
FESE研究 模拟饮用水中的高分子量消毒副产物：基于基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱的表征与鉴定

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36507.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

FESE研究

模

拟饮

用水中的

高分子量消毒副产

物：基于基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱的表征与鉴定。论文标题：High-molecular-weight disinfection byproducts in simulated drinking water: characterization and identification via matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry

期刊：Frontiers of Environmental Science Engineering

作者：Zi-Ang Zhang, Liangliang Han, Guang Huang, Peng Shi, Qing Zhou, Jingfan Qiu, Yang Pan

发表时间：8 May 2025

DOI：10.1007/s11783-025-2024-5

微信链接：[点击此处阅读微信文章](#)

近日，南京大学环境学院潘旻副教授和南京医科大学病原体生物学与免疫学系邱静凡等在Frontiers of Environmental Science Engineering期刊第19卷第8期发表了题为High-molecular-weight disinfection byproducts in simulated drinking water: characterization and identification via matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry的研究论文。

RESEARCH ARTICLE

High-molecular-weight disinfection byproducts in simulated drinking water: characterization and identification via matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry

Zi-Ang Zhang¹, Liangliang Han¹, Guang Huang², Peng Shi¹, Qing Zhou¹, Jingfan Qiu ³, Yang Pan ¹

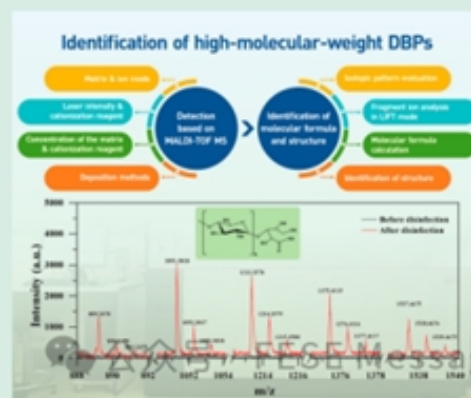
1. State Key Laboratory of Water Pollution Control and Green Resource Recycling, School of Environment, Nanjing University, Nanjing 210023, China

2. Center for Global Health, School of Public Health, Nanjing Medical University, Nanjing 211166, China

3. Key Laboratory for Pathogen Infection and Control of Jiangsu Province, Department of Pathogen Biology and Immunology, Nanjing Medical University, Nanjing 211166, China

HIGHLIGHTS

- Detection method of HMW DBPs using MALDI-TOF MS was established.
- Molecular and structural identification of HMW DBPs was performed.
- Identified HMW DBPs were oligosaccharides with oxidized end groups.



饮用水消毒是保障公共健康的重要环节，但消毒过程中消毒剂与水中天然有机物反应会生成消毒副产物（DBPs）。其中，高分子量消毒副产物（HMW DBPs）因占总有机卤素含量的50%左右，并存在致突变性，其健康风险近年来备受关注。然而，现有的检测方法存在明显局限性，其中气相色谱-质谱（GC-MS）适用于挥发性低分子量DBPs，电喷雾电离-高分辨质谱（ESI-HRMS）则因低分子量偏差难以准确分析HMW DBPs，导致其分子结构与毒性机制研究长期滞后。

本研究针对HMW DBPs的检测需求，系统优化了基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱（MALDI-TOF MS）的实验条件。通过对比反射/线性正负离子模式下的检测效果，发现反射正离子模式可显著提升信号强度；进一步筛选超-2,5-二羟基苯甲酸（super-DHB）、CHCA等6种基质后，确定super-DHB在正离子模式下电离效率最高且变异系数最低。在激光强度优化中，90%激光能量下信噪比达到峰值，而过高能量会导致样品燃烧。阳离子化试剂筛选显示，2 mg/mL三氟乙酸钠（NaTFA）可促进目标物形成 $[M + Na]^+$ 离子，峰强度显著高于硝酸银与氯化钾。沉积方法对比中，三明治法则通过两层基质包裹样品，获得了直径小于50 μm 的均匀晶体，信噪比达134.9且变异系数仅3.8%，优于干燥液滴法等其他三种方法（图1）。

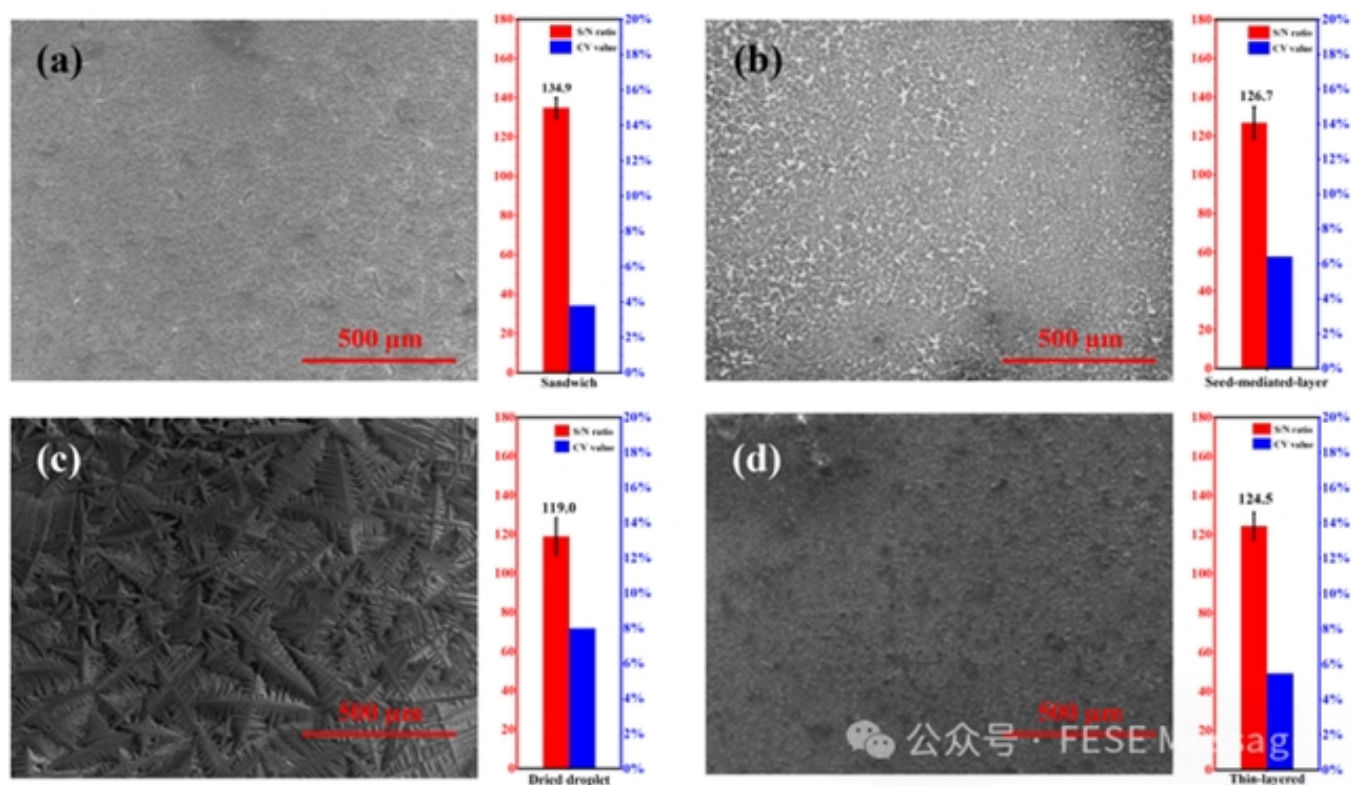


图1 200倍放大倍数下样品晶体的扫描电子显微镜图像。

基于优化条件（20 mg/mL super-DHB基质、2 mg/mL NaTFA、反射正离子模式、激光强度90%、三明治沉积法），团队在模拟饮用水中检测到了5组间隔162 Da（淀粉单体分子量）的特征峰（图2）。同位素模式分析显示，这些物质不含卤素原子；结合激光诱导解离（LIFT）模式串联质谱，观察到质荷比（ m/z ）为185、347、509等系列寡糖碎片离子，提示其为淀粉氧化降解产物（图3）。进一步通过数据库对比与元素组成分析，最终确定这些HMW DBPs的分子组成为 $C_{30}H_{51}O_{27}Na$ 、 $C_{36}H_{61}O_{32}Na$ 等，均为末端羧基化的聚葡萄糖醛酸钠盐。结构解析表明，这些产物源于淀粉在氯化消毒过程中的选择性氧化——葡萄糖残基的C6位羟基转化为羧基，同时糖苷键断裂形成低聚糖链。

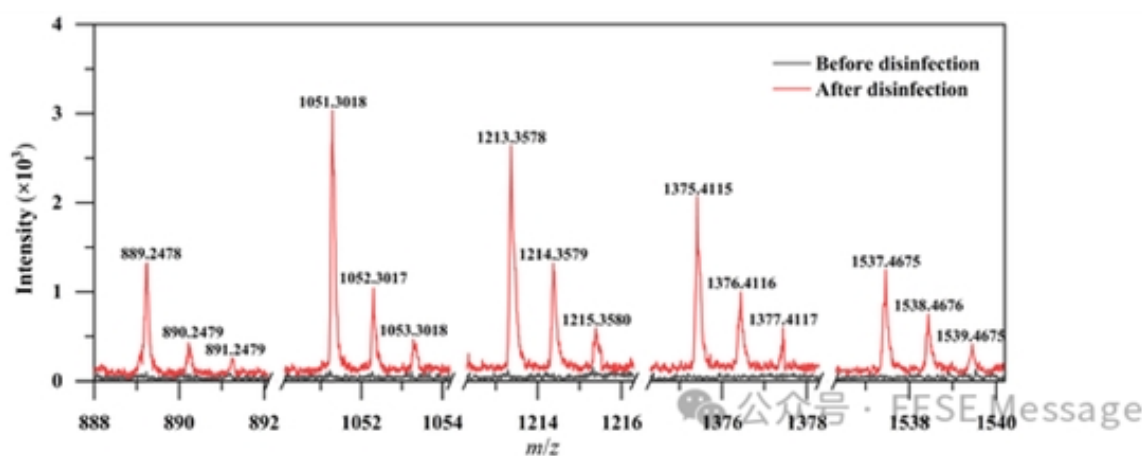


图2 优化条件下制备和检测的模拟样品基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱图。



扫码获取文章原文

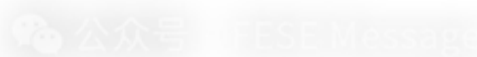
本文内容来自FESE期刊2025年第19卷第8期发表的研究论文High-molecular-weight disinfection byproducts in simulated drinking water: characterization and identification via matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry。通讯作者为南京大学环境学院潘旻副教授和南京医科大学邱静凡。

引用格式：Zi-Ang Zhang, Liangliang Han, Guang Huang, Peng Shi, Qing Zhou, Jingfan Qiu, Yang Pan. High-molecular-weight disinfection byproducts in simulated drinking water: characterization and identification via matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. *Front. Environ. Sci. Eng.*, 2025, 19(8): 104 <https://doi.org/10.1007/s11783-025-2024-5>

期刊简介



Impact Factor
6.4



Frontiers of Environmental Science Engineering是由高等教育出版社、中国工程院和清华大学共同主办的环境领域综合学术期刊，聚焦环境领域前沿问题与研究成果，重点关注开创性、跨学科的研究，致力于打造具有国际影响力的高水平学术交流平台，是中国工程院院刊系列期刊、中国科技期刊卓越行动计划入选期刊。

主编：曲久辉院士，John Crittenden院士

期刊官网1（国内免费获取）

<https://journal.hep.com.cn/fese/EN>

期刊官网2

www.springer.com/journal/11783

欢迎关注



来源：Frontiers of Environmental Science & Engineering

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发