



环境化学与生态毒理学国家重点实验室
State Key Laboratory of Environmental Chemistry and Ecotoxicology

崇德励行 尚礼笃学



首页

实验室概况

人才队伍

科研支撑

承担项目

科研成果

开放基金

党群园地

科学传播

会议室预定



首页 > 科研动态

曲广波等在ES&T上发表文章综述了离子淌度技术在有机污染物筛查中的应用

发布时间：2023-12-20 | 【打印】 【关闭】

离子淌度 (ion mobility spectrometry, IMS) 是一种新型气相分离技术，近几年已经较为广泛地用于分析小分子代谢产物、环境和食品中的有机污染物等。为深入系统地探究IMS在不同类型环境有机污染物检测方面的研究现状和发展方向，中国科学院生态环境中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室曲广波等与西班牙Zaragoza大学Cristina Nerin团队合作，在环境科学领域国际著名期刊Environmental Science & Technology发表了题为“Application of Ion Mobility Spectrometry and the Derived Collision Cross Section in the Analysis of Environmental Organic Micropollutants”的综述文章。

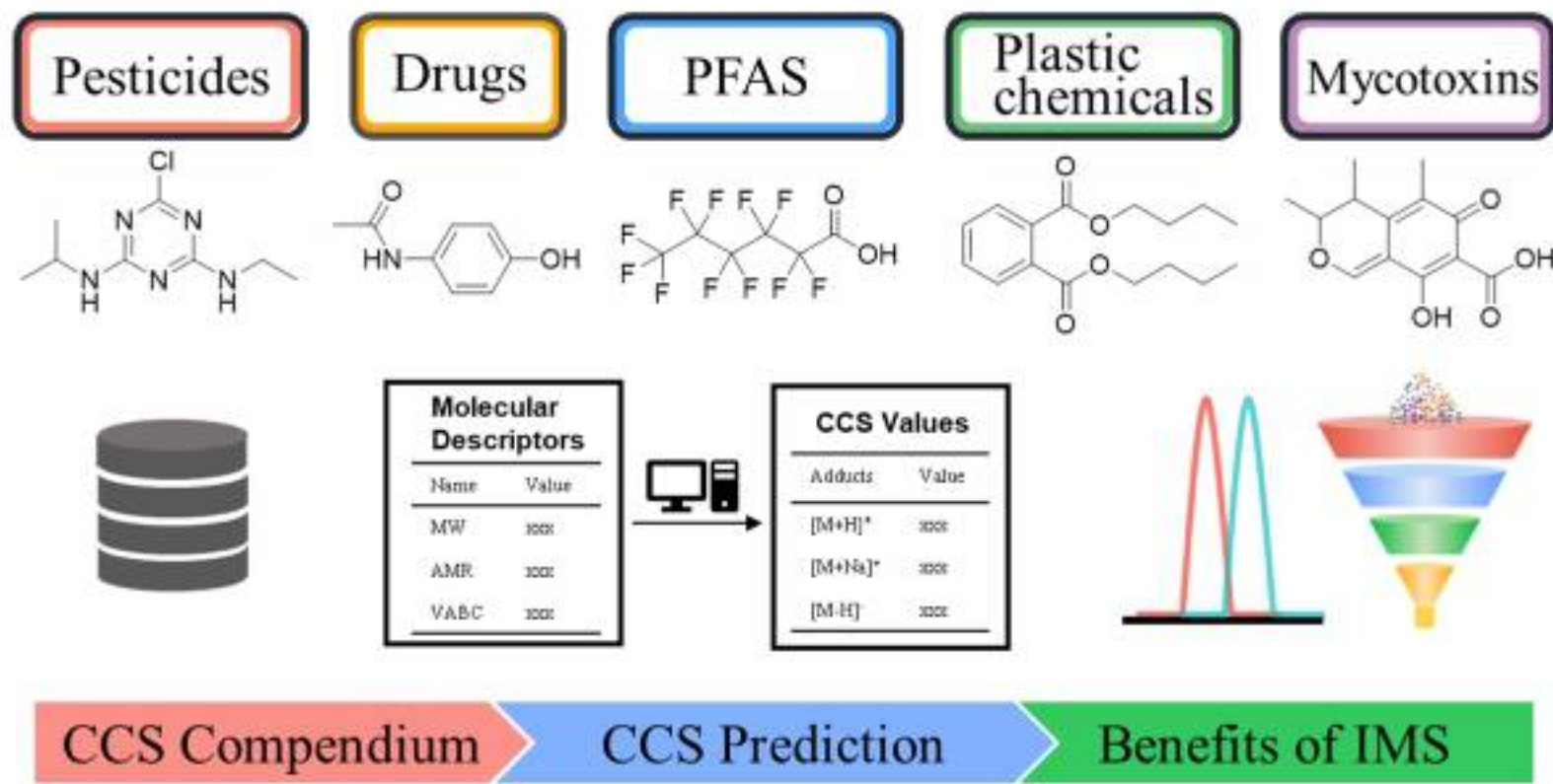


图1. 文章图片摘要。

IMS的基本原理是电场力推动离子在漂移管中运动，并在运动过程中和缓冲气体发生碰撞。由于具有较小截面的离子和缓冲气体相互作用较小，在漂移池中比具有较大截面的离子运动更快，因此IMS可以根据离子的形状、大小和电荷分布对其进行分离。在化学分析过程中，IMS可以和常规色谱-质谱联用，不仅可以提供分子的保留时间、质荷比和碎片离子，还可以提供其碰撞截面积 (collision cross section, CCS)，提升定性结果的可信度。

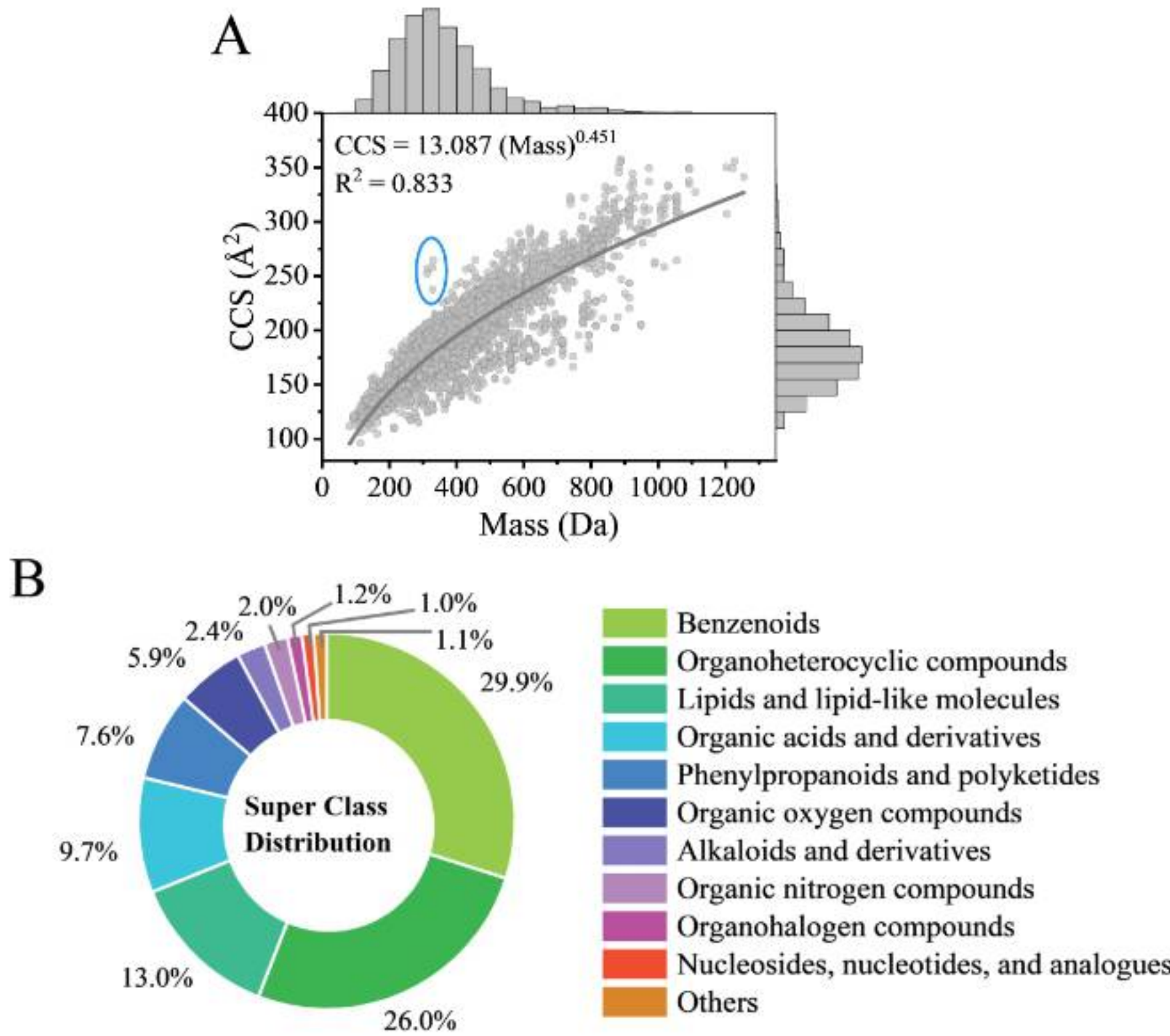


图2. (A) 9407个离子的CCS值与质量数的相关性，(B) 4170个物质的化学类别分布。

该工作针对目前环境有机污染物缺乏全面的CCS数据库这一问题，通过文献检索，共整理了4170个有机污染物分子的9407个CCS数据，包括农药、药物、真菌毒素、类固醇、塑料添加剂、全氟烷基和多氟烷基物质、多环芳烃、多氯联苯和多溴二苯醚及已知的转化产物等，该数据库的生成将促进环境有机污染物的可疑筛查和非靶向分析。该工作还评估了目前的CCS预测模型并探讨了影响CCS预测精度的因素，相比算法和分子描述符，模型训练集的化学空间和实验CCS数据的精度对CCS预测模型性能的影响更大。除此之外，文章全面的整理了IMS在不同类型污染物分析检测方面的应用，讨论了IMS在环境污染物定性和定量分析过程中的优势，包括扩大峰容量、减少质谱图干扰、降低物质检出限、区分同分异构体、减少假阳性结果等。

该论文的第一作者是国科大杭州高等研究院环境学院和中国科学院生态环境研究中心联合培养博士后宋雪超，通讯作者为曲广波研究员和西班牙Zaragoza大学Cristina Nerin教授。研究工作得到国家重点研发计划（2020YFA0907500）和国家自然科学基金（92043302, 92143301, 22193050）的支持。

文章链接：<https://doi.org/10.1021/acs.est.3c03686>



版权所有 © 环境化学与生态毒理学国家重点实验室 京ICP备05002858号

地址：北京市海淀区双清路18号 邮编：100085

Email: sklece@rcees.ac.cn 技术支持：青云软件

