

环境学院分析测试中心明星仪器推介

【第三期】高分辨液相色谱质谱仪

推介人：鲁楠 13504701306

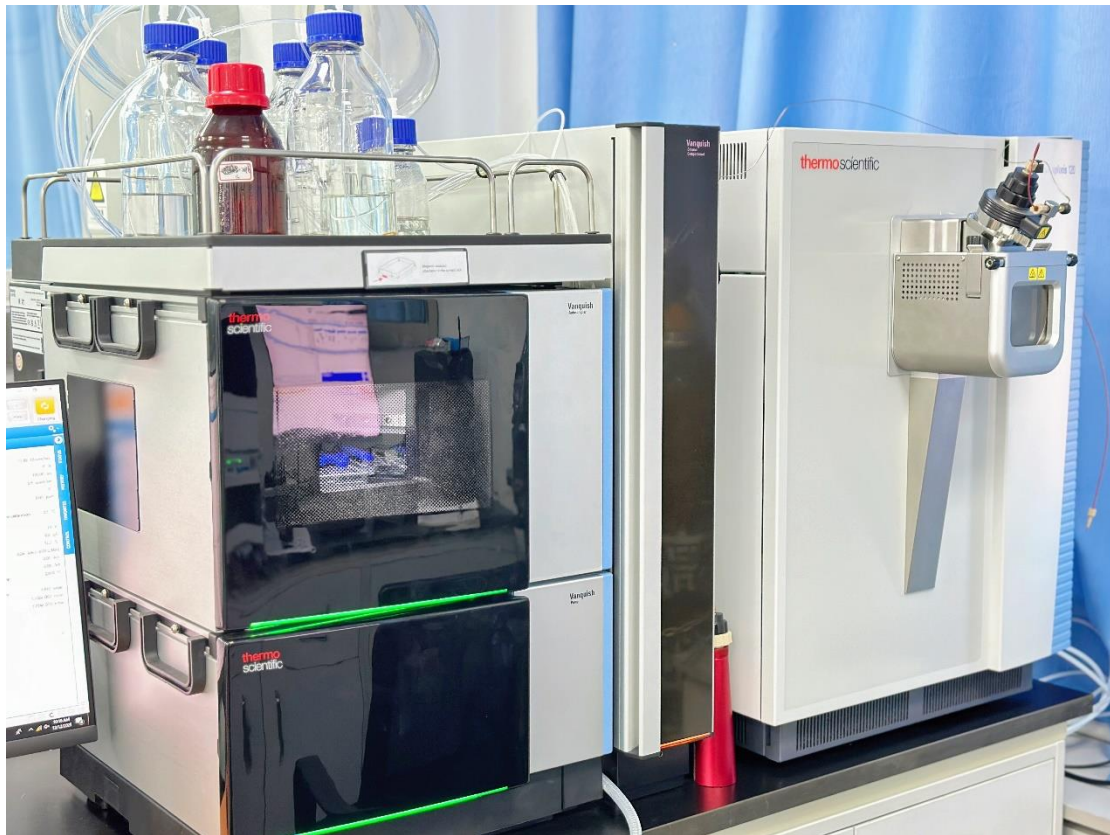
为充分利用仪器设备资源，提高服务科研和人才培养水平，促进资源共享和优化配置，学院分析测试中心特开展“明星仪器设备与技术推介”系列专题活动。

本期推出的明星仪器为 高分辨液相色谱质谱仪（Thermo Vanquish/Orbitrap Exploris 120，赛默飞世尔科技）



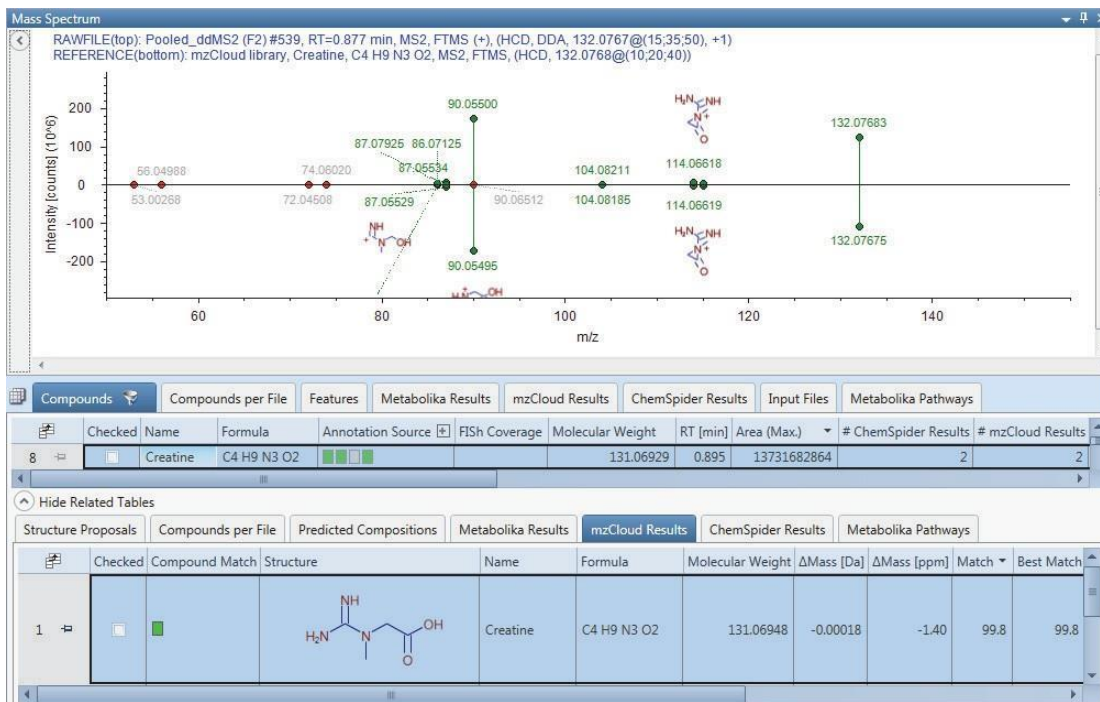
仪器简介

Thermo Scientific Orbitrap Exploris 120 质谱仪旨在实现操作简易性，并树立了仪器生产率和耐用性的新标准。m/z 200 时分辨率高达 120,000 (FWHM)，可从复杂样品的基质干扰中解析更多的目标离子。使用可寻址质量范围 m/z 40–3000 鉴定并确认低至高质量的离子。



Orbitrap Exploris 120 高分辨质谱仪为实验室进行高通量靶标筛查和定量提供了便利和坚固的技术支持。

功能强大的 Thermo Scientific Compound Discoverer 软件简化了对高可信度发现数据的解读，该软件可直接访问全球范围内规模独占鳌头的 LC-MSⁿ 参考谱库 Thermo Scientific mzCloud，或利用离线或本地库，同时提供临床研究、环境和食品安全、法医毒理学和药物分析等工作流程 (workflow) 为您提供数据分析解决方案。



突出优势

- 采用扫描速度更快的高场 Thermo Scientific™ Orbitrap™ 质量分析器，扫描速度可达 22 Hz。更快的扫描速度可以在更短的时间内分析更多的化合物，而不会出现丢峰或者扫描点数不够的情况，实现好的定量表现。同时更快的扫描速度也可以在相同时间内采集更多化合物的二级信息，提高化合物鉴定通量，实现定性分析百无一漏。
- 在分辨率设置为 60,000 的条件下，在不损失灵敏度的情况下实现高达 1.4 Hz 的正负极性切换扫描速度。一针进样即可获得正负两种模式的数据，大大缩短数据采集耗费的时间，让用户有更多时间和精力对数据进行深入分析和挖掘，进而获得满意的结果。
- 全新一代四极杆 Orbitrap 质谱仪均使用高场 Orbitrap 质量分析器，在保证超高扫描速度的同时，还可实现 120,000 的分辨率，让质量偏差 mDa 级别的干扰物无处遁形，为用户分析复杂基质样品提供充足的信心。同时也可以提高数据分析的效率，避免被各种干扰物迷惑，快速、准确地获得满意的结果。
- 具有全新的扫描方式选择，包括 DDA, DIA, targeted SIM 和 targeted MS/MS 等模式，丰富的扫描模式保证用户能够从容面对不同领域内各种不同的分析挑战。
- 高质量的共轭双曲面四极杆与 RF 应用相结合，可在更小的隔离窗口下实现极高的离子传输效率，提供出色的选择性，同时降低灵敏度损失。

典型应用

探索定量非靶分析揭示丹麦地下水中的微污染物

ACS
ES&T | Water

This article is licensed under [CC-BY-NC-ND 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

Open Access

Article

Explorative Quantitative Nontarget Analysis Reveals Micropollutants in Danish Groundwater

Published as part of ACS ES&T Water virtual special issue "Emerging Contaminants in Agroecosystems".

Mulatu Yohannes Nanusha,* Emil Egede Frøkjær, Helle Rüzsz Hansen, Signe Bonde Rasmussen, Jakob Bruun Nicolaisen, and Martin Hansen*

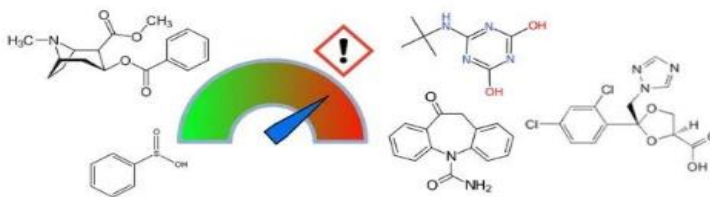
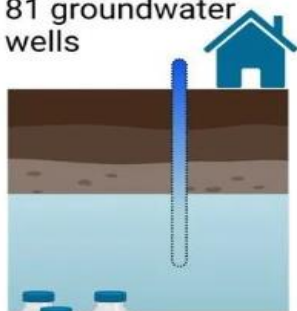
Cite This: <https://doi.org/10.1021/acsestwater.3c00403>

Read Online

摘要

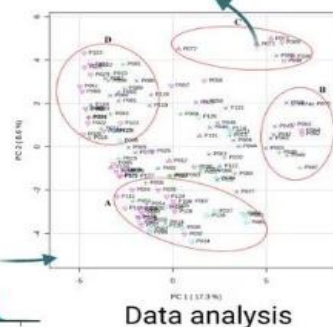
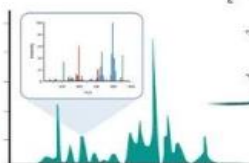
地下水是丹麦唯一的饮用水来源，然而地下水却容易受到农业、医院和工业活动等产生的化学污染物污染。由于靶标分析不足以分析未知的污染物，因此非靶分析对于检测可能被忽视的污染物十分重要。研究通过使用一个灵敏的非靶平台以及纳流液相色谱-高分辨率Orbitrap质谱仪 (HRMS/MS) 对81个横跨丹麦的地下水站点进行了调查。地下水样品固相萃取后，非靶识别了121种微污染物。其反映了农用化学品、工业、医疗/兽医等多个来源贡献。微污染物浓度水平从2 pg/L - 9.7 μg/L，其中农药降解产物的浓度最高。在78%的采样点，约29%微污染物浓度高于100 ng/L。非靶数据集还包含了另外230913个未识别的特征。我们的研究揭示了来自多个部门的微污染物分布情况，并且这些污染物不包括在丹麦定期开展的针对地下水的监测计划中，这一发现可能会对饮用水生产商产生挑战。同时研究表明，非靶分析在未来的地下水监测中可以发挥重要作用。

81 groundwater wells



Identified pollutants

Non-target analysis



Data analysis

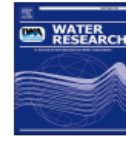
地表水中全氟及多氟烷基化合物靶向、疑似和非靶向筛查及风险评估

Water Research 233 (2023) 119735



Contents lists available at ScienceDirect

Water Research

journal homepage: www.elsevier.com/locate/watres

Integration of target, suspect, and nontarget screening with risk modeling for per- and polyfluoroalkyl substances prioritization in surface waters

Jingrun Hu^{a,b}, Yitao Lyu^{a,b}, Huan Chen^{c,*}, Leilei Cai^d, Jie Li^{a,b}, Xiaoqiang Cao^d, Weiling Sun^{a,b,*}^a State Environmental Protection Key Laboratory of All Material Fluxes in River Ecosystems, College of Environmental Sciences and Engineering, Peking University, Beijing 100871, China^b The Key Laboratory of Water and Sediment Sciences, Ministry of Education, Beijing 100871, China^c Department of Environmental Engineering and Earth Sciences, Clemson University, SC 29634, USA^d College of Safety and Environmental Engineering, Shandong University of Science and Technology, Qingdao, Shandong 266590, China

摘要详文

尽管全球市场上已经有数千种全氟烷基^Q和多氟烷基物质(PFAS)，但大多数研究只关注一小部分，可能会导致环境风险被低估。在此，我们使用互补的目标、可疑和非目标筛选分别对目标和非目标PFAS进行量化和识别，并根据它们的特定性质建立了风险模型，对地表水中的PFAS进行了优先排序。在北京市潮白河地表水中检出33种全氟辛酸磺酸。Orbitrap的可疑和非靶标筛选的灵敏度>77%，表明其在识别样品中的PFAS方面具有良好的性能。由于全氟辛酸磺酸具有较高的灵敏度，我们在多反应监测下使用三重四极杆(QQQ)作为定量标准。为了在没有可靠标准的情况下量化非目标PFAS，我们训练了一个随机森林回归模型，该模型显示测量和预测的响应因子(RFs)之间的差异仅为2.7倍。每个PFAS类别的最大/最小Rf在Orbitrap高达1.2-10.0，在QQQ高达1.7-22.3。制定了一种基于风险的优先排序方法来对已确定的全氟辛酸进行排序，并将四种全氟辛酸(即全氟辛酸、氢化全氟己酸、双氢氟酰亚胺、6:2氟调聚体羧酸)标记为高优先级(风险指数>0.1)以进行补救和管理。我们的研究强调了量化策略在全氟辛酸磺酸环境审查中的重要性，特别是对于没有标准的非靶标^Q全氟辛酸磺酸。

图文摘要

