



ISSN 1004-2997  
CN 11-2979/TH  
CODEN ZXHUBO

# 质谱学报

JOURNAL OF CHINESE MASS SPECTROMETRY SOCIETY

2016  
Vol.37 No.

1

ISSN 1004-2997



9 771004 299165

北京中科科仪股份有限公司  
中国物理学会质谱分会

主办

万方数据

## CONTENTS

**Research Reports**

- Changes of Chemical Constituents in *Scrophulariae Radix* During Processing Based on UPLC-Q-TOF MS ..... WANG Jing-zhe, LIU Zhen, MA Li-man, LI Jun, SHANG Ming-ying, LIU Guang-xue, XU Feng, CAI Shao-qing(1)
- Chlorine Isotope Analysis of Hexachlorobenzene in Air Using High Resolution Time-of-Flight Mass Spectrometry ..... LIU Xian-de, LI Li, CHI Yi, ZHANG Zhi-jie(10)
- Characterization of Biosynthetic Pathway of the dTDP-L-Rha by Electrospray Ionization Tandem Mass Spectrometry ..... XU Ying-ying, DONG Chen-ying, ZHOU Da-wei(17)

**Brief Research Reports**

- Study on Thermal Decomposition of 2-Chlorobenzalmalonitrile ..... XUE Tian, CUI Qing-zhong, LV Ning, HUANG Qiu-an, WANG Hong-bo(23)
- Accurate Determination of K, Ca and Mg in Human Serum by Isotope Dilution Inductively Coupled "Cold" Plasma Mass Spectrometry ..... CHEN Xue, WANG Jun, FENG Liu-xing, YANG Xiao-jin(31)
- Research of Melamine Mass Fragmentation Process Based on Density Functional Theory ..... REN Yun, ZHANG Qing-he, LI Xiao-ling, YANG Zong(37)
- Study of By-product from Cyclohexane Oxidation by Multiple Mass Spectrometry Technologies ..... WANG Nai-xin, WANG Xie-qing, LIU Ze-long(43)
- Determination of Seven New Emerging Pollutants in Sediment Using UPLC-QTOF-MS ..... TAN Jian-hua, TANG Jia-jun, OUYANG Pei-yu, WANG Ying-li, XIE Qi-lai, YANG Yu-xiang, CHEN Zhen-xin, LIU Xin-yu(52)

**Technical Notes**

- Determination of  $\delta^{13}\text{C}$  and  $\delta^{15}\text{N}$  of Urea in Fermentation Broth by Gas Chromatography-Combustion-Isotope Ratio Mass Spectrometry ..... LI Guo-hui, ZHONG Qi-ding, WANG Dao-bing, SHEN Shi-gang(60)
- Measurement of Available Lead and Cadmium in Soil by ICP-MS with Ultrasonic Extraction ..... NONG Yun-jun, XIE Ji-dan, HUANG Ming-hu, GUO Peng-ran, SU Liu-kun, MA Ming-yang(68)
- Analysis of Navel Orange Juice Components by Wooden-Tip Electrospray Mass Spectrometry ..... ZHONG Tao, ZHANG Xing-lei, ZHANG Hua, YANG Mei-ling, ZHOU Peng, LE Zhang-gao(75)
- Spatial Investigation of Analytes at the Sampling Cone of an ICP-MS ..... MA Hai-bin, ZHANG Peng(82)

**Review**

- Review of Analysis Methods of Impurity Elements in High Purity Silicon ..... ZHANG Jian-ying, ZHOU Tao, LI Jin-ying(88)

**Serial Parameters:** CN 11-2979/TH \* 1980 \* b \* A4 \* 96 \* Zh \* P \* ¥ 25.00 \* 1100 \* 13 \* 2016-01

**Execution Editorial Board:** CAI Chun, GUO Yin-long, LI Hai-yang, LIU Zhi-qiang

**Editors in Responsibility:** LUO Shu-li, SHEN Ying

目 次

研究报告

基于 UPLC-Q-TOF MS 分析加工炮制对玄参化学成分的影响 ..... 王静哲,刘震,马立满,李军,尚明英,刘广学,徐风,蔡少青(1)

气相色谱-高分辨飞行时间质谱法测定大气中六氯苯的氯同位素丰度比值 ..... 刘咸德,李莉,池逸,张志杰(10)

dTDP-L-鼠李糖生物合成路径的电喷雾多级串联质谱法表征 ..... 许莹莹,董晨影,周大伟(17)

研究简报

邻氯苯亚甲基丙二腈的热分解性能研究 ..... 薛田,崔庆忠,吕宁,黄求安,王洪波(23)

同位素稀释-电感耦合“冷”等离子体质谱法准确测定人血清中钾、钙、镁的含量 ..... 陈雪,王军,冯流星,杨晓进(31)

基于密度泛函理论的三聚氰胺质谱裂解过程研究 ..... 任昀,张庆合,黎晓玲,杨总(37)

环己烷氧化副产物全组分的质谱分析 ..... 王乃鑫,汪燮卿,刘泽龙(43)

UPLC-QTOF-MS 测定沉积物中 7 种新型污染物 ..... 谭建华,汤嘉骏,欧阳培毓,王赢利,解启来,阳宇翔,陈镇新,刘昕宇(52)

技术交流

气相色谱-燃烧-同位素比值质谱法测定发酵液中尿素  $\delta^{13}\text{C}$  和  $\delta^{15}\text{N}$  ..... 李国辉,钟其顶,王道兵,申世刚(60)

超声提取-ICP-MS 法测定土壤中有效态铅和镉 ..... 农云军,谢继丹,黄名湖,郭鹏然,苏流坤,马名扬(68)

牙签电喷雾电离质谱分析脐橙果汁成分 ..... 钟涛,张兴磊,张华,杨美玲,周鹏,乐长高(75)

分析元素在 ICP-MS 取样锥口的空间分布 ..... 马海斌,张彭(82)

综述

高纯硅中杂质元素的质谱与非质谱分析方法综述 ..... 张见营,周涛,李金英(88)

期刊基本参数:CN 11-2979/TH \* 1980 \* b \* A4 \* 96 \* Zh \* P \* ¥25.00 \* 1100 \* 13 \* 2016-01

本期执行编委:蔡春,郭寅龙,李海洋,刘志强

本期责任编辑:骆淑莉,沈莹

=====

热烈祝贺《质谱学报》被《EI》数据库收录

热烈祝贺《质谱学报》入编《中文核心期刊要目总览》2014 年版(第七版)

欢迎订阅 欢迎投稿  
《质谱学报》

国内统一连续出版物号: CN 11-2979/TH  
邮发代号: 82-349

国际标准连续出版物号: ISSN 1004-2997  
国外发行代号: Q 1717

《质谱学报》(双月刊),是经国家科委批准,北京中科科仪股份有限公司和中国物理学会质谱分会共同主办,中国原子能科学研究院协办的学术期刊,中文核心期刊之一。

本刊的宗旨是刊登物理、化学、生物化学、材料化学、核科学、地球科学、生命科学等基础学科中质谱法的新理论、新方法、新技术及其在各领域的应用研究成果;介绍质谱学及其相关技术在上述前沿课题研究中的最新进展;反映质谱技术广泛应用于农业、石油、地质、药物、化工、临床医学、生物工程、原子能、同位素分析、环境监测、食品质控、材料分析、公安司法、军事部门等国民经济多领域的研究成果。本刊栏目设置有“研究报告”、“研究简报”、“综述”、“讲座”、“技术交流”、“信息”等。读者主要对象为从事分析化学研究和测试的科技人员及大中专院校师生。

本刊被《EI》、美国《化学文摘,CA》(光盘版 CODEN ZXHUBO)、英国《分析文摘》、俄罗斯《文摘杂志》、荷兰《文摘与引文数据库》(Scopus)、《中国科学引文数据库》(CSCD)、《中国科技论文统计源期刊》(CJCR)、《中国生物学文摘》和中国生物化学文献数据库、《中国学术期刊综合评价数据库》(CAJCED)、《中国期刊全文数据库》(CJFD)、《中国学术期刊(光盘版)》、《中文科技期刊数据库》、《中国无机分析化学文摘》、《方正 Apabi 电子期刊》、等收录,并已入网“万方数据-数字化期刊群”、重庆维普科技期刊数据库、台湾中文电子期刊服务-思博网(CEPS)、《书生数字期刊》。

本刊网址: <http://www.jcmss.com.cn>。

国内外公开发售。大 16 开,单价:25.00 元/册,全年 150 元。全国各地邮局均可订阅,未在邮局订到者可直接向本编辑部补订。

银行转帐:

帐号: 02000266090088002-52 户名: 中国原子能科学研究院  
开户行: 工商银行北京房山支行二六六分理处

邮局汇款:

北京 275 信箱 65 分箱,邮编 102413  
收款人姓名:《质谱学报》编辑部

《质谱学报》

(ZHIPU XUEBAO)

(双月刊 1980 年创刊)

第 37 卷 第 1 期 2016 年 1 月出版

Journal of Chinese Mass Spectrometry Society

(Bimonthly Started in 1980)

Vol. 37 No. 1 Jan. 2016

主管: 中国科学院

主办: 北京中科科仪股份有限公司  
中国物理学会质谱分会

出版: 《质谱学报》编辑部

通信地址: 北京 275 信箱 65 分箱,  
中国原子能科学研究院

邮政编码: 102413

电话: (010)69357734

电子信箱: [jcmss401@163.com](mailto:jcmss401@163.com)

名誉主编: 郑兰荪

主编: 刘淑莹

印刷: 河北省廊坊市光达胶印厂

国内发行: 全国各地邮局

邮发代号: 82-349

国外发行: 中国国际图书贸易总公司

(北京市 399 信箱, 邮政编码: 100044)

发行代号: Q 1717

Website: <http://www.jcmss.com.cn>

Directed by: Chinese Academy of Sciences

Sponsored by: KYKY Technology Development LTD.  
Chinese Physical Society Mass Spectrometry Branch

Published by: Editorial Board of Journal of Chinese  
Mass Spectrometry Society  
Address: P. O. Box 275 (65),  
Beijing 102413, China  
Tel: 86-10-69357734;  
E-mail: [jcmss401@163.com](mailto:jcmss401@163.com)

Honorary Editor-in-Chief: ZHENG Lan-sun

Editor-in-Chief: LIU Shu-ying

Distributed Inland by: Local Post Offices  
Postal Issue No. 82-349

Distributed Abroad by: China International Book  
Trading Corporation  
(P. O. Box 399, Beijing 100044, China)  
Issue No. Q1717

中国标准连续出版物号: ISSN 1004-2997  
CN 11-2979/TH

邮发代号: 82-349

单价: 25 元(全年 150 元)