中国物理学会
质谱分会

西南交通大学
Southwest Jiaotong University

2026

中国环境质谱大会暨
无机和同位素质谱学术研讨会

大会论文集

主办 / 中国物理学会质谱分会
中国化学会质谱分析专业委员会

承办 / 西南交通大学

2026年10月23-26日 | 中国·成都



目录

1、先进质谱仪器及核心部件研发

序号	稿件名称（Title）	页码
1-1	超高效液相色谱-三重四极杆质谱联用仪研制与应用	1
1-2	超快激光解吸/电离质谱成像仪器研制与方法研究	3
1-3	蛋白质-配体相互作用分析质谱新仪器和新方法	4
1-4	飞秒激光烧蚀电离质谱的 ng/g 级固体痕量元素直接分析	5
1-5	Direct Analysis of Solid Trace Elements at ng/g Level by Femtosecond Laser Ablation Ionization Mass Spectrometry	6
1-6	国产专用同位素质谱仪及核心部件研发验证实践	7
1-7	Development and Validation Practice of Domestic Isotope Mass Spectrometers and Their Core Components	8
1-8	基于稀疏信号恢复与同位素解卷积的元素飞行时间质谱自动化解谱软件	9
1-9	Analysis Based on Sparse Signal Recovery and Isotope-Constrained Fitting	10
1-10	激光溅射电离质谱仪的研制	11
1-11	离子软着陆-STM-同步辐射一体化成像与谱学	12
1-12	新维度反应质谱仪器开发和应用	13
1-13	真空紫外（VUV）单光子后电离质谱成像技术及最新进展	14
1-14	双离子源 Q Trap 并行小型质谱及自动采样进样一体化系统	15

序号	稿件名称（Title）	页码
1-15	Real-time detection technology of biochemical hazardous substances based on small mass spectrometry	16

2、质谱分析新方法和新应用

序号	稿件名称（Title）	页码
2-1	AI 辅助的多引擎挖掘策略用于复杂体系全成分快速解析	17
2-2	N-丁基-9-氨基吖啶用于耐药细菌类脂 A 的 MALDI-MS 分析	18
2-3	XAFS-MS 联用探究 S 修饰的 RuO2 的酸性 OER 溶出抑制	19
2-4	Coupling XAFS–MS Study on the Suppression of Ru Demetallation in S-Modified RuO_2 during Acidic Oxygen Evolution	20
2-5	单细胞代谢物质谱流式分析	21
2-6	电喷雾电离质谱在大气新粒子形成机理研究中的应用	22
2-7	二氧化碳催化转化原位质谱-红外联用分析	23
2-8	功能化共价有机框架材料在质谱/原子光谱分析中的应用	24
2-9	COF-Based Single-Atom Materials：Synthesis, Regulation and Applications in Mass Spectrometry/Atomic Spectrometry Analysis	25
2-10	光化学蒸气发生自由基机理与光催化增强 ICP-MS 痕量元素检测	26
2-11	环境质谱分析：从污染现场到无人智能化	27
2-12	微滴表面超快光催化降解研究	28
2-13	基于活细胞标记的单细胞硫醇亚代谢组分析	29
2-14	Single-cell thiol profiling enabled by live-cell labeling	30
2-15	基于晶态材料的激光解吸电离质谱技术及其在环境毒理与疾病诊断中的应用	31

序号	稿件名称（Title）	页码
2-16	基于硼亲和原理的质谱分析方法	33
2-17	基于色谱-ICPMS 法的金属形态分析及体内代谢过程研究	34
2-18	Metal Speciation Analysis and In Vivo Metabolism Studies Based on Chromatography-ICPMS	35
2-19	基于稀疏信号恢复与同位素解卷积的元素飞行时间质谱自动化解谱软件	36
2-20	Analysis Based on Sparse Signal Recovery and Isotope-Constrained Fitting	37
2-21	加速器质谱技术及其环境示踪应用研究（邀请报告）	38
2-22	Accelerator mass spectrometry technology and environmental tracing applications	39
2-23	近无损单细胞取样用于单细胞时序代谢组学分析	40
2-24	面向疾病分类的 MALDI-TOF 多维图像特征融合端到端深度学习网络	41
2-25	An End-to-End Deep Learning Network with Multi-Dimensional Image Feature Fusion for Disease Classification Based on MALDI-TOF	42
2-26	膜介质-激光剥蚀-质谱联用分析对高纯稀土氧化物痕量元素检测的解决方案	43
2-27	Membrane Deposition-Laser Ablation-Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Analysis: A Solution for Trace Element Detection in High-Purity Rare Earth Oxides	44
2-28	纳米基质增强 MALDI-MS 灵敏度、成像质量的新方法研究	45
2-29	纳米孔道电化学测量在环境分析中的应用探讨	46
2-30	气液界面放电与大气环境相关的质谱分析	47

序号	稿件名称（Title）	页码
2-31	Electrical discharge induced by droplet fission	48
2-32	上海光源用户辅助实验系统质谱联用介绍	49
2-33	双模化学同位素标记衍生化技术联合液相色谱-高分辨质谱分析方法开发与环境健康应用	50
2-34	水体中重金属和有机污染物迁移性的直接质谱分析研究	51
2-35	水自由基试剂离子高灵敏检测全氟烷烃	52
2-36	异构体分辨的精准质谱分析	53
2-37	Precise Mass Spectrometry Analysis at the Isomer Level	54
2-38	用空气作为 ICP-MS 的碰撞反应气定量检测环境水体	55
2-39	Air-Based Collision/Reaction Cell ICP-MS for Multi-Element Determination in Environmental Waters	56
2-40	铀同位素的外标归一化法研究进展	57
2-41	直接电离质谱技术在资源环境样品金属组分分析中的应用研究	58
2-42	Direct Ionization Mass Spectrometry for Metal Component Analysis of Resource and Environmental Samples	59
2-43	质谱生物检测纳米标签技术	60
2-44	Nanotags for Enhanced Mass Spectrometric Bioassay	61

3、环境新污染物质谱分析

序号	稿件名称（Title）	页码
3-1	PM2.5 中聚乙烯微塑料的快速质谱分析新策略	62
3-2	Revealing Unknown PFAS via Cross-Modal Contrastive Learning from MS/MS Spectra to Molecular Structures	63
3-3	SPE-UPLC-MS/MS 测定污水处理厂进出水及受纳水体中抗炎草药来源的活性药物成分	65
3-4	Widespread Occurrence of Tire Wear p-Phenylenediamines and their Quinones in Cloud Water	66
3-5	从微纳米塑料到轮胎橡胶：质谱定量方法及应用	67
3-6	对苯二胺（醌）的环境质谱分析	69
3-7	多壳层异质结构质谱基质在临床代谢诊断的研究	70
3-8	高分辨质谱辅助的 CoFe 双原子催化体系降解抗生素机制研究	71
3-9	环境/食品中对苯二胺抗氧化剂及其醌衍生物的快速质谱分析	72
3-10	环境土壤及水体中痕量全氟烷基磺酰氟的分析	73
3-11	环境微塑料和低聚物检测分析	74
3-12	环境污染物及其代谢影响的质谱成像研究	75
3-13	环境中锂元素的高精度分析、来源与风险评估	76
3-14	基于 LC-MS/MS 的污水中毒品及新精神活性物质高通量检测与污水流行病学稳定性研究	77
3-15	基于质谱靶向/非靶向识别新型有机磷污染物	78

序号	稿件名称（Title）	页码
3-16	金属有机框架材料用于复杂基质中新污染物的分离分析与质谱检测应用	79
3-17	Metal-organic frameworks composites in the separation and mass spectrometry determination of emerging contaminants from complex matrices	80
3-18	聚苯乙烯纳米塑料共暴露下 PFOS 及其新兴替代品 6:2 FTSA 的毒性研究：来自肠—肝轴的启示	82
3-19	气候行动下全球钢铁冶炼过程中非故意持久性有机污染物排放特征	83
3-20	水中对苯二胺类抗氧化剂的快速 SALDI-TOF-MS 检测：基于磁性单层纳米 MXene 的前处理与检测平台	84
3-21	微液滴发生方法开发及其界面 NO2 反应质谱研究	85
3-22	在线分析质谱法及在污染物转化机理研究的应用	86
3-23	中国水体中对苯二胺（醌）的全国性污染特征与暴露风险	87

4、环境污染物非靶标分析

序号	稿件名称（Title）	页码
4-1	MXene 杂化吸附剂用于热敏纸中双酚类物质的移液器吸头微固相萃取	88
4-2	Zr/Eu-BDC-NH2比率荧光探针用于炭疽标志物和汞离子连续传感检测	89
4-3	A Zr/Eu-BDC-NH2 Ratiometric Fluorescent Probe for Sequential Sensing of Anthrax Biomarker and Mercury Ions	90
4-4	基于膜蛋白VDAC1亲和捕获的潜在线粒体毒性化合物高通量筛查	91
4-5	人工智能赋能非靶向筛查	92
4-6	Artificial Intelligence for Nontarget Screening	93
4-7	基于FT-ICR超高分辨率质谱的三七耦合环境污染物与生物信号分子非靶向化学指纹解析 Non-targeted chemical fingerprinting analysis of Panax notoginseng coupled environmental pollutants and biological signaling molecules based on FT-ICR ultra-high-resolution mass spectrometry	94
4-8	珠江口大气棕碳关键吸光组分的高分辨质谱解析	95
4-9	组分分离与高分辨质谱联用策略高通量分析农药杂质	96

5、无机及同位素质谱基础及应用

序号	稿件名称（Title）	页码
5-1	ICP-MS生物分析：元素标签工具箱及进样装置	97
5-2	车载四极杆质谱系统的设计及应用	98
5-3	分选芯片-ICP-MS联用技术用于循环肿瘤细胞的检测及其表型分析	99
5-4	国产自研磁电双聚焦热电离质谱仪(DF-TIMS)的40K同位素高精度测定和行星科学应用	100
5-5	基于LA-ICP-MS联用技术的多模态质谱成像方法及生物医学应用	101
5-6	基于国产硅胶发射剂对铅探测效率的优化	103
5-7	激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱法测定金矿中金元素	105
5-8	金属单细胞ICP-MS测定技术与应用研究	106
5-9	纳米塑料在黄瓜全生长周期内的分布及对食物链风险评估	107
5-10	土壤/沉积物中金属纳米颗粒的spICP-MS分析及溯源方法研究	109
5-11	微米空间分辨VUV-TOF质谱U-Pb定年及应用	110
5-12	稳定同位素质谱技术在产地溯源及同位素示踪中的应用	111
5-13	稳定同位素质谱在生态环境保护中的应用	112
5-14	原子光谱/质谱分析进样技术研究	114

6、质谱成像理论与方法

序号	稿件名称（Title）	页码
6-1	MALDI 质谱成像分析性能提升— 从新型基质开发到像素级质量校准	117
6-2	单细胞质谱成像	118
6-3	光谱分析与成像新方法	119
6-4	金属离子与有机代谢物同时组织成像：软电离策略与应用	120
6-5	面向大尺寸样品与原位非靶向代谢物鉴定的两种质谱成像新方法	122
6-6	协同基质在MALDI质谱成像中的应用	124

7、污染物环境效应与健康风险

序号	稿件名称（Title）	页码
7-1	Microdroplet-Enhanced Photoaging of Polystyrene Microplastics: Interfacial ROS Generation, Molecular Transformation, and Ecotoxicity Potential	126
7-2	pH变化下血细胞铅的分配行为与蛋白结合机制	127
7-3	环境污染物暴露后小鼠血液与肝脏的转录组响应：组织异质性及表达与剪接分析的互补性	128
7-4	不同海产品中汞的形态特征、生物可及性和生物利用率评估	129
7-5	环境相关剂量壬基酚慢性暴露通过花生四烯酸代谢依赖性炎症促进乳腺癌进展	130
7-6	晶体二氧化硅介导胞葬进程的多元机器学习模型构建与机制解析	132
7-7	空气污染物长期暴露与全球癌症负担	133
7-8	快速等离子体辅助合成UiO-66-NH2@MoS2异质结 用于压电催化去除抗生素	134
7-9	液质联用分析环境污染物及健康效应研究	135

8、质谱检测技术

序号	稿件名称（Title）	页码
8-1	TCEP/IAA衍生化与CE-ICP-MS检测细胞内硒代半胱氨酸（SeC）	136
8-2	复杂样品循环分离检测研究进展	138
8-3	固相微萃取-气相色谱-串联质谱法富集检测食品中痕量卤代污染物	139
8-4	国产离子色谱-质谱联用关键技术与应用	140
8-5	基于混合金属离子标记物信号放大的COF荧光阵列用于蜂蜜溯源及掺假鉴别	141
8-6	基于加速器质谱技术的10Be/7Be比值示踪平流层入侵研究	144
8-7	基于液相色谱-串联质谱技术的预制食品中有机磷酸酯污染监测与人群暴露评估	145
8-8	氪同位素的多接收电感耦合等离子体质谱测量技术研究进展	147
8-9	毛细管电色谱/固相微萃取-质谱技术及其药物分析应用	148

9、质谱分析样品前处理

序号	稿件名称（Title）	页码
9-1	COF基SPME-敞开式质谱联用检测全氟化合物	149
9-2	分子印迹-缺陷MOFs固相萃取-色谱-质谱分析食品中的真菌毒素	151
9-3	功能有机框架材料富集分析卤代有机污染物及其机理研究	152
9-4	化学标记驱动的蛋白质糖基化定量解码与功能解析	153
9-5	基于 ICP-MS 的磁性固相萃取前处理技术和微量元素可视化表征方法	155
9-6	基于超亲水印迹材料的痕量有机污染物精准萃取-质谱检测新方法	157
9-7	冷辅助固相微萃取-气相色谱-质谱法检测复杂基质中痕量液晶单体	158
9-8	离子印迹杂化整体聚合物用于元素形态的ICP-MS分析	159
9-9	面向高精度氪同位素分析的高效氪氩分离研究	160

先进质谱仪器及核心部件研发

超高效液相色谱-三重四极杆质谱联用仪研制与应用

赵忠俊[1, 2, *]，黄林[1],曾议霆[1]，李杰[1]，李成林[1]，廖童[1]，许云海[1]，段忆翔[1, 2, *]

（1. 成都艾立本科技有限公司，四川 成都 611930
2. 四川大学机械工程学院，四川 成都 610064 ）

超高效液相色谱-三重四极杆质谱（UHPLC-TQMS）具有高选择性、高灵敏度和良好定量性能，是环境、食品、药物及生命科学等领域复杂样品中痕量目标物定性与定量分析的重要技术平台[1]。随着复杂基质和超痕量分析需求不断增加，质谱仪对离子高效传输、离子束稳定性及背景噪声控制提出了更高要求[2]。离子由离子源进入质量分析系统的过程中，需跨越不同压力区域并经历多级离子光学传输，易受到碰撞损失、空间发散及中性粒子干扰等影响，进而制约离子利用效率和检测灵敏度[3-4]。

针对上述问题，本团队自主研制 UHPLC-TQMS，构建离子漏斗与“V-Tunnel”串联的离子传输结构，通过离子漏斗提高离子进入后级传输区域的有效通量，利用“V-Tunnel”的“V”型传输路径约束离子束传输并抑制中性粒子向后级真空区域传播，实现高效离子传输与低背景干扰。在此基础上，采用分段式线性四极杆碰撞池，通过分段四极杆施加梯度直流，实现离子的快速吸入与排出，提高多 MS/MS 通道切换效率并降低通道串扰。以 1 pg 利血平和氯霉素进行柱上进样测试，ESI+和 ESI−模式下连续 10 次进样的峰面积 RSD 均≤5 %，信噪比均＞2×10^6，检出限 IDL 为 0.137 fg。进一步将自研 UHPLC-TQMS 应用于 11 种全氟化合物（PFAS）的定量检测，在 0.5–50 ng/mL 浓度范围内建立校准曲线，11 种 PFAS 的相关系数 R^2均＞0.99。以 0.5 ng/mL 标准溶液测试结果计算，按 3 倍信噪比确定的检出限为 0.004–0.027 ng/mL，低于 GB/T 5750-2023 相关方法的校准曲线最低浓度点，表明该仪器具备良好的线性响应、灵敏度和定量稳定性，可满足复杂基质样品中痕量 PFAS 及其他目标物的高通量、精准定量分析需求。

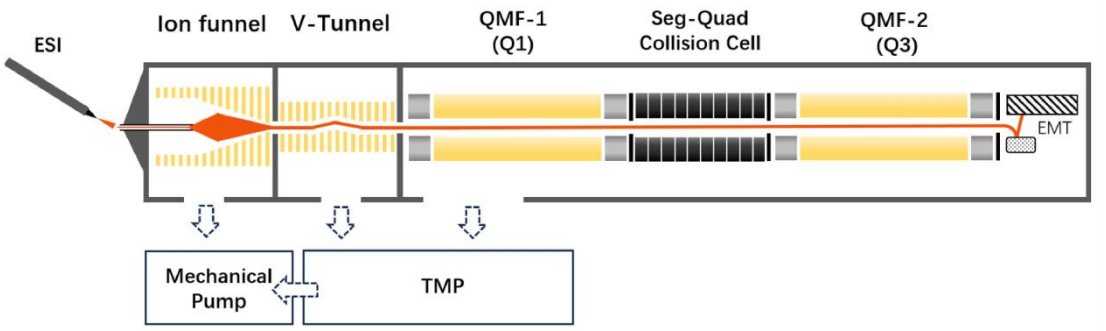


图 1 电喷雾-三重四极杆质谱结构示意图

关键词: 三重四极杆质谱;离子漏斗；分段四极杆；全氟化合物

参考文献

1. Glenn Loos, Ann Van Schepdael, Deirdre Cabooter; Quantitative mass spectrometry methods for pharmaceutical analysis. Phil. Trans. R. Soc. A 28 October 2016; 374 (2079): 20150366.
2. Covey T. Where have all the ions gone, long time passing? Tandem quadrupole mass spectrometers with atmospheric pressure ionization sensitivity gains since the mid-1970s. A perspective. Rapid Commun Mass Spectrom. 2025; 39(S1):e9354.
3. Shaffer SA, Prior DC, Anderson GA, Udseth HR, Smith RD. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry. Anal Chem. 1998 Oct 1;70(19):4111-9.

zhaozj@scu.edu.cn, 18181997128

4. Tsung-Chi Chen, Thomas L. Fillmore, Spencer A. Prost, Ronald J. Moore, Yehia M. Ibrahim, Richard D. Smith; Orthogonal Injection Ion Funnel Interface Providing Enhanced Performance for Selected Reaction Monitoring-Triple Quadrupole Mass Spectrometry. *Anal. Chem.* 21 July 2015; 87 (14): 7326–7331.

zhaozj@scu.edu.cn, 18181997128

超快激光解吸/电离质谱成像仪器研制与方法研究

殷志斌*，杭纬

厦门大学，化学化工学院，福建厦门，361005

*Email: zbyin@xmu.edu.cn.

表面辅助激光解吸/电离（SALDI）质谱在小分子生物分子检测与成像方面具备突出优势，但现有 SALDI 技术大多采用纳秒激光器，超快飞秒激光与 SALDI 结合的作用机制尚不清晰，同时普遍存在分子碎裂严重、碱金属加合物干扰背景高的问题，限制复杂生物样本的分析能力。为此，本团队搭建了一套分 fs～ns 脉宽可调的表面辅助激光解吸/电离飞行时间质谱（fs-SALDI-TOFMS）平台，以 AuNP、AgNP、PtNP、CNT 等纳米颗粒作为电离辅助基材，系统对比 600 fs ~ 5 ns 不同激光脉宽下的解吸和电离行为。实验结果表明，fs-SALDI 可显著抑制待测物分子碎裂，完全消除金团簇与碱金属加合离子带来的谱图干扰；对典型精神类与抗真菌药物实现低至～3 amol 的绝对检出限，单采样点可承受更多激光脉冲轰击，样品消耗显著低于纳秒 SALDI。基于该平台实现潜指纹中超痕量药物残留物以及小鼠脑组织脂质的高空间分辨质谱成像。此外，本工作还提出了飞秒激光诱导下的库仑场驱动解吸电离新机制，飞秒尺度电荷分离与库仑爆炸主导非热解吸电离过程，区别于传统 ns-SALDI 的热驱动解吸/电离机制。该工作为发展高性能超快激光表面辅助质谱成像技术提供理论依据与新的技术路径。

关键词: 单细胞质谱成像；表面辅助飞秒激光解吸/电离；高空间分辨率；超快激光；纳米基材.

参考文献

1. Y. Xu, X. Wu, W. Li, J. Hu, X. Chen, Z. Yin, W. Hang, *Sci. Adv.*, **2026**, 12, eadx8264.
2. Y. Leng, Y. Zhu, Q. Xu, Y. Chen, Y. Xu, T. Wang, S. Ma, Z. Yin, Z. Xu, W. Hang, *J. Am. Chem. Soc.*,**2026**, 148, 1561-1569.
3. Y. Jiang, Y. Leng, Y. Chen, Y. Xu, D. Luo, Z. Zhang, Z. Yin, C. Xiao, F. Wang, W. Hang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2026**, 148, 12194-12204.
4. H. Zhang, J. Luo, Q. Zhang, Y. Xu, Z. Yin, W. Hang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, 15923-15928.

*email: zbyin@xmu.edu.cn.

蛋白质-配体相互作用分析质谱新仪器和新方法

刘哲益[1]，王方军[1,*]

[1]中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市沙河口区中山路457号，116023

*Email: wangfj@dicp.ac.cn

蛋白质构象及其与金属离子、小分子和其他生物分子的相互作用是调控蛋白质功能的重要基础。质谱具有灵敏度高、样品消耗少以及能够表征多种蛋白质构象和非共价复合物等优势，为蛋白质动态结构及其与配体分子的相互作用研究提供了重要手段。然而，现有蛋白质结构质谱测量方法在串联质谱结构特征碎片高效获取、生理环境蛋白质共存构象表征以及配体结合位点精准解析等方面仍面临巨大挑战。我们围绕蛋白质结构与相互作用质谱表征的核心瓶颈问题，分别从蛋白质极紫外激光解离（UVPD）、细胞内蛋白质共存构象表征、蛋白质功能复合物结构和蛋白质–小分子相互作用位点解析等方面开展研究，发展系统性的蛋白质结构质谱分析新策略。针对传统体外纯化蛋白质质谱分析难以直接测量复杂细胞环境中蛋白质共存构象与相互作用的局限，我们发展了胞内蛋白紫外激光解离 Top-Down 质谱表征（In Cell UVPD-TDMS）新方法；通过整合活细胞诱导电喷雾离子化、非变性质谱和 193 nm 紫外光解离，以钙调蛋白（Calmodulin，CaM）为模型解析了细胞内蛋白的共存构象状态、钙离子（Ca2+）结合异质性及结构特征，揭示了不同构象钙调蛋白结合多个 Ca2+的精确位点。该方法实现了细胞内共存 CaM 构象的直接质谱检测和 Ca2+结合变体的构象差异解析，为细胞内蛋白质原位质谱表征及构象异质性研究提供了原创性分析技术。

飞秒激光烧蚀电离质谱的 ng/g 级固体痕量元素直接分析

王煜兵[1]，林泽辉[1]，张琪[1]，徐周毅[1*]，杭纬[2*]

1.厦门大学化学化工学院、智能仪器与装备学科，厦门，361005

2.厦门大学萨本栋微米纳米科学技术研究院，厦门，361005

摘要：固体材料中痕量杂质的快速直接测定对高纯材料质量控制具有重要意义。针对传统直接固体质谱存在谱干扰、基体效应及样品适用性受限等问题，本研究在缓冲气体辅助高辐照度激光烧蚀电离质谱（LAIMS）中引入 515 nm、600 fs 高重频飞秒激光和 TDC/ADC 双模式检测。飞秒激光可降低热效应和元素分馏，提高单位时间内原子化与电离效率；He 缓冲气体进一步抑制多电荷及团簇离子干扰。以系列铜标准样品评价性能，在 300 Hz 和 480 Pa He 条件下，系统质量分辨率约 8000。TDC 用于低丰度离子计数，ADC 用于高丰度信号采集，两种模式线性耦合后动态范围达到 9 个数量级。18 种痕量元素在 0.1–53 μg/g 范围内表现出良好线性，多数金属元素 R^2>0.99，检出限为 2.5–16.7 ng/g；谱干扰信号总和仅占总离子流约 1×10^{-5}。基于飞秒烧蚀下较均一的元素相对灵敏度[1]，进一步实现了无标样半定量分析，并在钢、矿物等样品中得到验证。作为高纯/功能材料应用拓展[3]，该方法用于 NIST 61X 系列标准玻璃和 K9 光学玻璃分析，所得结果与 GDMS 和 ICP-MS 总体一致。结果表明[2]，飞秒 LAIMS 兼具 ng/g 级检出能力、宽动态范围、低谱干扰和多类型固体适用性，可为高纯材料痕量杂质快速筛查提供新的技术路径。

关键词:飞秒激光；激光烧蚀电离质谱；直接固体分析；痕量元素；高纯材料

参考文献

1. Y. Wang, D. Luo, Q. Zhang, Z. Lin, Z. Xu, W. Hang, *Anal. Chem.*, **2025**, 97: 10085-10093.
2. Y. Wang, Q. Zhang, D. Luo, Z. Xu, S. Zhang, W. Hang, *Atom. Spectrosc.*, **2025**, 46(4): 327-336.
3. B. Zhang, M. He, W. Hang, B. Huang, *Anal. Chem.*, **2013**, 85: 4507-4511.

Email: zhouyixu@xmu.edu.cn; weihang@xmu.edu.cn

Direct Analysis of Solid Trace Elements at ng/g Level by Femtosecond Laser Ablation Ionization Mass Spectrometry

Wang Yubing[1], Lin Zehui[1], Zhang Qi[1], Xu Zhouyi[1*], Hang Wei[2*]

1. Department of Intelligent Instrumentation and Equipment, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China

2. Intelligent Instrumentation and Equipment, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China

ABSTRACT: The rapid and direct determination of trace impurities in solid materials is of great significance for the quality control of high-purity materials. In response to the problems such as spectral interference, matrix effect, and sample applicability limitations in traditional direct solid-state mass spectrometry, this study introduces 515 nm, 600 fs high-repetition-frequency femtosecond laser and TDC/ADC dual-mode detection in the buffer gas-assisted high irradiance laser ablation ionization mass spectrometry (LAIMS). The femtosecond laser can reduce thermal effects and element fractionation, and improve the atomicization and ionization efficiency per unit time; the He buffer gas further inhibits multi-charged and cluster ion interference. The performance was evaluated using a series of copper standard samples, and the system mass resolution was approximately 8000 under 300 Hz and 480 Pa He conditions. TDC is used for low-abundance ion counting, and ADC is used for high-abundance signal acquisition. The linear coupling of the two modes achieves a dynamic range of 9 orders of magnitude. 18 trace elements showed good linearity within the range of 0.1–53 μg/g, and most metal elements had $R^2 > 0.99$, with the detection limit ranging from 2.5 to 16.7 ng/g; the total spectral interference signal accounted for only about 1×10^{-5} of the total ion current. Based on the relatively uniform element relative sensitivity under femtosecond ablation[1], this method further achieved semi-quantitative analysis without a standard sample and was verified in steel and mineral samples. As an extension for high-purity/functional material applications[3], this method was used for the analysis of NIST 61X series standard glasses and K9 optical glass, and the results were consistent with GDMS and ICP-MS overall. The results show that [2], femtosecond LAIMS has the capabilities of ng/g detection, wide dynamic range, low spectral interference, and multi-type solid applicability, providing a new technical path for the rapid screening of trace impurities in high-purity materials.

KEY WORDS: Femtosecond laser; Laser ablation ionization mass spectrometry; Direct solid sample analysis; Trace elements; High-purity materials

REFERENCES

1. Y. Wang, D. Luo, Q. Zhang, Z. Lin, Z. Xu, W. Hang, *Anal. Chem.*, **2025**, 97: 10085-10093.

2. Y. Wang, Q. Zhang, D. Luo, Z. Xu, S. Zhang, W. Hang, *Atom. Spectrosc.*, **2025**, 46(4): 327-336.

3. B. Zhang, M. He, W. Hang, B. Huang, *Anal. Chem.*, **2013**, 85: 4507-4511.

Email: zhouyixu@xmu.edu.cn; weihang@xmu.edu.cn

国产专用同位素质谱仪及核心部件研发验证实践

李伯平[1]，郭冬发[1*]，刘桂方[1]，谢胜凯[1]，李军杰[1]，谭靖[1]

1. 核工业北京地质研究院，北京市朝阳区小关东里 10 号院，北京 100029

通用同位素质谱仪追求配置全、功能多，但在实际工作中许多配置和功能长期闲置，导致资源浪费。针对此背景，我们牵头组织国内力量验证了涡轮分子泵、磁流电源闭环控制器、电子倍增器、24 位 ADC、18 位 DAC 和 fA 级运算放大器等核心部件，研发了基于国产核心部件的专用同位素质谱仪，以满足特定应用场景需要。

M90 型锂同位素分析热电离质谱仪[1]是专用热电离质谱仪的典型代表。该仪器只针对锂同位素分析设计，配置 10 工位离子源、离子透镜、磁分析器、4 通道法拉第杯检测器、配套真空和电子测量系统，整机体积大幅度缩小，而锂同位素测量效果显著提高。基于国产核心部件的 M90 型热电离质谱仪，对天然锂同位素分析，$\delta^{7}Li$ 测量精密度达到 0.2‰，满足锂同位素溯源要求。

展望未来，针对一个特定应用场景的专用质谱仪，可以通过优化设计，突出被测对象指标，摒弃多余功能，大幅度提高性价比，是国产质谱仪突围的方向之一。

关键词: 专用质谱仪；核心部件；锂同位素

参考文献

郭冬发, 李伯平, 汤书婷, 等. 紧凑型锂同位素分析热电离质谱仪研制[J]. 世界核地质科学, 2024, 41(4): 633-649.

Corresponding author: guodongfa0322@hotmail.com, Tel: 13511062560

Development and Validation Practice of Domestic Isotope Mass Spectrometers and Their Core Components

Li Boping[1], Guo Dongfa[1*], Liu Guifang[1], Xie Shengkai[1], Li Junjie[1], Tan Jing[1]

1. Beijing Research Institute of Uranium Geology, No. 10 Xiaoguandongli, Chaoyang District, Beijing 100029, China

ABSTRACT: General-purpose isotope mass spectrometers are designed with comprehensive configurations and multiple functions; however, in practical work, many of these configurations and functions remain idle for long periods, resulting in a waste of resources. Against this background, we organized domestic efforts to validate a series of core components, including turbomolecular pumps, closed-loop controllers for magnet power supplies, electron multipliers, 24-bit ADCs, 18-bit DACs, and femtoampere (fA)-level operational amplifiers, and developed a special-purpose isotope mass spectrometer based on domestic core components to meet the needs of specific application scenarios.

The M90 thermal ionization mass spectrometer for lithium isotope analysis [1] is a typical representative of such special-purpose thermal ionization mass spectrometers. This instrument is designed exclusively for lithium isotope analysis, equipped with a 10-sample-position ion source, ion lenses, a magnetic analyzer, a 4-channel Faraday cup detector, and supporting vacuum and electronic measurement systems. The overall size of the instrument is substantially reduced, while the performance of lithium isotope measurement is significantly improved. Based on domestic core components, the M90 thermal ionization mass spectrometer achieves a δ^7Li measurement precision of 0.2‰ for natural lithium isotope analysis, meeting the requirements for lithium isotope traceability.

Looking into the future, for special-purpose mass spectrometers targeting specific application scenarios, performance and cost-effectiveness can be dramatically improved through optimized design that highlights the key indicators of the analytes while eliminating redundant functions. This represents one of the promising directions for the breakthrough of domestic mass spectrometers.

KEY WORDS: special-purpose mass spectrometer; core components; lithium isotope

REFERENCES

D. Guo, B. Li, S. Tang, et al., World Nuclear Geoscience, 2024, 41, 633-649.

Corresponding author: guodongfa0322@hotmail.com, Tel: 13511062560

基于稀疏信号恢复与同位素解卷积的元素飞行时间质谱自动化解谱软件

刘浩楠[1]，徐周毅[2,*]，杭纬[1,*]

1，厦门大学智能制造学院，福建 厦门 361005，中国

2，厦门大学化学化工学院化学系，谱学分析与仪器教育部重点实验室，福建 厦门 361005，中国

飞行时间质谱（TOFMS）是固体直接分析的重要技术。在元素分析领域，它主要涵盖激光烧蚀电离质谱（LAIMS）和辉光放电质谱（GD-TOFMS）等平台。然而，其质谱数据常伴有异方差噪声、动态基线漂移以及不可避免的同位素与多原子离子干扰，对数据处理的自动化和定量的准确性构成了重大挑战。本研究开发了一种结合稀疏信号恢复与同位素约束拟合解卷积的自动化数据处理算法，在实现了谱图的自动基线扣除与降噪的同时自适应确定峰检测阈值以提高寻峰精度，此外算法构建了全谱动态双侧水晶球（DSCB）模型，实现了对随时间变化的非对称峰形的精确建模。通过建立靶向多原子离子干扰库，结合同位素约束与非线性最小二乘拟合方法，实现了重叠峰的自动解析。结果表明，在无需人工干预的情况下，该方法能够有效解耦复杂基质中的重叠峰。在针对多种基质样品的分析中，该算法计算出的浓度与人工测定结果高度一致（$R^2 > 0.99 R^2 > 0.99$），显著提升了数据处理通量以及痕量元素的检测能力。

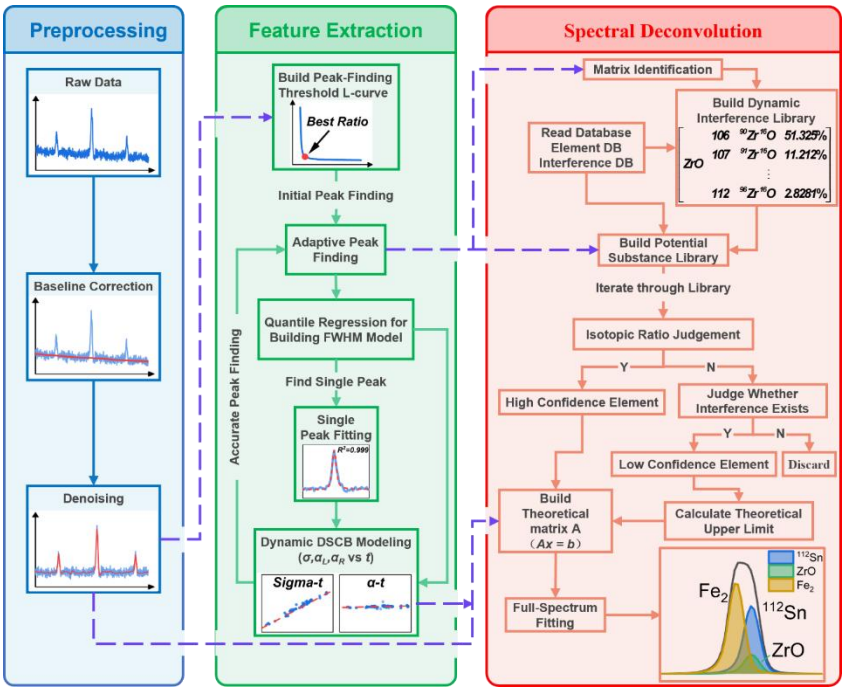


Fig. 1 Flowchart of the program

关键词：自动化解卷积；稀疏信号恢复；同位素约束拟合；飞行时间质谱

zhouyixu@xmu.edu.cn, 13600798695.

Analysis Based on Sparse Signal Recovery and Isotope-Constrained Fitting

Haonan Liu[1], Zhouyi Xu[2,*], Wei Hang[1,*]

1. Department of Chemistry, MOE Key Lab of Spectrochemical Analysis & Instrumentation, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China.

2. School of Intelligent Manufacturing, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China.

Time-of-flight mass spectrometry (TOFMS), including laser ablation (LAIMS) and glow discharge (GD-TOFMS) platforms, is vital for direct solid analysis. However, heteroscedastic noise, baseline drift, and spectral interferences challenge automated data processing and quantitative accuracy. This study develops an automated algorithm integrating sparse signal recovery with isotopically constrained deconvolution. It performs automated baseline subtraction, denoising, and adaptive thresholding to enhance peak-picking accuracy. Additionally, a full-spectrum dynamic Double-Sided Crystal Ball (DSCB) model precisely characterizes time-dependent asymmetric peak shapes. Overlapping peaks are automatically resolved utilizing a targeted polyatomic interference library, isotopic constraints, and non-linear least squares fitting. Results demonstrate effective, intervention-free decoupling of overlapping peaks within complex matrices. The algorithm-derived concentrations align highly with manual measurements ($R^2 > 0.99$), significantly improving data processing throughput and trace element detection capabilities.

zhouyixu@xmu.edu.cn, 13600798695.

激光溅射电离质谱仪的研制

杭纬*

厦门大学化学化工学院，福建 厦门 361005

高纯材料中的痕量杂质元素直接影响材料性能，因此发展快速、多元素、高灵敏的直接固体分析技术具有重要意义。针对传统质谱方法存在的元素分馏、基体效应及多原子离子干扰等问题，本研究自主研制了氦气辅助高灵敏度飞秒激光烧蚀电离质谱（fs-LAIMS）。该方法通过飞秒激光降低元素分馏，并结合氦气缓冲减少多原子离子干扰。针对痕量与主量元素信号跨度大的问题，融合时间数字转换器（TDC）与模数转换器（ADC）采集模式，将响应动态范围扩展至 9 个数量级；以阴极铜标准样品验证仪器性能，部分元素检出限达到个位数 ng/g 水平。进一步以 NIST SRM 610、612 和 614 玻璃标准样品开展元素分析，质谱背景干净、无明显多原子离子干扰，检出限为 0.1～0.3 μg/g；结合氧含量校正建立了无标样半定量方法。不锈钢和土壤标准样品的验证结果进一步表明，该平台具有良好的跨基体适用性，可为高纯材料快速痕量元素分析提供新的技术手段。

关键词 激光溅射电离质谱，高纯材料，痕量元素分析，无标样半定量

参考文献:

[1] J. *Pisonero, B. Fernández, and D. Günther. J. Anal. At. Spectrom.* **2009**, 24, 1145-1160.

[2] Y. *Wang, D. Luo, Q. Zhang, Z. Lin, Z. Xu, and W. Hang. Anal. Chem.* **2025**, 97, 10085-10093.

[3] Y. *Wang, Q. Zhang, D. Luo, Z. Xu, S. Zhang, and W. Hang. At. Spectrosc.* **2025**, 46, 327-336.

离子软着陆-STM-同步辐射一体化成像与谱学

李霄鹏 [1,*]

1. 中国科学院上海有机化学研究所，上海市零陵路 345 号，200032

如何高效地实现复杂分子体系的原子级分辨率表征是合成化学面临的重要挑战。我们团队近年来融合离子软着陆、扫描隧道显微镜（STM）、针尖增强拉曼（TERS）和同步辐射技术搭建离子软着陆单分子成像系统。其中，离子软着陆用于分子分离、纯化和制备，STM 用于结构可视化和分子轨道表征，STM 的针尖作为同步辐射的探测器实现单个原子的元素和价态确认，TERS 技术则用于化学键和官能团等信息的埃级分辨识别。此一体化系统并非质谱、STM、同步辐射和拉曼光谱的简单组合，而是通过 STM 桥联，充分地发挥离子软着陆在质量筛选、STM 在高精度成像、同步辐射在元素价态分析和 TERS 在官能团识别等方面的优势，实现协同增强效果。

关键词: 离子软着陆，STM,同步辐射

参考文献

1. Z. Zhang, J.L. Sessler, S.-W. Hla, X. Li, et al. *Nat. Chem.* **2020**, 12, 468
2. T. M. Ajayi, V. Rose, X. Li, S.-W. Hla, et al. *Nature* **2023**, 618, 69
3. F. Su, Z. Chen, T. Wang, X. Li, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2026**, 148, 15873
4. C. Du, L. Dai, X. Li, D. A. Leigh, L. Zhang, et al. *Nat. Chem.* **2026**, DOI: 10.1038/s41557-026-02197-4

xiaopengli@sioc.ac.cn, 15617882712

新维度反应质谱仪器开发和应用

王娜，岳磊*

（湖南大学　生物学院，湖南省　长沙市，410000）

在化学与生命体系中，生物大分子与活性中间体往往具有构象复杂、寿命短、反应路径多等特征，其质谱检测与结构解析长期面临“难生成、难操控、难解析”的关键挑战。

反应质谱是融合先进质谱仪器与特异性反应的化学测量技术，可为复杂分子体系精准表征提供重要支撑。自 20 世纪 80 年代陈耀祖先生开创我国反应质谱研究先河以来，该技术正从立体化学分析向高活性分子、复杂生物体系及多维结构解析纵深拓展，对离子生成效率、操控精度与表征维度提出了更高要求。

这次会议主要介绍近几年课题组开发的新型反应质谱技术及其在蛋白、团簇、反应中间体的可控生成、传输、机理和应用研究。

关键词：反应质谱；离子淌度质谱；气相离子化学；反应中间体

参考文献

[1]Yue L., etc., Dual Enhancement of Protein Imaging in Complex Tissues Using HydroWash: A Sequential Washing and Hydrogel Conditioning Strategy for DESI-MS, Analytical Chemistry, 2025,97,19092-19100.

[2] Yue L., etc.,Comprehensive Analysis of Metabolic Response in Arabidopsis thaliana under Heavy Metal Stress by Mass Spectrometry, Journal of Hazardous Materials，2026，502，140616.

[3] Yue L., etc., The Electric Field as a "Smart" Ligand in Controlling the Thermal Activation of Methane and Molecular Hydrogen; Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57，14635-14639.

[4] Yue L., etc., Direct Room-temperature Conversion of Methane into Protonated Formaldehyde: the Gas-phase Chemistry of Mercury Oxide Cation; Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 3251 – 3255.

[5] Yue L., etc., Control of Product Distribution and Mechanism by Ligation and Electric Field in the Thermal Methane Activation; Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 10219 - 10223.

项目资助：国家自然科学基金委员会面上项目 (22174037)

国家重点研发计划(2025YFA1310300，2023YFF0613400;2024YFF0725802)

***通信作者**：岳磊，教授，E-mail: yuelei@hnu.edu.cn

实验室立足于技术和仪器创新，充分吸收国内外的新技术，开发具有自主知识产权的现代质谱，开展多维度的反应机理探究和分子结构分析等科学研究，解决生物医学、有机化学、催化反应、环境化学、分析化学中等学科中的相关问题。

真空紫外（VUV）单光子后电离质谱成像技术及最新进展

胡勇军[1*]，陆世杰，李安安[1]

[1]华南师范大学光电科学与工程学院，广州，510631

*Email: yjhu@scnu.edu.cn

质谱分子成像技术可实现对复杂样品中的化学成分空间分布的可视化分析，是近年来质谱分析领域的一个热点。本课题组创新性应用真空紫外（VUV）单光子电离技术系统开展了激光解析-激光后电离质谱生物组织分子成像技术的研究和应用。该技术中，采用一束红外/可见激光来解析气化生物样品，另一束为真空紫外光（118 nm），对解析出的中性气体进行单光子电离。该方法所使用的解吸激光能够提供足够的解析能量，可将非挥发性有机物分子单光子“软”电离，不易使分子发生解离，对于低相对分子质量的化学物质具有独特的优势。如图 1 所示的解吸激光与电离激光的相对独立设计，为不同种类分子实验条件的优化提供了便利。在实验过程中，两束激光作用位置不变，样品杆在三维平台的带动下进行步长小于 50 微米的匀速移动，每一次激光对于“over area”新检测区域进行照射，通过采取往返扫描模式，直到整个样品表面被扫描完。成像数据经过 Matalab 软件处理获得质谱成像图。本课题组已经成功将这一技术应用于各种生物组织的原位分析检测，最近，利用该技术我们探测获取得到斑马鱼切片内源性和外源性化学成分的二维空间分布（如图 2 所示）。该方法对于化学物质的最低检测线为 0.02 ppm。该成像技术为生物组织内源性和外源性化学成分的可视化分析领域提供了一种新的技术思路。

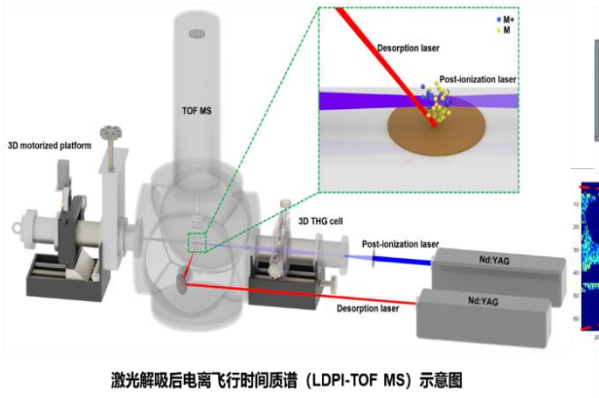


Fig. 1 Schematic drawing of the LDPI-MSI apparatus.

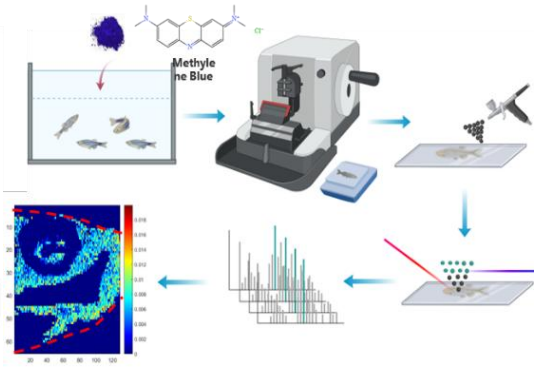


Fig. 2 LDPI-MSI of the zebra fish treated with Methylene Blue.

关键词：单光子“软”电离；原位分析；激光解吸；质谱成像；药物残留

参考文献

[1] J Chen, Y Hu, Q Lu, P Wang, H Zhan. The Analyst, **2017**, 142, 1119-1124.

[2] Q Lu, Y Hu, J Chen, S Jin. Analytical Chemistry, **2017**, 89, 8238-8243.

[3] W Nie, Y Hu, Q Lu, The Analyst, **2022**, 1(148): 175-181.

[4] A Li, S Lu, X Shang, H Zhang, M Xie, Q Lu, Y Hu. Analytical and Bioanalytical Chemistry, **2026**, 418: 2219–2229.

双离子源 Q Trap 并行小型质谱及自动采样进样一体化系统

徐伟[1*]，翟雁冰[1]，杜世宇[1]，杨宝坤[1]

[1]北京理工大学，北京市海淀区中关村南大街 5 号，100081

*Email: weixu@bit.edu.cn

针对现有小型质谱仪器定量准确性不足、检测通量有限的关键问题，本文提出基于时频变换的伪多反应监测（pseudo-MRM）质谱工作机制，通过实时离子筛选与精准操控，实现高效离子富集与干扰离子剔除，有效提升小型质谱的定量精度与检测通量。面向食品安全现场快速检测需求，适配非专业人员简易化操作场景，本文研发了一体化采样、前处理与电离试剂盒，并搭建数据非依赖采集（DIA）二级质谱分析方法。该体系仅需简单的样品接触、微萃取操作，即可完成实际食品样品中数百种化学成分的高通量检测。同时，本文自研搭载电喷雾-真空紫外双离子源的四极杆-离子阱（Q-Trap）杂化小型质谱仪器，可全面覆盖强、弱极性分子检测需求，支持高通量并行检测。整套仪器与方法体系实现了小型化、简易化、高性能的质谱定性定量分析，为现场快速筛查检测提供了可靠的技术支撑。



Fig. 1 Miniature ion trap mass spectrometer

关键词：小型质谱；化学毒剂；生物毒剂；微生物

Real-time detection technology of biochemical hazardous substances based on small mass spectrometry

Wei Xu[1], Baoqiang Li[2], Yanbing Zhai[1], Shiyu Du[1], Baokun Yang[1]

[1]Beijing Institute of Technology, 10081, Beijing

[2] Institute of Chemical Defense, Academy of Military Science, Beijing

The types of dangerous biochemical related substances to public safety are diverse, including dangerous chemicals, toxic agents, biological toxins, viral microorganisms, etc. Real - time and rapid detection of such substances is the basis for ensuring public safety. Similar to the miniaturization of computers, the miniaturization of mass spectrometers can greatly expand their applications outside the laboratory, especially on - site. However, miniaturizing the instrument is not simply making each component smaller. It is necessary to break through new principles and technologies according to the requirements of instrument miniaturization.

In this work, mainly aiming at problems such as quantitative accuracy and throughput after mass spectrometer miniaturization, the operating principle of pseudo - MRM mass spectrometry based on time - frequency transformation is introduced. Through real - time ion selection and manipulation, efficient ion enrichment and removal of interfering ions are achieved, ultimately realizing high quantitative accuracy and high throughput.

In the field of public safety applications, it is necessary to develop rapid and easy - to - use sample sampling and pretreatment methods to meet the operation requirements of non - professional personnel. Therefore, in this work, an integrated sampling, pretreatment, and ionization kit with relatively simple operation is developed, as well as an analysis method based on the DIA (Data - Independent Acquisition of MS/MS) mode. The system can achieve rapid, fully automated, and high - throughput detection of chemical toxic agents, biological toxic agents, microorganisms, etc.

质谱分析新方法和新应用

AI 辅助的多引擎挖掘策略用于复杂体系全成分快速解析

班玉娟 [1],缪雯 [1], 高澄枫, 伍建林 [1,*], 李娜 [1,*]

1. 澳门科技大学中药机制与质量研究全国重点实验室，澳门

环境样本、中药等复杂体系中存在数目繁多、类型丰富的化合物，LC-MS 可以快速、灵敏地采集这些化合物的信息，但后续结构解析面临数据库缺乏等难题。近年来，以深度学习、质谱智能解析为代表的人工智能（AI）技术迅猛发展，为复杂体系全成分的解析提供了快速的解决方法。本研究以药食同源中药、食品等为研究对象，创新性地构建了集成多引擎挖掘策略（IMMS），包括基于特征的分子网络（FBMN[1]）、基于结构单元的分子网络（BBMN）、SIRIUS[2]、BUDDY[3]、PEAKS Studio 等，这些 AI 赋能的工具在 IMMS 框架下协同工作，分别解决了化合物分类、结构推断、序列解析和分子式确认等不同维度的识别难题，从而实现了从“已知匹配”到“未知推断”的跃升。利用该策略，从瓜蒌、红曲米、黄酒等样品中鉴定了多种以前鲜有报道的化合物，包括 Amadori compounds、色素、寡糖、修饰肽等，为功能性成分的发现奠定了基础。

关键词: 多引擎挖掘策略（IMMS）、人工智能（AI）、复杂体系全成分解析.

参考文献

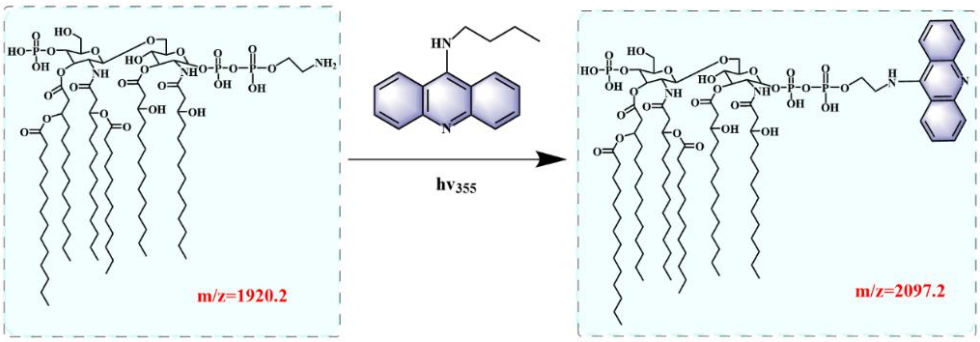
1. L.-F. Nothias, D. Petras, R. Schmid, et al, *Nat. Methods*, **2020**, 17(9), 905-908.
2. K. Dührkop, M. Fleischauer, M. Ludwig, A.A. Aksenov, A.V. Melnik, M. Meusel, P.C. Dorrestein, J. Rousu, S. Böcker, *Nat. Methods*, **2019**, 16(4), 299-302.
3. S. Xing, S. Shen, BH Xu, XX Li, T Huan, *Nat. Methods*, **2023**, 20(6), 881-890.

N-丁基-9-氨基吖啶用于耐药细菌类脂 A 的 MALDI-MS 分析

李夏媛 [1]，张立 [1]，许珍珠 [1],周平 [1,2]*

1.武汉大学化学与分子科学学院; 2. 武汉大学科研公共服务条件平台

摘要：类脂 A 是细菌内毒素毒性及生物活性中心，也是革兰氏阴性菌感染引发败血症和致命休克的关键因素[1]。细菌生存条件变化可影响类脂 A 的分子结构，细菌可通过修饰类脂 A 来降低药物敏感性从而产生耐药性[2,3]。相关生物医学研究亟需精准解析类脂 A 的结构。基质辅助激光解吸电离质谱是分析类脂 A 的常用方法，而分析效果很大程度取决于基质，高性能基质的研发对于类脂 A 研究具有重要价值。我们合成了 N-丁基-9-氨基吖啶（C4-9AA）作为一种新的反应基质用于类脂 A 分析。与常用基质相比，使用该基质检测细菌提取的类脂 A 具有更高的灵敏度。发现在大肠杆菌中存在一些具有特殊修饰结构的类脂 A。C4-9AA 在激光辐照下产生的吖啶自由基能与磷酸乙醇胺修饰类脂 A 迅速发生光化学反应，从而获得独特的吖啶化类脂 A 信号(见下图)，基于此特性建立了一种快速辨别耐药性细菌的方法。将其应用于粪便中提取的类脂 A 分析，从样品前处理到质谱检测约两小时即可完成，无需先对细菌进行培养。



关键词: 基质辅助激光解吸电离质谱；类脂 A；N-丁基-9-氨基吖啶

参考文献

1. C. R. H. Raetz, C. M. Reynolds and M. S. Trent, et al., *Annu. Rev. Biochem*., **2007**, 76, 295-329.
2. A. P. Zinkle, M. B. Batista and C. M. Herrera, et al., *Nat. Commun*., **2025**, 16, 10516.
3. V. I. Petrou, C. M. Herrera and K. M. Schultz, et al., *Science*, **2016**, 351, 608-612.

zbping@whu.edu.cn, 027-68752136

XAFS-MS 联用探究 S 修饰的 RuO2 的酸性 OER 溶出抑制

米吉松[1]，李丽娜[2,*]，蔡彬[1,*]

1. 化学与化工学院，山东大学，济南 250100
2. 上海高等研究院，中国科学院,上海 201210

针对 PEMWE 酸性 OER 中 RuO_2 易过度氧化为可溶 RuO_2 而溶出失活、且"硫如何抑制 Ru 溶出"的微观机制尚缺乏直接证据的问题，本工作以硫脲为硫源、在常压下通过两步法合成 S-RuO_2，结合 XRD、TEM、离位 Raman、S/Ru K 边 XAFS 与电化学测试，并计划进一步以电化学在线 ICP-MS 与原位 XAFS 追踪电位分辨的 Ru 溶出量与配位环境演变。结果表明，S- RuO_2 在 0.1 M $HClO_4$ 中过电位仅为 221 mV，显著低于自制与商用 RuO_2；结构表征显示 Ru–O 键合减弱、配位局域有序度降低，硫主要以锚定于 Ru 位点的硫酸根形式存在，并伴有少量可能进入晶格的低价硫，说明 S 修饰重塑了 RuO_2 的局域配位环境，从而在维持高活性的同时抑制 Ru 的过度氧化与溶出，为高效、高稳定、低成本的酸性 OER 催化剂提供了新的思路。

关键词: 酸性析氧反应；RuO_2；Ru 溶出；原位 XAFS；在线 ICP-MS

参考文献

1. Ji, Q., Tang, B., Zhang, X. et al. Operando identification of the oxide path mechanism with different dual-active sites for acidic water oxidation. *Nat. Commun.,* **2024**, 15, 8089.
2. Wu, ZY., Chen, FY., Li, B. et al. Non-iridium-based electrocatalyst for durable acidic oxygen evolution reaction in proton exchange membrane water electrolysis. *Nat. Mater.,* **2023**, 22, 100–108.
3. L. Wu, W. Huang, D. Li, B. Zhao, H. Zhou, W. Luo, *Angew. Chem. Int. Ed.,* **2025**, 64, e202420848.

Coupling XAFS–MS Study on the Suppression of Ru Demetallation in S-Modified RuO_2 during Acidic Oxygen Evolution

Jisong Mi[1], Lina Li[2*], Bin Cai[1,*]

1. School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China
2. Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210，China

ABSTRACT: Proton exchange membrane water electrolysis (PEMWE) requires highly active and stable catalysts for the acidic oxygen evolution reaction (OER). RuO_2 is active and cost-effective, but it is prone to over-oxidation into soluble RuO_4, which leads to dissolution and deactivation, and direct evidence for how sulfur modification suppresses Ru dissolution is still lacking. Herein, S-RuO_2 was synthesized via a two-step ambient-pressure method using thiourea as the sulfur source, and characterized by XRD, TEM, ex situ Raman spectroscopy, S/Ru K-edge XAFS and electrochemical measurements; electrochemical online ICP-MS and in situ XAFS will be further employed to track potential-resolved Ru dissolution and the evolution of the coordination environment. The results show that S-RuO_2 exhibits an overpotential of only 221 mV in 0.1 M $HClO_4$, significantly lower than those of the homemade and commercial RuO_2. Structural characterizations reveal weakened Ru–O bonding and reduced local coordination order, with S existing mainly as sulfate anchored at Ru sites, accompanied by a small amount of low-valent S that may enter the lattice. These findings indicate that S modification reshapes the local coordination environment of RuO_2, suppressing Ru over-oxidation and dissolution while maintaining high activity, and thus provide new insights into the design of efficient, stable and low-cost acidic OER catalysts.

KEY WORDS: Acidic oxygen evolution reaction; RuO_2; Ru demetallation; In situ XAFS

REFERENCES

1. Ji, Q., Tang, B., Zhang, X. et al. Operando identification of the oxide path mechanism with different dual-active sites for acidic water oxidation. Nat. Commun., 2024, 15, 8089.
2. Wu, ZY., Chen, FY., Li, B. et al. Non-iridium-based electrocatalyst for durable acidic oxygen evolution reaction in proton exchange membrane water electrolysis. Nat. Mater., 2023, 22, 100–108.
3. L. Wu, W. Huang, D. Li, B. Zhao, H. Zhou, W. Luo, Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64, e202420848.

单细胞代谢物质谱流式分析

张四纯

清华大学化学系

sczhang@mail.tsinghua.edu.cn

流式细胞仪是单细胞分析的有力工具，已在细胞生物学和临床研究实验室获得广泛应用。但是，现有的流式细胞仪大多依据检测细胞膜表面的蛋白质进行细胞区分，难以提供单细胞代谢物的信息。鉴于代谢物作为细胞新陈代谢的终端产物能更直观地反映细胞表型，加之肿瘤微环境中代谢物的影响成为肿瘤免疫治疗的研究热点，因此迫切需要研制可用于单细胞代谢物高通量检测的分析工具。

本课题组借鉴流式技术高通量单细胞分析的特点，提出了免标记质谱流式原理的单细胞代谢物分析方法，命名为 CyESI-MS [1]。这种方法从原理上继承了流式技术高通量单细胞分析的特点，又具备有机质谱能够同时检测多种代谢物分子的能力。通过该装置实现了高通量检测单细胞中的数百种代谢物，包括核苷酸、氨基酸、多肽、糖类、脂肪酸、甘油脂、甘油磷脂和鞘脂。目前的检测通量可以达到 40 个细胞/分钟左右，能够检测到单个哺乳动物细胞中上百种代谢物。通过各种细胞的代谢物质谱图，我们成功区分了四种不同类型的肿瘤细胞，并区分了肿瘤细胞的不同亚型 [1]。我们将这种方法用于白血病临床样品的细胞分析，证明了用细胞代谢物的质谱图可以区分血液中五种白血病细胞，并通过分析五种细胞间的代谢物差异，筛选出 36 个存在显著性差异的代谢物 [2]。

综上所述，我们发展了一种基于有机质谱检测单细胞中代谢物的流式细胞术，实现细胞内代谢物小分子在单细胞水平的高通量分析。该技术为发展新原理的流式细胞术奠定了基础，为单细胞代谢组学分析提供了新的手段。

关键词: 单细胞分析；代谢组学；流式细胞术；质谱检测.

参考文献

[1] Yao, H.; Zhao, H.; Zhao, X.; Pan, X.; Feng, J.; Xu, F.; Zhang, S.; Zhang, X. *Anal. Chem.* **2019**, *91*, 9777-9783.

[2] Yao, H.; Zhao, H.; Pan, X.; Zhao, X.; Feng, J.; Yang, C.; Zhang, S.; Zhang, X. *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 10282-10291.

电喷雾电离质谱在大气新粒子形成机理研究中的应用

宋育林 [1],孔祥蕾 [1,2*]

1. 南开大学化学学院元素有机化学全国重点实验室，有机新物质创造前沿科学中心，天津 300071

2.南开大学化学学院天津市生物传感与分子识别重点实验室，天津 300071

新粒子形成过程是超细大气颗粒物的主要来源，因此阐明新粒子形成的分子尺度机制对于理解气溶胶源汇动态以及提升气候模型的预测性能至关重要。本研究验证了电喷雾电离质谱关键团簇物种识别以及新粒子形成过程揭示中的新应用。我们在多种成核环境中进行了模拟实验，涵盖二元碱-硫酸体系、含多种酸性或碱性组分的三元体系以及含碘酸体系。结果表明，通过电喷雾电离质谱生成并检测到的团簇，其核心物理化学性质——包括化学组成、粒径分布和质量亏损——与先前 CLOUD 实验、其他严格设计的实验室研究以及关键理论计算的结果高度一致。此外，红外光解离光谱结合串联质谱不仅能鉴定带电非共价团簇的组成，还能揭示其结构特征，是一种强有力的分析工具。

关键词: 电喷雾电离，红外光解离，新粒子形成，气溶胶.

参考文献

1. Y. Song, S. Zhou, Y. Hou, X. Kong. *Anal Chem* **2026**, 98, 15259-15271.

Corresponding author email Tel.: kongxianglei@nankai.edu.cn

二氧化碳催化转化原位质谱-红外联用分析

汪乐余 [1*]

[1] 北京化工大学化学学院

化石燃料大量使用排放的 CO2 导致一系列气候与环境问题已引起各国政府高度关注，将 CO2 催化转化为高附加值或大宗化学品，进行资源化利用，是保护生态环境、坚持绿色可持续发展、实现“碳达峰、碳中和”双碳战略目标的重要途径，也是环境、化学和化工等相关领域研究的热点与难点。为实现 CO2 高效催化转化，不仅需要设计和制备一系列高性能催化材料，还需对催化转化机理进行深入探究，进而优化催化剂的设计和催化转化反应路径。为此，需设计和构建能用于“气液固”三相体系的异相催化转化原位质谱-红外分析系统，便于实时原位捕获底物分子在催化剂表面的活化过程、反应中间体、反应产物，并推演其反应路径。为高性能催化剂设计和二氧化碳高值资源化利用、双碳战略目标的实现提供理论和技术支撑。

报告人简介：汪乐余，北京化工大学化学学院 教授，博导，教育部新世纪优秀人才、国家杰出青年基金获得者。2007 年博士毕业于清华大学化学系，同年去美国加州大学洛杉矶分校（UCLA）从事博士后研究，2009 年回国加入北京化工大学、化工资源有效利用国家重点实验室，任教授、博导。主要围绕高性能纳米材料的设计、合成及其在生化传感、成像分析及催化能源中的应用开展研究，在包括 *JACS*、*Angew Chem Int Ed*、*Nat Commun*、*Chem*、*Sci. Adv.*、*Adv Mater*、*Adv. Sci.*、*Nano Lett* 等期刊上共计发表 SCI 收录论文 200 余篇，获省部级科技奖励 3 项，相关技术获授权中国发明专利 30 多项。目前主持国家自然科学基金委重大科学仪器研制项目、基金委重点项目、中石化重大横向委托项目等。



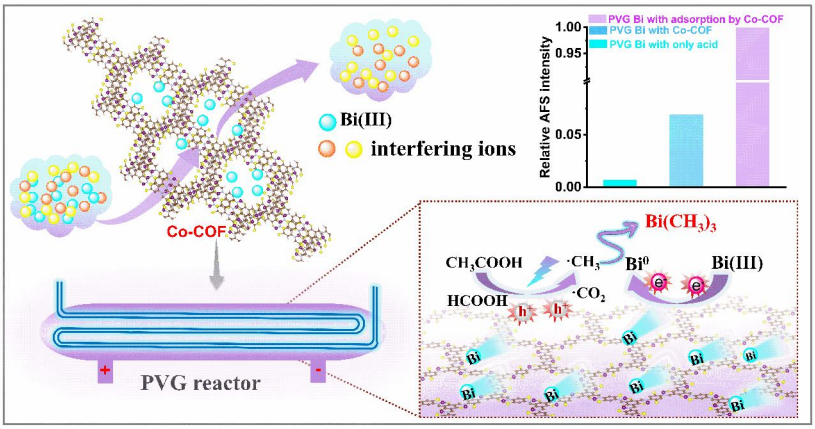
功能化共价有机框架材料在质谱/原子光谱分析中的应用

何娟, 彭茜茜, 侯贤灯*

四川大学分析测试中心，成都，610065

对痕量元素的高灵敏、高准确检测是环境保护、食品安全与可持续发展的关键技术支撑。原子光谱/质谱分析方法是目前元素检测的常用手段，其中，样品引入技术是制约原子光谱检测灵敏度的核心环节。传统进样方法（如喷雾进样、电热蒸发进样、激光蒸发进样等）存在运行成本高、装置结构复杂以及处理复杂基质样品时进样效率低、基体干扰显著等局限。光化学蒸气发生（Photochemical vapor generation，PVG）是一种在紫外光照下将目标元素转化为挥发性物种的进样方式，具有操作简便、绿色环保、基体分离等优势。然而，当前 PVG 仍面临诸多挑战：首先，当前 PVG 体系普遍依赖高浓度有机酸介质；其次，受限于现有光催化材料的光谱响应范围和量子效率，许多重金属及非金属元素的检测灵敏度有待提高；以及复杂基质中存在的过渡金属离子及溶解性有机物易淬灭光生自由基或竞争光子能量，造成基质干扰；因此，亟待发展高载流子分离效率及强抗干扰能力的光催化剂，以突破 PVG 进样的瓶颈。

单原子催化剂（Single atom catalysts，SACs）凭借其原子级分散的活性位点、独特的配位环境，为突破传统光催化体系在催化效率与结构调控方面的局限性提供了新方法。本论文开发了低温等离子体作为一种温和条件（低温常压）下合成与调控晶态多孔材料的新技术。基于此，对 COF 基 Cu 单原子光催化剂进行了快速合成与性能调控，并成功实现低浓度有机酸介质中溴的高效光化学蒸气发生。同时，通过进一步调控单原子种类得到了共价有机框架材料锚定的 Cd 单原子催化剂，实现了低浓度有机酸介质中锇的高效光化学蒸气发生。共价有机框架锚定的 Co 单原子可作为双功能吸附剂和光催化剂用于 Bi 的 PVG-AFS 检测。本工作以β-酮烯胺类 COF（TpPa-$(Br)_2$）为载体，利用其规整孔道与高比表面积锚定高分散的 Co 单原子，构建具有丰富活性位点的 Co 单原子材料（Co-COF），将其作为吸附与光催化双功能体系引入 PVG 过程，显著提升了 Bi^{3+}的检测性能，为复杂基质中痕量元素的高灵敏检测提供了新策略。



关键词: 单原子催化剂；共价有机框架材料；光化学蒸气发生；原子光谱；元素分析.

参考文献

1. Guo, X.; Sturgeon, R. E.; Mester, Z.; Gardner, G. J. *Anal. Chem.* **2004,** *76* (8), 2401-2405.
2. Yin, Y.; Liu, J.; Jiang, G. *TrAC, Trend Anal. Chem.* **2011,** *30* (10), 1672-1684.
3. Xu, F.; Lin, T.; Luo, J.; Hou, X. D. *Anal. Chem.* **2024,** *96* (1), 325-330.

Corresponding author email: houxd@scu.edu.cn

COF-Based Single-Atom Materials：Synthesis, Regulation and Applications in Mass Spectrometry/Atomic Spectrometry Analysis

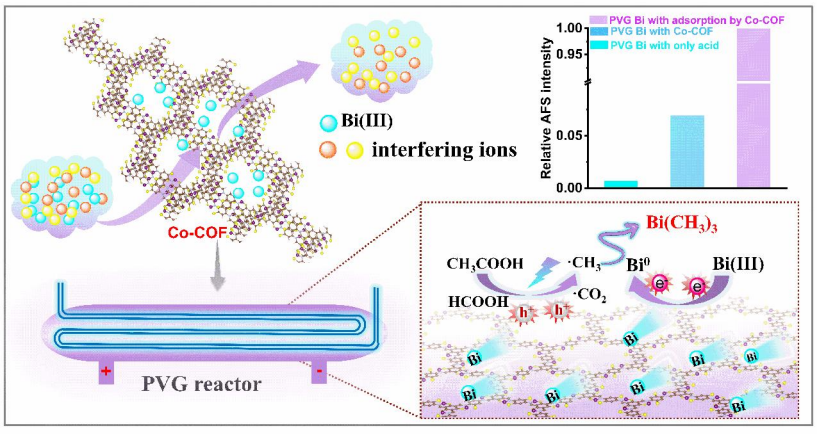
He Juan, Peng Qianqian, Hou Xiandeng*

Analytical&Testing Center, Sichuan University, Chengdu 610065, China

ABSTRACT:

Trace element detection is critical for environmental protection, food safety, and sustainable development. Atomic spectrometry/mass spectrometry are the primary tools, with sample introduction being the key sensitivity-limiting factor. Conventional methods suffer from high cost, complex instrumentation, poor efficiency, and severe matrix interference for complex samples. Photochemical vapor generation (PVG) is simple, green, and enables matrix separation, but current PVG systems require high-concentration organic acids, show insufficient sensitivity for many elements due to limited photocatalyst performance, and are prone to quenching/competition from transition metals and dissolved organics. Thus, photocatalysts with high charge separation and strong anti-interference ability are urgently needed.

Single-atom catalysts (SACs), with atomically dispersed active sites and tunable coordination, offer a new approach. Here, low-temperature plasma is developed as a mild technique for rapid synthesis and regulation of crystalline porous materials. Cu-SACs enable efficient PVG of bromine in low-acid media; tuning the single-atom type yields Cd SACs for efficient PVG of osmium. Co SACs anchored on β-ketoenamine COF serve as dual-functional adsorbent and photocatalyst for Bi determination by PVG-AFS. The ordered pores and high surface area of the COF support enable high-density dispersion of Co single atoms, affording abundant active sites (Co-COF). Integrating this adsorption-photocatalysis system into PVG significantly improves Bi^{3+} detection, offering a new strategy for trace element analysis in complex matrices.



KEY WORDS: Single-atom catalysts; Covalent organic frameworks; Photochemical vapor generation; Atomic spectrometry; Trace element analysis.

REFERENCES

1. Guo, X.; Sturgeon, R. E.; Mester, Z.; Gardner, G. J. *Anal. Chem.* **2004,** *76* (8), 2401-2405.
2. Yin, Y.; Liu, J.; Jiang, G. *TrAC, Trend Anal. Chem.* **2011,** *30* (10), 1672-1684.
3. Xu, F.; Lin, T.; Luo, J.; Hou, X. D. *Anal. Chem.* **2024,** *96* (1), 325-330.

Corresponding author email: houxd@scu.edu.cn

光化学蒸气发生自由基机理与光催化增强 ICP-MS 痕量元素检测

陈瀚蛟*

Hanjiao.chen@scu.edu.cn

四川大学分析测试中心

电感耦合等离子体质谱（ICP-MS），因其极高的检测灵敏度、优异的选择性以及多元素同时分析能力，被广泛应用于痕量元素的检测。这些技术在污染物监测、食品安全、生物医学、材料科学和地质研究等领域均发挥着关键作用。然而，传统进样方法（如喷雾雾化进样、电热蒸发进样、激光蒸发进样等）在复杂基质样品分析中常面临进样效率低、基质干扰大、使用成本高和装置复杂等问题。光化学蒸气发生（PVG）技术作为一种高效、绿色的液体样品引入技术，近年来在微量/痕量元素分析领域中受到了广泛关注。PCVG 通过光化学反应将目标元素转化为挥发性或者半挥发性物质，结合 ICP-MS，实现了痕量元素的高灵敏度检测。本论文通过构建在线/原位电子顺磁共振（EPR）检测系统，实时监测甲酸光化学蒸气发生体系中自由基的生成和转化过程。为深入理解 PVG-ICP-MS 反应机理提供了重要的实验依据和理论支持。

并通过一步气固磷化法合成了 Ni_2P/CdS NRs 复合材料，并将其作为高效非均相光催化剂，构建了高灵敏度检测 As(III)的分析方法。优化反应条件后，该方法实现了该方法实现了 2.6 ng L^{-1} 的检出限，并成功应用于实际水样中痕量 As(III)的分析。

关键词: 光化学蒸气发生；机理研究；电子顺磁共振；电感耦合等离子质谱

环境质谱分析：从污染现场到无人智能化

胡斌 [1,*]

1. 暨南大学，环境与气候学院, 广州, 中国.

E-mail: bin.hu@jnu.edu.cn

环境污染对生态环境和人体健康构成严重威胁，及时解析污染物的化学组成、空间分布及动态变化，对于污染控制、风险评估和应急决策至关重要。然而，传统环境污染物的质谱分析主要依赖现场采样和实验室分析，难以满足环境污染现场快速识别、动态监测和应急响应的需求。针对这些问题，本工作建立了面向复杂环境介质的新型质谱分析方法与装置：（1）发展了面向复杂基质污染物的现场富集采样技术和便携质谱分析方法，实现水、土、气多介质的污染物的现场解析与健康风险评估；（2）发展了面向危化环境与高空环境的远程采样技术，构建了大气与地面挥发性毒物污染的机器人远程采样-非现场的质谱分析系统，大幅提升环境监测安全性与时效性；（3）进一步将微型质谱与机械臂、无人船、无人机、仿生机器人集成，构建无人智能质谱分析技术平台，实现危化与辐射环境下采样-电离-检测-数据传输的自动化一体质谱分析。

关键词: 现场环境；无人智能化；移动质谱

参考文献

1. Li, W.; Hu, B. *Trends Anal. Chem.*, **2026**, *203*, 119023.
2. Li, W.; Liu, X.; Hu, B. *Trends Anal. Chem.*, **2026**, *195*, 118614.
3. Zhang, J.; Zhou, Z.; Hu, B. *Trends Anal. Chem.*, **2025**, *193*, 118461.
4. Liu, X. M.; Liu, X.; Li, B.; Zhang, X.; Hu, B. *Anal. Chem.*, **2025**, *97*, 9126-9130.
5. Liu, X. M.; Huang, Q.; Deng, J.; Liu, X.; Hu, B. *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 9325-9331.

微滴表面超快光催化降解研究

尹伊颜[1]，王晓蓉[1]，欧阳津[2]，那娜[1,*]

1. 北京师范大学化学学院，北京市海淀区新街口外大街 19 号，100875;
2. 北京师范大学文理学院，广东省珠海市香洲区唐家湾金凤路 18 号，519087

微液滴基于其独特的尺度效应和界面效应，在化学反应中具有其独特优势，与体相反应相比，微界面上的化学反应速率显著加快，甚至可提升一个或多个数量级，在污染物降解反应中也展示出了巨大应用前景。然而其加速反应效应，也为其在微界面的反应控制和选择性提升提出了挑战。与此同时，光催化反应能够通过光照下催化剂吸收光子产生电子激发态或电子–空穴对，降低反应活化能、引发或加速化学反应，在绿色高效降解中展示出了独特优势。以二维半导体催化剂为例，其电子能带结构对电场极为敏感，当外加电场强度足够高时，其带隙可被显著抑制，从而有望大幅提升光催化效率。但传统固态器件所能提供的电场强度有限，难以满足实验室规模下快速光催化反应的需求。而微滴的气-液界面天然存在极强的电场（约 1–10 V/nm），有望对附着于微滴表面的二维半导体施加有效调控，调制其能带结构，促进光催化降解进程。这需要我们对其过程进行全面监测及理论研究，以有效提供方法调控及改进策略。然而，微滴体系本身具有瞬态、微量和非平衡等特性，针对该界面电场效应的研究手段极为匮乏，传统表征方法大多是通过光谱或电化学等方式进行间接表征，无法直接提供分子转化直接结构信息，并且在复杂中间体结构鉴定中也展示了一定局限性。

相比之下，常压质谱技术，无需样品预处理，能够原位、实时准确获取分子结构信息[1-3]，在微液滴反应监测及机理研究提供了独特而有力的分析工具。基于本课题组在常压质谱装置搭建、反应监测研究及微滴反应过程监测与研究中的丰富研究经验[4,5]，本研究开展了微液滴表界面光催化快速降解监测及机理研究。研究中，我们选取经典的光催化二维半导体 g-C_3N_4 为催化剂，并利用商业雾化器构建水微滴的光催化降解体系。利用常压离子化质谱实时、直接提取微液滴反应过程中的分子变化，在线追踪微滴内罗丹明 B 的降解过程。对降解过程的监测结果显示在白光照射（7 mW/cm^2）下，g-C_3N_4 对于罗丹明 B 的光催化降解速率常数达到了 4.2876 min^{-1}，该速率相比于 g-C_3N_4 在体相中光催化降解速率提升了超过 3000 倍。此外，我们通过观察底物在液滴表面的分布、验证活性物质影响以及理论计算，揭示了在微滴表面施加高电场的情况下，g-C_3N_4 的能带结构受到显著影响，继而高效引发的超快、完全的光催化降解反应过程。这项工作首次揭示了二维半导体在微滴表面的带隙淬灭现象，在理论观点与实际催化反应应用之间建立了联系，并进一步推进了微液滴反应的研究和发展。

关键词: 常压质谱; 二维半导体; 微液滴; 光催化; 机理研究

参考文献

1. Yin, Y.; Ge, X.; Ouyang, J.; Na, N.* *Nat. Commun.* **2024, 15**: 2954.
2. Yin, Y.; Wang, X.; Ge, X.; Shen, X.; Liu, X.; Li, X.; Ouyang, J.; Na, N.* *Chem. Sci.*, **2025, 16**: 19370.
3. Wang, X.; Ge, X.; Zhao, Q.; Shen, X.; Li, X.; Qin, J.; Ouyang, J.; Na, N.* *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2026,** 65: e23888.
4. Ge, X.; Yin, Y.; Sun, J.; Ouyang, J.; Na, N.* *Chem. Sci.*, **2023, 14**: 2229.
5. Zhang, S.; Sun, J.; Yin, Y.; Ge, X.; Ouyang, J.; Na, N.* *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2023, 11**: 1701.

基于活细胞标记的单细胞硫醇亚代谢组分析

白玉*

北京大学化学与分子工程学院，分析化学研究所，北京，100871

单细胞代谢组学通过分析内源性代谢物分子揭示生理条件下异质性的表型差异 1。巯基代谢物因其固有的高还原性和亲核性，在生物系统中发挥独特而关键的作用。如，谷胱甘肽（GSH）维持细胞内的氧化还原稳态，辅酶 A（CoA）普遍参与脂质、氨基酸和碳水化合物的代谢，半胱氨酸（Cys）等。巯基代谢失调导致氧化应激和其他代谢功能障碍，与神经退行性疾病、心血管疾病和癌症直接相关 2-3。由于含巯基代谢物普遍存在，对内源性硫醇进行分析有助于绘制能量代谢、稳态和信号传导中广泛而精细的途径。然而，当生物样品暴露在空气中时，由于硫醇易氧化，从而影响测量精度。硫醇衍生化策略可使其免受氧化，但光谱测量方法在硫醇代谢途径研究中受到光谱重叠因素的印象，限制了代谢物的覆盖范围。为了避免细胞和组织匀浆等样本制备过程中硫醇的氧化，利用活细胞下硫醇的标记策略结合高灵敏和高分辨质谱技术，为准确解析内源巯基代谢物提供了一条有前景的途径。据此，我们将活细胞标记与有机质细胞术相结合，提出了一种单细胞巯基分析方法。设计并合成巯基反应质谱探针（SMP）并将其引入活细胞中，以原位阻断硫醇的氧化。标记后的细胞单分散有序注入高分辨电喷雾电离质谱仪。基于巯基色烯点击化学和带自身电荷标记探针，可在 10 分钟内标记内源性硫醇，并大大提高了灵敏度和覆盖率。基于有机质谱流式平台，可同时检测到多种硫醇物种和其他代谢物。该方法能够进行通路活性监测、代谢网络映射和非靶向代谢组分析。RSL3 诱导的铁死亡细胞研究结果表明，RSL3 通过核因子 E2 相关因子 2-谷胱甘肽轴抑制谷胱甘肽合成，导致亚型之间谷胱甘肽代谢的异质性 4。

关键词: 硫醇,亚代谢组,活细胞,化学标记

参考文献：

1. S.J. Qin, D.Y. Miao, X. Zhang, Y. Zhang, Y. Bai*, *TrAC Trends in Anal. Chem.*, **2023**, 164, 117086.
2. S.K. Ryan, M. Zelic, Y.N. Han et al., *Nat. Neurosci.*, **2023**, 26, 12-16.
3. J.D. Hayes, A.T. Dinkova-Kostova, K.D. Tew. *Cancer Cell*, **2020**, 38, 167-197.
4. D.Y. Miao, Q.N. Li, Y. Zhang, S.J. Qin, Y. Wang, X.Y. Liu, Y. Bai*. *Nat. Commun.*, **2026**, 17, 3378.

本研究受国家自然科学基金（22125401）项目资助

Corresponding author email: yu.bai@pku.edu.cn, Tel.: 010-62758198

Single-cell thiol profiling enabled by live-cell labeling

Yu Bai *

Institute of Analytical Chemistry, College of Chemistry and Molecular Engineering,
Peking University, Beijing 100871

ABSTRACT: Thiols serve indispensable biochemical functions across catalysis, redox homeostasis and energy metabolism. However, profiling multiple thiols at the single-cell level remains challenging due to their trace amount and susceptibility to oxidation. Herein, we report an integrated strategy for thiol profiling at the single-cell level which combines live-cell labeling with organic mass cytometry. The live-cell labeling strategy facilitated the comprehensive measurement of intrinsic thiols with expanded coverage and improved sensitivity 1-4.

KEY WORDS: Thiols, sub-metabolomics, living cell, chemical labelling

This study is supported by the National Natural Science Foundation of China (22125401)

REFERENCES

1. S.J. Qin, D.Y. Miao, X. Zhang, Y. Zhang, Y. Bai*, *TrAC Trends in Anal. Chem.*, **2023**, 164, 117086.
2. S.K. Ryan, M. Zelic, Y.N. Han et al., *Nat. Neurosci.*, **2023**, 26, 12-16.
3. J.D. Hayes, A.T. Dinkova-Kostova, K.D. Tew. *Cancer Cell*, **2020**, 38, 167-197.
4. D.Y. Miao, Q.N. Li, Y. Zhang, S.J. Qin, Y. Wang, X.Y. Liu, Y. Bai*. *Nat. Commun.*, **2026**, 17, 3378.

Corresponding author email: yu.bai@pku.edu.cn, Tel.: 010-62758198

基于晶态材料的激光解吸电离质谱技术及其在环境毒理与疾病诊断中的应用

靳迎雪[1]，刘宇菁[1],文绮[1]，林子俺[1*]

1.福州大学化学学院, 食品安全与生物分析教育部重点实验室, 福州, 350108

基质辅助激光解吸电离质谱（MALDI-MS）作为一种软电离技术，已成为生物大分子分析的重要工具。然而，传统有机基质在低分子量区域（m/z < 700 Da）易产生大量碎片离子，严重干扰小分子物质的检测；同时，样品与基质共结晶的不均匀性导致信号重现性差，限制了该技术在定量分析中的应用。为克服上述局限，研究者采用多孔晶态材料替代传统有机基质，发展了表面增强激光解吸电离质谱（SALDI-MS）技术。该技术不仅有效降低了背景干扰、提高了信号重现性，还显著增强了分析物的解吸电离效率。近年来，随着代谢组学研究对复杂样本高通量、高灵敏分析需求的提升，机器学习驱动的数据优化策略开始与 SALDI-MS 深度融合，进一步推动了该技术在智能化分析方向的发展。基于此，围绕晶态材料辅助激光解吸电离质谱平台的构建与应用，本课题组从环境毒理和疾病精准诊断两个方向开展了系统研究，取得了一系列可喜的进展，具体包括：

（1）为解决低浓度环境污染物暴露下代谢物检测灵敏度不足的难题，我们设计了一种金纳米粒子固载的共价有机框架复合材料（COF-S@Au NPs），建立其辅助的 LDI-MS 代谢分析方法。将该方法用于三氯生（TCS）暴露小鼠的血清代谢谱（SMPs）分析，筛选出 10 个差异代谢物，途径分析揭示 TCS 暴露可能干扰内分泌并诱发肠道功能紊乱，为环境毒理学的代谢组学研究提供了有效工具[1]。（2）此外，我们将晶态材料辅助 LDI-MS 技术的应用进一步拓展至临床疾病诊断领域，并开展了系统的材料设计与方法学探索。首先，在 ITO 玻璃上原位制备高度定向的 $Cu_3(HHTP)_2$ 纳米膜，构建高重现性 LDI-MS 平台，可直接用于生物体液的快速代谢分析，借助尺寸排阻效应实现小分子代谢物的选择性捕获，结合多元统计方法实现心血管疾病及其亚型的高效区分，为疾病标志物筛查提供了新方法[2]。在此基础上，采用催化剂调控策略制备了 AA 堆叠型 Py-DMTP COF 纳米膜，开发了 COF 薄膜辅助的血清代谢分析方法，应用于肺炎支原体（MP）感染患儿与健康儿童的对比研究，筛选出 23 个潜在生物标志物，通路分析表明 MP 感染显著干扰机体氧化还原、氨基酸及能量代谢通路，为临床支原体肺炎的无创代谢诊断与机制研究提供了新策略[3]。进一步地，精准设计合成了 Ag(SPh-COOH)、Ag(SPh-OH)、Ag(SPh-F)和 Cu(SPh-COOH)四种结构类似的有机金属硫属化合物（OMCs），并首次将该类材料引入 LDI-MS 以探索材料结构与解吸电离效率之间的“构-效”关系。结果表明，Cu(SPh-COOH)具有更好的解吸电离效率，成功辅助检测了分子量为 180-828 Da 区间的难电离糖类，并通过 SMPs 实现了中枢性性早熟（CPP）的高精度诊断，获得了 12 种可能的代谢生物标志物[4]。最近，在前期单一材料基础上，通过原位外延生长构建 COF316@CuHHTP 多孔异质结，利用协同效应实现小分子高效捕获与定向传输，并增强光热转换与电荷传输。将其用于乳腺癌血清代谢分析，结合机器学习，该平台实现了 AUC 达 0.996 的优异区分性能，并鉴定出 20 个疾病相关代谢标志物，为无创早筛提供了新策略[5]。

关键词：基质辅助激光解吸电离质谱；晶态材料；环境毒理；疾病筛查与诊断

参考文献

[1] Y.X. Jin, J.J. Chen, W. Xie, J.N. Zhang, J.J. Yan, C.R. Chen, J.S. Lin, Z.W. Cai and Z.A. Lin*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2025**, 17, 7056-7065.

[2] D. Ouyang, Z.H. Fu, G.R. Li, C. Zhong, J.H. Yuan, H. Huang, J. Lin, G. Xu, and Z.A. Lin*,

Chin. Chem.Lett., **2023**, 34, 6, 107992.
[3] Y.X. Jin, D. Ouyang, Q. Wen, J. Lin, Z.W. Cai, and Z.A. Lin*, *Anal. Chem.,* **2025**, 97, 39, 21530-21537.
[4] D. Ouyang, C.Z. Wang, C. Zhong, J. Lin, G. Xu, G.E. Wang* and Z. A. Lin*, *Chem. Sci.*, **2023**, 15, 278-284.
[5] Y.X. Jin, P.J. Qiu, Q. Wen, J.N. Zhang, Y.J. Liu, Y. Sun, J.P. Zheng, Y.H. Zhong, L. Guo and Z.A. Lin*, *Adv. Mater.*, **2026**, e74620.

基于硼亲和原理的质谱分析方法

冯钰锜

武汉纺织大学

顺式二醇类化合物（糖类、糖蛋白、核苷、儿茶酚胺、油菜素甾醇等）在复杂基质中丰度低、电离效率差、异构体繁多，其高灵敏、高选择性质谱分析面临挑战。硼酸与顺式二醇可逆形成环状硼酸酯，且结合与释放可由 pH 精确调控。本文以该原理为主线，论述基于硼亲和原理的质谱分析方法，重点突出“识别—增敏—定性”三重功能在质谱分析中的统一。硼酸基团首先作为选择性识别单元，通过硼亲和整体柱、磁固相萃取及无机硼酸材料实现顺式二醇化合物的富集净化；进一步将硼酸酯设计为可断裂连接臂，构建“标记—洗涤—酸解释放”的化学选择性探针，把固相净化的高效性与均相衍生化的高标记效率结合。在液相色谱-质谱分析中，硼酸衍生化通过柱前或柱后策略向目标物引入疏水基团或永久正电荷，显著提高电喷雾离子化效率；试剂结构由 DMAPBA 演进至 4-PAMBA 及邻位甲基取代的 2-methyl-4-PAMBA，解决了 $C_{27}/C_{28}/C_{29}$油菜素甾醇的响应歧视与衍生物稳定性问题，并结合稳定同位素标记实现精确定量。利用硼的$^{10}B/^{11}B$ 天然同位素簇及硼酸酯特征裂解（$[M-93]^+$中性丢失、$[M-H_2O]^+$脱水、α-C 断裂），还可实现未知顺式二醇代谢物的发现与结构注释。此外，硼酸修饰基质或双功能试剂提升了 MALDI-TOF MS 对顺式二醇小分子的检测能力；硼酸衍生化与声学喷射质谱（Echo MS）融合，则通过一锅双通道标记实现无色谱分离的超高通量分析，检出限达飞克级、单样分析约 3 秒。上述方法共享同一化学内核：硼酸酯的可逆性既可转化为可控释放开关，也可转化为衍生物稳定性调控变量和质谱结构信息。基于硼亲和原理的质谱分析已从靶向定量拓展至非靶向发现与高通量筛查，未来在提高顺式二醇代谢物覆盖率、优化可断裂连接臂动力学及拓展临床与食品检测应用方面仍具发展空间。

关键词: 硼亲和；顺式二醇；质谱分析；衍生化；硼同位素标签.

2023101@wtu.edu.cn

基于色谱-ICPMS 法的金属形态分析及体内代谢过程研究

张晓,于永亮*

东北大学 分析科学研究中心，沈阳，110819

金属形态与人体健康、疾病密切相关，其体内分布及代谢规律仍待深入探究。色谱-元素质谱联用技术（CE/HPLC-ICPMS）灵敏度高、线性范围宽，是生物样本金属形态检测的主流技术。基于 HPLC-ICPMS，我们研发了尿液自采样试剂盒与自动化预处理进样器，用于检测尿液中的砷代谢物。样本在厌氧条件下采集、储存和预处理，可有效抑制不稳定砷代谢物 MMA(III)和 DMA(III)的氧化，降低基质干扰，同时减少人工操作。环境中的砷易被微塑料（MPs）等污染物吸附，随饮食进入人体胃肠道后逐步释放，危害人体健康。为探究砷在胃消化中的溶出与形态转化规律，我们基于 3D 打印的柔软胃腔搭建了动态胃模型-CE-ICPMS 系统，通过 LabVIEW 控制在线监测 MPs 吸附砷的释放与转化，探究其随不同食物在胃部的代谢过程并开展健康风险评估。依托该平台，进一步揭示了抗生素对 MPs 吸附铬、胃部铬释放及毒性效应的作用机制。后续构建了体外动态肠道模型-HPLC-ICPMS 系统，利用 3D 打印水凝胶模拟肠道结构，LabVIEW 控制模拟肠道各项生理活动，在线追踪大米中砷形态的释放、转化与吸收过程，评估了大米中砷形态的生物利用度和健康风险。该研究体系可为砷代谢物分析及相关人体健康风险评估提供可靠的技术支撑与理论参考。

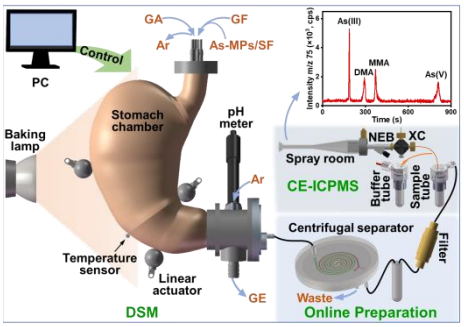


图 1 动态胃模型-CE-ICPMS 系统分析 MPs 在消化过程中砷形态的释放与转化

关键词: 色谱；元素质谱；金属形态分析；胃肠道模型；代谢物分析

参考文献

1. X. Zhang, X.-Y. Jiang, L. Zhao, S. Chen, Y.-L. Yu and J.-H. Wang. *Anal. Chem.* **2024**, 96, 1742-1749.
2. X. Zhang, X.-Y. Jiang, J.-Y. Cai, S. Chen, Y.-L. Yu and J.-H. Wang. *Anal. Chem.* **2024**, 96, 7155-7162.

Email: yuyl@mail.neu.edu.cn

Metal Speciation Analysis and In Vivo Metabolism Studies Based on Chromatography-ICPMS

Xiao Zhang, Yongliang Yu*

Research Center for Analytical Sciences, Northeastern University, Shenyang 110819

ABSTRACT: Metal species is closely related to human health and disease, yet the in vivo distribution and metabolic pathways of metal species remain to be thoroughly investigated. Hyphenated chromatography–inductively coupled plasma mass spectrometry (CE/HPLC-ICPMS) offers high sensitivity and a wide linear dynamic range, and has become the mainstream technique for metal speciation analysis in biological samples. Based on HPLC-ICPMS, we developed a urine self-sampling kit and an automated pretreatment-injection device for the detection of arsenic metabolites in urine. Samples were collected, stored, and pretreated under anaerobic conditions, which effectively suppressed the oxidation of unstable arsenic metabolites—monomethylarsonous acid (MMA(III)) and dimethylarsinous acid (DMA(III))—reduced matrix interference, and minimized manual operation. Environmental arsenic is readily adsorbed by contaminants such as microplastics (MPs) and is gradually released after entering the human gastrointestinal tract through diet, posing a threat to human health. To investigate the dissolution and speciation transformation of arsenic during gastric digestion, we constructed a dynamic stomach model coupled with CE-ICPMS using a 3D-printed soft gastric chamber. Controlled by LabVIEW, this system enabled online monitoring of the release and transformation of arsenic adsorbed on MPs, allowing us to explore its metabolic processes in the stomach with different food matrices and to conduct health risk assessments. Based on this platform, we further elucidated the mechanism by which antibiotics affect chromium adsorption by MPs, chromium release in the stomach, and associated toxic effects. Subsequently, we established an in vitro dynamic intestinal model coupled with HPLC-ICPMS. Using 3D-printed hydrogels to simulate intestinal structures and LabVIEW to control simulated physiological activities, we tracked the release, transformation, and absorption of arsenic species from rice in real time, and evaluated the bioavailability and health risks of arsenic species in rice. This integrated research system provides reliable technical support and theoretical reference for arsenic metabolite analysis and related human health risk assessment.

KEY WORDS: Chromatography; Elemental mass spectrometry; Metal speciation analysis; Gastrointestinal models; Metabolite analysis

REFERENCES

1. X. Zhang, X.-Y. Jiang, L. Zhao, S. Chen, Y.-L. Yu and J.-H. Wang. Anal. Chem. 2024, 96, 1742-1749.
2. X. Zhang, X.-Y. Jiang, J.-Y. Cai, S. Chen, Y.-L. Yu and J.-H. Wang. Anal. Chem. 2024, 96, 7155-7162.

Email: yuyl@mail.neu.edu.cn

基于稀疏信号恢复与同位素解卷积的元素飞行时间质谱自动化解谱软件

刘浩楠[1]，徐周毅[2,*]，杭纬[1,*]

1，厦门大学智能制造学院，福建 厦门 361005，中国

2，厦门大学化学化工学院化学系，谱学分析与仪器教育部重点实验室，福建 厦门 361005，中国

飞行时间质谱（TOFMS）是固体直接分析的重要技术。在元素分析领域，它主要涵盖激光烧蚀电离质谱（LAIMS）和辉光放电质谱（GD-TOFMS）等平台。然而，其质谱数据常伴有异方差噪声、动态基线漂移以及不可避免的同位素与多原子离子干扰，对数据处理的自动化和定量的准确性构成了重大挑战。本研究开发了一种结合稀疏信号恢复与同位素约束拟合解卷积的自动化数据处理算法，在实现了谱图的自动基线扣除与降噪的同时自适应确定峰检测阈值以提高寻峰精度，此外算法构建了全谱动态双侧水晶球（DSCB）模型，实现了对随时间变化的非对称峰形的精确建模。通过建立靶向多原子离子干扰库，结合同位素约束与非线性最小二乘拟合方法，实现了重叠峰的自动解析。结果表明，在无需人工干预的情况下，该方法能够有效解耦复杂基质中的重叠峰。在针对多种基质样品的分析中，该算法计算出的浓度与人工测定结果高度一致（$R^2 > 0.99 R^2 > 0.99$），显著提升了数据处理通量以及痕量元素的检测能力。

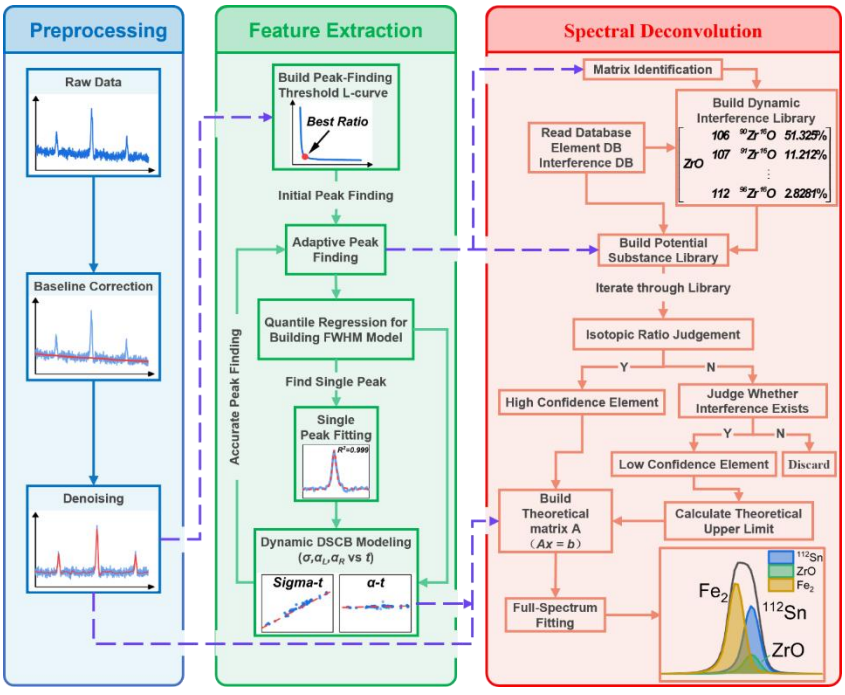


Fig. 1 Flowchart of the program

关键词：自动化解卷积；稀疏信号恢复；同位素约束拟合；飞行时间质谱

zhouyixu@xmu.edu.cn, 13600798695.

Analysis Based on Sparse Signal Recovery and Isotope-Constrained Fitting

Haonan Liu[1], Zhouyi Xu[2,*], Wei Hang[1,*]

1. Department of Chemistry, MOE Key Lab of Spectrochemical Analysis & Instrumentation, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China.

2. School of Intelligent Manufacturing, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China.

Time-of-flight mass spectrometry (TOFMS), including laser ablation (LAIMS) and glow discharge (GD-TOFMS) platforms, is vital for direct solid analysis. However, heteroscedastic noise, baseline drift, and spectral interferences challenge automated data processing and quantitative accuracy. This study develops an automated algorithm integrating sparse signal recovery with isotopically constrained deconvolution. It performs automated baseline subtraction, denoising, and adaptive thresholding to enhance peak-picking accuracy. Additionally, a full-spectrum dynamic Double-Sided Crystal Ball (DSCB) model precisely characterizes time-dependent asymmetric peak shapes. Overlapping peaks are automatically resolved utilizing a targeted polyatomic interference library, isotopic constraints, and non-linear least squares fitting. Results demonstrate effective, intervention-free decoupling of overlapping peaks within complex matrices. The algorithm-derived concentrations align highly with manual measurements ($R^2 > 0.99$), significantly improving data processing throughput and trace element detection capabilities.

zhouyixu@xmu.edu.cn, 13600798695.

加速器质谱技术及其环境示踪应用研究（邀请报告）

付云翀[1,2*],张丽[1,2]，刘许柯[2,3]，董国成[1,2]，程鹏[1,2]，杜花[1,2]，牛振川[1,2]，刘起[1,2]，卢雪峰[1,2]，范煜坤[1,2]，张路远[1,2]，侯小琳[1,2]，周卫健[1,2]

1. 中国科学院地球环境研究所，黄土科学全国重点实验室，西安 710061
2. 西安加速器质谱中心，陕西省加速器质谱技术及应用重点实验室，西安 710061
3. 西安地球环境创新研究院，西安 710061

摘要：随着加速器质谱技术（AMS）的发展，长寿命放射性核素成为环境科学研究的又一利器。通过对宇宙成因或者人工成因的长寿命放射性同位素示踪，可灵敏地标记各环境要素间物质、能量与信息传递过程及交换程度；结合其衰变规律作为有效的绝对定年手段，用以建立环境演化的时间标尺。如何使用 AMS 对长寿命放射性同位素进行准确、高精度、高效地测量成为了保证相关科学领域研究的关键。本工作简述了加速器质谱仪的原理和发展历程，介绍了西安加速器质谱中心依托 Xi'an-AMS 开展的科学研究工作。以宇宙成因核素 ^{7}Be-^{10}Be 为例，展示了从加速器质谱仪分析技术开发到环境示踪应用的研究过程。

关键词：加速器质谱；宇宙成因核素；同量异位素；环境示踪

*Corresponding author email: fuyc@ieecas.cn; Tel.: 029-62336199

Accelerator mass spectrometry technology and environmental tracing applications

Fu Yunchong[1,2*], Zhang Li[1,2], Liu Xuke[2,3], Dong Guochen[1,2], Cheng Peng[1,2], Du Hua[1,2], Niu Zhenchuan[1,2], Liu Qi[1,2], Lu Xuefeng[1,2], Fan Yunkun[1,2], Zhang Luyuan[1,2], Hou Xiaolin[1,2], Zhou Weijian[1,2]

1. State Key Laboratory of Loess Science, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710061, China;
2. Shaanxi Key Laboratory of Accelerator Mass Spectrometry Technology and Application, Xi'an Accelerator Mass Spectrometry Center, Xi'an 710061, China
3. Xi'an Institute for Innovative Earth Environment Research, Xi'an, 710061, China

Abstract With the rapid development of accelerator mass spectrometry (AMS) technology, long-lived radioisotopes tracer has become another important tool for environmental science research. Tracing with long-lived cosmogenic and anthropogenic radioisotopes, it is extremely sensitive to mark the process of material, energy and information transfer and the degree of exchange between environmental elements; combined with its decay law can be used as an absolute dating method to establish a time scale for environmental evolution. How to use AMS to accurately, accurately and efficiently measure long-lived radioisotopes has become the key to ensuring research in related scientific fields. In this work, the principle and development history of AMS are briefly described, and the scientific research work carried out by Xi'an-AMS in Xi'an Accelerator Mass Spectrometry Center is introduced. Taking ^{7}Be-^{10}Be of cosmic genesis nuclides as an example, it shows the development of AMS analytical methods and its environmental tracing research works.

Keywords: Accelerator Mass Spectrometry；Cosmic genesis nuclides；Isobars；Environmental tracers

*Corresponding author email: fuyc@ieecas.cn; Tel.: 029-62336199

近无损单细胞取样用于单细胞时序代谢组学分析

江德臣*

生命分析化学全国重点实验室，南京大学化学学院，南京市栖霞区仙林大道 163 号，210092

单细胞异质性是普遍存在的生物学现象，基于质谱的单细胞代谢组学分析是揭示细胞异质性本质的重要工具。由于细胞活动是动态变化的，对单个细胞进行动态跟踪检测，绘制出时间分辨的单细胞代谢图谱是目前研究者面临的一大挑战。为实现对单个细胞时间分辨的重复分析，必须确保采样过程不会显著影响细胞的功能。我们实验室利用扫描离子电导显微镜在细胞扫描过程中精确定位细胞膜表面的能力，将纳米毛细管作为单细胞微创采样的前端工具，承担扫描探针、取样探针及质谱喷针三项功能。通过控制纳米毛细管的采样深度和采样体积，减少采样过程对细胞的损伤。由于无需力反馈，可在维持细胞活性的前提下，实现对同一单细胞连续 3 次取样和代谢物检测。我们从细胞形态、分裂能力以及代谢表型的一致性等多个方面验证了采样步骤的微创性，初步建立近无损的时间分辨单细胞代谢组学分析平台。应用该平台动态追踪细胞在铁死亡过程中的代谢表型变化，跟踪同一单细胞在多个时间点的代谢状态，绘制细胞分化轨迹，揭示了增殖期细胞与静息期细胞对铁死亡诱导剂的敏感性差异。

关键词: 单细胞、时序代谢组学、近无损

Corresponding author email：dechenjiang@nju.edu.cn

面向疾病分类的 MALDI-TOF 多维图像特征融合端到端深度学习网络

石书林, 许林峰,*

西安交通大学电子科学与工程学院, 西安 710049

摘要: 基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱（MALDI-TOF MS）凭借其高通量、低成本的优势，已成为疾病快速筛查的有力工具。然而，传统质谱分析高度依赖繁琐的预处理和人工特征工程，极易丢失信号中潜藏的局部细微突变与全局时频特征，且传统机器学习模型难以直接处理数万维的非线性序列数据，泛化能力受限。为此，本文提出一种面向疾病分类的端到端多维特征融合深度学习网络 TBFCN（Triple-Branch Fully Convolutional Network）。该方法摒弃了传统一维信号处理范式，创新性地构建由原始信号（Raw）、连续小波变换（CWT）与短时傅里叶变换（STFT）组成的三路图像输入集，通过三个独立的 ResNet-18 主干网络分别提取多域特征，利用卷积块注意力机制（CBAM）进行自适应深度融合，最后由全卷积网络（FCN）直接输出疾病分类概率。在内部临床数据集及公开数据集 DRIAMS-A 上的实验结果表明，TBFCN 准确率达 97.5%，AUC 达 99.7%，F1 分数达 0.9294，显著优于传统机器学习算法（LR, SVM, RF, XGBoost）及主流一维深度学习模型。本研究有效克服了人工特征提取的局限性，实现了空间域、时频域和频域特征的深度整合，大幅提升了质谱分类的精度与鲁棒性，为 MALDI-TOF 在自动化疾病智能诊断中的临床应用提供了新方法。

关键词: MALDI-TOF MS；疾病分类；深度学习；多域特征融合；小波变换

参考文献

1. Wang, Y., et al., Comprehensive serum N-glycan profiling identifies a biomarker panel for early diagnosis of non-small-cell lung cancer. PROTEOMICS, 2023. 23(20): p. 2300140.

2. Gibb, S. and K. Strimmer, MALDIquant: a versatile R package for the analysis of mass spectrometry data. Bioinformatics, 2012. 28(17): p. 2270-2271.

3. Weis, C., et al., Direct antimicrobial resistance prediction from clinical MALDI-TOF mass spectra using machine learning. Nature Medicine, 2022. 28(1): p. 164-174.

4. Lassen, J.K. and P. Villesen, End-To-End Deep Learning Explains Antimicrobial Resistance in Peak-Picking-Free MALDI-MS Data. Analytical Chemistry, 2025. 97(5): p. 2795-2800.

5. Woo, S., et al., CBAM: Convolutional Block Attention Module. 2018.

*通信作者联系方式 xu.linfeng@xjtu.edu.cn

An End-to-End Deep Learning Network with Multi-Dimensional Image Feature Fusion for Disease Classification Based on MALDI-TOF

Shi Shulin, Xu Linfeng,*

School of Electronic Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

ABSTRACT: Matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry (MALDI-TOF MS) has become a powerful tool for rapid disease screening due to its high throughput and low cost. However, traditional analysis relies heavily on tedious preprocessing and manual feature engineering, easily losing local subtle mutations and global time-frequency features hidden in signals. Moreover, conventional machine learning models struggle to directly process high-dimensional nonlinear sequence data, limiting their generalization capability. To address this challenge, we propose an end-to-end deep learning network TBFCN (Triple-Branch Fully Convolutional Network) for disease classification. This method abandons the traditional 1D signal processing paradigm, and innovatively constructs a triple-branch image input set consisting of raw signals (Raw), continuous wavelet transform (CWT) and short-time Fourier transform (STFT). Three independent ResNet-18 backbones are employed to extract multi-domain features respectively, followed by adaptive deep fusion via convolutional block attention mechanism (CBAM), and final classification is performed by a fully convolutional network (FCN). Experimental results on internal clinical datasets and the public dataset DRIAMS-A demonstrate that TBFCN achieves accuracy of 97.5%, AUC of 99.7%, and F1-score of 0.9294, significantly outperforming traditional machine learning algorithms (LR, SVM, RF, XGBoost) and mainstream 1D deep learning models. This study effectively overcomes the limitations of manual feature extraction, achieves deep integration of spatial, time-frequency and frequency domain features, greatly improves the accuracy and robustness of mass spectrometry classification, and provides a new method for automated intelligent disease diagnosis using MALDI-TOF.

Keywords: MALDI-TOF MS; disease classification; deep learning; multi-domain feature fusion; wavelet transform

References

1. Wang, Y., et al., Comprehensive serum N-glycan profiling identifies a biomarker panel for early diagnosis of non-small-cell lung cancer. PROTEOMICS, 2023. 23(20): p. 2300140.

2. Gibb, S. and K. Strimmer, MALDIquant: a versatile R package for the analysis of mass spectrometry data. Bioinformatics, 2012. 28(17): p. 2270-2271.

3. Weis, C., et al., Direct antimicrobial resistance prediction from clinical MALDI-TOF mass spectra using machine learning. Nature Medicine, 2022. 28(1): p. 164-174.

4. Lassen, J.K. and P. Villesen, End-To-End Deep Learning Explains Antimicrobial Resistance in Peak-Picking-Free MALDI-MS Data. Analytical Chemistry, 2025. 97(5): p. 2795-2800.

5. Woo, S., et al., CBAM: Convolutional Block Attention Module. 2018.

*Corresponding author email: xu.linfeng@xjtu.edu.cn

膜介质-激光剥蚀-质谱联用分析对高纯稀土氧化物痕量元素检测的解决方案

方哲[1,2*]，王雷[1,2]，李凯[1,2]，王海舟[1,2]

1.钢铁研究总院有限公司，北京 100081；

2.钢研纳克检测技术股份有限公司，北京 100081

摘要：针对高纯稀土氧化物中痕量稀土元素在质谱法测试中的多原子质谱干扰问题，开发了一套膜介质-激光烧蚀采样系统，将生成的二次干气溶胶导入电感耦合等离子体质谱仪（ICP-MS），从而实现质谱干扰的消除以获得痕量元素的准确定量。基于该系统，以高纯氧化铈中钆（Gd）、镝（Dy）和镱（Yb）为典型应用对象，对烧蚀池中的气体组成、载气流速及激光光斑尺寸进行了参数优化。膜沉积效率通过生成的分析物质量与沉积后经 ICP-MS/MS 测定的质量之比来评估。结果表明：当采样体积为 100 μL 且铈（Ce）基体浓度超过 100 mg/L 时，沉积效率接近 100%。在上述优化条件下，氧化铈中 Gd、Dy 和 Yb 的检测限分别为 0.52、0.18 和 0.21 ng/g。对三份高纯度氧化铈样品的分析表明，该方法测得的 Gd 和 Yb 含量显著低于传统 ICP-MS 法，有效消除了氢氧化物和氧化物的干扰，对光谱干扰具有优异的抗干扰性，所得结果与 ICP-MS/MS 法测定结果一致。

关键词：膜介质 激光剥蚀 电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）

参考文献

1. X.Q. Zhang, J.L. Liu, Y. Yi, Y.L. Liu, Li Xiang, Y.Q. Su and P. Lin, Int. J. Mass Spectrom., **2007,** 260, 2022.

2. Z. Y, Front. Chem., **2022**, 10, 912938.

3. Y. Zhang, Z.B. Pan, P.C. Jiao, J. Ju and T. He, Atom. Spectros., **2019**, 40, 167–172.

4. Y. Takaku, K. Masuda, T. Takahashi and T. Shimamura, J. Anal. At. Spectrom., **1993**, 8, 687–690.

Email: fangzhe@ncschina.com Tel: 188-1032-3099

Membrane Deposition-Laser Ablation-Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Analysis: A Solution for Trace Element Detection in High-Purity Rare Earth Oxides

Zhe Fang[1,2*], Lei Wang[1,2], Kai Li[1,2], Haizhou Wang[1,2]

1. Central Iron and Steel Research Institute, Beijing, 100081, China
2. NCS Testing Technology Co. Ltd., Beijing, 100081, China

ABSTRACT: To address the challenge of polyatomic mass spectrometric interferences encountered in the determination of trace rare earth elements in high-purity rare earth oxides by mass spectrometry, a membrane deposition laser ablation sampling system was developed. The resulting secondary dry aerosol was introduced into an inductively coupled plasma mass spectrometer (ICP-MS), thereby eliminating mass spectrometric interferences and enabling accurate quantification of trace elements. Using this system, gadolinium (Gd), dysprosium (Dy), and ytterbium (Yb) in high-purity cerium oxide were selected as typical analytical targets, and key parameters—including the gas composition in the ablation cell, carrier gas flow rate, and laser spot size—were optimized. The membrane deposition efficiency was evaluated as the ratio of the mass of analyte generated to the mass determined by ICP-MS/MS after deposition. The results showed that when the sampling volume was 100 μL and the cerium (Ce) matrix concentration exceeded 100 mg/L, the deposition efficiency was close to 100%. Under the optimized conditions, the limits of detection for Gd, Dy, and Yb in cerium oxide were 0.52, 0.18, and 0.21 ng/g, respectively. Analysis of three high-purity cerium oxide samples indicated that the Gd and Yb contents measured by this method were significantly lower than those obtained by conventional ICP-MS, effectively eliminating hydroxide and oxide interferences. The method exhibited excellent resistance to spectral interferences, and the obtained results were consistent with those determined by ICP-MS/MS.

KEY WORDS: Membrane deposition, Laser ablation, Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometer (ICP-MS)

REFERENCES

1. X.Q. Zhang, J.L. Liu, Y. Yi, Y.L. Liu, Li Xiang, Y.Q. Su and P. Lin, Int. J. Mass Spectrom., **2007,** 260, 2022.
2. Z. Y, Front. Chem., **2022**, 10, 912938.
3. Y. Zhang, Z.B. Pan, P.C. Jiao, J. Ju and T. He, Atom. Spectros., **2019**, 40, 167–172.
4. Y. Takaku, K. Masuda, T. Takahashi and T. Shimamura, J. Anal. At. Spectrom., **1993**, 8, 687–690.

Email: fangzhe@ncschina.com Tel: 188-1032-3099

纳米基质增强 MALDI-MS 灵敏度、成像质量的新方法研究

张书胜　彭子芳　赵无垛　张岩皓

郑州大学化学学院，郑州，450052

Email:zsszz@126.com

基质辅助激光解吸电离质谱成像（MALDI-MSI）:将质谱中获得的质量信息和样品切片中位置分布信息进行结合，可非靶向地反映样本中分析物的空间分布信息。传统基质为有机小分子，在检测小分子分析物时基质背景干扰严重、电离效率低，分析物结晶不均匀导致小分子分析物检测灵敏度低、成像质量差。

我们发展了 COFs 基及 MXene-基纳米基质，提高了检测灵敏度和成像质量，成功用于多种类环境污染物的分析及其暴露后的组织空间分布研究。

关键词：基质辅助激光解吸电离质谱成像，纳米基质.

纳米孔道电化学测量在环境分析中的应用探讨

刘威[1, 2], 龙亿涛[1*]

1. 南京大学化学学院，分子传感与成像中心，南京，210023

2. 扬州大学化学与材料学院，扬州，225002

环境污染物的广域溯源、界面行为与迁移转化等研究，亟需发展分子尺度的精准测量与识别新方法。然而，环境污染物种类繁多、来源复杂，呈现低丰度、结构相似和动态迁移等特征[1]，基于光谱特征或质荷比的高灵敏度、高结构分辨及高时间分辨的污染物分子测量与示踪运用广泛。纳米孔道电化学技术亦可利用纳米尺度的限域孔道界面将单个分子结构与反应信息转化为可解析的离子电流事件，结合高时间分辨的微电流记录系统，实现单分子事件的精准识别与动态表征。近年来，该技术被成功应用于生物聚合物精准解析[2]、蛋白质翻译后修饰测量[3]及单分子动态过程表征[4]等，展现出高灵敏度、高空间分辨、和无需分子标记等优势。本文将围绕纳米孔道电化学测量的基本原理与技术发展，重点探讨其在环境污染物精准测量、生物分子相互作用解析及迁移转化过程监测等领域的应用前景，为新污染物的发现、溯源和转化等研究提供测量支撑。

关键词: 纳米孔道电化学；单分子测量；环境污染物精准测量.

参考文献

1. L. Monclús, H. P. H. Arp, K. J. Groh, A. Faltynkova, M. E. Løseth, J. Muncke, Z. Wang, R. Wolf, L. Zimmermann, M. Wagner, *Nature*, **2025**, 643, 349–355.
2. J Jiang, M-Y. Li, X-Y. Wu, Y-L. Ying, H-X. Han, Y-T. Long. *Nat. Chem.*, **2023**, 15, 578-586.
3. H-Y. Niu, M-Y. Li, Y. Gao, J-G. Li, J. Jiang, Y-L. Ying, Y-T. Long, *Nat. Chem. Biol.*, **2025**, 21, 716-726.
4. M-Y. Li, J. Jiang, J-G. Li, H-Y. Niu, Y-L. Ying, R. Tian, Y-T. Long, *Nat. Methods*, **2025**, 22, 241-253.

气液界面放电与大气环境相关的质谱分析

孟一凡*

南开大学化学学院

yfmeng@nankai.edu.cn

近年来，质谱分析在监测气液界面的化学反应中得到了广泛应用。传统理论认为液态水分子在常温常压下是稳定且惰性的，然而当反应体系从宏观稳定的体相溶液缩小至微米尺度时，其化学性质会发生显著变化，展现出诸多非凡特性，例如表面积体积比高、蒸发快、扩散迅速、酸碱性特殊、分子取向有序、存在界面电场等。其中，表面水分子偶极结构统一自发取向或是表面形成的界面双电层导致的界面强电场已经被广泛证明可以引发界面上羟基自由基和单电子的产生以及驱动多种氧化还原化学反应。除了界面电场之外，我们的研究表明液滴在分裂时会发生电荷分离现象，导致较小的液滴携带负电荷，较大的液滴携带正电荷。携带相反电荷的液滴在互相足够接近时，会产生击穿空气的气体放电现象，该现象类似空气中的等离子体或自然界中的闪电，可以引发一系列气液界面、液滴间隙中气体参与的化学反应。利用原位质谱技术，我们直观地表征了微液滴分裂诱导的间隙放电的能量范围、能够引发的各类化学反应。该气液界面放电被认为与众多大气环境问题有直接关联。

参考文献：

1. D. Xing, Y. Meng, X. Yuan, S. Jin, X. Song, R. N. Zare, X. Zhang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 61, e202207587
2. L. Liu, X. Zhang, P. Hu, L. Balabin, K. Chingin, H. Chen, *Anal. Chem.* **2025,** 97, 39, 21475–21481

关键词：气液界面，间隙放电，质谱分析

Electrical discharge induced by droplet fission

Yifan Meng

College of Chemistry, Naikai University

yfmeng@nankai.edu.cn

Abstract. In recent years, mass spectrometry has been widely applied to the investigation of chemical reactions occurring at gas–liquid interfaces. According to conventional theory, liquid water molecules are considered to be stable and chemically inert under ambient conditions. However, when a reaction system is reduced from a macroscopically stable bulk solution to the micrometer scale, its physicochemical properties can change dramatically, giving rise to a variety of extraordinary features, including a high surface-to-volume ratio, rapid evaporation, fast diffusion, unusual acid–base behavior, ordered molecular orientation, and the presence of interfacial electric fields. In particular, it has been widely demonstrated that the spontaneous alignment of water dipoles at the surface or the formation of an interfacial electrical double layer can generate strong interfacial electric fields, which are capable of inducing the formation of hydroxyl radicals and solvated electrons and driving a wide range of redox reactions at the interface. Beyond the role of interfacial electric fields, our studies further reveal that charge separation occurs during droplet fission, resulting in smaller droplets carrying negative charges while larger droplets become positively charged. When oppositely charged droplets approach each other sufficiently closely, gas discharge through air breakdown can occur. This phenomenon resembles atmospheric plasma or natural lightning and can trigger a series of chemical reactions involving gas-phase species at gas–liquid interfaces and within inter-droplet gaps. Using in situ mass spectrometry, we directly characterized the energy range of droplet-fission-induced gap discharges and the diverse chemical reactions that can be initiated by these processes.

Key words: air-water interface, electrical discharge, mass spectrometry analysis

上海光源用户辅助实验系统质谱联用介绍

李丽娜 侯坤明 樊鹏 米吉松 杜萌

（中国科学院上海高等研究院·上海光源，上海 201204；E-mail: liln@sari.ac.cn）

摘要：上海光源（SSRF）是我国目前服务用户最多的中能第三代同步辐射大科学装置，现已有 34 条光束线 46 个实验站向用户开放。同步辐射 XAFS 等谱学技术可在原子、电子层次原位、实时、动态地获取材料的精细局域结构信息，是解析水-土-气-生介质中污染物转移与形态转化机理、破解环境与能源催化共性科学问题的利器。随着研究不断深入，单一表征手段已难以满足复杂反应过程对物种识别与全程动态监测的需求。上海光源用户实验辅助组立足中能谱学线站，自主搭建了化学吸附-质谱（Micromeritics ASAP 2920、Quantachrome ChemBET PULSAR）、热重-质谱（Setaram Labsys EVO）、红外-质谱以及原位 XAFS-MS、XAFS-IR-MS 等多套联用装置，实现催化剂精细结构、表面吸附行为与反应气体组成的同步检测，温度范围 RT-500 ℃、压力≤2 bar，并支持远程控制。依托质谱毫秒级采样速率、全谱定性、在线连续监测与同位素测量等优势，该平台已应用于 CO 氧化（CO-TPR/TPD、O2 脉冲）、乙炔加氢（H2-TPR、C_2H_4-TPD）、废塑料升级循环（GC-MS/TG-MS 定性定量及催化剂失活分析）、丙烯环氧化（在线质谱 TPSR 瞬态测试，单点采样时间缩短至 10 s 以内）和焦炭气化（DRIFTS-MS）等典型反应研究，解析了催化剂表面氧物种、吸脱附行为与反应中间体，实现了产物分布的精确调控。质谱联用技术与同步辐射原位谱学的深度融合，可为环境污染物形态转化与能源催化机理研究提供“结构-表面-气相”多维度的原位证据链。

关键词：上海光源；同步辐射；质谱联用；原位表征；环境催化

作者简介：李丽娜，女，研究员、博士生导师，上海光源用户实验辅助组组长，研究方向为功能材料的原位谱学研究。2007 年获华东师范大学博士学位，曾于同济大学从事博士后研究、德国斯图加特大学访学。主持国家自然科学基金联合培育项目 2 项、国家重点研发计划项目子课题 1 项及中国科学院建制化平台课题等；近五年以通讯/第一作者在 Angew. Chem. Int. Ed.、Nat. Commun.、Environ. Sci. Technol.、Anal. Chem.等期刊发表 SCI 论文 129 篇（一区 TOP 72 篇），获中国分析测试协会科学技术一等奖、上海浦东新区明珠计划领军人才奖等奖励，兼任中国化工学会工程热化学专业委员会、上海市化学化工学会无机化学专业委员会委员。

双模化学同位素标记衍生化技术联合液相色谱-高分辨质谱分析方法开发与环境健康应用

赵先恩[1*]，李俊腾[3]，张慧敏[3]，赵衍辉[1]，朱树芸[3]，刘倩[2]，江桂斌[2]

[1]山东第一医科大学(山东省医学科学院)，药学院，医学科技创新中心，山东济南，250117

[2]中国科学院生态环境研究中心，环境化学与环境毒理全国重点实验室，北京，100085

[3]曲阜师范大学，化学与化工学院，山东曲阜，273165

*Email: xianenzhao@163.com，xenzhao@sdfmu.edu.cn

液相色谱-高分辨质谱（LC-HRMS）已成为环境健康与复杂体系分析的核心技术之一。然而，在面对生物或环境样本中数量庞大、动态范围宽、离子化效率差异显著的分析物时，传统非靶向分析仍面临巨大挑战，包括基质效应引起的定性/定量不准、低丰度代谢物/污染物检出困难、以及海量数据处理与特征提取效率低等[1]。

人工智能（AI）与化学同位素标记（CIL）技术深度融合的创新分析策略展现了强大的应用效果和未来发展前景。该策略的核心关键在于：CIL 技术通过引入特征性的同位素标签，对样本分析物分子结构中的目标化学官能团（如氨基、羧基、羰基、羟基、巯基等）进行特异性标记，实现对分析物的高效化学衍生化。该策略不仅显著提升了 LC 分离效果、MS 离子化效率、MS/MS 碎裂特异性，扩大了可检测化合物的覆盖范围，更关键的是，它为每个分析物创造了一个天然的“同位素内标”，实现了在复杂基质中无需标准品的高精度相对定量和定性依据，校正了质谱仪的基质效应，为 AI 解析提供了高质量、标准化的质谱数据[1,2]。AI 技术与同位素标记衍生化、LC-HRMS 的联合能够被深度整合至分析的全流程，包括数据处理层面、方法开发与优化层面、应用与识别层面。特别是在应用领域方面，在多组学、病原体检测、生物医药、环境健康等领域逐渐显现其强大功能[3]。

CIL-AI 联合策略不仅是 LC-HRMS 方法开发范式的革新，通过同位素标记化学衍生化与 AI 的联合，未来能够实现从“数据”到“识别”的跨越，将为环境健康和生物医药研究提供强大的技术支持，在暴露组学、毒理学、生物医学等研究中展现巨大应用潜力。

关键词: 化学同位素标记，多组学，高分辨质谱，人工智能，环境健康.

参考文献

1. S. Gao, X. Zhou, et al., *TrAC Trend. Anal. Chem.,* 2023, 162: 117022.
2. X. Zhou, S. Gao, et al., *TrAC Trend. Anal. Chem.,* 2023, 160: 116978.
3. Bushuiev, R., Bushuiev, A., et al., *Nat. Biotechnol.,* **2026**, 44 (4), 630-640.

水体中重金属和有机污染物迁移性的直接质谱分析研究

宋丽丽 [1], 万椿 [1], 徐加泉 [1,*]

质谱科学与仪器江西省重点实验室，东华理工大学，南昌，330013

摘要：水体环境是一个动态系统，重金属和有机污染物在“水-悬浮颗粒物-沉积物”三相之间存在复杂的迁移、释放和转化过程 [1]，精准揭示湖水中重金属和有机污染物的多介质迁移机制，为区域污染防控与生态保护提供科学依据。由于介质的多样性和目标检测物（不同形态重金属和有机污染物）物化性能的差异，目前传统的检测方法往往需要复杂的离线提取手段和多种检测技术的联用。因此，本研究利用顺次软电离直接质谱分析技术 [2,3]，依据目标检测物的物化性能，采用萃取、化学反应、电解等手段，对不同形态重金属和有机污染物进行顺次、在线提取，容易电离的有机污染物直接经电喷雾离子源电离后进入有机质谱进行检测，难以电离的多环芳烃类有机物和不容易直接被有机质谱识别的重金属离子，则通过加入络合试剂与其络合形成金属-有机络合物后，同样经电喷雾电离进入有机质谱检测。将该方法应用于江西省鄱阳湖中水、悬浮颗粒物、沉积物的分析，实现了三种介质中多种重金属组分（铅、铬、铜等）和多环芳烃类有机污染物（芘等）的结构及相对含量信息的一站式获取，根据目标物的含量信息计算其在三种介质中的分配系数，推算其在不同相之间的迁移关系，为水体环境中重金属和有机污染物迁移性的研究提供一种快速、简便的分析方法。

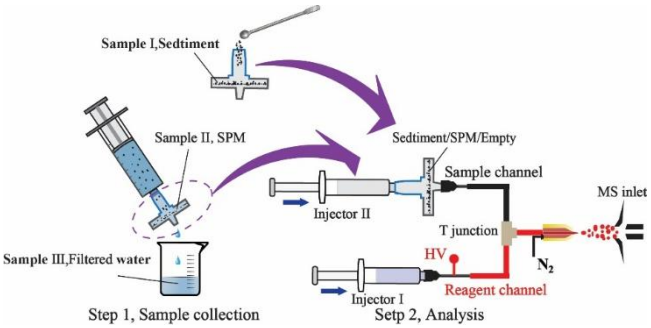


图 1 水体不同介质中重金属和有机污染物的顺次电离直接质谱检测装置

关键词: 重金属，有机污染物，迁移性，直接质谱分析.

参考文献

1. A. W.Child, B. C. Moore, J. D. Vervoort, et al. *Environ. Sci. Pollut. R.*, **2018**, 25(6), 5501-5513.
2. J. Q. Xu, Z. D. Yu, et al., *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 4728-4734.
3. X. L. Zhang, Y. Xu, et al., *J. Anal. At. Spectrom.*, **2023**, 38, 716-720.

水自由基试剂离子高灵敏检测全氟烷烃

张小平[1]，陈焕文[2,*]

[1]东华理工大学，江西省质谱科学与仪器重点实验室，江西南昌，330013

[2]江西中医药大学，恶性肿瘤中医药诊疗与康复中心江西省重点实验室，江西南昌，330004

*Email: chw8868@gmail.com

全氟烷烃（PFAs）是一类结构高度稳定的多氟烷基物质（PFASs）。这类物质有极高的碳-氟（C-F）键稳定性而且缺乏可电离基团，所以它们的直接检测极具挑战，依赖复杂的样品前处理步骤。因此，开发快速、灵敏且无需预处理的 PFAs 分析方法对环境污染监测与健康风险评估具有重要意义。传统质谱分析严重依赖复杂耗时的衍生化前处理，难以实现快速灵敏检测。为此，我们研究了一种基于水自由基化学活化的原位质谱新方法。该方法通过低能电晕放电在水蒸气中在线生成高活性水自由基对（$H_2O^{-\bullet}/H_2O^{+\bullet}$）[1]，在常温常压、无需催化剂的条件下，直接诱导 PFAs 发生 C-F 键断裂与羟基化反应，转化为易检测的羟基化衍生物，从而实现无需样品前处理的实时、高灵敏分析。该方法对全氟己烷、全氟庚烷和全氟辛烷的检测限达 0.56-0.86 ng/L，并成功用于环境水样与大气中 PFAs 的直接筛查与定量，展现出良好的适用性与可靠性。本研究不仅为 PFAs 的痕量分析提供了一种绿色、高效的解决方案，也为惰性化学键的原位活化与质谱检测机制研究提供了新思路。

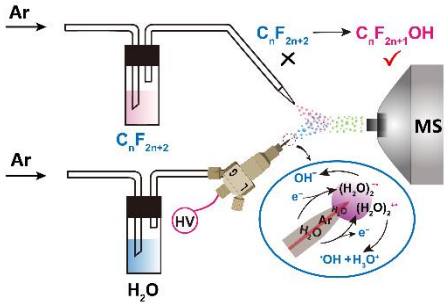


Fig. 1 质谱检测全氟烷烃在线装置图

关键词：全氟烷烃；水自由基阳离子；检测；质谱

参考文献

ADDIN EN.REFLIST [1] X. Zhang, Duan, M., Chingin, K., Balabin, R., Liu, L., Zhang, X.Chen, H. Anal. Chem. **2025, 97**, 16004-16010.

异构体分辨的精准质谱分析

陈素明 [1,*]

[1] 武汉大学高等研究院，湖北 武汉，430072

*Email: sm.chen@whu.edu.cn

同分异构是复杂分子的特殊属性，赋予了生命和化学系统的分子结构多样性，这些异构体尽管结构差别微小，却会带来功能的巨大差异。实现异构体水平的精准分析，是深入理解分子结构与功能关系的基石。然而，异构体理化性质相近，使得传统质谱技术在这一层面存在巨大挑战。如何赋予质谱分析异构体分辨能力，已成为化学测量学领域亟待突破的核心难题。

我们围绕“异构体分辨精准质谱分析”这一科学难题开展系统深入的研究。以创建异构体特异性信息维度为核心理念，发展了一系列异构体分辨质谱分析新原理与新方法，并将其应用于复杂体系的精准测量，取得多项重要科学发现。（1）建立基于化学反应的特异性信息生成策略，使等质量异构体产生可分辨的质谱信息维度，破解双键和手性异构定性定量难题，为脂质代谢物完整结构解析提供了关键技术支撑；（2）建立基于智能预测的多维信息生成方法，构建异构体多维信息高精度预测模型，突破异构体分析标准品依赖瓶颈，实现了异构体水平代谢物大规模精准鉴定；（3）基于所建立的异构体质谱分析方法，发现了疾病与生物过程中关键异构体表型变化规律，揭示了异构体发挥特异性生物功能的结构基础与分子机制。

关键词：质谱分析；异构体分辨；构效关系

参考文献

[1] Gao, M.; Wan, Q.; Zhou, S.; Wu, P.; Nie, W.; Chen, S. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147, 43699-43706.

[2] Wei, S.; Wan, Q.; Zhou, S.; Nie W.; Chen, S. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 32777-32784.

[3] Sun, J.; Luo, J.; Gao, M.; Wang, F.; Nie, W.; Chen, M.; Chen, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202507483.

[4] Wan, Q.; Chen, K.; Dong, X.; Ruan, X.; Yi, H.; Chen, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202306460.

[5] Chen, M.; Hao, Y.; Huang, X.; Wu, P.; Sun, J.; Zhang, B.; Chen, S. *Nat. Commun.* 2026, 17, 2554.

Precise Mass Spectrometry Analysis at the Isomer Level

Suming Chen[1,*]

[1]The Institute for Advanced Studies, Wuhan University, Wuhan, 430072

We have developed a series of new methods for isomer-resolved mass spectrometry analysis and applied them to the precise measurement of complex systems, leading to several significant scientific discoveries. (1) We established the strategy for generating specific information based on chemical reactions, enabling isomers of equal mass to produce distinguishable mass spectrometry information dimensions, providing critical technical support for the complete structural elucidation of lipid metabolites; (2) We established the multidimensional information generation method based on intelligent prediction, broke through the bottleneck of reliance on isomer analysis standards, and achieved large-scale, precise identification of metabolites at the isomer level; (3) Based on the established methods, we discovered the patterns of key isomer phenotypic changes in diseases and biological processes, and revealed the structural basis and molecular mechanisms by which isomers exert specific biological functions.

用空气作为 ICP-MS 的碰撞反应气定量检测环境水体

董硕飞 [1,*]

1. 安捷伦科技（中国）有限公司，北京，100102

电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）在元素定量分析时，常用氦气作为碰撞反应池中的碰撞气去消除多原子干扰。但近两年高纯氦气供应波动，提高了其在常规环境监测中的运行管理负担。新一代的 Agilent 9500 ICP-MS/MS 标配有双池耦合碰撞反应系统，可以用实验室中的环境空气同时作为碰撞气和反应气，提升了 ICP-MS 在多元素定量分析中的干扰消除能力。空气经专用过滤器去除水分及烃类后进入反应池，其中氧气驱动选择性离子－分子反应，氮气促进离子碰撞；结合 Q1、Q2 单位质量筛选，可通过质量转移或原位质量模式分离待测元素与多原子、氧化物及双电荷离子干扰。

本研究比较氦气、高性能氦气碰撞模式（AHM）和空气模式（Air Cell）的消除干扰的结果，并初步考察 Na、Ca、S、C、Cl 及稀土元素基质。空气流量为 0.9 mL/min 时，对 $NaAr^+$、SO^+、SOH^+、ArS^+、ArC^+和 $ArCl^+$等常见干扰具有良好抑制作用；在 100 ppm 硫基质中，Ti、V、Cr、Ge 和 Zn 均可准确测定。空气模式通过生成 AsO^+和 SeO^+，可避开 Nd^{2+}、Sm^{2+}、Gd^{2+}及氯基多原子离子的质谱重叠。该模式还可降低 Si、P、S 等难测元素的背景等效浓度并提高灵敏度。用饮用水、河水、废水标准品验证方法有效性，结果表明，多数定量结果与标称值偏差在±10%内。由于空气模式无需外置氧气瓶等等设备，可降低安全管理负担，并简化日常维护。在缺少氦气的特殊条件下，可以成为保持仪器运行提供简便可靠的分析方案。

关键词: ICP-MS，空气模式，Air Cell，碰撞反应气，环境

Corresponding author email: shuo-fei.dong@agilent.com

Air-Based Collision/Reaction Cell ICP-MS for Multi-Element Determination in Environmental Waters

Shuofei Dong[1,*]

1. Agilent Technologies Co. Ltd (China) , Beijing, 100102, China

ABSTRACT: Helium is widely used as a collision gas in inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) to mitigate polyatomic ion interferences. However, fluctuations in the supply of high-purity helium have increased operational costs and management challenges for routine environmental monitoring laboratories. This study evaluated an air-based collision/reaction cell approach using an Agilent 9500 ICP-MS/MS equipped with a dual-cell system. In this configuration, filtered laboratory air serves as both the collision and reaction gas, providing an alternative strategy for interference control in multi-element analysis. Before introduction into the reaction cell, laboratory air was passed through a dedicated filter to remove moisture and hydrocarbons. Oxygen in the filtered air facilitated selective ion-molecule reactions, while nitrogen promoted collisional processes. In combination with unit-mass filtering by the first and second quadrupoles, this approach enabled the separation of analyte ions from polyatomic, oxide, and doubly charged ion interferences through either on-mass interference removal or mass-shift reactions.

The interference-removal performance of conventional helium mode, advanced helium mode (AHM), and air-cell mode were compared in matrices containing Na, Ca, S, C, Cl, and rare earth elements. At an air flow rate of 0.9 mL min^{-1}, the air-cell mode effectively suppressed common interfering ions, including $NaAr^+$, SO^+, SOH^+, ArS^+, ArC^+, and $ArCl^+$. Accurate determination of Ti, V, Cr, Ge, and Zn was achieved in the presence of 100 mg L^{-1} sulfur. The formation of AsO^+ and SeO^+ through controlled mass-shift reactions minimized spectral overlap from Nd^{2+}, Sm^{2+}, Gd^{2+}, and chlorine-based polyatomic ions. The air-cell mode also reduced background-equivalent concentrations for analytically challenging elements, including Si, P, and S, while improving their analytical sensitivity. Method performance was evaluated using certified or reference drinking-water, river-water, and wastewater samples. For most analytes, the measured concentrations agreed with the reference values within ±10%. The results demonstrate that filtered laboratory air can provide effective interference control for multi-element analysis by ICP-MS/MS. Because the method does not require external helium or oxygen cylinders, it may simplify gas management, reduce routine maintenance requirements, and support reliable environmental monitoring when helium availability is limited.

KEY WORDS: ICP-MS, Air mode, Air Cell, collision/reaction gas, environmental

Corresponding author email: shuo-fei.dong@agilent.com

铀同位素的外标归一化法研究进展

汪伟, 徐江, 李志明*，席瑞阳，郭思琪，王亚龙，梁超纬，丁立胜

西北核技术研究所，西安，710024

铀同位素分析在核燃料循环、核标准物质研制、核取证等领域发挥着不可替代的作用。比如，铀同位素及其分馏效应研究是铀成矿过程研究的重要内容[1,2]，为鉴别矿物之间铀同位素的细微差异，通常采用高精密度的同位素质谱测定 $^{235}U/^{238}U$，且要求测量的精密度达到 0.01%水平[1-5]。为校正质谱测量过程中的质量分馏效应，双稀释剂质谱法是首选方法[3,4]，对 $^{235}U/^{238}U$ 测量的精密度达到 0.003%水平[3]。但国内各实验室库存的有证铀双稀释剂（如 IRMM3636）即将告罄，目前主要用于标准物质研制定值和月壤等珍贵样品分析。为满足大批量样品和储库建设等分析需求，急需开展双稀释剂研制定值和双稀释剂质谱法的替代技术研究。

在可校正质谱质量分馏效应的方法中，相比于标准样品交叉法，外标归一化法还可校正测量过程中质量分馏效应波动的影响，获得与双稀释剂质谱法媲美的测量精密度。基于多接收电感耦合等离子体质谱中质量分馏效应主要与质量数相关的规律性认识，借鉴 Pb 等元素的成功测量经验，项目组提出并建立了 $^{235}U/^{238}U$ 的钍外标归一化法和钚外标归一化法。

以钚外标归一化法为例，为评估方法测量 $^{235}U/^{238}U$ 的精密度，在干法进样模式下，以天然铀 CRM124-1、浓缩铀 GBW04234 和 GBW04238 的酸消解液为模拟样品，逐级稀释至 ^{238}U 信号强度约 40 V，按样品中 ^{238}U 与人为加入标样中 ^{239}Pu 的量之比约 20，在样品中加入适量欧洲测量与标准物质研究所的 IRMM290/F1，采用指数规律校正质量分馏效应，使用 ^{239}Pu 与 ^{242}Pu 的质量分馏因子校正 ^{235}U 与 ^{238}U 的质量分馏效应（即令 $F_{Pu}=F_U$）。5 次独立测量的结果表明，钚外标归一化法对上述模拟样品中 $^{235}U/^{238}U$ 测量结果的 RSD 达到 0.0030%~0.0047%（n=5）水平，且浓缩铀样品的测量值与参考值在不确定度范围内一致，表明该方法在高精密度测量铀同位素比值方面表现出良好的应用潜力。但天然铀样品的测量结果偏低，可能是受到钚标样中残留铀的干扰，目前正在开展钍钚标样中痕量铀的去污纯化流程研究。

针对大批量样品中 $^{235}U/^{238}U$ 的高精密度分析需求与双稀释剂短缺的矛盾，本论文开展钍外标归一化法和钚外标归一化法研究，初步建立分析方法并验证了方法的潜力。

关键词: 铀同位素分析；多接收电感耦合等离子体质谱；钚外标归一化法.

参考文献

1. 徐林刚. 矿床地质, **2014**, 33(3): 497-510.
2. 宋静, 谭凯旋, 刘振中, 等. 核化学与放射化学, **2022**, 44(6): 565-574.
3. S. Richter, R. Eykens, H. Kühn H, etc. *Int. J. Mass spectrom.*, **2010**, 295: 94-97.
4. J. Daniel, M. Noah M, R. Stephen, etc. *Geochim. Cosmochim. Acta*, **2010**, 74: 7127-7143.
5. 汪伟. 铀钚镅全同位素 MC-ICP-MS 高精密度分析技术研究[D].西北核技术研究所.**2024**.

lizhiming@nint.ac.cn

直接电离质谱技术在资源环境样品金属组分分析中的应用研究

徐加泉*

东华理工大学，江西省南昌市经开区广兰大道 418 号，330013

*Email: jiaquan_xu@foxmail.com

金属元素在资源与环境样品中的含量水平及赋存形态，对认识元素地球化学循环、判定环境风险、支撑矿产勘查均具有重要价值。常规检测手段多需经历消解、分离或富集等繁琐前处理，普遍存在流程冗长、耗样量大，且难以揭示不同组分间化学关联等不足。围绕上述瓶颈，我们构建了两类基于直接电离策略的质谱分析方法：其一，顺次电离技术通过精细调控试剂引入与能量施加的时间、空间次序，在单次实验中即可同时获得稀土矿石与大气细颗粒物等资源环境样品中金属组分的含量、形态及其化学关联信息[1-2]，为查明资源元素的赋存状态、追溯颗粒物金属来源提供了新途径；其二，微区质谱分析技术摆脱了对整块样品的依赖，无需复杂制样即可直接测定微量资源环境样品中痕量组分的含量与形态[3-4]，为矿物微区组成解析以及珍稀/地外样品的分析研究提供了有效方案。结果表明，直接电离质谱在快速筛查、痕量检测、形态识别与微区原位分析等方面展现出独特优势，可望为资源勘探开发、环境治理与相关地球化学研究提供新的技术支撑。

关键词: 直接电离质谱；资源环境分析；形态分析；痕量分析；快速分析

参考文献

1. J. Q. Xu, F. L. Li., F. Xia, T. G. Zhu, D. B. Wu, K. Chingin and H. W. Chen, *Sci. China Chem.*, **2021**, 64, 642.
2. L. L. Song, L. Y. Zhong, T. Li, Y. F. Chen, X. L. Zhang, K. Chingin, N. Zhang, H. Li, L. Y. Hu, D. F. Guo, H. W. Chen, R. Su and J. Q. Xu, *Environ. Sci. Technol.*, **2024**, 58, 19362-19371.
3. 3. J. Q. Xu, L. Ting, Z. D. Yu, L. L. Song, X. X. Xu and H. Li, *Chin. Chem. Lett.*, **2024**, 35, 108578.
4. 4. L. L. Song, Y. P. Liu, C. Wan, X. L. Zhang, Z. B. Yan, G. Q. Liu, Q. F. Wang, F. J. Nie, F. Xia and J. Q. Xu, *Anal. Chem.*, DOI: 10.1021/acs.analchem.6c03656.

Direct Ionization Mass Spectrometry for Metal Component Analysis of Resource and Environmental Samples

Jiaquan Xu*

East China University of Technology, 418 Guanglan Avenue, Nanchang 330013, China

*Email: jiaquan_xu@foxmail.com

ABSTRACT: The content and speciation of metals in resource and environmental samples are of great significance for understanding elemental geochemical cycling, assessing environmental risks and supporting mineral exploration. Conventional analytical protocols usually rely on tedious pretreatments such as digestion, separation and enrichment, which suffer from time-consuming procedures, large sample consumption, possible alteration of the original species and the difficulty in revealing chemical correlations among different components. To address these challenges, we have established two kinds of direct mass spectrometric strategies: (1) a sequential ionization technique, which finely controls the temporal and spatial order of reagent introduction and energy deposition, enabling simultaneous acquisition of the content, speciation and chemical correlations of metal components in rare earth ores and atmospheric fine particulate matter within a single experiment, thus providing new routes for identifying the occurrence states of resource elements and tracing metal sources of particulate matter; and (2) a micro-region mass spectrometric technique, which is free from reliance on bulk samples and allows direct determination of the content and speciation of trace components in gabbro and lunar soil without complicated sample preparation, offering an effective approach for characterization at the mineral-grain scale and for the analysis of precious or extraterrestrial samples. The results demonstrate that direct ionization mass spectrometry exhibits unique advantages in rapid screening, trace analysis, speciation identification and in-situ micro-region analysis, and is expected to provide new technical support for resource exploration and development, environmental management, and related geochemical research.

KEY WORDS: Direct ionization mass spectrometry; Resource and environmental analysis; Speciation analysis; Trace analysis; Rapid analysis.

REFERENCES

1. J. Q. Xu, F. L. Li., F. Xia, T. G. Zhu, D. B. Wu, K. Chingin and H. W. Chen, *Sci. China Chem.*, **2021**, 64, 642.

2. L. L. Song, L. Y. Zhong, T. Li, Y. F. Chen, X. L. Zhang, K. Chingin, N. Zhang, H. Li, L. Y. Hu, D. F. Guo, H. W. Chen, R. Su and J. Q. Xu, *Environ. Sci. Technol.*, **2024**, 58, 19362-19371.

3. J. Q. Xu, L. Ting, Z. D. Yu, L. L. Song, X. X. Xu and H. Li, *Chin. Chem. Lett*., **2024**, 35, 108578.

4. L. L. Song, Y. P. Liu, C. Wan, X. L. Zhang, Z. B. Yan, G. Q. Liu, Q. F. Wang, F. J. Nie, F. Xia and J. Q. Xu, *Anal. Chem*., DOI: 10.1021/acs.analchem.6c03656.

质谱生物检测纳米标签技术

吴仪[1]，刘睿[2,*],吕弋[1,2,*],

1. 四川大学分析测试中心,四川省成都市武侯区一环南一路 24 号,610064;
2. 四川大学化学学院,四川省成都市武侯区一环南一路 24 号,610064;

质谱技术以其高通量采样方法、丰富的检测通道、多样化的检测策略和高分辨率线性光谱而著称，已被广泛应用于生物传感领域，是组学分析的强大工具[1-3]。质谱纳米标签能将多个质量标签整合到一个标签中，从而在质谱分析中产生高信号强度，可通过质谱生物测定和质谱流式细胞术实现多重和灵敏的分析。我们总结了合成、设计和应用纳米标签的策略[4]，全面概述了纳米标签在质谱生物分析中的研究现况[5]。我们梳理了纳米标签在无机质谱分析、有机质谱分析和质谱流式细胞术中的原理与方法，分析了纳米标签作为生物标签所面临的挑战和前沿研究成果，重点介绍了其在质谱流式成像和悬浮阵列编码中的应用前景。为如何将纳米标签广泛应用于复杂且具有挑战性的生物质谱分析提供了见解[1]。

关键词: 质谱传感，纳米标签，生物分析，流式细胞术，悬浮阵列

参考文献

1. Wu, Y.; Liu, R.; Hu, J.; Huang, Z.; Lv, Y.; Zhang X. Advancements in Nanotags for Enhanced Mass Spectrometric Biosensor: Towards Next Generation Bioassay and Cytometry, *Chemical Reviews*, **2025**, 125(22), 11083-11119.
2. Arnett, L. P.; Rana, R.; Chung, W. W.-Y.; Li, X.; Abtahi, M.; Majonis, D.; Bassan, J.; Nitz, M.; Winnik, M. A. Reagents for Mass Cytometry. *Chem. Rev.* **2023**, 123 (3), 1166–1205.
3. Liu, R.; Zhang, S.; Wei, C.; Xing, Z.; Zhang, S.; Zhang, X. Metal Stable Isotope Tagging: Renaissance of Radioimmunoassay for Multiplex and Absolute Quantification of Biomolecules. *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49 (5), 775–783.
4. Habibullah, G.; Viktorova, J.; Ruml, T. Current Strategies for Noble Metal Nanoparticle Synthesis. *Nanoscale Res. Lett.* **2021**, 16 (1), 47.
5. Ding, J.; He, Z.; Zhai, Y.; Ye, L.; Ji, J.; Yang, X.; Zhai, G. Advances in Metal-Based Nano Drugs and Diagnostic Probes for Tumor. *Coord. Chem. Rev.* **2024**, 501, 215594.

*liur@scu.edu.cn, 028-85412398
*lvy@scu.edu.cn, 028-85412798

Nanotags for Enhanced Mass Spectrometric Bioassay

Yi Wu[1], Rui Liu[2,*], Yi Lv[1,*]

1. Analytical & Testing Center, Sichuan University, Chengdu 610064, China
2. College of Chemistry, Sichuan University, Chengdu 610064, China

Mass spectrometry, characterized by its high-throughput sampling method, inherent abundance of detection channels, diverse detection strategies, and high-resolution linear spectra, has been extensively utilized in biosensing and emerged as a potent tool for omics analysis.[1-3] In this context, mass nanotags are considered beneficial tags to realize multiplex and sensitive analysis by mass spectrometric bioassay and mass cytometry. Nanoparticles are capable of integrating multiple mass labels in a single tag, which in turn results in high signal intensities in mass spectrometric analysis. This paper summarizes the strategies for synthesizing, designing and applying nanotags,[4] and comprehensively outlines the current research status of nanotags in mass spectrometry-based bioassay.[5] We analyzed the principles and methods of nanotags in inorganic mass spectrometry analysis, organic mass spectrometry analysis and mass spectrometry flow cytometry, described the challenges and cutting-edge research results faced by nanotags as biological labels, and focused on their application prospects in mass spectrometry flow imaging and suspended array encoding. This paper provides insights into how to widely apply nanotags in complex and challenging bioassays[1].

KEY WORDS: Mass spectrometry sensing; Nanotags; Bioassay; Cytometry; Suspension Array

REFERENCES

1. Wu, Y.; Liu, R.; Hu, J.; Huang, Z.; Lv, Y.; Zhang X. Advancements in Nanotags for Enhanced Mass Spectrometric Biosensor: Towards Next Generation Bioassay and Cytometry, *Chemical Reviews*, **2025**, 125(22), 11083-11119.
2. Arnett, L. P.; Rana, R.; Chung, W. W.-Y.; Li, X.; Abtahi, M.; Majonis, D.; Bassan, J.; Nitz, M.; Winnik, M. A. Reagents for Mass Cytometry. *Chem. Rev.* **2023**, 123 (3), 1166–1205.
3. Liu, R.; Zhang, S.; Wei, C.; Xing, Z.; Zhang, S.; Zhang, X. Metal Stable Isotope Tagging: Renaissance of Radioimmunoassay for Multiplex and Absolute Quantification of Biomolecules. *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49 (5), 775–783.
4. Habibullah, G.; Viktorova, J.; Ruml, T. Current Strategies for Noble Metal Nanoparticle Synthesis. *Nanoscale Res. Lett.* **2021**, 16 (1), 47.
5. Ding, J.; He, Z.; Zhai, Y.; Ye, L.; Ji, J.; Yang, X.; Zhai, G. Advances in Metal-Based Nano Drugs and Diagnostic Probes for Tumor. *Coord. Chem. Rev.* **2024**, 501, 215594.

*liur@scu.edu.cn, 028-85412398
*lvy@scu.edu.cn, 028-85412798

环境新污染物质谱分析

$PM_{2.5}$ 中聚乙烯微塑料的快速质谱分析新策略

马金峰[1]，罗沛如[1]，张岩皓[2,*]，张书胜[1,2]

1. 郑州大学化学学院，郑州，450001

2. 郑州大学生态与环境学院，郑州，450001

塑料制品的广泛应用导致大量微塑料（MPs）被释放到生态系统中。尽管土壤和水等其他环境介质中的 MPs 已开展长期研究,但大气细颗粒物（$PM_{2.5}$）中的 MPs 因缺乏合适的分析方法，相关研究仍较为匮乏。传统视觉与光谱手段无法提供 MPs 的准确定量信息，因此本研究开发了一种基于热裂解-气相色谱-串联质谱（Py-GC-MS/MS） 的分析新策略，该方法无需复杂样品前处理，且具备较好的回收率、高灵敏度与精密度。利用该方法，成功实现了北方（郑州市、太原市）与南方（广州市）典型城市 $PM_{2.5}$ 中聚乙烯（PE）微塑料大气浓度的精准测定，为研究大气 MPs 的环境归宿、分布特征及毒性效应提供了关键技术支撑。

关键词：微塑料、$PM_{2.5}$ 、聚乙烯、热裂解- 气相色谱- 串联质谱、大气污染

参考文献：

1.Tournier, V.; Topham, C. M.;An engineered PET depolymerase to break down and recycle plastic bottles. Nature 2020, 580, 216−219.

2.Feng, J.; Zhao, H.;In Situ Identification and Spatial Mapping of Microplastic Standards in Paramecia by Secondary-Ion Mass Spectrometry Imaging. Anal. Chem. 2021, 93, 5521−5528.

yhzhang_chem@zzu.edu.cn

Revealing Unknown PFAS via Cross-Modal Contrastive Learning from MS/MS Spectra to Molecular Structures

Xiao Yang[1], Zhimin Zhang[1,*], Hongmei Lu[1,*]

1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha, 410083, China

ABSTRACT: Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) encompass more than six million molecules in PubChem, yet routine high-resolution tandem mass spectrometry (HRMS/MS) can confidently annotate only the few hundred congeners covered by experimental reference spectral libraries. The overwhelming majority of PFAS-like features detected in environmental samples therefore remain unknown, and existing in silico tools are either too slow to screen million-scale candidate spaces or poorly calibrated for highly fluorinated molecules. Here we present SmartPFAS, a cross-modal contrastive learning framework that embeds MS/MS spectra and molecular structures into a shared vector space, recasting structure elucidation as a nearest-neighbour retrieval problem. The spectral encoder tokenizes each peak by m/z embedding, precursor m/z, neutral loss and intensity, and contextualizes the peak set with a Transformer; the structure encoder applies graph isomorphism networks (GIN) to RDKit molecular graphs. Both branches are processed by External Space Attention Aggregation (ESA) and projected into the joint space, where an NT-Xent contrastive objective with hard-negative mining aligns matched spectrum-structure pairs. The model is pre-trained on 6,159,815 PFAS structures from the OECD PFAS Definition Node in PubChem paired with ICEBERG-simulated negative-mode spectra, and then fine-tuned on 276,574 experimental spectra of 18,587 PFAS curated from NIST23, MoNA, MS-DIAL, GNPS and MassBank, using spectral augmentation (intensity scaling, noise addition, m/z jitter and peak masking). At inference, a query spectrum is matched against a pre-computed PFAS embedding database; features without a hit are routed to multi-method candidate generation followed by SmartPFAS re-ranking. On a held-out test set of 198 PFAS (1,258 experimental spectra), SmartPFAS achieved Recall@1/@5/@10 of 86.56%/98.40%/99.84%, substantially exceeding DeePFAS (78.24%/90.56%/91.20%), CFM-ID 4.0 (53.80%/75.71%/93.80%), APP-ID (51.84%/74.08%/75.68%), SIRIUS 6.3 (38.72%/43.28%/43.84%) and MSGo (5.76%/12.32%/13.28%). Ablation showed that large-scale pre-training contributed most (Recall@1 falling to 68.60% without it), followed by hard-negative mining (75.83%), data augmentation (82.83%) and ESA (83.78%). For 51 PFAS standards measured on an Orbitrap HRMS, SmartPFAS reached Recall@1 of 61.36% and Recall@5 of 100% among the 44 compounds whose MS/MS acquisition was successfully triggered. In wastewater from a fluorochemical industrial park, it correctly identified 42.22% (Recall@1) of 90 annotated PFAS, outperforming MSGo (34.44%) and mzCloud (21.11%). Cross-modal contrastive alignment, combined with million-scale simulated pre-training, enables accurate, library-free and computationally efficient annotation of unknown PFAS directly from MS/MS spectra, offering a practical route to extend PFAS non-target screening far beyond the coverage of experimental spectral libraries.

Keywords: Per- and polyfluoroalkyl substances; Non-target screening; Cross-modal contrastive learning; Tandem mass spectrometry; Molecular structure retrieval

* Corresponding author email: zmzhang@csu.edu.cn；hongmeilu@csu.edu.cn

References

1. H. Wang, T.-C. Kuo and Y. J. Tseng, *Environ. Sci. Technol.*, **2025**, 59, 24841-24852.
2. N. Yu, Z. Ma, Q. Shao, et al., *Nat. Mach. Intell.*, **2025**, 7, 1879-1887.
3. T. Xie, H. Zhang, Q. Yang, et al., *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 13350-13360.
4. S. Goldman, J. Li and C. W. Coley, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 3419-3428.
5. A. J. Williams, L. G. T. Gaines, C. M. Grulke, et al., *Front. Environ. Sci.*, **2022**, 10, 850019.

* Corresponding author email: zmzhang@csu.edu.cn；hongmeilu@csu.edu.cn

SPE-UPLC-MS/MS 测定污水处理厂进出水及受纳水体中抗炎草药来源的活性药物成分

王璐[1], 刘雅睿[2], 张俊杰[1], 汪磊[1,2,*]

1. 南开大学环境科学与工程学院, 天津, 300350;
2. 天津医科大学公共卫生学院, 天津, 300070

论文摘要：水生生态系统中药物和个人护理产品（Pharmaceuticals and personal care products, PPCPs）的污染已引发广泛关注，但现有研究多聚焦于人工合成物质，源自草药的抗炎活性药物成分（herb-derived anti-inflammatory active pharmaceutical ingredients, HI-APIs）却被明显忽视。与合成 PPCPs 类似，HI-APIs 可经人体排泄进入城市污水系统，并可能通过污水处理厂排入受纳水体，具有潜在的生态与健康风险。然而，目前关于其在污水处理过程中的去除效率及在出水和受纳水体中赋存情况的实证证据仍十分缺乏。鉴于 HI-APIs 化学类别多样、理化性质差异大，本研究选取 16 种代表性化合物（涵盖生物碱、黄酮类、苯丙素类、萜烯类、有机酸和蒽醌类）作为目标分析物，建立了固相萃取联合超高效液相色谱-串联质谱（SPE-UPLC-MS/MS）方法，用于测定污水处理厂及受纳河流中 HI-APIs 的含量。水样经 HLB 固相萃取柱富集净化，以甲醇-水（含 0.1%甲酸）为流动相梯度洗脱，在电喷雾离子源正负离子切换模式下采用动态多反应监测（dMRM）模式检测。各目标物在各自线性范围内线性关系良好（R^2>0.99），方法检出限为 0.003–0.841 ng/L；1 μg/L 和 10 μg/L 两个加标水平下，除有机酸类、萜类、甘草查尔酮 A 及大黄素在部分基质中回收率低于 70%外，其余目标物的回收率范围为 70.27%–128.46%。将该方法应用于某污水处理厂进出水及受纳水体实际样品分析，共检出 13 种目标物质，进出水及受纳水体中的总浓度范围分别为 1016.54-1065.60 ng/L、54.30-59.29 ng/L 和 15.04-17.21 ng/L；且天然水体中苦参碱、氧化苦参碱、川芎嗪、甘草素、汉黄芩素、咖啡酸和大黄素，共 7 种物质的检出率达 100%，表明草药源 APIs 可能存在广泛的排放和水环境污染风险。需要指出的是，本方法对有机酸、萜类、甘草查尔酮 A 及大黄素的回收率存在一定妥协，但鉴于其对生物碱和黄酮类化合物（HI-APIs 的主要活性成分类别）的回收率和基质效应均满足要求，该方法仍适用于污水处理厂及受纳水体中 HI-APIs 的痕量检测，可为该类污染物的环境赋存研究和风险评估提供方法支撑。

关键词: 抗炎草药活性药物成分，SPE-UPLC-MS/MS，污水处理厂，受纳水体.

参考文献

1. N. Liu, X. Jin, A. C. Johnson, S. Zhou, Y. Liu, L. Hou, F. Meng and F. Wu, *Environ. Sci. Technol.,* **2025**, 59, 19146–19159.
2. J. Du, J. Xu, Y. Luo, X. Li, L. Zhao, S. Liu, X. Jia, Z. Wang, L. Ge, K. Cui, Y. Ga, M. Zhu, T. Ji, Z. Huang and X. Xia, *Environ. Sci. Technol.,* **2025**, 5, 11275–11285.
3. K. K. Jessing, R. K. Juhler and B. W. Strobel, *J. Agric. Food Chem.,* **2011**, 59, 11735–11743.
4. J. Hu, H. Chang, L. Wang, S. Wu, B. Shao, J. Zhou and Y. Zhao, *Environ. Sci. Technol.*, **2008**, 42, 8339–8344.

Widespread Occurrence of Tire Wear p-Phenylenediamines and their Quinones in Cloud Water

Runqi Zhang, Jianmin Chen*

Shanghai Key Laboratory of Atmospheric Particle Pollution and Prevention , Department of Environmental Science and, Fudan University, Shanghai 200433, China

**jmchen@fudan.edu.cn*

P-Phenylenediamines (PPDs), widely used tire antioxidants, undergo oxidation to form toxic quinones (PPD-Qs).[1] Despite their detection in diverse environmental media, the role of cloud water in environmental fate remains unknown.[2] This study employed ultra-high-performance liquid chromatography-Orbitrap mass spectrometry to investigate ten PPDs and PPD-Qs in cloud water collected from Tianmu Mountain in China- a remote background site with minimal industrial/human activity. The concentrations of PPDs (3.0 − 43.7 ng/L) are markedly exceeding their transformation products (PPD-Qs, 0.2 − 11.5 ng/L), with IPPD and 6PPD dominating. PPDs exhibited greater accumulation in water-insoluble organic matter (WISOM) than in water-soluble organic matter (WSOM), with enrichment factors(Concentration of PPDs in WISOM / Concentration of PPDs in WSOM) ranging from 1.13 to 1.88, indicating a stronger tendency for particle-phase partitioning. Significant positive correlations linked $PM_{2.5}$ levels with the deposition fluxes of both PPDs and PPD-Qs in WSOM and WISOM, demonstrating cloud water's key role in their atmospheric transport and wet deposition. This study presents the first characterization of PPDs and their quinone derivatives' distribution and environmental behavior in cloud water, revealing clouds' significant role in the fate of rubber-derived pollutants. The findings reveal clouds as pivotal reactors for tire-derived pollutants, driving oxidation and multiphase portioning, previously overlooked in global contaminant cycling.

KEYWORDS: Cloud water, *p*-phenylenediamines (PPDs)，PPD-quinones，wet deposition

[1] Tian, Z.; Zhao, H.; Peter, K. T.; Gonzalez, M.; Wetzel, J.; Wu, C.; Hu, X.; Prat, J.; Mudrock, E.; Hettinger, R.; Cortina, A. E.; Biswas, R. G.; Kock, F. V. C.; Soong, R.; Jenne, A.; Du, B.; Hou, F.; He, H.; Lundeen, R.; Gilbreath, A.; Sutton, R.; Scholz, N. L.; Davis, J. W.; Dodd, M. C.; Simpson, A.; McIntyre, J. K.; Kolodziej, E. P. A ubiquitous tire rubber–derived chemical induces acute mortality in coho salmon. *Science* **2021**, *371* (6525), 185-189. DOI: doi:10.1126/science.abd6951.

[2] Wang, W.; Cao, G.; Zhang, J.; Wu, P.; Chen, Y.; Chen, Z.; Qi, Z.; Li, R.; Dong, C.; Cai, Z. Beyond Substituted p-Phenylenediamine Antioxidants: Prevalence of Their Quinone Derivatives in PM2.5. Environmental Science & Technology **2022**, 56 (15), 10629-10637. DOI: 10.1021/acs.est.2c02463.

从微纳米塑料到轮胎橡胶：质谱定量方法及应用

陈昀芊[1],陈建民[1,*]

1.复旦大学环境科学与工程系，上海市空气质量与环境健康重点实验室（LAP³）

摘要

研究背景与科学问题：大气微纳米塑料是全球新兴污染物，可通过大气环流实现远距离传输，兼具气候干扰效应与人体呼吸暴露风险，是当前环境生态与健康领域的研究热点[1]。现阶段大气微纳米塑料研究普遍存在检测标准不统一、光谱技术分辨率受限、数量浓度无法真实反映污染负荷等问题，同时轮胎橡胶颗粒作为大气典型污染物，现有 ISO/TS 20593 方法依赖市场校正因子，难以区分 SBR 与 BR 并受 PS 干扰，制约了高分子颗粒物污染的溯源与风险评估工作推进。为解决上述科学问题，本文构建了一套基于热解吸/热裂解-气相色谱-质谱联用（TD/PY-GC-MS）的高分子颗粒物精准分析体系，覆盖大气微纳米塑料与轮胎橡胶颗粒两类核心污染物，实现定性识别与定量检测的一体化分析。

方法与实验方案：采用热解吸/热裂解-气相色谱-质谱（TD/PY-GC-MS）双发模式：低温热解吸去除有机干扰，高温热裂解定量聚合物[2]。结合气溶胶浓缩系统、SEM/EDS、μ-FTIR、Raman 进行采样与形态-化学辅助表征[3]。微塑料定量以特征热解产物和标准曲线为基础；橡胶定量探索以下策略：以苯乙烯三聚体标记 PS，实验测定 PS 裂解产率，扣除 PS 来源苯乙烯后计算 SBR，再由 SBR 贡献扣除 4-乙烯基环己烯（4-VCH）后计算 BR，NR 以二戊烯（dipentene）独立标定。道路样品先经拉曼初筛，再用质谱验证橡胶/非橡胶判别。

主要结果与发现：微塑料方面，上海 $PM_{2.5}$ 中细塑料颗粒（FPPs）平均浓度为 5.6 μg/m³，占 $PM_{2.5}$ 较高比例；2018—2022 年冬季有机碳（OC）中 FPPs 比例由 5.7%升至 28.8%；纳米塑料质量占比 36.3%、数量占比 99.9%；上海冬季微/纳米塑料肺沉积约 171.3 ng/h[4]；建立粒径-质量方程，估算人类活动区大气微塑料质量浓度年增长率 144%。橡胶方面，对 40 个道路采集颗粒进行质谱检测，其中拉曼初筛为 25 个橡胶、15 个非橡胶，质谱橡胶/非橡胶判别准确率超过 90%，在本批样品中显示质谱可作为橡胶识别的金标准。实现复杂大气基质中多类橡胶颗粒的精准定性，成功规避传统方法欧美校正因子适配性差、误差逐级传递、组分无法区分等弊端，为后续高精度定量方法开发奠定了核心技术基础。

主要结论：本研究构建了以 TD/PY-GC-MS 为核心的微/纳米塑料质谱定量体系，并拓展至轮胎橡胶识别。质谱法可弥补光谱与电镜在质量浓度和复杂基质定量中的不足；橡胶识别已验证，定量方法初步可行。该框架为大气微/纳米塑料及轮胎磨损颗粒的标准化监测、溯源和健康风险评估提供方法基础。

关键词：微/纳米塑料；轮胎橡胶；热解吸/热裂解-气相色谱-质谱；质谱定量；大气颗粒物

参考文献

ADDIN ZOTERO_BIBL {"uncited":[],"omitted":[],"custom":[]} CSL_BIBLIOGRAPHY

1. Stubbins, A., Law, K. L., Muñoz, S. E., Bianchi, T. S. & Zhu, L. Plastics in the Earth system. *Science* **373**, 51–55 (2021).

2. Jing, S. *et al.* Standardizing pyrolysis gas chromatography mass spectrometry for nanoplastics and microplastics detection to advance environmental research. *npj Emerg. Contam.* **1**, 2 (2025).

3. Chen, Y. *et al.* Quantification and Characterization of Fine Plastic Particles as Considerable Components in Atmospheric Fine Particles. *Environ. Sci. Technol.* **58**, 4691–4703 (2024).

4. Chen, Y. *et al.* Size Distribution of Micro-/Nanoplastic Particles and Their Chemical Speciation in the Atmosphere of Shanghai, China. *Environ. Sci. Technol.* **59**, 12833–12842 (2025).

Corresponding author email, jmchen@fudan.edu.cn

对苯二胺（醌）的环境质谱分析

张岩皓[1,*]，张书胜[2]，蔡宗苇[3]

1. 郑州大学生态与环境学院，郑州，450001;
2. 郑州大学化学学院，郑州，450001
3. 东方理工大学，宁波，315200

对苯二胺（PPDs）被广泛用作润滑剂、染料、聚合物中的抗臭氧剂和抗氧化剂，其大规模应用增大了排放量，对环境和人类健康构成了潜在威胁，是一类新型污染物。PPDs 的醌类衍生物 PPDQs 最近也被发现广泛存在于不同环境介质中。*N*-(1,3-二甲基丁基)-*N*'-苯基-1,4-苯二胺（6PPD）的一种新型醌类转化产物 6PPDQ 也被发现对溪流中银鲑鱼存在急性毒性，表明 PPDQs 可能存在生态风险。为了全面了解 PPDs/PPDQs 的环境归趋，开发了基于多质谱平台的两类新污染物检测方法，实现了多元复杂介质中的污染特征与暴露风险评估。

关键词: 对苯二胺（醌）；质谱分析；污染特征；健康风险

参考文献

1. Z. Tian, H. Zhao, T. Peter Katherine, M. Gonzalez, J. Wetzel, C. Wu, X. Hu, J. Prat, E. Mudrock, R. Hettinger, E. Cortina Allan, G. Biswas Rajshree, C. Kock Flávio Vinicius, R. Soong, A. Jenne, B. Du, F. Hou, H. He, R. Lundeen, A. Gilbreath, R. Sutton, L. Scholz Nathaniel, W. Davis Jay, C. Dodd Michael, A. Simpson, K. McIntyre Jenifer and P. Kolodziej Edward, *Science*., **2021**, 371, 185-189.
2. Y. Zhang, C. Xu, W. Zhang, Z. Qi, Y. Song, L. Zhu, C. Dong, J. Chen and Z. Cai, *Environ. Sci. Technol.*, **2022**, 56, 6914-6921.
3. N. Geng, S. Hou, S. Sun, R. Cao, H. Zhang, X. Lu, S. Zhang, J. Chen and Y. Zhang, *Environ. Sci. Technol.*, **2025**, 59, 3183-3192.

多壳层异质结构质谱基质在临床代谢诊断的研究

谢飞飞[1], 裴聪聪[1,*],彭子芳[2],张岩皓[3,*],张书胜[1]

1.郑州大学化学学院，郑州，中国，450001

2. 郑州大学公共卫生学院，郑州，中国，450001

3. 郑州大学生态与环境学院，郑州，中国，450001

代谢组学分析比蛋白质组学和基因组分析更为深入，因此被广泛应用于临床实践的分子诊断。代谢物的快速富集和灵敏检测高度依赖于纳米材料的设计和结构微调控，尤其是在基质辅助激光解吸/电离质谱（MALDI MS）中。代谢物的快速富集可以通过设计表面微纳粗糙结构通过尺寸排阻效应实现。而基质纳米材料的光生电荷分离和光热转换是关键且长期存在的问题，它在很大程度上限制了代谢物的离子化和解吸效率。在此背景下，本文聚焦于多壳层异质结构质谱基质在临床代谢诊断的研究。主要集中在以下三个方面的研究：1）通过煅烧升温速率精准调控壳层数量，合成多壳层结构纳米基质材料，多壳层结构具有多重光散射-反射带来的光捕获增强效应，显著增强基质的光热转换效率；2）多壳层形貌耦合其他物理效应，比如异质结结构等，协同增强代谢物的离子化和解吸效率；3）设计三壳层异质结基质材料，双壳层以及单壳层纳米材料，系统阐述多壳层对分析物解吸/离子化增强机制。从以上三个维度调控多壳层形貌，系统研究新型基质材料与代谢物富集和检测性能之间的构效关系。为了探究多壳层异质结构基质对临床样品代谢物富集、检测以临床代谢诊断研究的影响，以临床癌症样本为诊断模型，验证基于多壳层基质材料提取样本的代谢指纹能力，并结合机器学习考察其在临床诊断中的应用。在 LDI MS 检测中，三壳层异质结基质对代谢物的信号强度较单壳层结构增强约 3 倍，较传统有机基质（DHB、DHAP 等）增强 9-102 倍，同时具备优异的高盐、高蛋白环境耐受性。在临床血清检测中，仅需 100 nL 血清、无需预处理，在 1 秒内即可获得高质量代谢指纹图谱。基于 72 例肝细胞癌患者和 61 例健康对照的代谢图谱，LASSO 模型在训练集和测试集的 AUC 值分别达到 0.984 和 0.922，诊断准确率为 85.5%。本研究证实了多壳层空心结构的光捕获效应与异质结的电荷分离效应对 MALDI MS 性能的协同增强作用，为高性能 MALDI MS 无机基质的设计提供了理论指导，推动了纳米材料基质谱平台在诊断领域的发展。

关键词: 基质辅助激光解吸/电离质谱;多壳层空心异质结构；代谢分析

参考文献

1. R. Li, Y. Zhou, C. Liu, C. Pei, W. Shu, C. Zhang, L. Liu, L. Zhou and J. Wan, Angew. Chem. Int. Ed., **2021**, 60, 12504.
2. C. Pei, Y. Wang, Y. Ding, R. Li, W. Shu, Y. Zeng, X. Yin and J. Wan, Adv. Mater., **2023**, 35, 2209083.

ccpei@zzu.edu.cn; yhzhang_chem@zzu.edu.cn

高分辨质谱辅助的 CoFe 双原子催化体系降解抗生素机制研究

吴昱祺[1]，余祎明[1]，殷丹[1,*]，张岩皓[1,*]，张书胜[1,2]

1. 郑州大大学生态与环境学院，河南郑州，450001

2. 郑州大学化学学院，河南郑州，450001

本研究通过一步热聚合法制备了具有 Co 主位点与 Fe 辅助位点的石墨氮化碳双原子催化剂（CoFe-CN），用于活化 PMS 降解环境水体中的四环素（TC）。$Co_{0.85}Fe_{0.15}$-CN 性能最优，3 min 内四环素降解率达 90%，动力学常数为 Co-CN 的 2 倍，且该体系具备宽 pH 适应范围、抗阴离子干扰及多类新污染物普适去除能力。猝灭实验与电子自旋共振分析表明，Fe 的引入使得该体系的反应路径由自由基主导转变为以 $^1O_2$ 和电子转移为核心的非自由基路径。借助高效液相色谱-质谱联用技术（UPLC-MS/MS）鉴定降解中间体，解析三条氧化转化路径。结合 DFT 理论计算与 QSAR 模型开展产物毒性评估，证实降解过程可降低新污染物的生态风险。本研究为新污染物的高效氧化去除提供了新方法。

关键词：双原子；过一硫酸盐；非自由基路径；抗生素

参考文献

1. Q. Zeng, Y. Wen, X. Duan, X. Xu, J. Tan, Q. Zhang, Y. Liu and Q. Zeng, Appl. Catal. B Environ. Energy, 2024, 346, 123752.
2. J. Dai, A. Chu, Z. Li, J. Wan, Y. Wang, H. Cui and G. Fang, Appl. Catal. B Environ. Energy, 2026, 388, 126528.

yindan@zzu.edu.cn; yhzhang_chem@zzu.edu.cn

环境/食品中对苯二胺抗氧化剂及其醌衍生物的快速质谱分析

叶呈富[1]，彭子芳[2,*]，张岩皓[1,*]，张书胜[1,3]

1. 郑州大学生态与环境学院，中国郑州，450001
2. 郑州大学公共卫生学院，中国郑州，450001
3. 郑州大学化学学院，中国郑州，450001
4. 东方理工大学，中国宁波，315200

对苯二胺类抗氧化剂（PPDs）广泛应用于橡胶制品，其在环境释放过程中可进一步转化生成醌类衍生物（PPDQs）。近年来，PPDs 及 PPDQs 在多种环境介质和食品相关样品中被检出，其环境暴露、食物链传递及潜在健康风险受到广泛关注。由于实际样品基质复杂、目标物含量低，现有分析方法通常依赖繁琐的样品前处理和色谱分离过程，难以满足快速筛查与高通量分析需求。

针对上述问题，本研究以多层 MXene 为基础，通过对氨基偶氮苯（p-AAB）功能化修饰构建新型 p-AAB/MXene 材料，并将其作为表面辅助激光解吸电离飞行时间质谱（SALDI-TOF-MS）的基质兼吸附材料。p-AAB/MXene 可实现目标化合物的有效富集，并改善复杂基质条件下的质谱响应，从而提高 SALDI-TOF-MS 对 PPDQs 的检测性能。在此基础上，建立了 p-AAB/MXene-SALDI-TOF-MS 快速分析方法，并成功应用于 $PM_{2.5}$ 和饮料等实际样品中 PPDQs 的检测。该方法减少了复杂的样品前处理及色谱分离步骤，缩短了分析时间，同时具有良好的检测灵敏度和准确性。研究结果表明，功能化 MXene 兼具目标物富集与 SALDI 基质功能，为复杂基质中痕量 PPDQs 的质谱分析提供了新的材料与方法学思路。

关键词： 对苯二胺类抗氧化剂；醌类衍生物；MXene；表面辅助激光解吸电离；飞行时间质谱；快速分析

参考文献：

1. Y. H. Zhang, C. H. Xu, W. F. Zhang, Z. H. Qi, Y. Y. Song, L. Zhu, C. Dong, J. M. Chen and Z. W. Cai, Environ. Sci. Technol., **2022**, 56, 6914-6921.
2. Z. F. Peng, W. F. Zhang, D. Yin, X. Zhang, S. Liu, W. D. Zhao, J. Mao, Y. H. Zhang and J. P. Xie, Chem. Eng. J., **2023**, 454, 139978.
3. X. Zhang, X. B. Ji, Z. F. Peng, Y. H. Zhang, Z. W. Cai and S. S. Zhang, J. Chromatogr. A, **2025**, 1745, 465759..

zifang_peng@zzu.edu.cn; yhzhang_chem@zzu.edu.cn

环境土壤及水体中痕量全氟烷基磺酰氟的分析

朱俊臣，鲍冕，孙翠荣*

浙江大学药学院

全氟烷基磺酰氟（Perfluoroalkane Sulfonyl Fluorides, PFASFs）是全氟烷基磺酸（PFSAs）及其衍生物的重要前体，因其持久性、生物蓄积性和毒性，对生态及健康构成潜在威胁。其中，全氟辛基磺酰氟（PFOSF）和全氟己基磺酰氟（PFHxSF）已受《斯德哥尔摩公约》管控。由于缺乏易电离与发色基团，PFASFs 的直接色谱质谱检测面临巨大挑战，因而其环境暴露与毒理学研究受到制约。本文基于化学衍生化结合液相色谱-串联质谱（LC-MS/MS）技术，构建了针对水体、土壤基质中痕量 PFASFs 的高灵敏定量分析新方法。

基于全氟烷基磺酰氟（C_nF_{2n+1}-SO_2F）具有氧化性，采用对甲基苯硫酚为衍生化试剂可将其转变为具有较好质谱响应的全氟烷基亚磺酸（C_nF_{2n+1}-SO_2H），建立了土壤中痕量 PFOSF 和 PFHxSF 的液相色谱质谱联用分析方法。PFOSF 和 PFHxSF 在土壤中的方法检出限分别为 0.066 和 0.072 ng/g，回收率范围分别为 96-111%和 72-89%。结合溶剂诱导相变萃取（SIPTE）与对甲苯硫酚衍生化技术，构建了水体中痕量 PFOSF 和 PFHxSF 的 LC-MS/MS 定量分析方法。该方法利用乙腈/甲苯体系高效富集水样中的目标物，有效消除了基质干扰并提升了衍生效率。2023 年某氟化工厂采集水样中普遍检出 PFOSF（最高 3761.11 ng/L）和 PFHxSF（最高 3324.68 ng/L），并伴随高浓度 PFSAs 和全氟烷基羧酸（PFCAs）的共存。

针对短链的全氟丁基磺酰氟（PFBSF）回收率低、定量分析困难的瓶颈，开发了一种新型 4-羟基-N,N,N-三甲基苯胺三氟甲基磺酸盐衍生试剂。通过对衍生溶剂、试剂配比及催化剂等反应条件进行系统优化，实现了水、土基质中 PFBSF 的高灵敏定量分析，同时实现 PFOSF、PFHxSF 一体化 LC-MS/MS 技术检测。方法学验证表明，目标分析物 PFOSF、PFHxSF 和 PFBSF 在 5~100 ng/L 范围内线性良好（$R^2 > 0.99$），检出限低（水样：0.84~0.98 ng/L；土壤：0.022~0.030 ng/g），回收率稳定（72%~116%）。2023 年至 2025 年的时序变化分析显示，该区域水体和土壤环境中的 PFASFs 污染已显著减轻；PFSAs 和 PFCAs 的浓度虽整体下降，但仍处于较高水平，需进一步关注。

关 键 词：全氟烷基磺酰氟；衍生化试剂；液相色谱质谱联用；环境水体；环境土壤。

参考文献：

1. J Zhu, M Bao, H Yang, H Feng, Y Pan and C Sun. *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 499, 140285.
2. M Bao, H Feng, Y Zheng, H Luo, C Sun, and Y Pan. *Environ. Sci. Technol.*, **202**3, 57, 4180-4186.

环境微塑料和低聚物检测分析

张俊杰[1]，汪磊[1*]

1、南开大学环境科学与工程学院 天津 300350

摘要：本研究建立了环境样品中聚碳酸酯（PC）和聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）微塑料的 LC-MS/MS 定量方法。采用碱辅助热水解，在戊醇或丁醇体系中使 PC、PET 解聚，分别生成双酚 A（BPA）和对苯二甲酸（PTA），扣除本底后计算其质量浓度。污泥加标回收率为 87.2%–97.1%。该方法已应用于污泥、海洋沉积物、室内灰尘、贝类消化残留及海盐、岩盐等样品，无需分离微塑料，简便灵敏，为环境微塑料质量浓度定量提供了新思路，后续可拓展至聚乳酸及聚酰胺等聚合物。PET 微塑料在环境中被广泛检出，但针对环境介质中 PET 低聚物的分析方法仍较匮乏，其赋存特征与迁移转化行为尚不明确。本研究开发并验证了一种结合靶向 LC-MS/MS 定量与非靶向 UHPLC-HRMS 筛查的灵敏分析方法，用于室内灰尘中 7 种 PET 环状寡聚物（二聚体至七聚体）的测定及未知低聚物筛查。定量方法在 0.1–500 ng/mL 范围内线性优异（r^2 > 0.99）。灰尘基质加标实验表明，加速溶剂萃取（ASE）回收率为 87.9%–102%，准确度与重现性良好，并确定乙醇为最佳萃取溶剂。此外，采用 UHPLC-Orbitrap MS 首次从室内灰尘中识别出超过 15 种线型及环状低聚物。

关键词：聚对苯二甲酸乙二酸酯；低聚物；非靶向筛查；室内灰尘；高分辨质谱

通讯作者：汪磊，wang2007@nankai.edu.cn

环境污染物及其代谢影响的质谱成像研究

聂宗秀 [1,*]

海南省海口市美兰区人民大道 58 号



聂宗秀，中国科学院化学研究所研究员，国家杰出青年基金获得者，以颗粒质谱构建及小分子代谢产物质谱为主要研究方向。设计研制了多种颗粒离子化源及电荷探测器，构建了离子阱颗粒质谱装置平台，对微纳尺度颗粒进行了多参数表征；建立了基于指纹质谱的颗粒分析方法，获得了纳米颗粒的生物组织质谱成像，将质谱质量范围拓宽了 7 个数量级，从分子质谱的 10e6 Da 至颗粒的 10e14Da；合成和发现了系列 MALDI 新基质，获得了多种动物模型下的代谢小分子质谱成像。近年来在 Nature Nanotech.、Science Adv., Angew. Chem.、Anal. Chem.等期刊发表论文 140 余篇。授权中国发明专利 30 项。

报告内容简介：

随着微塑料和工业化学品在环境中的广泛残留，潜在的健康风险日益受到关注。聚乳酸（PLA）微塑料和轮胎添加剂氧化产物 6PPD-醌（6PPD-Q）作为生物降解塑料及轮胎添加剂的代表，广泛存在于自然环境中，并已被证实可在体内积聚并诱导代谢紊乱。我们采用高分辨质谱成像（MALDI MSI）与多器官多组学分析，系统揭示了这些污染物在小鼠体内的多器官分布及其代谢影响。结果表明，PLA 微塑料在胃肠道内可逐步降解为纳米颗粒进而破坏肠-肝轴稳态，6PPD-Q 则在体内迅速分布于肝脏、肾脏、睾丸等多个器官，二者均可通过引发系统性代谢紊乱与免疫扰动。多组学分析显示，两类污染物分别诱导了肠道菌群失调、炎症激活及氧化应激反应，扰乱谷胱甘肽、抗坏血酸、三羧酸循环与嘌呤代谢等关键通路，呈现出从急性损伤到慢性代谢重编程的动态变化趋势。质谱成像进一步揭示了抗氧化物质如谷胱甘肽、维生素 C 在组织及亚器官结构中的空间分布差异，显示污染物在不同器官微环境中引发的应激响应具有高度局部性与组织特异性，反映其对内稳态调控的深层干扰机制。该研究展示了污染物暴露引发的复杂系统性代谢重构，强调即使是低剂量或可降解材料，也可能通过持续暴露影响机体稳态。基于质谱成像与多组学的联合策略，为解析环境污染物在体内的行为路径与毒性机制提供了强有力的技术支持。

关键词：微塑料；6PPD-醌；代谢紊乱；质谱成像

参考文献：

1. Fan, J.; Qu, Y.; Qu, L.; Shen, D.; Liu, H.; **Nie, Z.***, Oral Exposure to PLA Microplastics Induces Time-dependent Nanotoxicity via the Gut-liver Axis. J. Hazard. Mater. 2025, 138931.

2. Jia, K.; Sun, J.; Du, Q.; Qu, Y.; Han, J.; Liu, H.; **Nie, Z.***, Mass Spectrometry Imaging Unveils the Metabolic Effect of 6PPD-Quinone in Exposed Mice. Environ. Sci. Technol. 2025, 59, (9), 4282-4291.

3. J.Y. Chen, L.C. Mao, Y.M. Jiang, H.H. Liu, X. Wang, L.W. Meng, Q.Y. Du, J. Han, L.Y. He, H.Y. Huang, Y.W. Wang, C.Q. Xiong*, Y. Wei, and Z.X. Nie*, *ACS Nano*, 2023, **17**, 4463.

4. J. Xue, H. Liu, S.M. Chen*, C.Q. Xiong*, L. Zhan, and **Z.X. Nie***, *Sci. Adv*.2018, **4**, eaat9039.

5. Y.M. Jiang, J. Sun*, C.Q. Xiong*, H.H. Liu, Y.Z. Li, X. Wang, and **Z.X. Nie***, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021. **60**, 23225.

环境中锂元素的高精度分析、来源与风险评估

杨学志[1*]，张海燕[2]，刘倩[2]，江桂斌[1,2]

[1]国科大杭州高等研究院，杭州，310000

[2]中国科学院生态环境研究中心，北京，100080

*Email: yangxuezhi@ucas.ac.cn

锂离子电池（LIBs）作为能源转型的核心器件，已深度嵌入电动汽车与电网储能体系。在全球碳中和进程驱动下，其产量与用量预计将迎来爆发式增长，然而配套的回收机制与废弃物管控政策明显滞后，导致锂向环境中的释放通量持续攀升，正演变为国际关注的新兴污染议题[1]。

为此，本研究围绕锂污染的环境归趋与风险开展系统探索，重点涵盖三个层面：（1）构建跨介质定量评估模型，首次将河流、污水、大气颗粒物、道路积尘、土壤、植被、野生动物及废电池正极材料纳入统一分析框架，系统刻画锂在不同隔室间的迁移潜力；（2）以我国江西晋江流域为典型研究区，针对碳酸锂冶炼集群开展环境追踪，发现周边地表水存在显著的人为锂输入信号，揭示工业活动对区域水质的直接冲击[2-3]；（3）选取典型三元正极材料，模拟其在河水、渗滤液及海水等真实水相环境中的溶出行为，结合理论计算阐明金属释放的主控因子与分子机制[4]。

上述成果为锂基材料的环境安全评估提供了实证依据，也为完善锂电池全生命周期管理与污染防控政策奠定了基础。

关键词: 新能源;锂电池;锂;赋存特征;环境风险.

参考文献

1. Xuezhi Yang; Haiyan Zhang; Qian Liu*; Guibin Jiang; The Li-ion battery industry and its challenges, Nature Reviews Chemistry, 2025, 9(8): 497-498.
2. Yang, Xuezhi; Wen, Haonan; Liu, Yin; Huang, Ying; Zhang, Qun; Wang, Weichao; Zhang, Haiyan; Fu, Jianjie; Li, Gang; Liu, Qian; Jiang*, Guibin; Lithium Pollution and Its Associated Health Risks in the Largest Lithium Extraction Industrial Area in China, Environmental Science & Technology, 2024, 58(26): 11637-11648.
3. Chenqi Guo; Xuezhi Yang*; Zechen Yu; Guohua Zhu; Qun Zhang; Jiejian Fu; Qian Liu; Haiyan Zhang*; Guibin Jiang; Lithium Pollution Arising from Papermaking and Textile Dyeing Industries: Emission Characteristics and Environmental Impact, Environmental Science & Technology, 2026, 60(4): 3556-3566.
4. Ya Liu; Haonan Wen; Yangsheng Chen; Xuezhi Yang*; Yin Liu*; Bin Zhao; Guibin Jiang; Dissolution Behavior of Lithium-Ion Battery Cathode Materials in Aquatic Systems: Key Drivers and Molecular Mechanisms, Environmental Science & Technology, 2026, 60(8): 6589-6599.

Corresponding author email: yangxuezhi@ucas.ac.cn, Tel: 18813042007

基于 LC-MS/MS 的污水中毒品及新精神活性物质高通量检测与污水流行病学稳定性研究

孟媛[1,*], 宋作栋[2], 杨九勇[3],陈跃[1]，肖亚文[1]

1. 山东警察学院 山东省济南市章丘区章莱路 2555 号
2. 江苏省扬州环境监测中心 江苏省扬州市邗江区文昌西路 458 号
3. 山东中医药大学附属医院 山东省济南市历下区经十路 16369 号

关键词: 毒品；新精神活性物质；污水流行病学；稳定性；LC-MS/MS

毒品及新精神活性物质（New psychoactive substances，NPS）的滥用问题日益严重，这些物质经人体排泄后随生活污水进入环境水体，已经成为公安、环境及健康领域的高关注物质。作为毒情监测的新兴手段，污水流行病学（Wastewater-based epidemiology，WBE）通过测定污水中毒品及其代谢物浓度反推区域消费水平，能够实时反映当地毒品消耗情况。然而，污水基质成分复杂、目标物含量低，且目标物在经下水管道至污水处理厂输送及样品储存过程中的降解行为常被忽视，导致生物标志物选择不恰当、毒情估算结果偏低，制约了 WBE 监测结果的可靠性[1-3]。因此，建立适用于复杂污水基质的高通量质谱分析方法，阐明目标物在下水管道及保存过程中的稳定性，是保障 WBE 数据质量的关键。

本课题通过优化前处理及仪器分析方法，建立了基于液相色谱-串联质谱（LC-QTRAP-MS/MS）的污水中 78 种毒品、NPS 及代谢物的高通量同步定性定量分析方法，并进行方法学验证。在此基础上，选取典型目标物，研究其在下水管道运输和样品存放过程中的稳定性，检测不同采集和储存条件下目标物的衰减变化，筛选适宜的生物标志物，以提高 WBE 模型的准确性。结果表明，样品经盐析辅助液液萃取法及过膜处理后，以多反应监测模式、正离子模式进行扫描，所有目标物在 0.1~20 ng/mL 范围内线性良好，6 点标准曲线相关系数（R^2）均大于 0.995，检出限为 0.11~2.70 ng/mL，定量限为 0.38~9.00 ng/mL。在高、中、低三种加标浓度下，所有目标物的加标回收率在 62.2%~126.5%，日内和日间精密度均小于 15%，方法满足污水中痕量多组分同步检测需求。通过模拟下水管道环境，发现温度和底泥是影响毒品及 NPS 稳定性的关键因素。高温会加速毒品及 NPS 降解，降低其在下水管道中的稳定性；底泥的存在使毒品及 NPS 的稳定性明显降低，这可能是由于底泥中的微生物加速目标物在下水管道中的自然降解。样品存放稳定性结果表明，随着存放温度的升高，毒品及 NPS 降解率呈现明显上升趋势，表明高温环境会加速其降解。污水的酸化处理能够降低目标物的降解，即加酸能够使样品更加稳定。相较于不过滤组，过滤后的毒品及 NPS 稳定性提高，这可能由于过滤能够去除污水中的大部分微生物，使得目标物稳定性提高。下一步将利用机器学习模型学习环境与稳定性的映射关系，将模型预测的稳定性用于实际样品的反算校正。研究结果可为摸清毒品及 NPS 的滥用规律及禁毒工作的预防、打击和惩治提供有力的数据支撑和科学依据。

参考文献

1. J. Gao, Benjamin J. Tscharke, Phil M. Choi, Jake W. O'Brien, T. Boogaerts, H. Jiang, M. Yang, Samantha A. Hollingworth, Phong K. Thai. *Environ. Sci. Technol.,* **2021**, 55(11): 7551.
2. R. Yi, T. Zeng, J. Chen, D. Liu, X. Yang, M. Zhao, Z. Zhou. *Water,* **2023**, 15(23): 4192.
3. R. Bade, J. Huchthausen, C. Huber, P. Dewapriya, B. Tscharke, R. Verhagen, C. Puljevic, B. Escher, J. O'Brien. *Water Res*., **2024**, 253: 121297.

yuanmeng0419@163.com, 18615178093.
本研究受到山东省自然科学基金青年科学基金项目（ZR2024QB327）和山东警察学院人文社会科学计划资助项目（YKYPYZX202301）资助。

基于质谱靶向/非靶向识别新型有机磷污染物

张珑馨，刘润增[1*]

山东大学环境科学与工程学院

有机磷污染物是一类在环境中广泛存在且备受关注的化学物质。传统的环境监测仅关注已知的有限种类的有机磷污染物，可能导致大量未知的有机磷污染物被忽视，存在潜在的环境与健康风险。本研究旨在综合利用靶向与非靶向筛查策略，系统识别环境中的新型有机磷污染物。首先，基于化学品信息挖掘发现一类未被关注的季膦类污染物，我们开发了高效液相色谱-三重四极杆质谱对该类污染物进行靶向定量分析，评估其在化工生产厂周围的赋存水平。在此基础上，我们进一步将化学品生产信息和环境转化相耦合，发现了一类新型有机磷酸酯，其来源于前体化合物有机亚磷酸酯的氧化。针对硫代有机磷酸酯标准品缺乏的困境，我们采用高效液相色谱-高分辨质谱进行非靶向筛查。基于特征碎片离子的非靶向筛查方法，从室内灰尘中首次识别出 12 种硫代有机磷酸酯。初步研究结果在多种环境样品中发现了一系列未被常规监测的、可能源于工业品杂质或环境转化产物的新型有机磷化合物。本研究证明了将非靶向筛查与靶向分析联用的有效性，为全面评估有机磷污染物的环境赋存、迁移转化及生态风险提供了新的视角和方法学支持，对完善环境监测体系和风险管控具有重要意义。

关键词: 靶向分析、非靶向分析、含磷新污染物.

金属有机框架材料用于复杂基质中新污染物的分离分析与质谱检测应用

王雪梅, 张震, 张新中, 卢小泉*

高原交汇区水资源与水环境保护教育部重点实验室，甘肃省生物电化学与环境分析重点实验室，西北师范大学化学化工学，兰州，730070

新污染物（ECs）是指对生态环境与人体健康存在潜在风险，但尚未纳入常规环境管理或难以用传统方法有效控制的一类污染物。其作为一类外源性化合物，广泛来源于工农业生产、交通运输、食品加工及城市化等人类活动，并可经由自然迁移与生物富集等过程在环境介质中持续扩散与累积，对生态环境与人体健康构成潜在威胁[1]。然而，ECs 在环境与生物样品中通常以痕量浓度（ng/L 至μg/L）存在，给常态化的检测与常规监管带来了显著挑战。

痕量水平与复杂基质之间的双重制约，也使得 ECs 的高效富集与高灵敏检测成为准确定量的关键技术难点。在样品前处理方面，固相（微）萃取及其衍生技术是目前应用最广的解决方案之一。其中，以金属有机框架（MOFs）为代表的多孔材料，凭借其高比表面积、可调控的孔道结构及丰富的表面官能团与界面相互作用，已展现出对多种 ECs 优异的选择性富集能力，可显著提升痕量新污染物的富集效果并有效抑制基质干扰[2]。

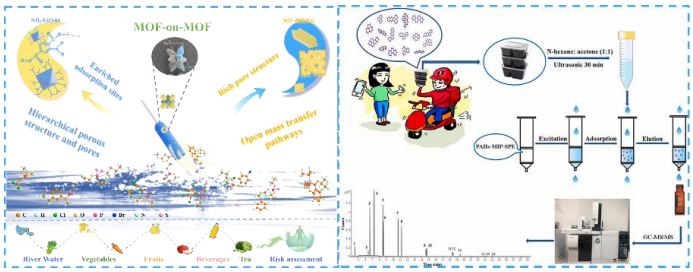


图 1 基于金属有机框架复合材料的固相（微）萃取结合质谱检测复杂基质中的新污染物

在检测方法层面，质谱技术因其优异的定性与定量能力、低至 ng/L 的检出限以及多组分同步分离分析的优势，已成为 ECs 检测的“黄金标准”。通过将高效萃取技术与高分辨质谱技术联用，可构建一套涵盖样品前处理至精准定量的完整分析检测流程，从而有效应对 ECs 痕量、多组分及复杂基质所带来的检测难题[3]。

基于上述思路，课题组系统开展了 MOFs 复合材料的精准构筑、样品前处理方法的改进并结合质谱检测技术，系统开展针对全氟和多氟烷基物质（PFAS）等典型新污染物在复杂基质中的高效分离与检测方法学研究（图 1）。

关键词: 金属有机框架；固相（微）萃取；分离分析；质谱检测.

参考文献

1. Y. Q. Tao, J. Q. Wang, Y. L. Chen, C. Q. Tan and H. G. Guo, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 495, 139058.
2. Z. Zhang, J. Zhang, X. M. Wang, X. Z. Zhang, W. B. Li, D. Xu, X. Z. Du and X. Q. Lu, *Small*, **2025**, 21, 2506627.
3. X. Z. Zhang, J. Yang, X. M. Wang, C. X. Li, T. Peng, Q. Mao, X. Z. Du and X. Q. Lu, *Talanta*, **2022**, 243, 123385.

Corresponding author email: luxq@nwnu.edu.cn, wangxuemei@nwnu.edu.cn, Tel: 0931-7971276.

Metal-organic frameworks composites in the separation and mass spectrometry determination of emerging contaminants from complex matrices

Xuemei Wang[1,2,3], Zhen Zhang[3], Xinzhong Zhang[1,2], Xiaoquan Lu[1,2,3*]

1. Key Laboratory of Water Security and Water Environment Protection in Plateau Intersection, Ministry of Education, Lanzhou, China;

2. Key Lab of Bioelectrochemistry and Environmental Analysis of Gansu Province, Lanzhou, China;

2. College of Chemistry and Chemical Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou, China

ABSTRACT: Emerging contaminants (ECs) refer to pollutants that pose potential risks to ecosystems and human health but have not yet been incorporated into routine environmental management or are difficult to control effectively by conventional approaches. As exogenous compounds, they originate broadly from anthropogenic activities such as industrial and agricultural production, transportation, food processing, and urbanization, and can disperse and accumulate continuously in environmental media through natural migration and bioaccumulation, thereby threatening ecosystems and human health[1]. However, ECs typically occur at trace concentrations (ng/L to μg/L) in environmental and biological samples, which poses substantial challenges for routine detection and regulatory oversight.

This dual constraint of trace levels and complex matrices makes efficient enrichment and sensitive detection of ECs a key technical bottleneck for accurate quantification. In sample preparation, solid-phase (micro)extraction and its derived techniques remain among the most widely adopted solutions. In particular, porous materials represented by metal-organic frameworks (MOFs), owing to their high specific surface area, tunable pore architectures, and abundant surface functional groups and interfacial interactions, have demonstrated excellent selective enrichment capability toward diverse ECs, markedly improving the enrichment of trace emerging contaminants while effectively suppressing matrix interference[2].

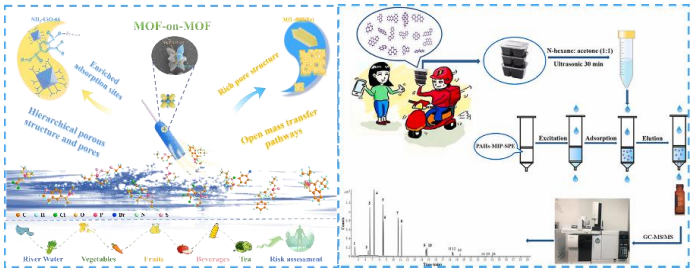


Figure 1 Solid-phase (micro)extraction based on metal-organic frameworks composites coupled with mass spectrometry for the detection of emerging contaminants in complex matrices

At the detection level, mass spectrometry (MS) has become the “gold standard” for EC analysis, given its superior qualitative and quantitative performance, detection limits down to ng/L, and capacity for simultaneous multi-component separation and analysis. Coupling efficient extraction techniques with high-resolution MS enables the construction of an integrated analytical workflow spanning sample preparation to accurate quantification, thereby effectively addressing the challenges posed by the trace levels, multi-component nature, and complex matrices of ECs[3].

Corresponding author email: luxq@nwnu.edu.cn, wangxuemei@nwnu.edu.cn, Tel: 0931-7971276.

Following this rationale, our group has systematically pursued the precise construction of MOFs composites, the improvement of sample preparation methods, and their integration with MS detection, with a focus on developing efficient separation and detection methodologies for typical emerging contaminants such as per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in complex matrices (Figure 1).

KEY WORDS: Metal-organic frameworks; Solid-phase (micro)extraction; separation and analysis; Mass spectrometry detection.

REFERENCES

1. Y. Q. Tao, J. Q. Wang, Y. L. Chen, C. Q. Tan and H. G. Guo, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 495, 139058.
2. Z. Zhang, J. Zhang, X. M. Wang, X. Z. Zhang, W. B. Li, D. Xu, X. Z. Du and X. Q. Lu, *Small*, **2025**, 21, 2506627.
3. X. Z. Zhang, J. Yang, X. M. Wang, C. X. Li, T. Peng, Q. Mao, X. Z. Du and X. Q. Lu, *Talanta*, **2022**, 243, 123385.

Corresponding author email: luxq@nwnu.edu.cn, wangxuemei@nwnu.edu.cn, Tel: 0931-7971276.

聚苯乙烯纳米塑料共暴露下 PFOS 及其新兴替代品 6:2 FTSA 的毒性研究：来自肠—肝轴的启示

陶秋英[1]，张玉思[1]，黄映红[1]，王献[1,*]

1. 中南民族大学化学与材料科学学院，湖北 武汉，430074

全氟和多氟烷基物质（PFASs）为高持久性人为源化学品，广用于工业与消费品，因化学稳定性强，其普遍赋存于环境介质中并关联多种毒性效应。本研究基于质谱非靶与靶向代谢组学方法，结合转录组测序、16S rRNA 高通量测序、分子生物学技术、细胞模型及组织病理学分析等多维研究策略，系统评估了传统全氟辛烷磺酸（PFOS）及其新兴替代品6:2氟调聚磺酸（6:2 FTSA）单独暴露以及与聚苯乙烯纳米塑料（PS NPs）联合暴露的毒理学效应，揭示了肠—介导其生物学效应中的作用。PFOS表现出比6:2 FTSA更强的全身、肝脏、肠道、代谢和微生物毒性；而6:2 FTSA尽管毒性相对较低、组织蓄积也较低，仍引起了显著的生物学扰动，提示其替代传统PFOS并不一定消除毒理学担忧。此外，PS NPs并非简单地增强PFOS和6:2 FTSA诱导的毒性。相反，它们通过改变污染物的组织分布，并影响肠道微生物群落和宿主－微生物代谢，从而重塑了毒理学响应。整合代谢组学、转录组学、微生物组、分子和病理组织学证据进一步揭示了色氨酸和胆汁酸代谢、肠道屏障完整性以及肝脏代谢稳态的协同紊乱。AhR相关信号通路的参与为微生物群衍生的代谢扰动与肠道反应之间提供了潜在分子联系，而肠道和肝脏的整合性改变支持肠—肝轴是PFAS毒性及其受PS NPs调节的关键机制框架（图1）。

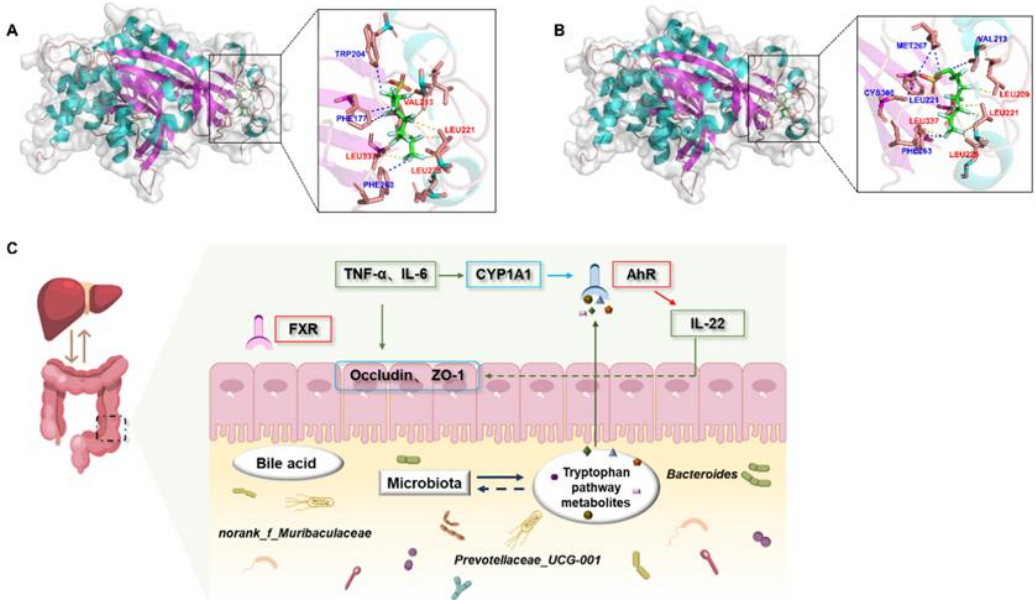


图1. 基于分子对接模拟的PFOS和6:2 FTSA与AhR蛋白相互作用及AhR介导毒性通路分析

本研究通过多组学数据融合解析了“肠-肝”轴的调控通路，为理解 PFOS、6:2 FTSA 的毒理学特征以及 PFOS、6:2 FTSA 与 PS NPs 联合暴露毒性的潜在机制提供了实验依据，对完善污染物管控策略及评估环境暴露风险具有一定的参考价值。

参考文献

1. Q. Tao, X. Wang* et al., *J. Colloid Interface Sci.*, **2026**, 702, 138921,
2. T.Y. Suman, I.-S. Kwak, *J. Hazard. Mater.* 487 (2025) 137249,
3. C. Yuan, X. Li, C. Lu, L. Sun, et. al., *Envir. Pollut.*, 372 (2025) 126027.

通讯作者：Email: xwang27@mail.scuec.edu.cn，Tel:（027）67842752

气候行动下全球钢铁冶炼过程中非故意持久性有机污染物排放特征

刘国瑞[1,2,4*]，孙宇翔[1,2,3]，杨秋婷[1]

1. 浙江省金华市迎宾大道 688 号，浙江师范大学地理与环境科学学院，321004
2. 北京市海淀区双清路 18 号，中国科学院生态环境研究中心，100085
3. 北京市怀柔区雁栖湖东路 1 号，中国科学院大学资源与环境学院，101408
4. 浙江省杭州市西湖区石龙山街 7 号谷源园区，国科大杭州高等研究院环境学院，310024

钢铁生产是支撑现代社会运行与经济发展的关键工业活动。然而，钢铁行业既是《巴黎协定》框架下推动工业深度脱碳的重点领域，也是《斯德哥尔摩公约》长期关注的非故意持久性有机污染物（UPOPs）重要排放源。随着全球气候行动持续推进，钢铁行业正在经历生产规模、区域布局与技术体系的多重重构。在气候行动背景下，钢铁行业低碳发展伴生的 UPOPs 排放风险仍缺乏系统评估。本研究系统梳理了全球钢铁行业低碳发展路径，评估了传统与新型低碳钢铁生产路线的 UPOPs 排放水平和排放潜力，构建了气候行动驱动的全球 UPOPs 排放评估框架，并进一步模拟了未来全球钢铁行业 UPOPs 排放的时空变化趋势。

研究表明，气候行动总体上有助于降低钢铁行业 UPOPs 排放，但不同技术路线的减排效益存在差异，且这种改善并非在所有地区同步发生。废钢电弧炉炼钢具有显著的碳减排优势，却是 UPOPs 的重要排放来源。相比之下，直接还原铁—电弧炉炼钢等新兴技术路线具有较低的 UPOPs 排放潜力。这表明，低碳技术的推广并不必然带来 UPOPs 排放的同步降低，需要关注不同技术路线的碳污协同效益。此外，随着全球钢铁产能布局和技术路线不断调整，UPOPs 排放正呈现新的空间转移特征，一些新兴钢铁生产地区可能面临潜在排放上升风险。研究进一步指出，当前以碳减排为核心的钢铁转型路径，仍缺少对 UPOPs 排放风险的系统纳入。《巴黎协定》与《斯德哥尔摩公约》虽然分别回应气候变化与 UPOPs 污染问题，但在钢铁行业的实际转型过程中，两者之间仍缺乏衔接。未来应更加重视气候治理与 UPOPs 治理的协同推进。该研究为理解全球钢铁行业低碳转型背景下 UPOPs 排放变化提供了科学依据，也为推动气候行动与环境健康协同治理提供了新的思路。

关键词: 钢铁冶炼；非故意持久性有机污染物；气候行动；碳污协同治理

参考文献

1. Y. Sun, Q. Yang, J. Yun, Y. Yang, J. Tang, Q. Liu, M. Zheng, G. Liu. *Adv. Sci.*, 2026, 13(29), e19769
2. M. Odabasi, A. Bayram, T. Elbir, R. Seyfioglu, Y. Dumanoglu, A. Bozlaker, H. Demircioglu, H. Altiok, S. Yatkin, B. Cetin. *Environ. Sci. Technol.*, 2009, 43(14), 5205–5211
3. W. Cornwall. *Science*, 2024, 384(6695), 498–499
4. Z. Fan and S. J. Friedmann. *Joule*, 2021, 4, 829–862

liiugr@zjnu.edu.cn, 15810654708

水中对苯二胺类抗氧化剂的快速 SALDI-TOF-MS 检测：基于磁性单层纳米 MXene 的前处理与检测平台

张琬笛[1], 彭子芳[2,*], 张岩皓[3,*], 张书胜[1]

1. 郑州大学，化学学院，郑州，450001
2. 郑州大学，公共卫生学院，郑州，450001
3. 郑州大学，生态与环境学院，郑州，450001

随着对苯二胺类抗氧化剂（PPDs）及其衍生物在工业消费品中的广泛应用，导致这些化学添加剂大量排放到环境中，多对人类健康和水生生物及其生态环境构成严重的潜在威胁。因此，对 PPDs 的测定是重要且必要的。然而，现有的检测方法（LC-MS、GC-Ms 等）存在样品前处理繁琐、仪器运行时间长、成本高等情况而无法满足高通量的样品分析。基质辅助激光解吸/电离飞行时间质谱（MALDI-TOF-MS）由于其高通量、高灵敏度和快速分析等特点，已成为化学、生物、医学和环境研究中的先进的分析技术，但传统的 MALDI 基质，如α-氰基-4-羟基肉桂酸（CHCA）、2,5-二羟基苯甲酸（DHB），在低分子量区域（＜500Da）存在较大的信号干扰，不能实现小分子化合物（如 PPD）的快速 MALDI-TOF-MS 检测。因此，以纳米材料为基质，开发表面辅助 LDI-TOF-MS（SALDI-TOF-MS）来解决这一问题。本工作设计并开发了一种新型磁性单层纳米 MXene（SNM@Fe_3O_4），可同时作为 SALDI-TOF-MS 基质和高效吸附剂，实现对 PPDs 的“富集-检测”一体化流程。基于 SNM@Fe_3O_4 的 SALDI-TOF-MS 方法已成功应用于测定中国北方（郑州）和南方（桂林）不同类型实际水样中的 4 种 PPDs，具有可接受的相对标准偏差（RSD）（≤8.4%）和添加回收率（67.9-110%），展示了 SNM@Fe_3O_4 在复杂环境基质中对痕量和超痕量有机污染物具有快速筛选的优异潜力。

关键词: MXene; PPD; 吸附剂; SALDI-TOF-MS 基质; 水环境分析

参考文献

1. G. D. Cao, W. Wang, J. Zhang, P. F. Wu, X. C. Zhao, Z. Yang, D. Hu and Z. W. Cai, *Environ. Sci. Technol.*, **2022**, 56, 4142-4150.
2. Z. F. Zhang, E. Sverko, S. A. Smyth and C. H. Marvin, *Anal. Bioanal. Chem.*, **2016**, 408, 7945-7954.
3. J. Wu, D. Ouyang, Y. T. He, H. Su, B. C. Yang, J. Li, Q. Q. Sun, Z. Lin and Z. W. Cai, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2019**, 11, 38255-38264.
4. D. Ouyang, Q. Zheng, H. Huang, Z. W. Cai and Z. Lin, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 15573-15578.

zifang_peng@zzu.edu.cn; yhzhang_chem@zzu.edu.cn

微液滴发生方法开发及其界面 NO_2 反应质谱研究

陈欢[1]，张新星[1*]

1 南开大学化学学院，天津市南开区卫津路 94 号，300071

* Email: zhangxx@nankai.edu.cn

摘要：

水微液滴界面具有不同于体相水的独特理化性质，但其特殊反应活性究竟源于微液滴的本征属性，还是由气动、超声或高电压等外部因素活化所致，仍存在争议。本研究建立了干冰生成法和绝热膨胀法两种无外部活化的微液滴制备方法，并结合自主研制的高灵敏、快速响应温度测量装置及高速摄像技术，对微液滴的温度参数和形成过程进行了表征。结果表明，绝热膨胀法产生的微液滴温度可低至-34.4°C，处于过冷状态；干冰生成法制备的微液滴温度较体相水低约 2 K。质谱分析发现，20 种反应在未活化微液滴与传统气动喷雾微液滴中表现出相近的反应行为，且无显著差异，表明微液滴的特殊反应活性主要源于其内在固有性质，而非外部活化因素。在此基础上，进一步研究了典型大气污染物二氧化氮（NO_2）在水微液滴界面的转化过程。结果显示，NO_2 可在微液滴界面同时发生氧化和还原反应，分别生成硝酸（HNO_3）和亚硝酸（HONO）。其中，HNO_3 是酸沉降的重要前体物，HONO 经光解可产生羟基自由基（·OH），进而促进挥发性有机物氧化和臭氧生成。本研究揭示了微液滴反应活性的本征来源及其介导 NO_2 氧化还原转化的新路径，表明云、雾和海洋飞沫等环境微液滴可能是大气活性物种生成与污染物转化的重要反应场所，为完善大气界面化学反应机制提供了新的认识。

关键词：质谱分析、微液滴、大气化学

在线分析质谱法及在污染物转化机理研究的应用

何静 [1,2*]，张洪 [1,2]，姜杰 [1,2*]

1. 哈尔滨工业大学(威海) 海洋科学与技术学院，威海，264209

2. 哈尔滨工业大学 城市水资源与水环境全国重点实验室，哈尔滨，150090

*E-mail: hejing@hit.edu.cn

关键词：气液界面、在线分析、污染物转化、质谱

摘要：气液界面反应机理研究是大气化学中的重要课题，然而，目前的气液界面反应分析方法多采用间歇取样、离线分析的方式进行，容易丢失反应过程中的瞬时态中间体，进而导致反应机理不完全。基于此，开发实时、在线的气液界面反应监测方法对气液界面反应机理全面解析具有重要意义。本团队以液滴为界面反应器，利用表面活性剂在水和有机溶剂中溶解度不同的特性，开发了界面分析质谱法，在气液界面反应进行的同时萃取界面物质进行在线分析，实现了气液界面反应的实时、在线监测，具有灵敏、能捕获瞬时态中间体的优点。基于该方法，对臭氧与磷脂的界面反应进行了在线分析，鉴定了 Criegee 中间体，阐释了臭氧与肺表磷脂的气液界面反应机理；进一步探究了海雾对该反应的影响，证明了海雾影响这类界面反应主要与其中盐离子的电荷量和半径有关；明确了油酸自氧化反应机理，该反应同样由 Criegee 中间体介导进行；阐明了大气中的乙二酸等小分子有机酸能够固定 CO_2，建立了大气 CO_2 化学和 SOAs 生成的联系。

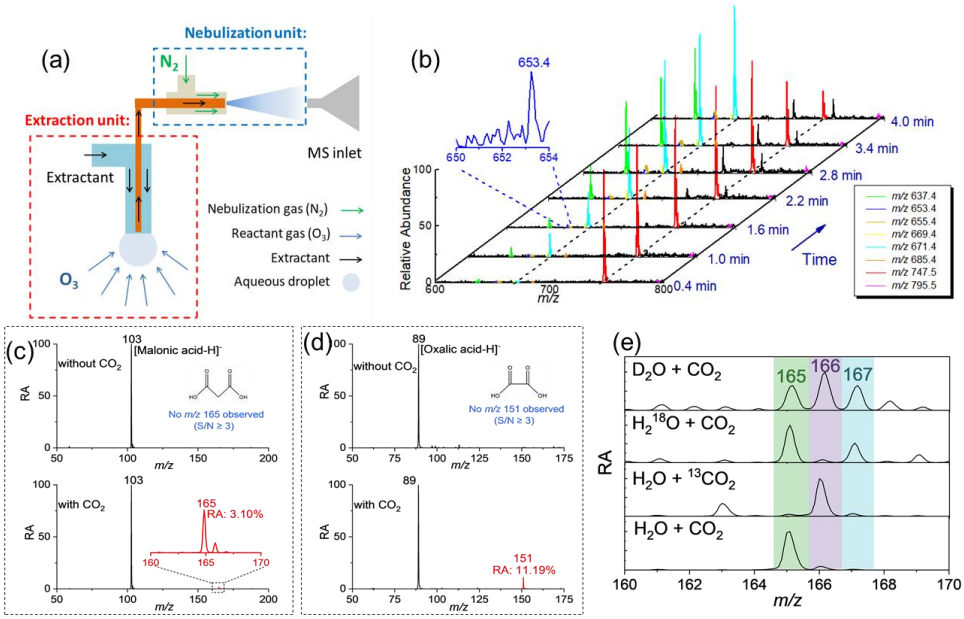


图 1. 界面分析质谱法及其应用

参考文献

1. Xia D.; Zhang H.; Jiang J. *, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 11266–11271.
1. Jing H.; Zhang H.*; Jiang J. *, et al. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 5018-5023.
2. Ju Y.; Zhang* H.; Jiang J.*, et al. *Nat. Ecol. & Evol.*, **2023**, 7, 1892–1902.
3. Zhang H.; Jing H.*; Jiang J., et al. *J. Colloid Interface Sci.*, **2025**, 677, 244-249.
4. Ju Y.; Zhang* H., Jiang J.*, et al. *J. Colloid Interface Sci.*, **2023**, 634, 535–542.

中国水体中对苯二胺（醌）的全国性污染特征与暴露风险

侯士姣[1]，张岩皓[2,*]，张书胜[1]，蔡宗苇[3]

1. 郑州大学化学学院，郑州，中国，450001
2. 郑州大学生态与环境学院，郑州，中国，450001
3. 东方理工大学，中国宁波，315200

随着橡胶制品广泛使用，取代对苯二胺类抗氧化剂（PPDs）及其醌类转化产物（PPD-Qs）在环境中的赋存、生态风险和人体健康风险引起全球关注。尤其是 6PPD-Q 被证实对水生生物具有极高毒性，但其在全国尺度下的污染特征、环境行为及人体暴露风险尚不明确。本研究进行了两项全国性调查：在八大流域 45 个城市采集 124 份河流水样，在 33 个省级行政区 90 个城市采集家庭自来水复合样，采用超高效液相色谱-三重四极杆质谱联用技术（UHPLC-MS/MS）分别测定河水中的 6 种 PPDs、自来水中的 7 种 PPDs 及两类样品中的 5 种 PPD-Qs，并开展流域通量、亲本-醌关系、年龄分层摄入和筛查级风险评估。家庭自来水中目标物检出率为 82 % - 100 %，可比城市/流域的自来水水平总体低于河流水体，而不同水源和处理工艺类别间无全国尺度显著差异。基于年龄分层评估显示，婴儿的估计每日摄入量（EDI）最高，但各年龄组全国中位筛查级风险指数（HQ）均远低于 1。两项调查从河流与供水末端互补揭示了 PPDs/PPD-Qs 的污染和风险差异，支持加强河流生态风险管理、家庭水龙头持续监测及重点化合物实验毒性阈值研究。

关键词: 对苯二胺（醌）；河流；家庭自来水；污染特征；风险评估

参考文献

1. Z. Tian, H. Zhao, K. T. Peter, et al., *Science*, **2021**, 371, 185-189.
2. N. Geng, S. Hou, S. Sun, et al., *Environ. Sci. Technol.*, **2025**, 59, 3183-3192.

yhzhang_chem@zzu.edu.cb

环境污染物非靶标分析

MXene 杂化吸附剂用于热敏纸中双酚类物质的移液器吸头微固相萃取

李喜悦，田倩，雷霄云*

陕西理工大学化学与环境科学学院，陕西省催化重点实验室，陕西·汉中，723001

*Email: xiaoyunlei@snut.edu.cn

双酚类化合物属于典型内分泌干扰污染物，在热敏纸等日常制品中普遍存在，即便处于痕量水平仍会干扰生物体内分泌系统[1]，而热敏纸基质复杂，传统前处理手段富集能力有限，因此发展高选择性吸附材料与配套痕量分析方法具有较高的研究价值。本研究以 $Ti_3C_2T_x$ MXene 纳米片为基底，通过自由基聚合反应合成 POSS-MA-co-γ-MAPS 共聚物并实现共价接枝，制备 MXene-POSS 有机-无机杂化吸附剂[2]。利用 SEM、TEM、XRD、FT-IR、XPS 表征技术，探究材料微观形貌、物相组成、表面化学性质及孔结构特征。将该杂化材料用作移液器吸头微固相萃取（PT-μSPE）吸附介质，结合 HPLC-UV 检测技术，建立热敏纸中 BPS、BPA、BPAF、BPAP 四种双酚类物质的分析方法，对材料制备工艺以及萃取条件进行系统性优化。实验结果显示，在最优条件下，4 种目标双酚物在 10–1000 μg·L⁻¹ 范围内线性相关性良好；BPS、BPA、BPAF、BPAP 的 MDL 分别为 0.52、1.77、4.06、3.85 μg·L⁻¹，MQL 依次为 1.74、5.89、13.53、12.82 μg·L⁻¹，应用于热敏纸实际样品检测时，加标回收率符合痕量分析的质控标准。研究证实，该杂化材料对双酚类目标物具备良好富集能力，所建立的 PT-μSPE-HPLC-UV 方法简便灵敏，可为复杂固体基质中双酚类内分泌干扰物的痕量测定提供新的材料选择与分析策略。

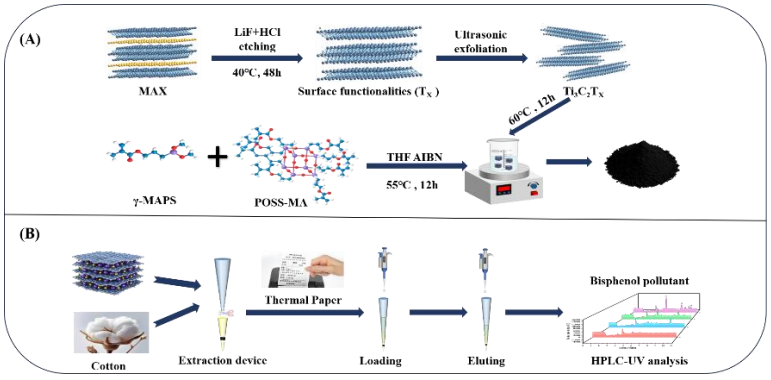


Fig.1 Schematic illustration of fabricating exfoliated $Ti_3C_2T_X$ MXene-grafted POSS-MA-co-γ-MAPS copolymer via free-radical polymerization, the PT-μSPE procedure with the resulting material as sorbent, and its application.

关键词：MXene；笼型聚倍半硅氧烷 (POSS-MA)；杂化复合材料；移液器吸头微固相萃取；双酚类污染物

参考文献：

[1] Sicherl P P, Pahović P Š, Franko N, et al. P18-30 Estrogenic Activity Assessment of Novel Bisphenol A Substitutes Present in Consumer Products and Thermal Paper[J]. Toxicology Letters, 2025, 411: S202.

[2] Zhike Si,Yongzhu YanCA1,Xiao Liu,et al. Flexible and multifunctional microcrystalline cellulose/Ti3C2Tx MXene-POSS composite films for electromagnetic interference shielding in extreme environments[J]. Chemical Engineering Journal,2025,Vol.525: 169897.

Zr/Eu-BDC-NH_2 比率荧光探针用于炭疽标志物和汞离子连续传感检测

补富强[1]，何娟[2*],侯贤灯[1,2*]

1. 四川大学化学学院&绿色化学与技术教育部重点实验室，成都，610064；
2. 四川大学分析测试中心，成都，610064；

摘要: 针对炭疽标志物（2，6-吡啶二羧酸，DPA）和汞离子（Hg^{2+}）现场实时监测的需求，本研究采用溶剂热法合成了双金属中心 Zr/Eu-BDC-NH_2 金属有机框架（MOF），基于配体天线效应、内滤效应及竞争取代原理，构建了一种比率荧光探针，用于 DPA 和 Hg^{2+}的连续检测。结果表明，该方法对 DPA 的检出限低至 5.2 nM，线性范围为 0-20 μM（R^2=0.998），对常见共存离子、氨基酸和糖类具有良好抗干扰能力，回收率为 97%-111%；对 Hg^{2+}亦表现出选择性识别性能，对 Hg^{2+}的检出限为 0.87 μM，线性范围为 0~20 μM（R^2=0.994），回收率为 97%-107%。本研究为炭疽病早期诊断标志物及重金属汞污染的连续检测提供了高灵敏、快速、低成本的传感新策略，具有很好的应用潜力。

关键词: 金属有机框架；炭疽标志物；汞；比率荧光

参考文献

1. K. Jomova, S. Y. Alomar, E. Nepovimova, K. Kuca and M. Valko, Arch. *Toxicol*, **2024**, 99, 153–209.
2. P. Thiraviyam, P. C. Rosline, S. Krishnamoorthy and P. Sivaperumal, *Chemosphere*, **2026**, 406, 144964.
3. O. S. Fagbenro and E. D. Olaleye, *Chemosphere*, **2026**, 402, 144928.
4. R. Fioravanti, L. Muzzioli, E. Maurel, G. Palma, G. Calabrese, A. Angioni, C. La Rocca, A. Mantovani, A. Pezzana and L. M. Donini, *Foods*, **2025**, 14, 3752.

A Zr/Eu-BDC-NH_2 Ratiometric Fluorescent Probe for Sequential Sensing of Anthrax Biomarker and Mercury Ions

Fuqiang Bu[1], Juan He[2], *Xiandeng Hou*[1, 2*]

1. College of Chemistry and Key Laboratory of Green Chemistry and Technology (Ministry of Education), Sichuan University, Chengdu 610064, China;
2. Analytical and Testing Center, Sichuan University, Chengdu 610064, China;

ABSTRACT: To meet the demand for on-site and real-time monitoring of the anthrax biomarker (2,6-pyridinedicarboxylic acid,DPA) and mercury ions (Hg^{2+}), a bimetallic-center Zr/Eu-BDC-NH_2metal–organic framework (MOF) was synthesized by a solvothermal method. Based on the ligand antenna effect, inner filter effect, and competitive displacement principle, a ratiometric fluorescent probe was constructed for the sequential detection of DPA and Hg^{2+}. The results showed that the detection limit for DPA was as low as 5.2 nM, with a linear range of 0–20 μM (R^2 = 0.998). The method exhibited good anti-interference ability against common coexisting ions, amino acids, and saccharides, with recoveries of 97%–111%. It also displayed selective recognition performance for Hg^{2+}, with a detection limit of 0.87 μM, a linear range of 0–20 μM (R^2 = 0.994), and recoveries of 97%–107%. This study provides a highly sensitive, rapid, and low-cost sensing strategy for the sequential detection of early diagnostic biomarkers of anthrax and heavy metal mercury pollution, showing promising application potential.

KEY WORDS: metal–organic framework; anthrax biomarker; mercury; ratiometric fluorescence

REFERENCES

1. K. Jomova, S. Y. Alomar, E. Nepovimova, K. Kuca and M. Valko, Arch. *Toxicol*, **2024**, 99, 153–209.
2. P. Thiraviyam, P. C. Rosline, S. Krishnamoorthy and P. Sivaperumal, *Chemosphere*, **2026**, 406, 144964.
3. O. S. Fagbenro and E. D. Olaleye, *Chemosphere*, **2026**, 402, 144928.
4. R. Fioravanti, L. Muzzioli, E. Maurel, G. Palma, G. Calabrese, A. Angioni, C. La Rocca, A. Mantovani, A. Pezzana and L. M. Donini, *Foods*, **2025**, 14, 3752.

基于膜蛋白 VDAC1 亲和捕获的潜在线粒体毒性化合物高通量筛查

陈卫丽[1],朱雅萱,黄宇铭[1],宫玉峰[1,*]

1.中国海洋大学，海洋生命学院，山东省青岛市鱼山路 5 号，邮编 266006

据统计，全球范围内已注册生产和使用的人工合成化学品及混合物超过 35 万种，其环境转化还会进一步产生大量结构和毒性未知的新污染物。如何从复杂环境化学物中快速识别具有潜在健康危害的活性化合物，是新污染物研究面临的重要挑战。环境污染物的毒性效应通常始于其与关键功能蛋白的相互作用。VDAC1 是线粒体外膜重要通道蛋白，参与线粒体代谢物转运、能量稳态及细胞死亡调控，因此可能是环境化学物诱导线粒体毒性的重要分子靶点。本研究以 VDAC1 为“诱饵”，建立了基于蛋白质亲和捕获（protein pulldown）与高分辨质谱非靶向分析相结合的 VDAC1 配体高通量筛查方法，可从复杂环境体系中直接富集并识别能够与 VDAC1 结合的化学物。利用该方法，我们发现约 468 种此前未见报道的 VDAC1 潜在配体。进一步选取代表性化合物，通过微量热泳动（MST）等方法验证其与 VDAC1 的相互作用，并在毒性实验中观察到相关生物学效应，支持部分 VDAC1 配体作为潜在线粒体毒剂的可能性。上述结果表明，以 VDAC1 为靶标的蛋白质亲和捕获策略能够将环境化学物筛查与分子靶点及毒性效应直接关联，为环境线粒体毒剂的高通量发现及其作用机制研究提供新的技术路径。

关键词: 蛋白亲和净化；线粒体毒性；VDAC1；高通量筛查

参考文献

1. Gong, Y.; Sun, J.; Wang, X.; Barrett, H.; Peng, H., *Environ. Sci. Technol.* **2024**, 58, (23), 10227-10239. Doi: 10.1021/acs.est.3c10973. (First author)
2. Gong, Y.; Yang, D.; Liu, J.; Barrett, H.; Sun, J.; Peng, H.,* *Environ. Sci. Technol.* **2023**, 57, (32), 11913-11925.
3. Gong, Y.; Yang, D.; Barrett, H.; Sun, J.; Peng, H.,* *Environ. Sci. Technol.* **2023**. 57, (9), 3486-3495.

Email: yufeng.gong@ouc.edu.cn; Tel. 18661733312.

人工智能赋能非靶向筛查

周燕

中国科学院成都生物研究所，成都

新兴化学危害物及其结构类似物不断涌现，标准品和参考谱库覆盖不足，复杂串联质谱解析与候选结构排序成为非靶向筛查的关键瓶颈。本报告围绕质谱碎裂规则、跨模态表示学习与动态数据库构建，介绍人工智能辅助化合物注释及其在食品和环境样品筛查中的研究进展。基于液相色谱－高分辨质谱数据，HazardFinder 将特征碎片、中性丢失与结构指纹关联，实现危害物类别判断和候选过滤；CMSSP 通过谱图与分子结构的对比预训练提高候选排序能力[1]；ClipMol 利用 SMILES 与 InChI 双视图预训练学习分子表示，并用于碰撞截面积预测[2]；在此基础上，MS-ClipMol 进一步实现谱图与预训练分子表示的对齐。结果表明，CMSSP 在 CASMI 2017 Category 4 测试中的 Top-1 注释准确率为 63.63%，在 30 个甘草代谢物实验谱图中的 Top-1 和 Top-3 准确率分别为 86.7%和 100%；MS-ClipMol 在 MassSpecGym Formula Split 上的 R@1 为 66.78%。在非靶向筛查中，真菌毒素高通量筛查方法在 398 份食品样品中检出 297 份阳性样品[3]；基于特征碎裂与结构取代规律的芬太尼类化合物筛查策略检出了全部 29 种验证化合物[4]；对苯二胺醌类化合物的动态筛查构建了包含 269,745 种候选结构的数据库，检出了全部 15 种合成验证化合物，并在 MassBank 的 5,187 组公开谱图中获得约 0.12%的假阳性率。上述研究表明，结合碎裂知识、机器学习和动态结构扩展，可提高候选结构排序能力并拓展潜在危害物的筛查范围；库外候选仍需结合标准品或独立结构证据进一步确证。

关键词：人工智能；非靶向筛查；高分辨质谱；跨模态对比学习；动态数据库

参考文献

1. L. Chen, B. Xia, Y. Wang, X. Huang, Y. Gu, W. Wu and Y. Zhou, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 16871–16881. DOI: 10.1021/acs.analchem.4c03724.

2. S. Shen, C. Shi, Y. Wang, X. Chen, Y. Zhou and B. Xia, *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 22451–22461. DOI: 10.1021/acs.analchem.6c03104.

3. W. Wu, X. Huang, R. Liang, T. Guo, Q. Xiao, B. Xia, Y. Wan and Y. Zhou, *Food Control*, **2023**, 150, 109772. DOI: 10.1016/j.foodcont.2023.109772.

4. X. Chen, B. Xia, W. Wu, Z. Jin, Y. Wang and Y. Zhou, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 487, 137232. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2025.137232.

Corresponding author email: zhouyan@ cib.ac.cn, Tel.

Artificial Intelligence for Nontarget Screening

Yan Zhou

Chengdu Institute of Biology, Chinese Academy of Sciences, Chengdu, China

ABSTRACT: Emerging chemical hazards and their structural analogues challenge the coverage of reference standards and spectral libraries. Interpreting tandem mass spectra and ranking candidate structures remain major bottlenecks in nontarget screening. This report presents advances in artificial intelligence-assisted compound annotation and its application to food and environmental screening, focusing on fragmentation rules, cross-modal representation learning and dynamic databases. Using liquid chromatography–high-resolution mass spectrometry data, HazardFinder links diagnostic fragments and neutral losses to structural fingerprints for chemical classification and candidate filtering. CMSSP aligns spectra and molecular structures through contrastive pretraining[1], while ClipMol learns molecular representations from paired SMILES and InChI views for collision cross-section prediction[2]. MS-ClipMol further aligns spectra with these pretrained molecular representations. CMSSP achieved a Top-1 annotation accuracy of 63.63% in CASMI 2017 Category 4, and Top-1 and Top-3 accuracies of 86.7% and 100%, respectively, for 30 experimental spectra of licorice metabolites. MS-ClipMol achieved an R@1 of 66.78% on the MassSpecGym Formula Split. In nontarget screening, the high-throughput mycotoxin screening method detected 297 positive samples among 398 food samples[3]; a screening strategy based on diagnostic fragmentation and substitution patterns detected all 29 validation compounds comprising fentanyl and its analogues[4]. Dynamic screening of p-phenylenediamine quinones used a database containing 269,745 candidate structures, detected all 15 synthesized validation compounds, and yielded a false-positive rate of approximately 0.12% across 5,187 public MassBank spectra. These results indicate that combining fragmentation knowledge, machine learning and dynamic structural expansion can improve candidate structure ranking and broaden screening coverage for potential chemical hazards. Candidates beyond existing libraries still require confirmation using reference standards or independent structural evidence.

KEYWORDS: artificial intelligence; nontarget screening; high-resolution mass spectrometry; cross-modal contrastive learning; dynamic databases

REFERENCES

1. L. Chen, B. Xia, Y. Wang, X. Huang, Y. Gu, W. Wu and Y. Zhou, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 16871–16881. DOI: 10.1021/acs.analchem.4c03724.

2. S. Shen, C. Shi, Y. Wang, X. Chen, Y. Zhou and B. Xia, *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 22451–22461. DOI: 10.1021/acs.analchem.6c03104.

3. W. Wu, X. Huang, R. Liang, T. Guo, Q. Xiao, B. Xia, Y. Wan and Y. Zhou, *Food Control*, **2023**, 150, 109772. DOI: 10.1016/j.foodcont.2023.109772.

4. X. Chen, B. Xia, W. Wu, Z. Jin, Y. Wang and Y. Zhou, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 487, 137232. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2025.137232.

Corresponding author email: zhouyan@ cib.ac.cn, Tel.

基于 FT-ICR 超高分辨率质谱的三七耦合环境污染物与生物信号分子非靶向化学指纹解析

Non-targeted chemical fingerprinting analysis of Panax notoginseng coupled environmental pollutants and biological signaling molecules based on FT-ICR ultra-high-resolution mass spectrometry

Yanning Dou[1,*], Li Wang[2], Xiaoming Zhang[1], Jian Shen[1], Jie Zhang[1]

1. School of Medical Laboratory, Qilu Medical University, Zibo 255300, China
2. Laboratory of Mass Spectrometry Technologies, Division of Energy Research Resources, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, 116023, China

ABSTRACT: Non-targeted chemical fingerprinting analysis based on FT-ICR ultrahigh resolution mass spectrometry was applied to characterize environmental pollutants and biological signaling molecules in Panax notoginseng. Panax notoginseng, a traditional Chinese medicinal herb, its roots hold substantial promise for applications in both nutraceuticals and pharmaceuticals [1,2]. Fungal and bacterial metabolites including toxic mycotoxins were preliminarily identified in SC-CO_2 extracts, among which betaenone D and chaetomellic acid C represented neglected medicinal material safety risks analogous to classic food-borne mycotoxin contamination events. These exogenous toxins originate from complex plant-soil microbial interactions, and climate change may further aggravate such contamination [3,4]. Noticeably, most target microbial pollutants were absent in UAE extracts, indicating ultrasonic-assisted extraction could mitigate mycotoxin levels. Geographical chemical variations and differential compound profiles between SC-CO_2 and UAE demonstrated their complementary extraction selectivity. This work highlights hidden mycotoxin hazards in P. notoginseng rhizosphere systems, provides evidence linking soil microbes to medicinal plant quality, and suggests UAE as a promising strategy balancing mycotoxin elimination and bioactive component preservation for sustainable herbal production.

KEY WORDS: Panax notoginseng, FT-ICR MS, non-targeted chemical fingerprinting, mycotoxin contamination, supercritical CO_2 extraction

REFERENCES

1. Z. Zhu, Z. Bai, Y. Cui, X. Li, X. Zhu, *Phytomedicine*，**2025**，142，156703.
2. G. Wei, G. Zhang, M. Li, Y. Zheng, W. Zheng, B. Wang, Z. Zhang, X. Zhang, Z. Huang, T. Wei, L. Shi, S. Chen, L. Dong, *Horticulture Research*, **2024**, 11, uhae170.
3. Y. Yang, J. Li, B. Yang, L. Wang, W.Tang, L. Cha, Front. Plant Sci, **2026**, 16, 1697347.
4. K. Zhang, I. Tran, M. M. Phillips, J Food Sci, **2024**, 89, 1252–1260.

yanningdoudou@163.com; 15898767168

珠江口大气棕碳关键吸光组分的高分辨质谱解析

薛亚未[1]，叶建波[2]，高媛[1*],谭羽俊[2]

1. 北京师范大学珠海校区理工实验平台，广东，珠海

2. 中山大学海洋科学学院，广东，珠海

棕碳（BrC）是大气有机气溶胶的重要吸光组分，其分子组成复杂，关键发色团及吸光贡献仍缺乏清晰认识。本研究以珠江口大万山岛冬季 $PM_{2.5}$为对象，结合 HPLC-HRMS、UPLC-MS/MS 和光学表征，解析甲醇溶性有机气溶胶的分子组成及吸光特征。HRMS 共获得 2736 个分子特征，CHON 和 CHO 类占主导，不同气团影响下分子组成和氧化程度存在明显差异。基于随机森林模型筛选出 318 个 BrC 相关分子特征，其中吸光贡献最高的 20 个组分贡献 71.66%的吸光。结果表明，具有较高共轭程度、中等氧化水平和含氮官能团的分子是 BrC 吸光的重要贡献者，为珠江口大气 BrC 关键吸光组分的分子识别提供了质谱证据。

关键词: 珠江口；棕碳；高分辨质谱；吸光组分.

参考文献

1. **Xue Y, Gao Y, Ye J, Zhong Q, Zhang C, Tham Y J.** Optical properties and sources of water-soluble brown carbon in PM2.5 at an island site in the Pearl River Estuary: Assessing continental and marine influences[J]. *Atmospheric Pollution Research*, 2026, 17(7): 103027. DOI: 10.1016/j.apr.2026.103027.
2. **薛亚未, 高媛, 叶建波, 卢润, 谭羽俊.** 超高效液相色谱-串联质谱法测定大气细颗粒物中 16 种硝基酚类物质[J]. *分析测试学报*, 2026, 45(3): 510–516. DOI: 10.12452/j.fxcsxb.25102902.
3. **Zeng Y, Shen Z, Takahama S, Zhang L, Zhang T, Lei Y, et al.** Molecular absorption and evolution mechanisms of PM2.5 brown carbon revealed by electrospray ionization Fourier transform–ion cyclotron resonance mass spectrometry during a severe winter pollution episode in Xi'an, China[J]. *Geophysical Research Letters*, 2020, 47: e2020GL087977. DOI: 10.1029/2020GL087977.
4. **Lin P, Bluvshtein N, Rudich Y, Nizkorodov S A, Laskin J, Laskin A.** Molecular chemistry of atmospheric brown carbon inferred from a nationwide biomass burning event[J]. *Environmental Science & Technology*, 2017, 51(20): 11561–11570. DOI: 10.1021/acs.est.7b02276.

Corresponding author email：yuan.gao@bnu.edu.cn; Tel: 0756-3621976

组分分离与高分辨质谱联用策略高通量分析农药杂质

金香子[1]，牟治国[1]，崔美玉[2]，董美花[1]，李东浩[1*]

[1]延边大学，理学院，化学系，农产品质量与安全评价吉林省高校重点实验室，延吉，133002

[2]延边大学，分析测试中心，延吉，133002

农药制剂中杂质组成复杂且潜在风险不一，且样品基质往往富含大量乳化剂等助剂，因此质谱前端离子化过程往往受到较强基质效应影响，离子化抑制导致低丰度杂质难以检出。本研究以农药制剂中杂质全分析为目的，基于自主研发的二维碳纤维组分分离技术，将农药制剂样品分为强、中、弱，三个极性，有效的将表面活性剂、助溶剂及高丰度共提取物进行分离，降低共洗脱离子竞争，保障电喷雾离子化效率，从而显著缓解离子抑制并拓展低丰度杂质的检出限。通过联用 UPLC-QTOF-MS，对马拉硫磷农药制剂进行杂质全分析，采用全扫描/数据无依赖采集（DIA），结合精确质量、同位素拟合、碎片诊断离子与保留行为对化合物进行定性。通过直接质谱分析比较，发现乳油制剂进行组分极性分离后，有效分离出聚乙二醇乳化剂，且极性组分内化合物质谱响应值得到显著提升（$p<0.01$）。制剂中一共定性出 10 种杂质，包括马拉氧磷与马拉硫磷单羧酸等降解、代谢转化产物。进一步通过马拉硫磷及其杂质的危害度评估显示，检出杂质 LD_{50} 值均小于马拉硫磷，并且多种杂质显示出更强的生物累积倾向与皮肤屏障穿透性，提示其具有更高暴露与健康风险。综上，本研究建立的极性组分分离方法有效缓解了基质干扰导致的离子抑制现象，提升了杂质检测灵敏度，有望应用于风险杂质的筛查与评估，为农药产品的质量控制和安全评价提供重要技术支持。

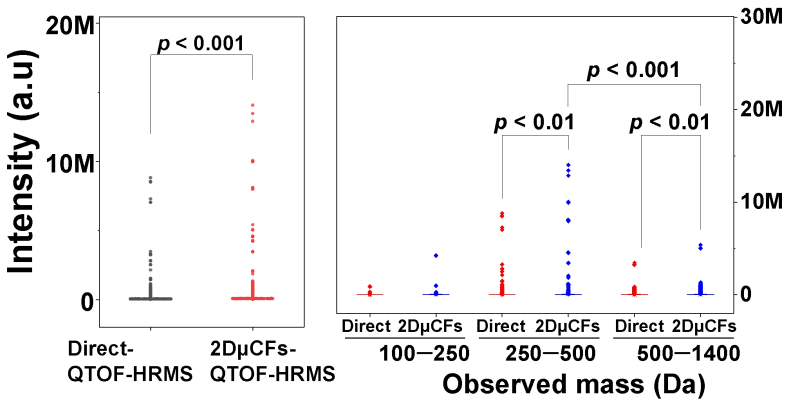


Fig. 1 组分分离前后马拉硫磷乳油制剂中不同分子量区间化合物的响应值变化

关键词: 农药杂质；快速筛查；组分分离；离子化效应.

参考文献

1. M. Cui, Z. Fatima, Z. Wang, Y. Lei, X. Zhao, M. Jin, L. Liu, C. Yu, M. Tong, D. Li*. *J Chromatogr A*, **2024**, 1719, 464774
2. L. Yang, Y. Wang, Z. Wang, M. Cui, R. Jin, H.-B. Shang, D. Li. *J Pharm Anal*. **2024**, 14 (5), 100900
3. H. Karasali, K.M. Kasiotis, K. Machera, A. Ambrus. *J Agric Food Chem*. **2014**, 62 (47), 11347–11352

本研究得到国家自然科学基金（22466035）及吉林省科技发展计划项目（YDZJ202501ZYTS410）资助

无机及同位素质谱基础及应用

ICP-MS生物分析：元素标签工具箱及进样装置

郭怡新，鄢新力，严晓文，杨利民，王秋泉*
厦门大学化学化工学院，谱学分析与仪器教育部重点实验室，厦门 361005

元素质谱生物分析经历20余年的发展，原理和技术都逐渐趋于成熟，目前正亟待推向实际应用。我将就我们实验室在ICP-MS生物分析发展过程中1）发展元素标记策略，2）构建元素标签工具箱，以及3）优化相关进样装置等研究工作[1-5]向与会专家同行和同学们做一简单汇报，以期推动ICP-MS生物分析的实际应用。

关键词：ICP-MS；生物分析；元素标签；直接插入式进样装置

参考文献：

1. J.F. Guo, L.Q. Chen, L.M. Yang, Q.Q. Wang, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.,* **2008**, *19*, 1108-1113.
2. M. Xu, L.M. Yang, Q.Q. Wang, *J. Anal. At. Spectrom.*, **2008**, *23*, 1545-1549.
3. X.W. Yan, M. Xu, L.M. Yang, Q.Q. Wang, *Anal. Chem.*, **2010**, 2, 1261-1269.
4. X.W. Yan, L.M. Yang, Q.Q. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, *50*, 5130-5133.
5. R. Yuan, F.C. Ge, Y. Liang, Y. Zhou, L.M. Yang, Q.Q. Wang, *Anal. Chem*. **2019**, *91*, 4948-4952.

Email: qqwang@xmu.edu.cn

车载四极杆质谱系统的设计及应用

关业栋，李萌，方随，张云鹤，康泰，李雪松，汪伟，徐江，李志明*
西北核技术研究所，西安 710024

稀有气体同位素因其独特的物理和化学性质，在能源矿产、地球科学、核物理、环境监测和天体物理等领域具有重要的示踪作用[1, 2]。目前，惰性气体的分析测试主要依赖实验室高精度磁质谱仪，需将样品带回实验室进行测量。然而，样品在取样过程中易受大气污染，或在储存和运输过程中因容器漏率较大而被污染[3]。为此，本文设计开发了一套兼顾便携性、可靠性与稳定性的车载四极杆质谱系统，为样品现场在线分析提供了可行方案。

与传统实验室磁质谱仪相比，该车载四极杆质谱安装于测试车内，可抵达指定地点开展现场气体分析测试。系统主要由四极杆质谱模块、样品处理模块、样品缓存模块、电控模块、电源模块等组成。各模块集成于两个并联的 19 英寸标准机柜中，并采用了减震、锁紧等多重固定措施。通过可编程控制器控制气动阀门开关顺序、时间和调用测量程序，系统实现了标准化的样品缓存、处理及测量流程，能够对环境空气中常量水平Ar、微量水平Kr及极微量水平Xe气体浓度及其比值进行在线快速测量。

主要结果：质谱分析室真空度优于 1.2×10^{-7}Pa，质量数为 2、16、18、28、44 等处残余本底气体的谱峰信号均小于 5×10^{-13}A。N_2 谱峰 10%处的峰宽为 0.99u。离子源对N_2 的灵敏度为 3.8×10^{-11}A/Pa。对Ar、Kr、Xe丰度标准气体的比值进行连续 6 次全流程重复测量，RSD分别小于 0.8%、0.1%和 0.6%。采用同位素稀释法对已知浓度的混合标准气体中Ar、Kr、Xe浓度进行连续测量，RSD分别为 0.2%、0.5%和 0.1%，与气相色谱法测量结果偏差小于 1%。在西安野外现场采集环境空气样品，经纯化后测量其中Ar、Kr、Xe浓度，与文献报道值偏差分别为 0.5%、-1.2%、1.4%。单个样品分析流程耗时约 30 分钟。

野外现场取样与分析测试实验充分证明，该车载四极杆质谱系统可实现野外样品的在线分析，具有快速、自动化、机动灵活等优势。该技术有效避免了样品在储存和运输过程中可能发生的组分变化或污染，显著提升了分析数据的真实性与时效性。未来，随着仪器小型化和自动化水平的进一步提升，该技术有望在环境监测、水文地质调查、核污染评估等领域获得更广泛的应用。

关键词：车载；四极杆质谱；稀有气体；同位素稀释；在线分析

参考文献

1.李萌, 关业栋, 李志明, 等. 现代应用物理, 2024, 15(06): 060801.
2.陶成, 刘文汇, 杨华敏, 等. 质谱学报, 2018, 39(10): 201-208.
3.刘汉彬, 李军杰, 张佳, 等. 世界核地质科学, 2021, 38(01): 82-90

Corresponding author email：lizhiming@nint.ac.cn

分选芯片-ICP-MS联用技术用于循环肿瘤细胞的检测及其表型分析

胡斌*
武汉大学化学与分子科学学院，武汉，430072

循环肿瘤细胞的检测可为癌症诊断和监测提供有价值的临床信息。然而，循环肿瘤细胞的稀有性和高度异质性，以及血液样本的复杂性，对其从血液中分离和准确检测提出了重大挑战。电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）作为一种强大的元素分析技术，可以通过外源性元素标签对目标细胞进行定量，并评估单个细胞上特定蛋白质的表达水平。微流控分选芯片则能够实现细胞的精确操控和高通量分析。本次报告将阐述微流控分选芯片结合元素标记-ICP-MS在循环肿瘤细胞检测中的应用潜力[1-6]。所涉及的系统包括：基于磁性探针的级联相转移分选芯片[1]，集成免疫标记、磁分离和聚焦功能的一体化微流控芯片系统[2]，由无鞘流收缩-膨胀阵列结构和带梯形凹槽的主动磁泳区构成的级联分选芯片[3]，级联负性磁泳微流控芯片[4]，简易级联惯性分选芯片[5]，及集磁偏转与确定性横向位移的DLD@MACS分选芯片[6]等。这种方法为传统的循环肿瘤细胞检测及表型分析提供了一种高效替代方案，能够实现对真实临床血液样本中循环肿瘤细胞的特异性、高通量检测。

关键词：ICP-MS；分选芯片；单细胞分析；循环肿瘤细胞

参考文献

1. Nian, M.X.; Chen, B.B.; He, M.; Hu, B. *Anal. Chem.* **2024**, 96: 766-774.
2. Xu, Y.; Chen, B.B.; He, M.; Cui, Z.W.; Hu, B. *Anal. Chem.* **2023**, 95: 14061-14067.
3. Cai, J.; Chen, B.B.; He, M.; Yuan, G.L.; Hu, B. *Anal. Chem.* **2024**, 96: 14222-14229.
4. Fu, X.L.; Chen, B.B.; He, M.; Yuan, G.L.; Hu, B. *Anal. Chem.* **2025**, 97: 6702–6710.
5. Fu, X.L.; Chen, B.B.; He, M.; Hu, B. *Anal. Chem.* **2025**, 97; 26688-26697.
6. Ma, J.R.; He, M.; Chen, B.B.; Yuan, G.L.; Cui, Z.W.; Hu, B. *Anal. Chem.* **2026**, 98: 21454-21465.

Email: binhu@whu.edu.cn, Tel: 86-27-68752162

国产自研磁电双聚焦热电离质谱仪(DF-TIMS)的^{40}K同位素高精度测定和行星科学应用

王达[1,*]，杨雄[1]，高世新[1]，廖兴飞[2]，沈小攀[2]
1. 成都理工大学行星科学国际研究中心
2. 西安交通大学电气工程学院

关键词：同位素异常，40K，国产质谱仪，磁电双聚焦，行星科学

同位素的核合成异常可以视为行星的“DNA”，记录构建行星体的物质在早期太阳系中的来源。近年来高精度 ^{40}K同位素异常的研究显示挥发性元素没有在早期的太阳星云中均一化，原始陨石中仍然保留了明显的 ^{40}K过剩（Nie et al., 2023），且早期太阳系呈现了 ^{40}K同位素异常值（$\varepsilon^{40}K=[(^{40}K/^{39}K)_{样品}/(^{40}K/^{39}K)_{标样}-1]\times10^4$）从外太阳系向内逐渐减小的径向变化特征，指示了一个独特的内太阳系端元（Wang et al., 2025; Zhang et al., 2026）。以上研究证明了 ^{40}K同位素是破解早期太阳系物质起源和演化历史的重要工具，但是其大规模的应用受限于 ^{40}K同位素的高难度质谱测量。^{40}K同位素分析的难点主要在于 ^{40}K的极低自然丰度，仅有0.012%，是 ^{39}K（93.26%）的约八千分之一。此前对于如此低丰度同位素的测量方案主要是激发大离子信号和差异化的信号放大（Wielandt and Bizzarro, 2011; Nie et al., 2023），但此方案要求极高的信号稳定性才能保证测量的准确。

针对上述难点，本文利用国产自研的磁电双聚焦热电离质谱仪(DF-TIMS)，根据叁钾同位素（^{39}K, ^{40}K, ^{41}K）测量的特性，进一步对DF-TIMS原型机（Yuan et al., 2025）做了有针对性的改进和优化工作。通过模拟硅胶薄膜中钾离子的发射、提取和聚焦，改进了离子提取方式；针对 ^{39}K、^{40}K、^{41}K的差异化放大方案，通过调整前置跨阻放大器，在 1.4 秒内同步了三个离子探测通道的信号，解决了此前 10^{13} Ω放大器响应延迟的问题。本文在改进后的仪器上评估了真空度、温度稳定性、检测器非线性效应、丰度灵敏度与 ^{40}Ca同质异位素干扰等影响，利用配置了 10^{12} Ω电阻的前置放大器在连续 6 个月对标准样品的测量取得了 0.22 ε（2SD, n=162）的外部重现性，与此前利用赛默飞Triton型TIMS搭配 10^{13} Ω高阻放大器的测量精度基本一致（0.28 ε, 2SD, n=45）。本文还对地球玄武岩标样、陨石和OIB样品进行了高精度测量，测量结果重现了之前报道的利用Triton TIMS测定的数值。本文还测定了留尼汪洋岛玄武岩的新样品，测试结果支持了作者此前的观点（Wang et al., 2025），留尼汪OIB可能保存了来自原始地球构建物质的 ^{40}K同位素异常。

参考文献

1 1 N. X. Nie, D. Wang, Z. A. Torrano, R. et al., Science, 2023, 379, 372–376.
2 D. Wang, N. X. Nie, B. J. Peters, et al., Nature. Geoscience., 2025, 18, 1174–1179.
3 D. Wielandt and M. Bizzarro, J. Anal. At. Spectrom., 2011, 26, 366–377.
4 X. Yuan, X. Shen, L. Liu, et al., Inter. Journal of Mass Spectrom., 2025, 510, 117408.
5 Zhang, Y., Zhou, M., Qin, L., Yang, B., Tang, H., Smith, T. and He, H., 2026. Earth and Plan. Sci. Lett., 674, p.119738.

Corresponding email: da.wang@cdut.edu.cn

基于LA-ICP-MS联用技术的多模态质谱成像方法及生物医学应用

郑令娜[1]，汪冰[1]，王萌[1,*] 丰伟悦[1]

1. 中国科学院高能物理研究所, 中国科学院纳米生物效应与安全性实验室，北京市石景山区玉泉路19号乙

细胞和组织中生物分子的空间分布、相互作用及其动态变化与生理功能和疾病发生发展密切相关。因此，在保持空间信息的基础上，对元素、脂质、代谢物、蛋白质等多类分子进行原位检测与成像，对于解析复杂生物体系的分子组成、空间异质性及其功能具有重要意义。

质谱成像（Mass Spectrometry Imaging，MSI）具有无需特异性标记、分子覆盖范围广和多组分同时检测等优势，已成为空间组学研究的重要技术。不同质谱成像技术在检测对象、空间分辨率、灵敏度及分子鉴定能力等方面各具优势，通过多种成像模式的联合及与其他空间分析技术的融合，可实现多维度、互补性的分子信息获取，为组织微环境解析、疾病机制研究及生物标志物发现提供新的技术手段。

本报告将首先介绍激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）、解吸电喷雾质谱（DESI-MSI）等质谱成像技术及其方法学进展，重点讨论多模态质谱成像在样品制备、空间配准、数据融合与多维信息解析等方面的技术策略；随后结合相关研究工作，展示多模态质谱成像在元素、代谢物及蛋白质等多层次空间分子信息表征中的应用，并探讨其在疾病组织微环境解析、分子机制研究及生物医学应用中的发展潜力。

关键词：质谱成像，空间组学，激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱，解吸电喷雾质谱

参考文献（5篇以内）

1. Fang, H.; Zheng, L.; Tian, J.; Huang, B.; Liang, S.; Ma, Z.; Wang, X.; Zhang, T.; Yao, H.; Zhao, L.; Wang, B.; Feng, L.; Wang, M.; Feng, W, *Anal. Chem.* **2025**, 97 (49), 27122 – 27132
Chen, L.; Ma, S.; Wu, H.; Zheng, L.; Yi, Y.; Liu, G.; Li, B.; Sun, J.; Du, Y.; Wang, B.; Liu, Y.; Zhang, C.; Chang, J.; Pang, Y.; Wang, W.; Wang, M.; Zhu, M, *Adv. Sci.* **2025**, 12(20), 2412434

Corresponding author email: wangmeng@ihep.ac.cn; Tel.:010-88233190

Multimodal Mass Spectrometry Imaging Methods Based on LA-ICP-MS Hyphenated Techniques and Their Biomedical Applications

Zheng Lingna[1], Wang Bing[1], Wang Meng[1,*] , Feng Weiyue[1]
1. CAS Key Laboratory for Biomedical Effects of Nanomaterials and Nanosafety, Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, 19B Yuquan Road, 100049 Beijing, China

ABSTRACT:
The spatial distribution, interactions, and dynamic changes of biomolecules in cells and tissues are closely linked to physiological functions and the occurrence and progression of diseases. Consequently, in situ detection and imaging of multiple classes of molecules—including elements, lipids, metabolites, and proteins—while preserving spatial information is of great significance for deciphering the molecular composition, spatial heterogeneity, and functions of complex biological systems.

Mass Spectrometry Imaging (MSI), featuring advantages such as label-free detection, broad molecular coverage, and simultaneous multi-component analysis, has become a vital technology in spatial omics research. Different MSI techniques possess unique strengths in target detection, spatial resolution, sensitivity, and molecular identification capabilities. By combining multiple imaging modes and integrating them with other spatial analysis techniques, multi-dimensional and complementary molecular information can be acquired, providing new technological tools for dissecting tissue microenvironments, investigating disease mechanisms, and discovering biomarkers.

This presentation will first introduce MSI technologies—such as Laser Ablation Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (LA-ICP-MS) and Desorption Electrospray Ionization Mass Spectrometry (DESI-MS)—along with their methodological advancements, with a focus on technical strategies in multimodal MSI, including sample preparation, spatial registration, data fusion, and multi-dimensional information analysis. Subsequently, drawing on related research works, it will demonstrate the applications of multimodal MSI in characterizing multi-level spatial molecular information across elements, metabolites, and proteins, while exploring its development potential in analyzing disease tissue microenvironments, investigating molecular mechanisms, and advancing biomedical applications.

KEY WORDS: Mass Spectrometry Imaging, Spatial omics, LA-ICP-MS, DESI-MS

REFERENCES.

1. Fang, H.; Zheng, L.; Tian, J.; Huang, B.; Liang, S.; Ma, Z.; Wang, X.; Zhang, T.; Yao, H.; Zhao, L.; Wang, B.; Feng, L.; Wang, M.; Feng, W, *Anal. Chem.* **2025**, 97 (49), 27122–27132
2. Chen, L.; Ma, S.; Wu, H.; Zheng, L.; Yi, Y.; Liu, G.; Li, B.; Sun, J.; Du, Y.; Wang, B.; Liu, Y.; Zhang, C.; Chang, J.; Pang, Y.; Wang, W.; Wang, M.; Zhu, M, *Adv. Sci.* **2025**, 12(20), 2412434

Corresponding author email: wangmeng@ihep.ac.cn; Tel.:010-88233190

基于国产硅胶发射剂对铅探测效率的优化

王泽润，冯磊，王文亮，张满超，徐江，张鹏飞，李志明*

西北核技术研究所，西安 710024

铅（Pb） 同位素分析是地质年代学和环境示踪研究的重要手段[1] 。热表面电离质谱（TIMS）具有电离传输效率高、本底低等特点，常用于超微量 Pb 的高精度分析。然而，Pb 的第一电离能高达 7.42 eV ，直接滴样时，Pb 几乎不发生热电离，因此，合理选择并优化电离增强剂（发射剂）是提高探测效率的关键。硅胶-磷酸是目前应用较广的 Pb 发射剂体系[2-4] ，但不同商业硅胶的性能可相差一个量级，各组分用量也有待进一步优化。本研究以 2 ng 天然 Pb 为对象，采用单带 Re 灯丝，考察硅胶-磷酸发射剂各组分对 Pb 探测效率的影响 。对比优索 ZS-30 、 晶火 ZJN-30 、麦克林S861488 和华盛 JN-30 四种国产硅胶后发现 ，麦克林 S861488 的效果最佳 ，Pb 探测效率可达 2.2% ，JN-30 最低，探测效率为 0.65%；该体系引入的 Pb 本底约为 10 pg ， 占样品量的 0.5% 。进一步优化结果表明，硅胶的最佳用量为 0.005~0.03 mg（1%硅胶 0.5~3 μL） ，1 N 磷酸的最佳用量为 0.5~2 μL 。在上述条件下，2 ng Pb 的 Pb 探测效率可稳定在约 2% 。本研究明确了硅胶-磷酸体系的最优使用条件，为后续提高μg 级 Pb 样品探测效率及拓展 TIMS 在微量 Pb 同位素分析中的应用提供了实验依据。

关键词: 热表面电离质谱；铅同位素；发射剂；探测效率.

参考文献

1. 储著银等. 超低本底单颗粒锆石CA-ID-TIMS U-Pb 高精度定年方法. 科学通报, 2016, 61: 1121–1129.
2. Huyskens MH, et al. Evaluation of colloidal silicagels for lead isotopic measurements using TIMS. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2012, 27: 1439–1446.
3. Gerstenberger H, Haase G. A highly effective emitter substance for mass spectrometric Pb isotope ratio determinations. Chemical Geology, 1997, 136: 309–312.
4. Nohda S. Precise isotopic measurements of lead by fused silica-gel. Geochemical Journal, 1999, 33: 133–139.

Corresponding author email：lizhiming@nint.ac.cn

Optimization of Lead Detection Efficiency Using Domestically Produced Silica Gel Emitters

Zerun Wang, Lei Feng, Wenliang Wang, Manchao Zhang, Jiang Xu, Pengfei Zhang, Zhiming Li*

Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China

Lead (Pb) isotope analysis is an important tool in geochronology and environmental tracing [1]. Thermal ionization mass spectrometry (TIMS), characterized by high ionization and transmission efficiency and low background, is widely used for high-precision analysis of ultratrace Pb. However, the first ionization energy of Pb is as high as 7.42 eV, and Pb undergoes almost no thermal ionization when a sample is loaded directly. Therefore, selecting and optimizing a suitable ionization enhancer (emitter) is critical for improving detection efficiency. The silica gel-phosphoric acid system is currently a widely used Pb emitter [2-4], but the performance of different commercial silica gels can vary by an order of magnitude, and the amounts of the individual components require further optimization. In this study, the effects of the components of a silica gel-phosphoric acid emitter on Pb detection efficiency were investigated using 2 ng of natural Pb and a single Re filament. Four domestically produced silica gels, Yousuo ZS-30, Jinghuo ZJN -30, Macklin S861488, and Huasheng JN-30, were compared. Macklin S861488 exhibited the highest Pb detection efficiency (2.2%), whereas JN-30 exhibited the lowest (0.65%). The Pb background introduced by the emitter system was approximately 10 pg, accounting for 0.5% of the sample amount. Further optimization showed that the optimal amount of silica gel was 0.005-0.03 mg (0.5-3 μL of 1% silica gel), and that of 1 N phosphoric acid was 0.5-2 μL. Under these conditions, the Pb detection efficiency for a 2 ng Pb sample remained stable at approximately 2%. This study establishes the optimal operating conditions for the silica gel-phosphoric acid system and provides an experimental basis for further improving the detection efficiency of microgram-level Pb samples and extending the application of TIMS to trace-level Pb isotope analysis.

Keywords: thermal ionization mass spectrometry; lead isotopes; emitter; detection efficiency

References

1. 储著银等. 超低本底单颗粒锆石CA-ID-TIMS U-Pb 高精度定年方法. 科学通报, 2016, 61: 1121–1129.
2. Huyskens MH, et al. Evaluation of colloidal silicagels for lead isotopic measurements using TIMS. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2012, 27: 1439-1446.
3. Gerstenberger H, Haase G. A highly effective emitter substance for mass spectrometric Pb isotope ratio determinations. Chemical Geology, 1997, 136: 309-312.
4. Nohda S. Precise isotopic measurements of lead by fused silica-gel. Geochemical Journal, 1999, 33: 133-139.

Corresponding author email：lizhiming@nint.ac.cn

激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱法测定金矿中金元素

王小龙[1, 2, *]，邱鑫健[2]，葛前梅[2]，顾叶青[2]，李小佳[1,*]
1. 钢研纳克检测技术股份有限公司，北京，100081
2. 钢研纳克江苏检测技术研究院有限公司，江苏苏州，215300

摘要：激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICPMS）是目前常用的固体直接进样技术之一。对比传统湿法分析，无复杂的前处理步骤，可以进行微区分析等优势。然而，在元素定量分析时，基体效应对LA-ICPMS测定结果影响较大，使用基体匹配的标准样品才能获得较为准确的结果。对于标准样品种类、含量梯度变化不丰富的样品，LA-ICPMS方法测定有一定难度。本实验开发了固-固混合标准加入法测定金矿中金元素。通过LA固体进样方法，省去了传统火试金方法复杂的前处理步骤。通过固-固混合的标准加入法消除基体效应的影响。实验使用三胺基硅胶（Triamine硅胶）作为金元素载体，定量吸附多组金，使其浓度呈梯度变化，与待测金矿样品混合压片后，使用LA-ICPMS测定金元素强度，以硅胶中已知浓度的金作为横坐标，测定强度作为纵坐标绘制工作曲线，使用标准加入法计算样品中金含量，即工作曲线与X轴交点的横坐标的绝对值为待测样品中金含量。使用该方法测定标准样品结果为36.6 g/t，与标准样品认定值接近。平行测定三次，结果偏转偏差为4.4%。固-固混合制样激光剥蚀电感耦合等离子体质谱可以实现金矿中金含量分析。

关键词: 激光剥蚀，ICP-MS，金矿，标准加入法，功能硅胶

参考文献

1. Hoffman T, Jaćimović R, Bay L J, et al. Development of a method for the elemental analysis of milk powders using laser ablation-inductively coupled plasma-mass spectrometry (LA-ICP-MS) and its potential use in geographic sourcing[J]. Talanta, 2018,186:670-677.
2. Queipo-Abad S, Rodríguez-González P, García Alonso J I. Measurement of compound-specific Hg isotopic composition in narrow transient signals by gas chromatography coupled to multicollector ICP-MS[J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2019,34(4):753-763.

王小龙，wangxiaolong@ncschina.com，13261501830.

金属单细胞 ICP-MS 测定技术与应用研究

刘念[1] 何滨[1,2] 胡立刚[1,2*] 江桂斌[1,2]
1 国科大杭州高等研究院，杭州，310024
2 中国科学院生态环境研究中心，北京，100086

细胞异质性和多样性广泛存在，从单细胞水平分析细胞内痕量元素及其形态具有重要研究意义[1]。电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）技术是应用较广泛的单细胞检测方法[2]，但其灵敏度和传输效率有待提升[3]。

本研究基于可加热全耗型雾化室优化了单细胞 ICP-MS 的检测条件。结果显示，单细胞检测的传输效率随雾化室温度升高而升高（图 1a）。当温度为 120℃，雾化气和补偿气流速分别为 0.3 和 0.6 L/min，进样流速为 20 μL/min，细胞浓度为 1×10^5 个/mL，积分时间为 0.1 ms 时，传输效率最高，最高可达 63.51%（针对人源红细胞）。利用该方法测定三种哺乳细胞类型（THP-1，HEPG-2 和 LX-2）中汞（Hg）的赋存特征。单个细胞中 Hg 的检测限为 0.009 fg。三种细胞类型的单细胞含量指数均呈现 S 型曲线，THP-1 的单细胞含量指数从暴露浓度为 1 μg/L 开始迅速增加，而 HEPG-2 和 LX-2 从暴露浓度为 0.1 μg/L 开始显著升高（图 1b），说明不同细胞类型和不同细胞个体对重金属的吸收存在多样性和异质性。本研究建立了高灵敏和高效率的重金属的单细胞 ICP-MS 检测技术，可以用于细胞内痕量金属的定量检测和分析，为低剂量重金属暴露的赋存特征及健康效应研究提供技术支撑。

图1a 传输效率随温度的变化规律；**图1b** 不同暴露浓度下三种细胞中汞的单细胞含量指数

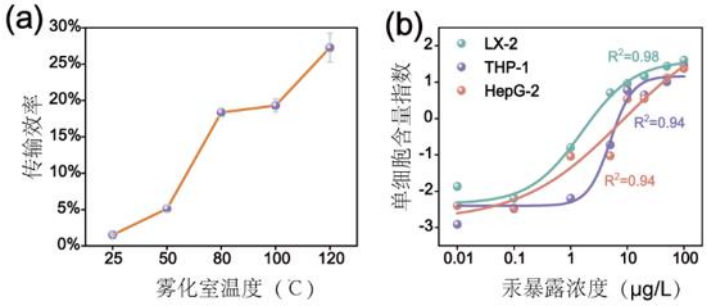


图 1a 传输效率随温度的变化规律；**图 1b** 不同暴露浓度下三种细胞中汞的单细胞含量指数

关键词：电感耦合等离子体质谱；单细胞；金属；应用

参考文献

1. Tang P, Yuan JH, Liu N, c Age-Related Dynamics of Typical Bioessential Elements in Mouse Sperm at Single-Cell Resolution, ***Anal. Chem.***, 2026, 98, 16949-16961.
2. Wang XY, Tang P, Liu H, et al., Detection of mercury in single mammalian cells at attogram level by SC-ICP-MS, ***Anal. Chim. Acta***, 2025, 1380, 344787.
3. Zhang GH, Liu N, Tian XW, et al., A Framework Integrating Single-Cell Metallomic Data in Health Effect Analysis via Quantile Features and Machine Learning, ***Environ. Sci. Technol.***, 2026, 60, 3107-3120.
4. Liu N, Li GM, Zhang GH, et al., Exogenous Metals Indirectly Affect Human Semen Quality via Immune Cells at Single-Cell Resolution, ***Environ. Health***, 2025, 3, 1083-1093.
5. Tao Y, Wang DY, Chen BB, et al., 3D-Printed Droplet Microfluidic TRA-ICP-MS Platform: Single-Cell Analysis of Cadmium and Nanoplastics Coexposure in *Synechocystis*, ***Anal. Chem.***, 2026, 98, 9812-9820.

*胡立刚，E-mail：lghu@rcees.ac.cn

纳米塑料在黄瓜全生长周期内的分布及对食物链风险评估

鲁毅，王宇，刘奇，魏星，陈明丽*

东北大学分析科学研究中心，辽宁 沈阳 110819

摘　要　纳米材料在农业中的应用及其环境安全问题日益受到关注，激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）是追踪纳米粒子在植物体内行为的重要工具。本研究利用 LA-ICP-MS 开展多种纳米材料在黄瓜体内的吸收、转运与分布研究。（1）合成具有金核-介孔氧化锌/二氧化硅核壳结构（Au@mZnO-mSiO₂）纳米肥料，利用 Au 作为示踪元素，结合 LA-ICP-MS 成像与 ICP-MS 定量，揭示其在黄瓜体内由根系向茎、叶的转运规律，证实其可长效释放锌并促进植株生长。（2）采用常温 LA-ICP-MS 成像与 ICP-OES 定量方法，研究了 TiO_2纳米粒子对黄瓜幼苗的影响，发现低浓度促进、高浓度抑制的双向效应，并解析 Ti 在根、茎、叶中的分布特征。（3）建立低温 LA-ICP-MS（cryo-LA-ICP-MS）方法，实现新鲜黄瓜叶片中 CeO_2纳米粒子的原位分布成像，明确 CeO_2与 Ce^{3+}对植物的不同影响。（4）利用 cryo-LA-ICP-MS 追踪铕标记聚苯乙烯纳米塑料，证实其主要富集于黄瓜根系，且粒径越小毒性越强。综上，LA-ICP-MS（含常温及低温模式）可高效、精准追踪多种纳米材料在植物体内的行为，为纳米肥料开发、生态风险评价及农业纳米安全研究提供重要技术支撑。

主题词　LA-ICP-MS；纳米粒子；黄瓜；分布

随着纳米技术在农业领域的广泛应用，各类纳米肥料、纳米材料及纳米污染物与植物的相互作用机制，成为农业环境科学的研究焦点。纳米粒子的吸收途径、体内转运、空间分布及生物效应直接关系到农业生产效率与生态安全，而传统检测方法难以同时实现精准定量与原位可视化，因此，建立高效、灵敏的追踪技术尤为重要。本研究以黄瓜为植物模型，依托激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）技术，从纳米肥料功能解析、纳米材料生物效应评估、新鲜样品成像方法构建到纳米污染物探究，逐渐开展研究，形成连贯完整的研究脉络。

首先，聚焦高效纳米肥料开发，设计并合成金核-介孔氧化锌/二氧化硅核壳纳米肥料（Au@mZnO-mSiO₂），利用金元素作为稳定内标示踪物，通过常温 LA-ICP-MS 空间成像与 ICP-MS 定量，清晰追踪该纳米肥料在黄瓜体内的完整转运路径：由根系主动摄取后，沿木质部向上定向迁移，最终在叶脉系统与叶片边缘富集，同时证实其具备优异的锌缓释性能，可在植物体内持续释放锌元素，有效促进黄瓜根系伸长、茎秆增粗与叶片扩展，显著提升植株生物量与生理活性，为新型缓释纳米肥料的设计与应用提供直接实验依据。

在明确纳米肥料效应基础上，进一步拓展至工程纳米材料的生物效应研究，以二氧化钛（TiO_2）纳米粒子为对象，借助常温 LA-ICP-MS 与 ICP-OES 技术，探究不同浓度 TiO_2对黄瓜幼苗生长及营养元素吸收的影响，发现低浓度（50-200 mg/L）TiO_2可促进根系发育、提升钾、钙、镁、锌等营养元素积累，而高浓度（500 mg/L）则引发氧化应激、抑制生长，呈现典型的低促高抑双向调控特征，同时阐明钛元素在根、茎、叶中的分布差异，为 TiO_2在农业中的合理应用提供剂量参考。

为突破新鲜植物组织脱水、结构畸变导致的成像问题，建立低温 LA-ICP-MS 原位成像技术，有效保留新鲜样品的原始结构，成功实现新鲜黄瓜叶片中氧化铈（CeO_2）纳米粒子的高分辨空间成像，直观展现出其在叶片中的分布特征；对比 CeO_2纳米颗粒与游离 Ce^{3+}的生物毒性，发现 Ce^{3+}对铜、锌、磷等关键营养元素的分布与代谢干扰更为显著，为稀土纳米材料的生态风险评估提供新视角。

最后，将低温剥蚀技术延伸至纳米污染物研究，利用低温 LA-ICP-MS 追踪铕标记聚苯乙烯纳米塑料，成像结果清晰表明其主要富集于黄瓜根系，向上转运效率极低，且粒径越小越易被根系吸收并抑制微量元素积累，阐明纳米塑料的植物毒性机制，为农田纳米塑料污染防控提供科学依据。

综上，本研究依托 LA-ICP-MS 技术，从纳米肥料、工程纳米材料到纳米污染物，构建了从定量到成像、从干样到鲜样的完整研究路线，解析了多种纳米粒子在黄瓜体内的行为规律，为推动农业纳米技术的安全高效应用提供重要理论与技术支撑。

参考文献:

[1] Yu Wang, Zhen Shao, Qi Liu, Xin-Yue Zhang, Yi Lu, Yu-Jia Wei, Hai-Yan Li, Ming-Li Chen,*

and Jian-Hua Wang. Journal of Agricultural and Food Chemistry. **2026**, 74(10), 8343-8355.
[2] Yu Wang, Qi Liu, Zhen Shao, Xue-Sheng Wang, Ya-Fei Chen, Jun-Jie Bai, Ming-Li Chen*, Jian-Hua Wang. Analytica Chimica Acta. **2025**, 1352, 343917.
[3] Yu Wang, Xing Wei, Jin-Hui Liu, Yu-Jia Wei, Xuan Zhang, Jun-Jie Bai, Cheng-Xin Wu, Xiao-Yan Sun, Wei Shi, Ming-Li Chen,* and Jian-Hua Wang*. Atomic Spectroscopy. **2022**, 43(5):364-370.
[4] Yu Wang , Jun-jie Bai , Yu-jia Wei , Chen-Xi Zhao , Zhen Shao , Ming-Li Chen *, Jian-Hua Wang *. Journal of Hazardous Materials. **2024**, 465, 133029.

Tracking the Absorption, Translocation and Distribution of Nanomaterials in Cucumber Using LA-ICP-MS

Yu Wang, Qi Liu, Yi Lu, Xing Wei, Ming-Li Chen*

Research Center for Analytical Sciences,
Department of Chemistry, College of Sciences, Northeastern University, Shenyang 110819, China

Abstract The application of nanomaterials in agriculture and their environmental safety issues have attracted increasing attention. Laser ablation inductively coupled plasma mass spectrometry (LA-ICP-MS) serves as a critical tool for tracking the behavior of nanoparticles in plants. In this study, LA-ICP-MS was employed to investigate the absorption, translocation and distribution of various nanomaterials in cucumber plants. Firstly, a core-shell structured nano-fertilizer (Au@mZnO-mSiO_2) with a gold core and mesoporous zinc oxide/silica shell was synthesized. Using gold (Au) as a tracer, the translocation pattern of the nano-fertilizer from cucumber roots to stems and leaves was revealed by combining LA-ICP-MS imaging with ICP-MS quantification, confirming its capability of sustained zinc release and growth-promoting effects on plants. Furthermore, ambient-temperature LA-ICP-MS coupled with ICP-OES was utilized to systematically evaluate the effects of titanium dioxide (TiO_2) nanoparticles on cucumber seedlings, revealing a bidirectional effect characterized by promotion at low concentrations and inhibition at high concentrations, and clarifying the distribution characteristics of titanium (Ti) in roots, stems and leaves. Secondly, a cryogenic LA-ICP-MS (cryo-LA-ICP-MS) method was established to achieve in situ distribution imaging of cerium oxide (CeO_2) nanoparticles in fresh cucumber leaves, and the differential impacts of CeO_2 and Ce^{3+} on plants were clarified. Finally, europium-labeled polystyrene nano-plastics were tracked using cryo-LA-ICP-MS, verifying that nano-plastics primarily accumulate in cucumber roots and exhibit stronger toxicity at smaller particle sizes. Collectively, LA-ICP-MS (including ambient and cryogenic modes) enables efficient and accurate tracking of the behavior of diverse nanomaterials in plants, providing important technical support for the development of nano-fertilizers, ecological risk assessment and agricultural nano-safety research.

Keywords LA-ICP-MS; nanomaterials; cucumber; distribution

* Corresponding author

土壤/沉积物中金属纳米颗粒的 spICP-MS 分析及溯源方法研究

徐明[1,2,*] 王煦栋[1,2]，冯倩[1,2]，

1．中国科学院生态环境研究中心，环境化学与环境毒理全国重点实验室，北京，100085

2．中国科学院大学，北京，100049

在我国局部地区，重金属污染仍是一个严峻的现实环境问题。2005 至 2013 年间开展的全国土壤污染状况调查结果显示，全国土壤监测点位总体超标率为 16.1%，其中耕地土壤超标比例达 19.4%。无机污染物占全部超标点位的 80%以上，Cd、Hg、As、Pb 和 Ni 为主要超标因子。此外，在部分资源型地区和工业聚集区，长期存在的人为活动导致的重金属污染现象仍在不断加剧[1]。由于重金属污染的成因复杂、空间差异大、化学形态多样，因此传统基于重金属总量的风险评价方式难以全面地反映其真实暴露特征。

针对上述问题，本团队基于单颗粒电感耦合等离子体质谱技术（spICP-MS），构建了一套适用于土壤/沉积物样本的金属纳米颗粒提取、表征与溯源方法[2]。通过对我国典型重金属污染区域（广东韶关、贵州威宁、辽宁葫芦岛等）的研究，厘清了土壤/沉积物中金属纳米颗粒的主要赋存特征。以贵州威宁草海为例，我们系统分析了草海湖沉积物中金属纳米颗粒的类型、浓度及粒径分布特征。研究结果显示，沉积物含有 Zn、Cu、Pb、Cd 等纳米级颗粒物。其中，含 Pb 纳米颗粒（PbNPs）的丰度较高，进而通过单颗粒同位素分析并结合 MixSIAR 贝叶斯混合模型，成功地对 PbNPs 的污染源进行了有效识别。

关键词：土壤，沉积物，金属纳米颗粒，单颗粒分析，质谱，同位素溯源.

参考文献：

1.Wang, X. Cairang, S. Du, J.* Wei, Z. Wu, Q. Hu, L. Xu, M.* *Environment & Health* **2025**, 3, 616–625.

2.Wang X. Cairang S. Du J. Liu L. Hu L. Xu M.* *Analytical Chemistry,* **2026**, 98(23), 17414–17423

Corresponding author email, Tel.

微米空间分辨VUV-TOF质谱U-Pb定年及应用

莫宇翔[1*], 史昊宇[1]，李佚轩[1]，王达[2]
1清华大学物理系及低维量子物理国家重点实验室，北京 100084
2成都理工大学地球与行星科学学院行星科学研究中心，成都 610059
*通讯作者：莫宇翔（ymo@mail.tsinghua.edu.cn）

锆石的 U-Pb 年代学是追溯地球与行星演化历史的核心工具之一。然而，古老锆石往往具有微米尺度的复杂环带结构或分区，且地外样品（如月球锆石）常以单颗粒形式存在（直径仅 5–10 μm），传统分析方法（如 LA-ICP-MS、SIMS）受限于空间分辨率（通常>10 μm）和测量效率，难以获取空间分辨的年代学信息。本研究发展了一种基于真空紫外激光剥蚀/电离飞行时间质谱（VUV-TOF-MS）的高空间分辨率 U-Pb 定年新方法。采用 125.5 nm（9.88 eV）VUV 激光实现样品的直接剥蚀与电离，实现了优于 2 μm 的空间分辨率的 Pb-Pb 和 Pb-U 同位素比例测量和定年。针对 Pb-U 定年中$^{206}Pb^+/^{238}U^+$比值受激光剥蚀深度和基质效应影响这一关键挑战，本研究发现单剥蚀孔离子信号比例$^{206}Pb^+/(U^+ + UO^+ + UO_2^+)$与参考$^{206}Pb/^{238}U$比值之间存在优异的线性关系（$R^2 > 0.999$）。利用 8 个参考锆石及 1 个 ICP-MS 交叉定年锆石（48 – 3465 Ma）对该方法进行了系统验证，仅需单参考锆石（GJ-1）即可完成 U-Pb 比值校准。>300 Ma 锆石的 U-Pb 定年结果与参考值吻合良好；>2.5 Ga 古老锆石的$^{207}Pb/^{206}Pb$比值加权平均不确定度优于 0.4%（2σ）。Pb-Pb 比值在整个年龄范围内均可直接准确测定，无需分馏校正。应用该方法，我们对澳大利亚 Jack Hills 地球最古老锆石进行了 U-Pb 年龄、Pb-Pb 年龄及稀土元素（REE）的同步成像分析，发现了与年龄相关的稀土元素分布特征，展示了该技术在解析单颗粒锆石多期次生长历史方面的独特优势。VUV-TOF-MS 方法为复杂环带锆石及微小地外样品的年代学分析提供了全新的技术方案。

关键词：VUV-TOF质谱；U-Pb定年；锆石；高空间分辨率；飞行时间质谱

参考文献

1. H. Shi, Y. Li, X. Yang, D. Wang and Y. Mo, *J. Anal. At. Spectrom.*, 2026, **41**, 3309–3321.
2. Y. Li, H. Shi, P. Wang and Y. Mo, *J. Anal. At. Spectrom.*, 2025, **40**, 1833–1844.

稳定同位素质谱技术在产地溯源及同位素示踪中的应用

张莉*，杨帆，周佳，王雨烨，孟靖，梁莉莉

上海交通大学分析测试中心， 上海 200240

稳定同位素具有强大的指纹特征，稳定同位素质谱分析在产地溯源及同位素示踪中发挥着越来越重要的作用。本报告将围绕近年来本实验室利用稳定同位素质谱技术的应用以及服务案例进行汇报，包括道地中药材产地溯源、药物成分剖析、食品和农产品真实性、环境污染物来源与形成机制以及深海沉积物中有机质示踪研究进行汇报。

所采用的实验技术涵盖 ^{13}C、^{15}N、D、^{18}O 全同位素质谱分析以及特定化合物同位素质谱分析技术，涉及元素分析-燃烧/裂解-稳定同位素质谱、气相色谱-稳定同位素质谱以及水平衡/痕量气体富集稳定同位素质谱。

关键词：稳定同位素质谱；产地溯源；示踪；剖析

参考文献:

1.J. Meng, Z. Liu, C. L. Gou, K. M. Rogers, W. J. Yu, S. S. Zhang, Y. W. Yuan and L. Zhang, J. Chromatogr. B, **2019**, 1105, 104-112.

2.Y. Y. Wang, F. Yang, J. Chen, Y. Li, J. Zhou, X. Qing, D. Yan, X. Lu, P. Zhou and L. Zhang. *J. Pharm. Biomed. Anal.,* **2023**, 226, 115270.

3.Y. H. Chang, T. H. Ding, Y. J. Yang, Q. Y. Hu, J. Lu, H.L. Wang and C. Huang. Environ. Sci. Technol. Lett., **2026**, 13, 540-546.

4.T.-S. Chen, H.-W. Xiao, F. Yang, H. Xiao, Y. Xu and H.-Y. Xiao, J. Hazard. Mater., **2026**, 515, 143129.

5.Y. H. Chang, T. H. Ding, Y. J. Yang, Q. Y. Hu, J. Lu, H.L. Wang and C. Huang. Journal: Environ. Sci. Technol. Lett., **2026**, 13, 540-546

稳定同位素质谱在生态环境保护中的应用

胡灿*，李海燕，邓显贺，于欣平，张峰瑞，梅宏成，郭洪玲
公安部鉴定中心，北京，100038

稳定同位素质谱（IRMS）可精准测定碳、氮、氢、氧、硫等元素同位素比值，是生态环境保护领域重要的分析技术。该技术依托环境介质-食物链的同位素传递富集效应，能够解析生物迁徙、物质循环、污染物来源、生物个体地理来源等关键科学问题 [1]。本文综述稳定同位素质谱技术原理，围绕生物多样性保护、污染源溯源、生态物质循环、环境风险研判等场景，系统梳理其在野生动物物证溯源、环境污染物示踪、生态系统物质循环解析方面的研究进展，重点介绍面向涉濒危野生动物案件的生物组织多元素同位素检测、贝叶斯概率溯源模型等法庭生态物证技术[2,3]。同时剖析样品前处理、数据库构建、模型可解释性等现实瓶颈，展望技术与机器学习融合、标准化参考体系建设等发展方向，为生态保护、环境治理以及涉生态环境案件司法鉴定提供技术参考。

关键词：稳定同位素质谱；生态环境保护；同位素指纹；污染源示踪；野生动植物溯源

参考文献

1.李思远，侯青叶，杨忠芳，等。*中国地质*，**2024**,51 (05):1617-1643.
2.Prigge T L, Andersson A A, Hatten C E H, et al. *Biological Reviews*, **2025**,100(3):1083- 1104.
3.Feng L, Wei C, Deng X, et al. *Forensic Sci Inter*, **2026**, 379, 112736.

Corresponding author email: hucanjiayou@126.com.

Applications of Isotope Ratio Mass Spectrometry in Ecological and Environmental Protection

Can Hu*, Haiyan Li, Xianhe Deng, Xinping Yu, Fengrui Zhang, Hongheng Mei, Hongling Guo
Insititute of Forensic Science, Ministry of Public Security of Chian, Beijing 100038, China;

ABSTRACT: Isotope Ratio Mass Spectrometry (IRMS) is an important analytical technique in the field of ecological and environmental protection, which enables accurate measurement of isotope ratios of elements including carbon, nitrogen, hydrogen, oxygen and sulfur. Relying on the isotope transfer and enrichment effect along the "environmental medium-food chain" pathway, this technique can address key scientific issues such as biological migration, material cycling, pollutant sources, and geographic origins of individual organisms [1]. This paper reviews the technical principles of isotope-ratio mass spectrometry. Scenarios including biodiversity conservation, pollution-source tracing, ecological material cycling and environmental-risk assessment are covered. It systematically summarizes research advances in wildlife forensic-origin tracing, environmental pollutant tracing, and analysis of ecosystem material cycles. Special emphasis is placed on forensic-ecological evidence techniques such as multi-element isotope determination of biological tissues and Bayesian-probabilistic origin-tracing models for endangered-wildlife-related cases [2,3]. Practical bottlenecks including sample pretreatment, database construction and model interpretability are analyzed. Future prospects are discussed, such as the integration of this technique with machine-learning algorithms and the establishment of standardized reference systems. This work provides technical references for ecological conservation, environmental governance, and forensic appraisal in cases involving ecological and environmental offences.
KEY WORDS: Isotope ratio mass spectrometry; Ecological and environmental protection; Isotope fingerprint; Pollution-source tracing; Wildlife and plant origin tracing.

REFERENCES

1. Li S Y, Hou Q Y, Yang Z F, et al. *Geology in China*, **2024**, 51(05): 1617- 1643.
2.Prigge T L, Andersson A A, Hatten C E H, et al. *Biological Reviews*, **2025**,100(3):1083- 1104.
3.Feng L, Wei C, Deng X, et al. *Forensic Sci Inter*, **2026**, 379, 112736.

Corresponding author email: hucanjiayou@126.com.

原子光谱/质谱分析进样技术研究

侯贤灯[1,2*]
1. 四川大学分析测试中心
2. 四川大学化学学院

进样技术直接影响原子光谱和无机质谱分析的灵敏度和准确度。在此重点汇报我们在蒸发/蒸气进样方面的研究工作，包括电热蒸发进样、新型氢化物发生进样、光化学蒸气发生新体系等。电热蒸发进样效率高，但需要注意样品基体的影响；氢化物发生可用于更多元素的检测，还可以进行光化学氢化物发生；光化学蒸气发生可以在极低浓度的有机酸或双酮介质中进行,等等。基于这些进样技术的原子光谱/质谱分析方法可用于元素环境分析。

关键词：电感耦合等离子体、微等离子体、发射光谱分析、无机质谱分析、进样技术

参考文献

1.L. Zhang, Y. Q. Li, J. Hu, H. J. Chen and X. D. Hou, *Anal. Chem*, **2025**, 97, 18884-18895.
2.X. Y. Zou, Y. L. Zhang, H. J. Chen, J. Hu and X. D. Hou, *Anal. Chem*, **2025**, 97, 17931-17937.
3.J. Hu, H. J. Chen, X. M. Jiang, and X. D. Hou, *Anal. Chem*, **2021**, 93, 11151-11158.
4.T. Zhang, J. Yang, S. Long, C. Yuan and X D. Hou, *Anal. Chem*, **2026**, 98, 8519-8528.
5.Y. Li, L. Zhang, Y. M. Zhai, H. J. Che and X. D. Hou, *Chem. Comm.*, 2026, 62, 5519-5522.

Corresponding author email, Tel

质谱成像理论与方法

MALDI 质谱成像分析性能提升— 从新型基质开发到像素级质量校准

方宇豪[1,2], 岑岘屹[1,2], 吴凯[1,2], 闫素君[1], 陈子龙[1,*], 朱新海[1,*]

1. 中山大学分析测试中心，广州 510275

2. 中山大学化学学院，广州 510006

基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱成像（MALDI-TOF MSI）可在保留组织空间结构信息的同时，实现代谢物、脂质及外源性小分子的原位分布表征，是空间分子分析的重要技术。然而，常规基质对低分子量酸性化合物的检测灵敏度和适用范围有限；同时，轴向 MALDI-TOF 长时间成像采集中受基质结晶、样品表面差异和仪器状态波动等因素影响，不同像素间易产生质量偏移，导致平均谱峰形展宽、分子注释偏差及离子图像失真。针对上述问题，本研究从“可检测性”与“数据质量”两方面开展方法学研究：（1）以质子亲和能（PA）为理论指导，从 22 种苯并咪唑/苯并噻唑衍生物中筛选出新型负离子模式基质 2-(4-二甲氨基苯基)-1H-苯并咪唑-5-胺，其对部分酸性小分子（含全氟辛烷磺酸 PFOS）的检出限低至 ng/L 级，并具有高真空稳定性与弱甜点效应；进一步建立斑马鱼全身切片成像方法，实现 PFASs 与内源游离脂肪酸的空间分布成像方法初探。（2）提出一种全自动、像素级的后采集质量重校准框架，在不牺牲单像素原始保真度的前提下，实现高精度、高鲁棒性的质量轴动态校正。该方法采用“一像素一模型”（one-pixel, one-model）范式，以高信噪比、广泛分布的内源性脂质参考峰为校准锚点，融合自适应峰匹配算法与 RANSAC（随机抽样一致性）驱动的稳健线性回归，同步校正全局系统漂移与局部空间异质性漂移。在 33,903 像素的鼠脑数据集上，校准后中位绝对质量误差由 28.1 ppm 降至 5.6 ppm，平均谱半峰宽由 0.154 Da 收窄至 0.072 Da，严格质量容差下分子注释数量显著增加，无监督聚类结果与解剖结构更加一致。在此基础上提出像素块共享模型快速校准策略，校准时间缩短约 70%，形成“全局预校准—单像素精细校准—像素块快速校准”多层级框架；方法在多种基质体系、离子模式、生物样本及 timsTOF、Orbitrap、RapifleX 等不同平台数据上均验证有效。上述研究分别改善 MALDI-MSI 的酸性小分子检测能力与质量数据可靠性，为高质量空间分子表征提供技术支持。

关键词: 质谱成像；新型基质；质量漂移；像素级质量校准

参考文献

1. Y. Fang, K. Wu, S. Yan, Z. Chen and X. Zhu, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2026**, 37 (8), 1858-1871.
2. X. Cen, Y. Fang, Z. Chen and X. Zhu, *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2024**, 38, e9751.
3. R. La Rocca, C. Kune, M. Tiquet et al., *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 4066-4074.
4. J. O. Eriksson, A. Sánchez Brotons, M. Rezeli et al., *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 16138-16148.
5. R. Wu, R. Liu, H. Hu and X. Wang, *Chem. Rev.*, **2026**, 126, 3324-3528.

陈子龙，E-mail: chenzlong6@mail.sysu.edu.cn；Tel: 18620785125
朱新海，E-mail: zhuxinh@mail.sysu.edu.cn；Tel: 18926195276

单细胞质谱成像

邢蕾[1,2]，赵玲玲[1]，赵聪林[1]，牟含章[1]，潘建斌[1]，康斌[1]，陈洪渊[1]，徐静娟[1*]

([1]南京大学化学学院，生命分析化学全国重点实验室，江苏 南京，210023；[2]南京农业大学食品科学与技术学院，肉品质量控制与新资源创制全国重点实验室，江苏 南京，210095；
*E-mail：xujj@nju.edu.cn)

在单个细胞中直观识别分子变化对于揭示基本的细胞功能以及疾病机制具有重要意义。我们课题组研制了一套真空紫外激光解吸/电离反射式飞行时间质谱成像（VUVDI-MSI）系统，该系统具有~300×300×25 nm3 的体素分辨率，同时具有 amol 水平的检测灵敏度，展现了在单细胞内物质成像上的显著优势。得益于该技术的纳米级深度剖析能力，我们开发了质谱显微断层扫描方法，通过结合自行开发的 Matlab 图像重构程序，绘制了细胞的 3D 图谱。建立了表面辅助 VUVDI -MSI 方法，实现了对细胞膜的精准剥离与表面蛋白质、脂质、代谢物的同步成像。基于该技术的纳米级横向分辨率，我们提出了一种 AI 辅助的亚细胞质谱成像策略，结合原位图像切割算法，分别对细胞核和细胞质进行了代谢组学分析，从而避免了来自细胞中不同区室成分的信号干扰。

参考文献（5篇以内）

[1]Xing L, Zhao CL, Mou HZ, Pan JB, Kang B, Chen HY, Xu JJ. Next generation of mass spectrometry imaging: from micrometer to subcellular resolution, ***Chem. Biomed. Imaging,*** 2023, 1, 670.

[2]Mou HZ, Pan JB, Zhao CL, Xing L, Mo YX, Kang B, Chen HY, Xu JJ. Nanometer Resolution Mass Spectro-Microtomography for In-Depth Anatomical Profiling of Single Cells, ***ACS Nano***, 2023, 17,10535-10545.

[3]Zhao CL, Zhao LL, Kang B, Xing L, Mou HZ, Chen HY, Xu JJ. Single-Cell Membrane Molecular Cartography Enabled by Nanoengineered VUV-LDI Mass Spectrometry Imaging, ***Anal. Chem.,*** 2025, 97, 20372-20379.

[4]Zhao CL, Mou HZ, Pan JB, Xing L, Mo YX, Kang B, Chen HY, Xu JJ. AI-assisted mass spectrometry imaging with in situ image segmentation for subcellular metabolomics analysis, ***Chem. Sci.,*** 2024, 15, 4547-4555.

[5]邢 蕾，赵玲玲，牟含章，赵聪林，潘建斌，康 斌，陈洪渊，徐静娟. 人工智能辅助的单细胞质谱成像技术应用进展，***质谱学报***, 2025, 46, 665-679.

光谱分析与成像新方法

张晓兵[1*]

[1]湖南大学化学化工学院，化学生物传感全国重点实验室 410082

*Email: xbzhang@hnu.edu.cn

基于分子探针的光谱分析与成像技术因响应速度快、对样本损伤小、可实现实时动态监测等优点，已成为医学检测、临床手术导航和药物开发等领域的强有力研究工具。然而，传统光学分子探针由于响应特异性有限以及样本背景干扰信号大等问题，难以实现临床病理环境中靶标的精准成像。此外，已报到的谱学成像分子探针易受探针浓度变化及环境因素的干扰，难以实现活体内靶标分子的定量检测，限制了其在病理分析、疾病早期筛查预警和疗效监测等领域的应用。为了解决这些问题，本课题组长期致力于分子探针设计与应用研究，取得了系列原创性成果：1）发展高性能光学分子探针结构调控新策略，为生物分子的精准检测与成像提供新工具；2）构建“超声波机械能-化学能-光能”级联转换发光分析新方法，开辟超声发光分子成像新方向；3）开发基于磁共振能量转移策略的定量成像新技术，推动磁共振成像精准医学新应用。

关键词： 分子探针 结构调控 超声发光 精准成像

参考文献

[1] Li, K.; Lv, Y.; Zhang, X. -B. *, et al., *PNAS*, **2021**, 118, e2018033118.

[2] Wang, Y.; Guo, J.; Song, G. *; Zhang, X. -B. * *Nat. Biomed. Eng.* **2025**, *9,* 656-670

[3] Wang, Y.; Guo, J.; Song, G. *; Zhang, X. -B. * Tan, W *. *Nat. Photon.* **2024**, *18,* 334-343.

[4] Zhang, C.; Nan, B.; Xu, J.; Rao J. *; Zhang, X. -B. *; Song, G*. *Nat. Biomed. Eng.* **2025**, *9,* 671-685.

[5] Lu, C.; Liao, S.; Chen, B.; Zhang, X. -B. *; Song, G*. *Nature Mater.* **2025**, 24, 133-142

[6] Li, J.; Li, Z.; Song, G*; Zhang, X. -B.* et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2026**, *65*, e22041.

[7] Liang, P.; Yan, Y.; Ren, T. -B *; Zhang, X. -B.* et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2026**, *148*, 30533.

个人简介



张晓兵，湖南大学教授、副校长、化学生物传感全国重点实验室副主任。长江学者特聘教授、国家杰出青年科学基金获得者、中国化学会会士。长期致力于化学生物传感与成像中的分子设计与合成，在该领域的基础研究与应用方面做出了原创性与系统性贡献，以第一完成人身份获2020年国家自然科学二等奖、2018年教育部自然科学一等奖及2018年/2024年湖南省自然科学一等奖，入选爱思唯尔2017-2024年中国高被引学者。2025年带领团队入选“全国黄大年式”教师团队，2023年、2025年两次成为中国科学院院士增选有效候选人。2010年至今主持包括国家重点研发计划项目、国家自然科学基金重大项目课题等项目10余项，发表通讯作者SCI源刊论文200多篇，包括Nature Mater.， Nature Biomed. Eng., Nature photon， PNAS， JACS，Angew Chem等50多篇，现任Anal Chem 等期刊副主编，及中国科学-化学等期刊编委。

金属离子与有机代谢物同时组织成像：软电离策略与应用

钟鸿英*
广西大学物理科学与工程技术学院，特色金属材料与组合结构全寿命安全国家重点实验室，
广西大学分析测试中心，
广西南宁西乡塘区大学东路100号，530004，中国

金属离子在酶催化、信号转导、氧化还原平衡、环境毒理和疾病发生中发挥关键作用。现有元素成像技术如LA-ICP-MS灵敏度高，但其硬电离过程易破坏金属-生物分子配位形态，难以同时获取金属元素与生物分子的原位信息。软电离质谱成像通过低能量电离策略，利用金属-碘团簇和有机络合物实现金属离子软电离，实现金属离子与有机代谢物同时成像及价态区分，为分析金属化学形态和分子结构提供了新途径。实验结果表明，这种软电离技术可应用于植物金属转运及环境毒理评价、金属材料分析和乳腺癌脑转移组织切片成像研究。

关键词：金属离子，软电离，生物成像，空间代谢组学，金属离子价态

参考文献

1. C. Shao, X. Zhou, A. Gao, Y. Luo, Y. Shan, L. Zhang, Z. Gui, X. Huang, X. Hu, T. Huo, L. Liu and H. Zhong. *Chem. Sci.* **2025**, 16, 12148.
2. Y. Qi, X. Yang, S. Jia, B. Shen, J. Zhao, Y. Wan, and H. Zhong. *Anal. Chem.* **2021**, 93, 15597-15606.

Corresponding author: Hongying Zhong, email: hyzhong@gxu.edu.cn

Simultaneous Imaging of Metal Ions and Organic Metabolites in Tissues: Soft Ionization Strategies and Applications

Hongying Zhong*
School of Physical Science and Technology, Guangxi University, 100 East University Road, Nanning 530004, P. R. China

ABSTRACT: Metal ions play crucial roles in enzymatic catalysis, signal transduction, redox balance, environmental toxicological assessment, and disease pathogenesis. Current elemental imaging techniques, such as LA-ICP-MS, are highly sensitive, but their hard ionization processes readily disrupt metal-biomolecule coordination forms. It is difficult to simultaneously obtain *in situ* information on both metal elements and biomolecules by using current techniques. Soft ionization mass spectrometry imaging, through low-energy ionization strategies, utilizes metal-iodide clusters and organic complexes to achieve soft ionization of metal ions. It enables simultaneous imaging of metal ions and organic metabolites as well as discrimination of metal valence states, thereby providing a new avenue for analyzing metal chemical speciation and molecular structures. Experimental results indicate that this soft ionization technique can be applied to studies on metal transport in plants and environmental toxicological assessment, the analysis of metal materials, and imaging studies of breast cancer brain metastasis tissue sections.

KEY WORDS: Metal ions, Soft ionization, Bioimaging, Spatial metabolomics, Valence states of metal ions.

REFERENCES

1. C. Shao, X. Zhou, A. Gao, Y. Luo, Y. Shan, L. Zhang, Z. Gui, X. Huang, X. Hu, T. Huo, L. Liu and H. Zhong. *Chem. Sci.* **2025**, 16, 12148.
2. Y. Qi, X. Yang, S. Jia, B. Shen, J. Zhao, Y. Wan, and H. Zhong. *Anal. Chem.* **2021**, 93, 15597-15606.

.

Corresponding author: Hongying Zhong, email: hyzhong@gxu.edu.cn

面向大尺寸样品与原位非靶向代谢物鉴定的两种质谱成像新方法

王宇[1,2]，夏兵[1,2,*]，周燕[1,2,*]
1. 中国科学院成都生物研究所，四川省成都市天府新区群贤南街 23 号，610213
2. 中国科学院大学，北京市怀柔区雁栖湖东路 1 号，101408

质谱成像技术具有高灵敏度、高特异性的特点，可以直观地表征生物组织中分子的空间分布信息，在药物代谢途径、药物安全性等研究中发挥着越来越重要的作用。质谱成像（如 MALDI、SIMS、DESI 等）是由离子化技术与扫描技术结合而成，然而由于扫描技术需要使用机械的位移平台，使得常规的质谱成像技术难以分析大尺寸样品；同时，由于空间分辨率和原位串联质谱（MS2）采集之间的固有权衡，原位非靶向代谢物鉴定仍然具有挑战性。针对上述问题，本研究提出了两种创新的质谱成像方法：其一为基于线带的二维－一维－二维质谱成像方法（2 dimensional–1 dimensional–2 dimensional mass spectrometry imaging, 2D-1D-2D MSI），该方法将线材编织成二维平面并将待分析样品印迹其上，随后将二维平面分解为一维线带，利用开发的线质谱接口进行解吸和电离分析，最终将采集的质谱数据重新构建成二维图像以获得分子的空间分布信息，该方法仅需简单且小型化的线-质谱接口装置，成像尺寸仅取决于样品印迹的线平面尺寸，在大尺寸样品分析中更为便捷且成本低，同时继承了分子印迹技术的优点，能够分析不规则、不平整的样品，并成功应用于完整的构树（*Broussonetia papyrifera*）幼苗植株（100 mm × 180 mm）中次生代谢物空间分布信息的分析，为植物学研究提供了新的分析方法；其二为聚类重采样质谱成像（clustering resampling mass spectrometry imaging, CR-MSI），该方法创新性地将无数像素扫描的原位 MS2 采集转换为几个代表性点测试，允许从单个组织切片中获取代谢物的空间定位和结构特征数据，同时设计了集成设备以自动化 CR-MSI 工作流程，将 MS2 采集从人工主观操作转变为客观、数据驱动的过程，并且 MSI 数据采集和处理之间的同步提高了整体 MSI 效率，应用于大鼠脑成像时原位收集了 1175 种 MS2，显著增强非靶向质谱成像的分子鉴定能力。

关键词：质谱成像，线质谱离子源，聚类重采样，敞开式离子化。

参考文献

(1) Wang, Y.; Xia, B.; Deng, S.; Ye, Y.; Zhou, Y. Performing 2D–1D–2D Mass Spectrometry Imaging Using Strings. *Anal. Chem.* 2022, *94* (3), 1661–1668.

xiabing@cib.ac.cn; zhouyan@cib.ac.cn

Two Novel Mass Spectrometry Imaging Methods for Large-Sized Samples and In Situ Untargeted Metabolite Identification

Yu Wang[1,2], Bing Xia[1,2,*], Yan Zhou[1,2,*]

1. Chengdu Institute of Biology, Chinese Academy of Sciences. Chengdu 610213, China
2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China

ABSTRACT: The Mass spectrometry imaging (MSI) is characterized by high sensitivity and high specificity, enabling the intuitive visualization of the spatial distribution of molecules in biological tissues, and thus playing an increasingly important role in studies such as drug metabolic pathways and drug safety. MSI (e.g., MALDI, SIMS, DESI) is constructed by combining ionization techniques with scanning techniques. However, because scanning techniques require mechanical displacement stages, conventional MSI is difficult to apply to the analysis of large-sized samples. Meanwhile, due to the inherent trade-off between spatial resolution and in situ tandem mass spectrometry (MS2) acquisition, in situ untargeted metabolite identification remains challenging. To address these issues, this study proposes two innovative mass spectrometry imaging methods. The first is a thread-based two-dimensional–one-dimensional–two-dimensional mass spectrometry imaging method (2D-1D-2D MSI). In this method, threads are woven into a two-dimensional plane onto which the sample to be analyzed is imprinted. The two-dimensional plane is then decomposed into one-dimensional thread bands, and a self-developed thread-mass spectrometry interface is employed for desorption and ionization analysis. Finally, the acquired mass spectrometry data are reconstructed into two-dimensional images to obtain the spatial distribution information of molecules. This method requires only a simple and miniaturized thread-mass spectrometry interface device, and the imaging size depends solely on the size of the thread plane onto which the sample is imprinted. The thread plane is more easily scalable, making the analysis of large-sized samples more convenient and cost-effective. In addition, this imaging technique inherits the advantages of molecular imprinting technology, enabling the analysis of irregular and non-flat samples. The developed MSI technique was successfully applied to analyze the spatial distribution of secondary metabolites in an intact Broussonetia papyrifera seedling (100 mm × 180 mm), providing a new analytical method for botanical research. The second method is clustering resampling mass spectrometry imaging (CR-MSI), which innovatively converts in situ MS2 acquisition from countless pixel scans into testing at a few representative points, allowing both spatial localization and structural characterization data of metabolites to be obtained from a single tissue section. Furthermore, an integrated device was designed to automate the CR-MSI workflow, transforming MS2 acquisition from a labor-intensive, operator-dependent procedure into an objective, data-driven process. Moreover, the synchronization between MSI data acquisition and processing improves the overall MSI efficiency. When applied to rat brain imaging, 1175 MS2 species were collected in situ, significantly enhancing the molecular identification capability of untargeted mass spectrometry imaging.

KEY WORDS: Mass spectrometry imaging, thread-based mass spectrometry ion source, clustering resampling, ambient ionization.

REFERENCES

(1) Wang, Y.; Xia, B.; Deng, S.; Ye, Y.; Zhou, Y. Performing 2D–1D–2D Mass Spectrometry Imaging Using Strings. *Anal. Chem.* 2022, *94* (3), 1661–1668.

xiabing@cib.ac.cn; zhouyan@cib.ac.cn

协同基质在MALDI质谱成像中的应用

李梦娟[1]，王浩[2*]，国新华[1*]
1. 吉林大学化学学院，长春前进大街2699号
2. 长春应用化学研究所高分子科学与技术全国重点实验室，长春人民大街5625号

脊髓损伤（SCI）后的氧化应激会引发丙烯醛（ACR）相关通路中代谢物的变化，该通路涉及活性羰基化合物（RCSs）、多胺、氨基酸、脂肪酸和脂质。全面绘制这些代谢物的图谱对于理解SCI的疾病进展至关重要。尽管基质辅助激光解吸/电离质谱成像（MALDI MSI）被广泛用于内源性化合物的成像，但同时对氧化应激网络中多种分析物类别进行宽谱成像仍具有挑战性。为此，我们开发了一种由2-肼基喹啉（2-HQ）和α-氰基-4-羟基肉桂酸（CHCA）组成的协同基质（co-matrix），用于SCI后大鼠脊髓组织的MALDI MSI分析。在该体系中，2-HQ与CHCA形成的离子对促进了均匀结晶和点间测定重现性，同时2-HQ可原位选择性地衍生RCSs。密度泛函理论计算表明，协同基质的离子特性增强了分析物的电离效率。利用该协同基质对大鼠脊髓损伤组织切片进行成像，观测到41种不同代谢物，其中包括两种与ACR氧化应激通路相关的羰基化合物。相比之下，单独使用CHCA仅能检测到15种代谢物（主要为脂质），而单独使用2-HQ仅检测到1种代谢物。对ACR相关通路中9种代谢物进行时间热图分析，揭示了ACR与谷胱甘肽之间存在协同的动态变化，两者均在第7天出现反弹（单因素方差分析，$p < 0.01$）。本研究为复杂损伤生物系统中多种代谢物类别的全面成像分析提供了一种新策略[1]。此外，组织膨胀技术显著提高了基质辅助激光解吸/电离质谱成像（MALDI MSI）的空间分辨率，但膨胀后的组织-凝胶在脱水过程中仍存在稳定性差的问题[2-3]。我们提出了一种醛-氨基辅助膨胀（AAEx）策略，该方法通过共价键将组织切片整合到水凝胶中，并利用席夫碱键将组织-凝胶锚定在氨基功能化的氧化铟锡（ITO）载玻片上。AAEx可有效防止组织-凝胶在脱水及长达三个月的干燥储存期间发生x-y方向收缩和开裂。经三个月储存的组织-凝胶仍保持优异的空间稳定性，可直接用于MALDI MSI分析，或在重新水化后用于荧光成像。在小鼠小脑的MALDI MSI实验中，AAEx使空间分辨率提升了约四倍，清晰分辨出对照组中无法区分的精细解剖结构层。AAEx技术在提高MALDIMSI分辨率的同时保证实验的成功率，降低了实验时间和材料成本。

关键词：MALDI质谱成像，协同基质，丙烯醛代谢通路，脊髓损伤氧化应激，膨胀纤维.

参考文献

1.M. J. Li，L. S. Chen, G, T. Xu, Y. X. Liu, H. Wang*, X. H. Guo* *Anal. Chem*. **2026,** In revision. .
2.Y. H. Chan, K. C. Pathmasiri, D. P. Jacques, M. C. Hibbard, N. Tao, Fischer J. L., E. Yang, S. M. Cologna, R. Gao, *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 5036.
3.H. Zhang, H. Lu, L. Ding, P. W. Tillberg, A. Hu, X. Shi, M. C. Wang, P. Huang, L. Li, *Nat. Methods* **2025**, *22*, 1051-1058.

guoxh@jlu.edu.cn Tel.0431-85166389

污染物环境效应与健康风险

Microdroplet-Enhanced Photoaging of Polystyrene Microplastics: Interfacial ROS Generation, Molecular Transformation, and Ecotoxicity Potential

Ying Chen[1], Xinying Gong[1,2,*], Zhengjun Gong[1,2,*]

1. School of Environmental Science and Engineering, Sichuan Engineering Research Center for Pollution Control in Rail Transit Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu 611756, China;

2. State Key Laboratory of Intelligent Geotechnics and Tunnelling, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China

ABSTRACT: Microdroplet interfaces are increasingly recognized as highly reactive microenvironments[1,2], yet their effects on the photoaging of chemically stable polymeric microplastics and the molecular evolution of released dissolved organic matter remain poorly understood. Here, polystyrene microplastics (PS-MPs) were used as a model polymer to determine whether microdroplet interfaces merely accelerate photooxidation or fundamentally alter polymer transformation pathways. PS-MPs were irradiated under microdroplet, bulk aqueous, and dry-powder conditions. Particle localization, morphology, and surface chemistry were characterized by confocal microscopy, SEM, XPS, and time-resolved FTIR spectroscopy. The released PS-derived dissolved organic matter (PS-DOM) was further analyzed by three-dimensional excitation-emission fluorescence spectroscopy and ultrahigh-resolution FT-ICR MS. Reactive oxygen species (ROS) were examined using molecular probes and EPR spectroscopy, while the local interfacial electric field was evaluated by vibrational Stark-effect SERS. PS-MPs preferentially accumulated at the air–water interface, where substantially enhanced surface oxidation and chain scission were observed compared with the bulk and dry-powder systems. FT-ICR MS revealed a clear stage-dependent molecular evolution of PS-DOM. Microdroplet-derived PS-DOM contained smaller, more unsaturated, and more oxygenated molecular formulas, while bulk-derived PS-DOM was dominated by relatively intact additive-related compounds. The apparent •OH-equivalent response reached 927.2 μM in microdroplets compared with 2.8 μM in bulk water, and the local interfacial electric field in PS-containing microdroplets was estimated to be approximately 8.1×10^8 V m^{-1}. ECOSAR screening further indicated distinct predicted ecotoxicological profiles between the two systems. These results demonstrate that microdroplet interfaces not only accelerate PS photoaging but also redirect the molecular transformation of PS-DOM through temporally distinct reaction regimes. The findings highlight the air-water interface as an important but previously underappreciated reaction environment governing the environmental transformation and potential risk evolution of microplastics.

KEY WORDS: Microdroplets, air-water interface, PS-MPs, reactive oxygen species, PS-DOM.

REFERENCES:

1. Zheng, X.; Fang, Y. G.; Tan, M.; Chen, B.; Francisco, J. S.; Zhu, C.; Chu, C., *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, (30), 26635-26642.

2. Li, F.; Lv, J.; He, A.; Xu, J.; Zhao, L.; Wang, X.; Mao, L.; Li, S.; Wang, H.; Wang, Y.; Jiang, G., *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, (34), 30574-30581.

gongxy23@swjtu.edu.cn, 15122625272

pH 变化下血细胞铅的分配行为与蛋白结合机制

苑敏 [1]，胡立刚 [1,2*]，江桂斌 [1,2]

[1] 国科大杭州高等研究院环境学院，杭州，310000

[2] 中国科学院生态环境研究中心环境化学与环境毒理学全国重点实验室，北京，100085

Email: lghu@rcees.ac.cn

关键词：铅；血细胞；pH；蛋白结合；电感耦合等离子体质谱

摘要：铅是典型的环境有毒金属，血细胞是其在血液中的重要载体，蛋白结合可能影响铅的滞留与交换。然而，pH 对血细胞铅含量及其蛋白结合行为的影响仍需阐明。本研究结合电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）、紫外-可见吸收光谱和等温滴定量热法（ITC），从细胞和蛋白层面考察上述过程。将 4 只铅暴露小鼠的血液样品分别置于 pH 7.4、7.2、7.0 和 6.8 条件下孵育，测定细胞相关铅含量并按细胞数量归一化。尽管不同个体的铅含量存在差异，4 个独立样品均呈随 pH 降低而下降的趋势。以各个体 pH 7.4 组为 100%，pH 6.8 组相对含量降至 60.9%±8.4%（均值±标准误，n=4），细胞数量基本稳定。紫外-可见光谱显示，随铅添加量增加，血红蛋白 274 nm 附近吸收增强，而 415 nm 及 540/576 nm 处血红素特征峰变化较小，提示铅主要扰动蛋白局部微环境。在较低 pH 条件下，铅引起的 274 nm 附近吸收变化减弱。ITC 检测到铅滴定血红蛋白时的放热信号，且不同 pH 下的积分热曲线形状和热效应幅度存在差异，表明结合过程具有 pH 依赖性。上述蛋白实验与细胞结果共同提示，pH 对铅与血红蛋白相互作用的影响可能参与细胞相关铅含量的变化，为理解血液中铅滞留的调控因素提供实验依据。

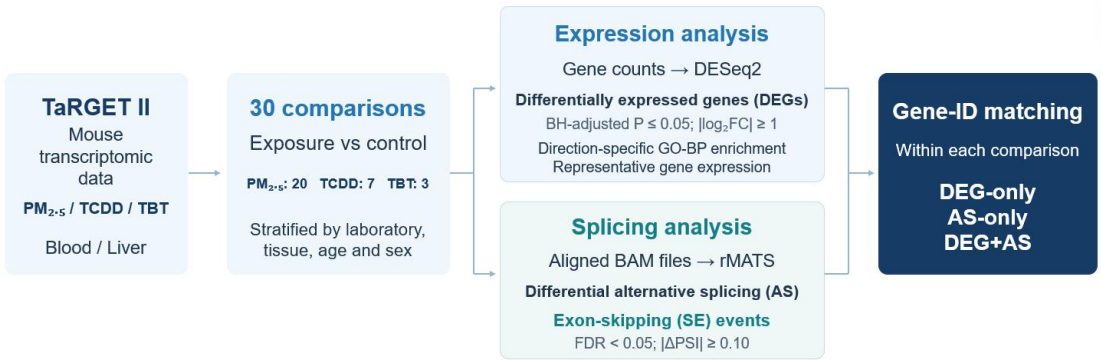
环境污染物暴露后小鼠血液与肝脏的转录组响应：组织异质性及表达与剪接分析的互补性

田倩,李喜悦,雷霄云*

陕西理工大学化学与环境科学学院，陕西省催化重点实验室，陕西·汉中，723001

*Email:xiaoyunlei@snut.edu.cn

环境污染物可影响基因表达丰度与可变剪接，但这些响应在不同组织、周龄和性别条件下是否具有一致性，以及可变剪接分析在表达丰度之外能提供哪些补充信息，仍需系统考察。本研究对 TaRGET II 公共小鼠转录组数据开展二次分析，纳入细颗粒物（PM2.5）、2,3,7,8-四氯二苯并对二噁英（TCDD）和三丁基锡（TBT）暴露相关的血液与肝脏数据，按污染物、组织、周龄、性别和实验室划分为 30 个暴露，对照分析组合，联合开展差异表达、功能富集、个体水平表达及外显子跳跃分析。结果显示，表达响应在组织和分析组合间存在明显差异，涉及红系、免疫、细胞周期、代谢及细胞外基质相关过程，未呈现跨污染物和组织普遍一致的变化模式。表达与剪接结果仅部分重叠：173 条分析组合–基因记录同时达到两类筛选标准，涉及 151 个不同基因。在 29 个具有有效表达检验结果的剪接阳性记录的分析组合中，仅达到剪接标准而未达到差异表达标准的记录比例中位数为 97.7%。上述结果表明，污染物相关表达响应具有组织和分析条件依赖性，外显子跳跃分析可补充识别基因表达丰度筛选未同时检出的 RNA 变化。联合评估表达与剪接有助于更完整地描述污染物相关转录组响应，并为候选事件的结构与功能验证提供依据。



关键词：环境毒理基因组学；差异表达；可变剪接；组织异质性

参考文献

1.P. K. Kuntala et al., Nat. Commun., 2026, 17, 6624. DOI: 10.1038/s41467-026-73324-5.
2.M. I. Love, W. Huber and S. Anders, Genome Biol., 2014, 15, 550.
3.Y. Wang et al., Nat. Protoc., 2024, 19, 1083–1104.
4.A. B. Villaseñor-Altamirano et al., PLoS ONE, 2019, 14, e0219747.

不同海产品中汞的形态特征、生物可及性和生物利用率评估

付凤富[1*]
1. 福州大学化学学院，福州 350108

不同种类的海产品含有多种不同汞形态包括无机汞和有机汞。相比于无机汞，有机汞的毒性更强，而且不同海产品中无机汞和有机汞的生物可及性和生物利用率也可能不同[1]。所以，开展不同种类海产品中的汞形态特征、生物可及性及其生物利用率研究，对客观评估海产品中汞的健康风险具有重要意义[2, 3]。

本研究利用 IC-ICP-MS 对采集自福建省不同区域的各类海产品包括藻类、贝类和鱼类中的汞形态和浓度特征进行了调查，并结合肠胃模拟模型对各类海产品中不同汞形态的生物可及性进行评估。在此基础上，利用 Caco-2 细胞体外模型和小鼠代谢体内模型分别评估了不同海产品基质下不同形态汞的体外和体内生物利用率。结果表明，所有鱼类、贝类和一部分藻类样品被检测出同时含有 Hg^{2+}和 MeHg、且 MeHg 是主要形态；而另一部分藻类样品被检测出只含有 Hg^{2+}。在肠胃消化过程中，各种类海产品中的一部分 CH3Hg+会发生脱甲基化、被转为 Hg^{2+}，藻类样品的 Hg^{2+}和 MeHg 的平均生物可及性分别为 97.7%和 11.6%，鱼类样品的 Hg^{2+}和 MeHg 的平均生物可及性分别为 65.1%和 57.7%，贝/虾类样品的 Hg^{2+}和 MeHg 的平均生物可及性分别为 65.1%和 50.8%。另外，使用 Caco-2 细胞测定的海产品基质下汞形态体外生物利用率同时取决于海产品种类和汞的化学形态；而使用小鼠暴露实验获得的汞形态的体内生物利用率主要取决于汞的化学形态、而不是海产品种类。Hg^{2+}在各种海产品中的体外生物利用率均高于 MeHg 和 EtHg，而同一种海产品中的 MeHg 和 EtHg 具有相似的体外生物利用率。相比之下，汞形态的体内生物利用率显示出相反的变化趋势，MeHg 和 EtHg 在所有海产品基质下的体内生物利用率远高于 Hg^{2+}。结果表明，体外 Caco-2 细胞模型不能直接替代体内动物模型用于评估海产品中汞的生物利用率，尤其是甲基汞和乙基汞。

目标危险指数模拟计算表明，准确测定有机汞含量并获得不同形态汞的代表性生物利用率，对于准确评估海产品中汞的实际暴露水平和实际健康风险至关重要。本研究的结果提供了不同海产品基质下不同形态汞的具有广泛代表性的生物利用率数据，有助于精确评估海鲜消费来源汞的健康风险，并为其他饮食来源中汞的生物利用率的评估提供了有价值的见解。

关键词：汞，海产品，生物可及性，生物利用率，风险评估.

参考文献（5 篇以内）

1.Y. Gong, L. M. Nunes, B. K. Greenfiled, Z. Qin, Q. Yang, L. Huang, W. Bu, H. Zhong, *Sci. Total Environ.*, 2018, 630, 222-230..
2.N. E. Selin, *Science*, 2018, 360 (6389), 607-609..
3.W. Liao, G. Wang, et al., *J. Hazard. Mater.*, 2019, 375: 130-137.

Corresponding author email: fengfu@fzu.edu.cn.

环境相关剂量壬基酚慢性暴露通过花生四烯酸代谢依赖性炎症促进乳腺癌进展

杨洋[1]，于晴[2]，何聿[1,*]

1．福建省福州大学化学学院食品安全与生物分析科学教育部重点实验室、福建省食品安全分析检测技术重点实验室，中国福建福州 350116

壬基酚是一种广泛存在的内分泌干扰物，但其在三阴性乳腺癌中的作用尚不明确。本研究以 4T1-Luc 小鼠模型为对象，结合脂质组学与代谢组学，考察了慢性 NP 暴露（1 和 10 μg/kg/day）对 TNBC 进展的影响。体外实验表明，NP 在 0.5 和 1 μM 浓度下可显著增强 4T1-Luc 细胞三维球体的增殖能力，并促进细胞迁移与集落形成，提示其具有直接的促肿瘤效应。体内实验中，高剂量 NP（10 μg/kg/day）加速原发肿瘤生长，显著增加肿瘤体积与重量，并大幅增加腋窝淋巴结及肺转移；低剂量组（1 μg/kg/day）虽未达统计学显著，但各指标均呈一致上升趋势，提示潜在长期风险。多组学分析揭示广泛的代谢重塑：甘油磷脂与鞘脂代谢显著改变，多种膜相关脂质升高，谷胱甘肽水平下降，嘌呤代谢明显紊乱；炎症细胞因子 TNF-α、IL-1β及 IL-6 显著升高，花生四烯酸来源的类花生酸（PGF2α、LTC4 等）亦明显累积。分子对接提示 NP 可与 SRC、STAT3、PTGS2 及 IL-1β等关键调控蛋白结合，其中与 PTGS2 的结合能为-6.2 kcal/mol，进而参与氧化应激与代谢适应。上述结果揭示了慢性 NP 暴露的毒理学与代谢后果，并突出其在促进三阴性乳腺癌生长进展中的潜在作用，为环境安全阈值的修订与污染物相关乳腺癌的预防策略提供了科学依据。

关键词：壬基酚，内分泌干扰物，三阴性乳腺癌，代谢组学，脂质组学。

参考文献

1.A. K. Dan, Y Sun, Z Ye, J. Lin, Z. A. Lin, Z. W. Cai, *J. Hazard. Mater.*, 2026, 508, 141874.

2.A. K. Dan, J. H. Yuan, P. S. Xie, J. Chen, C. R. Chen, Z. A. Lin, and Z. W. Cai, *Environ. Sci. Technol*., 2025, 59, 13671-13682.

3.C. R. Chen, Y. J. Zhang, J. N. Zhang, W Xie, H. Su, Y. H. Zhong, Z. A. Lin, Z. W. Cai, *J. Hazard. Mater*., 2026, 503, 141089.

G. Lian, S. Y. Chen, J. Chen, P. S. Xie, F. R. Gao, Y. Yang, Y. He, and Z. W. Cai, *J. Agric. Food Chem*., 2025, 73, 30714-30725.

Corresponding author email, Tel.

Environmentally Relevant Chronic Nonylphenol Exposure Promotes Breast Cancer Progression via Arachidonic Acid Metabolism-Dependent Inflammation

Yang Yang[1], Qing Yu[2], Yu He[1,*]

1. Ministry of Education Key Laboratory of Analytical Science for Food Safety and Biology, Fujian Provincial Key Laboratory of Analysis and Detection Technology for Food Safety, College of Chemistry, Fuzhou University, Fuzhou, Fujian, 350116, China

ABSTRACT: Nonylphenol (NP) is a widespread endocrine-disrupting chemical, yet its role in triple-negative breast cancer (TNBC) remains unclear. In this study, a 4T1-Luc mouse model was employed, combined with lipidomics and metabolomics, to investigate the effects of chronic NP exposure (1 and 10 μg/kg/day) on TNBC progression. In vitro experiments showed that NP at 0.5 and 1 μM significantly enhanced the proliferation of 4T1-Luc three-dimensional spheroids and promoted cell migration and colony formation, suggesting a direct tumor-promoting effect. In vivo, high-dose NP (10 μg/kg/day) accelerated primary tumor growth, markedly increased tumor volume and weight, and substantially enhanced axillary lymph node and lung metastasis. Although the low-dose group (1 μg/kg/day) did not reach statistical significance, all measured indicators exhibited consistent upward trends, implying potential long-term risks. Multi-omics analysis revealed extensive metabolic remodeling: glycerophospholipid and sphingolipid metabolism was significantly altered, multiple membrane-associated lipids were elevated, glutathione levels decreased, and purine metabolism was markedly perturbed. Inflammatory cytokines TNF-α, IL-1β, and IL-6 were significantly elevated, and arachidonic acid-derived eicosanoids (PGF2α, LTC4, etc.) also accumulated notably. Molecular docking suggested that NP may bind to key regulatory proteins including SRC, STAT3, PTGS2, and IL-1β, with a binding energy of −6.2 kcal/mol for PTGS2, thereby participating in oxidative stress and metabolic adaptation. Collectively, these results reveal the toxicological and metabolic consequences of chronic NP exposure and highlight its potential role in promoting TNBC progression, providing a scientific basis for the revision of environmental safety thresholds and the development of prevention strategies for pollutant-associated breast cancer.

KEY WORDS: Nonylphenol, Endocrine-disrupting chemicals, Triple-negative breast cancer, Metabolomics.

REFERENCES

1.A. K. Dan, Y Sun, Z Ye, J. Lin, Z. A. Lin, Z. W. Cai, J. Hazard. Mater., 2026, 508, 141874.
2.A. K. Dan, J. H. Yuan, P. S. Xie, J. Chen, C. R. Chen, Z. A. Lin, and Z. W. Cai, Environ. Sci. Technol., 2025, 59, 13671-13682.
3.C. R. Chen, Y. J. Zhang, J. N. Zhang, W Xie, H. Su, Y. H. Zhong, Z. A. Lin, Z. W. Cai, J. Hazard. Mater., 2026, 503, 141089.
4.G. Lian, S. Y. Chen, J. Chen, P. S. Xie, F. R. Gao, Y. Yang, Y. He, and Z. W. Cai, J. Agric. Food Chem., 2025, 73, 30714-30725.

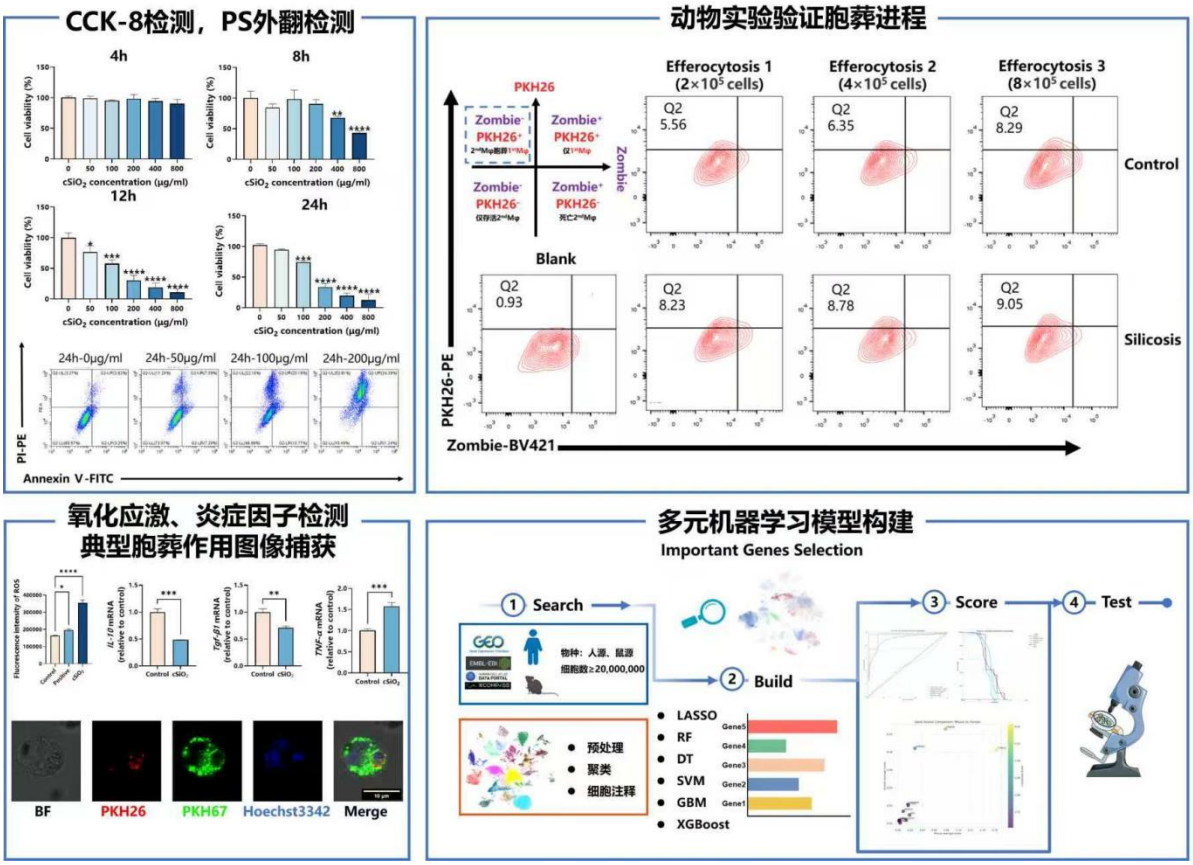
Corresponding author email, Tel.

晶体二氧化硅介导胞葬进程的多元机器学习模型构建与机制解析

曹建中[1]，宋杨[1,*]；
1. 中国科学院生态环境研究中心，北京市海淀区双清路 18 号，100085；

摘要：矽肺病（Silicosis）是一种由于长期吸入晶体二氧化硅颗粒引起的肺部职业性疾病。巨噬细胞清除死亡的细胞的过程被称为“胞葬作用”（Efferocytosis）。研究发现，胞葬作用有助于抑制炎症反应，维持机体稳态。然而，当二氧化硅介导胞葬作用时，它可能会引起巨噬细胞胞葬作用的重编程，这可能揭示了矽肺病发病的潜在机制。本研究首先揭示了晶体二氧化硅对巨噬细胞的毒性作用，并验证了晶体二氧化硅介导下巨噬细胞的胞葬作用。并利用多元机器学习模型在单细胞层面，对重要基因进行筛选与评分。这一研究有助于了解矽肺病的发病机制，并为矽肺的诊疗提供帮助[1,2]。

关键词：矽肺，胞葬作用，机器学习



参考文献

1.Jiongcong L,Wenke S,Bo L, et al. Efficient engulfment of necroptotic and pyroptotic cells by nonprofessional and professional phagocytes.[J]. Cell discovery,2019,5(1).
2.B P A,Bishuang C,R S S, et al. Macrophages use apoptotic cell-derived methionine and DNMT3A during efferocytosis to promote tissue resolution.[J]. Nature metabolism,2022,4(4).

Corresponding author email, Tel.

空气污染物长期暴露与全球癌症负担

张高信[1]，李英明[1,*]，张庆华[1]，江桂斌[1]
中国科学院生态环境研究中心，北京，100085

环境空气污染对全球公共卫生构成威胁。据估计，全球 99%的人口呼吸的空气超过世界卫生组织空气质量指南限值，其中中低收入国家人群的暴露水平较高，这凸显了将空气污染治理纳入全球公共卫生战略的紧迫性。癌症是快速增长的全球健康危机，也是仅次于心血管疾病的第二大死因，给全球健康带来了沉重负担。空气污染作为重要环境风险因素，其长期健康危害日益受到关注。当前全球范围内关于空气污染物长期暴露对癌症发病的综合影响，以及其对全球癌症负担的归因研究仍十分有限，缺乏系统性的认识。开展能够刻画空气污染长期暴露与癌症发病率关系、并精准量化人群归因负担的研究，对于制定人群层面的癌症预防策略至关重要。

针对这一科学问题，我们的研究基于 2000-2020 年全球 1.09 亿新发癌症病例，融合高分辨率（1×1 km）空气污染物浓度、人口分布、气候环境因子及社会经济变量，构建了全球尺度的空气污染物长期暴露与癌症发病率的综合评估体系。研究系统解析了 $PM_{2.5}$、O_3 和 NO_2 长期暴露对癌症的滞后效应及暴露-反应关系，并量化了归因负担。研究发现，长期暴露于 $PM_{2.5}$、O_3 和 NO_2 均显著增加全球癌症发生风险，其中 $PM_{2.5}$ 表现出 J 型暴露-反应关系，而 O_3 和 NO_2 则呈近似线性的风险增加趋势。在全球范围内，$PM_{2.5}$、O_3 和 NO_2 浓度每升高 10 μg m^{-3}，全癌种发生风险分别增加 16.0%、4.23%和 11.7%，分别归因约 882 万例、259 万例和 667 万例癌症新发病例。研究进一步表明，女性群体对 $PM_{2.5}$ 和 NO_2 暴露表现出更高的癌症易感性，其总体归因风险显著高于男性。本研究为全球空气污染与癌症负担的精准防控提供了前沿科学证据，也为将空气质量政策纳入癌症预防战略提供了坚实的数据支撑与决策依据。

关键词：癌症发病率、空气污染、归因负担.

参考文献

1.G. X. Zhang, Y. M. Li, A. Li, Q. H. Zhang, T. T. Li, H. D. Kan, P. L. Kinney and G. B. Jiang, *Nat. Health*, **2026**, 10.1038/s44360-026-00180-4.

Corresponding author email: ymli@rcees.ac.cn, Tel: 010-62849870.

快速等离子体辅助合成 UiO-66-NH_2@MoS_2 异质结用于压电催化去除抗生素

屠玉宁[1], 李宇琦[1], 陈瀚蛟[1,*],侯贤灯[1,2,*]
1. 四川大学分析测试中心，中国四川省成都市 610064
2. 四川大学化学学院，中国四川省成都市 610064

针对水体抗生素污染治理的需求，发展能高效利用环境机械能的压电催化技术具有重要意义。本研究构建了一种以 UiO-66-NH_2 与 MoS_2 为组分的花状异质结压电催化剂，并通过介质阻挡放电（dielectric barrier discharge, DBD）低温等离子体辅助原位生长法实现快速合成。该策略利用 UiO-66-NH_2 的多孔结构和 MoS_2 的压电响应特性，并通过等离子体体系构建的紧密界面，以改善电荷分离与传输过程。在超声振动条件下，优化后的 UiO-66-NH_2/MoS_2 催化剂在 100 min 内实现了 93.7%莫西沙星去除率，性能明显优于单一组分。结合实验表征与密度泛函理论（DFT）计算结果表明，异质结的形成显著增强了污染物与氧分子的吸附能力，并且界面电子转移过程有效促进了载流子分离与氧还原反应，从而提高了整体催化效率。本研究从界面电荷行为角度分析了压电异质结的催化机制，并展示了低温等离子体在构建高效复合催化材料中的应用潜力，为抗生素污染治理提供了一种可行思路。

关键词：压电催化；介质阻挡放电；金属-有机框架；降解.

参考文献

1.T. Jiang, Y. Wang, C. Cai, C. Nie, H. Peng, Z. Ao, Piezocatalysis for water treatment: Mechanisms, recent advances, and future prospects, *Environ. Sci. Ecotechnol.*, **2025**, 23, 100495.
2.C. Shi, S. Pu, L. Wu, X. Hou, A “turn on” colorimetric system based on bimetallic UiO-66(Zr/Ce) for rapid sensing of tetracyclines through visible light triggering, *Sens. Actuators*, *B* **2023**, 379, 133200.
3.Y. Peng, M. Geng, J. Yu, Y. Zhang, F. Tian, Y.n. Guo, D. Zhang, X. Yang, Z. Li, Z. Li, S. Zhang, Vacancy-induced 2H@1T MoS_2 phase-incorporation on $ZnIn_2S_4$ for boosting photocatalytic hydrogen evolution, Appl. Catal., B **2021**, 298, 120570.

Corresponding author email: houxd@scu.edu.cn.

液质联用分析环境污染物及健康效应研究

袁必锋*
复杂生命体代谢与调控全国重点实验室，武汉大学公共卫生学院，武汉，430071
*Email: bfyuan@whu.edu.cn

随着现代农业与工业的快速发展，环境污染物已广泛存在于空气、食品和日常用品中，构成严峻的公共健康挑战。部分污染物及其代谢产物可在体内蓄积，干扰生殖、内分泌及神经等多系统功能。早期妊娠暴露于环境污染物是妊娠期糖尿病（GDM）的已知危险因素，但特定化学类别如何通过代谢通路影响疾病发生，尚不明确。为此，我们首先建立了基于液相色谱-串联质谱（LC-MS/MS）的污染物系统分析平台，可实现 12 类 263 种污染物的高灵敏、高覆盖同步检测。依托该平台，我们前期工作揭示了污染物从母体向胎儿的转移规律[1]，并发现环境暴露可诱导细胞与小鼠组织的核酸表观遗传修饰变化[2]，其中 DEHP 通过自噬过度激活及线粒体功能障碍扰乱脂质代谢[3]。在此基础上，本研究结合靶向污染物检测与高通量代谢组学技术，在一个前瞻性出生队列中开展巢式病例对照研究，对早期妊娠血清样本中 11 个化学家族的 182 种污染物及 702 种代谢物进行检测。结果显示，7 种单一污染物与 GDM 风险显著相关，BHT-COOH 效应最强（OR = 2.34, 95% CI: 1.59–3.45）；加权分位数和（WQS）回归与贝叶斯核机器回归（BKMR）进一步证实了污染物混合物对 GDM 的联合效应。中介分析鉴定出 506 对暴露–代谢物显著关联，描绘了 GDM 相关的化学–代谢中间产物图谱。通路分析确定 6 条代谢通路显著介导污染物–GDM 关联，其中苯丙氨酸、酪氨酸和色氨酸生物合成通路的中介效应最大；这些通路在单一污染物和混合暴露指数中均表现一致。本研究表明，特定代谢紊乱在早期妊娠污染物暴露与 GDM 之间发挥中介作用，并在代谢通路层面提供了新的干预靶点。

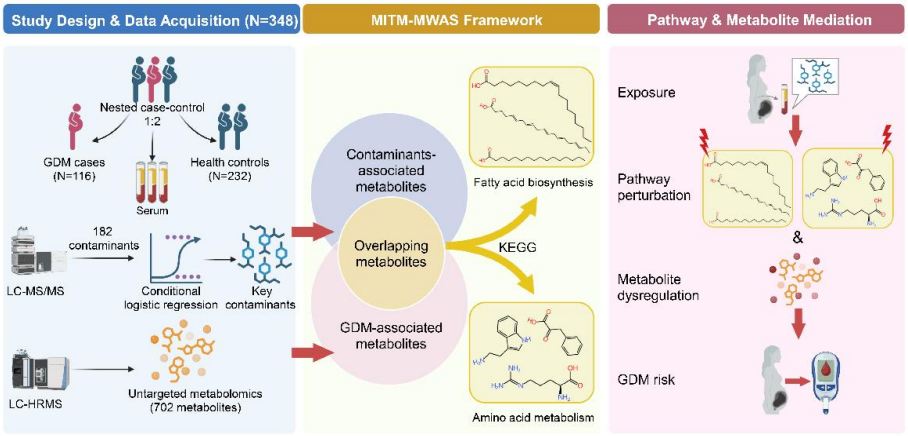


图 1. 液质联用分析鉴定环境污染物与 GDM 之间的代谢中介因子示意图。

关键词：色谱质谱联用，环境污染物，代谢组分析，混合暴露分析，妊娠期糖尿病

参考文献：

1. Yuan, K. Y.; Gu, Y. H.; Pei, Y. H.; Yu, S. Y.; Li, T. Z.; Feng, T.; Liu, Y.; Tian, J.; Miao, X.; Xiong, J.; Hu, M.; Yuan, B. F. *J Hazard Mater*, 2025, 486, 136970.
2. Feng, T.; Gu, Y. H.; Hu, Q. S.; Xie, N. B.; Gu, S. Y.; Gang, F. Y.; Xiong, J.; Yuan, B. F. *J Hazard Mater*, 2026, 503, 141125.
3. Yu, S. Y.; Liu, Q.; Gu, Y. H.; Han, W. Z.; Han, A. J.; Xiong, J.; Li, T. Z.; Hu, Q. S.; Gang, F. Y.; Zhao, C. Q.; Feng, T.; Tian, J.; Miao, X.; Yu, X. J.; Xie, N. B.; Yuan, B. F. *Autophagy* 2026, 22 (8), 1969-1984.

Corresponding author email, Tel.

质谱检测技术

TCEP/IAA 衍生化与 CE-ICP-MS 检测细胞内硒代半胱氨酸（SeC）

鲁毅，韩青君，杨鹏，魏星*，陈明丽*，王建华*

东北大学理学院，辽宁沈阳，110819

*Email: chenml@mail.neu.edu.cn; jianhuajrz@mail.neu.edu.cn

硒代半胱氨酸（SeC）含亲核性强、易氧化，活性高的的硒醇基团[1]。SeC 由 UGA 密码子编码，需 SECIS 序列存在时才进行翻译，构成各种功能性硒蛋白的活性位点[1,2,3]。硒代蛋氨酸（SeMet）可被蛋氨酸 tRNA 识别，从而随机替代蛋氨酸掺入蛋白，常被认为作为硒的储备形态[2]。细胞可通过转硫途径将 SeMet 转化为 SeC，该过程在肝脏较为活跃[2]。食物中 SeMet 和 SeC（氧化形式硒代胱胺酸 SeCys）是主要硒形态，经小肠吸收后，SeMet 几乎不发生形态转化，SeC 的氧化形式 SeCys 则会有部分转化为其与还原型谷胱甘肽（GSH）反应的产物（SeCGSH），随后上述硒形态首先进入肝脏[2,4,5]。本工作欲探究 SeCys 和 SeMet 孵育对肝细胞中 SeC 等硒形态积累造成的影响。由于 SeC 不稳定易氧化，本工作以三羧基乙基膦（TCEP）作为还原剂和碘乙酸（IAA）作为烷基化试剂，室温下实现细胞裂解物中 SeC 向 SeC-IAA 的高效转化（转化率可达 88%）并结合 CE-ICP-MS 实现 SeC-IAA，SeMet，甲基硒代半胱氨酸（MeSeCys）和硒糖（SeSug1）的分离检测。硒形态硒的检出限为 1.2 μg/L，峰面积和出峰时间的 RSD（n=3）小于 5%。对 SeMet、SeCys 或 SeCGSH 孵育细胞的裂解物的分析结果表明，HCCLM3 细胞较 HuH-7 细胞累积硒总量更高，SeMet 孵育导致细胞内硒的增加量最高，细胞主要通过将 SeMet 储存在蛋白质中进行硒的累积，而细胞中 SeC 硒占总硒不足 1%。将 SeMet 替换为 SeCys 或 SeCGSH 则可以使细胞内 SeC 的含量提高，但细胞累积的硒总量明显降低。此外在裂解物中存在一些未知的硒形态，有待进一步分析研究。

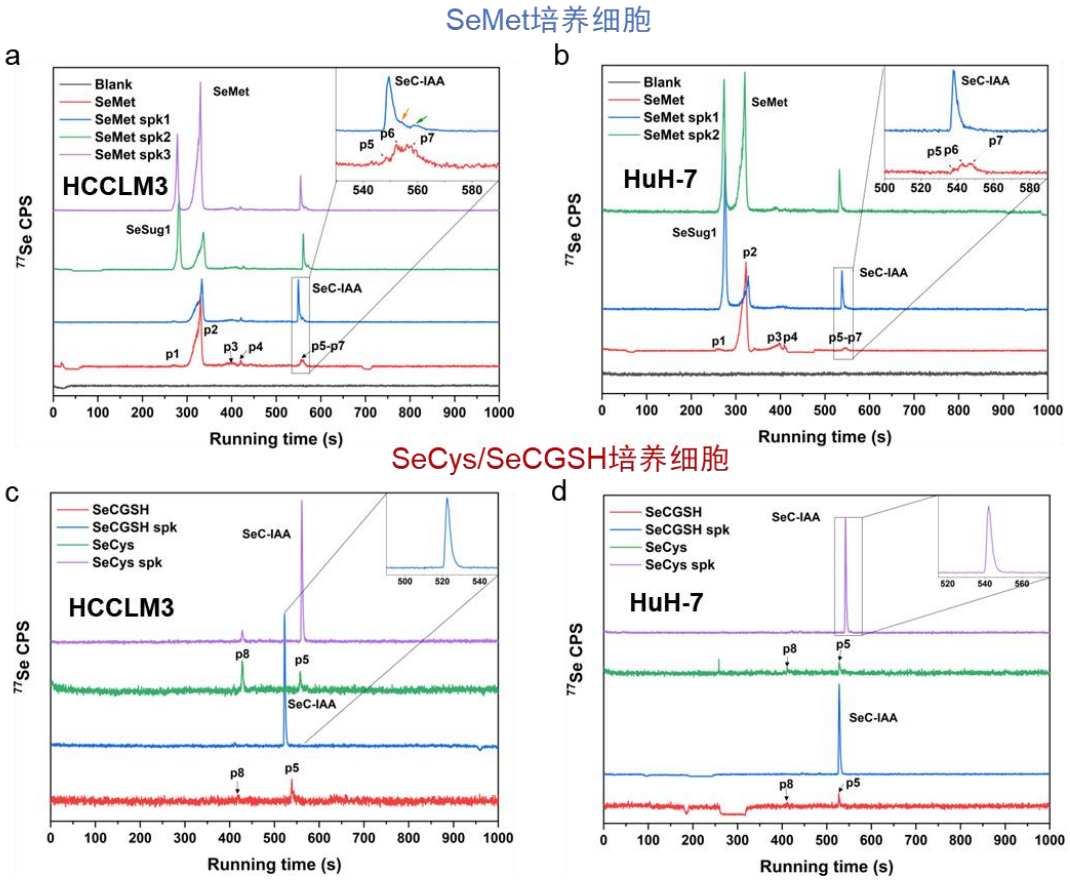


Figure 1 Electrophoreograms of CE-ICP-MS analysis of selenium species in lysates from HCCLM3 or HuH-7 cells incubated with SeMet, SeCys or SeCGSH. Incubating (a) HCCLM3 or (c) HuH-7 cells with SeMet with selenium content of 500 μg/L. spk 1-3 indicates the sequential addition of SeC-IAA, SeSug1 and SeMet to the lysate. For HuH-7 cells, spk1 indicates the addition of SeC-IAA and SeSug1 and spk2 means further addition of SeMet. Inset graph was the partial magnification of red and blue lines. SeCys or SeCys combined with GSH (six times the molar amount of SeCys used) with selenium content of 500 μg/L was applied for incubation of (b) HCCLM3 or (d) HuH-7 cells. In the figure, spk indicates the addition of SeC-IAA into the lysate. Blank is the electrophoreogram of lysate from cells not incubated with any added selenium species.

参考文献

[1] Cain A, Krahn N. Overcoming Challenges with Biochemical Studies of Selenocysteine and 1Selenoproteins[J/OL]. International Journal of Molecular Sciences, 2024, 25.

[2] Burk R F, Hill K E. Regulation of selenium metabolism and transport[J]. Annual Review of Nutrition, 2015, 35(1): 109-134.

[3] Lu J, Holmgren A. Selenoproteins[J]. Journal of Biological Chemistry, 2009, 284(2): 723-727.

[4] Hasegawa T, Mihara M, Okuno T, et al. Chemical form of selenium-containing metabolite in small intestine and liver of mice following orally administered selenocystine[J]. Archives of Toxicology, 1995, 69(5): 312-317.

[5] Gammelgaard B, Rasmussen L H, Gabel-Jensen C, et al. Estimating intestinal absorption of inorganic and organic selenium compounds by in vitro flux and biotransformation studies in Caco-2 cells and ICP-MS detection[J]. Biological Trace Element Research, 2012, 145(2): 248-256.

复杂样品循环分离检测研究进展

李攻科*，胡玉斐，夏　凌，肖小华

中山大学化学学院，广东省广州市，510006

摘　要:分析化学正从传统的线性模式向循环模式转变，推动分离与检测技术朝着更高效率和可持续性发展，其核心在于通过循环策略将时间维度引入分离与检测过程。本文综述了循环策略在分离与检测技术中的应用，首先阐述了宏观流动循环和微观反应循环2种模式，探讨了循环策略在样品前处理、色谱分离、电场驱动分离以及光谱、电化学和质谱检测中具体应用。利用化学循环、物质循环、信号放大、增敏循环等循环原理，辅以空间限域策略，提出痕量循环分析新理论、创制搭建新装置，发展了复杂样品中生物毒素、手性分子和致病菌等循环检测新方法，用于食品、生物样品、化妆品等复杂样品的快速鉴定与区分。通过引入时间维度，循环策略显著提升了分离效率、灵敏度、信息维度、动态监测能力及过程的可持续性。展望了循环策略在分离与检测中面临的挑战及发展方向。

关键词：循环分离；循环检测；空间限域；复杂样品；痕量分析。

参考文献

[1]B.S.Chen, Z.W.Liu, X.S.Yang, X.L.Zhou, L.Xia, G.K.Li, *Chemical Science*, **2026**, 17:2028-2044.

[2] B.Y, Huo, Z.M. Zhang, G.K.Li, *Analytical Chemistry*，**2026**, 98:19730-19741.

[3] X.L.Zhou, L.Xia, Y.F,Hu, G.K.Li, *Food Chemistry*, **2026**，525:150454.

[4] R.K.Zhang, Y.F. Hu, G.K. Li, *Analytical Chemistr*y, **2014**, 86: 6080-6087.

[5] R.K.Zhang, Y.H. Zhong, Z.Y. Lu, Y.L.Chen, G.K. Li, *Chemical Science,* **2021**,12: 660-668.

[6] H.T.Chen, M.M. Ji, L.Xia, Y.F. Hu, G.K. Li, *Analyst*，**2026**，151:3755-3765.

[7] M.M.Ji, Y.Chen, Y.F. Hu, G.K.Li, *Talanta*，**2025**, 285:127261

[8] R.K.Zhang, Y.H.Zhong, Y.F.Hu, Y.Chen, L.Xia, G.K.Li, *Analytical Chemistry*, **2024**, 96:3933-3941.

[9] Y.H. Zhong, Y.L. Chen, Y.F.Hu, X.H. Xiao, L.Xia, G.K. Li, *Analytical Chemistry*, **2023**, 95:6971-6979.

[10]Y.H.Zhong, W.T.Huang, R.K.Zhang, Y.F. Hu, X.H. Xiao, G.K. Li, *Sensors and Actuators B:Chemical*, **2022**,364:131901.

*基金项目：国家自然科学基金重点项目（No.22134007）、国家自然科学基金面上项目（No.22576240）、广东省自然科学基金项目（No.2024A1515011077）及广东省重点领域研发计划项目（Nos.2026B0202150002 和 2025B0202120004）。*Email: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

固相微萃取-气相色谱-串联质谱法富集检测食品中痕量卤代污染物

李鹏飞[1,2], 卢彦科[1], 闫宏远[1,2*]

1. 药物化学与分子诊断教育部重点实验室，河北大学化学与材料科学学院，保定，071002

2. 河北省公共卫生安全重点实验室，河北大学公共卫生学院，保定，071002

色谱-质谱联用技术结合了色谱高效分离性能与质谱高分辨识别能力，在食品分析、环境分析、生命分析等领域得到了广泛应用[1]。然而，生物基质本身的复杂性以及污染物极低的含量水平，给分析工作带来了巨大挑战。顶相固相微萃取技术操作简便，与色谱-质谱技术联用可显著提升复杂基质中痕量污染物的检测性能[2]。其中，设计制备具有快传质速率和高选择性的新型纤维涂层可显著提升萃取效率与分析方法性能[3]。为了提高纤维涂层的传质速率，以氧化石墨烯为前驱体，通过高温水热法和冷冻冰晶模板法设计制备了具有三维多孔结构的低共熔溶剂修饰石墨烯气凝胶，其比表面积大，孔径以介孔为主（5-20 nm），贯通的通孔结构加速了分析物的快速传质，30 min 内即可达到萃取平衡。将其作为固相微萃取纤维涂层并结合气相色谱-串联质谱，建立了鱼肉中多氯化萘的高灵敏检测新方法，有效避免了繁琐耗时的操作步骤，方法定量限为 0.03-0.19 pg/g，灵敏度可提高 1-2 个数量级[4]。为了提高纤维涂层的吸附选择性，结合纤维涂层原位制备技术和分子印迹技术，针对多氯联苯设计制备了酚醛树脂分子印迹纤维涂层，涂层厚度均一，对多氯联苯表现出较强的吸附选择性（印迹因子为 1.6-3.9）。将其与气相色谱-串联质谱相结合，建立了牛奶中痕量多氯联苯的高灵敏检测新方法。方法具备良好的选择性、较短的萃取平衡时间（30 min）和较高的灵敏度（定量限为 0.04-0.22 pg/mL），显示出其在复杂样品中痕量多氯联苯高效富集和灵敏检测方面的应用潜力[5]。建立的灵敏检测方法可以为动物源性食品的安全风险监测、质量管控以及污染溯源提供可靠的技术支撑。

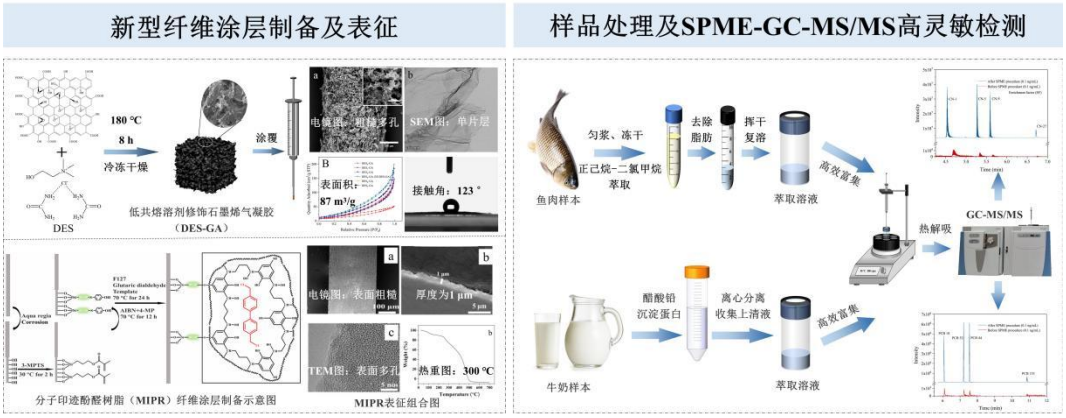


图 1 SPME-GC-MS/MS 法高灵敏检测动物源性食品中痕量卤代污染物

关键词：气相色谱-质谱联用；固相微萃取；新型纤维涂层；高灵敏检测；食品分析

参考文献

1.L. Yang, P. Li, L. Bai, J. Cao and H. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 480, 135989.
2.X. Li, P. Li, L. Wang, D. Han and H. Yan, *Chem. Eng. J.*,**2025**, 521, 167094.
3.P. Li, F. Zhang, H. Wang and H. Yan, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 27885-27893.
4.P. Li, Z. Wang, D. Han, Y. Han and H. Yan, *Talanta*, **2024**, 274: 125913.
5.S. Wang, P. Li, Y. Han, H. Liu and H. Yan, *Anal. Chim. Acta*, **2022**, 1227: 340328.

国家自然科学基金项目（82674726, 82373634）；河北大学创新团队计划项目（IT2023A06）资助.

Email: yanhy@hbu.edu.cn; Tel.: 0312-5079788

国产离子色谱-质谱联用关键技术与应用

刘莹[1]，谭江[2]，姚继军[2]，周江[1,*]

[1]北京大学化学与分子工程学院，北京市，中国，100871

[2]北京智科华质科学仪器有限公司，北京市，中国，100095

*zhoujiang@pku.edu.cn

离子色谱-质谱（IC-MS）联用技术是环境水体、土壤等复杂基质中强极性、水溶性有机污染物及无机离子精准检测的核心手段，在生态环境监测领域不可或缺。长期以来，我国该领域高端检测设备及核心联用技术高度依赖进口，存在设备成本高、适配性差、售后滞后、国产化配套体系不完善等问题，制约了环境污染物高通量、精准化、常态化监测工作的推进。

本文聚焦国产 IC-MS 联用系统的技术瓶颈，针对传统联用设备抑制器适配性差、基质抗干扰能力弱、检出限不足等痛点，优化离子色谱分离体系，发展国产超高压离子色谱，实现复杂环境样品中极性污染物的高效分离；改良色谱-质谱接口耦合结构，显著提升联用系统稳定性与灵敏度；搭建配套国产化数据解析软件，搭建了全套国产化 IC-MS/MS 检测平台。

依托国产 IC-MS，本文开展多场景环境应用验证，成功应用于饮用水中消毒副产物、草甘膦、极性农残、短链 PFAS 等典型新型污染物的定性定量检测，实现线性相关系数≥0.999，目标污染物检出限达到 ng/L 级别，精密度、回收率、重复性等关键指标均达到进口同类设备水平，可满足环境准检测要求。

本研究验证了国产设备在灵敏度、抗基质干扰能力等关键指标上的表现，为环境新型污染物精准监测提供国产化解决方案，助力我国环境监测设备国产化替代与生态环境检测技术标准化、智能化发展。

关键词：离子色谱-质谱联用，污染物监测，国产仪器

基于混合金属离子标记物信号放大的 COF 荧光阵列用于蜂蜜溯源及掺假鉴别

张涛[1]，李成辉[2]，侯贤灯[1,2*]
1. 四川大学化学学院&绿色化学与技术教育部重点实验室，成都，610064;
2. 四川大学分析测试中心，成都，610064

摘要：蜂蜜的产地溯源与掺假鉴别对于保障食品质量与真实性具有重要意义。然而，不同来源蜂蜜的化学组成具有较高相似性，且糖浆类掺假物与蜂蜜的主要糖类成分存在重叠，导致传统检测方法在复杂样品的精细区分方面仍面临挑战。本研究构建了一种基于混合金属离子信号放大的共价有机框架（COF）荧光阵列，结合机器学习实现洋槐蜜的产地溯源及糖浆掺假鉴别。通过筛选 Zn^{2+}、Te^{4+}、Al^{3+}、Ni^{2+} 和 Pd^{2+} 五种金属离子作为竞争性标记组分，并与四种具有不同荧光响应特征的 COF 材料相结合，利用金属离子、COF 与蜂蜜组分之间的相互作用调节荧光响应，增强不同蜂蜜样品间的响应差异，构建多维荧光指纹。进一步采用主成分分析（PCA）、线性判别分析（LDA）及 K 近邻（KNN）、偏最小二乘判别分析（PLS-DA）、支持向量机（SVM）和随机森林（RF）等方法进行数据分析与分类建模。实验结果表明，该阵列能够有效区分九种不同来源的洋槐蜜，并实现对五类掺假物的分类鉴别。引入混合金属离子标记后，四种监督学习模型在洋槐蜜产地分类中均达到 100% 的准确率。此外，该方法能够对不同掺假比例及混合糖浆掺假样品进行有效区分。综上，本研究通过混合金属离子介导的荧光响应调控与 COF 阵列的多维指纹识别相结合，提升了相似蜂蜜样品间的信号辨识能力，为蜂蜜产地溯源及糖浆掺假鉴别提供了一种具有应用潜力的分析策略。

关键词: 重金属标记；COF 荧光传感器阵列；蜂蜜溯源；掺假鉴别；机器学习.

参考文献

1.X. H. Zhang, H. W. Gu, R. J. Liu, X. D. Qing, J. F. Nie, A comprehensive review of the current trends and recent advancements on the authenticity of honey [J]. Food Chemistry: X, **2023**, 19.
2.D. Bose, M. Padmavati, Honey Authentication: A review of the issues and challenges associated with honey adulteration [J]. Food Bioscience, **2024**, 61.
3.A.P. Biswas, M. Tasnim, Ö. Süfer, S. C. Das, S. Sarker, M. Zhang, N. Islam, Honey adulteration detection: a comprehensive review of traditional and modern techniques [J]. Journal of Food Measurement and Characterization, **2026**.
4.J. Chen, W. Zeng, G. Wen, T. Lin, C. Li, X. Hou, Heavy metal marker-amplified recognition analysis: enhanced water body differentiation via carbon nanomaterial fluorescence and machine learning [J]. Analytica Chimica Acta, **2025**, 1380.
5.L. Wei, T. Sun, Z. Shi, Z. Xu, W. Wen, S. Jiang, Y. Zhao, Y. Ma, Y. B. Zhang, Guest-adaptive molecular sensing in a dynamic 3D covalent organic framework [J]. Nature Communications, **2022**, 13(1).

Xiandeng Hou email: houxd@scu.edu.cn, Tel: 85470818.

Mixed-Metal Labeling Signal Amplification-Enabled COF Fluorescence Array for Honey Provenance Traceability and Adulteration Identification

Tao Zhang [1], Chenghui Li [2], Xiandeng Hou [1,*]
1. Key Laboratory of Green Chemistry & Technology of MOE, College of Chemistry, Sichuan University, Chengdu 610064, China;
2. Analytical & Testing Center, Sichuan University, Chengdu 610064, China

ABSTRACT: Traceability of honey's origin and detection of adulteration are crucial for ensuring food quality and authenticity. However, the chemical compositions of honeys from different sources are highly similar, and syrup-based adulterants overlap with honey's primary sugar components, making it challenging for traditional detection methods to distinguish between complex samples with high precision. In this study, we developed a covalent organic framework (COF) fluorescence array based on the signal amplification of mixed metal ions, which, combined with machine learning, enables the traceability of acacia honey and the detection of syrup adulteration. By screening five metal ions—Zn^{2+}, Te^{4+}, Al^{3+}, Ni^{2+}, and Pd^{2+}—as competitive labeling components and combining them with four COF materials exhibiting distinct fluorescence response characteristics, the study utilized the interactions between metal ions, COFs, and honey components to modulate fluorescence responses, enhance the response differences among different honey samples, and construct multidimensional fluorescence fingerprints. We further employed Principal Component Analysis (PCA), Linear Discriminant Analysis (LDA), K-Nearest Neighbors (KNN), Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA), Support Vector Machines (SVM), and Random Forests (RF) for data analysis and classification modeling. The experimental results demonstrate that this array can effectively distinguish among nine types of acacia honey from different sources and classify five categories of adulterants. After introducing mixed metal ion labeling, all four supervised learning models achieved 100% accuracy in classifying the origin of acacia honey. Furthermore, this method can effectively distinguish between samples with different adulteration ratios and those adulterated with mixed syrups. In summary, by combining mixed-metal-ion-mediated fluorescence response modulation with multidimensional fingerprinting using COF arrays, this study enhances the ability to distinguish signals among similar honey samples, providing an analytical strategy with practical application potential for tracing honey origins and detecting syrup adulteration.

KEY WORDS: Heavy metal detection; COF fluorescent sensor array; honey traceability; adulteration detection; machine learning.

REFERENCES

1. X. H. Zhang, H. W. Gu, R. J. Liu, X. D. Qing, J. F. Nie, A comprehensive review of the current trends and recent advancements on the authenticity of honey [J]. Food Chemistry: X, **2023**, 19.
2. D. Bose, M. Padmavati, Honey Authentication: A review of the issues and challenges associated with honey adulteration [J]. Food Bioscience, **2024**, 61.
3. A.P. Biswas, M. Tasnim, Ö. Süfer, S. C. Das, S. Sarker, M. Zhang, N. Islam, Honey adulteration detection: a comprehensive review of traditional and modern techniques [J].

Xiandeng Hou email: houxd@scu.edu.cn, Tel: 85470818.

Journal of Food Measurement and Characterization, **2026**.
4. J. Chen, W. Zeng, G. Wen, T. Lin, C. Li, X. Hou, Heavy metal marker-amplified recognition analysis: enhanced water body differentiation via carbon nanomaterial fluorescence and machine learning [J]. Analytica Chimica Acta, **2025**, 1380.
5. L. Wei, T. Sun, Z. Shi, Z. Xu, W. Wen, S. Jiang, Y. Zhao, Y. Ma, Y. B. Zhang, Guest-adaptive molecular sensing in a dynamic 3D covalent organic framework [J]. Nature Communications, **2022**, 13(1).

基于加速器质谱技术的$^{10}Be/^{7}Be$比值示踪平流层入侵研究

刘许柯[1]，付云翀[1*]，周卫健[1]

1. 中国科学院地球环境研究所 黄土科学全国重点实验室，陕西 西安 710061

摘 要 平流层侵入会导致大气化学、热平衡和辐射平衡的快速变化。从地面痕量物质中明确识别的入侵事件并量化入侵强度是目前全面评估平流层入侵影响的瓶颈。主要在平流层中产生的超痕量宇宙成因 ^{10}Be 与 ^{7}Be 的比值具备在地面上示踪平流层气团的潜力，但这种方法尚未得到明确证实。在这里，我们使用最先进的加速器质谱技术，从中国西安的雨水和气溶胶中构建了具有每日分辨率的 $^{10}Be/^{7}Be$ 时间序列（2020 年 7 月至 2021 年 9 月）。分析结果表明，正如所期望的那样，平流层侵入物会导致 $^{10}Be/^{7}Be$ 比值突然增加，尤其是在夏季。这些 $^{10}Be/^{7}Be$ 比值在 2021 年夏季的 5 月 9 日达到年度最高值，约为 3.3（比年平均值高出约 2 倍）。同期还发生了严重的臭氧污染，超过了中国的空气质量标准（>200μg/m^3）。现场污染物测量、再分析数据、气象建模和箱式模型计算支持 $^{10}Be/^{7}Be$ 比值增加的平流层起源，并将其确定为量化入侵强度的一种手段。其中，该事件的发生主要是由于亚洲夏季风形成的反气旋驱动深层对流，形成与臭氧增加相关的深层平流层入侵事件。进一步的测试表明，$^{10}Be/^{7}Be$ 对探测西安冬季弱高层大气入侵具有足够的灵敏度。

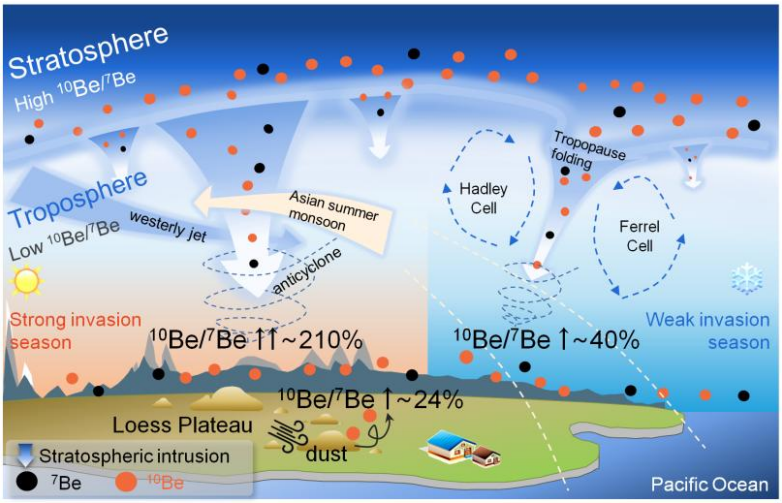


图1 平流层入侵事件期间$^{10}Be/^{7}Be$比值路径示意图。

Xiandeng Hou email: houxd@scu.edu.cn, Tel: 85470818.

基于液相色谱-串联质谱技术的预制食品中有机磷酸酯污染监测与人群暴露评估

孙明浩[1]，施致雄[1,*]
1．首都医科大学公共卫生学院

摘要：有机磷酸酯（organophosphate esters, OPEs）是一类广泛应用于塑料制品、电子电气产品、建筑材料以及食品包装材料中的添加型阻燃剂和增塑剂。大量研究发现 OPEs 已成为环境介质和人体样本中广泛存在的新兴污染物。此外，OPEs 在环境和生物体内可进一步发生降解、转化或代谢，形成有机磷酸酯代谢产物（mOPEs），进一步增加了人群暴露风险。膳食摄入是普通人群暴露 OPEs/mOPEs 的重要途径。然而，目前关于预制食品，尤其是预制菜及其食品接触材料中 OPEs/mOPEs 污染水平、迁移规律及人群膳食暴露风险的研究仍较为有限。基于此，本研究以预制菜及其包装材料为研究对象，开展 OPEs/mOPEs 污染监测、迁移规律研究及人群膳食暴露评估。首先建立食品基质中 OPEs/mOPEs 的高效检测方法。采用冷冻诱导相分离技术结合高效液相色谱-串联质谱（HPLC-MS/MS）方法，实现食品样品中多种 OPEs/mOPEs 的同时提取、净化和检测。在污染水平调查方面，采集 347 份市售预制菜样品，覆盖不同品牌和来源，按照实际食用状态进行样品处理，并检测其中 28 种 OPEs 和 13 种 mOPEs 的含量。结合北京居民膳食消费数据和体重数据，计算居民经食用预制菜摄入 OPEs/mOPEs 的每日摄入量（estimated daily intake, EDI），并与已有健康指导值进行比较，评估潜在健康风险。同时选取聚丙烯（PP）、聚乙烯（PE）、三聚氰胺甲醛树脂、聚乳酸以及稻壳纤维等不同类型包装材料，在模拟食品接触条件下开展迁移实验，分析 OPEs/mOPEs 从包装材料向食品体系中的释放迁移特征。比较加热前后 OPEs/mOPEs 污染水平变化，探讨加热过程对污染物迁移释放的影响。结果显示，所建立的检测方法具有良好的分析性能。目标化合物在 0.1~100.0 ng/mL 范围内呈现良好线性，相关系数均大于 0.9993；加标实验中平均回收率为 82.6%~115.9%，相对标准偏差低于 15.9%，表明该方法具有较高准确性和稳定性，能够满足大批量食品样品中痕量 OPEs/mOPEs 检测需求。347 份预制菜样品检测结果显示，OPEs 和 mOPEs 在预制菜中均有不同程度检出，其中 OPEs 总浓度范围为 1.05~115.23 ng/g（湿重，wet weight, ww），几何均值为 9.10 ng/g ww；mOPEs 总浓度范围为 0.10~7.82 ng/g ww，几何均值为 1.19 ng/g ww。与生鲜食品相比，预制菜中 OPEs 污染水平显著升高，提示食品加工过程及包装接触过程可能导致额外污染。主要检出物质与其在食品包装材料中的广泛应用特征相一致。包装迁移实验结果表明，不同类型包装材料均可检测到 OPEs 迁移现象，且迁移物组成与预制菜样品中主要污染物高度一致，进一步支持食品包装材料是预制菜 OPEs 污染的重要来源。加热实验发现，预制菜带包装加热后总 OPEs 浓度由加热前的 8.86 ng/g ww 升高至 9.81 ng/g ww，提示加热过程可能促进部分 OPEs 由包装材料向食品迁移。膳食暴露评估结果显示，北京居民通过食用预制菜摄入 OPEs 和 mOPEs 的水平低于现有健康指导值，整体健康风险处于较低水平。然而，由于部分 OPEs 及全部 mOPEs 尚缺乏充分毒理学数据，其长期暴露风险仍需进一步关注。综上，本研究建立了一种适用于食品基质中痕量 OPEs/mOPEs 检测的分析方法，揭示了预制菜及其包装材料中 OPEs/mOPEs 污染水平、组成特征及迁移规律，明确了食品包装材料在预制菜污染形成过程中的潜在作用，并评价了居民经膳食摄入 OPEs/mOPEs 的暴露水平。为预制菜食品安全监管、包装材料优化以及相关风险管理措施制定提供依据。

关键词：有机磷酸酯；预制菜；食品包装材料；暴露评估；食品安全

参考文献

1.J. X. Wu, S. Y. Yao, Y. W. Wang, et al., *Anal. Bioanal. Chem*., 2024, 416(28):6663-6677.

szx0127@ccmu.edu.cn, 010-83911775

Surveillance of organophosphate ester in pre-prepared dishes based on LC-MS/MS and human exposure assessment

Minghao Sun[1], Zhixiong Shi[1,*]

1. School of Public Health, Capital Medical University, Beijing 100069, China

ABSTRACT: Organophosphate esters (OPEs) are widely used as flame retardants and plasticizers in plastics, packaging materials, and other consumer products. Due to their extensive application, OPEs have become emerging contaminants of concern. Prepared dishes may present potential risks because of long-term contact with packaging materials and heating before consumption. This study aimed to establish an analytical method for the determination of OPEs and their metabolites (mOPEs) in food matrices, characterize contamination levels in pre-prepared dishes and packaging materials, investigate migration behaviors, and assess dietary exposure among the population. A freeze-induced separation pretreatment method coupled with high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry (HPLC-MS/MS) was developed for the simultaneous extraction, purification, and quantification of OPEs/mOPEs in food samples. A total of 347 commercially available prepared dish samples were collected and analyzed for 28 OPEs and 13 mOPEs. Dietary exposure was estimated using measured concentrations combined with dietary consumption data of Beijing residents. In addition, migration experiments were conducted using polypropylene, polyethylene, melamine-formaldehyde resin, polylactic acid, and rice-husk-fiber-based packaging materials under simulated food contact conditions. The effects of heating prepared dishes in their original packaging on OPEs/mOPEs contamination were also evaluated. The established analytical method showed satisfactory linearity, recovery, precision, and sensitivity, and was suitable for large-scale analysis of food samples. OPEs and mOPEs were widely detected in pre-prepared dishes. The total concentrations of OPEs ranged from 1.05 to 115.23 ng/g wet weight (ww), with a geometric mean of 9.10 ng/g ww, while total mOPEs ranged from 0.10 to 7.82 ng/g ww, with a geometric mean of 1.19 ng/g ww. Compared with fresh foods, pre-prepared dishes showed significantly higher OPEs contamination levels, suggesting that food processing and packaging may introduce additional contamination. Migration experiments demonstrated that different packaging materials could release OPEs into food simulants, and the major migrated compounds were consistent with those detected in pre-prepared dishes. Heating in packaging increased overall OPEs levels in some samples, indicating enhanced migration under heating conditions. Dietary exposure assessment suggested that OPEs/mOPEs exposure through pre-prepared dishes among Beijing residents was below existing health guidance values, although continued attention is required due to limited toxicological information for many compounds. This study established a reliable analytical approach for detection of OPEs/mOPEs in food matrices and systematically characterized contamination profiles, migration patterns, and dietary exposure risks associated with prepared dishes. The findings highlight the importance of incorporating food contact materials into the risk assessment framework for emerging food contaminants.

KEY WORDS: Organophosphate esters; Prepared dishes; Food packaging materials; Exposure assessment; Food safety

REFERENCES

1. J. X. Wu, S. Y. Yao, Y. W. Wang, et al., Anal. Bioanal. Chem., 2024, 416(28):6663-6677.

szx0127@ccmu.edu.cn, 010-83911775

氪同位素的多接收电感耦合等离子体质谱测量技术研究进展

梁超纬, 徐江*，李志明，席瑞阳，汪伟，李萌，王亚龙，关业栋，张鹏飞
西北核技术研究所，西安，710024

氪（Kr）同位素分析在核燃料循环监测与核活动识别中具有重要示踪价值。稳定 Kr 同位素（^{82}Kr、^{83}Kr、^{84}Kr 和 ^{86}Kr）产额对前体核种类与中子能谱硬度高度敏感，其同位素比值（^{83}Kr/^{84}Kr 与 ^{86}Kr/^{84}Kr）与核燃料燃耗呈近似线性关系，可作为燃耗深度的可靠指标。但准确判断燃耗的精密度要求较高，比如，为实现±3 GWd/tU 燃耗分辨能力（相对变化约 0.95%），同位素比值测量的相对标准偏差（RSD）需优于 0.1%[1, 2]。

传统静态气体质谱法能实现 Kr 同位素比值的高精密度分析，但其前处理流程（气体分离、纯化等）耗时较长，且每次仅能处理单个样品，难以满足大规模环境监测（如大气示踪、核环境安全监控等）对高通量、低成本的需求。相比之下，多接收电感耦合等离子体质谱（MC-ICP-MS）凭借高通量与高灵敏度优势，具备成为稳定氪同位素分析的重要技术手段的潜力。当前，该方法在测定稳定氪同位素时尚面临两大挑战：其一，Kr 的第一电离能较高（14eV），在氩等离子体中电离效率较低，导致信号强度低、精密度受限；其二，氩等离子体产生的强干扰复合离子 $^{40}Ar_2^+$，在高灵敏度条件下极易超档，进而引发法拉第杯饱和基线抬高、强峰拖尾及空间电荷效应，严重干扰相临质量同位素的准确测定。

为解决上述问题，本研究提出并建立了一种基于物理偏移法拉第杯的新型干扰抑制策略。具体而言，利用 Neptune XT 型 MC-ICP-MS 平台，将对应 m/z = 80 的法拉第杯机械移出离子束路径，从而在不依赖反应池或复杂校正模型的前提下，直接阻止大量的 $^{40}Ar_2^+$离子流进入检测系统。该方法可在保障仪器安全的同时，允许系统在高灵敏度模式下稳定运行，显著提升了 Kr 同位素信号强度与信噪比，进而有效改善了测量结果的精密度。

在连续 7 天内采用标准样品交叉法穿插测定 6 次 Kr 质控标样，结果显示：^{82}Kr/^{84}Kr 与 ^{86}Kr/^{84}Kr 的测量精密度分别为 0.0186%和 0.0184%，^{83}Kr/^{84}Kr 的测量精密度为 0.0239%。其校正值与静态气体质谱的校正值在不确定度范围内一致。应用该方法分析环境空气本底样品，西安样品的 ^{82}Kr/^{84}Kr、^{83}Kr/^{84}Kr 和 ^{86}Kr/^{84}Kr 校正值分别为 0.20345、0.20176 和 0.30314，新疆样品分别为 0.20320、0.20163 和 0.30349。两地同位素比值相对偏差显著：^{82}Kr/^{84}Kr 偏差为 0.123%，^{86}Kr/^{84}Kr 为-0.117%，均超过测量精密度的 4 倍以上，表明西安与新疆大气存在可鉴别的 Kr 同位素差异。结合采样环境分析，推断该差异可能源于新疆天山地区深部地质脱气释放富 ^{86}Kr 的深源气体[5]，以及西安地区受快速大气环流影响更接近全球平均分布。尽管目前尚无法准确识别核源项，但该技术在核燃料燃耗判断与溯源方面展现出良好的应用潜力。

关键词: 氪同位素分析；稀有气体；多接收电感耦合等离子质谱.

参考文献（5 篇以内）

1.张小枝, 刘大鸣, 李金英, 等. 核化学与放射化学, 2004, 26(4): 198-203
2.AREGBE Y, VALKIERS S, MAYER K, et al. ELSEVIER SCIENCE BV, 1996, 153(5): L1-L5
3.李萌, 关业栋, 李志明, 等. 现代应用物理, 2024, 15(06): 060801.
4.汪伟, 席瑞阳, 郭思琪, 等. 分析测试学报, 2023, 42(04): 473-479.
5.William K. Eymold, Talor B. Walsh, Joachim Moortgat, et al. Applied Geochemistry, 2021,129: 104954

xujiang@nint.ac.cn

毛细管电色谱/固相微萃取-质谱技术及其药物分析应用

陈子林*

武汉大学/武汉纺织大学

E-mail：chenzl@whu.edu.cn

质谱是生物医药分析及临床检验中 powerful 的分析技术。毛细管电泳/电色谱-质谱联用技术是结合了毛细管电泳/电色谱的高选择性与高效分离与质谱高灵敏度与强结构解析能力两者优点的联用技术。本报告拟介绍本课题组近年来开展毛细管电色谱/固相微萃取-质谱联用技术及其在药物分析和临床检测中应用研究最新进展，内容包括两个部分：（1）毛细管电色谱-质谱技术及其在中药分析中应用，（2）固相微萃取-纸基毛细管喷雾（PCS）-小质谱技术及其在抗肿瘤药物临床血药浓度快速检测中应用。

关键词：液相色谱-质谱，毛细管电色谱-质谱，生物医药分析，临床检测，中药分析

参考文献：

1.Y. Liu, W. Zhou, W. Sun, Z. Chen*, **J. Chromatogr. A,** 2021, 1645:462123.

2.Y. Liu, W. Zhou, Z. Mao, Z. Chen*, **J. Chromatogr. A**, 2019, 1602: 474-480.

3.Z. Li, Z. Chen*, **J. Pharm. Anal.,** to be published (under review of revised manuscript).

致谢：国家自然科学基金项目（81872828，82073803，882273885）资助

质谱分析样品前处理

COF基SPME-敞开式质谱联用检测全氟化合物

冉旭芹[1]，毛倩颖[1]，钱海龙[1,*]，严秀平
1. 江南大学食品学院，无锡 214122

建立快速、高灵敏的全氟烷基化合物（PFAS）分析方法，是有效管控PFAS环境污染的关键前提。然而，环境样品中PFAS通常处于极低浓度水平，且共存基质复杂，严重制约了分析方法的性能提升。针对上述瓶颈，本研究设计制备了多种功能化二维及三维共价有机骨架（COFs）材料，将其涂覆于固相微萃取（SPME）探针，并与敞开式质谱在线联用（SPME-AMS）。该策略融合了COFs材料优异的分子识别能力与SPME-AMS技术免色谱分离、可在线洗脱的独特优势，实现了复杂环境基质中PFAS的快速、高灵敏测定。研究系统优化了COFs及其SPME探针的制备参数，评价了不同COFs对PFAS的吸附行为，揭示了其选择性富集机理，并据此筛选出对目标PFAS具有最佳萃取性能的COFs材料。在此基础上，建立了基于COFs-SPME-AMS联用的分析新方法，并成功应用于不同类型环境样品中PFAS的定量分析。该工作不仅拓宽了PFAS吸附材料的种类选择，也为PFAS高效分析提供了技术支撑，同时推动了功能化COFs材料在环境分析化学中的实际应用。

关键词：共价有机骨架，固相微萃取，敞开质谱，全氟烷基化合物分.

参考文献

1. H. M. El-Kaderi, J. R. Hunt, O. M. Yaghi et al., *Science*, **2007**, 316, 268-272.
2. B. Gui, G. Lin, H. Ding et al., *Acc. Chem. Res.*, **2020**, 53, 2225-2234.
3. Q. Mao, H. Qian, X. Yan et al., *Anal. Chem.,* **2025**, 97, 11, 6312–6319.
4. X. Ran, C. Yang, X. Yan et al., *J. Mater. Chem. A,* **2025**, 13, 13825-13831.

Corresponding author email: hlqian@jiangnan.edu.cn, Tel. 17851308879

COF-Based SPME Coupled with Ambient Mass Spectrometry for PFAS Detection

Xu-Qin Ran[1], Qian-Ying Mao[1], **Hai-Long Qian**[1,*]
1. School of Food Science and Technology, Jiangnan University, Wuxi, 214122, China_

ABSTRACT: Rapid and sensitive analysis of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) is critical for pollution control, yet their trace levels and matrix interferences in environmental samples remain major obstacles. To address this, we synthesized functionalized 2D and 3D covalent organic frameworks (COFs) as solid-phase microextraction (SPME) coatings, coupled with ambient mass spectrometry (SPME-AMS). This combination leverages COFs' molecular recognition and SPME-AMS's chromatography-free, online-desorption capabilities for rapid, sensitive PFAS detection in complex matrices. Preparation parameters and adsorption behaviors were systematically optimized to elucidate the enrichment mechanism and identify the most efficient COFs. A novel COF-SPME-AMS method was established and successfully applied to PFAS quantification in various environmental samples. This work expands PFAS adsorbent options, provides technical support for efficient analysis, and promotes functionalized COFs in environmental chemistry.

KEY WORDS: Covalent organic frameworks, Solid-phase microextraction, Ambient mass spectrometry, Perfluoroalkyl substances.

REFERENCES (Word Style "Times New Roman", size 10.5).

1.1. H. M. El-Kaderi, J. R. Hunt, O. M. Yaghi et al., *Science*, **2007**, 316, 268-272.

2.B. Gui, G. Lin, H. Ding et al., *Acc. Chem. Res.*, **2020**, 53, 2225-2234.

3.Q. Mao, H. Qian, X. Yan et al., *Anal. Chem.,* **2025**, 97, 11, 6312–6319.

4.X. Ran, C. Yang, X. Yan et al., *J. Mater. Chem. A,* **2025**, 13, 13825-13831.

Corresponding author email: hlqian@jiangnan.edu.cn, Tel. 17851308879

分子印迹-缺陷 MOFs 固相萃取-色谱-质谱分析食品中的真菌毒素

孙世蓉[1]，刘璐[1]，吴文舒[2]，王磊磊[2]，赵汝松[1,*]
1. 齐鲁工业大学（山东省科学院） 山东省分析测试中心
2. 齐鲁工业大学（山东省科学院） 山东省科学院生态研究所

食品中真菌毒素的快速精准分析面临着样品基质复杂、目标物浓度低、干扰严重等挑战。本课题根据真菌毒素的结构特征，设计制备了系列选择性强和吸附性能高的分子印迹-缺陷金属有机框架材料（MI-dMOFs），作为新型吸附剂用于固相萃取；建立了多种基于MI-dMOFs真菌毒素的固相萃取方法，并应用于实际食品样品中真菌毒素的灵敏分析。本项目既是对MI-dMOFs功能的新探索，也是发现真菌毒素高效吸附剂的一种新途径，这对于真菌毒素的样品预处理和分析有重要意义。

关键词：固相萃取；样品预处理；真菌毒素

参考文献

1.S-R Sun, L Liu, X Wang, Y Dong, Y Li, Q Sun, Y Zhao, X Chen, Y-N Wu, R Boukherroub, R-S Zhao，*J Hazard Mater*, **2026**, 60, 142277
2.Z-J Ji, L-L Wang, X-L Wang, L Liu, X Wang, R-S Zhao, *ACS Food Sci Techno*, **2026**, 6, 1776–1785
3.S-R Sun, Q Sun, F Liu, Y Zhao, X-L Wang, H Jiang, N Li, Y Wu, L Liu, R-S Zhao，*J Agric Food Chem*, 2024, 72, 22327-22335
4.Q-B Fu, X Sun, L Liu, R-S Zhao, X Wang, *J Agric Food Chem*, 2025, 73, 25103-25127

Jialinliu_bprc@163.com, 13889707508.

功能有机框架材料富集分析卤代有机污染物及其机理研究

姜海龙*，刘红燕，赵汝松

齐鲁工业大学，山东 济南 250353

氟化液晶单体（FLCMs）、新型溴代阻燃剂（NBFRs）等卤代有机污染物具备生物累积性、长距离迁移及高毒性等特征，对生态环境与人体健康存在潜在危害，实现该类污染物的精准监测与早期预警具有重要现实意义。但环境基质复杂、目标物种类多且含量处于痕量水平，给其定性定量分析带来极大困难，开发高性能样品前处理吸附材料是解决该难题的关键。共价有机框架（COFs）因比表面积大、理化稳定性优异、易于功能化改性等优势，在样品前处理领域拥有良好应用前景。本研究分别采用氟化修饰与缺陷工程策略，构建系列功能化 COFs 萃取材料，结合气相色谱-串联质谱（GC-MS/MS），建立针对 FLCMs 与 NBFRs 的痕量分析方法。

首先基于氟-氟特异性相互作用，开展氟化 COFs 的设计合成，实现对 FLCMs 的高选择性萃取。以对苯二甲醛及其氟化衍生物作为配体制备 3 种氟化程度差异化的 COFs（EtTp-COF、EtDf-COF、EtTf-COF），经吸附动力学、热力学性能筛选得到最优材料 EtDf-COF，构建磁固相萃取-GC-MS/MS（MSPE-GC-MS/MS）分析方法。该方法萃取时间仅 8 min，检出限可达 0.3 ng/L，操作简便快速；将其应用于渤海、黄海、东海、南海海水样品检测，在东海、南海检出 FLCMs，推测污染来源与沿岸电子制造产业密切相关。此外，利用缺陷工程策略调控 COFs 孔道结构与比表面积，实现对 NBFRs 的高效富集。以 Br-COF 为基础，调控配体比例制备不同缺陷水平的 Br-COF-10、Br-COF-30、Br-COF-50，结合材料表征与性能评估筛选出 Br-COF-10，制备固相微萃取（SPME）涂层纤维，建立 SPME-GC-MS/MS 检测方法。该方法富集倍数高于 6000 倍，检出限低至 0.116 ng/L，可用于环境水体及食品样品中 NBFRs 分析；该涂层萃取性能为商用纤维的 2.72~157.81 倍，具备潜在商业化价值。本研究为卤代有机污染物的痕量检测提供新型技术手段，也为高性能 COFs 萃取材料的定向设计与制备提供理论依据。

* 通讯作者. E-mail: j05hx121@126.com; Tel: 18615542502
Jialinliu_bprc@163.com, 13889707508.

化学标记驱动的蛋白质糖基化定量解码与功能解析

刘嘉琳 [1,*]

1. 国家蛋白质科学中心（北京），北京市昌平区生命科学园路 38 号，102206

糖基化是重要的蛋白质翻译后修饰与信息编码层，其动态变化广泛参与生命过程调控。精准解析糖基化的动态变化，是解码其生物学功能的关键。围绕这一问题，我们建立了融合化学标记、质谱分析与定量解码的化学糖蛋白质组学技术体系。

通过化学酶法标记、同位素编码探针与靶向串级质谱，实现了 O-GlcNAc 修饰的深度鉴定和精准定量，揭示其在细胞周期和肿瘤进展中的动态重塑与调控机制。通过建立 Click-iG 技术，实现 N-糖基化、O-GalNAc 糖基化和 O-GlcNAc 修饰完整糖肽的同步解析；进一步发展完整糖肽定量软件 i-CIQ，提升了定量覆盖度与准确性，揭示了纤连蛋白核心岩藻糖基化在细胞分化中的动态变化与调控作用。此外，我们将糖蛋白质组学与结构生物学及功能实验相结合，揭示 MFSD6 受体的 N-聚糖与末端唾液酸化糖链协同识别病毒衣壳、触发肠道病毒 D68 解壳与入侵的新机制。上述研究贯通了特定糖型深度解析、多类型糖基化综合解码与功能机制阐释，为系统刻画糖基化动态、揭示其生物学功能提供了新的研究路径。

关键词：糖基化；质谱组学；化学标记.

参考文献（5 篇以内）

1.**Liu, J. #,** Hao, Y. #, He, Y., Li, X., Sun, D., Zhang, Y., Yang, P., Chen, X. Site-Specific Profiling of Protein O-GlcNAcylation in the Cell Cycle. *ACS Chem. Biol.* **2021,** 16, 10, 1917–1923

2.**Liu, J. #,** Hao, Y. #,*, Wang, C. #, Jin, Y., Yang, Y., Gu, G., Chen, X. Isotope-tagged photocleavable linker-assisted quantitative profiling of O-GlcNAcylation sites in primary and metastatic colorectal cancer cells. *ACS Chem. Biol.* **2022,** 17, 3, 513–520

3.**Liu, J.,** Fan, X., Cheng, B., Zhou, X., Zhou, W., Wang, J., Yang, P., Chen, X. Click-iG: Simultaneous Enrichment and Profiling of Intact N-linked, O-linked, and O-GlcNAcylated Glycopeptides. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023,** 62, e202303410

4.Meng, X.#, Zhou, Y.#, Xu, L., Hu, L., Wang, C., Tian, X., Zhang, X., Hao, Y., Cheng, B., Ma, J.*, Wang, L.*, **Liu, J.*** & Xie, R.* O-GlcNAcylation Facilitates the Interaction between Keratin 18 and Isocitrate Dehydrogenases and Potentially Influencing Cholangiocarcinoma Progression. *ACS Cent. Sci.* **2024,** 10, 1065-1083.

5.Liang, S.#, Guo, H.#, Xu, Z.#, Liu, Z.#, Wei, Z., Hou, J., Yang, W., Huang, W., Wang, W., Li, J., Qian, H., Ma, W., Deng, Z., Wang, Y.*, **Liu, J.*,** Rao, Z.*, Wei, W.*, & Lou, Z.* A dual-receptor checkpoint primes enterovirus D68 for respiratory cell entry. *Nat. Commun.* **2026,** 17(1), 8970.

Jialinliu_bprc@163.com, 13889707508.

Chemical Labeling-Driven Quantitative Decoding and Functional Characterization of Protein Glycosylation

Jialin Liu[1,*]

1. National Center for Protein Sciences (Beijing), 38 Life Science Park Road, Changping District, Beijing, 102206, China

ABSTRACT: Protein glycosylation broadly regulates biological processes, yet its structural diversity and dynamic remodeling complicate quantitative and functional analysis. We established a chemical glycoproteomics framework integrating chemical labeling, mass spectrometry, and quantitative decoding. Chemoenzymatic labeling, isotope-coded probes, and targeted multistage tandem mass spectrometry enabled deep, site-specific quantification of O-GlcNAcylation, revealing its remodeling during cell-cycle progression and tumor progression. Click-iG enabled simultaneous profiling of intact N-linked, O-GalNAc, and O-GlcNAcylated glycopeptides. We then developed i-CIQ, purpose-built software for quantitative chemical glycoproteomics, improving intact-glycopeptide coverage and accuracy and revealing dynamic changes in fibronectin core fucosylation and its role in cell differentiation. Integrating glycoproteomics with structural and functional analyses uncovered how the N-glycan and terminal sialylated glycan on MFSD6 cooperatively engage the viral capsid to trigger enterovirus D68 uncoating and entry. Together, these studies connect glycosylation-specific profiling, multi-class quantitative decoding, and mechanistic discovery, providing a framework for resolving glycosylation dynamics and biological function.

KEY WORDS: Glycosylation; Mass Spectrometry; Chemical Labeling;

REFERENCES (Word Style "Times New Roman", size 10.5).

1. **Liu, J. #,** Hao, Y. #, He, Y., Li, X., Sun, D., Zhang, Y., Yang, P., Chen, X. Site-Specific Profiling of Protein O-GlcNAcylation in the Cell Cycle. *ACS Chem. Biol.* **2021,** 16, 10, 1917–1923
2. **Liu, J. #,** Hao, Y. #,*, Wang, C. #, Jin, Y., Yang, Y., Gu, G., Chen, X. Isotope-tagged photocleavable linker-assisted quantitative profiling of O-GlcNAcylation sites in primary and metastatic colorectal cancer cells. *ACS Chem. Biol.* **2022,** 17, 3, 513–520
3. **Liu, J.,** Fan, X., Cheng, B., Zhou, X., Zhou, W., Wang, J., Yang, P., Chen, X. Click-iG: Simultaneous Enrichment and Profiling of Intact N-linked, O-linked, and O-GlcNAcylated Glycopeptides. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023,** 62, e202303410
4. Meng, X.#, Zhou, Y.#, Xu, L., Hu, L., Wang, C., Tian, X., Zhang, X., Hao, Y., Cheng, B., Ma, J.*, Wang, L.*, **Liu, J.*** & Xie, R.* O-GlcNAcylation Facilitates the Interaction between Keratin 18 and Isocitrate Dehydrogenases and Potentially Influencing Cholangiocarcinoma Progression. *ACS Cent. Sci.* **2024,** 10, 1065-1083.

Liang, S.#, Guo, H.#, Xu, Z.#, Liu, Z.#, Wei, Z., Hou, J., Yang, W., Huang, W., Wang, W., Li, J., Qian, H., Ma, W., Deng, Z., Wang, Y.*, **Liu, J.*,** Rao, Z.*, Wei, W.*, & Lou, Z.* A dual-receptor checkpoint primes enterovirus D68 for respiratory cell entry. *Nat. Commun.* **2026,** 17(1), 8970.

Jialinliu_bprc@163.com, 13889707508.

基于 ICP-MS 的磁性固相萃取前处理技术和微量元素可视化表征方法

王意 [1*]
1. 天津大学 分析测试中心，天津 300072

摘要：电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）凭借检出限低、分析速度快、可多元素同时测定等优势，已成为无机元素痕量分析的核心技术；激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）可实现固体样品中微量元素原位分布可视化表征。针对复杂环境水样中很痕量重金属元素难以准确定量的问题，本报告介绍了团队近年来在功能化磁性固相萃取（MSPE）纳米吸附材料方面的相关研究工作：开展多种功能化磁性纳米吸附材料的制备与系统表征，探究材料对重金属离子的吸附行为与作用机理，建立 MSPE-ICP-MS 分析方法，并用于环境水样的真实测定，方法准确度与重现性良好。

同时对 LA-ICP-MS 微量元素成像分析方法进行探索，该技术可获得固体组织、材料表面微量元素的二维分布成像，为元素空间分布解析提供技术路径。本报告介绍了近两年天津大学大型仪器平台以 LA-ICP-MS 支撑生物医药、微电子、地球科学等研究领域的典型应用案例，以实际应用场景，促进该原位表征技术在多学科领域的推广，推动跨学科元素分析研究工作的高效开展。

关键词：磁性固相萃取，电感耦合等离子体质谱，激光剥蚀，重金属吸附.

参考文献（5 篇以内）

1.Y. Wang, G. Ding, K. Lin, Y. Liu, X. Deng, Q. Li, Facile one-pot synthesis of ultrathin carbon layer encapsulated magnetite nanoparticle and graphene oxide nanocomposite for efficient removal of metal ions, SEP. PURIF. TECHNOL., 266(2021).

2.Nanocomposites of functionalized Metal-Organic frameworks and magnetic graphene oxide for selective adsorption and efficient determination of Lead(II), J. SOLID STATE CHEM., 313(2022).

3.X. Wang, C. Wu, K. Lin, X. Ma, Y. Wang, F. Tian, Polydopamine (PDA) functionalized ultrathin carbon layer encapsulated magnetite nanoparticle and graphene oxide (Fe3O4@C-GO@PDA) as recyclable and stable nanoadsorbent for enhanced removal of metal ions, Results in Chemistry, 17(2025) 102579.

4.王意,邹昊彤,薛涛,等.基于磁性金属有机骨架材料的固相萃取电感耦合等离子体质谱法测定环境水中的重金属元素[J].分析试验室, 2024, 43(04): 476-481.

yi.wang@tju.edu.cn, 18522955027.

Magnetic Solid- Phase Extraction Pretreatment Technology and Visualization Characterization Method of Trace Elements Based on ICP- MS

Wang Yi[1,*]

1. Analysis and Testing Center，Tianjin University，Tianjin 300072，China

ABSTRACT: Inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP MS) has become a core technique for trace inorganic elemental analysis owing to its advantages including low detection limit, fast analysis speed and simultaneous multi-element determination. Laser ablation inductively coupled plasma mass spectrometry (LA-ICP-MS) enables the visualization characterization of in situ trace element distribution in solid samples. Aiming at the challenge that trace heavy metal elements in complex environmental water samples are difficult to be accurately quantified, this report presents recent research on functional magnetic solid phase extraction (MSPE) nano-adsorbents developed by our team. A variety of functional magnetic nano-adsorbents were synthesized and systematically characterized. The adsorption behaviors and interaction mechanisms toward heavy metal ions were investigated. An MSPE-ICP-MS analytical method was established and applied to environmental water sample measurement, which exhibits favorable accuracy and repeatability.

The LA-ICP-MS technique for trace element imaging was explored. This technique can acquire two dimensional distribution images of trace elements in solid tissues and on material surfaces, providing a technical route for the analysis of elemental spatial distribution. Typical application cases supported by LA-ICP-MS from the Large-scale Instrument Platform of Tianjin University is introduced. Over the past two years, applications in biomedicine, microelectronics, geoscience and other research fields have been realized. Sharing these application cases helps advance this in-situ elemental characterization technology.

KEY WORDS: magnetic solid phase extraction; inductively coupled plasma mass spectrometry; laser ablation; heavy metal adsorption

REFERENCES (Word Style “Times New Roman”, size 10.5).

1. Y. Wang, G. Ding, K. Lin, Y. Liu, X. Deng, Q. Li, Facile one-pot synthesis of ultrathin carbon layer encapsulated magnetite nanoparticle and graphene oxide nanocomposite for efficient removal of metal ions, SEP. PURIF. TECHNOL., 266(2021).
2. Nanocomposites of functionalized Metal-Organic frameworks and magnetic graphene oxide for selective adsorption and efficient determination of Lead(II), J. SOLID STATE CHEM., 313(2022).
3. X. Wang, C. Wu, K. Lin, X. Ma, Y. Wang, F. Tian, Polydopamine (PDA) functionalized ultrathin carbon layer encapsulated magnetite nanoparticle and graphene oxide (Fe3O4@C-GO@PDA) as recyclable and stable nanoadsorbent for enhanced removal of metal ions, Results in Chemistry, 17(2025) 102579.
4. 王意,邹昊彤,薛涛,等.基于磁性金属有机骨架材料的固相萃取电感耦合等离子体质谱法测定环境水中的重金属元素[J].分析试验室, 2024, 43(04): 476-481.

yi.wang@tju.edu.cn, 18522955027.

基于超亲水印迹材料的痕量有机污染物精准萃取-质谱检测新方法

王明伟[1,2]，乔凤霞[3]，闫宏远[1,2*]

1. 药物化学与分子诊断教育部重点实验室，河北大学化学与材料科学学院，保定，071002

2. 河北省公共卫生安全重点实验室，河北大学公共卫生学院，保定，071002

3. 保定学院生物化工与环境工程学院，保定 071000

随着城市化和工业化的快速发展，大量具有毒性、生物蓄积性的有机污染物持续进入环境，对生态环境和人类健康构成巨大威胁，严重影响人类生存和社会可持续发展。有机污染物的精准萃取和高灵敏检测是研究其环境分布、迁移、去除及人群健康效应评价的基础，也是新污染物治理、保障生态环境安全和公众健康的重要前提。然而，环境样品组成复杂，目标物浓度低，其检测常存在特异性弱、基质干扰严重和灵敏度不足等问题。因此，亟需开发特异性好、抗基质干扰能力强、灵敏度高的环境质谱分析新方法，用于痕量有机污染物的准确检测。本研究以超亲水印迹材料制备和提高环境样品中痕量有机污染物萃取选择性为中心，以葡萄糖衍生的多孔碳为基底，采用自然界来源的壳聚糖等亲水化合物为功能单体，结合表面印迹技术，在极性体系中制备系列特异识别性好、吸附容量高和传质速率快的绿色表面亲水印迹生物质材料。制备过程简单温和，易于操作。通过考察优化合成条件，对制备的超亲水印迹材料的分子识别机理、微观形态和吸附机制进行系统研究。以所合成材料为吸附剂，开发绿色低耗的新型样品前处理技术，结合色谱-质谱检测手段建立复杂环境样品中有机污染物的快速、灵敏、精准分析新方法。质谱技术凭借其高选择性、高灵敏度和强大的结构确证能力，可实现复杂基质中痕量目标物的准确定性和定量，有效降低基质效应、提高信噪比和方法可靠性，是环境痕量有机污染物精准检测的核心技术支撑。该方法已成功用于环境水中全氟化合物、有机羧酸类污染物和基因毒性杂质等有机污染物的准确、快速、灵敏检测，为环境监测、新污染物治理和风险评估提供了新的研究思路和质谱分析技术支撑。

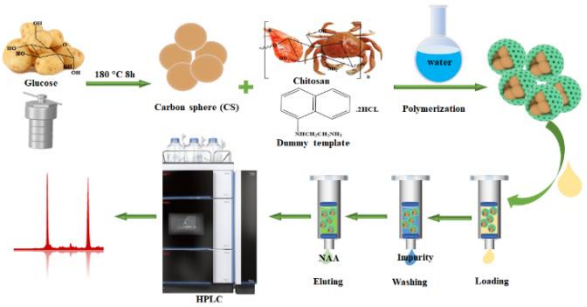


图 1 超亲水印迹材料制备及有机污染物萃取检测流程图

关键词：超亲水印迹材料；样品前处理；色谱–质谱联用；痕量有机污染物；精准检测

参考文献

1.S. Liang, L. Zhou, F. Gao, H. Guo, B. Wang, F. Qiao and M. Wang, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **2026**, 14, 9596-9607.

2.M. Wang, L. Zhou, F. Qiao and H. Yan, *Green Chem.*, **2024**, 26, 2000-2010.

3.M. Wang, F. Qiao and H. Yan, *Green Chem.*, **2021**, 23, 5197-5188.

4.M. Wang, C. Yang, J. Cao, H. Yan and F. Qiao, *Food Chem.*, **2023**, 411, 135471.

*Email: yanhy@hbu.edu.cn.

国家自然科学基金项目（82674726, 82373634）；河北省自然科学基金项目（B2022201048）；河北省教育厅青年拔尖人才项目（BJK2023027）；河北大学创新团队计划项目（IT2023A06）资助.

冷辅助固相微萃取-气相色谱-质谱法检测复杂基质中痕量液晶单体

常建宇[1]，陈佳钰[1]，闫宏远[1,2*]

1. 药物化学与分子诊断教育部重点实验室，河北大学化学与材料科学学院，保定，071002
2. 河北省公共卫生安全重点实验室，河北大学公共卫生学院，保定，071002

面向环境质谱复杂基质中痕量有机污染物精准分析的需求，复杂环境与生物样品中痕量目标物的高效萃取富集，是实现其高灵敏、准确质谱检测的基础。固相微萃取（SPME）作为一种先进的样品前处理技术，已广泛应用于环境监测、食品安全和医药分析等领域。然而，实际样品中痕量组分常与基质存在较强相互作用，难以通过常规 SPME 实现高效萃取富集。冷辅助固相微萃取-气相色谱-质谱（CA-SPME-GC-MS）技术将冷辅助 SPME 的高效富集能力与 GC-MS 的高选择性、高灵敏检测优势相结合，为复杂基质中痕量组分的富集与灵敏检测提供了重要技术途径。作为 CA-SPME 的核心，纤维涂层决定目标物的富集效率，并最终影响 GC-MS 方法的灵敏度和可靠性。液晶单体（LCMs）是液晶面板的关键组成物质，在生产、使用和回收过程中可释放进入环境介质。由于其具有环境持久性、生物蓄积性和远距离迁移性，LCMs 已广泛存在于多种环境介质和生物体中，对生态环境和人群健康安全构成潜在威胁。基于此，本课题组制备了离子液体修饰壳聚糖-还原氧化石墨烯、功能化微孔有机网络和分子有机笼等系列纤维涂层，结合 CA-SPME 技术，实现了复杂体系中痕量 LCMs 的高效萃取富集，富集因子可达 3 个数量级以上。结合 GC-MS，建立了环境、食品和人体样本中痕量 LCMs 的高灵敏检测新方法，较现有方法灵敏度提高 2~3 个数量级。该 CA-SPME-GC-MS 策略不仅促进了复杂体系中痕量有机污染物的高效萃取富集，拓展了 SPME 对半挥发性组分的适用范围，也为研究 LCMs 的环境分布、迁移转归、毒理学机制和健康风险评估提供了关键质谱分析技术支持。

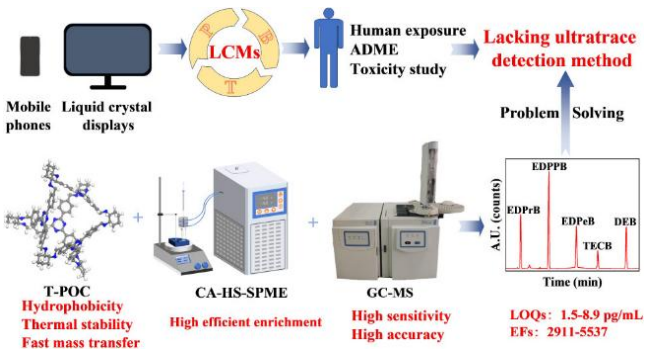


图 1 CA-SPME-GC-MS 高灵敏检测痕量液晶单体流程图

关键词：冷辅助固相微萃取；质谱检测；高效富集；液晶单体；复杂样品

参考文献

1.X. Li, P. Li, Y. Lu, J. Yin and H. Yan, *Environ. Health.*, **2025**, 3, 1125-1138.
2.X. Liu, M. Wang, L. Bai, Y. Han and H. Yan, *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 3316-3325.
3.P. Li, F. Zhang, H. Wang and H. Yan, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 27885-27893.
4.P. Li, M. Wang, L. Bai, D. Han and H. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 499, 140060.
5.X. Li, P. Li, L. Wang, D. Han and H. Yan, *Chem. Eng. J.*, **2025**, 521, 167094.

*Email: yanhy@hbu.edu.cn
国家自然科学基金项目（82674726, 82373634）；河北大学创新团队计划项目（IT2023A06）资助.

离子印迹杂化整体聚合物用于元素形态的 ICP-MS 分析

练鸿振*

生命分析化学全国重点实验室，南京大学化学化工学院，南京大学现代分析中心，南京，210023

实现环境和生物样品中元素形态的原生态、高选择性分离分析是一个严峻的挑战，形态分析的一个关键点是维持易变形态在样品前处理过程中的稳定性。基于固相吸附材料的萃取技术，包括固相萃取（SPE）、固相微萃取（SPME）、毛细管固相微萃取（CME）和磁固相萃取（MSPE）等日益受到关注[1,2]。另一方面，利用分子印迹技术（MIT）所制备的分子印迹聚合物（MIPs）可特异性地识别特定的目标分子。在 MIPs 基础上发展起来的离子印迹聚合物（IIPs）则能实现多种形态离子的特异性分离富集[3,4]。

我们采用本体聚合法制备了铜离子印迹杂化整体柱，所制备的 Cu(II)-IIP 材料通透性好、机械强度高、亲水性强，是一种理想的 CME 材料。Cu(II)-IIP 对 Cu(II)的吸附容量远高于 Cu(II)-NIP，而且抗干扰能力也强于 Cu(II)-NIP，与电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）联用可用于分析环境与矿物样品中的 Cu(II)；以 Fe_3O_4@HM 为固相载体，在其表面通过自由基聚合方式制备了 Ce(III)-MIIP。基于 Ce(III)-MIIP 为材料的 MSPE-ICP-MS 方法可准确测定环境与矿物样品中的痕量 Ce(III)；在 Fe_3O_4@HM 表面通过表面印迹法制备了 Au(III)-MIIP，材料具有优异的选择性和较强的抗干扰能力，基于 Au(III)-MIIP 的 MSPE-ICP-MS 方法可准确测定环境与矿物样品中的痕量 Au(III)；利用四乙氧基硅烷（TEOS）和 3-(甲基丙烯酰氧)丙基三甲氧基硅烷（γ-MAPS）在 Fe_3O_4 表面形成乙烯基修饰的有机-无机杂化层，然后以 $K_2Cr_2O_7$ 与 4-乙烯基吡啶（4-VP）形成配合物 1，$CrCl_3 \cdot 6H_2O$ 与甲基丙烯酸（MAA）形成配合物 2。两种配合物与带乙烯基的 Fe_3O_4 纳米粒子通过乙二醇二甲基丙烯酸酯（EDMA）交联，得到双离子印迹磁性纳米复合物，实现对环境和生物样品中 Cr(VI)和 Cr(III)的 MSPE-ICP-MS 形态分离分析。

关键词：ICP-MS，元素形态，离子印迹聚合物，杂化整体材料.

参考文献

1. C. Bendicho, C. Bendicho-Lavilla, I. Lavilla, *TrAC-Trend. Anal. Chem.*, 2016, 77: 109-121.
2. M. He, L. Huang, B. Zhao, B. Chen, B. Hu, *Anal. Chim. Acta*, 2017, 973: 1-24.
3. Y. Liu, J. Qiu, Y. H. Jiang, Z. C. Liu, M. J. Meng, L. Ni, C. C. Qin, J. B. Peng, *Micropor. Mesopor. Mater.*, 2016, 234: 176-185.
4. W. M. Guo, S. F. Dai, V. P. Nechaev, E. V. Nechaeva, G. J. Wei, R. B. Finkelman, B. F. Spiro, *J. Geochem. Explor.*, 2019, 196: 192-207.

Corresponding author email: hzlian@nju.edu.cn, Tel.: 025-83686075

面向高精度氪同位素分析的高效氪氩分离研究

李萌*，李志明，徐江，李雪松，汪伟，关业栋
西北核技术研究所，西安 710024

氪（Kr）同位素在地下水定年[1]、核环境监测[2]及大气示踪[3]等领域具有不可替代的科学价值。静态气体质谱因其超低检测限和优异的痕量气体分析能力，成为测量超微量 Kr 同位素丰度比的首选技术。然而，实际样品（大气、地下水或岩石释放气体）中氩（Ar）含量远高于 Kr，Ar/Kr 比值可达 10^4~10^6,会显著影响 Kr 同位素测量的准确性和精度。因此，实现 Ar 与 Kr 的高效分离并保持较高 Kr 回收率[4]，是 Kr 同位素测量的关键科学问题。

本研究基于自主搭建的前处理系统[5]，采用低温吸附-解吸技术，系统优化了不锈钢冷阱中 Ar 与 Kr 的分离条件。实验设计了吸附温度（55、65、70、75 K）、解吸温度（100、120、150 K）及吸附-解吸循环次数（2、3、4 次）等变量因素来分析对分离性能的影响。以 $^{84}Kr^+$和 $^{40}Ar^+$为监测离子，计算 Kr 回收率和 Kr/Ar 分离度，每组实验重复 3 次取均值。

主要结果如下：1、吸附温度影响显著：固定解吸温度、循环次数，吸附温度从 75 K 降低至 65 K，Kr 回收率从 58%升至 88%，但分离度从 378 骤降至 41，表明低温虽利于 Kr 吸附，却导致 Ar 共吸附加剧。2、解吸温度提升有利：固定吸附温度、循环次数，解吸温度从 100 K 升至 150 K，回收率从 62%增至 78%，分离度从约 800 跃升至 1537，说明较高解吸温度可优先释放 Kr 而保留 Ar。3、循环次数是关键：固定吸附温度、解吸温度，循环次数从 2 次增至 4 次，回收率从 72%缓慢升至 78%，而分离度从约 175 大幅提升至 1537，证实多次循环可有效“清洗”冷阱中残留 Ar，显著增强分离纯度。综合比较，最优条件为：吸附温度 70 K、解吸温度 150 K、循环次数 4 次。该条件下 Kr 回收率高达 78%，Kr/Ar 分离度高达 1537（Ar 残留率仅为 0.065%），远优于常规单次吸附解吸效果，同时兼顾了痕量分析的灵敏度与同位素测量的精度。此外，研究发现吸附温度的一致性对结果影响显著：若循环间温度波动（如先 70 K 后 65 K），回收率波动达±10%，分离度下降约 30%，故建议多次循环中保持吸附温度恒定。

本研究创新性地揭示了吸附温度、解吸温度与循环次数对 Kr/Ar 分离的协同作用机制，建立了兼顾高回收率与高分离度的优化策略，为静态气体质谱中痕量 Kr 同位素分析提供了可靠的 Ar 干扰消除方案。该成果对推动 Kr 同位素在地球科学、环境监测等领域的应用具有重要意义。未来可进一步探索新型吸附材料（如 MOFs、POPs）及精细温度梯度程序，以突破现有分离效率上限。

关键词：静态气体质谱；氪同位素；氩干扰；低温吸附−解吸；分离度.

参考文献

1.ROMEO N, MABRY J, HILLEGONDS D, et al. Applied Radiation and Isotopes, 2022, 189: 110450.
2.TU Le-yi, YANG Guo-min, CHENG Cun-feng. Analytical Chemistry. 2014, 86(8): 4002-4007.
3.CHU Yan-qing, WANG Wen-hao, DONG Xi-ze, et al. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2023, 38(6): 1 238-1 243.
4.陈彬, 傅钰, 户耀文, 等. 原子能科学技术, 2023, 57(11): 2170-2181.
5.李萌, 关业栋, 李志明, 等. 现代应用物理, 2024, 15(06): 060801.

limeng@nint.ac.cn, 18789495965.

limeng@nint.ac.cn, 18789495965.