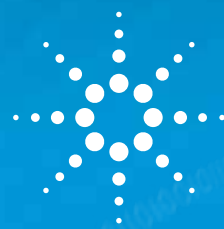


通过直接进样方式分析地表水中的药物成分

安捷伦 6550 iFunnel Q-TOF LC/MS 系统为目标化合物和非目标化合物的分析提供了极高的灵敏度



背景

在饮用水生产之前，需要一种高灵敏度和快速的分析方法来检测和分析地表水中的新型有机污染物。LC/MS 法是目前常规水样品分析的最佳解决方案，然而现有的分析方法为了满足仪器对灵敏度的要求而需要浓缩步骤，该步骤极易造成极性化合物在样品前处理过程中的损失。

实用方法

安捷伦新型 6550 iFunnel Q-TOF (6550 Q-TOF) 质谱检测器串联到一台安捷伦 1200 Infinity 系列液相色谱系统并装备大体积进样装置，可以为水样的直接分析提供卓越的性能。

本文提供的数据表明大体积、直接水样品进样与高精度质谱性能相结合，可以避免如液/液分配、固相萃取等的前处理过程。最终使干扰杂质的分辨能力得以提高并且消除了分析过程中对未知物鉴定能力的限制。本文建立了有机污染物的定量分析方法（如图 1），并且清晰的鉴定了河水中的有机污染物（如图 2）。利用此方法分析了一系列已知的化合物，其 LOD 和 LOQ 值如表 1 所示。

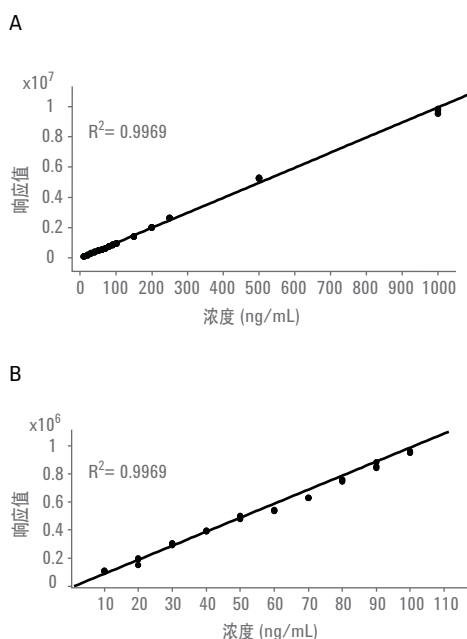


图 1. (A) 安替比林在10 ng/L 到 1000 ng/L 浓度范围内的校正曲线，其具备良好的线性。(B) 校正曲线低浓度区的放大图。



鉴定未知有机污染物

本文所述方法的主要优势在于可以同时分析鉴定多种未知污染物。如图 3 所示,未知污染物美多洛尔可以通过精确质量测定和同位素模式匹配分析得到鉴定。美多洛尔鉴定的进一步确认是通过将其 MS/MS 谱图与 Broecker, Herre & Pragst 法医/毒物数据库进行匹配来完成的(如图 4)。

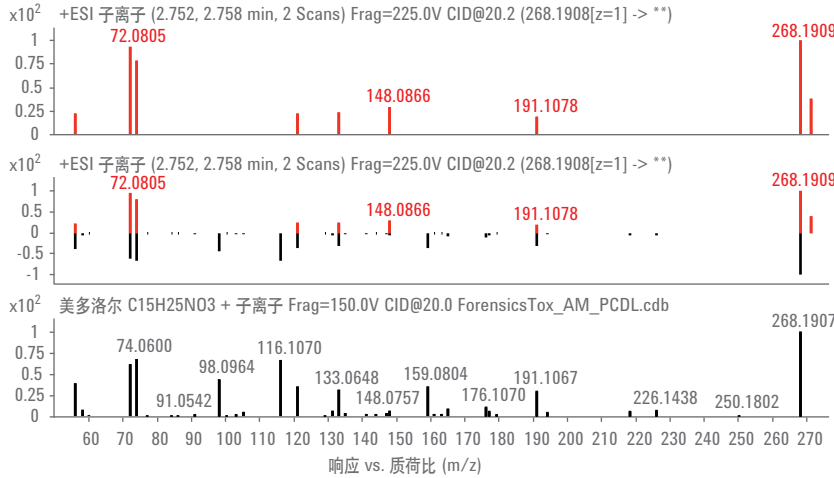


图 4 用 MS/MS 进一步鉴定分析美多洛尔, 保留时间与谱库参照值一致(上: 样品谱图, 中: 镜像谱图, 下: 谱库)

广泛适用性

安捷伦 6550 Q-TOF 采用喷射流和 iFunnel 技术, 可为广泛的目标化合物提供高灵敏度的检测(见表 1), 从而实现超痕量化合物的定性和定量分析。

表 1. 广泛范围目标化合物的 LOD 和 LOQ (ng/L)值.

化合物名称	LOD	LOQ	化合物名称	LOD	LOQ
阿替洛尔	0.84	3.59	磺胺甲恶唑	2.97	10.84
索他洛尔	0.44	2.01	卡马西平10,11 环氧	0.82	3.52
甲硝唑	0.73	3.19	非那西丁	0.81	3.50
罗硝唑	2.65	9.73	比索洛尔	1.38	5.52
磺胺嘧啶	2.69	9.87	普萘洛尔	1.13	4.67
甲氧苄氨嘧啶	3.02	11.02	卡马西平	0.53	2.39
磺胺甲噁唑	2.55	9.39	倍他洛尔	1.06	4.40
磺胺二甲噁唑	2.59	9.53	n,n 二乙基-3-甲基苯甲酰胺	0.95	4.02
安替比林	0.47	2.14	苯扎贝特	1.12	4.62
己酮可可碱	1.07	4.47	克罗米通	0.49	2.22
美托洛尔	0.56	2.51	地西洋	0.43	1.97
呋喃唑酮	2.27	8.47	非诺贝特	3.35	12.31
氨苯砜	3.85	14.70			

*利用 Joachim Kleiner 博士提供的程序, 基于 DIN 32645 计算得出。(www.kleiner-j.de)

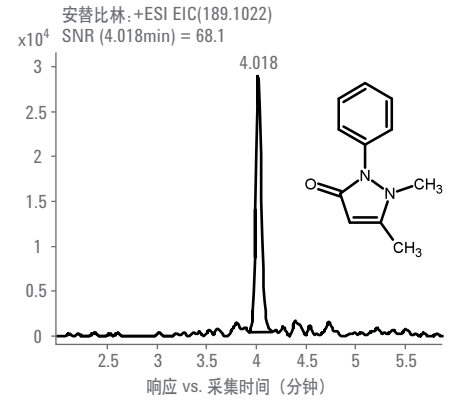


图 2. 浓度为 10 ng/L 的安替比林的提取离子色谱图及其分子结构(如插图所示)

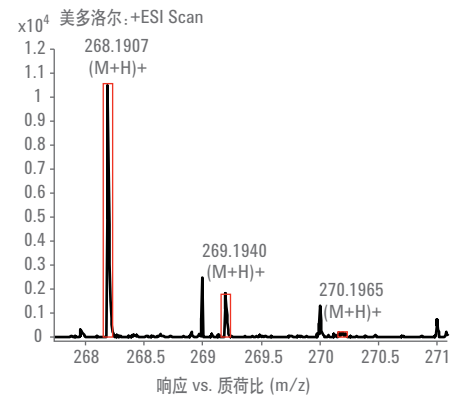


图 3. 未知污染物—美托洛尔的 EIC 谱图, 信噪比为 46:1, 红色区域代表理论同位素丰度和位置。

www.agilent.com/lifesciences/QTOF:cn

本资料仅限研究使用, 不可用于诊断目的。
本资料中的信息、说明和指标如有变更, 恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2012.
中国印刷, 2012年4月5日
5990-9862CHCN

