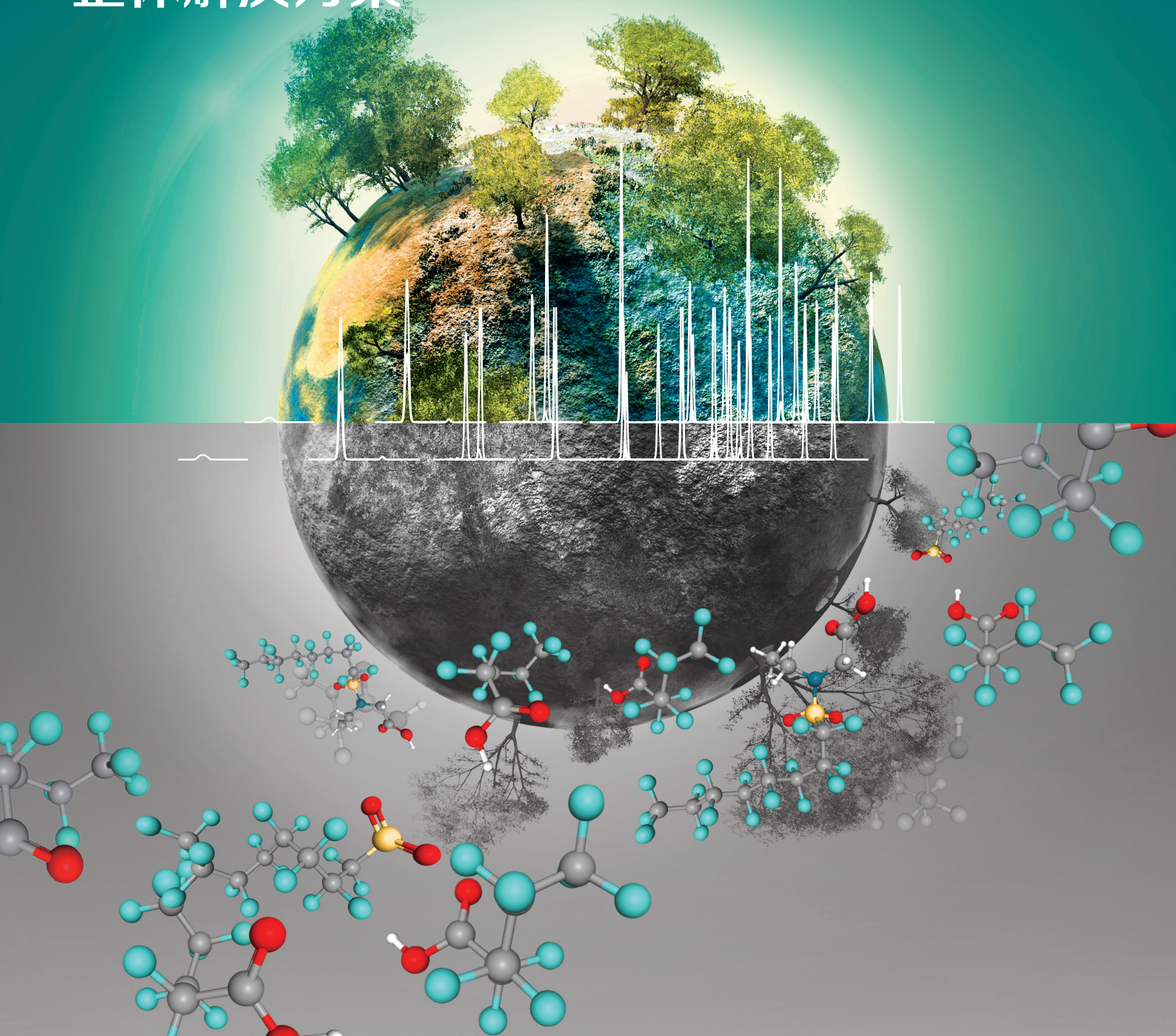


新污染物

突破瓶颈 — 赛默飞新污染物 整体解决方案



新污染物，全球关注焦点

新污染物多为大量化学品进入生产和使用后产生。目前国际上广泛关注的污染物有四大类：一是持久性有机污染物，二是内分泌干扰物，三是抗生素，四是微塑料，在被排放到环境中后，被界定为新污染物。新污染物由于具有较强的生物毒性、环境持久性、生物累积性等特征，能够对生态环境或者人体健康存在较大的危害性风险。但国内外对新污染物的治理均处于起步阶段，相应的检测、治理手段等均面临重重挑战，新污染物治理成为全球性重大课题。

新污染物

- 持久性有机污染物 (POPs)
 - 有机氯农药
 - 全氟化合物 (PFAS)
 - 多氯联苯 (PCBs)
 - 二噁英 (Dioxin)
- 内分泌干扰物 (EDCs)
- 抗生素
- 微塑料 (MPs)
- 消毒副产物 (DBPs)

目录

- ◆ 新污染物环境传输路径和分析策略
- ◆ 新污染物分析工作流程
- ◆ 新污染物检测案例分享
 - ◎ POPs
 - PFAS 定量定性分析
 - PCB 定量定性分析
 - 二噁英分析“金标准”
 - ◎ 微塑料
 - ◎ DBPs
- ◆ 新污染物健康风险和暴露评估
- ◆ 创新性样品制备
- ◆ 数据整合分析

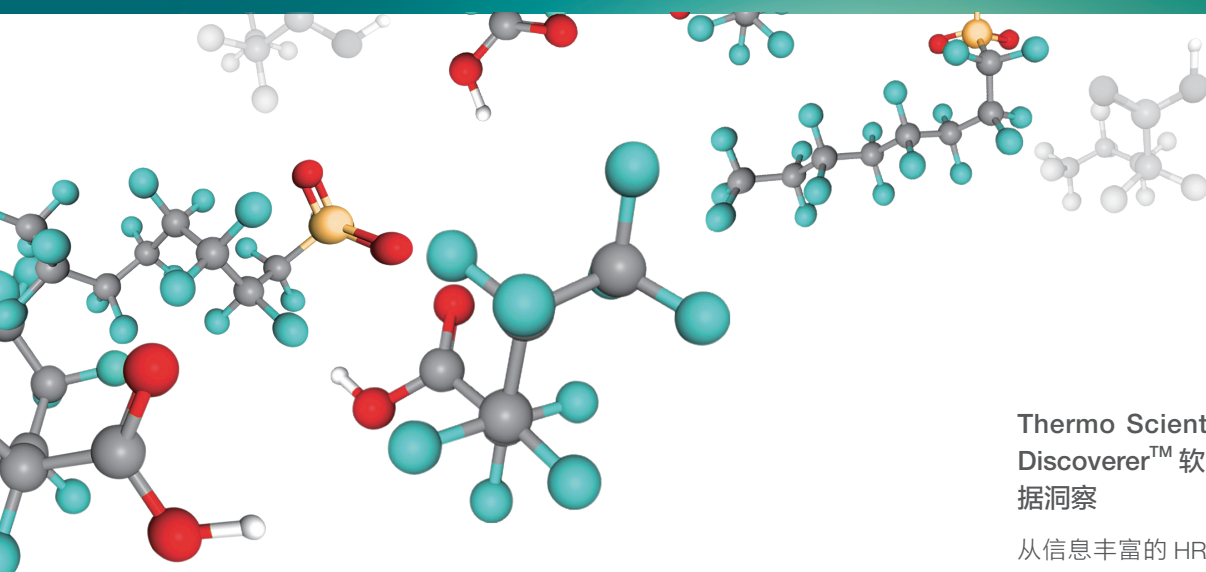
新污染物环境传输路径和分析策略

新污染物在环境中难以降解并在生态系统中易于富集，可长期蓄积在环境中和生物体内，能够随着空气、水流长距离迁移或顺着食物链扩散，进而威胁人类健康。国内新污染物治理将按“筛”、“评”、“控”三个步骤展开，先筛查出环境健康危害性大、环境介质频繁检出、生产使用量大的化学物质，然后通过危害评估、暴露评估和风险表征持续开展科学的环境健康风险评估，从数万方化学物质中精准圈定当前阶段环境风险较大的新污染物，列入重点管控新污染物清单，进而实施全生命周期管控措施。因此，新污染物分析策略包括三个维度：靶向分析、非靶向筛查和新污染物健康风险与暴露评估。



新污染物工作流程

新污染物分析工作流程取决于样品基质类型和分析目标。样品前处理部分，不同样品基质采用不同样品制备方法，如饮用水样品，采用固相萃取 (SPE) 方法；对于土壤样品，加速溶剂萃取仪 (ASE) 是最佳方法。色谱分离部分，根据灵敏度和选择性选择使用液相色谱 (LC)、气相色谱 (GC) 或离子色谱 (IC) 进行分离。最佳质谱仪取决于分析目标是靶向分析、非靶向筛查或健康风险与暴露评估。数据处理软件将取



样品制备

自动化样品制备方案简化和加速样品提取、制备和分离

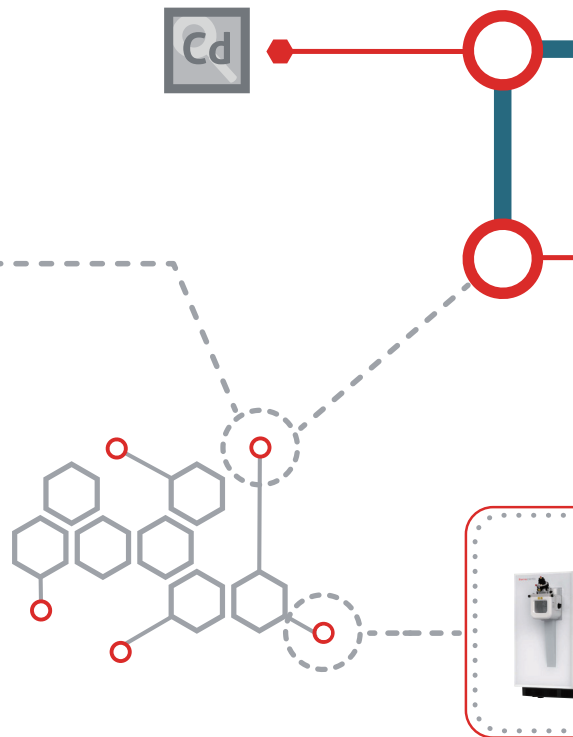


色谱分离

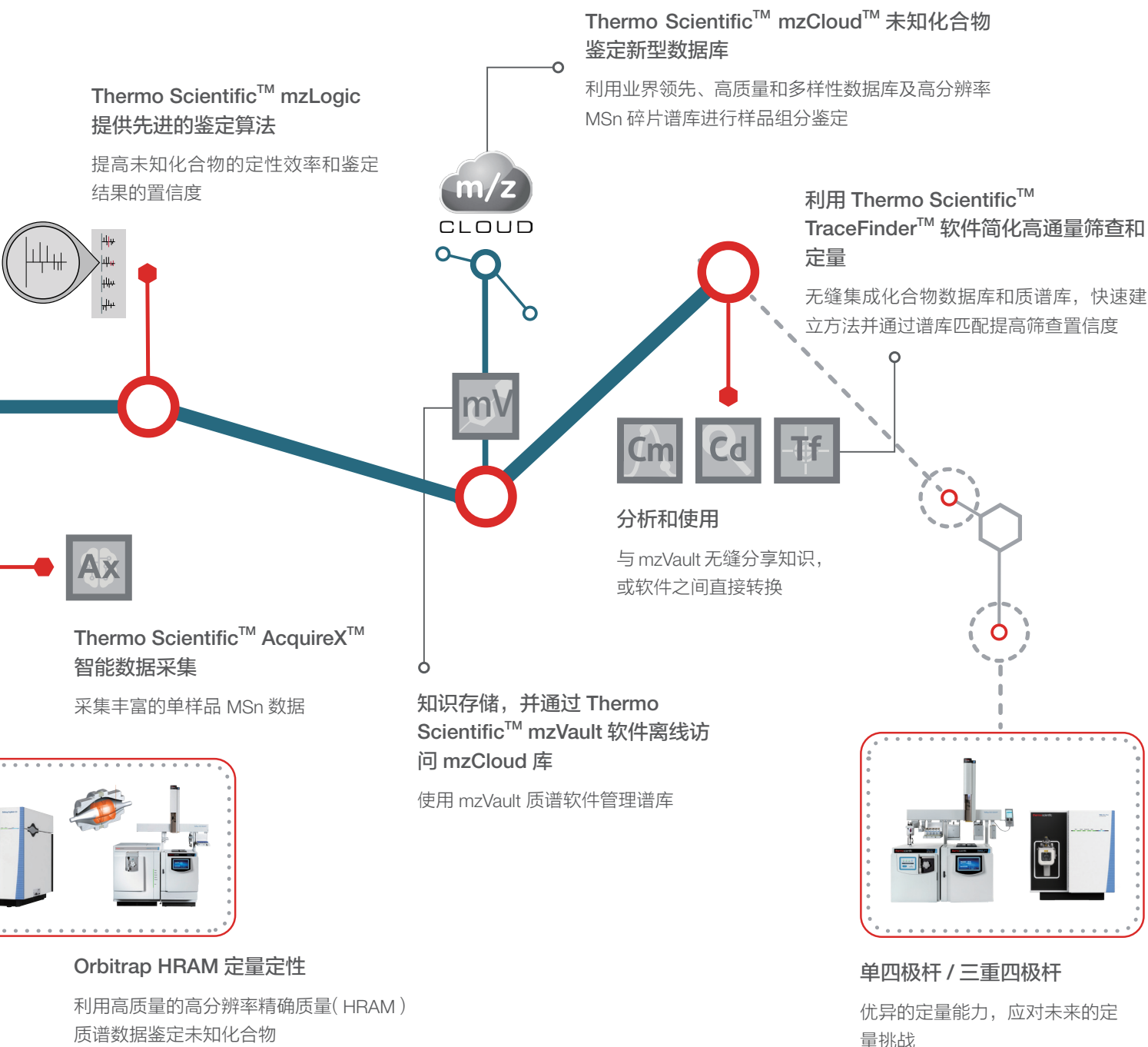
提供灵活性和性能兼具的分离技术，涵盖 LC, GC 和 IC 色谱分离平台

Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 软件提供有价值的
数据洞察

从信息丰富的 HRAM 化合物数据中提
取有效的高置信度数据



于分析工作流程, 变色龙色谱软件 (CDS) 或 TraceFinder™ 软件专为靶向分析和定量而设计, Compound Discoverer™ 软件适用于非靶向筛查和化合物结构鉴定。



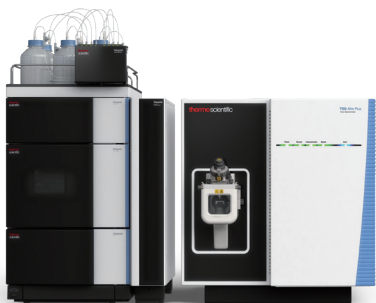
PFAS 靶向定量分析

PFAS 被称为“永远的化学品”，是全球重点管控的新污染物。针对 >C8 成分和挥发性较弱的 PFAS 化合物，液质联用是主要分析技术，而对于碳链更短 (<C8)、挥发性更强的 PFAS 化合物，则可通过自动热脱附 TD 系统和气相色谱质谱联用法 (TD-GC/TD-GC/MS) 进行分析。

Thermo Scientific™ TSQ™ Altis Plus

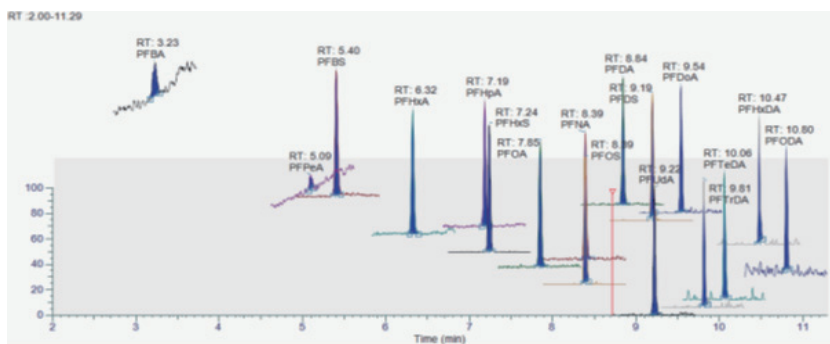
三重四极杆液质联用仪

- 超过 6 个数量级的线性动态范围与高选择性
- 提高的采集速度与低至 0.3 毫秒的有效驻留时间设置
- 超快选择反应监测 (SRM) 可按方法筛选或定量分析数千种化合物
- 优异的数据稳健性和可靠性



PFAS 三重四极杆液质联用仪分析

实现串联三重四极杆液质联用仪 17 种全氟化合物直接进样方法分析。方法选择性高，分析速度快，灵敏度完全满足法规要求，同时具有良好的重现性和线性范围。



20 pg/mL 混标中 17 种外标化合物提取离子色谱叠加图

除 LC-MS/MS 外，GC/GCMS 也是 PFAS 靶向定量分析的一种重要技术手段

Thermo Scientific™ ISQ™ 7610

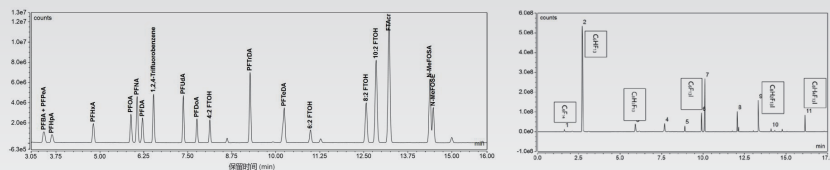
单四极杆气质联用仪

- NeverVent 技术在不卸真空情况下维护 EI 离子源，快速更换色谱柱
- 配置灵活并可随时根据客户分析需求扩展系统分析性能
- 使用更宽线性动态范围及更长使用寿命的检测器进行方法整合，有效减少仪器宕机时间



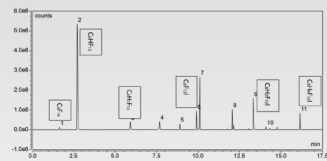
PFAS 气质联用分析

通过自动热脱附 TD 系统和气相色谱质谱联用法 (TD-GC/TD-GC/MS)，适用于水质和土壤中低 ppt 级和亚 ppt 级 PFAS 监测。结合更先进的 GC/MS 技术 (三重四极杆、高分辨质谱) 还可增强检测和化合物鉴定能力。



1 μL PFAS 总离子流图 (浓度如下: PFAC 0.3 ng/μL、4:2 FTOH 10 ng/μL、6:2 FTOH、8:2 FTOH 和 10:2 FTOH 30 ng/μL、FTAc 4 ng/μL、N-MeFOSA 7 ng/μL 以及 N-MeFOSE 5.5 ng/μL)

样品提取色谱图，同时对疑似 PFAS 化合物进行定性



未知PFAS化合物筛查

PFAS 化合物可通过三重四级质谱仪 (MS) 靶向分析进行检测和定量。然而, 未知 PFAS 化合物鉴定和定量则需要使用高分辨质谱技术 (HRAM MS)。随着高分辨质谱技术的进步, 利用高分辨质谱的高分辨和高质量精度的全扫描采集优势, 可对样品进行回溯性分析以及其他未知污染物筛查, 先进的化合物筛查和识别流程便于了解样品的全面信息, 提高未知化合物鉴定的覆盖度同时提升置信度。

Thermo Scientific™ Orbitrap

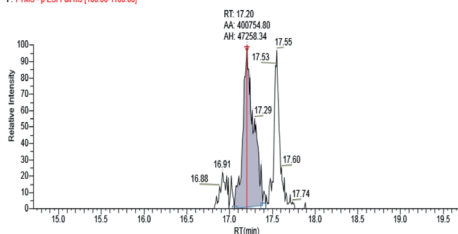
Exploris™ 120 高分辨液质联用仪

- 高场 Orbitrap 质量分析器, 可实现 120,000 分辨率, 消除复杂基质干扰, 消除假阳性和假阴性
- 更快的扫描速度, 提高化合物鉴定通量
- 一针进样即可获得正负两种模式数据, 缩短数据采集时间
- 具有全新的扫描方式选择



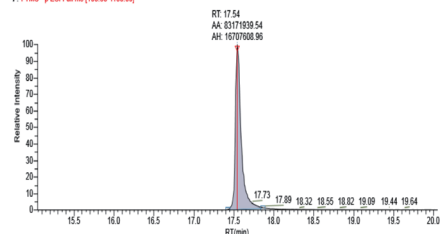
20150800116 L-PFDS NL 4.7E4 m/z 598.92-598.93

F: FTMS - p ESI Full ms [100.00-1100.00]



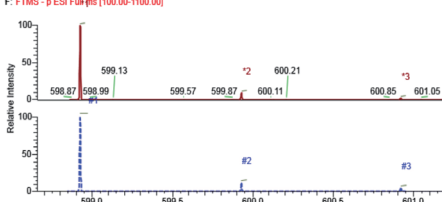
STD NaPFDS NL 1.8E7 m/z 598.92-598.93

F: FTMS - p ESI Full ms [100.00-1100.00]



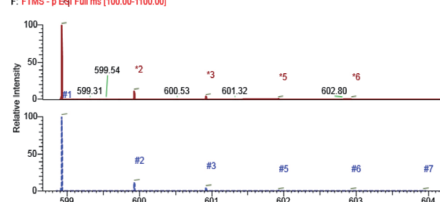
20150800116

F: FTMS - p ESI Full ms [100.00-1100.00]



STD

F: FTMS - p ESI Full ms [100.00-1100.00]



UCMR3 样本分析结果表明含有痕量的非靶向化合物 (PFDS)。样品采集后的鉴定通过查看同位素标记、精确质量数和保留时间来进行验证。

注: 左边的真实水样色谱图 PFDS (RT 17.5) 及其异构体 (RT 17.2) 的线性 Vs 右边 PFDS 异构体标准品的线性

一针进样, 同时实现化合物筛查、确证和定量

U.S. EPA 537 目标化合物

PFAS 化合物	Critical Level (ng/L)	DL (ng/L)	LCMRL (ng/L)
PFBS	0.15	0.2	<0.5
PFDA	0.15	0.26	<0.5
PFDoA		0.47	0.73
PFHpA	0.09	0.15	<0.5
PFHxA	0.13	0.19	<0.5
PFHxS		1.7	2.4
PFNA	0.11	0.17	<0.5
PFOA		0.22	0.5
PFOS		0.26	0.5
PFTA	0.15	0.2	<0.5
PFTDA		0.31	0.55
PFuNA		0.38	1

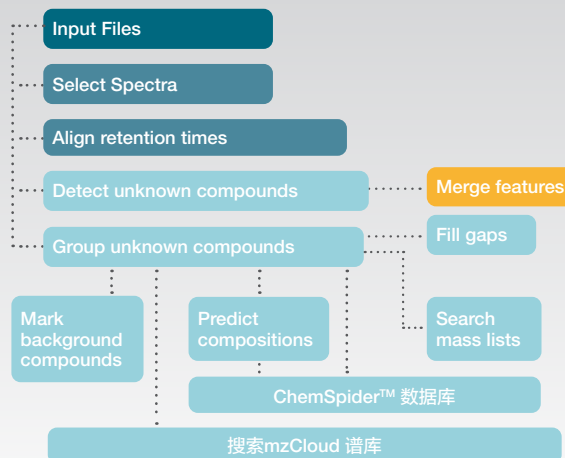
U.S. EPA 537 目标化合物

PFAS 化合物	Critical Level (ng/L)	DL (ng/L)	LCMRL (ng/L)
PFBA		0.19	0.64
PFODA		0.55	1
PFDS	0.13	0.19	<0.5
PFHxDA		0.12	0.5
PFPA	0.18	0.19	<0.5

采用全扫描模式进行未知 PFAS 化合物筛查时, 可获得化合物的检出限或 MRLs

蓝色标记的化合物不包含在 U.S. EPA 537 列表中, 但在相同的 UCMR3 饮用水过程水提取物中被发现。

对于含有未知 PFAS 化合物的复杂样品, 使用 Compound Discoverer 软件可以缩短数据处理时间并迅速获得结果。



Compound Discoverer 软件工作流程模块化, 可根据不同应用定制化。通过自定义工作流程、灵活可视化、分组工具和交互式链接显示来定制化数据处理

燃烧离子色谱法测定 AOF

是否存在其他 PFAS 化合物?

自动燃烧离子色谱法 (CIC) 为可能存在的 PFAS 或其他含氟化合物提供了一种补充非靶向筛查方法。

Thermo Scientific™ 燃烧离子色谱系统

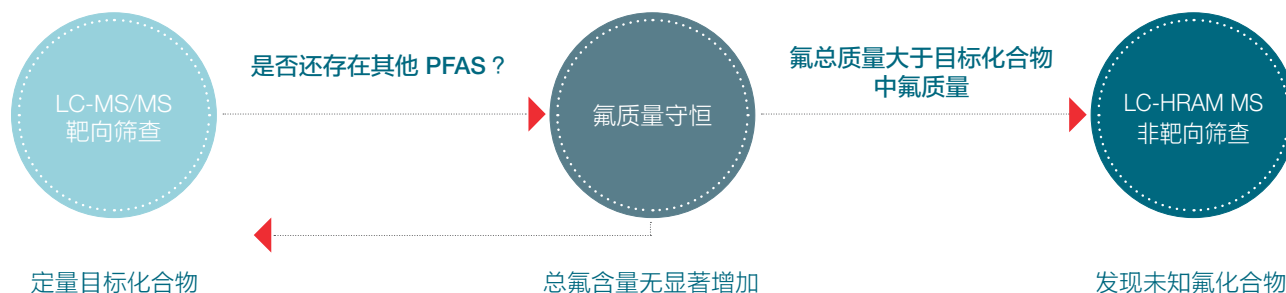
- 实现复杂基质自动化样品制备
- 产生更少的环境污染物
- 高灵敏度
- 使用简单, 节省时间



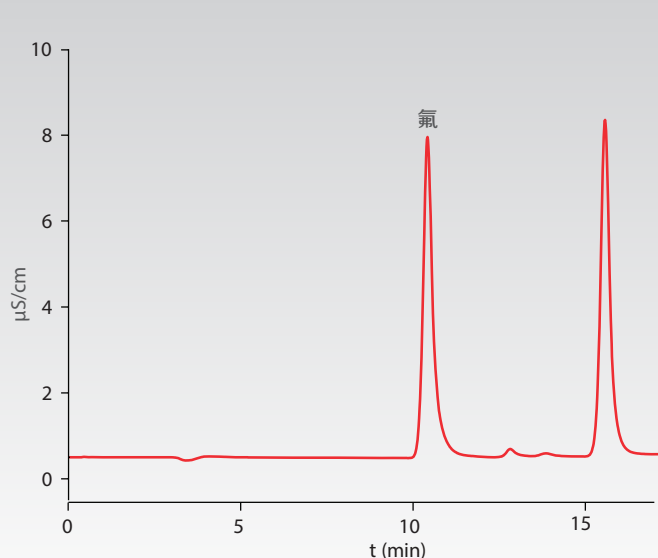
燃烧离子色谱法 (CIC) 测定可吸附有机氟 (AOF)

可吸附有机氟的分析用于确定样品中氟总质量是否超过目标化合物中氟质量。如果氟总质量偏高, 则样本中可能存在目标化合物以外的其他 PFAS。

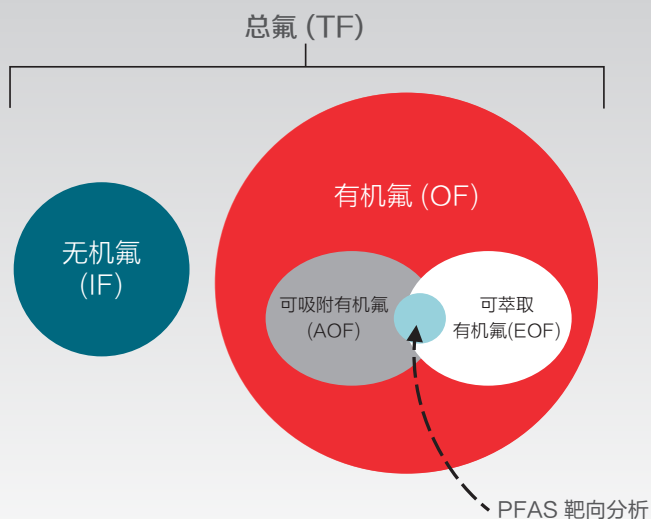
该方法的应用在其他可吸附有机卤成分 (AOX) 的测定中得到了很好的验证。



AOF-CIC 提供了一种简单且经济的方法来确定样品中是否存在其他 PFAS 分子。该技术通过选择并仅分析“可疑”样品, 有助于优化分析仪器的使用。



工业废水 CIC 色谱图, 稀释比例: 1:10



总氟包括无机氟和有机氟。有机部分包含可吸附有机氟 (AOF) 和可萃取有机氟 (EOF), 这两种化合物可通过 LC-MS/MS 进行分析。还有一些有机化合物不能通过这两种方法捕获。



PCB 定量定性分析

PCB 同系物中 dioxin-like PCBs (DL-PCB) 被归类为持久性有机污染物。U.S. EPA 1668 法规采用高分辨气相色谱分析地表水、土壤、沉积物等样本基质中 PCB。随着, 气相色谱-三重四极杆质谱技术发展, 其高灵敏度和高选择性, 使得 GC-MS/MS 成为多氯联苯定量分析的可靠工具。



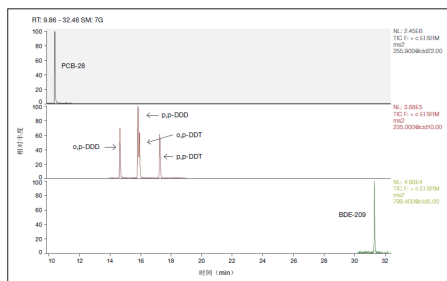
Thermo Scientific™ TSQ™ 9610 三重四极杆气质联用仪

- 采用全新 AEI 离子源, IDL 低至 0.3 fg (OFN), 轻松实现复杂基质中痕量化合物高灵敏度、高通量分析
- NeverVent 技术适用于 EI 和 AEI 离子源, 在不卸真空情况下可清洁离子源、更换色谱柱, 并且在 AEI 离子源系统中可更换灯丝
- 新型的检测器动态范围该更广, 使用寿命更长, 极大的延长了仪器的运行时间

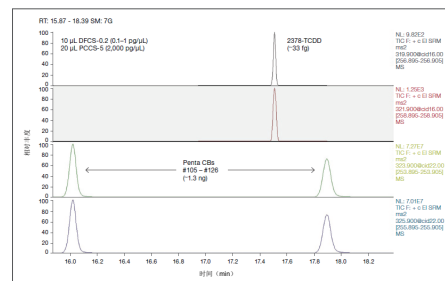


环境基质中痕量多氯联苯 GC-MS/MS 分析

TSQ 9610 GC-MS/MS 系统单次进样可实现包括 PCB 在内的多种不同化合物的高灵敏度分析; 提供扩展的动态范围, 使得高浓度 PCB 和低浓度二噁英可通过同一方法进行定量分析。



使用 TSQ 9610 GC-MS/MS 系统整合方法分析 PCB、OCP 和 PBDE



使用 TSQ 9610 GC-MS/MS 系统和同一方法同时分析痕量二噁英和高浓度 PCB

TSQ 9610 三重四极杆气质联用仪实现复杂基质中 PCBs 高灵敏度、高通量分析。在进行土壤污染物的全面表征, Orbitrap 高分辨气质联用仪使样品通量提高了四倍。

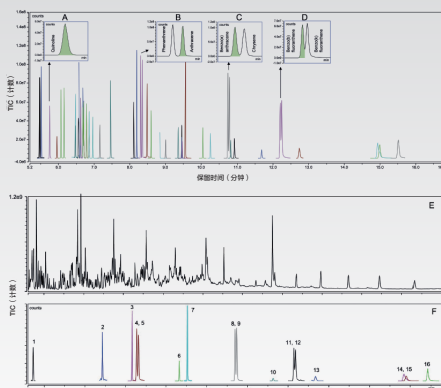
Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris GC 高分辨气质联用仪

- 分辨率高达 60,000 分辨率 (FWHM), m/z=200, 采集速率高达 40 Hz
- 提供 ppt 级全扫描 HRAM 数据
- 低于 1 ppm 的质量精度



土壤污染物 Orbitrap Exploris GC 全面表征

利用 Orbitrap Exploris GC 高分辨和高质量精度的全扫描采集优势, 实现土壤样品中 16 种 EPA PAHs, 7 种标记 PCBs, 3 种 oxyPAHs, 10 种甲基 PAHs 和 9 种 NSOPAHs 的高灵敏度定量分析的同时, 可对土壤样品进行回溯性分析以及其他未知污染物筛查。



50 pg/μL (50 pg 柱上进样量 (OC)) 溶剂标样 (溶剂为正己烷) 中 PAHs 和 PCBs 的 FS XIC 谱图的叠加图

化合物名称	RT 参考值 [min]	采集值 [min]	NIST 分子式	NIST 分子量 [amu]	质量数 [amu]	保留时间 [min]	相对强度 [%]	峰	NIST 分子式	峰	RSI
苯	4.886	70.8240	C ₆ H ₆	78.0942	77	100.0000	100	0	C ₆ H ₆	95.7	997
甲苯	6.545	127.01569	C ₇ H ₈	106.0954	105	170.0100	149	18	C ₇ H ₈	99	960
乙苯	6.729	128.10865	C ₈ H ₁₀	126.10000	125	89.0000	149	0	C ₈ H ₁₀	95.2	895
二甲苯	8.788	147.03149	C ₈ H ₁₀	147.03148	147	124.0332	149	0	C ₈ H ₁₀	95.4	988
萘	6.814	152.00088	C ₁₀ H ₈	152.00088	151	66.0001	151	0	C ₁₀ H ₈	95.5	911
邻苯二甲酸	6.545	150.99255	C ₈ H ₆ O ₄	150.99111	151	170.0439	151	0	C ₈ H ₆ O ₄	95.2	981
萘	7.084	249.84847	C ₁₀ H ₈	249.84848	249	247.0034	154	0	C ₁₀ H ₈	94.2	943
四氢萘	7.384	202.07170	C ₁₀ H ₁₂	202.07174	201	43.7289	169	0	C ₁₀ H ₁₂	94.3	975
萘	7.411	150.06262	C ₁₀ H ₈	150.06276	150	82.0481	162	0	C ₁₀ H ₈	97.2	984
二噁英	7.501	169.08841	C ₁₂ H ₈	169.08868	169	245.7657	164	2	C ₁₂ H ₈	95.6	953
芘	7.537	83.08540	C ₁₆ H ₁₀	83.08553	83	126.0077	168	0	C ₁₆ H ₁₀	95.4	959
芘	7.587	127.01809	C ₁₆ H ₁₀	127.01833	127	100.0000	164	0	C ₁₆ H ₁₀	97.0	976
芘	7.590	284.02240	C ₁₆ H ₁₀ N ₂	284.02267	283	105.18127	165	0	C ₁₆ H ₁₀ N ₂	95.9	855
芘	7.612	292.05356	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O	292.05397	291	117.0000	167	0	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O	96.3	915
芘	7.640	298.06060	C ₁₆ H ₁₀ SP ₂	298.06068	298	57.0000	164	0	C ₁₆ H ₁₀ SP ₂	95.9	948
甲萘	7.754	75.02623	C ₁₀ H ₈	75.02633	75	99.04770	166	0	C ₁₀ H ₈	95.4	958
五氯苯	7.934	284.83375	C ₆ H ₅ Cl ₅	284.83368	283	107.0000	167	0	C ₆ H ₅ Cl ₅	95.6	950
萘	7.938	125.04440	C ₁₀ H ₈	125.04448	125	27.2548	167	0	C ₁₀ H ₈	96	988
萘	7.963	200.06070	C ₁₀ H ₈	200.06075	200	80.0001	169	0	C ₁₀ H ₈	97.8	947
萘	8.022	125.01931	C ₁₀ H ₈	125.01928	125	24.00048	168	0	C ₁₀ H ₈	95.9	884
萘	8.073	214.08533	C ₁₀ H ₈	214.0854	214	97.7349	164	0	C ₁₀ H ₈	95.5	969
二噁英	8.102	137.07087	C ₁₂ H ₈ O	137.07084	137	136.0000	168	0	C ₁₂ H ₈ O	95.5	926
萘	8.113	172.06569	C ₁₀ H ₈	172.06565	172	170.0000	169	0	C ₁₀ H ₈	95.2	944
芘	8.148	108.98717	C ₁₆ H ₁₀	108.98715	107	234.0021	170	73	C ₁₆ H ₁₀	95.9	956
芘	8.177	198.12446	C ₁₆ H ₁₀	198.12451	198	45.00048	171	0	C ₁₆ H ₁₀	94.9	978
萘	8.203	118.98820	C ₁₀ H ₈	118.98820	119	90.0001	172	0	C ₁₀ H ₈	95.1	915
乙萘	8.221	88.03407	C ₁₀ H ₈	88.03412	88	88.0078	172	0	C ₁₀ H ₈	97.2	951
萘	8.239	265.87787	C ₁₆ H ₁₀	265.87789	265	192.0004	173	0	C ₁₆ H ₁₀	97.1	966
萘	8.252	178.07787	C ₁₆ H ₁₀	178.07771	178	74.0005	176	79	C ₁₆ H ₁₀	97.8	914
萘	8.287	268.03238	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O	268.03242	268	63.0001	174	86	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O	97.4	867
萘	8.388	149.02332	C ₁₀ H ₈	149.02332	149	88.1147	172	181	C ₁₀ H ₈	95.1	916

Compound Discoverer 3.2 软件 QuChERS 土壤萃取物解卷积 EI 数据 NIST 检索索引

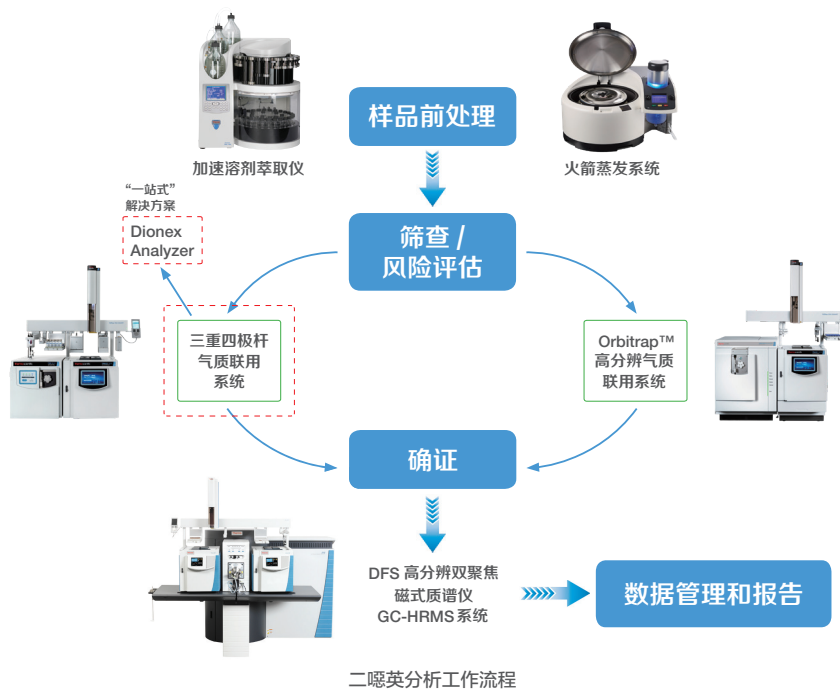


二噁英分析“金标准”

自欧盟食品安全指导文件的推出，串联质谱成为二噁英检测方法之一，但串联质谱检测方法仍需进一步验证来评价其可靠性，而 DFS 高分辨磁质谱作为二噁英检测的“金标准”，常规分析兼具灵敏度和稳健性。

DFS 高分辨双聚焦磁式质谱仪

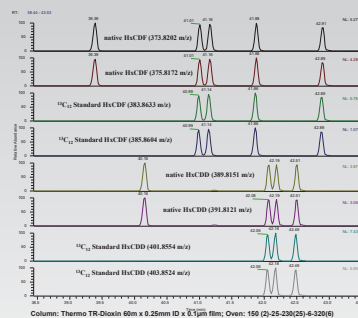
- 二噁英实验室的标准配置
- >60000 (10%峰谷定义) 的最大分辨率，动态定量范围达 106 (5fg-5ng)
- 注入至色谱柱的 TCDD 数量低至 20 fg，可带来优异的信噪比 (大于 200:1)
- 适用于各种复杂基质应用的多功能实验室



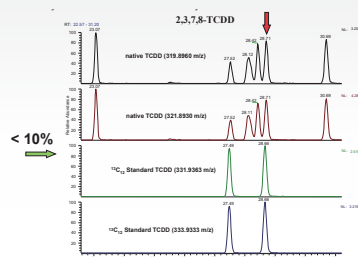
高分辨磁质谱：环境中二噁英和 POPs 分析“金标准”

DFS 相关法规

Market	Region	Regulation	Matrix	Analytes
Environmental	USA	US EPA 1613 B	Drinking water,soils sludge	Dioxins
Environmental	USA	US EPA Method 23	Emission	Dioxins
Environmental	USA	US EPA Method 8290	Chemical wastes, soil/sediments,tissue,water	Required
Environmental	USA	US EPA 1668A	Water,soil,sediments,tissue	PCB congeners
Environmental	USA	US EPA TO-9A	Ambient air,work environment	Dioxins and furans
Environmental	USA	US CARB 428	Stationary emissions	PCBs,209 congeners
Environmental	USA	US CARB 429	Stationary emissions for PAHs	PAHs
Environmental	USA	US EPA 1614 A	Water,soil,sediment,tissue	PBDEs
Environmental	EU	EN 1948-3	Emission,ash	Dioxins,210 congeners
Environmental	EU	EN 1948-4	Emission,ash	PCBs,209 congeners
Environmental	EU	EN ISO 22032	Water,soil,sediment,tissue	PBDEs
Environmental	Japan	JIS K0311 2008	Stationary emissions	Dioxins and furans
Environmental	Japan	JIS K0312 2008	Industrial and waste water	Dioxins and furans
Environmental	China	HJ77.1-2008	Water	Dioxins and dioxin-like
Environmental	China	HJ77.2-2008	Ambient air,Stationary emissions	Dioxins and dioxin-like
Environmental	China	HJ77.3-2008	Solid wastes	Dioxins and dioxin-like
Environmental	China	HJ77.4-2008	Soil,sediments	Dioxins and dioxin-like
Environmental	China	HJ916-2017	Water,soil/sediments,solid waste,air	Dioxins and dioxin-like



DFS 双数据同时采集进行痕量二噁英 (HxCDD/F) 分析时的色谱峰形



轻松满足 EPA 1613 标准对 2,3,7,8-TCDD 和下一个出峰的 TCDD 25% 峰谷分离要求

微塑料

微塑料 (Microplastics, MPs) 是近年来新污染物研究的热点, 目前常用的检测方法包括热裂解 Py-GC/MS、热脱附 TD-GC/MS、傅里叶红外 FTIR-GC&GC/MS 联用和 ICPMS 等, 用于微塑料及其添加剂和吸附污染物的定性定量分析、及微塑料聚合物表征。

靶向分析

01

- 微塑料、添加剂和吸附的微量有机成分质量浓度
- 颗粒大小、浓度

非靶向分析

02

- 对塑料聚合物进行表征
- 定量复杂基体低浓度化合物

联用方案

03

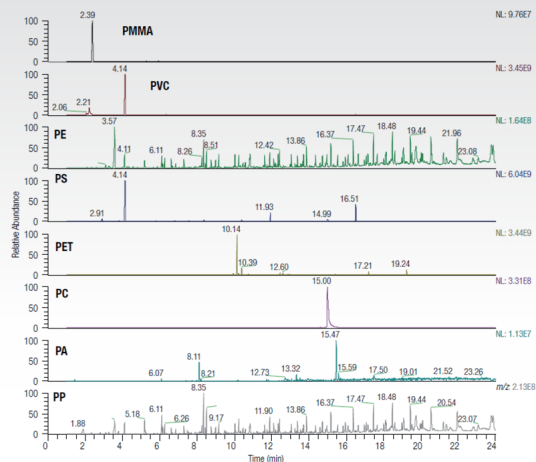
- FTIR 和 GC/MS 同时检测, 优势互补
- 4D 谱图鉴定化合物, 定性更准确
- 常量 + 痕量定量分析, 范围更宽
- 一机六用: GC, IR, MS, GC/MS, FTIR-GC, FTIR-GC/MS



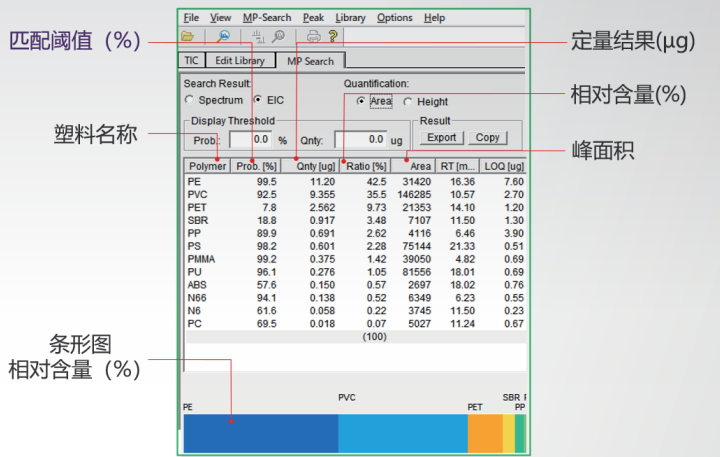
多种方案, 多重选择, 满足微塑料分析不同应用需求

Py-GC/MS 测定环境中微塑料

热裂解法 Py-GC/MS 利用高温裂解产生的特征碎片信息经色谱分离和质谱鉴定, 能够有效鉴别塑料成分和进行定量测定。通过查找微塑料样品的热裂解气质联用谱图中是否含有各种塑料成分的特征热裂解产物, 即可对微塑料样品中的成分进行定性。Py-GC/MS 作为塑料分析研究的常用工具, 方法成熟, 且有完善的微塑料数据库, 可大大方便科研工作者对微塑料的研究。



不同微塑料成分在 Py-GC/MS 上的特征碎片谱图



微塑料谱库自动检索结果



为防止饮用水传染疾病，对饮用水进行化学消毒是国际上公认和普遍采用的消毒工艺，替代消毒剂的使用和水中其他未知污染物驱动对更先进的水质监测流程和技术的需求。常规饮用水处理技术通常无法去除消毒剂（尤其是氯）与饮用水中一些天然有机物（NOM）、藻类有机物（AOM）、人为污染物（杀虫剂、药品、洗涤剂等）、溴化物及碘化物反应而产生的新污染物。

Thermo Scientific™ 离子色谱-质谱联用仪

- 更高的选择性和灵敏度，减少假阳性
- IC-MS 法检测消毒副产物，检出限低至 0.01-0.27 ppb
- 除满足碘乙酸、二氯乙酸、三氯乙酸及卤氧化物等热门 DBPs 的定性定量监测外，可扩展完成所有氯代和溴代卤乙酸的 analysis
- IC-MS 联用方法还可拓展至抗生素、高氯酸盐等强极性化合物分析



离子色谱-质谱联用系统分析水质中卤代乙酸（HAAs）

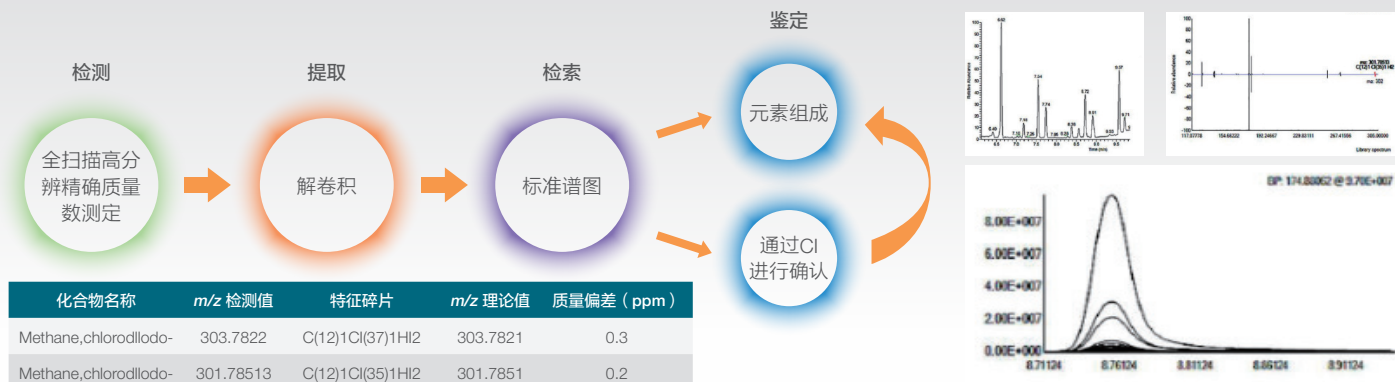
卤代乙酸 IC-MS 分析方法，是美国 EPA 557 引用的标准方法，已通过方法验证，能帮助提高置信度并节省时间。

DBPs	法规方法和分析技术
总三卤甲烷	EPA 501.1 (GC purge and trap) EPA 502.2 (GC-ECD) EPA 524.2 (GC-MS) EPA 551.1 (GC) GBT 5750.10 (GC,GC-MS)
卤代乙酸 (HAAs)	EPA 552.3 (GC-ECD) EPA 557 (IC-MS) GBT 5750.10 (GC,IC,LC-MS/MS)
亚氯酸盐和氯酸盐	IEPA 300.0 (B) and 300.1 (B), ISO 15061, EPA 317.0, EPA 326, and EPA 327 (比色法) GBT 5750.10 (IC)
溴酸盐	EPA 300.0 (B), 300.1 (B), ISO 15061, EPA 302 (2-D IC); EPA 317, 326, ISO 11206, EPA 321.8 (IC-ICP-MS), EPA 557 (IC-MS) GBT 5750.10 (IC)

离子色谱-质谱联用系统和高分辨气质联用仪为当前 DBPs 分析挑战和新 DBPs 发现提供新技术手段

Orbitrap Exploris GC 高分辨气质联用仪分析水中的消毒副产物

完整表征 DBP 混合物中存在的碘代 DBPs，对进一步研究其在消毒水中的反应和潜在毒理效应至关重要。由于基质的复杂性和化合物的超低浓度，水质中碘代 DBPs 鉴定非常困难，基于高分辨率、高质量精度的 Orbitrap Exploris GC 系列工作流程能为新消毒副产物发现提供技术支撑。

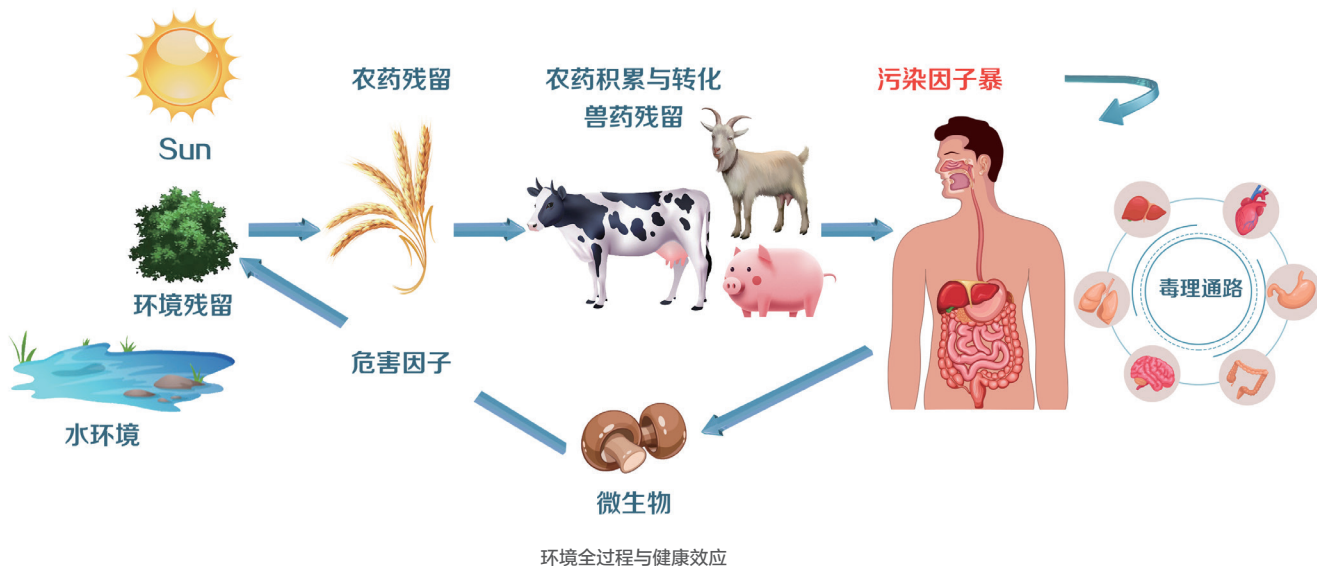


针对碘化 DBPs 谱图解卷积峰检测和化合物结构推测的化合物检测流程

新污染物健康风险与暴露评估

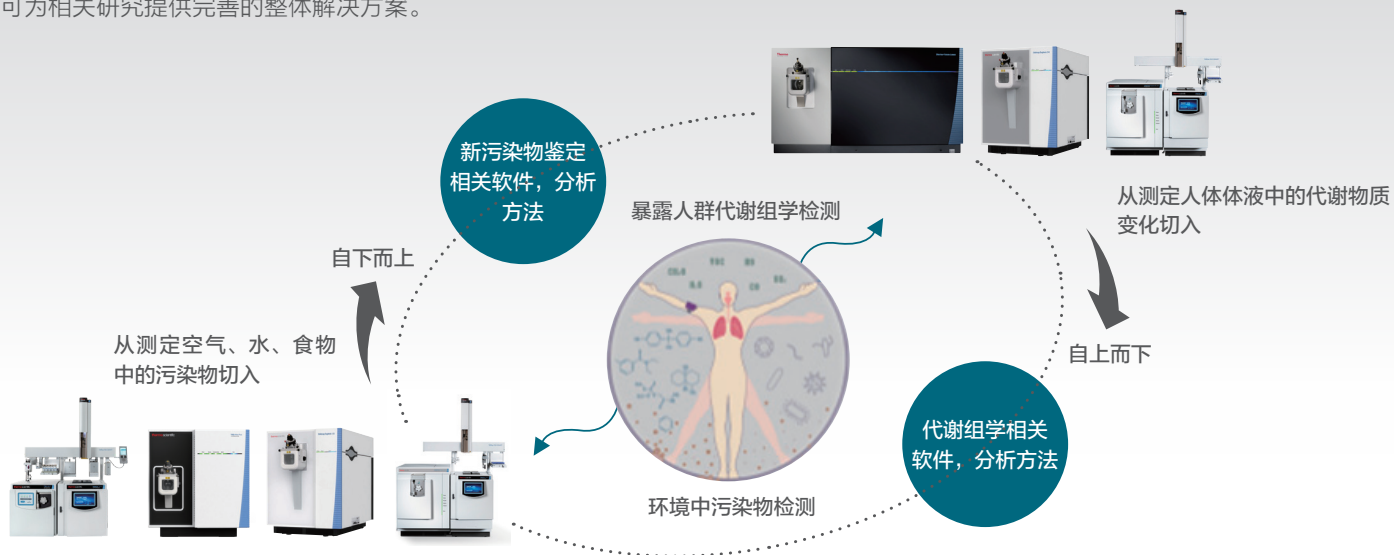
新污染物不仅对生态环境造成损害，而且会进一步通过饮食、水、空气或者直接皮肤接触等方式进入人体，并通过食物链的级联放大作用，最终对人类健康造成巨大风险，如增加患病风险、免疫和炎症反应、氧化应激、遗传损伤和代谢紊乱。暴露于不同类型的污染物可能产生不同的生物效应，基于质谱的代谢组学分析可以为污染物对生物体造成的影响提供更深入的分子机制的理解。

为了应对新污染物带来的诸多潜在风险，不仅需要对其进行浓度和含量监测，还需进一步进行暴露后的健康风险评估，并进行长期追踪，以获得更全面的数据，增强对污染物的治理和健康风险的预防。



内外暴露研究相结合挖掘与疾病相关的关键暴露因素

新污染物与健康风险关系研究，有自下而上（从环境入手）和自上而下（从人体样本入手）两种思路，也可以将两种方法相结合，再结合流行病学、分子生物学以及分析化学等多种手段，全面挖掘与疾病风险相关的关键环境因素。基于质谱的代谢组学方法可以同时检测和量化数以千计的代谢物特征。然而，环境和生物体在内的所有代谢物具有复杂的化学性质和动态范围，赛默飞完整的产品矩阵可为相关研究提供完善的整体解决方案。



创新性样品制备

样品前处理是实验室工作流程中最关键的步骤，60% 以上实验结果误差出现在此阶段，被视为整个分析工作流程中最难驾驭的阶段。环境中新污染物含量极低，样品前处理过程中标准化、自动化、高通量等问题是提高分析效率和确保获得高准确度、高重复性的样品制备效果关键。

Thermo Scientific™ Dionex™ AutoTrace™ 280 固相萃取仪

- 自动选择溶剂进行 SPE 柱的活化、清洗、洗脱
- 6 个萃取通道，可根据需要同时或顺序萃取 1-6 个 样品
- 可处理高达 20 L 的大体积液态样品
- EPA 方法中水样测试认可标准方法



Thermo Scientific™ TriPlus RSH EQuan 850 自动进样器

- 样品可直接进样在线富集
- 自动化在线浓缩，减少人为操作误差并降低成本
- 大体积进样直接改善样品的最低检测限（最大可达 20 mL）



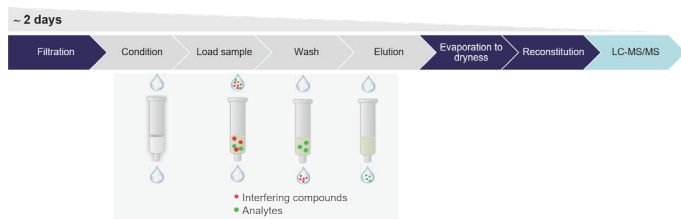
离线 SPE: AutoTrace 280

适用于液体样本或固体、半固体样品提取液中痕量有机萃取和浓缩，尤其适合于大体积液体样品中痕量污染物。与传统液-液提取方法相比速度更快，分析物回收率更高。

在线 SPE: TriPlus RSH EQuan 850 系统

可以将分析时间从小时缩短到分钟

离线 SPE



在线 SPE



离线 SPE Vs 在线 SPE

全系列自动样品制备解决方案，满足低至高通量要求

Thermo Scientific™ Dionex™ ASE™ 350 加速溶剂萃取仪

- 无人值守，可萃取高达 24 份样品
- 全自动在线溶剂混合，实现复杂萃取
- 收集器(60 mL)可直接转移至 Rocket 蒸发器
- 存储 24 种萃取方法和 24 种萃取序列，非常灵活



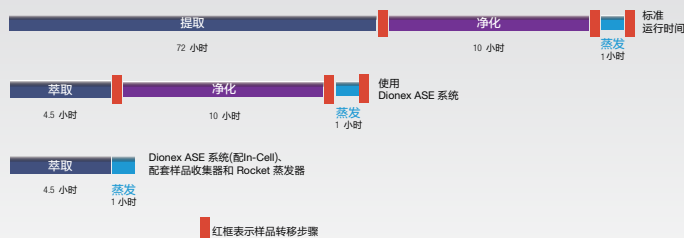
Thermo Scientific™ Rocket 火箭蒸发器

- 可全自动浓缩或干燥多达 18 只 ASE 试管或 6 只大容量烧瓶
- 省去净化和分析过程间的人工样品转移步骤
- 真正的自动操作功能，无需照看
- 用于终点检测的 Genevac AutoStop 功能



ASE+Rocket 样品制备

ASE 溶剂萃取仪和 Rocket 火箭蒸发器充分整合萃取-净化-浓缩一体化高效样品制备优势，完全省去净化和手工样品转移步骤。创新的样品前处理解决方案，帮助优化实验室工作流程，提升实验室生产力，确保获得高准确度、高重复性的样品制备效果。



样品前处理效率 (18 份样品的平均处理时间)

数据整合分析

新污染物分析，不仅需通过整合质谱分析 workflow 驱动的软件解决方案，让实验室人员以更智能、更高效的方式简化从仪器优化、故障排除到方法开发和结果报告的日常检测任务，更重要的是实现从已知到未知化合物的全面检测、峰提取与定量、统计学分析与可视化作图、化合物全面鉴定、通路分析等数据整合分析，挖掘更多有效信息，以支持新污染筛查及风险健康与暴露评估。

量身定制的软件

针对新污染分析，能提供功能强大的软件平台，覆盖从靶向分析至非靶向筛查的峰提取和定量分析软件解决方案，以及定制化报告和选项，包括高级计算、图表和结果标记。

	Compound Discoverer 软件	TraceFinder 软件	Chromeleon CDS 软件
非靶向筛查	●	○	○
靶向筛查	●	●	●
非靶向和靶向定量	○	●	○
仅靶向定量	○	●	●
GxP/21 CFR Part 11 合规性	○	○	●
谱库兼容性	●	●	●
三方仪器控制	○	●	●

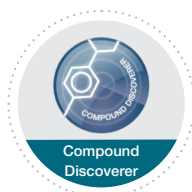
○ = 不适用 ○ = 一般 ● = 可以 ● = 较好 ● = 非常好



- 高效审计追踪功能
- 创新的 eWorkflow 设计
- 兼容 LC、GC、LC和MS
- 可控超 400 种第三方仪器



- 基于 SRM 的常规/高分辨定量分析
- 基于数据库/谱库的靶向、非靶向筛查
- 工作活动视图报告
- 五十个预配置报告模板



- 指纹谱分析，相对定量
- 谱图解卷积、简化
- 云谱库、本地谱库自动检索
- 代谢通路分析
- 统计分析 with 图形化

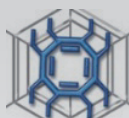
突破污染物鉴定束缚：标准品谱图库+线上数据库+ mzLogic 算法



标准品数据库

19,871 个化合物 Library, 谱图数量 >897.5 万, 每两周实时更新

	Compounds	Trees	Spectra	QM models
Therapeutics/Prescription Drugs	1,047	2,030	298,965	
Drugs of Abuse/Illegal Drugs	924	1,350	162,738	
Sports Doping Drugs	214	334	37,186	
Steroids/Vitamins/Hormones	21	49	10,268	
Endogenous Metabolites	1,203	2,170	910,401	
Natural Products/Medicines	79	143	119,736	
Natural Toxins	64	99	132,882	
Counterfeit Drug (Therapeutic)	71	116	11,297	
Extractables/Leachables	349	583	124,349	
Pesticides/Herbicides	536	996	108,073	



线上数据库

271 个数据库, 114 百万化合物结构

Home About us Web APIs Help Sign in

ChemSpider
Search and share chemistry

Simple Structure Advanced History

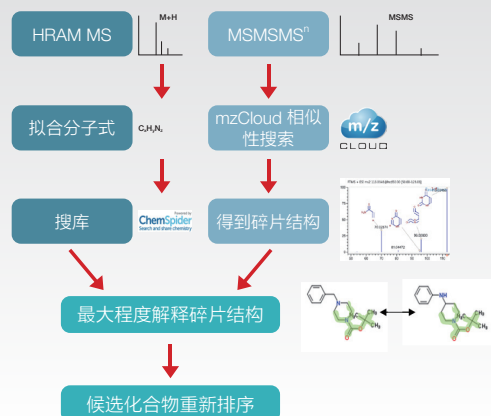
114 Million
chemical structures

271
Data sources



mzLogic 算法

突破数据库限制的新工具，增加鉴定结果及可信度



赛默飞世尔科技

上海

上海市浦东新区新金桥路27号3,6,7号楼
邮编 201206
电话 021-68654588

成都

成都市临江西路1号川投大厦1406室
邮编 610041
电话 028-65545388*5300

南京

南京市中央路201号金茂广场南楼1103室
邮编 210000
电话 021-68654588*2901

北京

北京市东城区北三环东路36号环球贸易
中心C座7层/8层
邮编 100013
电话 010-87946888

沈阳

沈阳市沈河区惠工街10号卓越大厦3109室
邮编 110013
电话 024-31096388*3901

西安

西安市高新区科技路38号林凯国际大厦
1006-08单元
邮编 710075
电话 029-84500588*3801

广州

广州国际生物岛寰宇三路36、38号合景
星辉广场北塔204-206单元
邮编 510000
电话 020-82401600

武汉

武汉市高新四路22号58众创光谷产业园A座1楼2-5楼
邮编 430075
电话 027-59744988*5401

欲了解更多信息，请扫描二维码关注我们的微信公众账号与官方网站。

赛默飞世尔科技在全国有共14个商业办公室。本资料中的信息，说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。



赛默飞
官方微信



赛默飞
官方网站

热线 800 810 5118
电话 400 650 5118
www.thermofisher.cn

ThermoFisher
SCIENTIFIC