

## 使用ACQUITY UPLC H-Class和Xevo TQD液相/串联质谱仪进行水中药物和个人护理产品(PPCP)的多残留分析

Claude Mallet, Gareth Cleland和Jennifer A. Burgess  
沃特世公司(美国马萨诸塞州米尔福德)

### 应用优势

- 对具有广泛化学多样性的低浓度化合物进行提取和浓缩
- 使用单一的LC-MS/MS方法分离和检测PPCP
- 在亚万亿分之一范围内进行PPCP的定量分析

### 沃特世解决方案

ACQUITY UPLC® H-Class系统  
Xevo® TQD  
ACQUITY UPLC HSS色谱柱  
Oasis®样品提取产品  
TargetLynx™应用软件

### 关键词

环境, 个人护理产品, 水, 内分泌干扰物, PPCP, PCP

### 简介

近年来, 水体中存在的药物和个人护理产品(PPCP)<sup>1</sup>残留在全世界范围内都受到了越来越多的关注。这些新型污染物对人类健康的影响以及它们对环境的潜在影响尚未被完全了解。随着人们的关注持续增长, 全世界许多政府机构开始资助相关的研究, 评估PPCP是否会导致有害的生态效应。

许多已发表的文章都提到, 在河流和溪流中存在万亿分之一(PPT)水平的PPCP<sup>2-7</sup>。因此我们需要能够检测这些痕量化合物的方法。除了需要检测低水平的PPCP, 该分析的另一个主要挑战在于化合物种类和结构广泛的化学多样性, 如图1所示。另外, 水样品的复杂性还要求分析方法能够适用于样品多样性。本应用纪要介绍了井水和地表水样品中78种PPCP(包括酸性化合物、碱性化合物和中性化合物)的提取、分离和检测。

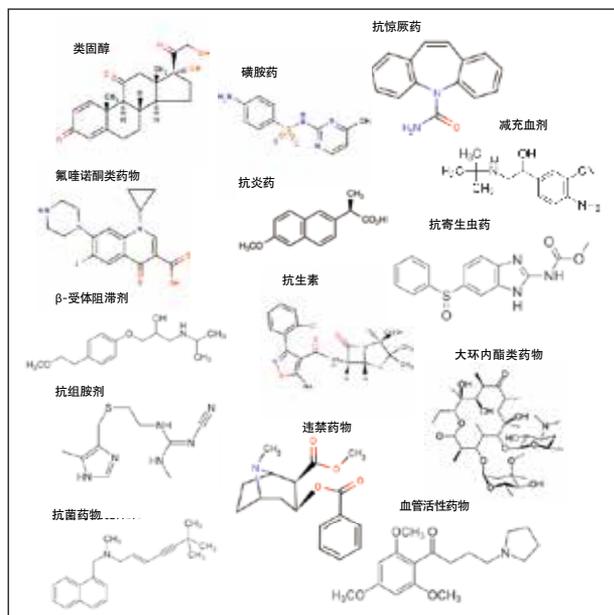


图1. 本研究所涉及的药物和个人护理产品中的化合物示例。

**UPLC条件**

系统:	ACQUITY UPLC H-Class
运行时间:	8.0 min
色谱柱:	ACQUITY UPLC HSS T3 C <sub>18</sub> 1.7 μm, 2.1 x 100 mm
柱温:	60 °C
流动相A:	10 mM甲酸铵水溶液, pH 3.2
流动相B:	10 mM甲酸铵甲醇溶液, pH 3.2
洗脱:	5 min线性梯度 从5%(B) 增加至95%(B)
流速:	0.450 mL/min
进样体积:	100 μL

**MS条件**

MS系统:	Xevo TQD
电离模式:	ESI+/-
毛细管电压:	3.0 kV
锥孔电压:	30.0 V
源温度:	150 °C
脱溶剂气温度:	550 °C
脱溶剂气:	1100 L/hr
锥孔气流速:	50 L/hr

**样品**

收集了两个不同类型的水样品, 分析前储存在4 °C条件下。此外, 购买了含有低水平目标物PPCP的试剂级水样品进行对比分析以及作为空白对照。

试剂级水样品: LC-MS级纯水(Fisher Chemical, Optima牌)

井水样品: 收集自当地的一个私人井水源

地表水样品: 收集自当地的一个水库

**样品制备**

提取流程在Waters® 6-cc Oasis MAX和6-cc Oasis MCX SPE 的串联小柱上进行。这种配置能够实现反相、阴离子交换和阳离子交换三层提取机制。设计这种提取方案是为了确保酸性、碱性和中性的PPCP完全保留。Oasis MCX小柱连接在Oasis MAX小柱下面, 二者都使用5 mL甲醇和5 mL水过柱进行了预平衡。使用适配器, 利用真空, 使水样品(1 L)以10 mL/min的流速加载到两个叠加的小柱上。一旦加载步骤完成, 就将叠加的小柱分开。接下来要分别对每个小柱进行特定的洗脱步骤, 流程如图2所示。Oasis MAX小柱使用5 mL 2%的氢氧化铵水溶液进行淋洗。提取分两个步骤实施, 首先用5 mL的甲醇进行提取(中性PPCP), 然后用5 mL含5%甲酸的甲醇提取(酸性PPCP)。两次提取液都收集到同一个20 mL的玻璃管中。Oasis MCX小柱用2%的甲酸淋洗, 然后用5 mL含5%氢氧化铵的甲醇进行提取(碱性PPCP)。混合MCX和MAX提取液分, 在60 °C下, 温和的氮气吹扫中蒸发至干。将干燥后的提取物复溶于900 μL (2 x 450 μL) 10 mM的甲酸铵中。接下来添加内标混合物(100 μL), 使其达到1.0 ppb浓度。基质校准标准液通过同样的方案制备, 只是对最终提取物的处理略有不同: 将干燥后的提取物复溶于800 μL (2 x 400 μL) 10 mM的甲酸铵中, 然后加入100 μL内标混合物。在不同浓度的PPCP的10 mM 甲酸铵溶液中, 分别添加100 μL该溶液。所加入的大多数化合物标准品的浓度范围是0.1到5.0 ppb (0.1、0.2、0.25、0.5、1.0、2.0、2.5和5.0 ppb的终浓度)。该范围相当于初始样品中0.1到5.0 ppt的浓度。有13种化合物的检测限较高, 它们的分析范围是1.0到50.0 ppb(相当于样品中1.0到50.0 ppt的浓度)。这13种化合物分别是头孢氨苄、西诺沙星、可待因、皮质酮、双氯青霉素、红霉素、吉非罗齐、布洛芬、酮洛芬、萘普生、托芬那酸、去炎松和华法林。内标混合物由三种同位素标记标准品组成: 西咪替丁-D3-N-甲基-D3、氯苯那敏-d6-马来酸盐-N,N二甲基-d6和吉非罗齐-d6-2,2二甲基-d6(购自C/D/N Isotopes Inc)。

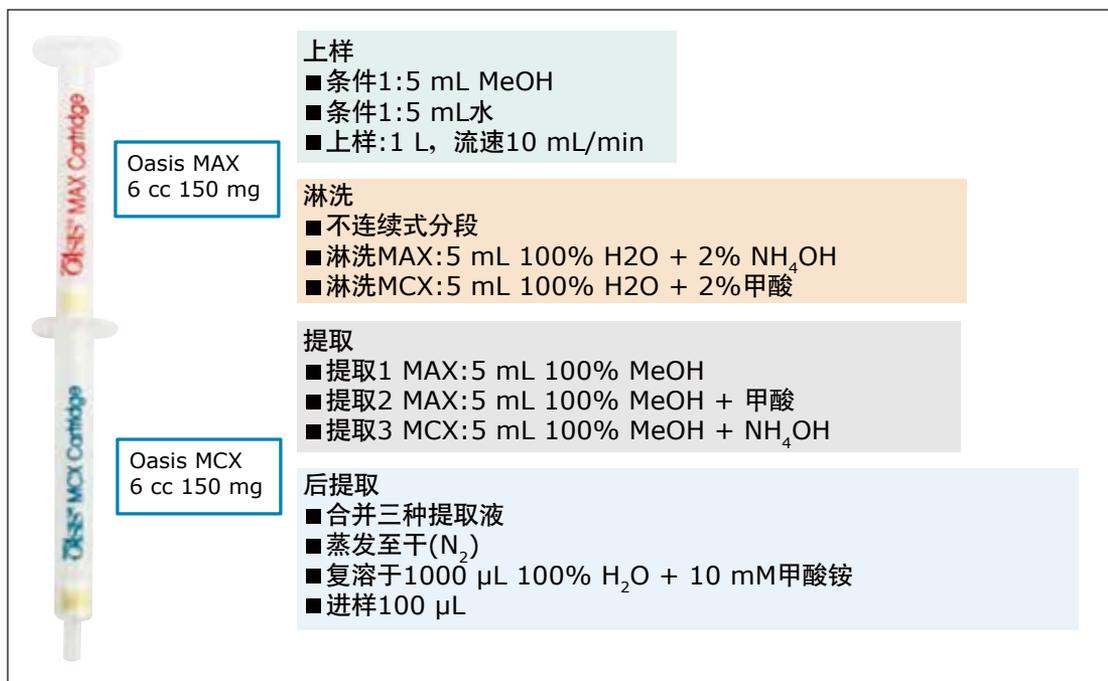


图2. 水中PPCP的固相萃取方案示意图。

## LC-MS/MS

选择并优化了PPCP的两种MRM离子对(定量和确证)(表1)。这些结果被录入了Quanpedia™数据库, 供我们自己和其它实验室未来进行研究时使用。对于本应用来说, 由于PPCP具有广泛的化学多样性, 为多残留分析找到最佳的色谱条件就成为了一个极大的挑战。使用2.1 x 100 mm ACQUITY UPLC HSS T3 分析色谱柱(1.7 μm)时获得了最佳的色谱分离度。在分离大多数化合物时表现出最佳色谱性能的流动相由甲醇/10 mM 甲酸铵水溶液(pH 3.2)组成。Optima LC-MS级甲醇和水购自Fisher Scientific。

化合物	电离模式	母离子	锥孔电压	产物离子	CE	保留时间 (min)
6 $\alpha$ -甲基强的松龙	ESI+	375.4	20	357.3	10	6.00
				339.3	10	
对乙酰氨基酚	ESI+	152.1	35	110.0	15	2.58
				93.0	20	
阿替洛尔	ESI+	267.2	40	145.1	25	3.40
				190.1	20	
阿奇霉素	ESI+	749.5	30	158.2	40	5.13
				591.5	30	
必可酮	ESI+	521.3	25	503.3	10	7.03
				319.2	15	
苯佐卡因	ESI+	166.1	25	138.1	15	5.06
				77.0	25	
溴己新	ESI+	377.1	30	114.1	15	6.05
				263.9	30	
盐酸丁咯地尔	ESI+	308.3	30	140.1	15	4.46
				237.1	15	
卡拉洛尔	ESI+	299.2	30	116.1	15	4.76
				221.1	20	
头孢氨苄	ESI+	348.2	40	158.0	20	5.76
				139.9	35	
氯苯那敏	ESI+	275.2	25	230.1	15	5.14
				167.0	35	
西布特罗	ESI+	234.2	30	160.1	15	3.57
				143.1	25	
西咪替丁	ESI+	253.1	30	159.1	15	3.36
				117.1	15	
西诺沙星	ESI+	263.2	35	245.1	15	4.79
				189.1	30	
可卡因	ESI+	304.3	25	182.1	15	4.51
				82.0	25	
可待因	ESI+	301.1	25	166.1	35	3.57
				216.1	25	
皮质酮	ESI+	347.4	35	329.3	15	6.05
				311.2	15	
可的松	ESI+	361.3	40	163.1	25	5.61
				342.2	20	
可替宁	ESI+	177.1	40	80.0	20	3.31
				98.0	20	
氯苯矾	ESI+	249.2	40	156.0	15	3.88
				108.1	20	
地塞米松	ESI+	393.3	20	373.2	10	5.96
				355.2	10	
双氯青霉素	ESI+	470.0	40	211.9	40	6.02
				254.0	25	
乙胺嘧啶	ESI+	200.2	25	100.1	15	3.15
				72.0	25	
二氟沙星	ESI+	400.3	30	382.2	20	4.43
				356.2	20	
异羟基洋地黄毒甙	ESI+	391.5	30	355.3	15	5.00
				373.3	10	
地尔硫卓	ESI+	415.2	30	178.1	20	5.51
				310.1	20	
苯海拉明	ESI+	256.1	20	167.1	5	5.30
				152.0	30	
恩诺沙星	ESI+	360.3	25	342.3	20	4.28
				316.3	20	
红霉素	ESI+	734.50	30	158.1	30	5.89
				576.5	20	
氟罗沙星	ESI+	370.4	30	326.3	20	3.98
				269.3	25	
氟甲唑	ESI+	262.1	35	244.0	15	5.50
				202.0	35	
氟米松	ESI+	411.4	25	391.2	5	5.85
				253.2	15	
吉非罗齐	ESI-	249.1	30	121.0	10	7.06
				127.0	10	
氢化可的松	ESI+	363.4	35	121.1	25	5.73
				327.3	15	
异丁苯丙酸	ESI-	205.1	20	161.1	5	6.91
				NA		
交沙霉素	ESI+	828.5	40	109	40	6.23
				174.2	35	
酮洛芬	ESI-	253.1	20	209.1	5	6.02
				NA		
左旋咪唑(四咪唑)	ESI+	205.2	25	178.1	20	3.68
				91.1	30	
林可霉素	ESI+	407.2	40	126.1	25	4.00
				359.3	20	
美托洛尔	ESI+	268.2	40	116.1	15	4.58
				74.1	20	
咪康唑	ESI+	417.1	40	161.1	30	7.12
				69.0	25	

化合物	电离模式	母离子	锥孔电压	产物离子	CE	保留时间 (min)
萘啶酸	ESI+	233.1	30	215.0	15	5.45
				187.0	25	
萘普生	ESI-	229.0	20	170.1	15	6.12
				185.0	10	
氧氟沙星	ESI+	362.3	25	318.3	20	4.06
				261.3	30	
奥芬达唑	ESI+	316.1	40	159.0	30	5.29
				284.1	20	
氧烯洛尔	ESI+	266.2	35	72.1	20	4.93
				116.1	15	
青霉素 G	ESI+	335.1	40	217.0	20	5.38
				317.0	20	
吡嗪酮	ESI+	313.3	40	203.1	15	6.23
				83.1	25	
普鲁卡因	ESI+	237.2	25	100.1	15	3.45
				120.0	25	
异丙嗪	ESI+	285.2	25	86.1	15	5.59
				198.1	25	
乙胺嘧啶	ESI+	249.2	40	177.1	30	4.95
				233.1	30	
雷尼替丁	ESI+	315.2	25	176.1	15	3.38
				130.1	25	
利福昔明	ESI+	786.5	40	151.1	45	6.61
				754.5	30	
罗红霉素	ESI+	837.6	40	158.1	35	6.30
				679.5	20	
沙丁胺醇(舒喘宁)	ESI+	240.1	30	148.0	15	3.36
				222.1	10	
司帕沙星	ESI+	393.3	30	349.3	20	4.64
				292.3	25	
苯甲酰磺胺	ESI+	277.1	30	156.0	15	4.45
				92.0	25	
磺胺嘧啶	ESI+	251.1	30	156.0	15	3.42
				92.0	25	
磺胺二甲氧嘧啶	ESI+	311.1	40	156.0	15	4.78
				92.0	25	
磺胺多辛	ESI+	311.3	40	156	15	4.40
				108.0	25	
磺胺甲基嘧啶	ESI+	265.1	35	92.0	25	3.72
				156.0	15	
磺胺对甲氧嘧啶	ESI+	281.1	35	92.0	25	3.93
				156.0	15	
磺胺二甲嘧啶	ESI+	279.1	35	186.0	15	4.13
				124.1	25	
磺胺甲二唑	ESI+	271.1	30	156.0	15	3.93
				92.0	25	
磺胺甲噁唑	ESI+	254.1	30	92.0	25	4.18
				156.0	15	
磺胺甲氧嘧啶	ESI+	281.1	35	92.0	25	4.09
				156.0	15	
磺胺吡啶	ESI+	250.1	35	92.0	25	3.68
				156.0	15	
特比萘芬	ESI+	292.3	35	141	10	6.37
				93.0	15	
特硝唑	ESI+	186.2	30	128.1	15	3.80
				82.0	25	
泰妙菌素	ESI+	494.4	30	192.0	15	5.72
				119.0	30	
噻氯匹定	ESI+	264.1	30	125.0	25	5.32
				154.0	15	
替米考星	ESI+	869.5	25	174.2	45	5.44
				696.5	40	
甲苯磺丁脲	ESI+	271.1	30	91.0	30	5.77
				74.0	10	
托芬那酸	ESI-	260.1	35	216.0	15	7.09
				180.0	15	
去炎松	ESI+	395.4	30	375.0	10	4.80
				357.0	30	
曲安奈德	ESI+	435.4	25	397.3	15	6.06
				415.3	5	
三氯卡班	ESI+	315.1	40	162.0	20	6.98
				128.0	30	
甲氧苄氨嘧啶	ESI+	291.3	40	123.0	30	3.95
				230.2	30	
曲普利定	ESI+	279.1	25	208.2	15	5.26
				193.2	35	
妥洛特罗	ESI+	228.2	30	154.1	15	4.69
				118.0	25	
华法林	ESI-	307.1	40	161.0	20	6.22
				250.0	25	
甲苄噻嗪	ESI+	221.1	40	90.0	20	4.43
				164.0	25	

表1. PPCP的MRM调谐参数和保留。

## 结果与讨论

尽管所分析的化合物具有广泛的化学多样性，我们仍然获得了总共82种化合物的优异色谱分析结果。不同种类化合物的色谱图如图3所示。本研究所涉及的82种PPCP中有78种能够通过双小柱SPE方法进行高效的提取。其中5种化合物(异羟基洋地黄毒甙、氟罗沙星、红霉素、6 $\alpha$ -甲基强的松龙和甲苯磺丁脲)在使用该提取方案处理井水和地表水样品时的回收率较差，虽然它们在试剂级纯水中的回收率是可接受的。因此，在进行定量分析时我们排除了这些化合物。

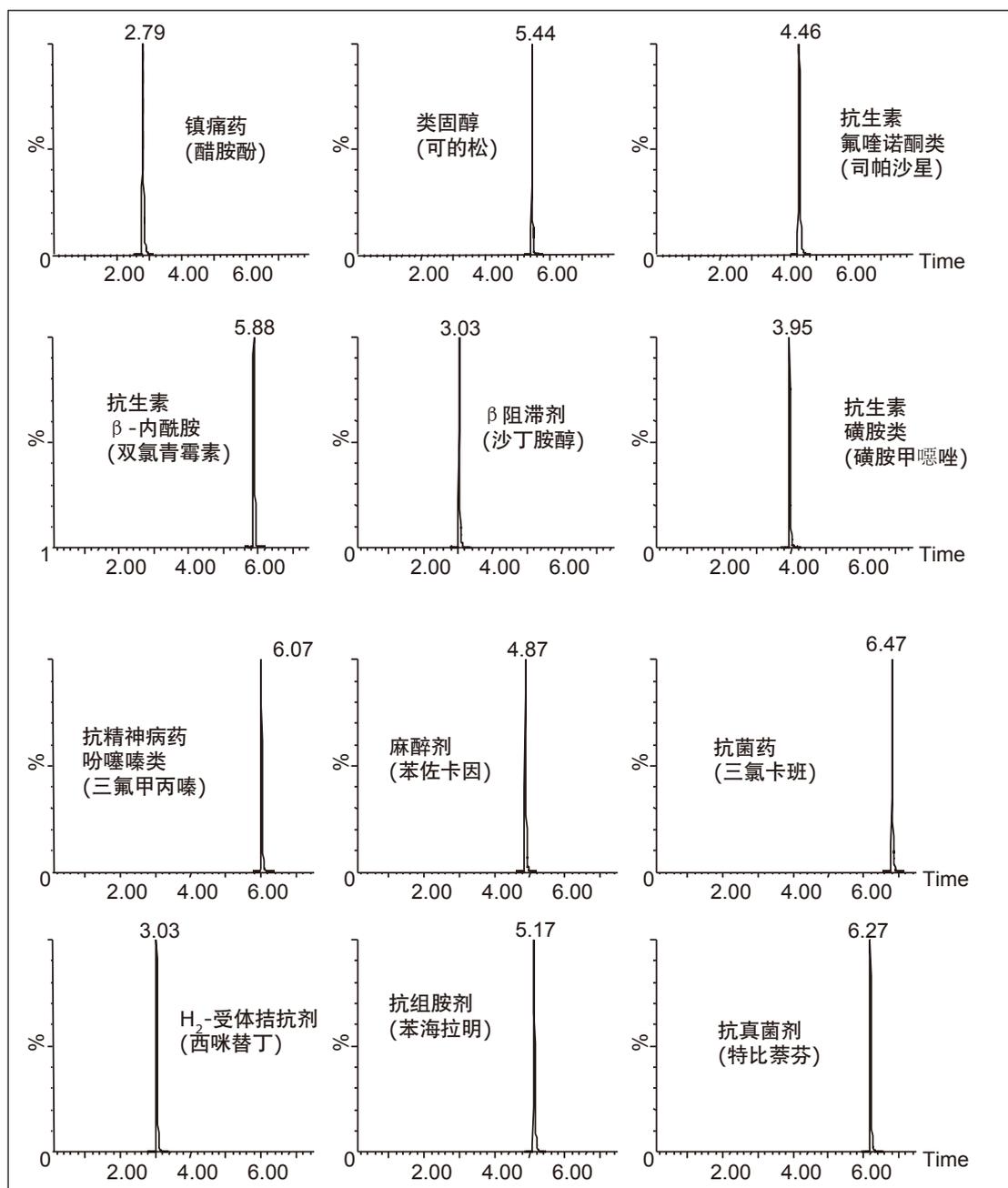


图3. 本研究中涉及的不同种类PPCP化合物的示例MRM色谱图。

为了确保该方法没有导致PPCP的残留或误检，我们检测了试剂级纯水空白样品，目的是找到可用作空白的洁净水源和创建校准标准品。通过筛查多个来源的样品，Optima LC-MS级纯水 (Fisher Scientific) 给出了最佳的结果。使用SPE方案对该试剂级空白水样品进行了浓缩。我们对提取后的该样品以及在提取后加入了PPCP的该样品进行了分析和比较。通过该试验可估计试剂级水样品中的背景水平，确定它是否完全不含目标PPCP。结果表明，试剂级水样品中只检测到四种含量在100 ppq水平以上的PPCP(表2)。这四种化合物是恩诺沙星、氟罗沙星、利福昔明和地尔硫卓。这些化合物被认为以100 ppq到1 ppt的水平存在于试剂级纯水样品中。检测试剂级纯水样品时，这四种化合物均未在1 ppt水平以上有所响应。在最低校准点以下检测到46种化合物，还有28种化合物没有在试剂级空白水样品中检测到。

化合物	检测到的含量水平	化合物	检测到的含量水平	化合物	检测到的含量水平
6 $\alpha$ -甲基强的松龙	ND	<b>恩诺沙星</b>	<1.0 ppt	沙丁胺醇(舒喘宁)	<0.1 ppt
对乙酰氨基酚	<0.1 ppt	红霉素	ND	司帕沙星	<0.1 ppt
阿替洛尔	<0.1 ppt	<b>氟罗沙星</b>	<1.0 ppt	苯甲酰磺胺	ND
阿奇霉素	<0.1 ppt	氟甲喹	<0.1 ppt	磺胺嘧啶	ND
必可酮	ND	氟米松	ND	磺胺二甲氧嘧啶	<0.1 ppt
苯佐卡因	<0.1 ppt	吉非罗齐	ND	磺胺多辛	ND
溴己新	<0.1 ppt	氢化可的松	ND	磺胺甲基嘧啶	<0.1 ppt
盐酸丁咯地尔	<0.1 ppt	异丁苯丙酸	ND	磺胺对甲氧嘧啶	ND
卡拉洛尔	<0.1 ppt	交沙霉素	<0.1 ppt	磺胺二甲嘧啶	ND
头孢氨苄	ND	酮洛芬	ND	磺胺甲噁唑	<0.1 ppt
氯苯那敏	<0.1 ppt	左旋咪唑(四咪唑)	<0.1 ppt	磺胺甲氧嗪	ND
西布特罗	<0.1 ppt	林可霉素	<0.1 ppt	磺胺吡啶	ND
西咪替丁	<0.1 ppt	美托洛尔	<0.1 ppt	特比萘芬	<0.1 ppt
西诺沙星	<0.1 ppt	咪康唑	<0.1 ppt	特硝唑	<0.1 ppt
可卡因	<0.1 ppt	萘啶酸	<0.1 ppt	泰妙菌素	<0.1 ppt
可待因	ND	萘普生	ND	噻氯匹定	<0.1 ppt
皮质酮	<0.1 ppt	氧氟沙星	<0.1 ppt	替米考星	<0.1 ppt
可的松	ND	奥芬达唑	<0.1 ppt	甲苯磺丁脲	ND
可替宁	<0.1 ppt	氧烯洛尔	<0.1 ppt	托芬那酸	ND
氨苯砜	<0.1 ppt	吡喹酮	ND	去炎松	ND
地塞米松	ND	普鲁卡因	<0.1 ppt	曲安奈德	ND
双氯青霉素	ND	异丙嗪	<0.1 ppt	甲氧苄氨嘧啶	<0.1 ppt
二氟沙星	<0.1 ppt	乙胺嘧啶	<0.1 ppt	曲普利啶	<0.1 ppt
异羟基洋地黄毒苷	ND	雷尼替丁	<0.1 ppt	妥洛特罗	<0.1 ppt
<b>地尔硫卓</b>	<1.0 ppt	<b>利福昔明</b>	<1.0 ppt	华法林	ND
苯海拉明	<0.1 ppt	罗红霉素	<0.1 ppt	甲苄噻嗪	<0.1 ppt

表2. 为了确定待测化合物含量水平对试剂级空白水样品提取物进行分析的结果。其中列出了所有有响应的化合物。若响应低于加入0.1 ppt PPCP后再进行测定的结果，以<0.1 ppt表示。检测到4种含量高于0.1 ppt但低于1.0 ppt的化合物，以粗体表示。在试剂级空白水样品提取物中没有表现出响应的化合物以ND(未检测到)表示。

图4展示了4种在试剂级纯水标准品中根本没有检测到的PPCP的MRM色谱图(定量离子跃迁)。试剂级空白纯水样品提取物以及添加PPCP后的试剂级纯水样品提取物被放在一起展示,对相当于未提取样品中0.1 ppt(100 ppq)的响应进行说明。

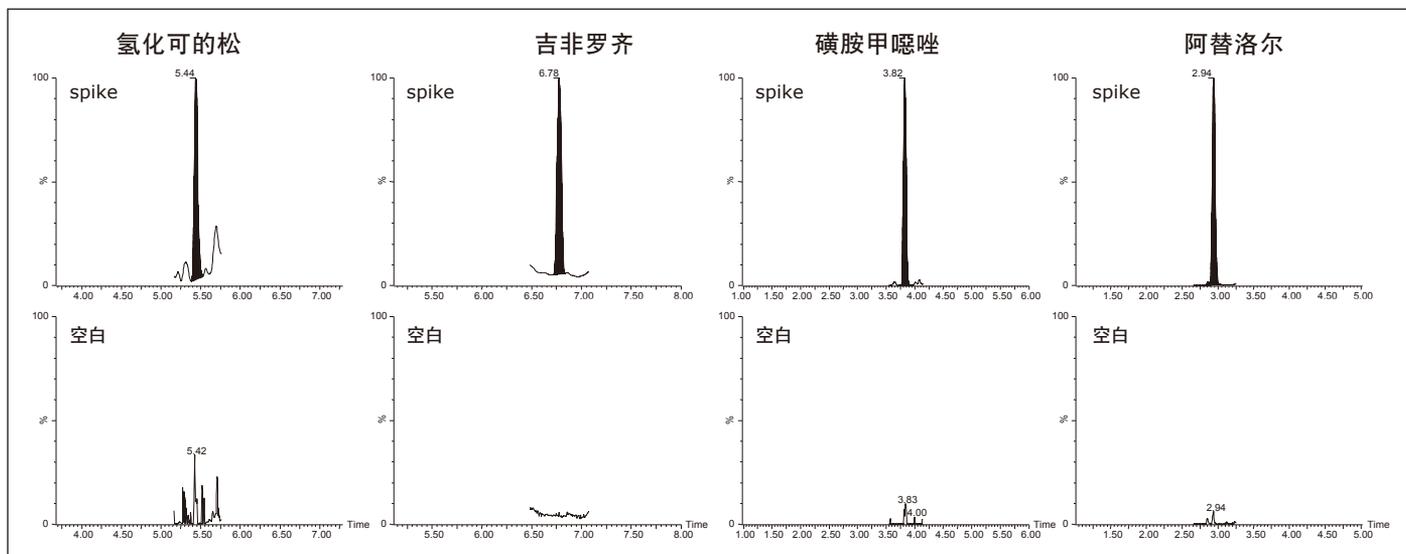


图4. 示例化合物的MRM色谱图, 展示了试剂级水样品提取物中的空白响应。顶端一行的色谱图展示了示例化合物在0.1 ppt水平(后加标至试剂级水样品提取物)的预期响应。底端一行展示了空白的试剂级水样品提取物的响应。

为了评估该方法的定量分析能力，选择了3种氘代化合物作为内标。除了试剂级纯水空白，还使用了井水样品和地表水样品来证明该方法在不同水基质中表现出的性能。在以3种氘代化合物作为内标的初始试验中，适用该提取方法的78种PPCP中的58种都获得了优异的定量结果。为了对其它化合物进行定量，还需要选择额外的内标进行进一步的研究。加标量为1 ppt的58种化合物的回收率如图5所示。对于含有适当内标的PPCP，R<sup>2</sup>值的范围在0.991到0.997之间(线性拟合，1/x加权)。所使用的内标和每种化合物的线性回归R<sup>2</sup>值如图3所示。

化合物	所使用的内标	R <sup>2</sup>	化合物	所使用的内标	R <sup>2</sup>
萘啶酸	西咪替丁-d3	0.994	妥洛特罗	西咪替丁-d3	0.996
利福昔明	氯苯那敏-d6	0.994	西布特罗	西咪替丁-d3	0.997
甲氧苄氨嘧啶	西咪替丁-d3	0.991	氯苯那敏	氯苯那敏-d6	0.993
红霉素	氯苯那敏-d6	0.995	西咪替丁	西咪替丁-d3	0.997
交沙霉素	西咪替丁-d3	0.993	异丙嗪	氯苯那敏-d6	0.993
林可霉素	西咪替丁-d3	0.993	曲普利啶	氯苯那敏-d6	0.993
罗红霉素	氯苯那敏-d6	0.994	苯海拉明	氯苯那敏-d6	0.995
替米考星	氯苯那敏-d6	0.994	雷尼替丁	西咪替丁-d3	0.994
阿奇霉素	氯苯那敏-d6	0.994	对乙酰氨基酚	西咪替丁-d3	0.995
泰妙菌素	西咪替丁-d3	0.991	可卡因	西咪替丁-d3	0.996
磺胺嘧啶	西咪替丁-d3	0.996	可待因	西咪替丁-d3	0.992
磺胺多辛	西咪替丁-d3	0.995	氨苯矾	西咪替丁-d3	0.993
磺胺甲基嘧啶	西咪替丁-d3	0.995	乙胺嘧啶	氯苯那敏-d6	0.996
磺胺对甲氧嘧啶	西咪替丁-d3	0.995	特比萘芬	氯苯那敏-d6	0.993
甲苄噻嗪	西咪替丁-d3	0.993	特硝唑	西咪替丁-d3	0.995
溴己新	氯苯那敏-d6	0.996	咪康唑	氯苯那敏-d6	0.991
盐酸丁咯地尔	氯苯那敏-d6	0.994	左旋咪唑(四咪唑)	西咪替丁-d3	0.993
噻氯匹定	氯苯那敏-d6	0.994	奥芬达唑	西咪替丁-d3	0.995
吉非罗齐	吉非罗齐-d6	0.994	吡喹酮	西咪替丁-d3	0.994
华法林	吉非罗齐-d6	0.992	苯佐卡因	西咪替丁-d3	0.995
普鲁卡因	西咪替丁-d3	0.993			

表3. 为每种化合物的定量分析指定最适合的内标。同时列出了所得的校准曲线的R<sup>2</sup>值。

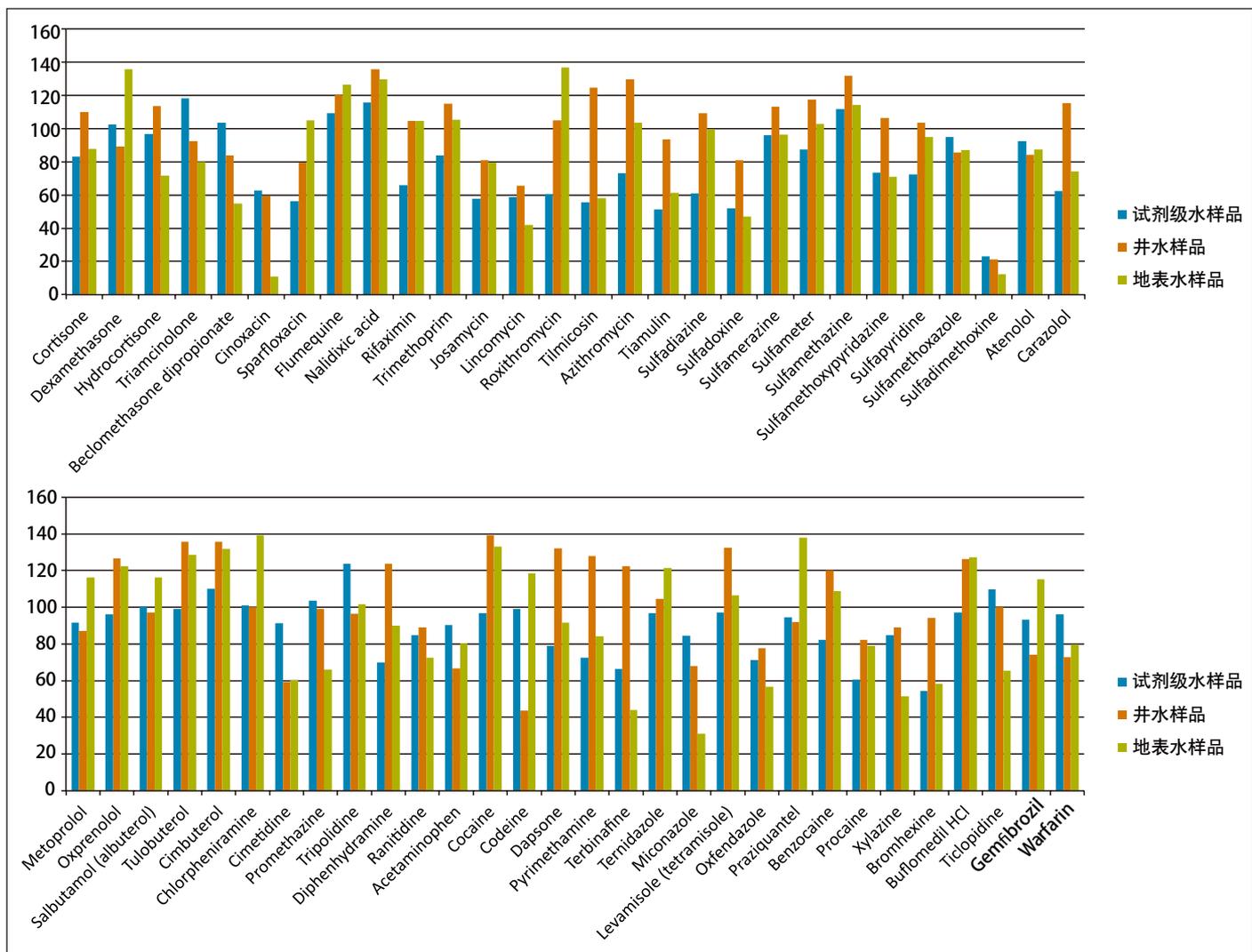


图5. 不同水基质加入1 ppt PPCP后的回收率计算结果柱状图。

为了评估3种水样品的基质效应，将未进行提取的试剂级纯水样品中的标准品响应与加入了1 ppt PPCP的试剂级水样品提取物、井水样品提取物和地表水样品提取物中的标准品响应作了比较，结果如图6所示。试剂级纯水样品中大多数PPCP的基质效应小于20%。这清楚表明该水样品的洁净度很高。井水样品和地表水样品中一半以上PPCP的基质效应大于20%。地表水样品的复杂性显然较高，其中约三分之一化合物的基质效应大于50%，如图6中饼状图的橙色区域所示。优化提取方案的目的是使多种类型化合物的捕集效率最大化，因此对两种提取小柱都仅仅使用了温和的清洗方案，以确保在最终提取之前不会发生化合物穿透。使用这种温和的清洗方案时，与洁净的样品(如试剂级水样品)相比，我们预期复杂的水样品可能仍将表现出基质效应。为了处理复杂性较高的水样品，可以使用SPE方案进行额外的净化步骤。关于最适合的内标的进一步研究也将有助于应对较高的基质负荷。在其它试验2中，2种不同的地表水样品也表现出类似的效应。

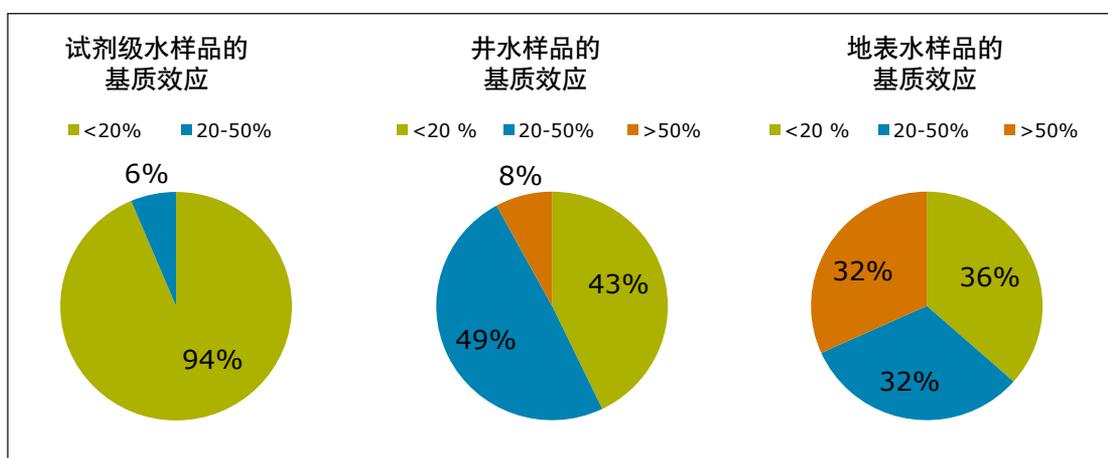


图6. 三种不同类型的水样品中不同PPCP的基质效应的饼状图。低基质效应(<20%)以绿色表示；中等基质效应(20%到50%)以蓝色表示；高基质效应(>50%)以橙色表示。表现出特定程度基质效应的化合物所占的百分比标注在饼状图不同的分配区域中。

该提取方法被用于评估井水样品和地表水样品中当前的PPCP水平。在井水样品中，在100 ppq水平以上，检测到2种PPCP：磺胺甲噁唑(0.97 ppt)和阿替洛尔(0.32 ppt)，而在该水平以下，检测到14种PPCP。在地表水样品中，在100 ppq水平以下检测到17种PPCP。图7分别列举了每个样品中所检测到化合物的示例。为了对空白样品进行说明，还展示了另一个样品中相同化合物的迹线，为了展示噪音水平，对图中的基线进行了放大

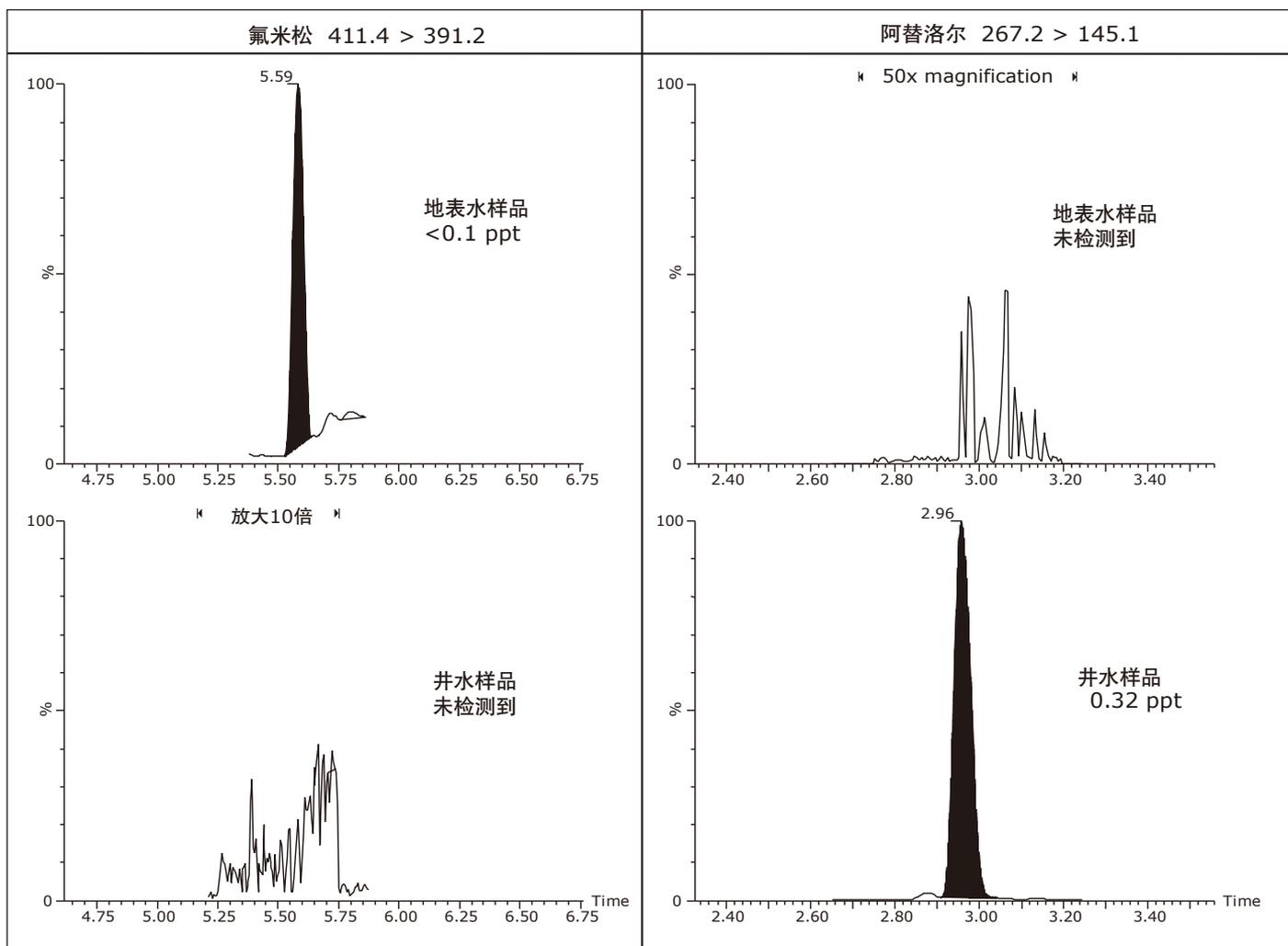


图7. 地表水残留和井水残留的示例化合物(氟米松和阿替洛尔)。为了对空白样品进行说明，还展示了没有检测到相同化合物的另一个样品的基线，只是其噪音水平经过了放大。

## 结论

- 开发了一种针对多种PPCP(包括酸性化合物、碱性化合物和中性化合物)进行提取、浓缩和定量分析的方法。
- 使用ACQUITY UPLC H-Class系统和小型台式Xevo TQD, 仅通过单次进样就能分析所有的化合物。
- 成功实施了灵敏的检测, 达到了亚万亿分之一的检测限, 并且使用该方法检测了地表水和井水样品中的残留。

## 参考文献

1. <http://www.epa.gov/ppcp/www.epa.gov/ppcp>
2. A L Batt, M S Kostich, J M Lazorchak. *Anal Chem.* (2008), 80: 5021-5030.
3. B J Vanderford, S S Snyder. *Environ Sci Technol.* (2006) 40: 7312-7320.
4. S Reverte, F Borrull, E Pocurull, R M Marce. *J Chromatogr A.* (2003), 1010: 225-232.
5. J D Chahill, E Furlong, M R Burkhardt, D Kolpin, L G Anderson. *J Chromatogr A.* (2004), 1041: 171-180.
6. B Kasprzyk-Horden, D R Baker. *J Chromatogr A.* (2011), 1218: 1620-1631.
7. B Shao, D Chen, J Zhang, Y Wu, C Sun. *J Chromatogr A.* (2009), 1216: 8312-8318.

# Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

Waters, Oasis, ACQUITY UPLC, UPLC, Xevo和The Science of What's Possible是沃特世公司的注册商标。  
TargetLynx和Quanpedia是沃特世公司的商标。其它所有商标均归各自的拥有者所有。

沃特斯中国有限公司  
沃特世科技(上海)有限公司

北京: 010 - 5209 3866  
上海: 021 - 6156 2666  
广州: 020 - 2829 5999  
成都: 028 - 6578 4990  
香港: 852 - 2964 1800

免费售后服务热线: 800 (400) 820 2676  
[www.waters.com](http://www.waters.com)