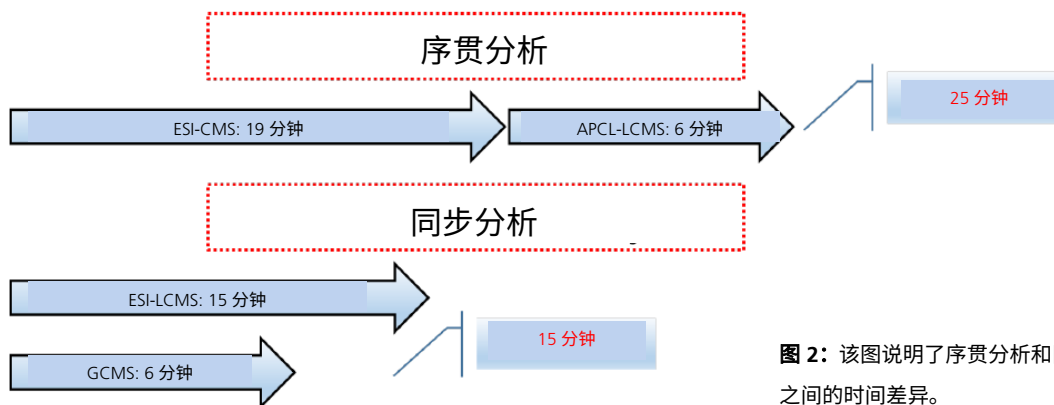


图 2：该图说明了序贯分析和同步分析之间的时间差异。

双仪器法带来的额外收益并不仅限于上述金额，因为 GC-MS/MS 也可用于分析萜烯或残留溶剂，其分析时间比 LC-MS/MS 方法快9分钟。如上所述，萜烯占大麻分析的9%，而残留溶剂占分析的6%。虽然残留溶剂分析不需要 GC-MS/MS 的功能，但仪器可以在单级四极杆 GCMS 模式或 GC/FID 模式下运行（如配备）。表2显示了使用 GC-MS/MS 空闲时间进行残留溶剂分析的ROI举例。这将使残留溶剂分析每年额外增加1,244,842美元的收益。如采用双仪器法，农药和残留溶剂分析每年一共可额外增加4,447,717美元的收益。

表2: 使用 GC-MS/MS 空闲时间进行残留溶剂分析的额外收益

额外收益	GC-MS/MS (残留溶剂)
分钟/天	1440
所需的 GC-MS/MS 农药/天	96
GC-MS/MS 农药分析时间 (分钟)	6
GC-MS/MS 的农药总时间 (分钟)	576
GC-MS/MS 运行时间 (分钟)	864
化合物分析种类	残留溶剂
化合物数量(CA)	21
分析时间 (分钟)	19
分析/天	45
收益/样品	\$75
收益/天	\$3,411
年利润 (365 天) - 溶剂	\$1,244,842
年利润 - 农药和溶剂	\$4,447,717

本文由美国岛津科学仪器有限公司提供。

Bob Clifford 是岛津科学仪器有限公司的总经理，可以通过 rhclifford@shimadzu.com，或访问 www.GrowYourLab.com 与他联系

值得注意的是，在某些仪器中，大麻类化合物的分析数量并不与之相同。例如，如果每天分析96种农药（表1）（即占总大麻分析的15%），加上6%的残留溶剂时间，则为保持比例，每天必须分析38种残留溶剂，因为 $96 \times (6/15) = 38$ 。表2显示每天可以分析45种残留溶剂，超过了要求的38种。同时表明 LC-MS/MS 和 GC-MS/MS 组合使用可提供更好的 ROI。

■ 结论

从表面上看，使用单一的 LC-MS/MS 仪器分析单类化合物（即农药）可以提供最佳的投资回报率。但实际却是，LC-MS/MS 和 GC-MS/MS 联用能够提供单类化合物分析的最优投资回报率，因为这种双仪器法可实现同步分析，每年可带来高达300多万美元的收益。此外，在 GC-MS/MS 运行时，还可用于其他化合物（如残留溶剂），每年可额外收入100万美元。与单仪器序列方法相比，双仪器同步方法可以带来高达400万美元的收益。LC-MS/MS 是大麻实验室中最昂贵的仪器，同时也具有最高的单位样品收益，因此每天必须分析尽可能多的样品，实现最高通量，以获得最佳投资回报率。还应注意，在使用双仪器法进行 LC-MS/MS 农药分析过程中，也对黄曲霉毒素B1、B2、G1、G2和霉菌毒素赭曲霉毒素 A 进行了分析。



岛津企业管理（中国）有限公司
岛津（香港）有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话: 800-810-0439
400-650-0439

免责声明:

* 本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售;
* 本资料中的所有信息仅供参考, 不予任何保证。
如有变动, 恕不另行通知。

第一版发行日:2019年4月