2024首届分析科学与仪器大会

THE 1st NATIONAL CONFERENCE ON ANALYTICAL SCIENCE AND INSTRUMENTATION (NCASI 2024)

分析科学 · 创造未来

ANALYTICAL SCIENCE CREATES FUTURE

会议论文

2024.11.8-12 中国·成都

2024 首届分析科学与仪器大会会议论文目录

分会场：1.原子光谱分析与仪器 1
单细胞二维分析的研究 1
生物体液样本成像分析的样本制备方法探索 2
水稻中镉的来源解析：从水溶态镉到镉同位素 3
云南“三江并流”区域典型重金属污染特征、迁移转化及溯源分析研究 4
基于原子光谱技术的纳米颗粒分析表征新方法研究 5
HPLC-ICP-MS/ESI-MS/MS 平行联用技术及金属组学研究 6
微型化原子发射光谱系统研制与分析应用 7
基于靶向金属标签的元素质谱生物医学分析应用 8
多接收磁质谱单颗粒元素与同位素分析方法开发及应用 9
微等离子体在熔盐电解及原子光谱在线分析中的应用 10
基于固体进样的重金属快速检测技术 11
便携式原子荧光光谱仪：从基础研究到仪器构建 12
基于多维检测的单细胞分析研究 13
DNAzyme 纳米机器原位成像抗生素诱导细胞炎症效应 14
元素砷的金属组学研究 15
原子光谱微型化进样技术与关键部件研究 16
现场应用场景的原子荧光光谱仪研制与应用 17
多组学探究金属有机骨架材料 ZIF-67 的抗菌性 18
食品中代森类农药的光谱检测方法改进及仪器研制 20
基于 ICP-MS 与化学计量学的辣椒品种差异分析及指纹图谱研究 21
基于等离子体反应的汞同位素分析方法开发及汞同位素分馏研究 22
基于电弧点火器/压电直接放电微等离子体原子发射光谱研究 23
利用 ICP-MS 表征二维银纳米颗粒的方法研究 24
基于量子点阳离子交换反应的原子光谱分析新方法研究 25
油液分析光谱仪的国产化实践与应用 26
微塑料分别与甲基汞和无机汞联合暴露对斑马鱼胚胎毒性研究 27
改进应用 ICP-MS/MS 分析全氟/多氟烷基化合物(PFAS)中总氟的方法 28
均相光化学蒸气发生-原子荧光光谱法用于硒的形态分析 29
3D 打印尖端放电微等离子体发射光谱仪器研制及现场分析应用 30
基于低浓度甲酸介质中镉辅助砷的高效光化学蒸气发生 31
DNA 诱导金纳米棒聚集效应用于邻苯二甲酸酯的可视化检测 32
碲高效光化学蒸气发生：锑和铁离子的协同作用 34
低背景双配体 Cu-MOF 纳米探针用于草甘膦农药的植物组织成像、快速筛查以及灵敏检测 35
基于地理信息系统的土壤重金属污染特征、来源分析和风险评估——以云南三江并流保护区典型区为例 36
便携式一步泡腾片微萃取结合智能手机数字图像比色法:现场快速检测痕量镍离子 37
一种用于流式细胞术中光热外差检测的低噪音，高增益的直流抑制光电检测器 38
电感耦合等离子体发射光谱法测定乙二醇中 Fe,Cr,Ni 39
微型原子发射光谱仪的级联放电微等离子体激发源研制 40

铂的高效光化学蒸气发生：分析应用及机理探究.....41
共价有机框架锚定 Cd 单原子：双功能吸附剂和光催化剂用于硒的 PVG-AFS 高灵敏检测.....42
基于免疫金标记银放大策略的便携式毛细管-微等离子体原子发射光谱仪：用于癌胚抗原检测的研究.....43
基于微孔压电超声雾化的高效 spICP-MS 单颗粒进样系统.....44
多接收磁质谱单颗粒元素与同位素分析方法开发及应用.....45
基于质谱成像技术解析无机汞暴露致肾脏毒性的特征.....46
利用 ICP-MS 进行单细胞中金属的准确定量分析.....47
细胞炎症诱导激活 CRISPR/Cas9 纳米机器及其基因编辑应用.....48
电感耦合等离子体发射光谱仪器发展及性能对比.....49
电感耦合等离子体光谱仪测定工业级丙二醇甲醚醋酸酯中的钾元素.....50
分会场：2. 分子光谱学与仪器.....51
拟肽大环的合成组装识别和跨膜转运.....51
太赫兹痕量探测系统与转动波谱分析.....52
气敏性萘酰亚胺类有机小分子光谱分析.....53
微纳复杂体系的大视场单颗粒成像.....54
光学治疗探针的设计合成及应用.....55
用于时间分辨荧光生化分析的β-二酮类铕(III)荧光配合物.....56
化学发光法定量表征氧空位.....57
DNA 荧光纳米探针用于肿瘤细胞 microRNA 灵敏检测与成像分析.....58
环境与能源研究中活性中间体单颗粒、单分子成像技术与仪器.....59
基于核酸探针的荧光各向异性分析新方法的构建及应用.....60
单分子化学成像新方法新仪器研制.....61
分子探针与活体传感.....62
碳笼罗丹明用于生物氧化还原的化学精准调控.....63
基于分子探针与谱效导向的中药药效物质辨识体系构建及应用.....64
Ag+. . . Ag+相互作用促进的功能多肽配位聚合物水凝胶的构筑和应用.....65
面向公共安全领域的化学传感与可视化检测方法研究.....66
高信息量穆勒矩阵偏振手性成像分析.....67
荧光抗癌试剂触发副凋亡和铁死亡用于胶质瘤的治疗.....68
单个活细胞内多组分相互作用原位实时分析系统研制.....69
气固界面能量转移催化发光传感系统研究.....70
早期急性肾损伤多模态体系的构建及应用研究.....71
纳米酶的设计、功能性调控及其在多色可视化生物传感中的应用.....72
纳米材料结构发光分析方法研究.....73
悬浮单液滴测量学.....74
单颗粒分析技术与生物标志物测量.....75
用于临床疾病诊断的光学探针.....76
含铁金属有机框架材料在癌症治疗中的应用.....77
PE 改性可降解塑料性能的快速测定.....78
全时域荧光寿命测试系统及其在热活化延迟荧光体系的应用.....79
铁死亡的多器官成像揭示吸烟诱导的肺损伤和动脉粥样硬化进展之间的联系.....80
原位形成小球藻复合水凝胶用于修复线粒体代谢功能治疗缺血性心脏病.....81

双催化纳米反应器通过协同化学动力学-饥饿治疗实现抑制肿瘤转移.....82
DNA 纳米探针用于肺癌的早期检测.....83
DNA 四面体纳米诊疗探针的设计及应用.....84
多肽 Dansyl-HENRYKW 对 Zn^{2+}的荧光传感检测.....85
红豆杉科植物叶的拉曼光谱研究.....86
基于表面等离子体耦合发射的水凝胶性质研究新方法：实时监测水凝胶纳米级溶胀行为.....87
具有聚集诱导发光特性的协同激活的双锁探针用于原位标记脂滴及精准成像动脉粥样硬化斑块.....88
温和条件下的活泼羧酸酯酰胺化反应及其光谱传感研究.....89
局域表面等离子体增强用于致病菌的可视化检测及成像.....90
具有线粒体靶向的蛋白结合光敏剂用于增强光动力治疗.....92
基于硒的核-卫星纳米组件重编程肿瘤相关巨噬细胞来增强癌症免疫治疗.....93
构建一种新型的智能手机比色平台用于检测食品中的丙烯醛.....94
基于过渡金属配合物框架的多检测荧光探针的合成及应用.....96
光谱溶液标准物质的应用.....97
利用放射治疗增敏剂增强肿瘤细胞光动力消融效果.....98
微等离子体辅助合成双配体铕金属有机框架材料用于比率荧光及可视化检测碱性磷酸酶.....100
新鲜食品腐败的无损视觉检测.....102
一种基于 HPQ 的近红外染料，用于对细胞和小鼠肿瘤部位进行原位精准成像.....103
分会场：3.SERS 50 年.....104
SERS 的电磁场机制.....104
从材料、结构、方法等多角度逼近 SERS 检测极限浅析.....105
准金属 SERS 基底的研制及其思考.....107
SERS 活性纳米孔用于单分子蛋白质分析与测序.....108
SERS 光谱的模拟：Kramers-Heisenberg-Dirac 微扰理论的启示.....109
如何开展可靠 SERS 定性分析和如何开展可解释的 AI+SERS 研究.....110
SERS analysis of extracellular vesicles: challenges and perspectives.....111
表界面催化反应 SERS 检测与挑战.....112
AI 驱动 SERS 研究的数据规范和评价指标.....113
活细胞的 SERS 分析.....114
基于柔性手指阵列亚纳米间隙的光场调控及医学 SERS 检测.....115
食品加工在线检测技术助力可持续发展.....116
基于 MOFs/金银纳米复合体的新型 SERS 传感器的制备及应用.....117
基于 enzyme@MOFs 和比率拉曼技术设计高灵敏度 SERS 传感器用于葡萄糖的检测.....118
生物正交靶向 SERS-生物发光双模态成像实时示踪三阴性乳腺癌器官转移.....119
新一代免疫层析检测技术平台--- 基于 SERS 的高灵敏定量免疫层析法.....120
基于表面增强拉曼散射的疾病高精准诊断.....121
醇配体含量在高温热注入法合成 AZO NPs 体系中对杂原子掺杂量、粒子形貌和光学性质的影响.....122
气凝胶态 SERS 技术集群在军工领域相关微痕量分析中的应用.....123
Au-Ag_2S 纳米粒子结构演化对其在光催化、光热及光动力治疗方面影响的 SERS 探究.....124
柔性 SERS 传感器的气体小分子精准测量研究.....125

高灵敏度 SERS 检测平台应用于毒素和核酸分析.....126
基于诱导机制的拉曼纳米探针用于生物标志物检测.....127
高密度、高均匀热点分布的 SERS 基底.....128
多重竞争型适配体 SERS 适配体传感体系结合机器学习对多种食品污染物的同时高灵敏检测.....129
基于 AuNRs@ZIF-8 复合固态基底对农药 4-ATP 的 SERS 检测.....130
基于 SERS 阵列的痕量瞬态物种检测.....132
基于 SERS 技术在法庭科学中毒物的精准鉴定.....133
原位光电化学-表面增强拉曼光谱传感平台的构建与应用.....134
超快速合成具有协同增强性能的双金属异质树突用于 SERS 检测多种污染物.....135
表面增强拉曼结合机器学习用于单独和混合农药的快速检测.....136
免标记表面增强拉曼结合 CNN 用于尿液病原菌的快速检测.....137
有机小分子单晶半导体 SERS 基底的现状与未来.....138
表面增强拉曼光谱 SERS 生物探针.....139
Ti_3C_2 MXenes 材料的可控氧化调节及其 SERS 性能研究.....140
多孔 SERS 基底在生化传感中的应用.....141
基于硅纳米线阵列的三维无机印迹 SERS 基底的构建及性能研究.....142
表面增强拉曼光谱揭示电极异质界面电子转移调控析氢反应零电荷电势.....143
基于磁固相萃取-表面增强拉曼光谱定量检测生物基质中痕量纳米塑料.....145
离子标记法监测 Ag 等离激元催化过程中的热空穴.....146
基于 Ag/Ag2O@ COF 复合 SERS 基底对铀酰离子的痕量分析研究.....147
应用场景下微量铀的高灵敏 SERS 检测方法研究.....148
结构可控 Ag 气凝胶优化 SERS 数字微流控平台用于超灵敏和高通量检测有害物质.....149
分会场：4.激光光谱与质谱.....150
超高空间分辨 LA-ICPMS 系统的研制.....150
激光光谱关键器件与技术应用.....151
LA-ICP-MS 技术在材料金属组学的应用研究.....152
激光诱导击穿光谱精确定量化理论框架及应用.....153
激光后电离质谱的研制.....154
基于大连相干光源的中性团簇红外光谱研究.....155
激光剥蚀 ICP-MS 高灵敏分析研究.....156
基于 ps-LIBS 的 2D/3D 快速元素成像技术研究.....157
石英增强激光光谱传感技术.....158
激光诱导击穿光谱信号增强技术的研究及应用.....159
非变性质谱离子源研制.....160
RSR-MS：基于参考的质谱组织和细胞成像超分辨率重构方法.....161
一种激光光纤准直聚焦的同轴观测质谱离子源光学系统.....162
原位红外光谱技术的应用分析.....163
非变性质谱的毛细管喷针拉制工艺研究.....164
体内氮芥-DNA 加合物类型与分布研究.....165
基于改良的 QuEChERS-气相色谱串联质谱法筛选测定植物源基质中 50 余种农药残留.....166
基于负载磷钼酸铵的介孔硅薄膜的阳离子交换作用与限域生长 $CsPbBr_3$ 纳米晶策略的 Cs^+荧光传感.....167
基于 $CsPbCl_xBr_{3-x}$: Mn^{2+}纳米晶阴离子交换作用的氢溴酸西酞普兰荧光可视化检测.....168

分会场：5.电化学分析与仪器.....169
Photo-induced electrochemiluminescence biosensing and imaging.....169
研究电致化学发光的高级仪器设备.....170
高时空分辨多模测量扫描电化学显微镜.....171
基于微流控电分析的分子 POCT 研究及应用.....172
“单”电极电化学发光装置及分析应用.....173
力学微环境对肿瘤细胞特性影响的扫描电化学显微镜研究.....174
电化学传感器用于动态监测癌细胞.....175
核酸分子界面组装及传感成像.....176
贵金属合金纳米簇近红外 I 区电化学发光信号放大及在分子灵敏检测中的应用.....177
基于金属气凝胶的柔性电分析传感.....179
基于 PEI/Zr4+修饰的水凝胶复合纳米通道高灵敏度检测卡那霉素.....180
基于双功能 Zr-MOF 介导的有机光电化学晶体管生物传感器检测 FTO 蛋白.....182
细胞膜稳定 ZIF-8，用于 DA 的实时检测.....183
电化学沉积技术构建新型分析界面用于灵敏免疫分析.....185
激光诱导石墨烯基电化学生物传感器的构建与快速检测应用.....186
新型电化学传感器构建及其对疾病标志物即时检测.....187
高分辨扫描电化学显微镜表征技术与电催化原位分析方法.....188
电化学发光成像的调控方法.....189
基于四面体 DNA 纳米结构的光驱动电化学生物传感器用于伏马菌素 B1 检测.....190
金属纳米团簇电化学发光探针的性能调控及其生命分析应用.....191
基于 MOF 材料的便携式和可穿戴式传感研究.....192
纸基核酸电化学生物传感新方法研究.....193
基于代谢产物的电化学分子印迹传感器构建及其在 TC-ARB 定量检测中的应用.....194
MOFs 材料在电致化学发光分析中的应用研究.....195
“免电沉积阳极溶出伏安”和“均相电化学”重金属传感新策略.....196
生物质碳点修饰的微电极用于体内监测多巴胺具有高选择性和生物相容性.....197
基于多巴胺增敏石墨炔纳米材料的光电化学传感平台构建与应用.....199
基于激光诱导石墨烯/MoS_2/Au 复合物的近室温 NO_2 传感器研究.....200
基于核酸适配体协同作用的高选择性识别 PFOA 的分子印迹电化学传感器的开发与应用.....201
银纳米颗粒修饰玻碳电极用于电化学测定维生素 B12.....203
基于分子印记聚合物-适配体三明治夹心结构与纳米酶辅助光电化学-比色双模式检测的通用传感平台.....204
基于双极电极的全固态柔性自供电传感器阵列用于双酚 A 高灵敏视觉检测.....205
苝衍生物自组装光电化学材料测定饮料中抗坏血酸.....206
基于 Fe_3O_4@Au 磁性纳米材料构建电化学-比色双模式生物传感器用于 microRNA-222 的灵敏检测.....208
基于差分脉冲伏安法-电化学发光的双模传感器用于检测癌胚抗原.....210
基于 CRISPR/Cas12a 和磁辅助构建灵敏检测乙肝病毒的电化学发光生物传感平台.....211
基于 Bi-ZnO 纳米片的光电化学传感器对手性色氨酸的有效识别.....213
磁浮分离介导啶虫脒均相检测传感新策略研究.....214
基于 ZnPTC-AuNPs-CdS 复合材料的光电化学免疫分析.....215
基于一种磺酰肼有机发光体的 ECL 免疫传感器的构建.....216

具 POD 酶样的单分散金纳米颗粒修饰 MoS_2 纳米片的电化学 H_2O_2 传感用于抗癌药物评价.....217
N 掺杂碳碗状半球负载超薄 P 掺杂 MoS_2/MoO_2 纳米片用于 血清和活细胞中多巴胺的电化学传感.....218
CuS 纳米颗粒锚定在富硫空位的 N-掺杂碳纳米纤维上用于对苯二酚的电化学和比色双模式传感.....219
通过等离子蚀刻原位构建 NiCo 层状双氢氧化物纳米片阵列用于食品中葡萄糖的非酶电化学传感.....220
利用高时空分辨率 ECL 成像技术，对工业纯钛及其合金的腐蚀行为进行表征和预测.....221
光启动自催化异质结调控的多信号有机电化学晶体管传感平台用于疾病早期诊断.....222
可穿戴电化学传感中的微观尺寸效应研究.....223
碳纳米管限域 MnO 自发沉积 Pb(Ⅱ)Hg(Ⅱ)双金属的超高灵敏检测.....224
Cu-BTC/FeCo-MOF derived carbon composite based molecular imprinted electrochemical sensor for highly sensitive and selective detection of Benomyl.....225
分会场：6.复杂体系的色谱分析.....226
样品制备仪器装置研究进展.....226
中药现代化中的样品前处理技术与仪器.....227
样品前处理材料与分析技术研究.....228
毛细管电色谱富氮共价材料基整体柱的制备与分析应用.....229
毛细管电泳分离分析的特色优势及其仪器性能的欠缺.....230
气相色谱开管柱制备研究.....231
基于移动反应界面的聚焦电泳成套仪器设备与应用.....232
共价有机骨架毛细管气相色谱固定相.....233
基于毛细管电泳技术之上的六种电动分离模式.....234
$SiO_2@SiO_2$ 核壳微球的放大制备与应用.....235
代谢组学的现状和挑战.....236
基于衍生化技术的色谱-质谱分析方法.....237
单细胞多维度质谱分析.....238
微流控体外诊断新技术与新仪器研究.....239
基于膜蛋白靶向多肽的细胞外囊泡高效亲和分离分析新方法.....240
基于生物特异性识别的功能化微柱与 CE/CEC-MS 在线联用分析.....241
尺寸排阻-化学亲和双机制分离材料及其对生物样品的高选择性富集方法.....242
热辅助微孔阵列式气膜分离装置的构建及其于食源性细菌挥发性标记物的快速检测应用研究.....243
单晶共价有机框架色谱固定相制备及其色谱行为研究.....244
新型硝基微孔有机网络涂覆固相微萃取纤维用于高效萃取检测取代对苯二胺及其醌类衍生物.....245
磁性多孔骨架材料的制备及其食品分析检测应用.....246
多孔分子笼材料用于高效液相色谱手性分离.....247
多孔有机材料在中药中有害物分离富集中的应用.....249
肝癌循环肿瘤细胞的精准捕获材料.....250
高性能金属有机骨架电色谱固定相的理性构建及其在酶抑制纳米材料筛选中的应用.....251
复杂基质样品中靶向和非靶向脂质分子分析方法优化与应用.....253
基于色谱质谱的复杂体系小分子分析新方法研究.....254

动态组合多肽库的组学分析与分子识别功能研究 255
小样本色谱系统保留时间的预测方法研究 256
基于化学衍生-计算机模拟二级质谱图数据库策略的酰基辅酶 A 全分析方法建立及其在肝癌生物标志物研究中的应用 257
阀上超临界流体萃取色谱分离用于单卵母细胞脂质组分析 259
基因毒性物质与 DNA 相互作用的泛亲和 ACEC 研究 260
有效碳数法在工业丙酮气相色谱分析中的应用 261
气相色谱-离子迁移谱测定富乙烷中超痕量一氧化氮 262
细胞外囊泡的色谱分离和药物递送 263
利用高通量计算模拟与体外实验模型相结合的方法，综合筛选和分离桑黄中潜在的乙酰胆碱酯酶抑制剂 264
一种开源的毛细管柱上单点多波长吸光度检测器 265
热辅助阵列气膜分离策略在新生儿食品及药品白念珠菌污染快速检测中的应用 267
苯基吸附剂对防风中香豆素类成分的萃取性能研究 268
2D 氢键有机骨架分子片用于挥发性有机化合物的高效固相微萃取 269
光辅助-辅剂示踪-气膜分离分析策略的构建及其在复杂体系中快速检测过氧亚硝酸根阴离子的应用 271
基于 ZIF-8 原位固定化和柠檬酸刻蚀法增强 AChE 活性 272
基于多模式质谱技术的中药三七“生熟异用”药效物质辨识及质量评价研究 273
分子印迹技术：从亲和分离纯化到挑战性应用 274
UiO-66-F4@PAN 纳米纤维复合膜固相萃取分析食品中氟喹诺酮类抗生素残留 275
新型液相色谱固定相的研制及其应用 276
动力学调控的金属有机骨架气相色谱固定相 277
壳聚糖-海藻酸盐-纤维素三维多孔海绵吸附剂的研制及其在阴离子染料富集和检测中的应用研究 278
苯硼酸功能化高结晶度荧光共价有机框架作为利福霉素抗生素和水的双重性能传感平台和利福霉素抗生素的吸附剂 279
基于 PFE 结合 GC × GC/TOF MS 的富油煤中小分子化合物结构解析 281
同时进行吸光、荧光和非接触电导检测的泰勒弥散分析系统 282
热分解法制备表面多级孔 UiO-66@SiO_2 核壳固定相及其色谱分离性能 283
基于 MOFs 的 OT-ACEC 药物筛选新方法研究 284
基于共价有机骨架材料的前处理新方法的开发 285
细胞外囊泡的规模化制备新方法与应用 286
整合富集多重中心切割二维液相色谱联用串联高分辨率质谱和分子网络技术提升新天然产物的发现效率−以工业大麻为例 287
分会场：7.微流控与微分析仪器 288
木质通道用于小分子的选择性识别、分离和传感 288
微流控单细胞病毒学研究 289
微流控类器官芯片系统中的器官互作研究 290
新型纳流控器件的制作及其在生物分析中的应用 291
微流控可控多腔室液滴的制备及其应用研究 292
基于光热调制激光背向散射干涉的微体积生化分子检测技术与系统 293
蛋白酶激活的化学发光探针设计及体内外分析 294
微流控肿瘤液体活检与纳米药物体内命运分析 295

自动化检测阿尔兹海默症 miRNA 的数字微流控-化学发光法 296
8min 超快速核酸扩增系统 297
基于多孔板的海藻酸钠凝胶微球在线制备平台及应用研究 298
基于微流控芯片的光热超快 PCR 研究 299
基于微流控质谱技术的细菌耐药性快速检测与机制解析 300
纳米孔微柱阵列芯片用于 CTC 空间捕获与分子分型 302
微结构辅助的多功能惯性微流控芯片构建与应用 303
多细胞系统可寻址多室微球的微流控工程 304
基于肝肠轴器官芯片的药物药效与毒性评估研究 305
海洋重金属离子在线电化学检测仪器与系统 306
使用 3D 微流体技术可控合成多室凝胶微球 307
重力取向微流控芯片用于生物相容性一步制造载细胞微凝胶球 308
基于微流体层流纳米组装的生物传感器的开发及其应用 309
微球数字化免疫分析及其在蛋白质超灵敏检测中的应用研究 310
一种用于多种抗生素同时检测的集成化微流控装置 312
基于电磁阀分选技术的肿瘤球大小与形状控制及其在精准药物测试中的应用 313
金纳米团簇传感阵列结合机器学习与智能手机拍照检测抗生素 314
基于功能化采样拭子阵列的便携式 ATP 生物发光仪对活沙门氏菌进行现场检测 315
光子晶体微珠微流芯片对农药残留快速检测研究 316
基于液晶的生物传感器用于食源性致病菌的无标记检测 317
分会场：8.质谱科学与仪器 319
高质量分辨原位液相二次离子质谱系统研制 319
基于质谱的多组学综合分析用于分子药理学研究 320
ICP-MS 单细胞分析 321
基于光催化纳米酶的 5mC 选择性氧化 322
DNA/RNA 修饰的精准分析与表观遗传研究 323
基于选择性富集及异构体分辨串联质谱的低丰度脂质组分析方法 324
界面电化学中间体动态命运质谱测量 325
一种基于质谱的高分辨率空间蛋白质组分析新方法 326
RNA 激活的 CRISPR/Cas12a 体系及其活细胞成像 327
基于 CRISPR-Cas12a 体系检测小分子和蛋白质 328
国产内螺旋结构的通道电子倍增器及其性能研究 329
原位电化学质谱分析系统的搭建与应用 330
小核酸药物体内时空分布规律研究 331
水自由基阳离子与碳一化合物的反应研究 332
便携式数字离子阱质谱仪的研制与应用 334
基于 CRISPR-Cas 系统的传感与调控研究 335
配体免修饰的靶蛋白质组技术用于性激素 17β-雌二醇靶蛋白鉴定 336
化学标记技术辅助的糖蛋白质组学研究 338
石油分子工程与石油组学 339
高压液-固催化反应的在线质谱表征 340
直接电离质谱技术和仪器研发及标准化 341
高盐浓度液体内弱相互作用结构的直接原位质谱分析 343
岛津创新自由基诱导解离（OAD）技术开启化合物结构解析新篇章 344

高端质谱分析仪器的研制与应用.....345
宽能可编程微波等离子体离子源的研发与应用.....346
在微液滴中无催化加速单糖的脱水反应.....347
减少胞质 DNA 成像中的干扰：一种新方法.....348
基于毛细管电泳-单分子荧光成像系统的蛋白质-DNA 复合物检测.....349
UHPLC-MS/MS 揭示脱氧核苷酸库清除系统控制 DNA 6mA 掺入.....350
基于脱氨酶的全基因组 R 环定量及定位.....351
鹿茸干细胞外泌体对溃疡性结肠炎的治疗作用及机制研究.....352
质谱-荧光双模态监测单细胞铁死亡过程中的脂质.....353
光聚焦-诱导电喷雾质谱法用于原位光化学反应监测及动力学研究.....354
甲基化腺嘌呤核苷对体外培养红细胞分化的影响初探.....355
原位阶梯伏安扫描流通式电化学质谱用于反应路径成像.....356
电化学自由基中间体的高灵敏快速标记筛查和非靶向质谱分析.....357
核酸纳米机器构建及其对炎症效应的活细胞成像应用.....358
LC-MS 分析 mRNA 的 poly A 尾长.....359
钴对红系祖细胞毒性作用研究.....360
HPLC-MS/MS 检测 N6-甲基腺嘌呤核苷(m6A)在癌症中的改变.....361
水自由基阳离子介导的 N_2 和 CO_2 常温常压条件下构建 C-N 键.....362
有机气溶胶中多环芳烃结构解析.....363
中心切割二维液相色谱串联质谱联用法用于寡核苷酸药物杂质鉴定.....364
用电荷标记 Paternò–Büchi 反应和超高分辨率质谱鉴定烯烃中的双键位置.....365
中性解吸电喷雾萃取电离质谱直接快速分析甘草蜜炙过程中的品质变化.....366
纳升解吸电喷雾电离质谱成像结合 Paternò-Büchi 衍生化反应对脂质深层次分析的方法研究.....367
磁性生物炭磁固相萃取-PY-GC/MS 法测定水中纳塑料.....368
串级离子迁移谱仪的常压离子碎裂技术的研究与应用.....369
基于空气的介质阻挡放电离子源的研制与应用.....370
高效液相色谱-荧光检测 siRNA 药物的方法开发及应用.....371
卤代醌暴露对哺乳动物线粒体 DNA 的影响.....372
电化学-质谱联用技术在线研究细胞力学信号转导过程.....373
柱前衍生高效液相色谱-质谱法测定 HN1-二肽加合物.....374
电化学-质谱联用技术研究单细胞力学信号转导通讯过程.....375
基于电喷雾电离质谱的非侵入性呼气一氧化氮检测方法及其在临床应用中的研究.....377
亲水作用液相色谱-质谱法高灵敏分析血液 microRNAs.....378
基于顺次电离质谱分析蜜制甘草的品质形成机制.....379
单细胞 ICP-MS 检测活细胞对纳米颗粒的摄取.....380
基于超高效液相色谱-四极杆/轨道阱高分辨质谱的合成大麻素类新精神活性物质质谱裂解规律研究.....381
基于微波等离子体炬解吸电离质谱法的烟叶原位分析.....382
生物检材中奥卡西平、利卡西平和卡马西平的 GC/MS 检验.....383
Ag^+介导毛细管电泳核酸分析.....384
核基质附着区 DNA 表观遗传修饰分析.....386
基于血清代谢组学的糖尿病合并冠心病的代谢分子标志物分析.....387
CAPTURING CRITICAL SITES OF PROTEIN-DNA COMPLEXES BY A HIGHLY

SENSITIVE ENZYME COMPLEX METHOD..... 388
基于双链特异性核酸酶荧光各向异性信号放大检测 miRNA..... 389
一种吲达帕胺的 LC-MS/MS 分析方法建立..... 390
一种严格消除核 DNA 的 UHPLC-MS/MS 检测线粒体 DNA 中 5mC 丰度的方法研究..... 391
基于固相萃取和稳定同位素稀释 UHPLC-MS/MS 准确定量免疫激动剂环鸟苷酸-腺苷酸
..... 393
微探针质谱前端（μPESI）的研发与应用..... 394
新一代行波离子导向技术的研制和质谱仪开发..... 395
原位电离质谱技术在毒药物案件中的应用..... 396
稀有气体同位素质谱仪离子源设计.....397
分会场：9.质谱多组学和空间成像.....398
Cross-Organ Impacts of Air Pollution on Energy Balance.....398
基于化学选择性探针与同位素标记结合的亚代谢组分离及全定量定性分析.....399
基于质谱的结构特异糖蛋白质组学及生物医学应用..... 400
亚细胞分辨分子质谱成像.....401
单细胞代谢物质谱流式细胞仪研制.....402
从高覆盖到高通量单细胞代谢组学分析方法及应用..... 403
基于质谱的脂质组学与空间多组学分析..... 404
质谱成像技术驱动精准药学研究..... 405
质谱成像与空间代谢组学应用进.....406
时空组学技术在肿瘤研究中的应用.....407
Mass spectrometry imaging-based multi-modal technique for environmental toxicology....408
neofleX 质谱仪助力多分子维度空间组学表征. 409
基于质谱技术的不同分子亚型乳腺癌核酸修饰特征研究.....410
单细胞代谢物分析质谱仪研制及应用.....411
细颗粒物暴露诱导的外泌体整合素通过整合素/SRC 信号通路损害大鼠主动脉内皮功能
.....412
基于纳米基底辅助的多功能质谱成像研究.....413
岛津质谱成像技术助力临床与药物研究.....414
岛津质谱成像技术助力临床及药物分析研究.....415
新污染物双酚 AF 扰动腺苷代谢致小鼠结肠炎性损伤作用研究.....416
基于 LC-MS 代谢组学技术研究急性肾损伤的核苷酸代谢紊乱.....417
化学蛋白质组学分析金属类小分子的靶蛋白及其毒作用机制.....418
生物光成像引导空间代谢流技术追踪循环肿瘤细胞介导的多器官转移的代谢活动....419
基于代谢组学探讨车前子提取物对急性肺损伤小鼠的保护作用.....420
基于液质联用技术的核酸修饰组学分析新方法开发及临床应用.....421
基于 HDX-MS 和 MSI 技术开发潜在镇痛药物 - 新型 σ 1 受体抑制剂吡唑并[3,4-d]嘧啶
-4-酮类衍生物.....423
基于质谱的疾病肽组学在阿尔兹海默症患者诊断中的应用.....424
基于质谱代谢组学的典型轮胎添加剂对小球藻毒性作用研究.....425
TOCP 和 TPHP 诱导斑马鱼发育免疫毒性机制的研究.....426
原位阵列微萃取和细胞外小泡代谢轮廓分析用于指导和监测产妇分娩.....427
药理学结合代谢组学探究蒙药特色炮制方法对京大戟的解毒作用.....428
ALDH2*2 突变影响阿霉素介导心脏毒性作用机制的多组学探索研究.....429

成像质谱流式在肿瘤微环境单细胞空间异质性研究中的应用与展望.....430
用于蛋白质和代谢物生物标志物一步分析的串联细胞术平台.....431
双酚 S 暴露通过扰动肠道微生物和代谢稳态 致小鼠肠道炎症及屏障损伤.....432
基于质谱成像技术用于肝细胞癌小分子药物效应研究.....433
蛋白深度分析中的应用研究.....434
利用 MALDI 质谱成像技术靶向肿瘤和脑内铁及铁代谢相关分子.....435
分会场：10.磁共振波谱与成像.....436
锂电池中的磁共振：从核磁共振到顺磁共振成像.....436
基于动态交换的核磁共振化学传感方法.....437
液体核磁共振研究神经退行性疾病中的 DNA G-四链体结构.....438
基于深度学习的人工智能赋能核磁共振.....439
基于自研线圈与分析软件的 7T 人脑 3D 磷核磁共振波谱成像.....441
膜环境中人源 Atg3 催化活化机制的 NMR 研究.....444
基于力-化学偶联的脱氧核酶活性调节研究.....445
脑胶质瘤葡萄糖代谢的多弛豫参数定量分析.....446
锰基纳米探针用于增强肿瘤磁共振造影.....448
19F-MRS/MRI 用于增强核酸递送的含氟脂质纳米粒的活体内筛选.....450
炎症靶向的 19F MRI 脂质纳米探针及高灵敏成像方法.....452
毒蕈碱 M1 受体第三胞内环的动态结构与相互作用.....454
分子内二酪氨酸交联影响细胞色素 c 的促凋亡能力及机制研究.....455
乌头属药材炮制解毒过程的 MAXY-NMR 研究.....456
基于中草药资源和核磁共振技术的药物筛选.....458
利用神经网络同时获取血液样本中的小分子和大分子谱图.....459
从核磁共振视角研究轮烷分子的动力学行为.....460
低场磁共振下的快速自旋回波成像.....461
肺部超灵敏 MRI 用于探究肺癌演进中肺功能的变化及分子机制.....463
基于核磁共振技术监测高温含氟熔盐氟酸碱性与熔盐性能关系.....465
分会场：11.纳米分析化学.....466
同步辐射 X 射线衍射细胞成像仪器研制与应用.....466
基于固态纳米孔/通道的分析检测.....467
脑化学活体离电传感.....468
奇特的微液滴化学.....469
拉曼光谱超快成像检测与识别装备研制及应用.....470
活细胞内蛋白质定位定量分析的一种通用型平台.....471
可拉伸电化学传感器实时监测形变细胞.....473
核素标记与放射免疫响应分析.....474
基于 CRISPR/Cas13a 数字层析试纸的 HIV-1 RNA 无扩增核酸检测方法的研究.....475
基于多肽组装识别缺少特有受体癌细胞的策略.....476
液-液界面超快自组装构筑高性能 SERS 基底及其生物检测应用.....477
肿瘤免疫微环境光学分子精准测量.....478
超构表面调控电化学发光策略的研究与外泌体检测应用.....479
基于生物反应网络的高性能生物传感应用.....481
纳米孔道单分子蛋白-蛋白相互作用实时追踪.....482
光诱导 Ag/碳点荧光材料的光学性能研究及其衍生传感功能.....483

无机离子对氮掺杂碳量子点荧光淬灭机制的研究.....484
基于可编程框架核酸的单分子生物感知.....485
限域单分子巯基化学反应的精准测量与调控.....486
DNA 编码金属纳米簇的性质调控与应用.....487
用于分子运输的可逆开关 DNA 仿生纳米通道的构建.....488
超分子纳米材料应用于汞形态分析方法研究.....489
基于生物纳米孔传感技术的无序蛋白折叠行为分析.....491
电化学发光多重免疫分析.....492
通用型微区关联成像技术.....493
光子上转换超分子组装体及其无背景生物传感.....494
原位自组装多肽调控细胞凋亡.....495
限域诱导多肽在生物表界面原位可控自组装及其在癌症信号检测中的应用研究.....497
双孔串联电阻脉冲传感器用于纳米颗粒多维特征分析.....449
双模式免疫层析疾病标志物检测新方法的研究.....500
滚环扩增技术在生物传感领域的应用研究进展.....501
基于 DNAzyme 功能化玻璃纳米管的单细胞内锌离子定量分析.....502
精准构建双界面纳米孔道电化学屏蔽干扰物.....503
功能化玻璃纳米孔原位单细胞检测纳米塑料诱导的氧化应激过程中的羟基自由基.....504
碳点的表面分析、理化性质调控及生物医学应用.....505
便携式纸基分子印迹传感器快速可视化检测烟草花叶病毒.....506
一种设计三发光中心全色域可调发光 Ln-MOFs 的通用策略及其在污染物识别中的应用.....507
基于 Fe-CDs 的类过氧化物纳米酶比色传感器阵列用于茶叶品质的鉴定.....508
纳米红外光谱系统在多层膜材料表征时的应用.....509
自循环纳米体系通过多途径放大氧化应激增强肿瘤铁死亡.....510
核酸介导的量子点动态组装体探针用于活细胞内 RNA 的成像分析.....511
杂交链式反应辅助 COFs@PEI@Au NPs 传感器构建及其对 p53 基因的荧光-SERS 双模式检测.....512
基于碳氟烷基链自组装的仿生催化体系的 ATP 传感研究.....514
基于金纳米颗粒的碱性磷酸酶检测新方法的研究.....515
常温常压下光催化纳米氧化锌产生水自由基阳离子.....516
基于环糊精衍生碳点的荧光传感阵列实现有机分子和无机离子的同时鉴别.....517
双功能碳点用于成像引导肥胖治疗.....518
铜基金属有机框架纳米酶的尺寸调控及其类酶活性研究.....519
高效自级联 $PdCu_3$ 尿酸酶/过氧化物酶模拟物降解并检测尿酸.....520
纳米羟基磷灰石优化大豆耐旱性与土壤环境.....521
SPASER 纳米探针在微量皮质醇检测中的应用研究.....522
利用等离子体标尺区分内源性、外源性 EPO 兴奋剂的研究.....523
基于铜掺杂共价有机聚合物类漆酶活性的福美双可视化检测.....524
DNA 模板化铂纳米颗粒的合成影响因素及酶活性调控探究.....526
聚合物修饰介导的表面电荷重整策略：逆转 MOF 生物矿化行为.....528
基于层流组装的纳米线生物传感器的开发及其应用.....530
仿生矿化合成金属有机框架纳米探针用于 ATP 比色检测.....531
基于机器学习辅助多价态球形核酸传感器用于肝癌早期精准诊断.....532
利用碳纳米洋葱作为比色和荧光信号输出的便携式多模平台检测胰蛋白酶.....533

分会场：12.生物传感与成像分析.....524
智能传感与精准医疗—-无尽的科学前沿.....524
电化学发光生物传感与单分子测量.....535
等离激元增强红外光谱电化学.....536
基于表面增强拉曼技术的生物医学传感研究.....537
荧光探针创制在生命健康研究中应用.....538
面向临床的分子成像新探针与新技术.....539
生物电化学传感-一种 IVD 技术探索.....540
生物标记用量子点的精确调控.....541
面向生物医学诊疗的智能微纳材料.....542
Ag(I)-硫醇配位聚合物的光谱和手性.....543
时空选择性分子传感与成像.....544
RNA 成像分子工具研究.....545
活细胞内的定向旋转与跷跷板运动的动态成像.....546
基于自由基可控性量模拟功能界面的光电化学分析传感研究.....547
微纳界面散射成像测量.....548
细胞膜功能结构域分布调控的 DNA 分子工具.....549
从单分子荧光到单分子化学发光.....550
基于电化学发光成像的单颗粒和细胞分析.....551
细胞活性连续实时动态监测仪.....552
DNA 动态自组装用于调控亚细胞结构与功能.....553
单实体碰撞电分析化学.....554
核酸单碱基分辨率可视化检测.....555
DNA 纳米器件用于 DNA/RNA 甲基化的定量分析与原位成像.....556
DNA 纳米探针与生物标志物原位测量.....557
实时多维度单分子动态示踪显微成像.....558
新型 NIR、自发光探针的成像及治疗研究.....559
基因编码 RNA 自组装用于细胞成像研究.....561
人造细胞的构建、可控组装及其组织模拟研究.....562
框架材料电化学发光机制与单晶成像.....563
基于菁类分子探针的活体成像分析.....564
活细胞动态分析.....565
基于酶分子工具创建的生物分析新方法.....566
胞内细菌感染的靶向识别、成像与高效清除.....567
胼通过取代基诱导叭啉氢键有机框架调节外部微环境来增强电化学发光和传感应用.....568
基于 DNA 的仿生细胞外基质体系用于细胞功能的干预与分析.....569
稀土配合物分子探针及其在生物传感和生物成像中的应用.....570
生物分子探针设计与功能调控.....571
单碱基分辨的 RNA m6A 修饰单细胞成像.....572
功能性纳米技术在生物分子可视化检测中的应用.....573
基于 ATP 响应的受体寡聚的 T 细胞免疫激活.....574
超高分辨和高亮度荧光探针在光诊疗中的应用.....575
太赫兹生物医学检测技术.....576
基于单分子电子学的生物分析化学研究.....577

基于灰度频率的 HeLa 细胞损伤程度检测方法研究 578
基于新型核酸杂交指示剂的电化学生物传感器的构建及应用 579
FRAME：flap 核酸内切酶 1 工程化 PAM 模块以精准、灵敏调控 CRISPR/Cas12a 的反式切割活性 580
高灵敏 DNA 电化学传感器在疾病精确诊断中的应用研究 581
单分子核酸力学测量 582
脑部成像功能分子的设计合成与应用研究 583
纳米光遗传学探针用于疾病的闭环调控 584
DNA 自组装的精确调控与应用 585
集成可限域的一体化纸基芯片比色生物传感器，用于农业产品安全检测 586
等离激元纳米探针用于细胞信号转导过程调控及可视化研究 587
光片显微成像技术和肿瘤免疫应用 588
具有多重免疫激活功能的粒子用于靶向治疗与成像分析 589
针对危险和有害物质的生物传感策略、芯片及仪器 590
基于金属-AIEgen 骨架材料的超灵敏侧流层析免疫检测 591
光化学长余辉与生命健康 592
半导体 SERS 纳米生物传感器 593
电致变色分子的设计及其活体影像 594
融合光场技术的快速容积拉曼成像 596
糖化 RNA 的原位成像与结构鉴定 597
模块化工程 DNA 纳米器件用于精确分析端粒酶 RNA 分布及活性 598
羧酸酯酶类两亲性双光子荧光探针的构建及其在不同病理下的应用 599
稀土红外荧光探针用于活体成像分析 600
单分子荧光共振能量转移分析核酸内切酶 Artemis 切割 DNA 的分子机制 602
基于 Ru–g–C_3N_4 和鲁米诺构建竞争型电化学发光免疫传感器用于灵敏检测心肌型脂肪酸结合蛋白 603
小细胞外囊泡上糖基化 RNA 的 FRET 成像 604
基于电化学发光阻抗显微平台的可视化细胞凋亡研究 605
细胞膜仿生纳米探针用于脑部糖基化代谢成像分析 606
基于新型萘二酰亚胺材料构建 PEC 免疫传感器用于 CEA 超灵敏检测 607
基于功能化细菌的肿瘤免疫治疗及其原位拉曼疗效监测 609
单颗粒细胞外囊泡表面蛋白质与 miRNA 多重分析及其在癌症诊断中的应用 610
纳米 MOF 改性微电极检测多巴胺 611
基于活泼羧酸酯硫醇解反应的乙酰胆碱酯酶传感研究 613
精准可控荧光探针的构建及其用于核酸构象分析 614
温度和 pH 双重响应荧光星形聚合物的合成及其细胞成像 615
金属有机框架晶面活化增强电化学发光 616
基于 MOFs 的脲酶纳米马达的持续自驱动增强膀胱癌疗效 617
近红外二区光控水凝胶纳米马达用于肿瘤免疫化疗 618
一种基于生物正交化学的钌催化的化学发光探针用于体内癌症可视化成像 620
基于三层超表面传感芯片的外泌体检测方法 622
可远程次序激活的生物功能化 MXene 用于时空可控的肿瘤光热治疗及多模态成像 623
低自限反应的中熵纳米酶持续催化增强化学发光用于成像分析 624
基于铜掺杂的 ZIF-8 标记的电化学适配体传感器用于内毒素（LPS）的灵敏检测 625

$Cu_2S/CdIn_2S_4$ 空心立方体的 Z-Scheme 异质结提高光电化学性能.....626
用于碱性磷酸酶活性检测的可再生 MOFs 功能化 SERS 传感器.....627
基于掺金磁性碳纳米管和 AgNPs/CuO/GO 纳米复合材料的新型电化学夹心适配体传感器用于检测 cTnI.....628
二维纳流体毒素传感器制备及应用.....629
基于可编程的 DNA 生物计算电路和 DNA 放大技术的电化学 miRNA 生物传感器的研究.....631
基于虚拟筛选 DNA 功能配基的免疫传感器在毒素检测中的应用.....634
近红外电化学发光的掺杂碳量子点用于 miRNA-155 的灵敏分析.....635
CDs@UiO-66-NH_2@$B(OH)_2$ 复合材料的比率荧光探针检测多巴胺.....638
主族原子取代罗丹明染料的构建及其超高信噪比成像.....639
用于靶向识别、成像示踪和高效消除胞内细菌感染的 AIE-噬菌体-DNA 纳米生物偶联物.....640
以液态金属纳米颗粒为核心的智能“核-壳”DNA 微凝胶的构建.....641
基于动态生物分子网络的高性能传感分析.....642
核酸仿生时序逻辑电路用于模拟记忆过程.....644
极性可切换光电化学生物传感器的双极猝灭策略用于铅离子检测.....645
DNA 发夹开关构象变换调控级联置换反应及应用研究.....647
基于远端脚点控制的 DNA walker 可调谐检测 MicroRNA 及细胞成像.....649
分会场：13.化学计量学与分析仪器.....650
化学计量学与新型光谱仪研制.....650
连续固相萃取光谱仪器装置构建及其定量分析方法.....651
基于虚拟样本产生技术提升光谱分析中的模型性能.....652
一种基于个性化联邦学习策略的医学图像分割模型.....653
复杂体系样品细分类及相应高端量测仪器化学计量学分析策略研究.....654
构建特殊空穴转移通道提高光电化学水分解性能的研究.....655
近场光谱成像设备研发、算法与应用.....657
光谱新视界:赛默飞在线拉曼技术创新与拓展.....658
基于激光诱导击穿光谱技术的稀土和金属材料精准智能分析及应用示范.....659
现代光谱融合分析技术中的化学计量学方法研究.....660
化学计量学算法研究进展及其图形界面设计实现.....662
果蔬产地智能分等分选关键技术及装备研发.....664
食用植物油真实性鉴别技术研究进展.....665
茶叶滋味与香气成分分析与风味调控.....666
基于质谱多维数据智能解析的小分子鉴定.....667
光谱技术结合化学计量学对健儿消食口服液快速含量分析和质量评价.....668
近红外光谱分析技术在药物智能制造中的研究与应用.....669
化学信息学中的小样本人工智能算法研究.....670
一维卷积神经网络分类应用的多视角解释.....671
AntDAS: 色质谱数据解析及应用.....672
化学计量学结合高光谱的天然样品识别方法研究.....673
从标量像素到矩阵像素：不同成像数据识别与解析的模型与应用.....674
化学计量学在水体微塑料识别及环境风险评估中的应用.....675
SIRIUS 辅助解析高纯啶虫脒中全杂质.....676

拉曼显微成像结合化学计量学在植物病菌侵染中的应用.....677
小波包变换用于近红外光谱高分辨信号提取.....678
一种通用、准确和高效的混合物红外光谱组份识别方法.....679
制冷自动进样器的研制及测试方法.....680
基于便携式能量散射 X 射线荧光结合二阶校正算法同时定量食品中的轻元素.....681
纳米酶比色传感器结合云端机器学习算法的手机 APP 智能识别中国绿茶.....683
通用质谱大模型开发.....684
液相色谱保留时间预测新方法研究.....685
中国 6 个不同产地甘草的灰色因子分析（GFA）和灰色因子聚类分析（GFCA）.....686
模仿活性追踪的算法设计在中亚苦蒿抗肝癌药效物质的研究.....688
EEM- PARAFAC 方法应用于α-葡萄糖苷酶与污染物的相互作用研究.....689
化学计量学：实现基于拉曼光谱的大气颗粒物 pH 通用测量.....690
比色传感阵列结合机器学习对岩茶等级的快速鉴别研究.....691
近红外光谱检测癌细胞的研究进展.....692
基于 HPLC-DAD 指纹图谱结合化学计量学的肉桂掺假鉴定.....693
基于激发-发射矩阵荧光高光谱成像的信息加密和解密.....694
三线性分解算法与深度学习算法在定量校正方面的比较.....695
Aptamer 增敏三维荧光结合“数学分离”用于食品中的三种四环素的高灵敏高选择性定量.....696
视频智能目标检测实现中药饮片的快速在线鉴定.....697
前表面激发-发射矩阵荧光光谱结合化学计量学用于西洋参的真伪鉴别.....698
1D-2D 融合卷积神经网络结合激发-发射矩阵荧光光谱用于六安瓜片的采集时间鉴别.....699
化学计量学方法结合三维荧光技术用于桃仁中苦杏仁苷的测定.....700
通过数据质量导航的机器学习策略结合化学直觉提升泛化能力.....701
语言模型助力纳米抗体的热稳定性预测.....702
基于机器学习的含能共晶筛选.....704
增强化学直觉的特征学习以提升光学性质的预测性能.....705
共晶预测工具(CCPT):基于深度学习辅助共晶筛选和密度评估的 Web Server.....706
基于疾病-基因-药物异构网络预测药物靶向基因.....707
基于激光诱导击穿光谱结合随机森林的钕铁硼合金中稀土元素快速定量分析.....708
基于 NIR-XRD 光谱融合结合偏最小二乘（PLS）的 CL-20 不同晶型定量分析.....709
拉曼光谱结合偏最小二乘法定量分析水中聚乙烯和聚苯乙烯两种微塑料.....711
LIBS 结合机器学习的铁尾矿组分快速定量分析方法研究.....712
LIBS 结合机器学习的熔融态锌液成分快速定量分析方法研究.....713
变分模态分解展开极限学习机用于复杂样品的光谱定量分析.....714
基于霸王龙优化算法的复杂样品近红外光谱变量选择方法研究.....715
基于鲸鱼优化算法的复杂样品近红外光谱变量选择和建模方法研究.....717
近红外光谱结合新型双集成建模方法快速测定土壤有机质含量.....719
基于图神经网络的分子拓扑和几何信息的高精度碰撞截面积预测.....720
基于机器学习方法的液态乳中全氟化合物的半定量预测.....721
高性能近红外光谱燃油牌号识别仪的研制.....722
HPLC 法同时测定冬瓜中丙醇二酸、苹果酸和柠檬酸的含量.....723
基于计算机筛选的的 DES 特异性结合抗生素的机制研究.....724
基于高光谱技术的物证鉴定现场智能快检研究.....725

分会场：14.SPME 及样品前处理分析 727
MXene 磁性二维复合物的制备及其在磷酸化肽富集中的应用 727
样品处理策略提升微型化原子光谱的分析性能 728
环境污染物快检的材料设计及分析方法构建 729
基于智能响应材料的分离分析方法设计 730
磁增强管内固相微萃取技术在重金属及其形态分析中的应用研究 731
限容凝胶电膜萃取系统构建及其在寡核苷酸提取中的应用 732
基于金属有机骨架材料的微固相萃取研究与应用 734
基于微反应器构建的样品前处理方法 735
基于单细胞分析的污染物环境行为与效应研究 736
新型有机污染物的富集机制及分析方法研究 737
全自动固相微萃取液相色谱进样器研制和应用 738
镧系荧光敏化与标记策略在环境污染物的识别应用 739
分子印迹石蜡 740
功能化磁性纳米材料的构建及应用初探 741
酶@多孔晶态框架复合纳米探针的设计及传感应用 743
用于蛋白组学样品前处理的硼亲合材料的制备 745
双模板分子印迹复合磁性共价有机骨架对提升双酚萃取选择性研究 746
敞开式大气压直接电离离子化技术及前处理方法 747
MOFs 基材料作为吸附剂富集环境中的痕量分析物 748
新型样品前处理方法结合色谱质谱联用技术在食品和环境分析中的应用研究 749
基于活体固相微萃取技术研究田间豇豆中多农药的消解行为 750
基于分子印迹的 SERS 传感器在新兴环境污染物高选择性检测中的应用 751
基于三唑啉酮类物质修饰的磁性纳米粒子分离富集血红蛋白及其在糖尿病人血液组学中的应用分析 752
基于超亲水印迹材料的痕量有机污染物精准萃取检测新方法 754
固相微萃取材料绿色分析化学(GAC)制备策略及其在样品前处理领域中的应用 755
用于修饰蛋白质组学样品前处理的分子印迹聚合物制备 756
基于低共熔溶剂/体系的样品处理技术研究 757
氨基修饰的三维阳离子共价有机骨架用于六氟双酚 A 的高效去除 758
氨基修饰的三维阳离子共价有机骨架用于六氟双酚 A 的高效吸附 759
具有缺失簇缺陷的 UiO-66 用于从土壤样品中高效提取和富集苯甲酰脲类杀虫剂 761
富介孔中空碳纳米球作为顶空固相微萃取纤维涂层从水和蜂蜜中萃取多环芳烃 762
MOF 衍生多孔碳微球 Ni@C-acid 作为固相微萃取涂层从茶汤中提取多环芳烃 763
DAAQ-TFP-COF 键合金属纤维作为萃取剂用于 PAHs 的在线μSPE-HPLC 研究 765
Magnetic preconcentration and probe-based immunoassay coupling to inductively coupled plasma mass spectrometry for protein analysis 766
界面辅助合成的共价有机骨架薄膜用于高效萃取微囊藻毒素 767
NH2-MON-SPME-GC-MS/MS 法高灵敏检测人体呼出气中痕量醛类生物标志物 769
基于印迹型共价有机框架的铅离子高选择性分离体系研究 770
基于双金属基 MOF-COFs 的痕量铅离子多模式检测体系的构建 771
基于 MIL-101(FeII)衍生的磁性多孔碳磁固相萃取-高效液相色谱法测定拟除虫菊酯 772
分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化 773
高性能糖胺聚糖裂解酶创制及其标准化研究 773

制备质谱研究.....774
小型质谱仪关键技术及应用.....775
核酸计量的跨尺度标准物质研究与应用.....776
生物标准物质定值技术研究进展及应用.....777
药品微生物微液滴培养快速检测方法标准化.....778
原子光谱分析标准研制及在环境监测中应用.....779
农业技术标准体系与发展需求.....780
氩-氩同位素定年分析系列标准物质研制.....781
与高效液相色谱法结合的定量核磁共振高准确度新方法进展.....782
基于磁性分子印迹聚合物的固相萃取-液相色谱-质谱联用检测血清中多奈哌齐浓度.....783
血清乳酸标准物质的研制及其应用.....784
地下水中多种类新污染物高通量靶向快速分析方法研究及应用.....785
重组 III 型人源化胶原蛋白关键质量参数分析方法建立.....786
聚乙二醇二缩水甘油醚（PEGDE）交联透明质酸水凝胶结构表征方法的开发.....787
海水基底营养盐的研制.....788
时间分辨荧光有机增敏球的制备及性能评价.....789
汽油中甲基叔丁基醚含量测定系列标准物质研制.....790
分会场：16.绿色实验室技术与科学管理发展.....791
气液多相态一体化环境污染物实时监测与预警系统.....791
铜铁掺杂氮化碳纳米酶用于检测食品总抗氧化能力.....792
分会场：17.实验室数智化.....793
全自动智能化毒物筛查 “熄灯实验室”建设及应用.....793
分会场：18.分析测试平台建设与管理.....794
提升服务科研能力 可持续支撑一流科研.....794
构建可持续分析测试平台的实践与思考.....795
服务科研，服务地方，培养人才——高校测试中心的多重功能.....796
校级学科公共平台建设管理与分析服务能力提升.....797
新形势下哈尔滨工业大学公共测试服务平台的建设与发展.....798
校院两级大型仪器公共服务平台的资质赋能与高质量管理实施.....799
集聚资源，打造可成长的测试服务平台.....800
基于 COSO 框架的设备验收内控体系优化研究.....801
关于公共实验平台电镜人才来源的一些探索.....802
电子顺磁共振技术与扫描 NV 显微镜：最新进展及多学科应用探索.....803
赛默飞分析科学整体解决方案.....804
科研仪器自动化管理的整体解决方案.....805
人工智能体在分析测试平台建设中的创新实践：以危险化学品专家“长安”为例.....806
分会场：19.分析仪器高质量发展.....807
一种硝基类炸药组分 HPLC 分析方法及两种不同仪器的性能对比.....807
实验室级高效液相色谱分离纯化用馏分收集器性能测试方法研究.....809
分会场：20.Sino-US Forum on Nano and Analytical Science.....810
金属化合物作用下持久性自由基的生成转化与控制机制.....810
分会场：21.教学型实验仪器及应用.....812
教学型仪器的研制与应用.....812
基于 LEGO 积木的激光诱导荧光毛细管电泳仪的研究.....813

纳米孔道单分子电化学测量仪的实验教学设计及应用 814
多功能拉曼光谱仪器的研发与教学应用 816
面向智能化学时代的《化学自动化》课程 817
基于自主搭建离子源的原位质谱创新实验课程建设 818
基于计算机视觉的 AI 滴定仪 819
用于扫描电镜仿真实验教学的实体控制设备的研制 820
自搭建红外变温透射装置在实验教学中的应用 821
模块化自组装 DIY 毛细管电泳教学仪的研制及实践教学应用 822
自主设计教具助力仪器分析实验教学初探 823
教学型流控分析仪的搭建及碳点纳米酶检测抗坏血酸 825
膜分离实验教学仪器研制与应用 826
氢氧化亚铁制备实验的改进 827
基于流动注射的模块式分光光度计的搭建与教学应用 828
基于“三全育人”高校仪器分析实验室创新管理实践探究 829
基于高分子材料 3D 打印实验的拔尖人才培养探索 830
分会场：22.环境分析与仪器 831
便携式液相色谱仪：从基础研究到仪器构建 831
地下水卤代新污染物电化学原位传感技术与设备研发 832
微纳传感及新污染物现场检测 833
顺次电离质谱技术在环境分析中的应用 835
荧光材料光学性能调控策略研究及其环境分析应用 836
同位素标记衍生化技术在代谢/暴露液-质分析应用 837
界面反应机制的光谱学探究 839
便携式气压计在现场环境分析中的应用 840
碳中和背景下的锂污染研究 841
面向环境现场分析的机器人质谱技术与方法 842
基于高分辨质谱的高通量疑似靶向分析揭示疫情感染高峰期药物及其转化产物的环境健康风险 843
基于碳氮纳米片的开启和关闭式荧光传感器的构建及其用于痕量检测全氟化合物 844
高通量多靶点毒性测试方法的建立及应用 845
共价有机框架增强 LDI-MSI 技术在新污染物毒性机制研究中的应用 846
氧化石墨烯-多壁碳纳米管水凝胶固相微萃取阵列结合在线解吸微等离子体诱导蒸气发生原子荧光法测定镉 847
岛津新污染物检测应用方案 849
便携式光子晶体传感器及其在环境分析中的应用 850
细颗粒物的多维表征及其降解机制研究 851
气相色谱-微等离子体原子发射光谱联用仪在环境监测中的应用 852
碳原子发射光谱的环境分析应用：从 TOC 到微纳米塑料的检测 853
城市污水处理厂中三嗪类除草剂及其转化产物污染特征与生态风险 854
燃烧源黑碳助力激光解吸电离质谱高效、经济、便捷地筛选多种新污染物 855
脑部外源性颗粒态污染物的识别与追踪 856
环境磁性颗粒的类过氧化物酶活性研究 857
多卤代荧光素类探针检测抗蚜威 858
工业源磁性铁氧化合物排放及其全球排放评估 859

PM2.5 致红细胞毒性的效应物质识别.....860
高性能水凝胶基个体 NO_2 暴露监测传感器的研制.....861
被动吸烟的健康监测可穿戴传感器.....862
MOF MIL-101(Cr)对植物生长的剂量依赖效应.....863
獐牙菜对四氯化碳诱导的小鼠急性肝损伤的保护作用及其机制.....864
自然光驱动的光催化剂增强鲁米诺化学发光用于检测多巴胺.....865
气相光催化中气-固界面羟基自由基生成与检测.....866
合理设计多功能 MOF 混合基质膜用于四环素的协同传感与去除.....867
共价有机框架材料作为质谱探针用于复杂样品中痕量污染物的高通量灵敏筛选.....868
原位热解质谱法快速分析纳米微塑料.....869
双功能银针敞开源质谱灵敏快速分析 1,2-双(2,4,6-三溴苯氧基)乙烷.....870
介质阻挡放电一步法快速合成铂纳米团簇：孔雀石绿的荧光传感.....871
微塑料介导蚯蚓肠道病原体外溢及环境活性分析.....872
一种简单的适配体荧光传感器用于检测城市污水中的四氢大麻酚及其代谢物.....873
成都市不同水体中邻苯二甲酸酯赋存现状及暴露风险评估.....874
小型化热裂解-尖端放电微等离子体碳光发射光谱用于水中微纳米塑料的检测.....875
中国茶叶中的增塑剂：分布特征、来源分析及暴露风险评估.....876
原位-热解质谱法快速分析纳米微塑料.....877
“猕猴桃”型磁-荧光组装体用于超灵敏侧流免疫层析.....878
铁锰矿物微界面有机质转化反应过程与机制研究.....879
气候变化背景下黑碳老化毒性的增效机制与人群健康风险.....880
一种基于碘介导的比率荧光试纸用于现场检测 CODMn.....881
溶液阳极辉光放电合成钪-金属卟啉框架用于增强的 F-传感.....882
便携式嗅觉可视化比色传感装置用于禽舍环境多种有害气体的快速识别检测.....883
基于强路易斯酸碱配位的便携式荧光仪检测矿石与水中的 Sc3+.....884
基于流动液滴的真空紫外光化学反应器用于儿童全血高通量消解.....885
基于便携式分光光度计的溶解氧在线检测仪.....886
超高效液相色谱-串联质谱法测定热塑性聚合物(PC/ABS)中 5 种双酚类化合物.....887
m6A 结合蛋白 YTHDF2 的液液相分离在砷诱导皮肤细胞恶性转化中的作用及机制探究.....888
双酚类新污染物 BPS 诱导小鼠肝脏炎症及脂质代谢紊乱研究.....889
职业暴露工人血液中镉的暴露水平、分布特征及结合蛋白鉴定.....890
复杂基质中痕量含铅纳米颗粒提取分析方法的建立.....891
汉江水体中微塑料的组成与分布.....892
粪便中幽门螺杆菌的比色生物传感检测方法.....893
含钛纳米颗粒二维同位素指纹溯源方法开发及环境应用.....894
基于磁性纳米复合基底的外磁场调控 SERS 热点研究.....895
基于柔性可穿戴传感器的大气污染个体暴露监测系统的研究与应用.....896
高效液相色谱-电感耦合等离子体质谱法测定松针中的十溴二苯醚和十溴二苯乙烷.....897
复杂基质中黑碳颗粒的识别与表征.....898
柔性可穿戴传感器实现气溶胶内的病原体感知.....899
铬诱发肺癌细胞增值的作用靶点及分子机制研究.....900
锂镍钴锰氧化物纳米材料在自然水体中的溶解过程与机制.....903
典型锂工业区锂污染特征与生态环境风险评估.....904

基于网络分析框架识别空气化学暴露组中的关键心血管毒性组分.....905
新型磁性β-环糊精聚合物的制备及其对水体微塑料的净化.....906
全氟烷基羧酸前体氟烷基硅烷物质和氟烷基烯酸酯的氧化降解机理探究.....907
中国典型城市 PM2.5 AhR 毒性效应归因研究.....908
室内灰尘中氯化石蜡结构类似物的非靶向识别.....909
分会场：23.环境监测与仪器.....910
工业烟气中可凝结颗粒物的在线监测与质控技术.....910
固废焚烧烟气中挥发性有机物和二噁英在线监测.....911
黑碳气溶胶质谱仪及其在大气环境化学中的应用.....912
基于注射泵的集成式水环境分析仪研发与应用.....913
湖北省地下水中 PFASs 的分布特征和暴露风险：长江、汉江和水源地在丰水期和枯水期的新证据.....914
水体和沉积物中粪大肠菌群的快检方法.....915
分会场：24.新污染物筛查技术与方法.....916
硝基芳香污染物的非靶向超高通量识别：从大气到人体.....916
快速效应导向分析：机器学习辅助环境中 AhR 效应物 HRMS 非目标筛查.....917
内分泌干扰物的识别和健康风险.....918
一种水体新污染物采样装置及筛查技术.....919
大气细颗粒物中半挥发性有机污染物的非靶向筛查.....920
计算机辅助高分辨质谱用于有机磷酸酯类新污染物的筛查.....921
我国茶叶中有机磷酸酯的污染来源、包装迁移和暴露评估.....922
分会场：24.新污染物筛查技术与方法.....923
黄河沉积物中新污染物筛查与风险评估.....923
水样中污染物的非靶向筛查方法与质量控制.....924
基于全二维气相色谱保留行为筛查母乳中具有生物蓄积潜力的化合物.....925
安捷伦高分辨质谱技术在新污染物筛查中的应用.....927
光控环介导等温扩增结合试纸条快速检测抗性基因 mecA.....928
新污染物快速分析及应用.....929
纳米酶基新污染物均相电化学/比色双模传感研究.....930
城市道路环境中橡胶衍生化合物的归趋.....931
典型工业过程高风险新污染物筛查识别与优先监测清单建立.....932
环境和人体中卤代有机污染物的识别方法研究.....933
养殖场地抗微生物药物及其转化产物的污染特征研究.....934
水体中多氯丁二烯和多氯苯的环境界面行为研究.....936
新污染物光引发剂的职业人体暴露.....937
北极环境中多氯萘的赋存水平、分布特征与生物富集.....938
空心分层棒状碳纳米管@PmPD@NiFe-LDH 复合材料的构建及其对布洛芬的吸附性能与机理研究.....939
肺癌干细胞模型的建立及其在环境污染物肺毒性探究中的应用.....940
基于多能干细胞的环境污染评估肺模型.....941
高分辨质谱非靶向分析中筛查参数阈值研究.....942
抗生素暴露与不孕不育症的相关性研究.....944
有机磷阻燃剂的神经毒性：阻断 PC12 细胞的钠通道和钾通道.....946
双酚类化合物对动脉粥样硬化的影响及其机制研究.....948

燃煤电厂和钢铁工业颗粒物中稀土元素的大气排放.....949
干细胞毒理学模型应用实例：双酚诱导的神经发育毒性.....950
三维多孔离子液体-壳聚糖-氧化石墨烯气凝胶高效提取和检测沉积物中多卤代咔唑.951
典型城市灰尘和橡胶消费品中的对苯二胺及其醌衍生物：来源分析、转化模式和毒性评价.....952
中国北京大气 PM2.5 中液晶单体的污染特征、季节变化和健康风险评估.....954
喜马拉雅山脉吉隆沟地区典型 POPs 赋存特征.....955
微塑料在人体中的检出与健康风险评估.....956
沿环境梯度的 SOM 组分变化推动地表多介质间 CPs 迁移过程的主导机制研究.....957
轮胎磨损颗粒相关新污染物在华北地区道路灰尘中的赋存与转化.....958
怒江上游水体和底泥中微塑料赋存特征及来源分析.....959
一种基于 MSNs@Au 纳米复合材料修饰的双酚 A 电化学传感器.....960
2,3,6,7-四氯咔唑肌肉发育毒性及机制探究.....962
锰通过调控 MTDH/ALKBH5/NLRP10 轴诱导足细胞损伤：基于流行病学和分子生物学层面的综合分析.....963
纺织印染工业室内灰尘中光引发剂的识别.....964
TRPML1 离子通道在模拟微重力条件下促进了 HepaRG 细胞的分化.....965
乳酸通过抑制炎症水平减轻 LPS 引起的急性肺部损伤.....966
中国东部典型轻工业城镇多氯丁二烯和多氯苯的赋存与风险评估.....967
高效液相色谱串联质谱法分析多种环境介质中新型替代品阻燃剂.....968
了解大脑中免疫微环境的变化：对多种脑部疾病的诊断和治疗有希望.....970
对微纳塑料的定义与检测的再思考.....971
水中新污染物筛查的自动采样技术与装置.....972
分会场：25.地下水质与健康.....973
城市水体中对苯二胺醌类新型环境污染物的识别和健康风险研究.....973
典型地区地下水中多环芳烃及其衍生物赋存特征及健康风险研究.....974
地下水中砷的现场检测技术.....975
应用原位在线 QXAS 研究重金属在矿物-水界面的吸附动力学.....976
热泉有机质的表征及其与微生物群落的相互作用.....977
亚砷酸盐 S-腺苷甲硫氨酸甲基转移酶催化蓝细菌 Nostoc sp. PCC7120 中的锑生物甲基化.....979
典型城市化地表水环境中抗生素分布的人为因素驱动研究-以苏州为例.....980
$MoSe_2$ 的晶相调控及其去除水中有毒金属的研究.....981
潜流带中不同形态铁与抗生素间反应性共迁移机制.....982
水样中痕量汞的同位素组成分析.....983
地下水中砷污染的控制与去除：基于 MIL-101(Fe)不同官能团修饰的三价和五价砷吸附研究.....984
二维 MOF 中低对称性配位对电催化硝酸盐还原的影响.....985
HPLC 分离不同形态汞的同位素分析方法研究.....986
污泥陶粒在城市黑臭水体生态修复中的应用研究.....987
对苯二胺醌类新污染物在水体中的赋存和降解机制研究.....988
基于机器学习的区域重金属场地风险评价方法研究.....989
原位可视化定量追踪浮游动物体内纳米塑料及其风险评估.....990
静电纺丝制备 BPTC/PVDF 共混基质膜去除水体重金属离子.....991

特异性吸附水环境中全氟替代物的分子印迹聚合物研究 992
杭州亚运会前后黑碳颗粒物特征和来源 993
吴起北洛河流域地下水重金属浓度分布与健康风险评价 994
粤西沿海中低温地热水的水化学特征分析 995
LC-ICP-MS 同时测定湖泊水体和沉积物中多种磷 997
蓝莓中花青素质谱成像技术方法研究 998
基于 OnlineSPE-LC-MS/MS 技术探究华北平原典型灌区地下水中抗生素的赋存特征和生态风险 999
分会场：26.核分析与核安全 1000
辐射剂量和关键核素可视化探测研究 1000
基于 ICP-MS/MS 测量的微量环境样品中 Pu 同位素分析及其示踪应用 1001
南海和印度洋海域中 ^{237}Np 和 $^{239+240}$Pu 的迁移特征 1002
超痕量放射性核素的分离与质谱分析技术研究 1103
基于人工智能算法的γ辐射空气吸收剂量率可疑数据高效诊断技术 1004
紧凑型 PGNAA 在线分析仪器的开发及其在铀矿采冶中的应用 1006
中子伽马多模探测与成像研究 1007
放射性碘吸附剂的单颗粒光散射成像分析 1008
锕系元素分离与分析新方法的探索研究 1009
利用 SF-ICP-MS 技术快速测定海水样品（15-20L）中 ^{237}Np 和 ^{239,240}Pu 同位素 1010
核事故污染环境 ^{137}Cs 源解析技术与应用 1011
一种快速组分离装置及其在真实高放废液核素分析中的应用 1012
基于物理加密与随机森林模型的军控核查方法 1013
纳米限域高活性金属与放射性碘的相互作用机制研究 1014
面向锕系元素结构探测的 X 射线吸收谱仪开发及应用 1015
分离和检测一体化铀的闪烁树脂合成及应用 1016
中国科学院地球化学研究所 1MV 串列加速器质谱仪 1017
环境水样中碘形态的 IC-ICP-MS 灵敏分析 1018
锕系元素精准识别：分离提取、安全防护与资源化新策略 1019
磷酸化生物质的制备及其对铀尾矿废水中铀的高效去除 1020
黄饼溯源属性研究 1021
基于激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱的燃料材料中杂质元素原位分析方法研究 1022
分会场：28.水环境材料与分析 1023
被动采样技术及其在有机污染物区域分布及界面通量测定的应用 1023
酶@多孔晶态框架杂化材料的设计及应用 1024
高性能 Janus 蒸馏膜制备及抗润湿/抗污染性能分析 1025
效应导向分析鉴定 UV/Cl_2 水处理中卤素离子存在下由酚类生成的毒害性消毒副产物 1027
体积排阻色谱联用型碳/氮检测器研制与应用 1028
电催化含氮污染物高分辨原位表征及资源化利用研究 1029
不同涂层电荷的纳米塑料在玉米植物中的叶面吸收及叶根转移 1030
基于两亲吸附材料的水体痕量新型污染物原位富集方法的研发和应用 1031
阳离子 MOFs 材料对高锝酸根放射性阴离子的吸附研究 1032
多孔富磷芒果生物炭用于水溶液中亚甲基蓝的吸附研究 1033
基于 Fe 改性 g-C_3N_4 的电极制备及其对 Cd(Ⅱ)灵敏检测 1034
双肖特基异质结、界面电场和氧空位协同作用增强 MXene/ZnS/Fe_3O_4 复合材料的压电

光催化活性，从而降解氟喹诺酮类药物 1035
高原微芒藻种属鉴定及处理制革废水的效果评估 1036
Yb 掺杂 BiOBr 可见光催化降解盐酸四环素中间产物及机理探究 1038
自主设计样品架提升微区原位观测样品的重现性 1039
可视化追踪纳米塑料在秋茄植株中吸收和迁移 1040
原位探究聚苯乙烯微塑料与芘/1-硝基芘对中肋骨条藻释放胞内和胞外溶解性有机质的影响 1041
分会场：29.分析药学与仪器 1042
核酸适体功能化筛选分析策略 1042
药物治疗的活体拉曼成像分析 1043
单分子检测仪器的研制及应用 1044
细胞膜界面分子测量 1045
基于相变的微液滴空腔自塑与细胞应用 1046
神经化学信号传递的原位分析化学 1047
基于 La-MOF 聚集诱导电化学发光和共振能量转移双信号免疫传感器用于检测人血清淀粉样蛋白 A 1049
界面自由基分析与应用 1050
异质性样本分离分析 1051
高效水相室温磷光材料的构建及其磷光分析 1052
微气泡驱动药物效应靶标分离分析微系统 1053
基于荧光聚合物点的酶活性与抑制剂分析 1054
配体工程赋能亲水性钙钛矿通过表面电位驱动阴离子交换用于 H_2S 多色传感 1055
基于纳米酶电化学传感生物标志物与体内活性物质分析研究 1056
中国 6 个不同产地甘草的 20 种氨基酸、热重参数、微量元素等的熵因子分析（EFA）和系统聚类分析（SCA） 1057
配体“开启”HIV-1 RNA 模板铜纳米簇荧光用于配体/RNA 相互作用分析 1059
基于 CRISPR/Cas12a 的双靶标核酸检测芯片用于人参配方颗粒的可视化分子鉴定 1060
HPLC-ELSD/CAD 测定黄芪中黄芪甲苷含量的对比分析 1061
揭示吲地磺胺抑制肝癌进展的分子机制：网络药理学、生物信息学和实验研究的综合应用 1062
甲钴胺 HPLC 到 UHPLC 分析方法的转移研究 1063
同步热分析-质谱联用仪在药物分析中的应用 1064
吴茱萸中乙酰胆碱酯酶抑制剂的综合筛选、优化提取、靶向分离及生物活性评价 1065
中药苦参中抗阿尔茨海默病活性成分的筛选及制备研究 1066
延胡索中乙酰胆碱酯酶抑制剂的综合筛选、优化提取、靶向分离及生物活性评价 1067
HPLC 同时测定滴眼剂中 10 种抑菌剂 1068
基于纳米酶电化学策略的生物标志物与活性物质分析研究 1069
基于原位扩增纳米酶催化和通用抗体定位策略电化学免疫传感器用于 AD 相关生物标志物检测 1070
人工介导的细胞内原位合成以诱导肿瘤细胞免疫源性死亡 1071
肿瘤微环境激活的细胞内羧基卟啉自聚合及癌症光动力治疗潜力 1072
基于共价有机框架的黄嘌呤无酶比色检测 1073
核酸适体信标探针的系统性进化方法的构建 1075
基于机器学习辅助的 AuCu 双金属工程化 MOF 电化学纳米传感器用于同时检测和去除

氟喹诺酮类抗生素.....1076
阻断蛋白-蛋白相互作用的功能性核酸适体体外进化技术.....1077
分会场：30.临床诊断与科学仪器.....1078
只有科学仪器先行才有话语权.....1078
病原微生物 I.S.T.技术平台的构建及应用初探.....1079
破译癌症的糖质密码初探.....1080
高分辨医学超声成像与操控.....1081
基于微流控芯片技术的肺癌循环肿瘤细胞捕获装置研发与应用.....1082
蛋白组学和空间多组学在癌症精准分子诊断中的应用探索.....1083
面向肿瘤多模态数据分析的深度学习模型技术研究与应用.....1084
临床检验国产质谱仪研发及应用.....1085
基于人体挥发物快检的疾病诊断质谱仪.....1086
英盛生物合纵连横临床质谱多平台整体解决方案.....1087
一种 Co@/羧甲基壳聚糖/多粘菌素 B 纳米酶的制备及其对革兰氏阴性菌的快速诊断.....1089
呼出气光谱增强的可挥发气体辨识与疾病诊断研究.....1091
仿生识别纳米材料的可控合成及其在生物成像中的应用.....1092
自动化小型质谱及其临床检测应用.....1093
一种基于光子晶体的尿糖检测仪器的研制.....1094
融合自动编码器和影像组学方法识别 MRI 宫颈肿瘤亚型.....1095
基于 iTRAQ 技术的三阴性乳腺癌及 HER2 高表达乳腺癌外泌体蛋白质组学研究.....1096
微生物的质谱“嗅觉"检测技术与应用实例.....1097
阿尔兹海默症血浆标志物的检测和标准化.....1098
Spatial omics and clinical imaging technique for accurate diagnosis of tumor.....1099
改进型 NMS 算法在仪器研制中的应用.....1100
人血浆中苯妥英抗癫痫药物的二维液相色谱检测方法学验证.....1101
基于滚环扩增信号放大和核酸自身丁达尔效应的免疫分析新方法.....1103
高通量单细胞代谢物分析揭示肺癌顺铂耐药性传递机制.....1104
蛋白质聚集态物理微环境的可视化研究.....1106
集成微通道技术的黑磷基质辅助激光解吸电离质谱检测血清中磷脂.....1108
多位原发灶乳腺癌转基因模型中甘油磷脂代谢扰动及免疫微环境特征分析.....1109
基于外泌体 microRNA 逻辑运算和信号放大对外泌体进行精准识别和鉴定.....1110
胰腺癌异质性细胞微球的脂质分子可视化.....1111
聚苯乙烯微米和纳米塑料暴露诱发的小鼠肾脏损伤与代谢异常.....1112
质谱成像与光谱成像的多模态融合在肿瘤异质性中的研究.....1113
气锥收缩稳定性的数值模拟研究.....1114
硼酸功能化磁性纳米粒：低丰度细菌的选择性高效富集与活性守护.....1115
分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备.....1117
基于高分辨质谱的两类毒性化合物非靶向筛查研究.....1117
化学毒剂毒物暴露植物标志物研究.....1118
以电子电离源质谱数据裂解规律和特征碎片构建不依赖质谱数据库的新精神活性物质结构解析程序.....1119
基于免疫代谢机制的新污染物毒性高通量分析方法.....1121
小型化质谱仪在毒物分析领域的应用.....1123
“点亮”型分子印迹荧光传感器的制备及其应用.....1124

SERS 技术在毒物分析与临床毒检的应用.....1126
光电化学传感平台的构筑及其在农药残留检测中的应用研究.....1127
ID-LC-MS/MS 检测血浆中四种除草剂：从方法开发到临床应用.....1128
脂溶性贝类毒素及其类似物的综合筛查鉴定策略及技术方法研究.....1130
玉米赤霉烯酮对黄粉虫生长发育的影响与降解菌株的筛选.....1132
电容法脱盐在质谱分析中的应用.....1133
一种志贺氏菌与致泻大肠埃希氏菌的菌属及其种间区分鉴定新方法.....1134
几种芬太尼代谢产物轮廓研究.....1135
单色聚焦 x 射线荧光光谱法同时检测生物样本中四种有毒金属元素.....1136
空间共轭微孔聚合物薄膜阵列传感器的设计.....1137
基于 2-(2'-羟基苯基)苯并恶唑衍生物荧光分子构建及其对典型化学战剂识别研究..1138
环境暴露下 RVX 的化学取证研究.....1139
苯并咪唑及其衍生物对化学战剂的阵列区分与应用.....1141
光纤倏逝波生物传感器在石房蛤毒素检测中的应用.....1142
尖吻腹蛇毒毒素蛋白的精准鉴定.....1143
基于细胞活性的相思子毒素及其解毒剂分析评价研究.....1144
基于噬菌体展示技术靶向蓖麻毒素的环肽亲和分子初筛.....1145
VX 在豚鼠尿液中的含氮代谢物的发现与全分子代谢规律.....1146
克百威在生物体内的转化及暴露溯源分析研究进展.....1147
基于蛋白组学的芥子气毒性机制研究进展.....1148
FMO3 在砷毒性代谢中的作用机制研究.....1149
分会场：32.检验医学 POCT.....1150
CRISPR 分子 POCT 技术开发的几个探索.....1150
神经元外囊泡数字化芯片解码退行性疾病.....1151
使用 AIEgens 驱动的生物传感器智能检测疾病标志物.....1152
TRACER：低丰度膜蛋白表达下的恶性肿瘤精准原位成像策略.....1153
基于负压辅助微针贴片的组织液快速提取及可穿戴多模式传感平台.....1154
基于蓝光光盘技术的免疫检测便携式定量成像系统.....1156
基于金属有机框架功能化纸芯片的外泌体提取快检新方法.....1157
NIR-AIE 侧流层析技术增强关节假体 S.aureus 早期诊断.....1158
膜分离技术耦合的纸基芯片.....1159
肿瘤标志物多重检测.....1170
基于纸基微流控比色法的高尿酸血症尿液指标智能检测.....1161
SPARK：自折叠扩增 CRISPR/Cas12a 平台用于多核苷酸激酶活性快速精准鉴定.....1162
基于肠-脑轴的无创诊疗策略研究.....1163
基于微流控芯片与 CRISPR 技术的多重病原菌检测.....1164
一种带有环装 DNA 保护的 DNAzyme Walker 用于细胞外小囊泡的定量分析.....1165
催化发夹组装(TRACE)辅助的四面体 DNA 纳米结构-RNA 干扰用于肿瘤同步治疗.1166
NiNPs 晶面位点控制的电位分辨 ECL 双标志物免疫传感器检测 CEA/CA125.....1167
基于 Pt 单原子的用于过氧化氢即时检验的高灵敏和选择性传感平台.....1168
基于脂质体膜融合和 DNA 探针的单个外泌体 miRNA 原位检测技术.....1170
碳配位单原子催化剂调节 Ru(bpy)32+阴极/阳极电化学发光实现抗坏血酸比率分析.....1171
用于定量测定活细胞中溶酶体碱化的"开-关"型 pH 探针的构建.....1173
免洗缓冲脂滴荧光探针构建及其对脂滴代谢过程的实时监测.....1174

结合 CRISPR 策略的便携式设备用于多重呼吸道病原体检测..... 1175
基于 HCR 辅助 RTF-EXPAR 的横向流动分析用于 H1N1 流感病毒的灵敏检测.....1176
数字化芯片解码帕金森病.....1178
POCT 质谱仪研制及临床检验应用..... 1179
一种基于铁单原子的二维柔型传感器用于过氧化氢的实时检测..... 1180
基于适配体-滚环扩增和银纳米颗粒聚集检测外泌体浓度.....1181
单原子催化剂调控的单发光体高效灵敏 MicroRNA 24 及癌胚抗原 CEA 的比率型检测方法的开发研究.....1182
分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备.....1183
肽基荧光分子信标.....1183
DNA 超分子水凝胶.....1184
细胞外囊泡单颗粒分析在液体活检标志物鉴定及癌症诊断与分型中的应用.....1185
限域微环境生物分子高分辨测量.....1186
Exploring site-specific N6-methyladenosine modifications as new cancer biomarkers..... 1187
球形核酸先进合成技术.....1188
级联信号放大技术在环状 RNA 定量检测中的研究.....1189
基于功能核酸的分子识别体系设计与生物分析应用..... 1190
DNA 纳米组装体用于生物分子的原位监测诊疗研究.....1191
"小分子自增强"拉曼散射：发现，机理及活体诊疗分析.....1192
功能性非天然核酸.....1193
基于荧光 RNA 的基因编码生物传感器.....1194
基于功能核酸的肿瘤生物标志物检测新技术.....1195
仿生核酸分子网络设计及其系统功能研究.....1196
基于功能核酸的靶向蛋白降解技术的开发及生物医学应用..... 1197
核酸适体生物传感器设计、组装及其在疾病检测和诊断中的应用.....1198
功能核酸分子辅助构建 MRI 探针实现活体病原菌的精准原位成像.....1199
基于 DNA 限域结构的生物传感新策略.....1200
精准识别与化学发光探针研究.....1201
金属核酸框架助力光电传感.....1202
核酸功能材料助力细胞和囊泡传感.....1204
纳米蛋白组学与癌症诊断.....1205
数字式单分子检测技术与应用.....1207
多价核酸适体纳米载体的构建及其高稳定性体内靶向成像分析.....1208
利用核酸适体扭转蛋白质相互作用不可成药性..... 1209
基于理论指导的多模态核酸适体传感体系及其在毒物分析的应用.....1210
纳米孔晶体微流控平台在肿瘤外泌体正交分析中的应用..... 1211
可编程核酸探针用于肿瘤的精准诊断..... 1212
核酸分子识别与精准化学调控.....1213
病毒样颗粒介导的肿瘤免疫治疗.....1214
过氧亚硝酸根激活型 DNAzyme 探针的制备及应用.....1215
DNA 无膜细胞器用于活体水平下的细胞命运调控研究.....1216
基于功能核酸嵌合受体的细胞调控分析研究..... 1217
基于分子逻辑门策略的双模成像探针用于溶酶体分析物的无损原位成像.....1218
靶向核酸 G-四链体的荧光探针设计及临床应用..... 1220

脱氧核酶在疾病诊疗方面的应用.....1222
基于光激活的数字 RPA/CRISPR-Cas12a 检测法用于快速灵敏地 BK 病毒 DNA 床旁检测.....1223
基于 LbuCas13a 靶向 DNA 的超高特异性基因分型平台.....1224
柔性多价亲和界面捕获及分选稀有细胞.....1225
可编程性 Argonaute 介导的核酸分析平台构建及在肿瘤相关 microRNA 检测中的应用.....1226
功能核酸适配体联合镧系发光检出策略在肿瘤来源细胞和细胞外囊泡检测中的应用.....1227
超快速 RNA 检测：无需预扩增的 Cas13a 自级联信号放大.....1228
单碱基分辨率 NSET 纳米尺映射活细胞膜上适体三维空间构象.....1229
基于核酸适配体标记策略的单细胞混样测序.....1230
利用细胞间膜转移筛选肿瘤特异性 T 细胞.....1231
Fluorescence monitoring of refluxed tyrosinase using endoplasmic reticulum-localized enzymatic activity-based sensing.....1232
口服核酸适配体修饰的 SICTERS 用于拉曼内窥镜结肠癌诊疗.....1233
DNA 纳米传感器用于 TRPML1 mRNA-Zn^{2+}-ATP 信号通路的成像研究.....1235
小胶质细胞 apoE 颗粒具有突触毒性并促进神经元衰老.....1236
DNA 模块化策略构筑双价配体实现对受体激活的精细调控.....1237
共价有机框架结构拉曼探针用于超灵敏体内生物成像.....1239
一种具有巨噬细胞选择性和可编程性的 DNA 模块化 STING 激动剂用于增强抗肿瘤免疫治疗.....1241
自堆叠小分子用于体内无基底超灵敏拉曼成像.....1243
增效乳腺癌纳米药物治疗通过局部光热调控其表面蛋白冠.....1245
mRNA 编码的溶酶体靶向嵌合体用于 SORT1-介导的乳腺癌膜蛋白降解.....1247
基于多重核酸适体识别的量子点侧向层析平台用于超灵敏的呼吸道传染病即时检测.....1248
pH-响应的 DNA 三螺旋纳米平台用于增强 NK 细胞识别.....1250
ABC 转运蛋白 AatA 或 MdlB 的介导的酪丁酸梭菌丁酸合成代谢调控机制研究.....1251
杂交链反应驱动的基于弯曲角度变化的 DNA 水凝胶薄膜传感器.....1252
分会场：34.法庭科学与仪器.....1253
二代测序技术的法庭科学应用与标准化.....1253
新精神活性物质发展趋势及分析技术.....1254
当前法医工作的重点关注和应对.....1255
质谱分析在法庭科学文件材料和文件形成时间鉴定中的应用研究.....1256
法庭科学中毒物的精准鉴定.....1257
法庭科学 DNA 检验新技术助力生物物证证据价值深度挖掘.....1258
公安机关虚拟解剖装备及实验室建设概况.....1259
三维数字化建档技术在案事件现场勘查中的应用.....1260
视频资料证据在案件调查中的应用.....1262
人工智能在电子数据取证中的应用.....1263
凝胶色谱结合统计学方法用于高分子材料物证的进一步检验.....1264
基于表面增强拉曼光谱法的保健食品中 PDE5is 快速检测方法的研究.....1265
法庭科学全自动智能化毒物筛查 “熄灯实验室”建设及应用.....1266
基于 HS-SPME-GC/MS 和电子鼻的性别推断研究.....1268
稳定同位素质谱仪在炸药分析中的应用.....1269
生物快速分析及应用.....1270

基于常压电离质谱的毒品快检关键技术研究 1271
痕量甲基苯丙胺场放大 CE–MS/MS 新方法研究 1272
基于拉曼-光度计-胶体金集成技术的快检设备研发 1273
基于高光谱技术的物证鉴定现场智能快检 1274
尸体磁共振成像在法医虚拟检验中的应用 1275
基于国产 GA118-24B 遗传分析仪进行 9 色荧光常+Y STR 复合扩增体系的构建及验证 1277
毛干蛋白质组中单氨基酸多态性的质谱检测分析 1278
第三代测序技术及法医学应用 1279
涂料墙面上汗潜手印热致荧光成像技术 1280
普鲁士蓝显现手印的研究 1281
图像拍摄设备溯源技术浅析 1284
基于刑事案件侦办的智能汽车取证研究 1285
通用人脸识别模型的跨界应用：实现高准确度亲缘人像比对 1286
塑料物证的全链溯源：法庭科学视角下 ATR-FTIR 分析塑料自封袋 1288
协方差矩阵的半正交参数池化方法在说话人自动识别中的应用 1290
自主研制 LDI-TOF-MS 质谱仪在文件检验应用初探 1291
电子签名笔迹时域频域特征研究 1292
区块链存证技术在刑事案件中的应用及法律规制研究 1293
基于 DESI-MSI 技术与 K-means 聚类算法的中性笔墨迹分析方法研究 1294
枪弹弹体分离检验检测仪 1296
SERS 技术快速检测水中微量芬太尼类物质 1297
血液中甘精胰岛素的液相色谱质谱分析检验方法 1298
稳定同位素技术在物证溯源和地域推断中的应用和展望 1299
核分析技术（NATs）应用于法庭科学证据分析的回顾与展望 1300
温度可调解吸原位电离质谱在毒物和爆炸物快速检测中的应用 1301
基于 UWB 定位技术在毒品实验室中的应用 1302
五氟苯基柱在毒物检验技术中的应用研究 1303
液体中γ-羟基丁酸、γ-丁内酯和 1,4-丁二醇的高效液质分析 1304
射击弹头痕迹图像自动比对算法在非同源数据泛化能力的研究 1305
电子锁中的电子数据勘验技术解析 1306
基于稳定同位素分析的秋水仙碱溯源研究 1307
基于大规模平行测序技术的高度自动化的便携式法庭科学 DNA 鉴识系统 1308
气相色谱-串联质谱法(GC-MS/MS)检测复杂基质中过氧化物炸药六亚甲基三过氧化二胺 1309
使用 GC-MS 对电缆隧道火灾中聚乙烯电缆燃烧烟尘与痕迹的研究 1310
基于高分辨质谱的依托咪酯及其类似物质谱裂解规律研究 1311
基于 ATR-FTIR 技术和机器学习算法的奢侈品包鉴别探究 1312
电气火灾熔痕检验新进展 1313
挥发和燃烧对汽油组分的影响 1314
光敏印油的光学和光谱特征分析研究 1316
AFAI-MSI 技术在文书鉴定领域应用的探索性研究 1317
智能电子天平管理系统在毒品检验鉴定中的研发及应用 1318
铜导线熔痕的电子背散射衍射分析研究 1319
生物样本中 42 种挥发性有机毒物的 HS/GC-MS 检验 1321

信号分析和波谱检测技术在声纹鉴定中的应用.....1322
SPME-Arrow 结合 GC-MS/MS 同时检测人体体表中 38 种挥发性有机化合物.....1323
紫外拉曼-荧光联用技术在毒品分析中的应用.....1324
电子背散射衍射分析技术在法庭科学中的应用.....1325
核磁共振法测定“Rush”中的亚硝酸烷基酯类新精神活性物质.....1326
基于深度学习的人脸特征可解释性数据集的构建.....1327
铁路护网上脱落细胞的提取纯化效果初探.....1328
基于并行分块模型处理的实时智能语音降噪技术.....1329
基于碳稳定同位素与 Relief-Voting 融合模型的中国汽油样品溯源研究.....1330
文书上伪造红印油指印的鉴别方法研究.....1331
基于复杂语音转换场景的说话人验证在源说话人追踪的应用.....1332
X 射线衍射法检验常见易制爆化学品成分.....1333
精密仪器在电子物证的应用.....1334
一起涉非甾体抗炎药物非法添加的案件检验.....1336
尿液中 13 种麻痹性贝类毒素检测.....1337
应用改良造影鞘管进行基于尸体计算机断层扫描的心脑血管靶向联合造影新方法.....1339
肌肉组织碎块对硝铵炸药爆炸残留物检验的干扰问题探析.....1340
基于荧光淬灭技术的便捷式爆炸物及毒品检测设备研制应用.....1341
芬氟拉明分子的光谱计算与分析.....1343
可疑毒品中新型麻醉活性物质脱氧甲氧西敏的 GC/MS 检验.....1345
硝酸肼镍检验方法研究.....1346
法医病理学检材自动固定装置摘要.....1347
经鼻内窥镜检验在法医死因诊断中的应用探讨.....1349
迷奸案检材中检出东莨菪碱一例.....1351
XRD 量化表征在微量物证中应用.....1352
自制硝铵炸药自燃自爆现象机理研究.....1353
HPLC-QTOF 检测苯环己哌啶类新精神活性物质 甲基胺酮和 2-oxo-PCE 在大鼠体内的代谢方式研究.....1354
锂电池爆炸残留物检验技术研究.....1355
关于两种一次性手套印痕的探讨.....1356
法医损伤自动测量技术与装备研发.....1357
超景深光学显微系统在涉爆、涉火物证及痕迹检验领域的应用.....1358
一种基于蛋白质组学的法医体液来源鉴定方法的有效性验证.....1359
应用死后肺部计算机断层扫描技术推断死亡时间.....1361
基于隔膜泵与超声装置开发虚拟解剖专用注射泵的方案研究.....1362
MSCT 技术在无名尸尸体检验中的应用.....1364
全自动多重滤膜法检验陈旧精斑认定嫌疑人 1 例.....1365
纸币磁性印刷检验初步研究.....1367
基于 MOFs 的固相微萃取技术在法庭科学领域的应用.....1368
创新性低渗透性水溶性造影剂的研发及在法医虚拟解剖血管造影中的应用探讨.....1369
分会场：35.食品分析.....1370
食品加工中产生的荧光碳点形成机制与性质分析.....1370
基于食品组学的空气炸薯片化学轮廓解析与标志性化合物表征.....1371
人工智能辅助的微球编码显微成像传感技术用于食源性致病菌的多重检测.....1372

小型化直接电离质谱仪研制及在食品安全快检领域的应用.....1374
以聚合物功能化三聚氰胺海绵作为新型 QuEChERS 净化材料联合 HPLC-DAD 分析牛奶中抗精神病药物.....1375
酶反应器-微流控纸芯片体系对食品中有机磷农残的快速检测.....1376
基于 2D 卟啉 MOF 的食品快检电化学生物传感研究.....1377
人工食品染料去仪器化快检平台的构建与应用.....1379
化学蒸气发生-比色法在食品现场分析中的应用.....1380
基于磁性生物炭改进 QuEChERS 在残留分析中的应用.....1381
集成式金属有机框架膜阵列芯片及装置用于多种抗生素的快速同时定量检测.....1382
食品安全风险物质快速富集 SERS 检测.....1384
高亲和功能化石墨烯吸附剂制备及其在食品分析中的应用研究.....1385
原位制备和调控新型 NiO/Cu/Cu_2 O/异质结电极用于鱼类中组胺的高灵敏电化学检测...1396
食源性致病菌分子检测及风险分析.....1398
CRISPR 系统介导的食源性致病菌及铅污染分析方法研究.....1399
基于旋转荧光阵列芯片和循环信号放大策的多种食源性致病菌同时快速检测方法..1390
基于熵分析（EA）和因子聚类分析（FCA）对中国贵州五种茶的 20 种氨基酸、微量元素、热重参数等进行多指标分析.....1391
大蒜的时空品质评价.....1393
莱芜大姜不同组织在生长过程中生物活性成分的积累和转运.....1394
基于水凝胶中多孔材料诱导生成纳米金的比色贴片 用于硫化氢抗湿高敏检测.....1395
乳铁蛋白热稳定性和铁饱和度的差示扫描荧光法检测.....1397
中空纤维萃取结合液质联用检测火锅底料中罂粟壳成分.....1398
水果营养及风味分析在冰箱气调保鲜技术效果的应用.....1399
借助 APGC-QTOF 技术鉴定芦荟果肉中异味物质.....1401
基于挥发性成分检测和机器学习建模的玉米新陈度分析.....1402
啤酒与黄酒中有机酸含量的对比分析.....1403
双增强型酶级联杂交水凝胶用于尿素灵敏检测.....1405
一种啤酒中嘌呤含量的 HPLC 分析方法开发与验证.....1406
气相色谱质谱联用法测定茶叶中有机氯类农药.....1407
基于钙钛矿纳米晶体构建提升传感性能的水凝胶生物传感器.....1408
多谱联用技术在新食品风险筛查中的应用.....1409
乳及乳制品中高氯酸盐的快速荧光检测方法.....1411
饮用水和牛奶中全氟辛酸的快速可视化荧光检测.....1412
HPLC 法同时测定汉麻酒制品中 3 种成分含量.....1413
调味料荜茇中抗阿尔茨海默症活性成分的系统评价和制备.....1414
乳制品中 PAH4 的快速绿色荧光检测方法.....1415
液相色谱-三重四级杆质谱分析稻谷中 7 种有机磷酸酯类阻燃剂.....1416
食品接触材料迁移物 PLA 颗粒对小鼠肠道的损害作用研究.....1417
稻米在不同加工条件下重金属变化规律.....1418
PY-GC/MS 联用技术用于食用油中矿物油的快速高效筛查.....1419
一种四臂 PEG 作为接枝剂用于制备高选择性的质谱电离基底检测玉米赤霉烯酮及其代谢物.....1420
一种共价有机框架-分子印迹复合材料的研制及其在食品安全检测中的应用研究.....1421
测定加热卷烟 13 种羰基化合物释放量的方法研究.....1422

食品中胆固醇含量的纸基可视化检测 1423
新型高选择性质谱离子源用于生物胺快速高灵敏检测 1425
伴侣动物猫和犬中革兰阴性菌耐药性研究及 blaCTX-M 基因传递机制初探 1426
基于超亲水 PVDF 改性膜材料的乳化破乳策略用于牛奶中多目标污染物残留分析 1430
基于液相色谱串联质谱技术的过敏蛋白定量研究 1432
分会场：36.地矿分析与仪器 1433
过渡金属辅助元素光化学蒸气发生/纳米粒子形成及其分析应用 1433
卤素高温水解设备研制及分析方法开发 1434
全新世石笋的高灵敏度原位微区 U-Th 测年方法 1435
LA-ICP-MS 褐帘石 U-Th-Pb 定年分析 1436
Neoma MS/MS：机遇与挑战 1437
Chelex-100 螯合树脂在地质样品高精度 Ni 同位素分析中的应用 1438
基于 MC-ICP-MS 两柱化学分离纯化 Ni 同位素分析方法 1439
使用临界混合双稀释剂法测量地质标样的 Mg 同位素 1440
碳酸盐岩中稀土元素的分离与分析方法 1441
《地矿分析新视角：微焦点工业 CT 的应用潜力》 1442
一种降低电感耦合等离子体质谱大气相关干扰的装置 1443
面向微/纳塑料分析的冷辅助固相微萃取装置设计及应用 1444
深海孔中收发一体 X 射线成分探测技术 1445
X 射线技术助力地址化探分析 1446
初探真空深紫外（157nm）激光剥蚀系统在地矿分析中的潜力 1447
富铬铁氧化物原位铁同位素组成精确测定 1448
离子探针分析中电气石硼同位素的基体效应及其在线校正策略 1449
LA-ICP-MS 全岩整体分析标准物质研制和基体效应研究 1450
国产新型飞秒激光剥蚀系统最新进展及其在地矿领域的应用 1451
ICPMSDataCal-Py：一个新的 LA-ICP-MS 数据快速处理模板 1452
高性能阴极荧光谱仪在矿物研究中的应用 1453
同位素稀释—电感耦合等离子体串联质谱法（ID-ICP-MS/MS）准确测定地质样品中的 S-Se-Te 1454
固体进样光电直读光谱技术在战略找矿中的应用 1455
离子吸附型稀土野外快速分析方法研究 1456
便携式锂钾分析仪的研发及其在战略性找矿中的应用 1458
基于液压驱动的自动柱色谱系统的开发 1459
一石三鸟:基于 ZIF-67 萃取、氧化和基体辅助光化学蒸气发生电感耦合等离子体质谱法测定超痕量碲 1460
过渡金属离子辅助铌和钽的光化学蒸气发生：挥发性物质生成及纳米粒子形成 1461
三星堆遗址 K7 出土玉石器风化机理研究 1462
固相溶剂标准加入—LA-ICP-MS 法测定土壤中的铅元素 1463
分会场：37.蛋白质组分析 1464
用于单细胞蛋白质组分析的微流控单细胞分选、捕获与预处理仪器 1464
高通量痕量及单细胞蛋白质组学方法开发与应用 1465
尿液是下一代生物标志物的来源 1466
精准医学蛋白质组分析技术的标准化研究进展 1467
蛋白质聚集的组学分析技术 1468

活细胞表面蛋白质功能位点挖掘和动态变化解析 1469
使用交联非天然氨基酸在活细胞中鉴定蛋白质之间的直接相互作用 1470
活细胞内蛋白质原位构象和相互作用规模化解析新技术 1471
基于磷酸可富集交联剂的开发及其在 XL-MS 中的应用 1472
DIA 宏蛋白质组技术及其在菌群研究中的应用 1473
小鼠脑肠通讯的肽组学研究 1475
基于 Top-Down 和 Middle-down 质谱技术的蛋白 proteoforms 分析 1476
生物样本完整天然蛋白复合物的超分辨质谱解析 1477
基于液相共分级-质谱法技术的蛋白质复合物分离分析方法研究 1478
蛋白质 L/D-型乳酸化修饰的组学分析和调控机制研究 1479
空间可视化蛋白质组学 1480
利用分子库对分子库筛选策略发现蛋白酶抑制剂和蛋白质共价配体 1481
增龄相关的代谢失衡和肠道氧化应激关系研究 1482
快速 MICROFASP 方法在高通量高灵敏度蛋白质组学研究中的应用 1483
基于血液多肽的抑郁症诊断研究 1484
大规模蛋白质组数据精准解析与标志物筛选 1485
外泌体分离制备新方法及其在临床诊疗研究中的应用 1486
皮肤基质微环境蛋白质组研究及应用 1487
基于 2.1 mm ID 色谱柱的高通量蛋白质组学平台 1488
解密蛋白质组学样本质控走向自动化高通量的黑科技 1489
基于质谱的空间多组学技术 1490
基于交联剂转运载体的活细胞蛋白质复合物原位分析技术 1491
新型氮氧高亲水性纳米材料的制备及其在蛋白质组相互作用分析中的应用 1493
宏蛋白质组学在微生物系统生态学研究中的应用路径 1494
多维宏蛋白质组分析新技术 1495
非变性自上而下质谱中完整蛋白质复合体气相解离机理的研究 1496
蛋白质变体分离鉴定新技术及其应用研究 1497
蛋白质结构的紫外光解离-非变性质谱分析 1498
基于纳米孔道单分子技术的时间蛋白质组学 1499
非变性质谱直接检测等位基因特异性蛋白修饰与相互作用 1500
基于人工智能的谱图库预测和糖基化蛋白质组分析 1501
基于变性-复性的样本处理策略提升泛素化修饰蛋白质组富集效率与定量准确性 1502
蛋白质异常巯基亚硝基化与神经退行性疾病的关系 1503
共价修饰蛋白质组：作用机制研究与前沿共价抑制剂开发的新策略 1504
蛋白质甲基化分析新技术 1505
原代单细胞蛋白组学新方法 1506
基于 NanoLC-MS/MS 的单细胞多维度多组学分析新方法 1507
小细胞肺癌蛋白基因组学研究 1508
基于功能二维材料的细胞表面工程策略在膜蛋白质组原位分析中的应用 1509
微生物宏蛋白质组数据库构建与数据解析新方法 1510
亲和肽配体用于全局 N 磷酸化蛋白质组解析 1511
利用空间特异性的 N 糖基化蛋白质组学技术揭示聚糖加工的位点异质性 1513
时空分辨的 TRAP 技术描绘药物体内外信号网络 1514
基于固相烷基化磁性纳米微球的蛋白质组样品预处理方法开发及应用 1515

M1 极化巨噬细胞外泌体通过 STAT3 通路调节肝脏铁调素.....1516
细胞表面蛋白质复合物分析新技术研究.....1518
双响应脂质体用于蛋白质复合物原位分析.....1519
遗传密码子扩展技术揭示活细胞中特异位点乳酰化重塑蛋白质功能.....1520
基于区域和性别分辨率的多组学技术系统解析金属元素失衡介导的大肠衰老和肠癌发生的分子机制.....1521
长肽段宏蛋白质组学分析增加微生物群落物种分辨率.....1523
基于化学蛋白质组学技术鉴定组蛋白β-羟基丁酰化的识别蛋白及其功能研究.....1524
基于邻近标记串联亲和富集策略鉴定 HDAC8 调控的蛋白质赖氨酸乙酰化分子网络1525
聚集态蛋白质组原位成像和多维度分析新技术.....1526
基于原位化学交联-可控断裂技术和自上而下组学策略的 α-synuclein 蛋白质变体复合物解析.....1527
电场辅助切向流过滤装置用于活性外泌体批量制备.....1528
T 细胞耗竭过程中酪氨酸磷酸化蛋白质复合物的动态变化研究.....1529
分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器.....1530
新体系动力电池关键材料测评技术进展.....1530
新国标助力氢能产业高质量发展.....1531
中国可持续航空油料生产技术及标准制定的建议.....1532
氢气中痕量含硫杂质对 PEMFCs 耐久性影响的研究.....1533
“双碳”目标下生物质检测平台的建设.....1535
固态锂电池材料表界面分析技术.....1536
动力电池排气安全测试.....1537
岛津丰富产品线助力新能源发展.....1538
加快氢燃料质量检测基础设施建设，促进氢能产业高质量发展.....1539
燃料氢中总卤化物的测试——燃烧炉离子色谱法.....1540
质子交换膜燃料电池车用氢气检测技术与标准研究进展及应用实践.....1541
氢气中痕量杂质分析红外光谱法的标准化研究.....1543
基于增强型等离子体放电气相色谱在线测定氢气中多项杂质的系统设计和方法开发.....1544
氢气中四氯乙烯和氯气对质子交换膜燃料电池耐久性的影响.....1546
氢气中卤化物和甲酸的分析标准要求及离子色谱的应用.....1548
光腔衰荡光谱法测定燃料电池汽车用氢气中痕量氯化氢.....1549
新标准、新仪器—福立仪器助力氢能产业高质量发展.....1550
基于电子制冷预浓缩与 GC-SCD/MS 联用测定氢气中硫化物、有机卤化物、甲醛的技术研究.....1551
分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器.....1552
单颗粒生物传感新方法与仪器.....1552
金属单细胞 ICP-MS 测定技术与应用研究.....1553
基于多孔导电薄膜的可延展多传感复合器件.....1555
基于金纳米团簇探针的荧光可视化传感研究.....1558
高灵敏硅基异质结光电传感器及其性能调控.....1559
基于软材料的即时检测平台及应用.....1560
智慧骨科传感器与手术机器人接口.....1561
MEMS 微振镜研究及生物检测应用.....1562
生物细胞机器人多维信息传感与自动化操控技术.....1563

纳米等离子体技术驱动的广谱病毒快速检测及多重生物传感平台.....1564
集成微裂纹力学传感器的心脏器官芯片.....1565
基于腔室型微流控芯片器官/类器官芯片体外模型研究.....1566
基于微流控技术快速检测食品药品中致病菌.....1567
第三代半导体异质结传感器.....1568
基于 MEMS 技术的量子磁强计技术及生物测量应用.....1569
大尺寸碳化硅单晶生长调控与人工智能辅助的无损检测.....1570
基于微流控芯片的航天微流式细胞仪研究.....1571
基于机器学习辅助的柔性压力传感器在人体健康监测中的应用研究.....1574
高灵敏小型化太赫兹探测器及薄膜厚度无损检测技术.....1575
碲基纳米材料及其二氧化氮敏感特性.....1576
全向风能采集器的设计方法与应用研究.....1577
单颗粒生物传感新原理新方法研究.....1578
用于高鲁棒肌电手势识别的模量匹配纤维基表皮电极.....1579
弹性可拉伸多传感复合器件.....1580
基于超快激光焊接的 MEMS 碱金属气室关键制备技术.....1581
基于自旋交换光泵浦 3He 磁强计的强磁场测量.....1582
分会场：40.半导体材料分析技术与仪器.....1583
等离子体质谱在半导体用高纯材料的分析研究.....1583
疏水碳纳米管-硫纳米片复合气敏材料用于人体呼出氨气的检测.....1584
半导体材料杂质分析前沿进展.....1586
半导体材料中硼掺杂的高精度中子深度剖面分析.....1587
半导体级氢氧化钾中痕量杂质元素的 ICPMS 测定方法.....1588
离子色谱技术在电子化学品行业的应用.....1689
半导体材料中超痕量杂质检测技术研究与进展.....1690
应用 GEDICPMS 技术直接进样测试电子特气金属污染.....1691
使用 ICP-MS/MS 测定半导体光刻胶中的超痕量杂质元素.....1692
阴极荧光成像及光谱采集系统及其在半导体领域的应用.....1693
基于光电材料转移介导阳极异质结破坏和阴极异质结重组的光燃料电池自供能传感器高灵敏检测 miR-155.....1694
分会场：41.分析测试青年论坛.....1695
脑神经分子的活体追踪与空间成像.....1695
含氟纳米探针构筑及活体成像分析.....1696
基于 CBT-Cys 点击反应的成像分析.....1697
PM2.5 中的关键毒性组分的精准识别与溯源.....1698
空间转录组测序仪器及应用.....1699
细胞器形态超分辨图像与药物筛选.....1600
光谱分析专用仪器设备的研制和开发.....1601
纳米限域策略结合表面增强红外光谱研究界面水的结构与解离.....1602
摩擦起电:新化学反应驱动力.....1603
可穿戴体液电子器件.....1604
3D 打印技术在分析仪器及其核心零部件研制中的应用.....1605
新型纳米酶递送系统的构建及其生物活性评价研究.....1606
蒙烯玻璃纤维织物的电学表征方法.....1607

基于核酸电路的生物传感与信息编码策略..... 1608
基于 MOFs 材料 SERS 传感器的构建及分析检测.....1609
反应型拉曼纳米探针用于挥发性气体检测..... 1610
基于等温核酸信号放大的活细胞内 miRNA 高对比成像分析.....1611
微纳结构设计与曾敏机制研究.....1612
基于激光解吸质谱技术的生物小分子分析及疾病诊断新方法研究.....1613
基于 GPC-UV 分析的土壤中聚苯乙烯微塑料简便定量研究..... 1614
单细胞代谢物质谱分析.....1615
纳流控离子整流器件用于渗透能收集..... 1616
生物燃料电池自供能传感.....1617
灵芝黄嘌呤氧化酶抑制剂（Fr.）的综合分析喀斯特病及其对痛风病的治疗.....1618
基于超滤和网络药理学的栀子花乙酰胆碱酯酶抑制剂快速筛选分离方法.....1619
激活型蒽醌光敏染料用于光动力治疗..... 1620
天然水体中铵/氨的荧光测定方法的发展..... 1621
PLA/PCL/n-HA 3D 打印浆料及其支架的性能表征..... 1622
微环境激活型磁共振成像探针的构建与应用..... 1623
棉花检验实验室智能化转型的思考与探究..... 1624
检测抗体药物糖基化修饰的新方法.....1625
便捷式纳米酶光度测量平台的设计及其在磷酸盐快速检测中的应用研究.....1626
基于小型化二氧化碳传感器校准装置的高效控制条件研究.....1627
质谱成像用于生物体内氧化还原及代谢异质性的研究.....1628
新型多孔碳材料的可控合成及其在环境污染物中的检测.....1629
酶-多孔有机框架材料生物催化剂在环境催化的应用.....1630
分会场：42.科技期刊发展论坛.....1631
打造精品分析化学中文期刊　助力学科发展..... 1631
地质学期刊《岩矿测试》学术影响力提升策略..... 1632
树脂产业链碳足迹核算.....1633
聚焦行业热点前沿，打造精品科技期刊..... 1634
分会场：43.四川分析检测论坛.....1635
超微量质谱离子化及 AI 辅助代谢物注释研究.....1635
Hemin/多肽共组装纳米管负载金簇用于尿酸的比色/荧光检测.....1637
连接多壁碳纳米管的钴单原子用于电化学检测膳食中的咖啡酸.....1638
三元过渡金属硫族化合物 CdSSe 用于双放大电致化学发光检测 CA19-9.....1639
基于铜离子和组氨酸顺序检测的具有大斯托克斯位移的多肽荧光探针：智能手机设备、真实的样品、测试条和生物成像.....1641
多肽荧光探针的构建及对汞离子和硫离子的连续检测和生物应用.....1643
基于 ZIF-8 和氮掺杂石墨烯量子点的分子印迹荧光传感器对双酚 A 的特异性识别和检测.....1644
利用橙红色荧光铜纳米团簇灵敏测定香叶木素..... 1645
应用高分辨质谱的新型合成大麻素 5F-EDMB-PICA 体外代谢研究.....1646
可视化检测室内电子屏幕蓝光凝胶传感器..... 1648
便携式装置用于漂发、染发剂中氧化性物质的快速检测..... 1650
基于金属有机框架载体的 SERS 基底的制备及应用研究.....1651
小鼠组织中的 4-10 硼酸-L-苯丙氨酸的 UPLC-MS/MS 检测方法的建立..... 1652

多维糖蛋白组学分析揭示全氟辛烷磺酸暴露肝毒性机制.....1653
基于超高效液相色谱-离子淌度质谱法的肝豆状核变性的尿液无创生物标志物研究.....1654
核级硼酸中痕量杂质元素分析技术研究.....1655
基于谷胱甘肽修饰碳点荧光法检测水样中的次氯酸根.....1656
$MnSe_2$ 与吡啶取代的吡咯并吡咯氧化石墨烯协同促进电化学检测 4-硝基氯苯.....1657
基于低共熔溶剂的表面分子印迹聚合物对四溴双酚 A 的特异性识别和富集.....1658
具有类过氧化物酶活性的花状 Fe/NC-F 单原子纳米酶用于咖啡酸的比色传感.....1659
基于肽纳米管激活 hemin 和 PPIX 的比色/荧光双信号传感体系灵敏检测单宁酸.....1660
金纳米粒子与氯化血红素共负载肽纳米管检测水样中儿茶酚.....1661
一种连续识别 Cu^{2+}和草甘膦的荧光/比色双模式多肽探针的合成及应用研究.....1662
比色/荧光双模式多肽探针的构建及对铜离子和草甘膦可视化检测研究.....1664
具有大斯托克斯位移的多肽荧光探针的构建及对镉离子检测的研究.....1666
基于多肽荧光探针序列识别铜离子和草甘膦的合理设计:智能手机、试纸、实际样品和活细胞应用.....1668
往复筒法测定血塞通软胶囊有效成分的体外溶出度.....1669
多量表联合常规检验数据的敌草快中毒患者预后评估研究.....1670
液相高分辨质谱表征抗体偶联药物 RC48 的临床前研究.....1672
分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛.....1673
科技创新高质量发展与试验技术能力评价体系.....1673
标准化人才助推科技创新.....1674
科技创新实验技术专业人才培养与能力认定.....1675
办好电镜教育 传承电镜文化.....1676
精准赋能：构建科学仪器行业人才数字化培养体系.....1677
产教同行，助推新质生产力发展 —— 国家级生物医药市域产教联合体探索与实践.....1678
CSTM/NTC 试验人员技术能力培训机构与考核基地管理要求.....1679
分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛.....1680
氢能催化材料创制与应用.....1680
原位电镜表征在工业催化剂上的应用.....1681
二维碳材料的电子显微学和光谱学分析.....1682
原位 TEM 表征在电极材料中的应用.....1683
“进”无止境——赛默飞世尔电镜的进化与进取之路.....1684
原位进样技术研发进展.....1685
中空可变纳米颗粒及其复合纳米材料的形貌与组成表征.....1686
位点调控对氮化碳光催化 CO_2 还原的影响.....1687
分会场：46.本草物质科学研究方法与技术.....1688
本草物质科学研究方法与技术毒性与毒性评价仪器.....1688
基于多维高效制备技术的本草物质科学研究.....1689
中药复杂体系的表征分析与分离鉴定.....1690
高分子多孔微球在天然产物分离中的应用研究.....1691
化学分析与生物测试驱动的活性物质识别.....1692
本草物质多维高效制备方法研究.....1693
高速逆流色谱分离新模式及新方法在天然产物活性物质分离制备中的应用.....1694
基于蛋白组学的药物作用机制研究.....1695
中药活性物质的多靶酶亲和超滤质谱筛选研究.....1696

细胞外囊泡和亚细胞蛋白质组研究新技术 1697
无衍生化的化学蛋白质组学揭示生物活性天然化合物的机制 1698
药食同源复杂体系全成分解析关键技术及产品开发 1699
安捷伦液相质谱技术在中药物质基础研究中的创新与应用 1700
绿原酸：双光子荧光成像与作用机制研究 1701
本草科学中安全性控制新技术探索及应用 1702
多级三维质谱实现三七中人参皂苷靶向亚代谢组定量表征 1703
药用植物中萜类化合物的精准导向分离及其抗肿瘤作用 1704
直接电晕充电：提升电雾式检测器的灵敏度与稳定性的新策略 1705
刺五加与短梗五加茎中化学成分的定性和定量研究 1706
天然产物“自下而上”结构分析策略 —基于气相碰撞诱导 C–C 键裂解的碎片离子结构鉴定与拼接 1707
食源性病原体的快速免疫分析方法 1708
基于天然纤维的绿色样品前处理方法及其中药有毒有害物质分析应用 1709
微针贴片用于有效装载和持续递送各种治疗药物 1710
内部萃取电喷雾电离质谱快速测定中草药中脂肪酸含量 1711
低共熔溶剂改善酸性化合物制备容量及其机理研究 1712
通过“四合一”测定实现中药中的细胞色素 C 配体在线筛选 1713
糖类物质分离分析与功能研究 1714
北豆根镇痛的多成分多靶点作用机理研究 1715
基于 iEESI-MS 不同产地柏子仁质量评价研究 1716
算法驱动天然产物质谱数据智能挖掘与鉴定 1717
岩藻糖修饰的高聚合度人乳寡糖异构体的超高温纯化制备与负离子串联质谱分析 1718
中药苦地丁生物碱成分及其活性研究 1719
四神丸治疗炎症性肠病的多成分多靶点机理研究 1720
翻译后修饰蛋白多组学样品前处理平台及在中药作用机制中的应用 1721
人工智能在天然产物复杂样品的分析应用 1722
多孔石墨化碳色谱在中药寡糖同分异构体分离中的应用 1723
基于硼亲和树枝状介孔硅的选择性富集用于人参皂苷的高效分析 1724
基于异构化性质的“自切换”低温液相色谱纯化方法研究 1725
姜黄中姜黄素组合物与 FGF21 功能蛋白双载微纳米复合物制备研究 1726
整合脂质组学与蛋白质组学揭示 MTDH 棕榈酰化修饰调控 ACSL4 活性 1728
基于微量升华法的沉香之“香”的药效物质基础研究 1729
凉山州特色农业废弃物荞麦秸秆的热解特性及动力学研究 1730
本草科学中应对有机磷农药残留的荧光检测方法开发 1732
分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛 1733
呼出气体质谱分析研究进展 1733
MALDI-TOF 质谱技术在临床科研中的应用探索 1734
食管癌中组蛋白乳酸化修饰的质谱鉴定和应用研究 1735
全自动样品前处理结合 LC-MS/MS：尿液中儿茶酚胺类物质的精准测定 1736
液相色谱与液质联用技术在抗精神疾病药物 TDM 中的应用探索与分析 1737
结合机器学习与时序代谢组学揭示胃癌化疗敏感性的代谢分层亚型及异质性 1738
泰利霉素潜在肝毒性的空间代谢组学研究 1739
空间分辨功能代谢组表征用于胶质母细胞瘤的溶瘤腺病毒治疗评价及作用机制研究 1740

一种新型同位素编码的光化学组织衍生化质谱成像技术对生物组织中胺类代谢物的定量可视化研究.....1742
髓鞘对缺血性脑卒中小鼠神经损伤恢复过程中保护机制的研究.....1743
分会场：48.场流分离与仪器.....1745
Performance Evaluation of thickness-tapered channel in flow field-flow fractionation..... 1745
复杂样品场辅助分离富集方法与微型化装置研究.....1746
非对称场流、切向流过滤和超速离心在细胞外囊泡分离纯化和蛋白质组学研究中应用与比较.....1747
流体场场流分离在生物分析中的应用.....1748
高梯度可调磁场作用下磁性粒子的运动特性和分离效果.....1749
A Porous Membrane-Medicated Preparative Electrophoresis for the Extraction of Nucleic Acids.....1750
应对富有机质水体中微量元素分析的不确定性：AF4-UV-ICPMS 技术的应用与挑战.....1751
基于中空纤维流场流分离技术的风化壳载 REE 纳米微粒表征.....1752
基于声流效应下的沙门氏菌高灵敏可视化快速检测研究.....1753
非对称场流分离技术在血小板来源细胞外囊泡异质亚群分离与研究中的应用.....1754
场流分离技术在土壤胶体颗粒重金属赋存与迁移研究中的应用.....1755
场流分离技术国内研究进展：机遇与挑战.....1756
“靶型”电泳技术研发及其应用.....1757
基于中空纤维流场流分离系统的天然有机质与薄层黑磷相互作用研究.....1758
声波微流控技术在微塑料尺寸分离中的应用研究.....1759
靶型旋转凝胶电泳用于蛋白质的分离.....1760
靶型凝胶电泳的双功能分区策略用于高分辨分离蛋白质.....1761
SEC 和 AF4 研究不同降解程度的大枣多糖对大豆 7S 球蛋白抗原性的影响.....1762
基于非对称场流分离技术纯化灵芝多糖及其抗肝癌活性研究.....1763
富含硫酮和氨基基团的磁性共价有机骨架选择性萃取痕量金属离子.....1764
基于非对称场流分离技术及天然低共熔溶剂提取纯化山药皮多糖.....1765
基于非对称场流分离技术探究内源性非淀粉多糖对山药淀粉温度循环回生的影响.....1766
基于便携式气体压力计的钙离子分析方法.....1767
无需色谱分离的无机锑形态分析的氢化物发生智能手机读数比色系统.....1768

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

单细胞二维分析的研究

王建华*、陈明丽、魏星
东北大学

根据水动力原理及流体惯性效应，利用惯性流辅助在微通道中操控细胞的排列与聚焦，实现高通量单细胞进样与 ICP-MS 分析，以研究细胞对金属纳米聚集体摄取的异质性。在金纳米粒子上修饰特定适配体，选择性结合循环肿瘤细胞（CTCs）表面表达的标志蛋白，在微流控通道中高效捕获血液中的 CTCs，ICP-MS 检测 Au 同位素，分析单个 CTC 上肿瘤标志蛋白的表达水平。在此基础上，发展了单细胞二维分析系统。在微通道中的极端温和流速条件下，实现单细胞聚焦。激光诱导荧光（LIF）和 ICP-MS 二维检测，分别获取药物摄取及标志蛋白的表达水平。辅之以机器学习，可从单细胞水平上同时描述标志蛋白的表达及其对抗癌药物摄取的响应。对单细胞进行多维多参数的同时检测，可提供更多有效信息，有利于多方位评价细胞内发生的生物化学过程及其相关机理。为此开展了一系列相关研究，并取得了初步信息。

关键字 单细胞分析；二维分析；荧光；ICP-MS

参考文献

1. C.X. Wu, X. Men, M.J Liu, Y.J. Wei, X. Wei, Y.L. Yu, Z.R. Xu, M.L. Chen*, J.H. Wang*, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 13297–13304.
2. X. Zhang, X. Wei, C.X. Wu, X. Men, J. Wang, J.J. Bai, X.Y. Sun, Y. Wang, T. Yang, C.T. Lim*, M.L. Chen*, J.H. Wang*, *ACS Nano*, **2024**, 18, 6612–6622.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

生物体液样本成像分析的样本制备方法探索

徐明*、刘畅、祁梦颖
中国科学院生态环境研究中心，环境化学与生态毒理学国家重点实验室

血液和尿液样本分析是个体健康监测及疾病诊断的主要手段之一，提供了重要的临床信息。然而，目前常用的分析方法，如血常规分析和生化分析，存在若干缺点，包括所需样品量大、分析速度慢、通量低、背景干扰严重等。因此，亟待开发快速、灵敏、高通量的体液样本分析方法，实现更为便捷的临床筛查与诊断目的。基于上述思路，我们建立了微量体液样本的快速制备与筛查方法。首先，利用明胶作为基质，可对微升级体液样本进行固定，获得了大小与分布均一的液滴样本，每批样本的制备时间仅需 20 分钟。继而，我们采用质谱成像技术，包括激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）和电喷雾质谱成像（DESI-MSI），对体液样本的金属组与代谢组进行分析，可实现关键标志物的快速筛查与识别（图 1）。利用上述方法，我们对人和小鼠经汞暴露后，尿液中关键元素和代谢物的变化进行了分析，进而对潜在的作用机制进行了探究，为汞的健康风险与毒理研究提供了新的视角。

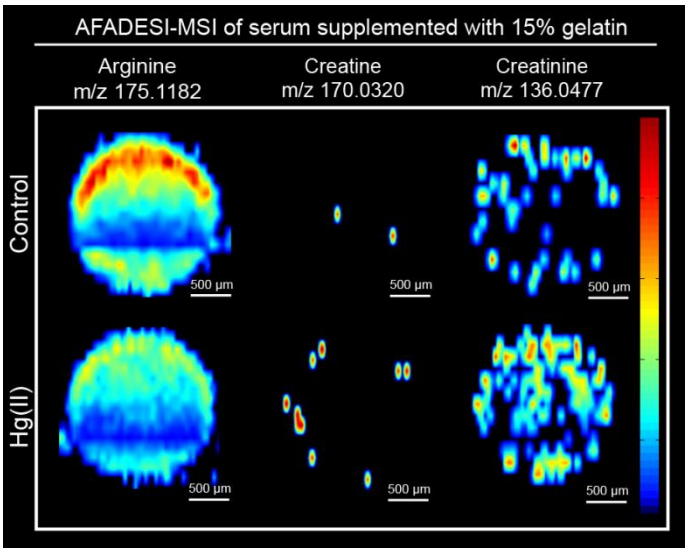


图 1. 利用质谱成像技术分析无机汞暴露对小鼠血清中精氨酸、肌酸和肌酐的影响

关键字 生物体液；样本制备；质谱成像；金属组；代谢组

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

水稻中镉的来源解析：从水溶态镉到镉同位素

阴永光*[1]、董强[1]、刘艳伟[1]、王子迪[1]、汤文瑶[1]、陈哲[1]、梁勇[2]、蔡勇[1]、江桂斌[1]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 江汉大学

镉是影响农用地土壤环境质量的主要污染物之一。镉可在稻米等谷物中累积。稻米等谷物摄入是东亚人群镉暴露的重要途径，也极大程度影响人类健康。稻米等农作物中镉的来源认知是降低其镉浓度及人体镉暴露的前提。课题组以水稻为模型，通过温室盆栽实验（大气镉沉降可忽略），发现土壤水溶态镉与稻米镉均有较好的相关性，提示土壤水溶态镉是土壤镉生物有效性的指示；通过镉同位素分析发现，在温室盆栽条件下，土壤水溶态镉与水稻全株镉的同位素组成基本一致，表明土壤水溶态镉是水稻吸收镉的主要来源；但在大田条件下，大气沉降也是水稻吸收镉的重要途径，通过镉同位素分析可定量土壤水溶态镉和大气沉降镉对大田水稻镉的分别贡献。针对小麦的盆栽实验也发现，土壤水溶态镉是小麦镉的主要来源。水溶态作为金属植物有效性的指示，适用于镉、锌等，但不适用于铅，这与金属离子的路易斯酸特性有关。

关键字 镉；水稻；水溶态；大气沉降；同位素；路易斯酸

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

云南“三江并流”区域典型重金属污染特征、迁移转化及溯源分析研究

温晓东*
大理大学

云南的“三江并流”区域是世界上生物物种最丰富的地区之一，然而该世界自然遗产正面临采矿、水电及旅游开发带来的诸多环境和生态问题。目前，由于对该区域的持久性有毒污染物尤其是重金属的环境监测体系很不完善，导致重金属污染特征、迁移转化及溯源分析数据非常缺乏，相关研究亟待加强。水、土壤、沉积物等环境介质基质复杂、重金属污染特征差异大，这给传统的环境分析方法提出了挑战。本研究拟开发基于新型样品前处理的适用于不同环境介质中重金属污染物特征分析的新方法，深入开展污染物迁移转化及溯源分析研究，识别迁移途径、揭示转化规律、厘清污染来源。本研究将为“三江并流”区域的环境质量评价、环境污染治理和生态风险防控提供重要基础数据，为政府决策提供依据。

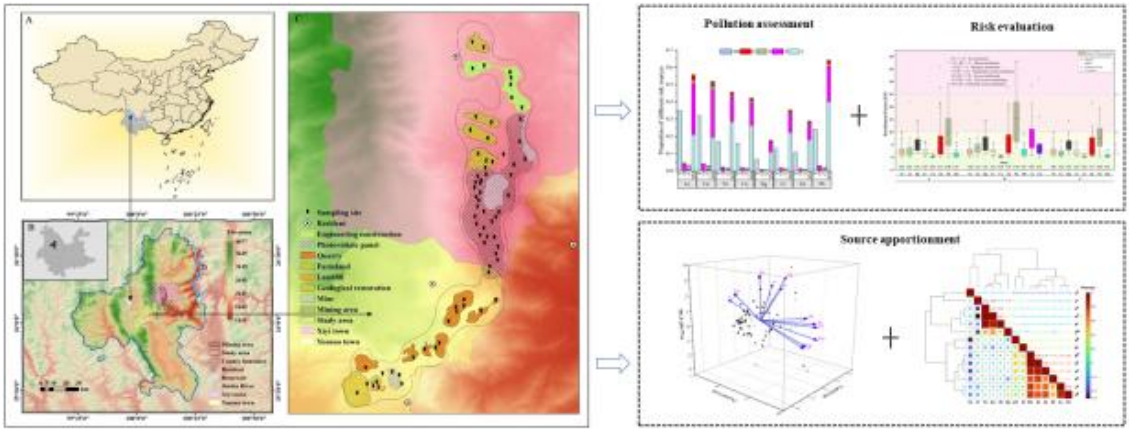


图 1. 本研究的示意图

关键字 重金属检测；“三江并流”区域；污染特征；迁移转化；溯源分析

参考文献

1. X. Liu, H.J. Chi, Z.Q. Tan, et al., Heavy metals distribution characteristics, source analysis, and risk evaluation of soils around mines, quarries, and other special areas in a region of northwestern Yunnan, China, *J. Hazard. Mater.* 458 (2023) 132050.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于原子光谱技术的纳米颗粒分析表征新方法研究

谭志强*、阴永光、张庆华、宋茂勇、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

近年来，纳米颗粒的环境健康风险引发关注。为解决复杂基质样品中低浓度纳米颗粒分析表征难题，自 2011 年起作者研究团队在国内率先开展了中空纤维流场流分离技术研究，先后研制了四代基于中空纤维流场流分离技术的纳米颗粒分析表征仪器（HF5-I、HF5-2、HF5-3、HF5-2022），这些仪器的分离性能逐渐优化，应用范围不断扩大，自动化程度逐步提高。最新一代的纳米颗粒分析表征仪器（HF5 2022）可实现纳米/亚微米级（如 10~200 nm）和微米级（如 1~10 μm）标准聚苯乙烯微球的完全分离。作者研究团队将研制的纳米颗粒分析表征仪器与电感耦合等离子体质谱仪、电感耦合等离子体光谱仪、尖端放电-微等离子体光谱仪等原子光谱仪联用，建立了含金属纳米颗粒和碳质纳米颗粒的分析表征新方法，阐明了这两种典型纳米颗粒的独特环境地球化学行为，为理解纳米颗粒的环境地球化学行为和生物效应提供了新视角。

关键字 场流分离；ICP-MS；PD-OES；银纳米颗粒；纳塑料

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

HPLC-ICP-MS/ESI-MS/MS 平行联用技术及金属组学研究

胡斌*、陈贝贝、何蔓
武汉大学

将高选择性分离技术（例如高效液相色谱（HPLC））与元素特异性检测技术（例如电感耦合等离子体质谱（ICP-MS））和分子特异性检测技术（例如电喷雾串联质谱（ESI-MS/MS））相结合，所构建的 HPLC-ICP-MS/ESI-MS/MS 平行联用技术是金属组学研究的有效平台。该联用技术能够提供金属及其化合物在生物体内的含量、形态、分布、转化和代谢等信息，有助于阐明金属的生物效应。本次报告中，我们将介绍新开发的 HPLC-ICP-MS/ESI-MS/MS 联用平台及其在金属组学中的应用，包括在鸡肝中发现甲基化的苯基砷酸代谢物[1]、CdSe/ZnS 量子点（QDs）在 HepG2 细胞中的代谢行为[2]以及硒代半胱氨酸（SeCys2）对 HepG2 细胞中甲基汞（MeHg）细胞毒性的拮抗作用[3]。

关键字 联用技术；ICP-MS；金属组学

参考文献

1. H.Y. Peng, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2017**, 56, 6773–6777.
2. L. Peng, et al., ACS Nano. **2015**, 9, 10324-10334.
3. H. Wang, et al., Sci. Rep. **2017**,7, 147.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

微型化原子发射光谱系统研制与分析应用

于永亮*、蔡继颖、刘双、沈浩、王建华
东北大学

基于介质阻挡放电（DBD）或尖端放电（PD）微等离子体为激发源的微型原子发射光谱（OES）系统，为痕量元素的现场分析提供了一种便携式仪器，但实际样品分析受复杂基质干扰，且某些金属/类金属为超痕量。因此，迫切需在样品引入方式及检测灵敏度上取得突破。① 光化学蒸气发生（PVG）进样的 DBD-OES。制备 MoS2-COF 复合材料作为双功能载体，利用大比表面积和多孔结构捕集重金属，同时其异质结提高了 PVG 效率；相较直接 PVG 进样，灵敏度提升 43 倍。② 首创微等离子体原位解吸进样的 DBD-OES。为发展高效进样模式，创新采用“即插即用”的活性炭头，同时充当重金属的捕集载体和同轴 DBD 的内电极，解吸进样效率>90%；相较溶液直接进样，灵敏度提升 2 个数量级，且 DBD 激发后无炭头结构损伤，可重复使用超 30 次。其与电萃取联用，可进一步适用高盐（g/L 水平）基质样品分析，能直接检测土壤提取液中有效态重金属。③ 气相富集（GPE）与原位解吸进样的 DBD-OES。为提高重金属捕集效率，创新采用阵列雾化板 GPE，40 s 完成批量样品的低浓度分析物的累积捕获，并能将分析物快速原位解吸进样，提高了检测灵敏度、分析通量和便携性。为适用于固体样品，进一步一体化集成了形态提取、基质分离及重金属捕集的功能，实现了鱼肉样品中无机汞和甲基汞的非色谱分离分析；批量样品分析 50 min 内完成，总汞提取效率>90%。④ 具有在线消解功能的便携式 PD-OES。该仪器可在 25 min 内实现 6 个样品的在线消化，经氢化物发生进样直接导入 PD-OES 检测，为固体样品中痕量重金属的现场分析提供了方便的工具。

关键字 微等离子体；原子发射光谱；样品引入方式；现场分析；微型装置

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于靶向金属标签的元素质谱生物医学分析应用

严晓文*、赵阳、赵鑫悦、侯汝雪、顾雨欣、杨利民、王秋泉
厦门大学化学化工学院

发展高特异性、高亲和力识别目标蛋白的元素标签对于生物定量分析和药物开发具有重要意义。我们以共价靶向药物伊布替尼（Ibt）作为 B 细胞淋巴癌蛋白布鲁顿酪氨酸激酶（BTK）的靶向分子，设计合成了叠氮修饰的靶向标签 Ibt-N_3。该标签可以快速穿过细胞膜，原位标记 BTK，接着实现稀土元素的点击反应 1:1 化学计量比标记和电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）准确定量[1]。此策略有效地规避了 DOTA-Eu 稀土螯合标签的细胞膜渗透性低的问题，成功将共价靶向药物用于细胞内癌蛋白 ICP-MS 定量分析。此外，针对传统砷药物药效低、副作用大、适用面窄的问题，我们以 BTK 为靶点，设计合成了含有靶向配体和不同砷形态亲电弹头的新型共价靶向砷抑制剂[2]。得益于三价砷弹头和靶向配体的协同作用，新型砷抑制剂高选择性地与 BTK 活性位点的半胱氨酸巯基高亲和力结合，有效抑制 BTK 介导的癌症信号通路，抑制 B 淋巴瘤细胞和小鼠移植瘤生长。此外，我们将砷作为 ICP-MS 元素标签用于砷药物定量分析研究，准确地获得砷药物的细胞摄取、小鼠组织分布和药代动力学信息。

关键字 元素质谱生物分析；靶向元素标签；电感耦合等离子体质谱；癌蛋白定量；砷抑制剂

参考文献

1. R. Hou, Y. Gu, Y. Zhao, X. Zhao, L. M. Yang, X. W. Yan, Q. Q. Wang, Atom. Spectrosc., **2024**, 45, 74-82.
2. Y. Zhao, X. Zhao, L. Duan, R. Hou, Y. Gu, Z. Liu, J. Chen, F. Wu, L. M. Yang, X. C. Le, Q. Q. Wang, X. W. Yan, J. Med. Chem., **2024**, 67, 5458-5472.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

多接收磁质谱单颗粒元素与同位素分析方法开发及应用

朱振利*
中国地质大学

纳米至微米级的颗粒物具有体积小、比表面积大、反应活性高等特征，在整个地球动力学系统中扮演着关键角色，也已成为广受关注的环境污染来源。这些颗粒物的元素与同位素信息包含了有关样品来源和迁移转化过程的丰富信息，而单个细胞的元素与同位素组成则与其代谢活动和细胞间的异质性密切相关。尽管如此，现有研究通常将所有颗粒物/细胞视为一个整体，忽略了单颗粒或单细胞的异质性。近年来，单颗粒（细胞）分析技术越来越受到重视。然而，目前基于四级杆和飞行时间质量分析器的单颗粒（细胞）分析技术仍存在灵敏度低、同位素比值精度不足等问题。本研究基于高速示波器和多接收等离子体质谱（MC-ICP-MS）开发了“事件触发信号捕获”（ETSC）系统，为单纳米颗粒级别元素与同位素分析提供了高灵敏度的解决方案[1]。ETSC 系统具备优异的颗粒物事件特异性识别和高灵敏度分析性能，能够检测到最小直径为 8 nm 的 AgNPs（1 ag 109Ag），优于其他单颗粒技术的分析灵敏度。在高灵敏度的基础上，ETSC 系统对 20 nm ~ 100 nm 的单个 AgNPs 的 109/107Ag 测量标准偏差（SD）均优于 0.09。利用数百~数千个颗粒的统计分析，40 ag AgNPs 的 109/107Ag 分析精密度可以提高至 0.7 ‰。此外，ETSC 系统还实现了对 ag ~ fg 质量稀土纳米颗粒的元素与同位素分析，以及自然环境中模拟核颗粒的识别和分析。同时，我们基于 ETSC 系统建立了单颗粒同位素比值校正方法，进一步提升了单颗粒同位素分析的准确度。研究结果表明，ETSC 系统对自然矿物粉尘的 Pb 测试值与参考值之间的相对偏差可控制在 0.32 %以内。此外，即便矿物颗粒量仅为总颗粒量的 1/109，ETSC 系统也可以有效将矿物颗粒识别检测，多颗粒的同位素分析精密度优于 1 ‰。最后，我们也将 ETSC 系统应用于单个藻类细胞中 P、Cu、Zn 等营养元素定量分析和元素比值分析，实现了单细胞异质性的观察。综上所述，ETSC 系统在单个颗粒尺度上提供了元素与同位素的信息，可以用于探究颗粒物地球化学循环，以及单细胞异质性等研究。

关键字 单颗粒分析；多接收磁质谱；单细胞；高时间分辨；同位素分析

参考文献

1. P. Xing, N. S. Belshaw, J. Dong, L. Li, Y. Geng, H. Zheng, X. Liu, Z. Zhu*, Talanta., **2024**, 278, 126540.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

微等离子体在熔盐电解及原子光谱在线分析中的应用

陆跃翔*
清华大学

微等离子体电化学（microplasma electrochemistry, MIPEC），是利用常温常压辉光放电产生的微等离子体作为一种气体电极的新型电化学体系。在体系中微等离子体同时具备电化学和等离子体的双重性质，可以实现电荷传输和激发原子光谱等多重功能，可应用于熔盐电解、在线监测和功能材料制备等多个领域。本文将微等离子体用于乏燃料干法后处理的熔盐电解精炼过程中。在高温熔盐中，利用微等离子体气体电极代替传统的固体电极进行电荷传输，可以有效解决阳极的腐蚀问题，阴极的枝晶问题。并且可以激发熔盐中金属离子的原子光谱信号，实现熔盐中元素的原位定性和定量分析，以及对电解过程的在线监测。

关键字 微等离子体；熔盐；原子光谱；在线分析

参考文献

1. G. Wei, X. Liu, Y. Lu, Z. Wang, S. Liu, G. Ye, J. Chen, Anal. Chem., **2018**, 90, 13163−13166.
2. J. Luo, Q. Qing, L. Huang, Z. Wang, S. Liu, J. Chen, Y. Lu, Chin. Chem. Lett., **2024**, 35, 108483
3. J. Luo, Q. Qing, Z. Wang, S. Liu, J. Chen, Y. Lu. Wang, Sep. Purif. Technol., **2024**, 332, 125829

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于固体进样的重金属快速检测技术

毛雪飞*
中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所

近年来，随着我国工农业的高速发展，尤其是无节制的矿藏开采、“三废”排放、汽车尾气以及农业化学投入品的滥用，重金属污染已成为我国当前最严重的环境污染和食品安全问题之一。但是，目前的重金属检测标准方法仍以实验室确证性分析为主，无法用于复杂样品重金属的现场、快速分析，从而难以从源头上及时、有效地对重金属污染进行监测和预防，开发重金属快速检测设备和技术势在必行。从食品、环境样品的基质特点来看，固体进样分析是最可行的技术方案，主要包括电热蒸发（ETV）原子光谱、X 射线荧光光谱（XRF）、激光烧蚀（LA）、激光诱导击穿光谱（LIBS）、X 射线吸收光谱（XAS）、中子活化（INAA）等。上述固体进样分析技术均无需样品消解处理，高效、快捷，但是部分技术的检出能力和稳定性尚难以满足食品质量安全标准的全部要求，如 XRF、LA、LIBS，还有部分技术难以实现现场化，如 LA、XAS、INAA 等。因此，基于电热蒸发（ETV）固体进样的原子光谱分析技术在分析灵敏度、稳定性和小型化方面具有特殊的优势。ETV 是利用电加热将样品中的待测元素以气溶胶的形式导入原子化器或激发源的技术，可实现常见重金属元素的快速、高效导入，技术简单、通用性强，适用于原子吸收、原子荧光、原子发射、无机质谱等多种检测系统。但是，食品和环境样品基质复杂，基体干扰一直是困扰 ETV 技术应用的核心瓶颈问题。新型的气相富集（GPE）、介质阻挡放电（DBD）、基体改进及背景校正等技术，有望实现复杂基体干扰的有效消除。特别是 GPE 技术，在特异性捕获消除基体干扰的同时，还可以通过预富集提高仪器的分析灵敏度。通过上述技术的集成与创新，可以有效解决固体进样的分析灵敏度和基体干扰问题，这将为食品和环境重金属速测技术的研发提供新的思路，从而为食品安全、环境质量监测与防控工作提供有效的技术支撑。

关键字 固体进样；重金属；快速检测

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

便携式原子荧光光谱仪：从基础研究到仪器构建

王秋泉*
厦门大学

原子光谱仪器作为痕量元素分析的常用工具在材料、环境和生命等科学研究中发挥着不可替代的作用，但其应有灵敏度的发挥受到来自样品引入和原子化效率的制约。化学蒸气发生、光诱导和纳米半导体材料介导的光催化蒸气发生技术的出现极大地提升了样品引入和后续目标元素原子化之效率。在简要回顾这一历程的基础上，我将简要介绍我们实验室在纳米半导体材料介导的光催化蒸气发生进样和原子化方面的基础研究工作，重点谈一谈高效复合纳米半导体材料的设计和制备和其光催化还原原子化的原理以及相关器件的构建，以期催生基于溶液原位原子化的便携式原子荧光光谱仪器。

关键字 原子荧光光谱分析

参考文献

1. Q. Q. Wang, J. Liang, J.H. Qiu, B. L. Huang, Online pre-reduction of selenium (VI) with a newly designed UV/TiO_2 photocatalysis reduction device, J. Anal. At. Spectrom., **2004**, 19, 715-716.
2. Y. M. Yin, J. Liang, L. M. Yang, Q. Q. Wang, Vapour generation at a UV/TiO_2 photocatalysis reaction device for determination and speciation of mercury by AFS and HPLC-AFS, J. Anal. At. Spectrom., **2007**, 22, 330–334.
3. Y. M. Yin, J. H. Qiu, L. M. Yang, Q. Q. Wang, A new vapor generation system for mercury species based on the UV irradiation of mercaptoethanol used in the determination of total and methyl mercury in environmental and biological samples by atomic fluorescence spectrometry. Anal. Bioanal. Chem., **2007**, 388, 831–836.
4. H. M. Li, Y. C. Luo, Z. X. Li, L. M. Yang, Q. Q. Wang, Nanosemiconductor-based photocatalytic vapor generation systems for subsequent selenium determination and speciation with atomic fluorescence spectrometry and inductively coupled plasma mass spectrometry, Anal. Chem., **2012**, 84, 2974−2981.
5. H. M. Li, Z. G. Xu, L. M. Yang, Q. Q. Wang, Determination and speciation of Hg using HPLC-AFS by atomization of this metal on a UV/nano-ZrO_2/HCOOH photocatalytic reduction unit, J. Anal. At. Spectrom., **2015**, 30, 916–921.
6. 王秋泉，闫丽珍，杨利民，磷化镓-氮掺杂二氧化钛可见光催化纳米复合材料及其制备方法和应 用，发明专利，**202410032597.1**
7. 王秋泉，闫丽珍，杨利民，溶液原位原子荧光光谱分析装置，发明专利，**202410578651.2**

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于多维检测的单细胞分析研究

魏星、吴成新、刘美君、杨婷、陈明丽*、王建华
东北大学

单细胞分析技术聚焦于研究细胞之间的个体差异或异质性，如今已成为生命科学研究的热门领域。已有研究表明，即使在相同的生理条件下，同源细胞在单细胞层面的表现也有显著差异，例如形态、基因表达水平和生长特性等。这些细胞间的个体化差异对于生命健康相关的各生理过程有着重要甚至是决定性的影响。流式细胞术是对快速流动中的细胞或生物微粒逐一进行形态学表征和定量分析的一种高通量单细胞分析技术，由于兼具高通量分析与多参数同时表征的优势，成为了应用最广泛的单细胞分析技术。但同时，由于在多色流式分析中存在的光谱重叠和复杂的补偿计算等限制，使传统流式细胞术很难在单细胞多参数分析方向获得进一步的发展。因此，我们建立了一种光谱-质谱二维多参数流式单细胞分析系统。首先建立高灵敏、高时间分辨率的多通道光学检测系统，并结合稳定高效的单细胞聚焦排列进样系统，建立基于光学检测的多参数流式单细胞分析系统。在此基础上，通过设计构建高效的雾化系统，将搭建的多参数流式单细胞分析系统与电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）联用，建立光-质二维多参数流式单细胞分析系统，实现单细胞的二维多参数分析。通过获取单个细胞蛋白表达、代谢、转录和表型等多维度交叉信息，进而多角度解析细胞和外泌体异质性对生命活动的影响。这对于基于循环肿瘤细胞的疾病早期诊断、预后评估、疗效评价和个体化治疗具有重要指导意义。

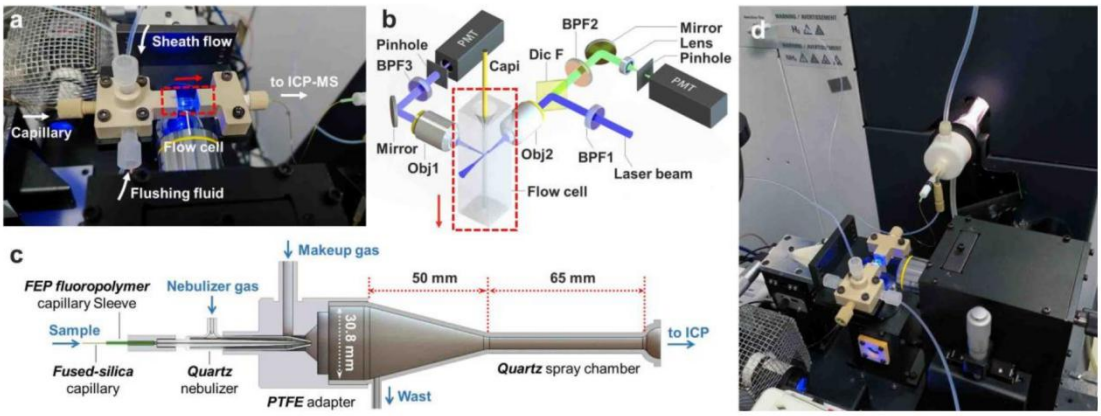


图 1. 二维流式单细胞分析系统实物图

关键字 单细胞分析；多维检测；原子光谱

参考文献

1. C.X. Wu, X. Men, M.J Liu, Y.J. Wei, X. Wei, Y.L. Yu, Z.R. Xu, M.L. Chen*, J.H. Wang*, Anal. Chem., **2023**, 95, 13297–13304.
2. X. Zhang, X. Wei, C.X. Wu, X. Men, J. Wang, J.J. Bai, X.Y. Sun, Y. Wang, T. Yang, C.T. Lim*, M.L. Chen*, J.H. Wang*, ACS Nano, **2024**, 18, 6612–6622.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

DNAzyme 纳米机器原位成像抗生素诱导细胞炎症效应

彭汉勇*[1,3]、袁爱姣[1,3]、郝慧芳[1,2]、武梓萌[1]、谢文菁[1]、陈乐源[3]、金心宇[1]、张宏伟[1]、叶镭[1]

1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 吉林大学公共卫生学院
3. 中国科学院大学

DNA 纳米技术在活细胞成像及关键分子调控方面取得了迅速发展，推动了合成 DNA 纳米机器的设计与功能拓展。这些纳米机器利用 DNA 结构的可编程特性，实现了精准操作和靶向功能，特别是自组装 DNA 纳米机器在生物传感、生物成像及分子调节等领域展现了广泛的应用潜力。抗生素引起的炎症涉及髓过氧化物酶（MPO）的释放，MPO 在组织中的表达与多种疾病相关。分析 MPO 对于理解炎症途径的毒性机制至关重要。然而，现有的检测方法大多需要多步反应，且容易收到样品基质、缓冲条件和背景信号的干扰，不适用于活细胞分析。本研究开发了一种 DNAzyme 纳米机器，利用金纳米颗粒（AuNPs）作为支架，装载功能性 DNAzyme 链和底物链。DNA 纳米机器具有可调节的可编程性、优良的生物相容性以及穿透细胞屏障的能力。当髓过氧化物酶存在时，触发卤化过程产生次氯酸（HClO），HClO 特异性催化 PT 位点的切割，释放 DNAzyme 链，进而切割其底物，释放带有荧光标记的片段，产生荧光信号。MPO 的检测限为 38.0 ng/mL，HClO 的检测限为 13.0 nM。由于所有必要的检测元件都集成在 DNAzyme 纳米机器中，因此可以很容易地将其引入细胞并自主地发挥作用。DNAzyme 纳米机器应用于活细胞成像，成功区分了在环境(佛波醇 12 -肉豆蔻酸酯 13 -乙酸酯、红霉素、青霉素和四环素)和抗生素生产废水中发现的 4 种流行抗生素引起的 MPO 水平升高。该纳米机器为监测 MPO 作为生物标志物评估抗生素暴露的健康影响提供了新的策略。

关键字 DNAzyme 纳米机器；髓过氧化物酶；抗生素；炎症；卤化物

参考文献

1. Peng H, Li X F, Zhang H, et al. Nat. Commun., **2017**, 8(1): 1-13.
2. Wu J, Peng H, Lu X, et al. Angew. Chem. Int. Ed., **2021**, 60(20): 11104-11109.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

元素砷的金属组学研究

陈贝贝*、何蔓、胡斌
武汉大学

金属组学（Metallomics）是继基因组学（Genomics）、蛋白质组学（Proteomics）和代谢组学（Metabolomics）之后提出的一门新的前沿交叉学科。根据 IUPAC 的定义，金属组学是研究细胞、器官或生物组织中所有的游离金属离子和金属结合分子的形态、浓度、时空分布、生物功能，以及与基因组、蛋白质组和代谢组之间的联系的科学。

砷（As）是一种有毒元素。As 的毒性不仅仅取决于其浓度，更与其所存在的形态密切相关。自然界中常见的 As 形态有：亚砷酸盐[As(III)]、砷酸盐[As(V)]、单甲基砷酸（MMA）、二甲基砷酸（DMA）等。As(III)的毒性大于 As(V)，无机砷的毒性大于有机砷化合物。因此，为了揭示 As 的毒性作用机制，发展新型砷形态分析方法，开展 As 的金属组学研究具有重要意义。

本课题组以细胞为研究对象，建立了高效液相色谱(HPLC)与电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)联用新方法研究了 As(III)在胞内的甲基化代谢行为[1,2]；设计并制备了苯砷酸小分子探针实现了胞内砷结合蛋白的捕获与鉴定[3,4]；将 As(III)和反式二氢二醇环氧苯并芘(BPDE)共孵育细胞，初步探究了 As(III)的胞内代谢与其引起基因毒性之间的联系[5]。

关键字 电感耦合等离子体质谱；联用技术；砷；金属组学

参考文献

1. Y.X. Li, B.B. Chen, M. He, B. Hu, Biomethylation metabolism study of arsenite in SCC-7 cells by reversed phase ion pair high performance liquid chromatography-inductively coupled plasma-mass spectrometry, Talanta 188 (2018) 210-217.
2. Z. Chen, B. Chen, M. He, B. Hu, Magnetic metal-organic framework composites for dual-column solid-phase microextraction combined with ICP-MS for speciation of trace levels of arsenic, Microchimica Acta 187 (2020) 48.
3. K. Nan, M. He, B. Chen, B. Hu, Analysis of arsenic binding proteins in HepG2 cells based on a biotinylated phenylarsenite probe, Analytica Chimica Acta 1183 (2021) 339007.
4. K. Nan, M. He, B. Chen, B. Hu, Histidine tag modified magnetic beads for analysis of arsenic binding proteins, Analytica Chimica Acta 1304 (2024) 342554.
5. Y. Li, M. He, B. Chen, B. Hu, Inhibition of arsenite methylation induces synergistic genotoxicity of arsenite and benzo(a)pyrene diol epoxide in SCC-7 cells, Metallomics 11(1) (2019) 176-182.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

原子光谱微型化进样技术与关键部件研究

蒋小明*、李凯、侯贤灯
四川大学

原子光谱仪器从原理和结构上来看，其核心部件主要包括原子化器/激发源以及进样单元。如何高效地将样品“纯净”地引入原子化器/激发源内，一直是该领域关注的重点，其在很大程度上直接决定着仪器整体的分析性能。在仪器小型化的发展过程中，随着激发源功率/功耗的降低，对引入其中样品形态的耐受力大幅降低，对样品及其形态的激发也具有一定的选择性，因而对进样技术也提出了更高的要求。通过蒸气进样方式，包括化学蒸气发生、电热蒸发等，可在很大程度上减少样品水分与基体的引入，同时提高进样效率；进一步设计高效的样品传输接口甚至实现无接口设计，可有效减小样品的传输损失，并有助于仪器的紧凑设计，最终实现仪器的小型化甚至便携式，用于现场原位、实时在线分析等应用。

关键字 原子光谱；微型化；进样；关键部件

参考文献

1. P. X. Li, J. Hu, Zhang, M.; He, L.; Li, K.; Hou, X. D.; Jiang, X. M. Anal. Chem. **2022**, 94, 7683.
2. Y. J. Deng, J. Hu, M. T. Li, L. He, K. Li, X. D. Hou, X. M. Jiang, Anal. Chim. Acta. **2021**, 1163 338502.
3. M. T. Li, K. Li, L. He, X. L. Zeng, X. Wu, X. D. Hou, X. M. Jiang, Anal. Chem. **2019**, 91, 7001.
4. M. T. Li, Y. Luo, Z. R. Zou, F. J. Xu, X. M. Jiang, X. D. Hou, J. Anal. At. Spectrom. **2021**, 36, 2735.
5. W. Zeng, J. Hu, H. J. Chen, Z. R. Zou, X. D. Hou, X. M. Jiang, J. Anal. At. Spectrom. **2020**, 35, 1405.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

现场应用场景的原子荧光光谱仪研制与应用

弓振斌、陈洛丹、吴荣坤、徐碧清、弓振斌*
厦门大学

本文介绍了现场应用场景如船载、车载以及在线监测时原子荧光光谱仪的研制和应用。与实验室仪器相比，现场应用时仪器需要应对更恶劣的使用环境，如运输过程的抗震防震，防潮防风，长时间海上作业时耐盐雾等要求；现场工作的原子荧光光谱仪要求操作过程简单，工作气体可使用氩气或其它惰性气体；本工作通过使用电解纯水制氢为原子化器提供燃气，改善原子化过程稳定性同时，减少化学试剂用量少，更适合在现场环境下的长时间连续工作。

研制的原子荧光光谱仪经多次现场测试，已完成车载、船载测试，连续长时间走航测试，以及固定站位的连续在线测试。可满足水体中、、等元素的现场测定，结果符合国家和行业规范的要求。

关键字 车载；船载；在线监测；原子荧光光谱仪

参考文献

1. L.D. Chen, Q.L. Lin, D.X. Yuan, Z.B. Gong, and D.X. Yuan, Anal. Chem., **2023**, 95, 15621-15627.
2. L.D. Chen, R.K. Wu, B.Q. Xu, Z.B. Gong, and D.X. Yuan, Anal. Chim. Acta, **2024**, 1330, 343301.
3. L.D. Chen, Z.Y. Zhong, R.K. Wu, Q.L. Lin, Z.B. Gong, and D.X. Yuan, Talanta, **2024**, 274, 126037.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

多组学探究金属有机骨架材料 ZIF-67 的抗菌性

严雪婷*、张倩、刘睿、吕弋
四川大学

Staphylococcus aureus (S. aureus) infection and antimicrobial resistance (AMR) to antibiotics are two significant factors that pose escalating threats to public health, potentially leading to persistent pain or even death1. Consequently, there is an urgent need for the development of alternative antibacterial materials. In this study, we have successfully developed a biocompatible nanosystem based on hollow spherical zeolitic imidazolate framework-67 (ZIF-67 HS), which exhibits remarkable bactericidal efficacy against Gram-positive S. aureus both in vitro and in vivo (Fig. 1). Importantly, our findings demonstrate that prolonged exposure of S. aureus to subminimum inhibitory concentrations of ZIF-67 HS does not induce secondary resistance as observed with conventional antibiotics; instead, it maintains sustained susceptibility towards antibiotic-resistant strains. Multi-omics analysis (including transcriptomics, metabolomics, and metalomics) have indicated that ZIF-67 HS regulate 95 genes, 261 metabolites and 2 metal elements in S. aureus. Through bioinformatics analysis in combination with bioassays, we demonstrated that ZIF-67 HS disrupted multiple essential pathways in the pathogen, including amino acids metabolism, iron metabolism, membrane transport, ROS and S. aureus infection pathways (Fig. 2). Our findings suggest that ZIF-67 HS induces bacterial death through multiple mechanisms rather than a single target and highlight its long-lasting antibacterial properties. This study presents novel insights into the potential of nano-biomedicine for eradicating bacteria and elucidates related molecular mechanisms.

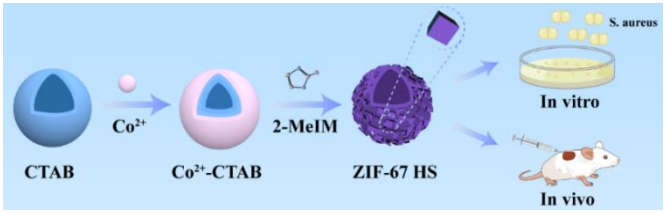


Fig. 1 Schematic illustrations of ZIF-67 HS synthesis process and antibacterial action.

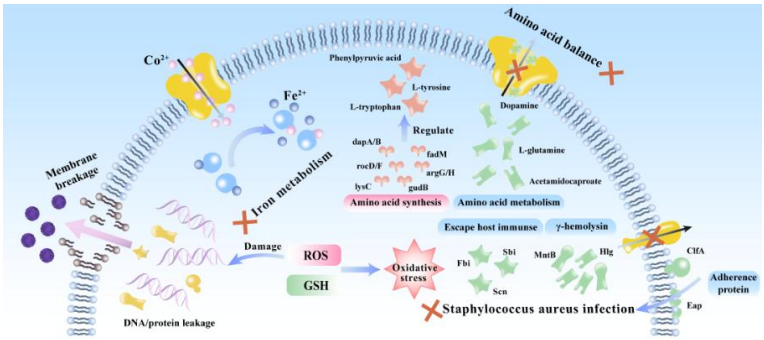


Fig. 2 Multi-target mode of action of ZIF-67 HS against S. aureus.

关键字 金属有机骨架材料；抗菌性

参考文献

1.Duan, S. et al. Multifunctional antimicrobial materials: From rational design to biomedical applications. Prog. Mater. Sci. 125, 100887 (2022).

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

食品中代森类农药的光谱检测方法改进及仪器研制

韩丙军*、张蕊、钱兵
中国热带农业科学院分析测试中心

二硫代氨基甲酸酯农药也称作代森类农药，是农业生产中最常用的经典保护性杀菌剂，约占全球杀菌剂市场的 30%。代森类农药的常规分析方法存在耗时长、转化率低、不能实时分析等问题。本研究利用微等离子体作为激发源，实时转化并激发代森类农药，建立了系列代森类农药分析方法。首先建立了一种 Hg 元素标记介质阻挡放电微等离子体发射光谱测定福美双的方法，将福美双的二硫键还原成游离巯基并用 Hg 进行标记，引起 Hg 在微等离子体中的原子发射光谱信号降低，实现福美双的高选择性和高灵敏度检测。然后建立了一种微波辅助-氯化亚锡还原与微等离子体发射光谱联合的液相色谱检测器，利用液相色谱对每一种代森类农药的分离，再用微波辅助的氯化亚锡盐酸将其在线还原成二硫化碳，在微等离子体中激发产生发射光谱信号，该方法可分析每一种代森类农药，目前已研制了全自动代森类农药分析样机。最后利用液体电极辉光放电辅助氯化亚锡盐酸溶液替换微波体系，解决了微波反应剧烈、稳定性差的问题，提高了方法的稳定性和灵敏度。

关键字 微等离子体；发射光谱；代森类农药；分析

参考文献

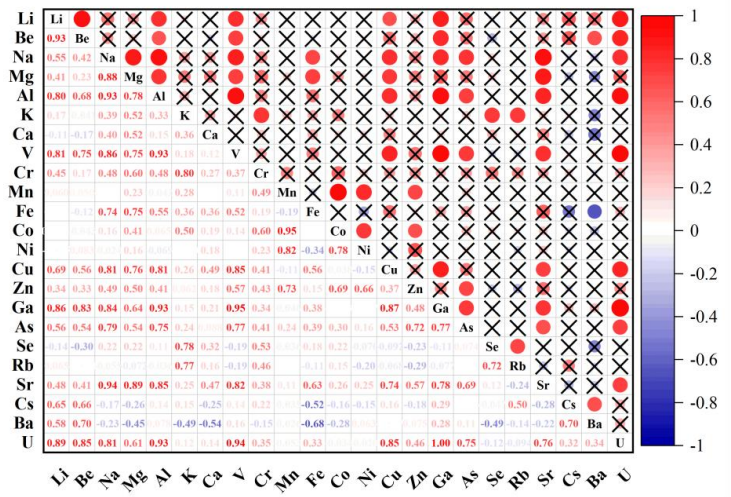
1. Tian, Q.; Wang, M.; Li, H.; Huan, Z.; Wang, M.; Lin, J.; Li, B.; Han, B., Hyphenated liquid electrode glow discharge–dielectric barrier discharge molecular emission spectrometry for determination of dithiocarbamates. Food Chem. **2023**, 429, 136884.
2. Han, B.; Li, Y.; Qian, B.; He, Y.; Peng, L.; Yu, H., A novel liquid chromatography detector based on a dielectric barrier discharge molecular emission spectrometer with online microwave-assisted hydrolysis for determination of dithiocarbamates. Analyst. **2018**, 143 (12), 2790-2798.
3. Han, B.; Li, Y.; He, Y.; Lv, D.; Peng, L.; Yu, H., Miniaturized dielectric barrier discharge–atomic emission spectrometer for pesticide: Sensitive determination of thiram after derivatization with mercurial ion. Microchem J. **2018**, 138, 457-464.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于 ICP-MS 与化学计量学的辣椒品种差异分析及指纹图谱研究

余筱筱*、蒋晗、汪悦、唐一雯
湖北师范大学化学化工学院

辣椒属茄科辣椒属，常异花授粉作物，是仅次于豆类、番茄的世界性蔬菜作物。具有较高的食用和药用价值，如促进减轻体重、降血糖、降血脂、抗炎镇痛等[1]。辣椒果实品质以营养、风味和商品品质为主：营养品质由糖、蛋白质、维生素、氨基酸等构成，其中维生素 C 含量堪称为“蔬菜之冠”[2]；风味品质主要指辣椒素类物质，其中辣椒素和二氢辣椒素含量最丰富，占总辣椒素的近 90%，是辣度的评判标准[3]；商品品质包括果胶含量、果肉厚度和果色。品种类型对辣椒产品的色泽、风味和营养指标间差异的影响较大。指纹图谱技术拥有丰富的定性和定量信息，更能体现食品成分色谱或光谱的整体性，是评价食品优劣、鉴别真伪、区分品种的有效方法。但当前的辣椒指纹图谱大多是关于化学成分种类与含量的表征[4]，对微量元素的研究较少。基于此，本工作以小米椒、美人椒、芜湖椒、螺丝椒、线椒、彩椒及当地特色的金柯辣椒为研究主体，测定糖类、蛋白质、维生素、氨基酸、辣椒素、果胶等多个品质指标，并采用 ICP-MS 技术定量及半定量分析辣椒中多种元素含量，建立无机元素指纹图谱。通过主成分分析、聚类分析、相关性分析等统计学方法筛选特征化合物，分析营养成分之间可能存在的某种联系及独特功效，有助于挖掘其相关性形成的机制。



关键字 ICP-MS，辣椒，元素指纹，化学计量学

参考文献

1. Y. Wang, Y. Zhou, J. Fu, Curr. Opin. Pharmacol., **2021**, 61, 1-5.
2. 王雪，谢立波，张慧，北方园艺，**2019**, 19, 121-124.
3. E. Mueller-Seitz, C. Hiepler, M. Petz, J. Agr. Food Chem., **2008**, 56, 24, 12114-12121.
4. G. Campmajó, L. Rodríguez-Javier, J. Saurina, O. Núñez, Food Chem., **2021**, 352, 129397.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于等离子体反应的汞同位素分析方法开发及汞同位素分馏研究

刘星、朱振利*
中国地质大学（武汉）

汞同位素，尤其汞同位素非质量分馏(Hg-MIF)可以为示踪环境中汞的迁移转化和汞污染溯源提供可靠的同位素示踪信息。但是，获取准确的汞同位素组成仍存在较大挑战，因为环境样品中 Hg 浓度较低需对样品中的汞进行富集。此外，基于光化学反应导致的 Hg 同位素 MIF 机制仍不完善。

本研究首先提出了一种基于流动注射-等离子体蒸气发生-多接收电感耦合等离子体质谱（FI-PIVG-MC-ICPMS）的微样品中汞同位素分析方法。该方法克服了常规分析方法对长时间、持续稳定进样的需要。最佳实验条件下，样品体积可以减少到 0.15 mL（1.5 ng），同时将单个样品的分析时间缩短到了 150 s，与传统的冷蒸气发生方法相比，单次测量时间减少了 8 倍，样品消耗减少了 66 倍。分析 0.15 mL 浓度为 10 ng/mL 的样品时，δ202Hg 和Δ199Hg 的测定精度分别为 0.05 ‰和 0.02 ‰（SD, n = 33）。该方法为低含量样品的准确汞同位素分析提供了一种有前途的简单、快速、灵敏的方法。

在开展上述工作中我们还检测到了显著的 Hg-MIF 特征，而这之前仅在汞的光化学反应过程中观测到。因此，我们搭建了 Hg 的等离子体反应装置用于生成、并收集了产生的 Hg0，最终使用 MC-ICP-MS 分别测量捕集液、废液以及反应前样品溶液中的 Hg 同位素组成，统计并分析数据。探究了等离子体还原过程中的 Hg-MIF 特征及产生机制。获得的主要认识包括以下几个方面：1）探究了三种不同类型的液体放电等离子体对 Hg-MIF 特征的影响，发现电极极性的变化造成的等离子体-液体反应路径的差异显著影响 Hg-MIF 特征；2）重点探究了液体阳极等离子体反应条件下的 Hg-MIF 分馏特征，明确了等离子体产生的电子和氢自由基是造成 Hg-MIF 分馏方向发生翻转的主控因素。

关键字 等离子体反应，蒸气发生，汞同位素，非质量分馏

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于电弧点火器/压电直接放电微等离子体原子发射光谱研究

李萌甜*、曹思梦雪、熊祎菁、徐富建、夏卉
西南民族大学

微等离子体技术因其体积小巧、能耗低等优势，在原子发射光谱分析领域得到了广泛应用。电弧点火器/压电直接放电微等离子体由于无需高压电源、无需工作气体、易驱动，是实现原子光谱部件小型化的理想装置。然而，这些微等离子体的低功率使其激发能力有限，进而导致分析灵敏度较低、可分析元素有限，且易受样品中水分与基体的影响。氢化物发生进样技术能够提高样品的传输效率，减少基质效应，但其产生的氢气副产物对等离子体激发的具体作用还需要进一步研究。本工作以改进放电微等离子体作为激发源，结合气体进样技术，达到增强激发能力、提高进样效率与有效激发率的效果，从而构建经济便捷的原子发射光谱分析方法及仪器。通过深入研究电弧点火器/压电直接放电微等离子体的原子化特性，探究氢气对于等离子体激发的影响，提升微等离子体原子发射光谱在小型化和现场化应用方面的潜力。

关键字 电弧点火器；压电直接放电；微等离子体；原子发射光谱；小型化

参考文献：

1. S. Cao, Y. Xiong, L. Wang, F. Xu, H. Xia, M. Li, Microchem. J. **2024**, 204, 111122.
2. F. Xu, Y. Liu, X. Liu, J. Tan, H. Xia, M. Li, Microchem. J. **2023**, 193, 109109.
3. M. Li, H. Li, N. R. Allen, T. Wang, L. Li, J. Schwartz, A. Li, Chem. Sci. **2021**, 12, 1907-1914.
4. M. Li, K. Li, L. He, X. Zeng, X. Wu, X. Hou, X. Jiang, Anal. Chem. **2019**, 91, 7001-7006.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

利用 ICP-MS 表征二维银纳米颗粒的方法研究

马明昊、徐明*、韦晓玉
中国科学院生态环境研究中心

二维银纳米颗粒具有优异的光学性能与大比表面积，在分析检测、抗菌消毒等领域受到广泛关注[1]。由于二维纳米颗粒的理化性质受到其形貌参数的显著影响，因此有必要对其进行准确的表征[2]。目前常用的单颗粒分析技术，如单颗粒电感耦合等离子体质谱（spICP-MS）法，通常将颗粒的几何形貌假定为球体并计算其等效球直径，难以应用于各向异性纳米颗粒的表征分析。在本项研究中，我们将采用电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）与透射电子显微镜（TEM）两种技术，表征二维银纳米颗粒的准确结构。首先，以三角形金纳米片为种子，通过化学还原银前驱体，获得具有不同银壳厚度的二维壳核纳米片（Au@Ag NPLs）。之后，利用 TEM 技术，我们测量了纳米片的边长、厚度等参数。同时，通过 ICP-MS 测定纳米片的元素质量浓度。最终，依据纳米片的元素质量比及理化参数，可准确地计算出二维银纳米材料的颗粒浓度、表面积及银壳厚度。综上，本研究基于 ICP-MS 对二维银纳米颗粒建立了表征方法，能够对其进行更为准确的定量分析。

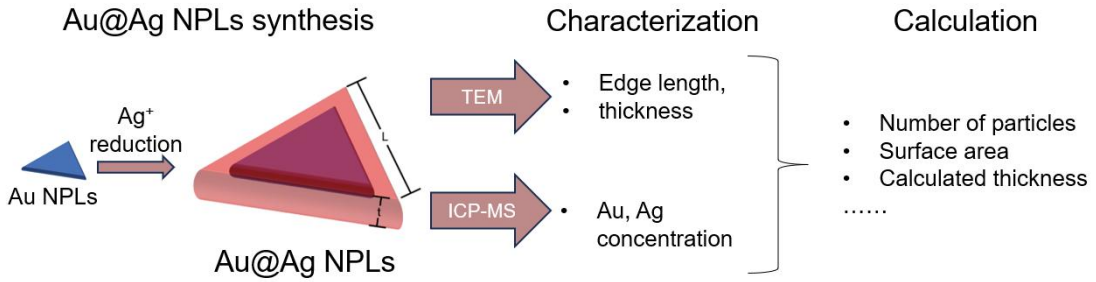


图 1. 利用 ICP-MS 及 TEM 表征 Au@Ag NPLs

关键字 二维银纳米颗粒；电感耦合等离子体质谱；定量分析；核壳结构

参考文献

1. Journal of Colloid and Interface Science, 418, **2014**, 87–94
2. Nano Letter, **2019**, 19, 4478−4489

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

基于量子点阳离子交换反应的原子光谱分析新方法研究

黄科*、伍春慧、黄鑫源、李舒琪
四川师范大学

量子点阳离子交换反应(Cation exchange reaction, CER)是发生在量子点中的一种元素置换反应，被广泛应用于纳米材料合成之中。我们首次将量子点 CER 应用于原子光谱分析之中，开发出了一系列的元素形态及生物分析新方法。利用银离子/银纳米、汞离子/甲基汞在 CER 表现的差异，成功实现环境水体及生物中超痕量多形态银、汞及其化合物的形态分析；通过构建多种基于适配体、酶促反应等分析策略，采用多种信号放大策略，用微滤膜将已反应和未反应的量子点与交换出的离子进行分离，采用电感耦合等离子体质谱最终成功实现一种或多种生物标志物如 TdT、T4 PNK 酶、胆碱酯酶、ß-糖苷酶、mucin 1、肺癌 A549 细胞的准确检测。

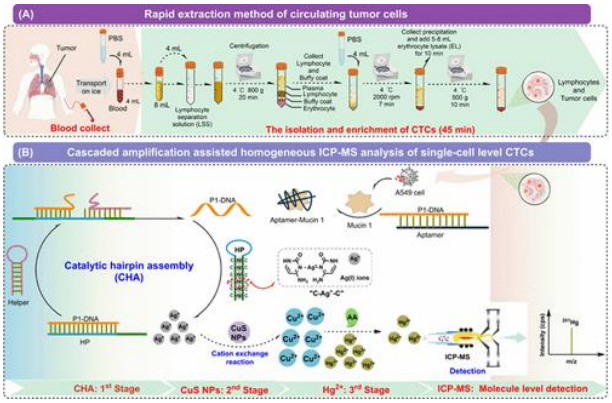


图 1. 基于量子点阳离子交换多重信号放大的肺癌 A549 细胞的分析示意图

关键字 电感耦合等离子体质谱；量子点；阳离子交换；形态分析；生物分析

参考文献

1. Wang, X.; Chen, X.; Zhou, R.; Hu, P.; Huang, K.; Chen, P. Anal. Chem, **2021**, 93 (8), 3889-3897.
2. Wang, Y.; Chen, X.; Shen, X.; He, Y.; Zhan, Z.; Liu, C.; Xie, Y.; Lin, F.; Huang, K.; Chen, P. Anal. Chem **2023**, 95 (38), 14244-14252.
3. Wu, Y.; Liu, J.; Li, S.; Jian, R.; Yuan, X.; Huang, K. Sci. Total Environ. **2024**, 954. 176416

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

油液分析光谱仪的国产化实践与应用

张冠文*
中国广州分析测试中心/广东中科谛听科技有限公司

项目针对重工装备、飞机、舰艇、火车等故障诊断与预防性维护的现场快速检测需求，研制一种转盘电极原子发射光谱仪（油液分析光谱仪），通过分析机械装备在用油的磨损金属含量，进行机械装备故障分析与研究，无需前处理一次进样 1~2 分钟内可同时检测 24 种元素，主要性能和技术指标达到国际同类产品同等水平；开发的仪器能直接进样，不需要辅助气体和水；体积小，环境适应力强，可以在车船上或野外作业；操作简单，高中文化水平简单培训即可使用。

项目仪器已实现产业化，目前在国防、重工、核电、风电、石化、民用交通等领域被广泛采用，并出口到一带一路近十个国家。

关键字 原子发射光谱仪、转盘电极直接进样、装备故障诊断与预警

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

微塑料分别与甲基汞和无机汞联合暴露对斑马鱼胚胎毒性研究

李雪、雷雅杰、毛雪飞*
中国农业科学院

近年来，微塑料（MPs）及其与水环境中的汞（Hg）等重金属的联合暴露所带来的潜在健康风险越来越受到关注。到目前为止，MPs 和 Hg 对海洋生物的影响主要集中在 Hg(II)上，而 MeHg 和 Hg(II)之间的差异化影响尚未得到充分认识。为此，本研究将受精后 6 至 168 小时的斑马鱼胚胎（Danio rerio）暴露于不同浓度的聚苯乙烯微塑料（PS-MPs，约 0.1 um）和 Hg(II)或/和 MeHg（20 ug/L）中，以研究 PS-MPs 和 Hg 物种在组织中的分布和积累及其相互作用，以及胚胎毒性、氧化应激和代谢轮廓。随着斑马鱼胚胎的发育，PS-MPs 被摄入并主要转移到卵黄囊、肝脏和肠道组织中，进一步作为 MeHg 与 Hg(II)之间显著的生物富集载体。无论单独或联合暴露于 PS-MPs 和 Hg 物种，都会明显发现胚胎异常，如延迟孵化、发育异常和运动行为异常，以及氧化应激增加的迹象。在此，PS-MPs+MeHg 比单独 MeHg 更严重地加剧了氧化应激，这可能与 PS-MPs 导致的幼鱼体内 Hg 水平高度积累有关。非靶向代谢组学结果证明，与单独暴露于 Hg(II)或 MeHg 相比，PS-MPs 参与扰乱了脂质代谢、氨基酸代谢和能量代谢，其中 PS-MPs+MeHg 处理中发现激活糖酵解过程导致过度的能量代谢。这项工作揭示了 PS-MPs 增强 MeHg 诱导毒性和不良应激的作用，进一步证明了元素化学形式与微塑料的差异化效应。在未来，必须考虑元素物种的组合毒性评估和微塑料和重金属的生态风险评估。

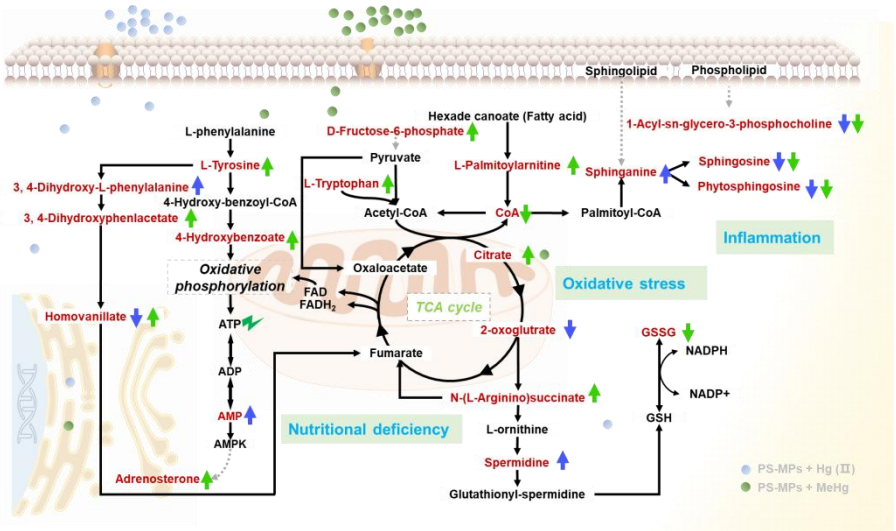


图 1. PS-MPs 与 Hg(II)/MeHg 共同暴露的通路分析。红色代表改变的代谢物，蓝色箭头为 PS-MPs+Hg vs Hg 组影响的代谢物，绿色箭头为 PS-MPs+MeHg vs MeHg 组影响的代谢物

关键字 微塑料，汞形态，联合毒性，生物富集，代谢组学

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

改进应用 ICP-MS/MS 分析全氟/多氟烷基化合物(PFAS)中总氟的方法

董硕飞*
安捷伦科技（中国）有限公司

全氟和多氟烷基化合物（PFAS），是一类人造化学物质，能耐高温且不易降解，由于其特殊性质，被广泛应用于各类工业和消费品领域。现有的研究表明 PFAS 会对实验动物造成肝脏毒性、发育与生殖毒性、遗传和免疫毒性以及致癌性，因此是被重点关注的新污染物之一。目前已知有 12000 多种 PFAS 化合物，并且这一数据还在不断扩大[1]。对此，世界各地的监管机构正在实施日益严格的 PFAS 监测和鉴定要求。现有的 PFAS 化合物的定量分析方法，基于先浸提出可提取有机氟（EOF）再用 LC-MS/MS 定量，大约可以定量 50 多种 PFAS 化合物，很多工业应用的 PFAS 化合物由于缺乏标准物质并没有包括在内。因此，为了更好的评估此类化合物的环境行为和毒理风险，通过检测 PFAS 中的总氟的含量的方法可以更真实的反映环境中有机氟化物的风险水平。

应用 ICP-MS/MS 定量检测氟离子含量的方法在 2015 年初步建立之后[2]，近些年被进一步地开发并应用在检测水体和茶叶中的总氟含量，并且应用到 PFAS 化合物的检测中[3]。本研究改进现有的定量检测中 PFAS 的总氟含量的方法，使用全氟辛酸（PFOA）作为标准物质，50%甲醇-水溶液作为溶剂，通过在线添加 Ba 离子溶液使得$[BaF]^+$离子团在等离子体中生成，以$[BaF]^+$离子团的含量来代表 F 离子的量。通过 H_2-O_2 的混合气体去消除 $Ba[OH]^+$对$[BaF]^+$离子团的质谱干扰，初步结果显示，可以使方法灵敏度与之前的方法相比提升十倍以上，并提升方法的分析精密度，使总氟的检出限小于 8 ng/ml。结合 SPE 等样品前处理技术，该方法可以应用到环境、食品等领域的实际样品中 PFAS 的总 F 含量的检测之中。

关键字 ICP-MS/MS，全氟/多氟烷基化合物，PFAS，总氟，定量

参考文献

1. U.S. Environmental Protection Agency. Comptox Chemicals Dashboard: Master List of PFAS Substances (Last Updated: August 10th, 2021). https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical_lists/pfasmaster.
2. N.L.A. Jamari, et al., Novel non-target analysis of fluorine compounds using ICPMS/MS and HPLC-ICPMS/MS, J. Anal. At. Spectrom. 32 (5) (2017), 942-950
3. J. Feldmann et al., ICP-MS as a contributing tool to nontarget screening (NTS) analysis for environmental monitoring, Environ. Sci. Technol., **2024**, 58, 29, 12755–12762

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

均相光化学蒸气发生-原子荧光光谱法用于硒的形态分析

徐富建*、徐浩宁、曹思梦雪、木贵敏、李萌甜、夏卉
西南民族大学

硒广泛存在于天然水体和土壤中，其毒理学和生物学效应与化学形态密切相关。研究表明，硒的无机形态比有机形态的毒性大，而亚硒酸根（Se(IV)）和硒酸根（Se(VI)）是环境水中硒两种主要的形态，由于 Se(IV)和 Se(VI)可以随着水体的化学和物理特性变化而发生迁移转化，因此对环境水样中的无机硒进行形态分析比测定总硒更为重要。

元素形态分析最常用的方法是色谱-原子光谱法联用，为了进一步提高样品传递效率，减少记忆效应，实现高效的基质分离，化学蒸气发生技术被引进到液相色谱-原子光谱联用技术中。光化学蒸气发生（PVG）由于具有成本效益、环境友好和对等离子体干扰低的优点，相比其他蒸气发生技术有独特优势。然而在 PVG 体系中 Se(VI)很难产生气态衍生物。为了解决这一问题，开发了各种纳米半导体光催化剂，如 TiO_2、ZrO_2 和金属有机骨架材料（MOFs）等。然而这些纳米光催化剂存在成本高、批次差异大、制备复杂、记忆效应严重等不足。本实验以均相镉离子为光催化剂，建立了高效液相色谱-光化学蒸气发生-原子荧光光谱法（HPLC-PVG-AFS），实现了无机硒的形态分析，对天然水样中无机 Se(IV)和 Se(VI)的形态分析取得了良好的结果。与半导体光催化剂相比，金属离子光催化剂具有价格低廉、操作简单、重现性好等优点，在硒的形态分析相关研究中具有广阔的应用前景。

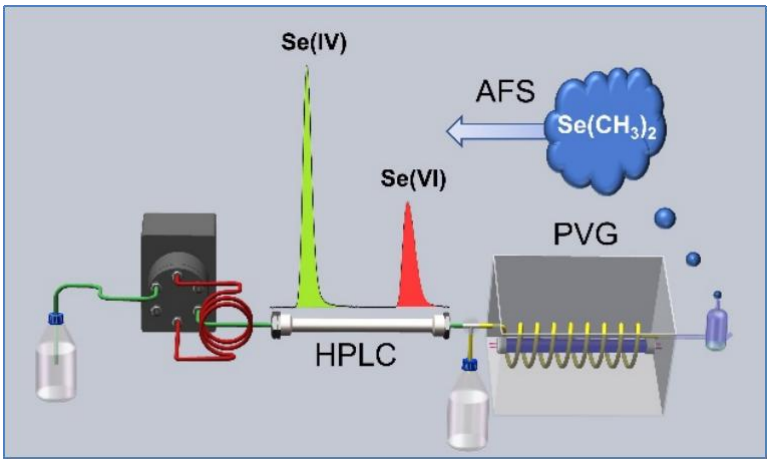


图 1. 高效液相色谱-均相光化学蒸气发生-原子荧光光谱法示意图

关键字 原子光谱，光化学蒸气发生，硒，形态分析

参考文献

1. Xu F, et al. In situ formation of nano-CdSe as a photocatalyst: cadmium ion-enhanced photochemical vapour generation directly from Se(VI). Chem. Commun., **2018**, 54: 4874-4877.
2. Li M, et al. Homogeneous catalysis for photochemical vapor generation for speciation of inorganic selenium by high performance liquid chromatography-atomic fluorescence spectrometry. J Anal. At. Spectrom., **2021**, 36: 2210-2215.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：报告

3D 打印尖端放电微等离子体发射光谱仪器研制及现场分析应用

杨嘉慧*[1]、郑成斌[1]、林瑶[1]、杨蕊[2]
1. 四川大学
2. 成都理工大学

为应对突发性环境污染事故，确保环境重金属检测结果的完整性、准确性和真实性，进一步简化分析流程和降低检测成本，亟需发展小型化、便携式分析仪器用于环境中金属污染物的快速现场分析。原子光谱法因具有高选择性、高灵敏度和高准确性等优点已成为重金属分析的金标准，但原子光谱仪器体积笨重、维护运行成本高昂且操作复杂限制了其在野外现场分析中的应用。基于微等离子体的小型化原子发射光谱，具有尺寸小、能耗低、激发能力强等优势，但目前小型化原子发射光谱装置大多通过定制部件零散搭建，稳定性和集成性不佳。

3D 打印技术具有经济、快速和一体化设计等优势，可实现实验装置的标准化制造。随着 3D 打印的技术发展和成本控制，其已逐渐成为分析化学实验室的常规配置，因此利用 3D 打印技术构建便携式微等离子体原子发射光谱仪可解决目前小型化仪器制造方面存在的问题。在此基础上，将分离富集技术和蒸气发生进样方式与 3D 打印微等离子体原子发射光谱仪相结合，有望进一步提高方法分析性能，并实现复杂环境和食品样品中重金属检测。这里汇报我们课题组近年来在这方面的研究工作：（1）3D 打印尖端放电微等离子体发射光谱分析仪器的研制；（2）相关样品处理和进样技术；（3）基于 3D 打印尖端放电微等离子体仪器的现场分析应用。这些研究将为环境重金属污染物现场检测提供新策略、注入新动力。

关键字 微等离子体，3D 打印，现场分析，原子光谱，重金属

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

基于低浓度甲酸介质中镉辅助砷的高效光化学蒸气发生

邓秀琴、高英*
成都理工大学

砷（As）以无机和有机两种形式存在。自然水体中主要以亚砷酸盐[As(III)]和砷酸盐[As(V)]等无机 As 为主，部分自然水体也赋存少量有机 As，主要为一甲基 As（MMA）和二甲基 As（DMA）。饮用受污染的水是人类 As 暴露的主要方式，全世界数百万人口受地下水中高浓度的 As 的影响。因此，了解 As 在环境中的分布是评估 As 污染的关键。本研究建立了基于光化学蒸气发生（PVG）与电感耦合等离子体质谱仪（ICP MS）相结合的高灵敏度测定 As 的方法。首次报道了在低浓度甲酸（FA）介质中，Cd 辅助 As 的高效 PVG 体系。在 FA 浓度为 0.15% (v/v)、Cd 浓度为 40.0 mg L^{-1}，紫外辐照 100 s 的条件下，As 的 PVG 效率为 93±1%。方法检出限（LOD, 3σ）为 0.2 ng L^{-1}，比直接进样液雾化法改善约 43 倍。与仅使用低浓度 FA 作为反应介质的 PVG 体系或甲酸钠和亚硫酸钠的混合物作为介质的 PVG 体系相比，本体系对样品基质的抗干扰能力得到了增强。方法成功应用于天然水体和大米标准物质中 As 的检测。利用气相色谱-质谱、电子顺磁共振、X 射线光电子能谱等研究了体系的反应机理。研究发现，MMA、DMA、As(III)和 As(V)在 PVG 体系中的挥发性产物均为 AsH_3。此外，还同时发现了 Cd 挥发性物质的生成。研究结果对有助于了解光化学过程中 As 与 Cd 的相互作用。

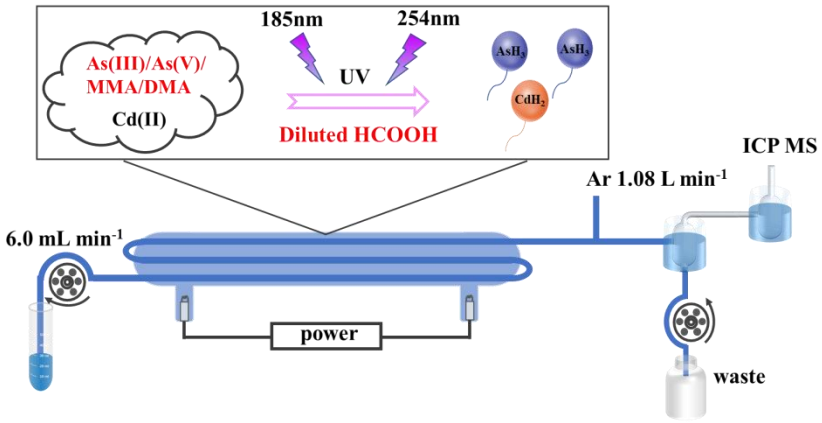


图 1. PVG 装置示意图

关键字 光化学蒸气发生 砷 镉 低浓度甲酸

参考文献

1. X. M. Guo, R.E. Sturgeon, Z. Mester, G. J. Gardner. *Anal. Chem*., **2004**, 76, 2401-2405.
2. J. Hu, C. Li, H. J. Chen, X. D. Hou. *Anal. Chem*., **2023**, 95, 10498-10503.
3. R. S. Oremland, J.F. Stolz. *Science*, **2003**, 300, 939-944.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

DNA 诱导金纳米棒聚集效应用于邻苯二甲酸酯的可视化检测

冯丽君、张信凤*
成都理工大学

邻苯二甲酸二（2-乙基己基）酯（DEHP）是最常用的增塑剂，被广泛用于食品包装，医疗包装、化妆品中[1]。DEHP 在人体内表现为雄激素阻滞的作用，长期积累可引起内分泌紊乱和免疫力下降，甚至产生致癌的风险。目前，DEHP 的检测主要通过色谱技术、光电化学、联免疫吸附测定和表面增强拉曼散射，虽然这些方法具有高灵敏度，但是由于成本高、样品制备复杂、仪器昂贵、耗时长而使快速、便捷的现场检测困难[2]。比色检测因为成本低、可视化、灵敏度高等特点常被用于食品分析和环境监测。然而，食品和环境样品的基质复杂，检测信号容易受到干扰导致显色不稳定和选择性较低。

金纳米棒（AuNRs）是一种细长的纳米颗粒。它不仅具有金纳米材料的高消光系数的特点，而且与金纳米颗粒（AuNPs）相比，表面活性剂包被的 AuNRs 对局域介电环境敏感，且在高浓度的盐溶液中不受影响，因此表现出更好的稳定性和灵敏度，是开发比色传感的理想材料。适配体对靶标具有高的亲和力，将适配体与 AuNRs 相结合，有望实现高稳定性、高选择性的可视化检测。

本课题基于 AuNRs 聚集可视化的原理，期望得到选择性高、特异性强、成本低廉的 DEHP 的检测效果。我们制备的十六烷基三甲基溴化铵（CTAB）修饰的 AuNRs 带正电荷，能与带负电荷的适配体发生电荷中和，体系电荷减小后导致 AuNRs 聚集呈蓝灰色。加入 DEHP 后，适配体与其特异性结合，带正电的 AuNRs 能均匀分散从而呈现原本的酒红色。实验结果显示，该传感器在最佳条件下能特异性检测 DEHP，检出限为 5.33 nM。该方法可应用于环境水样、土壤样品、食品样品的高灵敏检测，具有广阔的前景。

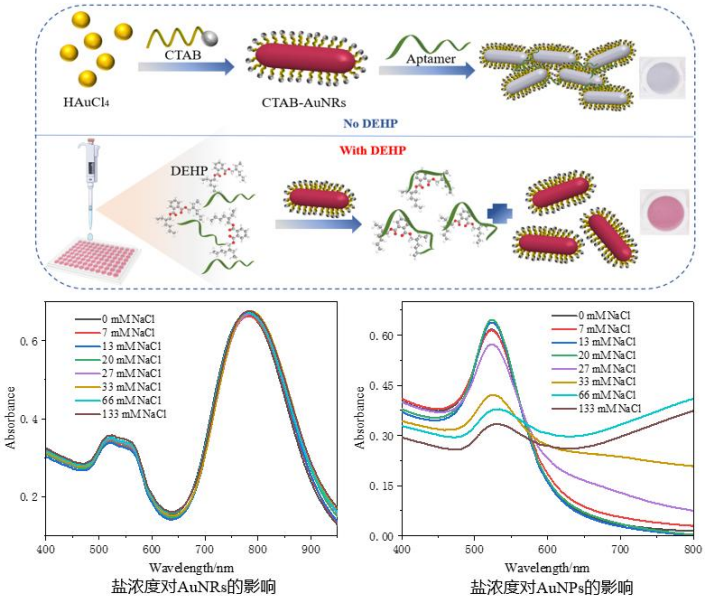


图 1. AuNRs 可视化检测 DEHP 的示意图和盐浓度对 AuNRs、AuNPs 的影响结果图

关键字 金纳米棒 可视化检测 邻苯二甲酸酯

参考文献

1. Lim, H. J, et al. Development of Quantum Dot Aptasensor and Its Portable Analyzer for the Detection of Di-2-Ethylhexyl Phthalate. Biosens. Bioelectron., **2018**, 121, 1–9.

2. Wang, Y, et al. Efficient Preparation of Dual-Emission Ratiometric Fluorescence Sensor System Based on Aptamer-Composite and Detection of Bis(2-Ethylhexyl) Phthalate in Pork. Food Chem., **2021**, 352, 129352.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

碲高效光化学蒸气发生：锑和铁离子的协同作用

黄渭文、余莹、高英*
成都理工大学

碲（Te）在生物地球化学循环、地质学研究和环境科学领域中扮演着重要的角色。因此，开发能够精确测定痕量碲的分析技术，深入研究碲的环境地球化学行为，对于评估其对生态系统的潜在影响及制定相关的环境保护策略具有重要意义。光化学蒸气发生（PVG）是原子分析光谱中的一种新型且环境友好的样品引入方法。在本项研究中，我们首次发现在低浓度乙酸介质中，Sb(III)和 Fe(III)对 Te 的 PVG 具有显著的协同效应，可大大提高 Te 的 PVG 效率。在选择的实验条件下，即在含有 2% (v/v)乙酸、5.0 mg L^{-1} Sb(III)和 15.0 mg L^{-1} Fe(III)的介质中，通过紫外线照射，Te(IV)和 Te(VI)的 PVG 效率高达 94±3%。与传统 PVG 相比，本方法在保持高灵敏度的同时，显著降低了有机酸的使用量，可减至 10 倍以上。Te(IV)和 Te(VI)的检出限（LOD）（3σ，n=11）为 0.2 ng L^{-1}。与使用传统气动雾化（PN）方法相比，本方法将 Te 的分析灵敏度提升了约 64 倍。通过对 1.0 μg L^{-1} Te(IV)和 Te(VI)标准溶液进行 7 次重复测量，获得相对标准偏差（RSD）分别为 2.1%和 2.5%，精密度良好。将该方法应用于三种河水样品中痕量无机总 Te 的定量分析，结果令人满意。通过机理研究，观察到 Te 和 Sb 复合纳米粒子的生成，这为理解 Te 在光化学过程中的迁移和转化模式提供了新的见解。

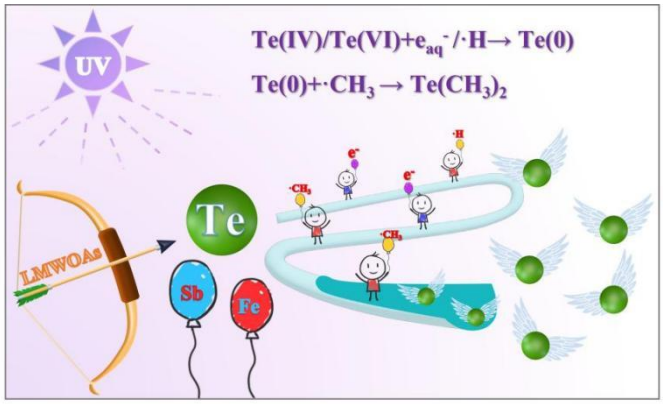


图 1. 反应原理图

关键字 碲；锑；铁；光化学蒸气发生；电感耦合等离子体质谱

参考文献

1. Wiklund. J. A, Kirk. J. L; Muir. D. C, Carrier. J, Gleason. A, Yang. F, Evans. M, Keating. J, *Environmental Science & Technology.*, **2018**, 52 (11), 6137-6145.
2. Deng. X, Dong. L, Chen. H, Wang. W, Yu. Y, Gao. Y. *Analytical Chemistry*., **2023**, 96 (2), 652-660.
3. Jeníková. E, Vyhnanovský. J. r, Haslova. K, Sturgeon. R. E, Musil. S, *Analytical Chemistry*., **2024**, 96 (3), 1241-1250.
4. He. H, Peng. X, Yu. Y, Shi. Z, Xu. M, Ni. S, Gao. Y, *Analytical chemistry*., **2018**, 90 (9), 5737-5743.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

低背景双配体 Cu-MOF 纳米探针用于草甘膦农药的植物组织成像、快速筛查以及灵敏检测

涂小艳、张信凤*
成都理工大学

草甘膦过度使用会导致土壤和饮用水中的残留量不断增加，对环境和人类健康造成巨大的风险。因此对环境中草甘膦残留量的监测至关重要。本研究开发了一种低荧光背景的双配体铜基金属有机框架(Cu-MOF)纳米探针，用于植物组织中草甘膦的成像、草甘膦污染样品的快速筛查以及灵敏检测。本研究以发光配体 2-氨基间苯二甲酸(AIA)和不发光配体均苯三甲酸(H_3BTC)为配体，Cu^{2+}离子为金属节点，制备了 Cu-MOF 纳米探针。由于配体与金属之间的电荷转移(LMCT) 以及配体之间的光致电子转移(PET) 效应，使得 Cu-AIA/BTC 探针具有较低的荧光背景。而加入有机磷农药草甘膦以后，草甘膦与 Cu-AIA/BTC 探针中的配体竞争配位，导致 Cu-MOF 材料的结构坍塌，释放出发光配体 AIA，从而以荧光开启模式检测草甘膦。该纳米探针在 0.1 ~ 80 μM 的浓度范围内对草甘膦具有良好的线性响应，检测限低(33 nM)，且该检出限远低于美国环境保护署(EPA)设定的最大污染物水平(4.1 μM)。此外，该纳米探针还成功应用于草甘膦在植物组织中的成像、草甘膦污染样品的快速筛查以及灵敏检测，具有广阔的应用前景。

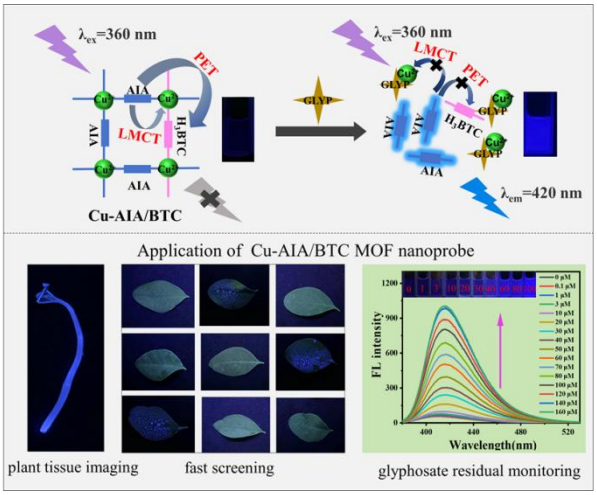


图 1. 低荧光背景的 Cu-AIA/BTC 纳米探针检测草甘膦的原理以及其应用

关键字 草甘膦　荧光开启　双配体 Cu-MOF

参考文献

1. Van Bruggen A.H.C., He M.M., Shin K., Mai V., Jeong K.C., Finckh M.R., Morris J.G. *Sci Total Environ*. **2018**, *616*, 255-268.
2. Wang X., Yun Y., Sun W., Lu Z., Tao X. *Sensor Actuat B- Chem*. **2022**, *353*, 131143.
3. Cui Y., Yue D., Huang Y., Zhang J., Wang Z., Yang D., Qian G. *Chem Commun*. **2019**, *55*, 11231-11234.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

基于地理信息系统的土壤重金属污染特征、来源分析和风险评估——以云南三江并流保护区典型区为例

卢宁[1]、杨晓芳[2]、池华剑[1]、刘鑫[1]、谭志强[3]、胡嘉懿[1]、柳娅[1]、邓庆文[1]、杨盛春[1]、温晓东*[1]

1. 大理大学
2. 四川大学
3. 中国科学院环境化学与生态毒理学国家重点实验室

被列为世界自然遗产的云南三江并流保护区重金属污染日益严重。本研究采用电感耦合等离子体发射光谱法测定了当地 115 个表层土壤样品中的 12 种重金属含量。结果表明，钨铍矿开采对当地土壤造成严重的重金属污染。表层土壤中钨(I_{geo} = 8.30)和铍(I_{geo} = 1.92)污染严重。应用污染指数、潜在生态风险(PERI)、人体健康风险(HHRA)和正矩阵分解(PMF)模型，结合地理信息系统(GIS)，对“三江并流”核心区哈巴雪山自然保护区的废弃钨铍重金属潜在危害进行系统评价。PMF 模型和 GIS 确定了自然、交通、采矿和矿工生活是当地重金属的主要来源。HHRA 结果表明，研究区域没有健康风险，但 GIS 确定了存在健康风险的区域。研究结果为钨铍矿区土壤重金属污染控制提供了参考数据。

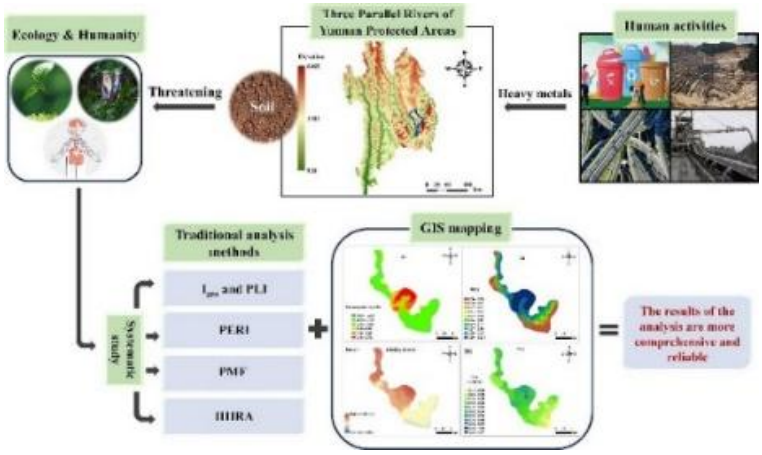


图 1. 研究示意图

关键字 土壤重金属污染；“三江并流”；地理信息系统；污染特征；来源分析；风险评估

参考文献

1. N. Lu, X.F. Yang, H.J. Chi, et al., Heavy metals pollution characteristics, source analysis, and risk assessment in soil based on Geographic Information System: A case study of a typical area in Three Parallel Rivers of Yunnan Protected Areas, China, *Microchem. J.* 205 (2024) 111348.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

便携式一步泡腾片微萃取结合智能手机数字图像比色法:现场快速检测痕量镍离子

孙怡萍[1]、杨晓芳[2]、胡嘉懿[1]、季富春[1]、池华剑[1]、柳娅[1]、胡侃[1]、郝芳芳[1]、温晓东*[1]
1. 大理大学
2. 四川大学

本研究首次将基于可切换亲水性溶剂(SHS)的一步泡腾片微萃取法(ETME)与智能手机数字图像比色法(SDIC)相结合，对镍离子(Ni^{2+})进行现场检测。当新型 SHS 泡腾片放置于样品溶液中时，萃取剂和 CO_2 原位生成。络合剂 1-(2-吡啶偶氮)-2-萘酚(PAN)从泡腾片中溶解，与 Ni^{2+}形成稳定的络合物，萃取剂在 CO_2 作用下均匀分散在样品溶液中，与 Ni-PAN 充分接触，实现了 Ni^{2+}的高效萃取。利用智能手机捕捉萃取相的颜色变化，并通过定制的“WASDIC 小程序”建立 Ni^{2+}浓度与智能手机采集图像颜色强度的定量关系，实现不同样品中 Ni^{2+}的定量分析。在最佳条件下，该方法的富集因子(EF)为 65.1，检出限(LOD)和定量限(LOQ)分别为 1.69 和 5.64 μg L^{-1}。该方法已成功地应用于环境样品和天然药物中痕量 Ni^{2+}的检测，且验证了该方法在现场分析中的适用性。

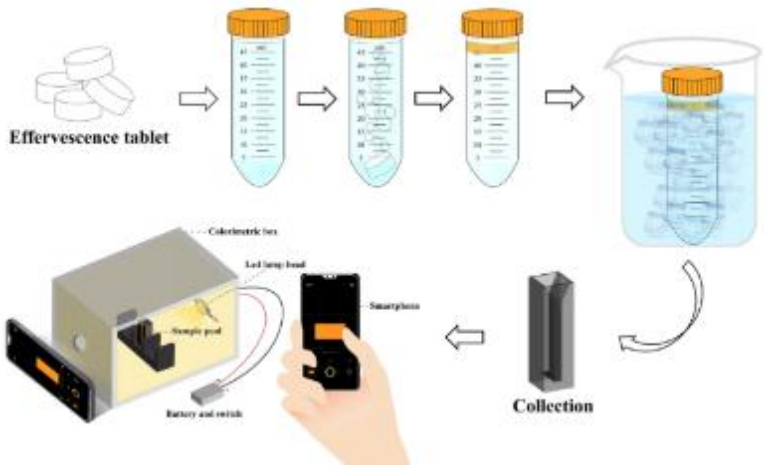


图 1.　SHS-ETME 与 SDIC 结合的示意图

关键字　一步泡腾片微萃取；智能手机数字图像比色法；可切换亲水性溶剂；现场检测；镍离子

参考文献

1. Y.P. Sun, X.F. Yang, J.Y. Hu, et al., Portable one-step effervescence tablet-based microextraction combined with smartphone digital image colorimetry: Toward field and rapid detection of trace nickel ion, *Talanta*. 274 (2024) 126036.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

一种用于流式细胞术中光热外差检测的低噪音，高增益的直流抑制光电检测器

徐嘉南、魏星、于永亮、王建华*
东北大学

光热外差检测基于物质对光的吸收产生的“热透镜”，通过对加热光的强度调制，分子吸收光之后在介质中产生调制的“热透镜”，使用探测光检测调制的“热透镜”，因此光热外差信号为隐藏的强直流背景下的弱交流信号，所以需要抑制其直流背景，仅放大交流信号，因此，我们设计了一种具备低噪音，高增益与直流抑制的光电检测器，其跨导放大电路具备自动直流分离装置，在课题组前期研究的基础上发展了基于光热外差检测的流体聚焦单颗粒分析系统，使用 80 nm AuNPs 评估系统性能，流式检测结果显示光热外差检测系统可实现 80 nm AuNP 的检测。

关键字 光热外差检测，流式细胞分析

参考文献

1.Vermeulen Pierre, Cognet Laurent, Lounis Brahim. Journal of Microscopy, **2014**, 254(3): 115-21.
2.Slipchenko M. N., Oglesbee R. A., Zhang D., Wu W., Cheng J. X. J Biophotonics, **2012**, 5(10): 801-7.
3.Wu Chengxin, Men Xue, Liu Meijun, Wei Yujia, Wei Xing, Yu Yong-Liang, Xu Zhang-Run, Chen
Ming-Li, Wang Jian-Hua. Analytical Chemistry, **2023**, 95(35): 13297-304.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

电感耦合等离子体发射光谱法测定乙二醇中 Fe,Cr,Ni

陈天怡*、许竞早、彭振磊、张育红
上海石油化工研究院有限公司

乙二醇是极为重要的化工原料，主要用于聚酯单体和汽车抗冻剂的生产。部分厂家选择采用不锈钢作为乙二醇的储存容器。铁（Fe）、铬（Cr）、镍（Ni）是不锈钢中的主要成分，长时间储存可能导致金属离子析出，从而影响产品质量。目前，乙二醇产品标准《GB/T 4659-2018 工业用乙二醇》中 Fe 的分析测试方法援引分析标准《GB/T 3049-2006 工业用化工产品 铁含量测定的通用方法 1，10-菲啰啉分光光度法》。然而，该标准涵盖范围广，并非针对乙二醇。此外，该分析方法存在操作步骤繁琐，样品用量大，检出限高（mg/L 级）等局限性，且无法满足多元素的高效检测需求。因此，开发一种多元素、用时快、检出限低的检测分析方法，对产品质量控制有重要意义。

电感耦合等离子体发射光谱法（ICP-OES）具有操作简便、检出限低（μg/L）、线性动态范围宽、多元素同时分析等特点。为了解决上述问题，本文采用内标法 ICP-OES 建立了一种适用于乙二醇中 Fe、Cr、Ni 多元素检测的新分析方法。通过优化进样方式、分析谱线的选择及干扰消除等技术手段，并结合精密度和回收率试验，验证了方法的可靠性。实验结果表明，当前方法加标回收率在 80-120%范围之间，检出限可低至 50 μg/L，RSD 小于 5%，具有良好的检测精度以及较短的分析时间，相较传统方法具有显著优势。

本研究为乙二醇产品的多元素质量控制提供了有效的技术支撑，未来可进一步拓展至其他化工产品的多元素分析，为其他类型化工产品提供参考。

关键字 icp-oes，乙二醇，痕量元素

参考文献

1. Y. Lum.et al, *Nat.Catal.* **2020**, 3, 14-22.
2. 中国国家标准化管理委员会.工业用乙二醇 GB/T 4649−2018[S].北京：2018:5
3. 中国国家标准化管理委员会. 工业用化工产品 铁含量测定的通用方法 1，10-菲啰啉分光光度法 GB/T 3049−2006/ISO 6685:1982 [S].北京：中国标准出版社，2007：4

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

微型原子发射光谱仪的级联放电微等离子体激发源研制

张梦、唐青松、侯贤灯、蒋小明*
四川大学分析测试中心

放电微等离子体作为激发源构建小型化原子发射光谱仪，具有仪器便携化和现场分析的优势和潜力。但其也存在激发能力有限、易受样品中水分与基体影响等微等离子体作为激发源所具有的通病。因此，研制新型的放电微等离子体激发源，以获得增强的激发能力，并提高对样品水分与基体的耐受力是构建高性能小型化原子发射光谱仪的关键。本工作首先设计了一种三个尖端放电级联的微等离子体激发源，三对尖端电极垂直于进样方向被依次平行设置在狭长的放电腔体内，形成阵列型尖端放电（ArrPD）；级联激发的模式使前级 PD 能够更多地蒸发和解离样品中水分和基质，进而提高了激发源的总激发能力及激发效率。结合氢化物发生蒸气进样，构建了小型化的原子发射光谱仪。然而，平行结构的尖端电极仅在一维方向级联放电，无法实现对分析物的全方位级联激发。基于此，进一步将三对平行放置的尖端电极依次旋转 60°相互交错，构建了轴向旋转阵列型尖端放电（AR-ArrPD）激发源，实现微等离子体对放电腔体检测方向截面的全覆盖，提高对分析物的捕获与激发效率。同时，对尖端放电中光谱响应的空间分布进行探究，证实了电极尖端处由于电子密度最集中，从而具有最强的光谱响应。因此，电极旋转交错放电能够实现对三对电极尖端处信号的无遮挡采集，进一步提高检测灵敏度。所设计的新型级联尖端放电激发源实现了对分析物的高效激发；在最优实验条件下，对 As、Ge、Hg、Pb、Sb、Se 和 Sn 七种元素进行了测量，分析灵敏度相较于在传统单尖端放电微等离子体激发源中提升了 3-6 倍。

关键字 级联放电；微等离子体；尖端放电；原子发射光谱；仪器小型化

参考文献

1. Li, M. T.; Li, K.; He, L.; Zeng, X. L.; Wu, X.; Hou, X. D.; Jiang, X. M., *Anal. Chem.*, **2019**, 91 (11), 7001-7006.
2. He, L.; Li, P. X.; Li, K.; Lin, T.; Luo, J.; Hou, X. D.; Jiang, X. M., *J. Anal. At. Spectrom.*, **2021**, 36 (06), 1193-1200.
3. Zhang, M.; Tang, Q. S.; Li, P. X.; He, L.; Hou, X. D.; Jiang, X. M., *Anal. Chem.*, **2023**, 95 (11), 5151-5158.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

铂的高效光化学蒸气发生：分析应用及机理探究

邹兴艳、张钰聆、胡静、侯贤灯*
四川大学

光化学蒸气发生（PVG）是一种由甲酸（FA）、乙酸（AA）、丙酸（PA）等低分子量有机化合物光解产生的自由基引发一系列氧化还原反应以产生待测元素的挥发性产物的蒸气发生进样方法[1]。目前，PVG 已发展成为原子光谱分析中一种前景广阔的样品引入技术，涵盖了包括类金属[2]、过渡金属[3]、贵金属[4]和非金属元素[5]在内的多种元素。贵金属本身具有不易挥发的特性，在 PVG 中受到的关注也较少。本文基于 PVG 进样和电感耦合等离子体质谱法（ICP-MS）建立了一种新的、灵敏可靠的铂测定方法，深入研究并比较了铂在甲酸、乙酸和丙酸三种介质中的 PVG。对反应介质、增敏离子、紫外光照时间和载气流速等参数进行了详细考察并在最优条件下对该方法的分析性能进行了评估，在甲酸、乙酸、丙酸介质中得到的检出限（LOD）分别为 15、1 和 0.6 ng L^{-1}，优于大多数已报道的铂的化学蒸气发生方法。将该方法用于多种水样中铂的检测，得到的加标回收率令人满意。此外，还对铂的 PVG 机理进行了探究。通过 TEM 等表征发现在三种介质中均生成了铂纳米粒子，纳米颗粒的大小不同可能导致了不同介质中铂的传输行为和分析性能差异。

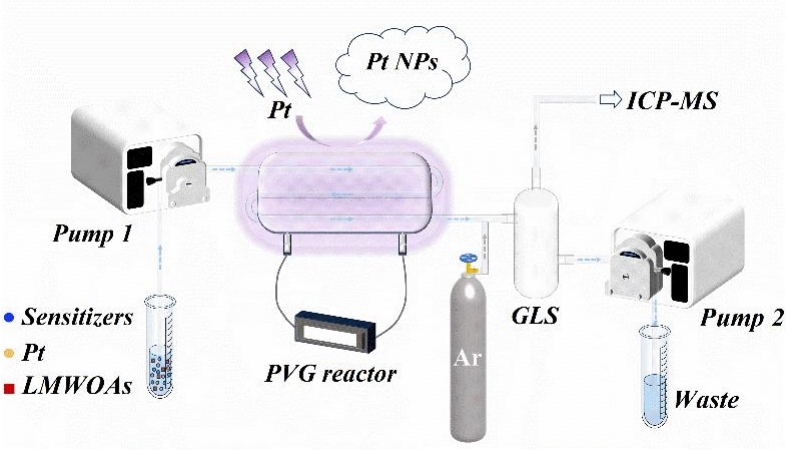


图 1. PVG-ICP-MS 安装示意图

关键字 铂；光化学蒸气发生；电感耦合等离子体质谱法

参考文献

1. Hu, J.; Li, C.; Zhen, Y.; Chen, H.; He, J.; Hou, X. TrAC, Trends Anal. Chem. 2022, 155, 116677.
2. Gao, Y.; Sturgeon, R. E.; Mester, Z.; Hou, X.; Zheng, C.; Yang, L. Anal. Chem. 2015, 87 (15), 7996-8004.
3. Cai, J.-Y.; Liu, S.; Yu, Y.-L.; Wang, J.-H. Anal. Chem. 2022, 94 (4), 2288-2297.
4. De Oliveira, R. M.; Borges, D. L. G. J. Anal. At. Spectrom. 2018, 33 (10), 1700-1706.
5. Hu, J.; Chen, H.; Jiang, X.; Hou, X. Anal. Chem. 2021, 93 (32), 11151-11158.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

共价有机框架锚定 Cd 单原子：双功能吸附剂和光催化剂用于硒的 PVG-AFS 高灵敏检测

文桂胶、彭茜茜、何娟、侯贤灯*
四川大学分析测试中心

Se 是人类必需的微量元素，对人体健康起着重要作用。然而，Se 的缺乏和过量摄入都可能导致一系列疾病。随着全球工业活动的增加，Se 已成为威胁人类健康的主要水污染物之一，因此环境中痕量及超痕量 Se 的检测具有重要意义。然而复杂基质样品的检测往往面临着共存离子干扰严重、灵敏度低等问题，因而对化学蒸气发生-原子荧光光谱法（CVG-AFS）的灵敏度和抗干扰能力提出更高的要求。本工作选择预分离富集策略，基于共价有机框架材料的单原子催化剂（Cd@COF）应用于光化学蒸气发生，不仅可以作为高效吸附剂，还可以作为 Se 光化学反应优良的催化剂。我们通过 Cd@COF 孔径的调控，探究了其与吸附检测性能之间的关系，并详细研究了影响 Se 的吸附和 PVG 信号的各种参数，以及减少复杂基体干扰的可能性。

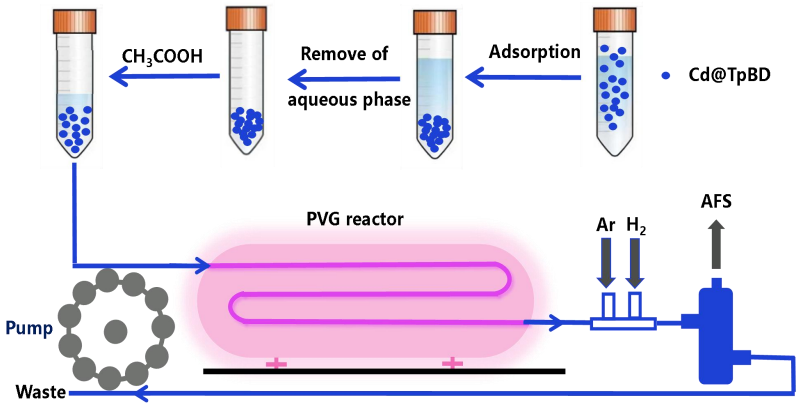


图 1. 预分离富集和光化学蒸气发生原子荧光法检测 Se 的示意图

关键字 单原子催化剂；光化学蒸气发生；原子荧光光谱法；Se；预浓缩

参考文献

1、Z. Zou, X. Jiang, L. Li, Q. Yao, H. Luo and K. Huang, *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, **2020**, 27, e00094.
2、K. Li, S. Zou, G. Jin, J. Yang, M. Dou, L. Qin, H. Su and F. Huang, Sep. Purif. Technol., **2022**, 296.
3、R. Wang, H. Xu, K. Zhang, S. Wei and W. Deyong, Journal of Hazardous Materials, **2019**, 364, 272-280
4、Y. Jia, Q. Mou, Y. Yu, Z. Shi, Y. Huang, S. Ni, R. Wang and Y. Gao, Anal. Chem., **2019**, 91, 5217-5224.
5、X. Deng, L. Dong, H. Chen, W. Wang, Y. Yu and Y. Gao, Anal. Chem., **2023**, 96, 652-660.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

基于免疫金标记银放大策略的便携式毛细管-微等离子体原子发射光谱仪：用于癌胚抗原检测的研究

何娟[1]、胡苗[1]、闫怡婷[1]、唐龙[1]、阳琳[1]、刘芳华[1]、张俊[1]、何娟[2]、侯贤灯[2]、江雪*[1]
1. 四川师范大学
2. 四川大学

基于银纳米沉积在金颗粒表面的信号放大技术已被用于免疫分析测定。然而，传统分析仪器由于体积庞大、成本高昂、操作复杂，在即时检测中受到限制。在本项研究中，我们设计了一种基于毛细管液体电极辉光放电（CLEGD）和小型原子发射光谱（AES）的便携式分析测试系统，用于微量血液样本中癌胚抗原（CEA）的高灵敏、快速测定。本设备采用3D 打印技术搭建整机结构，电池作为供电系统，微等离子体作为小型原子化器。打开放电开关，毛细管的虹吸作用将样品溶液引入微等离子体放电室进行原子化，免疫反应中 Ag^+ 产生波长 328.1 nm 的银原子发射线。在优化条件下，本便携式设备的线性范围为 1~500 ng/mL，检出限低至 0.9 ng/mL，该便携式仪器与大型 ICP-OES 检测结果保持一致。本研究为小型化原子光谱用于生物免疫反应提供了新策略。

关键字 电感耦合等离子体质谱；细胞

参考文献

1. Wang H, Chen B, He M, Hu B, *Anal. Chem.*, **2017**, 89, 4931-4938.
2. Rui L, Xing L, Yurong T, Li W, Xiandeng H, Yi L, *Anal. Chem.*, **2011**, 83, 2330-2336.
3. Shu-an X, Anqin L, Yao L, Li W, Yunfei T, Xiandeng H, Chengbin Z, *Anal. Chem.*, **2019**, 91, 2701-2709.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

基于微孔压电超声雾化的高效 spICP-MS 单颗粒进样系统

董俊航、朱振利*
中国地质大学（武汉）

单颗粒电感耦合等离子体质谱（spICP-MS）是一种可以同时表征纳米颗粒（NPs）尺寸、元素组成和浓度的强大工具。然而，传统的气动雾化（PN）进样系统的进样效率较低（1%到 5%），严重限制了 spICP-MS 在分析低浓度环境样品的能力。近年来，我们成功开发基于微孔压电超声雾化（MUN）的 ICP-MS 溶液样品引入系统，可以实现溶液样品的 100%的雾化引入，该系统理论上同样具备高效 NPs 引入的能力。因此，我们以银纳米颗粒（Ag NPs）作为初步研究对象，以电感耦合等离子体四级杆质谱（ICP-QMS）作为单颗粒信号检测工具，评估了 MUN 进样系统用于 spICP-MS 分析的潜力。

结果表明，MUN 进样系统在 NPs 传输效率方面同样表现出色，对 AgNPs 的传输效率高达 80%，显著优于常规 PN 进样的传输效率。此外，这种高传输效率在 10 μL min^{-1} 到 25 μL min^{-1} 的进样速率范围内保持恒定，而其他高效雾化器的传输效率通常会随着进样速率的增加而显著下降。随后，通过对 60 nm 和 100 nm 标准银纳米颗粒的分析，进一步验证了 MUN 系统的有效性与可靠性，确认了其在粒度分布表征方面的准确性。简而言之，MUN 可以为 ICP 提供高效的纳米颗粒样品引入，适用于粒径小且浓度低的环境样品中分析，相比于其他进样系统具备更低的成本和市场转化潜力。

关键字 单颗粒、微孔压电超声雾化、高效进样系统、spICP-MS

参考文献

1. J. Dong et al., *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 13351-13359.
2. J. Dong et al., *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 6271-6278.
3. J. Dong et al., *J. Anal. Atom. Spectrom.*, **2023**, 38, 2414-2423.
4. J. Dong et al., *J. Anal. Atom. Spectrom.*, **2024**, Accepted.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

多接收磁质谱单颗粒元素与同位素分析方法开发及应用

邢鹏举、朱振利*
中国地质大学（武汉）

纳米至微米级的颗粒物具有体积小、比表面积大、反应活性高等特征，在整个地球动力学系统中扮演着关键角色，也已成为广受关注的环境污染来源。这些颗粒物的元素与同位素信息包含了有关样品来源和迁移转化过程的丰富信息，而单个细胞的元素与同位素组成则与其代谢活动和细胞间的异质性密切相关。尽管如此，现有研究通常将所有颗粒物/细胞视为一个整体，忽略了单颗粒或单细胞的异质性。近年来，单颗粒（细胞）分析技术越来越受到重视。然而，目前基于四级杆和飞行时间质量分析器的单颗粒（细胞）分析技术仍存在灵敏度低、同位素比值精度不足等问题。本研究基于高速示波器和多接收等离子体质谱（MC-ICP-MS）开发了“事件触发信号捕获”（ETSC）系统，为单纳米颗粒级别元素与同位素分析提供了高灵敏度的解决方案[1]。ETSC 系统具备优异的颗粒物事件特异性识别和高灵敏度分析性能，能够检测到最小直径为 8 nm 的 AgNPs（1 ag ^{109}Ag），优于其他单颗粒技术的分析灵敏度。在高灵敏度的基础上，ETSC 系统对 20 nm ~ 100 nm 的单个 AgNPs 的 $^{109/107}$Ag 测量标准偏差（SD）均优于 0.09。利用数百~数千个颗粒的统计分析，40 ag AgNPs 的 $^{109/107}$Ag 分析精密度可以提高至 0.7 ‰。此外，ETSC 系统还实现了对 ag ~ fg 质量稀土纳米颗粒的元素与同位素分析，以及自然环境中模拟核颗粒的识别和分析。同时，我们基于 ETSC 系统建立了单颗粒同位素比值校正方法，进一步提升了单颗粒同位素分析的准确度。研究结果表明，ETSC 系统对自然矿物粉尘的 Pb 测试值与参考值之间的相对偏差可控制在 0.32 %以内。此外，即便矿物颗粒量仅为总颗粒量的 1/10^9，ETSC 系统也可以有效将矿物颗粒识别检测，多颗粒的同位素分析精密度优于 1 ‰。最后，我们也将 ETSC 系统应用于单个藻类细胞中 P、Cu、Zn 等营养元素定量分析和元素比值分析，实现了单细胞异质性的观察。综上所述，ETSC 系统在单个颗粒尺度上提供了元素与同位素的信息，可以用于探究颗粒物地球化学循环，以及单细胞异质性等研究。

关键字 多接收杯电感耦合等离子体质谱；纳米颗粒；同位素分析；单颗粒同位素比值校正方法

参考文献

1. P. Xing, N. S. Belshaw, J. Dong, L. Li, Y. Geng, H. Zheng, X. Liu, Z. Zhu*, Talanta., **2024**, 278, 126540.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

基于质谱成像技术解析无机汞暴露致肾脏毒性的特征

刘畅、徐明*
中国科学院生态环境研究中心

肾脏是无机汞（Hg(II)）的主要靶器官之一。目前，评价肾功能损伤主要采用血生化分析法，但该方法难以对轻微的肾脏损伤进行早期诊断与识别。针对上述挑战，本研究采用空气动力辅助解吸电喷雾质谱成像（AFADESI-MSI）技术，对饮用水 Hg(II)暴露造成的肾脏损伤特征及可能的毒性机理开展了研究。实验结果显示，经 3 mg/L Hg(II)暴露 28 天后，小鼠体重略微低于对照组，但血生化法的结果显示血尿素氮（BUN）和血清肌酐（SCr）均未显著变化。组织病理 H&E 染色结果则显示，小鼠肾脏已出现肾小管损伤和间质炎症。进而，我们采用 AFADESI-MSI 分析，证实 Hg(II) 暴露造成肾脏组织中精氨酸（arginine）、亚精胺（spermidine）、肌酸（creatine）和肌酐（creatinine）水平的增加，并呈现出空间异质性（图 1）。此外，Hg(II)暴露还引起氧化型与还原型谷胱甘肽水平的升高。上述结果说明，Hg(II) 可通过干扰肾脏氧化还原稳态，引起氧化应激损伤，进而干扰尿素循环，造成肾脏功能损伤。综上，相较于传统血生化分析法，质谱成像法能够更灵敏、准确地检测肾脏损伤生物标志物的变化，为揭示重金属的健康危害与毒性机理提供新的视角。

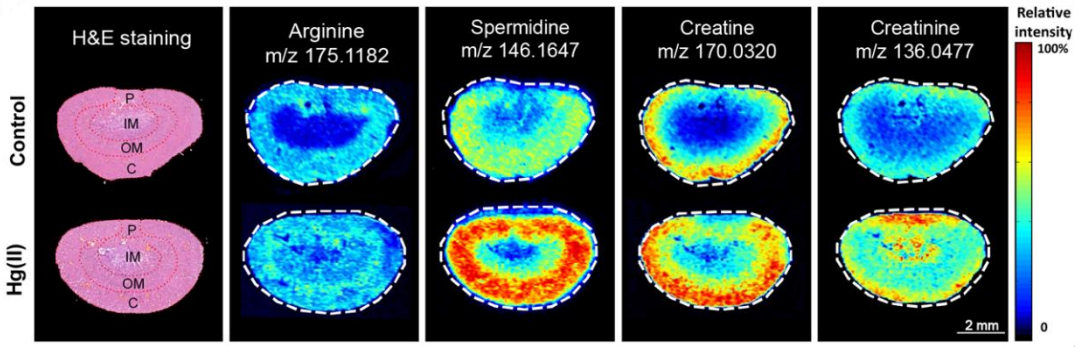


图 1. Hg(II) 暴露影响肾脏中尿素循环的主要代谢物水平与分布。肾盂区域（P），内髓质区域（IM），外髓质区域（OM）和皮质区域（C）

关键字 无机汞；肾脏毒性；质谱成像；代谢物；毒性机理

参考文献

1. Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR). Toxicological Profile for Mercury, Department of Health and Human Services, Public Health Service, **2022**.
2. Chen J.# Ma M.# Wang R. Gao M. Hu L. Liu S. Xu M.* Metallomics **2023**, 15, mfad014.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

利用 ICP-MS 进行单细胞中金属的准确定量分析

张俊辉、刘丽红*、何滨、胡立刚、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

单个细胞中金属的含量存在异质性[1]，常规测量中细胞的金属平均浓度会掩盖细胞之间的差异。单细胞内金属的准确定量分析对于金属在细胞中的功能、行为和毒性等具有重要意义。单细胞-ICP-MS 方法是单细胞中金属分析的有力工具，具有分析速度快、灵敏度高等特点。但由于细胞标准物质的缺乏，该方法通常使用纳米颗粒作为标准来计算传输效率，与细胞的结果差异较大，引起了最终定量的不准确性。本研究发现，利用纳米金对细胞中金属含量进行检测会引起 76%以上的误差；而通过测量细胞内源金属的含量对传输效率进行确定和校正，能够实现细胞中金属含量的准确定量。此外，为实现细胞处理和保存过程中的稳定性，建立并优化了细胞固定方法，保持了细胞的完整性和细胞内金属含量的稳定性。上述研究为单细胞中金属的定量分析提供了准确、稳定和可靠的分析方法。

关键字 金属，单细胞，纳米颗粒，ICP-MS

参考文献

1. Steven J. Altschuler, Lani F. Wu, *Cell*, **2020**, 141(4), 559-563.

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

细胞炎症诱导激活 CRISPR/Cas9 纳米机器及其基因编辑应用

邓兆佳、沙蕊、袁爱姣、彭汉勇*
中科院生态环境研究中心

成簇规则间隔短回文重复序列及相关蛋白（CRISPR/Cas）是当前应用最广泛的基因编辑工具，具有设计简单、特异性高、成本低廉等优点，在环境健康、疾病诊疗等领域极具潜力。在正常或病变细胞中无差别的 CRISPR/Cas 基因编辑易引发脱靶效应。现有的调控技术通常采用外源性激活方式，而通过细胞内源性生化过程实现对 CRISPR/Cas 精准且特异性的活性调控仍具有挑战。本研究介绍了一种由细胞炎症诱导激活的工程化 CRISPR/Cas9 纳米机器，用于可控的基因编辑。在初始状态下，磷硫酰化（phosphorothioate, PT）修饰的 DNA 序列作为锁定链与单向导 RNA（single guide RNA, sgRNA）的间隔区（spacer）互补结合，并沉默核糖核蛋白复合体（ribonucleoprotein, RNP）的靶向能力。当细胞处于炎症期间，上调髓过氧化物酶（Myeloperoxidase, MPO），通过催化卤化过程生成 HClO，从而特异性切割锁定链的 PT 位点，释放出自由的 RNP，实现对目标基因的编辑。本工作成功对 GFP 基因进行可控编辑，下调了 Hela 细胞中的 GFP 表达，为特定内源过程激活的 CRISPR 基因编辑提供了工具。

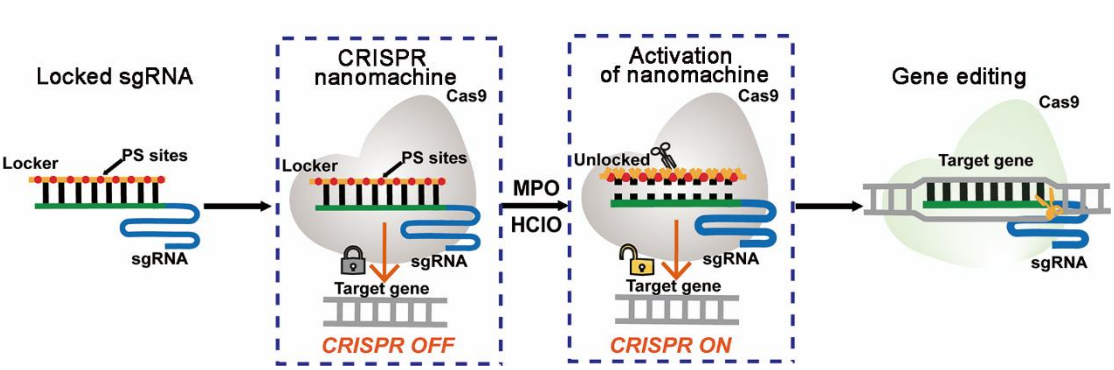


图 1. 细胞炎症激活锁定的 CRISPR/Cas9 以实现可控基因编辑

关键字 CRISPR/Cas9；基因组编辑；DNA 纳米机器；细胞炎症；磷硫酰化修饰

参考文献

1. H. Peng, C. Le, J. Wu, X.F. Li, H. Zhang, X.C. Le, *Acs. Nano.*, **2020**, 14, 2817-2826.
2. A. Yuan, R. Sha, W. Xie, G. Qu, H. Zhang, H. Wang, X.C. Le, G. Jiang, H. Peng, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 26657-26666

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

电感耦合等离子体发射光谱仪器发展及性能对比

陈蕾、李兵*
中南大学

电感耦合等离子体发射光谱法具有检出限低、线性范围宽、精密度高等优点，可对多种类样品进行 70 多种元素的精确定量分析，广泛应用于材料科学、矿业工程、化学及环境科学等学科领域。近年来，新型电感耦合等离子体发射光谱仪（ICP-OES）在光源稳定性、分辨率、检出限及自动化方面均取得了一定突破，国产高端型号 ICP-OES 的技术参数也已逐步达到国际先进水平。中阶梯光栅交叉色散分光系统搭配固体检测器（CCD、CID 等）仍是安捷伦、赛默飞、珀金埃尔默等知名厂商最新型号 ICP-OES 的核心配置。而斯派克最新 ARCOS 型号 ICP-OES 采用凹面光栅分光系统结合一维 CMOS 检测器，及专利密闭充氩光室，可实现全谱直读的高效元素定量分析，且无需氩气吹扫即可随时分析<190nm 以下谱线，是唯一可进行卤素测量的 ICP-OES。国产天瑞 ICP 3200、谱育 EXPEC 6500 系列 ICP-OES 在检出限、光谱分辨率、稳定性等方面已可满足多种类样品的测试需求，但相较于进口设备，其性能稳定性及分析精度等仍存在一定差距。随着国家对于高端仪器设备自主研发和创新的高度重视和支持，国产 ICP-OES 将不断实现技术创新及升级换代，在全球范围内发挥更加重要的作用。

关键字 电感耦合等离子体发射光谱，仪器发展，性能对比

分会场：1.原子光谱分析与仪器
交流类型：墙报

电感耦合等离子体光谱仪测定工业级丙二醇甲醚醋酸酯中的钾元素

马翀玮*
中石化（上海）石油化工研究院有限公司

丙二醇甲醚醋酸酯（PGMEA）是电子化学品重要的品种之一，已广泛应用于涂料、液晶显示器生产、光刻胶生产等领域，这就要求 PGMEA 中的金属（和非金属）杂质含量尽可能地低。但使用电感耦合等离子体光谱仪（ICP-OES）测定 PGMEA 中的钾元素却困难重重。PGMEA 中含有大量的碳元素，会消耗等离子体中的能量，导致仪器熄火，同时碳元素会对钾元素的谱线产生光谱干扰，导致钾元素的测试稳定性差。钾元素在等离子体中容易变成稳定的离子价态，难以进一步被激发，导致灵敏度差。本论文采用 0.8mm 中心管，减少进样流速，降低 RF 功率，增大雾化气流量，有效提高钾元素灵敏度和稳定性；增大氧气含量成功消除碳元素的干扰，钾元素定量限可降低至 2ppb，使采用 ICP-OES 检测 PGMEA 中的钾含量成为可能。

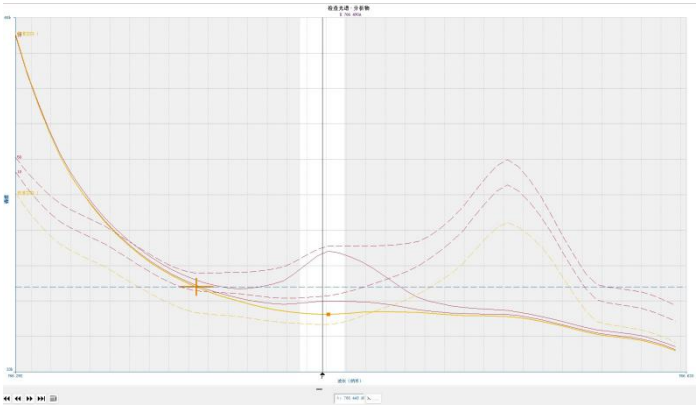


图 1. PGMEA 中的 K 元素 0，20，50ppb 信号图（虚线优化前，实线优化后）

关键字 PGMEA，ICP-OES，钾元素

参考文献

1.刘耀鹏,*微纳电子与智能制造*, **2022**, 4(1):120-124.
2.刘国红,*中国西部科技*, **2011**,10.22:2.
3.杨林,毕海超,隋东,等,*中国无机分析化学*, **2023**, 13(12):1383-1388.
4.张遴,赵收创,王昌钊,等,*理化检验：化学分册*, **2007**, 43(6):3

分会场：2. 分子光谱学与仪器
交流形式：报告

拟肽大环的合成组装识别和跨膜转运

江云宝*
厦门大学

硫脲作为一类阴离子结合受体，主要依据其-NH 与阴离子如醋酸跟离子的氢键结合作用，因此通常要求高的-NH 酸性，如取代以拉电子基团，以保障强的阴离子氢键结合。我们提出并发展了一类新型硫脲受体，酰胺基硫脲，即取代以推电子的酰胺基（RC(O)NH-）。我们发现硫脲的-NH 酸性并未提高，但其与阴离子的结合能力却显著增强。阴离子结合诱导受体分子结构变化（扭曲的 N-N 单键平面化）、并正反馈于阴离子结合是根本原因。后续的基于手性氨基酸的酰胺基硫脲研究发现，将手性氨基酸 N-端修饰以酰基，得到的酰基氨基酸酰胺基硫脲结构中含有分子内十元环维系的 beta-转角，氨基酸的手性因此得以远程传递至非手性的苯基硫脲生色团、并且转角两端的基团空间上靠近，应有利于分子内环化反应。我们因此提出以该类 beta-转角为原位生成的自模板的超大拟肽大环的合成策略，成功得到了系列拟肽大环，该类大环易于分子间堆积、形成纳米孔道，展现出跨膜转运特性。

感谢国家基金手性物质创造重大研究计划集成项目和化学部科学专项项目的资助，感谢实验室同学们的勤奋、睿智的工作。

关键字 拟肽大环；beta-转角；酰胺基硫脲；纳米孔道；跨膜转运

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

太赫兹痕量探测系统与转动波谱分析

郑小平*、邓晓娇、李佳
清华大学

针对化学品成分识别和痕量浓度的探测与分析问题，发明了太赫兹痕量探测系统，创建了基于碰撞展宽效应的太赫兹波谱分析方法。提出了基于传递函数和一维多通道卷积神经网络的逆向设计模型，实现了无源器件高精度且快速的电磁建模与优化设计，研制了高功率倍频源器件；突破了太赫兹探测系统的新体制和新结构，建立了基于薄势垒材料的太赫兹场效应探测器设计方法，研制了结合凹槽栅与渐变势垒层的场效应晶体管探测器，响应度和噪声等效功率达到 58 mA/W and 43 pW/$Hz^{1/2}$；搭建了太赫兹波谱系统，实现了 kHz 级的高频谱分辨，获得了挥发性有机物的高精细转动波谱，探测下限达到了 1.4 ppm。基于自研系统，提出了多模共振与尺度缩放相结合的宽带指纹谱增强技术，实现了两倍带宽下的指纹谱 33.7 倍增强；提出了基于碰撞展宽效应的太赫兹波谱分析方法，从气体固有物理特性的角度探索了痕量气体的成分识别和浓度分析，在低波谱数据量情况下，获得了相对误差 0.1%的高准确性痕量化学品浓度分析。

关键字 太赫兹；分析仪器；转动波谱；碰撞展宽效应

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

气敏性萘酰亚胺类有机小分子光谱分析

仉华*、牛慧玉
河南师范大学

萘酰亚胺类染料作为一类典型的荧光发色团，具有稳定的刚性平面结构和大π键共轭体系，而且其结构易修饰、易功能化。同时，荧光小分子探针具有灵敏度高，选择性好，对样品无损等优点，能够与荧光显微成像技术结合，实现在细胞或活体内目标分子的实时、可视化检测。因此，以萘酰亚胺类染料为母核结构的荧光探针在生命分析研究领域有着广泛的应用，如细胞中金属离子（Na^+、Hg^{2+}），氨基酸以及生物酶等的检测。但由于其半峰宽、强的溶剂化效应等固有因素，以该类结构为母体的探针易发生内滤及自吸收现象。如何提高该现象在生化分析中的积极作用成为亟需解决的科学问题。经过调研近十年的大量相关基础研究，建立了通过调控激发态能量释放途径，利用自吸收现象实现自内标荧光分析的方法。其中该部分工作选取细胞代谢过程中的重要气体分子二氧化碳（CO_2）作为研究对象，利用萘酰亚胺类染料设计制备了系列小分子气体荧光探针用于检测生物体中 CO_2 含量的微小变化。在本工作中，利用多种光谱手段以及成像手段具体研究了该系列气体小分子荧光探针在溶液、细胞以及活体水平对二氧化碳的响应行为。结果表明：该系列小分子荧光探针可以巧妙地利用自吸收现象实现原位低生物毒性的二氧化碳典型自内标比例分析检测。

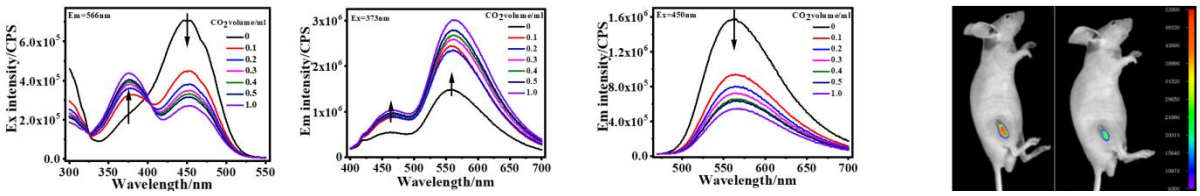


图 1. Spectrum change of the fluorescence sensor for CO_2 and the tumor mouse model imaging.

关键字 气敏性；分子光谱分析；激发态调控

参考文献

1. Z. Q. Guo, N. R. Song, J. H. Moon, M. Kim, E. J. Jun, J. Choi, J. Y. Lee, C. W. Bielawski, J. L. Sessler, J. Yoon, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 17846–17849.
2. H. Y. Niu, J. W. Liu, H. M. O'Connor, T. Gunnlaugsson, T. D. James, H. Zhang, *Chem. Soc. Rev.* **2023**, **52**: 2322-2357.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

微纳复杂体系的大视场单颗粒成像

何彦*
清华大学

微纳复杂体系是由大量细胞或活性物质基元及其环境组分组成的微纳尺度的动态时空网络，近年来在物理、化学和生物交叉领域引起普遍关注。我们发展面向微纳复杂体系的单颗粒示踪以及分析技术，实时原位考察细菌集群动态行为随时间的演变。通过发展大视场、高灵敏的成像装置，长时间记录细菌菌落中单纳米颗粒的轨迹，发展基于机器学习新技术的单颗粒轨迹分析方法，描述细菌与环境之间复杂相互作用的细节，以及在外因诱导下体系整体的时空变化。这些仪器和分析技术以及实验观察策略为研究微纳尺度上复杂性的涌现提供了新的工具。

关键字 微纳复杂体系；大视场成像装置；单颗粒轨迹示踪

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

光学治疗探针的设计合成及应用

李娜*
山东师范大学

光学治疗因其高时空选择性、无创性、低副作用等优点在癌症治疗领域受到越来越多的关注，但是光学治疗试剂靶向性差，所用激光功率密度高、组织穿透性差等问题严重限制了光学治疗的应用。为了解决光学治疗试剂靶向性差的问题，我们设计合成了一种同时靶向肿瘤细胞和线粒体的有机小分子光热剂，实现了对肿瘤精准高效的光热治疗。为了降低激发光源的功率密度，我们采用蛋白结合策略将分子光热试剂锚定到细胞内巯基蛋白上，使产生的热量直接作用于蛋白，有效破坏蛋白导致细胞死亡，进而增强光热治疗效果。此外，我们开发了一种靶向关键特定蛋白 BRD4 的光热试剂，在低功率密度的激光照射下，该光热剂可直接破坏 BRD4 蛋白结构，抑制其转录调控功能，增强了低温光热治疗的效果。为了改善激发光组织穿透性差的问题，设计了一种同源细胞膜包覆的仿生纳米反应器，利用 H_2O_2 与 CPPO 反应产生的化学能激发光敏剂 Ce6 产生 $^1O_2$，实现无激发光的光动力学治疗。

关键字 癌症；光学治疗；靶向；蛋白锚定；无光源激发

参考文献

1. H. Wang, J. Chang, M. Shi, W. Pan, N. Li, B. Tang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 1057-1061.
2. M. Shi, Z. Fu, W. Pan, Y. Chen, K. Wang, P. Zhou, N. Li, B. Tang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 13564-13568.
3. M. Shi, Y. Li, W. Pan, Z. Fu, K. Wang, X. Liu, N. Li, B. Tang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202403258.
4. Z. Yu, P. Zhou, W. Pan, N. Li, B. Tang, *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 5044.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

用于时间分辨荧光生化分析的β-二酮类铕(III)荧光配合物

袁景利*、张晓波
大连民族大学

某些β–二酮类铕(III)配合物在紫外光照射下可以发出强烈的长寿命红色荧光，基于这种性质，时间分辨荧光免疫分析技术于 1980 年代初得以建立，从而开创了无背景干扰的高特异性、高灵敏度荧光免疫分析技术。

我们在 1990 年代曾合成了以 BHHCT-Eu^{3+}为代表的几种氯磺酰化多齿β–二酮类铕(III)配合物，使得这类配合物直接用于生物标记成为可能[1]。后来，通过进一步结构优化，我们又设计合成了具有更佳性能的β–二酮类铕(III)配合物生物标记物 BHHBCB-Eu^{3+}，并将其用于时间分辨荧光免疫分析与生物成像[2]。最近，通过将羧基官能团引入 BHHBCB-Eu^{3+}，我们设计合成了具有优良水溶性、且荧光性能优异的β–二酮类铕(III)配合物 PBBHD-Eu^{3+}用于生物标记及时间分辨荧光生化分析[3]。此外，通过分子识别功能的引入，我们进一步设计合成了几种对某些生理活性组分具有特异性响应的β–二酮类铕(III)配合物荧光分子探针，实现了活细胞等生物样品中单线态氧[4]、次氯酸[5]及硫化氢[6]等的时间分辨荧光成像测定。我们的上述研究结果表明，β–二酮类铕(III)配合物在时间分辨荧光生化分析领域具有良好的应用价值。

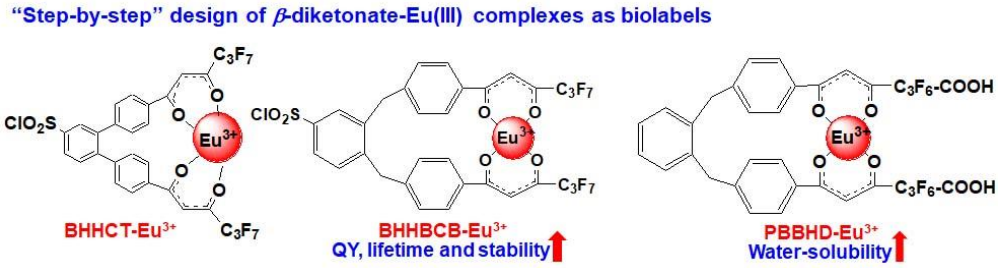


图 1

关键字 铕荧光配合物；时间分辨荧光；生物标记；生物成像

参考文献

1. J. Yuan, K. Matsumoto, H. Kimura, *Anal. Chem.*, **1998**, 70, 596-601.
2. L. Zhang, Y. Wang, Z. Ye, D. Jin, J. Yuan, *Bioconjugate Chem.*, **2012**, 23, 1244-1251.
3. Z. Dong, B. Song, H. Ma, X. Gao, W. Zhang, J. Yuan, *Talanta*, **2024**, 274, 126000.
4. J. Sun, B. Song, Z. Ye, J. Yuan, *Inorg. Chem.*, **2015**, 54, 11660-11668.
5. H. Ma, K. Chen, B. Song, Z. Tang, Y. Huang, T. Zhang, H. Wang, W. Sun, J. Yuan, *Biosens. Bioelectron.*, **2020**, 168, 112560.
6. J. Zou, B. Song, D. Kong, Z. Dong, Q. Liu, J. Yuan, *Inorg. Chem.*, **2024**, 63, 13244-13252.

致谢：感谢国家自然科学基金（No.21775015）对本研究的资助。

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

化学发光法定量表征氧空位

李保新*
陕西师范大学

氧空位是金属氧化物、卤氧化物中最常见的一种固有缺陷。氧空位可以改变金属氧化物的基本电子结构和能带结构，从而形成活性位点，提高催化活性。为了发现氧空位调控催化效率的规律，揭示氧空位的作用机理，就需要对表面氧空位进行精确定量表征。本研究将简单灵敏的化学发光分析法引入氧空位的定量表征中，建立了一种准工况条件下，定量表征氧空位的方法。

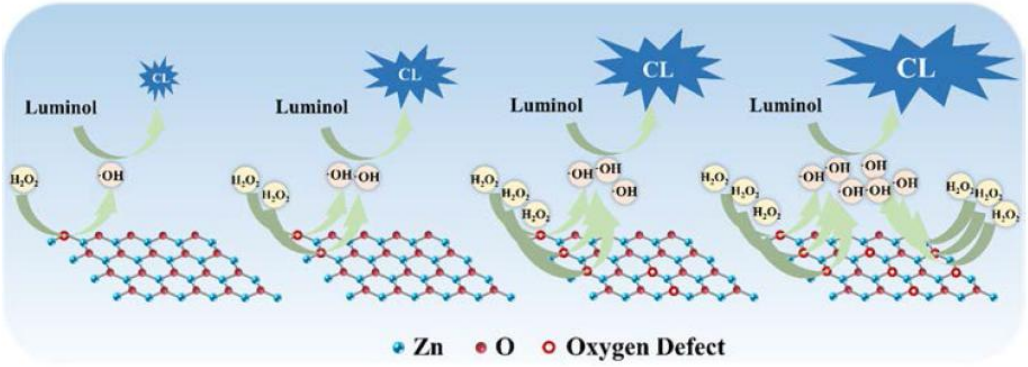


图 1

关键字 化学发光，氧空位，定量表征

参考文献

1. J. Lei, W. Liu, Y. Jin, B. Li, *Anal. Chem*., **2022**, 94, 8642-8650.
2. J. Lei, L. Zhang, M. Li, W. Liu, Y. Jin, B. Li, *Anal. Chem*., **2023**, 95, 17937-17944.
3. F. Li, L. Hou, W. Liu, Y. Jin, J. Lu, B. Li, *Anal. Chem*., **2023**, 95, 16021-16028.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

DNA 荧光纳米探针用于肿瘤细胞 microRNA 灵敏检测与成像分析

李春梅*、何琳、聂坤瀚
西南大学

癌症已成为严重威胁人类健康的主要公共卫生问题之一。研究表明，MicroRNA（miRNA）的异常表达与癌症等多种疾病密切相关。因此，miRNA 的定量分析和精准成像对于癌症早期诊断和机制研究至关重要。如何构建高效、高灵敏度和高特异性的 miRNA 检测与成像技术，以满足肿瘤早期诊断和机制研究的需求，仍然是一个亟待解决的关键问题。

本课题组构建了多种 DNA 纳米探针用于肿瘤细胞内 miRNA 的灵敏检测与成像分析，具体如下：（1）结合杂交链式反应（HCR）、催化发夹自组装（CHA）、DNA 人工模拟酶（DNAzyme）步行器循环反应等信号放大策略，构建了多种一维、二维和三维 DNA 纳米探针，用于 miRNA 灵敏检测与成像分析，对疾病早期诊断、药物筛选具有重要意义；（2）将双荧光能量转移技术集成于 DNA 逻辑纳米器件中，通过可编程性和多级输入特性，降低成像背景并提升能量转移效率，实现肿瘤细胞的空间选择性成像与实时动态监测。这一方法有效区分正常细胞与多种癌细胞类型，为肿瘤机制研究和图谱构建提供重要支持。

关键字 肿瘤标志物；灵敏检测；信号放大；荧光共振能量转移；细胞成像

参考文献

1. M. Sun; Q. Zhou; J. Peng; S. Liu; J. Luo; L. Bai; W.-J. Duan; J.-X. Chen; Z. Dai; J. Chen, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 9078–9087.
2. L. L. Li; W. Y. Lv; Y. T. Xu; Y. F. Li; C. M. Li; C. Z. Huang, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 4399-4406.
3. L. Liang; X.J. Shuai; L.P. Cao; J. Wang; Y. Wang; L.L. Li; Y.F. Li; C.Z. Huang; C.M. Li, *Anal. Chem.*, **2023**, 95 10721–10727.
4. X.J. Shuai; Y. Zhang; J. Zhai; J. Li; J. Chen; X.Y. Long; D. Li; C.Z. Huang; C.M. Li, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 6681–6689.
5. Y. Wang; L. P. Cao; X. J. Shuai; L. Liu; C. Z. Huang; C. M. Li, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 4597-4604.
6. Y. Wang; Y. Bai; L. P. Cao; L. L. Li; L. Zhan; H. Zuo; C. M. Li; C. Z. Huang, *Biosens. Bioelectron.*, **2022**, 197, 113783.
7. L. L. Li; F. Cheng; J. Li; S. J. Zhen; W. Y. Lv; X. J. Shuai; Y. F. Li; C. Z. Huang; C. M. Li, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 10992-10998.
8. Y. J. Jiang; N. Wang; F. Cheng; H. R. Lin; S. J. Zhen; Y. F. Li; C. M. Li; C. Z. Huang, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 11565-11572.

致谢：感谢国家自然科学基金面上项目（NSFC 22074124）及中央高校基本业务费（XDJK2020TY001）资助。

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

环境与能源研究中活性中间体单颗粒、单分子成像技术与仪器

唐波*
崂山实验室；山东师范大学

在环境与能源研究领域，活性中间体的检测与表征是理解复杂化学反应机制、优化能源转化过程及评估环境污染风险的关键。随着科学技术的进步，单颗粒、单分子成像技术已成为揭示这些微观过程的重要工具。我们聚焦于单颗粒、单分子水平上活性中间体的成像技术与仪器发展，探讨了其在环境与能源研究中的应用。在仪器开发方面，研制了适用于单颗粒表面分析的单分子荧光显微成像仪。在仪器的光学系统中，构建复合光场，创新性引入环形扫描全内反射照明，解决了激光散斑影响，以及由颗粒的立体性导致的表面活性物种荧光激发不均匀问题，提高了检测灵敏度和单分子信号定位精度；在图像算法方面，开发了高分辨自适应算法和质心定位单分子荧光成像算法和软件，将空间分辨率提高至 10 nm，可实现单颗粒三维建模与成像仿真、颗粒 识别、图像信号增强和单分子定位等功能。基于开发的高分辨荧光成像仪，在单分子水平分析了颗粒表面电子传输过程和活性氧产生的时空分布。发现反应中电子在 TiO2 表面原位产生，并向碳纳米管传输的过程，材料表面反应活性位点存在显著的动态重构变化，呈现与颗粒化学组成和结构依赖的空间异质性。进一步原位成像分析了光生空穴(h^+)和电子(e^-)对于颗粒表面•OH 产生调控作用，确认了碳纳米管-TiO2 表面•OH 的产生以氧气的电子还原途径为主，并通过反应过程中•OH 单分子荧光信号 on/off 的转化，获取催化剂表面•OH 的产生速率和产生速率常数，研究了•OH 产生的动力学行为。通过对外电场、磁场、光场下光催化剂表面载流子分离的原位成像分析，深入揭示了外场增强光催化效率的潜在机理，为深入理解颗粒表面的催化反应机制提供了支持。

关键字 单颗粒；单分子荧光成像；活性中间体

参考文献

1. Si, H.; Du, D.; Jiao, C.; Sun, Y.; Li, L.*; Tang, B.*, *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 6315.
2. An, J., Song, X., Wan, W., Chen, Y., Si, H., Duan, H., Li, L.,* Tang, B.*, *ACS Catal*. **2021**, 11, 6872−6882
3. Li X., An J., Gao Z., Xu C., Cheng Y., Li S., Li, L.,* and Tang, B.*, *Chem. Sci.*, **2023**, 14, 3554−3561.
4. Xu C., Chen Y., Li S., An J., Song X., Si H., Li L.,* Tang, B.*, *J. Phys. Chem. Lett*. **2022**, 13, 8635−8640.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

基于核酸探针的荧光各向异性分析新方法的构建及应用

甄淑君*
西南大学

荧光各向异性（FA）法是一种均相分析法，具有抗光漂白、高准确性、高通量等优点。其中，基于核酸探针的 FA 法已广泛用于蛋白、核酸、生物小分子、金属离子等靶标的检测。当靶标与荧光标记的核酸探针结合后，由于探针的质量（或体积）变大，导致 FA 值增大，因此可根据加入靶标前后的 FA 值的变化实现对靶标的检测。然而，基于核酸探针的 FA 法具有以下缺点：（1）核酸探针本身具有较大的质量（或体积），导致其具有较高的 FA 背景值；（2）靶标的质量（或体积）通常较小，与荧光核酸探针结合后不能引起 FA 值的显著改变，导致信背比低，灵敏度低。为了克服以上缺点，我们课题组近年来构建了以下几种基于核酸探针的 FA 新方法：（1）利用具有独特二维平面结构的氧化石墨烯（GO）作为质量（或体积）放大材料，将荧光标记的核酸探针间接连接在 GO 表面，实现了金属离子、腺苷、凝血酶、蓖麻毒素等靶标的灵敏检测；（2）利用核酸及蛋白组装体，结合不同核酸信号放大策略，实现了 microRNA、金黄色葡萄球菌肠毒素等靶标的灵敏、准确检测；（3）利用 DNA 纳米片作为核酸探针的质量（或体积）放大器，结合 CRISPR/Cas12a 系统，构建了高信背比的 FA 新方法，实现了 microRNA、HBV-DNA 及新冠病毒 N 蛋白的超灵敏检测。以上方法有望进一步用于临床检测。

关键字 荧光各向异性；核酸探针；生物传感

参考文献

1. 谢佳丽, 秦雨, 吴竹莲, 甄淑君, 基于核酸探针的荧光各向异性检测方法. 科学通报, **2024**, 69, 3900-3913.
2. Y. Yu, Y. Liu, S. J. Zhen, C. Z. Huang, *Chem. Commun.*, **2013**, 49, 1942-1944.
3. S. J. Zhen, Y. Yu, C. M. Li, C. Z. Huang, *Analyst,* **2015**, 140, 353-357.
4. X. Xiao, Y. F. Li, C. Z. Huang, S. J. Zhen, *Chem. Commun.,* **2015**, 51, 16080-16083.
5. X. Xiao, J. Tao, H. Z. Zhang, C. Z. Huang, S. J. Zhen, *Biosens. Bioelectron.,* **2016**, 85, 822–827.
6. S. J. Zhen, X. Xiao, C. H. Li, C. Z. Huang, *Anal. Chem.*, **2017**, 89, 8766−8771.
7. Y. X. Liu, X. Xiao, C. H. Li, C. Men, Q. C. Ye, W. Y. Lv, Y. F. Li, C. Z. Huang, S. J. Zhen, *Talanta*, **2020**, 211, 120730.
8. Y. X. Liu, T. J. Xie, C. H. Li, Q. C. Ye, L. L. Tian, Y. F. Li, C. Z. Huang, S. J. Zhen, *Anal. Chim. Acta*, **2021**, 1154, 338319.
9. T. Xie, Y. Liu, J. Xie, Y. Luo, K. Mao, C. Huang, Y. Li, S. Zhen, *Chemosensors*, **2022**, 10, 501.
10. T. J. Xie, J. L. Xie, Y. J. Luo, K. Mao, C. Z. Huang, Y. F. Li, S. J. Zhen, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 7237−7243.
11. J. L. Xie, T. J. Xie, Y. J. Luo, K. Mao, C. Z. Huang, Y. F. Li, S. J. Zhen, *Chinese Chem. Lett.* **2024**, 35, 109137.

致谢：感谢国家自然科学基金（22322409, 21974109）的资助。
分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

单分子化学成像新方法新仪器研制

方宁*
厦门大学

基于单分子的超高精度定位和超分辨率显微成像技术的出现增强了以纳米级准确度和精度解析单个分子以揭示更详细的分子动力学的关键能力。利用单分子荧光成像技术，我们研究了多孔材料中纳米限域效应对异相催化反应的影响，同时还把单分子荧光成像技术拓展到薄层二维层状材料领域，探究了不同缺陷位晶格结构、电子能带结构，以及层数对催化活性和反应动力学的影响。尽管已取得了诸多成就和突破，单分子化学成像领域仍然存在着诸多挑战，亟待发展新方法与新仪器以实现科学发现的新突破。

关键字 单分子成像；非均相催化

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

分子探针与活体传感

任天兵*，袁林，张晓兵
湖南大学

荧光成像分析是一种基于生物分子识别并将靶标的生物化学信号转变成可定量检测的物理信号的分析方法，其不仅为人类探索生命现象的本质提供了重要技术支撑，同时也为重大疾病的诊断和防控提供了有力工具。其中，基于有机小分子探针的荧光成像分析，由于其生物安全性好、可修饰性强以及操作简便等优点，已被广泛地用于复杂生物体系中靶标的原位、实时、快速的无损分析检测。然而，传统小分子探针由于发射波长较短以及难以动态可逆响应等问题，在活体水平疾病的检测中面临诸多挑战。针对这些关键科学问题，本课题组开展了系列研究工作：1）为了实现了活体中生化信息的准确获取，本课题组提出“不对称电子振动”策略，实现传统荧光探针发射波长和 Stokes 位移的同步提升，增强其活体成像信背比和组织穿透深度；2）为了解决活体成像中分子探针特异性不足等问题，本课题组通过分子融合策略开发了系列高稳定性近红外二区（NIR-II）小分子染料，为激活型 NIR-II 荧光探针的设计提供了通用性平台，显著改善活体疾病检测的灵敏度和准确性；3）进一步，通过氧化-还原电势和多重分子间相互作用构建 NIR-II 高选择性可逆响应荧光探针，为活体中靶标分子的原位实时动态检测提供有力工具。

关键字 小分子探针；荧光成像；活体传感；近红外成像

参考文献

1. T. Ren, L. Yuan*, X. B. Zhang, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, 140, 7716.
2. T. Ren, L. Yuan*, X. B. Zhang, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, 57, 7473.
3. T. Ren, L. Yuan, X. B. Zhang*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60, 800.
4. L. He, T. Ren*, X. B. Zhang, L. Yuan*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61, e202211409.
5. R. Wang, T. Ren*, L. Yuan, X. B. Zhang*, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 11669.
6. X. Zhang, T. Ren*, X. B. Zhang, L. Yuan*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202410666.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

碳笼罗丹明用于生物氧化还原的化学精准调控

罗潇*
华东师范大学

生物氧化还原的精准调控对现代医学的发展具有重要意义。良性氧化应激可通过信号转导机制实现疾病治疗。活性氧的爆发引起氧化损伤，可通过修复性清除活性氧或采用以杀治伤的方法对抗疾病。设计新型化学分子工具精准调控生物活性氧，是开发氧化还原相关疾病治疗新策略的前沿研究方向。本课题组近三年聚焦创制结构新颖的碳笼罗丹明，创新分子机制，耦合荧光调控机制，开展生物氧化还原的化学精准调控。一，高效清除活性氧，缓解脑部[1]及心肌[2]缺血再灌注损伤。二，高时空分辨释放活性氧，改善阿尔兹海默病症[3]、诱导免疫原性细胞死亡抗肿瘤[4]、治疗青光眼[5]。

关键字 碳笼罗丹明，活性氧，缺血再灌，肿瘤，青光眼

参考文献

1. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144(5), 2114-2119.
2. *Bioact. Mater.* **2023**, 28, 480–494.
3. *Chem. Sci.* **2023**, 14, 11689-11698.
4. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 202402949.
5. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, accepted.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

基于分子探针与谱效导向的中药药效物质辨识体系构建及应用

田蒋为*
中国药科大学

中医药在我国医疗卫生体系中发挥着重要作用，为保障人民群众健康做出了重大贡献。中药药效物质是指中药及其复方中能够表征临床疗效的化学成分（群），阐明中药药效物质对于揭示中药科学内涵、提高中药质控水平、创制中药新药具有重要意义。然而，中药的化学成分极其复杂，如何高效筛选中药药效物质仍然是中医药现代化与国际化进程中需要重点解决的技术难题。荧光探针具有灵敏度高、特异性好、高通量、操作简便等优势，并且能够与色谱、质谱等技术联用构建谱效导向体系，为解决中药复杂体系药效物质筛选效率低的问题提供了可能。因此，课题组提出基于分子探针构建谱效导向体系用于中药药效物质筛选的新策略：针对疾病发生发展过程中的关键靶标，合成高精度分子探针实现复杂体系中目标物的精准识别与检测[1,2]，借助成像技术在细胞、组织、模式生物、整体动物水平可视化评价中药效应[3,4]。采用色谱分析技术构建中药及其复方的指纹图谱，以分子探针为靶点活性或功能效应的检测工具，将指纹图谱数据和药理学数据进行关联，建立有意义的谱-效关系，利用质谱鉴定与药效相关的化学成分（群）[5]，为中药物质基础研究提供新技术和新方法。

关键字 分子探针；谱效导向；中药；药效物质

参考文献

1. Chan, C., Zhang, W., Xue, Z., Fang, Y., Qiu, F., Pan, J., Tian, J. Near-infrared photoacoustic probe for reversible imaging of the ClO–/GSH redox cycle in vivo. *Analytical Chemistry*, **2022**, 94(15): 5918.
2. Zhang, W., Cai, F., Xu, H., Wu, Y., Yu, X., Sun, L., Zhang, T., Yu, B., Zheng, X., Tian, J. Small-molecule photoacoustic imaging probe with aggregation-enhanced amplitude for real-time visualization of acute kidney injury. *Analytical Chemistry*, **2022**, 94(27): 9697.
3. Gao, H., Sun, L., Li, J., Zhou, Q., Xu, H., Ma, X., Li, R., Yu, B., Tian, J. Illumination of hydroxyl radical in kidney injury and high-throughput screening of natural protectants using a fluorescent/photoacoustic probe. *Advanced Science*, **2023**, 10: 2303926.
4. Zhang, W., Chan, C., Zhang, K., Qin, H., Yu, B., Xue, Z., Zheng, X., Tian, J. Discovering a new drug against acute kidney injury by using a tailored photoacoustic imaging probe. *Advanced Materials*, **2024**, 2311397.
5. Li, Z., Wang, B., Sun, K., Yin, G., Wang, P., Yu, X., Zhang, C., Tian. J. An aggregation-induced emission sensor combined with UHPLC-Q-TOF/MS for fast identification of anticoagulant active ingredients from traditional Chinese medicine. *Analytica Chimica Acta*, **2023**, 1279: 341799.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

Ag+...Ag+相互作用促进的功能多肽配位聚合物水凝胶的构筑和应用

王茜、周富鹏、江云宝*
厦门大学

多肽水凝胶因其内源的生物相容性和生物降解性等优势，在细胞支架、药物控制缓释、创伤修复、生物传感器、生物催化模板等领域得到广泛应用。研究多肽凝胶构筑单元和成胶方法，对构建新型多肽基生物功能材料具有重要的科学意义和应用价值。本课题组在前期研究中，发现含巯基的半胱氨酸及其衍生物配体与 Ag^+在水溶液中发生作用，原位形成由 Ag^+...Ag^+相互作用和侧链配体间相互作用共同维系的配位聚合物和水凝胶[1-3]。据此，本研究提出一种增强功能肽链间相互作用的新策略，即于功能肽段末端修饰以半胱氨酸或其衍生物、与 Ag^+形成配位聚合物以增强肽链局部浓度和相对空间关系、进而增强肽链之间相互作用、成胶能力和凝胶的力学性能。应用该策略，以阿兹海默氏症相关的核心五肽 Aβ (16–20)、细胞粘附肽 RGD 等为基序，发现 KLVFF 肽段 C-端衍生以半胱氨酸，Ag^+ 存在下于 pH = 5 缓冲液中极易成胶，临界成胶浓度 (0.05 wt%) 较 KLVFF 五肽自身的低 2 个数量级，几无细胞毒性[4]。后续将成胶多肽序列拓展至 c(RGDfC) 环肽，发现 c(RGDfC) 在 Ag^+存在下，于 pH = 4 缓冲液中作用形成配位聚合物，亦能于 0.4 wt% 临界成胶浓度形成水凝胶。上述结果进一步说明 Ag^+配位和 Ag^+···Ag^+相互作用促进的多肽凝胶构建策略确能削弱成胶多肽设计对特定序列乃至二级结构的依赖性。后续将进一步拓展多肽结构多样性和生物稳定性以及关联的多肽凝胶的功能的调控，探索多肽凝胶在杀菌、载药、刺激响应、生物识别等功能。

关键字 Ag+···Ag+ 相互作用　配位聚合物　功能多肽　水凝胶

参考文献

1. J.-S. Shen, D.-H. Li, M.-B. Zhang, J. Zhou, H. Zhang, Y.-B. Jiang*, *Langmuir* **2011**, 27:481-486
2. Q.Wang*, S.-L. Dong, D.-D. Tao, Z. Li, Y.-B. Jiang*, *Coord. Chem. Rev.*, **2021**, 432:213717.
3. Q.Zhang, Q.Wang, X.-X. Chen, P. Zhang, C.-F. Ding*, Z. Li, Y.-B. Jiang*, *Trends Anal. Chem.*, **2018**, 109:32-42.
4. Q.Wang*, F.-P. Zhou, D.-D. Tao, J.-H. Wei, R. Cai, Y.-B. Jiang*, *Chem. Commun.*, **2023**, 59:9599-9602.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

面向公共安全领域的化学传感与可视化检测方法研究

张奎*
安徽工业大学

荧光相关光谱(FCS)(如荧光互相关光谱(FCCS)、三元相关光谱(F3CS)等)通过测定多种荧光团修饰的目标分子在极小的激光聚焦体积（小于 1 fL）内产生的荧光波动信号，进而对这些荧光波动信号进行相关函数(Correlation function)分析（如互相关和三元相关等）来获取其荧光相关光谱曲线。该类方法可原位获取游离目标分子、分子间结合物等浓度信息。它具有原位分析、分析速度快、非侵入分析等特点。基于荧光相关光谱技术发展的多组分相互作用原位实时分析系统是目前进行活细胞原位实时分析的主要科学工具之一，可进行荧光相关光谱、荧光共振能量转移分析、光子爆发计数等研究，在生命科学、医药研究等领域具有重要应用。本研究团队在国家自然科学基金委国家重大科学仪器研制项目等支持下，开展了单个活细胞内多组分相互作用原位实时分析系统研制工作；通过对该仪器研制过程中碰到的检测系统信噪比、选择性和相关函数实时运算等关键科学问题的解决，完成了激光共焦系统、扫描成像系统、信号检测系统、控制系统、数据采集和处理系统等主件的研制，研制了单个活细胞内多组分相互作用原位实时分析系统的样机。目前该样机可用于多种荧光分子或粒子的单分子/颗粒检测（含光子爆发计数、荧光相关光谱、分子间荧光共振能量转移分析等）、细胞荧光共聚焦扫描成像、活细胞内分子间结合作用的原位分析研究等。

关键字 公共安全；神经试剂；光学传感；可视化分析

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

高信息量穆勒矩阵偏振手性成像分析

崔晓燕*
华东师范大学

生物多晶材料作为一类重要的生物组成结构，其产生及生长对于生物结构形成至关重要，且其异常形成是大量疾病产生的关键，因此开发相关的分析技术是疾病研究的重要保障。同时，生物病理多晶结构保留了其生长过程中的周围环境信息，因此探究其结构对于疾病研究意义重大。穆勒矩阵偏振成像技术是一类基于穆勒矩阵偏振分析的成像技术。具有高灵敏度、大信息量的优势，解决了常规光谱仪器难以区分并排除线性光学性质影响的困难。我们结合成像分析直观可视的优势，利用穆勒矩阵偏振成像技术实现了复杂固体结构的三维分析。利用穆勒矩阵偏振成像技术，我们能够充分研究复杂固体多晶结构的三维堆积情况，了解疾病产生及发展过程中生物体系中的细微及动态变化。因此穆勒矩阵偏振成像技术作为固体结构研究的利器，在相关研究中发挥了重要的作用。

关键字 穆勒矩阵；偏振成像；生物病理晶体；光学分析

参考文献

1. Feng, X.; Wang, T.; Hao, M.; Xue, N.; Zhu, H.; Tian, Y.; Cui, X. *Chem. Commun*. **2023**, 59(22), 3297-3300.
2. Feng, X.; Chen, B.; Kong, D.; Wang, T.; Cui, X.; Tian, Y. *J. Phys. Chem. C*, **2023**, 127, 6974-6980.
3. Duan, T.; Ai, J.; Cui, X.; Feng, X.; Duan, Y.; Han, L.; Jiang, J.; Che, S. *Chem.* **2021**, 7(10), 2695-2707.
4. Zhou, Y.; Feng, X.; Wang, T.; Tian, Y.; Cui, X. *CrystEngComm* **2021**, 23(6), 1439-1446.
5. Cui, X.; Nichols, S. M.; Arteaga, O.; Freudenthal, J.; Paula, F.; Shtukenberg, A. G.; Kahr, B., *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138(37), 12211-12218.
6. Cui, X.; Shtukenberg, A. G.; Freudenthal, J.; Nichols, S.; Kahr, B. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136(14), 5481-5490.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

荧光抗癌试剂触发副凋亡和铁死亡用于胶质瘤的治疗

牛广乐*
北京理工大学

报告了血脑屏障通透的阳离子荧光抗癌试剂，可诱导副凋亡和铁凋亡有效治疗胶质母细胞瘤 GBM。这些抗癌试剂靶向线粒体，触发 ATF4/JNK/Alix 调节的副凋亡和 GPX4 介导的铁凋亡。具体地，诱导大量细胞质空泡化，伴随活性氧的产生、线粒体膜电位降低和细胞内 Ca^{2+}超载，破坏代谢并诱导细胞死亡。静脉注射的抗癌试剂成功穿过血脑屏障并靶向原位 GBM 并启动有效的协同治疗。与 FDA 批准的药物替莫唑胺（20 天）相比，在耐药性 GBM 负荷的小鼠中，该类药物显著将生存期延长至 40 天，成为耐药性 GBM 的先驱性副凋亡诱导剂，为荧光抗癌药物的开发和脑部疾病的创新治疗开辟了新的途径。

关键字 荧光探针；抗癌试剂；副凋亡；铁死亡；脑胶质瘤

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

单个活细胞内多组分相互作用原位实时分析系统研制

董朝青*、任吉存
上海交通大学

荧光相关光谱(FCS)(如荧光互相关光谱(FCCS)、三元相关光谱(F3CS)等)通过测定多种荧光团修饰的目标分子在极小的激光聚焦体积（小于 1 fL）内产生的荧光波动信号，进而对这些荧光波动信号进行相关函数(Correlation function)分析（如互相关和三元相关等）来获取其荧光相关光谱曲线。该类方法可原位获取游离目标分子、分子间结合物等浓度信息。它具有原位分析、分析速度快、非侵入分析等特点。基于荧光相关光谱技术发展的多组分相互作用原位实时分析系统是目前进行活细胞原位实时分析的主要科学工具之一，可进行荧光相关光谱、荧光共振能量转移分析、光子爆发计数等研究，在生命科学、医药研究等领域具有重要应用。本研究团队在国家自然科学基金委国家重大科学仪器研制项目等支持下，开展了单个活细胞内多组分相互作用原位实时分析系统研制工作；通过对该仪器研制过程中碰到的检测系统信噪比、选择性和相关函数实时运算等关键科学问题的解决，完成了激光共焦系统、扫描成像系统、信号检测系统、控制系统、数据采集和处理系统等主件的研制，研制了单个活细胞内多组分相互作用原位实时分析系统的样机。目前该样机可用于多种荧光分子或粒子的单分子/颗粒检测（含光子爆发计数、荧光相关光谱、分子间荧光共振能量转移分析等）、细胞荧光共聚焦扫描成像、活细胞内分子间结合作用的原位分析研究等。

关键字 荧光相关光谱、活细胞、原位分析

参考文献

1. F. Li, Z. Du, X. Huang, et al. *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 886.
2. C. Dong, Q. Wang, et al. *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 12556.
3. J. Jiang, X. Chen, et al. *Translational Psychiatry*, **2018**, 8, 153.
4. 董朝青、任吉存.国家发明专利：用于三种分子间结合作用解析的荧光三元相关光谱系统. 专利号：ZL 202110563055.3
5. C. Dong, J. Ren. Fluorescence triple-correlation spectroscopy system for analyzing interaction between three kinds of molecules. Patent No. US 11530988B1.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

气固界面能量转移催化发光传感系统研究

张立春*、吕弋
四川大学

催化发光（Cataluminescnece, CTL）是指分子在气固界面发生催化反应时产生的化学发光，其与纳米技术的结合为气体传感器的研制提供了新的发展机遇，并在环境分析、食品监测、催化剂性能评价、化学反应过程监测等领域展现出良好的应用前景。我们课题组近几年在围绕能量转移催化发光传感系统开展了初步研究[1-3]。简单地说，整个 CTL 反应可以看作是吸附-反应-解吸过程。其中，第二步催化反应过程中生成的活性中间体返回基态时会产生发光，可以人为设计和调整。如，在 YVO4 中掺杂铕后，乙醇最大 CTL 波长会从 490 nm 变为 620 nm 且信号提高 300 多倍。YVO4:Eu^{3+}的荧光发射与 620 nm 处乙醇的 CTL 发射几乎一致，表明 CTL 可能来自于 YVO4:Eu^{3+}材料的发光，据此有理由相信发生了能量转移。同样，分子在铽掺杂的 $La_2O_2CO_3$ 的催化发光中，在 555 nm 和 490 nm 处可观察到 Tb 的特征发射峰，这种能量转移不是共振能量转移，因为不存在供体的发射与受体的吸收之间的光谱重叠。因此，我们认为稀土元素的激发能与化学反应能之间存在能量传递。利用能量转移可以调节发光过程，提高发光效率和提升传感性能。基于以上，我们将铕和铽共掺杂氧化钇材料引入 CTL 传感器系统中，开发了基于能量转移的比率催化发光方法，成功地区分了 7 种化合物，包括同分异构体。进一步，将这种新型比率 CTL 传感系统应用到对低活性气体物质的识别，如苯、甲苯、乙苯和二甲苯等芳香族化合物 BTEX。此外，在 Tb 单掺杂到 $La_2O_2CO_3$ 材料构建的比率催化发光体系中，基于 Tb^{3+}自身的两个特征发射峰比值，可以很好地分辨出 15 种胺类蒸汽，从而可以对肉类的新鲜度进行评价。进一步地，利用 Dy^{3+}掺杂 La_2O_3 催化发光传感器系统，提取催化发光过程中的动力学信息（响应时间）和热力学信息（响应信号）建立指纹图谱，成功实现了对 6 种爆炸气体的即时指纹识别。这些表明能量转移 CTL 作为一种新型的气体传感原理，其发展前景非常可期。

关键字 催化发光；能量转移；气体传感器；分子识别

参考文献

1. Pei X., et al, Ratiometric cataluminescent sensor of amine vapors for discriminating meat spoilage, *Anal. Chem.* **2021**, 93, 6692−6697.
2. Jiaxi Hu, J. et al., Ratiometric Cataluminescence for rapid recognition of volatile organic compounds based on energy transfer process, *Anal. Chem.* **2019**, 91, 4860−4867.
3. Hu, J. X., Ozone-inducted ratiometric cataluminescence for aromatic compounds discrimination based on Eu,Tb co-doped MgO, *Sens. Actuators B-Chem.*, **2021**, 327, 128939.

致谢：感谢国家自然科学基金（No.22274103）的资助。

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

早期急性肾损伤多模态体系的构建及应用研究

刘玲燕、易涛*
东华大学

Early diagnosis of acute kidney injury (AKI) is crucial for improving patient outcomes and reducing mortality rates. The development of an accurate and practical diagnostic method remains challenging, however. We recently developed a two-pronged renal reporter (DHU-AKI-3) with activatable crosstalk-free multiplexed output, which accurately diagnosed early AKI by integrating in vivo and in vitro detection. Upon systemic administration, DHU-AKI-3 was selectively activated in the injured kidney, enabling the long in situ retention time of the photoacoustic signal and rapid excretion of fluorescence into urine simultaneously. In various AKI mouse models, DHU-AKI-3 achieved in situ long-term AKI monitoring that preceded clinical diagnoses. It was compatible with smartphone-assisted colorimetric urinalysis for portable diagnosis in vitro. Importantly, the mutual authentication of crosstalk-free signal output in vivo and in vitro guaranteed the accuracy of portable urinalysis of early AKI. Such a two-pronged strategy holds great promise for directly visualizing early AKI in urine, addressing the urgent need for point-of-care testing in AKI management.

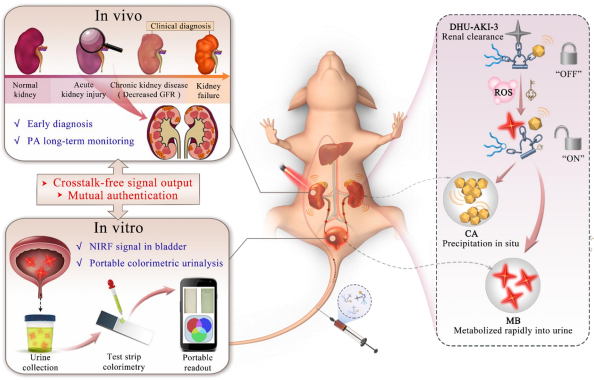


Fig. 1 Schematic illustration of two-pronged renal reporters for precise diagnosis of early kidney injury

Keywords: acute kidney injury, early diagnosis, crosstalk-free multiplexed output, portable urinalysis

References

1. L. Liu, F. Liu, D. Liu, W. Yuan, M. Zhang, P. Wei, T. Yi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022,** *134*, e202116807.
2. F. Liu, L. Liu, D. Liu, P. Wei, W. Feng, T. Yi, *Chem. Sci.*, **2022,** *13*, 10815.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

纳米酶的设计、功能性调控及其在多色可视化生物传感中的应用

杨通*、胡蓉、陈璐、程欢
云南师范大学

近些年来，纳米酶因其独特的理化性能、易于制备、好的稳定性、可调的结构及优越的催化活性，在生物医药方面有着重要的应用[1,2]。其中，可通过尺寸形貌的设计、掺杂策略、缺陷结构调控、表面改性和杂化等方式，调制纳米酶的催化活性。本课题组设计了多种高活性的纳米酶结构，并结合金纳米棒和金纳米双锥（Au NBPs）作为局域表面等离激元光谱探针，构建了多种多色可视化生物传感平台：（1）利用靶标诱导的三足 G4-DNAzyme 用于前列腺癌抗原的多色均相和固相检测[3]。（2）生物酶诱导的巯基胆碱促进棒状羟基氧化铁分解，促使双氧水产生活性氧（•OH），刻蚀金纳米双锥，从而实现对乙酰胆碱酯酶的可视化检测及其酶抑制剂的可视化筛选[4]。（3）以 ZIF-67 为模板，通过 Kirkendall 效应，制备了中空 NiCo-LDH 纳米笼。NiCo-LDH 的中空结构和缺陷态显著提高了氧化物酶活性，促进了活性氧片段的产生，实现高效快速腐蚀 Au NBPs。构建一种可视化等离子体生物传感平台用于 β-半乳糖苷酶（β-Gal）和细菌的即时检测（point-of-care testing, POCT）。（4）在理论指导下设计并合成了一种 S 精确掺杂的 Fe/Co 双原子纳米酶（S-FeCo-NC），实验和理论计算表明，S-FeCo-NC 所表现出的优异氧化酶样活性归因于 S 精确的掺杂，调控了双原子活性位点的电子结构。这种电子结构的调节优化了氧气吸附能，从而加快了酶催化反应的速率，对乙酰胆碱酯酶及其农药的可视化检测[5]。

关键字 纳米酶；设计；功能性调控；生物传感；应用

参考文献

1. X. Ding, Z. Zhao, Y. Zhang, M. Duan, C. Liu and Y. Xu, *Small*, **2023**, 19, 2207142.
2. Z. W. Jiang, X. Gong, Y. Wang, Y. F. Li and C. Z. Huang*, TrAC, *Trends Anal. Chem.*, **2024**, 178, 117862.
3. D. Y. Li, Z. Y. Li, L. Han, S. Meng, R. Hu, Y. H. Yang and T. Yang*, *Sens. Actuators, B*, **2022**, 371, 132510.
4. D. Y. Li, L. Chen, C. Y. Li, J. Zhang, Y. Zhao, Y. H. Yang and T. Yang*, *Biosens. Bioelectron.*, **2024**, 247, 115912.
5. H. Cheng, Y. Chen, M. Liu, H. Tao, L. Chen, F. Wang, L. Huang, J. Tang, T. Yang* and R. Hu*, *Chem. Sci.*, **2024**, 15, 14816-14828.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

纳米材料结构发光分析方法研究

袁智勤*、吕超
北京化工大学

随着纳米技术研究的不断推进，材料科学的研究不断向微观尺度发展。纳米材料由于其尺寸小、比表面积大、表面原子比例高等特点，其微观结构对材料性能的影响尤为显著。纳米材料的结构特征主要包括尺寸、形状、表面状态、晶格结构以及组成成分等方面，这些特征在纳米尺度下表现出独特的物理和化学性质，使得纳米材料在能源、环境、生物医学等领域具有广泛的应用前景。深入研究纳米材料结构-性能相关性，对开发先进功能纳米材料至关重要。常规表征技术能准确分析纳米材料微观结构，但无法满足日益增长的先进纳米材料快速制备和研究需求，因此开发快速、灵敏的新式纳米材料结构分析技术，对快速确定纳米材料结构、优化材料设计具有重要意义。光学分析技术具有快速、灵敏等特点，广泛用于各类检测系统设计。近年来，通过定制特殊光学检测系统，探究纳米材料结构与发光信号相关性，设计并开发了一系列纳米材料微观结构光学表征技术，并实现了纳米材料的结晶度、均一性、尺寸，以及原子配位环境的快速测定[1-3]。我们相信，合理设计光学传感单元，有望开发针对纳米材料不同微观结构的光学传感器，实现纳米材料结构的快速定性定量分析。

关键字 纳米结构；光学分析

参考文献

1. W. Guan, W. Cheng, S. Pei, X. Chen, Z. Yuan and C. Lu, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202401214.
2. Y. Jia, X. Fan, J. Yu, F. Lu, Z. Yuan and C. Lu, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 5598-5607.
3. Q. Yang, Z. Yang, F. Lu, H. Ge, Y. Du, D. Cao, Z. Yuan and C. Lu, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 4657-4664.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

悬浮单液滴测量学

刘雨昕，孙久乂，孙健，高宇毅，尹佳艺，钟铭蕊，庞树峰，刘湃，黄启燊，张韫宏*
北京理工大学

大气中存在着大量的悬浮颗粒物，亦称大气气溶胶。大气气溶胶的来源有自然源和人为源。中国经济高速发展，人类活动排放加剧，由工业和汽车尾气排放的一次气态污染气体如SO_2、VOC、NO_x等，经过复杂的二次转化，形成二次无机和二次有机人为源气溶胶，由此带来了雾霾污染事件频繁发生。如何认识雾霾的形成机制是关系到人体健康、经济良性发展的关键。本报告介绍光镊悬浮单液滴技术和受激拉曼测量原理、方法和应用，包括：1，雾霾中硫酸盐的快速生成动力学光镊受激拉曼研究方法，侧重介绍自主搭建的光镊，展现光镊的基本原理、主要部件和使用方法，针对二氧化硫与单液滴氧化动力学问题，给出了北京理工大学利用自主搭建的光镊取得的重要成果。2，有机气溶胶中半挥发性有机物的饱和蒸汽压测量，侧重介绍光镊技术的由来，以及通过简单的图像介绍光镊如何利用光动量的改变，产生光阱，捕获微颗粒，针对半挥发性有机物饱和蒸汽压测量偏差大的问题，介绍了光镊测量半挥发性有机物饱和蒸汽压的测量原理和优势，给出了实际测量结果及其与其它方法的比较。3，传质扩散系数测量，突出介绍了光镊捕获液滴的光路原理图，以及如何获得受激拉曼信号，针对复杂相态粘稠体系传质受阻问题，如何利用光镊高精度的半径测量，获得水的扩散系数。这内容成了悬浮单液滴精密测量学的主要部分，其实还有其它更广泛的应用空间，例如，如何测量气溶胶的吸湿性，如何液液相分离，如何测量单液滴的径向组成分布，如何测量液滴的表面组成等。

关键字 光镊；受激拉曼；悬浮单液滴

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

单颗粒分析技术与生物标志物测量

王健*、李亮同、黄敏
西南大学

近年来，单颗粒光散射显微技术因其较高灵敏度和实时动态的特点，在生物医药分析及化学反应的监控等领域得到了广泛应用(图 1)[1]。我们课题组利用散射光谱的位移、散射强度的变化、RGB 颜色分析及数量统计等方法，建立了 microRNA[2]、HBV[3] 等生物标志物的灵敏分析方法。为提高分析性能，一方面，我们开发新的光散射探针，增加反应活性位点，提高反应效率 [4]；另一方面，我们增加了仪器的附件，利用偏振片，研究了各向异性纳米探针的偏振特性，降低了背景，提高了分析灵敏度及准确度 [5,6]。

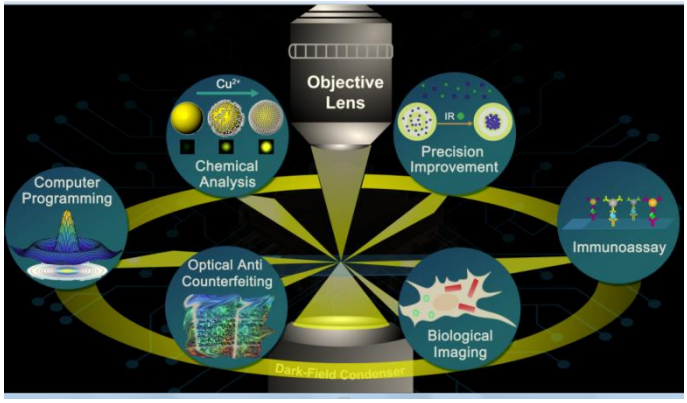


图1 单颗粒成像分析的应用

关键字 单颗粒成像；疾病标志物；偏振；光散射；金纳米棒；手性

参考文献

1. P. F. Gao, G. Lei, C. Z. Huang, *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 4707.
2. H. H. Yan, M. Huang, F. Zhu, R. Cheng, S. Wen, L. T. Li, H. Liu, X. H. Zhao, F. K. Luo, C. Z. Huang, J. Wang, *Anal. Chem*. **2023**, *95*, 3968.
3. Cheng, R.; Zhu, F.; Huang, M.; Zhang, Q.; Yan, H. H.; Zhao, X. H.; Luo, F. K.; Li, C. M.; Liu, H.; Liang, G. L.; Huang, C. Z.; Wang, J. *Biosens. Bioelectron.* **2022**, *202*, 114001.
4. Cheng, R.; Li, L. T.; Huang, M.; Zhu, F.; Li, Q.; Liu, H.; Gao, J.; Zhao, X. H.; Luo, F. K.; Wang, J. *Chem. Eng. J.* **2023**, 468, 143627.
4. J. J. Liu, H. H. Yan, Q. Zhang, P. F. Gao, C. M. Li, G. L. Liang, C. Z. Huang, J. Wang, *Anal. Chem.* **2020**, *92*, 13118.
5. J. J. Liu, S. Wen, H. H. Yan, R. Cheng, F. Zhu, P. F. Gao, H. Y. Zou, C. Z. Huang, J. *Anal. Chem*. **2023**, 95, 3968.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

用于临床疾病诊断的光学探针

于法标*
海南医科大学

细胞外囊泡作为液体活检生物标志物，在癌症诊断中有巨大的潜在应用价值。卵巢癌（OvCa）由于其高死亡率和缺乏有效的早期诊断方法，对女性健康构成了严重的威胁。有证据表明，携带来自 OvCa 的细胞特异性成分的纳米级小细胞外囊泡（sEVs）可以作为潜在的诊断生物标志物。然而，开发一种能够快速、有效、灵敏地检测纳米级 sEVs 的液体活检技术，对于实现卵巢癌的早期和准确诊断具有重要意义。通过设计一种表面增强拉曼散射（SERS）-多通道芯片检测 sEVs（S-MMEV）的方法来研究 sEVs 的表型变化，实现了通过对 sEVs 的表型进行分析成功区分健康人群和卵巢癌患者，同时对早期卵巢癌患者进行精准诊断。为基于小细胞外囊泡的癌症早期诊断提供了一种具有重要应用价值的新路径。

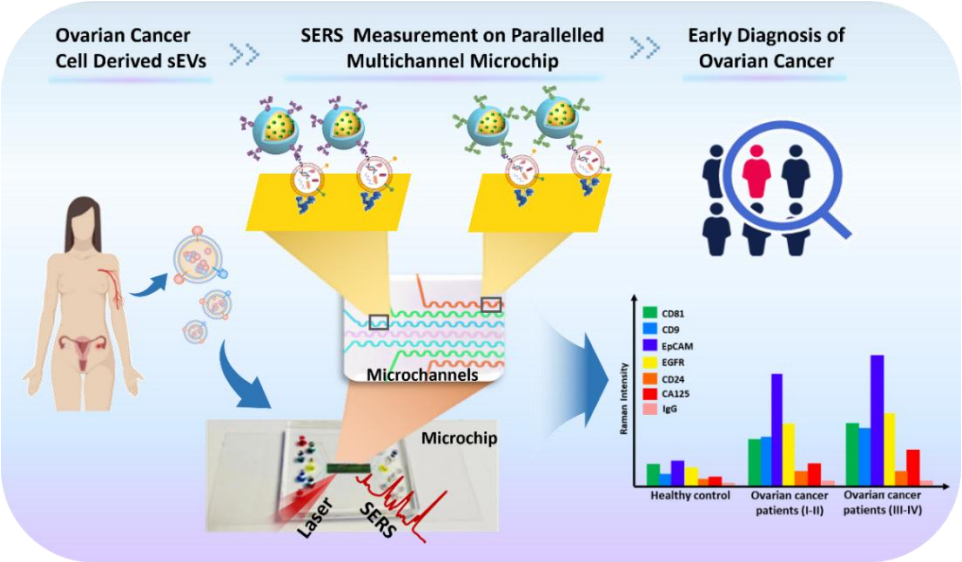


图 1. 基于 S-MMEV 检测 sEVs 表型变化对卵巢癌临床诊断的工作机制示意图

关键字 荧光探针；拉曼探针；微流控芯片；生物功能材料

参考文献

1. Sensitive phenotyping of serum extracellular vesicles on a SERS-microfluidic platform for early-stage clinical diagnosis of ovarian carcinoma. ***Biosensors & bioelectronics***, 2024, 267, 116724.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：报告

含铁金属有机框架材料在癌症治疗中的应用

万秀艳[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

铁基金属有机框架材料（MOFs）凭借其良好的生物相容性、高药物负载能力、响应性释放机制、以及多功能治疗集成特性，成为癌症治疗领域中非常具有前景的材料。我们以铁基纳米级金属有机框架材料 NMIL-100 作为外源性铁的来源，并负载葡萄糖氧化酶（GOx），然后进一步用癌细胞膜包被，获得纳米级联生物反应器。细胞内较高浓度的 GSH 使 NMIL-100 中的 Fe^{3+}还原为 Fe^{2+}，GOx 消耗肿瘤组织处的葡萄糖，切断癌细胞的能量供给，诱导细胞发生凋亡，同时还可以在肿瘤组织处积聚大量 H2O2。Fe^{2+}与 H_2O_2 发生芬顿反应，产生•OH，诱导细胞发生铁死亡，最终实现了对肿瘤的靶向性铁死亡-饥饿疗法的高效协同治疗。此外，我们还开发了一种含铁的 MOF 纳米平台用于 NO 供体（L-精氨酸）和奥沙利铂的递送，GSH 将 Fe^{3+}还原为 Fe^{2+}触发 MOF 骨架的坍塌，释放出药物。Fe^{2+}发生芬顿反应产生•OH，杀死癌细胞。•OH 还以激活 L-Arg 释放一氧化氮（NO），实现对结肠癌的气体治疗。同时，NO 还可以逆转癌细胞的化疗耐药性，使抗药细胞对化疗药物敏感，实现了对治疗抵抗性结肠癌的高效治疗。

关键字 铁；金属有机框架材料；癌症治疗

参考文献

1. X. Wan, L. Song, W. Pan, H. Zhong, N. Li, B. Tang, *ACS Nano* **2020**, *14*, 11017-11028.
2. X. Wan, Y. Zhang, T. Zheng, W. Pan, W. Zhu, N. Li, B. Tang, *Mater. Today Nano* **2024**, *26*, 100484.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：墙报

PE 改性可降解塑料性能的快速测定

邹琴*、谭超、吴同、毕爱明
宜宾学院

研究了快速测定 PE 改性可降解塑料降解行为的方法。以市场上标称可光降解 PE 塑料（保鲜膜、购物袋）为对象，通过不同波长紫外灯暴露老化实验，对比 PE 塑料的降解前后的性能变化；通过外观、失重率、紫外可见光谱、傅里叶变换红外光谱等进行表征，以此来判断其光降解行为。结果表明：样品表面随老化时间增加，出现褶皱、尺寸减小、破损等外观变化；失重率整体呈上升趋势；紫外可见光谱显示透光率、反射率整体呈下降趋势；红外光谱显示随着老化时间的增加，样品 C-C 键、C-H 键断裂生成羰基、碳碳双键、羟基等；表明样品在老化过程中发生了氧化反应生成了氧化反应产物，其结果与紫外可见光谱证明发生降解反应一致。红外光谱、紫外可见光谱、失重率的分析结果基本一致，几种方法的结合可以较好地分析 PE 可降解塑料的降解行为。

关键字 光降解；塑料；紫外可见光谱；红外光谱

参考文献

1. L.P. Domínguez-Jaimes, E.I. Cedillo-Gonzalez. *J. Hazard. Mater.*, **2021**, 413, 125452
2. 刘少通，程文华，彭文山.合成材料老化与应用, **2019**, 48(2): 24-29
3. 魏晓晓，崔芃，王大海等.分析仪器, **2022**, 240(01): 36-41.

4. Zia M, Faisal S, Shams FD, et al. *Appl. Sci. Converg. Tec.*, 2021, 30(3): 87-91

5. Jinglun Z, Linlin L, Dengxu W, et al. *Polymers*, 2022, 15(1):183-183.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流形式：墙报

全时域荧光寿命测试系统及其在热活化延迟荧光体系的应用

关妍*[1]、邱海林[2]
1. 北京大学
2. 天津东方科捷科技有限公司

光致发光寿命测量作为一种重要的分析手段，在材料科学、生物化学、环境监测以及医学诊断等多个领域发挥着不可替代的作用。发光寿命作为物质激发态特性的重要参数，能够直接反映物质的内部结构和动态行为，为科研工作者揭示物质性质提供了重要的视角。然而，在实际应用中，尤其是面对长短发光寿命共存体系时，传统的测量手段常面临显著挑战，难以准确区分和测量不同寿命组分的贡献。本文作者采用了全时域荧光寿命测试系统，对热活化延迟荧光（TADF）等一系列长短发光寿命共存体系进行了深入研究。实验结果表明，全时域荧光寿命测试系统凭借其超短的死时间、高重复频率的激光光源以及宽广的测量范围，成功实现了从纳秒到秒量级荧光寿命的准确捕捉。该系统不仅能够有效区分长短发光寿命组分，还能精确测量各组分的占比，为深入分析物质激发态特性提供了强有力的工具和技术支持。

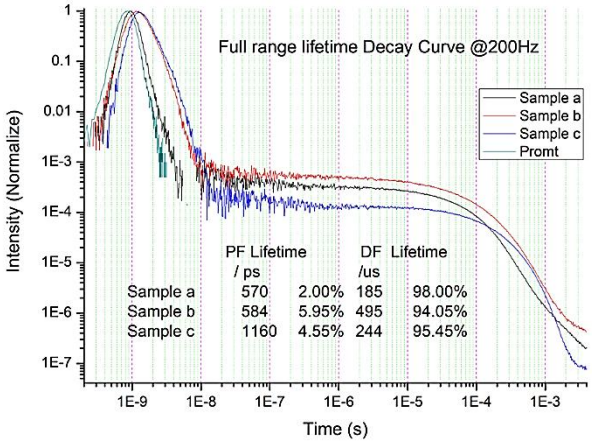


图 1

参考文献

1. C. Li, Y. Luo, Y. Huang, H. Qiu, Z. Lu. *Anal. Chem.* **2023**, 95, 8150−815.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

铁死亡的多器官成像揭示吸烟诱导的肺损伤和动脉粥样硬化进展之间的联系

黄晓晴、司维仪、高雯、唐波*
山东师范大学

吸烟（CS）是导致肺损伤和动脉粥样硬化的重要因素，两者有着共同的发病机制，并对彼此的临床表现和预后产生重大影响。尽管最近的发展引起了人们对铁死亡级联反应的关注，这使我们能够提高对这些 CS 相关疾病的认识，但器官间通讯的分子细节尚未完全阐明。在此，我们通过设计两种追踪铁死亡的近红外荧光探针（Cy-F-1 和 Cy-F-2），开发了一种多器官成像方法，以构建一个涉及肺和心血管之间同时通信机制的综合框架。Cy-F-1 表现出高水溶性，在富含 Fe^{2+}的水溶液中可以释放强烈的荧光。亲脂性三氟甲基烷基链赋予 Cy-F-2 靶向脂质的能力，可用于测量亲脂性环境中的 Fe^{2+}活性。这些特性使 Cy-F-1 和 Cy-F-2 能够分别对肺上皮细胞和泡沫细胞中的铁死亡进行可靠的成像。此外，通过 Cy-F-1 和 Cy-F-2 的体内多器官成像，我们发现 CS 暴露会导致肺和主动脉同步出现铁死亡。值得注意的是，CS 诱导的肺部铁死亡引发了炎症风暴，放大了动脉粥样硬化斑块内的铁死亡。这一过程抑制了细胞内 ABC 转运蛋白的表达，从而阻碍了脂质外流并加剧了斑块形成。这项研究证实了 Cy-F-1 和 Cy-F-2 在多器官中可视化铁死亡的潜力，并为探索多器官相互作用的分子机制提供了微观观察工具。此外，这项工作成功地绘制了 CS 诱导的肺损伤加剧 AS 过程中铁死亡相关信号通路的激活。对多个器官之间“串扰”的认识水平的提高将有助于疾病的早期诊断以及器官功能障碍治疗实践的管理。

关键字　器官串扰；多器官成像；铁死亡；荧光探针

参考文献

1. Dai Y. X., Yang W. C., Chen J. W., *et al*. Long-term effects of chronic exposure to electronic cigarette aerosol on the cardiovascular and pulmonary system in mice: A comparative study to cigarette smoke. *Environ. Int.* **2024**, *185*, 108521.
2. Duncan M. S., Greevy R. A., Tindle H. A., *et al*. Inclusion of Smoking Data in Cardiovascular Disease Risk Estimation. *JAMA Cardiol.* **2022**, *7*, 195-203.
3. Yoshida M., Minagawa S., *et al*. Involvement of cigarette smoke-induced epithelial cell ferroptosis in COPD pathogenesis. *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 3145.
4. Fang X. X., Ardehali H., Wang F. D., *et al*. The molecular and metabolic landscape of iron and ferroptosis in cardiovascular disease. *Nat. Rev. Cardiol.* **2023**, *20*, 7-23.
5. Xourafa G., Korbmacher M., Roden M. Inter-organ crosstalk during development and progression of type 2 diabetes mellitus. *Nat. Rev. Endocrinol.* **2024**, *20*, 27-49.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

原位形成小球藻复合水凝胶用于修复线粒体代谢功能治疗缺血性心脏病

吕立君、成圆、高雯、唐波*
山东师范大学

缺血性心脏病（IHD）是指因为长期心肌缺血导致的心脏疾病，预后多不良，存活率低，严重威胁了人类的生命健康。而心肌缺血（MI）是指心脏的血液灌注减少，导致供氧不足，心肌能量代谢不正常，不能支持心脏正常工作的一种病理状态[1]。当前临床治疗方法存在药不对症、血管移植物脱落，术后感染等问题，无法原位、可控地修复心脏供氧供能。线粒体是细胞内氧化磷酸化和能量产生的主要场所，调节供氧和线粒体呼吸链的电子传递是提高线粒体能量代谢的有效途径[2-3]。基于此，本研究制备了一种掺杂活性小球藻的可降解上转换纳米复合水凝胶材料，可无创地实现心脏原位供氧和心功能修复。在 980 nm 激光照射下，上转换纳米颗粒可分别产生三波段不同波长的光 （380 nm，660 nm, 800 nm），同时诱导水凝胶原位固化 (380 nm)、小球藻产氧 (660 nm)、提高 COX IV活性 (800 nm)，促进线粒体呼吸链的电子传递，产生 ATP，缓解心肌细胞缺氧和能量供应不足的问题。此外，复合水凝胶可在生物体内降解，减少了传统材料在体内长期积聚而产生的毒副作用，具有良好的生物相容性。在心肌缺血小鼠模型中，复合水凝胶能显著缓解心肌缺氧环境，促进心肌细胞线粒体生成 ATP，抑制 MI 引起的心肌损伤，恢复心功能。综上，本研究首次结合了光生物调节和微生物产氧，原位、可控地实现了缺血心肌的供氧供能，为缺血性心脏病的能量代谢治疗提供了一条有效策略。

关键字 心肌缺血，水凝胶，小球藻

参考文献

1. Vaccarino V, Almuwaqqat Z, Kim JH, et al. Association of Mental Stress–Induced Myocardial Ischemia With Cardiovascular Events in Patients With Coronary Heart Disease. *JAMA*. **2021**, *326*(18), 1818-1828.
2. Casanova A, Wevers A, Navarro-Ledesma S, Pruimboom L. Mitochondria: It is all about energy. *Front Physiol*. **2023**, *14*, 1114231.
3. Lea Dietrich et al., In situ structure and rotary states of mitochondrial ATP synthase in whole Polytomella cells. *Science*. **2024**, *385*, 1086-1090.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

双催化纳米反应器通过协同化学动力学-饥饿治疗实现抑制肿瘤转移

张惠文[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

肿瘤转移对癌症患者极具致命性，开发针对深部转移性肿瘤的有效治疗方法仍是重大挑战。在本研究中，我们通过双催化纳米反应器展示了一种芬顿反应激活的化学动力学治疗和葡萄糖氧化酶启动的饥饿协同疗法实现抑制肿瘤转移。中空介孔二氧化硅纳米粒子表面的葡萄糖氧化酶能够催化肿瘤内葡萄糖分解，生成葡萄糖酸和过氧化氢，而 Fe_3O_4 纳米粒子作为芬顿反应催化剂，可以原位催化过氧化氢生成具有强烈毒性的羟基自由基。中空结构孔中的含氧物质全氟己烷能够缓解缺氧环境，并促进双催化反应。通过癌细胞膜伪装，纳米反应器的递送效率和生物安全性得到有效提升。该纳米反应器能够实现葡萄糖耗竭和羟基自由基的连续聚集，有效抑制肿瘤转移，且副作用可忽略不计。

关键字 芬顿反应；化学动力学治疗；葡萄糖氧化酶；癌细胞膜

参考文献

1. H. Zhang, F. Lu, W. Pan, Y. Ge, B. Cui, S. Gong, N. Li, B. Tang, *Biomater. Sci.*, **2021**, *9*, 3814.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

DNA 纳米探针用于肺癌的早期检测

潘英博[1]、周萍[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

肺癌筛查和早期诊断对于改善患者预后、降低肺癌死亡率具有重要意义。为了实现肺癌的早期精准诊断，我们发展了一系列 DNA 纳米探针用于快速，高灵敏的肺癌诊断。我们开发了一种三条杠核酸试纸检测平台，结合 miRNA 引发的循环链置换反应，在一步反应后快速实现两种肺癌 miRNA 的同时检测。[1] 为了进一步提高肺癌诊断的准确性和特异性，避免假阳性信号，我们发展了一种基于 AND 型逻辑门和链式置换反应的横向流动试纸，用于四种肺癌相关 miRNA 精准高灵敏即时检测。[2] 此外，我们还发展了一种基于 DSN 酶信号放大策略的横向横流试纸用于诊断肺癌相关外泌体 miRNA。该体系成本低，操作简单，灵敏度高，并利用临床唾液和尿液样本实现了肺癌在真正意义上的非侵入性无创检测。[3] 这些 DNA 纳米探针在肺癌的早期诊断领域具有巨大的应用潜力。

关键字　肺癌；DNA 纳米探针

参考文献

1. Zhou, P.; Lu, F.; Pan, W.; Yin, J.; Li, N.; Tang, B. Cyclic Chain Displacement Amplification-Based Dual-miRNA Detection: A Triple-Line Lateral Flow Strip for the Diagnosis of Lung Cancer. *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 12301.
2. Zhou, P.; Pan, Y.; Pan, W.; Lu, S.; Yin, J.; Li, N.; Tang, B. Dual-AND Logic Gate-Based Strip Assay for Amplified Detection of Four miRNAs and Diagnosis of Lung Cancer. *Anal. Chem.* **2023**, *95*, 1280.
3. Zhou, P.; Lu, F.; Wang, J.; Wang, K.; Liu, B.; Li, N.; Tang, B. A Portable Point-of-Care Testing System to Diagnose Lung Cancer through the Detection of Exosomal miRNA in Urine and Saliva. *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 8968.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

DNA 四面体纳米诊疗探针的设计及应用

李艳华[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

DNA 作为一种遗传物质，已广泛应用于组织再生、疾病预防、生物传感、诊断、抗肿瘤药物传递和治疗等科学领域。由于 DNA 纳米结构对脱氧核糖核酸酶的不敏感性，因此被选为制备 DNA 探针的优秀候选者。DNA 四面体纳米结构是一种典型的 DNA 纳米结构，具有合成过程简单、产率高、结构清晰、稳定性好等优点。此外，官能团可以精确地排列在 DNA 四面体上，以提供在特定阶段的靶向传递或其他性能。这些独特的特征使 DNA 四面体探针成为动态监测生物分子和有效癌症治疗的理想候选 DNA 探针。

我们提出了一种新的基于 DNA 四面体纳米探针的邻近诱导 FRET 策略，用于可视化细胞和生物体的 Met 受体二聚体。通过改变受体的适配体，这一策略可能会扩展到对其他受体二聚体的可视化[1]。此外，我们还提出了一种基于 DNA 四面体的功能化纳米调节剂，特异性地诱导内质网应激，从而上调免疫原并增强免疫治疗[2]。这些 DNA 四面体纳米探针易于合成，并且在复杂的生物环境中具有优异的稳定性。我们期望 DNA 纳米探针能够促进癌症的诊断和治疗。

关键字 纳米；诊疗探针；肿瘤；成像；治疗

参考文献

1. Li, Y.; Zhang, X.; Pan, W.; Li, N.; Tang, B. A Nongenetic Proximity-Induced FRET Strategy Based on DNA Tetrahedron for Visualizing the Receptor Dimerization. *Anal. Chem.,* **2020**, *92*, 11921.
2. Li, Y.; Zhang, X.; Wan, X.; Liu, X.; Pan, W.; Li, N.; Tang, B. Inducing Endoplasmic Reticulum Stress to Expose Immunogens: A DNA Tetrahedron Nanoregulator for Enhanced Immunotherapy. *Adv. Funct. Mater.,* **2020**, *30*, 2000532.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

多肽 Dansyl-HENRYKW 对 Zn^{2+}的荧光传感检测

李连之*、冯慧云
聊城大学

合成了丹磺酰基修饰的多肽 Dansyl-HENRYKW (D-P7)。通过荧光光谱研究了该丹磺酰基修饰的多肽与不同金属离子的相互作用。结果表明，Dansyl-HENRYKW 对 Zn^{2+} 具有特殊的选择性响应，Zn^{2+} 的加入使多肽 Dansyl-HENRYKW 在 515 nm 处的荧光强度显著增强。研究了 Dansyl- HENRYKW 对 Zn^{2+} 的荧光传感性质和影响因素，多肽与 Zn^{2+}的键合比为 2:1，结合常数为 0.18×10^{12} $L^2 \times mol^{-2}$，检出限为 0.012 $\mu mol \times L^{-1}$。

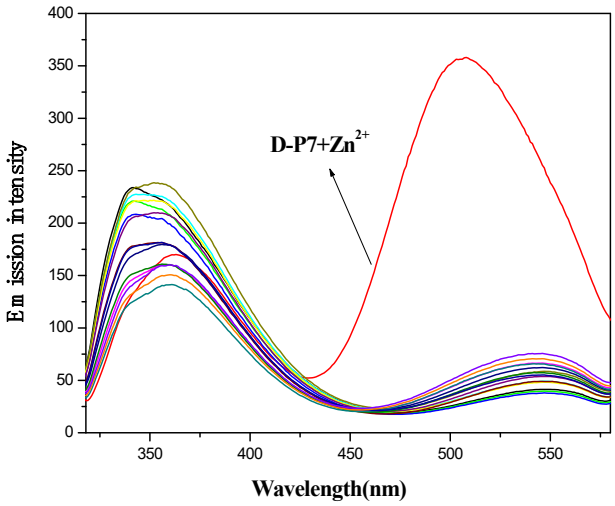


图 1. 不同金属离子存在时，D-P7 的荧光光谱

关键字 多肽；Zn^{2+}；荧光传感

参考文献

1. G.K. Walkup, B. Imperiali, *J. Am. Chem. Soc*., **1996**, *118*: 3053-3054.
2. B.P. Joshi, M. ChoW, J.S. Kim, J.Y. Yoon, *Bioorg. Med. Chem. Lett*. **2007**, *17*: 6425-6429.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

红豆杉科植物叶的拉曼光谱研究

屈永香、司民真、自兴发、段莹隆、王敏*
楚雄师范学院

为分析红豆杉叶主成分，我们对南方红豆杉、西藏红豆杉、云南红豆杉、云南榧的叶进行拉曼光谱研究。所得谱图中（图 1），1521、1189、1156、1006 cm^{-1} 附近出现较强的拉曼峰，与叶黄素的光谱一致，可知在 532 nm 激光的激发下，所测红豆杉叶表面和叶肉细胞的主成分为叶黄素，且其含量远高于大苞鞘石斛、翼齿六棱菊等有类似药理功效的其他植物。为考察叶黄素在叶面上的分布，我们对四种植物叶表面 25 个点进行面扫描，可知，各点的拉曼强度虽不相同，但峰位均与叶黄素的峰位一致，说明叶面各点均含叶黄素。后期可对红豆杉修剪的枝叶进行收集利用，为叶黄素的提取提供一种有效来源。

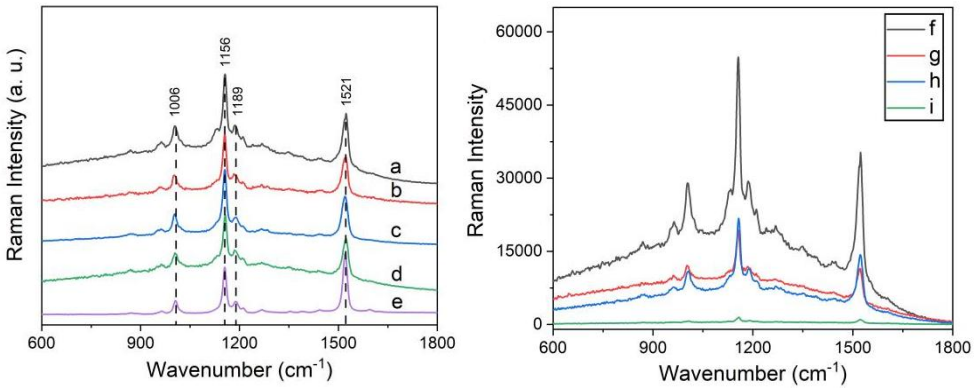


图 1 红豆杉叶表面及叶黄素的拉曼光谱，南方红豆杉（a）、西藏红豆杉（b）、云南红豆杉（c）、云南榧（d）和叶黄素(e)。四种植物叶表面的拉曼光谱，南方红豆杉（f）、云南樟（g）、翼齿六棱菊（h）和大苞鞘石斛（i）

关键字 红豆杉；拉曼光谱；叶黄素；成分分析

参考文献

1. G. Gudi, A. Krähmer, I. Koudous, et al. *Talanta*, **2015**, *143*, 42-49.
2. S. Zhang, Z.D. Sun, D.J. McClements, et al. *Food Hydrocolloids*, **2024**, *156*, 110311.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

基于表面等离子体耦合发射的水凝胶性质研究新方法：实时监测水凝胶纳米级溶胀行为

梁清波[1]、李钊[1]、翁玉华[1]、曹烁晖[1,2]、李耀群*[1]
1. 厦门大学化学化工学院
2. 厦门大学电子科学与技术学院

表面等离子体耦合发射荧光法（SPCE）利用平滑金属薄膜表面自由电子与其近场范围内的激发态荧光团相互耦合作用得到高度定向的发射信号[1]，该信号的强度、偏振性及角度分布与金属膜表面的样品尺度存在密切关系[2]，已被应用于聚合物生长过程的在线监测及薄膜材料的厚度测定等[3]。为了进一步拓展其应用范围，我们将具有优异轴向分辨率和厚度敏感性的 SPCE 法与具有出色荧光性质的聚集诱导发光（AIE）水凝胶共混体系相结合，开发出一种新的纳米尺度材料性质的研究方法。在金膜表面旋涂一层掺杂了三苯胺噻吩吡啶（TTPy）分子的聚丙烯酸/聚乙烯醇（PAA/PVA）水凝胶薄膜，利用 SPCE 法的距离相关性，并结合水凝胶薄膜随环境 pH 值的变化影响 TTPy 的分子旋转运动并产生荧光强度的变化，揭示水凝胶薄膜的膨胀和收缩行为，实现对水凝胶纳米级形态变化的实时监测（图 1）。

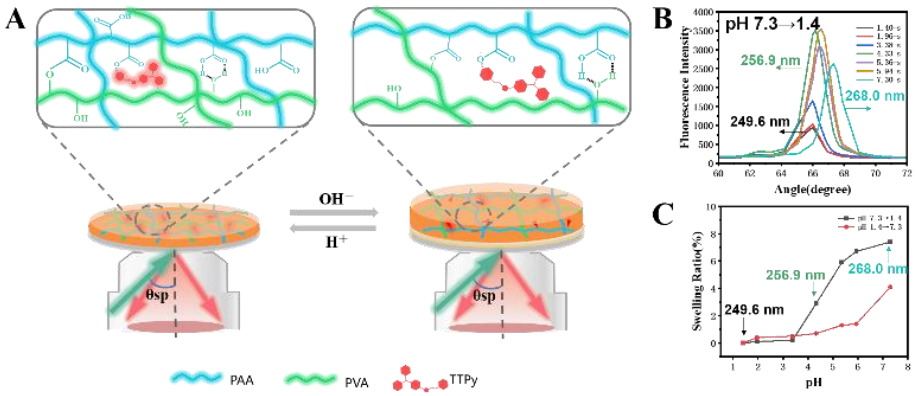


Fig. 1 A: Schematic of the AIE hydrogel SPCE chip for real-time monitoring of hydrogel nanoscale changes. B: SPCE angular distribution of AIE hydrogel SPCE chip from neutral to acidic medium. C: Swelling ratio of AIE hydrogels as a function of pH. From acidic to neutral medium (red line) and from neutral to acidic medium (black line).

关键字 表面等离子体耦合发射；聚集诱导发光；水凝胶

参考文献

1. S. Cao, W. Cai, Q. Liu, Y. Li, *Annu. Rev. Anal. Chem*., **2012**, *5*, 317-336.
2. I. Gryczynski, J. Malicka, K. Nowaczyk, Z. Gryczynski, J. Lakowicz, *J. Phys. Chem. B*, **2004**, *108*(32), 12073-12083.
3. Y. Weng, L. Xu, M. Chen, Y. Zhai, Y. Zhao, S. Ghorai, X. Pan, S. Cao, Y. Li, *Acs Macro Lett.*, **2019**, *8*(2), 223-227.
4. Y. Yang, Q. Li, H. Zhang, H. Liu, X. Ji, B. Tang, *Adv. Mater.*, **2021**, *33*(45), 2105418.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

具有聚集诱导发光特性的协同激活的双锁探针用于原位标记脂滴及精准成像动脉粥样硬化斑块

李晶晶[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

发展精准识别动脉粥样硬化斑块的成像探针对于心血管疾病的早期预警具有很大的挑战[1]。因此，我们发展了一种具有聚集诱导发光（AIE）特性的双锁逻辑门探针（Cbz-Lys-Lys-TPEB），可以同时被 H2O2 和组织蛋白酶 B （CTB）激活，用于有效地原位标记脂滴并精准“点亮”动脉粥样硬化斑块。该探针由疏水四苯乙烯（TPE）单元偶联具有 H2O2 响应的苯硼酸基团（第一个“锁”）和 CTB 可切割的亲水性肽链（第二个“锁”）合成。Cbz-Lys-Lys-TPEB 的双重锁定机制使其具有优异的分子分散状态和荧光猝灭特性。值得注意的是，H2O2 和 CTB 特异性解锁 Cbz-Lys-Lys-TPEB 的锁定位点产生了显著的 AIE 信号，这归因于裂解后疏水 TPE 残基的聚集和分子内旋转受限。此外，原位生成的强发射疏水性 TPE 残基为有效标记和追踪动脉粥样硬化斑块中的脂滴提供了最佳的成像平台。

关键字 动脉粥样硬化；聚集诱导发光；双锁探针；脂滴标记；成像

参考文献

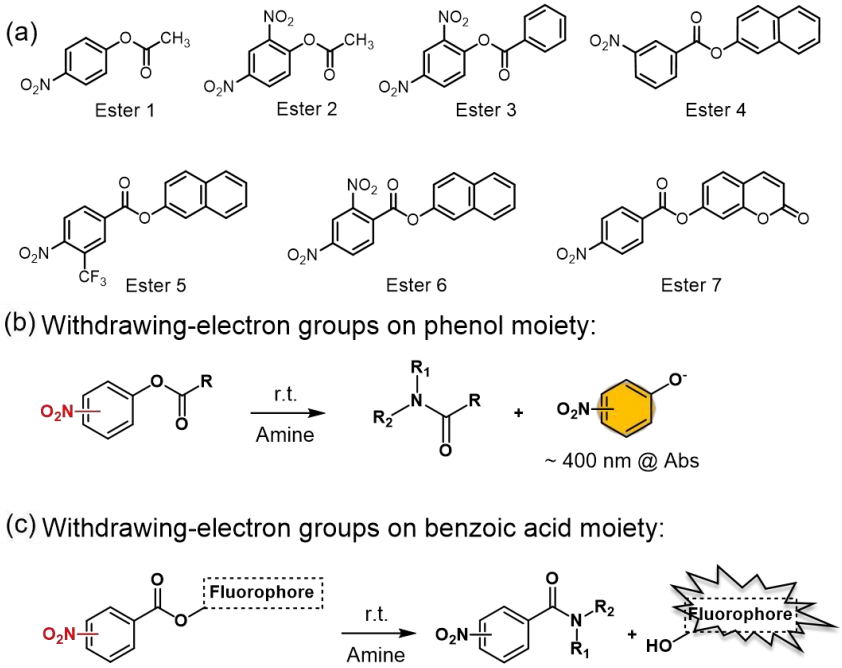
1. J. Li, K. Wang, W. Pan, N. Li, and B. Tang, *Anal. Chem*., **2022**, *94*, 12263-12273.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

温和条件下的活泼羧酸酯酰胺化反应及其光谱传感研究

钟清云、沈江珊*
华侨大学

一般来说，普通羧酸酯的酰胺化反应需要依赖催化剂、高温或较长的反应时间等实验条件[1-3]。本课题组在前期研究中，通过在芳香族羧酸酯结构上引入一些强拉电子基团如-NO_2，发展活泼羧酸酯光谱探针，在温和的实验条件下实现了甲醇醇解反应，由此构筑甲醇和氘代甲醇的识别与传感体系[4]。本研究在课题组的上述发现基础上，尝试研究在温和实验条件下活泼羧酸酯的酰胺化反应，并由此建立有机胺的光谱传感体系。



Scheme 1. (a) The molecular structures of probe esters 1-7, (b,c) The spectral-sensing methods operated in amidation reactions under mild experimental conditions, proposed in this work.

关键字　活泼羧酸酯；酰胺化反应；有机胺光谱传感

参考文献

1. K.S. Rakesh, S. Aditi, et al. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2018**, *57*, 3617−3627.
2. H. Chong, P.L. Jonathan, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, *127*, 10039-10044.
3. G.M. Christopher, et al. *Org. Biomol. Chem.*, **2017**, *15*, 3507-3518.
4. M.Y. Zhang, R.X. Ji, et al. *J. Phys. Chem. B*, **2024**, *128*, 7605−7614.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

局域表面等离子体增强用于致病菌的可视化检测及成像

赵晨曦*
中国医科大学

众所周知，细菌在极低的浓度（100 cells mL^{-1}）下即可以对人类的健康造成损伤，全球每年约有 20 %的死亡病例是由于细菌感染造成的[1]。在众多细菌感染死亡病例中，金黄色葡萄球菌作为革兰氏阳性细菌的代表具有较强的致病性和较高的致死率，感染后经常会发展成较为严重的感染性疾病[2-5]。此外，已有文献和临床数据表明金黄色葡萄球菌对抗生素较为容易产生耐药性，在大量抗生素的治疗手段下容易发展成为耐药菌[5]。因此，开发一种快速、灵敏、通用的细菌检测方法对早期诊断是迫切需要的。本研究基于表面等离子体共振（SPR）对类过氧化物酶（POD）的增强效应，构建了一种可视化、高灵敏的细菌传感策略。该策略利用 TiO_2 纳米管阵列（TNTs）的光催化特性及光在固体表面有限的穿透深度构建了 Janus 结构的管状类过氧化物酶（Pt/Au/MTNTs，POD）。并通过 Au NPs 局域表面等离子体共振效应（LSPR）产生的高能热电子显著提高了 Pt/Au/MTNTs 的催化活性。本研究以金黄色葡萄球菌（*S. aureus*）为细菌模型，将对 *S. aureus* 特异性识别的多肽通过静电吸附作用修饰在 Pt/Au/MTNTs 表面，利用比色反应对类过氧化物酶活性位点的依赖性来检测目标细菌，即：当目标物存在时，异硫氰酸荧光素（FITC）标记的多肽探针被 *S. aureus* 捕获并从 Au/Pt/MTNTs 表面脱落，从而恢复 Pt/Au/MTNTs 的类过氧化物酶催化活性。实验结果表明，Au NPs 的表面等离子体增强效应使该体系具有更低的检测限及更宽的线性响应范围，同时在实际样本中也取得了令人满意的检测结果。该策略为实现高效、灵敏的比色生物传感提供了一种简单、有效的方法，该方法不仅可以用于细菌的检测，还可以应用于生物毒素、生物标志物和癌细胞的特异性检测。

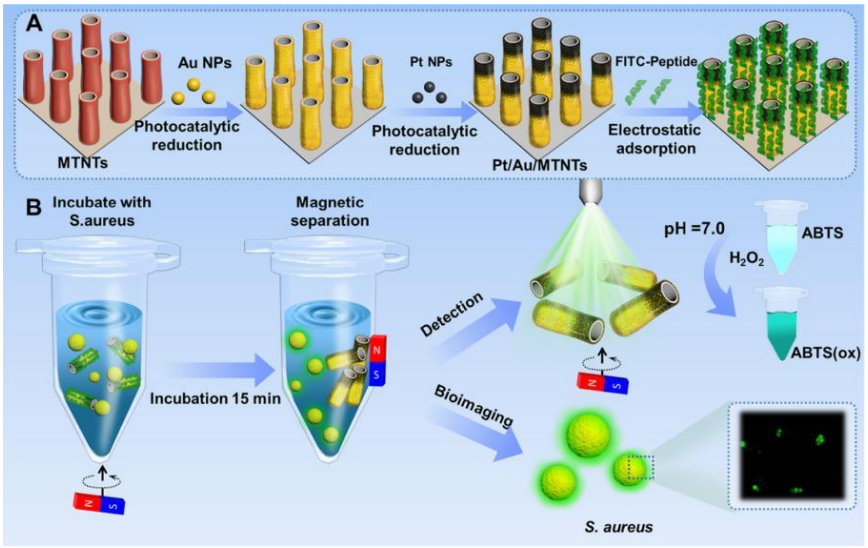


Fig. 1 (A) Preparation of Pt/Au/MTNTs as POD-like mimics. (B) Colorimetric assay for the detection and bioimaging of *S. aureus*.

关键字 细菌检测；分子成像；二氧化钛纳米管；局域表明等离子体共振；光催化

参考文献

1. C. X. Zhao, Y. J. Li, J. J. Zhao, H. L. Li, J. W. Xu, Z. D. Gao, C. Ding, Y.-Y. Song, *ACS Nano*, **2023**, *17*, 13296-13309.

2. A. Cui, L. Dong, Y. Hou, X. Mu, Y. Sun , H. Wang, X. Zhong, G. Shan, *Biosens. Bioelectron.,* **2024**, *257*, 116320.

3. W. Hu , J. Pang, S. Biswas , K. Wang ,C. Wang. , X. Xia, *Anal. Chem.*, **2021**, *93*, 8544–8552.

4. M. Jannatin, T.-L. Yang, Y.-Y. Su, R.-T. Mai, Y.-C. Chen, *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 5669-5676.

5. A. Abbas, A. Barkhouse , D. Hackenberger, G. D. Wright, *Cell Host Microbe*, **2024**, *32*, 837-851.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

具有线粒体靶向的蛋白结合光敏剂用于增强光动力治疗

石明婉[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

线粒体靶向分子光敏剂因其具有易修饰、低毒性等优点，在肿瘤光动力学治疗（PDT）中具有广泛的应用前景。但是，PDT 过程中仍存在分子光敏剂外排、活性氧（ROS）寿命短等问题。在这里，我们设计并合成了一种具有线粒体靶向和蛋白结合的有机光敏剂用于增强 PDT 的治疗效果。该光敏剂能够主动靶向线粒体并与局部巯基蛋白结合，从而有效阻止光敏剂外排并原位生成 ROS。在短时间激光照射下，光敏剂就能产生大量的 ROS，导致线粒体膜电位下降，从而造成线粒体损伤，引发细胞程序性死亡。值得注意的是，这种线粒体蛋白共轭策略缩短了激光照射时间并有效减少了对正常组织的损伤。体外和体内实验表明，光敏剂在激光照射 30 s 下能够显著抑制肿瘤生长。本研究为探索精准靶向治疗药物提供了新的视角。

关键字 蛋白结合；分子光敏剂；线粒体靶向；光动力学治疗

参考文献

1. M. Shi, W. Pan, P. Gao, Y. Chen, K. Wang, N. Li, B. Tang, *Chem. Commun.*, **2022**, *58*, 11729-11732.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

基于硒的核-卫星纳米组件重编程肿瘤相关巨噬细胞来增强癌症免疫治疗

张霞[1]、李娜[1]、唐波*[2]
1. 山东师范大学
2. 崂山实验室

肿瘤相关巨噬细胞(TAMs)是肿瘤微环境中最丰富的浸润性免疫细胞。这些 TAMs 主要极化为 M2 型巨噬细胞，促进肿瘤患者的肿瘤增殖和转移。此外，M2 型巨噬细胞可以抑制 T 细胞活性，帮助癌细胞逃避免疫系统，这不利于癌症的免疫治疗。幸运的是，TAMs 是高度可塑性的免疫细胞，在特定刺激下可以重极化为抗肿瘤的 M1 型巨噬细胞，使其能够通过吞噬和释放细胞因子攻击癌细胞。因此，将 TAMs 从 M2 型重编程为 M1 型已成为抗癌免疫治疗的一种很有前途的策略。在此，我们设计了 Se@ZIF-8 核-卫星纳米组件来重新编程 TAMs，从而增强免疫治疗效果。当纳米组件到达肿瘤组织时，硒纳米颗粒和 Zn2+响应酸性肿瘤微环境而被释放，从而共同促进活性氧的产生。这一系列事件引起线粒体损伤和 DNA 断裂，导致细胞暴露钙网蛋白(CRT)，这促使巨噬细胞吞噬癌细胞。此外，产生的 ROS 反过来激活核因子κB（NF-κB）信号通路，驱动 TAMs 从 M2 型重新极化为 M1 型，有效消灭癌细胞。此外，纳米组装体可以通过过量的 ROS 诱导癌细胞的免疫原性死亡来暴露钙网蛋白并增强巨噬细胞对癌细胞的吞噬作用。Se@ZIF-8 不仅能够抑制局部肿瘤，还能通过诱导全身免疫反应来抵抗远端肿瘤。Se@ZIF-8 核心卫星纳米组件通过逆转免疫抑制微环境为癌症免疫治疗提供了潜在的范例。

关键字　肿瘤相关巨噬细胞；免疫治疗；Se@ZIF-8 核-卫星纳米组件

参考文献

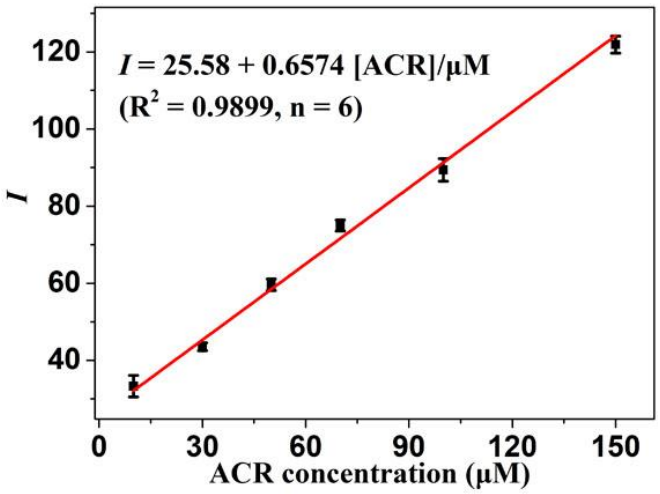
1. X. Zhang, G. Li, J. Yin, W. Pan, Y. Li, N. Li, B.Tang. *Nano Lett.* **2024**, *24*, 29, 9104–9114.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

构建一种新型的智能手机比色平台用于检测食品中的丙烯醛

曹海燕、石文兵*
长江师范学院

丙烯醛（ACR）是一种高毒性易挥发的不饱和醛，在食品储存和烹饪过程中形成，其存在对人类健康构成严重威胁。本研究旨在开发一种简单实用的比色平台，该传感平台基于3,3'，5,5'-四甲基联苯胺（TMB）的单电子氧化产物（oxTMB），在谷胱甘肽（GSH）的存在情况下，裸眼选择性地测定食品中的丙烯醛。所提出的检测方法将智能手机支持的比色测定与透明琼脂糖水凝胶相结合，提高了方法的灵敏度和适用性。紫外线照射有助于无色 TMB 与溶解氧快速反应，在没有其他催化剂和氧化剂存在的情况下生成蓝色 TMB 氧化产物。GSH 的加入可诱导 oxTMB 的减少，导致蓝色褪色和在 652nm 处的吸光度降低。然而，暴露在 ACR 中的 GSH 会被显著消耗，从而抑制 oxTMB 的褪色，引起 652nm 处吸光度的增加。基于这一发现，开发了一种简单有效的方法来定量检测 GSH 和 ACR，而无需制备纳米材料，在灵敏度、选择性、再现性和稳定性方面表现出优异的检测性能。GSH 的线性检测范围为 1~50μM（R^2=0.9997），检测限为 0.1000μM，ACR 的线性检测范为 1~70μM（R^2=0.9939），检测限为 0.0749μM。此外，在智能手机支持的比色平台的帮助下，这种方法在测定空气和真实食品样本中的 ACR 方面具有巨大的潜力。这项工作为构建简单实用的 ACR 传感器用于食品安全监测提供了思路。



图为 I 与 ACR 浓度之间的线性拟合关系。插图为：凝胶比色平台在不同浓度 ACR（0 μM、10 μM、30 μM、50 μM、70 μM、100 μM 和 150 μM）存在情况下的颜色照片。I 是根据公式下列公式计算而来。$I = (1 - \frac{I_R+I_G+I_B}{I_{bR}+I_{bG}+I_{bB}}) \times 100$ I_R、I_G、I_B 和 I_{bR}、I_{bG}、I_{bB} 分别为水凝胶比色平台存在和不存在 ACR 情况下对应的 RGB 值。

关键字 丙烯醛；比色法；水凝胶

参考文献

1. M. Du, M. M. Song, D. Wu, Y. Zhang, H. W. Song, H. J. Lv, A. B. Ke, H. X. Du and S. C. Zhao, *Food Chem.*, **2024**, *460*, 140667.

2. H. Xu, C. Zhang, R.-P. Huai, S.N. Suo, Y.W. Wang, Y. Peng, *Sensor. Actuat. B-Chem.*, **2022**, *371*, 132547.

3. S. Gupta, S. Kamil, P. R. Sinha, J. T. Rodier, S. S. Chaurasia, R. R. Mohan, *Toxicol. Lett.*, **2021**, *340*, 33-42.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

基于过渡金属配合物框架的多检测荧光探针的合成及应用

张文珠*、任俊宇、宋波、袁景利
大连理工大学

在生命科学研究中，荧光探针是获取生物体系相关信息的有力工具。随着研究的发展及深入，检测单一组分的荧光探针渐渐无法满足研究者们的需要。因此，设计及开发具有多检测能力的荧光探针成为研究的热点。近年来我们课题组设计了多个基于过渡金属配合物框架的多检测探针。设计了在不同模式下可以区分检测生物巯基氨基酸的多检测探针；设计了首个区分检测甲醛及硫化氢的双检测探针，成功揭示了在帕金森病中甲醛和硫化氢的负相关性。除此之外，设计了首个次氯酸和甲醛的双响应探针，大大提高了癌症诊断的准确性，克服了大部分单检测探针存在的假阳性问题，为未来多检测发光分子探针的设计提供了新的思路。



Fig. 1 Molecular structure of **Ru-aza-NBD** and its luminescence response mechanism towards FA and H_2S.

关键字　荧光探针；过渡金属配合物；多检测

参考文献

1. C. Liu, J. Liu, W. Zhang, Y.-L. Wang, Q. Liu, B. Song, J. Yuan, R. Zhang, *Adv. Sci.* **2020**, *7*, 2000458.
2. J. Ren, W. Zhang, X. Gao, B. Song, J. Yuan, *Chem. Eng. J.* **2024**, *486*, 150349.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：报告

光谱溶液标准物质的应用

蒋磊*、孟娇然
上海市计量测试技术研究院

分光光度计是一种分析测试领域中不可或缺的分析仪器，可基于物质分子对特定光谱的吸收特性，实现精确的定性与定量分析。该技术在理化分析、材料研究、环境监测、食品安全以及生物医药等关键领域展现出了广泛的应用价值。鉴于分光光度计的性能直接关系到分析结果的准确性和可靠性，实验室对其性能的评估与验证至关重要。在医药行业中，分光光度计的性能验证受到国内外药典的严格规范与要求，旨在保证仪器分析数据的准确无误。

为实现这一目标，实验室需采用经过严格认证的光谱标准溶液作为校准标准，全面评估仪器在波长、吸光度、杂散光、分辨率等方面的性能，从而有效实施仪器的校准与定期核查，确保仪器处于最佳工作状态，促进测量结果的有效溯源，增强分析数据的可信度。为此，本院研制了一系列光谱标准溶液，该系列标准溶液可有效评价分光光度计的各方面性能，能够满足中国药典、美国药典、欧洲药典等法规对仪器性能评价的需求。

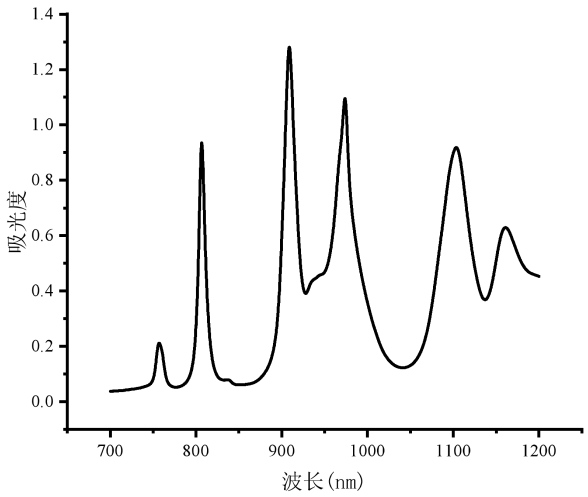


图 1. 一种全新的短波近红外标准物质谱图

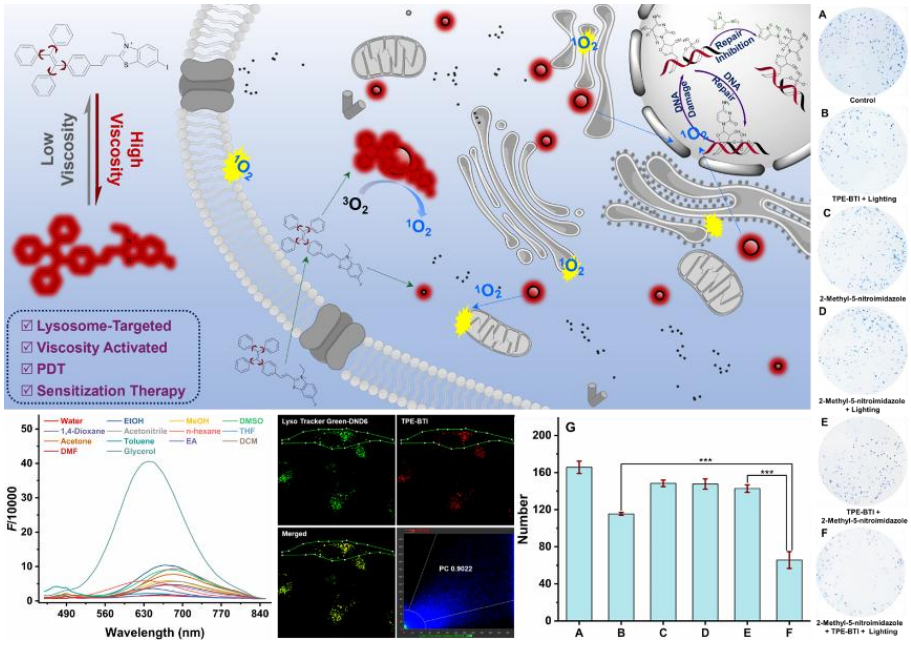
关键字 药典；紫外可见近红外；波长；吸光度；标准物质

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

利用放射治疗增敏剂增强肿瘤细胞光动力消融效果

林博[1]、赵坤仪[2]、刘春霞[1]、刘欢[1]、樊丽[2]、杜小波*[1]
1. 绵阳市中心医院
2. 山西大学环境科学研究所

与放疗等传统治疗方式相比，肿瘤光动力治疗（PDT）具有微创性、时空精度高、副作用小、无耐药性、疗效快等优点[1]。受制于传统光敏剂较低的光转化效率，PDT 效果并不理想。为了提高 PDT 的效果，科学家们利用在光敏剂中引入重原子和半导体元素等方式提高了光转化效率[2]。本文也利用碘取代的苯并噻唑和四苯乙烯构建了一个能特异性地聚集在溶酶体（细胞自噬中心和水解酶库）中的新型光敏剂 TPE-BTI。粘性的溶酶体限制 TPE-BTI 中苯环和桥联双键的旋转，抑制其非辐射跃迁，开启其近红外荧光（600 - 800 nm）发射和 PDT 能力。该特征赋予了 TPE-BTI 可视化肿瘤 PDT 治疗的能力。在白光照射下，TPE-BTI 的单线态氧（$^1O_2$）转化能力优于一些常用的光敏剂。考虑到肿瘤光动力治疗与放射治疗都是利用产生的活性氧物质（ROS）破坏活细胞中的 DNA 等生物活性大分子，从而导致细胞损伤和死亡。因此，本文进一步在 TPE-BTI 光消融肿瘤细胞中加入放疗增敏剂 2-甲基-4（5）硝基咪唑抑制损伤 DNA 的修复，提高了 PDT 治疗效果。以上结果表明，TPE-BTI 具有肿瘤可视化 PDT 治疗的能力，且放疗增敏剂 2-甲基-4（5）硝基咪唑能有效提高其治疗效果。该研究结果可为临床肿瘤 PDT 治疗提供更加高效的方案。



关键字　溶酶体靶向；粘度；近红外荧光；PDT；增敏剂

参考文献

1. Pham, T. C.; Nguyen, V.-N.; Choi, Y.; Lee, S.; Yoon, J., *Chem. Rev.*, **2021**, *121*, 13454−13619.
2. W. Liu, S. He, X. Ma, C. Lv, H. Gu, J. Cao, J. Du, W. Sun, J. Fan, X. Peng, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, e202411802.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

微等离子体辅助合成双配体铕金属有机框架材料用于比率荧光及可视化检测碱性磷酸酶

赵一兰、黄科、熊小莉、杨庆*
四川师范大学

碱性磷酸酶（ALP）是组织和器官中分布最广的水解酶之一，可调控分子运输、信号传导到新陈代谢等多种生理过程，在临床诊断中被广泛视为多种疾病的生物标志物。因此，开发简便、准确、高效的 ALP 检测方法对人体健康监测、临床诊断和基础研究都具有重要意义。迄今为止，已经报道了许多 ALP 的检测方法，荧光检测法由于具有高灵敏度、低成本、简单和易于读取等优点而取得了巨大关注。但传统的单发射荧光传感器往往容易受到来自背景信号、仪器和操作等各种无关因素干扰，影响检测准确性。

在本工作中，通过介质阻挡放电等离子体（DBD）快速合成了一种具有双配体的铕金属有机框架材料（Eu-MOFs），并以磷酸苯二钠（PPNa）为底物，建立了一种可视化检测碱性磷酸酶（ALP）的比率荧光探针。ALP 水解 PPNa 产生的磷酸根（PO_4^{3-}）可增强探针在 615 nm 处的荧光强度，而 425 nm 处保持不变，荧光强度比值 I_{615}/I_{425} 与 ALP 浓度在 0.4-7 U/L 范围内呈现良好线性关系，检出限为 0.14 U/L。同时在 254 nm 紫外灯照射下，溶液的荧光颜色随着 ALP 浓度的增加由蓝色变成了紫红色。基于此，利用智能手机辅助构建了准确检测 ALP 的可视化传感平台，线性范围为 0.4-7 U/L，检出限为 0.23 U/L。该传感器具有简便、灵敏、直观且可靠的优势，在检测血清中 ALP 浓度的实际应用中取得了令人满意的结果，具有很大的应用潜力。

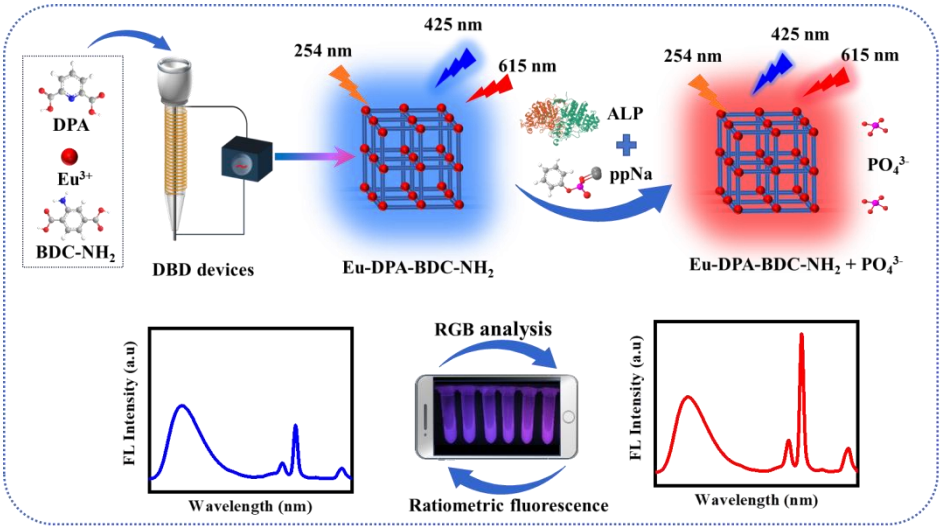


图 1. 实验流程示意图

关键字 碱性磷酸酶；双配体 MOFs；比率荧光传感；可视化检测

参考文献

1. S. Li, et al., Redox-responsive breakup of a nucleic acids@CoOOH nanocomplex triggering

cascade recycling amplification for sensitive sensing of alkaline phosphatase, *Analytical Chemistry*, **2022**, *94*, 6711-6718.

2. J. Xiong, et al., Ultrasensitive inner filter effect fluorescence sensing platform for alkaline phosphatase based on arginine surface-engineered gold nanoclusters, *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2023**, *378*, 133177.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

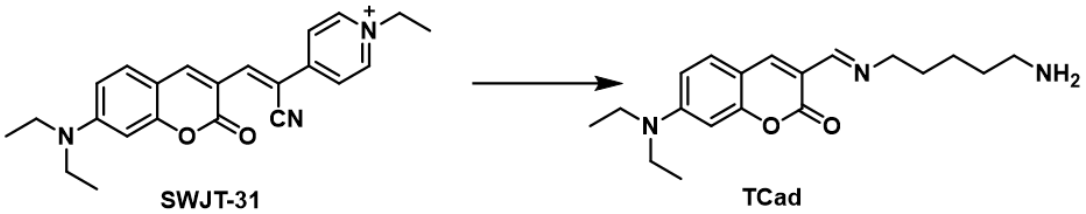
新鲜食品腐败的无损视觉检测

杜巍、王雅雯*
西南交通大学

食品安全是每个人都关心的话题，但食品安全事故频发，造成重大经济损失和人员伤亡[1]。不安全的食品会导致疾病和营养不良的恶性循环，尤其影响婴幼儿、老年人和病人。据估计，全世界每年有 6 亿人患病，42 万人死亡，3300 万人失去健康[2]。食物在生产和销售过程中的任何环节都可能受到污染，但大部分食源性疾病事件都是由于在家中、餐饮场所或市场上不正确地准备或处理食物而引起的。此外，食物储存不当也会加速食物变质。生物胺（BA）是一类具有生物活性的含氮低分子量有机化合物。大多数食物中都含有生物胺[3]，生物胺能促进人体的正常生理活动，而过量摄入则会产生不良影响。生物胺分为单胺和多胺。单胺包括尸胺、腐胺、酪胺、组胺、色胺和 2-苯乙胺，其中尸胺（Cad）是生物胺的代表。尸胺已被认为是食品腐败的标志物。它由氨基酸脱羧酶产生，过量摄入会导致人体中毒，引起头痛、血压变化、呼吸紊乱、心悸和呕吐等症状[4]。因此，检测食品的新鲜度在预防疾病方面发挥着重要作用。

目前有多种方法可用于检测生物胺，包括高效液相色谱法、毛细管电泳法、生物传感法等。这些方法都存在成本高、选择性差、样品制备繁琐等缺点。荧光分析法因其选择性好、操作简便，可用于检测多种标记物。

根据我们之前的工作，引入了吡啶乙腈作为检测 Cad 的识别基团。探针由受体（4-吡啶基丙烯腈）和供体（二乙基氨基香豆素）组成，利用吡啶单元上的阳离子增强识别基团的吸电子能力，增加探针的共轭度，从而调节吸收带，实现比色识别。



关键字　食品；腐败；检测

参考文献

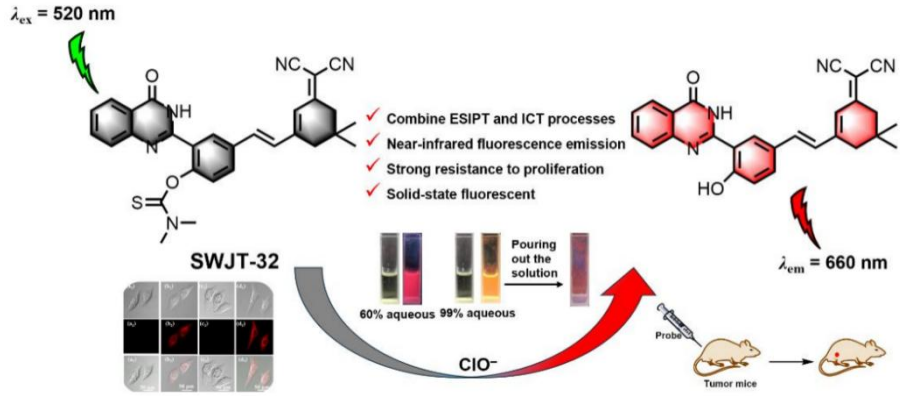
1. King, T.; Cole, M.; Farber, J. M.; Eisenbrand, G.; Zabaras, D.; Fox, E. M.; Hill, J. P. *Trends Food Sci. Tech.* **2017**, *68*, 160-175.
2. Mohammadi, Z.; Jafari, S.M.; Adv. *Colloid Interface Sci.* **2020**, *286*, 102297.
3. Sudo, N. *Front. Endocrinol.* **2019**, *10*, 504-510.
4. Ladero, V.; Enriquez, M. C.; Fernandez, M.; Alvarez, M. A. *Curr. Nutr. Food Sci,* **2010**, *6*, 145-156.

分会场：2.分子光谱学与仪器
交流类型：墙报

一种基于 HPQ 的近红外染料，用于对细胞和小鼠肿瘤部位进行原位精准成像

王雅雯*、张璐、姚雪、彭敏
西南交通大学

以二氰基异佛尔酮和 2 - (2-羟基苯基) - 4 (1H)-喹唑啉酮(HPQ)的杂化荧光团为基基本骨架，N, N-二甲基硫代氨基甲酸酯为识别基团，设计并合成了一种新型荧光探针 SWJT-32。电子供体酚羟基和电子受体丙二腈之间的电子推拉作用会产生 ICT 效应。对于 SWJT-32，N, N-二甲基硫代氨基甲酰氯与酚羟基反应生成氨基甲酸酯，从而阻断了 ICT 和 ESIPT 效应，淬灭了探针的荧光。SWJT-32 与 ClO^-反应后得到 SWJT-OH，其中暴露的酚羟基与二氰异佛尔酮分子之间的强电子斥力会增强 ICT 过程。此外，由于 SWJT-OH 的烯醇形式和酮形式之间的结构变化，ESIPT 效应明显，导致其在近红外区域发出强烈的荧光。它是基于激发分子内质子转移(ESIPT)和分子内电荷转移(ICT)两种荧光发光机制来检测次氯酸根离子(ClO^-)。该探针具有抗扩散性强、光稳定性和选择性好、成像对比度高等优点。同时，由于 SWJT-32 在活细胞中的低毒性和良好的生物相容性，也可用于检测 HeLa 细胞中的内源性和外源性 ClO^-，以及肿瘤小鼠体内的长期原位成像。因此，它可用于早期检测癌细胞，在诊断和评估癌症协同疗法方面有良好的应用前景。



关键字 荧光探针；ESIPT；ICT；原位检测；成像

参考文献

1. H.W. Liu, K. Li, X.X. Hu, L.M. Zhu, Q.M. Rong, Y.C. Liu, X.B. Zhang, J. Hasserodt, F.L. Qu, W.H. Tan, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 11788-11792.
2. Q.L. Xu, K.A. Lee, S. Lee, K.M. Lee, W.J. Lee, J. Yoon, *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, *135*, 9944-9949.
3. K. Li, T.B. Ren, S.Y. Huan, L. Yuan, X.B. Zhang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, *143*, 21143-21160.
4. L.Y. Zhou, X.B. Zhang, Y.F. Lv, C. Yang, D.Q. Lu, Y. Wu, Z. Chen, Q.L. Liu, W.H. Tan, *Analytical Chemistry*, **2015**, *87*, 5626-5631.

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：报告

SERS 的电磁场机制

易骏*
厦门大学

SERS 诞生后的首个十年，电磁场增强机制就被确立为其主导增强机制。这一理论指出，处于热点中分子的拉曼散射强度与局域场增强的四次方$|E|^4$密切相关。这一经典电磁场增强理论不仅提供了 SERS 增强过程的基本框架，也为 SERS 增强因子提供了近似的估算，因此在过去数十年中得到广泛认可。

然而，近年来随着实验技术的不断进步，研究者观察到了越来越多无法用经典理论解释的现象，如 SERS 的非线性效应及饱和现象，以及原子尺度的 SERS 效应等。这些新发现挑战了传统理论的适用范围，凸显了发展更全面理论的必要性。本报告将回顾 SERS 电磁场机制的发展历程，探讨当前经典理论的局限性，并对未来更全面、精确的电磁场机制理论进行展望。

关键字 SERS，等离激元，电磁场机制

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：报告

从材料、结构、方法等多角度逼近 SERS 检测极限浅析

方吉祥*、郭雨、史亚飞
西安交通大学

表面增强拉曼散射（SERS）技术通过金属纳米结构的表面增强效应，可实现对分子信号的显著放大，能够在极低的分子浓度下检测目标物质，因此在环境监测、食品安全和生物医学等领域具有重要应用。然而，尽管 SERS 技术在灵敏度和应用范围上取得了显著进展，但如何逼近其检测极限仍然是一个复杂的巨大挑战问题。因为，单一的谈材料的组分、尺寸、形状、形貌等，或者单一的谈何种纳米材料的结构，亦或是单一的谈采用何种前处理或者分子富集、分子识别的策略，在实际应用中都是无意义的。

从材料设计角度，几十年来，虽然研究人员设计了各种组分的各向异性及各种结构的纳米材料。然而，虽然单颗粒层面具有比球形颗粒更高的增强特性，在某些领域具有性能及应用优势，但是相应纳米粒子的聚集体及自组装体，与优化的球形纳米粒子的自组装体仍然不具有明显优势。因此，探索新的增强机制及增强方法，是增强拉曼光谱技术持续要深耕的重要科学问题。最近几年，本团队对基于离子聚沉的单分子 SERS 增强机制方面进行了深入研究。从初步研究结果看，少量卤素离子的活化作用在单分子 SERS 的发明中起到举足轻重的作用。而单从电磁场增强机制角度，通过各种纳米结构仍然很难取得稳定的超低的检测限（比如~10^{-14} M）。从实际应用角度，食品、药品、毒品检测，环境安全、生物医学检测等各种应用领域中，各种类型的分子，包括低散射截面及弱吸附分子，其属性千差外别，而且检测过程受到分子所存在的复杂基质的严重影响，因此，真实样品检测困难重重。针对不同应用领域及不同分子，深入研究其前处理方法、富集及分子操控策略具有重要的实用性。

本次报告，从材料选择、材料结构设计和不同分子富集、增强策略等多个层面，进行深入分析探讨，以便与同行分享讨论，促进国内在 SERS 50 年后，确立新的奋斗目标，开拓新的发展方向，展望新的应用前景。

关键字 表面增强拉曼散射技术，增强机制，材料选择，结构设计，方法优化

参考文献

1. Ruiyuan Zhang, Lingwei Li, Yu Guo, Yafei Shi, Jian-Feng Li*, Yi-Tao Long, Jixiang Fang*, Confined-Enhanced Raman Spectroscopy, Nano Letters 2023 23 (24), 11771-11777.
2. Lingling Zhang, Yu Guo, Rui Hao, Yafei Shi, Hongjun You, Hu Nan, Yanzhu Dai, Danjun Liu, Dangyuan Lei, Jixiang Fang*, Ultra-rapid and highly efficient enrichment of organic pollutants via magnetic mesoporous nanosponge for ultrasensitive nanosensors, Nature Communications, 2021, 12, 6849.
3. Jixiang Fang*, Shuya Du, Sergei Lebedkin, Zhiyuan Li, Robert Kruk, Manfred Kappes, Horst Hahn, Gold Mesostructures with Tailored Surface Topography and Their Self-Assembly Arrays for Surface-Enhanced Raman Spectroscopy, Nano Lett. 2010, 10, 5006-5013.
4. Zhen Liu, Zhongbo Yang, Bo Peng, Cuong Cao, Chao Zhang, Hongjun You,Qihua Xiong,* Zhiyuan Li,* and Jixiang Fang*, Highly Sensitive, Uniform, and Reproducible Surface-Enhanced Raman Spectroscopy from Hollow Au-Ag AlloyNanourchins, Adv. Mater. 2014, 26, 2431-2439.
5. Rui Hao, Yonghui Deng*, Jixiang Fang*, and Dongyuan Zhao, Three-Dimensionally

Nanometallic Superstructure Synthesized via a Single-Particle Soft-Enveloping Strategy, Nano Lett. 2024, 24 (15), 4554-4561.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：报告

准金属 SERS 基底的研制及其思考

席广成*
中国检验检疫科学研究院

消费品是食品、药品之外的生活用品。随着我国消费品市场的高速增长，消费品重大安全事件屡见报道，如“毒跑道”、“毒沙发”、“致癌性婴童用品”等，严重威胁消费者生命健康。习总书记强调，“人民对美好生活的向往，就是我们的奋斗目标”，消费品质量安全是人民美好生活的重要保障，对消费品中禁限用物质的高灵敏分析尤其重要。表面增强拉曼光谱 (SERS) 具有高灵敏和现场检测等优点，在痕量测定、真伪鉴别等领域具有广泛的应用前景，但仍然存在基底问题束缚了其大规模应用。研究团队以公共安全检测领域国家重大需求为导向，以发展 SERS 新原理和新方法为目标，开创了准金属 SERS 研究，取得了以下成果：(1) 区别于传统贵金属和半导体 SERS 基底，提出了准金属 SERS 新概念，发展了基于准金属的等离子体共振效应协同界面电荷传输的 SERS 增强新机制,为高性能 SERS 传感材料的选择和设计提供了指导。(2) 发展了准金属柔性 SERS 基底的有害物检测新策略，构建了大面积信号均匀准金属氮化物/碳化物纳米结构基底，大幅提升了非贵金属 SERS 基底的信号均匀性、稳定性和灵敏度，检测限低至 10^{-11} M。(3) 初步建立了基于准金属 SERS 基底的分离/分析集成式检测方法，率先实现了消费品等复杂基质产品中多组分禁限用物质的连续在线分离和高通量检测，为高灵敏、低成本现场快速检测新型 SERS 器件研制提供了新思路。

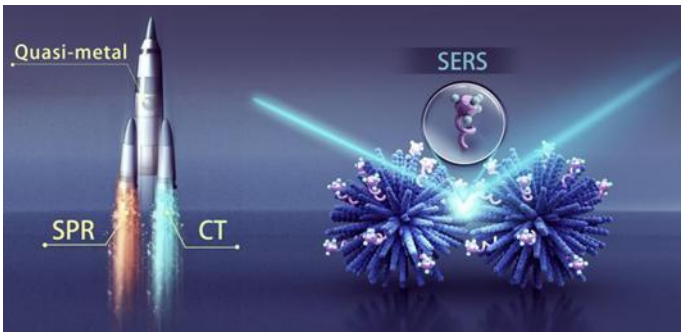


图 1. 高灵敏、高稳定、高通量的准金属拉曼光谱分析方法。

关键字 拉曼散射；准金属；纳米结构；协同增强；柔性基底

参考文献

1. H. M. Guan, W. T. Li, J. Han, W. C. Yi, H. Bai, Q. H. Kong, G. C. Xi*, Nat. Commun. 2021, 12, 1376.
2. H. M. Guan, W. C. Yi, T. Li, Y. H. Li, J. F. Li, H. Bai, G. C. Xi*, Nat. Commun. 2020, 11, 3889.
3. L. Zhang, J. F. Li, G. Y. Wei, H. F. Yang, H. Bai, G. C. Xi*, Angew. Chem. Int. Ed. 2024, e202316936.
4. L. Zhang, W. C. Yi, J. F. Li, G. Y. Wei, G. C. Xi,* L. Q. Mao*, Nat. Commun. 2023, 14, 6318.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：报告

SERS 活性纳米孔用于单分子蛋白质分析与测序

王康*、黎望、周鹃、丁燕茹、高才
南京大学

单分子蛋白质分析与测序能够为认识蛋白质结构、探索生命过程提供重要的分子信息。但是，目前最常使用的记录离子电流的方式只能从电流降、过孔时间与电流噪音三个参数上对目标单分子进行分析，对包含 20 种氨基酸和若干种排列组合方式的蛋白质分子，测量离子电流不能提供足够的蛋白质结构信息。表面增强拉曼散射（SERS）光谱可以达到单分子级的检测灵密度，如果能够与纳米孔技术结合，则可以在电流信息之外提供光谱维度的分子结构信息。这一设想的关键是构建具有高 SERS 活性的纳米孔。本研究组以石英纳米毛细管为模版，通过化学还原和电化学还原两步制备了孔径在 10 nm 以下的锥形金纳米孔，且具备单分子拉曼光谱活性。现已实现对单分子氨基酸、单分子多肽和单分子蛋白质的高通量检测，能够实现在溶液中快速获取大量单分子拉曼光谱并进行统计分析。我们还发展了一套基于布尔运算的单分子拉曼光谱统计方法，从而忽略单分子拉曼光谱强度易波动的特性，仅对其峰位置进行快速分析。通过进一步改进纳米孔结构，有可能实现对蛋白片段的序列测定。单分子蛋白 SERS 测序的难点在于即使蛋白发生去折叠，仍可能保留α螺旋等二级结构，这会使基于纳米孔的测序变得复杂，但同时也使直接观察蛋白质的二级结构成为可能。

总之，将 SERS 检测与纳米孔结合进行单分子检测与针尖增强拉曼（TERS）“固定分子，移动热点”的检测策略相反，是一种“固定热点，移动分子”的检测方式，能够在更接近实际生理条件的环境中大量、快速获取单分子蛋白拉曼光谱，进而进行统计分析。

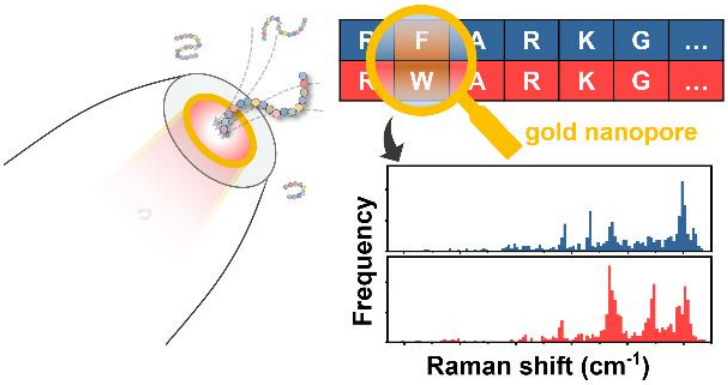


图 1. 基于 SERS 活性金纳米孔的单分子多肽分析与光谱统计。

关键字 SERS，纳米孔，单分子，蛋白，测序

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：报告

SERS 光谱的模拟：Kramers-Heisenberg-Dirac 微扰理论的启示

段赛*
复旦大学

表面增强拉曼（SERS）是一种利用纳米结构中的等离激元效应来显著增强吸附分子拉曼散射强度的技术。从理论上讲，这一过程与常规的拉曼散射过程类似，均涵盖光量子的吸收和非弹性自发辐射两个基本过程。不同之处在于，这两个过程在 SERS 中都会因为纳米结构的特殊光学性质而得到显著增强，即物理或电磁场增强效应。此外，通常由金属材料构成的纳米结构还可以通过静态和/或动态电荷转移效应，直接增大吸附在其表面的分子的拉曼散射截面，被称为化学增强效应。由于这些增强效应及纳米结构本身的复杂性，使得 SERS 光谱的理论模拟变得极具挑战性。同时，实验条件，如溶剂的种类和电化学环境的变化，也会进一步增加模拟的难度。尽管存在这些挑战，如前所述，SERS 过程原理上仍然可以通过二阶微扰理论，即 Kramers-Heisenberg-Dirac（KHD）微扰理论，来精确描述。本报告将从 KHD 理论出发，探讨在 SERS 模拟中如何精确描述各种增强效应，包括物理增强、化学增强以及这两者的耦合增强效应。此外，报告还将强调在不同激发条件（共振、预共振、非共振）下选择合适的模拟方法及其对应的实验条件，以期在复杂环境下实现对 SERS 光谱的精准理论模拟，为实验 SERS 光谱的解析提供有益的思路和方法。

关键字 SERS 模拟，KHD 理论，增强机制，激发条件

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：报告

如何开展可靠 SERS 定性分析和如何开展可解释的 AI+SERS 研究

刘国坤*
厦门大学

SERS 发现 50 年以来，基于 SERS 研究不断取得突破性进展。一方面，纳米科学的迅猛发展有力推动了基于纳米结构耦合所产生的局域表面等离激元效应的 SERS 研究从表面科学等基础研究拓展到能源材料、食品安全和环境监测等领域。另一方面，计算机硬件算力提升所带来的 AI 爆发，基于 AI 的现代化学计量学则进一步提升了基于 SERS 的谱构关系解析的准确性和可靠性，有力推动了 SERS 发展成一种普适的科研工具。本报告将讨论如下两点：1. 在面对弱吸附分子时，如何确保所测试的 SERS 光谱是来自于该分子，纳米材料制备过程中的保护剂如何影响 SERS 检测？2.在使用 AI 技术时，如何尽可能打开 AI 黑匣子，确保数据分析的可靠性？

关键字 SERS，可靠，AI

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：报告

SERS analysis of extracellular vesicles: challenges and perspectives

王玉玲*
Macquarie University

Cell-derived small extracellular vesicles (sEVs) are the specific subgroups of lipid bilayer vesicles secreted from cells to the extracellular environment. They carry distinct biomolecules (e.g., proteins, lipids and nucleic acids) from their parent cells. Therefore, the analysis of cell-derived sEVs can provide valuable information for disease progression, diagnosis and potential therapeutics. However, the use of sEVs in clinics is still limited due to their small size, low amounts in circulating fluids, and heterogeneous molecular features, making their analysis challenging. Among various analytical techniques, surface-enhanced Raman scattering (SERS) has emerged as a promising candidate for comprehensive molecular analysis of sEVs due to its ultra-sensitivity, non-destructive and rapid readout, and multiplexing capability. In this contribution, I will discuss the challenges of using SERS in sEVs analysis (both label-free and SERS-labels), and provide our perspectives to improve the reproducibility and quantification of sEVs in complex biological matrix.

关键字 SERS，extracellular vesicles

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：报告

表界面催化反应 SERS 检测与挑战

谢微*
南开大学

表界面化学反应的原位表征，需要在化学反应的环境下准确地获取表界面物种的信息，对分析方法的表面选择性、检测灵敏度和分子特异性，特别是在反应过程中进行原位测量的能力提出了很高的要求。表面增强拉曼光谱（SERS）是一种基于等离激元效应的增强光谱测量技术，十分适合在化学反应环境中分析固体表面分子的结构信息。SERS 信号的产生一般依赖金、银等贵金属增强基底，而催化剂纳米粒子则是发生表界面化学反应的关键要素，将催化剂粒子与 SERS 增强基底结合制备催化-测量双功能纳米粒子，使待测量的表界面化学反应发生在金、银等纳米结构的等离激元增强电磁场内，是实现表界面化学反应过程 SERS 原位表征的关键。

关键字 SERS，纳米粒子，表面化学，原位表征

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：报告

AI 驱动 SERS 研究的数据规范和评价指标

马昊*
厦门大学

以深度学习为代表的人工智能（AI）技术已经广泛地应用在表面增强拉曼光谱（SERS）研究，为生物医学、环境监测和食品安全等领域带来了显著的推动作用。尽管如此，AI 在 SERS 研究的应用形式以简单分类、回归任务为主，其优秀的泛化性和生成能力并未得到充分展现。数据的规范性和可靠性是实现模型卓越性能的前提条件。未来，若能整合可靠的理论和实验光谱，则有望构建高通用性、具有生成能力的谱学模型，进而实现基于 SERS 谱学的智能调控与精准生成。本报告将从 SERS 谱学的数据规范和评价指标出发，简要介绍当前现状和可能的解决思路。

关键字 SERS AI

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：报告

活细胞的 SERS 分析

徐抒平*
吉林大学

在 SERS 技术发展 50 年的历程里，细胞是一类关注度非常高的研究体系，对于其深入理解对认识生理过程和了解疾病的发生与演化规律都具有重要意义。细胞的生理功能具有动态性、实时性。SERS 研究活细胞具有一定挑战，在实验技术和方法方面具有一定特殊要求。该报告将对以往 SERS 进行活细胞研究工作进行列举和比对分析，进一步对活细胞分析的发展趋势提出思考。

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：报告

基于柔性手指阵列亚纳米间隙的光场调控及医学 SERS 检测

刘凡新*
浙江工业大学

表面增强拉曼散射（SERS）具有无标记分析检测特点，在分子标志物探测，特别是疾病生物标志物检测等领域具有重大应用前景。然而，由于人体血清中存在许多复杂成分，对特定生物标志物的检测准确性受到严重影响。在此，我们展示了一种基于 DNA 适配体修饰的纳米手指结构实现人血清中特定生物标记物 SERS 检测的有效策略。首先，通过硫醇结合将针对生物标记物的特定适配体锚定到金手指上；接着利用液体蒸发过程中产生的毛细管力，形成具有亚纳米间隙的坍塌纳米手指对结构。这种超小间隙的等离激元结构可产生极大的电磁场增强，极大地增强拉曼散射强度。最后，将该坍塌纳米手指对结构固定在生物载玻片底部，注入液体血清并在液相环境中进行拉曼特异性检测。基于这种选择性捕获的动态拉曼检测技术，可在三分钟内将特定标志物分子快速捕获到间隙热点处，得到 SERS 信号，其检测灵敏度可达到 0.001 纳克/毫升的超低浓度。该技术可以使得血清中的待检测标志物分子免受其他蛋白质的干扰，并通过生物标志物特征拉曼峰与适配体拉曼峰的比值得到高精度的分子浓度量化数据。该结构设计及检测技术显示处卓越的特异性和灵敏度，标志着 SERS 在应用于早期医疗诊断方面取得重大进展。

关键字 柔性手指阵列；适配体；亚纳米间隙；SERS；医学检测

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：报告

食品加工在线检测技术助力可持续发展

谢云飞*
江南大学

食品加工在线检测技术在保障食品安全和质量控制中起着至关重要的作用。随着可持续发展目标的提出，如何在食品加工过程中实现高效、实时、无损的检测成为研究热点。本研究旨在探索和评估拉曼光谱和表面增强拉曼光谱（SERS）技术在食品加工在线检测中的应用，以提高食品安全性、减少食品浪费并促进可持续发展。通过构建实验系统，使用拉曼光谱和 SERS 技术对果蔬、肉类、乳制品和加工食品等多种食品样品进行在线检测。拉曼光谱和 SERS 技术能够对食品中的农药残留、兽药残留、微生物污染和添加剂等有害物质进行高效识别和区分，具有较高的检测灵敏度。尤其是 SERS 技术，通过使用纳米颗粒增强效应，大大提高了检测的灵敏度和选择性，能够检测到低至 ppb 级别的污染物。结合多种传感器技术，构建了集成的食品加工在线检测系统，对食品加工过程中的质量变化进行实时监控，有效减少食品浪费。例如，拉曼光谱技术可以无损、快速、在线检测鸡蛋新鲜度，拉曼和近红外光谱技术相结合对猪肉糜新鲜度进行快速检测，保障食品卫生安全。拉曼光谱技术在食品加工在线检测中的应用，显著提高了检测效率，确保了食品质量和安全，有助于减少能源消耗和环境污染，推动食品行业的可持续发展。未来随着技术的不断进步，拉曼光谱及其相关技术将在更多食品加工环节中得到广泛应用，进一步提升食品安全监管水平和生产效率。

关键字 拉曼光谱，食品质量与安全，在线检测

参考文献

1. Zhuang, SQ; Cheng, J; Chen, ST; Xie, YF. Food Bioscience. 2024, 58, 103818.
2. Liu, YL; Ren, XN ; Yu, H; Xie, YF. Food Control. 2021, 118, 107426.
3. Chen, QM; Xie, YF; Yu, H; Yao, WR. Food Chemistry. 2023, 413, 135513.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于MOFs/金银纳米复合体的新型SERS传感器的制备及应用

张倩*、祝溱尉、庞鑫、熊宇、杨睿、杨秀培
西华师范大学

随着农业生产的迅速发展，农药被广泛用于保护作物和提高产量。福美双是一种杀虫剂，用于水果和蔬菜的杀菌。如果直接接触到皮肤或吸入体内，刺激呼吸道、消化道、肝脏，会引起多种慢性或急性疾病，因此找到一种能高效且灵敏的检测手段监测食品的福美双是非常必要的。表面增强拉曼散射 (SERS)技术，由于其指纹检测特性、样品前处理过程简单、检测快速等优点，被广泛运用于食品安全、环境化学等多个领域。常见的单一贵金属纳米溶胶 SERS 基底存在容易聚集、稳定性不好等局限。为了更好的满足应用要求，需要开发具有良好稳定性的 SERS 基底。金属-有机框架材料(MOFs)由于具有可调节的多孔结构和大的比表面积，受到广泛关注。将 MOFs 和 SERS 相结合获得新型 SERS 衬底，MOFs 可以支持和稳定金属纳米颗粒，克服传统的沉聚等问题，有效增大 SERS 热点。

本文将金银壳核纳米颗粒与 ZIF-67 相复合，制备了 Si/Au@Ag/ZIF-67 基底。进一步以对氨基苯硫酚为信号分子，检测了基底的 SERS 增强效果，其增强因子为 3.40×10^6，且均一性、稳定性和重现性良好。实际应用中，该基底可检测苹果中的福美双农药残留（图 1），检测所需时间仅为几秒，检出限可达 2.95×10^{-8} M，加标回收率为 95.7-102.3%，相对标准偏差小于 4.3%，符合农残检测要求。该方法制备的三维 SERS 基底具有简单快捷、稳定性好、灵敏度高等优点，在农药残留物的检测中具有广阔的前景。

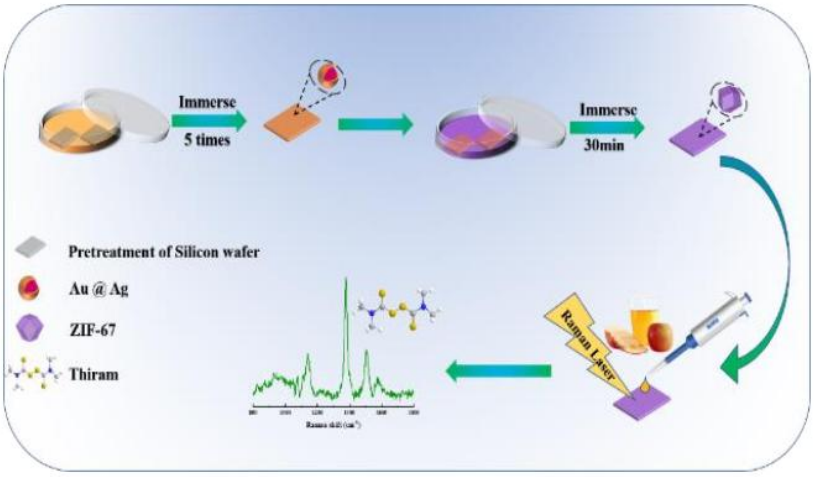


图 1. Si/Au@Ag/ZIF-67 基底的制备过程及其对福美双的检测。

关键字 表面增强拉曼，金属有机框架复合材料，农药检测

参考文献

1. Rui Yang, Baowen Zhang, Qian Zhang*, Xiupei Yang*. Analytical Methods, 2023, 15, 4851.
2. Qian Zhang*, Rui Yang, Bowen Chen, Diamond & Related Materials, 2023, 133, 109693.

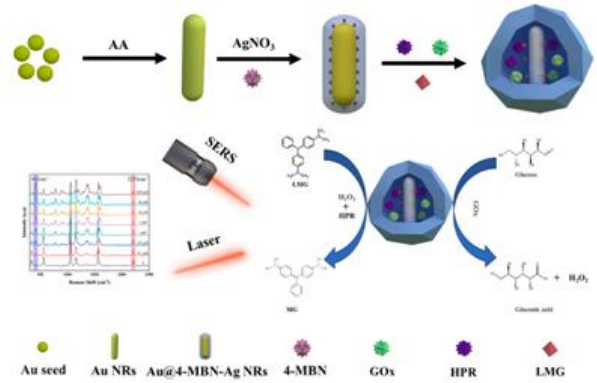
分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于 enzyme@MOFs 和比率拉曼技术设计高灵敏度 SERS 传感器用于葡萄糖的检测

孙岩，胡勇军*
德州学院

血糖水平升高可导致糖尿病、心血管疾病和肾衰竭等多种疾病的发生 1。根据国际糖尿病联盟(IDF)的报告糖尿病已成为 21 世纪威胁人类健康增长最快的疾病之一。血糖的频繁是引起大多数糖尿病并发症的主要原因 2。因此，快速准确血糖检测对早期筛查和及时控制病情至关。

表面增强拉曼散射（SERS）因其无创检测能力和独特的指纹效应、无需样品预处理、优异的灵敏度、实时检测等优点，已被广泛地应用于各类分析检测中。具有高灵敏度，高特异性和存储稳定性的衬底材料对于表面增强拉曼散射的实际分析应用至关重要。为了获得更稳定、可重现的 SERS 信号，我们基于 MOFs 材料设计了比率 SERS 传感器。在这项工作中，我们将 4-巯基丁腈(4-MBN)封装在 Au@Ag NRs 中作为内标(IS)，并将其与隐色孔雀石绿(LMG)、葡萄糖氧化酶(GOx)、辣根将过氧化物酶(HPR)包裹在 ZIF-8 中，制备串联酶催化比率 SERS 传感器 Au@4-MBN@Ag@LMG@ ZIF-8(GOx, HPR)，用于唾液中葡萄糖的检测。实验结果表明，我们所构建的检测方法具有线性范围宽（0.1 ~ 100 μM）、检测限低（0.03 μM）及特异性高等优点。这项工作提供了一种新的酶催化 SERS 传感器的设计策略。



关键字 表面增强拉曼散射，比率检测，金属有机框架，葡萄糖检测

参考文献

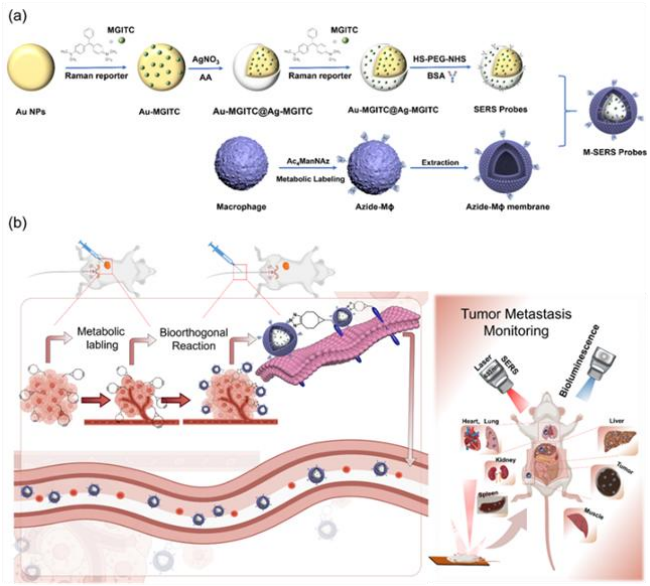
1. Q. Wang, C. Jiao, X. Wang, Y. Wang, K. Sun, L. Li, Y. Fan, L. Hu, Biosens. Bioelectron., 2023, 221, No.114908.
2. Y. Gao, Y. Huang, J. Chen, Y. Liu, Y. Xu, X. Ning, Anal. Chem., 2021, 93, 10593–10600.
3. Y. Sun, Y. S. Zhang, H. T. Ren, H. X. Qiu, S.H. Zhang, L. Qiao, Y. J. Hu, Talanta, 2024, 271, No. 125647.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

生物正交靶向 SERS-生物发光双模态成像实时示踪三阴性乳腺癌器官转移

王锐*、张伟、王思ム、张点奇、于法标*
海南医科大学

三阴性乳腺癌（TNBC）具有高侵袭性，易发生远端器官转移，预后较差，亟需有效的手段对早期转移进行监测。传统的临床成像技术，如 MRI 和超声，往往缺乏检测小转移性病变的敏感性，可能无法提供有效的监测信息。本研究将 SERS 成像和生物发光成像与生物正交标记技术相结合，以增强 TNBC 器官转移的实时跟踪。巨噬细胞膜包覆 SERS 探针能增强探针的免疫逃逸，提高体内循环时间。在 4T1-Luc 肿瘤细胞表面进行代谢标记，通过生物正交反应 SERS 探针能精确靶向肿瘤细胞。建立小鼠原位 TNBC 模型，利用临床药物阻断转移途径，在多个时间点进行 SERS 和生物发光成像，以监测肿瘤生长和器官转移；进而实现了对临床样本的有效检测。双模态成像策略能有效监测 TNBC 的远端器官转移，旨在改善早期检测和干预策略，从而提高患者预后。



关键字 三阴性乳腺癌，生物正交标记，SERS-生物发光双模态成像，器官转移

参考文献

1. H. Chen, S. Lin, D. Zhang, Y. Xing, F. Yu, R. Wang, Chem. Eng. J. 2023, 470, 144024.
2. C. Qiu, W. Zhang, Y. Zhou, H. Cui, Y. Xing, F. Yu, R. Wang, Chem. Eng. J. 2023, 459, 141502.

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：墙报

新一代免疫层析检测技术平台--- 基于 SERS 的高灵敏定量免疫层析法

邓安平*
苏州大学

首先对免疫层析法（ICA）的发展进行简单回顾，然后从以下几个方面对近年出现的基于表面增强拉曼光谱（SERS）的高灵敏定量免疫层析法进行重点介绍：(1) 免疫探针的构成；（2) 拉曼活性信号分子；(3) 基底材料；(4) 多组分同时检测；(5) 多模态检测；(6) 便携式 SERS-ICA 读卡仪；(7) 应用领域。最后对第三代免疫层析检测技术平台（SERS-ICA）作了一些展望。

关键字 高灵敏定量免疫层析法，表面增强拉曼光谱，表面增强拉曼光谱免疫层析法

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于表面增强拉曼散射的疾病高精准诊断

李俊容*
华中师范大学

表面增强拉曼散射（SERS）技术结合纳米材料独特的光学和物理学的性质以及与生物体系良好的兼容性等优势，已成功应用于呼吸道传染性疾病和癌症相关生物标志物的检测，但仍然面临着以下关键问题和挑战：1）目标物识别分子通常在 SERS 平台上采取随机的识别位点取向，这降低了 SERS 平台和生物标志物之间的亲和力并限制了检测的灵敏度。2）传统的 SERS 平台较难在单分子水平同步检测多种生物标志物，无法准确真实评估疾病状态和实现精准的疾病诊断。鉴于上述挑战，我们围绕如何提高识别亲和力以及满足实时原位同步获取多元信息两大方面，开展了如下工作：1）设计纳米酵母 SERS 平台，实现识别分子在各类材料表面简易功能化且分子识别位点定向分布，提高传感平台和目标物之间的亲和力，实现了 COVID-19 及癌症的高灵敏筛查[1-3]；2）发展数字化 SERS 纳米柱平台，取得了单分子水平多种癌症生物标志物的同步分析，实现了癌症的精准诊断和治疗动态追踪[4, 5]。我们力图推进新型 SERS 平台向实际应用转化。

关键字 表面增强拉曼散射，生物标志物检测，多元分析，精准诊断

参考文献

1. Junrong Li, Christopher B Howard*, Shuvashis Dey, Kym Lowry, David M. Whiley, Simon Puttick, Stephen Rose, Richard J. Lobb, Alain Wuethrich*, Selvakumar Edwardraja* and Matt Trau*. A universal reagent for detection of emerging diseases using bioengineered multifunctional yeast nanofragments. Nat. Nanotechnol. 2023, 10, 1222-1229.
2. Junrong Li, Rui Guan, Alain Wuethrich*, Mingzhe Yan, Jing Cheng, Guorong Liu, Jianbo Zhan, Matt Trau, and Yao Sun*. High Accuracy of Clinical Verification of Electrohydrodynamic-Driven Nanobox-on-Mirror Platform for Molecular Identification of Respiratory Viruses. Anal. Chem. 2024, 96, 11, 4495-4504.
3. Junrong Li, Meiqin Li, Alain Wuethrich, Rui Guan, Lihui Zhao, Cong Hu, Matt Trau, and Yao Sun*. Molecular Stratification and Treatment Monitoring of Lung Cancer Using a Small Extracellular Vesicle-Activated Nanocavity Architecture. Anal. Chem. 2024, 96, 7651-7660.
4. Junrong Li, Alain Wuethrich*, Abu A.I. Sina, Han-Hao Cheng, Yuling Wang*, Andreas Behren, Paul N. Mainwaring and Matt Trau*. A Digital Single-Molecule Nanopillar SERS Platform for Predicting and Monitoring Immune Toxicities in Immunotherapy. Nat. Commun. 2021, 12, 1087.
5. Junrong Li, Abu A. I. Sina, Fiach Antaw, David Fielding, Andreas Moeller, Richard Lobb* Alain Wuethrich*, and Matt Trau*. Digital Decoding of Single Small Extracellular Vesicle Phenotype Differentiates Early Malignant and Benign Lung Lesions. Adv. Sci. 2022, 10, 2204207.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

醇配体含量在高温热注入法合成 AZO NPs 体系中对杂原子掺杂量、粒子形貌和光学性质的影响

阮伟东*[1]、滕若楠[1]、周铁莉[2]
1. 吉林大学
2. 长春大学

通过高温热注入方法，在反应过程中锌源与铝源投料比以及其他参数、反应条件保持不变，仅通过调节锌源（即硬脂酸锌）与醇（1，10-癸二醇）的反应比例，投料的摩尔比例分别为 1:2.5、1:5.0、1:7.5、和 1:10.0。得到了具有不同形貌及在近中红外区具有不同局域等离激元共振（LSPR）吸收性质的铝掺杂氧化锌纳米粒子（AZO NPs）[1]。醇在反应过程中既作为配体与金属有机物反应使之形成氢氧化物后脱水形成氧化物晶格网络，又充当表面活性剂，影响纳米粒子的生长[2]。因此，投入不同含量的醇，不仅影响了 Al3+掺杂进 ZnO 内的含量，也获得了不同粒径和形貌均匀的 AZO NPs，更重要的是醇含量影响了 AZO NPs 的光学性质，三价铝离子对二价的锌离子进行的异价掺杂会导致自由载流子密度的增加，并且当自由载流子密度达到 1021 cm^{-3} 时，会导致金属掺杂半导体化合物在近红外或中红外（NIR 或 MIR）产生 LSPR 性质，而 ZnO NPs 在红外区是没有 LSPR 性质的[3]。随着对 AZO NPs 光学性能和制备工艺的进一步优化，AZO NPs 在近中红外区的应用前景将更加广阔。

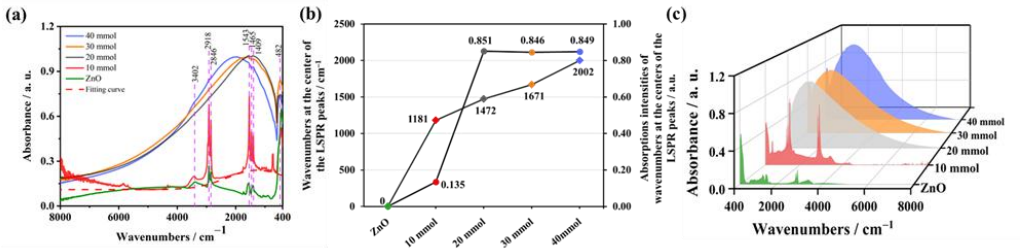


Figure 1. (a) The NIR-MIR absorption spectra of ZnO NPs and AZO NPs with different levels of alcohols. (b) Plots of wavenumbers versus absorption intensity at the centers of the LSPR peaks. (c) 3D illustration of the NIR-MIR absorption spectra of AZO NPs.

关键字 铝掺杂氧化锌纳米粒子（AZO NPs），近红外或中红外（NIR 或 MIR），局域等离激元共振（LSPR）

参考文献

1. Buonsanti, R.; Llordes, A.; Aloni, S.; Helms, B. A.; Milliron, D. J., Tunable Infrared Absorption and Visible Transparency of Colloidal Aluminum-Doped Zinc Oxide Nanocrystals. Nano Letters 2011, 11 (11), 4706−4710.
2. Della Gaspera, E.; Chesman, A. S. R.; van Embden, J.; Jasieniak, J. J., Non-injection Synthesis of Doped Zinc Oxide Plasmonic Nanocrystals. Acs Nano 2014, 8 (9), 9154−9163.
3. Luther, J. M.; Jain, P. K.; Ewers, T.; Alivisatos, A. P., Localized surface plasmon resonances arising from free carriers in doped quantum dots. Nature Materials 2011, 10 (5), 361−366.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

气凝胶态 SERS 技术集群在军工领域相关微痕量分析中的应用

何璇*，王子寒
中国工程物理研究院

基于能带耦合共振增强传感机制，率先发展了气凝胶态结构的 SERS 调控方法，通过调控气凝态材料表面氧空位、形貌、比表面积、非晶态等关键参量。获得气凝胶材料缺陷态能级，促进电荷转移效率[1]。获得高灵敏及特异性的气凝胶 SERS 材料。将半导体 SERS 增强因子首次调控到与贵金属相当的指标，半导体气凝胶 SERS 材料的增强因子（EF）为 10^8。并突破了从混合组分中高特异性检测微痕量炸药分子的难点。实现了对炸药 TNT、NTO、RDX、HMX 等无标记的高灵敏检测，检出限为 10^{-8}mol/L。获得了兼具高灵敏性及选择性的传感材料[2-4]。

其次，创新发展 SERS 声悬浮、SERS-数字微流控等现场样品前处理及检测技术，实现了微痕量混合样品的转移、分离、浓缩、检测等现场快速处理。首次实现了高灵敏定性及现场快速定量[5-9]。针对炸药检测安全性及谱学灵敏性，集成更适合含能材料等危化品分析的光谱仪。装置拉曼位移分辨率≤4.5cm^{-1}，波数准确性≤±3cm^{-1}。采集了 400 多种常见单质炸药、高分子、配方及常用溶剂，建立了现场未知物鉴定的数据库。嵌入主成分分析模型，通过特征峰搜寻，相似度检索与匹配度耦合相关，高准确的对未知物开展快速判定，最终实现对现场某些混合材料的成分判定。

基于以上 SERS 器件及便携式拉曼光谱装置，开展军工武器相关微痕量分析任务。针对某产品涂层变色等急难问题，开展了未知微痕量物质的分析工作，对产品离奇变色原因破案，并为全链条排查提供支持。气凝胶态 SERS 技术集群的发展，为武器产品相关问题的解决提供了新的技术支持。

关键字 气凝胶，SERS 炸药，微痕量检测

参考文献

1. W. Liu, Z. H. Wang, X. H. Tang, et al, X. He, *Advanced. Optical Materials.*, **2023**, 2300730.
2. W. Liu, Z. H. Wang, et al, S. Cui, X. He, *Carbon*, **2023**, 202, 389.
3. W. Liu, X. He, *Advanced Materials Technologies*, **2021**, 2101169.
4. Y. Liu, X. He, et al. *Sensors & Actuators: B. Chemical*, **2019**, 297,13487.
5. W. Liu, Z. H. Wang, et al, S. Cui, X. He, *ACS Sensors,* **2023**, 8, 1733.
6. Z. H. Wang, et al, S. Cui, X. He, et, al, X. He, *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2024,** 134934.
7. Z. H. Wang, et al, S. Cui, X. He, *Talanta,* **2023**, 258, 124460.
8. X. He, et al. *Sensors & Actuators: B. Chemical*, **2020**, 311,12767-12774.
9. X. He, et al. *Sci. China Chem.,* **2019**, 8,1064.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

Au-Ag_2S 纳米粒子结构演化对其在光催化、光热及光动力治疗方面影响的 SERS 探究

王月、马若飞、徐章润*
东北大学

Au-Ag_2S 纳米粒子因其出色的光吸收特性、可调节的光电性质以及可控制的结构尺寸备受关注[1]。但是，Au-Ag_2S 纳米粒子容易发生光生电子-空穴复合，降低光电转化效率，从而限制了其应用[2]。尽管目前已经通过改变材料的组成和尺寸等多种方法改善了 Au-Ag_2S 纳米材料光生电子-空穴对的分离[3]。然而，关于结构演化对 Au-Ag_2S 纳米粒子的光电性能的具体影响，仍需进一步研究。因此，本文设计并制备了不同结构的 Au-Ag_2S 纳米粒子，并将其应用于光催化降解污染物、表面增强拉曼散射（surface-enhanced Raman scattering，SERS）原位检测、靶向光动力和光热治疗的研究中。通过考察不同结构的 Au-Ag_2S 纳米粒子对光催化性能、光动力和光热治疗效果的影响，总结了纳米粒子的结构、性质与性能之间的关联规律。并且，以该关联规律为理论依据，实现了三维（3D）SERS 监测肿瘤细胞内 ATP 分子的时空分布情况，为肿瘤的精准靶向治疗提供了及时可靠的信息。

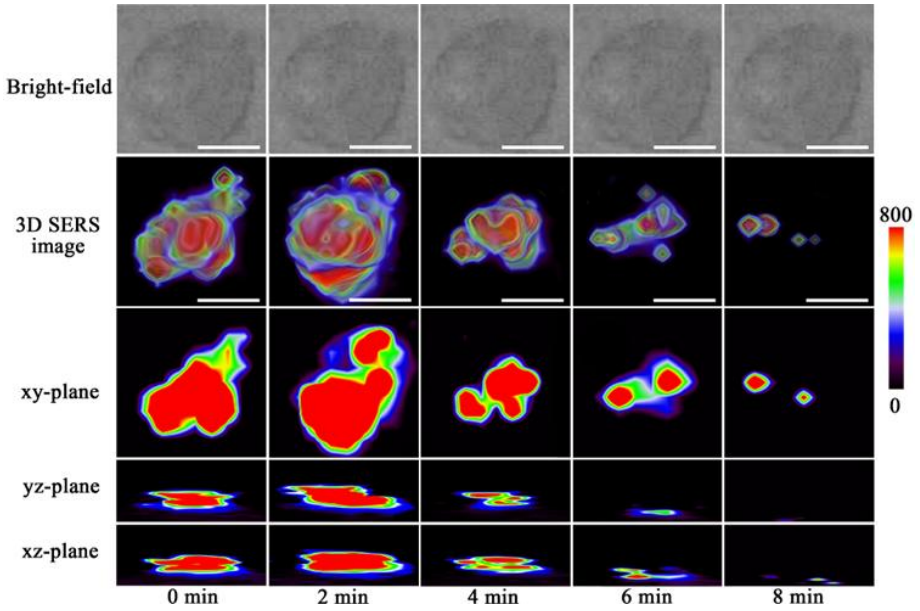


图 1. Au-Ag_2S Janus 纳米粒子光动力治疗 HeLa 细胞 0、2、4、6 和 8 分钟后的明场以及 3D SERS、xy-面、yz-面和 xz-面成像图像。使用位于 2226 cm^{-1} 处的 SERS 强度用于 SERS 成像

关键字 纳米粒子，结构演化，SERS，光催化，光动力治疗

参考文献

1. Ben-Shahar Y, Stone D and Banin U. Chemical Reviews, 2023, 123(7), 3790-3851.
2. Ma R, Gao H, Wang Y, Xu Z and Wu Y. Applied Surface Science, 2023, 636, 157770.
3. Yuan L, Geng Z, Xu J, Guo F and Han C. Advanced Functional Materials, 2021, 31(27), 2101103.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

柔性 SERS 传感器的气体小分子精准测量研究

李丹*
上海应用技术大学

本研究构建了一种纸基传感器件（PAD），可实现苯甲醛（BA）荧光和表面增强拉曼光谱（SERS）双传感检测（图 1）。当加入 BA 后会诱导席夫碱反应，导致功能材料分解并产生明显的荧光和 SERS 信号，因此，该纸基传感器不仅可用于 BA 的荧光传感器，还可作为一种高灵敏 SERS 基底用于 BA 的分析检测。该研究不仅为气体小分子的精准检测提供新的技术支持，还为智能传感器件的设计及应用提供新的研究思路。

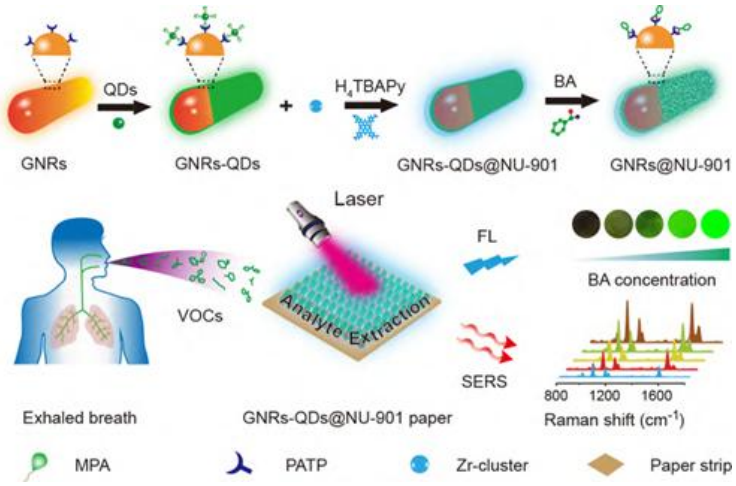


图 1. PAD 构建及其用于 BA 双传感检测示意图。

关键字 表面增强拉曼光谱，柔性材料，气体分子，精准分析

参考文献

1. Z. Xia, D. Li, W. Deng, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 4924-4931 (**Cover Paper**).
2. L. Chen, R. Peng, W. Deng, J. Huang, D. Li, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 9834-9841 (**Cover Paper**).
3. R. Peng, L. Guo, L. Chen, L. Liu, W. Deng, D. Li, Anal. Chem., **2024**, 96, 15117-15125 (**Cover Paper**).
4. Q. Zhang, D. Li, X. Cao, H. Gu, W. Deng, *Anal. Chem.*, **2019**, 91, 11192-11199.
5. D. Li, H. Duan, Y. Ma, W. Deng, *Anal. Chem.*, **2018**, 90, 5719-5727.

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：墙报

高灵敏度 SERS 检测平台应用于毒素和核酸分析

杨霞*
西南大学化学化工学院

表面增强拉曼光谱（SERS）具有指纹图谱丰富、操作简单的优点，广泛应用于检测食品中的毒素和癌症的核酸生物标志物。然而，SERS 检测的灵敏度和选择性需要提高。我们制备了智能和均匀的拉曼增强基底，如金螺旋纳米粒子、核壳 Au@PB@金用于检测福美双和莱克多巴胺等。同时，我们开发了 DNA 纳米结构引导的等离子体纳米结构、非贵金属纳米材料，如 WO3 空心微球、Sn1-xCexO2 纳米花、CeO2 纳米颗粒作为拉曼增强基底。此外，还设计了各种核酸级联扩增信号放大策略，如催化发夹组装（CHA）信号放大策略、混合链式反应（HCR）结合 Mg2+依赖性 DNA 酶切割核酸信号放大策略等，以构建 SERS 生物传感器，用于快速痕量检测 microRNA。这些研究为提高 SERS 性能提供了重要指导，为毒素分析和癌症早期诊断提供了新的平台。

关键字 表面增强拉曼，核酸生物标志物，有害分子，DNA 结构，半导体增强基底

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于诱导机制的拉曼纳米探针用于生物标志物检测

许婧文、徐静、李俊翰、宋焱焱*
东北大学

拉曼光谱能够提供大量指纹信息，为生物标志物的检测提供解决方案。然而，复杂的光谱通常需要通过数据分析后才能对目标物进行准确分析。含三键（炔基、氰基等）的分子在拉曼沉默区（1800−2800 cm^{-1}）具有特征峰，能够消除背景拉曼信号的干扰。基于目标物诱导机制，我们通过设计在静默区产生拉曼信号的纳米探针实现了对目标物的识别并原位探究了识别机理。

金属有机框架结构（MOFs）由金属中心和有机配体构成，能够通过对二者的设计将其作为纳米反应器，实现对目标物的识别和检测。我们首先通过调控有机配体合成了 Chiral-Fe-MOFs，并利用其介孔结构将具有类葡萄糖氧化酶性质的 Au NPs 修饰到 Chiral-Fe-MOFs 中。Au NPs 能够催化氧化葡萄糖产生葡萄糖酸和 H_2O_2，而 H_2O_2 能够随后将 Chiral-Fe-MOFs 的金属位点还原并和亚铁氰酸根反应原位生成在拉曼静默区产生信号的普鲁士蓝（PB）。基于 PB 在~2150 cm^{-1} 处 C≡N 的振动峰，实现对 L/D-Glu 对映选择性的测定。该平台对其余单糖对映体也表现出良好的识别能力，为拉曼技术在对映体传感中的应用提供了新方法。

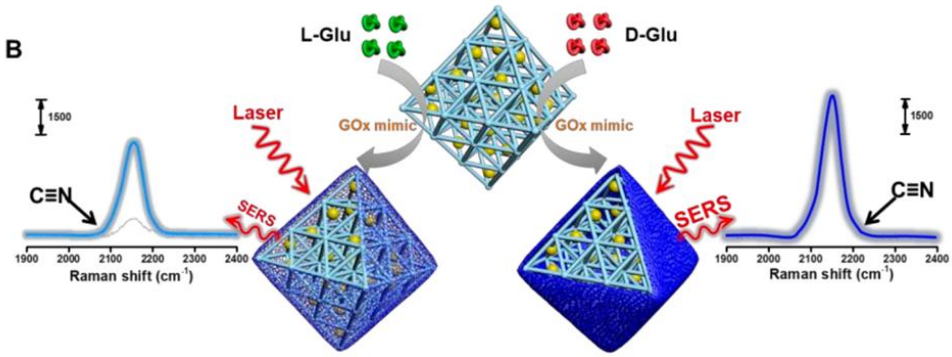


图1. 基于普鲁士蓝信号的SERS传感器设计，用于L/D-葡萄糖的识别和定量分析

关键字 拉曼静默区，普鲁士蓝，生物标志物

参考文献

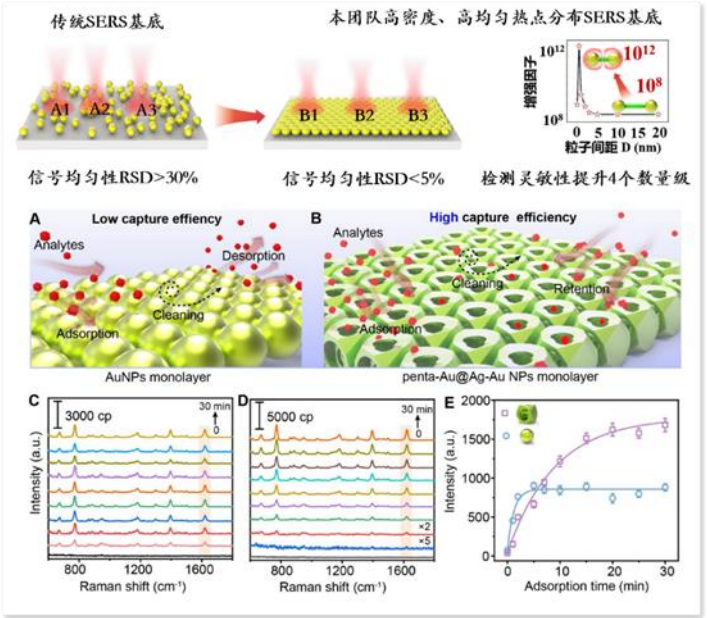
1. H. Liu, X. Gao, C. Xu, D. Liu, *Theranostics* **2022**, 12, 1870-1903.
2. J. Xu, J. Li, X. Liu, X. Hu, H. Zhou, Z. Gao, J. Xu, Y.-Y. Song, *Chem. Sci.*, **2024**, 15, 7308-7315.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

高密度、高均匀热点分布的 SERS 基底

宋丽平、刘怿、黄又举*
杭州师范大学

表面增强拉曼散射(SERS)检测性能的主要评价指标如灵敏度、信号重现性主要取决于 SERS 探针材料。SERS 增强机制主要是电磁场增强，其强度来源于数十个平方微米的拉曼光斑内部探针增强信号的集成。因此，为了实现 SERS 传感器的高性能，以下两个核心挑战亟待突破：(1)光斑范围内纳米探针的超高单分散性。(2)光斑范围内纳米探针的分布均匀性。基于此，本团队的工作主要集中于以下三部分：首先，本团队提出了 “晶核化学锚定”定向可控生长概念，实现了 SERS 探针基元的精准合成。通过优化探针粒子形态、组分、间距等因素，精准制备了多种、多级热点集成放大的 SERS 探针基元，并成功调控了探针基元吸收波长与拉曼光源波长完美匹配，实现了单粒子探针基元 SERS 信号放大的最大化。其次，本团队提出了两种液-液界面 SERS 探针基元自组装策略，分别为化学交联界面自组装和液-液界面瞬时空间限域自组装，实现了可自支撑、宏观大面积的 SERS 膜探针的制备。相比于单粒子探针基元，膜探针具有高密度和高均匀 SERS 热点的优势，极大提升了 SERS 传感器的检测灵敏性和信号重现性。最后，本团队基于精准调控的纳米粒子膜探针策略，构筑了一系列 SERS 生物传感器件，实现了其在食品、医疗及环境三个领域的高性能检测。



关键字 SERS，高密度热点，界面自组装，传感检测

参考文献

1. **L. Song**, B. B. Xu, Q. Cheng, X. Wang, X. Luo, X. Chen, T. Chen, Y. Huang, *Science Advances*, **2021**, 7, eabk2852
2. L.Jiang, X. Wang, J. Zhou, Q. Fu, B. Lv, Y. Sun, **L. Song,*** Y. Huang*, *Advance Sciences*, **2024**, 11, 2306125.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

多重竞争型适配体 SERS 适配体传感体系结合机器学习对多种食品污染物的同时高灵敏检测

陈俊霖，林洪，曹立民，隋建新，王凯强*
中国海洋大学

食品污染在世界范围内频繁发生，已成为全球关注的问题，因此食品污染物的同时检测至关重要。本研究引入了一种新颖的方法，将神经网络与便携式双重 SERS 适配体传感器相结合，以实现氯霉素和雌二醇的同时高灵敏检测。此策略有效地减少了传统多重竞争性 SERS 适配体传感器中特征拉曼峰的相互干扰。在此传感系统中，信号探针包括修饰有巯基-氯霉素适配体的 Au@4MBA@Ag NPs 以及巯基-雌二醇适配体修饰的 Au@DTNB@Ag NPs。捕获探针包括分别修饰有巯基-氯霉素适配体互补链以及修饰有巯基-雌二醇适配体互补链的磁性纳米花。通过电磁场模拟验证了同时检测过程中信号分子与捕获分子带来拉曼“热点”不可控的现象。为提高检测准确性，建立了神经网络模型，结果表明模型的训练集、测试集、验证集和总集的 R^2 分别为 0.963，0.976，0.991 和 0.970。最后使用十组光谱数据进行验证，将实际浓度与预测浓度进行对比，平均误差为 244μg/L。与线性回归、随机森林和支持向量机模型相比，所构建的新方法神经网络模型展现出了更高的精确度和清晰度。这种新技术为准确和高灵敏度的多种食品污染物的同时检测提供了理论支持。

关键字 同时检测，食品污染，神经网络，表面增强拉曼光谱

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于 AuNRs@ZIF-8 复合固态基底对农药 4-ATP 的 SERS 检测

周敏、赵航*、张攀硕、孙洪恒、陈静茹
中国海洋大学

4-ATP 是一种重要的农药中间体，毒性高，易被人体吸收使蛋白质变性，导致紫癜和高铁血红蛋白。目前，检测 4-ATP 可用的检测方法存在耗时、成本高等缺点，传统 SERS 检测基底中可同时满足便携性和特异性等要求的较少。本文选取金纳米棒（AuNRs）和 ZIF-8 的组合为制备检测 4-ATP 的高性能 SERS 衬底提供了一种可行的策略。

AuNRs 因特有的棒状形貌使自身长径比可变，LSPR 波长可调，是制造 SERS 衬底的理想选择之一。本文采用双表面活性剂（CTAB-NaOL）种子生长法制备 AuNRs，为纳米粒子提供更多的尖端与热点，从而起到增强局部等离子体共振的效果。实验发现了 AuNRs 长径比与紫外可见吸收光谱吸收峰之间的规律，改变制备过程中 AgNO3 的添加量，用 SEM 对其形貌进行表征，得到了吸收峰波长在 668、685、727、738、783、817 和 810 nm 的金纳米棒粒子。最终选取吸收峰 783 nm、长径比 3.03 的金纳米棒与 785 nm 激发光相匹配，并采用时域有限差分法(FDTD)构建模型完成数字仿真计算验证其可行性。

由于 ZIF-8 通过π-π电子相互作用捕获 4-ATP 且 ZIF-8 壳层中的-COOH 基团可与农药 4-ATP 中的氨基进行静电和配位相互作用，因此，本文以 AuNRs 为核生长 ZIF-8 外壳，可吸附和富集 4-ATP 分子，将更多的 4-ATP 分子带入基底的有效电磁增强区域。通过在 2-MIM、$Zn(NO3)_2$、CTAB 的混合液中加入 AuNRs 来实现 ZIF-8 的生长，实验结果说明随着 CTAB 溶液浓度的增大，ZIF-8 对 AuNRs 的包裹率逐渐下降，因此我们可通过控制 CTAB 的浓度来调控 ZIF-8 的包裹率。AuNRs 溶液中 CTAB 浓度下降至 10^{-5}M 时，采用空气/水界面自组装工艺制备成的 AuNRs@ZIF-8 固态基底对 4-ATP 分子的检测限可至 10-9M。在 1078 cm^{-1} 处，4-ATP 的特征峰强度波动很小，RSD 值为 5.79%。由于其高灵敏度、良好的重现性和对 4-ATP 分子的高选择性，制备的 AuNRs@ZIF-8 基底可以说是实现 4-ATP SERS 检测的良好选择。

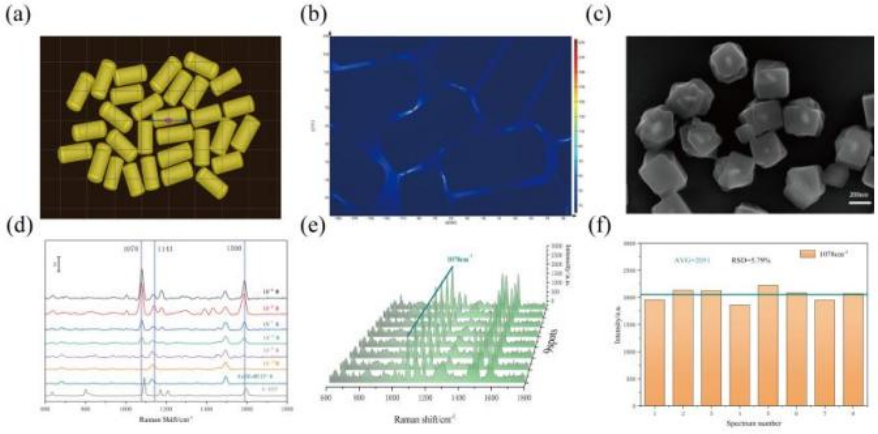


图 1. （a）SEM 图的 FDTD 建模；(b)FDTD 模拟电场分布图；（c）AuNRs@ZIF-8 的 SEM 图；（d）AuNRs@ZIF-8 基底对 4-ATP 的检测；（e）浓度范围为 10^{-5}-10^{-10} M 的 4-ATP 的 SERS 光谱；（f）1078 cm^{-1}8 个随机点强度分布的相应直方图。

关键字 SERS，金纳米棒，ZIF-8，4-氨基苯硫酚

参考文献

1. Tian Z F, Pei J X, Yu X, et al. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 969: 172416.
2. Xu H, Sun Y, Pei J, et al. Journal of Alloys and Compounds, 2024: 175198.
3.Lafuente M, De Marchi S, Urbiztondo M, et al. ACS sensors, 2021, 6(6): 2241-2251.
4.Lu Y, Zhang X, Zhao L, et al. Nature Communications, 2023, 14(1): 5860.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于 SERS 阵列的痕量瞬态物种检测

郝祺*
东南大学

表面增强拉曼散射(Surface-enhanced Raman scattering, SERS)能够清晰地反应出待测分子官能团的振动或转动信息，是一种能够识别特异性化学信息的“指纹”光谱技术，被广泛地应用于生物医学检测、催化能源等相关领域。但是在 SERS 研究中，“热点”区域只占个等离激元纳米材料表面的 0.2-1%左右，靶分子大概率吸附在非“热点”区域，极大地限制了 SERS 的灵敏度和重复性。如何操控靶分子并使其吸附在“热点”区域是当前 SERS 研究领域内的一个难点和瓶颈。

基于上述问题，我们利用多孔阳极氧化铝模板制备出 Au@Al_2O_3-Au-Au@Al_2O_3 三聚体纳米阵列，基于材料与目标分子的吸附性，在三聚体中设计陷阱颗粒并捕获目标分子。这种方法保证了目标分子能够稳定地落在中“热点”区域，从而提高了分子的检测灵敏度。通过实验，我们证明 Au@Al_2O_3-Au-Au@Al2O3 基底能够实现单分子 SERS 信号的检测，并应用于肺癌细胞的分型筛查。基于上述技术，我们进一步将 SERS 阵列应用于人体汗液分泌物的实时检测，对运动过程的尿酸代谢进行了研究，并将 SERS 阵列应用于催化反应过程中瞬态中间体的监测，为催化机理的揭示提供了光谱学依据。这种方法借助多孔纳米模板技术实现了“热点”的精准构筑，为研究“热点”区域的分子行为、高效的传感检测以及监测催化反应中间过程提供了一种新的技术手段。

关键字 纳米阵列，表面增强拉曼散射，等离激元，催化

参考文献

1. X. Zhao, X. Liu, D. Chen, G. Shi, G. Li, X. Tang, X. Zhu, M. Li, L. Yao, Y. Wei, W. Song, Z. Sun, X. Fan, Z. Zhou, T. Qiu, and Q. Hao*, Nat. Commun. 15, 5855 (2024)
2. Y. Wei, X. Fan, D. Chen, X. Zhu, L. Yao, X. Zhao, X. Tang, J. Wang, Y. Zhang, T. Qiu,* and Q. Hao*, Nano Lett. 24, 2110−2117 (2024)
3. Y. Wei, D. Chen, X. Fan, X. Tang, L. Yao, X. Zhao, Q. Li, J. Wang, T. Qiu, and Q. Hao*, ACS Catal. 14, 15043–15051 (2024).

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于 SERS 技术在法庭科学中毒物的精准鉴定

曹玥*、范欣蕊
南京医科大学

法庭科学中的快速精准鉴定一直是公共安全领域至关重要的问题之一，但许多传统分析方法都成本高、操作要求高、难以进行快速便捷的检测等缺点。在此，我们在光谱，尤其是表面增强拉曼散射（SERS）光学方面开发了一系列对法医学中各个物质进行快速、精准鉴定的方法，为法医学毒物的精准鉴定提供了新思路和新手段。基于光学方法，如利用 SERS 技术开发封装在单个金属纳米棒（AuNRs）上的沸石咪唑酯类 MOFs（ZIF-8），可以作为一种很有前景的 SERS 基底，用于在复杂环境中捕获西维因，同时与薄层色谱结合实现双模式分离，并在短时间内快速现场检测毒物。为了实现对呼吸道传播病毒的高效 SERS 检测，采用静电纺丝法制备了一种柔性聚乳酸纤维膜织物。该膜用作 SERS 活性基底，通过丝网印刷将联合收割机 Au 纳米片与针对目标物质的抗体结合的捕获探针。目标物质可以固定在捕获探针和 SERS 纳米标签之间，将该传感器应用于 SARS-CoV-2 的检测，检测限低至 10 TU/mL。此外，研究发现 AuNPs 探针进入细胞后，在细胞内酸性环境中可以观察到增强的拉曼/荧光信号，实现了单细胞内 pH 值原位拉曼/荧光成像，为新型复合式 SERS/荧光探针在单细胞分析中同时呈现双重信号分子的策略奠定了基础。之后进一步开发一种新型纳米皇冠探针，用于单细胞内双通道实时跟踪 caspase-3 和 H2O2 两种生物分子的动态变化。该探针不仅提供协同作用，而且可以达到互不干扰的目的，使结果更加可靠和可重复。在实际法医检案应用中，针对 20 年前已解剖案件，打破了传统病理切片的阅片方法，将 SERS 高分辨成像技术创新应用于法医学复杂尸检组织内未知晶体的原位成像分析(应用价值)，并呈现良好的实际应用效果。以上光谱新方法均能解决一定的法医及公共安全领域的实际问题，突破了传统分析方法的局限性，拓展了法庭科学毒物鉴定的新思路。

关键字 SERS，法医毒物分析，快速精准鉴定

参考文献

1. Yan Ding, Cheng Liu, Yang Shi, Li-Xiang Wang, Zhengsheng Mao, Hao Sun, Hua Wan, Feng Chen*, Yue Cao*. Dual-Mode Separation and SERS Detection of Carbaryl with PA-6/AuNRs@ZIF-8 Films. Anal. Chem. 2024, 96, 5, 1941–1947.

2. Qiao-Yan Jiang1, Ximin Cui2, YangSun1, Zhengsheng Mao1, JieWang1, Feng Chen1*, JianfangWang2, Yue Cao1*. Crown Monitoring: Trace the dynamic changes of caspase-3 and H_2O_2 in real-time imaging based on FRET/SERS. Biosensors and Bioelectronics, 2021, 192, 113539(1-6).

3. Yang Sun, Liuzhu Zhou, Yan Ding, Cheng Liu, Zhengsheng Mao, Qiao-Yan Jiang Jin Chen**, Feng Chen***, Yue Cao*. Fabrication of flexible electrospinning nano-fiber membrane for detection of respiratory tract transmission virus based on SERS. Talanta. 2024,266,125127.

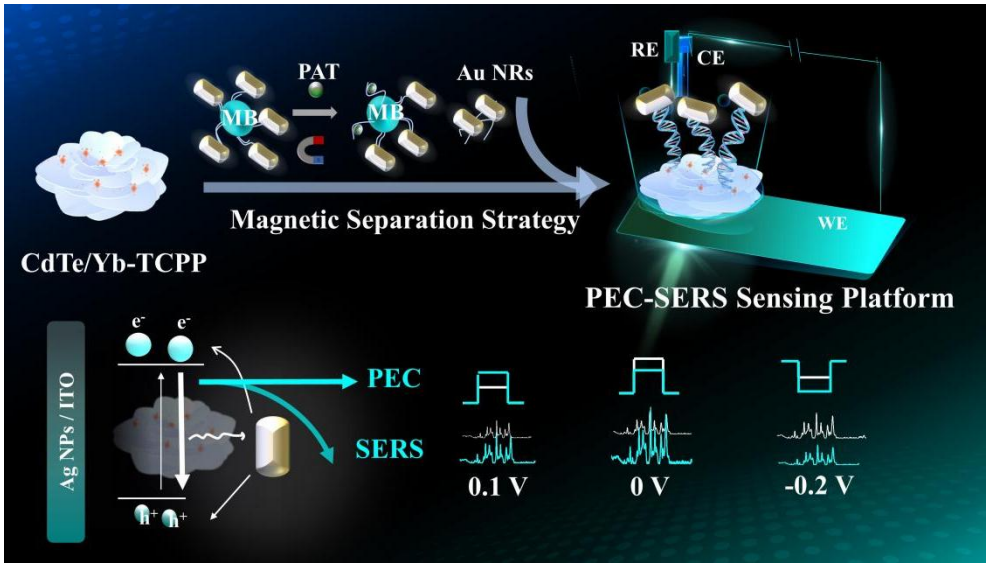
4.Youjia Yu[1,†], Qiaoyan Jiang[1,†], Hua Wan 1,2, Rong Li 1,Yang Sun 1, Zhiwei Zhang 1 , Zhengsheng Mao1, Yue Cao 1,* and Feng Chen 1,3,*. In Situ Identification of Unknown Crystals in Acute Kidney Injury Using Raman Spectroscopy. Nanomaterials 2022, 12, 2395(1-10).

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

原位光电化学-表面增强拉曼光谱传感平台的构建与应用

刘书达[1]、孟淑云[1]、董娜[1]、刘东[1]、由天艳*[1,2]
1. 江苏大学农业工程学院
2. 河南科技大学农业装备工程学院

理解半导体界面的电荷转移机制对于提高传感器件的电子和光学特性至关重要。然而，目前依赖单一信号采集方法的界面分析，限制了我们对光激发电荷转移过程的理解。本文提出了构建一种基于量子点/金属-有机框架（CdTe/Yb-TCPP）纳米复合材料的光电化学表面增强拉曼光谱（PEC-SERS）集成平台，用于多维度分析光激发下的电荷转移机制。该平台能够在532 nm激光下同时进行PEC和SERS测量。CdTe/Yb-TCPP纳米复合材料的光电流和拉曼光谱同时受到不同偏置电压的影响，两者的变化关系有助于揭示电荷转移路径。此外，我们利用磁性分离和DNA生物识别技术，将金纳米棒（Au NRs）引入到PEC-SERS系统中，构建了一种用于展青霉素检测的生物传感器。该生物传感器展现出电压调制的PEC和SERS信号的开关响应，这归因于Au NRs在不同电压下的等离子体共振效应对电荷转移的影响。将PEC-SERS传感器应用于苹果中展青霉素的检测，证明了该生物传感器的适用性。该研究提供了一种理解半导体-金属界面的有效方法，并为设计高性能生物传感器提供了一条新途径。



Scheme 1. Working principle of PEC-SERS biosensor for patulin.

关键字 光电化学，表面增强拉曼光谱，原位

参考文献

1. Y. Huang, W. Wang, H. Guo, D. Zhan, D. Wu, B. Ren, Z. Tian. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 8483−8489.
2. R. Devasenathipathy, J. Wang, D. Wu, B. Ren, Z. Tian. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 3821−3832.
3. L. Lu, Y. Zhou, T. Zheng, Y. Tian. *Nano Res.* **2023**, 16, 4049–4054.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

超快速合成具有协同增强性能的双金属异质树突用于 SERS 检测多种污染物

黄丹、李玲、魏思琪、殷闾西、尚文娟、吴莉*
四川大学分析测试中心

异质双金属材料在表面增强拉曼散射（SERS）领域引起了广泛关注，这些异质区间的交互耦合产生了协同效应。开发一种快速简便的方法制备具有优异 SERS 性能的双金属材料非常重要。本工作结合电沉积和电偶置换反应（GRR）在泡沫镍上超快速制备了双金属异质枝晶SERS基底。XPS 成像提供了微区成分分析，有助于将枝晶生长的微观变化与宏观特征联系起来。与纯金属相比，双金属材料具有更好的 SERS 增强性能。双金属的等离子体耦合协同效应和具有大表面积和尖突的树枝状结构都有助于电磁增强。该基底被用于农药、染料等多种污染物检测，检测限低至10^{-9}M。该方法为制造具有高 SERS 活性的双金属基底提供了一种超快速的合成新方法，在食品分析和环境监测领域具有广阔的应用前景。

关键字 异质双金属材料，表面增强拉曼散射，枝晶

参考文献

1. Y. Zhu and X. Wu, Progress in Materials Science, **2023**, 131, 101019-101074
2.M. B. M. Cortie, Andrew M, Chemical Reviews, **2007**, 111, 3713-3735
3. A. K. Pal and D. Bharathi Mohan, Journal of Alloys and Compounds, **2017**, 698, 460-468

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：墙报

表面增强拉曼结合机器学习用于单独和混合农药的快速检测

王馨若[2]、贺泽英[1]、刘文婧*[1]
1. 农业农村部环境保护科研监测所
2. 华中农业大学

目的：本研究旨在通过表面增强拉曼散射（SERS）技术，结合多种机器学习模型，开发一种高效且精准的痕量农药检测方法，并对农药混合物进行定性及定量分析。

方法：本研究采用纳米金作为 SERS 基底，针对啶虫脒、噻菌灵、多菌灵和福美双进行痕量检测，生成标准曲线以验证其线性关系。实验分析了单一农药及其混合物的拉曼光谱，SERS 数据经过预处理以减少噪声和干扰。采用卷积神经网络（CNN）、随机森林（RF）、支持向量机（SVM）进行分类与回归，并利用 4 种农药的特征峰标记对混合农药进行定性分析。

结果：SERS 技术能够成功监测 4 种痕量物质的检测，啶虫脒、噻菌灵、多菌灵、福美双最低检测限分别为 0.05 mg/L、0.05 mg/L、0.10 mg/L 和 0.05 mg/L。结合多种机器学习模型的 SERS 技术成功实现了四种农药及其混合物的分类与定量分析。其中 CNN 模型表现最佳，准确率达到 98%，且有效识别了低浓度农药残留。结合标准曲线，模型能够定量测定不同浓度下的农药残留。而 RF 和 SVM 的准确率分别为 95%和 91%，尤其对于较低浓度的。

结论：本研究表明，SERS 技术结合 CNN、RF、SVM 等机器学习模型能够高效且准确地进行农药残留检测与分类，成功实现了单一与混合农药成分的定性与定量分析。为农药残留监测提供了有效的技术支持。

关键字 SERS，机器学习，农药残留

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

免标记表面增强拉曼结合 CNN 用于尿液病原菌的快速检测

申忠华[1,2]、刘春雨[2]、刘文婧*[1]
1. 农业农村部环境保护科研监测所
2. 天津医科大学第二医院

目的：本研究旨在利用表面增强拉曼散射（SERS）技术结合深度学习，开发一种高效、准确的病原菌分类和检测方法，以实现尿路感染的快速诊断。

方法：分析2022-2023年就诊于天津医科大学第二医院行尿培养检查且结果呈阳性患者，并分析尿路感染患者的菌种分布情况。为了进行尿路感染病原菌的快速检测，采用纳米银作为SERS基底，使用12种标准菌株以及从患者尿液中分离的368株临床细菌作为研究对象，总共生成了7600条拉曼光谱数据。采用随机森林（Random Forest, RF）、主成分分析-支持向量机（PCA-SVM）以及自定义的1D卷积神经网络（CNN）进行病原菌分类。通过SHAP分析用于揭示了对分类起关键作用的拉曼特征峰。并直接检测尿液样本并检测CNN模型的预测效果。

结果：本研究对2022-2023年天津医科大学第二医院3211例尿液培养阳性样本进行了分析，确定了12种最常见的病原菌分别是：大肠杆菌，肺炎克雷伯杆菌，阴沟肠杆菌，鲍曼不动杆菌，奇异变形杆菌，铜绿假单胞杆菌，屎肠球菌，粪肠球菌，表皮葡萄球菌，金黄色葡萄球菌，无乳链球菌，白色念珠菌，这些病原菌合计占据了总感染数的85%。CNN模型在光谱特征提取和病原菌种类区分方面表现出了较强的能力，通过自动学习不同菌种的特征性拉曼峰，CNN能够精确分类不同的尿液病原菌，准确率为97.5%，显著优于RF模型的93.6%和PCA-SVM模型的84.1%。SHAP分析显示了具体的拉曼峰位对模型分类的贡献，确定了734cm-1处拉曼峰代表的ρ（CH2）腺嘌呤，（C-S）的反式构象在不同细菌种类的鉴别中具有重要意义。进一步实验表明结合SERS技术与CNN模型，成功识别了30例尿路感染患者，准确率为90.3%。

结论：SERS与深度学习相结合能够快速，有效的进行尿液病原菌鉴定，为尿路感染的临床诊断提供了一种精准、快速且鲁棒的工具，为临床进行尿液病原菌快速检测提供了一种优质的解决方案。

关键字 SERS，CNN，尿液，病原菌，SHAP

分会场：3.SERS 50 年
交流类型：墙报

有机小分子单晶半导体 SERS 基底的现状与未来

沈爱国*[1]、赵百川[2]
1. 武汉纺织大学 生物工程与健康学院/分析测试中心
2. 武汉大学 化学与分子科学学院

基于有机表面的增强拉曼光谱已逐渐成为 SERS 的一个有前景的分支，具有更高的选择性，尽管增强机制仍有争议。本文首次提出了一种新型的小分子有机半导体 SERS 基底，它是一种高结晶度的 p，p'-二氨基季铵盐苯基片状单晶，具有人字形结构取向。飞秒瞬态吸收光谱用于证明这种有机单晶微片（OS MS）中存在半导体本征光生自由电荷载流子，进一步的观察表明，在泵浦光激发下，OS MS 和探针分子（如亚甲基蓝、MB）之间存在显著的电荷转移。当不同的激发光与不同的 OS MS 探针分子系统匹配时，可以观察到显著的高选择性 SERS 现象，表明有机半导体可能具有与无机半导体相似的光诱导电荷转移（PICT）机制。

在获得更多光学/物理性质高度类似无机半导体的有机系 SERS 基底后，如何通过 DFT/VASP 等方法，结合 TA/PL/UV 等手段建构一个适用于有机表面 SERS 效应的物理/化学过程的理论模型是当前重中之重。此外，本文还将就如何开辟适合有机表面 SERS 技术的应用领域，如何有效提升有机半导体 SERS 基底性能，特别是通过对增强基底电荷转移能力的调制实现高效 PICT 效应等将被着重探讨。

关键字 有机小分子单晶，半导体，SERS，高选择性

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

表面增强拉曼光谱 SERS 生物探针

林杰*、吴爱国
中国科学院宁波材料技术与工程研究所

恶性肿瘤严重危害人类生命健康，“早发现、早诊断、早治疗”是目前根治实体恶性肿瘤的最佳途径。与组织活检相比，体外液体活检技术具有快速、简便和无损伤等优势。当影像学检查还没有发现任何病灶前，外周血液中循环肿瘤细胞检测可为肿瘤早期诊断和预后评估提供重要依据。循环肿瘤细胞（CTCs）的高效检测可有效地应用于体外早期诊断、预后及存活时间判断、快速判断治疗效果、体内耐药性检测、肿瘤分子分型鉴定、个体化治疗、肿瘤复发检测等，具有重要的科学意义和临床应用价值。表面增强拉曼散射光谱（SERS）技术是高灵敏的指纹光谱分析技术，具有快速、精准、无损检测等优势，可适用于固相、液相等复杂的检测体系。SERS纳米生物探针与谱学/影像技术的结合，为实现循环肿瘤细胞的精准诊断带来新的契机。研发功能型SERS纳米生物探针，随后结合具有光、电、磁场响应的SERS探针试剂盒仪器设备，完成外周血样中循环肿瘤细胞的快速富集、高效分离、准确检测和分型鉴定，从而通过SERS光谱/图像分析实现肿瘤的精准诊断应用突破，并开发可推广的检测试剂盒。重点突破液体活检发展中检测成本高、耗时长、细胞富集难和靶向性差等难题。

关键字 表面增强拉曼光谱（SERS），液体活检，检测分析，分子指纹图谱

参考文献

1. J. Yu, J. Lin#, L. Guo*, et. al, J. Am. Chem. Soc., 2022, 144, 21908-21915.
2. J. Lin*, A. G. Wu*, et. al, Fund. Res., 2024, 4, 858-867.
3. J. Lin, A. G. Wu*, et. al, Anal. Chem., 2023, 95, 4671. (Cover).
4. X. Y. Meng, J. Lin*, L. Guo*, et. al, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, DOI: 10.1002/anie.202407597.
5. J. Y. Pei, J. Lin*, W. X. Chen*, et. al, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202316123.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

Ti_3C_2 MXenes 材料的可控氧化调节及其 SERS 性能研究

刘鑫*[1]、党阿磊[2]、李铁虎[2]
1. 太原理工大学人工智能学院
2. 西北工业大学材料学院

Ti_3C_2 MXenes(二维过渡金属碳/氮化物)材料作为继石墨烯后的一类新型二维材料，因其独特的光电特性已被广泛应用于储能、电磁吸收、光电催化及表面增强拉曼散射(SERS)领域。然而，其较低的氧化稳定性极大的限制了其作为 SERS 基底材料的服役寿命和检测稳定性。为此，本文通过水热法调节了 Ti_3C_2 MXenes 的氧化行为，从物相结构和结晶面角度优化制备出了具有良好稳定性和 SERS 活性的 Ti_3C_2/TiO_2 杂化材料，并阐明了 Ti_3C_2/TiO_2(001)基底的 SERS 增强机理。结果表明，氧化过程中添加或改变晶面导向剂的类型会显著改变 Ti_3C_2 MXenes 的氧化行为，其中沿(001)晶面生长的 Ti_3C_2/TiO_2 基底具有最好的氧化稳定性和 SERS 性能，相较于原始的 Ti_3C_2 MXenes 材料其服役寿命提高了 8 倍，SERS 灵敏度提升了 10^3，信号相对标准偏差(RSD)降低至 5.61%。这一工作有望为解决 MXenes 材料的稳定性问题并拓展其在 SERS 领域的应用提供新的见解。

关键字 MXenes，表面增强拉曼散射，氧化稳定性，结晶面

参考文献：

1. X. Liu, A. Dang, T. Li, et, al. ACS Sensors, 2023, 8, 3, 1287–1298.
2. X. Liu, A. Dang, T. Li, et, al. Biosensors & Bioelectronics, 2023, 237, 115531.
3. X. Liu, A. Dang, T. Lee, et, al. ACS Sensors, 2024, 9, 1, 483–493.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

多孔 SERS 基底在生化传感中的应用

梁延博、张宇、韩琳*
山东大学

多孔表面增强拉曼散射（SERS）基底以其卓越的信号增强能力和高灵敏度，在生化传感领域展现出广阔的应用前景。多孔结构不仅显著增加了比表面积，还提供了丰富的“热点”，从而有效提升拉曼信号的强度。多孔 SERS 基底在痕量分析物检测中展现出优异的灵敏度和选择性，能够高效捕获包括生物分子、污染物和药物在内的多种目标物质。随着制备技术的不断进步，多孔 SERS 基底的可重复性、稳定性以及成本效益显著提升，使其在环境监测、食品安全和疾病早期诊断等生化传感领域展现出巨大潜力。未来，多孔 SERS 基底在生化传感中的研究将聚焦于提高其灵敏度和可重复性，同时探索其在新兴领域中的应用前景。通过与微流控技术、人工智能等前沿技术相结合，多孔 SERS 基底有望在实时在线监测、便携式传感器和个性化医疗等领域发挥更加重要的作用。

关键字 SERS 基底，多孔结构，生化传感

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于硅纳米线阵列的三维无机印迹 SERS 基底的构建及性能研究

廖文龙[1]*，巫娟[1]，龙倩[2]，邵俊玲[1]，郑丽[2]，刘坤平[2]*
1 成都大学 食品与生物工程学院
2 成都大学 药学院/四川抗菌素工业研究所

表面增强拉曼光谱(SERS) 作为一种分子光谱技术，能够快速、高灵敏度地检测微量及痕量目标物，在环境监测、食品安全、生物医药等领域具有巨大的应用潜力。传统溶胶型金银 SERS 基底的热点具有很大随机性，难以在较宽的动态范围内获取稳定的 SERS 信号。基于微纳阵列结构的三维 SERS 基底，其高比表面积能够在单位体积内产生高密度热点，而且 Z 轴上可以更好地承受激光错焦，从而提供更方便可行的 SERS 测量。本课题组通过金属辅助化学刻蚀（MACE）法制备了有序硅纳米线阵列（SiNWs）[1,2]，并采用无电沉积和原位还原法在 SiNWs 表面直接生成 Au-Ag 双金属纳米粒子（Au-Ag BMNPs），通过实验和理论模拟研究了 Au-Ag BMNPs 尺寸和元素比例对 SERS 性能的影响，成功构建了具有高密度热点群的金银双金属三维 SERS 基底（SiNWs-AuAg，图 1A）[3]，在此基础上负载以 TiO2 为内核，SiO2 为印迹层的核壳型无机分子印迹框架（TiO2@SiMIP），从而显著改善三维 SERS 基底对模板分子（R6G）的特异识别作用（图 1B），同时由于 TiO2 优异的光催化活性和无机分子印迹框架良好的光稳定性，三维无机印迹 SERS 基底经简单的紫外光照处理便可实现自清洁循环利用。本研究通过整合三维 SERS 基底与无机分子印迹框架，有望为复杂介质中目标物的快速检测研究提供参考。

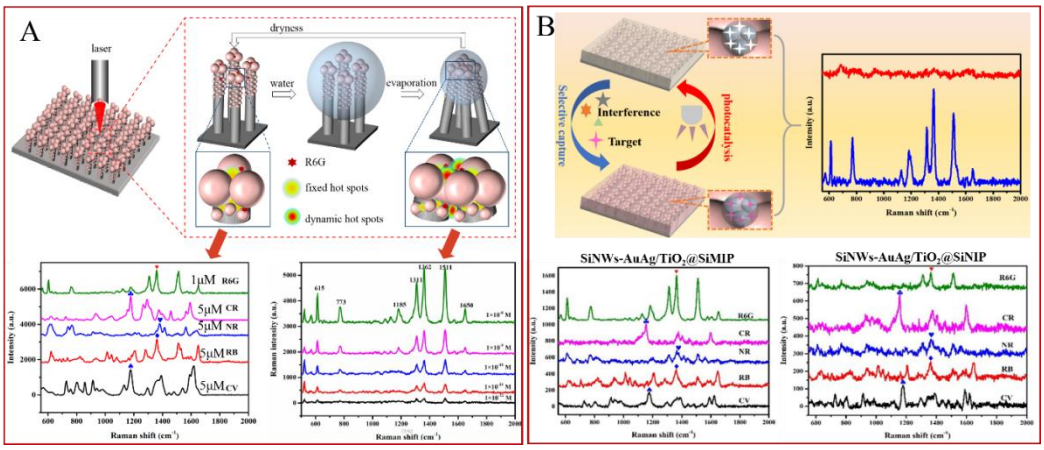


图 1 （A）三维 SERS 基底 SiNWs-AuAg 不同状态下的 SERS 性能；（B）基于 SiNWs-AuAg 的无机分子印迹和非分子印迹 SERS 基底的性能对比

关键字 硅纳米线阵列，三维 SERS 基底，无机印迹框架，光催化

参考文献

1. Liao W, Lin Q, Xu Y, et al. *Nanoscale*, 2019, 11(12): 5346.
2. Yang E, Liao W, Lin Q, et al. *Analytical chemistry*, 2020, 92(12): 8090.
3. Liao W, Liu K, Chen Y, et al. *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, 868: 159136.
4. Liao W, Wang Q, Hao J, et al. *Microchimica Acta*, 2023, 190: 50.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

表面增强拉曼光谱揭示电极异质界面电子转移调控析氢反应零电荷电势

杨玲、谢微*
南开大学

氢能作为一种能量密度高，清洁环保的绿色能源成为下一代能源革命的主力。铂基催化剂是目前析氢性能最好的催化剂之一引起人们的研究与关注[1]。对于金属铂催化的析氢反应（Hydrogen Evolution Reaction， HER）研究催化活性物种在界面上的传质过程有助于深入理解催化反应过程[2]。对于电化学系统，电极和电解质之间电化学双层（EDL）的存在会影响催化物种的扩散行为。在固体电极表面和周围水溶液之间的界面处产生的电化学双层（EDL）是一个控制化学反应发生的复杂环境。根据 Gouy-Chapman-Stern 理论（GCS 理论）[3]，当电极在没有施加电势的情况下接触电解质时，会自然形成界面电场，这会使电极表面和附近的分子极化。因此，电解质中有两种成分：Stern 层和扩散层。Stern 层代表电解质和电极表面之间形成的界面电场，而扩散层中的溶剂和溶质分子不受界面电场的影响，主要以布朗运动的形式存在。Stern 层的性质决定了电荷转移过程，从而影响电极/电解质系统的电化学响应。根据零电荷电势（potential of zero charge，PZC）这一概念的提出可以用于定量描述电极与电解液自发形成的电场。显然，PZC 值与电极催化剂材料与电解液的性质都有关系。目前，析氢反应的主要电解液为酸性或碱性，而非酸性析氢反应的动力学更值得研究因为相较于酸性条件出现了 2 个数量级的下降。

研究微观物理化学现象离不开现代高级表征技术，表面增强拉曼光谱（Surface enhanced Raman spectroscopy，SERS）是一种高度灵敏、特异性高的界面表征手段，能够分析几个纳米尺度的表界面物化现象[4]。利用表面增强拉曼光谱与电化学方法联用能够原位分析电极界面析氢反应活性物种扩散步骤。在这里，我们选择了铂-水电化学界面，以 4-硝基苯硫酚的电催化还原反应为 4-氨基苯硫酚探针，水作为氢源，分析处于不同界面的铂纳米颗粒产氢效率的变化（-NH2）出现的电压变化，发现了界面电子转移对于电极零电荷电势的调控，这一发现为设计高性能析氢反应催化剂提供了理论依据。更值得一提的是，当我们将电解液由中性更换至碱性时，由于检测的灵敏度高，我们发现碱性条件下同样的铂纳米颗粒产氢效率下降，说明尽管真正的氢源水分子没有改变，但相较与中性电解液界面水与电极表面氢原子的传输效率发生了改变。

综上，我们利用原位电化学-表面增强拉曼联用装置引入探针分子，对铂-水界面活性氢物种的产生与传质进行深入分析，并研究了催化剂处于不同界面时电极零电荷电势的改变，这一研究为设计高性能析氢催化剂提供指导并对于电催化析氢反应的传质过程提供了自己

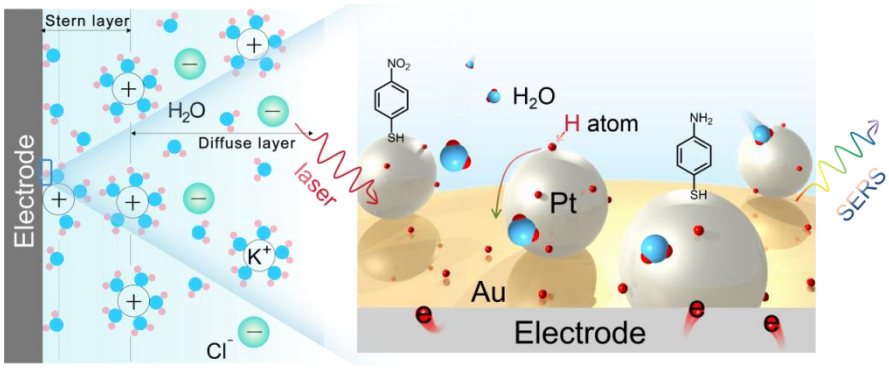
的理解。

图 1.电化学-表面增强拉曼装置测试示意图

关键字 表面增强拉曼光谱，析氢反应，双电层，零电荷电势

参考文献

1. Huang, Z., Cheng, T., Shah, A. H. et al. Edge sites dominate the hydrogen evolution reaction on platinum nanocatalysts. Nat. Catal. 2024, 7, 678-688.

2. Li, L., Wang, P., Shao, Q., Huang, X. Metallic nanostructures with low dimensionality for electrochemical water splitting. Chem. Soc. Rev., 2020,49, 3072-3106.

3.Brown, M. A. Abbas, Z., Kleibert, A., Green, R. G., Goel, A., May, S., Squires, T. M. Determination of Surface Potential and Electrical Double-Layer Structure at the Aqueous Electrolyte-Nanoparticle Interface. Phys. Rev. X 6, 011007.

4. Wang, X., Huang, S. C., Hu, S., Yan, S., Ren, B. Fundamental understanding and applications of plasmon-enhanced Raman spectroscopy. Nat. Rev. Phys.2020, 2, 253-271.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于磁固相萃取-表面增强拉曼光谱定量检测生物基质中痕量纳米塑料

蔡瑾、毛震、张晓丹、耿翱博、黄沛力*
首都医科大学

纳米塑料（NPs）广泛存在于环境中，并可通过消化道、呼吸道和皮肤接触等途径进入人体。然而，由于 NPs 尺寸小、进入生物体的浓度低以及生物基质的复杂性，评估其在人体内的内暴露风险仍面临诸多挑战。本研究合成了一种环境友好的氨基化磁性吸附剂（Fe_3O_4@SiO_2@PEI），该吸附剂通过静电作用、疏水作用、氢键和π-π相互作用，能够高效富集生物基质中的多尺寸 NPs，并在多次循环使用后仍保持优异的富集性能。此外，我们还合成了一种无需表面活性剂的表面增强拉曼散射（SERS）基底（BGNS-Ag_3-PEI）。该基底中双金属金银纳米星的尖端结构诱导了强电磁场的增强效应，聚乙烯亚胺壳层能够在热点区域内特异性吸附 NPs，从而有效解决了 SERS 检测的再现性和稳定性问题。结合 Fe3O4@SiO2@PEI 的高效富集能力和 BGNS-Ag_3-PEI 卓越的 SERS 性能，本研究成功实现了尿液和血清基质中多尺度 NPs（20 nm、100 nm、200 nm 及其混合物）的成功检测。该方法的检出限低至 6×10^{-7} g/L，具有良好的定量分析能力（R^2>0.982）和重现性。本研究突破了复杂生物基质中低含量 NPs 的检测瓶颈，为 NPs 的内暴露监测及其潜在健康风险的评估提供了有力的技术支持。

关键字 纳米塑料，表面增强拉曼光谱，生物基质，定量分析

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

离子标记法监测 Ag 等离激元催化过程中的热空穴

杜晓萌、谢微*
南开大学

局域表面等离激元共振（Local Surface Plasmon Resonance, LSPR）是指当特定频率的光照射于金或银等贵金属纳米颗粒时，引发表面自由电子的集体振动现象。LSPR 的辐射衰变显著增强了金属表面分子的振动信号，使得表面增强拉曼光谱（Surface-Enhanced Raman Spectroscopy, SERS）成为一种兼具高表面选择性和高灵敏度的光谱技术。原位 SERS 的多重优势为研究纳米催化剂表面的反应机理提供了理想的解决方案。与传统光谱方法不同，具有高特异性的 SERS 能够提供多个窄的拉曼谱带，实现对各种成分的精细指纹识别，并在无需分离提纯的条件下进行实时检测。

我们构建了一系列银基 SERS 检测基底，并针对等离激元热空穴，提出了一种基于亚硫酸根标记的 SERS 检测方法。由于亚硫酸根对热空穴具有强亲和力，通过观察亚硫酸银的拉曼信号可以实时监测热空穴。在此研究中，我们揭示了热空穴平衡对热电子转移速率的决定性作用。此外，该简单的空穴检测方法也可用于确定热电子的转移速率。我们发现，等离激元化学反应速率与波长之间的关系并非仅由金属基底的 LSPR 所决定，还受到等离激元化学阳极再填充效应的影响。利用热空穴的偏振动力学，这种 SERS 检测方法有助于揭示热空穴的空间分布。对等离激元热空穴的实时原位检测为光催化领域中电子-空穴对之间动力学相关性的研究提供了可靠的表征工具。

随后，我们进一步应用亚硫酸根标记的 SERS 检测方法验证了取代基效应对等离激元电子-空穴分离速率的调控作用。结合机理研究，揭示了分子修饰在载流子分离过程中的调控规律，证明其在优化等离激元催化性能中的重要性。

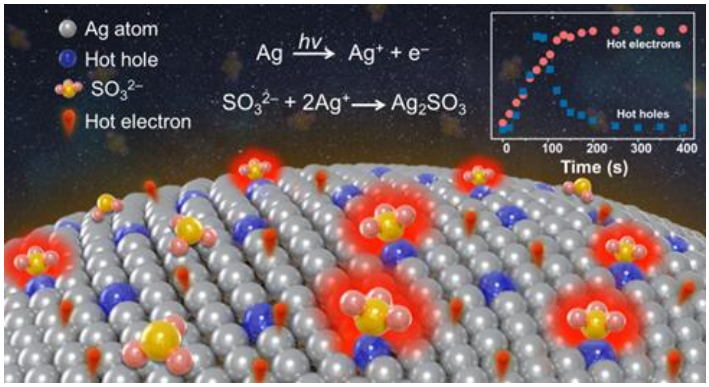


图 1. Ag 表面等离激元热空穴的 SERS 检测方法。

关键字 表面增强拉曼光谱，局域表面等离激元共振，热空穴检测，亚硫酸根

参考文献

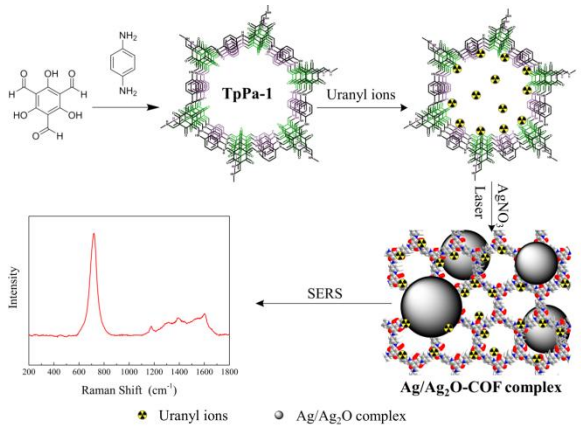
1. Cortés E., Grzeschik R., Maier S. A., et al. *Nat. Rev. Chem.* **2022**, 6, 259-274.
2. Xie W. and Schlücker, S. *Chem. Commun.* **2018**, 54, 2326.
3. Du X. M., Wang T., Li Y. L., et al. *Nano Lett.* **2024**, 24, 11648-11653.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

基于 Ag/Ag2O@ COF 复合 SERS 基底对铀酰离子的痕量分析研究

盖涛，姜交来，王少飞，张凌，廖俊生*
中国工程物理研究院材料研究所

铀是民用和军事领域的重要核材料；然而，其广泛应用引发了人们对环境保护和核工业领域潜在安全问题的担忧。在本研究中，我们开发了一种 Ag/Ag_2O-COF（共价有机框架）复合 SERS 基底，用于检测环境水溶液中的铀酰离子（UO_2^{2+}）。本文将 Ag/Ag_2O 复合材料对铀酰的强 SERS 效应和 COF-TpPa-1 对铀酰离子的高吸附效率相结合，实现了铀酰离子的痕量检测。该方法的线性范围为 10^{-8} mol L^{-1} 至 10^{-6} mol L^{-1}，铀酰离子的检测限为 8.9×10^{-10} mol L^{-1}。此外，常见的金属阳离子和含氧酸根离子对铀酰的 SERS 检测几乎没有影响，这有助于天然水样中铀酰的痕量分析。尽管本工作所提出的策略在此用于铀酰的检测，但其可重复使用性能和高效的方法可以扩展到对其他具有拉曼活性的物质进行痕量检测。



分析过程简要示意图

关键字 SERS，铀酰，COF TpPa-1，Ag/Ag2O-COF 复合物，定量分析

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

应用场景下微量铀的高灵敏 SERS 检测方法研究

姜交来[1]、王少飞[1]、盖涛[1]、张政军[2]、廖俊生*[1]
1. 中国工程物理研究院材料研究所
2. 清华大学材料学院

铀作为一种重要的核材料，在核工业中具有不可替代的作用，是核能发电的主要原料。然而，大量核电站运行、核燃料循环与乏燃料后处理等过程等都会造成铀污染物释放至环境中，引起地下水污染，对人类健康造成长期影响，如引起如肝中毒、脑损伤和生殖问题等疾病。同时核设施运营单位等部门在从事铀相关活动时也面临放射性工号的核安全以及含铀废液的处理与排放等问题。这些实际而又紧迫的需求均需要着力发展应用场景下微量铀的快速分析技术。表面增强拉曼光谱（SERS）技术作为一种高灵敏的指纹分析技术，具有低成本、快速响应和不需样品预处理的优点，在微量铀的快速分析中具有显著优势。为此，我们从铀的 SERS 机制认识出发，基于不同应用场景下微量铀的检测需求，从高灵敏 SERS 基底构筑以及痕量铀的高效富集两个维度开展研究，以提升 SERS 对微痕量铀的检出能力。设计制备了多种增强基底，包括银纳米粒子、惰性氧化层包覆银纳米棒、氧化银等，开展了对铀的 SERS 分析方法研究，建立了水中铀、固体表面沾污铀以及固体铀氧化物等多种应用场景下的 SERS 分析方法。基于电荷转移效应构建了一种对铀具有较强选择性的氧化银 SERS 基底，实现了复杂环境中铀的高选择性检测。同时，利用 COF 材料对铀的高效富集能力，通过以多孔网状结构为载体，将 SERS 活性结构 Ag/Ag_2O 与 COF 材料相复合，有效提升了对铀的检出能力，检出限达到纳摩尔量级。总之，我们从实际需求出发，通过 SERS 机制、灵敏度提升、场景变化等所需 SERS 技术问题的解决，推动了 SERS 技术的实用化进程。

关键字 SERS，铀，放射性核素，Ag_2O，痕量分析

参考文献

1. T. Gai, J. Jiang, J. Liao* et al. Talanta, 2024, 277: 126407.
2. J.Jiang, Yunfeng Du, J. Liao* et al., Applied Surface Science, 2022,577,151968.
3. S.Wang, J.Jiang, J. Liao* et al.. Science Bulletin, 2019,64: 315-320.

分会场：3.SERS 50 年
交流形式：墙报

结构可控 Ag 气凝胶优化 SERS 数字微流控平台用于超灵敏和高通量检测有害物质

王子寒[1,2]，崔升[2]*，何璇[1]*
1. 中国工程物理研究院化工材料研究所，四川 绵阳 621999;
2. 南京工业大学材料科学与工程学院，江苏 南京 211800

基于表面增强拉曼（SERS）技术的微型芯片或设备是未来高通量、快速检测爆炸物等有害物质的重要趋势。SERS 与数字微流控技术（SERS-DMF）的互补结合实现了双赢，拓宽了两者的应用领域。然而，SERS-DMF 中盐筛选形成的贵金属“热点”存在结构不可控、空间密度低等问题，严重限制了实际应用的灵敏度和效率。在这项工作中，制备了结构可控的 Ag 气凝胶作为 SERS 基底，将其与数字微流控技术（AgA-DMF）相结合，实现了对有害物质的快速、高通量和超灵敏检测。通过调整结构单元尺寸和长径比，优化了 Ag 气凝胶的 SERS 性能。其增强因子高达 4.82×107。AgA-DMF SERS 平台能检测出各种有害物质：2,4,6-三硝基甲苯（TNT，10-8 M）、3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮（NTO，10-9 M）和亚甲基蓝（MB，10-9 M）。该平台以出色的反应效率简化了所有流程，并在 10 分钟内完成了对五个样品的高通量检测。此外，该平台还集成了便携式拉曼技术，实现了对真实样品的现场检测。所提出的 AgA-DMF 平台可快速、高通量、超灵敏地检测废水中的有害物质，在环境安全监控方面也具有相当大的应用潜力。

关键字 Ag 气凝胶，数字微流控，快速检测，爆炸物分子，高通量检测

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

超高空间分辨 LA-ICPMS 系统的研制

杭纬*、孟一凡、徐周毅
厦门大学

我们了提出的微透镜光纤的采样技术，开发了一种用于微小生物组织和单细胞成像 LA-ICP-MS 技术，能够实现纳米级的亚细胞空间分辨率。该装置的关键是微透镜光纤和具有三通结构的样品剥蚀池。通过调节激光的能量和光纤-样品之间的距离，我们可以轻松地获得直径在 0.4 μm 至 10 μm 范围之间的剥蚀弹坑，而且对于金属元素的检出限可以达到 sub-fmol 水平。在该装置的基础上，我们搭建了自动化的 LA-ICP-MSI 平台，成像过程快速且简单。借助这套智能的成像系统，我们直观地观测到了三种光动力治疗药物被小鼠摄取后，在小肠内的分布情况。纳米级的质谱成像结果也揭示了小肠绒毛组织表皮和毛细血管在药物吸收和运输中的重要作用。除此之外，这项技术在单细胞成像中也表现出了巨大的潜力。由于高空间分辨的优势，我们可以在细胞器的尺度上对化学物质在细胞内的分布做出判断。借助该 LA-ICP-MSI 平台，我们发现 GNRs 和卡铂分别分布在 HeLa 细胞的溶酶体和细胞核内；而重金属离子对于洋葱细胞的污染则主要分布在细胞壁内。随着金属元素的生物标签等金属相关生物技术的发展，生物样品中金属元素的分析受到了人们的广泛关注。这种纳米级的 LA-ICP-MSI 技术就像一种化学显微镜，因其高的空间分辨率有望在细胞生物学和医学科学的许多领域带来冲击。

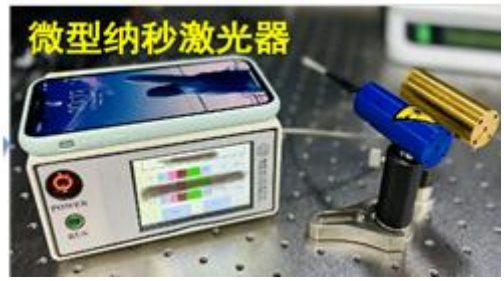
关键字 激光剥蚀；空间分辨；电感耦合等离子体质谱

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

激光光谱关键器件与技术应用

张大成*、侯佳佳、许博坪、张怡、余明昊、张嘉成、王韶仪
西安电子科技大学

激光以单色性、宽调谐、高峰值功率、超快时间分辨等特点为光谱学的发展带来了强大的推动力。利用激光高峰值功率特点可以烧蚀各种材料进行激光诱导击穿光谱（LIBS）测量。但是 LIBS 技术在检测灵敏度、光谱分辨率、设备成本与体积方面仍面临挑战。为此，我们将飞秒超连续光谱、飞秒激光成丝等技术应用于等离子体诊断，实现了对激光等离子体中粒子时空分布测量，以及对等离子体中多元素多谱线的增强；针对激光光谱远程探测中面临灵敏度不足的问题，我们研制了紧凑型宽调谐光参量振荡器，结合激光诱导荧光（LIF）方法，可实现数百米外特定元素高灵敏探测；利用钛宝石晶体宽增益特性，结合短腔与光栅选频，可实现线宽小于 200MHz 的极窄线宽宽调谐纳秒激光器，可实现核燃料同位素的高分辨测量；在此基础上，我们将烧蚀激光以及泵浦激光等进行了微型化设计，实现了 2ns



脉宽的高峰值功率微型纳秒激光器（如图 1）。利用这些光源研制成微型 LIBS 测量装置等，并将其应用于血清、文物碎片等检测，为进一步发展无人设备光谱载荷等提供了独特了自主可控的核心器件。

图 1. 高峰值功率微型纳秒激光器

关键字 纳秒激光；可调谐激光器；等离子体光谱；荧光光谱；飞秒成丝

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

LA-ICP-MS 技术在材料金属组学的应用研究

汪正*
中国科学院上海硅酸盐研究所

内容主要为 ICPMS 在无机材料金属组学的多样性表征。包括三方面内容： 无机材料最新研究进展和将来发展趋势，比如：陶瓷，晶体，玻璃，生物材料，涂层材料等等； 无机材料 ICPMS 分析的挑战；无机材料组分的多样性表征具体案例分享，如采用样品消解为溶液进样元素分析研究以及采用激光剥蚀进样固体直接元素分析及成像分析研究，探索和材料性能之间的联系。

关键字 LA-ICP-MS；材料金属组学；成像分析

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

激光诱导击穿光谱精确定量化理论框架及应用

王哲*
清华大学

激光诱导击穿光谱（LIBS）技术具有快速、遥测、多元素同时分析、便于实现在线或原位分析等优势，在煤质分析、钢铁分析、污染物检测和外太空探测等领域都有巨大的应用潜力。但是到目前为止，LIBS 技术尚未实现精确定量化和大规模商业化，其主要瓶颈是信号不确定度过高导致的测量精密度较低和基体效应显著导致的测量准确度较低，且工业恶劣环境对长期稳定性提出了严峻挑战。本工作围绕 LIBS 的本质特征展开机理研究，发展并完善了以等离子体时空演化为中间纽带的创新研究方法，建立了一整套精确定量化理论框架。阐明了 LIBS 信号不确定性及测量误差的产生机理，并在此基础上提出等离子体调制方法显著提升等离子体稳定性和原始信号质量；建立了包括基于等离子体特性波动补偿的光谱标准化方法、结合物理规律和数据驱动模型各自优点的混合驱动定量模型、以及基于大数据技术的光谱辨识方法等一整套精确定量模型；自主研制了多套 LIBS 设备，并针对工业恶劣环境，发明多项提高测量长期稳定性的技术，应用于煤质快速分析、金属分析、水泥生料品质在线测量等领域。

关键字 激光诱导击穿光谱；定量化；等离子体调制

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

激光后电离质谱的研制

殷志斌*[1]、冷宜昕[1]、杭纬[2]
1. 深圳综合粒子设施研究院
2. 厦门大学

激光离子源技术因其具有微区采样，无需繁琐样品前处理，样品消耗量低等，常被称为最锋利的刀。同时脉冲式激光产生脉冲式离子，可与飞行时间质量分析器完美结合，因此激光解吸/电离（LDI）和激光直接电离（LI）技术成为固体直接分析中的一类重要技术。然而，传统的 LDI 源由于工作在高真空环境下，当激光能量较高时，常常因为离子初始动能较大致使谱图分辨率变差，难以进行定量分析；反之当激光能量下降时，又会导致其离子化效率变低，从而元素/分子利用率低下，无法检测到痕量元素信号。为此，我们提出激光后电离策略，自主研制了一台激光解吸-激光后电离飞行时间质谱仪（LD-LPI-TOFMS）。通过引入第二束四倍频激光作为后电离源，克服了低激光能量下元素分馏和基体效应以及高激光能量下谱图分辨率较差的问题，对 15 种镧系元素成功获得 fg 级绝对检出限和 ng/g 的相对检出限，对 Ni-Ta 超薄纳米层实现了亚纳米级的平均溅射率和厚度测量，并成功实现了多种金属合金中痕量元素的检测。由于 266 nm 激光的双光子能量为 9.32 eV，在饱和功率密度下可以对元素周期表中大多数元素获得较高的二次电离效率，有望实现固体样品中痕量元素的无标样半定量分析。

关键字 激光后电离；飞行时间质谱；固体元素分析；纳米薄层分析

参考文献

1. S. Ma, Y. Leng, X. Li, Y. Meng, Z. Yin, W. Hang, *TrAC Trends Anal. Chem.*, **2023**, 159, 116902.
2. Z. Yin, Z. Xu, R. Liu, W. Hang, B. Huang. *Anal. Chem.*, **2017**, 89, 7455-7461.
3. Z. Yin, X. Cheng, R. Liu, W. Hang, B. Huang. *J. Anal. Atom. Spectrom.*, **2017**, 32, 1878-1884.
4. Z. Yin, L. Hang, R. Liu, W. Hang, B. Huang. *J. Mass Spectrom.*, **2018**, 53, 435-443.

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

基于大连相干光源的中性团簇红外光谱研究

江凌*
中国科学院大连化学物理研究所

研究团簇结构与性能随尺寸变化的规律，对深刻认识和理解物质从分子态到凝聚态的渐变过程具有重大意义。目前，离子团簇由于带有电荷，易于探测和质量选择，研究最为广泛。中性团簇由于缺乏电荷，难于探测和质量选择，实验研究非常困难。鉴于上述情况，我们发展了基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法，实现了质量选择中性团簇的高灵敏探测、结构表征和性能研究。利用该方法，发现了最小水滴立体结构是由 5 个水分子组成，打破了前人对最小水滴是由 6 个水分子的认知，为理解水的微观结构演化机制提供了新的思路。在本报告中，首先介绍这个实验方法，然后举例说明它在水团簇结构演化机制和金属团簇催化研究中的应用。

关键字 团簇；大连相干光源；质谱；红外光谱

参考文献

1. G. Li, C. Wang, Q. Li, L. Jiang*, et al., Rev. Sci. Instrum., **2020**, 91, 034103.
2. B. Zhang, J. Li*, D. Zhang*, X. Yang*, L. Jiang*, et al., J. Phys. Chem. Lett., **2020**, 11, 851.
3. B. Zhang, L. Jiang*, J. Li*, X. M. Yang*, et al., Proc. Natl. Acad. Sci., **2020**, 117, 15423.
4. G. Li, J. Li*, X. M. Yang*, L. Jiang*, et al., Nat. Commun., **2020**, 11, 5449.
5. S. Jiang, Z. Zhang*, J. Kuo*, Z. Liu*, L. Jiang*, et al., J. Phys. Chem. Lett., **2021**, 12, 2259.
Y.-Y. Zhang, L. Jiang*, X. M. Yang*, J. Li*, et al., Cell Rep. Phys. Sci., **2022**, 3, 100748
6. C. Wang, H. Xie*, H. S. Hu*, L. Jiang*, et al., Angew. Chem., Int. Ed. **2023**, 62, e202305490.
7. Y. Y. Zhang, G. Li*, L. Jiang*, J. Li*, et al., J. Phys. Chem. Lett., **2024**, 15, 3055.

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

激光剥蚀 ICP-MS 高灵敏分析研究

郭伟*
中国地质大学（武汉）

激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）具有很强的元素（同位素）微区分析能力，且样品前处理简单、灵敏度高、多元素（同位素）同时检测等优点。已广泛应用于地球科学、生命科学等领域，然而，其灵敏度仍难于满足微米级别空间分辨率要求，如 3-5 微米单个流体包裹体分析等。本工作致力于提高激光剥蚀气溶胶原位提取效率、等离子体电离效率和离子提取及传输效率等，通过研制新型原位提取激光剥蚀池、Ar-N_2 混合 plasma 基体改进剂、降低气溶胶在 plasma 中解离时间、降低接口区压力增加离子提取丰度等融合技术，最终实现了 LA-ICP-MS 元素分析灵敏度 20-46 倍提升。该技术已成功应用于单个流体包裹体元素分析和小麦粒单个细胞元素成像研究。

关键字 激光剥蚀电感耦合等离子体质谱；高灵敏；高空间分辨率；分析研究

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

基于 ps-LIBS 的 2D/3D 快速元素成像技术研究

王珍珍*
西安交通大学

激光诱导击穿光谱(LIBS)技术在环境监测、材料科学、考古研究等领域有着广泛的应用。目前的研究重点是利用 LIBS 提高元素空间成像的空间分辨率。纳秒激光器是 LIBS 中常用的激光器。在纳秒激光烧蚀过程中，靶材存在热效应，难以进一步提高空间分辨率。本研究利用皮秒激光器分析了激光聚焦光斑直径、激光能量和激光照射间隔对 LIBS 空间分辨率的影响。研究表明，缩短激光波长和透镜焦距可以显著减小烧蚀坑的直径。较小直径的烧蚀坑可以为空间成像获得更高的空间分辨率提供条件。随后，以定制的 Cu-Al 卷曲样品作为实验样品，研究激光能量和照射间隔对空间分辨率的影响。当激光能量为 0.4 μJ/脉冲，照射间隔为 0.8 μm 时，空间分辨率可达 1 μm。并将实验结果与 SEM-EDS 观察结果进行对比，对 LIBS 实验结果进行了验证。在以上研究的基础上，基于高空间分辨率的 LIBS 空间成像技术已应用于非均匀材料的二维和三维快速元素成像。

关键字 激光诱导击穿光谱；皮秒激光；2D/3D 元素成像

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

石英增强激光光谱传感技术

马欲飞*、乔顺达、何应
哈尔滨工业大学

针对常见半导体激光源输出波长短、功率低、调谐范围窄的问题，本论文提出了以宽带可调谐单纵模固体激光器作为激励源，并以此开展了石英增强光声光谱 (QEPAS) 气体传感技术的研究工作。同时，基于固体激光器光学谐振腔的开放性，设计了内腔 QEPAS 气体传感系统，将音叉探测单元放置在了激光器谐振腔内，在提高系统集成度的同时，也利用了腔内的高功率密度，改善了系统探测性能。最后，针对 QEPAS 技术中的核心探测元件，设计了多款新型石英音叉，有效降低了其共振频率、增大了叉股间隙，实现了压电转换效率的提高和光学噪声的降低。

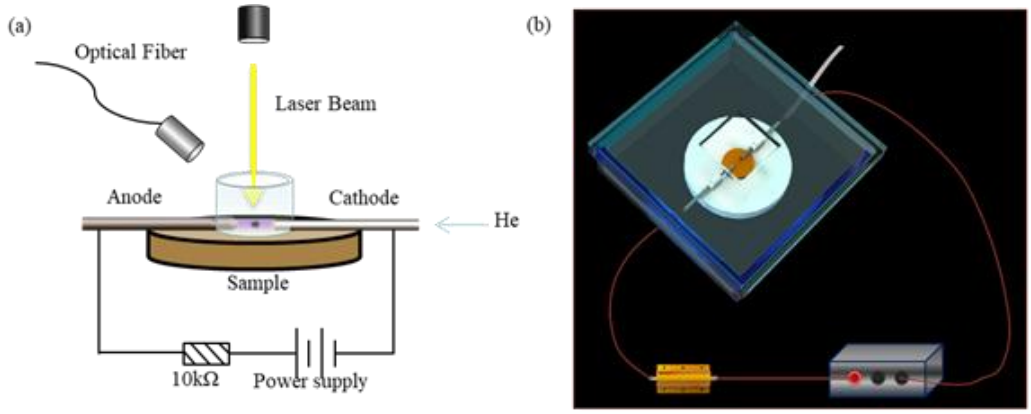
关键字 激光光谱；石英音叉；气体传感

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

激光诱导击穿光谱信号增强技术的研究及应用

张国霞、李悦、汪正*
中国科学院上海硅酸盐研究所

激光诱导击穿光谱（LIBS）技术是近年来备受关注的固体直接进样分析技术，由于其拥有众多优点，如无接触、原位分析、快速实时检测、无需样品预处理、无需真空环境等，被广泛应用于环境监测、生物医学、食品安全，考古鉴定， 工业在线诊断等多个领域。但由于激光诱导脉冲为瞬时作用，因此产生的激光等离子体无法持续稳定，使烧蚀效率降低，稳定性差，限制了信号的信噪比和灵敏度，使得该方法无法满足痕量元素的检测要求。大气压辉光放电(APGD)是发展较快的一种微等离子体技术，其优点包括在大气压下操作、低功耗、结构简单、成本低、元素选择性高、可持续稳定放电等，作为激发源应用于原子光谱分析上是一种绿色经济的等离子体源。因此，本研究利用大气压辉光放电微等离子体（APGD）的可持续放电特性，对瞬态的 LIBS 激光等离子体进行二次持续激发。通过装置的联用及参数的优化最终有效地提高 LIBS 检测的灵敏度及稳定性，拓展 LIBS 在痕量元素分析领域的应用。在最佳参数条件下，将 LIBS-APGD 系统应用于土壤中 Ti、Ni、Cu、Y、Ba、La、Eu、Yb 和 Lu 元素的检测，与 LIBS 系统相比，这些元素的发射谱线信号强度分别提高了 17.8，5.7，5.2，10.5，7.4，6.1，8.7，7.8 和 8.7 倍，检出限从 246，356，133，158，10，175，102，105 和 262 $mg \cdot kg^{-1}$ 降低至 43，67，31，20，2，35，21，18 和 49 $mg \cdot kg^{-1}$。此外，通过对土壤标准样品（GBW07453、GBW07455）以及实际土壤样品中 Ti、Ni、Cu、Y、Ba、La、Eu、Yb 和 Lu 元素的检测验证了 LIBS-APGD 系统的分析准确性。



关键字 激光诱导击穿光谱；大气压辉光放电

参考文献

1. Yue Li, Guoxia Zhang, Zhaoqing Cai, Zheng Wang* Novel Signal Enhancement Strategy for Laser-Induced Breakdown Spectroscopy via Miniaturized Atmospheric Pressure Glow Discharge, Anal. Chem. **2022**, 94, 6281−6288

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

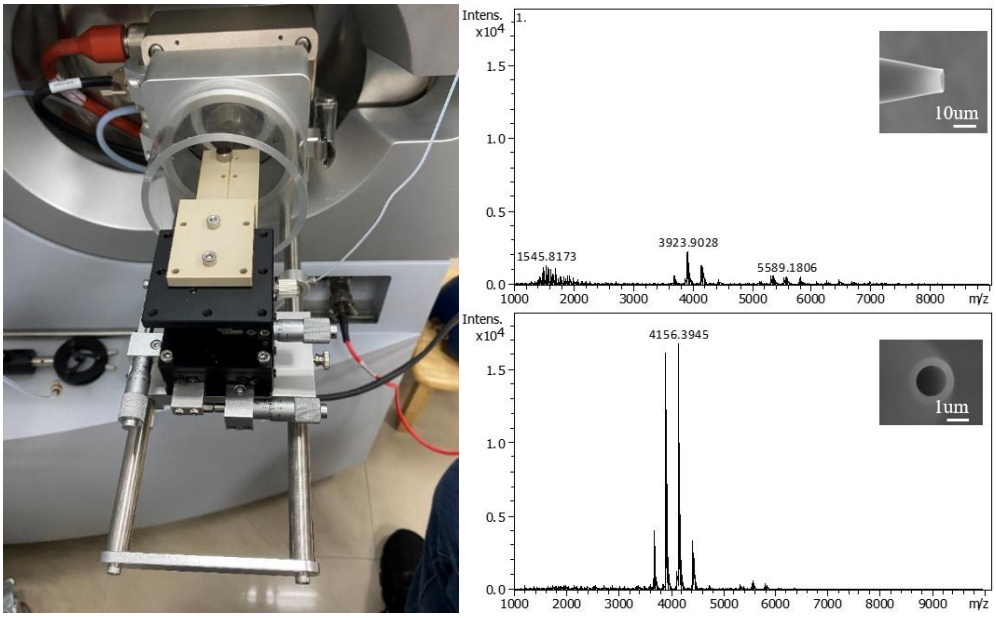
非变性质谱离子源研制

陈子龙*[1]、朱挺[1,2]、朱新海[1]、闫素君[1]
1. 中山大学分析测试中心
2. 中山大学化学学院

非变性质谱（native MS）技术可以测定生物大分子在接近生理状态下的准确分子量，尤其适合表征蛋白质及其复合物的结构、蛋白质与小分子的非共价相互作用等，可测试的分子量高达百万 Da，具有广泛的应用前景。但是商品化质谱离子源售价高昂并且各厂商之间不通用，甚至该离子源在同一厂商的不同型号质谱仪上也可能不通用，导致该离子源的推广受到一定限制。因此，自主设计和研制该离子源可以大幅度降低使用成本，推动 native MS 技术的进一步发展及其广泛应用。

目前已经在布鲁克公司的捕集离子淌度飞行时间质谱仪（Bruker timsTOF）上自主设计并研制了一款 native MS 离子源，利用牛血清蛋白（BSA）初步探究了质谱上机条件。同时对亚微米级尖端毛细管喷针的拉制参数进行了优化，不仅重现性高，还可大幅度降低使用成本。

结果表明，自主设计搭建的 native MS 离子源装置用于分析完整蛋白是可行的。未来将进一步扩展该自主研制的 native MS 离子源质谱接口的适用范围，完成 ThermoFisher 和 Waters 等厂商高分辨质谱的接口设计，丰富完整蛋白的质谱碎裂模式（如 HCD、ETD、ECD、LID 和 UVPD 等），并提出完整蛋白结构质谱解析的软硬件方案。



关键字 非变性质谱；离子源；自主设计

参考文献

1. S. Tamara, M. A. den Boer, A. J. R. Heck, *Chem. Rev.*, **2022**, 122, 7269-7326.
2. J. L. Bennett, G. T. H. Nguyen, W. A. Donald, *Chem. Rev.*, **2022**, 122, 7327-7385.
3. A. D. Rolland, J. S. Prell, *Chem. Rev.*, **2022**, 122, 7909-7951.

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：报告

RSR-MS：基于参考的质谱组织和细胞成像超分辨率重构方法

方一帆[1]、殷志斌[2]、徐周毅*[1]、杭纬[1]
1. 厦门大学
2. 深圳综合粒子设施研究院

高空间分辨率质谱成像可以在不标记生物样品的情况下同时分析数百种离子的空间分布特征，然而更高的分辨率往往伴随着更长的采样时间。近来，通过深度学习方法实现质谱的高空间分辨率快速成像取得了重大进展，但是，多数方法不可避免地依赖于大量的训练数据，又或者是需要成对的高低分辨率质谱图像，而这样可用的质谱图像数据通常很难获取到。在这里，我们提出了一种基于参考图像的质谱超分辨率重构方法，利用苏木精-伊红染色显微图像/光学显微镜图像作为参考图像，用于提取丰富的纹理信息，并结合原始质谱图像的离子强度信息，训练得到一个图像特定的超分辨重构网络，仅使用单张质谱图像以及单张参考图像，产生了具有丰富化学信息和纹理细节结构的高分辨率重建质谱图像。

关键字 质谱成像；超分辨重构；单细胞质谱成像；深度学习

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

一种激光光纤准直聚焦的同轴观测质谱离子源光学系统

杨美彬、徐周毅*、杭纬
厦门大学

传统激光解吸电离质谱技术中脉冲激光束一般经由聚焦透镜聚焦后照射到样品表面，但此方法进行成像时激光束斑直径较大，难以获得高空间分辨的质谱成像结果。而将激光经由微透镜光纤引入至离子源的设计，可以大幅缩小光斑尺寸从而提高空间分辨率。但由于微透镜光纤出口的焦距为微米级，光纤与样品之间的距离极短，导致光纤极易遭到损伤，同时样品的溅射易使光纤上产生沉积造成污染降低激光传输效率。

因此，本研究设计了一种激光光纤准直聚焦的同轴观测质谱离子源光学系统。激光经光纤耦合模块进入微透镜光纤聚焦后形成低微米级的光斑，聚焦光斑再次扩散后经过二向色镜反射，随后扩散光通过准直透镜转换为平行光，再经由与准直透镜焦距相同的聚焦透镜被再次聚焦，聚焦后的光斑大小与微透镜焦距处的光斑大小一致。通过这一设计，即保证激光光斑与微透镜光纤光斑一致，又避免了微透镜光纤受到样品溅射的污染。另外，在二向色镜上方设置有同轴照明观测模块，该模块由下至上依次为准直透镜、分束镜、聚焦透镜及 CCD 相机，其中照明光经过分束镜后被样品反射或透射出来，后又经过分束镜后被 CCD 相机接收，以此来减小照明光对观测的影响。除此之外，离子源内设闭环二维位移台，实现自动的矩阵弹坑剥蚀。该设计减小束斑尺寸和避免光纤采样时被污染从而提高成像分辨率，在采样同时观测采样状态，自动化的加入大大缩小实验所需的时间。

关键字 激光解吸电离质谱；离子源；光纤；同轴观测

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

原位红外光谱技术的应用分析

何嘉锋*
中国科学院生态环境研究中心
国科大杭州高等研究院

近些年来，原位红外光谱技术应用十分广泛，被应用于很多领域，尤其是在研究催化反应的中间过程及其中间物种的原位监测。原位红外光谱技术包括许多种类，主要有调制激发光谱（MES）、衰减全反射红外光谱（ATR-IR）、漫反射红外傅里叶变换光谱（DRIFTS）、时间分辨红外光谱等，这些红外光谱技术通常是协同作用以研究相应的催化反应过程中的变化。调制激发光谱与传统傅里叶变换红外光谱相比，具有更高的灵敏度，更适合用于研究痕量物质。调制激发光谱在非稳态条件下运行，这是由于通过改变外部参数（例如：浓度、温度、辐射或 pH 值）对系统进行周期性扰动而强制的。

具有调制激发光谱的 ATR-IR 是一种非常灵敏的光谱技术，用于研究痕量物质在原位界面吸附的动态行为。如原位衰减全反射红外光谱结合调制激发光谱也可以研究气体物质在固体物质界面处的吸附过程中的动态变化。一项研究表明，通过原位衰减全反射红外光谱结合调制激发光谱和相敏检测能证明 CO_2 在冰表面的吸附伴随着碳酸的形成，在没有高能辐射和没有强酸质子化的情况下，冰上的 CO_2 可以形成碳酸。碳酸在低温下形成有利，而在高温下它会迅速分解形成碳酸氢盐（HCO^{3-}）和碳酸盐（CO_3^{2-}）。

原位 DRIFT 也可以结合紫外-可见吸收光谱对具有催化活性的催化剂的瞬态失活效应进行研究。例如，Au 催化剂在催化 CO 氧化方面应用广泛，但是缺乏对快速时间分辨尺度反应机理的分子水平研究；有研究表明应用原位 DRIFT 和 UV-vis 来监测 Au/TiO_2 上 CO 氧化过程中的快速动态变化。另有研究表明，调制-激发衰减全反射红外光谱研究铱催化苯甲醇的有氧氧化中的支撑效应，ATR-IR-MES 光谱有助于吸附的瞬态醇盐的检测。

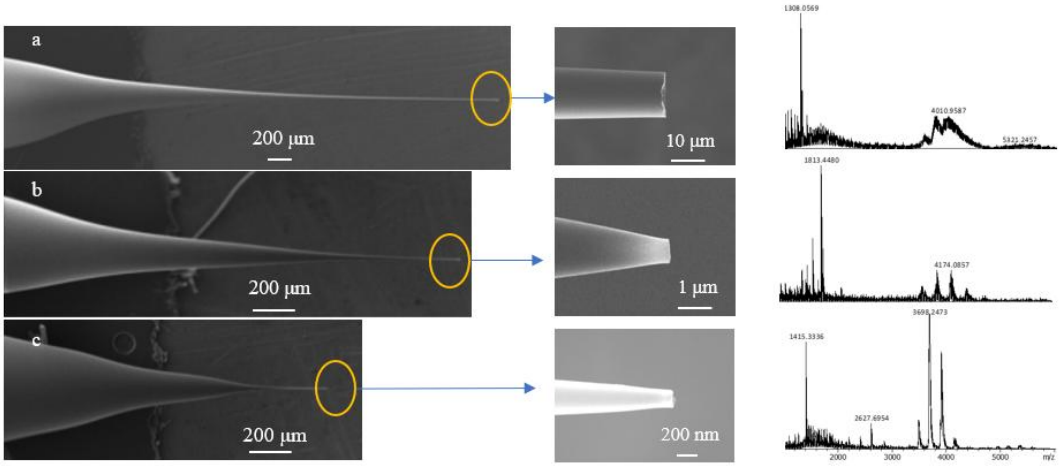
关键字 原位红外光谱；调制激发光谱；衰减全反射红外光谱；漫反射红外傅里叶变换光谱；时间分辨红外光谱

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

非变性质谱的毛细管喷针拉制工艺研究

朱挺[1,2]、闫素君[2]、朱新海[2]、陈子龙*[2]
1. 中山大学化学学院
2. 中山大学分析测试中心

非变性质谱（native MS）方法可以在气相中保持非共价蛋白复合物的四维结构完整性，可以提供生物大分子的分子量、化学计量比和蛋白亚基间的互作网络关系，具有广泛的应用前景。然而，在实际应用中 native MS 结果的好坏常常受限于蛋白复合物的除盐效果，蛋白表面富含钠盐和钾盐极易导致谱图谱峰严重展宽，甚至无法获得有效信号。先前研究表明，通过降低毛细管喷针的尖端直径有望降低盐加和对蛋白谱峰信号的影响，但商品化 native MS 喷针不仅单价昂贵、可选尺寸少，且单个样品测试可能需要消耗数根喷针，导致喷针的使用成本居高不下，阻碍了 native MS 技术的技术推广。为此，本研究旨在优化亚微米级毛细管喷针的拉制方法，并探究不同毛细管尖端直径对生物大分子谱峰分辨率的影响因素。目前已经使用 Sutter 公司的 Mode P-2000 激光拉制仪，对喷针形貌产生影响的拉制条件进行探索 ，获得了不同拉制条件（激光加热温度、拉伸力度、延迟时间等）对其形貌的影响规律。借助机器学习手段，进一步优化了喷针拉制参数。同时，结合自主设计并加工的 native MS 离子源在捕集离子淌度飞行时间质谱仪（Bruker timsTOF）上完成了喷针有效性的验证。结合扫描电镜和蛋白样品质谱测试数据表明，自主拉制的毛细管喷针能够结合自制 native MS 离子源进行高盐含量下的完整蛋白高灵敏检出。同时，自主拉制的毛细管在形貌调整上更为便捷和多样，能完全根据实验需求进行灵活调整。



关键字 非变性质谱；毛细管喷针；完整蛋白表征

参考文献

1. J. L. Bennett, G. T. H Nguyen, W. A. Donald, *Chem. Rev.*, **2022**, 122, 7327-7385.
2. A. C. Susa, Z. Xia, E. R. Williams, *Anal. Chem.*, **2017**, 89, 3116-3122.
3. J. S. Jordan, Z. Xia, E. R. Williams, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2022**, 33, 607-611.

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

体内氮芥-DNA 加合物类型与分布研究

刘晓慧[1,2]、王朝霞[1]、刘玉龙[1]、徐华*[1]、陈爱兵[2]、谢剑炜[1]
1. 军事医学研究院国家安全特需药品全国重点实验室，北京 ，100850
2. 河北科技大学化学与制药工程学院，石家庄，050018

目的：烷化剂氮芥易与 DNA 上的碱基共价结合形成 DNA 加合物，导致 DNA 发生链内或链间交联，由此引发细胞毒性和基因毒性。氮芥可干预 DNA 复制和分裂过程，被 IARC 列为 2A 类致癌物；但同时其作为抗肿瘤药物在临床上被最早应用并取得了明显治疗效果，至今氮芥及其衍生物仍是治疗相关肿瘤的有效手段。本研究旨在检测动物分别暴露 3 种氮芥即双（2-氯乙基）乙胺（HN_1）、双（2-氯乙基）甲胺（HN_2）和三（2-氯乙基）胺（HN_3）后，体内形成的 HN-DNA 加合物类型及其在不同组织中的分布情况，为准确溯源氮芥暴露和后续研究剂量-效应关系提供实验基础。

材料与方法：ICR 小鼠分别经腹腔注射 100 μL 的 10 mg/mL 的 HN_1、HN_2 和 HN_3 溶液，30 min 后收集小鼠的肝脏、脾脏、肺脏、肾脏等组织。将组织在研磨筛上充分研磨并收集细胞，采用细胞裂解液法提取 DNA，以酸解加热方式水解 DNA。采用多反应监测模式（MRM）检测肝脏、脾脏、肺脏和肾脏等组织中的 HN-DNA 加合物，验证氮芥与机体相互作用产生的加合物类型及其分布规律。

结果：肝脏组织中可检测到 HN1-A、HN1-G、G-HN1-G、HN2-G、G-HN2-G、HN3-G 、A-HN3-A 和 G-HN3-G 加合物，脾脏组织中可检测到 HN1-A、HN1-G、G-HN1-G、HN2-G、G-HN2-G、HN3-G、A-HN3-A 和 G-HN3-G 加合物，肺脏组织中可检测到 HN1-A、HN1-G、G-HN1-G、HN2-G、G-HN2-G、HN3-G、A-HN3-A 和 G-HN3-G 加合物，肾脏组织中可检测到 HN1-A、HN1-G、G-HN1-G、HN2-G、G-HN2-G、HN3-G、A-HN3-A 和 G-HN3-G 加合物，

结论：实验数据表明，氮芥暴露的 ICR 小鼠中均能检测到 HN1-A、HN1-G、G-HN1-G、HN2-G、G-HN2-G、HN3-G、A-HN3-A 和 G-HN3-G 加合物，提示 3 种氮芥在体内主要与腺嘌呤和鸟嘌呤形成单加合和双加合产物，其可作为氮芥暴露的生物标志物。

关键字 氮芥；DNA 加合物；高效液相色谱串联三重四级杆质谱

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

基于改良的 QuEChERS-气相色谱串联质谱法筛选测定植物源基质中 50 余种农药残留

黄思成*
成都市公安局

食品安全与质量事关全球经济、人类健康和国土安全，加之食品供应链变得日益复杂，食品风险防范更加注重大型赛事赛前安全保障。食品种类的多样性及成分的复杂性，譬如农兽药物残留等多种痕量污染物的快速高通量筛选鉴别成为武警力量开展食品安全预判分析的重大挑战。因此，基于质谱数据库赋能高分辨质谱分析复杂样品的手段，本研究则建立了一种改良的 QuEChERS 法结合气相色谱串联质谱法（GC-MS/MS）同时检测多种植物源食材基质中 50 余种农药残留的快速检测方法。植物源食材样品用乙腈超声提取，经多功能针式过滤器压滤快速净化后上机，选用 HP-5MS 色谱柱分离，60℃保持 1 min，以 40℃/min 的速度升至 120℃，最后以 5℃/min 升至 310℃，进入动态多反应监测（dMRM）模式检测，基质匹配外标法定量。结果表明，50 种农药在 0.005~0.500 μg/mL 的浓度范围内线性关系良好（R^2>0.999），方法检出限和定量限分别在 0.06~3.88 μg/kg 和 0.20~9.60 μg/kg 之间；在 0.005、0.01、0.1 mg/kg 的加标水平下，50 种农药化合物平均加标回收平均回收率在 70.27~128.69% 范围内，相对标准偏差为 0.65~17.12%。进一步，分别选用青菜、西兰花、韭菜、橘子、番茄、大蒜样品验证所建 50 种化合物分析方法的适用性，不同种类样品带来的基质干扰均有所差异，基于质谱库同时监测了多个离子对，因此可以结合样品基质的干扰情况灵活取舍，确保对每一类样品的检测都有很好的选择性。结果表明，青菜中有较多农残被检出。可见，该方法操作简单，一步净化，且方法检出限低、灵敏度高，准确度和精密度均较好，方法性能验证其符合多种农药残留要求，并能适用于大批量检测植物源食材中多种类农药残留，充分发挥出具备同步分析多组分的优点，强化食品中风险成分的通量高分辨筛查与预警分析。

关键字 气相色谱串联质谱法；植物源基质；农药残留

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

基于负载磷钼酸铵的介孔硅薄膜的阳离子交换作用与限域生长 $CsPbBr_3$ 纳米晶策略的 Cs^+荧光传感

王昊、谢梦虹、韦嘉珍、李振宇、李嘉辉、杨冰念、林俊良、黄艺鹏*
桂林理工大学

基于磷钼酸铵中 $NH4^+$与 Cs^+的阳离子交换作用以及介孔限域原位生长 $CsPbBr_3$ 钙钛矿纳米晶（$CsPbBr_3$ NCs）的策略，设计了一种磷钼酸铵负载的介孔硅薄膜（AMP-SiO_2），用于 Cs^+的选择性富集，并建立了 Cs^+的荧光检测新方法。磷钼酸铵负载的介孔硅薄膜在 pH = 3 的条件下与 Cs^+的离子交换性能最佳，离子交换时间 15 min 即可达到平衡，薄膜对 Cs^+的吸附容量为 323 μg/片(1.3 × 1.3 cm^2)，富集因子高达 62500。将富集的 Cs^+原位生成 $CsPbBr_3$ NCs 后，薄膜的荧光增强量与 Cs^+浓度在 0.001-30 μg/mL 范围内呈线性关系，检出限为 0.00034 μg/ mL。在 Cs^+与其他共存离子浓度比为 1:50 的条件下，共存离子对 Cs^+的测定干扰程度小于 15%，表明该方法对 Cs^+具有较高的选择性。本方法能够检测出北海海水以及防城港海水样品中 Cs^+浓度分别是 0.037 μg/mL 以及 0.045 μg/mL，Cs^+的加标回收率在 98.20%以上。该研究为复杂基质样品中 Cs^+放射性核素的高选择与高灵敏检测提供新技术。

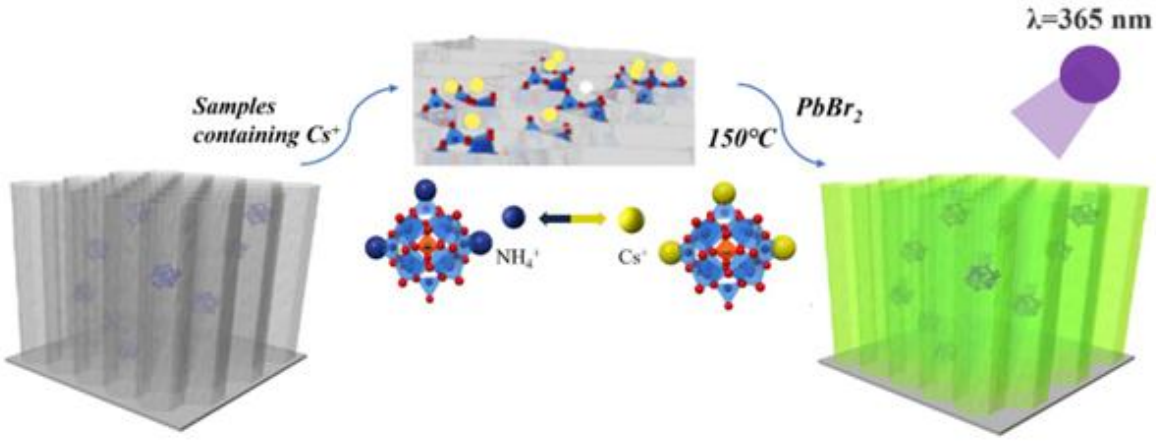


图 1. AMP-SiO_2 的阳离子交换及 $CsPbBr_3$ NCs 的限域生长示意图

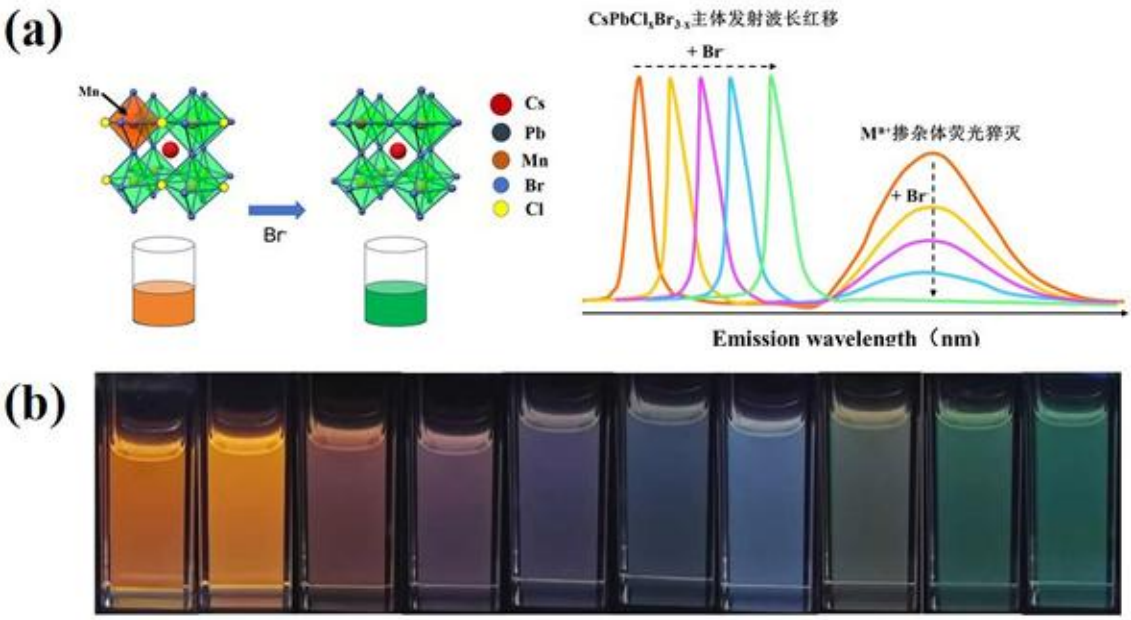
关键字 放射性核素；铅卤钙钛矿纳米晶；荧光开关

分会场：4.激光光谱与质谱
交流类型：墙报

基于 $CsPbCl_xBr_{3-x}$: Mn^{2+}纳米晶阴离子交换作用的氢溴酸西酞普兰荧光可视化检测

李嘉辉、韦嘉珍、谢梦虹、吴梅清、黄艺鹏*
桂林理工大学

西酞普兰是一种抗抑郁药物，其生产方法使其以氢溴酸盐的形式存在。精神调节类保健品的大量涌现使不法分子在保健品中非法添加氢溴酸西酞普兰以提高其产品的保健效果成为可能。然而，保健品是一类具有调节作用但不以治疗疾病为目的的特殊食品，国家食品安全法规定不得向保健品中非法添加药物，因此亟需发展保健品中氢溴酸西酞普兰的现场快速检测方法。鉴于此，本研究利用 $CsPbCl_xBr_{3-x}$: Mn^{2+}纳米晶与氢溴酸西酞普兰之间的卤素阴离子快速交换反应引起 $CsPbCl_xBr_{3-x}$ 主体的荧光发射峰红移和 Mn^{2+}掺杂体发射峰猝灭的协同作用，构建多模态响应的传感方法。在 $CsPbCl_xBr_{3-x}$ 主体波长移动模式下，氢溴酸西酞普兰的检测线性范围为 0.05-2.50 μmol/mL，检出限为 0.01 μmol/mL。在荧光猝灭响应模式下，氢溴酸西酞普兰的传感线性范围同样为 0.05-2.50 μmol/mL，检出限为 0.02 μmol/mL。



在多重响应的作用下，体系的荧光颜色随着氢溴酸西酞普兰浓度的增加产生明显的颜色变化，显示出较高的可视化分辨率，为氢溴酸西酞普兰阳性样品的初步快速筛查提供新技术。

图 1. (a) $CsPbCl_xBr_{3-x}$: Mn^{2+}纳米晶对氢溴酸西酞普兰的荧光传感原理示意，(b)$CsPbCl_xBr_{3-x}$:Mn^{2+}纳米 晶分散液与不同浓度（0,0.10,0.50,0.75,1.00,1.25, 1.5, 1.75, 2.00, 2.50 μmol/mL）的氢溴酸西酞普兰 反应后 365nm 紫外光下的照片

关键字 铅卤钙钛矿纳米晶；锰掺杂；荧光传感；氢溴酸西酞普兰；可视化检测

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

Photo-induced electrochemiluminescence biosensing and imaging

索吉克*
University of Bordeaux

Electrochemiluminescence (ECL) is the electrochemical generation of light. It involves an interfacial charge transfer that produces the excited state of a luminophore at an electrode surface. ECL is a powerful technique that is widely employed for immunoassays and clinical diagnosis. On the other hand, photoelectrochemistry at illuminated semiconductors is a field of research that deals with the charge transfer of photogenerated charge carriers at an electrode surface. The combination of ECL with photoelectrochemistry at illuminated semiconductors is referred to as photoinduced ECL (PECL) and is a growing field of research.[1]

PECL results in the conversion of incident photons ($_{exc}$), that are absorbed by the semiconductor photoelectrode to emitted photons ($_{ECL}$), produced by the ECL reaction. Although demonstrated in the seventies, PECL remained unexplored until the last five years, as a result of the considerable progress achieved in semiconductor photoelectrodes and ECL systems.[1] Nowadays, a large variety of PECL systems can be designed by combining photoelectrode materials with ECL luminophores, making it a versatile tool for light conversion.[2] In this talk, we will present the recent developments in PECL and we will show that, by engineering the photoelectrode material and carefully considering the reactivity involved for ECL and its counter-reaction, PECL enables the ultimate concept of all-optical ECL (AO-ECL), i.e., ECL generation at an illuminated monolithic device immersed into the electrolyte solution.[3] Due to the robustness of recently manufactured PECL systems, several applications can already be envisioned for microscopy, elucidation of mechanisms solar conversion mechanisms, bioanalysis, and near-infrared imaging.[4-5]

关键字 Electrochemiluminescence

参考文献:

1. Zhao, Y.; Descamps, J.; Sojic, N.; Loget, G., *Acc. Chem. Res.* 2024, 57, 2144.
2. Yu, J.; Saada, H.; Abdallah, R.; Loget, G.; Sojic, N., *Angew Chem Int Ed* 2020, 59, 15157.
3. Zhao, Y.; Descamps, J.; al Hoda Al Bast, N.; Duque, M.; Esteve, J.; Sepulveda, B.; Loget, G.; Sojic, N., *J Am Chem Soc* 2023, 145, 17420.
4. Zhao, Y.; Léger, Y.; Descamps, J.; Sojic, N.; Loget, G., *Small* 2024, 2308023.
5. Descamps, J.; Zhao, Y.; Goudeau, B.; Manojlovic, D.; Loget, G.; Sojic, N., *Chem. Sci.* 2024, 15, 2055.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

研究电致化学发光的高级仪器设备

丁志峰*
Western University

在本文中，我们介绍了课题组在电致化学发光（ECL）高级仪器设备方面的进展[1]：实时 ECL 光谱[2]、绝对 ECL 量子效率[3-6]以及单一 ECL 反应动力学[7]。

通过“实时光谱”，我们可以在一个电位动态过程中连续收集显示发光的单个 ECL 光谱，从而探索 ECL 发光机理；还可以追踪中间体和激发态的形成，这对于研究和描绘电子转移路径至关重要[2]。ECL 反应的效率被定义为:通过激发态辐射弛豫产生的光子总数与注入系统的库仑电子总数之比。直至最近，一个体系的 ECL 效率大多是通过与一种知名的 ECL 发光体 Ru(bpy)32+的 ECL 效率进行对比来计算的。我们最近开发了一种方法，利用按需校准的检测系统，如光电倍增管（PMTs）[3]、光子计数头（PCHs）[4]和光谱仪/CCD 阵列相机[5]，可以再现并定量地确定绝对 ECL 量子效率。准确确定 ECL 发光体的效率对于发光的应用至关重要，因为优化光子输出/电子输入比可以为消费者节省大量成本。我们将给出几个实例来展示一下我们的策略 [6] 。最后，我们搭建了可靠的仪器设备，使用超微电极、光子计数器和高时间分辨率测量仪以及 COMSOL Multiphysics 软件，对金属纳米簇和新型发光分子的单一湮灭电致化学发光（ECL）反应，以及高频光电化学的数字模拟进行了研究并测定反应动力学常数[7]。

关键字 电致化学发光， 实时 ECL 光谱，绝对 ECL 量子效率，单一 ECL 反应动力

参考文献:

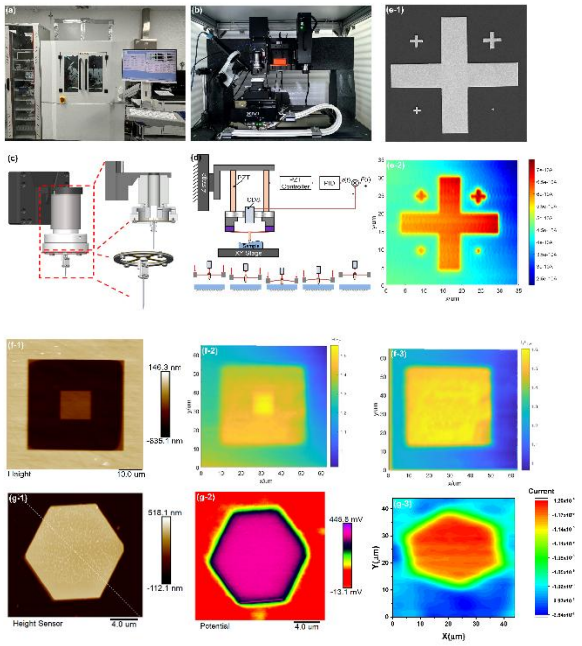
[1]Hesari, M.; Ding, Z. *J. Electrochem. Soc.* **2016,** *163*, H3116-H3131
[2] Hesari, M.; Ding, Z., *Nat. Protoc.* **2021,** *16*, 2109-2130.
[3]Adsetts, J. R.; Chu, K.; Hesari, M.; Ma, J.; Ding, Z., *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 11626-11633.
[4]Chu, K.; Adsetts, J. R.; Ma, J.; Zhang, C.; Hesari, M.; Yang, L.; Ding, Z., *J. Phys. Chem. C* **2021**, *125*, 22274-22282.
[5]Adsetts, J. R.; Chu, K.; Hesari, M.; Whitworth, Z.; Qin, X.; Zhan, Z.; Ding, Z., *J. Phys. Chem. C* **2022**, *126*, 20155–20162.
[6]Wei, X.; Chu, K.; Adsetts, J. R.; Li, H.; Kang, X.; Ding, Z.; Zhu, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 20421-20433.
[7]Ding et al., in preparation.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

高时空分辨多模测量扫描电化学显微镜

詹东平*、汪洋
厦门大学

在纳米尺度上研究电催化剂的表界面反应特性以及物理场电效应对其电催化性能的影响规律，揭示电催化反应机理和构效关系，是材料、能源、催化以及电化学等领域长期面临的挑战和关键科学问题。同时，为了揭示材料物理性质、反应机理和电化学性能之间的内在关联性，当代电化学仪器方法趋于同位点、多模态、高时空分辨的原位/工况测量。本课题旨在研制纳米尺度的扫描电化学显微镜仪器平台，包括（1）研制了集成高精度气浮导轨直线运动平台和压电三维位移台的三维联动位移系统，结合软硬件误差补偿，实现了纳米精度的宏-微-纳跨尺度的精确定位；（2）提出了微力伺服机制，设计并研制了基于十字薄梁结构的微力伺服模块，实现了纳米探针和样品基底间接触零点；（3）在此基础上发展了扫描接触力显微镜和扫描电化学显微镜联用的同位点、多模式测量技术，实现了复杂样品本征反应活性和表面形貌的同步测量。仪器平台达到了纳米空间分辨、化学活性分辨、反应机理分辨以及物理外场协同等目标，为设计和构筑高效界面催化体系，揭示纳米尺度界面反应机制提供技术支撑。



(a)仪器实物图；(b)宏-微-纳三维联动平台；(c)微力伺服模块结构图；(d)微力伺服原理；(e1-2)SECM 高分辨成像；(f1-3)多级结构 GC 模板、恒高度 SECM 成像、恒距离 SECM 成像；(g1-3) Ag 纳米片多模测量 AFM、SKPM、SECM 成像。

关键字 扫描电化学显微镜、多模测量、高时空分辨

参考文献：

1. L. Han, D. Zhan, et al, *Angew Chem Int Ed Engl.*, **2020**, 59 (47), 21129-21134.
2. Q. He, D. Zhan, et al, *J Am Chem Soc.*, **2021**, 143 (44), 18419-18425.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于微流控电分析的分子 POCT 研究及应用

方雪恩*
复旦大学

受全球气候加速变化、人类活动范围不断扩大、病原体跨物种传播频繁发生，新型病原体引发全球大流行风险持续增加。对于如何实现病原体现场快速测量既是当前基础研究的热点、也是对抗病原体的重要武器，攸关民众健康、社会安定和国家战略安全。本项目采用了微流控芯片光/电分析策略，建立了离心式微流控分子 POCT 测量系统和穿戴式电分析测量系统，并成功应用于重要临床病原体的快速现场测量和穿戴式实时测量分析。

关键字 微流控芯片　电分析　床旁分析　分子检测

参考文献：

1. Huiwen Xiong, Chenxin Zhu, Hui Chen*, Huali Shen*, Jilie Kong *, and Xueen Fang*, , ***Advanced Science, 2023, 2307840***

2. Bin Yang, HaonanWang, Jilie Kong, and XueenFang *, **Nature Communications, *2024,15,1936.***

3. Bin Yang, Jilie Kong*, and Xueen Fang*, **Nature Communications, 2022, 3999**

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

“单”电极电化学发光装置及分析应用

徐国宝*[1,2]、刘宏展[1,2]、高文跃[1,3]、杜芳昕[1,3]、Kateryna Muzyka[1,4]、祁文静[1,3]、启黎明[1,3]、Dmytro Viktorovych Snizhko[1,4]、Yuriy Tymofiiovych Zholudov[1,4]

1. 中国科学院长春应用化学研究所电分析化学国家重点实验
2. 中国科学技术大学应用化学与工程学院
3. 中国科学院大学
4. 哈尔科夫国立无线电电子大学生物医学工程系分析光化学电子学实验室

电化学发光在临床分析、发光器件等领域得到了广泛的应用。传统的电化学发光装置至少有两个电极，包括阳极和阴极[1,2].双极电化学发光装置具有两个驱动电极和至少一个双极电极。对于多元电化学发光分析，传统电化学发光装置和双极电化学发光装置中都需要使用电极阵列。然而，用某些材料制造电极阵列既困难又昂贵。“单”电极电化学发光装置是一类有吸引力的替代方案。

我们在这里介绍了几种基于电阻诱导产生电位差、无线输电和自供电镀锌铁的“单”电极电化学发光装置，以及它们在多元分析和金属保护涂层腐蚀成像分析等的应用[3-7].

致谢：感谢国家自然科学基金委会(Nos. 22174136)、中华人民共和国科学技术部(CU03-02)、乌克兰教育和科学部(M/109-2019)和中国科学院的资助。

关键字 单电极

参考文献

1. C. Meng, et al., *eScience*, **2022**, 2, 591.
2. Z. Liu, et al., *Chem. Soc. Rev.,* **2015**, 44, 3117.
3. W. Qi, et al., *Anal. Chem.,* **2014**, 86, 8927
4. L. Qi, et al., *Anal. Chem.,* **2016**, 88, 1123
5. W. Gao, et al., *Chem. Sci.,* **2018**, 9, 3911.
6. F. Du, et al., *Anal. Chem.,* **2022**, 94, 2189.
7. H. Liu, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202411764.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

力学微环境对肿瘤细胞特性影响的扫描电化学显微镜研究

李菲*、赵宇翔、曙阿克.库尔曼巴依
西安交通大学

体外构建肿瘤细胞力学微环境模型、发展单细胞原位表征技术，研究与癌症相关力学微环境对细胞特性的影响，对探索癌症病理和发展新型治疗技术具有重要意义。我们构建了模拟乳腺癌和肝癌不同发展阶段的细胞力学微环境体外模型，应用扫描电化学显微镜（SECM）原位表征了乳腺癌和肝癌细胞在不同基质刚度力学微环境中的多药耐药蛋白活性和铁死亡过程等，结果证实力学微环境对乳腺癌和肝癌细胞生化特性的影响，为研究力学微环境相关癌症病理学提供了单细胞原位表征数据参考。

关键字 力学微环境；乳腺癌；肝癌；铁死亡；扫描电化学显微镜

参考文献：

1. S. Kuermanbayi, Y. W. Yang, Y. X. Zhao, Y. B. Li, L. Wang, J. Yang, Y. Zhou, F. Xu, F. Li, *Chem. Sci.*, **2022**, 13, 10349.

2. Y. X. Zhao; Y. B. Li; S. Kuermanbayi; Y. L. Liu; J. J. Zhang; Z. Y. Ye; H. Guo, K. Qu, F. Xu, F. Li, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 1940.

3. Y. X. Zhao, Z. Y. Ye, Y. L. Liu, J. J. Zhang, S. Kuermanbayi, Y. Zhou, H. Guo, F. Xu, F. Li, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 1102.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

电化学传感器用于动态监测癌细胞

陈旭*、魏雪、周赟璠
北京化工大学

细胞的动态变化在细胞的增殖与分化、疾病的发生与发展以及免疫治疗中扮演着关键角色。监测细胞动态变化的研究对于理解生命过程、疾病机理、药物作用以及开发新的治疗策略都具有重要的意义 [1]。然而监测活细胞的动态变化还面临细胞标记、细胞异质性、实时监测等困难。针对上述问题，我们发展了系列电化学生物传感器，用于原位监测乳腺癌细胞的动态变化。如监测肿瘤转移相关的上皮间质转化(EMT)动态变化过程，发展的多重电化学生物传感器能够在单次运行中同时监测乳腺癌细胞表面的 E-cadherin 和 N-cadherin，实现对 EMT 动态过程长达 60 小时的追踪 [2]。此外，肽水凝胶集成的三维(3D)电化学发光(ECL)传感器，可用于监测 3D 培养下的乳腺癌细胞在有/无药物刺激时释放的小分子 [3]，实现高灵敏地对乳腺癌细胞的不同亚型进行区分。

关键字 电分析化学 癌细胞 动态监测

参考文献：

1. Y. Qi, F. Zhang, S. Tian, H. Wu, Y. Zhao, X. Zhang, Y. Liu, P. Fu, C. Amatore, W. Huang, Nat. Nanotechnol., 2024, 19(4), 524-533.

2. X. Wei, H. Xiong, Y. Zhou, X. Chen, W. Yang, Biosens. Bioelectron., 2024, 258, 116372.

3. Y. Zhou, X. Wei, J. Chen, H. Xiong, D. Sui, X. Chen, W. Yang, Anal. Chem., 2024, 96(33), 13464-13472.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

核酸分子界面组装及传感成像

张璞*
西南大学

生物传感器的构建为肿瘤诊断提供了重要的技术支持，其存在靶向识别反应动力学不足、细胞渗透率有限以及多组分检测准确度有待提高等重要科学问题。本工作针对以上问题，围绕 DNA 纳米结构自组装，取得系列研究成果：1）通过 DNA 纳米结构高度有序自组装，提高靶标与纳米结构识别的动力学反应速度，提高传感器响应速度；2）利用 DNA 正四面体与细胞膜受体通道相互作用，提高载体的细胞膜渗透性，提高传感器原位检测灵敏度；3）构建核酸门控组分动态网络调控信号分子释放，实现肿瘤标志物多组分精准检测及成像。

关键字 核酸纳米结构 自组装 电化学发光 生物传感

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

贵金属合金纳米簇近红外 I 区电化学发光信号放大及在分子灵敏检测中的应用

张玲*、郭凡凡、李家迪、李垣瑾、曾文俊、汪川云
哈尔滨工业大学（深圳）

分子的近红外一区电化学发光（NIR I ECL）检测是一种信噪比高和穿透力强的分析方法，目前在免疫分析和生物分子检测中有较为广泛的应用[1]。如 CdTe 量子点、CN 量子点、SnS2 量子点/ Ti3C2 MXene 二维材料、Eu2[Ru(dcbpy)3]3 纳米晶体、Au 纳米簇、Co 掺杂 Au 纳米簇等 NIR I ECL 纳米材料已被报导，并应用于免疫传感器和适配体传感器的构建，检出限能够达到几个 fg·mL-1 和 fmol·L-1[2]。同时，多巴胺对于 Ag2Se 量子点的 NIR I ECL 信号具有淬灭作用，能够实现 0.1 μmol·L-1 以上的多巴胺检测[3]。然而，NIR I ECL 纳米材料的 ECL 转换效率较低，进一步提高其转换效率迫在眉睫。贵金属纳米材料具有独特的光学和催化性质[4]。本研究利用合金效应、配体静电吸引提高 AuPtAg 合金纳米簇的 NIR I ECL 信号，并实现去甲肾上腺素的直接电化学检测和癌症标志物免疫传感器的构建（Fig. 1）。Ag 和 Pt 掺杂能够提高 Au 纳米簇的 NIR I ECL 信号，使其增强 14.6 倍（Fig.1B）。同时，使用硫辛酸（LA）取代纳米簇表面的部分谷胱甘肽（GSH）配体，使表面带有正电荷，与共反应剂产生静电吸引，从而使信号进一步提高 2.2 倍。最终，采用 LA 保护的 AuPtAg 包埋的 SiO2 微球构建的去甲肾上腺素传感器的检出限达到 0.1 nmol·L-1，并具有很好的抗干扰性（Fig. 1C 和 D）。采用 AuPt 合金纳米簇标记的人甲胎蛋白癌症标志物免疫传感器的检出限达到 1.0 pg·mL-1，是商业酶联免疫分析检测试剂盒的百分之一（Fig. 1E 和 F）[5]。本研究对于生物分子的灵敏检测和重大疾病的早期诊断具有重要的研究意义。

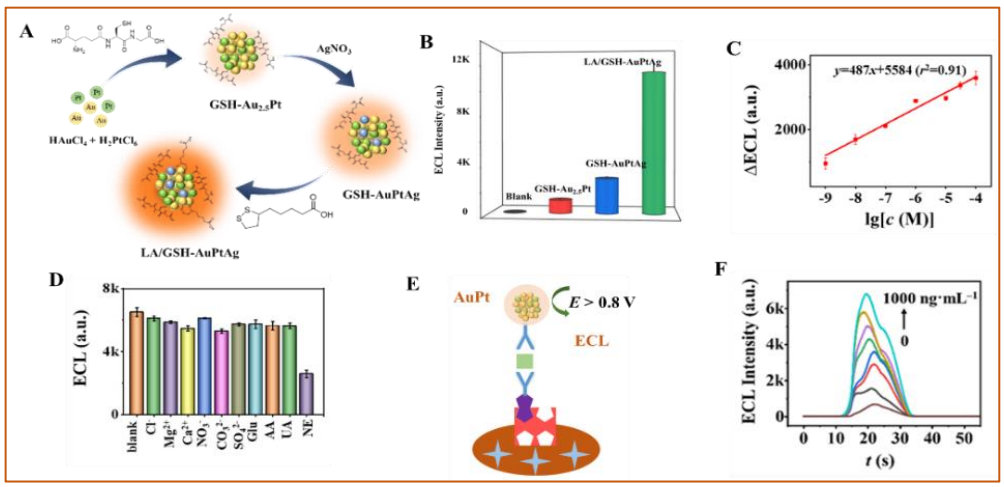


Fig. 1 （A 和 B）GSH-AuPt 和 LA/GSH-AuPtAg 纳米簇的合成示意图和 NIR I ECL 信号对比图。（C 和 D）LA/GSH-AuPtAg-SiO_2 构建的去甲肾上腺素 ECL 传感器的线性工作曲线和抗干扰性研究。（E 和 F）GSH-AuPt 纳米簇标记的人甲胎蛋白 ECL 传感器的结构示意图和不同浓度人甲胎蛋白的 I_{ECL}-t 曲线。

关键字 贵金属纳米簇，近红外一区电化学发光，分子检测，去甲肾上腺素腺素，人甲胎蛋

白

参考文献：

1. A. L. Antaris, *et al*, Nat. Materi. **2016**, 15, 235-242.
2. G. Liang, *et al*, Anal. Chem. **2012**, 84, 10645-10649.
3. R. Cui, *et al*, Anal. Chem. **2012**, 84, 8932-8935.
4. L. Zhang, *et al*, Chem. Eng. J., **2023**, 463, 142494.
5. L. Zhang, *et al*, Biosensors, **2023**, 13. 550.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于金属气凝胶的柔性电分析传感

文丹*
西北工业大学

柔性电化学传感器可以便携、无创的方式实现对生理指标和健康状态的连续监测，在健康管理和疾病监测领域展现出诱人前景。通过低维度纳米颗粒的三维可控组装构建的新型金属气凝胶表现出多孔、超轻、表面积大、催化性能优异、柔韧性佳等特点，因此在柔性电化学传感器件的研究中极具潜力。这主要是因为其：1）优异的催化性能有望取代生物酶的使用（灵敏度和稳定性）；2）丰富的分级多孔结构和导电性良好的金属骨架可以加速反应物的传质扩散和促进催化反应的电子转移（灵敏度）；3）三维纳米线网络结构可以保障传感响应元件在形变条件下的工作性能（柔韧性和准确性）。

我们近期的工作主要集中在金属气凝胶的多维度设计以发展可穿戴、便携式生物传感应用方面。即，1）针对生化标志物的电化学反应特性，通过对金属气凝胶的组分、形貌、表面“三位一体”调控，发展高效的柔性电分析传感界面；并结合实验结果与理论模拟，揭示柔性传感性能与敏感材料结构之间的构-效关系。2）发展柔性传感芯片，结合微流控芯片、微针阵列和电路设计等，实现了汗液/组织液中一系列重要生化标志物（代谢物小分子、蛋白等）灵敏、稳定的穿戴式电化学传感检测。

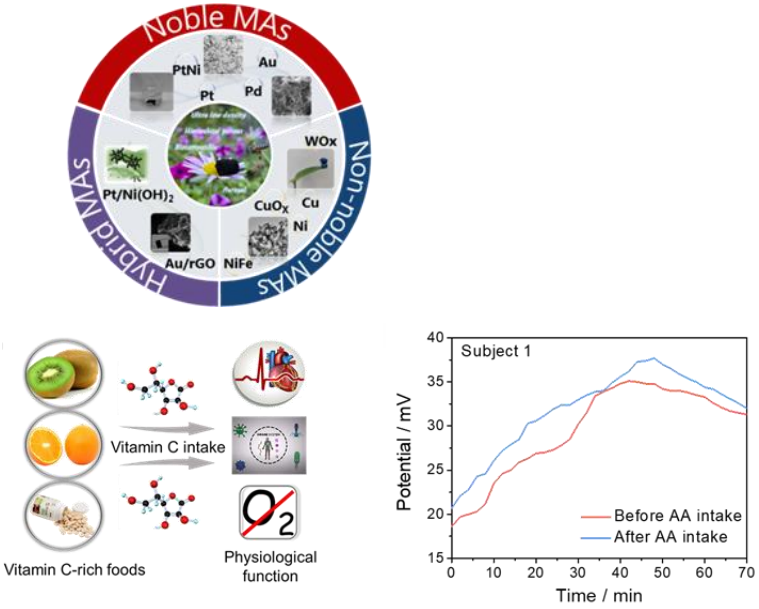


Fig.1 Function-led design of metal aerogels (left) for flexible electrochemical sensing (middle and left).

关键字 柔性电化学传感，金属气凝胶

参考文献：

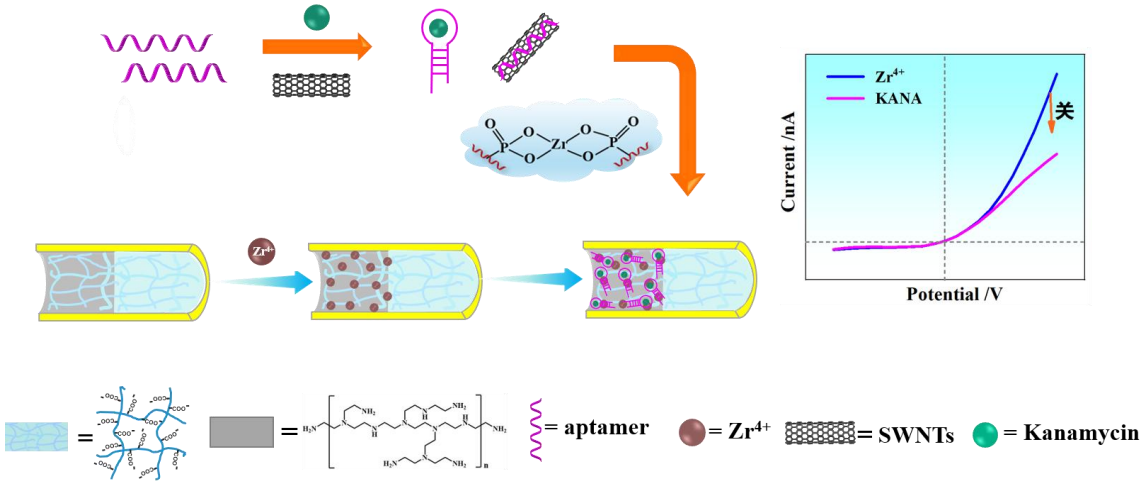
1. X. Jiang, R. Du, R. Hübner, et al. Matter **2021**, 4, 54.
2. S. Gong, Y. Lu, J. Yin, et al. *Chem. Rev.*, **2024**, 124, 455-553.
3. Y. Chen, X. Wan, G. Li, et al. *Adv. Funct. Mater.*, **2024**, 2404329

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于 PEI/Zr4+修饰的水凝胶复合纳米通道高灵敏度检测卡那霉素

刘丽丽、郭艳丽*
西北大学

卡那霉素(Kanamycin, KANA)是一种氨基糖苷类抗生素，广泛用于治疗由革兰氏阴性和革兰氏阳性感染引起的动物疾病。卡那霉素残留可以通过食物链在人体内蓄积，会对人体造成严重损伤[1]。因此，开发一种具有高稳定性、高灵敏度、高选择性的传感器来检测食品和环境中的卡那霉素残留具有重要意义。纳米孔传感具有低成本、实时快速、高灵敏度，单分子水平和无需标记等特性，已被广泛应用在生命科学、临床医学等领域。固态纳米孔因其尺寸可调、表面易改性、机械稳定性好等优势，在 DNA 测序、蛋白质检测及能量转换等方面展现了巨大的应用潜力。然而，固态纳米孔也存在信噪比低、检测通量低等缺点，限制了其实际应用。此前的研究多集中在通过锥形纳米孔的离子整流的变化进行分析测定，但传感器的稳定性较差且易堵塞，影响了检测效果。因此，为了克服单一材料本身存在的弊端，开发具有优良特性的复合材料成为了解决这一问题的有效方法。水凝胶是一种具有三维（3D）网络结构的“柔软湿润”材料，具有促进离子/电子快速质量传递的潜力及空间带电的能力。基于此，本研究中利用径迹蚀刻法制备了圆柱形聚合物纳米孔，并通过光聚合和化学交联法在聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）聚合物纳米孔中填充水凝胶，制备了一种水凝胶复合纳米通道膜。填充水凝后，孔内由平面电荷变成空间电荷，含有大量羧酸基团，通过不对称修饰可得到具有高离子电流整流（ICR）的 PEI/Zr4+修饰的水凝胶复合纳米通道。利用 Zr4+与适配体的磷酸基团的特异性相互作用，成功建立了无固定探头的 ICR 传感器，可用于卡那霉素的无标记、高选择性和高灵敏度检测。本文建立的传感器对卡那霉素的线性响应范围在 20~200 nM, 检测限低至 10.5 nM。这项研究不仅为氨基糖苷类抗生素的检测提供了新的思路，通过调整适配体模板的超分子种类和序列，制造的传感系统也有可能成为检测各种目标的通用平台。



关键字 水凝胶复合纳米通道; 卡那霉素检测; 离子电流整流

参考文献：

1. X. Qi, L. Zhang, X. Wang, S. Chen, X. Wang, *Food Control*., 2023, 149, 109700.

2. A. Fragasso, S. Schmid, C. Dekker, ACS Nano, 2020, 14,1338-1349.

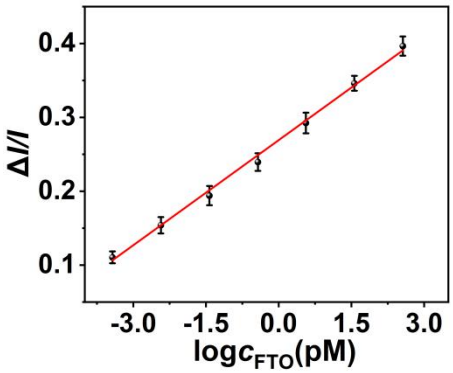
3. W. Chen, Q. Zhang, Y. Qian, W. Xin., et al. ACS Central Science, 2020,6,2097-2104.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于双功能 Zr-MOF 介导的有机光电化学晶体管生物传感器检测 FTO 蛋白

胡义鑫，周云雷*，殷焕顺*
山东农业大学化学与材料科学学院，山东省泰安市，271018
E-mail：zhyl@sdau.edu.cn; yinhs@sdau.edu.cn

摘要：m^6A 甲基化是一种常见的表观遗传修饰，被认为在植物胚胎发育中起着关键作用。m^6A 含量的高低均会对植物产生不同的影响。FTO 蛋白是一种 RNA m^6A 去甲基化蛋白，利用此蛋白可以氧化 RNA 中的 m^6A 使其变为 N^6-羟甲基腺苷(hm^6A)。因此，本工作开发了一种新型的由双功能 Zr-MOF 介导的 $Bi_4O_5I_2$/BiOBr 异质结门控的有机光电化学晶体管(OPECT)生物传感器用于检测 FTO 蛋白及水稻中的 m^6A。通过 FTO 去甲基化蛋白对被 m^6A 标记的 RNA 反应，使 m^6A 反应成具有羟甲基的 hm^6A，随后利用 RNase A 水解酶，将 RNA 链水解成单个 hm^6A 核苷酸。同时将纳米复合材料 $Bi_4O_5I_2$/BiOBr 作为栅极材料，在其表面羧基。利用羧基与氨基的共价反应，将氨基苯硼酸修饰于栅极表面。再利用苯硼酸与邻二醇的共价反应，将六-(6-巯基-6-去氧)-α-环糊精(HMC)修饰于栅极表面。接下来，将含有单个 hm^6A 核苷酸的水解液滴加到栅极表面，在利用甲基转移酶催化 hm^6A 的羟甲基与 HMC 的巯基发生共价反应，将 hm^6A 核苷酸捕获至栅极表面。最后，通过 hm^6A 的磷酸基团将 Zr-MOF 固定在栅极表面。Zr-MOF 作为一种类碱性磷酸酶，一方面可以将无色的 PNPP 转变成黄色 PNP，实现对 m^6A 的比色检测。另一方面，Zr-MOF 可以催化 Na_3SPO_3 生成 H_2S，H_2S 与门控材料进行反应，使其原位生成 Bi_2S_3，Bi_2S_3 的生成使原本阴极电流的栅极材料转变为阳极电流，阳极电流能够更好的适用于耗尽型有机光电化学晶体管，从而实现了对 OPECT 的有效调控。所提出的 OPECT 生物传感器实现了 FTO 蛋白的灵敏及特异性检测，并提供了 0.15 fM 的低检出限。



关键词：m^6A 甲基化；FTO；有机光电化学晶体管；Zr-MOF；生物传感器

参考文献：

1. J.H. Chen, C. S. Wang, Z. Li, J. Hu, S. Y. Yu, Y.T. Xu, P. Lin, W.W. Zhao, Analytical Chemistry, **2023**, 95, 4243-4250.
2. G. Gao, J. H. Chen, M. J. Jing, J. Hu, Q. Xu, C. S. Wang, H. Zhou, P. Lin, G. Chen, W. W. Zhao, Advanced Functional Materials, **2023**, 33(22): 2300580.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

细胞膜稳定 ZIF-8，用于 DA 的实时检测

蒙杨明旭、臧广超*
重庆医科大学

引言：

实现神经系统中 DA 的实时快速检测对于疾病的诊断以及病理机制的探究有着重要的临床意义。ZIF-8 作为纳米催化剂产生电子转移，进而氧化 DA[1]，但其稳定性差的缺陷限制了其在电化学领域的应用。

我们提出了一种通过细胞膜配位键稳定 ZIF-8 的策略，构建了一种在生理环境下对神经细胞 DA 进行实时检测的碳纤维微电极（M/ZIF-8/CFEM）。

材料与方法:

ZIF-8 通过原位生长法修饰于碳纤维微电极，细胞膜通过浸泡法修饰。

结果与讨论:

FIG.1A 和 B 显示了 ZIF-8/CFEM 的扫描电镜图像，碳纤维表面均匀生长了一层 ZIF-8 颗粒，颗粒呈现明显的多面体结构。与裸 CFME 相比(FIG.1C)， DiI 标记的 M/ZIF-8/CFEM 荧光非常明显(FIG.1D)，表明细胞膜修饰成功。

CV 显示，由于改性材料后阻抗较大，ZIF-8/CFME 和 M/ZIF-8/CFME 的氧化还原峰强度较裸 CFME 低(图 2a)。用 CV 法研究了电极对不同浓度 DA 的电化学催化反应。如图 2b 所示，氧化峰电流随着 DA 浓度的增加而增加。从 FIG.2C 的 i-t 曲线可以看出，随着 DA 浓度的增加，催化电流也随之增加。随后在 aCSF 中加入了各种生理相关的电活性物质(FIG.2D)，结果表明 M/ZIF-8/CFEM 对干扰物质具有明显的选择性。

结论:

综上所述，我们的工作通过 ZIF-8 与生物材料的结合构建了一种具有良好生物相容性和选择性的工具，有望进一步用于活体动物中枢神经系统多巴胺释放动力学的研究。

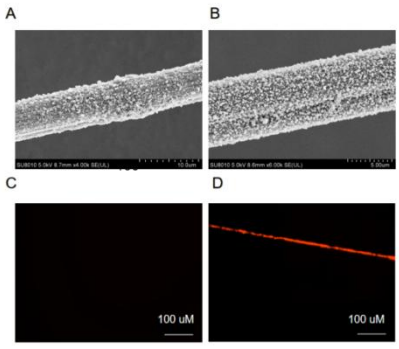


Fig.1.(A,B)SEM images of ZIF-8/CFME. (C) Fluorography of bare CFME. (D) Fluorography of M/ZIF-8/CFME

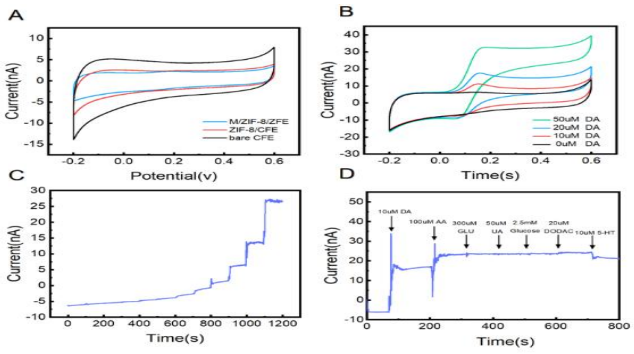


Fig. 2. (A) CV curves in aCSF solution. (B) Typical CVs in aCSF upon the addition of 10 μM DA, 20 μM DA, and 50 μM DA. (C) Amperometric i-t curve upon successive additions of different concentrations of DA: 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2, 5, 10, 20 μM. (D) Amperometric current responses in 10 μM DA ,100 μM AA, 300 μM L-glutamate, 50 μM UA, 2.5 mM Glucose, 20 μM DOPAC and 10 μM 5-HT.

关键字 碳纤维微电极;多巴胺

参考文献：

[1] Xu P, Wang X, Shi J, et al. Functionally Collaborative Nanostructure for Direct Monitoring of Neurotransmitter Exocytosis in Living Cells[J]. Nano Lett, 2023, 23(6): 2427-2435.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

电化学沉积技术构建新型分析界面用于灵敏免疫分析

覃晓丽*、刘波、陈进、陈虎权、邱芬芬、张琴、伍锦良
湖南农业大学

设计和发展高效、便捷的分析测量手段，以检测复杂样品体系中一系列低浓度疾病生物标志具有重要意义。近年来，功能化金属有机骨架(MOFs)应用于生物分析受到越来越多的关注[1-2]。与其他合成方法相比，电化学沉积法可以在室温下方便、精确地控制 MOF 薄层均匀地生长在电极表面[3]。利用这些功能化 MOF 构建的新型分析界面，构建的免疫传感器，可实现对目标分析物进行灵敏、快速的检测。例如，利用电化学沉积法制备三联吡啶钌功能化 2D MOFs 修饰的电化学发光（ECL）免疫传感器，实现了猪瘟病毒(CSFV)生物标志物的超灵敏分析检测，检测范围宽(10 fg mL-1 - 10 ng mL-1)，检测限低(5.4 fg mL-1) (Fig.1).

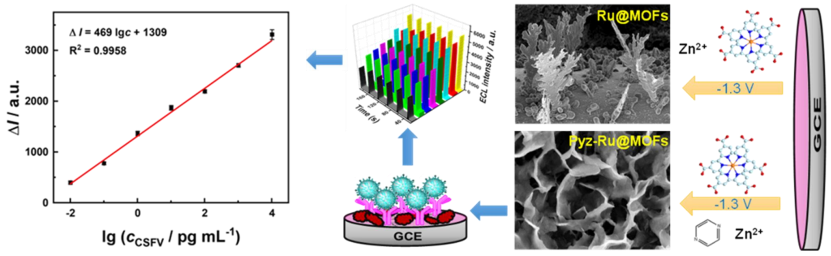


Fig. 1 Preparation of Pyz-Ru@MOFs and fabrication procedure of ECL immunosensor.

关键字 电化学沉积技术；电化学发光免疫分析；金属有机框架材料；二维纳米材料

参考文献：

1. X. Qin, Z. Zhan, Z. Ding, *Curr. Opin. Electrochem.*, **2023**, 39, 101283.
2. D. Tang, X. Yang, B. Wang, Y. Ding, S. Xu, J. Liu, Y. Peng, X. Yu, Z. Su, X. Qin, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2021**, 13, 46225-46232.
3. B. Liu, X. Li, H. Chen, J. Chen, W. Wang, S. Deng, X. Yang, B. Wang, Z. Su, X. Qin, *Microchem. J.*, **2023**, 194, 109301.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

激光诱导石墨烯基电化学生物传感器的构建与快速检测应用

刘东*
江苏大学

源于水体富营养化的蓝藻水华现象是导致水体污染的重要起因之一，其爆发具有突发性、范围广等特点，而且过程中会产生高危害性的微囊藻毒素（MCs），尤以 MC-LR、MC-RR 产生量高、毒性强 [1]。

基于此，开展了激光诱导石墨烯（LIG）基电化学生物传感器的研制工作，并将其用于水环境中 MC-LR、MC-RR 的快速、灵敏分析。针对高质量 LIG 电极的制备问题，发展了基于激光直写与热熔胶压印技术相结合的 LIG 电极制备工艺，实现了单通道、双通道 LIG 电极以及金纳米粒子功能化 LIG 电极的快速、高效制备；进一步，利用活性探针二茂铁、亚甲基蓝标记适配体，构筑了多种 LIG 电极为基底的电化学适配体传感器件，实现了对 MC-LR、MC-RR 及二者同时检测目的[2-3]；在此基础上，结合电场驱动富集技术，创制了可实现 MC-LR、MC-RR 检测的便携式电化学检测装置，解决了现场、快速分析问题[4]。研究工作为面向环境污染物快检的电化学传感器开发提供了一种新的思路。

关键字 电化学传感器；激光诱导石墨烯；微囊藻毒素；电场驱动富集技术；快速检测

参考文献

1. H.X. Zhang, X. Zhao, Y.H. Li, P. Xie, *Environ. Pollut.*, **2023**, 330, 121780.
2. Y. Wang, Y.Y. Li, C. Liu, N. Dong, D. Liu*, T.Y. You, *Biosens. Bioelectron.,* **2023**, 239, 115610.
3. Z. Chen, N. Dong, Y. Wang, Y.Q. Li, W.J. Li*, D. Liu*, T.Y. You, *Sens. Actuat. B-Chem.*, **2024**, 419, 136437.
4. C. Liu, Y. Wang, Y.Y. Li, S.Y. Meng, W.J. Li, D. Liu*, T.Y. You, *Sci. Total Environ.*, **2023**, 900, 166407.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

新型电化学传感器构建及其对疾病标志物即时检测

梁阿新*
北京理工大学

This study concentrates on the development of innovative electrochemical sensors and their application for instantaneous detection of disease markers, which are essential for timely medical intervention. Electrochemical sensors have garnered substantial attention due to their high sensitivity, rapid response times, cost-effectiveness, and portability. These characteristics render them particularly suitable for point-of-care testing, where swift results are critical for effective clinical decision-making. Consequently, electrochemical sensors have emerged as indispensable tools for detecting various disease markers associated with conditions such as cancer, cardiovascular diseases, diabetes, and infectious diseases. Furthermore, this investigation delves into various strategies employed in surface modification techniques such as functionalization with specific biomolecules or polymers that enhance specificity towards particular biomarkers while minimizing interference from other substances present in biological samples. Techniques like layer-by-layer assembly or self-assembled monolayers may be utilized to create customized surfaces that optimize sensor functionality. In addition to material selection and surface engineering approaches discussed above, this study also explores integration methods enabling these electrochemical sensors to be coupled with microfluidic systems or wearable devices capable of continuous monitoring. Such innovations could pave the way toward developing comprehensive diagnostic platforms capable not only of detecting but also quantifying disease markers over time—providing invaluable data regarding patient health status.

关键字 电化学分析；疾病标志物；生物传感器；即时检测

参考文献

1. J. Tan, Y. Wen, M. Li, *Emerging biosensing platforms for quantitative detection of exosomes as diagnostic biomarkers. Coordin. Chem. Rev.*, **2021**, 446, 214111.
2. P. X. Guan, et al., *Molecularly imprinted nanobeacons redirect innate immune killing towards triple negative breast cancer*. *Angew. Chem. Int. Edit.*, **2023**, 135: e202301202.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

高分辨扫描电化学显微镜表征技术与电催化原位分析方法

晋兆宇*
电子科技大学

现代大型仪器虽在表征材料物理性质方面（微观形貌和结构）已具备出色的能力，但在化学行为测量上仍存在极大挑战。尽管近年来谱学与电化学联用技术的快速发展，使得在原位或工况条件下对电化学界面中间体结构的表征成为可能，但其时空分辨率依然有限，难以精准描述电催化过程。针对这一难题，我们在前期工作中基于高分辨扫描电化学显微镜的表面滴定技术（SI-SECM），建立了适用于多种模型催化体系中间体的原位分析方法[1]。主要进展包括：发展了 SECM 表面滴定技术在单原子催化剂活性位点分析中的应用，实验验证并定量分析了燃料电池催化剂中“原子位点间距效应”，为突破燃料电池效率瓶颈提供了理论支持[2-3]；构建了 SECM 表面滴定技术与原位拉曼耦合的分析方法，揭示了含氮污染物电催化转化过程中的活性氢定量信息，推动了可再生能源驱动的资源循环利用技术[4-7]；开发了多场耦合电催化体系的 SECM 原位定量分析方法，为热/光热增强的活性氢生成与稳定化机制提供了关键定量证据，进一步拓展了碳、氮小分子高效催化转化器件的应用前景[8]。

关键字 扫描电化学显微镜；电催化；原位分析

参考文献：

[1] Jin, Z. Anal. Chem. 2023, 95: 6477-6489.
[2] Jin, Z.; Li, P.; Meng, Y.; Fang, Z.; Xiao, D.; Yu, G. Nat. Catal., 2021, 4: 615-622.
[3] Jin, Z.; Li, P.; Fang, Z.; Yu, G. Acc. Chem. Res. 2022, 55: 759-769.
[4] Li, H.; Li, P.; Guo, Y.; Jin, Z. Anal. Chem. 2024, 96: 997-1002.
[5] Liu, K.; Li, H.; Xie, M.; Wang, P.; Jin, Z.; Liu, Y.; Zhou, M.; Li, P.; Yu, G. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146: 7779-7790.
[6] Li, P.; Liao, L.; Fang, Z.; Su, G.; Jin, Z.; Yu, G. Proc. Nat. Acad. Sci. 2023, 120: e2305489120.
[7] Li, P.; Li, R.; Liu, Y.; Xie, M.; Jin, Z.; Yu, G. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145: 6471-6479.
[8] Wang, P; Li, P.; Pan, Z.; Liu, K.; Xie, M.; Yu, G.; Jin, Z. Submitted.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

电化学发光成像的调控方法

马诚*
扬州大学

电化学发光(ECL)是一种可控的化学发光形式，其发射强度受施加在电极表面的电压的影响。通过与光学显微镜的结合，最近发展起来的 ECL 成像技术在研究高时空分辨率的生物相关事件方面显示出巨大的应用潜力。最近，我们组在自制 ECL 显微镜的基础上开发了一系列 ECL 显微成像技术。例如，通过自我调节的 ECL 显微镜监测蛋白冠形成动力学。[1]通过比较不同复杂体系和不同纳米药物载体的蛋白冠形成动力学，通过 Ru(bpy)33+和多种蛋白质在不同载体表面的竞争吸附调节的蛋白冠形成动力学曲线，很好地证明了该技术的通用性和准确性。为了提高 ECL 成像的灵敏度，我们采用了温度调节的 ECL 成像策略。[2]由于 ECL 发射层受 ECL 反应路线的影响，我们记录了温度升高的细胞 ECL 图像，从而提供了在特定高度内灵活调节成像范围的方法。为了提高空间选择性，我们报道了一种位点选择性热增强电化学发光显微镜。[3]通过在电极-溶液界面处原位产生一个微米级的热点，我们实现了发光强度提高 63 倍，外加电压提高 0.2 V。为了提高空间分辨率，我们开发了单细胞成像的受激发射路径。[4]该显微镜使用聚焦的红移光束将自发 ECL 转移到受激 ECL，从而可以选择性和可逆地调整来自均质溶液、单个颗粒和单个细胞的 ECL 发射。此外，与共聚焦 ECL 模式相比，单细胞基质粘附的清晰度提高了 2～3 倍。以上结果表明，ECL 显微镜提供了一种新的颗粒和细胞可视化方法，充分扩展了 ECL 技术在生物分析领域的应用。

关键字 电化学发光，成像，细胞

参考文献：

[1] Zejing Xing, Xiaodan Gou, Li-Ping Jiang*, Jun-Jie Zhu*, Cheng Ma*, An In Situ Investigation of the Protein Corona Formation Kinetics of Single Nanomedicine Carriers by Self-Regulated Electrochemiluminescence Microscopy, ***Angew. Chem. Int. Ed.***, 2023, *62*, e202308950.

[2] Cheng Ma#, Zejing Xing#, Xiaodan Gou, Li-Ping Jiang*, Jun-Jie Zhu*, A temperature-tuned electrochemiluminescence layer for reversibly imaging cell topography, ***Chem. Sci.***, 2022, *13*, 13938-13947.

[3] Xiaodan Gou, Yiwen Zhang, Zejing Xing, Cheng Ma*, Changjie Mao*, Jun-Jie Zhu*, Site-selective heat boosting electrochemiluminescence for single cell imaging, ***Chem. Sci.***, 2023, *14*, 9074-9085.

[4] Cheng Ma, Xiaodan Gou, Zejing Xing, Min-Xuan Wang, Wenlei Zhu, Qin Xu, Dechen Jiang*, Jun-Jie Zhu*, Reversibly Tuning Electrochemiluminescence with Stimulated Emission Route for Single-Cell Imaging, ***Research***, 2023, *6*, 0257.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于四面体 DNA 纳米结构的光驱动电化学生物传感器用于伏马菌素 B1 检测

董娜[1]、刘书达[1]、孟淑云[1]、陈祚[1]、李玉叶[1]、刘东[1]、由天艳*[1,2]
1. 江苏大学
2. 河南科技大学

电化学生物传感器的检测性能在很大程度上取决于氧化还原探针物理性质的变化，而氧化还原探针容易受到电极基底的干扰，从而降低传感器的灵敏度[1, 2]。针对这个问题，我们开发了一种基于四面体 DNA 纳米结构的光驱动电化学生物传感器，用于高灵敏检测伏马菌素 B1(FB1)。该传感器利用四面体 DNA 纳米结构作为连接桥梁，将含有 CdSe 量子点(QDs)的 DNA 纳米线与负载亚甲基蓝和金纳米棒的氧化石墨炔复合材料(GDYO-MB-Au NRs)相结合，构成光敏感电化学传感界面。该传感界面的光敏特性在于，光照下 MB 的化学性质会发生改变，即 MB 在光照下发生降解。当 FB1 存在时，会导致 CdSe QDs-DNA 纳米线的剥离，进而抑制 MB 的降解，增强电化学信号。这种设计有效降低了背景信号，显著提高了检测灵敏度。该传感器的检测范围为 0.5 fg mL-1 至 10 pg mL-1，检测限低至 0.45 fg mL-1。这一策略为开发高灵敏度电化学生物传感器提供了新的思路，具有广阔的应用前景。

关键字 电化学生物传感；四面体 DNA 纳米结构；伏马菌素 B1

参考文献：

1. M. Cui, Y. Wang, M.X. Jiao, S. Jayachandran, Y.M. Wu, X.J. Fan, X.L. Luo, *ACS Sens.* **2017**, 2, 490-494.
2. G.X. Wang, Q.J. Xu, L. Liu, X.L. Su, J.H. Lin, G.Y. Xu, X.L. Luo, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, 9, 31153-31160.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

金属纳米团簇电化学发光探针的性能调控及其生命分析应用

彭花萍*
福建医科大学

电化学发光（ECL）具有背景信号低、灵敏度高、可控、设备简单及适用性广等优点，在生命分析领域具有广泛的应用前景。探寻性能优良的 ECL 探针对于 ECL 技术的发展十分关键。金属纳米团簇具有良好的生物相容性、独特的光学和电化学性质、广泛的分子结构等特性，引起了研究者们的广泛关注。本课题组近年来从探究水相中金属纳米簇 ECL 探针发光机制以及 ECL 本质机理问题入手，提出了纳米尺度价态调控、电催化和聚集诱导双增强、低氧化电位共反应剂介导的低电位 ECL、能级匹配等 ECL 调控的特殊机制，制备了高性能金属纳米团簇 ECL 纳米探针；针对临床疾病诊疗的应用需求，在传感材料、界面设计、共反应体系等方面提出创新策略，建立了基于其调控机制介导的 ECL 分析平台、免疫金簇“二合一”ECL 传感器、分离式 ECL 检测平台、电催化调控的 ECL 传感策略等检测方法，并成功用于生命分析，为合理设计 ECL 纳米探针及生物传感提供了新机制和新方法。

关键字 电化学发光探针；金属纳米团簇；发光机制；生命分析

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于 MOF 材料的便携式和可穿戴式传感研究

舒韵*、糜子逸、苏彤、沈瑾、陈龙、胡效亚
扬州大学

当前，开发高性能的便携式和可穿戴传感器对于监测人体健康有着重大意义。而金属有机框架（MOF）材料因其比表面积大、催化活性好和良好的机械柔韧性等特点，已经成为一种理想的传感材料，在此，我们构建了不同的基于 MOF 的便携式和可穿戴传感器，并研究了其在疾病检测中的应用。

首先，我们开发了基于镍-钴金属有机骨架复合材料（Ni-Co MOF）涂覆在 CNT/PVA/PU(CPP) 导电薄膜上的高度可拉伸柔性电化学传感器，用于检测汗液中的皮质醇。并基于高度可拉伸的 Ni-Co MOF/银/还原氧化石墨烯/PU (Ni-Co MOF/Ag/rGO/PU) 纤维制备了一种可穿戴电化学传感器，用于连续监测汗液中的葡萄糖。

其次，我们开发了一种与微流控通道集成的基于 MOF 衍生多孔碳纳米材料的柔性可穿戴式电化学传感器用于监测汗液中尿酸，pH 和 K+含量。MOF 衍生多孔碳具有大的表面积和高的电催化活性，可实现尿酸的高灵敏检测。pH 和 K+的检测通过在电极上电沉积聚苯胺 (PANI) 及修饰缬氨霉素离子选择性膜来实现。尿酸传感器表现出优异的灵敏度和选择性。pH 和 K+传感器也表现出较高的灵敏度，重现性，稳定性和选择性。此外，通过实验证明，电极在弯曲情况下依然保持了良好的电化学性能。进一步研究了三者在汗液中的实时水平，并且通过摄入高嘌呤食物，分析了汗液和尿液样本中尿酸含量的变化，两者显示出相同的趋势，表明该传感器在健康监测领域具有广阔的应用前景。

最后，我们将 MOF 材料与两亲性聚合物辛胺接枝聚丙烯酸包覆的钙钛矿复合，在免疫层析纸基等装置上，构建了一种双模式免疫层析新方法，应用于肿瘤标志物癌胚抗原的快速检测；进一步结合纳米酶级联体系，构建比率型荧光探针，实现了抗坏血酸的比色-荧光双模式的现场即时（POC）检测。

总之，我们所构建的便携式和可穿戴传感器具有高灵敏度、低检测限、对干扰物的高选择性和环境储存稳定性等特点，在今后的个性化诊断中具有巨大的潜力。

关键字 MOF；便携式；可穿戴式；体液检测

参考文献：

1. Ye, Q.; Yuan, E.; Shen, J.; Ye, M.; Xu, Q.; Hu, X.; Shu, Y.*; Pang, H.*, *Adv. Sci*. **2023, 10(31):** e2304149.
2. Shu, Y.*; Wang, Y.; Guan, J.; Ji, Z.; Xu, Q.*; Hu, X., *Anal. Chem.* **2022, 94 (13)**: 5415-5424.
3. Shu, Y.*; Su, T.; Lu, Q.; Shang, Z.; Xu, Q.*; Hu, X*. *Anal. Chem.* **2021, 93 (48)**: 16222-16230.
4. Shang, Z.; Su, T.; Jin, D.; Xu, Q.; Hu, X.; Shu, Y.* *Biosen. Bioelectron.*, **2023, 230**: 115245.
5. Lu, Q.; Su, T.; Shang, Z.; Jin, D.; Shu, Y.*; Xu, Q.; Hu, X*. *Biosen. Bioelectron.* **2021, 184**:113229.
6. Shu, Y.*; Ye, Q.; Dai, T.; Guan, J.; Ji, Z.; Xu, Q.; Hu, X*. *J. Hazard. Mater.* **2022, 430**: 128360.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

纸基核酸电化学生物传感新方法研究

刘晓娟、李峰*
青岛农业大学

纸作为一种丰富、廉价、生物兼容性好的材料，具有多孔性、比表面积大、易于表面修饰等优点，在便携式生物传感器制备领域具有得天独厚的优势。立足于课题组在核酸生物传感方向的研究基础，将核酸的目标识别、信号放大等策略有机融合于纸芯片、激光诱导石墨烯（LIG）等材料上，构建了多种快速、灵敏、用户友好的便携式电化学生物传感器件，并利用 MOFs、CdS NPs、MnO2 纳米片、DNA 水凝胶等纳米材料提升传感器性能，实现了外泌体、miRNA、癌胚抗原等多种疾病标志物以及农药残留的高灵敏、高选择性检测[1-3]，在疾病早期诊断、食品安全监控等领域具有巨大的潜在应用价值。

关键字 核酸生物传感；电化学；纸芯片

参考文献：

[1] X. J. Liu, X. Gao, L. M. Yang, Y. C. Zhao, F. Li, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 11792.
[2] X. J. Liu, H. Cheng, Y. C. Zhao, Y. Wang, F. Li, *Biosens. Bioelectron.*, **2022**, 199, 113906.
[3] X. J. Liu, Y. Wang, Y. H. Du, F. Li, et. al. *Chem. Eng. J.*, 2024, 486, 150233.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于代谢产物的电化学分子印迹传感器构建及其在 TC-ARB 定量检测中的应用

邢伊*
东莞理工学院

The rapid and highly sensitive detection of antibiotic-resistant bacteria (ARB) contributing to global antibiotic resistance is crucial for environmental monitoring. However, conventional analytical methods for ARB are known to be time-consuming, intricate, and costly. In this study, a metabolite-based electrochemical analysis method was developed for detecting tetracycline-antibiotic resistant bacteria (TC-ARB) in water by leveraging the variations in bacterial metabolic responses to tetracycline. Firstly, high-performance liquid chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry (HPLC-HRMS/MS) and Compound Discover were utilized to screen, identify, and determine stable extracellular metabolites of Escherichia coli (E. coli) HB101 and TC-ARB (established by transforming the pBR322 plasmid into E. coli HB101) following incubation with TC. Through additional spiking experiments, the metabolite adenine was identified. Secondly, an electrochemical molecular imprinting sensor with a specific recognition function and excellent tolerance was developed, employing adenine as the signal recognition element for detecting TC-ARB (E. coli). The developed sensor demonstrated satisfactory stability (RSD < 4.21%), reproducibility (RSD < 3.57%), and selectivity (RSD < 4.43%), with a low limit of detection (LOD) of 10.0 CFU·mL–1. Moreover, it required only 6 hours for detection, a significantly shorter timeframe than the coating plate method. Improtantly, it could successfully identify the biologically active TC-ARB (E. coli) and distinguish TC-ARB (E. coli) from E. coli HB101. Notably, it has been successfully utilized for quantitative detection of TC-ARB (E. coli) in diverse water samples, displaying accuracy similar to that of the coating plate method. This further enhances the capability of electrochemical sensors in monitoring the rise and dissemination of antimicrobial resistance in aquatic environments.

关键字 Tetracycline; Antibiotic resistant bacteria; Metabolite; Molecular imprinting technology; Electrochemical sensor

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

MOFs 材料在电致化学发光分析中的应用研究

吴丹*、王贝贝、王翰禹、王强强
济南大学

摘要：自党的十九大报告提出“推进医养结合，加快老龄事业和产业发展”以来，与此相关的“医疗康养战略”就迅速成为社会关注的热点问题。随着医疗康养工作的深入推进，快速、灵敏地检测重大疾病标志物（如癌症、糖尿病等）、食品污染物（如真菌毒素）以及环境污染物（如环境雌激素）的需求变得尤为紧迫[1]。尽管传统的检测方法在灵敏度和准确性方面表现出色，但它们通常依赖于大型、昂贵的设备，且操作复杂，不适合快速检测。因此，开发复杂环境中低丰度靶标物质的高特异性与高灵敏检测方法成为当今社会的前沿课题，也是食品安全分析、环境监测与疾病早期预警研究中迫切需要解决的难点和面向人民健康的国家重大需求。

电化学发光（Electrochemiluminescence, ECL）是一种强有力的分析技术[2]，具有反应速度快、灵敏度高、背景信号接近零、检测范围广、易便携化和低成本等优势。随着生物分子研究的深入，对 ECL 传感器提出了更高的要求[3]。MOFs 是一种经过改进的分子晶体材料，具有比表面积大、孔尺度可调、结构多样性、导电性好、水稳定性好和良好的生物相容性等特点，在 ECL 传感器的构建中具有广阔的应用前景[4,5]。本文主要介绍通过调控 MOFs 的配体和金属离子，使其作为发光体、发光体载体及共反应促进剂等[6-8]，从而实现食品及环境污染物、疾病标志物的灵敏分析检测。

关键字 MOFs，电化学发光

参考文献：

1. H.P. Sun, Z.X. Li, Y. Gu, C.X. Guo, Chinese J. Struc. Chem., **2022**, 41, 2211018-2211030.
2. Z. Karimzadeh, M. Mahmoudpour, E. Rahimpour, A. Jouyban, RSC Adv., **2024**, 14, 9571-9586.
3. Z.Q. Huang, L. Zhao, Q.F. Guo, D.W. Fan, X. Ren, Q. Wei, D. Wu, Anal. Chem. **2024**, 96, 6659-6665.
4. C. Wang, S.Q. Liu, H.X. Ju, Bioelectrochemistry, 2024, 149, 108281.
5. B. Mohan, S. Kumar, V. Kumar, T. Jiao, H. K. Sharma, Q.S. Chen, TrAC Trend. Anal. Chem., **2022**, 157, 116735.
6. L. Zhao, X. Ren, Y. Du, Z.F. Gao, H.M. Ma, H. Wang, Y.Y. Li, Q. Wei, H.X. Ju, D. Wu, Adv. Funct. Mater., **2024**, 2410886
7. B.B. Wang, X.J. Liu, D.W. Fan, H.M. Ma, Z.F. Gao, D. Wu, Q. Wei, Anal. Chem., **2024**, 96, 4479-4486.
8. L. Zhao, X. Ren, H.M. Ma, H. Wang, Y.Y. Li, Q. Wei, D. Wu, H.X. Ju, Anal. Chem., **2023**, 95, 13463-13469.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

“免电沉积阳极溶出伏安”和“均相电化学”重金属传感新策略

朱刚兵*
江苏大学

随着社会及工业建设的不断发展，废水、废渣和废气等污染物排放持续增加且随意排放，对农田土壤及水体环境造成严重污染，导致其中重金属含量严重超标。由于重金属具有生物累积效应，被重金属污染的农产品被人体食用后，会在人体内进行富集引起严重危害，如重金属易与人体内的蛋白质活性基团结合，使酶失去原有的生理活性，对人体造成不可逆的损伤[1,2]。为此，发展有效方法对重金属实现痕量检测具有重要意义。电化学方法具有响应速度快、成本低、灵敏度高和易于操作等特点，已被广泛的应用于重金属的检测。其中应用最大的是溶出伏安分析法，其通常包含电沉积和溶出两个步骤，然而电沉积步骤的存在使得传感步骤变复杂。另外基于 DNA 适配体等生物电化学传感技术常需要复杂的电极固定化程序。

针对上述问题，近年我们课题组提出了“免电沉积阳极溶出伏安分析”[3]和“均相电化学生物传感”两种策略应用于重金属离子的电化学测定[4]。

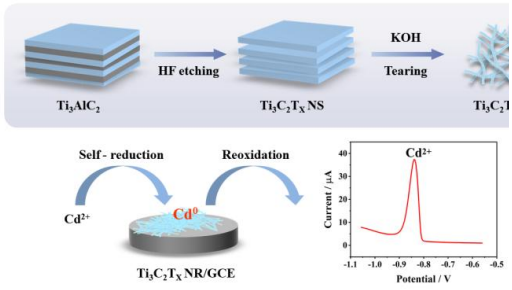


Fig. 1 基于$Ti_3C_2T_x$纳米带的重金属免电沉积溶出伏安分析示意图

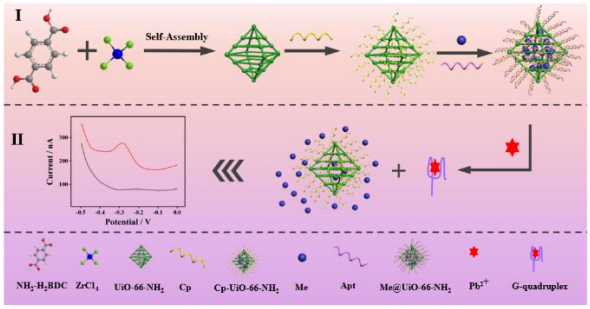


Fig. 2 基于Me@UIO-66-NH_2纳米材料的的重金属均相电化学生物传感示意图

关键字 重金属，电化学传感，阳极溶出伏安法，均相电化学

参考文献：

[1] X. Liu, Y. Yao, Y. Ying, and J. Ping, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2019, **115**: 187.
[2] W. Y. Zhou, S. S. Li, J. Y. Song, M. Jiang, T. J. Jiang, J.Y. Liu, J. H. Liu, and X. J. Huang, *Analytical chemistry*, 2018, **90**: 4328.
[3] Y.Yi, Y. Ma, F.Ai, Y. Xia, H. Lin, G. Zhu, *Chemical Communications*,2021, **57**: 7790.
[4] T. Liu, R. Zhou, C. Zhang, Y. Yi, G. Zhu, *Chemical Communications*, 2023, DOI: 10.1039/D3CC00940H.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

生物质碳点修饰的微电极用于体内监测多巴胺具有高选择性和生物相容性

王健[1]、冉建华[1]、李晨钟[2]、臧广超*[1]
1. 重庆医科大学
2. 香港中文大学

背景：神经化学物质的检测在神经和精神疾病的诊断、治疗、预后和病理机制中起着重要作用。目前，最重要的多巴胺(DA)检测技术仍然是基于微透析、光谱学和电化学。电化学方法具有优异的时空分辨率，在亚秒时间尺度上具有很大的应用潜力。然而，由于脑内电活性物质的干扰和电极植入引起的炎症反应，其在体内传感中的应用受到限制。本研究通过在电极表面固定生物衍生导电材料，提高传感界面的选择性和生物相容性，成功构建了高性能的 DA 原位检测平台(EWCDs@Nafion/AuNCs/CFME)。该微传感器可可靠地跟踪细胞、脑切片和活体大鼠脑内多巴胺的动态变化，为多巴胺相关神经系统疾病的诊断、治疗和研究提供有力工具。

方法：采用电沉积的方法将金纳米结构(AuNCs)修饰在喷涂好的碳纤维上，并通过浸渍干燥将膜结构固定在均匀分散的 EWCDs@Nafion 溶液中。

结果：EWCDs@Nafion/AuNCs/CFME 的原理图如图 1A 所示。经过层层组装后，电极尖端的宏观和微观形貌发生了变化。在图 1B 中，电极界面示意图显示，EWCDs 的固定使其具有良好的选择性，吸附 DA 的同时排斥干扰物质抗坏血酸和尿酸，并催化其生成多巴胺醌。图 2A 显示了钾刺激多巴胺释放的分子机制，并用于评估 EWCDs@Nafion/AuNCs/CFME 在细胞(图 2B 和 C)和脑片(图 2D 和 E)中 DA 传感的可靠性。结果表明，该传感器可用于细胞和大脑中 DA 的实时、灵敏监测。

结论：总之，我们的工作证实了携带电荷的生物衍生材料用于数据传感器的潜力。EWCDs@Nafion/AuNCs/CFME 的开发使我们能够准确地跟踪复杂大脑中 DA 的动态。

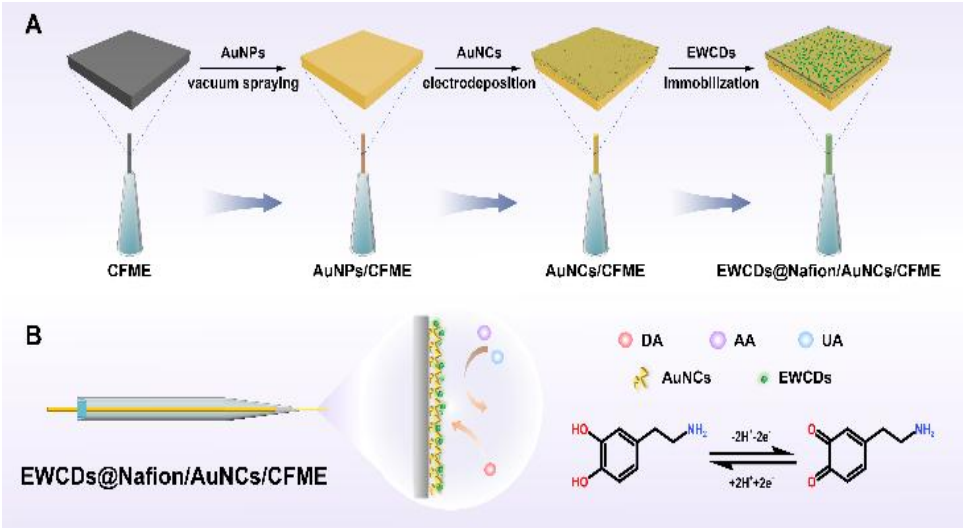


Fig. 1 (A) Schematic illustration of the fabrication of EWCDs@Nafion/AuNCs/CFME and (B) the DA electrochemical detection mechanism on the electrode surface in micromorphology.

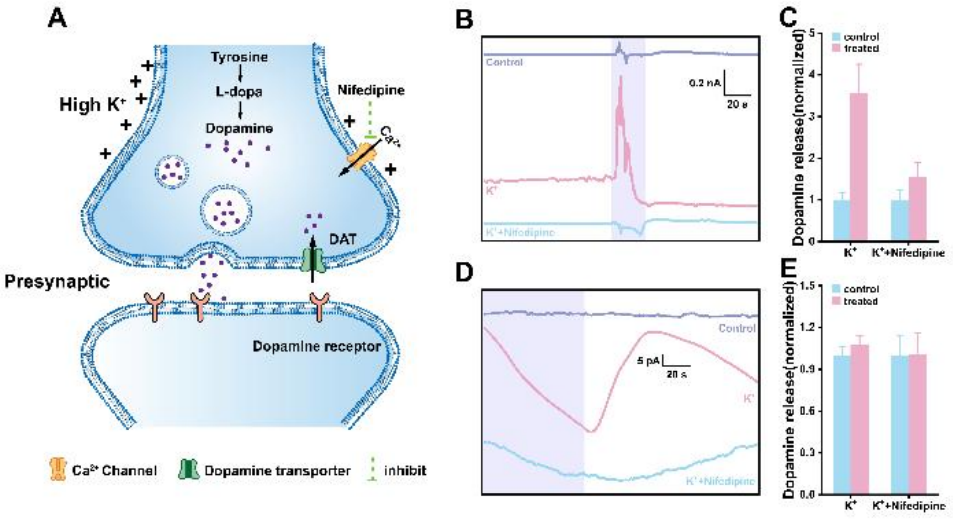


Fig. 2 (A) Physiological mechanism of DA release. Amperometric response recorded with EWCDs@Nafion/AuNCs/CFME in PC12 cells (B) and brain slices (D). (C and E) The corresponding current statistics.

关键字 碳纤维微电极，多巴胺，脑片，PC12 细胞

参考文献

[1] Liu C, Goel P, Kaeser P S. Spatial and temporal scales of dopamine transmission[J]. Nat Rev Neurosci, 2021, 22(6):345-358.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：报告

基于多巴胺增敏石墨炔纳米材料的光电化学传感平台构建与应用

许仕平、黄雪莲、余嘉慧、罗观英、彭花萍*
福建医科大学

石墨炔（GDY）是一种新型二维碳基同素异形体材料，具有导电性能良好、能量带宽适宜、稳定性强等优点[1]，但在光电化学（PEC）应用中存在光电流转换效率低等不足[2]。本实验采用窄带隙 GDY 作为为光电活性材料设计传感基底，结合多巴胺（DA）对其光电流的增敏作用，设计构建一种高灵敏度、高稳定性的新型 PEC 传感平台。研究表明，GDY-DA 复合物通过减小带隙、π-π相互作用堆叠，促进电子跃迁，从而加快电子转移速率，减少电子空穴复合。基于此，本研究成功将上述传感平台用于 DA 的高效检测，其检测线性范围为 0.01~10 μM 和 10~100 μM，检测限为 9.5 nM（S/N=3）。进而将上述增敏 PEC 体系用于慢性粒细胞白血病诊断的 DNA 生物传感平台构建。本方法构建的 PEC 传感平台拓展了 GDY 在生物医学领域的传感应用，在生物医学领域具有巨大应用潜力。

关键字 光电化学；石墨炔；多巴胺；增敏作用；慢性粒细胞白血病

参考文献

1. G. L. Hu, J. Y. He, J. Chen, Y. J. Li, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 4123-4133.
2. H. Li, J. H. Lim, Y. Lv, N. Li, B. T. Kang, J. Y. Lee, *Chem. Rev.*, **2023**, 123, 4795-4854.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于激光诱导石墨烯/MoS_2/Au 复合物的近室温 NO_2 传感器研究

张玲*
军事科学院防化研究院

NO_2 是环境的主要污染物，也是呼吸道系统疾病的标志性气体，在超过 25 ppb（十亿分之一）浓度即可对人体气道造成危害[1]，因此对传感器的性能提出了更高的要求。金属氧化物基半导体纳米材料及其异质结在化学电阻气体传感方面具有巨大的前景[2]。然而，高工作温度、需集成于叉指电极（IDE）和额外附加加热器的要求阻碍了它们的广泛应用。这项工作展示了原位激光辅助制备 Au 和 MoS_2 共装饰的激光诱导石墨烯（LIG/MoS_2/Au）异质材料，作为一种灵活有效的近室温 NO_2 传感器。通过省略 IDE 和额外的加热模块，传感器的结构明显简化。通过优化前驱体溶液 HAuCl4 的浓度和二次刻蚀的功率，LIG/MoS_2/Au 传感器对 1.0 ppm NO_2 的响应为 11.2‰，几乎是纯 LIG （3.09‰）的四倍。此外，它具有相当优异的传感稳定性和选择性。

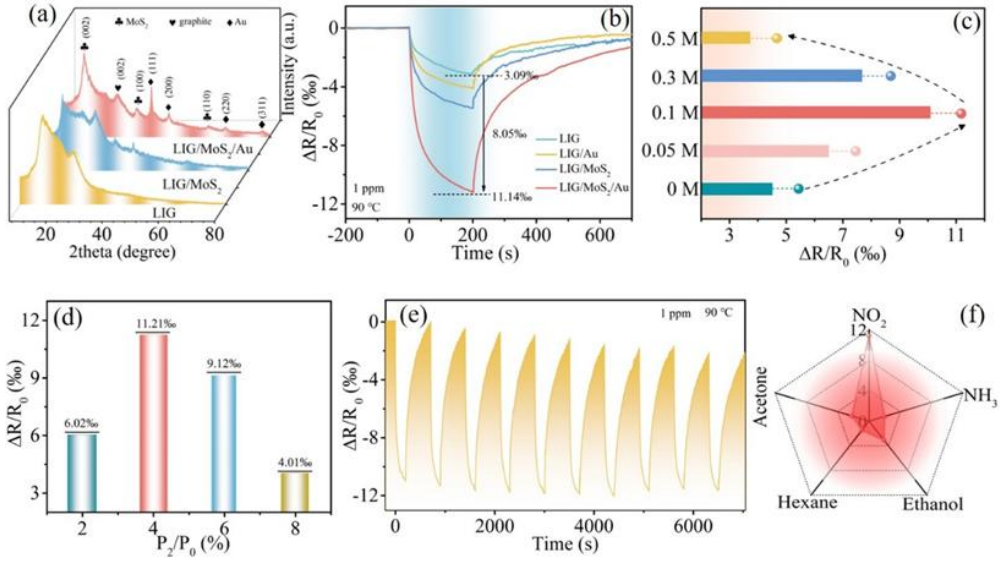


Figure 1. (a) XRD patterns for LIG, LIG/MoS_2 and LIG/MoS_2/Au. (b) The sensing performances of different sensors in the presence of 1 ppm NO_2 at 90 ℃. (c) Response statistics chart of LIG/MoS_2/Au prepared with various concentrations of $HAuCl_4$ precursor solution and (d) LIG/MoS_2/Au sensors prepared under different secondary powers. (e) Cycle test of LIG/MoS_2/Au to 1 ppm NO_2 at 90 ℃. (f) Selectivity of LIG/MoS_2/Au based sensors.

关键字 NO_2；激光诱导石墨烯；Au；MoS_2

参考文献

1. I. Manisalidis, E. Stavropoulou, A. Stavropoulos, *Front. Public Health*, **2020**, 8, 14.

2. J. Zhao, N. Yi, X. Ding, S. Liu, J. Zhu, A. C. Castonguay, Y. Gao, L. D. Zarzar, H, Cheng. *Chem. Eng. J.*, **2023**, 456, 140956.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于核酸适配体协同作用的高选择性识别 PFOA 的分子印迹电化学传感器的开发与应用

秦兴澳、朱晓宇、王颖*
同济大学环境科学与工程学院

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) are widely detected pollutants that pose serious hazards to living organisms and the environment[1]. Therefore, there is an urgent need to develop a sensor capable of highly selective and sensitive detection of PFAS. In this thesis, we developed a novel molecularly imprinted (MIPs) electrochemical sensor (MIP/Apt@PFOA/CEAK16/AuNPs/Au) based on nucleic acid aptamers (Apts) for the highly selective recognition of PFOA. In this recognition strategy, AuNPs (gold nanoparticles) were applied due to their excellent electrical conductivity, and CEAK16 peptide was used to reduce non-specific adsorption at the interface[2], and MIP and Apt provided dual recognition sites for PFOA. When PFOA is present, the imprinted cavity with specific recognition ability binds to PFOA through hydrogen bonding and other forces[3], leading to a decrease in the current of the signalling probe ferrocene carboxylic acid, enabling the quantitative detection of PFOA. After optimisation of the experimental parameters, the sensor owned a detection range of 0.1-100 nM and a detection limit of 0.97 nM. We compared the sensors Apt@PFOA/CEAK16/AuNPs/Au and MIP/CEAK16/AuNPs/Au with a single recognition element, which showed a detection limit of 1.06 and 1.22 nM, respectively. The specific recognition ability of the sensor was also calculated and the blotting factors of PFOA with some perfluorinated analogues (PFOS, PFNA, PFDA, PFHA) were 9.48, 2.0, 2.0, 2.2, and 1.4, respectively, which indicated that the sensor had a high specific recognition ability. In addition, the sensor has good repeatability and reproducibility, and the analytical results of PFOA determination in real water samples are in good agreement with those of LC-MS analysis. Generally, these performance indicates that the developed dual recognition sensor based on the synergistic effect of Apt has a good potential for the highly selective and rapid detection of PFOA in the aqueous environment.

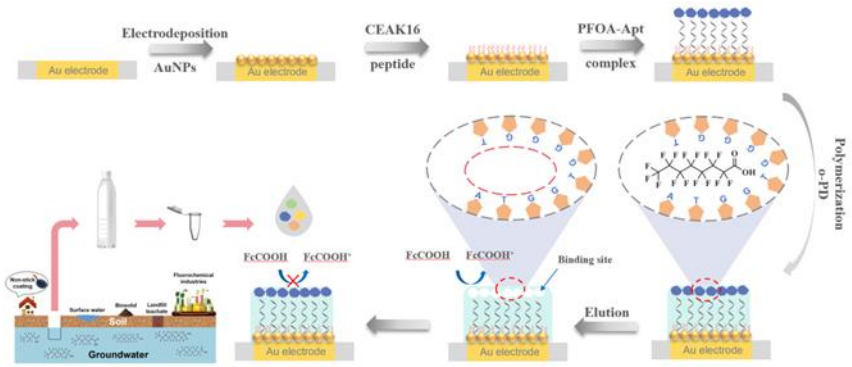


图 1. MIP/Apt@PFOA/CEAK16/AuNPs/Au 电化学传感器制备流程图

关键字 Molecular imprinting; Aptamer; Amphiphilic peptide; Electrochemical sensor; PFOA

参考文献

1. A.B. Lindstrom, M.J. Strynar, E.L. Libelo, *Environ. Sci. Technol*. **2011**,45 7954–7961.

2. Qin, X., Zhu, X. and Wang, Y., *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 342866.

3. Yang, D., Hui, Y., Liu, Y., Wang, W., He, C., Zhao, A., Wei, L. and Wang, B., *Food Chem*, **2024**, 433, 137362.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

银纳米颗粒修饰玻碳电极用于电化学测定维生素 B12

唐英茹、张萌、徐大林、杨晓燕*
青岛科技大学

维生素 B_{12}（VB_{12}）是一种水溶性营养物质，对于红细胞的形成、神经系统功能和髓鞘的构建是必不可少的[1]。然而，轻微的失衡会导致严重的疾病，如恶性贫血、神经系统疾病以及对肝脏和肾脏的有害影响。因此检测 VB_{12} 可以为一些血液疾病和神经性疾病的早期筛查提供依据。电化学法由于操作简便、灵敏度高、成本低而备受关注。许多研究人员已经利用修饰或未修饰的电极或生物传感电极对 VB_{12} 进行电化学研究和电分析测定[2]。本文所制备的银纳米颗粒（Ag NPs）修饰电极对 VB_{12} 有较强的电化学响应，据此建立了一种利用微分脉冲伏安法（DPV）高灵敏检测 VB_{12} 含量的检测。通过对电极进行活化处理，在 HAc-NaAc 缓冲溶液（pH=4.6）中于-1.0 V 富集 600 s，然后在-0.5～-0.9 V 间对 Ag NPs 修饰的电极进行微分脉冲伏安分析。VB_{12} 的浓度在 2.5×10^{-9} g/mL 到 1.5×10^{-7} g/mL 范围内与峰电流 ip（如图 1 所示）呈良好的线性关系，线性方程为 Y=0.0092C+0.070。修饰后的电极已用于 VB_{12} 片剂和人血清中 VB_{12} 含量的检测，此方法具有很好的应用前景。

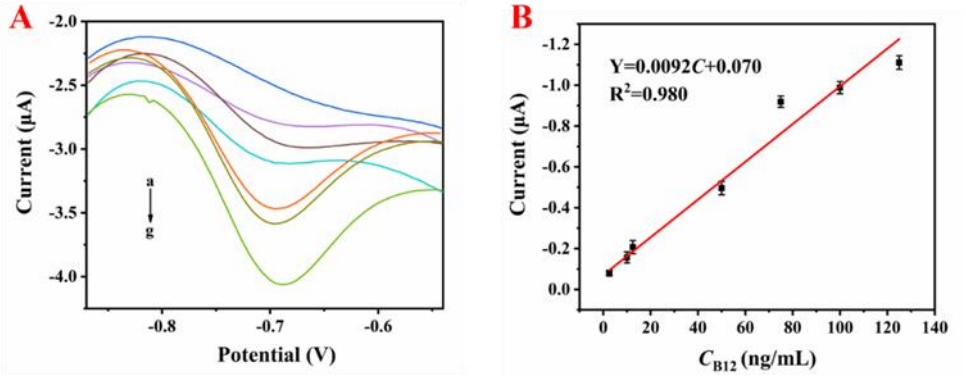


图 1 (A) 不同浓度 VB_{12} 的溶液在 Ag NPs 修饰电极上的差分脉冲伏安图. (a~g: 2.5 ng/mL,10 ng/mL, 12.5 ng/mL, 50 ng/mL, 75 ng/mL, 100 ng/mL, 125 ng/mL). (B) 检测 VB_{12} 含量的工作曲线。

关键字 维生素 B_{12}；电化学；微分脉冲伏安法；Ag NPs

参考文献

1. Dadashi-Silab, S.; Preston-Herrera, C.; Stache, E. E. *J. Am. Chem. Soc.***2023**, *145*, 19387-19395.
2. Parvin, M. H.; Azizi, E.; Arjomandi, J.; Lee, J. Y. *Sens. Actuators B Chem.* **2018**, *261*, 335-344.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于分子印记聚合物-适配体三明治夹心结构与纳米酶辅助光电化学-比色双模式检测的通用传感平台

沈颖卓、王正、徐琴*
扬州大学

由于小分子抗体使用的局限性且在获取高灵敏信号方面存在挑战。因此，开发具有高灵敏度和选择性的分析策略和特定的识别元件对于检测小分子是至关重要的。本研究基于分子印迹聚合物（MIP）-适配体夹心结构和纳米酶的协同效应，构建了可推广的光电化学-比色双模式传感平台。MIP 功能化的类过氧化物酶 Fe_3O_4 (Fe_3O_4@MIPs) 和模拟碱性磷酸酶 Zr-MOF 标记的适体 (Zr-mof@Apt) 被用作识别元件。通过在 Fe_3O_4@MIPs 上选择性吸附小分子靶标模型邻苯二甲酸二丁酯（DBP），引发 Zr-MOF@Apt-DBP- Fe_3O_4@MIPs 三明治结构的形成。Fe_3O_4@MIPs 氧化 TMB 形成蓝色 oxTMB。然而，当 DBP 选择性吸附时，Fe3O4@MIPs 的催化活性受到抑制，导致颜色变浅，可通过比色法检测到。此外，Zr-mof@Apt 可以有效催化 L-抗坏血酸 2-磷酸倍半镁盐水合物（AAPS）的水解，产生抗坏血酸（AA），不仅可以中和光生空穴降低 PEC 传感的光电流信号，还会降低 oxTMB 比色信号。双模式平台对浓度范围为 1.0 pM 至 10 μM（PEC）和 0.1 nM 至 0.5 μM（比色法）的 DBP 表现出良好的线性。检测限分别为 0.263 nM（PEC）和 30.1 nM（比色法）（S/N = 3）。双信号测量模式和夹层识别策略的集成为小分子检测提供了灵敏、准确的平台。

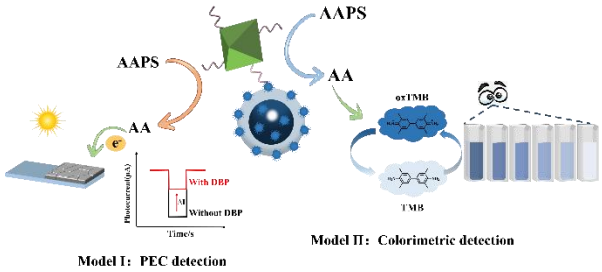


Fig. 1 The detection mechanism of the dual-modal PEC-colorimetric sensing platform

关键字 分子印迹；适配体；双识别；双信号检测

参考文献

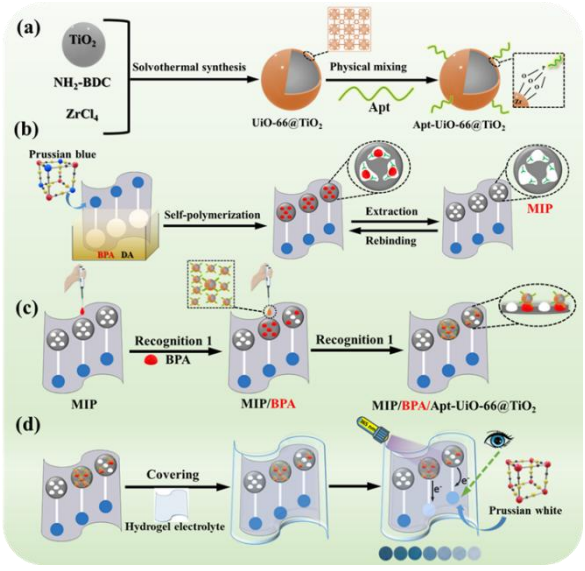
1. Fei, J., Jiang, J., Bai, Y., Wu, W., Zhao, X., Yu, W., Wen, K., Yu, X., Shen, J., Wang, Z., *Anal. Chem.* **2023. 95 (39)**, 14665-14674.
2. Jia, Y., Du, Y., Ru, Z., Fan, D., Yang, L., Ren, X., Wei, Q., *Anal. Chem.* **2023. 95 (16)**, 6725-6731.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于双极电极的全固态柔性自供电传感器阵列用于双酚 A 高灵敏视觉检测

王正、沈颖卓、徐琴*
扬州大学

本文报道了一种基于双极电极的全固态柔性自供电传感器阵列，用于双酚 A（BPA）的视觉检测。传感器阵列放置在由激光雕刻的柔性 ITO/PET 制成的开放双极电极（BPE）上。阴极是普鲁士蓝（PB），而阳极是由 BPA 分子印迹聚合物（MIPs）修饰。此外，基于聚丙烯酰胺（PAM）的水凝胶作为固体电解质。将 Zr-MOF（UiO-66）包裹在 TiO_2 上形成 TiO_2@UiO-66 纳米复合材料，用于适配体（Apt）的组装以及光电子的产生 。在第一次识别中，BPA 被 MIPs 选择性地识别在 BPE 的阳极上，并在第二次识别中触发了 MIPs/BPA/Apt-TiO_2@UiO-66 夹芯结构的形成。在紫外光照射下，捕获的 TiO_2@UiO-66 产生光电子并形成电位差，将光电子注入至阴极上的 PB 膜，使 PB 膜在没有外部电源的情况下发生还原反应生成普鲁士白 (PW) 并产生颜色变化。颜色变化的程度与产生的电子数成正比，这些电子与捕获 BPA 的量直接相关。肉眼对 BPA 的定量范围为 10^{-6} ~ 10^{-11} M。该阵列已成功应用于水样中 BPA 的定量分析且结果良好。这种基于 BPE 的全固态柔性传感器表现出低背景信号、增强的选择性和抗干扰性。与传统的液结电极不同，全固态柔性传感器可以集成到柔性可穿戴设备中，提供更广泛的应用场景和更高的商业价值。



关键字 双极电极；全固态；柔性；视觉传感器；自供能传感器

参考文献

1. Zhang J, Liu J, Su H, et al, Sensors and Actuators B-Chemical (2021) 341.
2. Fischer C, Fraiwan A, Choi S, biosensors & bioelectronics 79 (2016) 93-7.
3. Huang X, Li J, Liu Y, et al, Bio-Design and Manufacturing 5 (2022) 201-209.
4. Hao N, Zuo Y L, Dai Z, et al, Analytical Chemistry 93 (2021) 14053-14058.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

茚衍生物自组装光电化学材料测定饮料中抗坏血酸

孙心阳、张伟*
聊城大学

抗坏血酸（AA）在人体合成和代谢过程中起着重要的作用[1-3]。然而，它不能由人体合成，需要从外源性食物的摄入[4]中得到补充。由于在储存和加热过程中易于降解，因此开发灵敏、精确的光电化学生物传感器测定食品中抗坏血酸的含量具有重要意义。灵敏、精确的光电化学生物传感器需要在长波长光照和施加小偏压条件下产生高效光电性能的材料。然而长波长辐照光、偏压小的光电化学（PEC）材料目前报道的很少。

本文首次报道了 3,4,9,10-茚四羧基二酐（PDA）自组装棒状纳米材料在 630 nm 辐照和施加 0 V（vs. Ag/AgCl）电压的条件下对 AA 展现显著的光电流响应。该工作以 PDA 自组装材料作为 PEC 平台来检测 AA。该 PEC 生物传感器对 AA 在 5 μM 至 400 μM 的浓度范围内呈线性响应，其检测限为 4.1 μM。与其他的 AA 生物传感器相比，所提出的自组装 PEC 生物传感器具有相对较宽的线性范围。此外，所提出的自组装 PEC 生物传感器在饮料样品检测中具有良好的实用性。

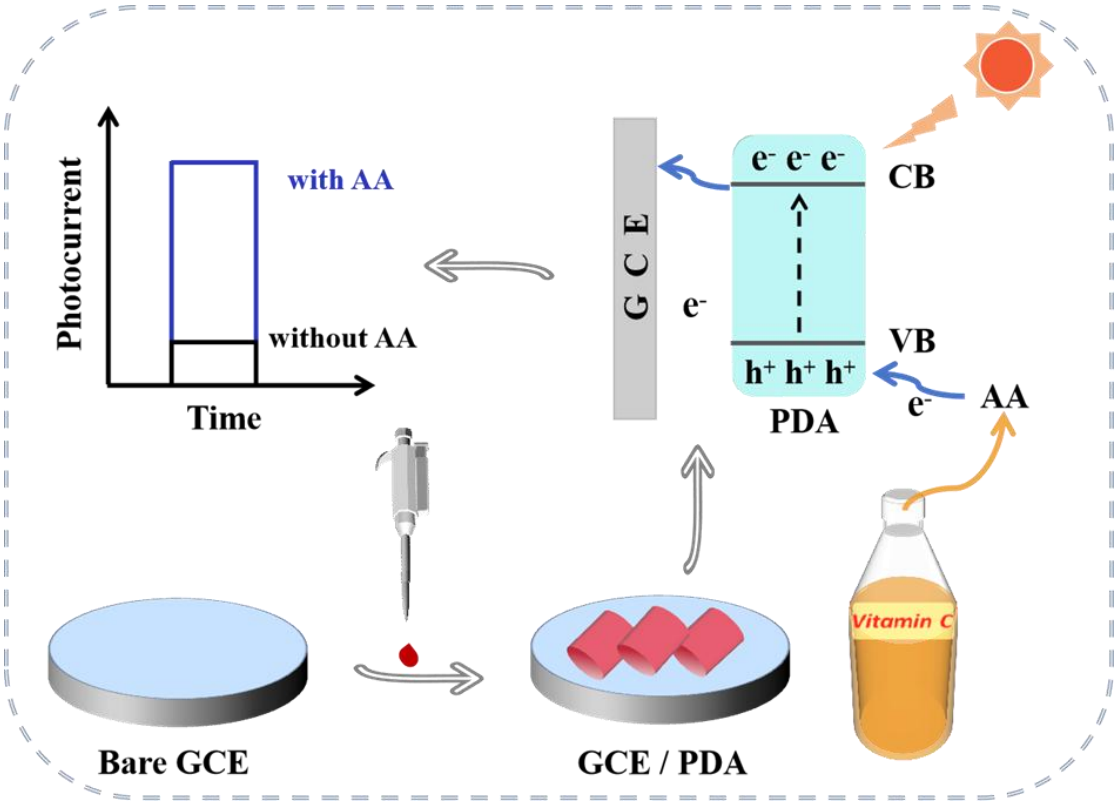


图 1 PEC 传感机理示意图

关键字 茚衍生物；自组装；抗坏血酸检测；自供电光电化学生物传感器；630 nm 光源

参考文献

1.X. Chen, Y. Xu, H. Li, B. Liu, A nanoclay-based magnetic/fluorometric bimodal strategy for

ascorbic acid detection, Sensor Actuat B-Chem, 246(2017) 344-51.
2.X. Shi, J. Li, Y. Xiong, Z. Liu, J. Zhan, B. Cai, Rh single-atom nanozymes for efficient ascorbic acid oxidation and detection, Nanoscale, 15(2023) 6629-35.
3.L. Wang, C. Gong, Y. Shen, W. Ye, M. Xu, Y. Song, A novel ratiometric electrochemical biosensor for sensitive detection of ascorbic acid, Sens Actuat B-Chem, 242(2017) 625-31.
4.P. Singh, S. Prasad, Determination of ascorbic acid and its influence on the bioavailability of iron, zinc and calcium in Fijian food samples, Microchem J, 139(2018) 119-24.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于 Fe_3O_4@Au 磁性纳米材料构建电化学-比色双模式生物传感器用于 microRNA-222 的灵敏检测

李菲菲、贾丽萍*
聊城大学

MicroRNA-222 （miRNA-222）在血液和体液中的异常表达可作为癌症早期诊断的生物标志物。本研究通过 PEI 自组装策略合成了 Fe_3O_4@Au 磁性纳米材料，并基于 Fe_3O_4@Au 的三种不同性能构建了灵敏检测 miRNA-222 的电化学-比色双模式生物传感器（图 1）。首先，将 HP1 和 S-Fc 形成的发夹型 HP1/S-Fc 聚合物通过 Au-S 键固定在 Fe_3O_4@Au 表面，基于目标物 miRNA-222 诱导的催化发夹自组装策略不仅将葡萄糖氧化酶 GOx 引入到 Fe_3O_4@Au 表面，形成 Fe_3O_4@Au/HP1/HP2-GOx 复合物，而且释放出大量的 S-Fc。磁性分离后，上层清液中的 S-Fc 被玻碳电极表面的β-环糊精俘获固定在电极上，单链 DNA 上的 PO_4^{3-}可以和钼酸盐生成具有电化学活性的磷钼酸盐沉淀，由此可实现对 miRNA-222 的电化学检测。Fe_3O_4@Au 具有类过氧化酶的性质，因此分离得到的 Fe_3O_4@Au/HP1/HP2-GOx 复合物具有级联催化作用，在葡萄糖和显色底物 3,3',5,5'-四甲基联苯胺 (TMB) 的存在下可产生比色信号，从而实现对 miRNA-222 的比色检测。在本工作中，Fe_3O_4@Au 发挥了三种作用：（1）作为载体负载 HP1；（2）类过氧化物酶催化特性；（3）磁性分离作用。相较于传统的单模式生物传感器，双模式检测不仅提高了检测的准确度，而且提升了检测的便利性。在最佳的实验条件下，电化学和比色检测的线性范围分别为 1fM-1nM 和 10nM-500nM。该传感器的构建为癌症的早期诊断和治疗提供了一种新的方法。

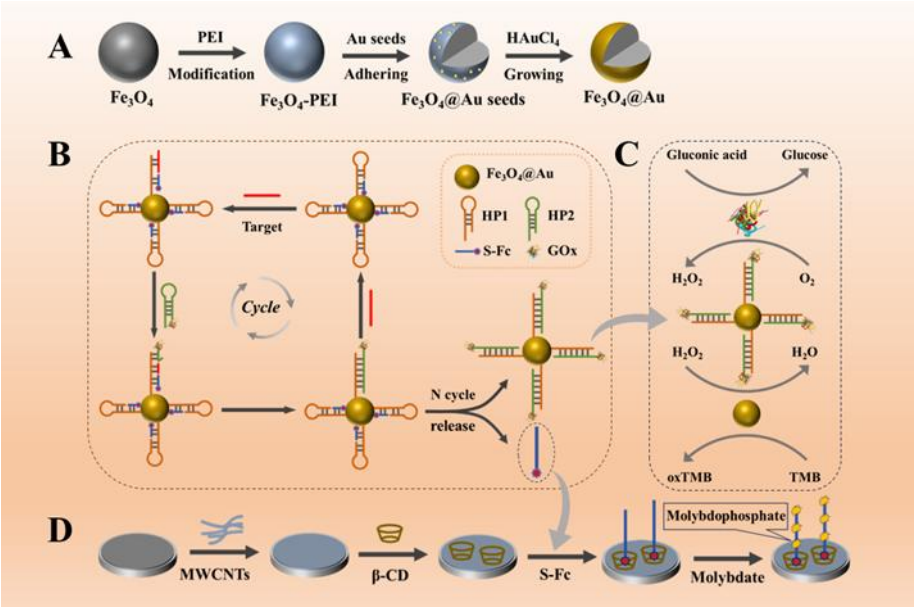


图 1. 电化学-比色双模式传感器的设计原理

关键字 Fe_3O_4@Au；双模式检测；催化发夹自组装；microRNA-222

参考文献

1. W. Zhang, X. Jiang, S. Liu, D. Zhao, M. Yang, *Chin. Chem. Lett.*, **2020**，31，459-62.
2. S. Xiao, Y.T. Yang, Y.F. Chen, J.L. Liu, Y.Q. Chai, R. Yuan, *Biosens. Bioelectron.*, **2024**，254，116193.
3. W. Zhang, W. Hao, X. Liu, X. Sun, J. Yan, Y. Wang , *Talanta.*, **2020**，219，121332.
4. D. Song, R. Yang, S. Fang, Y. Liu, F. Long, A. Zhu, *Microchim. Acta.*, **2018**，185，491.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于差分脉冲伏安法-电化学发光的双模传感器用于检测癌胚抗原

魏汝凯、高震、尚磊*
聊城大学

灵敏、可靠和特异性的癌胚抗原（CEA）检测是癌症早期诊断的关键目标[1]。这项工作以还原氧化石墨烯（rGO）作为传感器平台[2]，使用氯化血红素（Hemin）-DNA 作为增强电化学发光（ECL）和差分脉冲伏安信号（DPV）响应探针，构建了一种新型 ECL-DPV 双模传感器用于 CEA 的高灵敏度检测。首先通过Π-Π相互作用将 CEA 适配体链固定到石墨烯修饰的电极表面，之后通过非共价嵌入的方式将 Hemin 结合到 CEA 适配体链中[3]，在氧气（O_2）存在的条件下，Hemin 可以电催化还原 O_2 产生还原 DPV 电流。在此过程中产生大量的 OH·，激发了三吡啶钌$[Ru(bpy)_3]^{2+}$-草酸根体系产生强烈的阴极 ECL 信号[4]。检测时，CEA 可以减少表面的适配体链，从而降低了 Hemin 的量，导致 DPV 电流和 ECL 信号的明显降低，因此实现了电极对癌胚抗原在 1fg/mL 至 500pg/mL 浓度范围内的双模检测，提高了检测的可靠性和准确性。构建的传感器具有良好的重现性，稳定性及选择性，并且在实际样品检测中取得了满意的结果。

关键字 双模传感器、氯化血红素、癌胚抗原

参考文献

1. Y. Tang, Y. Chen, Y. Liu, Y. Xia, F. Zhao, B. Zeng, *Anal. Chem* **2022** 94 (51), 17787-17794
2. B. Liu, Y. Zhao, Y. Jia, J. Liu, *J. Am. Chem. Soc*. **2020**, 142, 34, 14702–14709
3. Y. Guo, J. Li, S. Guo, E. Wang, S. Dong, *ACS. Nano* **2011** 5 (2), 1282-1290
4. J. Li, C. Wang, W. Wang, L. Zhao, H. Han, *Anal. Chem.***2022** 94 (21), 7655-7664

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于 CRISPR/Cas12a 和磁辅助构建灵敏检测乙肝病毒的电化学发光生物传感平台

刘雨、贾丽萍*
聊城大学

乙型肝炎病毒 (HBV)是一种 DNA 病毒，它由蛋白质、脂质包膜和含有部分双链环状 DNA 的二十面体核衣壳核心组成。HBV 感染会导致慢性肝炎、肝硬化和肝细胞癌等严重的肝脏疾病。因此，开发一种快速、准确的方法检测 HBV 对于乙型肝炎的预防和控制至关重要。本工作基于 CRISPER/Cas12a 特异性切割性能和磁性辅助构建了灵敏检测乙肝病毒(HBV DNA)的电化学发光传感平台。首先合成了具有磁性的 Fe_3O_4@Ru@SiO_2 纳米复合材料，并通过酰胺键将二茂铁修饰的 DNA（Fc-DNA）固定在材料表面。Fc 的引入一方面可以有效猝灭 Ru 的电化学发光，另一方面 Fe_3O_4@Ru@SiO_2 表面 DNA 的引入阻碍了共反应剂 TPA 和 Ru 之间的电子转移，使发光强度降低。在目标物存在下，靶标激活 crispr/cas12a 切割 Fc-DNA，从而使 Fc-DNA 从材料表面脱落，导致 ECL 增强。基于 ECL 强度的变化，即可实现对 HBV 的检测。本文将磁性分离和磁性电极相结合，不仅降低了背景干扰，而且简化了电极修饰过程，缩短了分析时间，为乙肝病毒检测提供了一种新的方法。

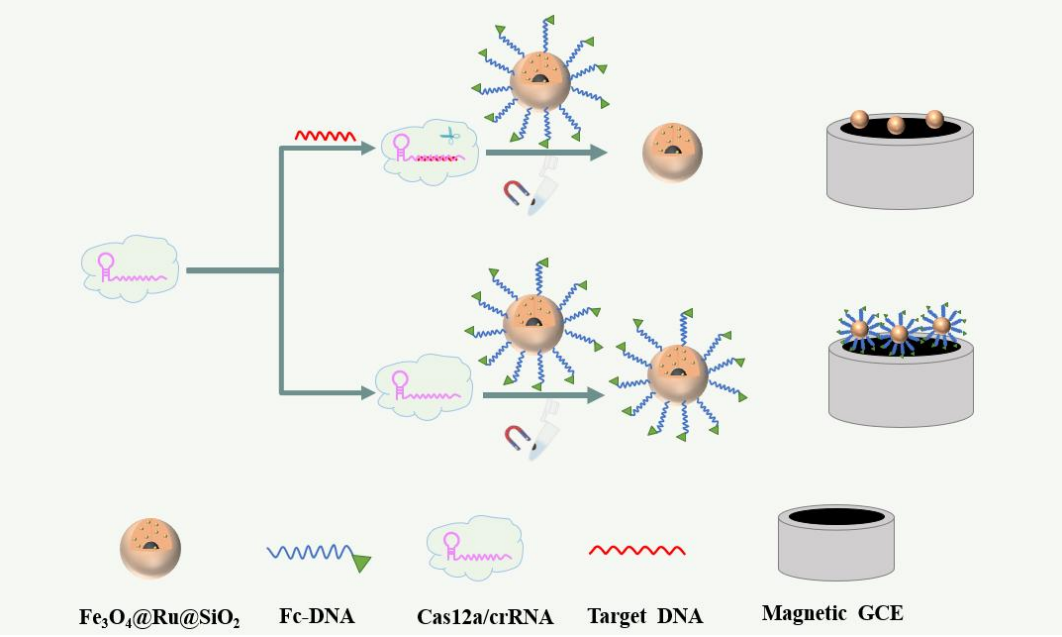


图 1 基于 CRISPR/Cas12a 和磁辅助灵敏检测乙肝病毒的原理图

关键字 CRISPR/Cas12a；磁辅助

参考文献

1. H. Li, Q. Cai, Y. Guan, Z. Li, G. Jie, H. Zhou, *Sensor Actuat B-Chem.*, **2024**, 412, 135781.
2. L. Gou, Y. Sheng, Q. Peng, J. Ling, H. Yue, F. Chen, H. Tang, *Sensor Actuat B-Chem.*, **2020**, 312, 127987.

3. Y. Lin, P. Luo, F. Luo, C. Lin, J. Wang, B. Qiu, Z. Lin, J. Chen, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 13710-13718.
4. X. Yang, L. Liu, Y. Feng, X. Guo, Y. Wu, Q. Gao, C. Zhang, H. Qin, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 10459–10466

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于 Bi-ZnO 纳米片的光电化学传感器对手性色氨酸的有效识别

李南盛、韦朝鲜、颜文菊、张娅、杨晓霖、宋凯信、袁亚利*
桂林理工大学

手性分子的对映选择性传感是生物医学研究和制药工业的重要课题。本研究的对映体选择性光电化学（PEC）传感器的构建通过电沉积的 Bi-ZnO 纳米片与手性配体 L-His 构成。电化学恒电流沉积法制备的 Bi-ZnO 纳米片可以作为 PEC 的平台。通过 L-组氨酸（L-His）的合成后修饰（PSM），成功地将同手性引入非手性 Bi-ZnO 纳米片上。所得到的 L-His/Bi-ZnO 结构对于色氨酸（L/D-Trp）对映体的手性识别表现出优异的区分能力。此外，通过调节电荷载流子分离诱导的光电流变化机制所提出的纯手性 PEC 电极对手性识别显示出广泛的应用潜力。由于直接在半导体材料基底上构建的传感平台，因此可以直接作为 PEC 传感平台，从而为手性对映体的识别提供稳定、简化和低成本的传感装置。

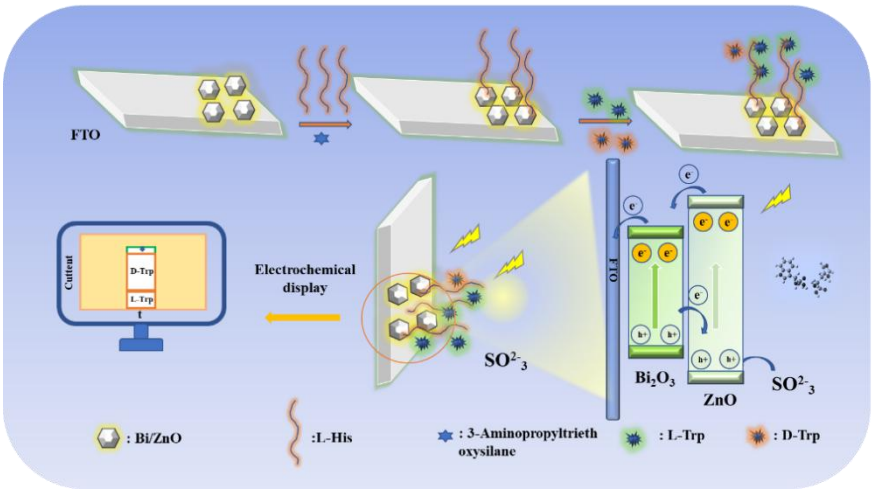


Fig. 1 Synthesis steps and detection principles of L-His/Bi-ZnO

关键字 光电化学；手性配体；恒电流沉积法

参考文献

1.Fu B , Liu Y , Wang J ,et al.Discrimination of chiral amino acid enantiomers through photoelectrochemical sensing platform[J].*Chemical Engineering Journal*, 2024, 492.
2.Song Y Y ,emailprotected, Emailprotected E ,et al.Engineering Homochiral MOFs in TiO_2 Nanotubes as Enantioselective Photoelectrochemical Electrode for Chiral Recognition[J]. *Anal. Chem.* 2021, 93, 12067−12074.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

磁浮分离介导啶虫脒均相检测传感新策略研究

谢亚荣、马荣娜*
聊城大学

开发绿色、准确、可靠的农药残留检测方法，是实施农业质量监管的重要技术支撑。啶虫脒（Ace）作为一种具有一定遗传和细胞毒性的新烟碱氯化物杀虫剂，广泛应用于家庭和农业害虫防治。本研究构建了一种磁浮分离介导的均相啶虫脒电化学检测新策略，克服了传统电化学农药残留检测电极表面过度修饰和溶液、电极两相识别的局限性，实现免固定均相检测啶虫脒。该传感平台构建中空二氧化硅微球 HSB 作为悬浮识别元件和具有信号转导输出的功能磁信号报告探针 Fe_3O_4@AgNPs。目标 Ace 触发浮力驱动介导的准同质识别反应，预加载的 Fe_3O_4@AgNPs 部分释放，简单磁吸捕获一定量的可区分磁信号报告探针，将 Ace 量转化为电位分辨 Ag 的信号。实验结果证明，释放的磁性信号探针电流强度与 Ace 浓度的对数在一定范围内呈现良好的线性响应，具有操作简便、快速和稳定性好的显著优点。有意义的是所提出的方法具有一定的通用、简易性，可通过简单转换目标识别元件延伸到普遍检测，为其他农药残留检测提供了一个全新视角，具有较好的应用前景。

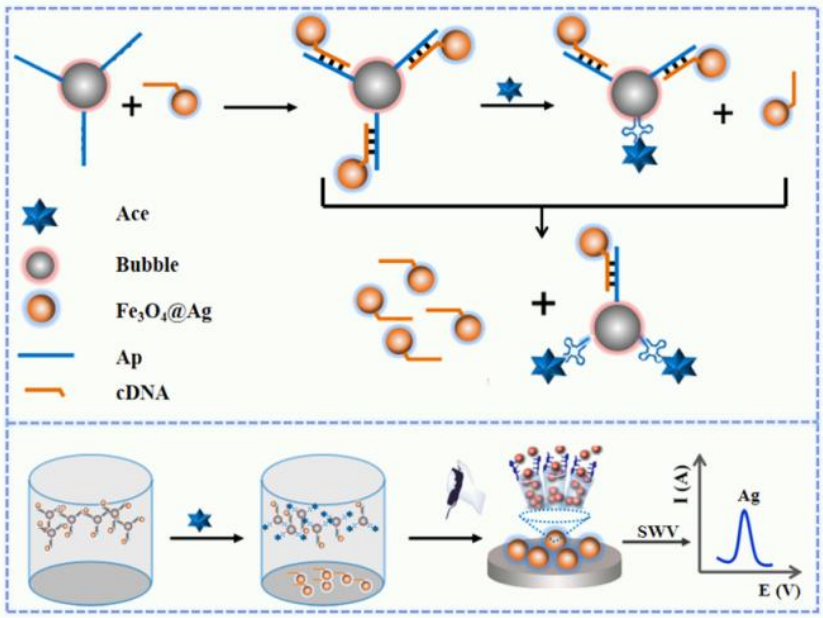


图. 1 磁浮分离介导啶虫脒均相检测传感原理图

关键字 均相；磁浮；农药残留；电化学

参考文献

1. E. M. Saggioro, D. G. do Espírito Santo, S. F. Sales Júnior, et al. *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, **2019**, 183.
2. Xia, C., Ji, H., Jun, L., et al. *Sens. Actuators B.*,**2019**,298 126866.
3. Pan, H., Gong, Y.,Cao, W., et al., *Anal. Chem.*, **2023**, **95**: 7336-7343.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于 ZnPTC-AuNPs-CdS 复合材料的光电化学免疫分析

陈进、王碧瑞、邱芬芬、覃晓丽*
湖南农业大学

光电化学（PEC）生物分析是将光电化学过程与生物识别相结合而发展起来的一种新型分析方法[1]。因其仪器价格便宜、操作简单、灵敏度高等优点受到广大科研人员的青睐[2,3]。本论文首先用电化学沉积法合成了以苝-3,4,9,10-四羧酸（PTC）为有机配体的锌基金属有机框架（ZnPTC），随后生成了 ZnPTC-AuNPs-CdS 纳米复合材料，以此构建的 PEC 免疫传感器对伤寒沙门氏菌进行免疫分析，检测范围为 1 fg mL^{-1}-100 ng mL^{-1}，检测限低至 0.21 fg mL^{-1}（S/N=3），构建的 PEC 免疫传感器具有线性范围宽、灵敏度高、抗干扰性与选择性好的特点，可用于实际样品的检测。

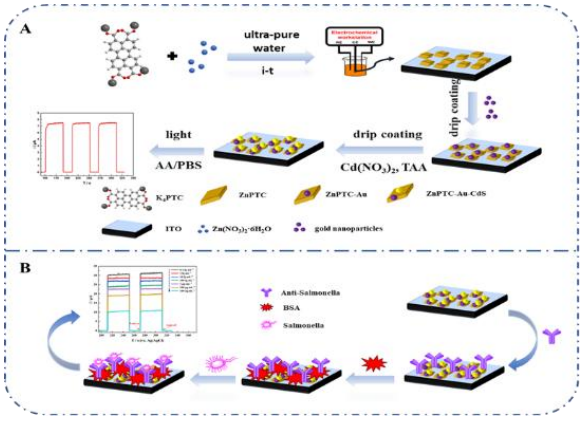


图 1 电化学沉积法制备 ZnPTC-Au-CdS（A）及免疫传感器构建示意图（B）。

关键字 光电化学生物分析；锌基金属有机框架；检测伤寒沙门氏菌

参考文献

1.Z. J. Li, J. R. Lu, W. T. Wei, M. Tao. *Chem Commun*. **2022**, 58, 12418-30.
2. M. X. Zhao, L. Q. Yang, J. Zhao, J. B. Jiang, Z. Wang. *Chemelectrochem*. **2022**, 9, 1160-1150.
3.Y. Song, J. Yao, R. Y. Wang, C. T. Wang, Y. Zhao, L. Q. Wang. *Anal Methods-UK*. **2021**, 13, 7.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

基于一种磺酰肼有机发光体的 ECL 免疫传感器的构建

陈虎权、李湘玉、刘波、伍锦良、张琴、覃晓丽*
湖南农业大学

电化学发光（ECL）免疫分析因其稳定性好、灵敏度和选择性高、线性范围宽、可控性好等优点而受到广泛关注[1]。有机发光体因其种类繁多、具有强烈而稳定的 ECL 信号而备受关注[2]。本文用电合成的方法，合成一种叔丁基苯硫磺酰肼（PTPCI）作为 ECL 有机发光探针，构建了用于检测 SARS 病毒的电化学生物传感器，PTPCI 传感器对 SARS-CoV S 蛋白具有快速识别、高选择性和专一性等优点，线性范围为 20 fg/mL ~ 200 ng/mL，检测下限为 10.5 fg/mL（S/N=3）。该传感器不仅可以灵敏的用于 SARS 检测，也为临床检测目标分析物提供了一种新的途径。

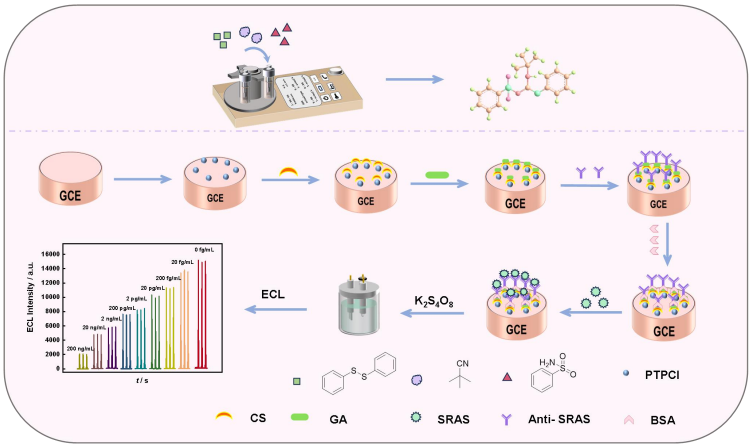


图 1 PTPCI 的制备以及 ECL 免疫传感器的构建过程。

关键字 电化学发光；有机发光探针；生物传感器

参考文献

1.Vidic J, Manzano M. *Curr. Opin. Electrochem*, **2021**, 29, 100750.
2.Ruliang Y, Yujiao Z, Jiyang L. *Nanomaterials*, **2024**, 14, 390.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

具 POD 酶样的单分散金纳米颗粒修饰 MoS_2 纳米片的电化学 H_2O_2 传感用于抗癌药物评价

刘绮雯、陈嘉媚、杨朔、余细勇、黄洋、黄胜峰*
广州医科大学

纳米酶独特的粒径、理化性质和超高的稳定性在传感领域引起了广泛关注，但提高纳米酶的催化活性仍然是一个亟待解决的问题。鉴于金属纳米颗粒具有超高的模拟酶活性和多酶催化的优势，开发了一种集双过氧化物酶(POD)活性于一体的金修饰 MoS_2 纳米片(MoS_2/Au NS)。通过优化和调整 AuNPs 的密度及其形态等参数，获得了在 MoS_2 纳米片上的单分散高密度分布的 AuNPs，可以大大提高 MoS_2/Au NS 的 POD 样活性，采用 Nafion 溶液辅助 MoS_2/Au NS 修饰电极表面，以提高其稳定性。利用导电 Nafion 溶液修饰 MoS_2/Au NS 纳米酶，构建电化学 H_2O_2 检测平台。带负电荷的磺酸基可以消除带负电荷的电活性物质，提高特异性。然后用抗坏血酸刺激肿瘤细胞产生 H_2O_2 作为治疗模型，建立超灵敏的时间库伦法检测细胞裂解液中的 H_2O_2。ΔQ 的对数和 H_2O_2 浓度的对数在 1 μM ~ 500 mM 之间呈良好的线性关系，LOD 值为 0.3 μM。所研制的 H_2O_2 传感器具有良好的稳定性、重现性(RSD = 2.3%， n = 6)和选择性，实现了细胞裂解液中 H_2O_2 的定量检测。与细胞裂解液中 H_2O_2 的商业化荧光检测试剂盒相比，本研究开发的电化学 H_2O_2 传感器更简单、更快、灵敏度更高、成本更低。这为基于 H_2O_2 精确检测的疾病诊断和治疗评估提供了一种潜在的替代方法。

关键字 电化学传感器；纳米酶；类过氧化物酶活性；H_2O_2 传感；抗癌药物评价

参考文献

1. Q. Liu, Y. Huang, S. Wang, S. Yang, Z. Jiang, S. Huang, *Anal. Chim. Acta*, 2024, 1320, 342996.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

N 掺杂碳碗状半球负载超薄 P 掺杂 MoS_2/MoO_2 纳米片用于血清和活细胞中多巴胺的电化学传感

熊小莉*[1]、徐莉[1]、胡平越[2]、欧莲[1]、郭俊春[1]、王谦[1]、李升[3]
1. 四川师范大学
2. 四川大学
3. 重庆医药高等专科学校

多巴胺（DA）是中枢神经系统中的一种关键神经递质，其浓度异常与多种疾病相关。本研究成功制备了一种新型碗状 N 掺杂碳半球支撑的具有分层结构的 P 掺杂 MoS_2/MoO_2 超薄纳米片（N-BCH@P-MoS_2/MoO_2）。该催化剂结合了 N-BCH 的高比表面积和 P-MoS_2/MoO_2 的高电催化活性，有效提高了传质效率和电催化性能。N 和 P 的共掺杂进一步调控了催化剂的电子结构，增加了导电性和活性中心的数量。结果表明，N-BCH@P-MoS_2/MoO_2 对 DA 的检测具有良好的灵敏度和选择性，在较宽的浓度范围（3 - 100 μM）内，检测限低为 120 nM（S/N = 3）。此外，这种电催化剂还具有良好的生物相容性，可用于检测人体血清和活细胞中的 DA，在临床诊断中具有巨大的应用潜力。它有望在未来的临床诊断和个人健康监测中发挥重要作用。

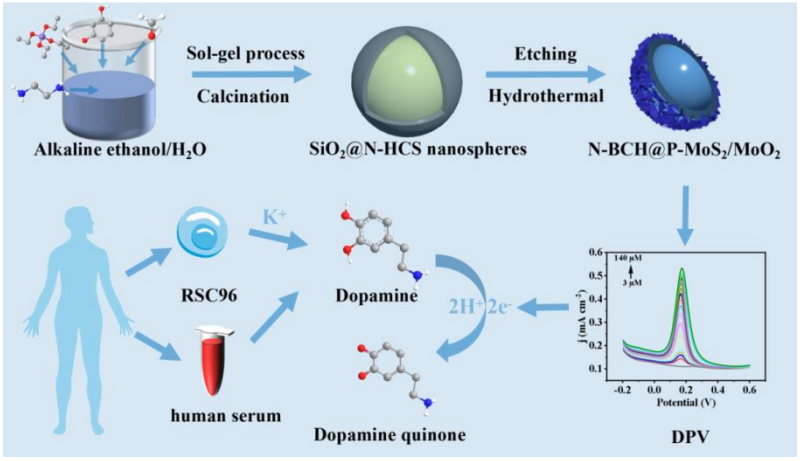


Fig.1 The preparation process of N-BCH@P-MoS_2/MoO_2

关键字 碳半球壳；MoS_2/MoO_2 纳米片；N、P 掺杂；多巴胺；电化学传感器；血清和活细胞

参考文献

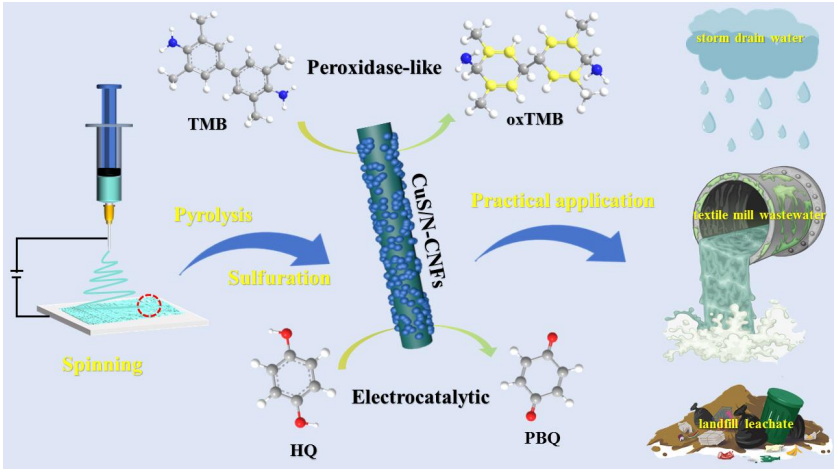
1.Y. Haldorai, A.T.E. Vilian, M. Rethinasabapathy, Y.S. Huh, Y.-K. Han, *Sens. Actuators B: Chem.* **2017**, 247, 61-69.
2. J. Tian, H. Zhang, Z. Li, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2018**, 10, 29511-29520.
3.X. Li, J. Shao, J. Li, L. Zhang, Q. Qu, H. Zheng, *J. Power Sources,* **2013**, 237, 80-83.
4.J. Du, A. Chen, X. Gao, Y. Zhang, H. Lv, *Carbon,* **2022**, 191, 67-74.
5.T. Meng, A. Nsabimana, Z. Liu, H. Jia, S. An, H. Wang, Y. Zhang, *J. Colloid. Interface Sci.* **2020**, 579,12-20.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

CuS 纳米颗粒锚定在富硫空位的 N-掺杂碳纳米纤维上用于对苯二酚的电化学和比色双模式传感

熊小莉*、袁香伟、金瑶、徐莉、欧莲、郭俊春、王谦
四川师范大学

对苯二酚(HQ)广泛应用于染料、摄影、制药等行业，其在自然界中毒性高、难以生物降解，对人类健康和环境污染带来严重污染。因此快速灵敏检测环境中的 HQ 对保护环境和人类健康具有重要意义。本工作通过静电纺丝和硫化反应制备了 N 掺杂碳纳米纤维铆定 CuS 纳米粒子（CuS/N-CNFs）的纳米酶催化剂，丰富的硫空位和介孔碳结构显著降低了电荷转移电阻，提升了电催化性能，有利于 HQ 的电化学检测。此外，该催化剂还具有明显的类过氧化物酶活性，在过氧化氢的存在下催化无色的 3,3', 5,5' -四甲基联苯胺 (TMB)生成蓝色的 oxTMB。基于此，建立了一种电化学和比色的双模式传感器，并分别在 1-614 μM 和 1-57 μM 范围内对 HQ 的检测呈良好的线性关系，计算得到检测限（LODs）分别为 0.293 和 0.621 μM（S/N=3）。将所建立的 HQ 双模传感器平台运用在真实水样中，取得了令人满意的回收率，有望成为实际应用的潜在候选方法。



Scheme 1. Brief experimental flow chart.

关键字 硫化铜；硫空位；碳纳米纤维；电化学和比色法；对苯二酚；双模式检测

参考文献

1.N. Li, J.-R. Huang, H.-Y. Zhang, M. Cui, B. Sun, C. Zhang, H.-Y. Zhao, *ACS Appl. Nano Mater.*, **2024**, 7, 1960-1969.

2.H. Wang, J. Xu, Q. Zhang, S. Hu, W. Zhou, H. Liu, X. Wang, *Adv. Funct. Mater.*, **2022**, 32, 2112362.

3.J. Zhu, X. Peng, W. Nie, Y. Wang, J. Gao, W. Wen, J. N. Selvaraj, X. Zhang, S. Wang, *Biosens. Bioelectron.*, **2019**,141, 111450.

4. Z. Cao, J. Guo, J. Jia, Z. Zhang, Y. Yin, M. Yang, S. Yang, *Electrochim. Acta,* **2022**, 422, 140549.

5.H. Huang, Y. Chen, Z. Chen, J. Chen, Y. Hu, J.-J. Zhu, *J. Hazard. Mater.*, **2021**, 416, 125895.
分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

通过等离子蚀刻原位构建 NiCo 层状双氢氧化物纳米片阵列用于食品中葡萄糖的非酶电化学传感

闫怡婷[1]、唐龙[1]、胡苗[1]、阳琳[1]、何娟[1]、张俊[1]、刘芳华[1]、何娟[2]、江雪*[1]
1. 四川师范大学
2. 四川大学

开发高效的非酶电化学传感器对于食品中葡萄糖质量评估具有重要意义。我们采用等离子体辅助刻蚀方法在镍泡沫上原位合成 NiCo 层状双羟基氧化物纳米片阵列（NiCo-LDH/NF），并将其用于在碱性环境下的葡萄糖传感。制备的 NiCo-LDH 纳米片均匀分散，具有较高电化学活性表面积和良好的电子转移效率（电子转移系数（α）高达 0.91，催化速率常数（k）为 2.44 × 106 cm^3 mol^{-1} s^{-1}）。基于 NiCo-LDH/NF 的非酶葡萄糖传感器具有较宽的线性范围（0.4-150 μM）、高灵敏度（98000 μA mM^{-1} cm^{-2}）和低检测限（48.76 nM），并且展现出满意的重现性和选择性。本工作开发了一种简单快速的原位合成方法，用于构建高灵敏度的非酶电化学传感器。

关键字 等离子体；刻蚀；NiCo-LDH；非酶葡萄糖传感器

参考文献

1. T Long, Y.T. Yan, C.G. He, *Microchemical Journal,* **2024**, 206: 111496.
2. J Li, C.H. Ma, S.J. Zhu, *Nanomaterials.,* **2019**, *9*, 1428.
3. S.Y. Hao, L.C. Chen, C.L. Yu, *ACS Energy Lett.,* **2019**, 4, 952–959.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

利用高时空分辨率 ECL 成像技术，对工业纯钛及其合金的腐蚀行为进行表征和预测

陈轩、马诚*
扬州大学化学化工学院

钛及其合金的耐蚀性很大程度上依赖于其自身的钝化氧化膜，因此氧化膜缺陷处很可能发生腐蚀，这可能是由其自身晶界生长缺陷或其他外部来源引起的。鉴于氧化膜缺陷处电阻相对较低、电化学活性较高的特点，我们利用 ECL 成像技术对这些可能被腐蚀的微区域进行表征，从而以低成本、高时空分辨率、高通量预测钛及其合金的腐蚀。结果还表明，ECL 成像的上述独特优势可以很好地应用于广泛的钛合金，并在各种场景下有效表征各种腐蚀形式。

关键字 钛合金；腐蚀表征和预测；电化学发光成像

参考文献

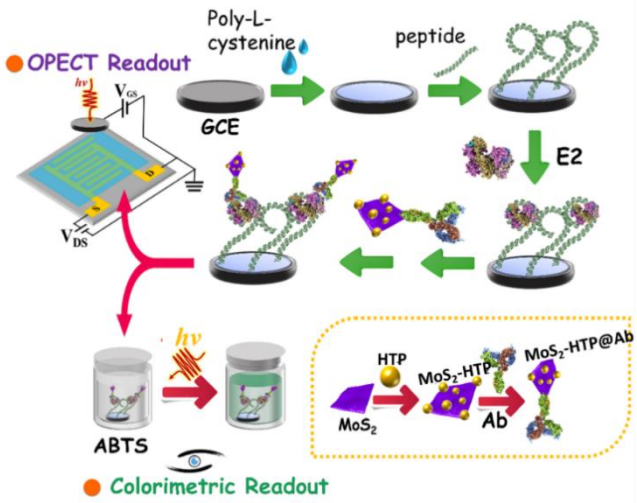
1. Zhang, L. C.; Chen, L. Y., A review on biomedical titanium alloys: recent progress and prospect. *Advanced engineering materials* **2019,** *21* (4), 1801215.
2. Veiga, C.; Davim, J. P.; Loureiro, A., Properties and applications of titanium alloys: a brief review. *Rev. Adv. Mater. Sci* **2012,** *32* (2), 133-148.
3. Anil Kumar, V.; Gupta, R.; Prasad, M.; Narayana Murty, S., Recent advances in processing of titanium alloys and titanium aluminides for space applications: A review. *Journal of Materials Research* **2021,** *36*, 689-716.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

光启动自催化异质结调控的多信号有机电化学晶体管传感平台用于疾病早期诊断

陈妍洁、戴宏*
衢州学院

Precise detection of biomarkers in complex samples makes great significance for timely health risk control. The organic electrochemical transistors (OECT) biosensor with excellent signal amplification effect paved an effective pathway for ultra-sensitive bioassay. Moreover, the multi-signal output strategies with independent signal conversion channel was expected to provide more diversified information and promote the accuracy of results. Herein, a high performance multi-signal OECT biosensor combined photoelectrochimical (PEC) and visual analysis was particularly designed by taking a new HTP-MoS_2 cascade self-catalyzed heterojunction (CSH) as the signal conversion unit. In the process of multi-signal assay, the HTP-MoS_2@Ab CSH probe anchored on gate mode via peptide grafted technology with good specificity. Under radiation of UV light, effective electron-hole pairs separation and free charges migration occurred in HTP-MoS2@Ab2 probe and target relative photocurrent produced on gate, which can be further amplified by the flexible micro-organic semiconductor channel with ultra-high sensitivity. As for colorimetric assay, the HTP-MoS_2@Ab_2 probe CSH initiated a photo-initiated cascade self-catalyst reaction in 2,2¢-azinobis(3-ethylbenzothiazoline)-6-sulfonic acid (ABTS) thereby translating the target recognition into visual color variation. The HTP-MoS2 CSH enabled multi-signals generation for sensitive and accurate detection of target E2 in suspected patients, which provide valuable information for accurate early diagnosis and treatment prognosis of tumors.



Schematic diagram of multi-signal OECT biosensor controlled by Photo-initiated Cascade self-catalyzed heterojunction

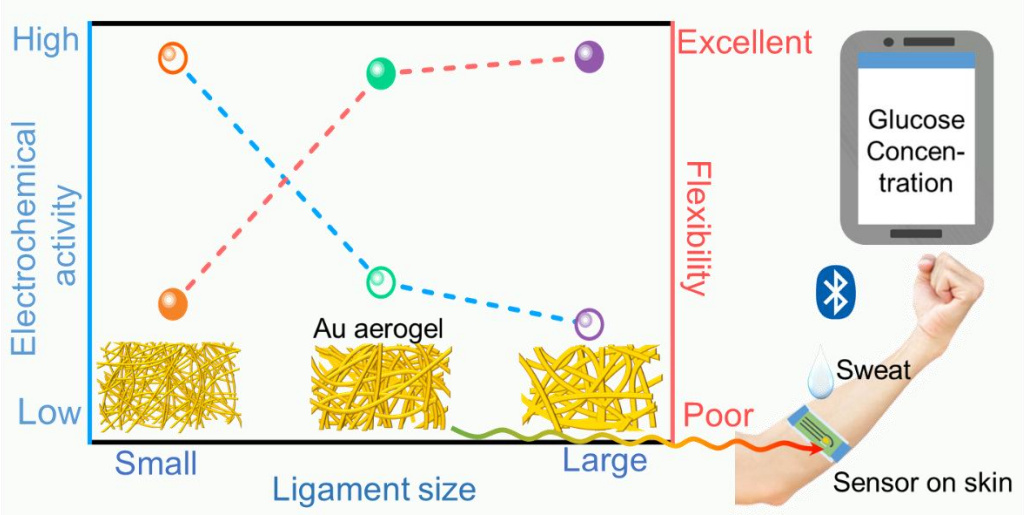
关键字 photoelectrochemical; photo-initiated cascade self-catalyzed heterojunction; organic electrochemical transistors; multidual-signal conversion

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

可穿戴电化学传感中的微观尺寸效应研究

万鑫豪、文丹*
西北工业大学

可穿戴传感能够感知人体生理生化信号，提供健康状态分析。电化学可穿戴传感能够快速，灵敏，连续监测生化标志物而备受关注。然而，敏感电极微观尺寸与可穿戴电化学传感性能的关系尚不清楚，这对柔性电极材料设计具有重要意义。考虑到 Au 气凝胶优异的柔韧性和电化学性能，我们用其评估和揭示可穿戴电化学传感中的微观尺寸效应。即以三种不同韧带尺寸的 Au 气凝胶为模型，探究其柔性电化学传感性能。具体来说，随着韧带尺寸的减小，Au 气凝胶的电化学活性面积增大、电子传递速率加快，具有更好的电化学传感性能。此外，随着韧带尺寸的增大，Au 气凝胶具有更好的柔韧性，分子动力学模拟与原位拉伸扫描电子显微镜揭示了基于尺寸的断裂应变对机械柔性的影响。最后，以兼具灵敏性和柔韧性的 Au 气凝胶作为电极材料，结合微流控芯片和无线电路板设计成功构建可穿戴电化学传感器，实现了人体重要代谢物——葡萄糖在汗液中的实时监测。本工作系统深入揭示了可穿戴电化学传感中的微观尺寸效应，对合理设计柔性电极材料具有指导意义。



关键字 尺寸；金属气凝胶；电化学传感；柔韧性；可穿戴电子

参考文献

1. S. Shu, W. L. Cheng, *Chem. Rev.*, **2024**, 124, 2, 455–553.
2. Y. Zhao, Y. L. Liu, *Adv. Mater.*, **2023**, 2305917, 1-31.
3. G. L. Li, D. Wen, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 14068-14075.
4. X. H. Wan, D. Wen, to be submitted.

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

碳纳米管限域 MnO 自发沉积 Pb(II)Hg(II)双金属的超高灵敏检测

周晶*
江西农业大学

由于重金属对人类健康的危害，高效的检测方法受到了极大的关注。传统的电化学技术以其低检测限和高灵敏度而著称，并广泛应用于重金属离子分析。然而，富集过程中所需的电沉积步骤增加了检测过程的复杂性。在这项工作中，我们利用过渡金属的价态循环特性，制备了能在检测过程中免电沉积步骤的被碳纳米管包裹的受限MnO/CNT复合材料。同时，通过采用纳米限制策略，增强了材料的稳定性并减少了干扰，实现自沉积。主要研究内容有：

利用过渡金属具有未完全填充的轨道和丰富的可变氧化态的特性，触发金属离子的原位自还原反应，避免额外还原的需求。另外，为了增强过渡金属氧化物的检测性能，采用含氮有机配体一步热解煅烧出氮掺杂的碳纳米管材料以提高材料的吸附性能与导电性能。实验结果表面，该材料孔径小，电化学阻抗小，吸附性能优异，并能够通过Mn(II)/Mn(III)进行氧化还原循环，是一种选择性好、高灵敏度且无需电沉积的传感策略，用于同时检测多种HMI。

关键字 高灵敏检测; 重金属离子; 电化学传感

参考文献

1. Yixuan Xia, Yong Zhao, Fengxiang Ai, et al. *Journal of Hazardous Materials*, 2022, 425: 127974
2. Yixuan Xia, Jiating Li, Gangbing Zhu, et al. *Sensors and Actuators: B. Chemical*, 2022, 355: 131247

分会场：5.电化学分析与仪器
交流类型：墙报

Cu-BTC/FeCo-MOF derived carbon composite based molecular imprinted electrochemical sensor for highly sensitive and selective detection of Benomyl

陈利利*
江西科技师范大学

分子印迹聚合物（MIPs）在农药残留检测中有着广泛的应用。与传统的电化学检测机制相比，分子印迹技术可以实现复杂样品中目标分析物的高选择性检测。然而，一些局限性，如识别位点的可及性差、随机聚合和次优电导率等，阻碍了 MIPs 在电化学传感中的实际应用。因此，广泛的研究集中在开发具有更大传感表面和出色导电性的电化学传感衬底上，这可以提高电子传递速率并增加更多的分子印迹位点。

金属有机框架（MOF）由于其化学和结构的可调性、大表面积、高孔隙率以及相对温和的制备条件而成为功能电极材料。然而，传统的 MOF 具有较低的导电性，这限制了它们在传感材料中的实际应用。近年来，由于 MOF 衍生的碳材料具有优异的导电性、显著的孔隙度和丰富的金属活性位点等优点，成为电化学传感器领域的研究热点。由 MOFs 碳化而成的碳材料克服了 MOFs 固有的不稳定性、有限的微孔隙度和柔性结构。此外，在 MOF 中加入第二种金属可以增强金属之间的协同作用，从而提高电催化活性。Cu-BTC 是一种具有丰富表面官能团的导电膜，与聚（3,4-乙烯二氧噻吩）(PEDOT)-MIP 形成氢键，有利于印迹膜的均匀分布，增加了识别位点的数量。MOFs 与 MOFs 衍生碳的结合可以实现优势互补和协同催化作用，但目前报道较少。研究主要内容有：

开发了一种基于 FeCo-ZIF 衍生碳和 Cu-BTC 复合材料的高灵敏度和选择性 MIP 电化学传感器。首先采用一步法制备 FeCo-ZIF 衍生碳，并直接热解对电极表面进行修饰，然后采用电沉积法制备 Cu-BTC。最后，结合聚（3,4-乙烯二氧噻吩）（PEDOT），利用电聚合技术在复合材料上制备分子印迹膜。合成的 Cu-BTC 和 FeCo@NC 复合材料不仅具有高比表面积、优异的导电性和良好的催化性能，而且可以作为一种有前途的固定更多印迹位点的基体材料。所得到的传感器显示出对 BN 的高电化学活性，表现出增强的电流响应。该印迹传感器具有高选择性、重复性好、性能可靠等特点。为了评估所构建传感器的实际适用性，我们在白菜和桃子中的 BN 测定中获得了令人满意的回收率结果，表明了其在食品分析中的潜力。

关键字 Metal-organic framework (MOF)-derived carbon; Cu-BTC; Pesticide detection; Benomyl; Electrochemical sensor

参考文献

1. Shuya Xue, Jiamin Zou, Jiapeng Li, et al. *Food Chemistry*, 2024, 12(6): 456.
2. Jiani Ding, Yijian Tang, Shasha Zheng, et al. *Nano Research*, 2022, 15(8): 6793-6818.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

样品制备仪器装置研究进展

李攻科*、秦宏林
中山大学
通讯联系人: E-mail：cesgkl@mail.sysu.edu.cn

随着科学技术的飞速发展，分析化学领域面临的挑战日益增加，主要体现在分析样品的多样性、复杂性，以及待测组分含量低，进行仪器分析前样品制备是实现复杂样品中目标分析物的高质量定性和定量分析的关键步骤。为了提高整个分析过程的效率，发展快速、高效的样品制备技术至关重要。新材料为加速相吸附和相分配样品制备技术提供了良好的物质基础，样品制备-分析检测联用技术是实现快速、高效样品分析的手段，通过多组并联或串联实现高通量样品制备，多步骤协同、在线联用等策略加速样品制备。智能机械和自动化的应用推动了样品制备技术发展，使分析测定的全过程真正达到自动化，最大限度降低人为因素对分析结果的影响。利用微机械加工技术实现仪器装置微型化，通过微流控技术操控微量流体，可集成多个样品制备及分析检测功能单元，实现分离、富集和检测一体化。本文综述了近年来样品制备技术的主要研究进展，着重介绍了样品制备仪器装置的创新与实际应用，提出了样品制备仪器装置创制存在的挑战及发展方向。

关键字 样品制备；仪器装置；研究进展

参考文献：

1. L.S. Yu, L.Y. Huang, Z.Y. Wang, Y.H. Xiong, G.K. Li, Z.Y. Chen, Actuator B-Chem., 412 (2024) 11.
2. L.H. Yin, B.Y. Huo, L. Xia, G.K. Li, Anal. Chem. (2024) 8.
3. J.N. Lin, X.Y. Ouyang, Y.L. Hu, G.K. Li, Q.S. Zhong, J. Chromatogr. A., 1734 (2024) 9.
4. D. Li, Z.M. Huo, L. Xia, X.H. Xiao, G.K. Li, Anal. Chem., 96(14) (2024) 5368-5374.
5. B.Y. Huo, L. Xia, Y.L. Hu, G.K. Li, Biosens. Bioelectron., 255 (2024) 9.
6. B. Huang, X.Y. Wei, S.H. Weng, Z.M. Zhang, G.K. Li, Trac-Trends Anal. Chem., 174 (2024) 17.
7. H.S. Lai, G.K. Li, Z.M. Zhang, Anal. Chem., 95(49) (2023) 18149-18157.
8. H.S. Lai, Z.Y. Chen, G.K. Li, Z.M. Zhang, Anal. Chem., 94(47) (2022) 16275-16281.
9. L. Xia, J.N. Yang, R.H. Su, W.J. Zhou, Y.S. Zhang, Y.H. Zhong, S.M. Huang, Y.L. Chen, G.K. Li, Anal. Chem., 92(1) (2020).
10. 李攻科，汪正范，胡玉玲，肖小华等. 样品制备方法及应用. 北京：化学工业出版社，2022.

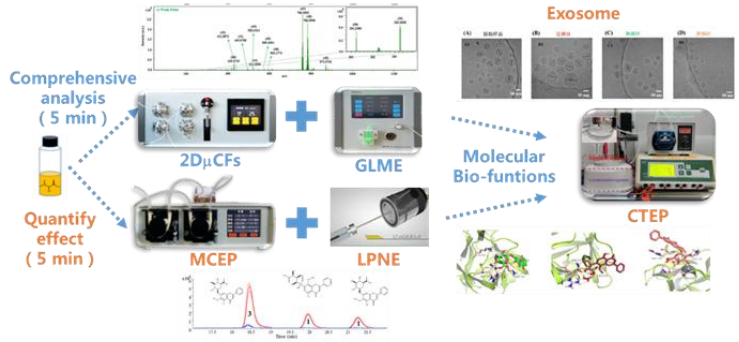
基金资助：国家自然科学基金重点项目（No.22134007）、国家自然科学基金项目(No. 22076223)和广东省基础与应用基础研究基金项目（2024A1515011077）。

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

中药现代化中的样品前处理技术与仪器

李东浩*
延边大学
通讯联系人: E-mail：dhli@ybu.edu.cn

天然药物成分复杂，极性及含量差异显著[1]。中药作为中国几千年的葵宝，也是祖国医药学宝库中的一颗璀璨的明珠。然而，相对于西药而言中药药效物质基础和作用靶点不明确，导致药效缓慢、用药方法和剂量模糊等问题。中药拥有了几千年的临床使用历史，明确的功效是中药的根本特征。然而，目前在中药研究中普遍采用开发西药的思路和方法，即分离单体明确其分子结构后开展药理活性、生物毒性和动物评估等系列实验研究。但是目前为止很难得到标志性的研究成果。作者认为中药现代化的关键在于研究思路和研究方法的创新。根据中药功效明确的特点，本研究团队提出了“功效在先、靶点在中、功能分子在后”的研究思路，并提出和自主研发了系列样品前处理技术和相关仪器设备。为了认识中药全成分开发了“气流微萃取仪”[2]和“二维组分分离仪”[3]，为了开展单靶点多组分相互作用开发了“多室电泳仪”，为了原位检测中药代谢动力学开发了“纳米限域液相纳萃取器”[4]，为了生物活性评价（外泌体分离与检测）开发了“靶型凝胶电泳仪”[5]。在学习疾病的信号通路基础上，通过这些技术和仪器设备可以短时间内挖掘和发现中药中的有效功能分子，再进一步明确其代谢通路以及在信号通路上的多靶点多组分相互作用，最后用生物学方法验证其功能分子的配伍有效性。完全可以避免目前单体实验中反复多次而效果不佳的传统研究模式。本研究思路是中药现代化的一种尝试，希望在中药发展中有所作用。



关键字：中药现代化、样品前处理、多靶点多组分、功能分子

参考文献：

[1] Harvey AL, Edrada-Ebel R, Quinn RJ. Nature reviews. Drug discovery, 2015 Feb;14(2):111-292.
[2] Jinhua Zhao, Donghao Li* et al., Journal of Chromatography A, 2023, 1708, 464357.
[3] Lei Yang, Donghao Li* et al. Journal of Pharmaceutical Analysis, 2024, 14(5), 100900.
[4] Yilin Zou, Donghao Li* et al. Analytical Chemistry, 2021, 93 (3), 1310-1316.
[5] Lu Liu, Donghao Li* et al. A circular non-uniform electric field gel electrophoresis for simultaneous separation and concentration of nanoparticles. Analytical Chemistry, 2022, 94, 23, 8474–8482.

注：国家自然科学基金项目(No. 22376177，22176164)

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

样品前处理材料与分析技术研究

师彦平*
中国科学院兰州化学物理研究所
通讯联系人: E-mail：shiyp@licp.cas.cn

样品前处理主要是实现分析物分离、纯化、富集的目的，减少其它物质或杂质等的干扰，便于后续分析。开发快速、简便、准确、选择性高和环境友好的样品前处理材料与技术已成为现代分析化学领域亟待解决的关键问题。固相萃取（SPE）是一种重要的样品前处理技术，具有操作简单、萃取效率高、固液分离快等优点，目前已广泛用于食品、药物、环境和生物等复杂基质样品中痕量或超痕量目标分析物的高效萃取及快速分析。SPE技术的核心在于高效的功能化萃取剂的制备。近年来，我们研究组以固相萃取结合分离分析的理念，完成了食品药品安全性评价的分离分析新方法，研制了修饰中空纤维管、功能化磁性碳纳米材料、药物和生物分子印迹聚合物等50多种固相萃取新材料，建立了80多种食品药品的色谱分析新技术，并应用于食品安全、药品安全和生物毒物等的分析检测方面。近期我们设计制备了几种过渡金属磁性复合材料，并用于大米等复杂样品体系中维生素的固相萃取与分离分析研究（图 1），取得了良好结果[1-3]。

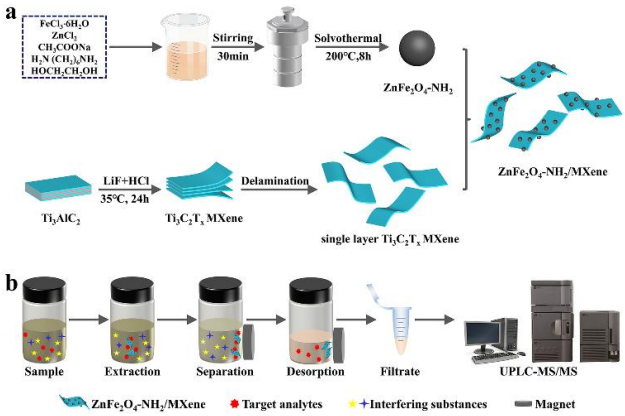


图 1. 过渡金属磁性纳米复合材料的固相萃取与分离分析技术

关键字 样品前处理，固相萃取，纳米材料，分离分析

参考文献：

1. 国家自然科学基金项目（Nos. 22374160, 22174153）资助.
2. Yu-Zhu Ding, Yi-Da Zhang, Yan-Ping Shi*. *Talanta*, 2022, 241: 123278.
3. Yu-Zhu Ding, Yi-Da Zhang, Yan-Ping Shi*. *Journal of Chromatography A*, 2023, 1693: 463881.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

毛细管电色谱富氮共价材料基整体柱的制备与分析应用

张文芬 郭云 张书胜*
郑州大学现代分析与基因测序中心，郑州 450000.
通讯联系人: E-mail：zsszz@126.com

毛细管电色谱（CEC）是将毛细管电泳（CE）和高效液相色谱（HPLC）二者结合的一种高效微分离技术，具有效率高、选择性好、流动相和分析物消耗低等优点。毛细管整体柱（capillary monolithic column，CMColumn）是 CEC 的一种重要分离形式，也是实现高效分离的核心单元，但目前仍存在 CMColumn 制备重复性、渗透性较差，孔隙率较低、背压较高等问题，因此如何制备固定相种类多、渗透性好、柱分离效率高、适用范围广的 CMColumn 是 CEC 分离科学中的具有挑战性的前沿研究课题。

富氮共价材料具有疏水骨架、丰富的亲水位点、大小可调的孔径、易修饰化学结构等优点，在多靶标小分子物质进行特异性识别和高效分离领域具有较高的潜在应用价值。因此，基于富氮共价材料制备 CMColumn，构建 CMColumn-CEC 高效分离体系具有显著优势和广泛的应用前景。本文以 N-烯丙基杯吡啶、富氮共价材料为识别功能单元，采用化学键合和物理掺杂法制备了四种具有良好的分离性能的 CMColumn，并将其成功应用食品安全分析。

关键字 富氮 COF，整体柱、毛细管电色谱

参考文献：

1.Sun J N, Yang S W, Cheng H Y, et al.. *J Chromatogr A*, 2019,1595, 221-229.
2.Zhao H Y, Wang Y Z, Zhang D Y, et al. *Electrophoresis*, 2018, 39,933-940.
3. Lv Y Q, Lin Z X, Svec F. *Anal Chem,* 2012, 84,8457-846
4. Guan L J, Guo Z Q, Zhou Q, et al. *Nat Commun,* 2023, 14, 8114

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

毛细管电泳分离分析的特色优势及其仪器性能的欠缺

夏之宁*[1]、黄一可[2]、王敏[1]、刘翠[1]
1. 重庆大学 药学院
2. 重庆医科大学 药学院

分析并讨论毛细管电泳（CE）面对分离度、灵敏度、重现性、自动化、可操作性的现状。重新提出了毛细管电泳存在的问题，分析了限制 CE 普及性发展的问题根源，在毛细管电泳的仪器结构上对比 HPLC 优势，找出了 CE 的几个不足。初步提出了毛细管电泳仪及其部件的可能发展和改进的设想。报告针对毛细管电泳在技术和应用方面的优势方向。特别是通过仪器与技术的改进手段，论述提升 CE 手性化合物分离度的观点；讨论新型 CEC 固定相与毛细管改性，讨论 CEC 固定相与 LC 固定相的区别；讨论 CE 除了分离分析之外，在亲和常数、分配常数等物化参数与活性物质筛选上的进展。评价 CE 作为柱反应器的优点；在“脏试样”分离分析与“全极性分子”分离分析上的优点；讨论 CE 在细胞、细菌、纳米粒子等颗粒分离分析与识别上的优势；举例在临床检验与医学领域 CE 相关方法；CE 在中药与天然药物研究的最新针对性特点。仪器与技术方面（以三点例子）综述了关于分离度与 EOF——电泳介质运动控制、CE-MS 联用接口、专用 CE 类仪器。

关键字 毛细管电泳，性能，器件，分离，应用

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

气相色谱开管柱制备研究

袁黎明*
云南师范大学化学化工学院，昆明，650500
E-mail：yuan_limingpd@126.com

气相色谱可以分为填充柱气相色谱和开管柱气相色谱，也可分为气-液色谱和气-固色谱。对于复杂样品和手性化合物，在多数情况下都是在开管柱气相色谱上进行分离分析的。

在开管柱内壁直接涂渍色谱固定液的称壁涂层开管柱，在内壁均匀涂敷吸附剂如氧化铝、石墨烯、分子筛、金属-有机骨架材料等的称多孔层开管柱[1-2]。在开管柱气相色谱中，具有OV-1、SE-54、OV-17、OV-225、PEG 20M 等化学结构固定液的柱是最主要的常规商品柱[3]；而手性笼 CC3-R 色谱柱具有最好的手性选择性，全甲基-*β*-环糊精柱是最广泛使用的手性商品柱[4-5]。现在国产的气相色谱常规商品柱在国内具有较低的市场占有率，而手性柱则完全依赖于进口。本课题组系统地研究了石英开管柱的多种柱内壁处理技术，如低浓度氢氧化钠处理、高浓度氢氧化钠处理、氢氧化钠和盐酸处理、氢氟酸处理、氨丙基化衍生处理、硅烷化衍生处理、聚硅氧烷衍生化处理、沉积氯化钠粗糙法、沉积水玻璃粗糙法、沉积 L-谷氨酸手性硅胶球粗糙法等，详细地探讨了这些柱内壁处理技术和不同固定液以及浓度等对各种色谱开管柱的分离性能的影响。国内多个团队开展的气相色谱开管柱的研究已为其商业化生产打下了坚实的基础[6-9]。

本团队多年来还一直系统地开展着高效液相色谱手性柱、手性薄层色谱板、手性高分子固膜的制备研究。

参考文献：

1. 傅若农. 色谱分析概论. 2 版. 北京：化学工业出版社, 2005.
2. 许国旺, 侯晓莉, 朱书奎. 分析化学手册.5.气相色谱分析. 3 版. 北京：化学工业出版社, 2016.
3. 刘虎威. 气相色谱方法及应用. 3 版. 北京：化学工业出版社, 2023.
4. 袁黎明, 刘虎威. 色谱手性分离技术及应用. 北京：化学工业出版社, 2020.
5. J.H. Zhang, S.M. Xie, L. Chen, B.J. Wang, P.G. He, L.M. Yuan, *Anal. Chem.,* **2015**, 87, 7817-7824.
6. B. Huang, K. Li, Q.Y. Ma, T.X. Xiang, R.X. Liang, Y. N. Gong, B.J. Wang, J.H. Zhang, S.M. Xie, L.M. Yuan, *Anal. Chem.,* **2023,** 95, 13289−13296.
7. W.Q. Tang, X.N. Yi, H.X. Guan, X.W. Wang, Y. W. Gu, Y.J. Zhao, J. Fu, W. Li, Y. Cheng, S.S. Meng, M. Xu, Q.H. Zhang, L. Gu, X.Q. Kong, D.H. Liu, W. Wang, Z.Y. Gu, *J. Am. Chem. Soc.,* **2023,** 145, 26580−26591.
8. Z.H. Wang, C. Yang, T.X. Liu, H.L. Qian, X.P. Yan, *Anal. Chem.,* **2023,** 95, 8145−8149.
9. Q.Y. Song, J. Yang, K.N. Zheng, T. Zhang, C. Yuan, L.M. Yuan, X.D. Hou, *J. Am. Chem. Soc.,* **2024,** 146, 7594−7604.

国家自然科学基金（No. 22174125）资助

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于移动反应界面的聚焦电泳成套仪器设备与应用

曹成喜*、李红根、王宇兴、刘伟文、张强
上海交通大学
*E-mail: cxcao@sjtu.edu.cn

30年来，有关移动反应界面（moving reaction boundary, MRB)概念、理论、方法和应用取得了较大发展，初步形成了较系统的概念和理论体系、以及应用研究。第一、在反应界面概念和理论发展方面，前后提出了：移动沉淀界面、移动中和界面、移动络合界面、移动氧化还原界面、移动亲和界面和移动超分子界面模型和理论等。在此基础上，建立了移动沉淀界面和移动络合界面的数学模型、以及相关的计算机模拟软件等。

第二、基于MRB的IEF物理模型与理论。基于MRB概念和理论，探索了等点聚焦电泳（IEF）与MRB的关系，揭示了IEF是基于MRB的电驱动分离分析技术，解释IEF一系列基础科学问题，包括：IEF动力学、电控聚焦现象、IEF准稳定性、pH梯度漂移、pH梯度水平化现象、Hjerten's mobilization机理、IPG技术稳定性机理、及电迁移电流扩散电流等。

第三、基于以上研究，课题组建立了基于MRB的IEF技术体系，包括：合成了IEF和2DE所需的10种以上关键材料carrier ampholytes，制备了40种以上的IEF核心分离，探索出稳定、高分辨的IEF实验方法，研制了拥有自主知识产权的成套IEF和2DE仪器设备系统。

第四、在以上基础上，课题组研制了：1、自识别等电聚焦电泳技术设备，2、微阵列聚焦电泳技术设备，3、制备性自由流电泳成套技术设备等。在此基础上开发了基于糖尿病诊断新技术、遗传性Hb病诊断新技术、微量制备性凝胶电泳成套技术设备。



图 1. 等电聚焦电泳仪（左上），微阵列聚焦电泳仪（右上）、制备性自由流电泳技术设备（下）。

关键字 等电聚焦电泳，微流控芯片，自由流电泳，移动反应界面，糖尿病，地中海贫血。

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

共价有机骨架毛细管气相色谱固定相

严秀平*、钱海龙、马甜甜、邓文超
江南大学食品学院
通讯联系人: E-mail：xpyan@jiangnan.edu.cn

共价有机骨架（Covalent-Organic Frameworks, COFs）是一类由C、H、B、N、O等轻质元素通过共价键连接形成的新型多功能多孔材料，具有密度低、比表面积大、热稳定性和化学稳定性高、结构单元多元化、易功能化等优点。COFs独特的结构特征和优异的性能使其在色谱分析中显示出良好的应用潜力。本报告将介绍本团队在COFs应用于气相色谱固定相的研究进展[1-8]。

关键字 气相色谱，固定相，共价有机骨架

参考文献：(

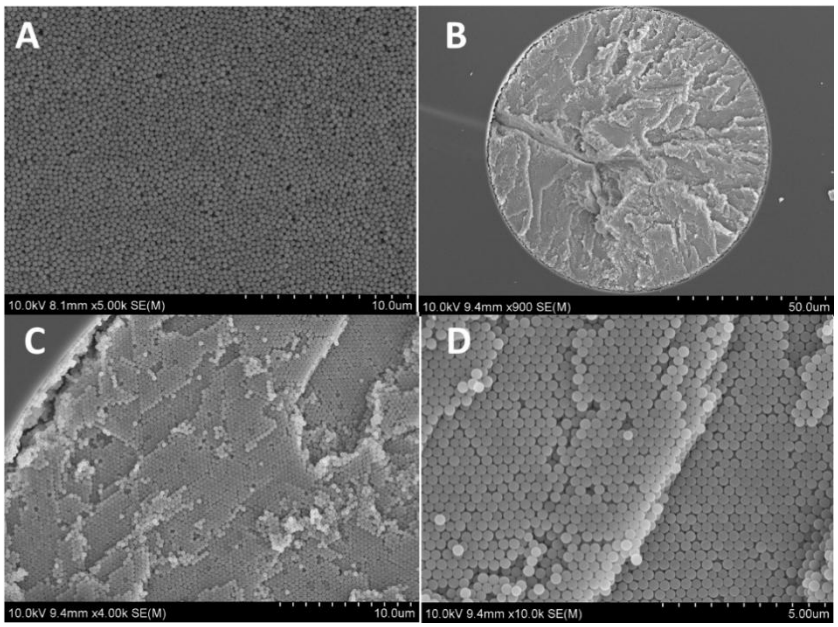
1. C.-X. Yang, C. Liu, Y.-M. Cao, X.-P. Yan, *Chem. Commun.* **2015**, 51, 12254-12257.
2. H.-L. Qian, C.-X. Yang, X.-P. Yan, *Nat. Commun.* **2016**, 7, 12104.
3. T.-T. Ma, C. Yang, H.-L. Qian, X.-P. Yan, *J. Chromatogr. A* **2022**, 1673, 463085.
4. T.-T. Ma, C. Yang, H.-L. P. Ma, T. Liu, Qian, X.-P. Yan, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2023**, 15, 32926-32934.
5. W.-C. Deng, H.-L. Qian, C. Yang, S.-T. Xu, X.-.P. Yan, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2023**, 15, 54977−54985.
6. T.-T. Ma, W.-C. Deng, H.-L. Qian, S. Xu, C. Yang, X.-.P. Yan, *ACS Mater. Lett.* **2024**, 6, 1616−1622.
7. Z.-H. Wang, C. Yang, H. -L. Qian, X.-P. Yan, *Anal. Chem.* **2023**, 95, 8145
8. W.-C. Deng, H.-L. Qian, C. Yang, S.-T. Xu, X.-.P. Yan, *Talanta* **2024**, https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.127012

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于毛细管电泳技术之上的六种电动分离模式

柳青[1]，Soumia Chedda[1]，王彦[1]，阎超[1,2*]
[1]上海交通大学药学院
[2]上海通微分析技术有限公司
Email: chaoyan@sjtu.edu.cn

我们将分析和讨论六种基于毛细管电泳分离技术之上的电动微流分离技术，包括毛细管区带电泳(Capillary Zone Electrophoresis, CZE)，毛细管凝胶电泳(Capillary Gel Electrophoresis, CGE)，胶束电动毛细管色谱（Micellar ElectroKinetic Chromatography, MEKC），毛细管等电聚焦(Capillary IsoElectric Focus, cIEF)，毛细管等速电泳(Capillary Isotacho-Phoresis, CITP)以及毛细管电色谱(Capillary ElectroChromatography, CEC)。并对这些技术的基本原理及其发展状况和应用场景分别进行探索。同时，将着重汇报我们在毛细管电色谱和定量毛细管电泳技术的研究和开发进展，尤其是侧重汇报亚微米颗粒固定相在毛细管电色谱中的分离柱效的重大突破以及未来的应用前景。



图一：亚微米填料的扫描电镜图

A: SEM of 320 nm ODS on a plate，

B-D： SEM of cross section of a packed 100 μm i.d. capillary,

放大倍数：
B, X900;
C, X4000;
D, X10000.

参考文献：
1. Q. Liu, C. Yan, Journal of Chromatography A, 1587 (2019)
2. Soumia Cheddah, Z. Xia, Y. Wang and C. Yan, Langmuir, 36, 5655, 2023.

关键字 亚微米颗粒填料

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

SiO_2@SiO_2 核壳微球的放大制备与应用

唐长伟，杨子龙，李常乐，刘家玮，白 泉*
西北大学化学与材料科学学院，陕西省现代分离科学重点实验室，西安 710127
通讯联系人: E-mail：baiquan@nwu.edu.cn

复杂样品的高效快速分离分析是分离科学家所面临的挑战。近年来，核壳型二氧化硅色谱填料因其特殊的结构，具有高效、快速和低背压的特点被广泛用于复杂样品的快速分离分析。目前用于商品化的二氧化硅核壳色谱填料主要通过层层自组装制备。但是该方法制备过程繁琐，耗时费力，产率低，成本高[1]。虽然二氧化硅核壳填料亦可利用模板法、双相法和聚合诱导胶体凝集法（PICA）等方法制备[2,3]，但存在制备条件苛刻，壳层包覆不完全、破损、壳层厚度不均匀、批次间重现性差等问题。针对上述问题，本研究采用 PICA 法对二氧化硅核壳微球进行放大制备，深入研究了 PICA 法制备 SiO_2 核壳微球过程中二氧化硅壳层的形成机理。发现硅核的表面状态和 Zeta 电位是影响壳层生长的主要因素。脲基改性可以降低硅核表面 Zeta 电势。当表面 Zeta 电位在-20.1 mV ~ -4.8 mV 范围内时，有利于脲醛树脂(UF)与二氧化硅纳米颗粒形成的凝聚体在二氧化硅芯表面沉积形成 SiO2 壳层。通过控制硅核的界面状态和表面 Zeta 电位，可以克服制备 SiO2 核壳重复性差的问题。通过改变反应时间和硅溶胶的粒径，调控二氧化硅核壳微球的和壳层厚度和孔径，并对 pH、反应温度、水含量、反应时间等实验参数进行了优化。在最佳条件下，实现了对二氧化硅核壳微球半制备放大。在 10L 反应釜中一次可制备 2.5 mm 无孔 SiO_2 微球 300g。在 5L 反应釜中，利用 PICA 法制备了不同粒径、孔径和壳层厚度的二氧化硅核壳微球，产率可达到 50g。经 C18 改性后，通过对不同极性的小分子溶质、蛋白质和蛋白质酶解液分离，结果表明所制备的 C18 核壳反相柱具有高效的分离能力和较低的柱压，可用于小分子和蛋白质的快速分离纯化。该研究对二氧化硅核壳填料的制备与发展具有很好的推动作用。

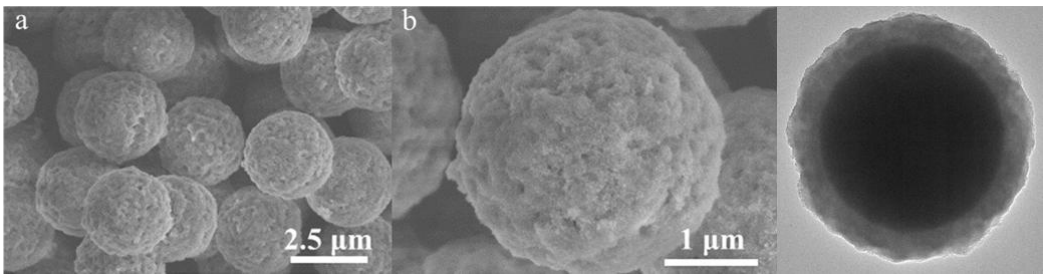


图 1 PICA 法制备的 SiO_2@SiO_2 核壳微球的 SEM 和 TEM 图

参考文献：

1. J. Kirkland, F.A. Truszkowski, C.H. Dilks, G.S. Engel, *J. Chromatogr. A*, **2000**, 890 (1), 3-13
2. W. Chen, K. Jiang, A. Mack, B. Sachok, X. Zhu, W.E. Barber, X. Wang, *J. Chromatogr. A*, **2015**, 1414, 147-157
3. X. Yang, G. Wan, S. Ma, H. Xia, J. Wang, J. Liu, Y. Liu, G. Chen, Q. Bai, *Talanta*, **2020**, 207, 120310

关键字 核壳微球，聚合诱导胶体凝集法，Zeta 电位，快速分离， UPLC

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

代谢组学的现状和挑战

许国旺*
中国科学院大连化学物理研究所 大连 116023
E-mail: xugw@dicp.ac.cn

代谢组学是一门研究分子量小于 1500 的内源性代谢物的科学，在生命健康、药物研发、环境科学和农业等不同领域发挥着越来越重要的作用。从图 1 可以看到，越来越多的科技工作者和领域专家正在研发和使用代谢组学。而且，代谢组学已越来越多地用于解决实际问题，显示出代谢组学的发展潜力。

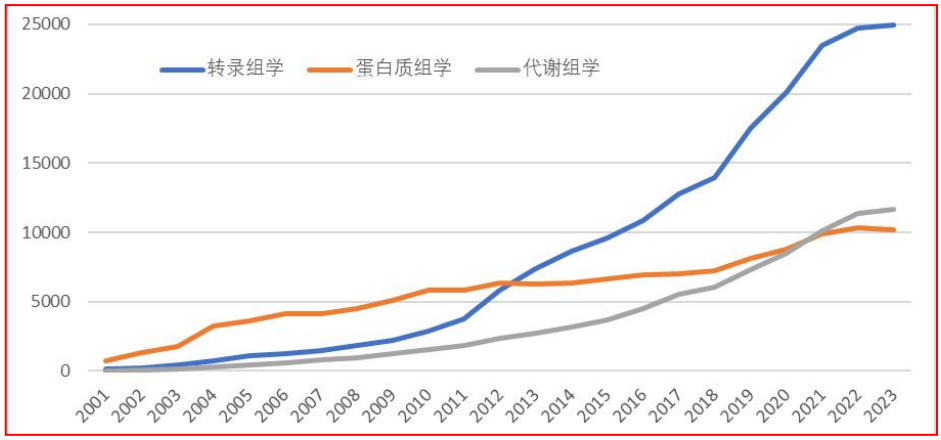


图 1 三种常见生命组学在 WOS 上发表文章数的检索

本报告将结合自己实验室的工作，试图总结代谢组分析的现状，着重在分析覆盖度、代谢组定性、代谢组定量等方面的进展，指出分析方法存在的问题及可能的解决办法。并以临床医学应用研究为例，进一步总结代谢组学在疾病分型、标志物发现、代谢重编程、代谢物功能阐明等方面的进展和挑战。除涉及大规模临床样品研究外，还将报告单细胞代谢组学研究的前景。

关键字 代谢组学，单细胞分析，标志物发现

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于衍生化技术的色谱-质谱分析方法

冯钰锜*
武汉纺织大学
通讯联系人: E-mail：yqfeng@whu.edu.cn

液相色谱-质谱（LC-MS）结合化学衍生化技术在复杂生物样品的定量与定性分析中，通过提升分析物的离子化效率、分离度和检测灵敏度展现了良好的应用潜力。报告人将介绍其课题组在该领域的几个代表性研究工作：

1. pH 敏感型化学选择性探针的设计、合成及应用：设计了一种 pH 敏感探针，通过硼酸酯反应实现快速代谢物标记，标记时间仅需 10 分钟。这种方法显著提高了样品利用率和分析灵敏度，为复杂样品的高灵敏度分析提供了新思路。

2. 点击化学-质谱探针技术示踪大鼠体内 DEHP 的代谢足迹：课题组发展了点击化学-质谱探针技术（CC-MS）来示踪大鼠体内邻苯二甲酸二（2-乙基己基）酯（DEHP）的代谢足迹。使用合成的炔基修饰 DEHP 类似物和新型质谱探针，成功鉴定出 247 种潜在 DEHP 代谢物，为理解 DEHP 诱导的毒性机制提供了新视角。

3.胆汁酸的深度分析及新结合物的发现：建立了胆汁酸分析的两套策略，即衍生化辅助的双电压扫描质谱策略和基于 MRM(±)的氨基酸结合型胆汁酸（AA-BAs）的分析策略。这些策略提高了胆汁酸的结构稳定性和区分度，首次发现了肠道菌合成的新型氨基酸结合胆汁酸，拓展了对胆汁酸代谢机制的认识。

4. 基于色谱保留规律的同分异构体代谢物鉴定研究：课题组在同分异构体代谢物鉴定中创造了基于色谱保留规律的 FAHFAs 和 OH-FAs 筛查策略，通过色谱定量结构保留鉴定模型，实现了无标准品情况下的 FAHFA 新分子结构鉴定，为其生物合成和功能研究提供了基础数据。

关键字 色谱，质谱，衍生化

参考文献：

1. X Wang, P Bai, Z Li, QF Zhu, Z Wei, YQ Feng. ***Angewandte Chemie International Edition*** 2022, 61, e202208138.

2. YZ Wang, YY Chen, XZ Wu, PR Bai, N An, XL Liu, QF Zhu, YQ Feng. ***Analytical Chemistry*** 2023, 95, 11550-11557.

3. QF Zhu, JW Yan, TY Zhang; HM Xiao, YQ Feng. ***Analytical Chemistry*** 2018, 90, 10056-10063.

4. YN Hu, JT Zhan, PR Bai, N An, JJ Tan, YZ Wang, QF Zhu, YQ Feng. ***Journal of Hazardous Materials*** 2023, 452, 131190

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

单细胞多维度质谱分析

秦少杰、张翼、张雪、白玉*

北京分子科学国家实验室，北京大学化学与分子工程学院，北京，100871
E-mail：yu.bai@pku.edu.cn

单细胞异质性普遍存在，与肿瘤、衰老、免疫和发育等诸多关键生物学过程密切相关。单细胞多组学分析为分子网络和表型差异提供全面的视角 1。然而，代谢物和蛋白质的巨大性质差异、宽动态分布范围，缺乏扩增能力等特点使得单细胞蛋白质组和代谢组多组学分析面临巨大挑战。常压离子化质谱装置灵活、可设计性强，实现复杂生物样本的原位、实时、高通量分析，在微量样本生物标志物分析领域发挥重要作用。

我们通过设计新型常压离子化进样技术，发展超高灵敏的质谱分析策略，在单细胞多维度生物标志物分析方面开展系列工作。利用新型电喷雾加速的基底电喷雾离子化装置结合罗丹明类高灵敏质谱标签，提出多重信号放大策略，构建了高灵敏常压质谱免疫分析平台，获得了 zmol 的凝血酶检出限。与阵列式芯片结合，实现微升级血清中 CA125 肿瘤标志物的快速筛查；利用基于迪恩流的微流控单细胞排列技术，结合 nanoESI-Orbitrap MS，搭建了多维度有机质谱流式细胞分析平台，实现了单细胞中蛋白质和代谢物等多维度分子信息的高通量同时获取。基于该多重信息可提高肿瘤细胞分型的特异性和灵敏度；为肿瘤耐药相关机制研究提供重要的分析技术和分子基础。发展在线单细胞超声裂解进样装置，可实现单细胞中约 600 种代谢物的鉴定，其中 3-羟基丁酸（BHB）异构体含量差异分布可用于 MCF-7 细胞三种亚型的精细区分。单细胞测序结果揭示了 BHB 下游靶标蛋白质的差异表达，表明了肿瘤细胞在抗氧化能力方面可能存在的异质性。为全面深入的单细胞多组学分析及其肿瘤异质性研究提供有力的工具和技术支撑 2-5。

关键字 单细胞，多维度，蛋白质，代谢物

参考文献

1. M. Stoeckius, C. Hafemeister, W. Stephenson, B. Houck-Loomis, P.K. Chattopadhyay, H. Swerdlow, R. Satija, P. Smibert, *Nat. Methods,* **2017**, 14, 865.
2. S.T. Xu, W. Ma, Y. Bai*, H.W. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 72.
3. S.T. Xu, M.X. Liu, Y. Bai*, H.W. Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 1806.
4. S.J. Qin, D.Y. Miao, X. Zhang, Y. Zhang, Y. Bai*, *TrAC Trends in Anal. Chem.*, **2023**, 117086.
5. S.J. Qin, Y. Zhang, M.Y. Shi, D.Y. Miao, J.S. Lu, L. Wen and Y. Bai*, *Nat. Commun.* **2024**, 15, 4387.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

微流控体外诊断新技术与新仪器研究

刘笔锋*
华中科技大学

E-mail：bfliu@hust.edu.cn

体外诊断是当前医学检测领域的最重要方向之一，近年来发展迅猛，新技术新仪器不断涌现，市场规模不断扩大，其中，基于微流控芯片的体外诊断新技术正成为该领域的热点。微流控技术具有全集成、低消耗与自动化等优势，尤其适合即时诊断以及资源受限场景下的生物分子分析。本文将重点介绍近年来本研究组在发展面向临床应用的微流控芯片体外诊断新技术与新仪器，主要包括：1）微流控芯片分子诊断；2）微流控芯片免疫分析；3）微流控芯片的类器官与药敏检测。上述研究表明，微流控芯片对于临床诊断的发展具有核心推动作用。

关键字 微流控芯片；体外诊断；新仪器

参考文献：

1. Y Xiao, M Zhou, C Liu, S Gao, C Wa, S Li, C Dai, W Du, X Feng, Y Li, P Chen, B-F Liu, *Biosen. Bioelectron.*, **2024**, 255, 116240.
2. C Qian, C Wan, S Li, Y Xiao, H Yuan, S Gao, L Wu, M Zhou, X Feng, Y Li, P Chen, B-F Liu, *Anal. Chem.* **2023**, 95, 12521-12531.
3. S Li, C Wan, B Wang, D Chen, W Zeng, X Hong, L Li, Z Pang, W Du, X Feng, Y Li, P Chen, B-F Liu, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 6145-6155.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于膜蛋白靶向多肽的细胞外囊泡高效亲和分离分析新方法

徐坤、高涵、黄嫣嫣*、赵睿

中国科学院化学研究所，中国科学院活体分析化学重点实验室

通讯联系人: E-mail：yyhuang@iccas.ac.cn

膜蛋白作为生物界面上的关键活性分子，在细胞-细胞、细胞-环境物质和能量交换中发挥重要作用，是疾病检测和治疗的主要分子靶标。针对细胞通讯关键膜蛋白，设计、筛选新型亲和识别分子，发展靶向分离新材料和探测新方法，可望为癌症等疾病的检测与治疗提供新的思路和手段。

针对四次跨膜蛋白 CD81 在细胞通讯中的关键作用但缺乏亲和识别探针的问题，利用正-反义肽相互作用原理及遗传密码子简并性，开展了新型反义肽的设计、合成和亲和筛选。发展了模拟生理环境的均相亲和筛选新体系，具有快速和单残基分辨能力的特点，获得了与 CD81 蛋白胞外小环及邻近结构域形成多位点空间互补的优选反义肽。建立了多肽识别导向的活细胞中 CD81 蛋白高选择性检测和分析新方法，实现了不同细胞中 CD81 蛋白表达水平的鉴定和亚细胞分布的定位，为复杂体系中四次跨膜蛋白的特异性识别与靶向探测提供了新工具。基于四次跨膜蛋白 CD81 在细胞外囊泡表面高度富集的特征，开展了多肽识别介导的细胞外囊泡亲和分离新材料和新方法研究。从多价协同识别原理出发，设计构筑了以 CD81 靶向多肽为功能识别单元而空间构型、分子取向多样的亲和分离界面。建立了不同侵袭性乳腺癌细胞分泌囊泡的高效、高选择性分离富集新方法，具有高回收率、高纯度的特点。进一步将所构建的多肽功能化亲和微球用于不同临床分期肿瘤患者尿液样本中细胞外囊泡捕获，实现了囊泡中多种肿瘤标志蛋白的分析检测，为基于无创液体活检的腺癌分型和转移预测提供新工具与新方法。

关键字 膜蛋白、靶向多肽、亲和分离、复杂样品、细胞外囊泡

参考文献：

1. K. Xu, H. Gao, Y. Li, Y. Jin, R. Zhao, Y. Huang, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202400129.
2. Y. Li, H. Gao, Y. Jin, R. Zhao, Y. Huang, Anal. Bioanal. Chem., 2023, 15, 4079-4092.
3. Y. Zhu, Y. Huang, T.-H. Yan, J. Li, Y. Li, H. F. Drake, H. Zhong, Y. Jin, R. Zhao, H.-C. Zhou, Adv. Healthcare Mater., 2022, 11, 2200004.

感谢国家自然科学基金项目的资助。

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于生物特异性识别的功能化微柱与CE/CEC-MS在线联用分析

杨丽*、王安平，杨巾栏
东北师范大学

通讯联系人: E-mail： yangl330@nenu.edu.cn

作为一种高效分析方法，CE/CEC-MS 兼具了毛细管电泳/电色谱的高效分离和 MS 的高灵敏检测优势，是复杂样品分离分析、生物检测和免疫分析等的有力工具，在食品、环境、生物、医药等领域发挥着重要作用 1。然而，由于受 CE/CEC 微小进样量及与 MS 检测兼容性等因素的影响，CE/CEC-MS 分析往往需要离线对样品进行复杂的预处理及富集、放大等过程，极大地限制了其对复杂生物样品中痕量物质分析检测的应用。如何在保证分离效率和检测灵敏度的同时，简化分析操作，提升分析通量，是当前 CE/CEC-MS 分析的一个备受关注的课题。为此，我们发展了基于生物特异性识别的功能化微柱与 CE/CEC-MS 在线联用分析技术，通过以微纳材料修饰的毛细管微柱为载体，采用共价键和或物理吸附等手段，引入适配体、RNA 等生物识别分子，在毛细管进样端构建新型功能化毛细管微柱，目标物经 CE/CEC 分离后，在线耦联 MS 检测，从而一次进样即可实现特异性识别、富集放大、CE 分离和 MS 检测 2。该技术成功应用于生物样品中 microRNA、生物酶、蛋白质及多肽等痕量生物标记物的准确灵敏检测，为进一步拓展 CE/CEC 分离及 MS 检测技术在分析化学及其相关领域的应用提供可借鉴的思路，在诸如痕量物质检测、生物分析、医药研发等领域有着重要的研究意义和潜在应用前景。

上述研究工作受到了国家自然科学基金委、吉林省科技厅等项目资助。

关键字 毛细管电泳，毛细管电色谱，质谱，功能化微柱，生物特异性识别

参考文献：

1. Y. Li, S.Y. Miao, J.H. Tan, Q. Zhang, D.D.Y. Chen, Anal. Chem., 2024, 7799-7816.
2. A.P. Wang, K.X. Liu, M.M. Tian, L. Yang, Anal. Chem. 2022, 94: 9252.; A.P. Wang, J.N. Liu, L. Yang, Anal. Chim. Acta 2023, 1239: 340750; A.P. Wang, Z.H. Qi, M.M. Tian, J.L. Yang, L. Yang, Talanta. 2024, 279:126631.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

尺寸排阻-化学亲和双机制分离材料及其对生物样品的高选择性富集方法

卫引茂*
（西北大学化学与材料科学学院，西安 710069）
E-mail:ymwei@nwu.edu.cn

生物样品分析对于理解生命过程以及发现疾病标志物具有重要意义。基于固相萃取的样品前处理方法是生物样品分析的必要步骤，其中，吸附剂是痕量物质分离与富集研究关注的重点。但是，采用常规方法制备的吸附剂孔内外表面均分布有吸附位点，外表面的吸附位点降低了吸附剂的抗蛋白吸附性能，使得吸附剂不能直接用于生物样品的处理。为减低吸附剂孔外表面引起的蛋白干扰，我们课题组采用孔内外差异化修饰方法，制备了外表面为亲水层、内表面为亲和吸附层的限进型吸附剂，提出了尺寸排阻-化学亲和双机制富集生物样品中目标物的分析方法。

制备了 4 种抗蛋白吸附的特异性吸附剂：（1）异氰酸酯硅烷化试剂修饰的纳米粒子与阿仑膦酸钠反应，再用脲酶水解除去外表面的配体，最后用葡萄糖酸内脂对外表面进行亲水化，制备了内表面为 Ti 亲和、外表面亲水性的介孔吸附剂，研究了吸附剂的抗蛋白吸附性能以及研究了吸附剂在复杂生物样品中富集磷酸肽的性能。（2）活性介孔硅胶 MOF 与氨基苯硼酸反应，再用脲酶水解除去外表面的配体，最后对外表面进行亲水化，制备了限进介孔硅胶吸附剂。此外，对 3-D COF 外表面边界的氨基，用亲水性葡萄糖酸内酯封端，制备了限进 3-DCOF 附剂。研究了吸附剂的抗蛋白吸附性能以及在血液分析中的应用。（3）UiO-66(Zr/Fe)@Fe3O4 用氨基苯硼酸修饰，再用 aminoacylase 除去 MOF 表面的配体，制备了内表面硼亲和与 Zr 协同吸附的吸附剂，该吸附剂具有较强的抗蛋白吸附性能，可直接用于血清中核苷酸的分析中。（4）借鉴限进吸附剂概念，首次提出尺寸排阻-化学亲和双机制提取外泌体新原理，并开发了相应的超大孔吸附剂，该吸附剂可排除血液中的细胞碎片、大颗粒外囊泡、脂质体和蛋白，高选择性地富集血液中的外泌体，克服了其它单机制化学吸附法的缺陷。研究表明，基于尺寸排阻-化学亲和双机制的固相萃取材料可显著提高生物样品的富集选择性。

关键字 固相萃取，样品前处理，吸附剂

参考文献

1. Yijia He, Yirui Hao, Jiwei Shen, Chaozhan Wang, Yinmao Wei* **Anal. Chim. Acta**, 1178(2021)338849
2. Zewei Yao, Mao Li, Yao Sun, Chaozhan Wang, Yinmao Wei*. **Talanta** 265 (2023) 124867
3. Xu, Yidong; Xue Chen; Wei, Yinmao*. Food Chemistry 461 (2024) 140882.
4. Xu, Yidong; Sun, Yao; Yao, Zewei; Wei, Yinmao*. **ACS Applied Materials & Interfaces,** 15(2023)30643−30652
5. Wenzhuo Dong, Mengqian Jia, Jiwei Shen, Chaozhan Wang, Yinmao Wei*. Analytical Chemistry, under review.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

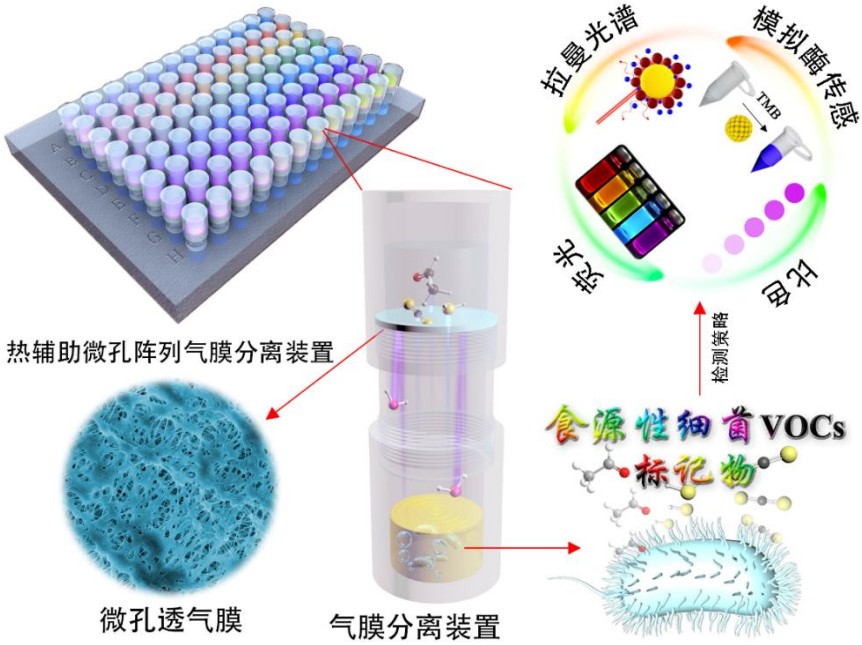
热辅助微孔阵列式气膜分离装置的构建及其于食源性细菌挥发性标记物的快速检测应用研究

陈正毅*、余来水、谢俊、侯霄雯

桂林医学院，药学院，广西药物分子发现与成药性优化重点实验室

通讯联系人: E-mail：chenzhengyi@glmc.edu.cn

通过检测细菌代谢过程中释放的挥发性有机物(VOCs)来实现其快速准确定性定量是目前兴起的一种快速检测食源性细菌技术，而样品的高效前处理以及检测的简便化是 VOCs 快速检测过程中最主要的技术挑战之一。针对此问题，本课题组拟通过发展气膜分离技术构建热辅助微孔阵列式气膜分离装置；采用系统的程序升温方式实现细菌扩增过程并加快食源性细菌 VOCs 标记物的挥发速度，提高气膜分离效率进而实现高效的样品基质与目标物分离前处理目的；结合化学衍生化技术将分离所得 VOCs 直接原位转化为可快速便携检测的待测物，为构建高检测灵敏度和高选择性检测方法提供必要条件；最后结合所建立的快速检测方法，间接通过细菌 VOCs 标记物的快速分离分析来实现食源性细菌的快速、简便、精确检测分析；推动食品安全微生物分析样品前处理技术的发展及应用，为食品安全分析提供新的技术支持。



热辅助微孔阵列式气膜分离装置的组成及其应用示意图

关键字 样品处理；食源性细菌；食品安全；复杂样品；挥发性有机物；微型化装置

参考文献：

1. L. Yu, L. Huang and Z. Wang, Y. Xiong, G. Li, Z. Chen, *Sens. Actuators B*, **2024**, 135791.
2. Z. Chen, L. Yu, Z. Zhang, L. Su, Y. Xiong, *ACS Food Sci. Technol.*, **2024**, 4, 373-381.
3. H. Lai, Z. Chen and G. Li, *Anal. Chem.*, **2022**, 16275-16281.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

单晶共价有机框架色谱固定相制备及其色谱行为研究

吴帆，林子俺*

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

E-mail：zianlin@fzu.edu.cn

色谱技术作为目前分离复杂组份最有效的手段之一，被广泛应用于环境、食品和医药等领域。色谱柱的分离纯化效果及分析检测性能很大程度上取决于色谱填料。尽管以硅胶和聚合物为基质的固定相已被广泛应用于色谱分离，但硅胶基质较窄的 pH 使用范围和聚合物基质易溶胀特点严重阻碍了两者的深入应用。因此，发展兼具高化学稳定性和高分离性能的色谱固定相始终是色谱领域的研究热点与难点。共价有机框架材料(Covalent Organic Frameworks, COFs)是一种新型的，有别于金属有机框架的多孔有机材料。因其具有规整的孔道结构、高比表面积以及良好的化学和热稳定性等优点，近年来在催化、光电器件和分析化学等领域获得广泛关注。然而，目前报道的 COFs 材料多为无定形的小尺寸形貌，难以直接作为色谱固定相使用，这成为了 COFs 在色谱固定相应用的难点，因此合成形貌规则均匀、尺寸适中的 COFs 材料具有重要意义。相比于常规的多晶 COFs，单晶 COFs 的内部构成单元在三维空间上呈现规律性、周期性地排列，因其所具有长程有序性的晶体结构、完整而规则的晶体形貌和规整均匀的孔道等优势，使得单晶 COFs 在色谱固定相中显示出良好的应用潜力。

近年来，课题组围绕色谱分离的核心问题，系统开展了单晶共价有机框架的结构设计、功能调控及其在色谱固定相方面的应用研究，具体包括：（1）聚焦纳微米尺度 COFs，可控合成了一系列粒径均匀的单分散 COFs，该合成方法具有反应条件温和可控、粒径孔径及形貌精准可控等优点[1,2]；（2）将一系列不同形貌的单晶 COFs 直接作为色谱固定相应用于液相色谱研究，实现了同分异构体和疏水性化合物的高效分离，并且成功应用于环境污染物和复杂生物样品的分离[3,4]。

关键字 单晶共价有机框架；色谱固定相；同分异构体；分离

参考文献：

1. Ma W., Zheng Q., He Y., Guo W., Lin Z*., Zhang L*. *J. Am. Chem. Soc*., **2019**, 141, 18271-18277.
2. Zheng Q., Liu J, Wu Y, Ji J, Lin Z.* *Anal. Chem*., **2022**, 94, 18067-18073.
3. Zheng, Q., Huang, J., He, Y., Huang, H., Ji, Y., Zhang, Y., Lin, Z*. *Appl. Mater. Interfaces*., **2022**, 14(7), 9754-9762.
4. Zhang Q., Wu F., Liu J., Su H., Zhong Y., Lin Z*. *Chin. Chem. Lett*., **2024**, accepted.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

新型硝基微孔有机网络涂覆固相微萃取纤维用于高效萃取检测取代对苯二胺及其醌类衍生物

李鹏飞[1,2]，杨岚森[1]，刘海燕[1]，韩晔红[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

通讯联系人: E-mail：yanhy@hbu.edu.cn.

取代对苯二胺及其醌类衍生物（PPDs/PPD-Qs）是一类新兴有机污染物，具有潜在的神经毒性，生殖毒性和遗传毒性。呼吸摄入和皮肤接触是 PPD/PPD-Qs 的主要暴露途径，吸入后主要沉积于上呼吸道，对人体健康构成严重威胁，已经引起公众对其潜在健康影响的担忧。本研究合成了具有多吸附位点和快传质速率的新型硝基微孔有机网络（NO2-MONs），吸附性实验和模型拟合数据证明了多种相互作用（孔效应、氢键、π-π和疏水相互作用）。NO2-MONs 作为固相微萃取纤维涂层，采用响应面法优化萃取参数，实现了痕量 PPDs/PPD-Qs 的高效萃取。结合气相色谱串联质谱法（GC-MS/MS）建立了空气颗粒物和咽漱液中痕量 PPDs/PPD-Qs 的高灵敏检测方法，定量限低至 0.38–2.6 pg mL−1，方法回收率为 75.7%–117.5% (RSD ≤ 9.8%)。该方法解决了现有半定量检测方法准确性差的问题，为研究 PPDs/PPD-Qs 毒理作用的浓度-剂量-效应关系以及相关限量标准制定提供了技术手段。

关键字 气相色谱串联质谱法，固相微萃取，微孔有机网络，取代对苯二胺，有机污染物

参考文献：

1. X. Chen, T. He, X. Yang, Y. Gan, X. Qing, J. Wang, Y. Huang, *J. Hazard. Mater.*, **2023**, 452, 131245.
2. J. Wu, G. Cao, F. Zhang, Z. Cai, *Sci. Total Environ.*, **2023**, 866, 161373.
3. Y.J. Zhang, T.T. Xu, D.M. Ye, Z.Z. Lin, F. Wang, Y. Guo, *Environ. Sci. Technol. Lett.*, **2022**, 9, 420-425.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

磁性多孔骨架材料的制备及其食品分析检测应用

王鲁良，杨晓帅，赵婕，李子玉，吕胜男，王鲁良*

鲁东大学食品工程学院

通讯联系人: E-mail：luliangking@126.com

民以食为天，食以安为先。农药残留、真菌毒素污染以及新兴污染物的出现严重威胁食品安全，如阿维菌素类杀虫杀菌剂、苯并咪唑类杀菌剂、真菌毒素和酚类内分泌干扰物等。由于食品样品基质复杂且污染物含量低，发展高富集效率和高选择性的样品前处理技术尤为关键。磁固相萃取技术，具有易操作、易分离、生物相容性好等优点，极其适用于复杂的食品样品分析。多孔骨架材料如金属有机骨架材料和、共价有机骨架材料和氢键有机骨架材料等，因其结构多样、性质多样、比表面积大、孔道可控、化学和热稳定性好等特点，在污染物吸附与分离、气体储存、催化、传感等受到广泛的关注。本文利用简单自组装方法制备了一系列磁性多孔骨架材料，并成功用于食品中阿维菌素、苯并咪唑等农药残留、赭曲霉毒素等真菌毒素的高效富集萃取。同时结合液相色谱，建立了上述分析物的检测分析新方法。相关研究证明共价有机骨架复合材料在食品、环境等领域具有广泛的应用潜力。

关键字 多孔骨架材料；磁固相萃取；食品分析

参考文献：

1. Wang L-L, et al. Self-assembled Fe_3O_4–COOH @ hydrogen-bonded organic framework composites for magnetic solid-phase extraction of tetracycline in food samples coupled with HPLC determination, *Talanta* **2024**, 280: 126746
2. Wang L-L, et al. Facile preparation of covalent-organic framework composites for magnetic solid-phase extraction of naphthaleneacetic acid in food prior to HPLC-UV analysis, *Journal of Chromatography A* **2024**, 1731: 465180
3. Wang L-L, et al. Magnetic covalent organic frameworks combined with HPLC for determination of alkylphenols，*Talanta Open* **2024**, 9: 100320
4. Wang L-L, et al. Determination of abamectin in food based on magnetic covalent organic frameworks and HPLC-FLD，*Journal of Food Composition and Analysis* **2024**,130: 106199
5. Wang L-L, et al. Magnetic covalent organic frameworks for extraction and determination of endocrine-disrupting chemicals in beverage and water samples，*Journal of the Science of Food and Agriculture* **2024**, 104: 257-265
6. Wang L-L, et al. Synthesis of magnetic covalent organic framework composites for effective extraction of benzimidazole fungicides from food samples，*Microchemical Journal* **2023**, 195: 109419

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

多孔分子笼材料用于高效液相色谱手性分离

章俊辉*、梁瑞雪、王莹、俞力琴、谢生明、袁黎明

云南师范大学化学化工学院
通讯联系人: E-mail：zjh19861202@126.com

多孔材料具有比表面积大、孔结构有序、孔径大小可调等优点，成为近些年来色谱分离领域的研究热点，并展现出良好的色谱分离性能。多孔分子笼材料是由形状稳固、具有独立分子内部空腔的三维笼状分子通过弱的分子间作用力组装形成的新型多孔分子材料。根据合成笼状分子时模块的连接方式不同，多孔分子笼主要有两大类：（1）多孔有机笼（POCs），也叫共价有机笼，是由有机模块通过共价键作用形成具有笼状结构和分子内部空腔的纯有机多孔分子材料，合成模块是通过共价键作用连接形成笼状分子；（2）金属-有机笼（MOCs），也叫配位笼，是由金属离子和相应的有机构筑模块（有机配体）通过配位键导向自组装形成的具有笼状结构和分子内部空腔的新型金属-有机超分子多孔材料，合成模块是通过配位键作用连接形成笼状分子。与无限延伸的框架或网络状多孔材料（MOFs 和 COFs）相比，多孔分子笼材料具有良好的溶解性，可溶于有机溶剂形成均相溶液，在均相溶液中更易于进行化学修饰、制备复合材料，也更方便通过涂敷、化学键合等方式制备高效液相色谱固定相。另外，多孔分子笼材料的独立分子内部空腔也是主-客体识别的良好场所。本研究将一些手性多孔分子笼材料作为手性选择剂，通过化学键合于球形硅胶表面制备高效液相色谱手性固定相，并用于手性化合物的拆分研究。研究结果表明，手性多孔分子笼材料具有优秀的手性拆分性能，制备的高效液相色谱柱可拆分许多不同种类的手性化合物，具有良好的研究意义和应用前景。

关键字 高效液相色谱；手性分离；手性固定相；多孔分子笼

参考文献：

1. H.L. Qian, C.X. Yang, X.P. Yan, *Nat. Commun.*, **2016**, 7, 12104.
2. M. Xu, P.Y. Cai, S.S. Meng, Y.H. Yang, D.S. Zheng, Q.H. Zhang, L. Gu, H.C. Zhou, Z.Y. Gu, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61, e202207786.
3. M. Xie, K. Quan, H. Li, B. Liu, J. Chen, Y. Yu, J. Wang, H. Qiu, *Chem. Commun.*, **2023**, 59, 314.
4. B. Ji, G. Yi, K. Zhang, Y. Zhang, Y. Gui, D. Gao, J. Zeng, L. Wang, Z. Xia, Q. Fu, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 15655.
5. Y. Chen, S. Huang, L. Xia, Y. Hu, G. Li, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 1380.
6. J. Xu, G. Feng, D. Ao, X. Li, M. Li, S. Lei, Y. Wang, *Adv. Mater.*, **2024**, 36, 2406256.
7. Y. Wang, J.K. Chen, L.X. Xiong, B.J. Wang, S.M. Xie, J.H. Zhang, L.M. Yuan, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 4961.
8. B. Huang, K. Li, Q.Y. Ma, T.X. Xiang, R.X. Liang, Y.N. Gong, B.J. Wang, J.H. Zhang, S.M. Xie, L.M. Yuan, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 13289.
9. J.H. Zhang, S.M. Xie, L. Chen, B.J. Wang, P.G. He, L.M. Yuan, *Anal. Chem.*, **2015**, 87, 7817.
10. S.M. Xie, N. Fu, L. Li, B.Y. Yuan, J.H. Zhang, Y.X. Li, L.M. Yuan, *Anal. Chem.*, **2018**, 90,

9182.

11. R.X. Liang, Y.P. Zhang, J.H. Zhang, Y.N. Gong, B. Huang, B.J. Wang, S.M. Xie, L.M. Yuan, *J. Chromatogr. A*, **2023**, 1711, 464444.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

多孔有机材料在中药中有害物分离富集中的应用

陈彦龙*、张行远、廖琼峰
广州中医药大学

E-mail：zxfxliao@gzucm.edu.cn

中药是现代药物开发的巨大宝库。中药中蕴含了许多化学结构多样、生物活性独特的天然活性药物，这些药物在疾病治疗中发挥了重要作用。然而，中药在生产、加工、运输和储藏等过程中可能受到一些持久性有机污染物的污染，导致中药的品质下降，从而对公众健康构成威胁。持久性有机污染物来源广泛、种类多样，给检测工作带来了巨大的阻碍，而且这些污染物在中药中的含量低，要求检测方法具有较高的灵敏度。共价有机框架是一类多孔有机材料，具有比表面积大、孔道可调和易功能化等特点，已经广泛用于样品前处理和色谱分离等领域。针对中药中溴化酚、全氟烷基化合物、氯化萘和双酚类物质，设计制备了多种具有多重识别位点的共价有机框架材料，使用多种分析表征技术对制备材料的结构进行了表征；通过分子模拟等技术研究了其对目标物的吸附行为和吸附机理；随后将制备的材料作为样品前处理介质，对影响样品前处理的因素进行了系统优化。在最优的条件下，结合色谱–质谱技术建立了昆布、人参、西洋参等中药中溴化酚、全氟烷基化合物等持久性有机污染物的检测方法。

关键字 多孔有机材料、中药、持久性有机污染物、样品前处理

参考文献：

1. Y Chen, X Zhang, J Ma, J Gong, W A, X Huang, P Li, Z Xie, G Li, Q Liao. *J Hazard Mater.*, **2024**, 465:133084.
2. J Gong, Y Chen, W A, X Zhang, J Ma, Z Xie, P Li, A Huang, S Zhang, Q Liao. *J Hazard Mater.*, **2024**, 472:134563.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

肝癌循环肿瘤细胞的精准捕获材料

卿光焱*、孙文静、张晓雨、常永新
中国科学院大连化学物理研究所

自美国政府实施“抗癌登月计划”以来，美国癌症死亡率从 20 世纪 90 年代每年下降 1%增至 2%，其中最重要的原因就是筛查，例如肠镜用于早期大肠癌的筛查普及，使大肠癌发病率和死亡率连续 20 余年持续下降。2022 年 2 月，拜登总统重启“癌症登月计划”，并将癌症筛查列为七项抗癌计划的其中之一。全球癌症统计数据显示，全球新诊断肝癌 905,700，死亡 830,200，且中国占据 45%和 47%。肝癌生存率低的原因在于筛查费用昂贵且肝脏痛感迟钝，多数患者在被诊断时已处于中晚期，错过最佳的治疗时期。血清标志物-甲胎蛋白（AFP）是肝癌筛查、诊断、复发风险评估及治疗疗效观察的现有临床检测手段。然而，低 AFP 患者中存在较多的阳性病例，这大大降低了 AFP 的灵敏性。

外周血液中循环肿瘤细胞（Circulating tumor cells, CTCs）因携带肿瘤组织的遗传和表观信息，是液体活检的重要标志物。作为肿瘤诊疗的有效途径之一，CTCs 捕获材料的开发对肝癌的早期诊断、病情监测、药效评价、术后评估等具有非常深远的临床意义。然而，由于 CTCs 在血液中数量极少且在捕获过程中容易受到损伤，因此对 CTCs 的精准捕获和无损释放极具挑战。本课题组致力于研究循环肿瘤细胞高选择性捕获及无损释放材料，其释放的循环肿瘤细胞可进一步进行培养，这对于研究单细胞分析及肿瘤精准治疗是至关重要的技术突破。

关键字 循环肿瘤细胞；生物界面；聚糖；分子识别；细胞印记；水凝胶；早期诊断

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

高性能金属有机骨架电色谱固定相的理性构建及其在酶抑制纳米材料筛选中的应用

闫美婷[1]，纪柏安[2]，贵缘琦[1]，夏之宁[2,*]，付琦峰[1,*]
[1]西南医科大学药学院，泸州，646000；[2]重庆大学药学院，重庆，401331
通讯联系人: E-mail：夏之宁 znxia@cqu.edu.cn；付琦峰 fuqifeng1990@163.com

近年来，金属有机骨架（MOFs）涂层作为高性能电色谱（CEC）分离固定相的应用价值受到广泛关注[1]。然而，目前已开发的 MOFs 电色谱固定相大多仅具有微孔结构（孔径＜2 nm），限制了客体分子在 MOFs 骨架内部的快速扩散和传质，相应的 CEC 分离性能也受到限制，难以满足复杂样品高效分离分析的需求。此外，前期 MOFs 电色谱固定相的相关研究多数仅聚焦于材料本身的合成与分离性能验证，未充分探讨其在生物医药领域中的应用潜力。因此，有必要进一步开发具有强分离选择性和传质性能的新型 MOFs 电色谱分离介质，并拓展其在生物医药等领域中的广泛应用。

基于此，本研究组近期针对毛细管电色谱（CEC）固定相传质阻力大、作用位点利用率低等瓶颈性问题，通过将多级孔及均一介孔金属有机骨架（MOFs）材料引入到 CEC，成功实现了高相比和低传质阻力之间的协调统一，构建了多种高性能 MOFs 电色谱固定相：（1）首次将具有优良传质性能及强热力学相互作用的均一介孔 MOFs（mesoMOF-1）引入到电色谱分离领域，将其作为新型固定相用于高效 CEC 分离分析。相较于 HKUST-1 涂层柱，mesoMOF-1 涂层柱能更加有效地平衡各类分析物自身的动力学扩散及与介孔孔道间的热力学相互作用，相应的分离度、分离效率及柱容量均得到显著提升[1]；（2）利用自研半胱氨酸诱导原理[2]构建了具有晶间介孔结构的 UiO-66-NH2 涂层 CEC 固定相，并将其作为酶载体材料建立了基于 UiO-66-NH2 固定化酶微反应器（IMER）的 CEC 在线酶分析方法。相比于传统 IMER-CE 方法，UiO-66-NH2-IMER-CEC 的酶分析及分离性能获得了显著提升[3]；（3）利用硅烷共价偶联方法将微孔-介孔多级孔结构的 HP-UiO-66-NH2 固定在毛细管柱内壁，构建了 HP-UiO-66-NH2-IMER-CE 在线酶分析方法，其酶负载量、稳定性及酶分析性能相比于 UiO-66-NH2-IMER 获得了显著提升。将该方法应用于酶抑制活性纳米材料的快速筛选，发现氧化石墨烯、单壁碳纳米管、碲化镉量子点等具有不同程度的酶抑制活性[4]；（4）基于双调节剂介导界面纳米融合策略，建立了在半胱氨酸改性毛细管内壁上快速原位生长高质量多级孔 MOFs 涂层的新方法。深入探究了 HP-UiO-66(Hf)涂层孔径分布及其动力学传质与热力学相互作用间的内在联系，实现了对多类复杂分析物的高效 CEC 分离分析。进一步构建了新型 HP-UiO-66(Hf)-IMER-CE 系统，证实其具有更高性能的 CE 酶分析及酶抑制纳米材料筛选应用价值。以上研究既为解决 CEC 固定相领域的难点问题及高性能电色谱固定相的理性设计提供了新的思路和手段，还有效拓展了其在复杂样品分离分析及生物分析等领域中的应用价值。

关键字 金属有机骨架，固定相，毛细管电色谱，固定化酶微反应器

参考文献：

1. Y.Q. Gui, J. Zeng, Y.K. Huang, L. Rao, Q.F. Fu*, Anal. Chem., 2022, 94(48): 16720-16727.
2. B.A. Ji, Z.N. Xia*, Q.F. Fu*, ACS Appl. Mater. Interfaces, 2021, 13, 41075-41083.
3. R. Liu, Z.N. Xia*, Q.F. Fu*, Anal. Chem., 2022, 94: 6540-6547.
4. M. Yan, Z.N. Xia*, Q.F. Fu*, Anal. Chem., 2024, accepted.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

复杂基质样品中靶向和非靶向脂质分子分析方法优化与应用

苏冠勇*
南京理工大学

脂质组学技术是人类了解环境污染物早期暴露毒性的有力工具，建立生物样品中脂质分子高通量筛选的分析方法是开展脂质组学技术的关键。在以往的研究中，金标准 Folch 法（氯仿/甲醇，v/v = 2:1）和 Bligh & Dyer 法（氯仿/甲醇，v/v = 1:2）作为传统的双相脂质萃取法被广泛应用于各种生物样品；然而，这两种传统脂质萃取方法难以收集下层有机相和萃取出极性脂质，且耗时较长，降低了可重复性。本研究通过建立仪器分析方法和优化脂质萃取步骤，建立了一种氯仿/甲醇/水（15:14:2）单相脂质萃取方法，且该方法相比于传统脂质萃取方法，能够实现从复杂基质样品中一次同步提取极性和非极性脂质分子。本报告重点介绍该方法的构建过程，及所构建方法在具体研究中的实验结果。

关键字 污染物，脂质分子，液液萃取，液相色谱，静电场轨道阱质谱

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于色谱质谱的复杂体系小分子分析新方法研究

刘心昱、王宇婷、管朋维、杨军、由蕾、许国旺*
中国科学院大连化学物理研究所

人体作为复杂的化学体系，除了内源性代谢物外，还有环境、菌群、营养来源的化学物质，这些小分子与人类健康密切相关。然而，人体内小分子物质的组成、结构、浓度分布等具有高度复杂性，高覆盖、高灵敏地获取小分子信息面临巨大挑战。

面向人体内复杂的小分子表征，我们建立了基于色谱-质谱的高覆盖、高灵敏分析新技术体系。具体地，构建了多模式、多维色谱-质谱体系，实现极性和非极性小分子的高覆盖分离分析，单个方法最多分析超 2000 个化合物，提高信息获取通量；开发了计算组学新方法，挖掘高分辨质谱数据中的低丰度代谢物和暴露组信号，充分提取传统方法中极易丢失的微弱信号质谱特征，实现了大规模、多批次数据中化学组信息的全面获取。为进一步覆盖不同来源小分子的检测，开发了基于多维色谱联用高分辨-多反应监测模式的一体化表征新策略，实现一次进样高覆盖、高灵敏地同时表征代谢组和暴露组，显著节省样本用量及分析时间。此外，为了实现大规模人群体内环境来源化学品的精准定量，创新性的建立了基于多同位素内标-混合标品-基质加标等多重质控策略，确保了上万人血清样本中化学残留物的精准定量，解决了覆盖度、灵敏度及稳定性问题，实现了多实验室检测数据的整合可比。

将所建立的方法用于重大慢病的研究，阐明了外源性暴露物的慢病风险、肠道菌群重塑与肥胖的风险和治疗相关，提出了利用抗性淀粉减重治疗及其菌群-代谢交互作用机制，为慢病预防和治疗以及生命全周期健康管理提供科学依据。

关键字 多维色谱、计算组学、高通量深覆盖、重大慢病

参考文献

1. L. You#, J. Kou#, M. Wang#, G. Ji#, X. Li, C. Su, F. Zheng, M. Zhang, Y. Wang, T. Chen, T. Li, L. Zhou, X. Shi, C. Zhao, X. Liu*, S. Mei*, G. Xu*, Nat. Commun., **2024**, 15, 2268.
2. C. Wang#, H. Fu#, J. Yang#, L. Liu, F. Zhang, C. Yang, H. Li, J. Chen, Q. Li, X. Wang, Y. Ye, N. Sheng, Y. Guo, J. Dai, G. Xu, X. Liu*, J. Wang*, J Hazard Mater., **2023**, 447, 130831.
3. Y. Wang, L. Zhou, T. Chen, L. You, X. Shi, X. Liu, S. Zheng, J. Jiang, Y. Ke, G. Xu, Environ Pollut., **2023**, 331(Pt 2): 121914.
4. L. You, F. Zheng, C. Su, L. Wang, X. Li, Q. Chen, J. Kou, X. Wang, Y. Wang, Y. Wang, S. Mei, B. Zhang*, X. Liu*, G. Xu*, Environ. Int., **2022**, 158, 106919.
5. H. Li#, L. Zhang#, J. Li#, Q. Wu#, L. Qian, J. He, Y. Ni, P. Kovatcheva-Datchary, R. Yuan, S. Liu, L. Shen, M. Zhang, B. Sheng, P. Li, K. Kang, L. Wu, Q. Fang, X. Long, X. Wang, Y. Li, Y. Ye, J. Ye, Y. Bao, Y. Zhao, G. Xu, X. Liu*, G. Panagiotou*, A. Xu*, W. Jia*, Nat metab., **2024**, 6 (3):578-597.
6. R. Ouyang, J. Ding, Y. Huang, F. Zheng, S. Zheng, Y. Ye, Q. Li, X. Wang, X. Ma, Y. Zou, R. Chen, Z. Zhuo, Z. Li, Q. Xin, L. Zhou, X. Lu, Z. Ren, X. Liu*, P. Kovatcheva-Datchary*, G. Xu, Gut Microbes, **2023**, 15:2231596.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

动态组合多肽库的组学分析与分子识别功能研究

金钰龙*[1,2]、王卓[1]、赵睿[2]
1. 北京化工大学
2. 中国科学院化学研究所

小分子活性多肽在生命过程中发挥着重要作用，发展多肽等活性分子及代谢物的选择性富集与高灵敏分析方法对于理解生命、建立生物医学诊疗新策略具有重要意义。本研究设计合成了新型的基于可逆共价与非共价协同作用的分子印迹聚合物（Molecularly Imprinted Polymers, MIPs）。利用可逆加成-断裂链转移这种基于可逆反应的活性可控聚合方法，制备了尺寸厚度均匀的核壳型磁性 MIPs 复合材料，显示出传质速率快、抗干扰能力强的优点，建立了环肽激素-心房利钠肽、氟喹诺酮类抗生素、β受体阻滞剂等活性多肽及代谢物的快速族分离与富集新方法。进一步，结合硼亲和的可逆共价取向识别作用，制备了能选择性识别β受体激动剂的 MIPs，实现了血液等复杂生物样品中目标药物及代谢物的族分离检测。

此外，多肽的动态共价与非共价识别作用是多肽自组织并实现复杂功能的分子基础。在生命的出现与进化过程中，自复制分子和折叠大分子扮演着重要作用。本研究进一步设计合成了一系列 3,5-二巯基苯基衍生的二肽基元分子，利用动态可逆二硫键，在水溶液中构建了复杂的动态组合多肽库，并利用液相色谱-高分辨质谱高效分离鉴定了组合库成员。发现了对机械力与质子双响应的环状 6 聚体自复制子与环状 15 聚体折叠体，以光酸为桥梁，实现了光驱动下多肽自折叠及质子耗散过程中自复制的循环。该研究为人工合成这种具有自复制与分子折叠行为的类生命原型提供了新思路，并可望在神经退行性疾病相关蛋白质错误折叠聚集体的自复制扩增与功能调控研究中提供人工模型。

关键字 动态组合多肽库，组学分析，分子识别，富集分离

参考文献

1. Y. Jin, P. Mandal, J. Wu, N. Bocher, I. Huc, S. Otto, *J. Am. Chem. Soc.*, **2023**, 145, 2822-2829.
2. Y. Jin, P. Mandal, J. Wu, A. Kiani, R. Zhao, I. Huc, S. Otto, *J. Am. Chem. Soc.*, in minor revision.
3. Y. Jin, K. Xu, Y. Huang, H. Zhong, R. Zhao, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 2045.
4. H. Hou, Y. Jin, K. Xu, L. Sheng, Y. Huang, R. Zhao, *Anal. Chim. Acta*, **2021**, 1154, 338301.
5. L. Su, Y. Jin, Y. Huang, R. Zhao, *J. Sep. Sci.*, **2017**, 40, 2269-2277.
6. 感谢国家留学基金项目、国家自然科学基金项目的资助.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

小样本色谱系统保留时间的预测方法研究

林晓惠*、李岩松、东坤杰、张艳慧、王肖肖
大连理工大学

代谢组学作为系统生物学的主要组成部分，已广泛应用于疾病诊断、药物研发等领域。色谱质谱联用技术是获取代谢组数据最有用的平台，其瓶颈是代谢物定性。

代谢物的鉴定通常采用质谱信息检索数据库进行，只依赖质谱信息的鉴定假阳性高。色谱保留时间(Retention Time, RT)可以提供与质谱正交的信息，有助于降低鉴定的假阳性，提高准确度。受标样的限制，在给定的色谱条件下，已知 RT 的化合物数量少，所以建立有效的方法准确预测化合物的 RT 具有重要的意义。

许多研究采用机器学习方法预测化合物的 RT，但样本的稀疏性通常会导致机器学习模型训练不充分等，严重影响了 RT 预测的性能。近年来，基于迁移学习的保留时间预测得到广泛关注 [1,2]，然而如何获取大样本数据以提高预训练的质量是一个亟待解决的关键问题。此外，目前的 RT 预测主要关注化合物本身的表示学习，而 RT 不仅与化合物结构有关，还与色谱条件密切相关。因此，将色谱条件纳入 RT 预测模型有助于提高预测性能。

在本工作中，我们建立了一种基于小样本融合和迁移学习的保留时间预测方法。通过融合不同色谱条件下的多个小样本数据，增大样本量以缓解样本稀疏性；设计了有效的色谱条件向量化表示，分别采用数据集编码和色谱条件的向量化表示来区分不同的色谱实验、不同数据集对应的保留时间预测问题。在融合的数据集上预训练基模型，利用下游目标小数据集进行微调，进而得到相应色谱条件下的 RT 预测模型。在 14 个公共数据集上进行了实验分析，结果表明，我们的方法在 MAE 和 MedAE 上具有优越的性能，普遍优于基线方法，证明了色谱条件的向量化表示对提升模型性能的有效性以及小样本融合策略是一种缓解 RT 预测中样本量少的有效方法。

关键字 保留时间预测，迁移学习，代谢组学

参考文献

1. Q. Yang, H. Ji, H. Lu, Z. Zhang. Prediction of Liquid Chromatographic Retention Time with Graph Neural Networks to Assist in Small Molecule Identification. Anal Chem. 2021, 93(4): 2200-2206. doi:10.1021/acs.analchem.0c04071
2. R. Ju, X. Liu, F. Zheng, X. Lu, G. Xu, X. Lin. Deep Neural Network Pretrained by Weighted Autoencoders and Transfer Learning for Retention Time Prediction of Small Molecules. Anal Chem. 2021, 93(47): 15651-15658. doi:10.1021/acs.analchem.1c03250

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

基于化学衍生-计算机模拟二级质谱图数据库策略的酰基辅酶 A 全分析方法建立及其在肝癌生物标志物研究中的应用

丁俊*[1]、冯钰锜[2]、黄赞[3]
1. 中国科学院植物种质创新与特色农业重点实验室，中国科学院武汉植物园，中国湖北武汉 430074
2. 武汉纺织大学，生物工程与健康学院，中国湖北武汉，430200
3. 武汉大学，生命科学学院，中国湖北武汉，430072

酰基辅酶 A 是羧酸进入生物代谢网络的重要活性形式，参与脂质代谢、药物代谢、表观遗传修饰等重要生理过程。其代谢的异常与心脑血管疾病、癌症等多种疾病联系密切。因此，全面获取生物体内酰基辅酶 A 的种类及含量信息能系统地反应其代谢轮廓及体内稳态，对其潜在生理功能探索及疾病机理研究具有重要意义。据报道，潜在的酰基辅酶 A 种类高达数千种，然而，现有的酰基辅酶 A 分析方法受到色谱分离困难、质谱检测灵敏度低、无标准品定性的限制，仅能实现数十种高含量酰基辅酶 A 的测定。

为解决上述问题，我们利用基于 8-(重氮甲基)喹啉(8-DMQ)的化学衍生策略，显著改善酰基辅酶 A 的色谱行为，质谱检测灵敏度提高 600 余倍。通过系统分析少量酰基辅酶 A 衍生物的二级质谱图，总结其一般性碎裂规律，成功构建了含 8,337 种酰基辅酶 A-8-DMQ 衍生物 33,344 张二级谱图的计算机模拟质谱数据库。该模拟库可在无标准品的前提下实现酰基辅酶 A 的高通量自动定性。此外，我们发展了基于 XGBoost 机器学习算法的酰基辅酶 A 衍生物保留时间预测模型，进一步对质谱模拟库定性的假阳性酰基辅酶 A 进行筛查过滤，显著提高了定性的准确性及可靠性。我们利用该方法对衰老小鼠各组织器官中酰基辅酶 A 的时空分布进行研究，成功定性了 53 种酰基辅酶 A，结构类型涵盖脂肪酰基型、氧化脂肪酰基型以及三种全新结构,并初步阐述了酰基辅酶 A 的组织分布异质性及其在衰老过程中的潜在作用(图 1A)[1]。

在肝癌生物标志物的研究方面，我们通过系统分析肝癌病人的癌组织和对应癌旁组织、癌症病人和健康人体血清中的酰基辅酶 A 及酰基肉碱，发现丙酰辅酶 A 及其衍生物丙酰肉碱在肝癌样本中显著降低，且与肝癌的病理分级分期负相关。机制研究表明 ALDH6A1 介导的丙酰辅酶 A 代谢抑制了柠檬酸合酶活性和 TCA 循环，从而通过调节肝癌代谢重编程来抑制肝癌的发生(图 1B)[2]。因此，靶向丙酰辅酶 A 的代谢可能是干预肝癌的新型策略。丙酰辅酶 A、丙酰肉碱和甲基柠檬酸有望成为潜在的肝癌代谢生物标志物和治疗药物。该研究加深了对肝癌代谢重编程的理解，为肝癌的诊断和治疗提供潜在的代谢标志物和作用靶点。

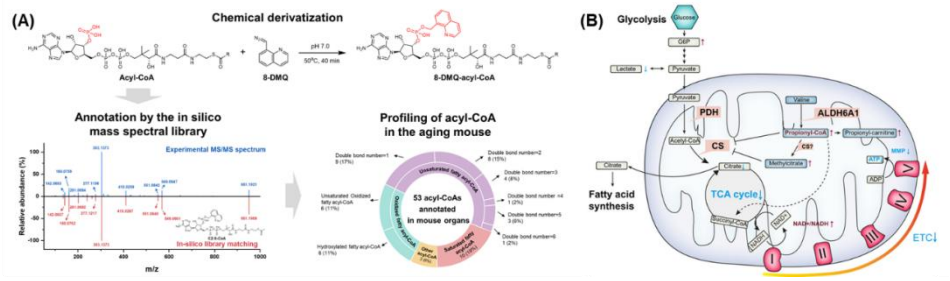


图1. 酰基辅酶A衍生物计算机模拟质谱数据库的构建(A)及其在肝癌生物标志物挖掘中的应用(B)

关键字 酰基辅酶 A；化学衍生；计算机模拟质谱数据库；色谱-质谱分析；肝癌；生物标志物

参考文献

1. J. Yu, M. Guo, Y. Liu, S. Li, J. Ni, Y.-Q. Feng, J. Ding, Analytical Chemistry 96 (2024) 13897.
2. J. Sun, J. Ding, Q. Shen, X. Wang, M. Wang, Y. Huang, X. Zhang, H. Zhu, F. Zhang, D. Wu, M. Peng, Z. Zhang, Y. Yuan, W. Li, Z.-G. She, X.-J. Zhang, H. Li, P. Zhang, Z. Huang, Journal of Hepatology 78 (2023) 627.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：报告

阀上超临界流体萃取色谱分离用于单卵母细胞脂质组分析

杨金磊、程润松、潘思远、杜沐蓉、张四纯*、张新荣
清华大学

哺乳动物卵母细胞的脂质组学对于研究能量储存、膜结构和细胞信号传导具有重要意义。群体水平的脂质组学分析突出了不同卵母细胞发育阶段的不同脂质特征，但忽略了卵母细胞之间的个体差异。由于样本的稀有性和异质性，对单个哺乳动物卵母细胞进行脂质组学分析是必要的。LC-MS/MS 批量分析的复杂预处理过程和较长的分析时间与单卵母细胞分析所需的高灵敏度和高分析通量不相容。我们引入超临界二氧化碳来实现阀上超临界流体萃取（SFE）和色谱分离（SFC）用于单卵母细胞质谱分析。超临界流体对脂质物种具有良好的提取能力，在线 SFE 适用于细胞脂质提取，极大减少了预处理导致的稀释。SFC 提供高分析通量（每个卵母细胞 5 分钟）。使用这种阀上 SFE-SFC 在线策略，我们实现了单卵母细胞脂质组学分析，其覆盖度与群体水平分析相当。该分析平台为微量样本的脂质组学分析提供了一种通用工具，并为研究卵母细胞发育机制提供了见解。

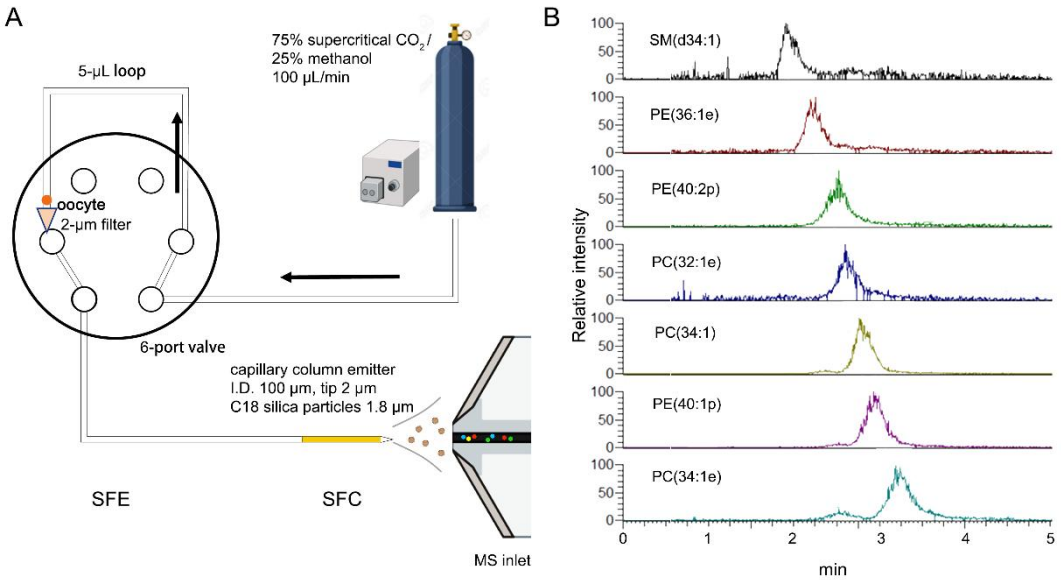


Figure 1. (A) Diagram of on-valve SFE-SFC workflow. (B) Supercritical fluid chromatography separation of cellular lipid species.

关键字 超临界流体色谱；超临界流体萃取；单细胞脂质组分析；质谱

参考文献

1. L. Zhang, J. Zhao, S. M. Lam, et al, *Nat. Cell. Biol.*, **2024**, 26, 278-293.
2. L. Schmit, L. S. Burmeister, A. Greinacher, et al, *Metabolites*, **2022**, 12, 1198.
3. T. Xia, M. Yuan, Y, Xu, et al, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 23, 8345–8353.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

基因毒性物质与 DNA 相互作用的泛亲和 ACEC 研究

黄一可*、夏之宁、田雅文、付心茹
重庆医科大学

在日常生活中，人们不断会接触基因毒性物质。它们能直接或间接损伤细胞 DNA，导致基因突变，存在致癌风险。因此，研究基因毒性物质与细胞 DNA 的相互作用是早期评价 DNA 损伤，甚至致癌的关键过程。亲和毛细管电泳（ACE）是研究生物分子间相互作用的有力工具，它依赖于互作物质对的形式与大小，建立各种研究模型，选择结合常数（Kb）计算方法。而对于互作不明确的体系，需要预先估计，再选择 ACE 相互作用的运行模式。换言之，几乎没有一种 ACE 模式是可以在一个较大的 Kb 范围内适用。因此，我们建立了一种泛亲和毛细管电色谱，无需预先选择 CE 模式，开展毛细管电泳相互作用研究方法，从而得到了能测定较宽结合常数的方法。以 DNA 为作用靶分子，测定了 12 种基因毒性物质的 DNA 的结合常数，评价的 DNA 毒性大小。展现了在较宽范围内，评价有 DNA 毒性分子潜在毒性的能力。这将为新毒性物质筛选和识别提供一定的研究基础。

关键字 亲和毛细管电泳；相互作用；筛选；基因毒性；DNA

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

有效碳数法在工业丙酮气相色谱分析中的应用

王燕波*、张育红、彭振磊、许竞早
中石化（上海）石油化工研究院有限公司

工业丙酮是一种重要的有机溶剂，主要通过乙烯和空气氧化反应得到。本文以氮气为载气，选用聚乙二醇（INNOWAX）毛细管色谱柱对工业丙酮中杂质进行定性分析，并采用有效碳数校正面积归一化法（简称有效碳数法）进行定量分析。通过对丙酮标样及不同来源丙酮样品的分析,考察有效碳数法的准确性和重复性。实验结果表明，有效碳数法的定量结果与内标法（GB/T 6026-2013）的定量结果一致，各杂质组分回收率为 93.8%-104.2%，相对标准偏差<2.0%。该方法具有快速、简便、环保的特点，可用于工业丙酮的无标定量。

关键字 气相色谱；有效碳数法；工业丙酮；无标定量

参考文献

1.氢火焰离子化检测器校正因子的理论计算[J]. 范国梁,宋崇林,周维义,阎颖,刘昌俊,姜东峰,隋静,刘春宇.分析化学,2002(08)
2.有效碳数法在甲乙酮气相色谱分析中的应用[J]. 马玲;吕晓华;秦婷;吕新明;张金龙;朱侠;沙力塔娜提·包拉提;苏庆.中国口岸科学技术,2022(01)
3.气相色谱法-有效碳数定量测定环己烷及其烃类杂质含量[J]. 郝燕.合成纤维工业,2020(05)
4.有效碳数法在芳烃气相色谱分析中的应用[J]. 张育红;王川;彭振磊.石油化,2015(06)
5.无自身标准样品 GC-FID 法测定标准物质中有机杂质含量[J]. 贾林;胡岚;王婧娜;杨彩宁;严蕊;王景荣.化学分析计量,2013(02)

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

气相色谱-离子迁移谱测定富乙烷中超痕量一氧化氮

蔡灵喜*
中石化（上海）石油化工研究院有限公司

富乙烷是由乙烯、丙烯和丁烯等不饱和烃类组成的一种重要化工原料。一氧化氮等氮化物对于富乙烷下游裂解和合成反应都有极大的影响。本研究针对氟乙烷中超痕量一氧化氮，建立了气相色谱-离子迁移谱（GC-IMS）对其进行快速定量的方法。实验对色谱条件进行了优化，结合外标法定量，实现了对富乙烷中超痕量的定量分析。标准样品用气体在线稀释仪稀释后经过三通阀接入气袋，采用仪器配备的 MXT-WAX（30 mm×0.25mm, 0.25μm）色谱柱，柱温 60℃，迁移管温度：45℃，载气流量 5ml/min，离子迁移谱漂移气流量：150ml/min。结果表明，采用该方法，一氧化氮可在 5min 内完成检测，定量范围为 0.010 -0.998 mL/m^3，满足实际样品的分析需求。采用 0.010 mL/m^3 标准样品进行重复性实验，其相对标准偏差为 9.3%。本方法具有准确、快速、灵敏等优点，适用于富乙烷中超痕量一氧化氮的定量，满足实际应用需求。

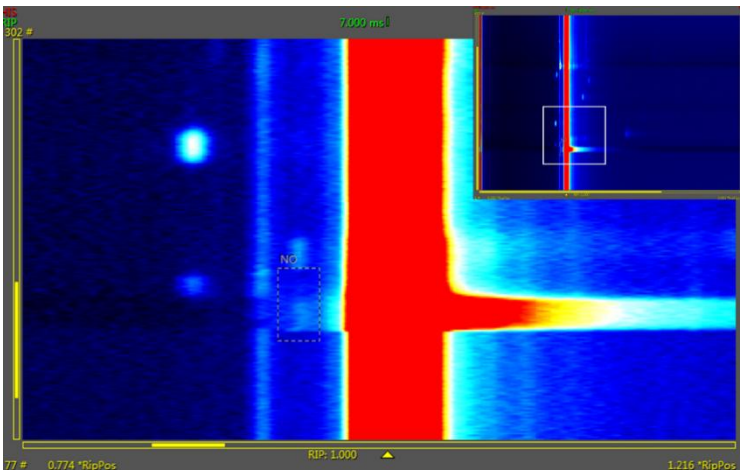


图 1.富乙烷中一氧化氮典型图谱

关键字 一氧化氮，富乙烷，气相色谱-离子迁移谱

参考文献

1. 刘学.干气回收富乙烷气装置运行总结[J]. 广东化工,2021,48(11):134-136.
2. 付玥.石油产品中氮及氮化物的分析检测[J].化工管理,2021,(20):36-37. DOI:10.19900/j.cnki.ISSN1008-4800.2021.20.018.
3. 刘汉勋,樊立民,刘霞,等.用离子色谱法测定丙烯中痕量碱性氮化物[J]. 分析化学,1995,(02):148-153.
4. 李锋.室内环境中一氧化氮的化学发光检测及其催化消除方法研究[D]. 江南大学,2017.
5. 王晓琴,周理,沈琳,等.气相色谱-离子迁移谱法检测天然气中形态硫的方法探讨[J]. 石油与天然气化工,2022,51(01):110-117.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

细胞外囊泡的色谱分离和药物递送

张瑾、苏宁、刘威、李梦冉、郑浩洋、李冰、靳雪、高明霞*、张祥民
复旦大学

细胞外囊泡（EVs）被证明能够逃避吞噬作用、跨越生物屏障、具有良好的生物相容性和内在稳定性等优点[1, 2]。基于这些优势，EVs 已被用作有效的药物递送载体，但其低载药能力极大地限制了进一步的应用[3]。本研究提出了一种基于细胞穿透肽（CPP）的载药方法，增强了治疗药物在 EVs 中的包封效果，而基于 EVs 的药物递送系统对肿瘤细胞具有更强的杀伤效果。以尿源性 EVs 和化疗试剂阿霉素（DOX）为模型，CPP 与 DOX 通过连接剂 N -琥珀酰亚胺基 3-马来酰亚胺丙酸（SMP）共价偶联制备 CPP-DOX。CPP-DOX 在温和条件下与 EVs 孵育，促进 DOX 在 EVs 内的包封。CPP-DOX-EVs 表现出较强的抗癌能力，因为 EVs 作为递送载体促进了癌细胞的摄取。负载 CPP-DOX 的 EVs 的载药效率为 37.18%，比被动孵育负载 DOX 的 EVs 的载药效率提高了约 2.5 倍。该方法操作简便，条件简单可控，与其他负载方式相比进一步凸显了其优势。基于 CPP 的载药方法为 EVs 药物递送系统提供了有效的策略。

关键字 细胞外囊泡；细胞穿透肽；阿霉素；负载方法

参考文献

1. Tominaga N, Kosaka N, Ono M, et al. Brain metastatic cancer cells release microRNA-181c-containing extracellular vesicles capable of destructing blood–brain barrier. Nat. Commun., **2015**, 6(1), 6716.
2. Herrmann I K, Wood M J A, Fuhrmann G. Extracellular vesicles as a next-generation drug delivery platform. Nat. Nanotechnol., **2021**, 16(7), 748-759.
3. Donoso-Quezada J, Ayala-Mar S, González-Valdez J. State-of-the-art exosome loading and functionalization techniques for enhanced therapeutics: a review. Crit. Rev. Biotechnol., **2020**, 40(6), 804-820.

感谢国家自然科学基金的资助（22274027）。

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

利用高通量计算模拟与体外实验模型相结合的方法，综合筛选和分离桑黄中潜在的乙酰胆碱酯酶抑制剂

侯万超*
广西中医药大学

该研究建立了一种综合筛选与分离方法，结合高通量计算机模拟和体外实验模型，用于筛选和验证桑黄中的潜在乙酰胆碱酯酶抑制剂。通过数学建模方法，研究了桑黄活性成分的提取工艺优化、活性筛选、作用机制阐明、分离纯化技术以及分析与鉴定方法。这些研究为开发基于桑黄的阿尔茨海默病治疗策略提供了理论基础。

第一阶段，通过结合 BP 神经网络和响应面法优化桑黄中多酚类活性化合物的提取工艺。随后，采用亲和超滤-液相色谱-质谱联用技术实现乙酰胆碱酯酶抑制剂的快速筛选。通过分子对接评估和分子动力学分析验证了这些活性化合物的抗阿尔茨海默病潜力，并通过质谱鉴定活性成分。此外，通过酶促反应动力学研究乙酰胆碱酯酶抑制剂的作用机制。同时，利用网络药理学方法探讨桑黄活性成分的抗阿尔茨海默病活性并阐明其作用机制。

最后阶段，使用离子液体逆流色谱对活性成分进行分离，并通过断层扫描和质谱进行化合物鉴定。确定了最佳工艺条件，包括酶解时间、酶用量、固液比和乙醇浓度，预测了理论多酚提取量。研究发现了 4 种潜在的乙酰胆碱酯酶抑制剂，分别为纤孔菌素 A、桑黄素 E、Phellinstatin isomer 和桑黄素 D，它们与乙酰胆碱酯酶的对接结合能量各不相同。分子对接和分子动力学模拟确认了这些活性化合物与酶之间的稳定相互作用。此外，网络药理学研究揭示了这些活性成分与阿尔茨海默病相关的多个靶点及共同代谢通路。分离出的多酚类活性成分纯度超过 90%，均对乙酰胆碱酯酶表现出可逆抑制作用。

该模型系统地从基础到深层次探讨了活性化合物与乙酰胆碱酯酶的相互作用。随后，采用高速逆流色谱进行分离和纯化，为发现新型乙酰胆碱酯酶抑制剂提供了新方法和思路，同时为从天然食品中发现新型治疗药物提供了有希望的途径。

关键字 桑黄；BP 神经网络和响应面法；计算机模拟；体外实验模型；离子液体逆流色谱。

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

一种开源的毛细管柱上单点多波长吸光度检测器

尹邦杰*
桂林电子科技大学

紫外吸光度检测（UV-PD）是毛细管电泳（Capillary Electrophoresis，CE）和高效液相色谱（High Performance Liquid Chromatography，HPLC）中应用最广泛的检测方法之一[1-2]。UV-PD 基于朗伯-比尔定律，能够实现物质的定量检测，具备简单、高效且稳定的特点。在毛细管柱上实现多波长检测，具有显著优点：（1）辅助识别物质提供结构信息；（2）提高检测灵敏度；（3）扩展线性检测范围；（4）多波长相互校正减轻基线噪声和漂移。但是，目前，大多数毛细管柱上 UV-PD 仅能单波长检测。因此，多波长 UV-PD 在分析化学等领域前景广阔，但其检测器结构复杂、成本高，限制了推广。近些年来，3D 打印技术的发展使得制造低成本、定制化的检测器成为可能[3-4]。为此，本研究基于 3D 打印技术，提出了一种开源的、低成本、体积小巧简易的毛细管单点多波长吸光度检测器。

检测器结构如图 1 所示[5]，检测器的核心结构为由 3 个三角形部件组成的六边形核心。核心外再嵌套了一个六角笼外壳，以确保 3 个三角部件之间彼此紧密接触。3 个三角形部件表面上都有深度为 30 μm 的凹槽，互相组合以构成 60 μm 的检测狭缝以及汇聚于同一检测点的 3 个独立检测通道（图 1E，光路横截面）。检测器采用 3 个不同波长的深紫外发光二极管（235，255，278 nm）作为光源，采用毛细管作为检测通道，每个光源耦合一个光电探测器。本研究使用 Arduino R3 + ADS1115 10bit ADC 模块来采集光电探测器输出的电压信号，然后通过串口传回电脑进行后续数据处理，光电探测器和 ADS1115 均由 Arduino 上的 5 V 电压端口供电。发光二极管则使用课题组自制的恒压恒流源供电。

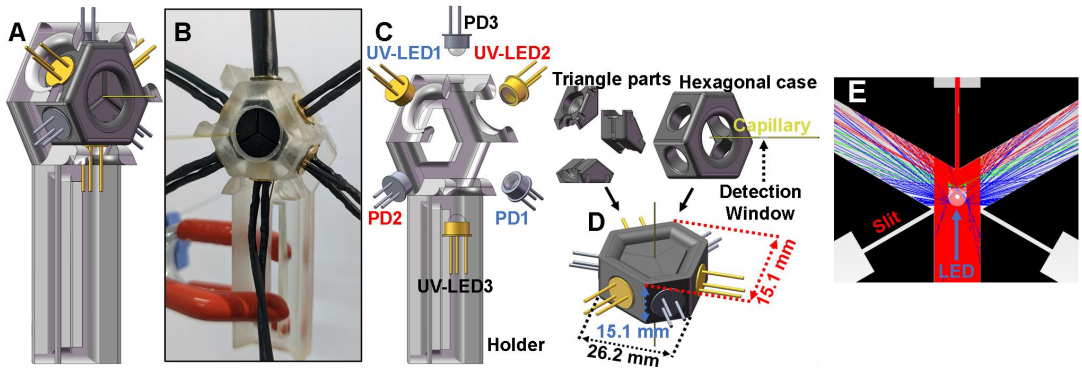


图 1 多波长检测器结构图[5]

将该检测器应用于 HPLC（图 2A）和 CE（图 2B）中，检测了多种常见药物验证了检测器的通用性，并评估其性能。基于检测器 3 个光通路汇聚于同一检测点的特性，本研究系统分析了不同狭缝长度对检测结果的影响，优化了检测器的狭缝长度和宽度。在 50 μm 毛细管内径下，235 nm、255 nm、278 nm 光通路分别获得了 42.99 μm、45.21 μm、42.56 μm 的有效光程，以及 11.05%、9.21%、5.87%的杂散光，检测限（LOD）为 24-117 μg/L，重复性（RSD）为 0.07−1.08%（n=3）。本研究首次实现了同一检测点的多波长检测，这一进展推动了便携式、低成本分析仪器的发展，对各种应用领域具有重要意义。

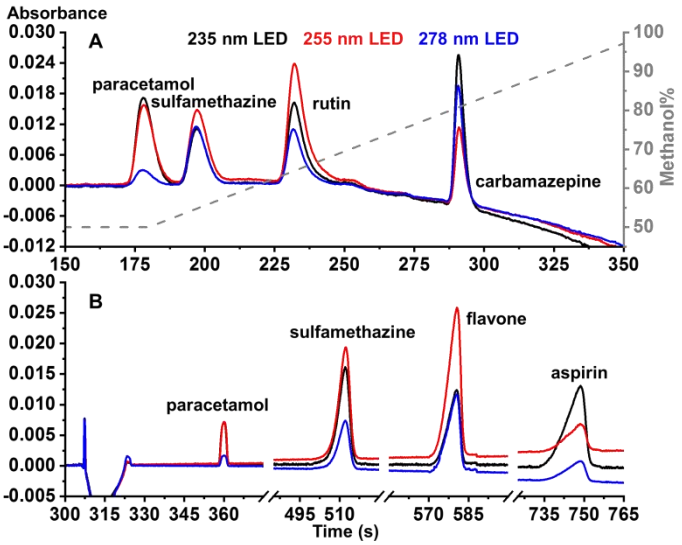


图 2 多波长检测器应用于 HPLC（A）和 CE（B）[5]

关键字 高效液相色谱、毛细管电泳、深紫外吸光度、多波长检测、吸光度比率、发光二级管

参考文献

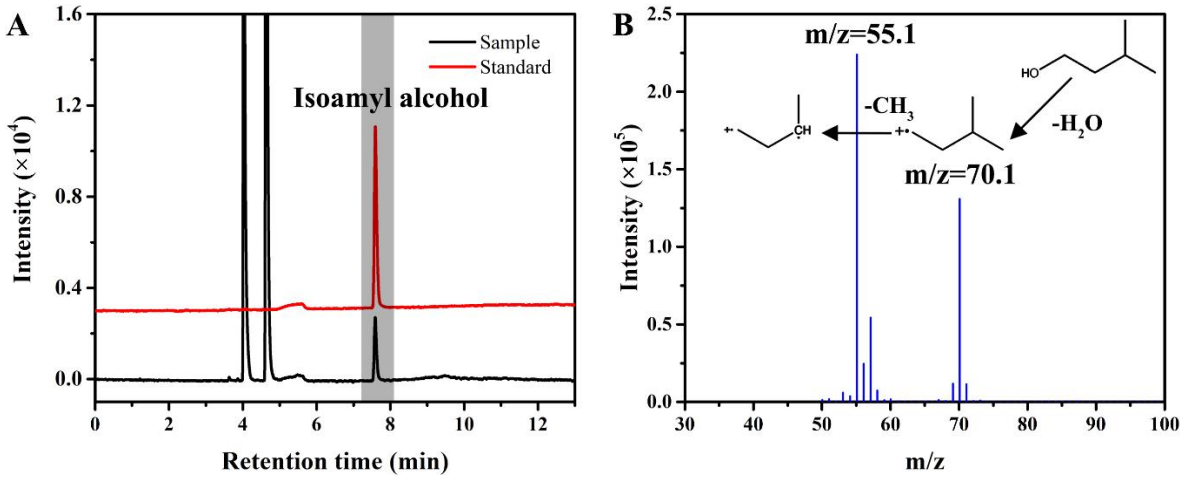
1. Picou R A, Schrum D P, Ku G, et al. Separation and detection of individual Aβ aggregates by capillary electrophoresis with laser-induced fluorescence detection[J]. Analytical biochemistry, 2012, 425(2): 104-112.
2. Kai Ying L, Jun W, Hui W, et al. Design and evaluation of capillary array electrophoresis with 532 nm laser-induced fluorescence detection[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2007, 35(5): 772-774.
3. Palenzuela C L M, Pumera M. (Bio) Analytical chemistry enabled by 3D printing: Sensors and biosensors[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2018, 103: 110-118.
4. Ngo T D, Kashani A, Imbalzano G, et al. Additive manufacturing (3D printing): A review of materials, methods, applications and challenges[J]. Composites Part B: Engineering, 2018, 143: 172-196.
5. Bangjie Yin, Zihan Zeng, Hui Zeng, etc. Open-Source Absorbance Detector with Multiple Deep UV-LEDs for On-Capillary Multiwavelength Detection at a Single Point [J] Analytical Chemistry. 2024, 96(36): 14348–14353.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

热辅助阵列气膜分离策略在新生儿食品及药品白念珠菌污染快速检测中的应用

侯霄雯、陈正毅*
桂林医学院

婴幼儿的免疫系统发育尚未完善，尤其是在早产儿或免疫功能受损的婴儿中，白念珠菌感染的风险更高。接触白念珠菌易导致婴幼儿患鹅口疮、消化道感染、系统性感染等疾病。但传统的检测方法，包括培养技术、PCR 和 ELISA，由于需要专门的设备、熟练的人员和冗长的程序而面临限制，阻碍了现场检测并延长了样品制备的时间不便于白念珠菌的快速检测，另一种方法涉及检测真菌排放的挥发性有机化合物（VOCs），这是一种在食品安全等应用中非常前途的方法。与针对非挥发性生物标志物的方法相比，VOCs 检测法专注于更简单的组合物，干扰最小，需要的制备步骤更少。为了保障婴幼儿的身体健康，在与 VOCs 检测法结合的基础上，本课题组利用便携式的热辅助阵列气体膜分离装置对在 YPD 液体培养基中培养 24 h 白念珠菌进行气膜分离，超纯水做吸收液并利用 GC-MS 检测其 VOCs 成分，初步判断其 VOC 成分含有异戊醇，又通过 GC-FID 分析异戊醇-3-戊醇混标溶液与样品组，进一步确定异戊醇为白念珠菌的 VOCs 之一，同时也验证了该装置能够有效地分离、富集和检测白念珠菌释放的异戊醇标记物，该方法具有更高的灵敏度、速度，在样品制备时间方面优于传统的平板培养方法，为食品药品中白念珠菌的检测提供了快速、高效的方法，从而保障婴幼儿健康。



关键字 气膜分离装置；白念珠菌；新生儿；样品前处理；气相色谱法

参考文献

1. L. Yu, L. Huang and Z. Wang, Y. Xiong, G. Li, Z. Chen, *Sens. Actuators B*, **2024**, 135791.
2. Z. Chen, L. Yu, Z. Zhang, L. Su, Y. Xiong, *ACS Food Sci. Technol.*, **2024**, 4, 373-381.
3. H. Lai, Z. Chen and G. Li, *Anal. Chem.*, **2022**, 16275-16281

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

苯基吸附剂对防风中香豆素类成分的萃取性能研究

张震、白立改、侯利悦、刘海燕、王明伟、韩晔红、闫宏远*
河北大学

中药材防风中的呋喃香豆素类成分补骨脂素、欧前胡素、异欧前胡素具有保护心血管、抗炎等多种药理活性[1,2]。但与此同时，香豆素类成分具有肝毒性和肾毒性。本文针对三种呋喃香豆素类成分的化学结构，以 4-烯丙基氨甲酰基苯基硼酸为单体，制备了苯基吸附剂，通过在线固相萃取-高效液相色谱法对中药材防风提取液和小鼠血浆中的香豆素类成分进行萃取和分析，结果表明经过固相萃取后的溶液中，基质组分的色谱峰基本消失，实现了复杂样品中防风提取液中三种呋喃香豆素的在线萃取与分离。

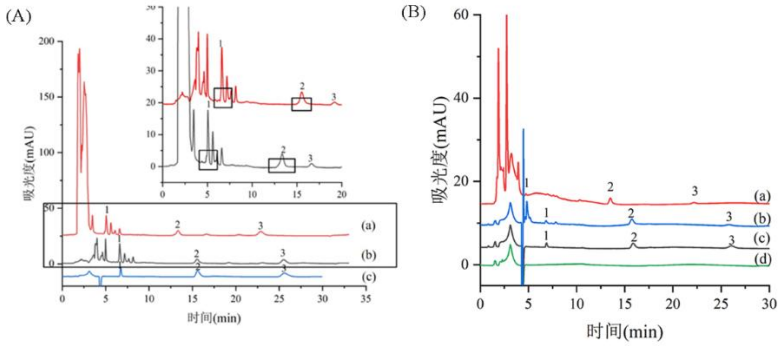


图 A、B 分别为防风提取液和小鼠血浆色谱图;（a）、（b）为经过 SPE 前、后的样品/加标血浆色谱图；（c）为对照品溶液色谱图；（d）为空白血浆色谱图。

关键字 防风 苯基吸附剂 固相萃取 香豆素

参考文献：

1. Z. Alehaideb, S. Matou-Nasri, Toxicol. Rep. 2021, 8, 1437-1444.
2. A. K. Yadav, R. Maharjan Shrestha, P. N. Yadav, Eur. J. Med. Chem. 2024, 267, 116179.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

2D 氢键有机骨架分子片用于挥发性有机化合物的高效固相微萃取

石小也、王景、于丽青*
河北大学化学与材料科学学院

氢键有机框架（HOFs）是由有机或金属有机结构单元通过氢键、π-π堆叠和其他分子间相互作用自组装而成。HOFs 因其良好的结构结晶度、大比表面积和高的孔隙率等优点而受到人们越来越多的关注。不幸的是，由于弱的氢键会在溶液中解离，最终损害结构的完整性，阻碍了 HOFs 在分析化学应用中的潜力。HOF-DAT 是通过二氨基三唑（DAT）与 1,4,5,8-萘四甲酸二酐（NTCDA）之间的酰亚胺化反应制备的带有 DAT 连接体的 2D HOF 分子片。形成的 2D HOF 分子片具有多位点氢键相互作用，有高度的热稳定性，且二维片状结构有利于气体分子的传输，且表层面暴露的大量活性位点，有利于目标分子与活性位点的接触，从而提高多孔框架材料在催化，传感以及吸附中的性能。本工作合成了一种新型 2D 氢键有机骨架分子片（HOF-DAT）作为固相微萃取纤维涂层，用于富集呼出气中醛类和长链烷烃的生物标志物，用于结直肠癌的早期检测。通过傅里叶变换红外光谱、X 射线衍射、热重分析、N2 吸附-脱附等一系列表征，证明 HOF-DAT 是一种具有良好的热稳定性和较高的富集倍数的吸附材料。其富集因子（EFs）可达 515-2706。建立的分析方法具有较宽的线性范围（2-2000 μg L−1）、较低的检出限（0.05–0.13 μg L−1）和定量限（0.17–0.43 μg L−1）。同一根纤维 6 次平行萃取的日内 RSD 和日外 RSD 分别为 3.4-7.2% 和 3.8-11.5%。同一批次的 3 根纤维提取目标分析物的 RSD 为 5.9-12.4%。通过 200 次的循环测试，萃取效率没有明显下降。以上结果表明，该固相微萃取纤维具有良好的稳定性和较长的使用寿命。

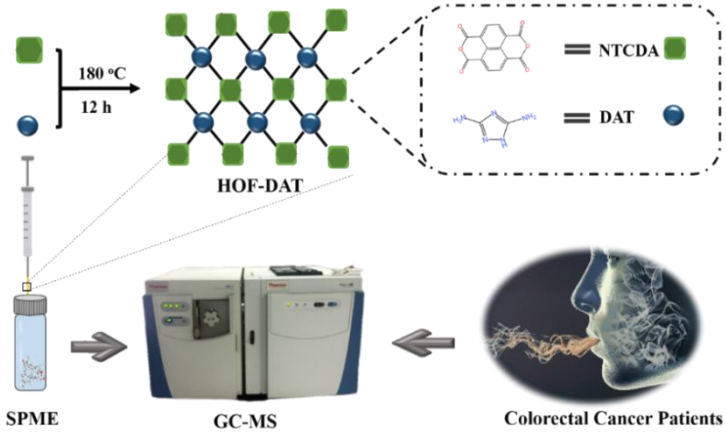


图 1. HOF-DAT 涂层纤维检测结直肠癌患者呼出气中生物标志物的示意图

关键字 氢键有机骨架，2D 分子片，固相微萃取，呼出气，结直肠癌

参考文献

1. Y. He, S. Xiang, B. Chen, J. Am. Chem. Soc.,2011, 133(37), 14570-14573.
2. Y. Wu, X. Mao, M. Zhang, X. Zhao, R. Xue, S. Di, W. Huang, L. Wang, Y. Li, Y. Li, Adv. Mater., 2021, 33(51), 2106079.

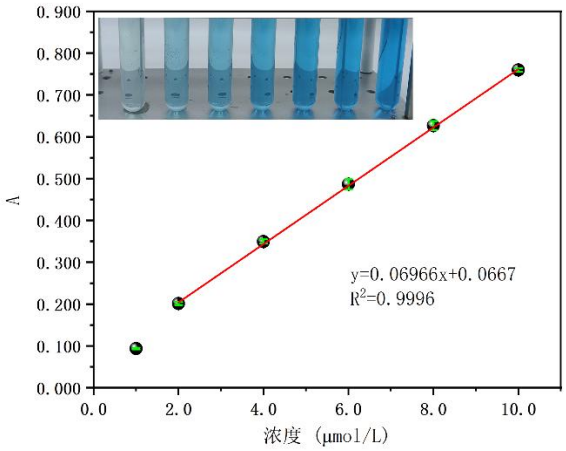
3. M. Liu, P.A. Gurr, Q. Fu, P.A. Webley, G.G. Qiao, J. Mater. Chem. A., 2018, 6(46), 23169-23196.
4. A. Kondo, H. Noguchi, L. Carlucci, D.M. Proserpio, G. Ciani, H. Kajiro, T. Ohba, H. Kanoh, Am. Chem. Soc., 2007, 129(41), 12362-12363.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

光辅助-辅剂示踪-气膜分离分析策略的构建及其在复杂体系中快速检测过氧亚硝酸根阴离子的应用

席尘冰、赵玉彩、韦姣情、陈正毅*
桂林医学院

过氧亚硝酸盐(ONOO-)作为机体内含有的一种活性氧，能够防止细胞毒物攻击生物体和在信号传导中调节基因表达，其细胞毒性在信号转导和抗微生物活性中起着关键作用。然而，过量的 ONOO-会通过氧化巯基、硝化蛋白质酪氨酸、过氧化膜脂质、损伤 DNA 诱导细胞凋亡，且已被证明与多种验证性疾病的发病机制有关。同时，ONOO-的极强氧化性和硝化性使其极易在短时间内与其他生物分子反应或者自我降解[1]。现存的 ONOO-快速检测技术以荧光探针为主，虽然检测速度和精度优异，但大多制备成本高昂，对操作人员要求较高，且探针和样品的储存运输条件十分苛刻。因此，开发有效且不易受环境和时间影响细胞和生物体内 ONOO-快检技术至关重要。本文首次构建了光辅助-辅剂示踪-气膜分离分析策略用于生物体内 ONOO-的快速检测。选取甲醇作为辅剂，在紫外光照催化条件下与 ONOO-光解产生的·OH 进行氧化还原反应生成甲醛，再通过自研的气膜分离装置[2-3]从复杂样品体系中提取甲醛，后与酚试剂进行衍生化反应生成嗪并与高铁离子进行显色反应，生成蓝绿色的化合物，颜色的深浅可用于现场简单定性检测，最后通过比色法测吸光度来检测提取到甲醛的浓度。该方法的检测限为 1.0μmol/L，且在 2.0-10.0μmol/L 浓度范围内线性良好(图 1)。最重要的是，此策略对样品的保存条件无任何特殊要求，且存放的时间完全不影响检测结果的准确性和灵敏度，同时所需的原料成本低且容易制备，可随时随地对复杂样品进行快速高效的定性定量检测。



ONOO-标准曲线

关键字 气膜分离; 复杂体系; 生物标记物; 样品前处理; 微型化装置

参考文献

1. W. Xu, L. Tan and J. Zeng, Biosens. Bioelectron., 2022, 114242.
2. L. Yu, L. Huang and Z. Wang, Y. Xiong, G. Li, Z. Chen, Sens. Actuators B, 2024, 135791.
3. H. Lai, Z. Chen and G. Li, Anal. Chem., 2022, 16275-16281.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

基于 ZIF-8 原位固定化和柠檬酸刻蚀法增强 AChE 活性

王伟峰 1、常香蕾 1,2、杨军丽*1
1. 中国科学院兰州化学物理研究所
2. 中国科学院大学

基于阿尔茨海默病（AD）研究的胆碱能假说，乙酰胆碱酯酶（AChE）已成为 AD 新药研发中十分重要的靶点之一。与大部分天然酶一样，AChE 在实际应用中易受到化学环境、温度、缓冲体系等外界因素的影响，导致其催化活性和稳定性降低，难以被纯化回收利用，大大增加了药物筛选的成本。基于金属有机框架材料（MOFs）的酶固定化策略已被广泛用于提高酶结构稳定性，但仍然存在固定化酶活性降低的局限性。课题组建立了一种简单、高效、原位固定-柠檬酸（CA）刻蚀的高活性固定化 AChE 制备策略。该策略利用 CA 的温和质子环境有效破坏 ZIF-8 框架中 Zn^{2+}与有机连接体之间的配位键，增大了复合材料的表面孔隙，从而降低了传质阻力，充分暴露了酶的活性位点。与游离酶相比，AChE@ZIF-8-CA 的催化活性提高约 6.10 倍。此外，AChE@ZIF-8-CA 具有优异的包封效率，对温度、pH 和有机溶剂表现出良好的耐受性，循环 5 次后仍具有 84%初始酶活性，为药物筛选应用奠定了良好的基础。基于 AChE@ZIF-8-CA 的优异性能，以石杉碱甲为阳性对照，验证了 AChE@ZIF-8-CA 用于抑制剂筛选的可行性，并从花椒根部提取物中成功发现具有潜在活性的 AChE 抑制剂。本研究为构建高活性固定化酶提供了一种简单高效的方法。

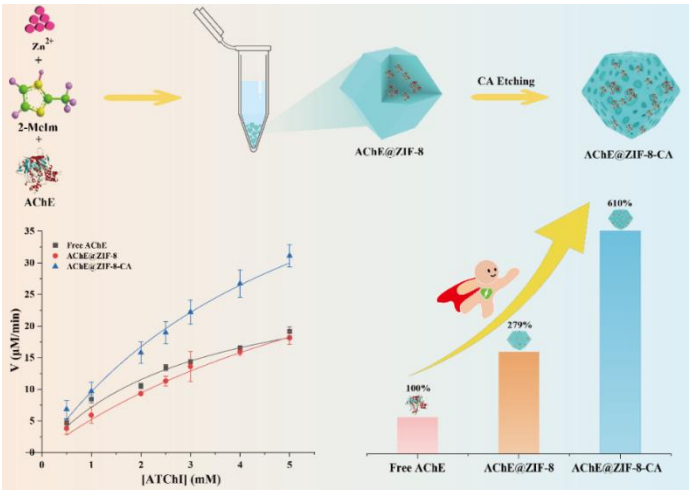


图 柠檬酸刻蚀 ZIF-8 制备高活性固定化乙酰胆碱酯酶的原理图

关键字 金属有机框架材料；酶固定化；乙酰胆碱酯酶；酶活性增强

参考文献

1. R. T. Kareem, F. Abedinifar, E. A. Mahmood, A. G. Ebadi, F. Rajabi and E. Vessally, *RSC Adv.*, 2021, **11**, 30781-30797.
2. Y.-M. Li, J. Yuan, H. Ren, C.-Y. Ji, Y. Tao, Y. Wu, L.-Y. Chou, Y.-B. Zhang and L. Cheng, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, **143**, 15378-15390.
3. J. Y. Liang, S. Gao, J. Liu, M. Y. B. Zulkifli, J. T. Xu, J. Scott, V. C. Chen, J. F. Shi, A. Rawal and K. Liang, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2021, **60**, 5421-5428.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

基于多模式质谱技术的中药三七“生熟异用”药效物质辨识及质量评价研究

范文翔、杨莉、王峥涛*
上海中医药大学

“生熟异用”是中药炮制之精髓。三七为典型“生熟异用”中药，临床上认为三七生用止血活血，熟用补血，但炮制过程核心物质转化、关键药效评价生理指标以及质控标准尚不明确。本研究基于 UPLC-Q-TOF-MS/MS 高分辨质谱、三重四极杆质谱和 MALDI 原位质谱成像技术建立了一种集多成分表征、炮制轨迹绘制、差异化合物发现、化学成分转化机制解析、差异化合物原位空间分布的新方法，阐明了三七中皂苷类成分在炮制过程中的时-空分布变化规律。进一步以血小板聚集功能为模型探讨三七生熟异用的物质基础，比较不同蒸制三七对 ADP 诱导大鼠血小板聚集作用的影响和大鼠血瘀模型的改善作用。采用“谱-效”关系分析方法快速筛选潜在的抗血小板聚集活性成分，并定向分离制备所预测的活性成分群并进行验证。实验结果表明 140°C-2h 蒸制三七活血作用最强，共筛选出人参皂苷 Rg5，Rk1，Rs3，20(S)-Rg3 等潜在活性皂苷。同时，活性导向的验证结果表明预测的稀有人参皂苷成分群是 140°C-2h 三七发挥抗血小板聚集活性的关键组分。而 Rg5，Rk1 则具有显著的抗血小板聚集活性，并且与 ADP 受体 P2Y12 有较好的分子相互作用。最后整合蒸制过程皂苷含量动态变化、皂苷转化规律和生物活性数据完成三七“生熟异制”关联的质量评价。研究成果有助于阐明三七生熟异治炮制机理，提升其质量控制水平。

关键字 液质联用技术、质谱成像技术、中药药效物质

参考文献

1. Fan, Wenxiang, et al. Journal of Advanced Research (2024): doi.org/10.1016/j.jare.2024.01.003
2. Fan, Wenxiang, et al. Journal of Ethnopharmacology 319 (2024) 117126
3. Fan, Wenxiang, et al Phytomedicine 103 (2022) 154223

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

分子印迹技术：从亲和分离纯化到挑战性应用

刘震*
南京大学

分子印迹技术是制备仿生分子识别材料的重要手段，已经在分离和传感等领域取得了广泛的应用。但是，复杂生物及临床样品体系中的分子识别为分子印迹技术提出了更高的要求和挑战。报告人研究团队长期致力于先进分子印迹材料的理性设计与可控制备，已经制备出 100 余种性能先进的分子印迹材料。在此基础上，结合纳米技术和生物信息学等科学前沿，已经将分子印迹技术的应用从传统的分离纯化扩展至单细胞分析、生物成像分析和精准癌症诊断等挑战性领域。本报告将介绍报告人研究团队在亲和分离纯化、生物暗物质和精准癌症标志物的发现与确认等方面的最新进展。

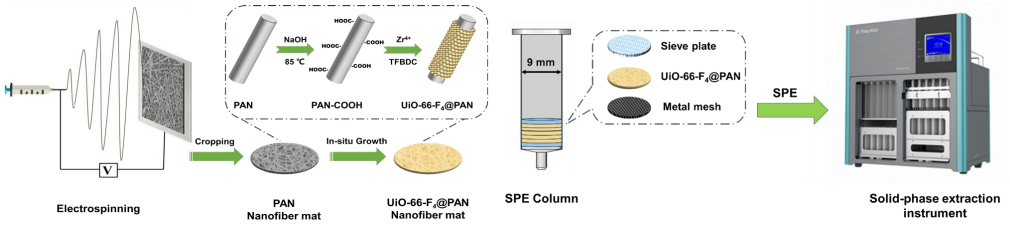
关键字 分子印迹、亲和纯化、生物暗物质、精准癌症标志物、纳米材料

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

UiO-66-F4@PAN 纳米纤维复合膜固相萃取分析食品中氟喹诺酮类抗生素残留

刘家玮*、李俭、苏丽荣、白泉
西北大学

金属有机骨架（MOFs）作为一类新兴有机-无机功能材料，在样品前处理领域受到了广泛关注。UiO-66-F4 是一种由锆离子和含氟取代有机羧酸配体组装形成的 MOFs 功能材料，比表面积大、酸碱稳定性高，且能选择性结合含氟污染物，是一种潜在的固相萃取（SPE）材料。然而 MOFs 粒径小，萃取时易发生团聚。静电纺丝纳米纤维具有独特的三维立体结构，可在其表面高效负载 MOFs 晶体，形成 MOFs@电纺纤维复合材料，为目标物萃取提供超高表面积-体积比，可显著提高传质效率和萃取容量。同时，电纺纤维优良的机械性能和易于成膜的特点也为开发新型固相萃取膜材料提供了可能。基于此，本研究首先通过静电纺丝技术制备了聚丙烯腈（PAN）电纺纤维膜，再通过原位生长法将 UiO-66-F4 负载在 PAN 纤维表面，制备了 UiO-66-F4@PAN 纳米纤维复合膜。将该复合膜裁剪后，装填至固相萃取小柱中，结合全自动固相萃取仪，对 8 种氟喹诺酮类抗生素（FQs）进行萃取研究（图 1）。通过优化萃取和洗脱条件，建立了 FQs 分析新方法。该方法在 0.1-200 ng mL-1 范围内线性良好，相关系数 R2>0.9986，检出限为 0.025-0.048 ng mL-1，定量限为 0.084-0.16 ng mL-1。



该方法成功实现了鱼肉、鸡蛋和蜂蜜中 FQs 的测定，加标回收率在 76.0-109.7%之间，精密度良好（RSD<8.1%）。研究表明 UiO-66-F4@PAN 纳米纤维复合膜能够实现不同类型动物源食品中微量/痕量 FQs 的灵敏、准确分析。

图 1 UiO-66-F4@PAN 纳米纤维复合膜的制备及固相萃取流程

关键字 金属有机骨架，静电纺丝纤维膜，固相萃取，抗生素

参考文献

1. Z. Deji, X. Zhang, P. Liu, X. et al. Crit. Rev. Anal. Chem., 2023, 53, 887-905.
2. C. Hou, L. L. Chu, X. X. Wu, et al. ACS Appl. Nano Mater., 2024, 7, 10787-10796.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

新型液相色谱固定相的研制及其应用

王路军、夏之宁*
西南医科大学

高效液相色谱（HPLC）是一种高效的分离分析技术，广泛地应用于纯度检验、成分分析和制备分离，是化学、生物和环境等领域最重要的分离分析手段。而色谱固定相是 HPLC 最核心的部分，因此不同性能固定相的研制是 HPLC 方法发展的基础。通常 HPLC 的分离模式可以根据固定相与被分析物之间的相互作用类型来分类。在过去的几十年里，传统的单一模式液相色谱，像反相液相色谱（RPLC），亲水作用色谱（HILIC），离子交换色谱（IEC）和尺寸排柱色谱（SEC）已经得到了很好的发展。但是这些单一模式的 HPLC 其分离能力还存在一定的局限性，在此基础上又兴起了一系列混合模式液相色谱（MHPLC）。

MHPLC 是一根色谱柱上能够实现两种或多种分离机理共同主导的分离技术。MHPLC 的兴起对传统单一模式液相色谱存在的缺陷起到了重要的补充作用。比如，MHPLC 可以在一根色谱柱上实现对大极性离子化合物和低极性有机化合物的分析。同时，MHPLC 通常具有高的负载容量，可适用于半制备以及制备液相色谱固定相的开发。因此 MHPLC 固定相的研究已经成为色谱分析领域的热点之一。针对混合模式色谱领域，我们研制了多种新型的混合模式色谱固定相（如图 1），将其用于核苷类、芳香烃类、苯酚类、苯甲酸以及黄酮类等物质的分离分析，并最终将其用于中药等复杂体系的分析。

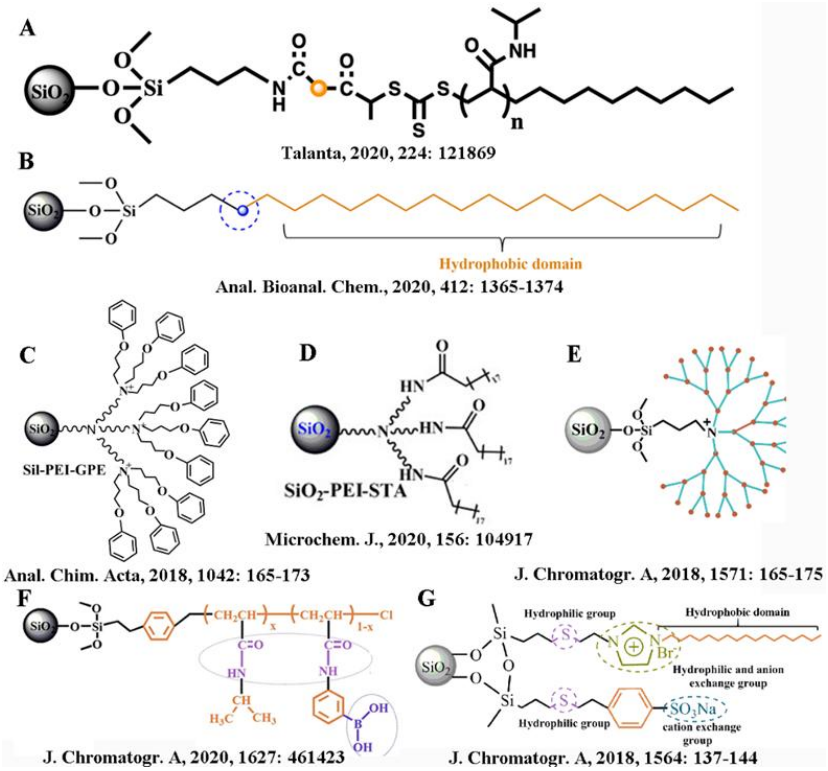


图 1 课题组近期研制的新型混合模式色谱固定相

关键字 固定相，液相色谱，混合模式，复杂体系

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

动力学调控的金属有机骨架气相色谱固定相

徐铭*
南京师范大学

金属有机骨架（MOF）材料作为一类具有规整孔道、高度的结构可设计性和大量的开放位点的材料，在气体分离领域展现出了优异的性能。今年来，设计具有高效色谱分离能力的 MOF 固定相仍然是材料领域和气体分离领域研究的热点之一。针对这一热点，本课题组着重分析了 MOF 和目标物的相互作用力以及目标物在 MOF 孔道中的扩散，致力于从热力学和动力学两个角度调控 MOF 结构，设计高效 MOF 固定相，同时解析高效分离的原理。

首先，我们将一系列被认为不具有分离能力的 MOF 固定相的尺寸从微米级降到纳米级，大幅度提高了目标物在固定相中的扩散，从动力学角度提高了这些材料的色谱分离能力。随后，我们发展了一种新型的构建多级孔金属有机骨架固溶体(s)(MOSS)的策略。构建了具有可调控微介孔比例的多级孔纳米 MOSS 材料。纳米 MOSS 平衡了客体分子的热力学相互作用和动力学扩散，表现出突出的分离能力。紧接着，我们提出了一种新型的配体裁剪策略，用于精准控 MOF 形状，实现从动力学和热力学双角度调控固定相的分离能力。PCN-MOFs 的孔壁能提供的作用力较弱，因此纳米棒的形貌能延长扩散路径更有利于达到上述平衡，获得更好的分离效果。NU-MOFs 则相反，较大的共轭中心使得该材料的孔壁能提供过强的作用力，因此纳米台的形貌可以缩短扩散路径减小扩散阻力更能获得好的分离效果。这些工作为设计具有高效分离能力和独特分离选择性的 MOF 色谱固定相提供了一个新的方向。

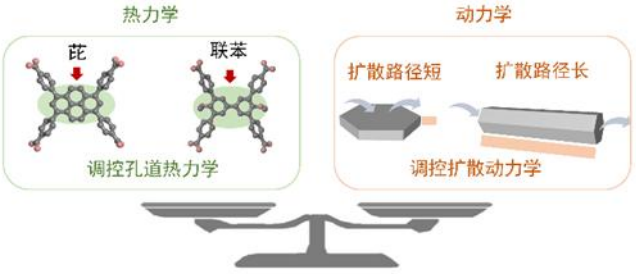


Fig. 1 Control the separation ability of MOF stationary phases

关键字 色谱分离；金属有机骨架

参考文献

1. Xu M., Cai P.-Y, Meng S.-S., et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202207786.
2. Xu M., Meng S.-S., Cai P.-Y., et al., ACS Cent. Sci. 2022, 8, 184.
3. Meng S.-S., Han T., Gu Y.-H., et al., Anal. Chem. 2022, 94, 14251.
4. Tao Z.-R., Wu J.-X., Zhao Y.-J., et al., Nat. Commun. 2019, 10, 2911

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

壳聚糖-海藻酸盐-纤维素三维多孔海绵吸附剂的研制及其在阴离子染料富集和检测中的应用研究

王丹丹*1、文曾 1、林静 1、曾佳 1、李舟 1、李邓 1、朱映西 1、夏之宁 1,2
1. 西南医科大学
2. 重庆大学

本研究以三元低共熔溶剂为纤维素溶剂，聚乙烯醇为成孔剂，戊二醛为交联剂，采用生物质基材料，即壳聚糖、海藻酸钠和纤维素，制备了三维多孔的海绵吸附剂。与壳聚糖、海藻酸盐和纤维素制备的一元和二元海绵相比，CAC 海绵具有更好的吸附能力、力学性能和水稳定性。复合材料可显著改善 CAC 海绵的三维多孔结构。另外，对 CAC 海绵的物理化学性质进行了系统地表征，包括 CAC 海绵的多孔网络结构、特征官能团、热稳定性、晶体结构、力学性能和元素组成。系统地研究了 CAC 海绵对阴离子染料的吸附性能、吸附效率和选择性吸附能力。结果表明，CAC 海绵对阴离子染料具有良好的吸附性能（105.9-203.7 mg/g）和优异的选择性，选择性因子高达 26.5，实验数据符合 Langmuir 模型和伪二级模型。CAC 海绵的吸附行为表现出温度稳定性和较强的 pH 依赖性。利用密度泛函理论确定了阴离子染料的吸附机理，即静电相互作用是 CAC 海绵吸附阴离子染料的主要动力。最后，结合 CAC 海绵与高效液相色谱法对河水、自来水、饮料样品中的阴离子染料进行富集及检测，CAC 海绵具有突出的富集能力（富集因子:31.16-69.69）。

关键字 壳聚糖-海藻酸纤维素海绵；三维多孔吸附剂；低共熔溶剂；阴离子燃料；选择性去除

参考文献

Wen Z., Gao D., Niu H., Lin J., Li Z., Zeng J., Ke F.M., Zhang K.L., Xia Z.N.*, Wang D.D.*, Three-dimensional porous adsorbent based on chitosan-alginate-cellulose sponge for selective and efficient removal of anionic dyes, Journal of Environmental Chemical Engineering, 2023, 11(5): 110831.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

苯硼酸功能化高结晶度荧光共价有机框架作为利福霉素抗生素和水的双重性能传感平台和利福霉素抗生素的吸附剂

刘秋宜、王明月、李玲玲、高蝶*
西南医科大学药学院药物分析实验室

利福霉素类抗生素包括利福平（RIF）、利福喷丁（RFT）和利福布丁（RBT），因其对结核病的突出治疗优势而广为人知。过度使用或滥用利福霉素类抗生素会使其在水产品和水环境中积累，进而通过食物链进入人体，对人体造成伤害。因此，迫切需要开发一种可以快速检测和吸附生物体液中的利福霉素类抗生素的多功能荧光共价有机框架（COF）。此外，监测药物中的利福霉素类抗生素对于确保药物质量也是必要的。

在本研究中，我们采用基于氯化胆碱（ChCl）-六氟异丙醇（HFIP）合成的低共熔溶剂（DES）代替常规有机溶剂合成了 COF-OMe，再用（4-乙炔基苯基）硼酸进行合成后修饰，首次开发了一种高结晶度的苯硼酸功能化的 BA@COF。该方法提倡无催化剂的绿色化学理念，结合后修饰的策略，制备出一种兼具彩色荧光和吸附功能的 BA@COF，用于传感和吸附利福霉素类抗生素。随着苯硼酸的引入，BA@COF 在各种溶剂中表现出更好的分散性能，对三种利福霉素类抗生素的检测灵敏度和吸附量均高于修饰前的 COF-OMe。最后，BA@COF 被成功用于传感和吸附水生生物、药物和血液各种实际样品中的三种利福霉素类抗生素。此外，BA@COF 还表现出检测乙醇中水分的能力，获得较宽的检测范围（0.1−50%, v/v）。最后，我们结合 Materials Studio 计算机模拟计算结果对 BA@COF 的传感-吸附机制进行了详细的探讨。

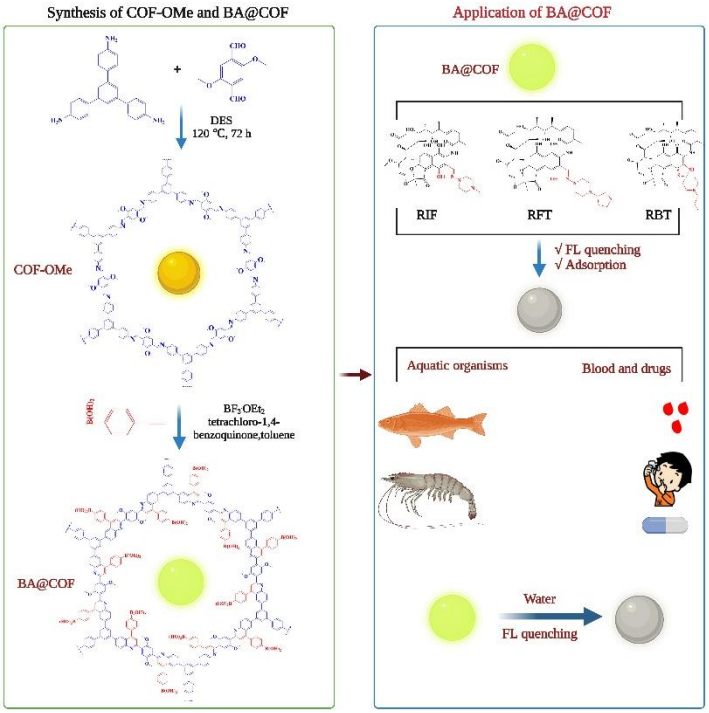


图 1. BA@COF 的合成（左）和应用（右）

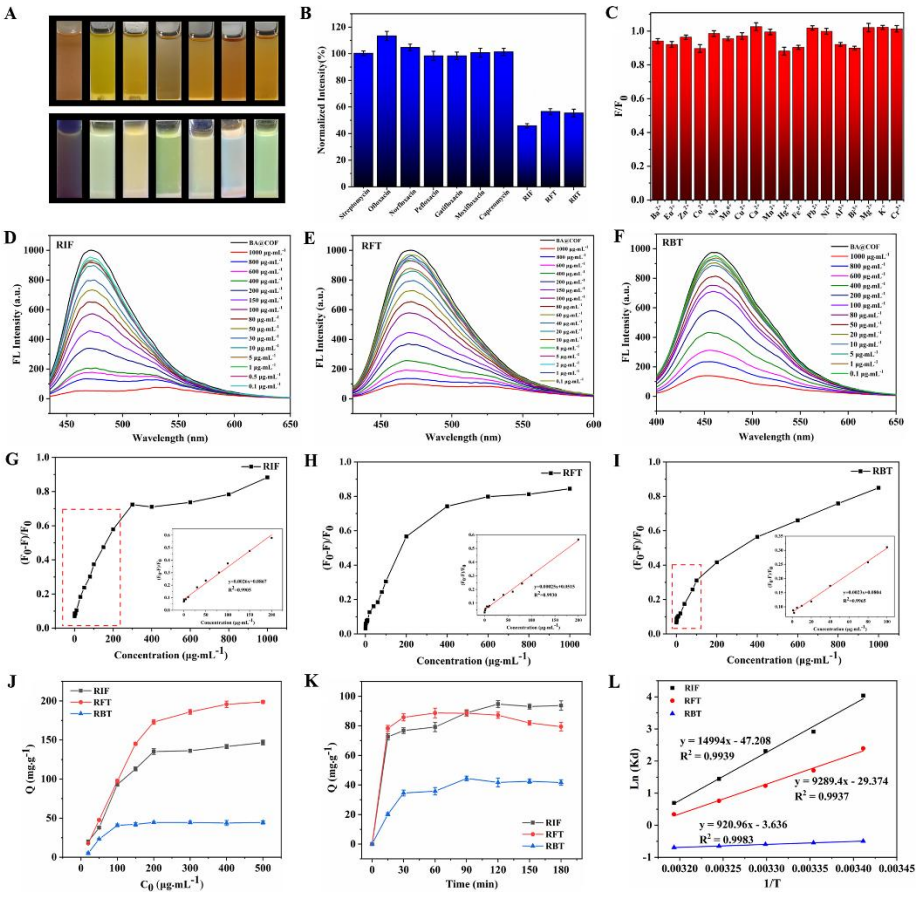


图 2. A. BA@COF 的彩色荧光。B-C. BA@COF 的传感选择性和抗干扰能力。D-I. BA@COF 检测三种抗生素的荧光光谱和标准曲线。J-K. BA@COF 对三种抗生素的静动态吸附。L. BA@COF 对三种抗生素的吸附热力学模型

关键字 荧光共价有机框架；苯硼酸后修饰；利福霉素类抗生素；传感；吸附

参考文献

1. A. Ganguly, K.Y. Hwa, A. Santhan, T.S.K. Sharma, Chemosphere, 2022, 307, 135373.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

基于 PFE 结合 GC × GC/TOF MS 的富油煤中小分子化合物结构解析

段江粉、任旭、冯秀琳、杨金辉*
新疆大学

富油煤有机组分的详细表征对于煤的清洁、高效和增值利用至关重要。采用 7 种有机溶剂对淖毛湖煤进行加压流体萃取（PFE），得到 7 种煤可溶物。采用全二维气相色谱/飞行时间质谱连用技术（GC×GC/TOF MS）对可溶物进行了表征。

萃取率结果为: 吡啶＞甲醇＞丙酮＞异丙醇＞四氯乙烯＞乙腈＞正己烷，综合考虑，低沸点，高极性，高萃取率的甲醇为最佳萃取剂。GC × GC/TOF MS 分析结果显示，淖毛湖煤萃取物主要由三类化合物组成:脂肪烃、芳香烃和含杂原子化合物。脂肪烃主要由正构烷烃、少量烯烃和取代环烃构成，芳香烃主要为短链取代的苯和萘。含杂原子化合物种类丰富，主要为一些长链的烷酸甲酯、醇醚、酚、酮、羧酸、醛、含硫和含氮化合物。结果表明加压流体萃取溶剂用量少，萃取效率高；与常规的 GC/MS 分析技术相比，GC×GC/TOF MS 提高了分离能力，克服了共洗脱现象，揭示了煤等复杂混合物更多的结构细节；萃取没有破坏淖毛湖煤大分子结构，煤中的小分子物质以烃类为主,而氧、硫等杂原子多数存在于煤大分子中。

关键字 富油煤；GC×GC/TOF MS；小分子化合物

参考文献

1. L.Yan, Y.Zhang, H.Yan, etc.ACS Omega 2020, 5 (48), 31085-31091.
2. W.Zhang, Y.Cheng, J.Kong, etc. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 2023, 174.
3. H.Li, S.Liang, Y.Hou, etc. Fuel Processing Technology 2022, 227.
4. H.Xu, X.Bai, X.Fan, etc. Journal of the Energy Institute 2024, 113.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

同时进行吸光、荧光和非接触电导检测的泰勒弥散分析系统

曾梓涵、张政、尹邦杰、张敏*
桂林电子科技大学

泰勒弥散分析（Taylor dispersion analysis，TDA）是一种快速、直接和便捷的方法来鉴定物质的扩散系数（D）和流体动力学半径（RH）的分析方法。TDA 的常规检测手段有分光检测（AD），荧光检测（FD）和电容耦合非接触电导检测（C^4D）等。不同的检测方法对样品的选择性不同，如 AD 需要分析物在特定波长下有吸收；FD 的分析物需要具有荧光活性；而 C4D 对带电分析物具有普适性，可以用于无 AD 和 FD 信号的物质的检测。本研究发展了一种新型的 TDA 系统，利用 3D 打印技术将 FD，AD 和 C^4D 集成在同一检测窗口的流通检测池，并与毛细管电泳装置（CE）结合，组成一个多功能的 TDA 系统，用于提高 TDA 应对复杂样品的灵活性和可靠性。

为验证 TDA 多功能系统的能力，分别在 TDA 模式（无 CE）和 CE-TDA 模式，以牛血清蛋白（BSA）作为标准分析物，比较了三种检测方法和不同缓冲溶液对 TDA 的结果影响。在 C^4D 检测中，小分子将显著干扰 C^4D-TDA 的结果，而这种干扰在 AD-TDA 和 FD-TDA 中并不明显。CE 能够将 BSA 与小分子离子分离，有效降低了小分子离子对 C4D 信号的干扰。此外，在 AD 和 FD 信号的帮助下，该系统展示了混合 C^4D-TDA 信号的分辨率，成功分辨出葡萄糖酸盐完全被其他化合物（如 BSA，荧光素等）覆盖的峰。最终结果表明，该多功能系统结合了三合一组合检测和电泳为 TDA 的混合物分析提供了强大的工具。

关键字 泰勒弥散分析，电泳，非接触电导检测

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

热分解法制备表面多级孔 UiO-66@SiO_2 核壳固定相及其色谱分离性能

吕俊辉、杨子龙、刘家玮、白泉*
西北大学

金属–有机框架(MOFs)作为新型的多孔材料，由于其比表面积大、孔径尺寸可调以及作用位点丰富等特点可被开发成新型色谱固定相应用于 HPLC 中。然而，由于 MOFs 材料存在形状不规则、孔径尺寸小、粒径分布不均匀的缺点，将 MOFs 材料直接填装进色谱柱导致柱压高、色谱峰宽、柱效低等问题。目前以无孔硅胶为内核，将 MOFs 原位生长在硅胶核表面制备尺寸均匀的 MOFs@SiO2 复合微球成为解决上述问题的有效方法[1]。MOFs@SiO2 的核壳型结构既能保留 MOFs 材料的分离特性，又可具备球形基质材料的良好填充性能。而 MOFs 较小的孔径，限制了溶质在孔道内的扩散和传质速度，导致较大的探针分子难以进入 MOFs 的孔道内与其产生相互作用，严重影响了色谱分离性能。因此，扩大 MOFs 材料的孔径，克服尺寸排阻效应对分子扩散的限制，是提高 MOFs 核-壳类色谱固定相分离性能的关键[2,3]。本研究利用 UiO-66 与 UiO-66-NH2 的热稳定性差异，采用热分解法结合原位生长法，建立了壳层厚度可控、孔径可调的多级孔 UiO-66@SiO2 核壳固定相制备的新方法。首先，以 2.5 μm 无孔硅胶为核，通过 3-氨丙基三乙氧基硅烷(APTES)对硅胶表面进行改性，得到氨基硅胶(SiO2-NH2)。将 SiO2-NH2、金属离子 Zr4+、对苯二甲酸(热稳定性配体)和 2-氨基对苯二甲酸(热敏性配体)混合一锅反应，成功制备微孔 UiO-66/UiO-66-NH2@SiO2 核壳固定相。通过控制热分解温度和加热时间，利用 2-氨基对苯二甲酸的脱羧反应在框架内形成缺陷，从而制备出具有不同形貌和孔径的多级孔 UiO-66@SiO2 核壳微球。分别以微孔 UiO-66@SiO2 和多级孔 UiO-66@SiO2 核壳微球作为固定相，通过对烷基苯同系物、不同极性的四种小分子等溶质进行分离考察了两种固定相的色谱分离性能。结果表明，相较于微孔 UiO-66@SiO2，多级孔 UiO-66@SiO2 柱不仅可以实现了对上述溶质的基线分离，而且色谱峰更窄，分离度更高，表现出更好的分离能力和柱效。丙苯在多级孔该柱上的理论塔板数达到 10373 块·m-1，而在微孔 UiO-66@SiO2 柱上仅有 1860 块·m-1。表明多级孔的结构有利于提高溶质分子扩散速度和传质效率，进而提升色谱分离性能。本研究为提升 MOFs 固定相的分离性能并拓宽其应用范围提供了新思路。

关键字 UiO-66，表面多级孔，核壳微球，固定相，热分解法

参考文献：

1. X.Q. Zhang, Q. Han, M.Y. Ding, *RSC Adv.*, 2015, 5, 1043–1050.
2. H. Rehman, C. Y. Zhang, X. W. Liu , Y. Liu , J. W. Liu , C. W. Tang, Q. Bai, *J. Chromatogr. A*, 2023, 1709, 464377
3. Y. Liu, J. Li, J. W. Liu, C. W. Tang, Q. Bai, *Microchem. J.*, 2024, 204, 111110

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

基于 MOFs 的 OT-ACEC 药物筛选新方法研究

王敏 1,2、夏之宁*3
1. 西南医科大学附属医院药学部
2. 西南医科大学药学院
3. 重庆大学药学院

方法适用体系有限、生物大分子耗量大且无法回收使用以及生物大分子易受外部环境影响而失活变性等是当前亲和毛细管电泳（ACE）方法在药物筛选研究中不可避免的局限。通过涂覆或键合毛细管内壁以实现生物大分子固定化的固定化生物大分子的开管亲和毛细管电色谱（OT-ACEC）方法有效解决了上述问题。但 OT-ACEC 方法的研究尚处于起步阶段，现有方法仍面临开管亲和毛细管稳定性差、使用寿命短以及柱内生物大分子负载量低等问题。受开管毛细管电色谱（OT-CEC）方法采用具有较大比表面积和多孔结构的柱填料以提高吸附位点数和柱容量启发，本研究首次提出引入固载载体的 OT-ACEC 方法。固定载体的引入有望提高生物大分子负载量和稳定性并延长生物大分子与配体相互作用时间而改善配体分离选择性。而固定化载体的选择直接关系到 OT-ACEC 筛选配体的识别能力和色谱分离效率，是该方法的关键。

金属有机骨架材料（MOFs）是一种具有高比表面积和孔隙率、结构多样性和可调孔径的多孔纳米材料。MOFs 在固载生物大分子以保持酶活性和稳定性以及作为 OT-CEC 固定相材料以改善分离性能和增加柱容量等方面展现出巨大应用潜力。基于此，本研究创新性地发展了 MOFs 固载生物大分子的 OT-ACEC 方法，开展了系列基于 MOFs 固载的新型生物分子固定化 OT-ACEC 方法研究，在新型固定化生物分子 OT-ACEC 研究及其应用方面所取得的进展包括：1）构建了基于 MOFs 表面固载的 OT-ACEC 策略，并用于药物与蛋白间相互作用的快速研究。通过引入聚多巴胺和 MOFs，将蛋白固定于毛细管内表面，增加了固定蛋白的量并有效地保持了蛋白的生物活性。通过所构建的基于 MOFs 表面固定化蛋白的 OT-ACEC 方法可快速筛选化合物，并具有潜在评价未知药物活性的能力。2）建立了基于 MOFs 原位封装生物大分子的 OT-ACEC 药物筛选方法。采用仿生矿化法原位封装凝血酶策略制备了 ZIF-8 封装凝血酶的 OT-ACEC 柱。相较于物理吸附法，仿生矿化法 MOFs 原位封装生物大分子策略在提升生物大分子的负载量、稳定性以及重复使用性方面优势更甚。本研究探索了固定化生物大分子的亲和毛细管电泳方法，初步体现了其在药物筛选中的应用潜力，可为靶点药物分析和筛选方法的开发提供了新思路。

关键字 亲和毛细管电泳；生物大分子固定化；金属有机骨架材料；药物活性筛选

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

基于共价有机骨架材料的前处理新方法的开发

高蝶*1、夏之宁 2
1. 西南医科大学
2. 重庆大学

样品前处理作为痕量分析的关键步骤，所选方法应具有高选择性、高富集效率、对目标物吸附能力强的特点。在样品前处理中，吸附剂的选择尤为重要，合适的吸附剂能提高萃取的选择性和提高吸附效率。共价有机骨架（Covalent organic frameworks, COFs）是一类通过化学共价键连接有机单元而形成的有序结晶多孔材料。因具有高比表面积、可调的孔隙尺寸、密度低、高化学稳定性以及表面易修饰等特点，在药物前处理领域显示出可观的前景。然而，常规的 COFs 在溶剂中分散性差且对目标成分选择性不高，使其对目标物质的吸附受到较大影响。因此，本课题组针对上述 COFs 存在的问题，研制了不同种类 COFs，并对它们进行了后修饰，通过引入特定基团，改善了所制备 COFs 的分散性能；通过引入 MIP 特异性结合位点、MXene、咔唑功能基等，制备出基于 COFs 的复合材料或后修饰材料，实现目标成分的选择性富集和灵敏检测。例如，我们以 1,3,5-tris (3,3″,3‴-trifluoro-4′,4″,4‴-tris (p-formylphenyl)benzene) 和 2,5-bis (allyloxy) terephthalic hydrazide 为前驱体，通过优化影响 COF 结晶度的参数包括溶剂组分的摩尔比、溶剂的体积、反应温度和反应时间，制备出具有高结晶度和高比表面积的 F-COF。通过引入具有线性选择性的卤素键和具有空间选择性的 MIP 结合位点，成功制备出对四溴双酚 A 具有高特异选择性吸附能力的 SiO2@F-COF@MIP，结合 HPLC-DAD，实现了水样和鱼肉样品中四溴双酚 A 的高选择性富集和高灵敏检测。以 TAPB 和 TPB 为前驱体，通过优化一系列影响结晶度的条件，首次在室温下合成了高结晶度的 COF，并通过共价修饰，将氨基化 MXene 修饰到 COF 上形成 COF@MXene。该材料比表面积大，作用位点丰富，可以用于氟喹诺酮类抗生素的高效富集。实际样本（药片、鸡蛋、环境水）的分析结果证实了 COF@MXene 广阔的应用前景。

关键字 共价有机骨架材料，样品前处理，吸附，灵敏检测

参考文献：

1. Y.M. Zou, L.C. Wang, Q.Y. Liu, Y.L. Yang, D.D. Wang, Y.Q. Tao, M.Y. Wang, L.L. Li, M. Tian, J.J. Wang, Z. Wen, X. Li*, D. Gao* , Fusion of materials with directional-selection and family-selection properties to prepare covalent organic framework composite with superior selective adsorption performance, Sep. Purif. Technol. 2024, 329, 125169.
2. Y.L. Yang, Q.Y. Liu, Y.M. Zou, M. Tian, L.C. Wang, L.L. Li, M.Y. Wang, Y.Q. Tao, J.J. Wang, Z. Wen, F.M. Ke, D.D. Wang*, D. Gao*, Covalent assembly synthesis of covalent organic framework and MXene based composite for the adsorption of fluoroquinolones, J. Environ. Chem. Eng. 2023, 11(5), 110975.

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

细胞外囊泡的规模化制备新方法与应用

刘路宽*1、王立志 1、夏俊豪 1、关心 1、朱梦茹 1、刘佳 1、杨开广 2、张丽华 2、刘晶 1
1. 大连医科大学附属第一医院
2. 中国科学院大连化学物理研究所

细胞外囊泡（EVs）作为细胞疗法的创新替代方案，因其携带丰富的生物活性分子而备受瞩目。EVs 的规模化分离是其功能研究和生物应用的前提。而传统方法则受到通量低、产量低和潜在损伤的制约。为了克服这些难题，我们发展了多种 EV 制备新技术。首先，我们创新性地利用模板印迹技术和静电相互作用原理，设计出一种带有纳米空腔的人工抗体。该抗体能够高效捕获尿液和细胞培养基中的外泌体并进行蛋白质组学分析。这种人工抗体在 EV 捕获方面的效果与商业沉淀法相当。其次，我们提出了一种基于离子渗透压原理的连续浓度富集策略（IOSCE），该策略巧妙结合了超强吸水聚合物（SAPs）的浓缩能力和带电聚合物的富集特性。与传统的超速离心法相比，IOSCE 不仅显著提高了 EVs 的分离产量（高达 2.64 倍），而且成功分离出具有强大生物活性的间充质干细胞源性 EVs。这些 EVs 在调节 RNA 代谢和翻译过程中展现出卓越的神经炎症抑制能力。最后，我们利用先进的机械挤压技术和药物加载方法，成功制备了富含线粒体蛋白和传统中药单体的间充质干细胞源性纳米囊泡。通过一系列体外和体内实验验证，我们发现这些载药纳米囊泡在促进细胞增殖与迁移、血管生成、调节炎症反应以及增强抗氧化能力等方面具有显著效果，为治疗辐射和紫外线引起的皮肤损伤、糖尿病皮肤溃疡等皮肤疾病提供了新的可能性。

关键字 细胞外囊泡，分离分析，规模化制备，蛋白质组，皮肤损伤

分会场：6.复杂体系的色谱分析
交流形式：墙报

整合富集多重中心切割二维液相色谱联用串联高分辨率质谱和分子网络技术提升新天然产物的发现效率-以工业大麻为例

陈应庄*
湖南师范大学

天然化合物的高效发现对于推动新药研发具有重大意义。然而，由于常量化合物的掩盖与干扰，系统性挖掘天然药物中广泛存在的微量新化合物面临巨大挑战。针对天然药物微量成分分析，传统方法存在操作复杂、通量低、鉴定效率不高等问题。为了克服这些难题，本研究基于自主研发的高兼容性二维调制器和常规液相色谱，构建了一种灵活、高效的富集-多中心切割二维液相色谱-高分辨质谱联用系统((mLC-LC)-HRMS) 。该系统不仅能够准确去除天然药物中的常量组分，还能高效富集微量成分、进行精细分离，并通过高分辨质谱技术进行检测，获取高质量的微量组分质谱数据。进一步，结合分子网络挖掘技术，有望显著提升微量化合物的解析效率和新化合物的发现能力。为验证新方法的可行性与优势，本研究以工业大麻为对象进行了系统性研究。利用(mLC-LC)-HRMS 对样品在一维分离中的低丰度组分进行了 10 次富集操作，并完成了二维分离与高分辨质谱分析。实验结果证明，与传统分析方法相比，新发展的方法能够提供更丰富、更高质量的质谱数据。通过与现有文献的对比及分子网络(MN)分析，共鉴定出 107 种已知和潜在的大麻素，数量远超传统一维分析方法。综上所述，将(mLC-LC)-HRMS 与 MN 技术相结合，在天然药物微量成分的发现上具有广阔的应用前景。特别值得一提的是，所构建的二维系统在两个维度上实现了完全解耦，具有独立线性放大至制备级别的潜力，这为结合分析二维系统挖掘新化合物信息，进行潜在新化合物的精准导向分离提供了可能。

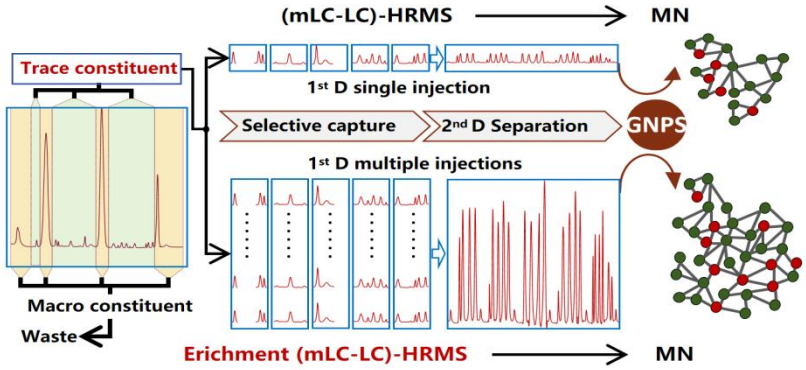


图 1.整合(mLC-LC)-HRMS 与 MN 技术挖掘新天然化合物原理示意图

关键字 二维液相色谱；调制器；微量天然产物；多心切割；工业大麻；基于特征的分子网络

参考文献：

1. M. Chen, T. Wang, W. Wang, et al. *Chromatographia* **2022**, 85, 931-937.
李俊. 中草药, 2022, 53: 1163-1172

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

木质通道用于小分子的选择性识别、分离和传感

宋焱焱*、郭俊丽、杨媚、赵俊健、代振清
东北大学

糖和氨基酸是生命活动的基本单元，通常具有互为手性镜像的对映体结构。虽然这些对映体具有相同的物理和化学性质，但它们在生理上却表现出完全不同的性质。因此，发展高选择性、高灵敏且低成本的手性小分子的识别、分离和传感平台对生物医学和药物检测与研发具有重要意义。课题组在近期的研究中以树木传输水分和养料的微米级通道为平台，成功制备了一系列基于天然木质通道的电化学传感体系，不但可以用于对微生物和蛋白质的快速检测，还实现了对葡萄糖、氨基酸等小分子对映体的选择性识别与传感。在此基础上，利用在木质通道上设计不同功能区，例如：手性 MOFs 改性的通道部分作为分离区，炭化的木质通道部分用作检测电极，发展了集对映体在线识别、分离与检测为一体的小型化器件。

关键字 木质通道，分子识别，对映体分离，电化学检测，一体化器件

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

微流控单细胞病毒学研究

刘武*
山东大学

仅在过去二十年间，世界范围内已经见证了多次 RNA 病毒的爆发，具备广谱抗病毒活性和高耐药屏障的药物治疗方法的重要价值不言而喻。然而，病毒感染过程的动力学及其抑制在细胞层次上存在随机性。在单细胞水平上解析病毒感染过程的异质性将可以鉴定被掩盖但具生物意义的表型及其在病毒感染和/或抗病毒耐药性形成中的独特作用，从而为病毒-宿主相互作用机制的阐明与抗病毒药物、疫苗的开发提供全新的机遇。

为此，我们开发了一种多层微流控芯片用于捕获、隔离并长期培养约 5000 个独立活细胞，通过时序荧光成像实现了单细胞层次上病毒感染动态过程的高通量监控与动力学定量分析。利用这一平台，定量考察了细胞内病毒增殖的启动、速度、与产量等动力学信息，并针对抗病毒药物治疗进行单细胞分析。相比常规细胞群体水平上的药物效能分析通常仅测定药物的半数抑制浓度（IC50），单细胞分析可以揭示抗病毒药物的作用机理、耐药性形成、药物组合的协同作用等方面重要信息，显示出前所未有的分辨率。考虑到传统研究范式从分子到机制需要付出的大量努力，单细胞分析有望对抗病毒药物的开发产生转化性影响。

病毒致病过程除了病毒在细胞内的复制，另一环节则是病毒从已感染细胞扩散至未感染细胞。在上述单细胞内病毒复制动态研究的基础之上，我们又发展了一种微流控芯片可以将一个已感染细胞和一个未感染细胞配对，从而在单细胞水平上追踪并定量分析病毒感染在细胞间扩散的动态过程，实现了对整个病毒生命周期的全面考察。通过量化分析与比较发现非溶解性模式不仅扩散周期更短，病毒的复制产量和速度增长幅度也更大。此外，病毒衣壳抑制剂可以有效阻断溶解性扩散，但对非溶解性扩散无明显影响。初步研究表明非溶解性扩散利用了非经典的自噬通路实现。通过清晰地分辨两种扩散模式，我们正在进一步研究与非溶解性扩散相关的影响因素与通路，从而推动病毒感染发病机制的理解与病毒性疾病传播的药物阻断。

关键字 微流控，病毒感染，单细胞分析，抗病毒药物

参考文献

1. W. Liu, M. U. Caglar, Z. Mao, A. Woodman, J. J. Arnold, C. O. Wilke, C. E. Cameron. *Sci. Adv.*, **2019**, 5, eaax4761.
2. W. Liu, H. He, S.-Y. Zheng. *Trends Biotechnol.*, **2020**, 38, 1360-1372.
3. W. Liu, C. O. Wilke, J. J. Arnold, M. S. Sotoudegan, C. E. Cameron. *bioRxiv*, **2024**, 2024.09.25.615011.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

微流控类器官芯片系统中的器官互作研究

张秀莉*[1]、罗勇[2]
1. 苏州大学
2. 大连理工大学

微流控器官芯片为类器官间的相互作用提供了一个理想平台，其高度兼容药物评估的特性，正使得基于微流控芯片的类器官系统成为一个极具前景的方向。理论上，培养基的循环能够确保类器官之间实现充分的相互作用。然而，在实际的类器官芯片上，类器官间的相互作用并非总能被明确观察到。针对这一问题，报告人团队构建了多类器官芯片系统，深入研究了微流控芯片设计对类器官相互作用的影响和规律，并据此研发出了一种新型微流控多类器官芯片。该芯片相比传统设计，能够更有效地提升肝类器官 CYP3A4 酶的含量。此外，报告人团队还根据新药研发中面临的毒效药效问题，构建了免疫-肝微生理系统，发现动物上无毒、临床上有毒的特异质型肝毒性药物，能够在近临床血药浓度，通过药物-免疫细胞-肝细胞之间的协同作用，诱发严重的肝损伤，而结构相似药物并无此效应。

关键字 类器官芯片，器官互作，特异质型肝毒性评价，中药毒性生物质控

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

新型纳流控器件的制作及其在生物分析中的应用

王琛*
南京师范大学 化学与材料科学学院

纳流控是近二十年来发展起来的一门新兴学科，是对纳米尺度下物质传输性质进行研究和应用的科学。在能源转化、海水淡化、样品分离及生物传感中发挥着重要作用。在纳流控的研究中，由于受到纳米空间的限制，对所输运物质具有尺寸选择性；同时，通道内发生双电层重叠，同种电荷被排斥，产生了对离子的选择性传输。纳米通道的尺寸效应和电荷效应，共同决定着纳流控的物质传输性质。利用这些特性，不仅可以对纳通道中的流体进行操控，实现样品分离；而且针对物质传输特性的分析，还可以实现样品检测。常规的纳流控分析方法，是在纳米通道内组装分子，基于分子识别前后，通道内发生的体积变化，实现传感检测。然而，由于纳米空间的限制，分子组装困难，容易发生管道堵塞的现象。此外，基于体积变化的离子流检测，灵敏度不高。所制备的器件结构和尺寸固定，难以灵活调控物质传输性质。对此，我们构建了不对称纳米通道器件，发展端面分析新方法。让探针修饰和分子识别发生在纳米通道的端面。这样不仅可以有效解决通道内分子组装难、识别难的问题，还可以利用不对称纳米结构的离子整流特特性，进行高灵敏的分析检测。此外，通过引入功能材料界面，改变材料的结构和性质，实现了对物质传输性质的精准调控和高效分析。

关键字 纳流控；生物分析；端面分析方法；不对称传输

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

微流控可控多腔室液滴的制备及其应用研究

林玲*
北京工商大学

受到真核细胞结构和位置组装的启发，在生物医学应用中将多用途异质水凝胶材料配置为多室颗粒已受到广泛关注。精确的空间布置极大地拓宽了细胞和生物材料组装体的设计参数，从而促使人们更加深刻地理解物理生物学特性之间的相互作用。然而，在微空间内构建多尺度、分层的微小分支立体单元仍然具有挑战性。因此，设计具有足够性能的三维生物体外模型用于观察细胞间相互作用，对于细胞分析领域的研究具有重要的意义。这里我们开发了一种创新的三维微流控液滴制备装置，该装置由上层的微流控芯片和下游的基于流动聚焦模型的毛细管装置组成。上层微流控芯片负责驱动和配置多相液体进入系统，精确定义颗粒的内部微观结构，而下游的毛细管装置则专注于生成理想的球形水凝胶颗粒。这项微流体技术不仅展现了其灵活的设计理念，而且其生产过程简便易行，能够轻松制备具有十个甚至二十个隔间的复杂粒子。通过封装不同的生物材料，该装置展示了多室粒子在多种应用中的巨大潜力。例如：将微粒用于多组分分析，通过在 microRNA 分析中展现了其多目标检测的能力，证明了其高度的特异性和灵敏度，这项多目标分析在单颗粒水平上进行，有效避免了常规标记干扰对生物测定的影响。同时，为了克服在分析过程中颗粒随机朝向带来的困难，开发了一种具有自定向能力的含气泡多隔室凝胶微球。此外，在拓扑纹理和基质胶修饰的联合作用下，微颗粒表面可诱导内皮细胞粘附并形成单层内皮屏障。初步构建的肝微颗粒组织模型中，内皮屏障的半通透性得到了证实，肝功能也得到了增强。利用这些模型再现了内皮屏障对前体药生物转化的敏感抑制作用。除此之外，其他类型的细胞和材料也可以封装在这些水凝胶中， 实现微球在模拟人体器官功能方面的应用潜力，也为未来的生物医学研究和药物测试开辟了新的途径。

关键字 微流控、多腔室微球、液滴、细胞分析

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

基于光热调制激光背向散射干涉的微体积生化分子检测技术与系统

张校亮*、史小芳、高晓光、李晓春
太原理工大学

生化分子的微体积、高灵敏度检测对于水质安全、疾病早期诊断等领域具有重要意义。激光背向散射干涉是一种具有高灵敏度的生化检测技术，但该技术易受到环境温度波动的影响[1-3]。本研究中，我们将光热效应和激光背向散射干涉技术相结合，发展了新型的基于光热调制激光背向散射干涉的微体积生化分子检测技术,通过提取特定调制频率下光热信号的幅值来避免环境温度波动的影响，系统地研究了光热调制的多个参数对检测信号的影响，结合显色反应实现了微体积的重金属离子、肾病生物标志物等生化分子的检测。通过将检测装置小型化与集成化，进一步提高了该检测技术与系统的稳定性。

关键字 光热效应；激光背向散射干涉；生物标志物；定量检测

参考文献

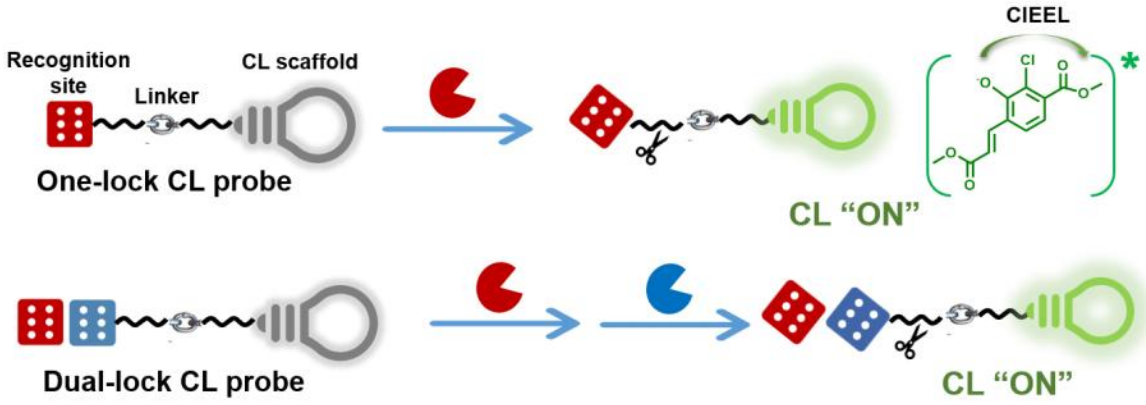
1. D. J. Bornhop, J. C. Latham, A. Kussrow, et al., Science, 2007, 317, 1732-1736.
2. R. C. Dunn, Anal. Chem. 2020, 92, 7540-7546
3. U. Kim, J. Song, D. Lee, et al., Biosens. Bioelectron. 2015, 74, 469-475.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

蛋白酶激活的化学发光探针设计及体内外分析

曹志娟*、张志辉、孙茹、杨雅诗、徐姝琳
复旦大学

蛋白酶在人体蛋白中约占据 2%，作为一种生物分子，可在体内水解蛋白肽键，从而参与细胞分裂、生长、凋亡和迁移等生长过程，因此其水平的异常变化与疾病的发生发展密切相关，可作为疾病诊断的生物标志物，也常作为靶标辅助药物的研发，例如成纤维活化蛋白酶、亮氨酸氨基肽酶和二肽激酶 IV 与肝部疾病相关。研究小组针对疾病发展过程中异常变化的蛋白酶水平需实时监测的问题，结合金刚烷-二氧杂环丁烷探针骨架，设计了一系列可实现目标物快速、选择性、灵敏性检测的蛋白酶激活型化学发光探针，并据此发展低成本、高通量的药物筛选平台，以期为疾病诊断和药物开发提供一种可选择的方法。



关键字 蛋白酶，化学发光，探针，疾病诊断，药物筛选

参考文献

1. Al-Awadhi FH, Luesch H. Targeting eukaryotic proteases for natural products-based drug development.
Nat Prod Rep. **2020**, 37(6): 827-860.
2. Cudic M, Fields GB. Extracellular proteases as targets for drug development. *Curr Protein Pept Sci.* **2009**,
10(4): 297-307.
3. Wu, L., Huang, J., Pu, K. et al. Dual-locked spectroscopic probes for sensing and therapy. *Nat Rev Chem*
2021, 5, 406–421.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

微流控肿瘤液体活检与纳米药物体内命运分析

宋玉君*、卢强兰、曾菲、何冠中
南京大学

肿瘤诊断和治疗监测面临新的挑战。我们通过发展新型微流控技术，着力解决肿瘤液体活检和治疗监测的难题。在肿瘤液体活检方面，构建了酶负载的金属有机框架辅助的单细胞微流控芯片用于高通量单细胞代谢分析，发展了金属有机框架-DNA 生物条形码技术用于肿瘤标志物的高灵敏检测，制备了基于可识别细胞外囊泡的纳米界面微流控平台用于肿瘤细胞外囊泡的快速分离检测，构建了人工生物标志物的微流控平台用于肿瘤尿液监测。在纳米药物体内命运分析方面，我们开发了多种基于微流控平台的纳米药物制备系统，可实现 MOF，HOF 和脂质体等纳米药物的连续可控制备，发展了模拟体内肿瘤病理环境的仿生微流控芯片和器官芯片技术，用于分析纳米药物在体内的靶向、渗透和代谢等行为，为纳米药物的临床开发提供新的筛选平台。

关键字 微流控；液体活检；肿瘤诊断；器官芯片

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

自动化检测阿尔兹海默症 miRNA 的数字微流控-化学发光法

金燕*、海仁沙•麦麦提依力
陕西师范大学

阿尔茨海默症（AD）是一种已知的老年性痴呆，会导致严重的记忆丧失和认知障碍。到目前为止，AD 还没有有效的治疗方法。研究发现，早期干预可以延缓 AD 的发展。因此，建立筛查 AD 的自动化检测方法具有重要意义。数字微流控（DMF）可通过介电润湿作用自动化操控离散液滴，实现液滴的混合、反应和分裂等操作。将 DMF 与化学发光检测技术相结合，可充分发挥 DMF 自动化操控液滴的能力，建立自动化检测 AD 相关 miRNA 的 DMF-CL 法。本研究设计了三链 DNA 探针，当 AD 相关 miRNA 与三链 DNA 中发夹核酸的环部互补杂交后，释放出富含 G 碱基的单链 DNA（GDNA）。GDNA 在钾离子和氯化血红素（hemin）存在时，形成 G-四链体-hemin DNAzyme，可催化鲁米诺与过氧化氢化学发光反应。根据化学发光信号的变化，可无需标记、自动化检测 AD 相关 miRNA。由于 DMF 可自动化操控液滴，DMF-CL 核酸检测法大大减少了试剂用量和人工操作，省时省力。此外，原位产生 G-四链体-hemin DNAzyme，这样就无需进行额外标记和修饰，节约实验成本。因此，该方法可自动化、低成本检测 AD 相关 miRNA，将为疾病相关 miRNA 检测提供新方法。

关键字 数字微流控 化学发光 阿尔茨海默症 miRNA

参考文献

1. M. G. Pollack, A. D. Shenderov, R. B. Fair, Lab Chip, 2002, 2, 96-101.
2. B.Yang, L.Shi, Q.R. Tang, W. Liu, B.X. Li, C.Y. Yang, Y. Jin, Lab Chip, 2023, 23, 785-792.
3. B.Yang, L.Shi, Q.R. Tang, W. Liu, B.X. Li, C.Y. Yang, Y. Jin, Sensor. Actuat. B-Chem., 2023, 389,133905

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

8min 超快速核酸扩增系统

黄绍磊、方策、肖林、张东旭*
厦门大学

核酸检测作为一种分子诊断方式，由于其特异性强灵敏度高的优势，已经应用于传染病诊断、肿瘤早筛等多个领域，在新冠疫情中成为了诊断金标准。实时荧光 PCR (polymerase chain reaction) 技术作为临床上最常用的核酸检测方法，其耗时约为 1~3 小时，这严重限制了其在医院门诊、急诊救护等 POCT (point of care testing) 场景下的使用。通过控制生物反应体系的温度变化来完成 PCR 反应的变性-退火-延伸过程，能够实现微量核酸分子在短时间内的大量扩增，因此提高微量液体的变温速率是缩短 PCR 反应时长的关键。目前已经研发出了固定微腔型、微流道型、热对流型等多种类型的快速扩增系统，但仍存在较多问题需要解决：扩增时间大多超过 15min、部分系统无法进行实时荧光采集以进行定量检测、样本量小或扩增效率低下使得临床检测灵敏度不足、耗材无法大规模生产和使用等。

本研究着力于提高微量液体的变温速率，设计了超快速双温区实时荧光 PCR 系统，通过两个不同的温区进行切换实现大的温差变化，通过控制加热片和风扇实现单个温区的小温差变化，在设置两个温区的控制策略后，能够大幅缩短 PCR 各反应阶段之间的切换时间。除此外，该系统还能够兼容实时荧光检测，用于定量分析。本研究还探究了影响液体变温速率的关键因素为液体厚度和薄膜的厚度，并考虑批量生产制造的各种因素，设计了容量为 50 μL 的扩增腔室芯片，能够充分保证扩增样本量。

本研究通过所设计的双温区快速变温装置搭配优化后的微流控扩增腔室芯片，大大提高了微量液体的变温速率，平均升降温速率可达 11.99 ℃/s 和 14.57 ℃/s。为了验证系统进行核酸扩增的性能，对 HCMV 样本进行扩增检测并与商用 PCR 仪器 (CFX96 Touch, BIO-RAD, U.S.A) 进行对比，检测时长从 1 h 30 min 缩短至 8 min 45 s，但 Ct 值基本不变。本研究所提出的超快速变温方案能够兼容实时荧光检测，速度快，功耗低，体积小巧，无需复杂部件，具有很强的临床应用潜力。

关键字 核酸检测，扩增，超快速

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

基于多孔板的海藻酸钠凝胶微球在线制备平台及应用研究

程永强*[1,2]、张子威[1]、李晓彤[1]、陈龙宇[1]、邵一凡[1]、张茜[1]、唐波[2]
1. 山东大学
2. 崂山国家实验室

海藻酸钠凝胶微球由于其能够提供仿生微环境，已在三维（3D）细胞培养、药物控释等领域展现出巨大的应用潜能 1。本课题组前期开发了一种基于弯毛细管离心驱动的界面乳化液滴微流控分析平台，具有操作方便，成本低廉，液滴体积可控性强等优势 2。本研究在前期工作的基础上提出了一种基于多孔板的海藻酸钠凝胶微球（AHMs）在线制备平台，并开展原位 3D 细胞培养。Ca-EDTA 复合物作为 Ca^{2+}源用于海藻酸盐链的交联反应，在重力驱动下实现了在线乳化、预凝胶化、自发破乳和固化四个步骤，制备的 AHMs 具有良好的球形度($\Phi = 0.96$)和单分散性(PDI% = 2.35%)。整个 AHMs 无需复杂的微加工，能够直接在多孔板内制备且实现单细胞的包裹，以方便后续的培养和观察，细胞存活率超过 85%。该平台有望成为生物医学和组织工程领域中的通用 3D 细胞培养工具。

关键字 液滴微流控，凝胶微球，3D 细胞培养，交联反应

参考文献

1. Y. Zhu, H. Li, C. Peng, J. Ma, S. Huang, R. Wang, B. Wu, Q. Xiong, D. Peng, S. Huang, J. Chen, *Int. J. Biol. Macromol.*, **2023**, 247, 125727-125743.
2. Z. Zhang, Y. Cheng, X. Li, L Chen, R Xu, X Qi, Y Shao, Z. Gao, M. Zhu, *Anal Chem.*, **2023**, 3028-3036.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

基于微流控芯片的光热超快 PCR 研究

游民黎*
西安交通大学

核酸检测已经广泛应用于疾病诊断、食品安全检测和环境监测中。其中，PCR 因其灵敏度高和特异性好的优势已成为核酸检测的金标准，也是传染性疾病的日常诊断手段。但传统 PCR 技术存在两个缺陷：较长的扩增时间与对大型仪器设备的依赖，这严重限制该技术的应用场景，已满足不了日益增长的核酸检测需求，尤其是在大规模疫情爆发期间。针对以上问题，我们开发了基于微流控芯片的等离子体驱动光热超快 PCR 技术。利用金属纳米材料的光热效应对 PCR 体系进行无接触体加热，将 PCR 扩增时间缩短至 10 分钟以内；基于微流控芯片实现不依赖泵阀且无污染的便携式的核酸扩增检测。研发的微流控超快光热 PCR 检测平台有望为大规模疾病筛查以及食品环境现场检测提供强有力的快检手段。

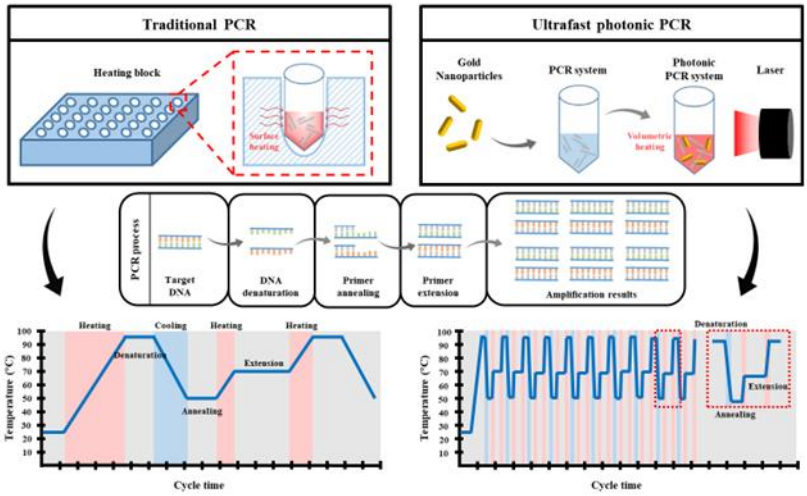


图.1 光热超快 PCR 与传统 PCR 对比

关键字 微流控技术，光热纳米材料，核酸检测

参考文献

1. Chaoyu Cao, **Minli You***, Haoyang Tong, Zhenrui Xue, Chang Liu, Wanghong He, Ping Peng, Chunyan Yao, Ang Li, Xiayu Xu, Feng Xu*. Lab on a Chip 2022, 22(20), 3837-3847.
2. **Minli You**, Pengpeng Jia, Xiaocong He, Zheyu Wang, Shangsheng Feng, Yulin Ren, Zedong Li, Lei Cao, Bin Gao, Chunyan Yao, Srikanth Singamaneni, Feng Xu, Small Methods 2021, 5(5), 2001254.
3. **You, M.**; Li, Z.*; Feng, S.; Gao, B.; Yao, C.; Hu, J.; Xu, F.*, Trends in Biotechnology 2020, 38 (6), 637-649.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

基于微流控质谱技术的细菌耐药性快速检测与机制解析

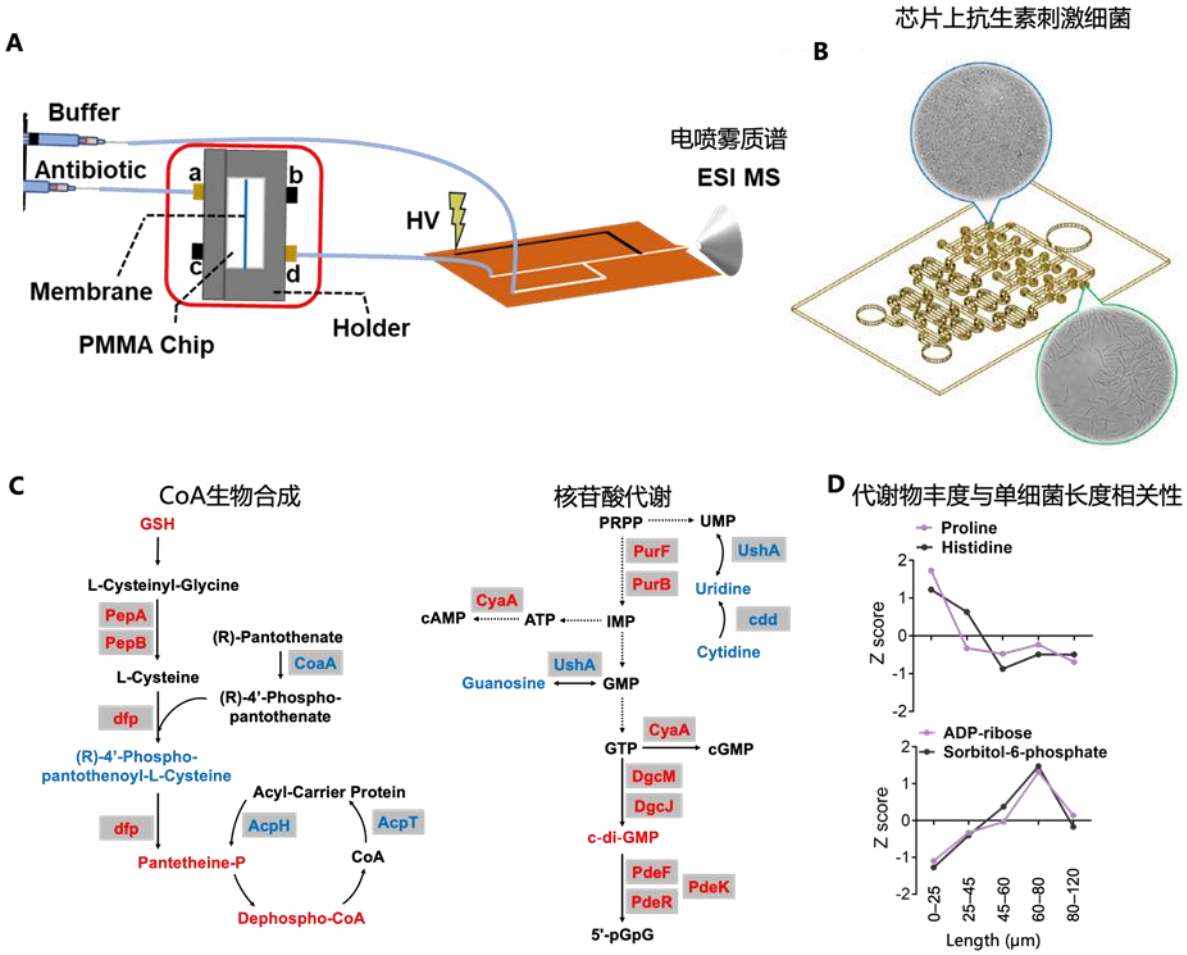
张冬雪、乔亮*
复旦大学

细菌耐药性一直是一个困扰全球的问题。预计到 2050 年，每年将会有 100 万人死于微生物耐药性。我国国家卫生健康委员会颁布的《遏制微生物耐药国家行动计划（2022-2025 年）》中提到，要完善监测评价体系，加强微生物耐药的科技研发。这其中就体现出了细菌耐药性快速分析检测，耐药机制研究这两个关键科学问题。

微流控是一种新兴的技术，具有高通量、自动化等优点，可以与多种分析手段联用，实现细菌的培养、分离及检测。质谱技术具有灵敏度高、检测速度快、应用范围广等优点。基质辅助激光解吸离子化飞行时间（MALDI-TOF）质谱、电喷雾离子化（ESI）质谱都已广泛应用于细菌诊断的研究中，基于质谱的蛋白质组学技术和代谢组学技术也广泛应用于细菌耐药机制研究中。

本研究结合微流控技术与质谱技术，开发耐药性快速检测新方法，并从蛋白、代谢、转录三个层面深入研究耐药菌在抗生素作用下发生应激形变的分子机制。首先，设计合适结构的微流控芯片，实现细菌与抗生素共培养，通过分析抗生素信号及其被细菌代谢后的产物信号，可以快速鉴定耐药菌，并且实现不同菌株耐药性的比较（图 A）1。此外，全面开展耐药机制研究。运用微流控芯片快速筛选抗生素刺激细菌条件（图 B），结合转录组学和蛋白质组学，挖掘细菌耐药相关生物标志物 2；然后运用在线微流控质谱平台，综合分析细菌代谢组和蛋白质组，挖掘耐药相关代谢网络（图 C），发现了一种结合传统抗生素与针对细菌丝状变长过程中关键酶的化学抑制剂的联合抑菌新方法 3；最后利用微探针电喷雾质谱技术从单细菌层面分析细菌耐药机制（图 D），研究细菌耐药异质性 4。

综上，本研究结合微流控技术和质谱技术，对耐药菌开展分析研究。建立了高灵敏、快速检测细菌耐药性的方法，实现了细菌耐药性的准确、快速鉴定；构建的微流控质谱联用平台实时提取细菌表型信息及分子信息，揭示微生物耐药分子机制，开发抑菌新方法；建立了单细菌胞内生物分子测量方法，研究细菌个体耐药异质性。本研究从静态到动态，从表型到功能，从整体到个体，在弥补抗生素开发速度跟不上耐药菌进化速度方面的不足具有巨大的潜力。



关键字 微流控质谱；组学技术；耐药性检测；耐药机制研究；细菌应激形变

参考文献

1. D. Zhang, ,,,,,, L. Qiao, *Analyst*, **2021**, 146, 515-520.
2. D. Zhang, ,,,,,, L. Qiao, *Anal. Chem.*, **2019**, 91, 2352-2359.
3. D. Zhang, ,,,,,, L. Qiao, *Chin. Chem. Lett.*, **2023**, 34, 107938.
4. D. Zhang, ,,,,,, L. Qiao, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **2023**, 120(27): e2301170120.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

纳米孔微柱阵列芯片用于 CTC 空间捕获与分子分型

张鹏*
上海交通大学

循环肿瘤细胞（CTC）的分子表型分析对监测癌症转移和复发具有重要的意义。微流控技术为从血液中捕获并检测这些稀有细胞提供了一种前景广阔的方法。然而在微流控芯片界面上对 CTC 的表型分析仍然具有技术挑战。我们开发了一种纳米孔微柱阵列芯片，通过增强和可调的免疫亲和识别，实现了高效的 CTC 捕获和空间分辨的分子分型。纳米孔微柱阵列同时解决了流体传质、表面粘滞流边界效应以及表面拓扑和多价反应等问题，并通过协同作用增强了 CTC 的免疫捕获效率。此外，通过调节芯片不同区域的流体速度，可在芯片内形成 CTC 洗脱剪切力梯度，通过达到细胞黏附力和流体剪切力的平衡，从而允许在相应的空间位置上免疫捕获表达不同水平的上皮细胞粘附分子（EpCAM）的单个 CTC。纳米孔微柱阵列芯片成功应用于准确区分早期和晚期乳腺癌，以及乳腺癌的化疗效果监测。我们期望纳米孔微柱阵列芯片能提供一种原位捕获和分子分析的生物标志物检测方法。

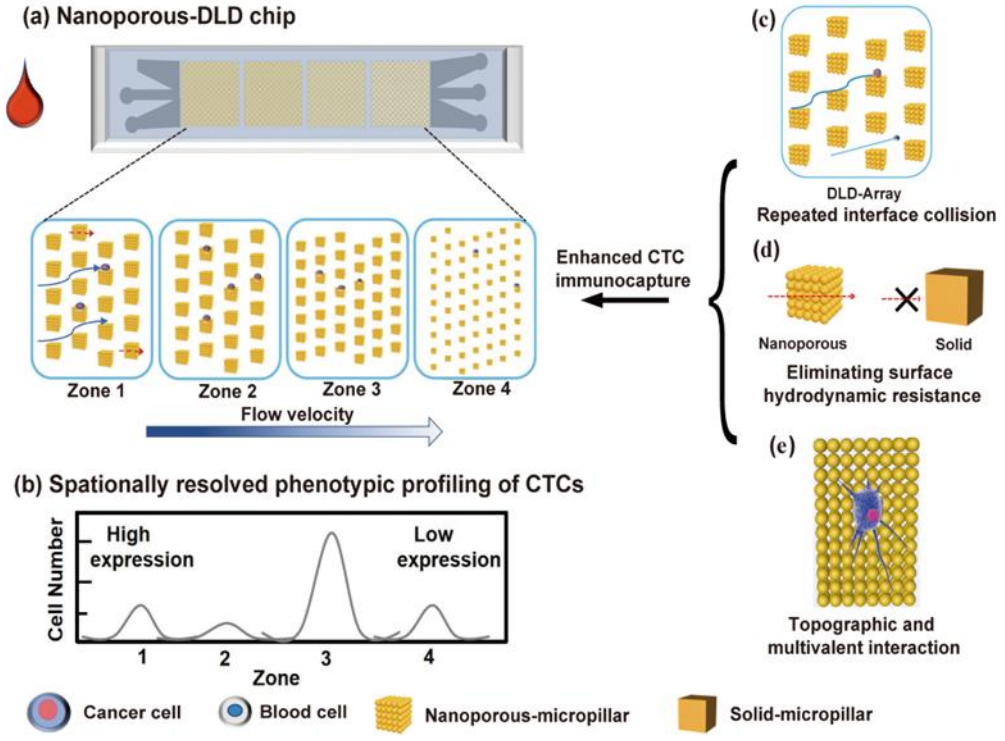


Fig. 1 Working principle of nanoporous-DLD chip towards spatially resolved phenotypic profiling of CTCs

关键字 循环肿瘤细胞；纳米孔微柱阵列芯片；空间分辨免疫捕获；分子分型

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

微结构辅助的多功能惯性微流控芯片构建与应用

申少斐*
山西农业大学

惯性微流控芯片技术因可以连续有效的处理实验进程，无需施加任何耗能的外力场即能完成流体或粒子操控等具有独特的优势。本研究首次在螺旋管道中引入微结构设计，构建出多功能惯性微流控芯片。通过二次流的稳定和加速实现了血细胞分选、细胞三维聚焦、单细胞封装以及单细胞水平药物筛选等应用。该芯片对比其他惯性微流方法具有许多优点。例如，芯片制作更为简单（单层和大尺寸管道设计），稳定性高（长时间操控仍能保持始终如一的操控质量），操作方式简便（无需鞘液流的帮助），处理通量较高（无平行化设计即能达到~mL min-1 级别）。这些优点有利于实现芯片的大批量生产和高效操作，为生物医学中微型诊断仪器的研制提供新的技术手段。

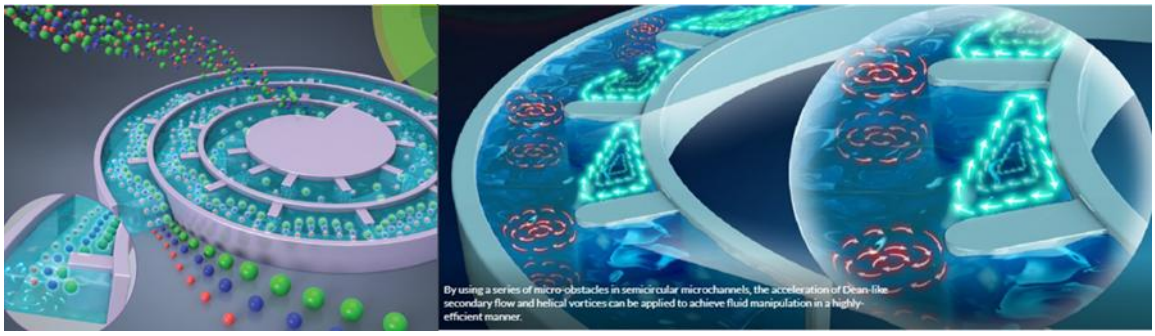


Fig. 1 Construction and applications of multifunctional inertial microfluidic chip by dimensional confinement

关键字 微流控芯片；惯性微流；细胞分选；三维聚焦；单细胞

参考文献

[1] Shen, S.; Zhao, L.; Bai H.; Zhang Y.; Niu Y.; Tian C.; Chan H. *Anal. Chem*. **2024**, **96(4)**: 1750-1758.
[2] Tang, T.; Zhao, H.; Shen, S.; Yang, L.; Lim, C. *Microsyst Nanoeng*. **2024**, **10**: 3.
[3] Shen, S.; Bai, H.; Wang, X.; Chan, H.; Niu, Y.; Li, W.; Tian, C.; Li, X. *Anal. Chem*. **2023**, **95(45)**: 16649-16658.
[4] Shen, S.; Zhang, Y.; Yang, K.; Chan, H.; Li, W.; Li, X.; Tian, C.; Niu, Y. *Anal Chem*. **2023**, **95(49)**: 18278-18286.
[5] Shen, S.; Zhang, F.; Zhang, Y.; Li, Y.; Niu, Y.; Pang, L.; Wang, J. *Microsyst Nanoeng*. **2023**, **9**: 46.
[6] Zhao, L.; Gao, M.; Niu, Y.; Wang, J.; Shen, S. *Sens. Actuators B Chem*. **2022**, **369**: 132284.
[7] Shen, S.; Zhang, F.; Wang, S.; Wang, J.; Long, D.; Niu, Y.; Wang, D. *Sens. Actuators B Chem*. **2019**, **287**: 320-328.
[8] Shen, S.; Tian, C.; Li, T.; Xu, J.; Chen, S.; Tu, Q.; Yuan, M.; Liu, W.; Wang, J. *Lab Chip*. **2017, 17(21)**: 3578-3591.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

多细胞系统可寻址多室微球的微流控工程

林勇宁[1]、吴增楠[1]、郑亚婧[1]、王潇睿[2]、林金明[1]、侯莹[1]、李楠[1]、邢高娃[1]、林玲*[2]
1. 清华大学
2. 北京工商大学

凭借高通量制造和定制化的优势，基于微球的体外多细胞分析系统构建受到了广泛关注。然而，在水凝胶微球中实现精确的、生物相容的细胞排列和空间信号分析仍然具有挑战性。在这项工作中，报道了一种用于生物相容生成可寻址超分段多隔室微球的微流控方法。在微流控方法中，通过可控微流控技术来精细调整微球的内部微结构，并通过气体喷射器确保制备过程的生物相容性。作为概念验证，获得了六隔室和二十隔室的微球，且未添加任何生物有害试剂。这些作为多细胞系统的微球成功地应用于细胞共培养和药物测试。

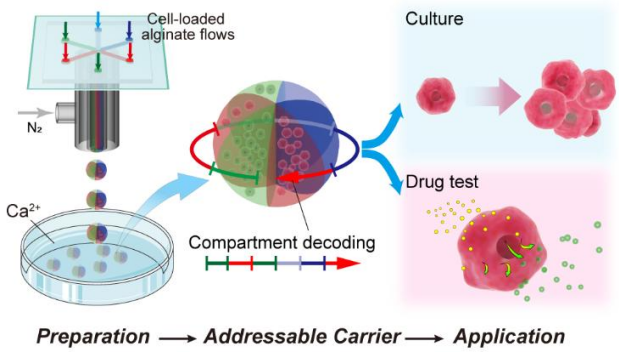


图 1：可寻址多隔室微球的制备与性能示意图

关键字 微流控，多腔室微球，细胞培养

参考文献：

1.Yongning Lin[#], Zengnan Wu[#,] *, Yajing Zheng, Xiaorui Wang, Jin-Ming Lin, Ying Hou, Nan Li, Gaowa Xing, and Ling Lin*, Microfluidic engineering of addressable multicompartmental microspheres for multicellular systems, Analytical Chemistry, 2024, 96, 13762-13767.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：报告

基于肝肠轴器官芯片的药物药效与毒性评估研究

常铭洋*
复旦大学

统体外模型难以再现药物经过胃肠道并影响肝脏的连续过程，特别是在精准模拟口服药物的吸收、首过代谢及其对肝细胞毒性评估方面，给药物开发带来了巨大的挑战。为了解决局限性，本研究构建了一个先进的肝肠轴器官芯片系统，利用精密耦合的微流控技术，模拟口服药物的吸收和代谢过程。药物先通过肠道类器官芯片渗透，再经由连接的血管通道进入肝类器官芯片，来评估其药代和肝毒性。在肝类器官芯片模型中，通过内皮细胞层模拟真实的生理内皮屏障，为肝实质细胞提供营养和充足的氧气供应。肝细胞被不同浓度的游离脂肪酸（FFA）诱导出现不同程度的脂滴累积，成功模拟了非酒精性脂肪性肝炎（NASH）的不同进展阶段。为了验证该系统在药物评估中的应用，我们选择了乙酰辅酶 A 羧化酶（ACC）抑制剂 Firsocostat 进行研究。通过将 Firsocostat 添加到流动的内皮细胞层，模拟静脉给药方式，我们准确评估了其在不同 NASH 阶段的治疗效果，揭示了其时间依赖性。后期研究表明，基于健康人源肝、肠类器官的肝肠轴器官芯片，可稳定维系器官芯片功能。HPLC-MS 检测显示其对口服药物首过效应和肝毒性反应与临床类似，能识别毒性标志物。因此，我们展望采用精密耦合微流控技术的肝肠轴器官芯片可作为一种准确、标准的体外模型，为新药开发提供重要的工具和方法学支持。

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

海洋重金属离子在线电化学检测仪器与系统

陈曦*
厦门大学

利用电化学方法，研发包括：1）具有对海水中漂浮悬浮物、海水 NaCl 和目标重金属离子富集功能的海水过滤装置；2）对铅、镉、锰、铜等重金属离子具有高灵敏检测能力电化学检测系统；3）准确高效和保密性高的数据处理和传输系统。开展了你以下三个方面研制工作：1）海洋环境中船载电化学检测系统,实现在线铅、镉、锰、铜等重金属离子的同时检测。系统由高精度电位分析仪，电化学系统（修饰工作电极为主的三电极系统），水下采样系统（过滤、流动注射泵及其控制系统），以及数据采集、处理和传输等组成。2）海洋环境中浮标使用电化学检测系统。船载系统可为人工值守操作模式，而浮标使用的原位电化学检测系统，则在船载仪器系统的基础上，进一步集成化，并在自动化（无人值守）和抗海洋恶劣环境方面具有更高的适应性能。3）研制系统的标准化、产业化和初步商品化。船载和浮标使用的多参数重金属离子电化学检测系统将开展高精度电位分析仪，电化学流动检测池，水下采样系统，数据采集、处理和传输等四个子系统。

关键字 检测

参考文献

1. Z W. La, F Y. Lin, L. H. Qiu, Y. R. Wang, X. Chen, H. Hu, *Talanta,* **2020**, 211, 120752-120758.
2. Z W. La, F Y. Lin, Y P, Huang ,Y. R. Wang, X. Chen, *J. Anal. Testing,* **2021**, 5: 60-68.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

使用 3D 微流体技术可控合成多室凝胶微球

林金明*
清华大学

细胞是生物体结构和功能的基本单位。近年来，不同种细胞间、同种细胞不同个体间以及同个细胞不同位置间广泛存在的细胞异质性，使得单细胞分析成为了一个热门的研究领域。单细胞分析可以从结构、功能、遗传、行为等方面揭示和解释细胞异质性，为我们更细致的了解生命活动提供了新的方向。微流控技术，藉由其诸多优点，成为了单细胞分析中举足轻重的一件工具。本次报告将结合我们实验室的部分研究结果，重点介绍近几年来国内外有关微流控单细胞分析方法研究的最新进展。

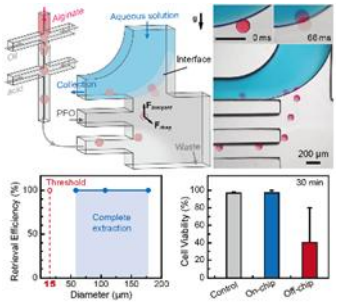
关键字 微流控，单细胞分析，微区分析

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

重力取向微流控芯片用于生物相容性一步制造载细胞微凝胶球

陈舒朗、吴增楠、林金明*
清华大学

液滴微流控技术因可以高通量地产生单分散性、结构可控的微凝胶球，在生物医学领域中被广泛用于细胞包封。然而，在包封过程中保持细胞活性富有挑战，因为将载细胞微凝胶球从油相转移到水相培养环境的后处理过程是耗时的，使得细胞暴露在有害因素下的时间过长而活性受损。因此，我们开发了重力取向的微流控设备，将微液滴产生、凝胶交联和微凝胶球提取集成在微流控芯片上，用于一步制造载细胞微凝胶球。芯片上微凝胶球的提取是由浮力驱动、并由假表面活性剂动力学加速实现的，对不同尺寸、不同硬度和不同材料的微凝胶球广泛适用。被微凝胶球包封的细胞具有较高的存活率（≈98%），并且存活率在同一批次和不同批次之间的差异较小。该一步制造微凝胶球的方法提高了微流控技术在细胞包封上的生物相容性和实用性，有望应用于单细胞分析、临床治疗等领域。



关键字 微凝胶球；细胞包封；液滴微流控；微制造

参考文献

1. Chen, SL.; Wu, ZN.; Zhang, Q.; Li, YX.; Yao, HR.; Chen, SY.; Xie, TZ.; Lin, JM. *Small*. **2024**, 23067

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

基于微流体层流纳米组装的生物传感器的开发及其应用

林海锋[1]、许柠[2]、林金明[3]、林玲*[1]
1. 北京工商大学
2. 中国农业科学研究院
3. 清华大学

相比于传统的纳米材料合成方法（如化学还原法、溶剂热法和模板法等），微流控层流组装技术在精确控制反应条件、避免颗粒聚集、提高形貌均匀性以及提升反应效率方面展现了显著优势。通过在微尺度上精确调节流体流动和反应物的相互作用，微流控技术能够实现纳米材料的高均匀性和高效合成，特别是在复杂结构和多功能纳米线与纳米网络的制备中表现突出。

本研究开发了基于微流控层流组装技术的一维纳米线生物传感器，并进一步探讨了其在生物检测领域的应用。通过优化不同的层流模式、传感器结构和表面功能化修饰，该传感器成功实现了对多种生物分子的高效检测，展示了微流控层流组装技术在纳米线传感器制备中的巨大潜力，为可控纳米结构的设计及其在实际生物检测中的应用提供了新的思路。

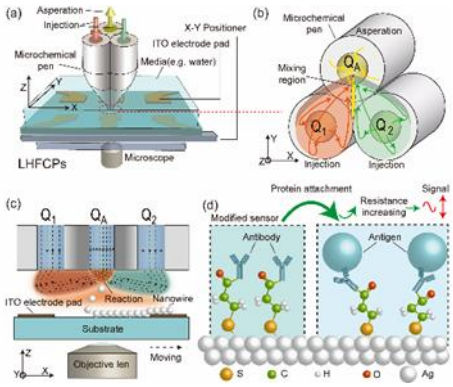


图.基于层流组装的纳米传感器制备及其应用

关键字 微流体、层流、组装、纳米、生物传感器

参考文献

1. Haifeng Lin; Ning Xu; Sifeng Mao; et al. Robust Long-Nanowire Fabrication by Clean-Phase-Assisted Micro Chemical Pen for Enhanced Bioassay Sensitivity, *Analytical Chemistry*, **2024**, 96, 36, 14339
2. Haifeng Lin; Nahoko Kasai; Ning Xu; et al. Localized hydrodynamic flow confinement assisted nanowire sensor for ultrasensitive protein detection, *Biosensors and Bioelectronics*, **2022**, 218: 114788
3. Haifeng Lin; Sifeng Mao; Hulie Zeng; et al. Selective Fabrication of Nanowires with High Aspect-Ratios using a Diffusion Mixing Reaction System for Applications in Temperature Sensing, *Analytical Chemistry*, **2019**, 91(11): 7346

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

微球数字化免疫分析及其在蛋白质超灵敏检测中的应用研究

龚凤[1,2]、吉邢虎[2]、何治柯*[2]
1. 川北医学院检验医学院、转化医学研究中心
2. 武汉大学化学与分子科学学院

数字化免疫分析是一种基于泊松分布的单分子计数分析方法，在蛋白质的超灵敏检测领域备受关注。传统的数字化免疫分析方法通常需要首先构建单分子微反应器，如微液滴或微阵列等，以实现目标分子的单分子分散；再借助酶促反应信号放大以实现单分子水平灵敏度的检测 1。这些方法通常依赖于精密的微加工技术或复杂的酶促反应，限制了其广泛应用 2。因此，开发更为简便、高效的数字化免疫分析方法，降低超灵敏分析检测的时间和成本，是分析研究工作者的不懈追求。

微球数字化免疫分析是一种直接以微球作为单分子分散载体的数字化分析方法，它避免了繁琐的微加工过程、简化了数字化免疫分析流程。近年来，本课题组借助多种超亮荧光标签，开发了一系列微球数字化免疫新方法，并将这些方法应用于蛋白生物标志物的超灵敏检测中。例如，我们利用荧光微球同时作为免疫反应载体和单分子检测标签， 在其表面修饰抗体以特异性识别样本中的目标蛋白，再与生物素化抗体形成夹心免疫复合物，随后利用链霉亲和素修饰的磁珠对结合了目标蛋白的荧光微球进行捕获和分离，最后统计带有荧光微球的磁珠（阳性磁珠）的比例，构建了一种无酶微球数字化免疫分析新方法，实现了对 AFP 和 IL-6 的高灵敏度检测 3；设计并制备了一种以 Au NPs 为核，BSA-Bio 为间隔层，表面偶联 SA-Cy3 组成，具有等离子体增强荧光特性的纳米颗粒作为单分子检测的信号标签，并结合亚微米磁珠，构建了一种微球数字化免疫分析新方法，在 75 min 内实现了对 IL-6 的高灵敏检测，其检测限（LOD）低至 95 fg/mL。这些直接以微球作为单分子分散载体的微球数字化免疫分析方法，由于无需复杂的微制备过程和繁琐的酶扩增步骤，极大地降低了数字化免疫分析的技术壁垒和操作难度，在基于蛋白生物标志物超灵敏检测的临床诊断领域具有极大的应用前景。

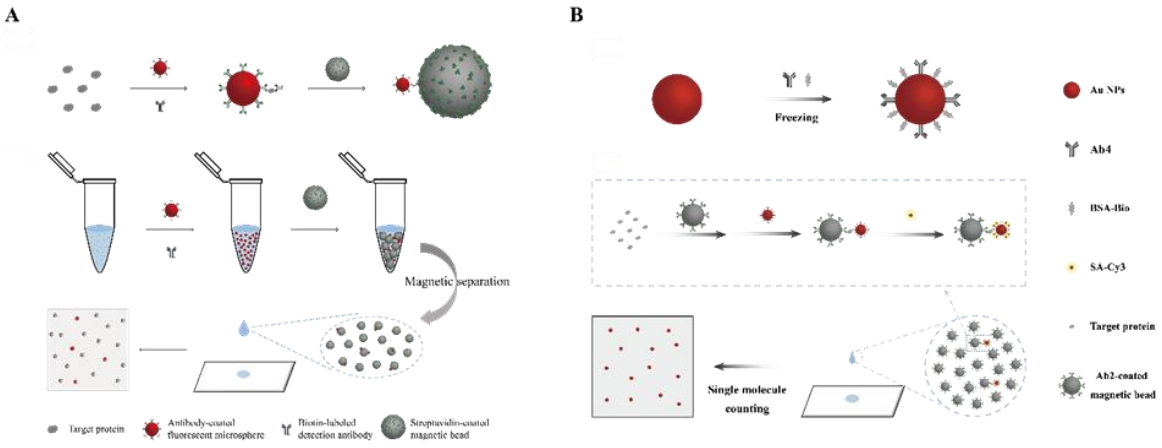


图 1. 基于荧光微球（A）和等离子体增强荧光纳米颗粒（B）的微球数字化免疫分析用于蛋白质高灵敏分析示意图。

关键字 数字化免疫分析，微球，蛋白检测，单分子

参考文献：

1. Rissin, D. M.; Kan, C. W.; Campbell, T. G.; et al. *Nat. Biotechnol.* **2010**, *28*, 595-599.
2. Duffy, D. C. *Lab Chip* **2023**, *23*, 818-847.
3. Gong, F.; Tan, Z.; Shan, X.; Yang, Y.; Tian, S.; Zhou, F.; Ji, X.; He, Z. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 3517-3524.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

一种用于多种抗生素同时检测的集成化微流控装置

王潇睿、林玲*
北京工商大学

鉴于食品中抗生素残留对人类健康构成严重的长期威胁，迫切需要一种现场可视化的抗生素检测方法[1]。然而，传统的抗生素检测方法在操作人员专业度和设备成本方面的要求阻碍了对样本的快速即时检测（POCT）。本研究报告了一种含有十字阀门的微流控芯片和免疫层析试纸的集成化芯片装置，实现了牛奶中多种抗生素的快速检测[2]。通过手机成像和应用程序分析，该方法可对磺胺类、β-内酰胺类、链霉素类、四环素类抗生素进行快速定性和定量分析，检测时间保持在 10 分钟内。四种抗生素的检出限（LODs）分别为 0.15、0.12、0.25 和 0.29 ng/mL，即使在高度复杂的基质中也能观察到该方法对多种抗生素的选择特异性。这种集成化的检测装置成功将多组分目标物的分离和实时检测集成到芯片上，在牛奶等食品的多组分残留检测中具有很大的发展潜力。

关键字 抗生素残留，微流控芯片，十字形阀门，即时检测，同时检测

参考文献

1. X. Wang, Y. Xie, L. Lin, *Trends Anal. Chem.*, **2022**, 157, 116797.
2. X. Wang, G. Xing, N. Li, Y. Xie, L. Lin, *Chin. Chem. Lett.*, **2023**, 34(8), 108110.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

基于电磁阀分选技术的肿瘤球大小与形状控制及其在精准药物测试中的应用

孙佳宇*
香港城市大学

先前基于肿瘤球的癌症研究精度受到其大小和形状高度异质性的限制。在此，我们报道了一种用户友好的基于电磁阀的分选器，旨在减少这种异质性。人工智能算法被用于实时检测和分割肿瘤球，以进行大小和形状的计算。一种简单的电磁阀驱动的分选模块被用于筛选出符合期望大小和形状的目标肿瘤球。通过该分选器，我们成功揭示了同一群体中，大小和形状不同的肺肿瘤球对顺铂药物反应的差异。并且，利用该分选器，肿瘤球群体水平的药物测试精确度得到了提升，达到了与单个肿瘤球分析相媲美的水平。

关键字 肿瘤球体；液滴微流控技术；人工智能；基于电磁阀的分选器；尺寸和形状依赖性药物测试

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

金纳米团簇传感阵列结合机器学习与智能手机拍照检测抗生素

许金铭*
清华大学

抗生素被广泛用于疾病治疗、农业以及畜牧业等领域，但其在环境中的长期残留会对生态系统和公众健康构成重大威胁 1。因此，开发简便高效的的抗生素检测方法至关重要。传感阵列是由多个传感元件组成的基于交叉反应信号的一种识别技术，在检测多种分析物及复杂混合体系时显示出极大优越性 2。金属纳米团簇（MNCs）是一种新兴的发光纳米材料，小尺寸和可调整的核壳结构赋予其丰富的物理化学特性 3，使其成为设计传感阵列的理想材料。

以牛血清白蛋白和鸡卵清蛋白为配体分别合成了两种金纳米团簇（AuNCs），并将其用于构建传感阵列检测四环素类和喹诺酮类两类抗生素。团簇与七种抗生素具有不同的相互作用，展现出差异性的光致发光变化。利用线性判别分析（LDA）和极端随机树（ExtraTrees）算法对响应模式进行分析，传感阵列能够高精度识别七种抗生素。通过进一步使用 ExtraTrees 算法建立回归模型，还实现了对七种抗生素的浓度预测。该阵列还能区分抗生素混合物和多种干扰物质，在河水样本的检测中也依旧保持良好性能。此外，通过将 AuNCs 制作成试纸并结合智能手机拍照，可以快速地检测缓冲液和河水体系中的七种抗生素并进行准确的分类。

关键字 金纳米团簇

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

基于功能化采样拭子阵列的便携式 ATP 生物发光仪对活沙门氏菌进行现场检测

廖文珺、林玲*
北京工商大学

据世卫组织报告，世界范围内每年十分之一的人患食源性疾病，在其诱因中，活沙门菌是主要病因，增殖迅速，短时间内对食品造成大规模污染，对公众健康构成重大威胁。而在现有细菌检测方法中，传统的培养法检测耗时长、易污染，免疫学方法操作繁琐且无法区分死活菌，核酸检测法容易产生假阳结果，并且这些方法都需要严格的实验环境和经验丰富的操作人员，限制了现场应用。而 ATP 检测法不仅耗时短，无需专业人员且可以区分死活菌。近年来，ATP 发光传感器作为一种常用的便携式仪器已广泛用于监测细菌污染，该传感器可在 15s 内读出相对发光单位信号，但是其检测限远高于通常食品中细菌病原体的污染剂量，并对所有含有 ATP 的活性生物体都能产生信号。本文提出一种功能化拭子结合 ATP 发光传感器用于快速和现场检测活沙门氏菌。简而言之，尼龙纤维植绒拭子通过与甲醛、柠檬酸和 EDC/NHS 溶液逐步反应以接枝羧基，从而实现化学改性后修饰抗体，用于活沙门氏菌的特异性吸附。三个功能化拭子形成一个拭子阵列，用以现场吸附富集细菌，最后利用便携式 ATP 生物发光传感器测量拭子上所捕获细菌被裂解后释放的 ATP 生物发光，对富集的细菌进行量化。本方法生物测定的可检测范围为 10^2-10^7 CFU/mL，35 分钟内的检测限为 8 CFU/mL，实现了对原始仪器检测限 3 个数量级的降低。该功能化拭子阵列具有较高的特异性和灵敏度，有效降低了 ATP 发光传感器的检测限并实现了信号的放大。该方法用于现场检测简单方便，摆脱了现有大多检测方法需要专业实验人员在严格的实验室条件下操作的限制，并有望作为通用的生物检测传感平台扩展应用于病毒、寄生虫等现场检测中。

关键字 沙门氏菌检测；功能化拭子；ATP 生物发光传感；现场检测；高灵敏度

参考文献

1. Liao W, Lin H, Sun Y, et al. Functionalized sampling swabs array-based portable ATP bioluminescence sensor with on-site enrichment and high specificity for live Salmonella detection[J]. Talanta, 2024, 272: 125819.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

光子晶体微珠微流芯片对农药残留快速检测研究

石鑫[1,2]、赵孟如[1,2]、张炜[1]、王哲[1]、汪洋[1]、郭宝元*[1,2]
1. 国家粮食与物资储备局科学研究院
2. 上海理工大学健康科学与工程学院

农药残留检测是推动农业现代化进程、促进农业绿色发展必不可少的环节。目前常用的农药残留检测方法主要包括色谱分析方法和免疫分析方法，但也存在成本高、操作复杂等问题[1]。因此，开发简单快速、灵敏可靠的高通量农药残留检测方法，具有重要的研究价值和现实意义[2]。

本研究利用单乳液玻璃毛细管芯片，制备出尺寸均一、大小可控的二氧化硅光子晶体微珠，利用光纤光谱仪测量不同种微珠的反射峰位置，实现微珠编码。对微珠表面的功能化进行了研究，以增强其与生物分子的结合能力；并设计构建光子晶体微珠微流控芯片，尺寸在 120~250μm 的光子晶体微珠注射到光子晶体微珠阵列芯片反应池中，构成检测芯片，将光子晶体微珠阵列芯片应用于粮食中吡虫啉、啶虫脒、噻虫嗪农药残留的检测；本文确定了微珠表面修饰方法，优化该体系合适的抗体用量、标记抗原等反应条件，并验证了该平台应用于多种农药残留检测的可行性。结果表明，本方法的回收率在 94.8%～112.2%， RSD＜7.5%。综上所述，本方法无需步骤复杂的人工操作，同时具有多种农残高通量检测的优势，因此有潜力应用于粮食中农药残留的快速检测。

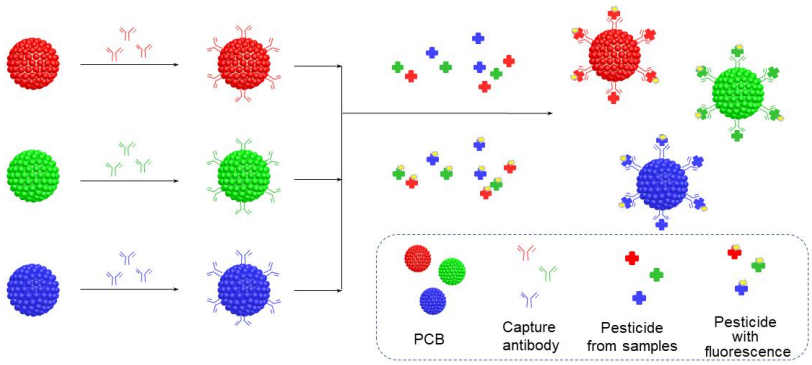


图 1 编码光子晶体微珠检测农药残留示意图

关键字 微流控芯片；光子晶体微珠；多农残检测；高通量检测

参考文献

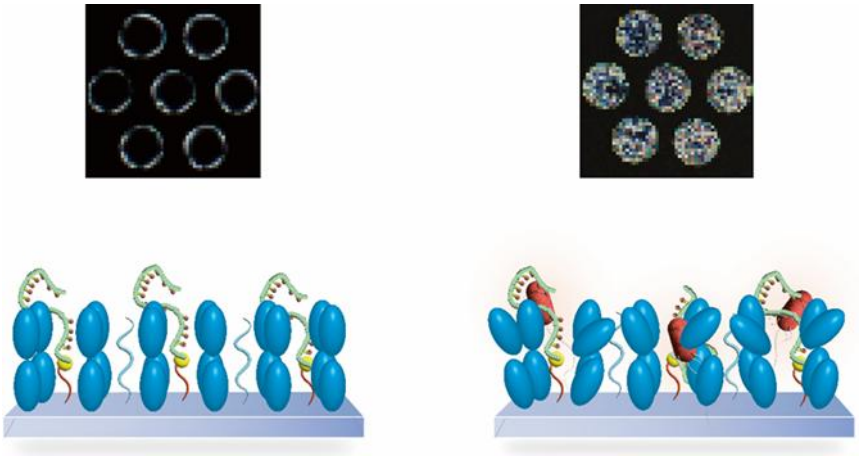
1. T.W. Na, H.J. Seo, S.N. Jang, H. Kim, H. Yun, H. Kim, J. Ahn, H. Cho, S.H. Hong, H.J. Kim, S.H. Lee,*J. Chromatogr. A,*.**2022**, 1676, 463257.
2. C. Benbrook, *Regul. Toxicol. Pharmacol.*, **2023**, 138, 105328.

分会场：7.微流控与微分析仪器
交流类型：墙报

基于液晶的生物传感器用于食源性致病菌的无标记检测

杜明阳、林海锋、郭婷、廖文珺、李俊、吴其禹、林玲*
北京工商大学

食源性疾病对现代人类的生产和生活产生了显著影响。快速、灵敏和同时检测多种食源性病原体是公共卫生面临的挑战。我们开发了一种无标记液晶传感器，利用适配体，能够同时检测三种食源性致病菌。传感器基底由经过二甲基十八烷基[3-(三甲氧基硅烷)丙基]氯化铵（DMOAP）、（3-氨丙基）三乙氧基硅烷（APTES）和特定细菌适配体修饰的干净载玻片及一块具有四个圆孔的 Sylgard 184 聚二甲基硅氧烷（PDMS）芯片所构成。每个孔内放置一片铜透射电子显微镜（TEM）网格，支撑液晶作为响应元件。在未捕获细菌的情况下，液晶保持垂直有序的排列，在偏振光显微镜下呈现均匀的黑色光学外观。相反，当适配体捕获细菌时，有序的液晶构型被破坏，在偏振光显微镜下呈现明亮的光学外观。该传感器对沙门氏菌（Salmonella typhimurium）、金黄色葡萄球菌（Staphylococcusaureus）和大肠杆菌 O:157 的检测限分别为 5.28×10^2 cfu/mL、6.65×10^2 cfu/mL 和 8.50×10^2 cfu/mL，线性检测范围为 10^2到 10^7 cfu/mL。这种方法表现出卓越的灵敏度和精确性，并已在真实食品样品检测中得到了验证，在食源性致病菌检测方面具有良好前景。



关 键 字 Salmonella typhimurium, Escherichia coli, Staphylococcus aureus, liquid crystal, biosensor,DNA

参考文献

1. Ali, S.; Alsayeqh, A. F. Review of major meat-borne zoonotic bacterial pathogens. Frontiers in Public Health 2022, 10, 1045599.
2. Almaary, K. S. Food-Borne Diseases and their Impact on Health. Biosciences Biotechnology Research Asia 2023, 20 (3), 745-755.
3. Cai, D.; Chen, G.-L.; Wang, T.; Zhang, K.-H. Combination of multiple nucleic acid aptamers for precision detection of tumors based on optical methods. Journal of Cancer Research and Clinical Oncology 2023, 149 (10), 7895-7903.
4. Zhan, X.; Liu, Y.; Yang, K.-L.; Luo, D. State-of-the-art development in liquid crystal biochemical sensors. Biosensors 2022, 12 (8), 577.

5. Koenig Jr, G. M.; Ong, R.; Cortes, A. D.; Moreno-Razo, J. A.; de Pablo, J. J.; Abbott, N. L. Single nanoparticle tracking reveals influence of chemical functionality of nanoparticles on local ordering of liquid crystals and nanoparticle diffusion coefficients.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

高质量分辨原位液相二次离子质谱系统研制

汪福意*
中国科学院化学研究所

飞行时间二次离子质谱（ToF-SIMS）是一种基于高真空的前沿表界面分析技术，但商品仪器长期以来难以用于液体和液固界面分析。自 2013 年起，我们课题组与美国太平洋西北国家实验室朱梓华研究员等合作，基于一种高真空兼容微流控装置，发展了原位液相 ToF-SIMS 新技术，实现了液相、液固界面的原位、实时 ToF-SIMS 分析。但是，ToF-SIMS 商品仪器灵敏度较低、质量分辨率差、化学专一性不强，以及微流控池可能发生的漏液损害仪器等问题，限制了原位液相 ToF-SIMS 技术的应用。近年来，我们与中国科学院大连化学物理研究所李海洋和陈平研究员团队合作，针对这些突出问题，研制了一台新型原位液相 ToF-SIMS 系统。我们采用了连续 C60 一次离子源，提高 ToF-SIMS 分析灵敏度；在微流控器件和 ToF-SIMS 真空室之间增设了氦气缓冲室，在碰撞冷却、提取高能量发散二次离子的同时，可保护 ToF-SIMS 真空度和一次离子源；垂直引入了与 CID 串联的 W 型 ToF 质量分析器，提升了 ToF-SIMS 分析的质量分辨率和结构解析能力。我们所研制的高质量分辨原位液相 ToF-SIMS 系统将在液固界面和生物软物质界面（如细胞膜）等分析领域具有广阔的应用前景。

关键字 飞行时间二次离子质谱；原位液相二次离子质谱；表界面分析；仪器研制

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

基于质谱的多组学综合分析用于分子药理学研究

康经武*
中国科学院上海有机化学研究所，生命过程小分子调控全国重点实验室， 上海市零陵路 345 号

药物-蛋白质相互作用对于了解药物的作用机制和预测可能的不良副作用至关重要。然而，全面分析药物-蛋白质相互作用仍然是一个挑战。为了解决这个问题，我们提出了一种策略，通过整合多种基于质谱的组学分析来提供整体药物-蛋白质相互作用，包括物理相互作用和功能相互作用，以雷帕霉素 (Rap) 为模型。化学蛋白质组学分析揭示了 47 种 Rap 结合蛋白，包括已知的靶蛋白 FKBP12，具有很高的可信度。 Gen Ontology 富集分析表明 Rap 结合蛋白参与了许多重要的细胞过程，如 DNA 复制、免疫、自噬、程序性细胞死亡、衰老、转录调控、囊泡介导的运输、膜组织、碳水化合物和核碱基代谢过程。磷酸化蛋白质组学分析显示，在 Rap 刺激下，有 255 种磷酸化蛋白下调，150 种磷酸化蛋白上调，主要参与 PI3K-Akt-mTORC1 信号轴。非靶向代谢组学分析显示，在 Rap 刺激下，有 22 种代谢物下调，75 种代谢物上调，主要与嘧啶和嘌呤的合成过程有关。综合多组学数据分析为我们深入了解药物-蛋白质相互作用提供了深刻的见解，揭示了复杂的药物作用机制。

关键字 HPLC-MS；多组学综合分析；分子药理学；药物靶标鉴定；作用机制

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

ICP-MS 单细胞分析

胡斌*、陈贝贝、何蔓
武汉大学

由于细胞异质性和多样性的广泛存在，从单细胞水平分析细胞内痕量元素及其形态具有重要的研究意义。电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)是一种强有力的痕量元素检测手段。然而，将 ICP-MS 直接用于单细胞的痕量元素分析时，还存在以下问题：待测元素含量低、对元素形态不具选择性、样品基质复杂、细胞样品量极少、跳峰信号来自于多个细胞等。微流控芯片是优良的细胞操纵平台，结合 ICP-MS 在线联用，可以实现单细胞内痕量元素的测定。本课题组构建了液滴芯片/微流体装置、液滴裂分芯片以及负磁泳聚焦芯片等单细胞操纵平台与时间分辨 ICP-MS 在线联用，建立了微流控芯片-ICP-MS 单细胞痕量元素及形态分析方法[1-5]，并将其用于单细胞水平的痕量元素及形态分析与纳米粒子的摄取研究。

参考文献

[1] Wang H, et al. A Facile Droplet-Chip-Time-Resolved Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Online System for Determination of Zinc in Single Cell [J]. Anal. Chem., 2017, 89, 4931-4938.
[2] Yu X, et al. 3D Droplet-Based Microfluidic Device Easily Assembled from Commercially Available Modules Online Coupled with ICPMS for Determination of Silver in Single Cell [J]. Anal. Chem., 2019, 91, 2869-2875.
[3] Yu X, et al. Argon Enclosed Droplet Based 3D Microfluidic Device Online Coupled with Time-Resolved ICPMS for Determination of Cadmium and Zinc in Single Cells Exposed to Cadmium Ion [J]. Anal. Chem., 2020, 92, 13550-13557.
[4] Chen Z, et al. Droplet-Splitting Microchip Online Coupled with Time-Resolved ICPMS for Analysis of Released Fe and Pt in Single Cells Treated with FePt Nanoparticles [J]. Anal. Chem., 2020, 92, 12208-12215.
[5] Chen Z, et al. Negative Magnetophoresis Focusing Microchips Online-Coupled with ICP−MS for High-Throughput Single-Cell Analysis [J]. Anal. Chem., 2022, 94, 6649-6656.

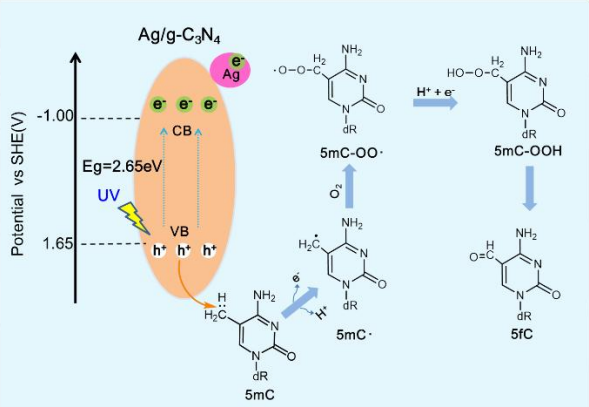
关键字 ICP-MS，微流控芯片，单细胞分析

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

基于光催化纳米酶的 5mC 选择性氧化

李向军[1]、马杨德[1,2]、王惠东[2]、张蕊[2]、李瑞宾[2]、Zhang Hongquan[2]、汪海林*[1,2]
1. 中国科学院大学
2. 中国科学院生态环境研究中心

DNA 甲基化是表观遗传中很重要的一部分，它能够在不改变 DNA 序列的情况下控制基因的表达，从而使基因沉默、激活。胞嘧啶能够被甲基化形成 5-甲基胞嘧啶(5mC)，作为哺乳动物中重要的甲基化修饰，5mC 还能够被 TET 双加氧酶氧化，从而发生去甲基化，该过程在生殖、发育、疾病和治疗中起着关键作用[1]。本研究首次发现了 g-C3N4 能够在光激发的状态下，催化 DNA 上的 5mC 氧化形成 5-醛基胞嘧啶(5fC)，进而引发 5mC 去甲基化。单原子银掺杂提高了该反应的光催化转化率(5fC 产率~92%)。相比于 TET 双加氧酶，Ag/g-C3N4 具有更好的选择性。通过材料表征、自由基捕获和 HPLC-MS/MS 探究反应机理，结果表明光生空穴在该反应中起主要作用。光生空穴氧化 5mC 形成 5mC 自由基，随后经过一系列反应最终形成 5fC。将该方法和丙二腈偶联反应进行结合[2]，经过聚合酶链式反应使 5mC 转化为胸腺嘧啶（dT），通过比对处理前后的测序结果，能够实现 5mC 的单碱基测序，这有望替代传统的重亚硫酸盐测序。



参考文献：

1. Jones, P. A. *Rev Genet* **2012,** *13* (7), 484-9.
2. Zhu, C.; Gao, Y.; Guo, H.; Xia, B.; Song, J.; Wu, X.; Zeng, H.; Kee, K.; Tang, F.; Yi, C. *Cell stem cell* **2017,** *20* (5), 720-731 e5.

关键字 纳米酶，光催化，5mC，选择性氧化

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

DNA/RNA 修饰的精准分析与表观遗传研究

赖玮毅、汪海林*
中国科学院生态环境研究中心

DNA 胞嘧啶的（去）甲基化直接与多种重大疾病的发生发展密切相关，因其丰度低，通常检测需要用百万个细胞，难以应用于疾病早期样本的检测。我们先后研发出了：“细胞中 DNA 信号干扰物游离核苷酸的高效去除技术”、“DNA 盐桥修饰磁性微纳颗粒的高效富集及原位酶解技术”、“碳酸氢铵增强质谱离子化效率技术”，并集成为一体化的分析系统，将检测限由百万个细胞降低到 20 个细胞。利用所建立了的方法，发现维生素 C 具有调控 DNA 去甲基化活性的辅助因子功能，是关键性突破，为维生素 C 及类似物的抗肿瘤、免疫治疗等新功能的研究“开启了大门”。通过建立代谢编码的示踪技术与高精准的质谱分析方法，成功地在高等生物果蝇中首次检测到复制后、可调控基因表达的 DNA 腺嘌呤甲基化修饰的存在 (Cell 封面论文)。该项研究赋予了 DNA 腺嘌呤甲基化的“第二次生命”。研制了世界先进的毛细管电泳装置，可与超灵敏的激光诱导荧光、分子转动相关的荧光偏振、单分子荧光实时成像等检测技术联用。提出了“近距离作用增强荧光偏振响应”机理；首次将荧光偏振与电泳迁移相结合在单核苷水平精细地测定核酸适配体与蛋白质相互作用；建立了可诱导基因突变、丰度极低的、肺癌标志物 DNA 加合物的超灵敏分析方法，较经典的 32P 放射性检测灵敏度提高了三个数量级，从根本上避免了放射损伤。所建立的 DNA(去)甲基化的功能分析方法已成为国际上的标杆。与国际上十八家机构合作，开展了表观遗传学研究，在 Science 等重要影响的学术期刊上发表了系列论文。

关键字 质谱，DNA 修饰，RNA 修饰，表观遗传

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

基于选择性富集及异构体分辨串联质谱的低丰度脂质组分析方法

瑕瑜*、王紫丹
清华大学

脂质是生命体不可缺少的一类生物分子，广泛参与脂膜构建、能量储存、信号传导等细胞事件。细胞中数以千计的脂质分子被统称为脂质组 (lipidome)，其浓度范围跨越 6-8 个数量级，并伴随着多种结构异构体或同重体。本课题组致力于发展基于快速衍生方法的异构体分辨串联质谱方法，从而实现对多类别脂质的精细结构分析。基于 Paternò-Büchi（PB）反应衍生双键，我们已经建立了适用于 16 类含量较高脂质的双键位置定性定量技术。然而，由于高丰度磷脂的电离抑制，尚缺乏低丰度脂质类的精细结构分析方法。为此，我们利用功能化磁性纳米材料（TiO2 MNPs）靶向低丰度脂质类中的独特分子结构，对其进行选择性分离富集，并结合异构体分辨质谱解析在精细结构层面定性定量。通过 Ti(IV)与低丰度脂质的羟基和磷酸单酯的配位相互作用，我们发展了开发了针对脑组织和血浆中的中性鞘糖脂（GSLs，含量约总脂质 0.03-3%）以及细胞内磷酸磷脂酰肌醇（PIPn，含量约总脂质 1%）的选择性富集方法，实现 30-100 倍的富集效率，检测限达到亚纳摩尔。进一步结合电荷标记 PB 反应及液相色谱-串联质谱（LC-MS/MS），我们鉴定了 600 余种不同结构的低丰度中性 GSLs 和 PIPn。最后，我们将低丰度脂质的精细结构解析应用于人脑胶质瘤组织的分型和巨噬细胞信号通路的研究，揭示了多种低丰度脂质合成酶的在疾病中的代谢异常。

关键字 样品富集、脂质组学、串联质谱、不饱和脂质

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

界面电化学中间体动态命运质谱测量

闵乾昊*
南京大学

界面电化学过程的分子信息原位测量对电化学反应的机理研究具有重要指导意义。然而，目前的原位测量技术尚缺乏有效手段从分子信息水平连续监测电化学过程中短寿命中间体在电化学调制下的动态变化过程。鉴于此，研究组提出电化学反应界面“气助快速采样耦合无高电压电离”技术，以实现亚稳态物种的“高保真连续读取”，针对电致化学发光（ECL）、有机电合成、电催化氧还原（ORR）过程，发展了一系列亚稳态中间体（半衰期毫秒至微秒）连续动态质谱监测技术。我们开发了可同步记录 ECL 反应过程电信号、光信号以及质谱信号的质谱监测平台 RT-Triplex，实现了 ECL 动态过程的多参数、实时监测。首次从分子层面验证了分别由过氧化物中间体和二氮杂醌中间体介导的两条鲁米诺 ECL 反应途径，发现了氟硼二吡咯类染料（BODIPY）和共反应剂正三丙胺（TPrA）的 ECL 催化路径，系统解析了不同活性氧物种在光泽精阴极 ECL 反应中的角色与功能。针对有机电合成反应，搭建了解耦型电化学流动反应池-质谱分析平台，同时实现了有机电合成的高通量筛选与反应机理探究。通过对电极界面非均相反应与溶液中均相反应进行解耦，揭示了电化学 C-N 键自由基偶联反应中的隐藏反应路径，探究了由氧化还原介质介导的有机电合成反应动力学参数，并从分子层面阐释了氮杂环丙烷电合成反应机理。此外，发展了纳米电催化反应声喷雾质谱分析平台，利用不同活性氧（O2•-, ·OH, H2O2）的物质转化测量替代传统电化学测试中的电荷转移测量，实现了不同电催化剂介导的 ORR 反应中间体的连续监测与权重分析，以及 ORR 单原子催化剂的性能评估与筛选。

关键字 原位质谱测量；电化学；中间体；动态监测

参考文献：

1. X. Zhang, W. Lu, C. Ma, T. Wang, J.-J. Zhu, R. Zare, Q. Min, *Chem. Sci.* **2022**, 13, 6244-6253.
2. Z. Zhang, H. Xu, Y. Fan, X. Zhang, W. Wang, J.-J. Zhu, Q. Min, *Nano Lett.* **2023**, 23, 1820-1829.
3. X. Zhang, Y. Dong, Y. Wang, Z. Zhang, X. Zhang, J.-J. Zhu, Y. Tian, Q. Min, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202313446.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

一种基于质谱的高分辨率空间蛋白质组分析新方法

秦伟捷*
国家蛋白质科学中心（北京）

哺乳动物体内含有大量生物分子组成不同且表型各异的细胞，这些细胞通过有序的空间排列组成了具有特定结构和功能的各种组织器官。虽然空间转录组学在解析基因表达分布的组织器官异质性方面已有广泛应用，但它无法直接表征执行细胞功能的蛋白质。广泛的蛋白质组学和转录组学比较研究揭示，哺乳动物组织中 mRNA 与蛋白质含量之间的皮尔逊相关系数仅为 0.35 至 0.6，且在单细胞水平更低，因此仅依赖转录组数据进行基因表达和空间分布推断不可避免会产生偏差。

虽然直接测定组织中蛋白质的空间分布更具优势，但由于目前蛋白质组学技术的样品通量和灵敏度有限，全组织切片的大规模非靶向空间蛋白质组研究尚面临诸多技术难题。首先，缺乏有效手段将整个组织切片均匀分割成微米级分辨率的样本，同时精确保留空间信息。更重要的是，随着空间分辨率的提高，需要分析的样本数量呈指数级增长，导致该策略无法应用于实际研究。因此，迫切需要发展高通量的空间蛋白质组学方法，在不损失空间分辨率和蛋白质组深度的前提下，大幅度提高分析通量。

针对上述关键技术瓶颈，本工作发展了一种空间蛋白质组稀疏采样策略，首先对相邻组织切片分别进行不同角度的平行等间隔投影切割条带，经质谱蛋白质组分析后，通过基于深度学习的计算手段将从各切片中获得的不同角度条带复原为蛋白质组空间表达分布，从而实现用少量样本对完整切片进行高分辨、深覆盖的空间蛋白质组分析。使用该策略，我们成功构建了目前最全面的小鼠大脑全组织切片微米级分辨率空间蛋白质组，包括 9000 余种蛋白质的表达含量和空间分布，覆盖深度提高一倍以上。发现了多个大脑不同解剖区域和细胞类型特异的新 marker 蛋白。首次大规模发现 mRNA 和蛋白质在多种生物过程中存在不同水平的空间分布不一致，如突触分泌蛋白质和神经递质、细胞代谢以及认知和运动功能等相关通路，对脑科学研究具有重要价值。

关键字 生物质谱，蛋白质组，空间，高通量

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

RNA 激活的 CRISPR/Cas12a 体系及其活细胞成像

彭汉勇*[1,2]、袁爱姣[1]、沙蕊[1,2]、谢文菁[1,2]、曲广波[1,2]、张红权[4]、汪海林[1,2,3]、乐晓春[4]、江桂斌[1,2,3]

1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学
3. 杭州高等研究院
4. 阿尔伯塔大学

CRISPR-Cas 系统作为一种革命性的基因编辑工具，因其操作简单、编辑精确、效率高等特点，已在分子生物学和基因治疗领域得到了广泛应用。CRISPR 基因编辑技术中的 Cas 蛋白，如 Cas12a 和 Cas13a，能够特异性靶向核酸，并激活反式切割活性，非特异性持续切割单链核酸报告基因。Cas 酶的反式切割特性使得检测信号可以被放大，提高了检测的灵敏度，推动了 CRISPR 技术在超灵敏分析和分子诊断领域的发展。然而，目前这些 Cas 酶主要用于试管内分析，而在活细胞中的应用受到限制。主要原因为：一、RNA 激活的 Cas13a 会对胞内功能性 RNA 进行非特异性反式切割，可能对细胞造成伤害，而 Cas12a 虽然仅反式切割单链 DNA，但能否被胞内 RNA 激活尚未明确；二、活细胞内条件无法达到最佳切割活性，包括 Mg^{2+}离子、报告基因浓度等，受限于复杂的胞内递送过程。因此，亟需开发新的 CRISPR 工具，以满足活细胞应用需求。本工作通过研究 Cas12a 酶的功能，发现了 Cas12a 能够被 RNA 激活，并反式切割 DNA 报告基因。CRISPR/Cas12a 与靶标 RNA 通过碱基互补配对结合，其反式切割速率随 DNA 报告基因的延长而增加。这一发现表明 Cas12a 蛋白是一种独特的“全能型”蛋白酶，能够直接靶向三种类型的核酸，包括 RNA、单链 DNA、双链 DNA，并激活其反式切割活性。基于上述 Cas12a 新功能，构建了一种高度集成的 RNA 激活 CRISPR/Cas12a 纳米机器，用于活细胞中特征 miRNA 的成像。该工作还系统评价了 CRISPR/Cas12a 的 RNA/DNA 靶向能力及酶切速率，为 CRISPR 研究提供了定量数据。该发现为 CRISPR/Cas 结构与功能研究带来了新的视角，将推动病毒检测、疾病诊断、转录组调控、分子成像和基因编辑等领域的 CRISPR 新技术研发。

关键字 DNA 纳米机器；CRISPR/Cas12a；活细胞成像；microRNA 检测；基因编辑

参考文献：

1. Peng H, Li X F, Zhang H, et al. *Nat. Commun.*, 2017, 8(1): 1-13.
2. Wu J, Peng H, Lu X, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60(20): 11104-11109.
3. Yuan A, Jiang G, Peng H, et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 39, 26657–26666 (Supplementary Cover)

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

基于 CRISPR-Cas12a 体系检测小分子和蛋白质

赵强*
中国科学院生态环境研究中心

灵敏快速检测生物和环境相关的小分子和蛋白质在很多领域具有重要意义，如药物发现、代谢组学和毒性分析、环境监测、食品安全和临床诊断等。CRISPR-Cas 是一种新型基因编辑工具，被广泛用于基因编辑等领域，这一新技术的出现为相关领域带来了前所未有的变革和突破。CRISPR-Cas 基因编辑系统由簇状规则间隔短回文重复序列（Clustered Regularly Interspaced Short Palindromic Repeats，CRISPR）和 CRISPR 关联蛋白（CRISPR associated，Cas）组成。CRISPR-Cas 体系也为灵敏检测核酸分子等提供了新型的工具。Cas12a 属于第 2 类 V 型 CRISPR 系统，是一种由向导 RNA 引导的 DNA 靶向核酸酶，可特异识别 DNA 靶标，靶标 DNA 与 Cas12a 结合，激活 Cas12a 的“附属切割”活性，剪切单链 DNA 底物，这一特性可用于检测方法的信号放大。采用核酸适配体或免疫抗体作为识别分子，特异性识别目标分子，利用 CRISPR-Cas12a 体系的优势，我们发展了多种检测环境和健康相关小分子和蛋白质的新颖方法，通过 DNA 适配体或者 DNA 标记等将目标分子的测定转化成 DNA 的检测，借助 DNA 分子激活 CRISPR-Cas12a 的附属切割活性，来实现检测信号的输出和信号放大。所构建的方法操作简便、检测迅速、灵敏度高、具有通用性，显示出应用前景。

关键字 CRISPR-Cas，小分子，蛋白质，生物分析，免疫抗体，适配体

参考文献：

1. D. E. Scott, A. R. Bayly, C. Abell, J. Skidmore, Nat. Rev. Drug Discovery, 2016, 15, 533-550.
2. R. Barrangou, J. A. Doudna, Nat. Biotechnol., 2016, 34, 933-941.
3. J. S. Chen, E. Ma, L. B. Harrington, M. Da Costa, X. Tian, J. M. Palefsky, J. A. Doudna, Science 2018, 360, 436-439.
4. Y. Xiong, J. Zhang, Z. Yang, Q. Mou, Y. Ma, Y. Xiong, Y. Lu, J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 207-213.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

国产内螺旋结构的通道电子倍增器及其性能研究

刘术林*、张斌婷、闫保军、刘旭东、彭华兴、李国浩
中国科学院高能物理研究所

为了探测质谱仪器中从分析器出来的离子，研制出内螺旋结构的通道电子倍增器，利用铅铋硅酸盐玻璃经高温氢还原后在其表面形成比较合适的电阻层和在这种玻璃中适当增加碱金属氧化物/或碱土金属氧化物，可以获得较高的二次电子发射系数的特征，首先吹制喇叭口结构，使得其最大限度的提高通道电子倍增的收集效率，其次，制作内螺旋通道，由此获得较多的碰撞次数进而获得较高增益和降低离子反馈，最后，把两者封装成一体，通过选择合适的氢还原温度和时间，并通过健全分析测试手段，来全面评价通道电子倍增器的性能，测试结果表明：新研制的通道电子倍增器在直流模式下的增益达到 10^6，脉冲计数模式下的增益达 10^7，在较高工作电压下达到 10^8，暗电流和暗计数率均小于由两块微通道板构成的电子倍增器 1~2 个数量级，动态范围比微通道板有探测器高 2~3 个数量级，总体技术指标与国际同行相当。通过优化材料和工艺以及测试评价，新研制的内螺旋通道的通道电子倍增器性能优越，是质谱仪器的较好检测器候选之一。

关键字 通道电子倍增器，增益，动态范围，质谱

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

原位电化学质谱分析系统的搭建与应用

魏振威*
武汉大学

电化学合成与催化不仅是当代化学工业重要组成部分，同时还关系着国家未来的能源安全，是实现我国“双碳”战略目标的重要途径。为了阐述清楚复杂电化学反应过程的机理，实现电化学反应过程的理性调控，需要针对电化学反应过程中丰富的中间体以及产物开发高灵敏度、定性与定量的分析。质谱法具有灵敏度高、选择性好、无需标记等特点，通过结合高分辨质谱技术和串联质谱技术，可以快速对于复杂体系样品中多个组分实现定性表征与定量分析，因此非常契合电化学反应机理研究的需求。然而，由于中间体寿命通常在毫秒甚至微秒量级，这就对于质谱分析技术的原位性提出了巨大挑战。我们开发了浮地电化学电喷雾原位质谱分析系统，用于电化学合成与催化反应过程的中间体捕获与质谱分析。通过在浮地千伏级高压条件下，在纳喷雾喷针内集成构建电化学三电极反应系统，我们成功实现了电化学反应的原位质谱分析。这一策略还成功隔离了质谱离子化与电化学反应过程，使得质谱离子源参数与电化学反应过程参数可以独立操控，具有普适性。这一技术在未来将可能有效的推动电化学反应机理的研究的发展。

关键字 质谱、电化学、原位分析、短寿命中间体、反应机理、反应通路

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

小核酸药物体内时空分布规律研究

尹瑞川*、李小兰、王靖博
四川大学

小核酸药物，又称为寡核苷酸（oligonucleotides）是继小分子、抗体之后的第三大类创新药物，可分为反义寡核苷酸（ASO）、小干扰 RNA（siRNA）、微小 RNA（microRNA）和适配体（aptamer）等 1。与小分子和抗体不同，小核酸药物靶点是蛋白质上游的 RNA，而不是蛋白质本身，因而不会受到蛋白质结构的限制，在人类绝症和顽疾的治疗中表现出巨大潜力。由于小核酸是亲水性的阴离子聚合物，其细胞膜的穿透性极差，一般需要借助递送系统，因而确保精准地递送寡核苷酸到靶向细胞至关重要。递送效率低是导致众多临床寡核苷酸药物失败的重要原因。然而，如何精准地评价小核酸递送效率是极具挑战性的科学难题。传统的评价体系多依赖于荧光或放射性标记，并不能直接表征小核酸分子体内的时空分布特征。针对上述挑战，本文采用纳升解析电喷雾电离质谱成像技术（nano-DESI MSI），构建新一代免标记的评价体系，直观地揭示小核酸及其代谢物的时空分布特征，从递送和代谢两方面综合评价核酸递送系统的性能。我们通过优化 nano-DESI 探针制备过程、 引入剪切力显微技术以及离子化模式的快速切换，实现了空间分辨率和数据采集效率的双重提升，成功开发一种高通量的单细胞质谱成像方法 2。基于该技术，我们构建了自动化核酸鉴定及定量分析一体化的技术平台， 用于探究小核酸药物和相关代谢物的组织空间分析规律。该平台能精确地评价小核酸药物的递送效率，为开发科学高效的递送系统提供重要的科学依据。

关键字 小核酸药物、纳升解析电喷雾电离、质谱成像、递送效率

参考文献：

1. A. Khvorova, J. K. Watts, *Nat. Biotech.*, **2017**, 35, 238-248.
2. R. Yin, K. E. Burnum-Johnson, X. Sun, S. K. Dey, J. Laskin, *Nat. Protoc.*, **2019**, 14, 3445-3470.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

水自由基阳离子与碳一化合物的反应研究

张小平[1]、段敏敏[1]、胡平花[1]、陈焕文*[2]
1. 东华理工大学
2. 江西中医药大学

水自由基阳离子（H_2O^+）因其独特的化学特性，在众多重要的化学和物理过程中表现出关键的作用，受到科学界的广泛关注。在前期研究中，我们发现，水自由基阳离子是一种高活性物种，能够与丙酮 1、烯醇 2、碳碳双键 3、和氮氮三键 4、芳香胺等复杂化合物快速发生化学反应，有效破坏有机物的化学键。

碳一化合物，如二氧化碳和甲烷等，作为自然界和工业应用中不可或缺的化合物，在燃烧、合成以及大气化学等领域的作用显著。系统地探讨水自由基阳离子对碳一化合物的反应机制，不仅为我们深入理解大气化学中物质的动态平衡提供了理论支持，还为新型化学生产技术的发展提供了实践指导。最近，我们深入探究了水自由基阳离子与碳一化合物反应的机理，深入揭示反应中间体的结构及动态变化。例如，我们发现水自由基阳离子能够高效活化甲烷形成甲醇产物（图 1），高效活化二氧化碳形成甲酸和草酸产物等。我们团队的研究旨在显著推动绿色化学工艺的进步，通过精确的理论计算和实验验证，致力于解决这一领域中的科学挑战。

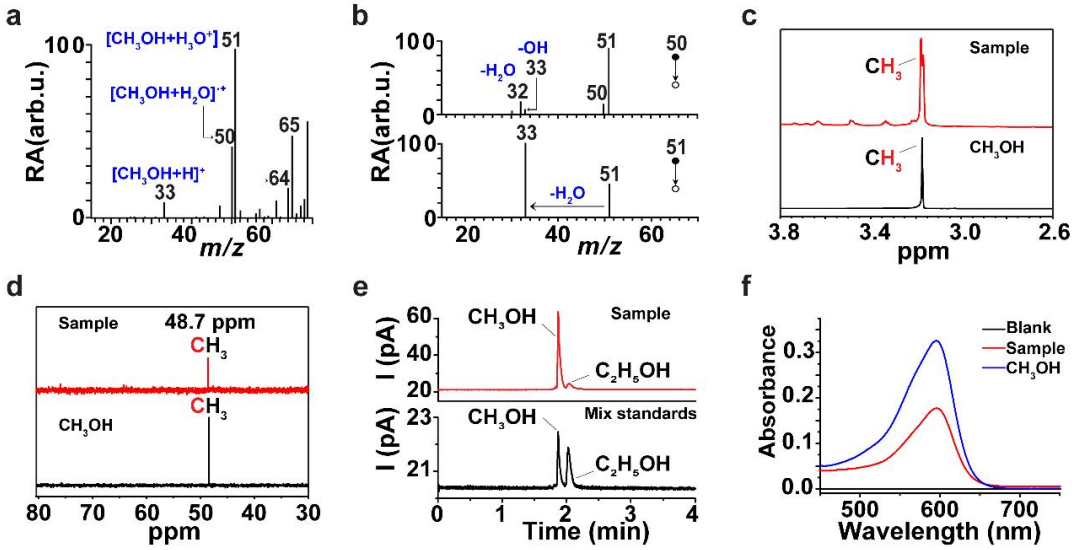


图 1. 采用质谱、核磁、气相色谱、紫外光谱等手段对水自由基阳离子与甲烷反应形成甲醇的表征结果

关键字 水自由基阳离子；甲烷；甲醇；质谱

参考文献

[1] Zhang X., Ren X., Zhong Y., Chingin K., Chen H. Rapid and sensitive detection of acetone in exhaled breath through the ambient reaction with water radical cations. *The Analyst* **2021**.

[2] Zhang X., Ren X., Chingin K., Xu J., Yan X., Chen H. Mass spectrometry distinguishing C=C location and cis/trans isomers: A strategy initiated by water radical cations. *Analytica chimica acta*

2020, *1139*, 146-154.

[3] Yang W., Zhang X., Zhang J., Wang G., Liang H., Zhang X., Chingin K., Chen H. Determination of C═C Positions of Unsaturated Fatty Acids in Foods via Ambient Reactive Desorption Ionization with Water Dimer Radical Cations. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **2024**, *72*, 845-856.

[4] Zhang X., Su R., Li J., Huang L., Yang W., Chingin K., Balabin R., Wang J., Zhang X., Zhu W. Efficient catalyst-free N_2 fixation by water radical cations under ambient conditions. *Nature communications* **2024**, *15*, 1535.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

便携式数字离子阱质谱仪的研制与应用

李灵锋*、任杰、冼天信、田森、赵天翼、李鹏
苏州大学

便携式质谱仪的研制有助于使具备强大分析能力的质谱仪从实验室走向现场检测[1,2]。本文重点开展了直接吸气与热解析进样技术、基于空气放电的离子源技术和数字离子阱技术的研究，研制了可以应用于现场快速检测的便携式数字离子阱质谱仪[3,4]。直接吸气与热解析进样技术可以无需样品前处理，实现固体液体气体多种样品形态的现场快速的直接检测。在离子源方面，开展了电晕放电离子源及介质阻挡放电离子源的多种新颖结构的设计和研究，采用放电区和样品电离区分区结构的设计，放电电离更加稳定；反向吹扫和正向电场牵引的结构设计克服了基于空气放电产生的大量臭氧、氮氧化物等活性物质的干扰，样品电离产物可控，电离效率更高。采用的高精度数字方波射频源扫频技术和双曲面电极的线形离子阱质量分析器，利用数字离子阱赝势阱深更深的优势，结合双向辅助 AC 激发[5]，慢反扫激发解离等技术，实现了低质量截止的多级质谱功能。平台具备单位质量分辨的能力，检出限可达 5 pg（可卡因）或 1 ppbv（甲基膦酸二甲酯）以下，线性响应动态范围可达两个数量级。在所研制的平台上开展了爆炸物、毒品、危化品的现场快速检测的应用研究。结果表明该便携式数字离子阱质谱仪无需各种惰性气体、溶剂等耗材，同时具备强大的分析能力，符合现场快速检测的各种应用需求。

关键字 便携式质谱仪，数字离子阱，电晕放电离子源，介质阻挡放电离子源，现场快速检测

参考文献：

1. D. E. Austin, S. A. Lammert, *Int. J. Mass spectrom.* **2021**, 470, 116721-116722.
2. D. T. Snyder, C. J. Pulliam, Z. Ouyang, R. G. Cooks, *Anal. Chem*. **2016**, 88, 2-29.
3. L. Li, T. Zhang, W. Ge, X. He, Y. Zhang, X. Wang, P. Li, *Molecules* **2022**, *27*, 4551-4562.
4. L. Li, T. Zhang, D. Wang, Y. Zhang, X. He, X. Wang, P. Li, *Molecules* **2022**, *27*, 3506-3516.
5. C. Duan, J. Zhang, T. Xian, L. Li, Y. Zhang, X. He, P. Li, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **2024**, *35*, 551-560.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

基于 CRISPR-Cas 系统的传感与调控研究

刘晓玲*
西北农林科技大学

众所周知，T7 RNA 聚合酶以 T7 启动子下游序列为模板进行体外转录，然而我们首次发现 poly(T)模板有助于转录生成超长 RNA 链，其转录效率相比于常规模板得到了很大的提高。T7 RNA 聚合酶的 poly(T)序列依赖性转录行为极大地改善了转录效率。实验结果显示，在 T7 启动子下游以 36 nt poly(T)序列作为转录模板时，会生成一系列长链产物，而不是生成与模板长度相同的转录产物，并且电泳条带中最短的长度与转录模板的长度相同（~36 nt）。我们进一步研究了使用不同长度的 poly(T)模板对转录产物的影响，结果表明使用长度更长的 poly(T)模板可以生成更长的转录产物，并且条带最短位置都与相应模板中 poly(T)的长度相对应。此外，还测试了相同长度（27 nt）的不同序列的模板对转录产物的影响。结果发现当模板为随机序列时，产物主要条带的长度与预期的转录产物相同。当模板为 27G 时，泳道中出现的短的且微弱的条带，说明只产生了少量的 RNA 产物。这是因为转录模板富含的 poly(G)形成极其稳定的 G-四链体二级结构，从而使转录反应难以发生。当以 27C 为模板时，由于难以合成仅由 rG 碱基组成的长链，因此泳道中只产生了一条短的条带。通常在转录出几个 rG 碱基后，反应就会终止。当使用 27A 作为转录模板时，也只生成了比 27 nt 短的条带，可能是 T7 RNA 聚合酶对 UTP 不敏感使其将 UMP 掺入转录产物的能力较弱的原因。相反，当使用 27T 为转录模板时，就会转录出大量的长链产物，泳道中显示连续且弥散的电泳带。这些结果表明，一旦转录从 poly(T)模板开始，T7 RNA 聚合酶可以具有类似于 Poly(A)聚合酶的性质，可以启动无模板的 3'-端 RNA 的延伸，产生大量的长链 RNA，形成信号放大。这种基于 T7 RNA 聚合酶对 poly(T)模板转录出长链产物的奇怪现象在以前未见报道，其确切机理仍需进一步探索。

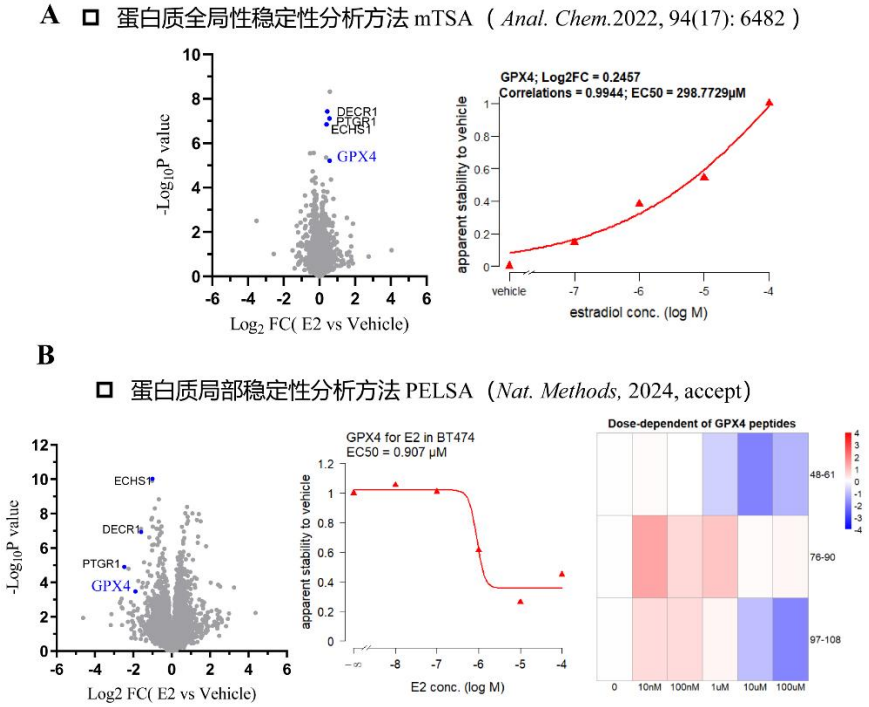
关键字 T7 RNA 聚合酶，转录，poly(T)模板，信号放大

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

配体免修饰的靶蛋白质组技术用于性激素 17β-雌二醇靶蛋白鉴定

李亚楠[1]、汪海林[2,3]、叶明亮*[1]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 国科大杭州高等研究院
3. 中国科学院生态环境研究中心

配体作用蛋白的深入解析有助于全面理解配体对机体功能的调控，进一步促进机制揭示、新药开发以及疾病治疗。近年来，借助高通量的质谱技术，多种基于能量状态差异的靶蛋白质鉴定方法被开发，并成功应用于不同类型配体（药物、代谢物、污染物等）-蛋白质相互作用的研究，这些方法无需配体修饰，普适性好，可以实现靶蛋白质空间的“一网打尽”。雌二醇（17β-estradiol，E2）是哺乳动物主要的雌激素，主要通过与受体蛋白结合参与机体各种生理、病理活动的调控过程，但相关靶蛋白质及内在机制尚不明确。基于此，本工作基于课题组开发的多种新型配体免修饰靶蛋白质组学技术从乳腺癌 BT474 细胞中鉴定 E2 靶蛋白质，从定量到的 5000 多个蛋白质中发现了潜在靶蛋白质 GPX4，后续利用基于免疫印迹分析的细胞热位移分析（CETSA）及有机溶剂诱导蛋白质沉淀方法（SIP）在活细胞和裂解液层次确认了 BT474 细胞中铁死亡关键调节蛋白 GPX4 与 E2 存在直接结合，进一步分析发现，E2 处理可以显著下调 BT474 细胞中 GPX4 的表达，并促进脂质过氧化发生，提示 BT474 细胞内 E2 可以和 GPX4 直接结合并促进铁死亡发生。



图：配体免修饰的靶蛋白质组技术用于性激素 17β-雌二醇靶蛋白鉴定

关键字 靶蛋白鉴定，雌二醇，蛋白质组学

参考文献：

1. Mingliang Ye*, et al. (2022). *Anal. Chem.* 94(17): 6482-6490.
2. Mingliang Ye*, et al. (2024). *Nat. Methods* accepted.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

化学标记技术辅助的糖蛋白质组学研究

刘嘉琳*
国家蛋白质科学中心（北京）

蛋白质以其巨大的复杂性和瞬息万变的动态性提供了生物系统与生命万象结构、功能的物质基础。其中，结构复杂多变的糖基化修饰极大地增添了蛋白质组功能的多样性，糖基化异常与许多人类重大疾病的发生发展息息相关。然而，由于富集技术与分析方法尚不完善，目前糖蛋白质组学分析仍存在鉴定深度不足、糖基化修饰类型覆盖面不全等局限，难以从全局上系统揭示生命体内糖基化修饰的调控网络，一定程度上制约了糖生物学功能的探索。因此，我们基于聚糖的化学标记技术，先后发展了位点特异性 O-GlcNAc 修饰鉴定深度覆盖与精准定量技术，多类型糖基化修饰一体化综合解析新技术；揭示了角蛋白 18（Keratin 18）第 30 位丝氨酸上 O-GlcNAc 修饰促进胆管癌细胞体内外生长的调控机制。基于化学标记技术建立的全面、精准、高效的定量糖蛋白质组学分析平台，系统性描绘生命体在不同生理或病理状态下其糖基化修饰时空变化图谱，为化学糖生物学的发展提供有利新工具。

关键字 化学标记；糖基化修饰；糖蛋白质组学；质谱分析

参考文献：

1. **J. Liu**, B. Cheng, X. Fan, X. Zhou, J. Wang, W. Zhou, H. Li, W. Zeng, P. Yang, X. Chen*, *Angew Chem Int Ed Engl*, **2023**, 62, e202303410.
2. **J. Liu#**, Y. Hao#, Y. He, X. Li, D. Sun, Y. Zhang, P. Yang*, X. Chen*, *ACS Chem Biol,* **2021**, 16, 1917-1923.
3. **J. Liu#**, Y. Hao#, C. Wang#, Y. Jin, Y. Yang, J. Gu*, X. Chen*, *ACS Chem Biol,* **2022**, 17, 513-520.
4. X. Meng#, Y. Zhou#, L. Xu, L. Hu, C. Wang, X. Tian, X. Zhang, Y. Hao, B. Cheng, J. Ma*, L. Wang*, **J. Liu***, R. Xie*, *ACS Cent. Sci.,* **2024**, 10(5), 1065-1083.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

石油分子工程与石油组学

韩晔华*
中国石油大学（北京）

石油分子工程是石油化工的前沿发展方向，是复杂体系分子工程的典型代表。为了实现石油资源分子级的优化利用，必须从分子水平认知石油组成结构，以此为基础建立加工转化过程的构效关联，进一步掌握分子层次的反应机理和转化规律，从而完成加工过程分子级的定向调控，实现原子经济性的最大化。这是石油化工行业面向我国能源战略需求及产业转型升级的必经之路。

石油体系的复杂性阻碍了石油分子工程向分子层次的全面深入。报告人在多学科交叉的基础上通过分析方法和表征思路的根本创新，创建了一套全组分、全链条、多维度、跨尺度的分子测量方法学，在分子辨识、构效关系、反应机理三个层面逐级实现认知突破，指导石油的高效清洁转化：（1）针对分子组成复杂性造成的分子辨识受限，创建了可控优势软电离的新方法，开发了多级结构快速解析技术，突破了石油分子表征的盲区，解决了重质油及全链条石油产品的全组分分子表征难题；(2)针对转化规律复杂性造成的构效关系认知受限，提出了重油分子结构序列分析和结构基因分区的新思路，开发了分子结构-分子尺寸的耦合测量法，为分子扩散性能表征增加了新维度，建立结构分区-性能分区和传递-反应的关联；（3）针对体系界面复杂性造成的反应机理研究受限，开发了亚稳态反应中间体的捕集测量方法，设计分子离子反应开展气液相转化过程的反应活性位点研究，拓展了反应机理研究的微区时间尺度，揭示了相态转化过程的异构互变及动力学捕获现象。

创新的分子测量方法学不仅有效解析石油体系，在其它复杂有机体系如环境水、土、PM2.5 以及生物体系都显示出强大的剖析能力。全面深入的分子表征为复杂体系分子工程奠定基础。

关键字 石油组学，质谱，分子工程

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

高压液-固催化反应的在线质谱表征

崔存浩[1]、周忠岳[2]、齐飞*[2]、郑兰荪[1]
1. 厦门大学化学化工学院
2. 上海交通大学机械与动力工程学院

溶液介质中的液-固催化反应涉及到固-液或气-液-固界面，反应物、产物、溶剂和催化剂之间的相互作用更为复杂。对反应体系进行实时的物种检测与过程分析，是解析反应机制并精确控制液-固催化反应过程的关键。但固体催化剂以及高温高压的反应条件制约了对此类反应体系的在线表征，制约了高压液-固多相催化反应的实时演变追踪与中间体捕获。质谱技术在过程分析与催化反应表征中扮演着重要的角色，其中在线质谱技术能够将反应溶液连续地从反应容器中转移到质谱仪上进行分析，获取接近实时的反应演变，截获并表征短寿命中间体。因此，利用在线质谱来表征反应物、中间体和产物的动态信息，对于揭示催化过程和反应机理具有重要价值。

本工作将介绍课题组在高压液-固催化反应在线质谱监测的探索，阐述为克服苛刻反应条件所采取的策略，如反应器设计、取样方式、催化剂隔离方案，以及反应器与电离源集成的反应监测技术等。采用所开发的方法，我们进行了若干高压液-固催化反应的体系研究，包括 Ru-Ni/SiO_2 催化的酚类小分子的加氢与氢解反应，Ru/C 与 Pd/C 催化的木质素聚合物解聚反应等，均获得了实时在线的物种演变，并结合多种表征手段对反应机理进行了研究。近日，本研究进一步将多级质谱技术结合到在线反应监测研究中，实现了木质素高压解聚过程中产物结构演变的实时追踪。本研究验证了对高压液-固催化体系进行在线质谱表征的可行性，证明了该方法对反应机理研究的积极意义。下一步工作将进一步探索对催化剂表面反应，有望实现接近原位水平的表面反应质谱表征。

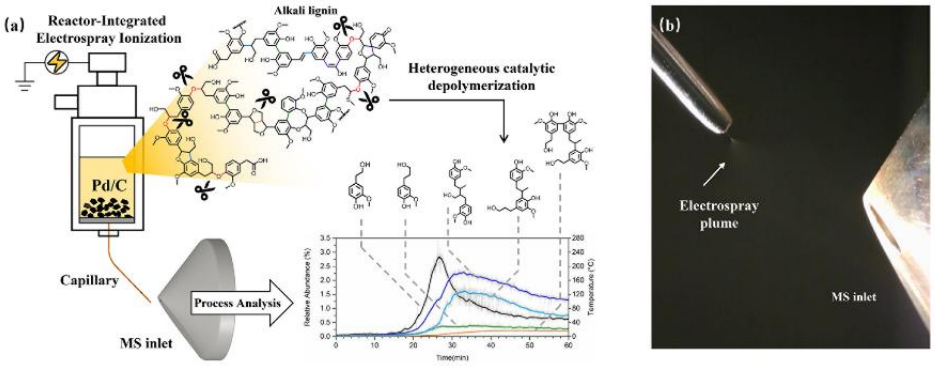


Fig. 1 Scheme of reactor-integrated ESI and image of electrospray plum

关键词 在线质谱；液-固催化；反应监测；电喷雾电离

参考文献

[1] Cui C, Liu X, Zhou C, Liu C, Zhou Z, Qi F. *Energy Fuels* 2021, 35(17): 13863-13870.
[2] Cui C, Chen X, Liu C, Zhu Y, Zhu L, Ouyang J, Shen Y, Zhou Z, Qi F. *Anal. Chem.* 2021, 93(38): 12987-12994.
[3] Cui C, Zhu L, Ouyang J, Shen Y, Ren H, Yuan W, Zhou Z, Qi F. *Applications in Energy and Combustion Science* 2022, 10: 100069-100077.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

直接电离质谱技术和仪器研发及标准化

洪欢欢[1,2]、陈腊[1,2]、甘剑勤[2]、范国正[2]、闻路红*[1,2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

直接电离质谱技术是2004年出现的一种颠覆性、新型质谱技术，相比传统质谱仪，样品只需要简单处理，不需要色谱分离，直接电离后进入质谱进行检测，具有速度快、效率高、操作简单、成本低、支持现场应用等优点，特别适用于各种有毒有害化学物质现场快速检测，在公安禁毒、食品安全、中毒急救、战场防化等现场快检领域具有传统质谱无可比拟的应用价值，成为质谱研究领域的前沿和热点，是实现质谱仪快速、低成本、操作简单、现场检测的最佳技术路线。直接电离质谱仪还没有解决仪器的灵敏度、抗污染、离子提取准确性等技术难题。

本文提出了一种新型直接电离质谱产品技术及标准化方法。设计了相对接地的安全放电技术，研制了单电极直接电离离子源DBDI，形成了高可靠性结构，可产生高达24.58 eV能量的高质量等离子体；提出了低真空连续进样质谱分析方法，提升了目标离子进入质量分析器数量，提高仪器灵敏度，研制了高灵敏度小型化直接电离质谱仪。实验结果表明，可检测出≤0.1 ng/mL的冰毒样本，实现了小型化Q-Trap离子精准筛选功能，产品整体技术达到国际先进水平。针对衡量直接电离离子源关键部件性能指标缺失问题，建立了离子电流评价方法，通过DBDI、nanoESI、PDESI等直接电离离子源的验证，形成了高质量要求的离子电流偏差指标值不超过10 %，已发布《直接质谱离子化装置》行业团标。针对直接电离质谱主机的性能评价标准缺失问题，构建了以多目标快筛、定性重复性等性能指标综合为一体的评判体系，可以涵盖现有直接电离质谱仪性能水平评估，已完成《敞开式直接电离质谱仪性能测定方法》国家标准立项，促进了直接电离质谱技术标准化体系建设。

本文研制的直接电离质谱联用系统具有定性半定量能力强、分析速度快、操作简单等优势，已批量用于公安禁毒、食品安全、中毒急救、战场防化等领域，作为新质生产力产品在现场快速检测领域具有良好的应用前景与推广价值。

关键字 直接电离，DBDI，小型质谱，标准化

参考文献：

1. Mirabelli MF; Wolf JC, Zenobi R. ANALYTICAL CHEMISTRY, 2016, 88 (14): 7252-7258.
2.葛赛金, 张英军, 朱雯飞, 吴辉, 白桦, 马强, 李晓旭. 分析化学, 2020, 48(1): 22-27.
3.洪欢欢, 赵鹏, 宁录胜, 闻路红, 徐铁锋. 分析化学, 2017, 45(10): 1529-1534
4. Conway C, Weber M, Ferranti A, Wolf JC, Haisch C. DRUG TESTING AND ANALYSIS, 2023, inpress. 5. Weidner L, Hemmler D, Rychlik M, Schmitt-Kopplin P. ANALYTICAL CHEMISTRY, 2023, inpress.
6. Dumlao M, Khairallah GN, Donald WA. AUSTRALIAN JOURNAL OF CHEMISTRY, 2017, 70 (11): 1219-1226.
7. Gazeli O, Elia EA , Argirusis N, Lazarou C, Anastassiou C, Franzke J, Garcia-Reyes JF, Georghiou GE, Agapiou A. ANALYST, 2024, 149(17): 4487-4495.
8.Zhai YB, Fu XY, Xu W. MASS SPECTROMETRY REVIEWS, 2024, 43 (5): 1172-1191.

9. Huo XM, Gan L, Ding XY, Yu Q, Zhou B, Zhou JH, Qian X. ANALYTICA CHIMICA ACTA, 2024, 1318: 342943.
10. Ouyang Z, Zhou MW, Xia Y. JOURNAL OF THE AMERICAN SOCIETY FOR MASS SPECTROMETRY, 2023, 34(12): 2607-2610.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

高盐浓度液体内弱相互作用结构的直接原位质谱分析

张燕燕*、汪福意
中国科学院化学研究所

能源存储与转换领域的液体内存在多种复杂且多变的微观弱相互作用结构，这对于新能源器件（如锂离子电池、太阳能电池等）的能量转化效率以及极端环境适应性至关重要。然而，由于缺乏合适的分子表征技术，能源存储与转换领域液体化学长期处于“黑箱”状态，严重阻碍了下一代稳定、功能液体的理性设计。

目前，分子动力学模拟等理论计算方法以及包括拉曼光谱、红外光谱、核磁等在内的谱学表征方法已被广泛用于研究液体内微观化学结构，但无直接分子证据。能源存储与转换领域液体大多为高盐浓度、高度空气敏感液体样品，现有常规电喷雾电离质谱受离子化方式的固有限制，难以直接研究这类液体。飞行时间二次离子质谱（ToF-SIMS）是近年来得以迅速发展的表界面前沿质谱技术，其基于一次离子束轰击样品表面的原位采样及离子化的分析模式，为能源存储与转换领域液体化学的原位表征带来了新机遇。然而，受超高真空运行环境限制，传统 ToF-SIMS 仪器长期仅局限于固体样品分析。

针对 ToF-SIMS 超高真空室难以引入液体的技术瓶颈，我们基于聚醚醚酮（PEEK）基底研制了一种高真空兼容、高度化学稳定的微流控装置，在液体池上方采用一氮化硅薄膜进行封装，实现装置内液体与 ToF-SIMS 超真空环境的隔离。随后，使用聚焦至~300 nm 的一次离子束在氮化硅薄膜上现场构建一直径为 1~2 μm 的检测微孔，并利用液体表面张力将液体限域在微孔处，以此突破高真空限制，实现了液体的直接原位 ToF-SIMS 分析，发展了原位液相 ToF-SIMS 新技术。我们以直接分子证据解析了锂离子电池电解液、钙钛矿太阳能电池的前驱体溶液等的微观弱相互作用结构及其动态演变机制，构建了溶液微观化学与器件宏观性能之间的构效关系，对推动能源存储与转换领域技术革新具有重要意义。系列工作不仅展示了原位液相 ToF-SIMS 在高盐浓度、空气敏感液体的直接原位质谱分析方面的独特优势，还打破了 SIMS 是一种“硬”电离技术的刻板定义，打开了液体内弱相互作用结构原位可视化研究的新局面。

关键字 质谱分析；原位液相二次离子质谱；原位质谱；新能源液体；弱相互作用

参考文献：

[1] Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202215799.
[2] Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202303177.
[3] Sci. Adv. 2023, 9, eadf8412.
[4] ACS nano 2023, 17(13), 12629-12640.
[5] ACS Energy Lett. 2019, 4, 215-221.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

岛津创新自由基诱导解离（OAD）技术开启化合物结构解析新篇章

王荣荣*
岛津企业管理（中国）有限公司

岛津始终致力于研发新技术解决广大用户在质谱分析中面临的难题。OAD-TOF 是拥有创新离子碎裂技术的高分辨质谱产品，由岛津田中耕一质谱研究所开发。自由基诱导解离（OAD）能提供高价值的 MS/MS 数据，包含特征碎片离子等关键信息，为化合物结构解析开启新的篇章。自由基诱导解离（OAD）利用电荷中性的自由基进行碎裂，可兼容正/负离子采集模式。同时通过软件即可轻松切换传统 CID 和新型 OAD 分析模式，全面覆盖化合物结构信息。OAD-TOF 新产品将为化合物结构深度表征，脂类异构体分析以及非靶向脂质组学研究领域质谱用户带来全新的体验。

关键字 新型离子碎裂技术，自由基，脂质组学

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

高端质谱分析仪器的研制与应用

赵忠俊*[1,2]、邓辅龙[1]、翟培件[2]、罗英[2]、郭星[1]、裴红亮[1]、段忆翔[1,2]
1. 四川大学
2. 成都艾立本科技

质谱分析在获取物质成分、确定成分质量等方面至关重要，为质量控制、安全评估、环境监测和科学研究等领域提供了基础性支持。随着我国科学研究和社会生产的高质量发展，与日俱增的质谱仪器市场需求与研发水平不足的国内现状形成了结构性矛盾，尤其是高端质谱仪器面临国外垄断的“卡脖子问题”。质子转移反应飞行时间质谱（Proton transfer reaction time-of-flight mass spectrometry, PTR-TOF MS）和三重四极杆质谱（Triple quadrupole mass spectrometry，TQ MS）作为高端质谱分析仪器的重要代表，具有高灵敏度，高准确性的特点，也由于技术门槛较高，难以实现国产化突破。本团队基于质子转移反应技术，成功研制了高性能分段漂移管电离装置、射频四极杆离子传输器和基于正交加速的飞行时间质量分析器，实现了高分辨高灵敏度质子转移反应飞行时间质谱仪的国产化，并在大气环境监测、医学诊断、石油化工和高端科研等领域开展了广泛应用。此外,本团队深入研究了四极场理论，突破了基于碰撞冷凝的多极杆离子传输、结合预四极的四极杆质量分析和分段四极杆碰撞诱导解离等关键技术，结合高性能电喷雾电离源、离子漏斗及离子检测器，成功实现了三重四极杆质谱仪的全正向自主研制，质量范围 10~1500amu，分辨率 0.5amu，质量偏差小于 0.1amu，达到国内领先水平。

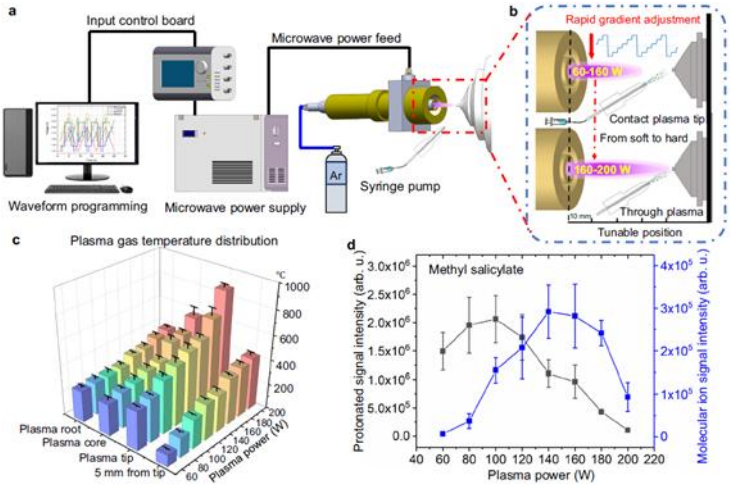
关键字 质谱；三重四极杆；飞行时间

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：报告

宽能可编程微波等离子体离子源的研发与应用

褚冯键[1]、赵高升[2]、冯鸿儒[1]、潘远江[1]、汪小知*[1]
1. 浙江大学
2. 上海大学

虽然在过去的 20 年里已经开发了许多常压电离质谱技术来解决不同的分析问题，但仍然缺乏一种可以处理所有类型分析物的单一离子源技术 1, 2。我们提出了一种宽能量可编程微波等离子体电离质谱(WPMPI-MS)系统，通过对微波能量的数字化调节，可以实现对各种特性物质的高覆盖 MS 分析。此外，可以使用可编程波形快速扫描电离能，从而可以在几秒钟内同时检测生物分子，重金属，非极性分子等。WPMPI-MS 在实际样品分析中表现良好，可在一滴血清中快速分析 9 种毒理学标准，并具有良好的定量和液相色谱耦合能力。WPMPI-MS 还被用于检测土壤提取物、固体药物和垃圾填埋场渗滤液，证明了其对实际样品的强大分析能力。进一步的，我们发现该离子源中存在快速氧化反应，可以在毫秒时间内无催化氧化各类污染物，且与环境代谢一致，可用于环境污染物的预测。在此基础上，利用氧化特性实现了常规方法无法检测的全氟烷基磺酰氟的质谱分析，通过在线氧化取代，开发了一种非衍生化的全氟烷基磺酰氟的直接检测技术。综上所述，该技术在生物和环境化学分析方面的潜在用途是广泛的，预计将成为商用离子源的可行替代方案



关键字 离子源，等离子体电离，环境分析，常压质谱，液质联用分析

参考文献

1. Takáts, Z., Wiseman, J. M., Gologan, B. & Cooks, R. G. Mass Spectrometry Sampling Under Ambient Conditions with Desorption Electrospray Ionization. Science, 2004, 306, 3.
2. Shi, L. et al. Ambient IonizationMass Spectrometry: Application and Prospective. Crit. Rev. Anal. Chem., 2022, 1–5.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

在微液滴中无催化加速单糖的脱水反应

胡文娅、刘继坤、韩晔华*
中国石油大学（北京）

5- 羟甲基糠醛（HMF）是一种可以由单糖制备的重要平台化合物。从单糖中脱水合成 HMF 对许多生物制品和生物燃料的生产具有重要意义。然而，目前关于葡萄糖制备 HMF 的方法需要催化剂、较长的反应时间以及较高的反应条件，苛刻的反应条件阻碍了其发展和工业化。微液滴表面存在多种特殊性质，例如比表面积高、蒸发速度快、酸碱性特殊、分子取向有序、存在界面电场等。这些特殊的性质会显著影响微液滴反应中的动力学，从而大幅增加反应速率。在这项工作中，采用电喷雾法制备微液滴，在微液滴中实现了葡萄糖在无催化剂条件下快速合成 HMF。接着，使用离子迁移率质谱(IMMS)对反应过程中的中间体进行了捕获和分离，为酸催化反应机理提供了证据。通过操控微喷雾的条件，加速了 HMF 合成的两个关键步骤——异构化和脱水。使用量子化学计算法证实了微液滴表面异构化和脱水过程的活化能的降低。本工作的方法相比已报道的体相合成方法的表观加速系数在 5~6 个数量级。微液滴在加速单糖脱水反应的有效性凸显了其作为绿色化学合成工具的潜力。

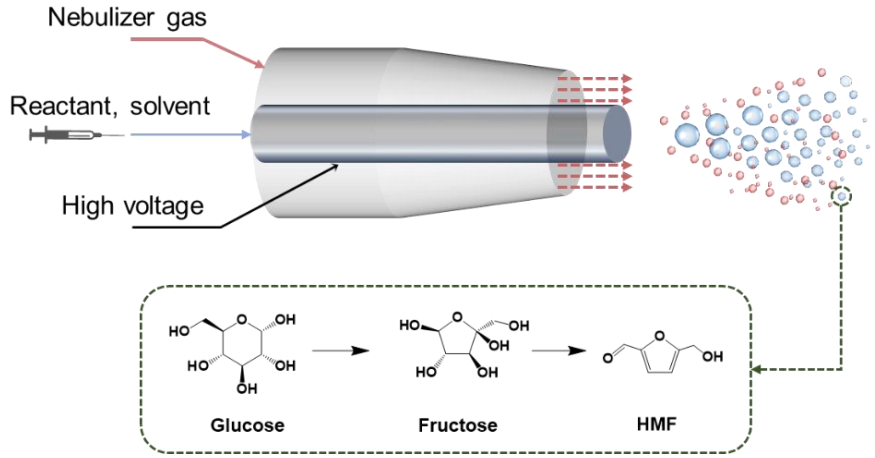


图 1 利用葡萄糖无催化加速合成 HMF 的微滴反应器示意图

关键字 反应加速，微液滴，5-羟甲基糠醛，无催化反应

参考文献

1. J.K. Lee, D. Samanta, H.G. Nam, R.N. Zare, Micrometer-Sized Water Droplets Induce Spontaneous Reduction, J. Am. Chem. Soc. 141(27) (2019) 10585-10589.
2. Z. Wei, M. Wleklinski, C. Ferreira, R.G. Cooks, Reaction Acceleration in Thin Films with Continuous Product Deposition for Organic Synthesis, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 56(32) (2017) 9386-9390.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

减少胞质 DNA 成像中的干扰：一种新方法

刘海龙[1,2]、宋星睿[1]、赖玮毅[1]、汪海林*[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

胞质 DNA 在天然免疫中起着至关重要的作用，其检测与响应机制为理解免疫系统的功能和调控提供了新的视角。微核的形成、胞质染色质片段的产生、线粒体 DNA 的释放和反转录转座子的激活均会导致胞质 DNA 的产生。胞质 DNA 的积累与细胞衰老、慢性炎症和神经退行性疾病有关，在细胞的正常功能、免疫反应和疾病发展中具有重要的生物学意义。PicoGreen（PG）是一种超敏感的荧光核酸染料，广泛应用于胞质 DNA 成像及定量、溶液和凝胶中的 DNA 定量、细胞增殖测定和生物样品中循环核酸的分析。由于存在背景干扰，细胞原位成像胞质 DNA 并进行准确可靠的定量面临挑战。为了实现对胞质 DNA 的准确成像，必须对潜在干扰进行评估和去除，促进我们对胞质 DNA 的功能及其与免疫系统的交互的理解。我们的研究通过建立一种新的胞质 DNA 原位成像方法，应用 Proteinase K 处理策略，显著降低了背景荧光的干扰不仅提高了成像的准确性，而且为研究胞质 DNA 在免疫反应和炎症反应中的作用提供了新的视角。这一技术的成功开发和应用，将对细胞生物学、免疫学以及相关疾病的诊断和治疗研究产生重要影响。

关键字 胞质 DNA；PicoGreen；荧光成像；Proteinase K

参考文献

1.Jovasevic, V. et al. Nature, **2024**, 628, 145–153.
2.Miller, K. N. et al. Cell, **2021**, 184, 5506–5526.
3.Sun, L., Wu, J., Du, F., Chen, X. & Chen, Z. J. Science, **2013**, 339, 786–791.
4.Singer, V. L., Jones, L. J., Yue, S. T. & Haugland, R. P. Analytical Biochemistry, **1997**, 249, 228–238.
5.Emam, A. et al. Nat Cell Biol, **2022**, 24, 1154–1164.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于毛细管电泳-单分子荧光成像系统的蛋白质-DNA 复合物检测

凌晓婷[1]、章大鹏[1,2]、宋星睿[3]、赖玮毅[1]、赵强[1]、汪海林*[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院
3. 中国科学院大学

亲和毛细管电泳具有高灵敏度、高分辨率、快速、样品消耗小、操作简单等优势，能在生理条件下研究生物大分子如蛋白质和 DNA 之间的相互作用并进行多参数表征[1-4]。通过亲和毛细管电泳-激光诱导荧光偏振技术，不仅能够快速、灵敏地区分蛋白质-DNA 复合物和游离的蛋白质或 DNA，还能够进行多参数分析。通过基于方形毛细管的毛细管电泳单分子荧光成像系统[5]，能够分离、检测并成像单个蛋白质-DNA 复合物，是研究蛋白质-DNA 之间的相互作用重要的分析技术。此外，在样品中加入适量的甘油、聚乙醇等有机渗透剂不仅可以增强蛋白质-DNA 的结合亲和力，还可以降低复合物的解离速率，增强复合物的稳定性。对分离得到的单个蛋白质-DNA 复合物还可以进行质谱-亲和毛细管电泳联用。

关键字 质谱 毛细管电泳 蛋白质-DNA 复合物

参考文献

1. H L Wang, M L Lu, M S Tang, et al., DNA wrapping is required for DNA damage recognition in the Escherichia coli DNA nucleotide excision repair pathway. *Proc Natl Acad Sci USA*, **2009**, 106, 12849.
2. D P Zhang, M L Lu, H L Wang, Fluorescence Anisotropy Analysis for Mapping AptamerProtein Interaction at the Single Nucleotide Level. *J Am Chem Soc*, **2011**, 33, 9188.
3. B L. Zhao, D P Zhang, C M Li, et al., ATPase activity tightly regulates RecA nucleofilaments to promote homologous recombination, *Cell Discov*, **2017**, 3, 16053.
4. F Z Yu, D P Zhang, C B Zhao, et al., Flanking Strand Separation Activity of RecA Nucleoprotein
Filaments in DNA Strand Exchange Reactions. *Nucleic Acids Res*, **2023**, 51, 2270-2283.
5. S Q Liu, B L Zhao, D P Zhang, et al., Imaging of Nonuniform Motion of Single DNA Molecules Reveals the Kinetics of Varying-Field Isotachophoresis. *J Am Chem Soc*, **2013**, 135, 4644-4647.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

UHPLC-MS/MS 揭示脱氧核苷酸库清除系统控制 DNA 6mA 掺入

陈少坤[1]、李向军[2]、汪海林*[1]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学

细胞内 RNA m6A 降解可能导致 DNA N^6-甲基腺嘌呤（6mA）的异常错误掺入。生理上，错误掺入的 6mA 会破坏碱基配对和 DNA 双螺旋构象，影响 DNA 的复制和转录。本研究采用稳定同位素标记技术和超灵敏 UHPLC-MS/MS 分析技术，发现在大多数测试的哺乳动物细胞系中胞内 RNA m6A 降解几乎不会导致游离 6mA 核苷的产生，且不会进一步导致错误掺入 DNA 6mA 的产生，这说明存在阻断 6mA 错误掺入的脱氧核苷酸库清除系统。进一步实验表明，脱氨酶 ADAL、焦磷酸酶 MTH1 和腺苷酸激酶 1（AK1）以及其他调控蛋白共同组成了该清除系统。少数哺乳动物细胞（如 NIH3T3 细胞）中该清除系统的失效，会导致异常的高水平 6mA 掺入。本研究揭示了维持基因组表观遗传稳态的一种新机制。

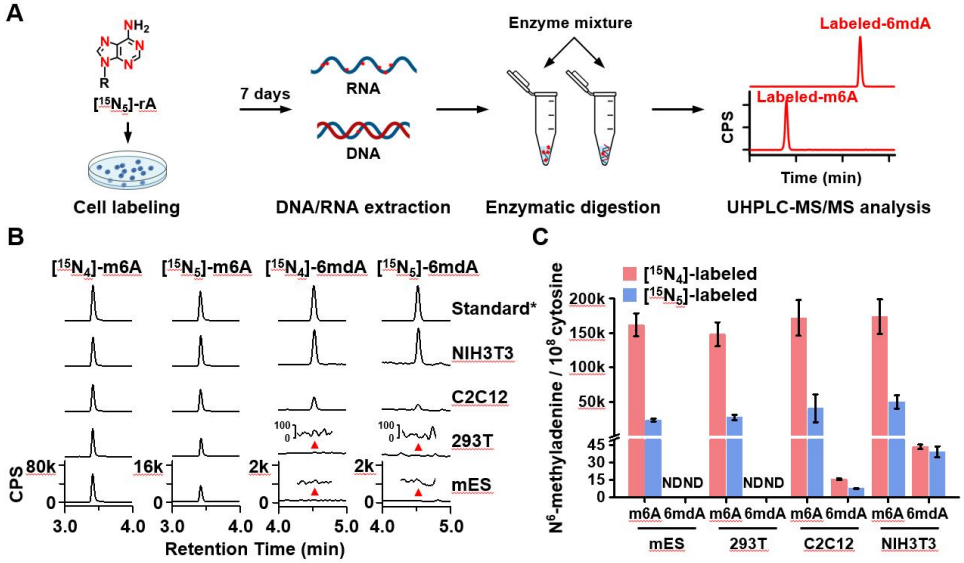


图 1. 稳定同位素示踪技术结合 UHPLC-MS/MS 分析追踪哺乳动物细胞中 RNA m6A 到 DNA 6mA 的转化代谢进程。

关键字 HPLC-MS/MS，DNA 6mA 掺入，脱氧核苷酸库清除系统，脱氨酶 ADAL，腺苷酸激酶 1

参考文献

1. Musheev M. U., Baumgärtner A., Krebs L., & Niehrs C. *Nat. Chem. Biol.*, **2020**, 16, 630-634.
2. Liu X., Lai W., Li Y., Chen S., Liu B., Zhang N., et al. *Cell Res.*, **2021**, 31, 94-97.
3. Chen S., Lai W., Li Y., Liu Y., Jiang J., Li X.*, Jiang G., Wang H.* *EMBO J.*, **2023**, 42, e113684.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于脱氨酶的全基因组 R 环定量及定位

房天骄[1]、张一帆[1,2]、汪海林*[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

R 环（R-loop）是基因组中一类特殊的非 B 型 DNA 结构，由一条 DNA：RNA 杂交链和一条单链 DNA 组成，其在生物体中广泛存在，在基因转录调控、DNA 复制、DNA 损伤和修复以及 DNA 稳定性等方面发挥重要作用[1]。R 环检测的现有方法主要依赖于识别 DNA：RNA 杂交链的抗体（S9.6 抗体）或酶（RNase H 突变体及其衍生工具），这些技术的发展极大地促进了 R 环的生理和病理性功能的深入研究[2]。然而，目前仍存在一些局限性，独立的方法之间结果存在不一致性，因此，发展精确、无偏、特异的基因组 R 环定量和全基因组定位方法仍是 R 环研究领域亟待解决的一大挑战。

我们关注到一类脱氨酶，它能够特异性地识别单链核酸结构，并对其上的胞嘧啶脱氨为尿嘧啶产物。R 环结构中暴露的单链 DNA 是该脱氨酶的潜在底物。基于此，我们提出了一种基于脱氨酶的全基因组 R 环定量及定位方法。脱氨酶作用于 R 环的单链 DNA 上将脱氧胞嘧啶（dC）转化为脱氧尿嘧啶（dU），同时以 RNase H 处理消除 R 环结构作为对照，利用 HPLC-MS/MS 对转化产物进行定量，通过转化率的统计在整体水平上识别和定量 R 环。另外，脱氨酶处理后产生的 dU 在经文库构建及二代测序后会被识别为脱氧胸腺嘧啶（dT），通过数据分析比对 dC 到 dT 的突变即可实现 R 环的定位。该方法过程温和，不依赖于 DNA：RNA 杂交链的免疫沉淀，期望通过合适的脱氨酶反应条件、高分辨的 HPLC-MS/MS 分析方法和有针对性的生物信息学分析流程，实现在全基因组水平上 R 环的准确定量和定位。

关键字 R 环，脱氨酶，脱氧尿苷

参考文献

1. T. García-Muse, A. Aguilera, Cell, 2019, 179, 604-618. 2. F. Chédin, SR. Hartono, LA. Sanz, EMBO J., 2021, 40, e106394.
2. Liu X., Lai W., Li Y., Chen S., Liu B., Zhang N., et al. *Cell Res.*, **2021**, 31, 94-97.
3. Chen S., Lai W., Li Y., Liu Y., Jiang J., Li X.*, Jiang G., Wang H.* *EMBO J.*, **2023**, 42, e113684.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

鹿茸干细胞外泌体对溃疡性结肠炎的治疗作用及机制研究

杨姝[1,2]、曾姝洁[3]、随志刚[1]、张玉奎[1]、张丽华*[1]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 中国医科大学
3. 大连医科大学

炎症性肠病(inflammatory bowel disease, IBD) 是一组病因和发病机制不明，慢性特发性胃肠道炎性疾病，包括克罗恩病 (Crohn's disease, CD) 和溃疡性结肠炎 (Ulcerative Colitis, UC)。既往在西方国家常见，近 20 年来在我国发病率逐渐升高。目前 IBD 治疗的主要药物是氨基水杨酸盐、糖皮质激素、免疫抑制剂和生物制剂等，但迄今为止，仍无治愈 IBD 的药物和方法[1]。 IBD 病程迁延反复，对患者身心健康造成严重损害，且医疗费用高昂。因此，随着 IBD 患者的不断增加，IBD 已然成为一个亟待解决的重大社会健康问题[2]。外泌体由于其高生物兼容性和被肠道有效吸收的能力，可用于治疗 IBD。然而，鹿茸干细胞来源的外泌体（ASC-exos）尚未在此背景下进行研究，其作用机制仍不清楚。

本研究通过建立 DSS（dextran sulfate sodium）诱导的 UC 小鼠模型，以鹿茸干细胞外泌体（Antler stem cell derived exosomes，ASC-exos）进行干预，评价其在复杂的炎症微环境中介导细胞间通讯以治疗 IBD 的能力，我们发现 ASC-exos 腹腔注射可以抑制 UC 小鼠体重下降并降低 DAI，减少结肠缩短和组织损伤；显著稳定肠道屏障，从而促进组织修复；抑制促炎因子表达，促进抗炎因子表达；明显降低肠道组织的氧化应激反应。体外实验证明，ASC-exos 可以显著修复结肠上皮细胞相关屏障功能，改善巨噬细胞的炎症及氧化应激等反应。同时，我们从体内和体外两个方面验证了 ASC-exos 的安全性。总体而言，我们证明了 ASC-exos 可以在体内和体外通过修复肠道屏障、改善炎症和氧化应激来减轻小鼠的 IBD，并基于蛋白质组学进行作用机制的探索。这项研究为 ASC-exos 在 IBD 背景下的潜在治疗效果提供了新证据，为替代治疗策略提供了概念基础。

关键字 炎症性肠病；鹿茸干细胞；外泌体；蛋白质组

参考文献：

1. 吴开春, et al., 炎症性肠病诊断与治疗的共识意见(2018 年·北京). 中国实用内科杂志, 2018. 38(09): p. 796-813.
2.Ng, S.C., et al., Worldwide incidence and prevalence of inflammatory bowel disease in the 21st century: a systematic review of population-based studies. *Lancet,* **2017**. 390(10114): p. 2769-2778.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

质谱-荧光双模态监测单细胞铁死亡过程中的脂质

安倩、黎永毅、魏振威*
武汉大学

传统的群体分析方法往往掩盖了个体细胞的差异，无法准确反映生物系统的复杂性，而单细胞技术能够揭示细胞群体内部的异质性。然而，传统的单细胞分析技术虽然能够在细胞水平上提供重要的生物学信息，但往往难以全面反映细胞内的动态变化。质谱（MS）和荧光成像技术的结合，有望在荧光成像的引导下实现细胞空间脂质组学和代谢组学。基于此，本工作开发了一种 PlasmonTip MS 与荧光成像结合的单细胞平台用于实时监测铁死亡过程中的单细胞脂质变化。

关键字 质谱；荧光；铁死亡；空间脂质组学

参考文献

1. X.M. Sun, Y. Yu, K. Qian, J. Y. Wang, L. Huang, Small Methods, 2023, 8, 2301317. 2. X. X. Chen, Z. K. Peng, Z. B. Yang, *Chem. Sci.*, **2022**,13, 6687-6695.
2. X. X. Chen, Z. K. Peng, Z. B. Yang, *Chem. Sci.*, **2022**,13, 6687-6695.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

光聚焦-诱导电喷雾质谱法用于原位光化学反应监测及动力学研究

黎永毅、韩金、王祥宇、魏振威*
武汉大学

对反应动力学的研究是理解反应过程的关键，然而利用质谱法监测快速光化学反应仍然具有挑战性。在此，我们开发了基于光聚焦-诱导电喷雾离子化（OF-iESI）装置，实现对光化学反应的实时原位监测。我们通过使用激光从纳升电喷雾玻璃毛细管后端同轴入射，纳升电喷雾玻璃毛细管可作为光学透镜实现光聚焦并在尖端处实现比其他区域更高的光学功率密度，从而实现对快速光化学反应的原位监测。通过理论计算，最高光功率密度区域体积约为 45 nL。此外，该装置集成了晶体管-晶体管逻辑电平（TTL）控制器实现对激光源（450 nm）脉冲持续时间（>1 ms）的精准调控，并通过严格控制脉冲时间，实现对光化学反应时间的精确控制和对反应动力学的研究。为验证该装置的原位分析能力，我们监测了四氢喹啉的脱氢过程中生成的短寿命自由基阳离子中间体。此外，我们还使用该装置研究了基于三线态能量转移 Paternò−Büchi 反应的动力学，结果显示其遵循准二级反应动力学。通过串联质谱法我们还成功识别了该反应中的短寿命供体-受体碰撞复合物中间体。

关键字 质谱，诱导电喷雾，反应监测，反应中间体，光化学反应

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

甲基化腺嘌呤核苷对体外培养红细胞分化的影响初探

梁子钰[1]、张俊辉[1]、侯之琳[2]、刘丽红[1]、胡立刚[1,2]、汪海林*[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

红细胞是血液中为人体所有组织和细胞供氧的重要细胞。全球性血液短缺问题的长久存在使得通过生物工程的方式体外制备红细胞有很大的研究价值[1]。由于红细胞生成过程受到复杂且严格的调控，体外培养红细胞分化成熟的技术尚有待优化。血红蛋白是评价红细胞成熟的重要指标之一，它由珠蛋白及亚铁血红素组成[2]。相较于对大量细胞进行平均血红蛋白含量检测，通过单细胞铁含量检测能对单细胞水平上红细胞的成熟程度进行评估。将体外培养的红细胞与外周血中成熟红细胞单细胞铁含量进行比对，有助于更加精确地了解在体内、体外成熟的红细胞的异质性，进而为优化体外红细胞制备技术提供新的见解。

本课题组在先前的研究中发现，在培养红系祖细胞早期爆式形成单位（burst-forming unit-erythroid, BFU-E）的扩增阶段，添加 DNA N6-甲基腺嘌呤（6mdA）能增强并维持细胞内 c-Kit 的表达及磷酸化，进而激活引起其下游 MAPK 信号通路和 PI3K/AKT 信号通路，促进红系祖细胞的大量扩增。值得注意的是，在扩增阶段使用 6mdA 处理后没有影响分化阶段成熟红细胞的产生，且分化后细胞血红蛋白含量上升及吐核细胞比例增加[3]。为进一步探究 6mdA 及其他甲基化腺嘌呤核苷对体外培养红细胞分化的影响，我们计划在红细胞体外培养的分化阶段在培养基中添加 6mdA 或其他甲基化腺嘌呤核苷，通过检测红细胞的单细胞铁含量，并结合细胞形态、细胞表面标志物表达情况、红系特异性相关基因表达等相关指标进行评估。同时也促进对于甲基化腺嘌呤功能的深入认识。

关键字 甲基化腺嘌呤核苷；红细胞生成过程；单细胞铁含量

参考文献

1. Cervellera CF, Mazziotta C, Di Mauro G, et al., Immortalized erythroid cells as a novel frontier for in vitro blood production: current approaches and potential clinical application[J], *Stem Cell Res Ther.* **2023**,14(1):139.
2. Muckenthaler MU, Rivella S, Hentze MW, Galy B, A Red Carpet for Iron Metabolism [J], *Cell*. **2017**, 168(3): 344-361.
3. Li Y, Liang ZY, Wang HL, N6-methyl-2'-deoxyadenosine promotes self-renewal of BFU-E progenitor in erythropoiesis [J], *iScience*. **2023**, 26(6):106924.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

原位阶梯伏安扫描流通式电化学质谱用于反应路径成像

崔曦、陈建雄、易红、魏振威*
武汉大学

我们搭建了一个可以实现阶梯伏安扫描的流动电化学池与质谱联用平台，并将该平台应用于电化学反应的实时、原位监测。在结构上，该平台将流动电化学池与气动喷雾接口进行集成，并在流动电化学池出口与质谱之间设置大气化学电离区域，能实现对短寿命电化学中间体的原位质谱监测，并提高了对较低极性电化学反应反应物、中间体及产物的检测灵敏度。除此之外，该平台还能够实现原位电化学质谱分析过程中电极电位的精确测量和控制，可以提供不同电极电位下多种电化学反应路径的详细信息，为电化学合成研究者优化反应条件和研究反应机理提供了有力的分析工具。

Step sweep voltammetry flow electrochemical (EC) mass spectrometry (MS) platform was developed for real-time and in-situ mapping of electrochemical reaction pathways. By integrating a flow EC cell into the pneumatic spray nozzle followed by atmospheric chemical ionization, this setup was capable for in-situ MS monitoring of short-lived EC intermediates with enhanced sensitivity. This setup also realized precise measurement and control of electrode potential during in-situ EC-MS analysis, which can provide detailed information on the interplay of reaction pathways under different electrode potentials, offering a powerful analytical tool for optimizing reaction conditions and investigating reaction mechanisms for the EC synthetic chemists.

关键字 电化学中间体；反应监测；大气压化学电离；电极电位；实时分析

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

电化学自由基中间体的高灵敏快速标记筛查和非靶向质谱分析

曾宸、陈建雄、朱成标、魏振威*
武汉大学

在电化学合成过程中经常会生成低丰度、短寿命、不稳定的自由基中间体，开发出一种自由基中间体的稳定化标记与筛查方法对于理解电化学反应机理至关重要。在本研究中，我们开发了一种化学标记策略，用于快速筛选和高灵敏度分析电化学自由基中间体。选用5,5-二甲基-1-吡咯啉氮氧化物（DMPO）作为标记试剂，带上 DMPO 标记信标的自由基中间体会在串联质谱中被迅速筛查出来。进一步结合我们最近搭建的浮地电化学电喷雾质谱平台（FE-ESI-MS），能够实现自由基中间体的在线确认。通过该策略，可以直接对潜在设计自由基反应路径进行筛查，我们研究并验证了对甲苯亚磺酸钠和 2-甲基-2H-吲唑的双自由基偶联机理。标记不仅稳定中间体结构，提高中间体质谱响应，标记产物还能在多级质谱中产生特征碎片，这种化学标记筛查策略能够提升质谱在非目标分析中发现重要电化学中间体的能力，并在未来进一步研究低丰度和短寿命的电化学中间体。

关键字 电化学自由基中间体，化学标记，5,5-二甲基-1-吡咯啉-N-氧化物（DMPO），非靶向分析

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

核酸纳米机器构建及其对炎症效应的活细胞成像应用

武梓萌、彭汉勇*、袁爱姣、郝慧芳、谢文菁
中国科学院生态环境研究中心

抗生素诱导的炎症反应涉及髓过氧化物酶(myeloperoxidase, MPO)的释放，该酶是多种疾病的生物标志物。MPO 的检测对了解炎症途径的毒性机制至关重要，但现有部分方法(如酶联免疫吸附测定、磁共振成像等)步骤多且易受干扰，不适合用于活细胞分析。本研究基于原位杂交探针成像技术，开发了一种 DNAzyme 纳米机器，利用金纳米颗粒(gold nanoparticles, AuNPs)作为支架，装载功能性 DNAzyme 链和底物链。当 MPO 存在时，会触发卤化过程生成次氯酸(HClO)，HClO 特异性地催化磷硫酰化(Phosphorothioate, PT)位点断裂，释放出游离的 DNAzyme 链，进而切割底物释放带有荧光标记的片段，产生荧光信号。该方法针对 MPO 的检测限为 38.0 ng/mL，HClO 的检测限为 13.0 nM。本研究开发的 DNAzyme 纳米机器可以进入细胞自主运作，并通过活细胞成像成功区分了 4 种高关注的抗生素诱导的炎症效应，为评估抗生素暴露的健康影响提供了新的手段。

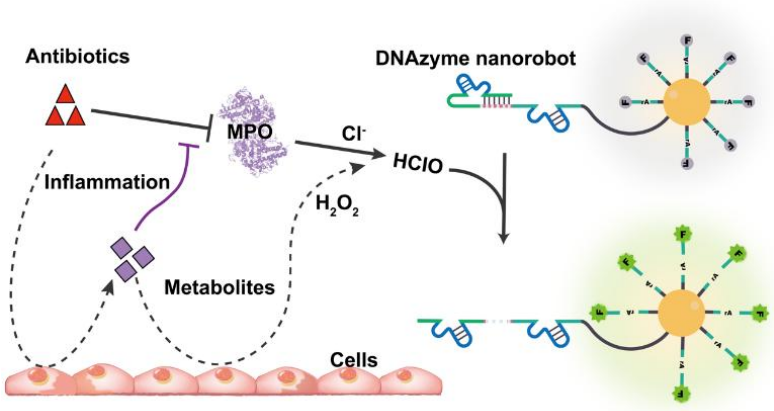


图 1 DNAzyme 纳米机器监测细胞内 MPO/HClO

关键字 DNAzyme 纳米机器；髓过氧化物酶；抗生素；炎症；卤化物

参考文献

1. Peng H, Li X F, Zhang H, et al. *Nat. Commun.*, **2017**, 8(1): 1-13.
2. Wu J, Peng H, Lu X, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60(20): 11104-11109.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

LC-MS 分析 mRNA 的 poly A 尾长

尹瑞川*、范瑞霞
四川大学药学院

2020 年 12 月，美国食品药品监督管理局批准了两种 COVID-19 疫苗，即辉瑞- biontech 公司的 BNT162b2 疫苗和 Moderna 公司的 mRNA-1273 疫苗的紧急使用权。这两种 mRNA 疫苗对于遏制 COVID-19 的发展起到了关键作用 1。同时治疗性 mRNA 也已成为治疗复杂疾病的有力工具，特别是对于缺乏有效治疗的疾病。已有研究证明其 3'-poly A 序列对 mRNA 的稳定性和高效翻译有关，但是由于 poly A 尾并非均一的长度，而是存在广泛的异质性，这种异质性对 mRNA 的稳定性和翻译效率有重要影响 2，因此准确表征 poly A 的尾长及其分布至关重要。因此本研究通过提取 A549 细胞内 RNA，利用 RNase T1 酶在 37℃下特异地剪切 mRNA 的鸟嘌呤核糖核苷酸 3'-磷酸基团和相邻核糖核苷酸 5'-羟基之间的磷酸二酯键，通过与生物素标记的 Oligo dT 探针互补配对，再与生物素有强亲和性的链酶亲和素凝胶结合，在洗脱液中 65℃孵育 5min，最终得到分离纯化的 poly A 片段，最后利用高效液相-质谱联用技术（LC-MS）分离检测。我们拟优化液相流动相、分离梯度、质谱等参数，建立一个更准确高效表征 mRNA 药物 poly A 序列异质性的方法，为 mRNA 药物质量控制提供一种快速有效的分析方法。

关键字 mRNA 药物，poly A 尾

参考文献

1.Teo, Shyh Poh. "Review of COVID-19 mRNA Vaccines: BNT162b2 and mRNA-1273." *Journal of pharmacy practice* vol. 35,6 (**2022**): 947-951.
2.Guimaraes, Guilherme J et al. "Characterization of mRNA therapeutics." *Mass spectrometry reviews* vol. 43,5 (**2024**): 1066-1090.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

钴对红系祖细胞毒性作用研究

李瑶[1]、汪海林*[2]
1. 内蒙古大学
2. 中国科学院生态环境研究中心

红细胞是人体含量最丰富的一类细胞之一，由于其氧气及二氧化碳的运输功能，它对于所有脊椎生物的生存都至关重要。红细胞的生成是从造血干细胞分化为成熟红细胞的一个多步骤过程，在这个过程中，会受到多种生长因子及体内微环境的影响，任何异常都会引起贫血等疾病。钴是自然界普遍存在的一种重金属元素。作为维生素 B12 的组成成分，钴是细胞生长、分化及发育所必需的元素。但体内过量钴的存在也会产生一系列毒性反应。随着 MOM 髋关节置换术的出现，由于金属髋关节的磨损或由体液腐蚀而导致其中钴离子的释放导致的健康问题引起人们的广泛关注。早期的体外研究检测了关节置换术中使用的重金属合金的细胞毒性，发现钴可以诱导严重组织坏死和巨噬细胞毒性。氯化钴暴露引起细胞的氧化应激反应从而对神经系统产生不良影响。此外，氯化钴的暴露可引起细胞内低氧环境并导致低氧诱导因子（hypoxic inducible factor-1, HIF-1）的高表达，这种低氧环境会改变血管生成及细胞凋亡相关基因的表达，增加肿瘤发生几率。HIF-1 是激活促红细胞生成素的转录因子。钴可以直接通过诱导 HIF-1 的表达进而促进促红细胞生成素的产生，诱导红细胞增多症的发生。虽然目前已发现钴可引起红细胞生成异常，但现有研究仅局限于对最终成熟红细胞生成数量的判定，红细胞生成是一个复杂的过程，钴对红细胞生成过程的毒性作用及分子作用机制仍是亟须解决的科学问题。申请人前期对红系祖细胞暴露高浓度 CoCl2（10 μM, 20 μM, 50 μM 和 100 μM），结果显示 10 μM CoCl2 暴露四天或 50 μM CoCl2 暴露三天后即显著抑制红系祖细胞的增殖，引起红系祖细胞的凋亡。初步研究表明 CoCl2 可能通过抑制红系祖细胞中增殖相关蛋白 c-Kit 的表达及磷酸化来抑制红系祖细胞的增殖。但其影响红系祖细胞功能的分子机制还需进一步探索。

关键字 红系祖细胞、氯化钴暴露

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

HPLC-MS/MS 检测 N6-甲基腺嘌呤核苷(m6A)在癌症中的改变

张绿叶[1,2]、汪海林*[1]
1. 中国科学院生态环境研究中心，环境化学与生态毒理学国家重点实验室
2. 华东理工大学化学与分子工程学院，上海市功能性材料化学重点实验室

RNA 由四种核苷组成，其中具有化学修饰基团的核苷称为修饰核苷，在体内对多种生理功能发挥特殊调控作用[1]。研究发现修饰核苷 N6-甲基腺嘌呤(m6A)及体内降解产物游离 m6A 通过不同分子机制影响人体多种生理病理相关状态，包括肿瘤形成。并且，血液和尿液中代谢异常的修饰核苷已被广泛报道于多种癌症中，是潜在疾病生物标志物[2]。本课题发展了一种基于 HPLC-MS/MS 准确定量生物基质中 RNA 修饰核苷的分析方法，对细胞、组织、体液等不同生物基质适用。建立了针对不同基质的前处理过程，并利用同位素内标定量分析检测了 14 种修饰核苷和未修饰核苷目标物，具有理想灵敏度。应用该方法聚焦肾癌细胞和组织中 DNA，RNA 和代谢途径中的多种代谢游离核苷目标物的含量差异，并应用于分析癌症组织中嘌呤修饰核苷在疾病进展中的改变，进而结合其他研究手段探究其调控机制。

关键字 HPLC-MS/MS，N6-甲基腺嘌呤核苷，肿瘤代谢重编程

参考文献

1. Jonkhout, N., Tran, J., Smith, M.A., et al. The RNA modification landscape in human disease. *RNA*, **2017**, 23,1754–1769.
2. Ogawa A., Nagiri C., Shihoya W., et al. N6-methyladenosine (m6A) is an endogenous A3 adenosine receptor ligand *J. Molecular Cell*, **2021**(D1).

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

水自由基阳离子介导的 N_2 和 CO_2 常温常压条件下构建 C-N 键

张文博[3]、赵若男*[1]、张小平[3]、苏蕊[2]、朱腾高[1]、陈焕文[1]

1. 江西中医药大学
2. 吉林大学
3. 长春中医药大学

水自由基阳离子[$(H_2O)_2^{+\bullet}$]独特的反应活性使其在驱动复杂化学转化过程中的作用不可替代[1]，本团队致力于复杂样品的直接质谱分析，在此基础上掌握了常温常压条件下对化学分子进行可控赋能形成特定离子的基本规律[2]，成功制备了可供实验观测的足量水自由基阳离子，并将其引入 N_2-CO_2 体系，仅以空气成分为原料合成了高附加值的含氮化合物 2，5-二氨基戊酸，并采用电喷雾质谱技术，串联质谱技术对混合样品进行了分析，确定了产物的准确性（图 1）。该方法避免了传统 C-N 键构筑过程中贵金属催化剂和毒害性有机试剂的使用[3,4]，利用水自由基独特的两中心三电子结构，在无需催化剂条件下实现了 C-N 键的构筑。该技术展示了水自由基阳离子在绿色化学中的巨大应用潜力，为高效环保合成含氮化合物提供了新的思路。

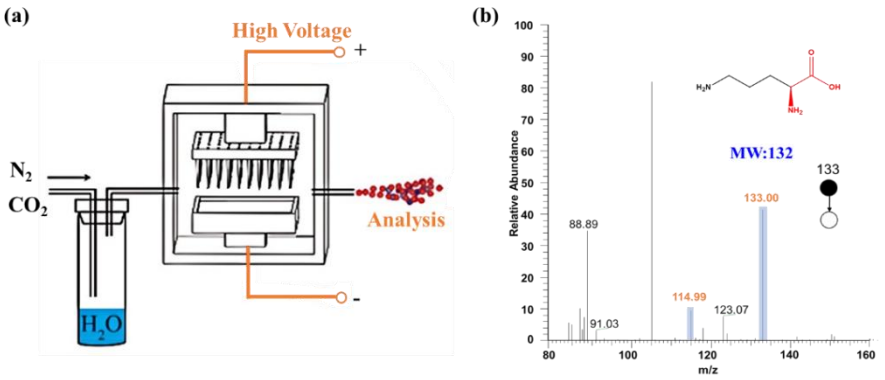


Fig. 1 (a): Experimental setup diagram; (b): Tandem mass spectra of the products

关键字 水自由基阳离子，直接质谱分析，C-N 键构建

参考文献

[1] X. Zhang, R. Su, J. Li, L. Huang, W. Yang, K. Chingin, R. Balabin, J. Wang, X. Zhang, W. Zhu, K. Huang, S. Feng, H. Chen, *Nat. Commun.*, **2024**,15, 1535.

[2] X. Zhang, X. Ren, Y. Zhong, K. Chingin, H. Chen, *Analyst*, **2021**, 146, 5037-5044.

[3] S. Pulletikurti, M. Yadav, G. Springsteen, R. Krishnamurthy, *Nat. Chem.*, 2022, 1142-1150.

[4] A. Burton, J. Stern, J. Elsila, D. Glavin J. Dworkin, *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, 41, 5459-5472.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

有机气溶胶中多环芳烃结构解析

王昊东、韩晔华*
中国石油大学（北京）

多环芳烃（PAHs）是已知最丰富的碳存在形式，其来源广泛，性质特殊。在地球上，PAHs 几乎存在于生态循环的任何地方，有机物的不完全燃烧是其主要的生成方式，经大气传播向环境中迁移，其稳定的构象和特殊性质会对人体造成严重危害。PAHs 毒性随环数的增加呈上升趋势，因此痕量的大分子 PAHs 毒性令人无法忽视，但复杂的构像和多样的异构体对其精细结构表征带来挑战。为了推进有机气溶胶中多环芳烃的系统性结构解析，本文基于多维质谱技术开发了多环芳烃的精细结构表征方法。高分辨质谱与离子淌度质谱联合分析，获得精确分子量以保证 PAHs 淌度数据的准确性。结构独特的小分子 PAHs 为母核结构经相同方式增环，在 m/z-CCS 空间上，多环芳烃的质量与淌度变化呈线性关系，母核结构特征和增环方式分别对应函数的截距和斜率，基于上述规律实现了 PAHs 有序的、系统的分类。结合不同系列函数，可测量大分子多环芳烃结构，解析样品中 PAHs 化合物的构象复杂性，对比函数的结构预测值可分辨异构体。总之，本研究开发了从分子层次表征复杂 PAHs 精细结构的方法，将推动完善大气环境毒理评价。

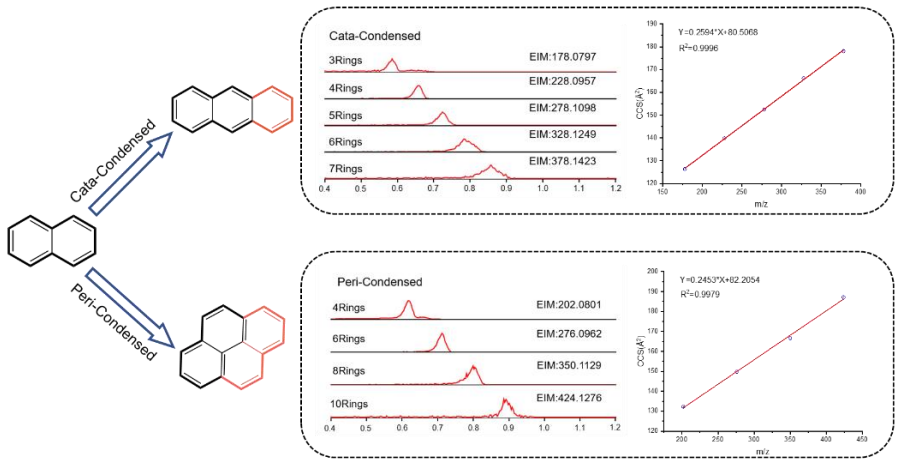


图 1 萘经渺位缩合与迫位缩合增环后 m/z 与 CCS 变化关系示意图

关键字 多环芳烃，有机气溶胶，离子淌度质谱，异构体分析

参考文献

1. B. Peng, Q. Dong, F. Li, T. Wang, X. Qiu, T. Zhu, *Environ. Sci. Technol.*, **2023**, 57, 41, 15314–15335
2. X. Zhang, J. E. Krechmer, M. Groessl, W. Xu, S. Graf, M. Cubison, J. T. Jayne, J. L. Jimenez, D. R. Worsnop, M. R. Canagaratna, *Atmos. Chem. Phys.*, **2016**, 16, 12945–12959.
3. Y. Kojima, K. Inazu, Y. Hisamatsu, H. Okochi, T. Baba, T. Nagoya, *Atmospheric Environment.*, **2010**, 44, 2873-2880.

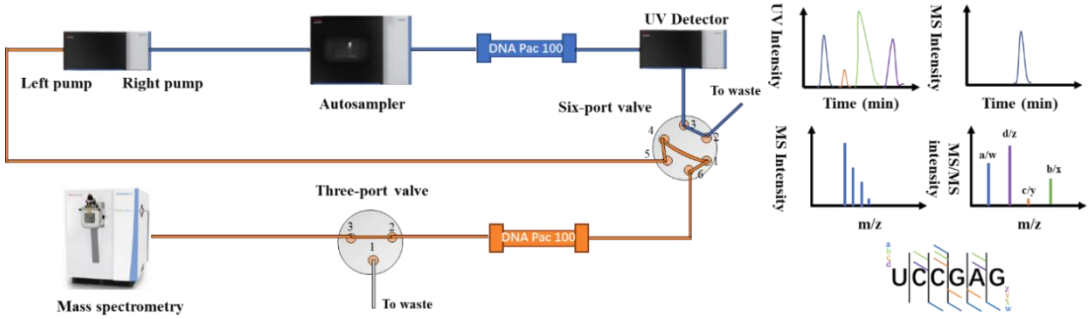
分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

中心切割二维液相色谱串联质谱联用法用于寡核苷酸药物杂质鉴定

周世文、冯鸿儒、潘远江*
浙江大学

杂质的鉴定是寡核苷酸药物质控的重要环节。由于寡核苷酸杂质的结构与主成分高度相似，其分子量差异往往仅为一个核苷酸单元。此外，杂质中还包含序列异构体和化学修饰等多种类型，导致其与主成分的分离和分析难度较大。

为了解决这一问题，我们开发了一种基于中心切割的二维液相色谱串联质谱联用方法，用于寡核苷酸药物的分析与杂质鉴定。该方法在第一维采用阴离子交换色谱，通过优化缓冲盐和非挥发性盐体系，可以在 15.5 分钟内有效分离 15 至 45 个碱基的寡核苷酸片段。随后，利用中心切割技术将目标寡核苷酸或杂质导入第二维离子对反向色谱系统，进行进一步分离并脱盐，以实现与质谱的兼容性。通过一级质谱可精确测定各寡核苷酸杂质的分子量，而采用数据依赖性采集模式的二级质谱（DDA-MSMS）分析能够进一步鉴定寡核苷酸的序列组成。我们以治疗急性肝卟啉症的寡核苷酸药物 Givosirna 为例，应用该方法成功鉴定出 9 种杂质，并对其进行序列测定。



关键字 质谱分析 寡核苷酸药物 二维液相色谱

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

用电荷标记 Paternò–Büchi 反应和超高分辨率质谱鉴定烯烃中的双键位置

包若凝、韩晔华*
中国石油大学（北京）化学工程与环境学院，重质油全国重点实验室，北京，102249

烯烃作为有机化工重要的原料、中间体及石油产品，其结构性质在二次加工过程中起到至关重要的作用。由于石油基质复杂，当前对于石油烯烃结构鉴定研究仅停留在低碳数、线性烯烃层面。本文利用碳碳双键的电荷标记 Paternò–Büchi 反应与 APCI-UHRMS MS/MS 相结合，开发了一种用于烯烃中 C=C 双键位置的灵敏且结构信息丰富的分析方法，极大拓宽了石油中烯烃结构鉴定的范围。通过电荷标签 PB 试剂 2-乙酰吡啶将 C=C 双键转化为四元环氧烷，实现良好的双键衍生化，反应产物在碰撞诱导解离（CID）下产生丰富的诊断离子，用于指示 C=C 位置。利用一系列烯烃模型化合物进行实验验证，表明该方法成功实现对烯烃 C=C 双键位置的鉴定。通过该衍生化策略，结合 DBE 碳数图，实现对催化裂化油浆和煤焦油中烯烃精细结构的有效表征，能够对石油炼化行业的工艺定向优化、产品质量提高以及机理分析提供重要指导。在此，我们开发了一种新的电荷标记 Paterno-Buchi 反应策略，该策略允许(i)提高烯烃的电离效率，实现烯烃不同碳数、不同双键位置异构体的测定，(ii) 快速高效，低样品消耗，不需要额外的仪器修改，(iii)极大扩展了石油组学中烯烃分析范围，不受沸点限制以及复杂基质干扰，实现极具挑战的高碳数烯烃精细结构鉴定，为分析石油复杂基质中烯烃精细结构提供了一种有效的分析方法。

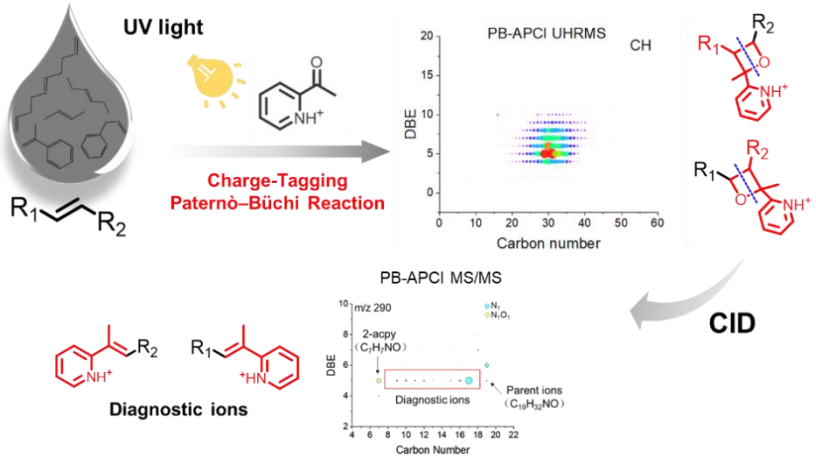


图1 利用电荷标记Paternò–Büchi反应鉴定烯烃双键位置策略

关键字 烯烃化合物；PB 反应；超高分辨率质谱

参考文献

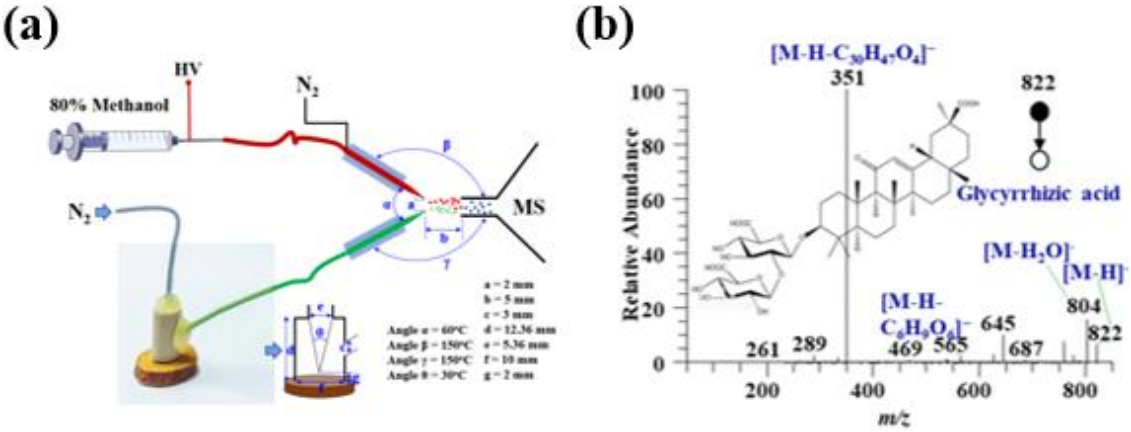
1. Ma X, Xia Y, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2014**, 53 (10), 2592–2596.
2. Hu W, Niu J, Bao R, Han, Y, *Analytical chemistry*, **2023**, 95(41):15342-15349.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

中性解吸电喷雾萃取电离质谱直接快速分析甘草蜜炙过程中的品质变化

刘莹、陈焕文、吴栋*
江西中医药大学

利用蜂蜜炮制加工甘草可增强其有效成分含量和补益作用 1，但其炮制过程中的品质变化机理尚不明确，且产地与炙甘草品质密切相关 2。本实验在无需任何样品预处理条件下，采用中性解吸电喷雾萃取电离质谱（ND-EESI-MS）技术（如图 1a 所示），以 80%甲醇为萃取剂，在正、负离子模式下分别对甘草炮制过程中四个不同炮制程度的甘草样本，以及来自内蒙古、新疆、甘肃、安徽、广东和江西的蜜炙甘草样本进行检测分析，并采用碰撞诱导解离（CID）实验对目标离子进行验证。实验结果表明，在正、负离子模式下，炙甘草中分别检测到 17 和 18 种化合物；甘草在蜜炙过程中，光甘草酚、刺槐黄素、甘草香豆素和甘草次酸等物质含量积累；在六个不同产地蜜炙甘草样本比较中，内蒙古炙甘草质量较优。本方法无需样本预处理，能够较优地承受复杂基质，分析速度快，为实现复杂样本的无创原位分析提供了一种质谱分析新技术。



关键字 甘草；中性解吸电喷雾萃取电离质谱（ND-EESI-MS）；炮制；品质

参考文献

1. P. Sun, H. W. Chen, X. Fan, J. Wang, L. Lu, G. Yang, J. Liu, W. Yao, F. Ding, J. Ding, *J Ethnopharmacol.*, **2024**, 329, 118178.
2. X. Cui, L. Lou, Y. Zhang, B. Yan, *Sci Rep.*, **2023**, 13, 5160.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

纳升解吸电喷雾电离质谱成像结合 Paternò-Büchi 衍生化反应对脂质深层次分析的方法研究

王靖博、尹瑞川*
四川大学

脂质是一类广泛存在于生物体内的有机化合物，在细胞区分、信号传导和能量存储等生物过程中起着重要的作用 1。组织和细胞脂质的综合分析有助于了解脂质的生物学功能并揭示新的脂质生物标志物。目前，质谱成像法（MSI）已经被广泛应用于脂质的定量和定性分析，其特点是无需特殊的样品前处理，能在复杂样品中进行无标记的空间定位和分子识别 2。近年来，本团队开发了单细胞分辨率的纳升解吸电喷雾电离质谱成像法（nano-DESI-MSI），该方法通过特制的 nano-DESI 探针对组织样品表面进行萃取，获得极高的空间分辨率（＜10μm）。利用该方法，我们实现了对小鼠子宫组织的多种脂质的高精度成像 3。然而，脂质具有多种结构异构体，包括 C=C 双键位置异构体和 sn-位置异构体等，这给 MSI 法鉴定脂质带来了极大的挑战，也是 nano-DESI-MSI 方法面临的一大问题。常规 nano-DESI-MSI 技术无法深入鉴定脂质的结构（C=C 位置异构体），难以解析脂质的 C=C 位置异构体的重要功能，这极大地限制了 nano-DESI-MSI 法的应用。为了解决这一难题，本研究将 nano-DESI-MSI 与常用的脂质衍生化法联用，构建一种新的空间精细脂质组学方法。目前已有报道的脂质衍生化法有 Paternò–Büchi（PB）反应、单线态氧（1O2）和环氧化法 4 等，其中 PB 反应是一种[2 + 2]光环化加成反应，在紫外光照条件下，脂质上的不饱和双键会和酮类化合物发生环化反应，通过产物离子的二级质谱来鉴定脂质不饱和键的位置。该反应简单快速，与 nano-DESI-MSI 兼容性良好。本研究将构建新型的 PB-nano-DESI-MSI 平台，通过小鼠、人体病变组织成像来验证其可行性。现在已经完成了平台的搭建和 PB 反应试剂的筛选，以及 PB 在线反应的验证。该平台不仅为脂质组学提供新的分析方法，还为 nano-DESI-MSI 技术提供开发思路。

关键字 nano-DESI-MSI 技术，paternò-büchi 衍生化反应，脂质组学

参考文献

1. K. Vriens et al. Evidence for an alternative fatty acid desaturation pathway increasing cancer plasticity. Nature. 2019, 566(7744): 403–406.
2. J. Laskin and I. Lanekoff. Ambient Mass Spectrometry Imaging Using Direct Liquid Extraction Techniques. American Chemical Society. 2016, 1(05)
3. R. Yin, K. E. Burnum-Johnson, X. Sun, et al. High spatial resolution imaging of biological tissues using nanospray desorption electrospray ionization mass spectrometry. Nat Protoc, 2019, 14(12): 3445-3470.
4. X. Ma and Y. Xia. Pinpointing double bonds in lipids by paternò-büchi reactions and mass spectrometry. Angew Chem Int Edit. 2014, 53(10): 2592–2596.

分会场：8.质谱科学与仪器
1538 交流形式：墙报

磁性生物炭磁固相萃取-PY-GC/MS 法测定水中纳塑料

孟龙月*、杜雪
延边大学

纳米塑料（NPs）是新兴的水污染物，对人类健康和生态安全构成严重威胁。由于 NPs 的生物毒性和迁移性，开发检测 NPs 的方法具有重要意义。本研究采用磁性固相萃取（MSPE）结合热解气相色谱-质谱（Py-GC/MS）对复杂基质中的 NPs 进行预处理和富集，以避免样品溶出和洗脱液的使用。为了在水中富集 NPs，使用活化和共沉淀方法方便地制备了来自玉米秸秆的磁性生物炭（Fe_3O_4/BCs，即 Fe_3O_4/YMG 和 Fe_3O_4/YMG-$ZnCl_2$），并用作 MSPE 的吸附剂。结果表明，Fe_3O_4 掺入生物炭中不仅使其具有磁性，而且增强了其表面官能团和吸附位点的多样性，使其适用于 MSPE。Fe_3O_4/YMG-$ZnCl_2$ 在各种竞争物种中表现出对 PSNP 的优异提取和富集能力。Fe_3O_4/YMG-$ZnCl_2$ 表现出良好的耐 pH 值和阴离子性能，其反应机理通过吸附动力学和等温模型得到验证。此外，用 Fe_3O_4/YMG-$ZnCl_2$ 提取河流和自来水中 PSNPs 后，通过 Py-GC/MS 成功对其进行定性分析。

关键字 纳米塑料；磁性生物炭；吸收机制；磁性固相萃取

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

串级离子迁移谱仪的常压离子碎裂技术的研究与应用

冼天信、张允晶、何兴理、李鹏、李灵锋*
苏州大学电子信息学院

离子迁移谱凭借其结构简单、灵敏度高以及分析速度快等特点，被广泛应用于爆炸物检测领域，但受限于较低的峰容量导致其容易出现假阳性的问题。为进一步提高离子迁移谱的定性能力，参考串级质谱的原理发展出了串级离子迁移谱。串级离子迁移谱的第一个离子迁移阶段利用不同离子具有不同的离子迁移率的特点，获得一级离子迁移谱图，同时根据检测目标筛选分离出需要进一步分析的目标母离子，随后对被筛选出来的母离子施加外部能量使其发生碎裂从而获得碎片离子，在紧接着的第二个离子迁移阶段记录这些碎片离子的特征迁移谱，通过分析对比这些特征迁移谱从而达到提高定性能力的目标[1-3]。与工作在真空环境下的串级质谱技术不同，串级离子迁移谱往往工作在大气压条件下，这将会导致离子在碎裂模式和碎裂机制上存在一定的差异。本文研制了一个串联迁移管离子迁移谱仪，并分别设计了常压电场离子碎裂单元以及常压高温离子碎裂单元。基于电场碎裂单元的最高电场可达 147 Td，基于高温离子碎裂单元的最高温度可达 600 ℃。基于所研制的平台，成功获取了多种爆炸物在常压下的二级碎片离子迁移谱信息，并对比了两种碎裂单元的碎裂能力。为研究真空环境与常压环境下离子碎裂机制与碎裂模式的差异，改造了一台实验室自制的离子阱质谱仪，利用碰撞诱导解离（CID）技术获取了真空环境下梯恩梯（TNT）的碎片离子谱图，同时获取了由高温引起的 TNT 碎裂得到的碎片离子谱图，并分析对比了两种碎裂技术的离子产物。利用串级迁移谱技术，能够在常压环境下获取目标母离子的二级碎片离子结构信息，大幅提高离子迁移谱的定性能力，有望降低现场检测假阳性的出现概率。

关键字 串级离子迁移谱，常压离子碎裂，爆炸物检测

参考文献

1. U. Chiluwal, G. Lee, M. Y. Rajapakse, T. Willy, S. Lukow, H. Schmidt, G. A. Eiceman, *Analyst,* **2019**, 144, 2052-2061.
2. M. Amo-González, S. Pérez, R. Delgado, G. Arranz, I. Carnicero, *Anal. Chem.,* **2019**, 91, 14009-14018.
3. H. Shokri, E. G. Nazarov, B. D. Gardner, H.-C. Niu, G. Lee, J. A. Stone, N. Jurado-Campos, G. A. Eiceman, *Anal. Chem.,* **2020**, 92, 5862-5870.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

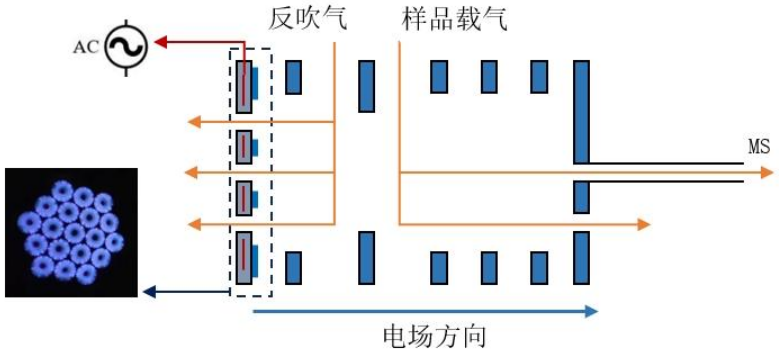
基于空气的介质阻挡放电离子源的研制与应用

任杰、赵天翼、何兴理、张允晶、李鹏、李灵锋*
苏州大学电子信息学院

目前，便携小型化是质谱技术发展的一个重要方向，逐渐成为一种现场快速检测的重要手段。离子源是其中的一个关键部件，直接决定了采样方式与离子产物。介质阻挡放电（Dielectric Barrier Discharge，DBD）离子源因其免试剂，体积小等特点在近些年被广泛研究[1,2]。但大多数研究均采用惰性气体作为放电气体，需要携带气罐，这不利于现场检测的应用。而基于空气作为放电气体，往往受限于其复杂的反应机制及大量的电离副产物，一些样品的电离效果并不理想。

本研究设计了一种基于空气的逆流式 DBD 离子源。该离子源采用空气作为放电气体，结合正向电场牵引离子和反向气流吹扫中性副产物的新颖结构设计，具备超高的初始反应离子流，适合便携式质谱仪的应用。首先，基于印刷电路板（PCB）设计了多孔阵列式面状 DBD 离子源结构。其次，将离子源分为初始离子生成区与样品反应区，避免样品直接接触等离子体[3]，放电环境更加稳定。同时，通过将反向吹扫气流经过多孔阵列的放电区，并结合放电表面电极与反应区电极形成正向牵引电场，实现了臭氧、氮氧化物等中性副产物与初始反应离子的分离，电离过程更为简单可控。另外，探究了正向牵引电场以及反向气流对于离子传输的影响，并对比了该离子源与常规的电晕放电离子源的生成的初始离子流的大小。

最后将该离子源与搭建的小型质谱仪联用，应用于多种毒品和爆炸物测试，对比了逆流与传统顺流的检测性能。结果表明，该新型离子源具有良好的软电离效果，电离产物可控，具备良好的检测性能，在现场快速检测领域中有较好的应用价值。



关键字 离子源；介质阻挡放电；便携式质谱；软电离

参考文献：

1. S. Brandt, F. D. Klute, A. Schutz, J. Franzke, *Anal. Chim. Acta*, **2017**, *951*, 16-31.
2. N. Na, C. Zhang, M. Zhao, S. Zhang, C. Yang, X. Fang, X. Zhang, *J. Mass Spectrom*, **2007**, *42*, 1079-1085.
3. L. Li, T. Zhang, W. Ge, X. He, Y. Zhang, X. Wang, P. Li, *Molecules*, **2022**, *27*, 4551-4562.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

高效液相色谱-荧光检测 siRNA 药物的方法开发及应用

李小兰、尹瑞川*
四川大学华西药学院

小干扰 RNA（Small interfering RNA；siRNA）通常是长度为 21～23 bp 双链 RNA，通过内吞途径进入细胞内与 Argonaute(Ago)等蛋白质因子结合，形成 RNA 诱导的沉默复合体(RISC)。Ago 具有核酸内切酶活性，能特异性地切割靶基因 RNA，产生的 RNA 片段易受到 5'或 3'核酸外切酶的攻击而快速降解，从而达到沉默靶基因的目的[1]。由于它们相对较大的约 13 kDa 的尺寸和亲水性，未借助载体或未与配体缀合时，其细胞摄取效率低，这种低效的递送机制是导致众多临床 siRNA 药物试验失败的关键因素[2]。然而，测定靶向组织中的 siRNA（即递送效率）仍是亟需解决的难题。基于荧光 RNA 探针，本文开发了高灵敏、特异性的高效液相色谱-荧光（HPLC-FL）方法，用于定量血液和组织样本中 siRNA 药物浓度。我们优化了荧光探针的设计，发现 Cy3 标记的 21nt 正义 RNA（sense strand）探针，能特异性结合目标核酸链（guide strand），比已报道的肽核酸（PNA）荧光探针价格便宜，而且具有更高的检测灵敏度。采用反相离子对色谱法（IPRP-LC）分离 Cy3-RNA 双链和游离 RNA 探针，对液相色谱条件（柱温、梯度、离子对试剂、改性剂等）进行了优化筛选。相比于目前其他用于小核酸药物生物分析的方法：比液相色谱-质谱联用技术（LC-MS）的样品预处理步骤简单、灵敏度高、分析仪器更经济，同时具有酶联免疫吸附法（ELISA）的特异性[3]。动物借助载体或通过与配体缀合给药后，用建立的方法检测实际血液和组织样本中 siRNA 的含量，可直观、简洁、有效地测定靶向组织中 siRNA 药物的递送效率。

关键字 siRNA，高效液相色谱-荧光，荧光 RNA 探针

参考文献：

1. 王菲菲，合符，进任，邢国振,*中国新药杂志.*, **2022**, 31, 427-434.
2. Roberts. T. C, Langer. R, Wood. M. J, *Nature Reviews Drug Discovery.*, **2020**, 19, 673-694.
3. Yuan. L, J. F. Dupuis, K. Mekhssian, *Molecules.*, **2023**, 28, 1618.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

卤代醌暴露对哺乳动物线粒体 DNA 的影响

刘怡然、汪海林*
中国科学院生态环境研究中心

卤代苯醌是近年来饮用水中新检出的一类未受控消毒副产物，其浓度仅为 ng/L 级，但细胞毒性和遗传毒性却高于大多数受控污染物，如三卤甲烷和卤乙酸。卤代苯醌暴露会导致基因组 DNA 损伤，影响核基因的表达，有研究发现部分核基因的表达影响 mtDNA 拷贝数。因此设想卤代苯醌暴露可能影响 mtDNA 拷贝数。另外，本课题之前的研究发现卤代苯醌暴露会影响基因层面的甲基化水平，但是卤代苯醌对线粒体 DNA 甲基化修饰的影响尚不完全清楚。因此 mtDNA 拷贝数或 mtDNA 甲基化水平可能是一个潜在的环境污染和疾病风险的生物标记物。

关键字 卤代醌 线粒体 DNA

参考文献：

1.Huang Ret.al.Ultra Pressure Liquid Chromatography–Negative Electrospray Ionization Mass Spectrometry Determination of Twelve Halobenzoquinones at Ng/L Levels in Drinking Water. Anal. Chem. 2013
2.Jinhua Li et.al.Emerging Disinfection Byproducts, Halobenzoquinones: Effects of Isomeric Structure and Halogen Substitution on Cytotoxicity, Formation of Reactive Oxygen Species, and Genotoxicity. Environmental Science & Technology.2016
3.Zhang X,Dioni L,et.al.Inhalable particulate matter and mitochondrial DNA copy number in highly exposed individuals in Beijing, China: A repeated-measure study.Part Fibre Toxicol.2013
4. Wang X, et.al.Association of particulate matter air pollution with leukocyte mitochondrial DNA copy number .Environ Int.2020
5.Sun, H., Wang, X., Eds.; Advances in Experimental Medicine and Biology.Springer.2017
6.yun HM et.al. Effects of airborne pollutants on mitochondrial DNA methylation. Part Fibre Toxicol, 2013
7.Janssen BG,Byun HM,Gyselaers W,et.al.Placental mitochondrial methylation and exposure to airborne particulate matter in the early life environment: An ENVIR ON AGE birthcohort study.Epigenetics, 2015
8.Zhao, B. et.al.Redox-Active Quinones Induces Genome-Wide DNA Methylation Changes by an Iron-Mediated and Tet-Dependent Mechanism. Nucleic Acids Research.2014

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

电化学-质谱联用技术在线研究细胞力学信号转导过程

王昊天[1]、严景[2]、林嘉美[1]、刘艳玲[2]、徐加泉*[1]
1. 东华理工大学
2. 武汉大学

细胞力学信号转导对于细胞的生长、迁移、粘附、凋亡等生物学过程具有重要的调控作用[1]，该过程不仅响应快，而且涉及复杂的生物分子，包括活性氧 (ROS) 、活性氮(RNS)等短寿命的无机分子[2]，以及氨基酸、蛋白质等有机生物分子[3]。但是现有方法还难以实现细胞力学信号转导过程中这些物质的高通量、高灵敏、高时间分辨分析。

为此，我们发展了一种基于柔性可拉伸电极的电化学-质谱联用技术，用于研究内皮细胞力学信号转导过程。在该技术中，我们首先构建了一种 PPL/PDMS 柔性可拉伸电极[4]，通过拉伸电极，可以对贴附于其表面的细胞进行机械刺激，以诱导细胞力学信号转导过程；然后，电化学传感技术可以实时监测细胞力学信号转导过程释放的 ROS 和 RNS 等电活性信号分子；同时，该柔性电极还可以作为电离源对细胞力学信号转导过程中的代谢物进行原位在线电离用于质谱分析。结果显示，我们构建的 PPL/PDMS 电极具有良好的机械拉伸性能、电化学传感性能以及电离性能。内皮细胞受力学信号刺激后，通过电化学分析结果可观察到明显的 NO 信号，且其信号强度与力学信号刺激作用的强度和时间有关；而质谱分析结果不仅观察到与 NO 代谢相关的代谢产物变化，如精氨酸、瓜氨酸等，还观察到γ-亚麻酸、十二烷酸等生物小分子的信号变化，而且观察到了多胺代谢通路的变化。综上所述，本工作为研究细胞力学信号转导提供了一种新的方法。

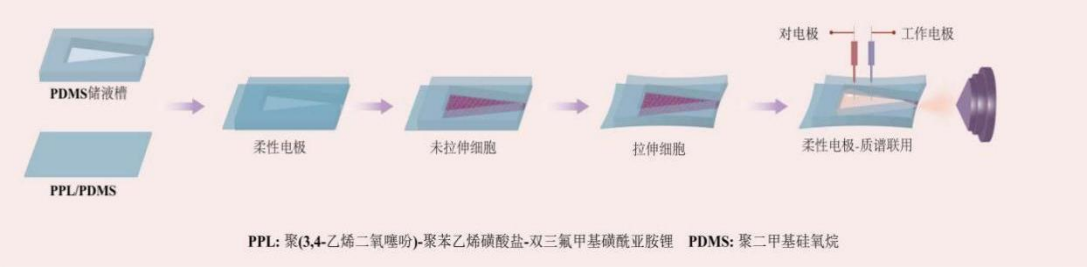


图 1 电化学-质谱联用技术实时原位研究细胞力学信号转导过程示意图

关键字 细胞，力学传导，电化学，质谱

参考文献：

1. S. E. Murthy, A. E. Dubin, A. Patapoutian, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, **2017**, 18, 771–783.
2. Y. L. Liu, W. H. Huang, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60, 2757-2767.
3. W. T. Fan, Y. Qin, X. B. Hu, J. Yan, W. T. Wu, Y. L. Liu, W. H. Huang, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 15639-15646.
4. J. Yan, Y. Qin, W. T. Fan, W. T. Wu, S. W. Lv, L. P. Yan, Y. L. Liu, W. H. Huang, *Chem. Sci.*, **2021**, 12, 14432-14440.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

柱前衍生高效液相色谱-质谱法测定 HN1-二肽加合物

马杨德、于惠兰、刘石磊*
国民核化生灾害防护国家重点实验室

氮芥（HN1-HN3）属于糜烂性化学战剂，它可以通过吸入、皮肤和眼睛接触等方式进入人体，再通过血液循环造成全身中毒和局部损伤。氮芥在尿液中能代谢成小分子水解产物，它还能与蛋白等大分子结合形成特定的加合物，后者比前者具有更长的半衰期，因此它的检测更适合溯源。HN1 能够和人血清白蛋白上的 Cys 发生反应，生成特定的加合物，通过链霉蛋白酶能够酶解成 HN1-cys-pro 二肽加合物。本文通过本实验室前期的工作基础，通过蓝胶柱分离等方法处理酶解后的 HN1 染毒蛋白，分离得到 HN1-cys-pro，经化学衍生反应用于高效液相色谱-质谱分析检测。本方法获得的 HN1-cys-pro 衍生产物比 HN1-cys-pro 具有更好的色谱保留，从而进一步排除酶解体系中基质的干扰，为复杂基质样品中的氮芥检测提供技术支撑。

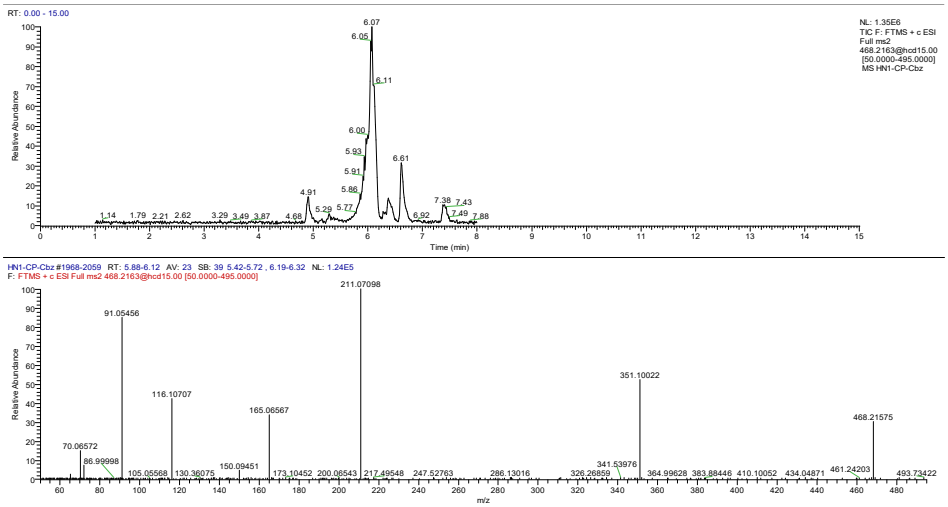


图 1 HN1-cys-pro-Cbz 液相色谱-质谱图

关键字 氮芥，高效液相色谱-质谱

参考文献：

1. 陈博,于惠兰,刘石磊,等.质谱学报, 2019, 40(4):10.
2. Chen B , Yu H L , Liu S L ,et al. Analytical & Bioanalytical Chemistry, 2019, 411:6405-3415.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

电化学-质谱联用技术研究单细胞力学信号转导通讯过程

张彩莹、历婷、林嘉美、李慧、徐加泉*
东华理工大学

细胞力学信号转导通讯过程是细胞间通讯的基础，对于维持生物体的正常生理功能和稳态至关重要[1]。而在单细胞层次研究力学信号转导通讯，可以克服细胞异质性，对于理解力学环境对细胞生物学功能的影响机制具有重要意义[2]。由于细胞力学信号转导过程非常复杂，涉及的生化分子种类多、含量低、变化快。因此，发展高通量、高灵敏、高时间分辨的分析技术是关键。

为此，我们发展了一种超微电极电化学与纳升电喷雾电离质谱联用技术，用于研究单个内皮细胞力学信号转导通讯过程。在该技术中，我们首先构建了一种铂纳米颗粒修饰的碳纤维电极[3]，该电极可对细胞力学信号转导过程中释放的活性氧、活性氮等电活性组分进行原位实时监测，根据电化学响应信号判断单细胞力学信号转导进程，并收集细胞力学信号转导过程释放的代谢物；然后，采用构建的蒸发再溶解纳升电喷雾电离质谱分析方法[4]对收集的代谢物进行质谱分析，该方法可克服高浓度缓冲盐对质谱信号的抑制作用；最后，采用正交偏最小二乘判别分析方法对质谱数据进行分析，获得力学信号转导通讯过程的特征代谢产物。实验结果显示，细胞受到机械刺激时，通过电化学方法可观察到约为 0.6 nA 的峰值电流，且信号呈现快速增加、缓慢降低的特征，持续时间约为 10 秒，通过对照实验可以确定，该信号为内皮细胞释放的 NO；质谱分析结果显示，在峰值电流时，可在细胞外液中观察到 m/z 230.56、m/z 453.41、m/z 615.38、m/z 643.48、m/z 690、m/z 763.45 等特征离子峰。综上所述，该方法为研究单细胞力学信号转导通讯过程提供了一种重要的手段。

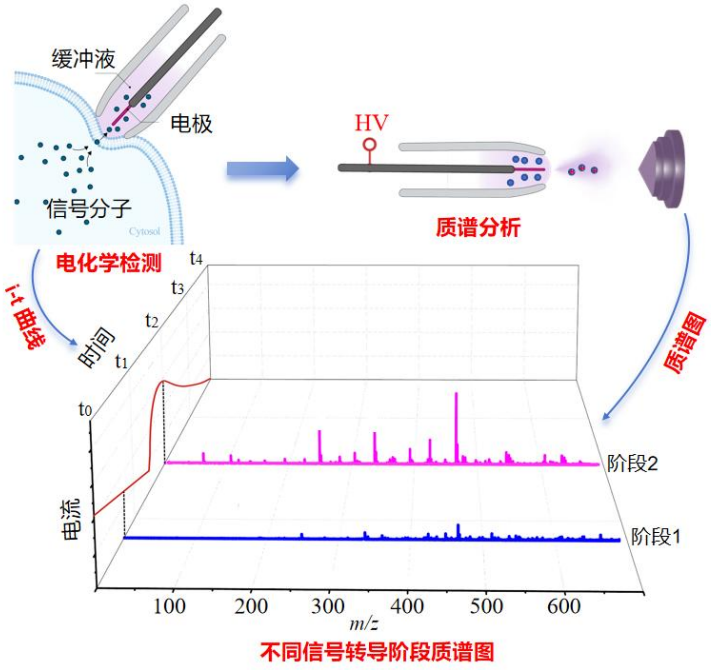


图 1 电化学-质谱联用技术研究单细胞力学信号转导通讯原理示意图

关键字 单细胞，力学信号转导通讯，电化学-质谱联用

参考文献：

1．H. Jeong, S. Clark, A. Goehring, G. S. Dehghani, A. Rasouli, E. Tajkhorshid, E. Gouaux, *Nature*, **2022**, 610, 796-803.

2．A. Saraswathibhatla, D. Indana, O. Chaudhuri, *Nat. Rev. Mol. Cell. Biol.*, **2023**, 24, 495-516.

3．Z. L. Chen, J. M. Lin, Q. M. Li, X. L. Zhang, Y. G. Song, H. Li, W. H. Huang, J. Q. Xu, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 9659-9665.

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

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于电喷雾电离质谱的非侵入性呼气一氧化氮检测方法及其在临床应用中的研究

何明晋、苏蕊、朱腾高、王晓芬*、陈焕文
江西中医药大学

一氧化氮（NO）既难于被质子化也无法被去质子化，很难通过软电离技术形成离子[1,2]。然而，NO 广泛用于人体炎症检测及疗效评估，其检测需求日益增长[3,4]。本研究开发了一种新型非侵入性的手持取样器，采用 2-苯基-4,4,5,5-四甲基咪唑啉-3-氧代-1-氧（PTIO）作为吸收液，并将其与电喷雾电离质谱（ESI-MS）技术结合，用于呼气中 NO 的快速检测，旨在探讨健康人群、肿瘤患者和尘肺患者的呼气 NO 含量差异。方法学验证显示，NO 的线性范围为 0.5~250 μg/L，线性相关系数达 0.9960，方法的检出限为 0.077 μg/L，回收率在 98.35%~105.34% 之间，相对标准偏差小于 4.83%。实际样本检测结果显示健康人群与肿瘤患者及尘肺患者之间存在显著性差异（$p < 0.05$）。该方法灵敏度高、操作简单、快速，适用于呼吸系统疾病的早期诊断与监测。

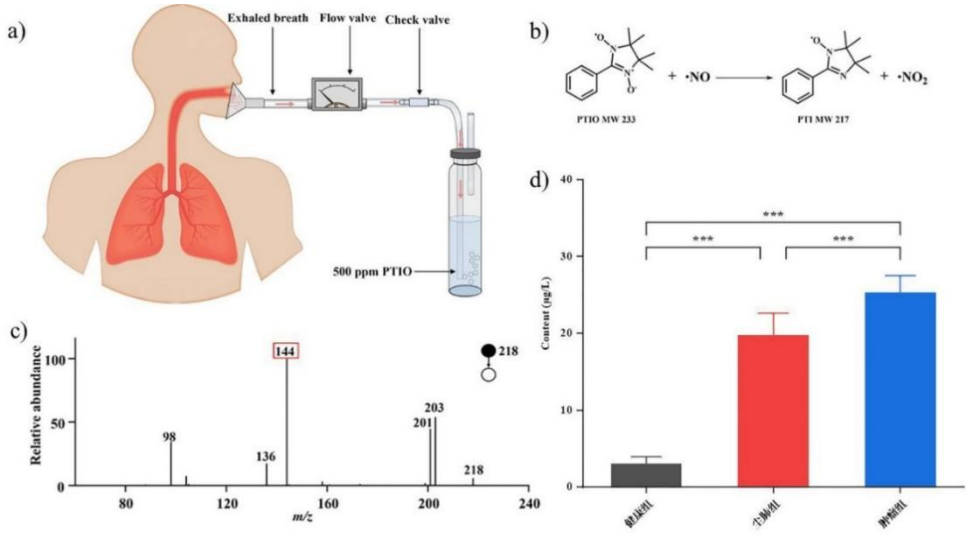


图 1 呼气中 NO 的收集及检测. a) 呼气收集装置示意图；b) PTIO 与 NO 反应方程式；c) PTI 二级质谱图；d) 不同人群呼气中 NO 的含量差异性分析

关键字 电喷雾电离质谱（ESI-MS），一氧化氮，呼出气体，应用

参考文献：

1. Demarque D P, Crotti A E, Vessecchi R, Lopes J L, Lopes N P. *Nat. Prod. Rep.*, **2016**, 33: 432-455
2. Song L, Chuah W C, Lu X, Remsen E, Bartmess J E. J. Am. Soc. *Mass Spectrom.*, **2018**, 29: 640-650
3. Man M Q, Wakefield J S, Mauro T M, Elias P M. *Inflammation*, **2022**, 45: 949-964
4. Wyszyńska M, Nitsze-Wierzba M, Czelakowska A, Kasperski J, Żywiec J, Skucha-Nowak M. *Molecules*, **2022**, 27: 4279

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

亲水作用液相色谱-质谱法高灵敏分析血液 microRNAs

吕萍、尹瑞川*
四川大学华西药学院

微小 RNA (microRNAs, miRNAs) 是一类非编码的单链 RNA，于 20 世纪 90 年代由诺贝尔生理学或医学奖获得者 Victor Ambros 和 Gary Ruvkun 发现。miRNAs 通过与靶 mRNA 结合在转录后基因调节方面发挥着至关重要的作用，已有研究表明，miRNAs 参与了组织细胞的正常发育过程。在病理状态下，miRNAs 的表达显著上调或下调，因而 miRNAs 被认为是肿瘤等多种疾病的潜在生物标志物[1]。尽管反相离子对色谱-质谱法 (IPRP-LC-MS) 是目前通用的核酸分析方法，但该方法需要使用强吸附的离子对试剂和较强毒性的氟代醇，容易造成仪器和环境的污染。与 IPRP-LC-MS 相比，亲水作用液相色谱-质谱法 (HILIC-MS) 更加绿色环保，同时由于使用高比例的有机相因而具有更高的检测灵敏度，近年来在核酸分析领域引起了广泛关注。在本研究中，我们提出一种能直接同时测定多种 miRNAs 的 HILIC-MS 方法。我们采用由简单的乙腈-水系统和挥发性盐组成的流动相，通过优化流动相梯度和柱温等，实现了多种 miRNAs 的分离；并通过高分辨质谱 (HRMS) 和三重四极杆质谱 (QqQ) 对多种 miRNAs 的进行定性及定量分析。为评估方法的检测效果，我们将结果与 IPRP-LC-MS 方法获得的结果进行比较，并通过选择性、线性、精密度和准确度等指标进行方法学验证。由于血液中 miRNAs 浓度较低，我们开发了基于固相萃取 (SPE) 的提取方法来富集、纯化目标分析物。该方法已被应用于血液样本中目标 miRNAs 的检测分析，为后续 miRNA 标志物筛查奠定了良好的基础[2,3]。

关键字 microRNA, 亲水作用液相色谱-质谱法 (HILIC-MS), 固相萃取 (SPE)

参考文献：

1. Suszynska M, Machowska M, Fraszczyk E, Michalczyk M, Philips A, Galka-Marciniak P, Kozlowski P, *Nucleic Acids Res*., **2024**, 52, 1628-1644.
2. Zaporozhchenko IA, Morozkin ES, Skvortsova TE, Bryzgunova OE, Bondar AA, Loseva EM, Vlassov VV, Laktionov PP, *Anal Biochem*, **2015**, 479, 43-47.
3. Wu A, Ji H, Li Y, Liu R, Hu Z, Ju S, Wang F, *J Chromatogr B Analyt Technol Biomed Life Sci.*, **2020**, 1152, 122199.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于顺次电离质谱分析蜜制甘草的品质形成机制

吴栋*、陈焕文
江西中医药大学

甘草（Glycyrrhiza uralensis Fisch.）利用蜂蜜炮制过程中不同极性化学成分变化复杂，且产地也是影响其品质的因素之一。本研究以生甘草为实验材料，与蜂蜜混匀、加热炒制后获取蜜制甘草，利用顺次电离质谱依次获取样品中水溶性和醇溶性成分，探究炮制过程中品质形成机理，并比较了内蒙古、新疆、安徽、甘肃、广东和江西 6 个地理来源炙甘草的品质差异。结果共检测到样品中 43 种化合物，包含脯氨酸、精氨酸、丝氨酸、光甘草酚、单糖、二糖和三糖等 15 种水溶性化合物，甘草素、柚皮素、甘草酸、甘草次酸、芒柄花素等 28 种醇溶性化合物。主成分分析（PCA）和偏最小二乘法判别分析（PLS-DA）结果显示不同加工过程甘草样本可有效区分，且糖类、光甘草定、芒柄花素、光甘草酚和甘草次酸等物质含量积累；6 种地理来源炙甘草可有效区分，甘草苷、黄豆苷元、芥子酸和阿魏酸等物质可作为潜在差异代谢物，内蒙样本中甘草次酸、黄豆苷元等物质含量较高，品质较好。总之，本工作为快速全面分析植物源食品和中药材的品质提供了新的方法和思路。

关键字 炙甘草，顺次电离质谱，品质

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

单细胞 ICP-MS 检测活细胞对纳米颗粒的摄取

刘旭挺、宋杨*
中国科学院生态环境研究中心

电感耦合等离子体质谱仪（ICP-MS）是检测样品中元素含量的常见仪器。传统用于测量细胞中元素的方法依赖于细胞的消解，但这种前处理会破坏细胞结构，检测得到的元素浓度只是大量细胞的平均值。而随着分析仪器的不断进步，ICP-MS 的检测灵敏度和采集速率有了极大的提升，使得检测单个细胞中的元素含量成为可能。搭配单细胞专用的进样装置和雾化器，样品溶液中分散的细胞被雾化，细胞悬浮在气溶胶液滴中，随后被引入等离子体，进行检测。相关的检测数据可以在单纳米颗粒分析系统中进行分析。我们用培养的小鼠腹腔巨噬细胞（J774A.1）分别暴露于四氧化三铁纳米颗粒（Fe_3O_4 NPs）和二氧化硅纳米颗粒（SiO_2 NPs），通过优化单细胞样品进样流程，包括微量注射泵和雾化过程的参数，检测了细胞样品中摄取的纳米颗粒的含量，为探究细胞对金属和非金属纳米颗粒的摄取行为提供了检测方法。

关键字 单细胞 ICP-MS，纳米颗粒，细胞

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于超高效液相色谱-四极杆/轨道阱高分辨质谱的合成大麻素类新精神活性物质质谱裂解规律研究

徐柏杨、高建红、吴丽、宋虹、张宏建*
国家毒品实验室浙江分中心（浙江省毒品技术中心）

摘 要：运用超高效液相色谱-四极杆轨道阱高分辨质谱（UHPLC-Q-Orbitrap HRMS）分析技术，检测吲哚酰胺类、吲唑酰胺类和萘甲酰类等不同骨架结构的合成大麻素类新精神物质。采用 hypersil gold vanquish 色谱柱，以 0.1%甲酸水溶液-甲醇为流动相进行梯度洗脱，在电喷雾正离子（ESI+)-碰撞诱导解离(CID)模式进行数据采集，分别对不同骨架结构的合成大麻素可能质谱裂解途径进行推测，归纳质谱裂解规律，总结根据谱图推导未知合成大麻素结构的方法。结果显示，同一骨架结构的合成大麻素具有高度相似的碎裂途径，可为该类物质的鉴定和快速筛查提供参考依据。

关键字 合成大麻素；UHPLC-Q-Orbitrap HRMS；裂解规律；新精神活性物质

参考文献：

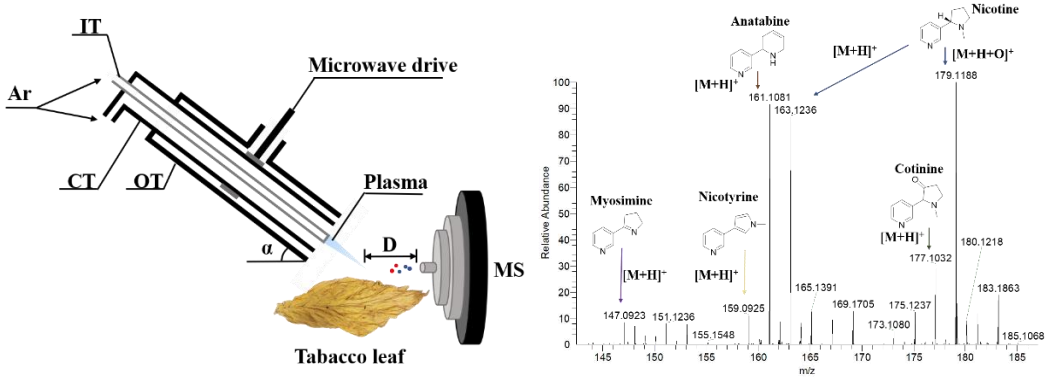
1. Akutsu. M, Sugie. K. I, Saito. K. *Forensic. Toxicol.*, **2016**, 35: 94-103.
2. Sekula. K, Zuba. D, Lorek. K. *J . Am. Soc. Mass. Spectrom.*, **2018**, 29(10): 1941-1950.
3. Liu.C.M, Hua. Z. D, Jia. W, Li T. *Drug. Test. Anal.*, **2022**, 14(2): 307-316.
4. Qian. Z. H, Jia. W, Hua. Z. D, Liu.C.M. *J. Chinese Mass Spectrom. Soc.,* **2021**, 42(1):84-92.
5. Wu. N, Danoun. S, Balayssa. S. *Forensic Sci. Int.*, **2021**, 324:110813-110823.
6. Liu.C.M, Jia. W, Meng X, Hua. Z. D. *J. Forensic. Sci.,* **2021**, 66(6):2156-2166.
7. Meng. Y, Zheng. Y, Bao. Y. R, Wang. S, Li. T. J, Meng. X. S. *J. Instrum. Anal.,* **2024**, 43(9):1376-1388.
8. Jia. W, Xu. X, Shi. L, He. B, Fan. C, Chu. X. G. *J. Instrum. Anal.,* **2019**, 38(10):1179-1186.
9. Wang. G. X, Wang. J. F, Hei. H. *Chem. Bull.,* **2021**, 84(12):1345-1350.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于微波等离子体炬解吸电离质谱法的烟叶原位分析

唐鹤[1]、张勇刚[2]、任志广[2]、朱俊臣[1]、谢越[1]、张晓兵[2]、冯鸿儒*[1]、袁凯龙[2]、潘远江[1]
1. 浙江大学
2. 浙江中烟工业有限责任公司

烟草是世界范围内重要的经济作物，其中含有大量的天然产物。因此，对烟草成分的分析对烟草安全质量的控制和评价至关重要。微波等离子体火炬解吸电离质谱(microwave plasma torch desorption ionization mass spectrometry，MPT-MS)是一种新兴的环境质谱(AMS)技术，可用于快速实时分析样品而无需预处理。我们的工作重点是利用 MPT-MS 对烟叶进行化学成分分析，实现在烟叶中检出多种香味物质。在未进行任何样品预处理的情况下，我们利用 MPT-MS 在新鲜烤烟叶中检测到 14 种化合物，在调制烤烟叶中检测到 30 种化合物，包括多种生物碱以及醛、酮、酚类化合物，这证实了调制可以增加卷烟的风味。此外，我们还利用 MPT-MS 技术成功地原位鉴定了烟草中重要的香气成分 a/b-西伯三烯二醇(a/b-cembranoids)的特征片段离子，证明了 MPT-MS 在烟草成分原位分析方面的能力及其在烟草质量评价方面的潜力。



关键字 微博等离子体炬；敞开式质谱；烟草；西伯三烯二醇

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

生物检材中奥卡西平、利卡西平和卡马西平的 GC/MS 检验

张梦茹*
乌鲁木齐市公安局刑侦支队刑科所

本文运用 GC/MS 联用系统方法通过对一起案件中死者心血/现场标有奥卡西平的药片进行检验，定性方法主要将未知样品与 NIST 普库中色谱图进行比对，死者心血中检出卡马西平和利卡平成分，现场标有奥卡西平的药片中检出奥卡西平成分，从而确定了案件性质。奥卡西平通过胃肠道快速吸收，服用膜衣片时至少 95%的剂量被吸收，奥卡西平迅速且几乎完全地降解为药理活性成分 10，11-二氢-10-羟基-卡马西平（利卡西平，MHD）

关键字 奥卡西平 卡马西平 立卡西平 GC/MS

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

Ag^+介导毛细管电泳核酸分析

黄守龙[1,2,3]、章大鹏*[1,2,3]、汪海林[1,2,3]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院
3. 中国科学院大学

银是一种过渡金属，在自然界有单质形式存在，但大多数以化合物形态存在于银矿石中。银离子不仅被广泛应用于医疗卫生行业[1-2]，还在金属离子检测、DNA 突变检测等领域引起广泛关注[3]。核酸是生物体遗传信息的携带者和传递者，在生理条件下，DNA 上的大部分磷酸释放质子，使 DNA 带负电荷。带负电荷的磷酸盐骨架可以很容易通过与人体内的金属离子如 Na^+、K^+和 Mg^{2+}或 Ca^{2+}的非特异性结合来稳定其结构[3]。

毛细管电泳（CE）是一种高效的分析分离技术。快速有效的分离和小的样品体积需求使 CE 成为生物分析的强大技术[4-5]。激光诱导荧光（LIF）为 CE 提供了极其灵敏的检测。CE-LIF 的组合具有高效、快速、低样品消耗、高灵敏度等优点，在 DNA 测序、DNA 片段限制性长度多态性、单核苷酸多态性、单链构象多态性和 DNA-蛋白质相互作用等 DNA 诊断和分析领域得到了广泛的研究和应用[4-10]。

国内外对金属离子和碱基对已经开展广泛和持续的研究[11-15]。本文旨在开发一种 Ag+介导毛细管电泳分离核酸的新方法，以此分离长度、序列或构象不同的核酸。这一独特的方法可能在表征和分析各种小的 DNA/RNA 分子，包括功能性适体，适体酶，核酶，microRNA 和小的非编码 RNA 有着重要的应用。这些 DNA/RNA 分子具有特定的二级或三级结构，这些结构可能与它们的调节、识别和催化功能有关[10]。

我们已经利用实验室搭建的 CE-LIF 开展了分离大小相同但序列不同的 ssDNA，在样品缓冲液和分离缓冲液中分别加入不同浓度的 Ag+。可以发现，当分离缓冲液加入 Ag+后，ssDNA 混合物的保留时间略有提前，且受 Ag+浓度的影响。该方法或将用于长度多态性分析、单链多态性分析、杂交分析、蛋白质-核酸相互作用和构象-功能关系的研究[10]。

关键字 Ag+ 毛细管电泳 核酸分析

参考文献：

1. D. Zhang, H. Wang. *Anal. Chem*., **2019**, 91, 14538–14544.
2. C. Ghosh, P. Sarkar, R. Issa, J. Haldar. *Trends Microbiol*., **2019**, 27, 323–38.
3. Q. Sun., et al. *Biomater Res*., **2022**, 26: 9.
4. J. Miller. *Chemistry Reviews.*, **2019**, 393, 37-47.
5. Z. Wang, C. Wang, J. Yin, T. Li, M. Song, M. Lu and H. Wang. *Electrophoresis.*, **2008**, 29, 4454-4462.
6. D. Zou, D. Zhang, S. Liu, B. Zhao, H. Wang., *Anal. Chem*., **2014**, 86, 1775–1782.
7. H. Wang, M. Lu, M.-s. Tang, B. Van Houten, J. B. A. Ross, M. Weinfeld and X. C. Le. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A*., **2009**, 106, 12849.
8. B. Zhao, D. Zhang, C. Li, Z. Yuan, F. Yu, S. Zhong, G. Jiang, Y. G. Yang, X. C. Le, M. Weinfeld, P. Zhu and H. Wang. *Cell Discovery*., **2017**, 3, 16053.
9. Le, X. C., V. Pavski, and H. L. Wang. *Can. J. Chem*., **2002**, 83, 185–194.

10. T. Li, D. Zhang, W. Luo, M. Lu, Z. Wang, Y. Song and H. Wang, *Anal. Chem*., **2010**, 82, 487–490.
11. Z. Chen, C. Liu, F. Cao, et al. *Chemical Society Reviews.*, **2018**, 47, 4017-4072.
12. Y. Miyake, H. Togashi, M. Tashiro, H. Yamaguchi, S. Oda, M. Kudo, et al. *J Am Chem Soc.,* **2006**, 128, 2172–3.
13. H. Torigoe, A. Ono, T. Kozasa. *Chemistry.*, **2010**, 16, 13218-13225.
14. A. Ono, S. Cao, H. Togashi, et al. *Chemistry Communications.*, **2008**, 10, 4825-4827.
15. T. Dairaku, K. Furuita, H. Sato, J. Sebera, K. Nakashima, J. Kondo, et al. *Chemistry.,* **2016**, 22, 13028–31.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

核基质附着区 DNA 表观遗传修饰分析

张蕊、赖玮毅、汪海林*
中国科学院生态环境研究中心

DNA 甲基化是重要的表观遗传修饰，其中 5-甲基胞嘧啶（5-methylcytosine，5mC）是研究较为成熟的修饰之一。5-羟甲基胞嘧啶（5-hydroxymethylcytosine，5hmC）是 5mC 在 TET 双加氧酶催化作用下的氧化产物，它不仅是去甲基化的中间产物，同时也是一种表观遗传标记，同样参与众多生命活动，在基因表达、细胞核重新编程、胚胎发育和肿瘤发生等过程中起着重要的作用[1,2]。核基质附着区（Matrix Attachment Regions，MARs)，是真核生物中染色质与核基质特异性结合的一段 DNA 序列。在真核生物中，基因组 DNA 通过 MARs 和核骨架结合，锚定在核骨架网状结构上。随着研究的深入，发现 MARs 和染色质结构域的边界，位点控制区域，顺式调控元件相关联，具有绝缘基因结构域，促进 DNA 复制，增强转录的功能[3]。

在本研究中，我们利用高盐抽提法提取分离 MARs，并进一步开发了稳定同位素标记的超高效液相色谱串联质谱技术(UHPLC-MS/MS)，用于检测 MARs 中的 DNA 修饰水平。通过这种方法，我们首次发现，与基因组 DNA 相比，MARs 中 5hmC 的含量在 293T，HL60，NB4 和 mES 四个细胞系中显着降低。该方法还可用于分析 MARs 中的其他 DNA 修饰，有助于更好地研究 MAR DNA 修饰的功能，并可能提供潜在的疾病标志物，为疾病的诊疗带来新的突破。

关键字 DNA 甲基化；5-羟甲基胞嘧啶；核基质附着区

参考文献

[1] Wu, H. & Zhang, Y. Reversing DNA Methylation: Mechanisms, Genomics, and Biological Functions. *Cell* **2014, 156**, 45–68.
[2] Xu, Y. *et al.* Genome-wide Regulation of 5hmC, 5mC, and Gene Expression by Tet1 Hydroxylase in Mouse Embryonic Stem Cells. *Molecular Cell* **2011, 42**, 451–464.
[3] Narwade, N. *et al.* Mapping of scaffold/matrix attachment regions in human genome: a data mining exercise. *Nucleic Acids Research* **2019, 47**, 7247–7261.
[4] Zhang, R., Lai, W. & Wang, H. Quantification of Epigenetic DNA Modifications in the Subchromatin Structure Matrix Attachment Regions by Stable Isotope Dilution UHPLC-MS/MS Analysis. *Anal. Chem.* **2021, 93**, 15567–15572.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于血清代谢组学的糖尿病合并冠心病的代谢分子标志物分析

金震宁*[1,2]、胡巍[3]、杨艳[4]、王惠雨[1,2]、樊荣[1,2]、张绍兴[1,2]
1. 浙江清华长三角研究院生物技术与医药研究所
2. 浙江清华长三角研究院全省多维组学与分子酶学重点实验室
3. 中国人民解放军总医院第一医学中心口腔科
4. 武汉大学中南医院口腔科

背景：糖尿病（DM）是常见的慢性代谢性疾病，约 90%病例为 II 型糖尿病，是冠心病（CHD）的危险因素之一。糖尿病患者的冠心病发病率和死亡率风险较健康人群高 2-4 倍。**目的：**开展血清代谢组学鉴定并验证糖尿病合并冠心病的特征代谢分子标志物。**方法：**采用基于离子色谱质谱（IC-MS）的代谢组学，对健康对照组、糖尿病组（DM）或糖尿病合并冠心病组（CHD-DM）的患者血清样本分析比对，筛选代谢分子标志物；采用酶学分析法实施验证。代谢组学分析每组含 10-12 个独立样本，酶学验证每组含 22 个独立样本。**结果：**与健康对照组相比，DM 和 CHD-DM 组分别发现 611 种和 420 种代谢产物产生显著变化；CHD-DM 和 DM 组间有 653 种代谢产物存在明显差异。在独立的 DM、CHD-DM 和健康对照组样本中进一步验证筛选出的 3 种候选标志物，磷酸肌酸（PCr）、环鸟苷酸（cGMP）和牛磺酸。较 DM 组和健康对照组，上述 3 种代谢物均在 CHD-DM 组明显升高；PCr、cGMP 可作为区别 CHD-DM 和 DM 的代谢分子标志物。**结论：**除牛磺酸外，磷酸肌酸和环鸟苷酸可作为糖尿病患者冠心病患病率风险预测标志物。

关键字 代谢组学、糖尿病、冠心病、代谢分子标志物

参考文献：

1. T. R. Einarson, A. Acs, C. Ludwig and U. H. Panton, Cardiovasc Diabetol, 2018, 17, 83.
2. R. Nesto, Acta Diabetol, 2001, 38 Suppl 1, S3-8.
3. T. Chowdhury and S. S. Lasker, Diabet Med, 2002, 19, 83-84.
4. M. C. Bertoluci and V. Z. Rocha, Diabetol Metab Syndr, 2017, 9, 25.
5. N. Gao, Z. Yuan, X. Tang, X. Zhou, M. Zhao, L. Liu, J. Ji, F. Xue, G. Ning, J. Zhao, H. Zhang and L. Gao, J Diabetes Complications, 2016, 30, 199-205.
6. J. C. Zgibor, K. Ruppert, T. J. Orchard, S. S. Soedamah-Muthu, J. Fuller, N. Chaturvedi and M. S. Roberts, Diabetes Res Clin Pract, 2010, 88, 314-321.
7. G. M. Reaven, Diabetes Obes Metab, 2002, 4 Suppl 1, S13-18.
8. R. Pallares-Mendez, C. A. Aguilar-Salinas, I. Cruz-Bautista and L. Del Bosque-Plata, Ann Med, 2016, 48, 89-102.
9. E. H. Ji, J. Lee and S. Hu, Adv Exp Med Biol, 2021, 1280, 149-159.
10. L. Cui, J. Liu, X. Yan and S. Hu, Anal Chem, 2017, 89, 11737-11743.
11. S. Hu, J. Wang, E. H. Ji, T. Christison, L. Lopez and Y. Huang, Anal Chem, 2015, 87, 6371-6379.
12. J. Wang, T. T. Christison, K. Misuno, L. Lopez, A. F. Huhmer, Y. Huang and S. Hu, Anal Chem, 2014, 86, 5116-5124.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

CAPTURING CRITICAL SITES OF PROTEIN-DNA COMPLEXES BY A HIGHLY SENSITIVE ENZYME COMPLEX METHOD

Qinghua Zhang[1,2]、Yonggang Hu[2]、Hailin Wang*[1]

1. The State Key Laboratory of Environmental Chemistry and Ecotoxicology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences.

2. National Key Laboratory of Agricultural Microbiology, College of Life Science and Technology, Huazhong Agricultural University.

Protein-DNA interactions (PDIs) are a ubiquitous facet of organismal development, serving instrumental functions in processes such as DNA replication, recombination, and repair. Accurate and dynamic profiling of PDIs is paramount in facilitating a comprehensive understanding of disease mechanisms. As such, the development and refinement of sensitive, efficient, and precise analytical methodologies represent a crucial component of PDI research. In our prior studies, we constructed a precise sequencing of single protected-DNA fragment molecules (SPDFMS) targeting individual protected nucleic acid fragments to decipher the Protein-DNA interaction atlas[1]. We also developed a two-color alternating excitation-modified single-molecule real-time fluorescence imaging assay[23].

In the current study, we have engineered a composite enzyme digestion system that can effectively and selectively digests unprotected nucleic acids, while remove the background of short DNA fragments. This allows for the enrichment of protected DNA segments with near-single nucleotide resolution. This system can reliably remove the free ends of various intricate single-stranded DNAs. Leveraging next-generation sequencing technologies, we have the capability to localize these dynamic interactions at the single-base level. Moreover, our sample preparation procedure is not limited to the investigation of known protein-DNA interactions but is also capable of identifying diverse, hitherto unknown interactions. The amalgamation of high-throughput sequencing, chromatographic analysis, and other technical resources paves the way for the development of novel analytical methodologies. These new techniques will undoubtedly play a significant role in the characterization, localization, and resolution of dynamic interactions within PDI complexes.

关键字 PDIs，Enzyme digestion，Sequencing

参考文献：

1.Yuan, Z. et al., Chemical Science, 2021, 12(6), 2039-2049.

2.Zhao, B. et al., Cell discovery, 2017, 3, 16053.

3.Yu, F. et al., Nucleic acids research, 2023, 51(5), 2270–2283.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于双链特异性核酸酶荧光各向异性信号放大检测 miRNA

吴惠兰[1,2]、章大鹏*[1,2]、汪海林[1,2]
1. 中国科学院大学生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院环境学院

MicroRNA（miRNA）是一类长度约为 19-25 核苷酸的非编码单链小-核糖核酸（RNA），具有调控转录后靶基因表达功能，在细胞分化、生物发育及疾病发生发展过程中发挥巨大作用，被认为是疾病诊断与治疗的潜在生物标志物。部分 miRNA 在细胞内表达水平很低，因而需要极为灵敏而定量的方法。本研究基于双链特异性核酸酶（duplex-specific nuclease, DSN）的特征建立了一种荧光各向异性信号放大快速（30 min 内）检测 miRNA 的分析方法，将 TMR 荧光基团标记的单链 DNA（ssDNA）作为探针，其与目标 miRNA 碱基配对形成 DNA/RNA 杂合体，DSN 能特异性降解杂合体中的 ssDNA 使 miRNA 被释放，其与溶液中的单链 DNA 探针结合形成杂合体继续被 DSN 降解进行循环，通过对单链 DNA 探针的荧光各向异性变化实现目标 miRNA 定量分析。该方法在 50 pM-2 nMmiRNA 范围内表现出良好的线性关系，检出限为 40 pM。并且该方法还具有高选择性，能够区分单碱基突变 miRNA。

关键字 荧光各向异性检测；双链特异性核酸酶；miRNA 检测

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

一种吲达帕胺的 LC-MS/MS 分析方法建立

曹佳佳、孙元社*、易特、许华祥、李彤
依利特(苏州)分析仪器有限公司

吲达帕胺是一种非噻嗪类吲哚衍生物，具有钙拮抗作用和利尿作用，可作为利尿和抗高血压药，临床上主要用于治疗轻、中度原发性高血压。由于该药临床应用剂量较小，每天给药仅 2.5mg，口服后人体血浆中药物浓度较低，因此需要建立高灵敏度的检测方法。液质联用体现了色谱和质谱优势的互补，将色谱对复杂样品的高分离能力，与质谱具有高选择性、高灵敏度及能够提供相对分子质量与结构信息的优点结合起来，在药物分析等领域得到了广泛的应用。

本文建立了一种液质联用法测定吲达帕胺。本方法开发建立在依利特 EClassical 3200L 高效液相色谱仪与 MS2 Vertical 9100 质谱仪联用系统上，采用 SinoPak BEH T-C18 (3um, ID 2.1×100mm)色谱柱分离，以甲醇/水/冰醋酸=45/55/0.1 为流动相，流速为 0.2 mL/min，通过电喷雾离子源(ESI)，以多反应监测(MRM)方式进行负离子检测，吲达帕胺的检测离子对为 m/z 364.0→189.0，结果如图 1 所示。该方法快速、灵敏，可适用于吲达帕胺的分离检测。

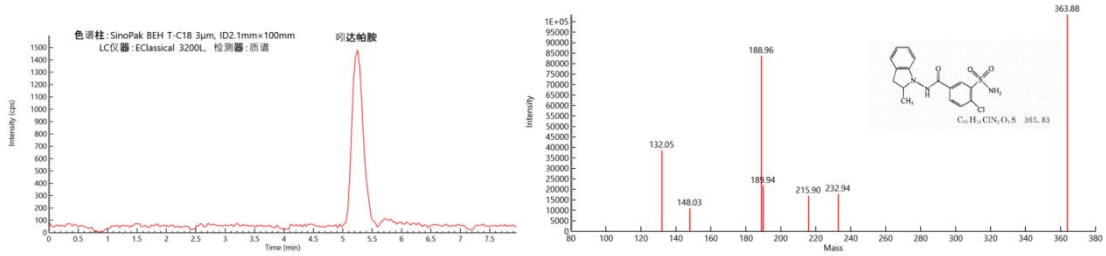


图 1 吲达帕胺的 LC-MS/MS 分析图

关键字 液相色谱，LC-MS/MS，吲达帕胺，方法建立

参考文献：

1. S. Xu, Y. Liang, H. Qu, Y. Li, H. Gao, G. Hao, *Chinese Journal of Clinical Pharmacology and Therapeutics*, **2012**, 17, 206-210.
2. X. Jin, Y. Wang, D. Ouyang, Y. Chen, G. Zhou, G. Yang, H. Zhou, Z. Tan, *Chinese Journal of Clinical Pharmacology and Therapeutics*, **2012**, 17, 1157-1162.
3. J. Chen, N. Mei, Y. Xie, W. Jiang, X. Jiang, *Chin. J. Pharm. Anal.*, **2005**, 25, 1035-1037.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

一种严格消除核 DNA 的 UHPLC-MS/MS 检测线粒体 DNA 中 5mC 丰度的方法研究

郑婧[1]、刘怡然[1]、梁子钰[2]、汪海林*[1,2]
1. 国科大杭州高等研究院
2. 中国科学院生态环境研究中心

5-甲基胞嘧啶（5mC）在核 DNA 中是一种重要的表观遗传 DNA 标记，但在线粒体 DNA（mtDNA）中仍难以发现。在这里，我们首次报道了一种新的、严格的核 DNA（nDNA）消除质谱测定法，用于可靠、准确地检测 mtDNA 中的 5mC。

首先，通过结合碱性裂解和线性 DNA 特异性 RecBCD 切割，环状 mtDNA 可富集 809 - 946 倍。然而，残留的 nDNA 约占提取的 mtDNA 的 12 - 19%。其次，在限制性内切酶 BbsI（针对人类 mtDNA）或 EcoRV（针对小鼠 mtDNA）的辅助下，环状 mtDNA 只被切割成单个或两个线性化 mtDNA 片段，但残留的 nDNA 则被有效降解为更短的片段。因此通过凝胶电泳，线性化 mtDNA 片段与残留的降解 nDNA 短片段被有效分离。最后，将线性化的 mtDNA 条带切片并进行胶内酶切，酶切产物进行精确的稳定同位素稀释 UHPLC-MS/MS 分析。通过这种灵敏而准确的方法，我们证明可以在正常细胞系的小鼠 mtDNA 和经 CpG 甲基转移酶 M. SssI 处理的人类 mtDNA 中检测到 5mC。总之，我们提供了一种功能强大的质谱检测方法，用于准确测量细胞系中 mtDNA 5mC 总体丰度。

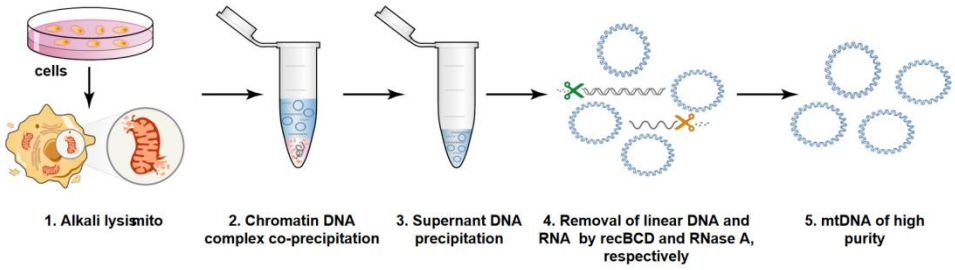


图 1 mtDNA 提取纯化流程图

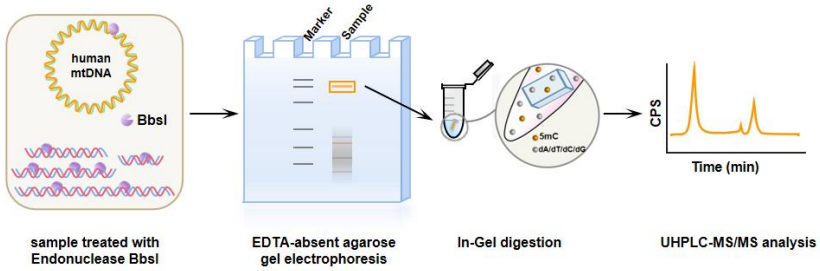


图 2　mtDNA 5mC 丰度检测流程图

关键字 UHPLC-MS/MS；线粒体 DNA；5mC

参考文献：

[1] Shock, L. S., Thakkar, P. V., Peterson, E. J., et al. DNA methyltransfer-ase 1, cytosine methylation, and cytosine hydroxymethylation in mammalian mitochondria[J]. Proc Natl Acad Sci U S A, 2011, 108 (9): 3630-3635.

[2] Guitton, R., Nido, G. S.,Tzoulis, C. No evidence of extensive non-CpG methylation in mtDNA[J]. Nucleic Acids Res, 2022, 50 (16): 9190-9194.

[3] Shao, Z., Han, Y.,Zhou, D. Optimized bisulfite sequencing analysis re-veals the lack of 5-methylcytosine in mammalian mitochondrial DNA[J]. BMC Genomics, 2023, 24 (1): 439.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

基于固相萃取和稳定同位素稀释 UHPLC-MS/MS 准确定量免疫激动剂环鸟苷酸-腺苷酸

宋星睿[1,2]、刘海龙[2]、赖玮毅[2]、李向军*[1]、汪海林[2]
1. 中国科学院大学
2. 中国科学院生态环境研究中心

炎症是生物体对病原体、微生物或组织损伤的保护性应答，可产生不同类型的免疫反应。在细胞内，需要有对应的识别受体对外源病原体组分进行识别，进而产生免疫应答。其中，环鸟苷酸-腺苷酸合成酶（Cyclic GMP-AMP synthase，cGAS）作为细胞中异常胞浆 DNA 的首要识别受体，可对细胞质双链 DNA 进行识别并被激活。被激活后的 cGAS 以 ATP 和 GTP 为底物，催化形成第二信使 2',3'-环化 GMP-AMP（2',3'-cyclic GMP-AMP，2',3'-cGAMP），产生的 2'3'-cGAMP 可激活干扰素基因刺激因子（Stimulator of Interferon Genes，STING），最终引发下游 I-IFNs 和促炎细胞因子相关基因的表达。因其生物样品中基质复杂、2'3'-cGAMP 生理条件下浓度低等原因，使得目前对 2'3'-cGAMP 的分析检测存在诸多难题。因此，发展细胞水平 2'3'-cGAMP 的快速、准确、灵敏的检测手段，对于理解 cGAS 调控生理及病理作用、临床诊断和治疗相关自身免疫疾病等领域具有重要意义。

本研究基于固相萃取法（Solid Phase Extraction，SPE）[1]富集和稳定同位素稀释法（Isotope Dilution Mass Spectrometry，IDMS）[2]，建立了快速、准确、灵敏且高通量的 2'3'-cGAMP UHPLC-MS/MS 分析检测方法，可对细胞水平下 2'3'-cGAMP 进行有效富集与检测，为生物医药效应研究、临床诊断与监测等领域提供快速、准确、高通量的检测方案。

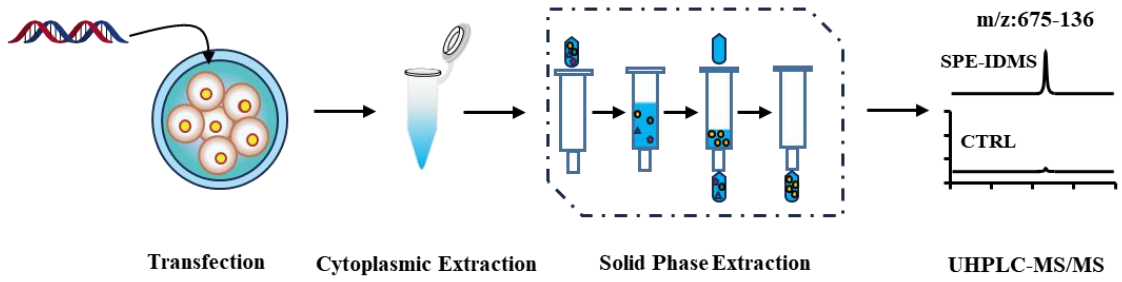


Fig. 1 Schematic diagram of cGAMP detection based on SPE-IDMS

关键字 cGAS；2'3'-cGAMP；UHPLC-MS/MS；固相萃取法；同位素稀释法

参考文献

1. D. Gao, T. Li, X. Li, X. Chen, Q. Li, M. Wight-Carter, Z. Chen., *Proc. Natl. Acad. Sci.,* **2015,** 112, E5699-E5705.

2. W. Lai, C. Lyu, H. Wang., *Anal. Chem.* **2018,** 90, 6859-6866.

分会场：8.质谱科学与仪器

交流形式：墙报

微探针质谱前端（μPESI）的研发与应用

朱建雄*[1]、邢云惠[2]、钟国平[2]

1. 广东联捷生物科技有限公司

2. 中山大学药学院

本报告将披露一种微探针质谱前端技术与仪器系统，包括快速去基质效应的样品处理试剂盒和一个微探针自动进样器。样品处理试剂盒是针对特定样品和特定待测物配制的去基质效应的样品萃取试剂及装置；微探针自动进样器则是采用一种新发明的带刻槽的实心针，在一个 4-轴机械运动模组的驱动下先是从样品瓶中蘸取~0.5μL 的样品溶液，再转移到质谱离子源，伸入到与质谱入口经优化的位置，接着对它施加直流高压，针尖上蘸取的样品液在高电压驱使下产生电喷雾，样品中的待测物经电喷雾转化成游离的带电粒子(离子)而被质谱仪收集、分离和检测，然后是走到等离子洗针器洗针，完了做下一个样品，整个过程大约耗时 20~40 秒，其中洗针耗时 10~30 秒。以这一新型前端取代 LC/MS 中液相色谱用来直接将样品引入质谱进行分析检测，分析速度能提高几十倍。因为去掉了色谱，整个系统极为简单，几乎不用方法开发，操作也非常方便，而且不用流动相，不用色谱柱，也无需喷雾气，完全避免了液相色谱带来的超压、漏液、柱效下降、离子源污染、方法切换费时费事等诸多问题。微探针-质谱能分析一切 LC/MS 可以分析的样品，得到的重现性、线性、定量限等分析参数均与 LC/MS 不相上下。本报告将演示微探针在血药浓度分析和小分子组学研究的应用实例。

关键字 质谱前端、质谱样品处理、质谱临床应用、组学分析、DMPK、TDM、高通量质谱分析

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

新一代行波离子导向技术的研制和质谱仪开发

郭星*[1]、王哲坤[1]、赵忠俊[1]、何星亮[1]、邓辅龙[1]、代渐雄[2]、杨燕婷[2]、段忆翔[1]
1. 四川大学
2. 成都艾立本科技有限公司

质谱仪是高端科学仪器门类中的翘楚，具有强大的分子质量测定及结构解析能力，在环境监测、医疗诊断、食品科学及过程分析等国家重点领域及各种民生领域中承担着极其重要的角色[1]。离子导向器(IG)被誉为质谱仪的“重要桥梁”，其离子传输性能直接影响着质谱仪的整机状态和应用范围[2]。

传统离子导向装置在维持一定离子驱动力的前提下增加导向器长度，必须在设备两端施加更大的直流电压，极易产生高压放电的现象，从而影响仪器的工作性能甚至损坏仪器电子设备，导致质谱仪整机的性能提升及应用拓展极为受限。团队自主研制的新型行波离子导向器(TWIG)利用瞬态变化的低幅值行波电压来驱动离子的轴向运动，可以解决上述问题[3-4]。基于 TWIG 技术研制的行波离子分子反应器(TW-IMR)，已成功与质子转移反应飞行时间质谱仪(PTR-TOFMS)联用。与传统 PTR-TOFMS 相比，TW-IMR 使仪器在不引入额外脉冲透镜的情况下，显著提高了 TOFMS 的离子利用率，为设计更高性能的 PTR-TOFMS 系统开辟了一条全新途径[4]。

基于 TWIG 技术已成功开发并表征的行波迁移率分离器(TW-IMS)[4]，以一种经济简便的方式，不仅可能够作为高性能离子迁移谱仪独立使用，而且可与飞行时间质谱仪联用。利用两种仪器的优势互补提供前所未有的分析能力，用于更具有挑战性的分析检测，诸如:同分异构体的分离以及生物构象的深度解析，应用于蛋白组学及临床诊断等领域。

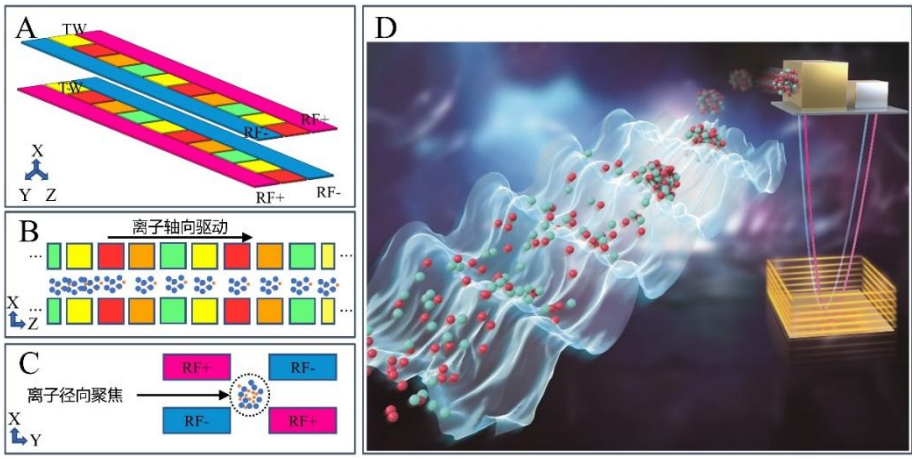


图1 (A) PQTWIG中各功能电极的三维结构示意图；(B) 行波电极实现离子的轴向驱动；(C) 射频电极实现离子的径向聚焦；(D) PQTWIG中离子“冲浪并聚焦”；

关键字 行波离子导向器，行波分子离子反应池，行波离子迁移谱，飞行时间质谱

参考文献：

1. 杨芃原. 质谱学报, 2020, 41(02): 93-94.
2. T. W. Burgoyne, G. M. Hieftje. Mass spectrometry reviews, 1996, 15(4): 241-259.
3. X. Guo, J. Pu, J. X. Dai, et al. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2023, 38(3): 619-628.
4. 郭星，赵忠俊，代渐雄，等. 分析化学, 2021, 49(9): 1461-1469.

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

原位电离质谱技术在毒药物案件中的应用

吴辉*[1]、朱明怀[2]
1. 厦门中为科学仪器有限公司
2. 厦门市公安局刑事科学技术研究院

目的 对不同基质样本中的毒药物进行快速筛查定性。方法 使用探针取样后，热解析电喷雾原位电离源直接进样，串联三重四级杆质谱进行检测。结果 建立了毒品类（精神药品、麻醉药品）、农药类、那非类药物、止痛类药物、减肥药物、降血糖药物的筛查谱库，根据案件类型选择相应谱库进行快速筛查定性。结论 原位质谱技术能够对各种类型样本进行快速筛查定性，提升实验室检测效率，加快案件处理。

关键字 原位电离源；毒药物快速筛查；质谱筛查谱库

分会场：8.质谱科学与仪器
交流形式：墙报

稀有气体同位素质谱仪离子源设计

欧阳博立*、邹盛强、林跃武
四川紫璞科技有限责任公司

质谱分析是进行稀有气体同位素分析最常用的方法之一。由于待测样品中稀有气体的含量通常很低，可检测到的信号微弱，稀有气体同位素分析对质谱仪具有更高的性能要求，需要满足灵敏度高，背景信号弱和真空环境好等条件。本文的主要工作是设计一种适用于稀有气体同位素质谱仪的电子轰击型离子源，以满足对稀有气体同位素进行质谱分析的需求。

本文从离子源性能的影响因素和稀有气体质谱对离子源设计的要求出发，设计出了一个体积小，电极片数量少，结构简约且理论性能较好的电子轰击型离子源，同时设计了适配的离子源外接腔体，离子源的安装和接线方式缩小了腔体内部体积，易于在静态分析下维持超高真空度。使用仿真软件 COMSOL6.1 和 SIMION8.0 对离子源的工作过程进行了相应的电磁学仿真，分析了电子发射、离子产生和离子引出聚焦过程中电磁学参数对电子电离效率、离子生成位置、离子能量分散、离子引出率与离子束聚焦效果等因素的影响。

为验证所设计离子源的可行性，在某专用气体同位素质谱仪的基础上搭建了测试环境，对离子源进行了实验测试，检测到了氮峰和氩峰等一系列质谱峰，结果表明所设计的离子源具备实现气体离子化并输出离子束进行质谱分析的能力，峰形系数和分辨率与理论值较为接近，离子源性能良好。

关键字 质谱仪；电子轰击型离子源；模拟仿真

参考文献：

1. Oya K, Naho Y, Yoshihisa O, et al. Development of an electron impact ion source with high ionization efficiency for future planetary missions[J]. Planetary and Space Science, 2022, 220.
2. Appelhans, A. D, Olson, et al. High efficiency noble gas electron impact ion source for isotope separation[Z]. 2016.
3. Werner, H. W. Design of a small magnetic-sector mass spectrometer with reduced mass discrimination[J]. Journal of Vacuum Science Technology, 1972, 9(1): 216-219
4. 黄超, 赵学, 张建超, 等. 基于相空间方法的电子轰击离子源参数对其性能影响的研究[J]. 真空科学与技术学报, 2011, 31: 169-173.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

Cross-Organ Impacts of Air Pollution on Energy Balance

杨铸*
香港浸会大学

Epidemiological studies have consistently linked exposure to fine particulate matter (PM2.5) with the development of metabolic diseases, including cardiovascular disease and non-alcoholic fatty liver disease, particularly in individuals with high-fat, high-cholesterol diets. Air pollution significantly disrupts biological processes, leading to metabolic shifts that impair energy balance, a fundamental aspect of nearly all life processes. However, the molecular mechanisms driving these adverse effects, particularly through disrupted cross-organ communication, remain poorly understood. By harnessing the power of multi-omics approaches, we explored how PM2.5 exposure affects energy metabolism across various organs in animal models. Our findings reveal that PM2.5 exacerbates the detrimental effects of unhealthy diets on cardiovascular health by impairing metabolic processes in other organs. In addition to its direct toxicity on the cardiovascular systems, PM2.5 disrupted branched-chain amino acid metabolism in the spleen and altered lipoprotein production and clearance in the liver, thereby heightening cardiovascular disease risk associated with poor dietary habits. By uncovering the molecular alterations behind PM2.5's negative impact on energy balance among various tissues, these results underscore the heightened health risks faced by individuals consuming high-fat, high-cholesterol diets while exposed to environmental pollutants. These insights may pave the way for targeted interventions and preventive strategies for vulnerable populations.

关键字 Particulate matter; high fat and high cholesterol; energy metabolism; cardiovascular risk; multi-omics; cross-organ communication.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于化学选择性探针与同位素标记结合的亚代谢组分离及全定量定性分析

田洪涛[1]、赖治臻[1]、张文佳[1]、杨啸林[1]、周江[2]、李智立*[1]
1. 北京协和医学院基础学院
2. 北京大学化学与分子工程学院

小分子代谢物作为疾病诊断和预后生物标志物的价值日益凸显，这迫切要求开发出具备高灵敏度与精确度的定性与定量分析方法。目前，代谢检测技术仍面临诸多挑战，包括样本预处理流程繁琐、基质效应干扰显著、代谢物检测灵敏度不足以及定量结果精确度不高等问题。针对这些难题，本研究创新性地设计并合成了针对羧基、磷酸基、羟基、氨基、硫醇和羰基等多亚代谢组的化学选择性探针。该探针巧妙融合了磁性固相萃取技术、正交切割位点设计、14N/15N 同位素标记策略以及高选择性偶联位点，有效削弱了基质干扰，显著提升了定量分析的准确性。结合 HRIAIQuant 的软件可实现对高分辨率质谱中的 14N/15N 同位素提取与定量分析，极大地提高对代谢物的确认。应用此探针与软件，从人血清中成功识别出 33,874 个代谢物，其中在 HMDB 中确认了 701 种代谢物，并发现了 1,062 种潜在的新型代谢物。该技术方法在阿尔兹海默病（AD）小鼠模型 SAMP8 和 SAMR1 的多个脑区飞发现差异代谢物。该技术为开展临床大样本代谢物定量分析及差异代谢物筛选提供了一种新型分析技术策略，为开展不同批次临床样本的疾病标志物验开辟了新技术手段。

关键字 化学选择性探针；同位素标记；亚代谢组；阿尔兹海默病.

参考文献

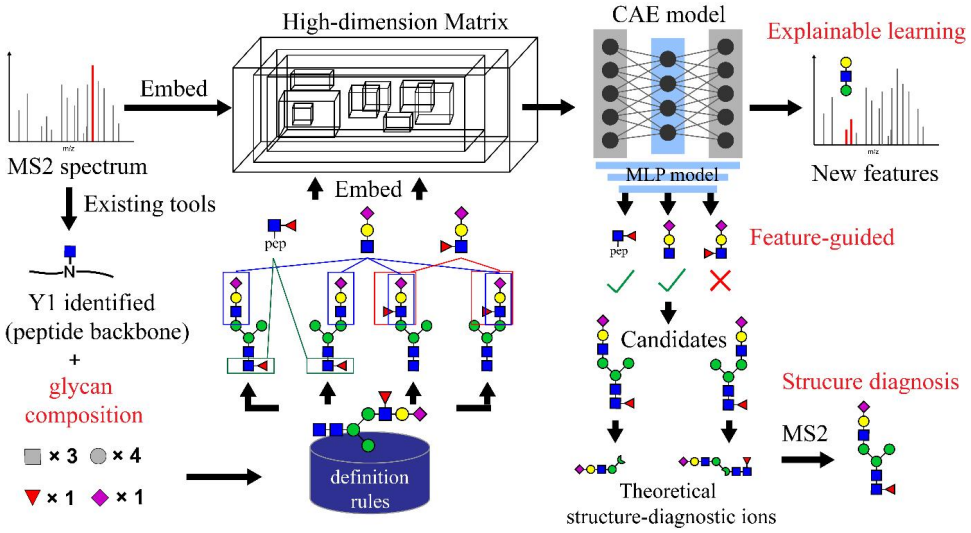
1. N. Garg, L. P. Conway, C. Ballet, M. S. P. Correia, F. K. S. Olsson, M. Vujasinovic, J. M. Löhr, D. Globisch, Angewandte Chemie International Edition 2018,
2. S. Liu, M. Zhang, Z. Lai, H. Tian, Y. Qiu, Z. Li, ACS Appl Mater Interfaces 2022.
3. H. Tian, Z. Lai, M. Zhang, S. Liu, R. Zhang, J. Zhou, Z. Li, Analytical Chemistry 2023, 95, 9539-9547.
4. M. Zhang, Z. Lai, R. Zhang, S. Liu, H. Tian, Y. Qiu, D. Li, J. Zhou, Z. Li, Small 2023, 19, e2204734.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于质谱的结构特异糖蛋白质组学及生物医学应用

田志新*
同济大学

糖基化是蛋白质上常见的翻译后修饰，广泛调节蛋白质的结构和功能。相对于甲基化、乙酰化、磷酸化等小分子修饰的单一结构，糖基化修饰具有数以万计的结构，包含序列结构、链接结构、异头异构，立体构象等多个维度。本报告将介绍我们发展的基于质谱的糖链序列和链接结构特异糖蛋白分析方法，包括唾液酸链接特异衍生反应、序列和链接结构特异亲水色谱分离、序列和链接结构特异串级质谱解离、以及序列结构特异深度学习解析。



关键字 质谱；糖蛋白质组学；糖链结构；标志物；机制

参考文献

1. Zhixin Tian*, et al. Analytica Chimica Acta, 2024, doi: 10.1016/j.aca.2024.343066.
2. Zhixin Tian*, et al. Anal. Bioanal. Chem., 2024, doi:10.1007/s00216-024-05392-9.
3. Zhixin Tian*, et al. Analytica Chimica Acta, 2024, 1288, 342129.
4. Zhixin Tian*, et al. Analytica Chimica Acta, 2023, 1252, 341029.
5. Zhixin Tian*, et al. Analytica Chimica Acta, 2022, 1230, 340391

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

亚细胞分辨分子质谱成像

王佳宁、蔡宗苇*
香港浸会大学

在生物医学研究中，分子质谱成像技术，特别是基于基质辅助激光解吸电离（MALDI）的成像方法，正变得越来越重要。尽管其分辨率与传统光学显微镜相比存在明显差距，但通过对光学系统的精细设计，已经成功将 MALDI 成像的分辨率提高至 1.2 微米，并在 0.6 微米间隔进行了过采样测试。这一成就虽然标志着技术的显著进步，但在实现高分辨率下的高质量基质沉积和保持系统稳定性方面，仍面临着艰巨挑战。目前，商业上可获得的 MALDI MS 成像系统的最高分辨率为 5 微米。如果未经修改的商业系统能够实现有效的亚细胞级别的分辨率，那么不仅能够显著提升其应用价值，还能保持系统的高稳定性和实用性。 通过样品制备方法与技术策略的提升，可以在同等空间采集分辨率下获得更高信噪比，更高对比度的成像信号，进而可以提升或者将仪器有效分辨率的极限得以充分发挥。我们开发了相应的优化方法和数据分析策略，极大提升了 5 微米分辨率下单细胞成像的灵敏度和覆盖度。通过降维与数据挖掘分析，呈现了亚细胞分辨的与细胞周期和环境胁迫相关联的脂质表达空间区位变化。更进一步，我们开发了一种十倍（10x）扩展的 MS 成像技术，使得未经修改的商用质谱仪的成像分辨率得以十倍提升至亚微米级别，实现了 500 纳米的成像分辨率，显著超越了现有仪器 5 微米的限制。这种增强的分辨率使得组织结构的可视化与光学显微镜观察到的非常相似，使结构与功能之间的关联分析能够更加精确。特别是，该技术路线不仅能够识别到小鼠脑组织中的单个神经元，还成功地展现了浦肯野细胞的树突网络，其宽度小于 1 微米。此外，该技术还能够对单细胞成像呈现更多亚细胞结构的细节，为在亚细胞水平上探索脂质的生物学功能开辟了新的研究途径。 综上，我们的研究实现了前所未有的亚细胞脂质质谱成像细节成像，极大地增强了我们研究复杂生物系统以及利用质谱成像开展细胞生物学层面研究的手段。

关键字 分子质谱成像；基质辅助激光解吸电离；单细胞成像；亚微米分辨率；空间脂质组

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

单细胞代谢物质谱流式细胞仪研制

张四纯*
清华大学

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。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。

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。

关键字 流式细胞术；单细胞；代谢物；质谱

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

从高覆盖到高通量单细胞代谢组学分析方法及应用

石先哲*、徐天润、胡学森、胡春秀、许国旺
中国科学院大连化学物理研究所

细胞存在异质性，传统的群体细胞研究会掩盖个体的差异，开展单细胞研究对真实反映各个细胞在生理病理过程中发挥的作用意义重大。单细胞中代谢物组分复杂、含量较低且缺乏放大技术，通常需要分析大量单细胞样品，亟待发展高覆盖、高通量的单细胞分析新技术新方法。

为了提高单细胞代谢组分析的覆盖度，我们将 nanoESI 和 APCI 的电离机理整合，设计了同轴 nanoESI-APCI 复合电离源，相较于 nanoESI 单一模式，其信噪比提升了约 5 倍，最低检测限提升了 1 个数量级，实现了单细胞中极性和非极性代谢物的同时电离，可从单个哺乳动物细胞中鉴定出 254 种代谢物，比 nanoESI 单一模式多 82 种。复合电离源示范性地应用于营养限制诱导的细胞代谢紊乱研究，揭示了肿瘤细胞在应对营养压力时的复杂代谢调控。利用该复合电离源结合激光捕获显微切割，发现了代谢物在肿瘤微环境中的空间分布，证明该方法可用于单细胞水平的空间分辨肿瘤代谢异质性研究；将该复合电离源进一步应用于前列腺癌肿瘤干细胞的代谢特征研究，在单细胞水平观察到前列腺癌中激活的 TCA 循环[Adv Sci, 2024: e2306659]。

为了提高单细胞代谢组分析的通量，我们设计和研制了一种惯性微流控芯片-低频脉冲感应纳升电喷雾电离源，结合高分辨质谱构建了高通量单细胞代谢组学分析平台。该技术平台不仅能耐受细胞高盐基质的干扰，从单个细胞中鉴定到 200 多种代谢物，而且具备 80 个细胞/分钟的分析通量，可连续获取数千个单细胞的代谢组信息[Anal Chim Acta 2022, 1221, 340116]。利用该平台进行巨噬细胞极化亚型的单细胞代谢组学分析。通过统计学分析巨噬细胞不同亚型间的差异代谢物，确定谷氨酰胺是 M1 和 M2 亚型差异的关键代谢物。细胞实验表明，在单培养和共培养中，M1 极化更依赖于培养环境中的谷氨酰胺。当谷氨酰胺缺乏时，M1 极化无法顺利进行，而 M2 极化受到的影响较小。这一发现有望为肿瘤治疗提供新的潜在靶点和研究思路[Anal. Chem., 2024, 96, 14935]。

关键字 单细胞；代谢组学；质谱；高覆盖；高通量

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于质谱的脂质组学与空间多组学分析

林树海*、徐昊、王亚东、姜天航、姚博
厦门大学

由于脂质的分子结构复杂多样，基于质谱的脂质组学大数据的快速定性定量分析依然存在挑战。在空间多组学的数据整合方面也存在诸多困难。我们近期开发出人工智能算法系统，构建出 1.6 亿的脂质质谱信息库，在普通计算机就可以实现高达 4 万亿/秒的质谱图搜库速率，通过系统的统计方法总结出三条保留时间规律可以高效去除假阳性，而且还构建出生成式大模型以提升 20%左右的准确性和覆盖度。不仅如此，我们还开发出有效的可视化快速定量工具，适用于所有液相色谱质谱条件。在空间多组学方面，我们也开发出质谱成像新工具，对组织标本实现高效的聚类与边界分割。更重要的是，还可以有效地整合空间代谢组学与空间转录组学，从而对组织的空间多组学数据有效解读，更好理解组织内部的免疫代谢演化过程。

关键字 液相质谱；质谱成像；脂质组学；人工智能；多组学

参考文献

1. J. Hartler, A. Triebl, A. Ziegl, M. Trötzmüller, G.N. Rechberger, O.A. Zeleznik, K.A. Zierler, F. Torta, A. Cazenave-Gassiot, M.R. Wenk, A. Fauland, C.E. Wheelock, A.M. Armando, O. Quehenberger, Q. Zhang, M.J.O. Wakelam, G. Haemmerle, F. Spener, H.C. Köfeler, G.G. Thallinger. Nat Methods. 2017, 14, 1171-1174.
2. H. Tsugawa, K. Ikeda, M. Takahashi, A. Satoh, Y. Mori, H. Uchino, N. Okahashi, Y. Yamada, I. Tada, P. Bonini, Y. Higashi, Y. Okazaki, Z. Zhou, Z.J. Zhu, J. Koelmel, T. Cajka, O. Fiehn, K. Saito, M. Arita, M. Arita. Nat Biotechnol. 2020, 38, 1159-1163.
3. Y. Li, O. Fiehn. Nat Methods. 2023, 20(10):1475-1478.4.
4. Z.J. Cao, G. Gao. Nat Biotechnol. 2022, 40(10):1458-1466.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

质谱成像技术驱动精准药学研究

李彬*
中国药科大学

质谱成像技术是一种新型分子成像技术，具有免标记、高覆盖、高灵敏等优势，被广泛应用于小分子代谢物的组织分布研究。本课题组建立了系列质谱成像新技术与新方法，显著提高药物分子检测灵敏度，可视化药物组织分布，服务精准药学研究。

关键字 质谱成像；药物组织分布

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

质谱成像与空间代谢组学应用进展

聂洪港*[1]、狄双双[1]、胡文娅[1,2]、刘继坤[1,2]、马海潇[3]、韩晔华[2]、翁瑞[3]
1. 北京大学
2. 中国石油大学（北京）
3. 中国农业科学研究院

质谱成像作为一种结合了质谱检测与分子成像的可视化检测技术，通常是对动植物样品及组织切片进行逐点或逐行，连续采集质谱信号后，将某一质核比离子的相对强度大小以亮度明暗的方式，在对应的空间位置展现出来，从而得到该离子在样品切片中的空间分布和相对含量信息。通常情况下，质谱成像技术不需要进行标记，就可以实现生物组织中成百上千中物质的定性、定量和定位分析，结合生物信息学分析手段与代谢通路研究，逐步发展为空间代谢组学中最重要的研究方法，既可从生物组织原位发现差异代谢物，还能识别其生物学功能。本工作主要介绍了作者采用常压基质辅助激光解析电离质谱成像技术在研究股骨头坏死、肿瘤等多种疾病的过程中的应用实例，以及质谱成像技术在食品、中药和环境研究中的应用情况。

关键字 质谱成像；空间代谢组学

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

时空组学技术在肿瘤研究中的应用

吴靓*
华大生命科学研究院

Single-cell technology is a powerful tool to uncover the tumor heterogeneity and the cell state of microenvironmental components in the last decades. Recently, rapidly developing single-cell even subcellular resolution spatial technologies are beneficial to underlying tissue architecture and cell-cell interaction within tumor niches. The presentation will briefly introduce the development of single-cell and spatial technologies and discuss how to use spatial transcriptome for systematically investigating the heterogeneity of particular tumor regions, revealing the evolutional regularity of tumor cells and the mechanism of microenvironment reshaping, during tumor progression at a high-resolution, and the potential applications in the clinical scenario.

关键字 空间转录组技术；肿瘤研究；肿瘤微环境

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

Mass spectrometry imaging-based multi-modal technique for environmental toxicology

赵超*
中国科学院深圳先进技术研究院

A majority of the biological and chemical imaging techniques depend on “inherent properties” to visualize the target compounds and their interactions from different forms of samples. However, no single technique to date is capable of capturing the overall chemical and biological information simultaneously from complex biological processes. Multi-modal strategy, which intends to overcome the limitation of individual technique and to acquire more “hidden” information, provides a fresh and valuable perspective on investigating the biological processes with higher spatial or spectral resolutions. Therefore, comprehensive methodologies with two or more analytical techniques display a great attraction. By integrating mass spectrometry imaging (MSI) and others multiplex analytical techniques, MSI-based multi-modal technique is able to help us clarity the metabolic pathway of biomolecules and exogenous pollutants, as well as disease progress exposed to pollutants. Specifically, we elaborate the potential toxicity of bisphenols exposure, such as immunotoxicity, nephrotoxicity, and splenic injury, and breast cancer proliferation and deterioration, etc. [The work was supported by the National Natural Science Foundation of China (22176195), the Guangdong Province Zhu Jiang Talents Plan (2021QN02Y028), the Key projects of basic research in Shenzhen (JCYJ20210324115811031)].

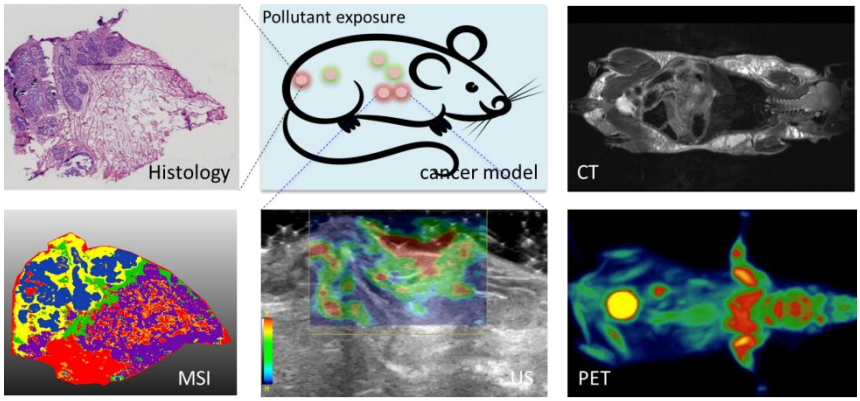


Fig.1. Take a typical cancer model for example to clarify the characteristics of MSI-based multi-modal technique

关 键 字 Mass spectrometry imaging; Tumor heterogeneity; Environmental toxicology; immunotoxicity

参考文献

1. C. Zhao, et al. Science Bulletin, 2021, 66, 578-591.
2. C. Zhao, et al. The Innovation, 2021, 100151, 525-526.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

neofleX 质谱仪助力多分子维度空间组学表征

李鹏飞*
布鲁克公司

空间组学技术 (spatial-omics) 是近年来兴起的一种新型分析策略。在 2022 年的《Nature》杂志中，空间组学技术被列为“最值得关注的七大技术”之一，进一步凸显出它在学术界的地位和受认可度。质谱成像以其原位检测、分子水平分析、免标记等优点，逐渐成为了空间组学分析策略的一个非常重要的分支。

neofleX 是布鲁克公司于今年 ASMS 上推出一款革命性的 MALDI 成像质谱仪，它配备了布鲁克专属的 smartbeam 3D 激光器，确保了具有真实的“方形像素点”成像采集功能；配备了增强型检测器，可实现线性模式和反射模式下、持久稳定的数据采集性能。

neofleX 力争实现每一帧像素分子信息的最大化，通过对组织切片中多个分子维度的空间成像表征，可以将靶标蛋白质与聚糖分子、代谢物、脂质、内源性多肽、外源性分子，以及 RNA/DNA 进行空间关联性研究。这种全方位的、多分子维度的空间生物学表征方案为肿瘤病理和脑神经科学等研究领域提供了极其丰富的信息，有助于加深人们对细胞状态、细胞功能、组织结构和蛋白质活性邻接关系的理解，为空间生物学研究带来了前所未有的覆盖广度和分析深度。

关键字 MALDI；质谱成像；空间组学

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于质谱技术的不同分子亚型乳腺癌核酸修饰特征研究

郭成*、洪秀娟、徐冬妍、潘桃
浙江大学

乳腺癌是全球女性发病率最高和死亡率最高的癌症。不同分子亚型乳腺癌具有不同的临床特征及预后结果：Luminal B 型乳腺癌的预后相对于 Luminal A 型乳腺癌来说较差，但总体而言，管腔亚型的预后仍然较好。HER2 阳性型乳腺癌具有快速生长的特点，而三阴性乳腺癌则表现出更强的侵袭性，并且其预后相对较差。这些分子亚型的不同特征以及与乳腺癌患者预后的关系，为个体化治疗提供了重要的指导依据。

RNA 修饰在 mRNA 和各种非编码 RNA 上广泛存在。在 RNA 的众多修饰中，RNA 甲基化是最典型的修饰类型。研究表明异常的 RNA 甲基化修饰分子通过影响细胞的关键功能，如 RNA 的剪接、稳定和翻译从而调控肿瘤的发生发展 RNA 修饰被认为参与了乳腺癌的发生发展。然而，人们对不同分子亚型乳腺癌 RNA 修饰特征的了解仍然十分有限，相关研究也较为缺乏。

前期，我们发现亲水相互作用色谱串联质谱(HILIC-MS/MS)对人尿液和血液中的核酸修饰具有优异的检测灵敏度，尤其是当使用苹果酸作为流动相添加剂时，能进一步提高质谱检测灵敏度，这对于检测低丰度甲基化修饰具有重要意义。本研究中，我们建立了多种 RNA 修饰的同时、高灵敏 HILIC-MS/MS 分析方法，运用该方法全面分析和评价了不同分子亚型乳腺癌组织的 RNA 修饰特征。对乳腺癌 RNA 修饰的深入研究有望发现潜在的治疗靶点，为开发新疗法和精准靶向药物提供科学依据。

关键字 质谱分析；核酸修饰；乳腺癌；生物标志物

参考文献

1. Sung H, Ferlay J, Siegel RL, Laversanne M, Soerjomataram I, Jemal A, Bray F. CA Cancer J. Clin. 2021, 71, 209-249.
2. Motorin Y, Helm M. Wiley Interdiscip. Rev. RNA. 2022, 13, 1691.
3. C. Guo, Y. Q. Hu, X. J. Cao, and Y. S. Wang, Anal. Chem., 2021, 93, 17060-17068.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

单细胞代谢物分析质谱仪研制及应用

陈安琪[1,2]、甘剑勤[2]、洪欢欢[1,2]、闫明月[2]、支鹏翔[2]、李刚强*[1,2]、闻路红[1,2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

单细胞代谢组学可以使人类对生命的探索和疾病的诊治更精准和全面，是当前生命科学研究的前沿和热点。单细胞代谢物获取、离子化和自动化高通量分析是单细胞代谢组学的国际性难题。国际上已有的商品化质谱仪只能做群体细胞代谢物分析，难以实现单个细胞代谢物分析。

针对如何从单个细胞中获取内源性代谢物的技术难题，提出了微液滴萃取技术路线，采用有机溶剂包裹单个细胞，通过萃取机理获取每个细胞中的代谢物质，完成单细胞中代谢物的高效提取；针对单个细胞体积小（1pL）、代谢物含量低（fmol-amol）、过度稀释导致质谱检测困难的问题，通过建立液滴体积和表面张力的理论计算模型，提出精密压力控制的皮升液滴产生方法，实现萃取液滴体积 100-1000 pL 连续可调，大福降低稀释效应，提升了单细胞代谢物检测灵敏度；针对皮升级样品难以进行长时离子化的问题，发展了一种基于非接触式电极及静电场诱导技术的样本界面离子化方法，研制了低流速、高灵敏度的皮升级电喷雾离子源，实现了百皮升样本长达数十秒的稳定离子化；针对如何从海量的单细胞代谢数据中筛选出高价值信息的问题，发明了一套基于人工智能算法的单细胞质谱数据的分析方法，建立了有效的单细胞质谱数据处理流程。在上述关键技术突破的技术上，研制了国际上首台能全自动分析单个细胞中代谢物的质谱仪，在皮升液滴萃取技术、皮升电喷雾质谱技术等核心技术居于领先水平。

本文研制的单细胞质谱仪有高灵敏度、高可靠性、高通量等优点，在研究疾病的致病机制、药物的药理毒理作用、重大疾病早期筛查、肿瘤治疗药物筛选等领域具有重要的生命科学和临床医学价值，有力支撑了单细胞代谢组学的发展需求。

关键字 单细胞；代谢；分析；质谱仪

参考文献

1. Chen, A.,Yan, M.,Feng, J.,Bi, L.,Chen,,Hu, S.,Hong, H.,Shi, L.,Li, G.,Jin, B.,Zhang, X.,Wen, L., IEEE Trans Biomed Eng, 2022, 69(1): 325-333.
2. Wei, Z.,Xiong, X.,Guo, C.,Si, X.,Zhao, Y.,He, M.,Yang, C.,Xu, W.,Tang, F.,Fang, X.,Zhang, S.,Zhang, X., Anal Chem, 2015, 87(22): 11242-8.
3. Feng, J.,Zhang, X.,Huang, L.,Yao, H.,Yang, C.,Ma, X.,Zhang, S.,Zhang, X., Anal Chem, 2019, 91(9):5613-5620
4. Zhang, X. C.,Zang, Q.,Zhao, H.,Ma, X.,Pan, X.,Feng, J.,Zhang, S.,Zhang, R.,Abliz, Z.,Zhang, X., et al. Anal Chem, 2018, 90(16): 9897-9903.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

细颗粒物暴露诱导的外泌体整合素通过整合素/SRC 信号通路损害大鼠主动脉内皮功能

朱林*、刁鑫、袁晨睿、许佐威、蔡宗苇
香港浸会大学

细颗粒物（PM2.5）是一种重要的环境健康风险，与全身炎症和心血管疾病相关，主要通过对内皮功能的有害影响。然而，具体的分子机制仍不清楚。本项目通过研究 PM2.5 对大鼠血管内皮功能的影响，重点关注外泌体整合素和整合素/SRC 信号通路。成年雄性大鼠在中国太原暴露于富含 PM2.5 的环境空气或过滤空气中。分离血清外泌体，使用透射电子显微镜和纳米颗粒追踪技术进行表征。通过质谱对外泌体和大鼠心脏组织区域进行蛋白质组学分析，重点关注整合素/SRC 信号通路轴。PM2.5 暴露显著改变了外泌体整合素的表达，特别是αIIbβ3 和αVβ3。心脏组织的质谱成像显示主动脉区域对 PM2.5 敏感，蛋白质组数据表明整合素通路激活，SRC 激酶是损伤的关键生物标志物。在体外 PM2.5 暴露导致 HUVEC 细胞中活性氧（ROS）水平升高和内皮单层破坏，暗示 PM 导致内皮功能障碍。SRC 抑制有助于恢复内皮完整性。故而我们推测，PM2.5 通过外泌体整合素和 SRC 激酶激活破坏血管内皮，识别 SRC 激酶作为减少空气污染引起的心血管风险的潜在治疗靶点。

关键字 空间蛋白组；质谱空间组学；内皮功能

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于纳米基底辅助的多功能质谱成像研究

殷志斌*
深圳综合粒子设施研究院

基质辅助激光解吸/电离质谱成像（MALDI-MSI）技术因其具有无标记、可视化、灵敏度高、耐盐性好等优势，被广泛用于生命科学研究领域中。然而，有机基质的使用常常存在低质量数（m/z < 500）背景干扰、基质沉积和共结晶不均匀等不足，限制了 MALDI-MSI 的广泛应用。同时，常规 MALDI-MSI 方法由于需要使用冷冻切片进行制样，也制约了该技术在植物叶片、花瓣等组织中的成像表征。因此，开发一种可兼容多种制样方式的质谱成像新方法，将大幅降低样品前处理和制备时间，为空间分辨代谢组学研究提供一种新思路。基于此，我们开发了一系列新型纳米基底材料代替传统有机基质，并发展了基于压印、印迹和直接冷冻切片等不同制样方式的多功能表面辅助激光解吸/电离质谱成像（SALDI-MSI）方法，对糖类、氨基酸类、小分子药物类、脂肪酸类等不同种类分析物实现了双极性检测，绝对检出限最低可达 10 amol。利用该方法，我们不仅实现了功能活性物质在药用植物和果蔬中的空间分布研究，还揭示了靶向药物在整株植物中的输导和转运机制。由于基底表面具有纳米级孔隙，因此该方法还可用于指纹中违禁品的快速筛查及鼠脑切片的高空间分辨率成像。该方法可百搭于任何 MALDI-MSI 仪器平台，使其在整株植物成像和单细胞成像中具有巨大潜力。

关键字 纳米基底；表面辅助激光解吸/电离；压印质谱成像；高空间分辨

参考文献

1. Z. Yin, W. Huang, K. Li, A. R. Fernie, S. Yan, Plant J., 2024, 119, 2168-2180.
2. Z. Yin, W. Huang, A. R. Fernie, S. Yan, Trend. Plant Sci., 2023, 28, 250-251.
3. D. Chen, M. Du, Y. Huang, Y. Xu, Y. Chen, L. Ma, Q. Xie, X. Zhu, Z. Chen, H. Xu, X. Wu, Z. Yin, Nano Res., 2023, 16, 3028-3039.
4. D. Chen, Y. Xu, Y. Huang, Y. Chen, Y. Zhao, B. Yan, X. Zhu, Z. Chen, H. Xu, Z. Yin, X. Wu, ACS Agric. Sci. Technol., 2023, 3, 119-130.
5. X. Wu, R. Qin, H. Wu, G. Yao, Y. Zhang, P. Li, Y. Xu, Z. Zhang, Z. Yin, H. Xu, Nano Res., 2020, 13, 611-620.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

岛津质谱成像技术助力临床与药物研究

张方丽*
岛津企业管理（中国）有限公司

随着生物医学研究的不断深入，对精确分析和定位生物样本中化合物的需求日益增长，如疾病发生发展过程研究、肿瘤异质性研究等。近年来，快速发展的质谱成像技术(Mass Spectrometry Imaging，MSI)为生物医学研究提供了一个强大的工具，在免标记的前提下，直观、快速、准确地呈现出分子在细胞或组织中的结构信息、定量信息和位置分布等信息。该技术在药物研究、疾病发展、临床研究等领域中展现了显著优势。

成像质谱显微镜 iMScope QT 内嵌光学显微镜，联合高分辨质谱仪，能同时实现光学图像和质谱成像的分析。本报告将分享岛津质谱成像综合解决方案，并通过具体科研成果，揭示成像质谱显微镜 iMScope 在临床疾病诊断、药物分布和代谢、药物递送等领域的应用价值，探讨其在未来科研和临床应用中的潜力。iMScope 通过整合光学观察与质谱成像技术，以其独特的技术优势，为临床诊断和药物研究提供了新的视角。

关键字 质谱成像；成像质谱显微镜；临床诊断；药物研究

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

岛津质谱成像技术助力临床及药物分析研究

张方丽*
岛津企业管理（中国）有限公司

随着生物医学研究的不断深入，对精确分析和定位生物样本中化合物的需求日益增长。本报告将分享岛津质谱成像综合解决方案，并通过具体案例，揭示成像质谱显微镜 iMScope 在临床疾病诊断、药物分布和代谢研究等领域的应用价值，探讨其在未来科研和临床应用中的潜力。iMScope 通过整合光学观察与质谱成像技术，以其独特的技术优势，为临床诊断和药物分析研究提供了新的视角和工具。

关键字 质谱成像；成像质谱显微镜；临床研究；疾病诊断；药物分析

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

新污染物双酚 AF 扰动腺苷代谢致小鼠结肠炎性损伤作用研究

唐志*、王瑞瑞、杨美婷
广东医科大学

摘要： **目的：**双酚 AF（Bisphenol AF，BPAF）作为双酚 A（BPA）的替代物之一，被广泛用于塑料行业，已在地表水、土壤、室内灰尘和人体生物体液中检出[1, 2]。BPAF 已成为备受关注的新污染物，但有关 BPAF 暴露的体内过程和其对肠道的损伤作用知之甚少[3]。本研究利用质谱代谢组学技术结合整体动物实验，聚焦探讨了 BPAF 暴露造成肠道炎性损伤的作用机制。**方法：**对小鼠进行为期 4 周的 BPAF 灌胃染毒，研究 BPAF 的肠道损伤作用；实验结束后，收集小鼠结肠组织，进行组织病理学分析，利用 qPCR 对结肠细胞因子的相对表达量进行分析；GC/MS 非靶向代谢组检测；对所收集的粪便及肠内容物进行微生物 16S rRNA 基因测序。**结果：**本研究发现：BPAF 暴露导致小鼠结肠长度缩短，结肠组织出现严重的病理学损伤，肠黏膜屏障受到破坏；BPAF 诱导促炎因子升高，抗炎因子降低；代谢组检测结果表明 BPAF 影响小鼠体内的代谢重塑，嘌呤代谢通路显著下调，其中嘌呤、肌苷、cAMP 等嘌呤代谢产物显著下调。肠道微生物测序结果显示，BPAF 导致肠道有益菌 AKK 菌属丰度显著降低，而肌苷可显著缓解被 BPAF 抑制的 AKK 菌丰度的降低，且 AKK 菌与嘌呤代谢物肌苷呈明显正相关，说明 AKK 菌有可能也参与肌苷代谢。**结论：**本研究表明环境新污染物 BPAF 通过干扰腺苷代谢诱导小鼠结肠组织发生炎性损伤。

关键字 双酚 AF；肠道损伤；腺苷代谢；代谢组学

参考文献

1. H. Jin, J. Zhu, Z. J. Chen, Y. J. Hong, Z. W. Cai, Environ. Sci. Technol., 2018, 52, 812-820.
2. J. C. Liu, L. Y. Zhang, G. H. Lu, R. R. Jiang, Z. H. Yan, Y. P. Li, Ecotoxicol. Environ. Saf., 2021, 208, 111481.
3. X. Y. Zhao, Y. Y. Zhang, T. Yu, L. Cai, J. L. Liang, Z. Chen, C. Y. Pan, M. Yang, Ecotoxicol. Environ. Saf., 2023, 762, 115324.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于 LC-MS 代谢组学技术研究急性肾损伤的核苷酸代谢紊乱

李晓娜、王思涵、赵立波*
北京大学第三医院

背景：急性肾损伤（Acute kidney injury, AKI）是一种起病急、进展快、预后差的严重临床急症，在住院患者中具有较高的发病率和死亡率，已经成为一项公共卫生问题。DNA 甲基化在肾脏疾病的发生和发展中起着重要作用，但 AKI 患者中的甲基化代谢轮廓及其在肾脏的空间分布改变尚不清楚。

方法：本研究基于建立的 AKI 高危人群队列，应用倾向性评分匹配法（PSM）、1:1 匹配后，纳入 61 对 AKI 与未发生 AKI（NAKI）的重症患者。采用超高效液相色谱-串联质谱联用法（UHPLC-MS/MS）法对两组患者血浆和尿液中的 11 种甲基化相关代谢物、29 种嘌呤与嘧啶类核苷酸代谢物进行定量分析。进而应用万古霉素诱导的 AKI 小鼠模型，考察小鼠不同程度肾脏损伤的核苷酸代谢物变化规律。

结果：相比未发生 AKI 的重症患者，AKI 血浆中胆碱、TMAO、和 S-腺苷蛋氨酸（SAM）等 5 种甲基化代谢物和腺嘌呤、肌苷等 4 种核苷酸水平显著上调（$P < 0.05$），而尿液中胆碱、甜菜碱、TMAO、SAM 等 6 种甲基化代谢物和鸟嘌呤、黄嘌呤等 7 种核苷酸水平显著下降（$P < 0.05$）。AKI 应激状态下，胆碱、TMAO 等肠道菌群代谢物的改变可能为菌群组分及含量变化的结果，作为核苷酸合成底物嘌呤与嘧啶分子的改变提示核苷酸合成与代谢的紊乱。相关性分析显示血浆差异代谢物与肾功能指标（血肌酐（SCr）、肾小球滤过率（eGFR）和尿素）正相关，部分代谢物升高为 AKI 独立保护因素（$OR > 1, P < 0.05$）；尿液差异代谢物与肾功能指标呈现负相关，为 AKI 独立危险因素（$OR > 1, P < 0.05$）。血浆 2'-脱氧腺苷、SAM 产物 SAH 和尿液 SAM/SAH 比值具有最佳区分 AKI 效能（AUC 分别为 0.904、0.844、0.794）。有趣的是，在万古霉素诱导的 AKI 模型小鼠中发现随着肾损伤严重程度加重，胆碱等甲基化代谢物、次黄嘌呤等核苷酸底物变化程度增加。

结论：AKI 住院患者甲基化及嘌呤类代谢物在血浆中的上调和尿液中的下调，揭示 AKI 肠道菌群的扰动与核苷酸合成分解的紊乱，且血浆 SAH 水平和 SAM/SAH 比值表现出与肾功能（SCr 和 eGFR）较强的相关性和较好的 AKI 区分效能。该研究为临床重症患者 AKI 发生的病生理机制及预警生物标志物的筛选提供更多理论支持与线索。

关键字 LC-MS；急性肾损伤（AKI）；甲基化；核苷酸代谢

基金支持 本项目得到国家自然科学基金项目(No.31901040)和北京大学第三医院临床重点项目 No.BYSY2022062)资金支持。

参考文献

1. Li Xiaona#, Liu zhini#, Zhuo Li, et al. Talanta. 2024, 267:125171.
2. Liu zhini#, Li Xiaona#, Wang Tiehua, et al. Clinica Chimica Acta. 2024, 553.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

化学蛋白质组学分析金属类小分子的靶蛋白及其毒作用机制

邵晓剑*
中山大学

银化合物作为潜在的抗癌药物候选物，具有诸多优良特性，如副作用小、具有抗炎特性以及能够克服耐药性的潜力大。然而，银离子发挥抗癌活性的确切机制尚不清楚，这阻碍了银化合物在抗癌应用中的进一步发展。本研究将热蛋白质组学分析、基于活性的蛋白质组学和泛素化蛋白质组学分析相结合，研究了以无毒的硫脲（TU）配体为载体的一价银复合物的分子机制。通过形成 AgTU 复合物，TU 配体将 Ag+离子输送到癌细胞和肿瘤异种移植模型中，从而发挥其抑制效力。我们的化学蛋白质组学研究显示，AgTU 作用于泛素-蛋白酶体系统（UPS）并破坏蛋白质稳态，这已被确定为其主要的抗癌机制。具体而言，Ag+离子在细胞环境中从 AgTU 中释放，直接靶向 19S 蛋白酶体调节复合物，并可氧化其半胱氨酸残基，从而抑制蛋白酶体活性并导致泛素化蛋白积累。经 AgTU 处理后，蛋白酶体亚基发生大规模泛素化和异常聚集，导致蛋白质稳态受损和癌细胞发生副凋亡。本研究揭示了 Ag(I)靶向 19S 蛋白酶体调节复合物的独特抗癌机制，并为优化金属类小分子药物的疗效开辟了新途径。

关键字 化学蛋白质组学；金属类离子；靶蛋白；毒作用机理

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

生物光成像引导空间代谢流技术追踪循环肿瘤细胞介导的多器官转移的代谢活动

栾合密*
广东工业大学
化学与精细化工广东省实验室揭阳分中心（广东省榕江实验室）

循环肿瘤细胞（CTC）被认为是转移性前体，它们脱落到血液中，在循环中转运，并发生外渗，使其能够成功定植到远处器官。在 CTC 介导的转移过程中出现的一个特征是代谢重编程。然而，由于从患者血液样本中分离和体外培养罕见的 CTCs 存在固有的技术障碍，从 CTCs 到转移的进化转变的全面分子特征描述仍然模糊不清。具有空间和时间分辨率的高灵敏度和稳健的代谢分析策略是揭示存活的黑色素瘤 CTCs 形成的远处转移灶的代谢重塑机制的有力工具。虽然稳定同位素追踪技术能准确测量体外肿瘤细胞的代谢活动，但评估体内器官特异性转移瘤内代谢异质性的方法仍不成熟。为了应对这一挑战，我们引入了生物荧光成像引导的空间代谢追踪技术（BIGSMT），这是一种整合了体内生物荧光成像、稳定同位素追踪、激光捕获显微切割和液相色谱-质谱测量的新方法。这种方法无需染色或复杂的样品制备过程，可防止代谢物流失，并利用化学衍生技术提高了中心碳通路中极性代谢物的灵敏度和准确性。我们的空间分辨代谢追踪分析表明，来自不同器官的转移性黑色素瘤细胞从丙酮酸进入糖酵解或三羧酸循环的碳通量各不相同，碳主要通过丙酮酸脱氢酶进入三羧酸循环。这项研究能够以空间分辨的方式对 CTC 衍生的多器官转移瘤中的代谢活动进行稳健的比较分析，为探究循环肿瘤细胞转移过程中的代谢异质性及其在环境健康领域的应用提供了新的工具。

关键字 生物光成像；空间代谢流技术；循环肿瘤细胞

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于代谢组学探讨车前子提取物对急性肺损伤小鼠的保护作用

李林楠、刘亚敏、杨莉、王峥涛*
上海中医药大学

急性肺损伤（ALI）和急性呼吸窘迫综合征（ARDS）是许多危重疾病中导致急性呼吸衰竭的主要原因，其发病机制错综复杂，涉及炎症反应失控、氧化还原失衡、肺水代谢紊乱、凝血与纤溶异常、细胞凋亡及遗传因素等多个层面。目前临床上尚无特异性的治疗手段和药物，近年来，中医辨证论治原则和整体观念在 ALI 临床和实验研究中的应用取得了一定进展。其中车前子为车前科植物车前 Plantago asiatica L.或平车前 Plantago depressa Willd.的干燥成熟种子，具有清热、利尿通淋、渗湿止泻等功效，主要成分是苯乙醇苷类、环烯醚萜类、黄酮类等。研究团队以车前子有效成分车前子提取物、类叶升麻苷和大车前苷为研究对象，通过脂多糖气管滴注诱导小鼠 ALI 模型，发现车前子有效成分可以通过缓解肺部炎症及水肿情况、改善小鼠肺功能、降低炎症因子等指标治疗 ALI 小鼠，通过 UPLC-QTOF-MS 非靶向代谢组学技术从血清、肺组织和尿液三个层面寻找与 ALI 相关的代谢标志物，通过多元统计分析结合在线数据库筛选差异代谢物、进行热图分析、通路富集分析以及代谢网络的构建。利用 UPLC-MRM-MS 技术建立 48 种氨基酸和 14 种血管紧张素的定量分析方法，通过火山图分析、Pearson 相关分析等表征与车前子治疗 ALI 相关的氨基酸代谢物，将内源性代谢物与药效生化指标结合共同来揭示车前子对 ALI 小鼠的保护作用，发现车前子可通过调控精氨酸代谢、苯丙氨酸代谢、亮氨酸代谢等来发挥治疗 ALI 小鼠的作用，这一发现也为 ALI 的病理病机及药物的作用机制提供研究思路和方向。

关键字 急性肺损伤；代谢组学；车前子

参考文献

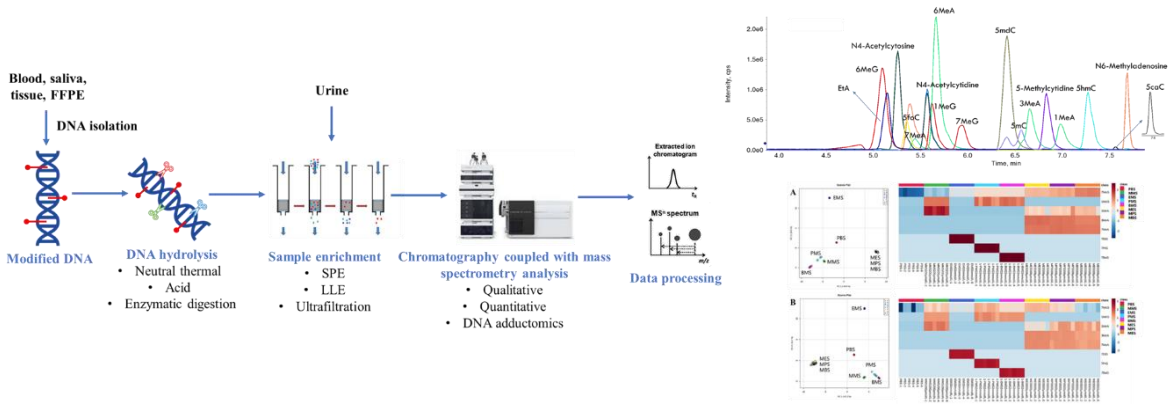
1. Liu, Yamin, et al. Journal of Chromatography A 1721 (2024): 464816.
2. Liu, Yamin, et al. Phytomedicine (2024): 155562.
3. Liu, Yamin, et al. Rapid Communications in Mass Spectrometry 37.24 (2023): e9637.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于液质联用技术的核酸修饰组学分析新方法开发及临床应用

唐煜*[1]、李立英[1]、王卫华[1]、田国芳[1]、韦芳[1]、曾雪[2]、唐丽华[3]
1. 清华大学药学院
2. 清华大学附属北京清华长庚医院
3. 哈尔滨医科大学附属第二医院

核酸的碱基结构修饰分为表观遗传修饰和暴露于外源性污染物后产生的 DNA 加合物，二者的化学本质均为烷基化/官能团化修饰的碱基或核苷，目前基于 LC-MS 技术的碱基修饰分析方法还存在需要前处理步骤繁琐、衍生化、覆盖度低、灵敏度差、通量低等技术难题，还缺乏能够高覆盖度、快速、灵敏、非衍生化的表征核酸修饰轮廓的组学分析方法，本研究基于 UHPLC-MS/MS 技术，采用同位素内标法，建立了一套灵敏、准确、快速的高通量核酸修饰组学分析方法，可以在 10 分钟内同时对 20 种常见表观遗传修饰化合物和 DNA 加合物进行定量分析。通过方法学验证，该方法的选择性、准确度、精密度、提取回收率、基质效应和稳定性均表现良好。将该方法应用于体内外生物样品分析，在体外小牛胸腺 DNA 暴露实验中，我们采用代表性基因毒性杂质磺酸酯和亚硝胺类化合物暴露后，对核酸修饰轮廓进行分析，发现了基因毒性杂质的烷基化官能团与核酸修饰结构之间的具有明确的构效关系，不同基因毒性杂质核酸修饰轮廓特征不同，为基因毒性杂质研究和潜在毒性作用机制探索提供了数据支持。在体内实验中，我们采集 40 例健康人群和前列腺癌患者的尿液，采用该方法对尿液中的游离核酸修饰化合物进行了整体分析，阐明了人尿液样品的核酸修饰轮廓。通过组学分析两组尿液样品中的游离核酸修饰化合物轮廓具有显著差异，前列腺癌显著影响了患者体内的表观遗传修饰特征，影响了内源性核酸修饰物的正常修复和代谢，其中，5-甲基胞苷、3-甲基腺嘌呤、7-甲基腺嘌呤、1-甲基腺嘌呤在正常人群和前列腺癌患者尿液中的含量具有显著差异，可作为前列腺癌发生和发展的潜在生物标志物。



关键字 核酸修饰组学；DNA 加合物；UHPLC-MS/MS；基因毒性杂质；癌症

参考文献

1. Tang Y, Xiong J, Jiang H P, et al. Anal Chem, 2014, 86(15): 7764-72.
2. Smith Z D, Meissner A. Nat Rev Genet, 2013, 14(3): 204-20.

3. Tang Y, Chen X, Wang D, et al. Talanta, 2021, 222: 121500.
4. Wang Y, Narayanapillai S, Hu Q, et al.Chem Res Toxicol, 2018, 31(9): 836-838.
5. Wang W, Liu H, Wang F, et al. Plant Cell, 2023, 35(10): 3739-3756.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

基于 HDX-MS 和 MSI 技术开发潜在镇痛药物 - 新型σ1 受体抑制剂吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-酮类衍生物

汪鹏程[1,2]、张媛媛[1,2]、杨运煌[1,2]、胡锐*[1]、刘买利[1]
1. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院
2. 华中科技大学武汉国家光电研究中心

本研究聚焦于开发对σ1 受体具有高亲和力的新型配体，以应用于针对临床镇痛治疗[1-3]。研究首先通过利用σ1 受体拮抗剂的三维(3D)药效团模型和分子对接技术，筛选获得了一系列基于吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-酮骨架的化合物并通过核磁共振（NMR）波谱和质谱技术对新合成的化合物进行了结构表征。通过体外亲和力实验测评估确定了这些化合物与σ1 受体的结合亲和力。实验结果显示，在吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-酮骨架上的碱性氨基部分和取代基进行修饰，对这些化合物与的σ1 受体结合特征有显著影响。其中显示出最强亲和力的化合物是 1-(4-氟苯基)-6-甲基-5-(3-(哌啶-1-基)丙氧基)-1,5-二氢-4H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-酮（化合物 39），其对σ1 受体的结合亲和力表现出较高的 Ki σ1 值（7.48 ± 1.11 nM）。此外进一步通过氢-氘交换质谱（HDX-MS）分析显示，化合物 39 特异性结合于σ1 受体的β折叠和α5 区域，其结合界面与经典σ1 受体拮抗剂氟哌啶醇的结合方式非常相似。通过质谱成像（MSI）实验显示，化合物 39 在腹腔注射 15 分钟后能穿透血脑屏障进入脑组织并在 30 分钟后达到药物浓度峰值，进而在随后 2h 代谢出脑。最后，在小鼠福尔马林诱导的疼痛模型的两个阶段中，化合物 39 具有良好的剂量依赖性的镇痛效果。并且该化合物表现出良好的生物安全性，进一步支持其作为镇痛药物的潜力。综上所述，本研究合成的化合物 39 有望成为治疗疼痛的新型镇痛类药物。

关键字 疼痛，σ1 受体，质谱成像，氢氘交换质谱

参考文献

1. Lan Y, Chen Y, Xu X, et al. Synthesis and biological evaluation of a novel sigma-1 receptor antagonist based on 3,4-dihydro-2(1H)-quinolinone scaffold as a potential analgesic. Eur J Med Chem. 2014; 79: 216-230.
2. Lan Y, Chen Y, Cao X, et al. Synthesis and biological evaluation of novel sigma-1 receptor antagonists based on pyrimidine scaffold as agents for treating neuropathic pain. J Med Chem. 2014; 57(24): 10404-10423.
3. Lan Y, Chen Y, Xu X, et al. Synthesis and biological evaluation of a novel sigma-1 receptor antagonist based on 3,4-dihydro-2(1H)-quinolinone scaffold as a potential analgesic. Eur J Med Chem. 2014; 79: 216-230.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

基于质谱的疾病肽组学在阿尔兹海默症患者诊断中的应用

张琬童[1]、徐子星[1]、邓春晖*[1]、孙念荣[2]
1. 复旦大学化学系
2. 复旦大学附属中山医院

阿尔茨海默病是一种破坏性和进行性的神经退行性疾病，以记忆障碍和认知功能障碍等明显的临床表现为特征，通常在患病晚期才会显现。这种疾病进展缓慢、不可逆且发病机制尚不明确，目前仍缺乏有效的根治方法。因此，对阿尔茨海默病的早期发现和准确诊断至关重要。然而，目前临床上对阿尔茨海默病的诊断方法大多采用侵入性的腰椎穿刺脑脊液分析或者昂贵的正电子发射断层扫描，采样过程极其痛苦并易引起感染。因此，发现用于诊断阿尔茨海默病的血清生物标志物对早期诊断以及及时干预发病进程至关重要。内源性多肽主要是由蛋白质降解片段，基因编码和体内基因非依赖性酶组成，广泛存在于人体血清、血浆和尿液等体液中。它们在体内的表达水平可以反映机体的生理和病理状态，在作为生物标志物方面具有广阔的临床应用前景，在监测疾病内源性肽的表达水平在为建立阿尔茨海默病诊断方法上具有巨大的潜力。

因此我们通过结合磁性纳米材料和高通量的 MALDI-TOF MS（Matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry）质谱技术，高效提取了 110 名阿尔兹海默症患者和 120 名健康人的血清肽指纹图谱，一共得到了 2685 个特征峰，然后在发现集中通过 OPLS-DA 算法，FC 以及 p 值筛选出了 15 条特征多肽。基于这 15 条特征多肽以及 VIP 值最高的 3 条特征多肽，使用六个机器学习算法，KNN, random forest (RF), support vector machine (SVM), logistic regression (LR), neural network (NN), and naive Bayes (NB)，进行阿尔兹海默症海默症诊断模型的建立，在发现集和测试集中均得到了较好的诊断准确率和精确度。最后结合 LC-MS/MS 和 Uniprot 对这 15 个特征肽段进行了鉴定以及 GO 富集分析，分析了阿尔兹海默症患者体内可能出现的异常生理过程。

关键字 肽组学；质谱；磁性纳米材料；阿尔兹海默症

参考文献

1. C. Ballard, S. Gauthier, A. Corbett, C. Brayne, D. Aarsland, E. Jones, Alzheimer's Disease, Lancet. 377 (2011) 1019–1031.
2. 2023 Alzheimer's disease facts and figures, Alzheimers. Dement. 19 (2023) 1598–1695.
3. J. Peng, H. Zhang, H. Niu, R. Wu, Peptidomic Analyses: The Progress in Enrichment and Identification of Endogenous Peptides, Trends Analyt Chem. 125 (2020) 115835.
4. Y. Li, N. Sun, X. Hu, Y. Li, C. Deng, Recent Advances in Nanoporous Materials as Sample Preparation Techniques for Peptidome Research, Trends Analyt Chem. 120 (2019) 115658.
5. L. Li, J. Wu, C.J. Lyon, L. Jiang, T.Y. Hu, Clinical Peptidomics: Advances in Instrumentation, Analyses, and Applications, BME Frontiers 4 (2023) 0019.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

基于质谱代谢组学的典型轮胎添加剂对小球藻毒性作用研究

陈智锋*[1]、姜洁如[1]、廖晓亮[1]、蔡宗苇[2]
1. 广东工业大学
2. 香港浸会大学

最近，轮胎添加剂的安全性问题引起了广泛关注。2019 年，轮胎制造行业消耗了 1900 万吨橡胶。随着全球工业化的推进，轮胎需求持续增加，预计到 2024 年这一数字将增至 2300 万吨。日常繁忙的交通使轮胎与路面摩擦，从而释放出轮胎添加剂。降雨时，这些添加剂通过地表径流进入周围的水生环境。其中，1-环己基-3-苯基脲（CPU）是一种典型的轮胎添加剂，已在水生环境中广泛检测到，并对水生生物构成潜在威胁。为评估 CPU 的生态危害，我们选用小球藻作为模式生物，结合质谱代谢组学与生化分析进行研究。代谢组学结果显示，小球藻在暴露 7 天后，CPU 影响了亚油酸和α-亚麻酸的代谢通路。同时，CPU 暴露显著增加了活性氧物种和丙二醛含量，并增强了超氧化物歧化酶的活性。因此，我们推测，CPU 通过改变藻细胞内的亚油酸代谢通路，引发氧化应激，从而抑制藻类生长。这些结果为 CPU 的环境风险评估提供了重要依据。

关键字 代谢组学；小球藻；轮胎衍生物

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

TOCP 和 TPHP 诱导斑马鱼发育免疫毒性机制的研究

梁晓萍[1]、李心砚[1]、赖东梅[1]、栾天罡*[1,2]
1. 广东工业大学
2. 五邑大学

磷酸三苯酯（TPHP）和磷酸三邻苯甲酯（TOCP）是广泛使用的有机磷阻燃剂，可在多种环境介质被检测到。研究表明这两种污染物可引起小鼠巨噬细胞凋亡，促进大鼠中性粒细胞胞外陷阱释放并加剧氧化损伤等。然而，它们对于水生生物的免疫毒性机制研究尚不明确。本研究采用环境相关浓度的 TPHP 和 TOCP 对斑马鱼幼鱼进行暴露，发现 TPHP 减少了巨噬细胞和中性粒细胞的数量，而 TOCP 则增加了巨噬细胞的数量。同时，TPHP 抑制了促炎因子并上调了抗炎因子转录水平，而 TOCP 则促进了促炎因子上调并抑制抗炎因子的转录水平。

为了探究 TPHP 和 TOCP 不同的免疫毒性作用机制，采用转录组学和代谢组学对幼鱼的基因和代谢物进行分析，结果表明两种污染物均参与调节糖酵解和嘌呤代谢通路，并且对通路中关键基因的调控表现出不同的趋势。为了阐明上述通路受调控的关键蛋白及其基因的转录水平。使用分子对接技术研究了两种污染物与能量传感器（AMPK）的相互作用机制，结果发现 TPHP 和 TOCP 均与 AMPK 有较高的亲和力，结合能分别为- 11.72 和-12.93 kJ/mol，但结合位点不同。采用荧光定量 PCR 测定糖酵解和嘌呤代谢通路中的关键调控基因，结果表明 TPHP 可抑制丙酮酸激酶（pklr）并促进黄嘌呤脱氢酶（xdh）的基因表达水平，而 TOCP 促进 pklr 并抑制 xdh 的基因表达水平。

上述结果表明，TPHP 通过与 AMPK 结合，降低 pklr 基因的转录水平，抑制糖酵解过程中能量的产生，并进一步激活嘌呤代谢，导致巨噬细胞和中性粒细胞的数量减少，从而产生免疫抑制作用。TOCP 与 AMPK 结合后，促进了 pklr 基因的转录水平，激活了糖酵解过程中能量的产生，导致巨噬细胞的数量增加，同时由于中性粒细胞无法及时对巨噬细胞进行反馈，从而引发了免疫刺激作用。本研究揭示了 TPHP 和 TOCP 对斑马鱼产生不同的免疫毒性作用机制，为评估有机磷类阻燃剂的免疫毒性危害提供了理论依据。

关键字 有机磷阻燃剂；斑马鱼；免疫毒性；分子对接

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

原位阵列微萃取和细胞外小泡代谢轮廓分析用于指导和监测产妇分娩

杨宸宇[1]、李宁[3]、陈皓霖[1]、张曼[1]、陈怡婕[1]、张祥民[1,2]、黄绍强[3]、孙念荣[2]、邓春晖*[1,2]
1. 复旦大学化学系
2. 复旦大学生物医学研究院
3. 复旦大学附属妇产科医院麻醉科

细胞外囊泡是一组包在膜内的多样化颗粒，几乎每种细胞都会主动分泌。根据其生物起源，它们可分为三大类：外泌体（30-150 nm）、微囊泡（100 nm-1 μm）和凋亡体（1-5 μm），其中以磷脂双层结构为特征、大小小于 200 nm 的纳米颗粒均为外泌体，而小的微囊泡可归类为小细胞外囊泡（sEV）[1]。大量研究表明，sEV 在各种生理过程中发挥着至关重要的作用，并被公认为能在细胞间传递生物活性成分，从而促进信息交流[2]。特别是由于它们广泛存在于几乎所有体液中，sEV 是无创体外诊断和实时监测的理想目标。除了被广泛报道的生物活性成分（如 miRNA 和蛋白质），sEV 中的代谢物也因其对这些医疗功能的重大贡献而逐渐被披露。代谢物是生化反应的下游产物，会随着生理和环境的变化而发生实时变化。因此，它们可以灵敏、实时地反映生理状态或疾病进展，对早期检测异常状态或疾病非常重要[3]。然而，sEV 代谢物的大规模分析面临着巨大的挑战，阻碍了对其进行深入探索，从而无法充分发挥其潜力。为了克服这一挑战，开发了一种工程化的板载适体阵列（16×24 个点），用于连续扩大血浆 sEV 的微提取并使用质谱进行原位代谢分析。利用这种集成阵列策略，从 274 份产前或产后妇女的血浆中获取了 sEV 的代谢谱，与传统悬浮法相比，分析时间减少了一半（7.5 小时），样品量减少了 95%（仅用 0.125 μL）。此外，使用机器学习算法对 sEV 代谢谱进行分析，构建了一个风险评分系统，可以准确评估分娩期间是否需要硬膜外镇痛以及给药后发烧的可能性。该系统基于入院样本，准确率高达 94%。此外，产后样本中还可识别镇痛后发热，总体准确率达 88%，该研究可实时监测分娩过程，为产妇分娩提供及时指导，凸显了大规模临床样本中 sEV 检测对医学创新和进步的重要意义。

关键字 早期预警，细胞外囊泡，液体活检，质谱，代谢物

参考文献

1. Théry C, Witwer K W, Aikawa E, et al. Minimal information for studies of extracellular vesicles 2018 (MISEV2018): a position statement of the International Society for Extracellular Vesicles and update of the MISEV2014 guidelines[J]. Journal of extracellular vesicles, 2018, 7(1): 1535750.
2. Mathieu M, Martin-Jaular L, Lavieu G, et al. Specificities of secretion and uptake of exosomes and other extracellular vesicles for cell-to-cell communication[J]. Nature cell biology, 2019, 21(1): 9-17.
3. Mamas M, Dunn W B, Neyses L, et al. The role of metabolites and metabolomics in clinically applicable biomarkers of disease[J]. Archives of toxicology, 2011, 85: 5-17.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

药理学结合代谢组学探究蒙药特色炮制方法对京大戟的解毒作用

刘冰冰*、曾敏、郁红礼、吴皓
南京中医药大学

目的：本研究旨在研究蒙药药材京大戟生品和诃子炮制品的肠道毒性差异，并通过药理学和代谢组学方法探究蒙药特色诃子炮制方法的解毒作用。

方法：选用 ICR 小鼠 40 只，随机分为空白组(0.5% CMCNa 溶液)、京大戟生品低、中、高组（1.35、4.50、9.00 g/kg）、诃子制京大戟组（4.50 g/kg）。给药 2 周后，用全自动生化分析仪检测小鼠血清中谷丙转氨酶 (ALT)、谷草转氨酶 (AST)、碱性磷酸酶 (ALP)、肌酐 (CR)、尿素 (Urea) 含量，酶联免疫吸附测定法 (ELISA) 检测十二指肠、回肠、空肠、结肠炎症因子肿瘤坏死因子-α (TNF-α)、白介素-1β (IL-1β)含量，HE 病理切片分析观察肠道组织的变化，并对十二指肠、空肠、回肠、结肠进行代谢组学分析，对变化显著的代谢通路进行验证。

结果：给药 2 周后，京大戟生品各组会导致小鼠回肠的炎症因子 TNF-α、IL-1β含量显著上升，回肠组织出现炎性浸润，组氨酸代谢、精氨酸生物合成、谷胱甘肽代谢、烟酸和烟酰胺代谢发生显著性变化，而诃子制品会改善这种趋势；生品高剂量组的 ALT、AST 含量较空白组略有升高，但仍在正常范围内；各给药组 ALP、CR 和 Urea 含量无显著性变化。经过相关酶的验证，发现京大戟生品会导致小鼠回肠发炎，一氧化氮（NO）水平上调，组胺含量显著下降，诃子制后相关症状得到改善。

结论：京大戟生品会导致小鼠回肠产生致炎物质 NO，损伤胃肠道黏膜，导致炎症；同时生品会使组胺含量下降，其抗炎作用降低，加剧炎症。而诃子制后会减少 NO 的产生，改善组胺含量的下降，使肠道炎症得以缓解。研究阐明了诃子炮制的解毒机理，为大戟科有毒药材的炮制提供重要见解。

关键字 蒙药；炮制；京大戟；毒性；代谢组学

参考文献

1. Fu K, Xu M, Zhou Y, et al. Pharmacological Research, 2020,155, 104688.
2. Liu B, Cao J, Liu L, et al. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2024,238, 115838.
3. Wu J, Wu Y, Feng W, et al. Molecular Nutrition & Food Research, 2022, 66(14), 2101175.
4. Vallance B A, Dijkstra G, Qiu B, et al. American Journal of Physiology-Gastrointestinal and Liver Physiology, 2004,287(4), G865-G874.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

ALDH2*2 突变影响阿霉素介导心脏毒性作用机制的多组学探索研究

杨宏坤、叶懿、廖林川*
四川大学

目的：建立阿霉素（DOX）致野生型、ALDH2*2 基因敲入小鼠心脏损伤模型；从蛋白质组学和代谢组学角度，研究急性 DOX 中毒介导心脏毒性的机制，以及探究 ALDH2 突变加重心肌损伤的机制。方法：（1）建立急性腹腔注射建立野生型（WT）、ALDH2*2*2 基因敲入（KI）小鼠阿霉素致心肌损伤模型，并检测 CK、CK-MB、α-HBDH、LDH 血浆水平；收集心肌组织，制片并进行 H&E 染色，观察形态学改变；（2）进行蛋白质组学研究，获得差异蛋白质，通过 GO 富集、KEGG 富集、PPI 等生信分析，探索阿霉素中毒致心肌损伤以及 ALDH2*2 基因敲入加重损伤程度相关的通路；（3）开展非靶向代谢组学研究，筛选、鉴定差异代谢物，通过 KEGG 通路富集分析，反映 DOX 给药后代谢通路和下游代谢物的变化以及 ALDH2 活性下降带来的影响，寻找与蛋白质组学数据间的联系。

结果：（1）两组模型小鼠心肌细胞变性、间质水肿，其中 KI 组病理损伤更为显著，CK、CK-MB、α-HBDH、LDH 血浆水平显著升高（$p<0.05$），心肌酶谱联合分析，佐证了 DOX 造成小鼠心肌细胞死亡；（2）蛋白质组学结果显示，筛选得到 WTDOX 组与 WT 组间总计 283 个差异表达蛋白，其中，上调（FC＞1.2）的有 106 个，下调（FC＜0.83）的为 177 个。经过 KEGG 通路富集分析，富集到 33 条有统计学差异的通路，其中差异性最显著的依次包括铁死亡、线粒体自噬、AMPK 信号转导、GSH 代谢、ROS 生成、自噬、PPAR 信号转导等通路；而筛选得到的 KIDOX 组与 KI 组间为 331 个差异表达蛋白，从中排除 WTDOX 组与 WT 组 2 组间共有的差异蛋白，剩 227 个；其中，上调（FC＞1.2）的为 4 个，下调（FC＜0.83）的为 223 个；KEGG 通路富集分析，富集到 12 条有统计学差异的通路，其中差异性显著的包括核糖体、焦点黏附、细胞外基质-受体相互作用、剪接体、PI3K-Akt 信号转导、较 WTDOX 组和 WT 组 2 组间更多的与心肌病相关通路；（3）代谢组学结果显示，将 WTDOX 组与 WT 组，正、负离子模式下，筛选到的有统计学意义的差异代谢物，在数据库中进行确认，鉴定到 114 个差异代谢物，表达上调（VIP＞1）的有 78 个，下调（VIP＜1）的有 36 个；KEGG 通路富集分析，差异性最显著的通路前五位依次为：TCA 循环、精氨酸生物合成、γ-氨基丁酸能突触、癌症中心碳代谢、精氨酸和脯氨酸代谢。KIDOX 组与 KI 组间与 ALDH2 相关的特异性差异代谢物，鉴定为 149 个，表达上调（VIP＞1）的有 112 个，下调（VIP＜1）的有 37 个。KEGG 通路富集分析，差异性最显著的通路前五位依次为：癌症中心碳代谢，精氨酸和脯氨酸代谢，丙氨酸、天冬氨酸和谷氨酸代谢，半胱氨酸和蛋氨酸代谢，精氨酸生物合成。

结论：（1）急性阿霉素介导心脏毒性，ALDH2*2 突变对 DOX 心脏毒性存在影响；（2）DOX 诱导心肌细胞死亡的核心机制可能是铁死亡，而非既往讨论更多的坏死、凋亡或自噬的结论；（3）ALDH2*2 突变影响 DOX 介导的心肌损伤，主要与 PI3K-Akt 信号转导通路下调、无法关闭自噬信号相关。

关键字 阿霉素；心肌毒性；ALDH2*2 突变；蛋白组学；代谢组学

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

成像质谱流式在肿瘤微环境单细胞空间异质性研究中的应用与展望

赵静、曲广波*、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

肿瘤微环境（Tumor microenvironment, TME）是由肿瘤细胞及其周围的非肿瘤细胞、细胞外基质、血管系统以及可溶性产物组成的复杂生态系统。TME 中的各类细胞尤其是免疫细胞的谱系、功能和状态具有高度异质性。TME 的组织结构和空间特征决定了 TME 中各类异质性细胞的分布和细胞间相互作用，进而影响肿瘤细胞的命运。近年来，高维成像技术和空间组学的发展为揭示 TME 的单细胞空间异质性提供了新的方法。成像质谱流式（Imaging Mass Cytometry, IMC）通过结合激光剥蚀和质谱流式技术，能够以 1 μm 的分辨率同时对四十种以上的蛋白质及其修饰物进行成像，在揭示肿瘤发展机制和预测患者临床进展方面具有巨大应用潜力。因此，本文综述了 IMC 在 TME 单细胞空间异质性研究中的现状、前景与挑战。首先，概述了 TME 空间异质性的研究现状和 IMC 的技术原理。随后，总结了 IMC 在乳腺癌、肺癌、肝癌等癌症的 TME 单细胞空间异质性研究中的最新应用和重要发现，重点讨论了 IMC 成功应用于 TME 单细胞空间异质性研究需要考虑的研究设计原则、实验方法优化和数据分析策略。最后，文章展望了 IMC 与其它单细胞技术相结合，实现单细胞多组学联合分析的前景与挑战。

关键字 成像质谱流式；肿瘤微环境；单细胞空间异质性

参考文献

1. Jing Zhao,Yaquan Liu, Meng Wang, Junjie Ma, Pu Yang, Shunhao Wang, Qi Wu, Jie Gao, Mingli Chen, Guangbo Qu, Jianhua Wang, Guibin Jiang. Insights into Highly Multiplexed Tissue Images: A Primer for Mass Cytometry Imaging Data Analysis[J]. TrAC Trends Anal Chem. 2022,157(11674).

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

用于蛋白质和代谢物生物标志物一步分析的串联细胞术平台

杜沐蓉、张四纯*
清华大学

在单细胞分析中整合多组学数据对于深入了解细胞的异质性至关重要，可揭示不同水平的调控机制如何共同影响细胞表型。在生命科学研究中，蛋白质作为生命功能执行者，单细胞层次的蛋白质分析具有重要意义。与此同时，代谢组作为蛋白组的下游系统，能够提供更加直观的细胞状态信息。而单细胞层面上的代谢组分析，在研究耐药机制、生理状态监测等方面有不可取代的作用。多组学技术在群体细胞水平上已经取得了一定进展，但在单细胞层面依然存在显著技术瓶颈。

荧光激活细胞分选技术可以对具有特定生物标志物的细胞进行分析与分选，已经广泛应用于临床多个领域。例如针对 EpCAM 和 CD4/CD8 等表面蛋白开发的荧光抗体标记试剂，为疾病研究或细胞亚群分析提供了强有力的支持，证明了基于流式细胞术的方法在生物医学研究中的巨大潜力。但是 FACS 受限于荧光交叉干扰，对受测标志物的覆盖率较低。近年来，提出了多种包括无标记质谱细胞术 CyESI 和完整活细胞电发射电离技术 ILCEI-MS 在内的，基于有机质谱分析的方法来解决覆盖度问题，但因其用完即弃的特性，限制了数据的溯源与多维度分析。

最近瞄准特定蛋白进行标记再通过有机质谱分析的方法，虽然在应用上有所突破，但质量标签相对单一，在面临复杂样品时易产生非特异性吸附的问题，难以满足临床样本的高需求。因此，开发一种能够同时满足高覆盖率、高通量以及多维度信息获取的新方法，对于推进单细胞研究和应用具有重要且紧迫的意义。Wang 课题组提出的 CytoLM 平台，结合了手持激光诱导荧光设备 LIF 与 ICP-MS，实现了单颗粒/单细胞的二维细胞术分析，验证了荧光流式细胞术与质谱分析串联分析的可行性。

在此，我们提出了一种在线串联荧光流式细胞术与有机质谱流式细胞术的平台，可以实现对单细胞蛋白质与代谢生物标志物的一步分析。该系统使用高灵敏度的完整活细胞电发射电离技术，保证了细胞悬液的分散与稳定，作为新一代的质谱流式细胞术，记录单细胞的丰富代谢信息。利用高时间分辨率的手持激光诱导荧光设备在线监测单细胞中感兴趣的蛋白质，同时验证了该平台在检测时的样品利用率。此外我们还开发了一系列针对串联细胞术数据处理的算法，便于进一步开发多维度的单细胞分析技术。该串联细胞术平台具备同时在线监测蛋白质与代谢生物标志物的信息的能力，是一种适用于单细胞体系的多组学分析手段。

关键字 流式细胞术；单细胞分析；质谱

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

双酚 S 暴露通过扰动肠道微生物和代谢稳态 致小鼠肠道炎症及屏障损伤

刘涵、王裕田、维丽斯、唐志*
广东医科大学公共卫生学院，东莞市环境医学重点实验室

目的：本研究旨在探讨双酚 S（Bisphenol S, BPS）暴露对小鼠肠道屏障功能的影响及其潜在机制。作为双酚 A（Bisphenol A, BPA）的替代品，BPS 的安全性近年来引发广泛关注[1]，越来越多的证据表明，BPS 具有与 BPA 类似的内分泌干扰作用，然而其对肠道健康的潜在危害尚未得到充分研究[2]。本实验通过构建 BPS 暴露的小鼠模型，结合微生物 16S rRNA 基因测序以及代谢组学手段，全面评估 BPS 对肠道屏障的损害。

方法：将 6 周龄的 C57BL/6 小鼠随机分为对照组、BPS 低剂量组（0.05 mg/kg/d）及 BPS 高剂量组（5 mg/kg/d），进行为期 28 天的暴露染毒，实验期间记录小鼠的体重及粪便等一般情况。染毒结束后，对结直肠组织进行采样并记录长度；对结肠组织进行 H&E 及 PAS 染色；用 qRT-PCR 检测结肠中细胞因子 TNF-α、IL-6、IL-1β和 IL-10 的基因表达水平及屏障相关紧密链接蛋白 claudin-1、occludin、ZO-1 的基因表达水平；用 16s rRNA 测序技术分析其肠道微生物群；用气相色谱质谱法（GC-MS）检测小鼠结肠组织的非靶向代谢组。

结果：与对照组相比，BPS 高剂量组呈现显著的结直肠长度缩短（P<0.05）； BPS 染毒组表现出隐窝结构破坏，且黏膜下层和肌层伴有损伤及炎性细胞浸润等损伤表型，PAS 染色结果显示 BPS 诱导小鼠糖原表达水平呈显著减少（P<0.05）；小鼠结肠组织中相关炎症因子 TNF-α、IL-6、IL-1β水平显著提高（P<0.05）而抗炎因子 IL-10 水平显著减少（P<0.05），紧密链接蛋白相关基因 claudin-1、occludin、ZO-1 水平显著减少（P<0.05）；对其进行肠道菌群检测发现，BPS 暴露后，没有发现α多样性上的显着变化，但是就β多样性而言，主成分分析（PCA）显示 BPS 染毒组与对照组的肠道微生物组成呈现了显著的不同（P<0.05）；属水平上，对肠道有害菌，如 Helicobacter、Erysipelatoclostridium、Achromobacter 等的丰度显著升高，有益菌，如 Paraprevotella、Akkermansia 等的丰度显著降低；非靶向代谢组学检测发现 BPS 改变的代谢物富集在色氨酸代谢、胆汁酸生物合成、碳水化合物降解途径等途径上，主要改变的化合物包括γ-氨基丁酸、色氨酸等。结论 BPS 暴露会造成小鼠肠道微生物紊乱，并通过影响肠道代谢途径间接损害肠道屏障并引发肠道炎症，这一机制不仅揭示了 BPS 的潜在肠道毒性,也为未来相关研究提供了新的思路。

关键字 双酚 S；BPA 类似物；微生物菌群；代谢稳态；肠道炎症；屏障功能

参考文献

1. Wang H, Gao R, Liang W, Wei S, Zhou Y, Wang Z, Lan L, Chen J, Zeng F. Large-scale biomonitoring of bisphenol analogues and their metabolites in human urine from Guangzhou, China: Implications for health risk assessment. Chemosphere. 2023, 338, 139601.
2. Wang Y, Wang B, Wang Q, Liu Y, Liu X, Wu B, Lu G. Intestinal toxicity and microbial community disorder induced by bisphenol F and bisphenol S in zebrafish. Chemosphere. 2021, 280, 130711.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

基于质谱成像技术用于肝细胞癌小分子药物效应研究

徐秀男、赵慧芳、张瑞平*
山西医科大学

3D 肿瘤细胞球（3D TCS）是一种有前途的体外肿瘤模型，能直接地模拟肿瘤的生理特性，为药物和内源性代谢物的体外研究提供良好的平台。5-氟尿嘧啶（5-FU）作为肝细胞癌化疗的重要药物，但它们在代谢水平的药物效应仍然不明确。目前，分析细胞球代谢物的技术主要包括液相色谱-质谱联用技术（LC-MS）、核磁共振（NMR）等，但存在样品预处理复杂、无法原位分子可视化等方面的问题。基质辅助激光解吸/电离质谱成像（MALDI-MSI）是一种新型的原位、免标记、高通量分子可视化技术，不仅弥补当前原位代谢分析的不足，还可提供更高的分辨率（≤1 μm）。基于此，我们通过 MALDI-MSI 技术分别比较 3D TCS 给药前后在不同微区内的代谢分子的丰度和分布差异，从而深入探究 5-FU 对 3D TCS 代谢的机制影响。MSI 数据显示，药物治疗后 3D TCS 内部微区的脂质分子在空间分布上发生了显著变化，特别是磷脂酸（PA）、磷脂酰胆碱（PC）和鞘磷脂（SM）。进一步的通路分析结果表明，5-FU 主要通过影响脂质代谢中的甘油磷脂代谢来发挥作用。这为深入理解抗肿瘤药物效应机制提供分子信息的参考。

关键字 质谱成像 代谢组 多细胞肿瘤球体

参考文献

1. L.M. Li, Q.C. Zang, X.Z. Li, Y. Zhu, S.J. Wen, J.M. He, R.P. Zhang, Z.P. Abliz, Journal of Pharmaceutical Analysis., 2023, 13, 483-493.
2. J. Chen, P.S. Xie, P.F. Wu, Z.A. Lin, Y. He, Z.W. Cai, Environmental Science & Technology., 2023, 57, 10542-10553.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：报告

HILIC-MOF 的多功能构建及其在糖蛋白深度分析中的应用研究

李大鹏*
四川大学

本研究开发了一种新型亲水性金属有机框架材料（UiO-66-NH2/PVP@Glc），通过酰胺与多羟基的协同作用，显著提升了对糖基的亲和力，从而提高了糖肽的富集效率。基于亲水作用液相色谱（HILIC）策略，该材料在富集低丰度、弱结合糖肽方面展现了优异的选择性和灵敏度。研究表明，UiO-66-NH2/PVP@Glc 在人血清样本中鉴定出 379 种糖肽和 247 种完整糖肽，共识别出 1577 个特异性 N-糖基化位点，检测限低至 0.05 fmol/μL，选择性达到 IgG/BSA 比例为 1:4000。此外，该材料成功应用于未酶解糖蛋白的捕获，展现出与顶端质谱分析的潜在兼容性。通过在 2 型糖尿病（T2D）患者血清中的应用，揭示了与 T2D 相关的糖基化特征差异，尤其是在复杂型 N-糖和中性糖结构上的变化。与现有材料相比，UiO-66-NH2/PVP@Glc 在糖肽富集中的表现更为优异，大幅提升了低丰度糖肽的检测能力，并提供了更为全面的糖蛋白组学分析。这一研究为糖蛋白组学在疾病诊断和治疗中的应用提供了新的技术途径，也为未来开发更多功能化的 HILIC 材料提供了参考。UiO-66-NH2/PVP@Glc 的高效富集性能及广泛适用性，使其成为糖蛋白组学研究中极具前景的工具。

关键字 MOF、糖肽、富集、蛋白组学

参考文献

1. Li, D.* et. al., Amide and Multihydroxyl Complementary Tailored Metal–Organic Framework with Enhanced Glycan Affinity for Efficient Glycoproteomic Analysis. ACS Appl. Mater. Interfaces 2024, 16 (1), 401–410.

分会场：9.质谱多组学和空间成像
交流形式：墙报

利用 MALDI 质谱成像技术靶向肿瘤和脑内铁及铁代谢相关分子

韩康*、石欣彤、赵悄雅、张衡、张桐、李星瑶、常彦忠
河北师范大学

研究目的：铁是维持生命所必需的微量元素之一，它参与多种生理活动[1]。全面直接靶向组织切片中的铁及铁代谢相关分子，将更有利于探索铁代谢紊乱的生理过程。在这项研究中，我们提出了一种基质辅助激光解吸电离质谱成像(MALDI-MSI)方法，用于外周和特定脑区铁的全面定位。

研究方法：我们选择了基于铁螯合剂的反应基质来促进氧和铁的共价电荷标记，解决了 MSI 对金属元素的检出限低的问题。我们考察了三种常用的铁螯合剂:DFO、DFX 和 DFP[2]。其中，DFP 可以直接用作靶向铁成像的基质。DFO 在 343nm 处的紫外吸收最不理想，不能直接用作基质。然而，我们发现利用 DFO 作为衍生试剂，然后寻找最优的电离基质也可以达到成像的目的。此外，我们还研究了烘烤的样品预处理方法，该方法便于生物样品中铁的原位成像。研究了肿瘤组织和脑组织的最佳厚度对空间分辨率的影响。

研究结果：我们发现 Fe2O3 与铁螯合剂在接触时并不发生反应，而是 DFP 基质吸收紫外激光电离后才与铁离子发生反应。在这项研究中，我们利用 MALDI-MSI 不仅绘制了铁在大脑多个核团中的表达水平，而且还证明了随着年龄的增长，大脑中的铁表达水平也在增加。该方法证明，脂质体柠檬酸铁[3]可以有效地绕过血脑屏障将铁输送到大脑。追踪同位素 Fe57 在大脑中的迁移可以帮助我们更好地理解铁的代谢途径。

研究结论：本研究为揭示铁在组织中的空间定位提供了一种简单而优化的方法。未来的研究可以选择更多的金属螯合剂作为其他金属代谢研究的基质，甚至可以选择一种能够同时螯合多种金属元素并进行成像的衍生试剂。相信随着技术的进步，MSI 在小分子尤其是金属元素的原位检测方面将会有更好的表现。

关键字 MALDI-MSI；铁原位成像；铁代谢

参考文献

1. X. Guo, X. Jin, K. Han, S. Kang, S. Tian, X. Lv, et al., Iron promotes neurological function recovery in mice with ischemic stroke through endogenous repair mechanisms, Free Radic Biol Med 182 (2022) 59-72.
2. A. Isidori, F. Loscocco, G. Visani, M. Chiarucci, P. Musto, A.S. Kubasch, et al., Iron Toxicity and Chelation Therapy in Hematopoietic Stem Cell Transplant, Transplant Cell Ther 27 (2021) 371-379.
3. S. Dichtl et al., Dopamine promotes cellular iron accumulation and oxidative stress responses in macrophages. Biochem Pharmacol. 148 (2018), 193-201.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

锂电池中的磁共振：从核磁共振到顺磁共振成像

胡炳文*
华东师范大学

提高电池性能的关键之一是了解其电化学反应和结构变化间的关系。我们联用 EPR 与核磁共振（NMR）对二次电池进行分析。

（1）EPR 成像：铜/铝集流体难以被光或电子穿透；因此大多数表征技术都是从侧面观察锂沉积。我们开发了原位高分辨率 X 波段 EPR 成像，可以以前视图方式观察锂沉积。通过光谱空间成像，还可以区分沉积在集流体表面的块状锂和树枝状锂。[1] 我们还为全固态电池开发了原位 EPR 成像，表明在没有压力的情况下，锂枝晶会生长并渗透到固体电解质中，而压力会抑制锂枝晶的生长。[2] 我们还用 EPR 研究了 KJB 碳涂层的铜箔上的钠沉积，用于无负极钠电池；发现在铜箔上会发生钠的不断聚集；但是在 KJB 涂层上，钠的沉积会逐步自己平整，称为自平整。[3]

（2）EPR 和 NMR：流行的 RIXS（共振非弹性 X 射线散射）方法可能无法区分捕获的 O_2 和 Ru-$O_2^{(\delta-)}$；而我们在 $Li_2Ru_xSn_{1-x}O_3$ 系统中，EPR 被证实能够检测正极中捕获的 O_2，并区分这两个态。研究发现，在 Sn 含量较高的 $Li_2Ru_xSn_{1-x}O_3$ 体系中，分子 O_2 更易产生。我们提出了氧化氧的两种可能的演化路径，即（1）氧电子空穴→→ Ru-$(O_2)^{m-}$ (m > 1) → Ru-$(O_2)^-$或（2）氧电子空穴→→ Sn-$(O_2)^{m-}$ (m > 1) → Sn-$(O_2)^-$ → O_2 [4]。

采用 EPR 和 NMR 研究了 P2-$Na_{0.66}[Li_{0.22}Mn_{0.78}]O_2$，证明了 O_2 和 O_2^{n-}的存在。使用高氟化电解质，O_2 将被抑制，Li 或 Na 离子的损失也将大大抑制。[5] 此外，将 EPR 应用于富锂体系，发现 O3 型材料 $Li_{1.2}Ni_{0.2}Mn_{0.6}O_2$ 和 O2 型材料 $Li_{1.033}Ni_{0.2}Mn_{0.6}O_2$ 在 4.8V 高压下都会产生捕获的 O_2；尽管以前的报告认为只有 Mn 面内迁移的 O2 型材料在高压下是稳定的、不会产生 O_2。[6]

（3）在时间允许的条件，讲述固态电池中 ^{17}O NMR 的核磁共振与固态电池的优化。

关键字 核磁共振；顺磁共振；成像；锂沉积；氧反应

参考文献：

[1] Geng, F.; Yang, Q.; Li, C.; Shen, M.; Chen, Q.; Hu, B., Chemistry of Materials 2021, 33, 8223-8234.
[2] Jiang, Y.; Lu, G.; Kang, S.; Geng, F.; Hu, B., J. Phys. Chem. Lett. 2023, 14 (20), 4682-4687.
[3] Kang, N; Geng, F; Li, Z; Jiang, Y; Shen, M; Lou, X; Hu, B, ACS Energy Lett. 2024, 9, 1633–1638
[4] Wu, X.; Liu, H.; Lou, X.; Geng, F.; Li, J.; Li, C.; Hu, B. J. Phys. Chem. Lett. 2023, 14 (34), 7711-7717.
[5] Zhao, C.; Li, C.; Liu, H.; Qiu, Q.; Geng, F.; Shen, M.; Tong, W.; Li, J.; Hu, B., JACS 2021, 143, 18652.
[6] Liu, H.; Li, C.; Zhao, C.; Tong, W.; Hu, B., Energy Storage Materials 2022, 50, 55-62.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

基于动态交换的核磁共振化学传感方法

赵延川*
中国科学院上海有机化学研究所

实时跟踪和检测动态变化过程对于疾病诊断和生物机制研究至关重要。尽管如此，现有的分析检测技术在不经分离的条件下难以精准获得待测样品的多组分信息。为了克服这一挑战，我们结合了分子识别技术和核磁共振氟谱，开发了一种基于动态交换的新型化学传感检测方法。此方法能将分子识别过程转化为具有特征化学位移的氟谱信号，能精确对应样品中的每个组分，从而在不需分离的情况下实现对复杂样品中多个分析物的同时检测。利用核磁共振氟谱检测信号的简单性和无背景干扰的特点，我们通过建立一个检测数据库来实现分析物的自动识别。此外，由于核磁共振探针的检测是基于动态相互作用，避免了衍生化反应对生物体系可能造成的破坏，使我们能够实时、原位地监测酶介导的生物代谢过程。这些方法不仅简化了核磁共振谱图的分析过程，并且为自动化识别奠定了基础，有望极大地促进生物机制的深入研究及疾病诊断技术的发展。

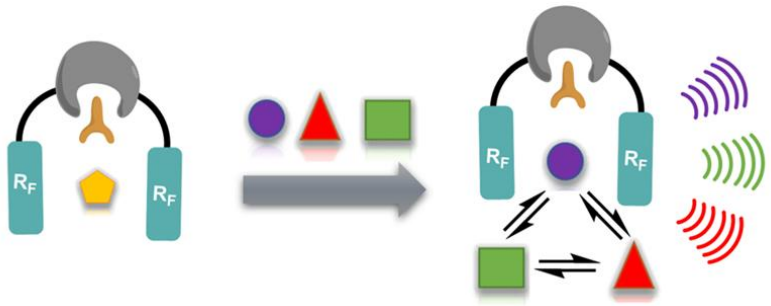


图 1　基于动态交换的核磁共振传感方法

关键字 核磁共振氟谱；化学传感；手性检测；分子识别；生物代谢

参考文献：

[1] Gu, G.; Xu, Z.; Wen, L.; Liang, J.; Wang, C.; Wan, X.; Zhao, Y. Chirality Sensing of N-Heterocycles via ^{19}F NMR. *JACS Au* **2023**, *3*, 1348–1357.
[2] Li, H.; Xu, Z.; Zhang, S.; Jia, Y.; Zhao, Y. Construction of Lewis Pairs for Optimal Enantioresolution via Recognition-Enabled “Chromatographic” ^{19}F NMR Spectroscopy. *Anal. Chem.* **2022**, *94*, 2023–2031.
[3] Xu, Z.; Gu, S.; Li, Y.; Wu, J.; Zhao, Y. Recognition-Enabled Automated Analyte Identification via ^{19}F NMR. *Anal. Chem.* **2022**, *94*, 8285–8292.
[4] Wen, L.; Meng, H.; Gu, S.; Wu, J.; Zhao, Y. Toward Nanomolar Multi-Component Analysis by ^{19}F NMR. *Anal. Chem.* **2022**, *94*, 8024–8032.
[5] Li, Y.; Wen, L.; Meng, H.; Lv, J.; Luo, G.; Zhao, Y. Separation-Free Enantiodifferentiation with Chromatogram-like Output. *Cell Reports Phys. Sci.* **2020**, *1*, 100100.
[6] Xu, Z.; Liu, C.; Zhao, S.; Chen, S.; Zhao, Y. Molecular Sensors for NMR-Based Detection. *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 195–230.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

液体核磁共振研究神经退行性疾病中的 DNA G-四链体结构

郭沛、严珍珍、万里祺、何阿信、韩达*
中国科学院杭州医学研究所

作为生物体内遗传信息的载体，基因组中的 DNA 通常以经典的 B 型结构存在。非经典 DNA 结构则被认为是人类疾病的致病驱动因子和药物靶点。G-四链体（G4）是由富含鸟嘌呤的核苷酸序列形成的一种非经典核酸结构，广泛存在于基因的启动子、重组热点和端粒等区域。G4 结构的形成调控 DNA 复制、转录和重组等重要过程。近年来，DNA G4 结构在神经退行性疾病中的作用受到广泛关注[1,2]。人基因组中的短串联重复序列是以 2-6 个碱基为重复单元首尾串联而成的 DNA 序列，其扩增突变导致 50 多种神经退行性疾病。其中，脊髓小脑共济失调 36 型（SCA36）是由 NOP56 基因 1 号内含子中富含鸟嘌呤的 GGCCTG 六核苷酸重复序列扩增引起。然而，该 DNA 重复序列能否形成 G4 结构及其潜在的生物学功能尚不清楚。液体核磁共振（NMR）技术能够高效地发现 G4 形成序列、允许在接近生理溶液条件下解析核酸结构。在本工作中，我们通过液体核磁共振波谱和圆二色光谱实验发现 GGCCTG 重复序列能够形成 G4 结构，并进一步解析了 NOP56-G4 的溶液核磁结构，揭示其特殊的椅式反平行拓扑结构。基于核酸结构信息，使用靶向 NOP56-G4 的小分子配体和分子生物学实验证明 NOP56 G4 结构的形成能够抑制 DNA 复制和转录过程。该工作为 NOP56 基因内含子中的一种特殊 G4 结构提供了前所未有的高分辨率结构基础，为 SCA36 的潜在致病机制提供了新思路，同时为疾病治疗提供了基于核酸结构的新靶点。

关键字 液体核磁共振波谱；核酸结构；G-四链体结构

参考文献：

[1] D. Varshney, J. Spiegel, K. Zyner, … S. Balasubramanian* *Nat. Rev. Mol. Cell. Biol*. **2020**, 21, 459.
[2] Y. Wang, J. Wang, Z. Yan, … P. Guo*, D. Han* *Nucleic Acids Res.*, **2024**, 52, 2698.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

基于深度学习的人工智能赋能核磁共振

林雁勤*、罗尧、陈忠
厦门大学

核磁共振(NMR)是强大的谱学分析技术，但也存在一些问题，比如多维谱采集时间长、信噪比低等。传统方法在一定程度上可以解决这些问题，但在处理精度或速度方面有局限性。基于深度学习的人工智能技术在这些方面有较大的优势，已广泛应用于 NMR 各个领域，如图 1 所示，包括谱图的非均匀采样重建、去噪、谱峰识别等任务，活体磁共振波谱的频率和相位校正、量化、疾病检测，纳米 NMR 的去噪和重建[1]。

在基于深度学习的人工智能赋能 NMR 方面，本课题组提出了多种谱图处理方法。在非均匀采样重建方面，提出了 EDHRN 方法，实现了 2D 及 3D 谱图的重建[2]。针对目前深度学习非均匀采样重建方法都是基于单域(时域或频域)的缺陷，提出了时频域联合的深度学习网络 JTF-Net[3]，实现了比单域重建更优的重建效果。此外，目前所有的重建算法在全采谱缺失时都无法评估重建谱图的质量，针对这个问题，提出了基于 JTF-Net 的无参考质量评估指标，称为重建质量保证率(REQUIRER) [3]。受非均匀采样重建启发，在实验中引入了指数采样来加速 PSYCHE 纯化学位移谱的获取，并设计了 PS-ResNet [4]对伪二维欠采谱进行重建，实现了快速获取高质量谱图的目标。在去噪方面，提出了可用于 1D 及任意高维谱图的 DN-Unet[5]，该方法采用编解码器结构为基础，在训练中使用了一种 M-to-S 策略(多个噪声输入谱对应于相同的无噪标签谱)，极大提升了网络性能。在纯化学位移谱图的处理上，提出了 AC-ResNet [6]神经网络和 SM-CDMANE 损失函数，增强了网络对弱峰的识别能力，可用于处理低质量的 ZS 纯化学位移谱，显著提高了谱图质量。针对目前纯化学位移谱灵敏度低，提出了基于自旋回波谱获取纯化学位移谱，灵敏度与常规 1D 谱相当甚至更好[7]。此外，还将纯化学位移技术应用于药物研究[8]。

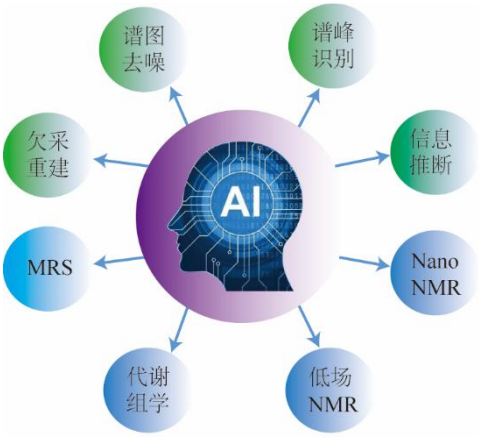


图 1. 深度学习在 NMR 中的应用

关键字 核磁共振，深度学习

参考文献：

[1] Y. Luo, X. Zheng, M. Qiu, Y. Gou, Z. Yang, X. Qu, Z. Chen, and Y. Lin*, *Prog. Nucl. Magn.*

Reson. Spectrosc., in revision.

[2] J. Luo, Q. Zeng, K. Wu, and Y. Lin*, *J. Magn. Reson*., **2020**, 317, 106772. (**Cover Article**)

[3] Y. Luo, W. Chen, Z. Su, X. Shi, J. Luo, X. Qu, Z. Chen, and Y. Lin*, *Nat. Commun.*, in revision.

[4] X. Zheng, Z. Yang, C. Yang, X. Shi, Y. Luo, J. Luo, Q. Zeng, Y. Lin*, and Z. Chen*, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2022**, 13. 2101-2106.

[5] K. Wu, J. Luo, Q. Zeng, X. Dong, J. Chen, C. Zhan, Z. Chen, and Y. Lin*, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 1377-1382.

[6] Z. Yang, X. Zheng, X. Gao, Q. Zeng, C. Yang, J. Luo, C. Zhan, and Y. Lin*, *J. Phys. Chem. Lett*., **2023**, 14, 3397-3402.

[7] Zhengxian Yang, Weigang Cai, Wen Zhu, Xiaoxu Zheng, Xiaoqi Shi, Mengjie Qiu, Zhong Chen, Maili Liu,and Yanqin Lin*, *Chem. Sci.*, revised manuscript submitted

[8] Mengjie Qiu, Xiaoxu Zheng, Z. Chen, and Y. Lin*, *ChemBioChem*, Invited Review, to be submitted.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

基于自研线圈与分析软件的 7T 人脑 3D 磷核磁共振波谱成像

高楠[1]、左真涛[2,3]、邓日荣[1]、薛蓉[2,3]、宋小磊*[1]
1. 清华大学生物医学影像研究中心
2. 中国科学院生物物理研究所脑与认知科学国家重点实验室
3. 中国科学院大学

背景：

磷核磁共振波谱成像(^{31}P-MRSI)是一种无需外源性造影剂的活体成像技术，可以评估细胞能量代谢。它可以反映很多重要的生理过程，包括 PCr/Pi、α-/β-/γ-ATP 和 Mg^{2+}的动力学，以及 pH 和磷脂信息。然而，在过去的几十年里，^{31}P-MRSI 在人体中的应用一直受到其低灵敏度的限制。基于先进 7T 人体磁共振扫描仪，我们开发了用于人脑的 ^{31}P/^{1}H 双核阵列线圈以及高效分析软件，并招募健康志愿者进行人脑 3D ^{31}P-MRSI 成像实验，在 9 分钟的扫描时间内获得了 15 mm 各向同性空间分辨率的含磷代谢物定量分布图。

材料与方法：

本研究共招募了三名健康志愿者进行人体实验。所有实验均经清华大学伦理审查委员会批准，所有参与者均提供书面知情同意书。^{31}P/^{1}H 双核阵列线圈为覆盖全脑而设计：对于 ^{1}H，设计了 8 通道 Tx/Rx 线圈，以提高激发均匀性；对于 ^{31}P，单通道鸟笼线圈用于发射，14 通道表面阵列线圈用于接收。最终的线圈内径为 20 cm×22 cm。

所有数据均在西门子 7 T MAGNETOM Terra 多核磁共振扫描仪上采集，^{31}P-MRSI 采用 FID-CSI 序列，扫描时间为 8 min 59 s，分辨率为 30 mm iso (TR/TE = 350/0.35 ms, FA = 50°, NEX = 3, matrix = 8×8×8)。并使用 MPRAGE 序列采集 T1 加权结构像 (TR/TE/TI = 3710/4.06/1000 ms, FA = 8°, FOV = 240×224×192 mm^3，分辨率为 1 mm iso，扫描时间为 5 min 52 s)。

所有数据均采用自研软件在 MATLAB R2024a 进行时域处理。首先对原始数据进行信号平均以及空间域重建，并进行二倍填零使空间分辨率提高一倍。然后使用 WSVD 算法进行通道合并，接着基于 MRSI 数据的部分可分离性质进行低秩去噪，并采用最优硬阈值算法进行奇异值截断。最后，用 10 Hz 指数函数对 FID 信号进行切趾，并将 PCr 峰移至 0 ppm 完成信号对齐。使用 AMARES 算法拟合预处理数据来量化信号，并通过 PCr 和 Pi 的化学位移计算 pH。

结果：

一个代表性的 ^{31}P-MRSI 轴位层面展示了每个体素的 ^{31}P 谱线，可对其进行逐体素光谱分析、可视化和定量（图 2A）。3D ^{31}P-MRSI 数据集的信噪比分布表明，线圈表现出良好的灵敏度和空间均匀性（图 2C）。单个体素的拟合结果如图 2D-E 所示，量化指标包括 PCr、Pi、α-ATP、β-ATP、γ-ATP、PC、PE、GPC、GPE、NAD 和 UDPG 在内的 11 种代谢物。此外，图 3 分别展示了冠状位、矢状位和轴位的 PCr、α-ATP、β-ATP、γ-ATP 和 pH 分布图。其中，皮层中 ^{31}P 代谢物的含量高于深部核团。

结论：

本研究使用自研线圈和分析软件完成了 7T 人脑 3D ^{31}P-MRSI，在 9 分钟内实现了 15mm 的各向同性分辨率。

致谢：
本研究感谢众志医疗(中国苏州)的朱华彬老师在 7T 双核线圈开发方面的帮助。



Figure 1 Home-built $^{31}P/^{1}H$ daul-tuned array coils for human brain at 7T

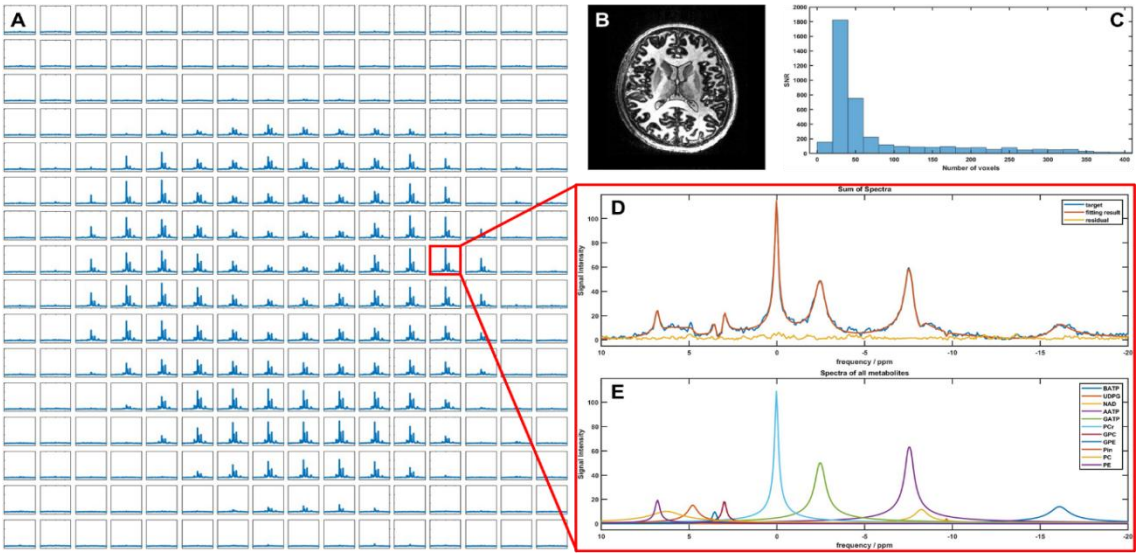


Figure 2 (A) A representative slice of ^{31}P-MRSI. Each cell contains a processed ^{31}P spectrum of a single voxel. (B) The anatomical image of the same slice. (C) SNR histogram of all voxels in 3D ^{31}P-MRSI. 96% of them have SNR over 20. (D) Representative fitted ^{31}P spectrum of a single voxel. The acquired spectrum, summed fitted spectrum, and residual are in blue, orange, and yellow, respectively. (E) Individual fitted spectra of ^{31}P metabolites, including PCr, Pi, α-ATP, β-ATP, γ-ATP, PC, PE, GPC, GPE, NAD, and UDPG.

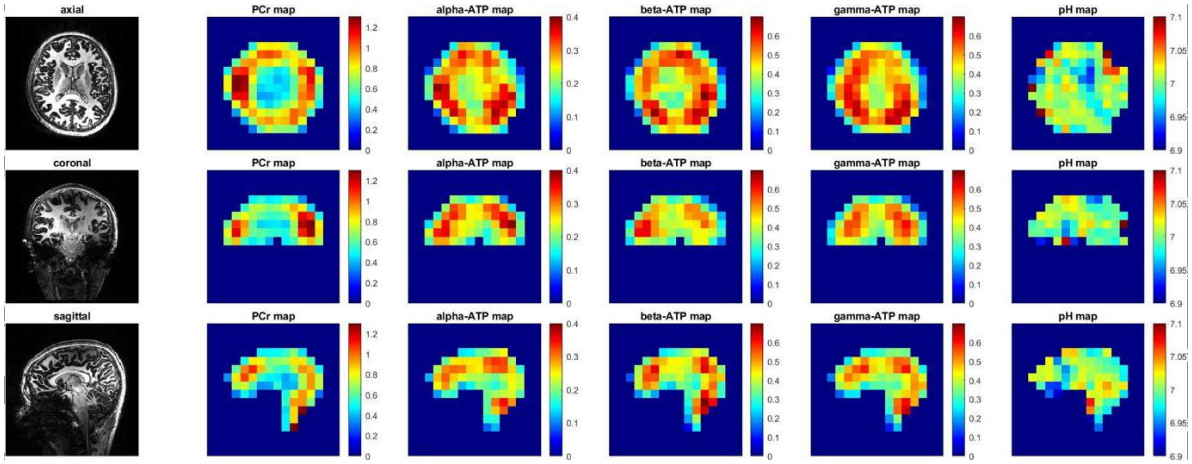


Figure 3 Representative maps of ^{31}P metabolites in axial (1st row), coronal (2nd row), and sagittal (3rd row) planes. Maps of PCr, α-ATP, β-ATP, γ-ATP, and pH are shown (2nd-6th columns). The corresponding anatomical images are shown in the first column.

关键字 磷核磁共振波谱成像，代谢成像，超高场磁共振

参考文献:

[1] X. H. Zhu, M. Lu, W. Chen, *J. Magn. Reson.*, **2018**, 292, 155-170.
[2] C. T. Rodgers, M. D. Robson, *Magn. Reson. Med.*, **2010**, 63(4), 881-891.
[3] Z. P. Liang, *4th IEEE Int. Symp. Biomed. Imaging*, **2007**, 988-991.
[4] M. Gavish, D. L. Donoho, *IEEE Trans. Inf. Theory*, **2014**, 60(8), 5040-5053.
[5] L. Vanhamme, A. van den Boogaart, S. Van Huffel, *J. Magn. Reson.*, **1997**, 129(1), 35-43. 6. J.
[6] Ren, A. D. Sherry, C. R. Malloy, *NMR Biomed.*, **2015**, 28(11), 1455-1462.
[7] R. A. de Graaf, *In Vivo NMR Spectroscopy: Principles and Techniques (3rd ed.)*, **2019**.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

膜环境中人源 Atg3 催化活化机制的 NMR 研究

叶炎生*[1]、吴琼[1]、岳庚辰[1]、周雨璇[1]、刘买利[1]、田舫[2]、李从刚[1]
1. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院
2. 美国宾夕法尼亚州立大学医学院

人源 Atg3（hAtg3，类 E2 酶）催化 LC3（酵母 Atg8）脂化，是自噬过程中关键的一步生化反应。Atg3 曾被鉴定为本质无序蛋白，归因于近 1/3 的序列为本质无序区域；研究发现，Atg3 的催化活性受其 N 端本质无序区域与膜结合后形成的两亲螺旋结构的调控；然而，这些无序区域在晶体结构中为盲区（或者被去除以结晶），而且缺乏膜环境中的研究，Atg3 的催化分子机制一直备受关注但至今仍未解决。

相比于 X-ray 晶体衍射、冷冻电镜等结构解析方法，核磁共振（NMR）技术具有独特优势：包括适用于蛋白质本质无序区域的直接观测分析；可解析分子量较小（<50 kDa）的难以结晶的蛋白质动态结构；近年来原位 NMR 方法的迅速发展，使在活细胞、生物膜等生理环境中获取原子分辨的蛋白质结构与动态作用信息成为可能。前期研究工作中，我们发展了系列 NMR 方法，直接观测到 hAtg3 的 N 端从水溶液中的本质无序到膜环境中形成的两亲螺旋结构的转变，解析了 hAtg3 的首个高分辨三维结构，并鉴定了 hAtg3 与高度弯曲膜的直接作用及其功能调控机制。最近，我们发展了高灵敏的 19F-NMR 方法，直接观测到了 hAtg3 催化活性位的动态构象及其受膜作用的调控。我们的研究工作表明，NMR 方法在生物酶（Atg3）的催化机制研究中具有重要的应用前景。

关键字 蛋白质核磁共振，酶催化，本质无序区域，相互作用

参考文献：

[1] Yansheng Ye, Erin R. Tyndall, Van Bui, Maria C. Bewley, Guifang Wang, Xupeng Hong, Yang Shen, John M. Flanagan, Hong-Gang Wang, Fang Tian. Multifaceted membrane interactions of human Atg3 promote LC3-phosphatidylethanolamine conjugation during autophagy. *Nat. Commun.* **2023**, 14: 5503;
[2] Yansheng Ye, Erin R Tyndall, Van Bui, Zhenyuan Tang, Yan Shen, Xuejun Jiang, John M Flanagan, Hong-Gang Wang, Fang Tian. An N-terminal conserved region in human Atg3 couples membrane curvature sensitivity to conjugase activity during autophagy, *Nat. Commun.* **2021**, 12(1):374.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

基于力-化学偶联的脱氧核酶活性调节研究

余心怡[1,2]、胡锐*[1,2]、杨运煌[1,2]、刘买利[1,2]
1. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院
2. 华中科技大学武汉光电国家研究中心

脱氧核酶（DNAzyme）是通过体外筛选过程挑选出的具有催化活性的 DNA 分子，能够精确调控其活性对其在生物技术和治疗方面的应用来说至关重要。然而，目前大多数调节策略都需要事先了解 DNAzyme 的结构和催化机制。在此我们描述了一种可推广的策略，使用具有一定刚性的双链 DNA 分子钳[1,2]来调节 DNAzyme 的催化活性。通过逐渐调整连接在 DNAzyme 分子两端的 DNA 钳施加的机械力，我们成功将 10-23 DNAzyme 的活性降低至其原始水平的一半以下，并展示了在一定可控范围内的逐步活性调节。我们成功实现了循环可逆地调节 DNAzyme 活性，通过 DNA 链置换反应移除抑制链后，DNAzyme 的催化活性可以得到完全恢复。通过对氟取代样品的核磁共振氟谱（19F-NMR）实验[3]，初步研究了 DNA 分子钳对 DNAzyme 结构的影响。19F-NMR 实验及分析结果表明，在 DNAzyme 上添加 DNA 分子钳后，催化环处会发生结构变化，并有更复杂的化学环境形成。综上所述，由于不依赖关于 DNAzyme 结构或催化机制的先验知识，本研究描述的策略适用于不同的 DNAzyme。这一方案可以迅速将现有 DNAzyme 转化为具有调节功能的构件，具有广泛的应用潜力，包括开发适应不同检测区间的生物传感器、可编程纳米器件、复杂网络、精确控制的药物递送系统和用于靶向基因表达调控的先进工具。

关键字 脱氧核酶、活性、力-化学偶联、核磁共振波谱、变构

参考文献：

[1] C.-Y. Tseng, G. Zocchi, *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, 135, 11879-11886.
[2] H. Qu, M. Zheng, Q. Ma, L. Wang, Y. Mao, M. Eisenstein, H. Tom Soh, L. Zheng, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62, e202214045.
[3] J. Borggräfe, J. Victor, H. Rosenbach, A. Viegas, C. G. W. Gertzen, C. Wuebben, H. Kovacs, M. Gopalswamy, D. Riesner, G. Steger, O. Schiemann, H. Gohlke, I. Span, M. Etzkorn, *Nature*, **2022**, 601, 144–149.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

脑胶质瘤葡萄糖代谢的多弛豫参数定量分析

江谋、张磊、周欣、陈世桢*
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院，华中科技大学

目的：

葡萄糖代谢是大脑功能的核心，正常的葡萄糖代谢是维持正常大脑活动的基础。定量弛豫参数能对葡萄糖的代谢进行监测，但是不同的弛豫参数对不同的生理参数敏感。因此对脑葡萄糖代谢使用多弛豫参数定量测量进行全面分析是有必要的。

方法：

本研究开发了一种基于稳态进动快速成像的 MRF 序列，能在 9.4 T 动物磁共振扫描仪上实现 T_1，T_2 和 $T_{1\rho}$的同时测量(图 1)。MRI 实验中，首先对脑胶质瘤小鼠进行 16 分钟连续 MRF 扫描以建立基线值。随后以 150 μL/min 的速率静脉注射 50% w/v 葡萄糖溶液 150 μL，同时不间断进行 MRF 扫描。最后，再进行持续 100 分钟的 MRF 扫描(图 2)。



图 1：MRF 脉冲序列的示意图，实现 T_1，T_2 和 $T_{1\rho}$同时定量测量。

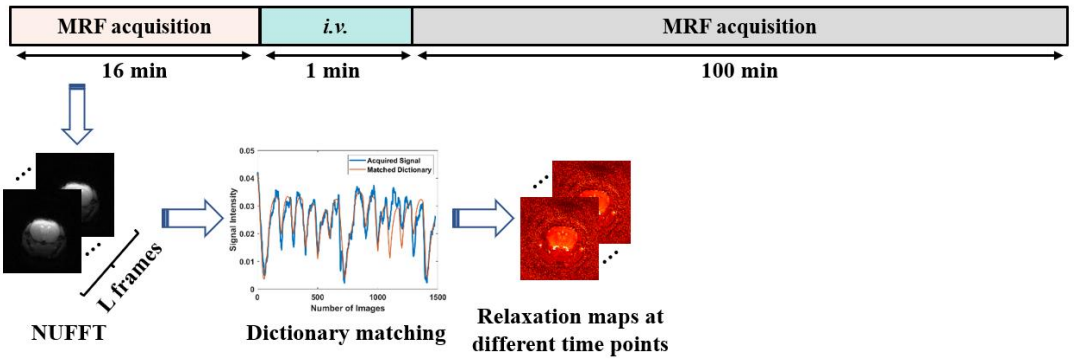


图 2: MRF 实验流程。

结果：

在正常脑组织中，平均ΔR_1，ΔR_2 和$\Delta R_{1\rho}$值呈现先升高后逐渐下降的趋势，反映了脑内葡萄糖代谢的典型动态变化。相反，胶质瘤组织平均ΔR_1，ΔR_2 和$\Delta R_{1\rho}$值显示出与对侧正常脑组织(丘脑)的明显差异，表明肿瘤区域的葡萄糖代谢改变（图 3）。

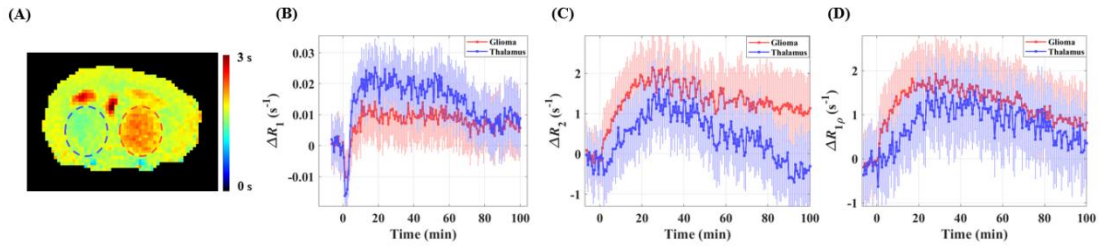


图 3：荷瘤小鼠脑内ΔR_1，ΔR_2和$\Delta R_{1\rho}$监测曲线。(A):小鼠的脑组织对比图像。(B-D):胶质瘤组织与对侧正常脑组织(丘脑)的ΔR_1，ΔR_2和$\Delta R_{1\rho}$动态监测曲线。

讨论：

ΔR_1的峰值比ΔR_2和$\Delta R_{1\rho}$更快。这种快速升高可能是由于给药后葡萄糖在脑内蓄积，导致血液粘度增加和组织扩散率降低，从而升高ΔR_1。这表明ΔR_1对脑血管中葡萄糖水平的变化更敏感。ΔR_2和$\Delta R_{1\rho}$曲线显示，不同的脑区表现出不同的葡萄糖摄取和清除率，肿瘤组织表现出更高的葡萄糖摄取和清除率。由于受白质微结构各向异性影响的偶极相互作用可能会影响 R_2测量却基本不影响 $R_{1\rho}$。表明$\Delta R_{1\rho}$在检测脑组织葡萄糖浓度变化方面具有更高的精度。

关键字 磁共振指纹成像，胶质瘤，葡萄糖代谢

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

锰基纳米探针用于增强肿瘤磁共振造影

吴轩、张磊、周欣、陈世桢*
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院，华中科技大学

磁共振成像技术（Magnetic Resonance Imaging ，MRI）是对磁场中人体组织的氢原子核施加射频脉冲，使其发生能级跃迁并产生磁共振信号，通过对这些信号的接收、处理和重建，实现目标部位的 MRI。与传统的 PET 和 CT 成像技术相比，MRI 具有无电离辐射，良好软组织对比度的优点，可进行多参数成像，为肿瘤的诊断提供更丰富的信息。临床上使用的 MRI 造影剂，均为 Gd 基小分子造影剂，存在体内循环时间短、无靶向性等缺点。相较于小分子，纳米材料作为 MRI 造影剂的优势显著，其具有高弛豫率，低毒性、易于表面修饰、体内循环时间长等优势，可实现靶向成像，精准定位病变部位，提高诊断的准确性。而 Gd 离子存在一定的金属毒性，研究发现，部分内源性的金属元素也具有磁共振性能，且它们具有更好的生物安全性，因此，一些人体内源性顺磁性金属并具有较好生物安全性的造影剂逐渐被开发，如基于 Fe、Mn 等元素设计的 MRI 造影剂。基于上述分析，我们合成了锰基聚多巴胺纳米探针，用于肿瘤的 ^{1}H MRI。

在本研究中，我们在聚多巴胺合成过程中引入 Mn 离子参与配位，获得 Mn-PDA，进一步负载葡萄糖氧化酶（GOx）并修饰透明质酸（HA），GOx 可以消耗肿瘤细胞的葡萄糖，“切断”肿瘤的能量供应，HA 可以靶向肿瘤细胞膜上的 CD44 蛋白，实现肿瘤细胞主动靶向。透射电镜结果显示，MDG@HA 纳米探针呈球形，粒径在 180 nm 左右，相比没有修饰 HA 的纳米探针，其表面有一层明显的半透明外壳。（图 1A）。对 Mn-PDA 纳米探针进行弛豫测试，结果显示，纳米探针纵向弛豫率 r_1 为 8.05 $mM^{-1}\cdot s^{-1}$，约是钆喷酸葡胺的 2.2 倍（图 1B）。基于该纳米探针良好的 ^{1}H MRI 效果，进一步将其应用于肿瘤成像。结果显示，纳米探针经尾静脉注射后，肿瘤部位的磁共振信号强度随着时间的延长而逐渐增加，最终在 12 h 达到峰值（图 1C）。综上所示，我们构建了一种 Mn 基的聚多巴胺纳米探针，具有良好的 MRI 性能和生物安全性，显著增强活体肿瘤 MRI 造影效果，为良好造影效果的 MRI 造影剂的设计提供了新策略。

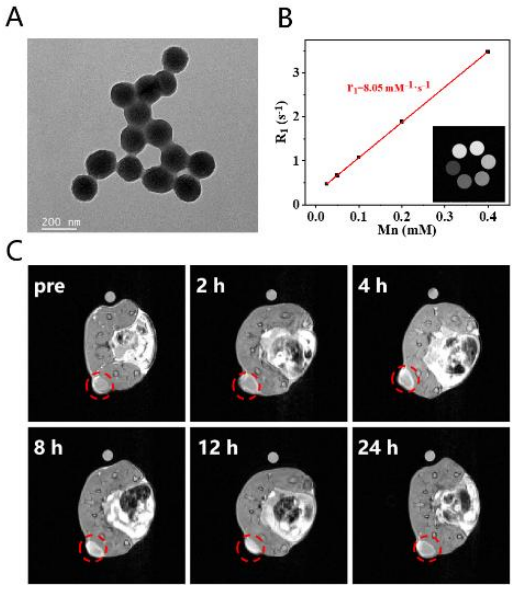


图 1 (A) MDG@HA 的透射电镜图 (B) MDG@HA 的纵向弛豫率 (C) 注射 MDG@HA 后，不同时间点的活体 1H T1-weighted MR 图像

关键字 磁共振成像，造影剂，肿瘤

参考文献:

[1] Balachandran Y. L., Wang W., Yang H., et al. ACS Nano 2022, 16 (4), 5647-5659.
[2] Zhang S, Zhang Y, Feng Y, et al. Advanced Materials, 2022, 34(50): 2206851

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

19F-MRS/MRI 用于增强核酸递送的含氟脂质纳米粒的活体内筛选

解铠铴[1,2]、陈代钦[1,2]、陈世桢[1,2]、周欣*[1,2]
1. 中国科学院精密科学与技术测量创新研究院
2. 华中科技大学

在活体内实时监测脂质纳米粒（LNPs）和核酸之间的相互作用对于优化和筛选 LNPs 具有重要指导意义。研究表明，含氟脂质可以显著提高包括核酸在内的多种生物大分子的递送效率。19F 核磁共振波谱（19F-MRS）因具有无电离辐射、无组织穿透深度限制、无背景信号干扰以及非侵入性等优势，成为研究含氟药物在体内行为的强大工具。通过将含氟脂质引入 LNP 中，19F-MRS 可用于在活体水平研究 LNP 与核酸之间的相互作用，从而实现对 LNP 转染效率的实时预测。

在本研究中，我们设计了一系列氟化脂质用于制备含氟 LNP（FLNP）。通过测试不同的 FLNP，结果表明它们显著提高了核酸递送效率。我们进一步探讨了氟化脂质在促进基因递送过程中的作用机制，提出 FLNP 不仅能改善细胞摄取和溶酶体逃逸，还可以减少细胞内吞过程中核酸的泄漏。此外，我们发现 FLNP 在转染细胞后，19F-MRS 信号的恢复与其转染效率呈正相关。基于此，我们开发了一种非侵入性的实时 19F-MRS/MRI 的筛选策略，有望为具有高效转染效率的 FLNP 的开发提供重要指导。

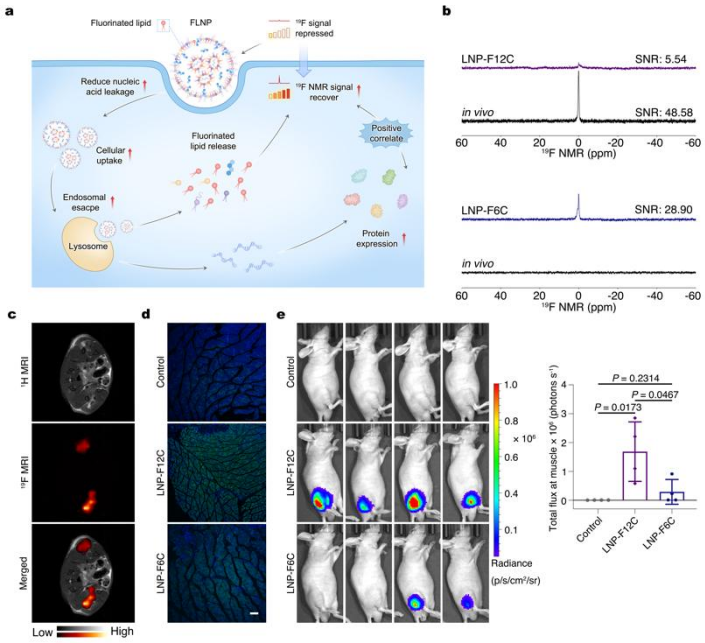


图 1 (a)活体内验证 19F-MRS/MRI 信号恢复用于预测 FLNP 核酸转染效率的示意图；(b)小鼠肌肉注射不同 FLNP 0 h 和 48 h 后的 19F MRS；(c)肌肉注射 LNP-F12C 48 h 的小鼠 1H T1-加权/19F 双核 MRI；小鼠肌肉注射不同 FLNP 48 h 后 EGFP 蛋白(d)以及 Luciferase 蛋白(e)的表达情况。

关键字 19F-MRS/MRI；脂质纳米粒；载体筛选

参考文献：

1. J. Lv, H. Wang, G. Y. Rong, et al., *Accounts of Chemical Research*, **2022,** 55, 722-733.
2. D. G. Reid, P. S. Murphy, *Drug Discovery Today*, **2008,** 13, 473-80.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

炎症靶向的 19F MRI 脂质纳米探针及高灵敏成像方法

公腾[1]、黄平升[2]、马乐乐[1]、宋小磊*[1]
1. 清华大学生物医学工程学院，生物医学影像研究中心，北京 100084
2. 中国医学科学院，北京协和医学院生物医学工程研究所，天津 300192

靶向炎症的活体分子影像有助于理解疾病机制、制定治疗方案并进行预后评估。氟-19（19F）磁共振成像（MRI）具有背景干扰小、相对其他杂核灵敏度高、探针稳定性好等优势，联合高分辨氢核磁图可以实现类似于 PET 的高特异性“热点”成像。此外，19F 的谱峰范围宽，可实现多色成像。然而，传统全氟化碳纳米乳难以从体内代谢排出，具有安全隐患[1]。因此亟需开发高生物相容性和高清除率的 19F MRI 探针。

本研究设计了一种亲水性氟化脂质（C10-F），并通过微流控技术将其与磷脂、胆固醇以及聚乙二醇化磷脂共同构建出一种氟化脂质纳米颗粒（C10-F@LNP）。该探针具有较好的水溶性和生物相容性。而且，由于 LNP 可被单核/巨噬细胞摄取并趋化到炎症部位[2]，利用 1H/19F MRI 有望实现炎症“热点”成像。体外表征显示（图 1 a,b），C10-F@LNP 呈球形，平均水合粒径为 167.1 nm，在水中具有良好的分散性和稳定性（PdI = 0.015）。在 9.4T Bruker 动物 MRI 系统中测试结果表明探针在-64.86 ppm 处有一单峰，使用 72 mm 氢氟双核线圈搭配超材料增强器（“清超卓影”订制）在 12 分 16 秒内获得信噪比约 39 的 19F MR 图像（图 1 c,d）。超材料增强器的使用使 19F 的 SNR 相较于 Bruker 购买的 40mm 线圈提升了近 10 倍（图 2）[3]。总之，本研究成功构建了一种可用于 19F MRI 的脂质纳米探针，结合超材料增强器可实现高灵敏 19F MRI，为有效监测炎症过程提供了新的手段。未来研究将集中在探针的长期安全性评估及在不同疾病模型中的应用潜力。

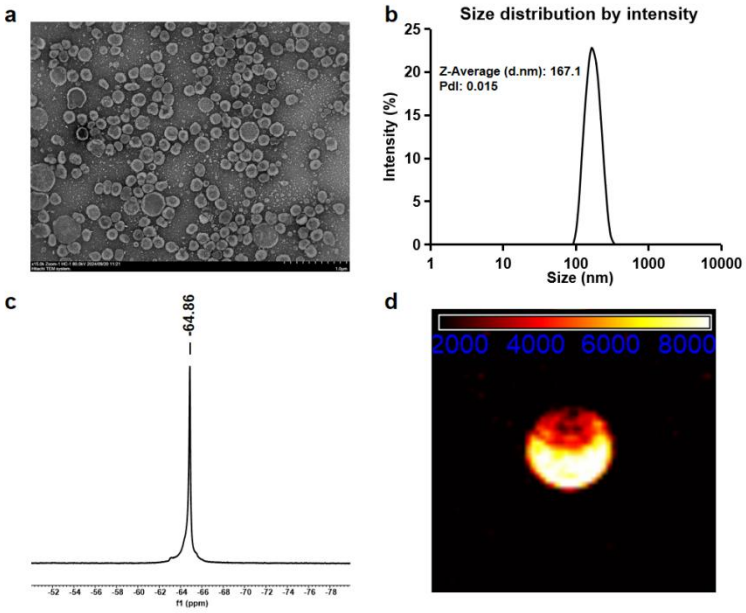


图1 C10-F@LNP的（a）投射电镜结果图（b）粒径分布图（c）^{19}F NMR和（d）^{19}F MRI

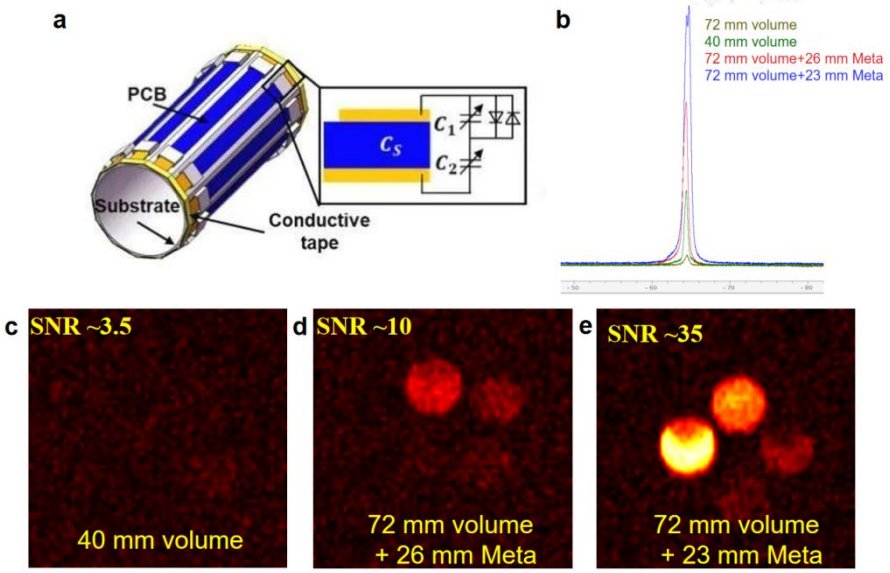


图 2 （a）超材料增强器组成[3]；不同线圈及增强器采集的（b）^{19}F NMR 及（c-d）^{19}F MRI

关键字 19F MRI，炎症，脂质纳米颗粒

参考文献：

[1] Tirotta I, Dichiarante V, Pigliacelli C, et al. Chemical Reviews, 2015, 115, (2), 1106-29.

[2] Deprez J, Verbeke R, Meulewaeter S, et al. Nature Nanotechnology, 2023, 18, (11), 1341-1350.

[3] Chi Z, Yi Y, Wang Y, et al. Advanced Materials, 2021,33, (40).

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

毒蕈碱 M1 受体第三胞内环的动态结构与相互作用

杨菊*
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

毒蕈型乙酰胆碱 M1 受体，作为一种 A 类 G 蛋白偶联受体（GPCR），是中枢及外周神经系统疾病的重要药物靶点。在 M1 受体的七跨膜结构中，连接跨膜螺旋 TM5 和 TM6 的第三个胞内环（intracellular loop 3, ICL3）是一段包含约 150 个氨基酸残基的固有无序区（intrinsically disordered region, IDR）。尽管已有研究通过冷冻电镜方法解析了 M1 受体与 G 蛋白形成的激活态复合物结构[2]，但受限于 ICL3 的动态特性及当前技术手段，关于其构象及蛋白互作的信息依然匮乏。基于其序列的高度差异性和结构的动态性，对受体 ICL3 进行结构与功能研究是理解 GPCR 功能多样性的关键[1]。在本研究中，我们以 M1 受体的 ICL3（M1_ICL3）为研究对象，采用液体核磁共振和化学交联质谱结合的方法，对独立的和全长受体中的 M1_ICL3 进行动态结构和相互作用探究。

一方面，我们使用原核表达系统实现对 M1_ICL3 以及与 M1 受体特异性偶联的 Gq 蛋白α亚基的表达、纯化和同位素标记。通过传统三共振核磁实验，完成了 M1_ICL3 主链信号的归属。通过核磁滴定、^{19}F NMR 和顺磁弛豫增强（PRE）等方法，初步表征了 M1_ICL3 的溶液构象特征及其与 Gq 蛋白之间的弱相互作用。另一方面，我们使用昆虫细胞系统完成全长 M1 受体和 Gαβγ三聚体的表达、纯化和体外复合体组装，通过化学交联质谱进行分子间相互作用的分析。结果表明，受体激活后，M1_ICL3 与 G 蛋白的三个亚基均发生了广泛的相互作用，并且其动态构象也发生了特定的变化。本研究将推进对受体 ICL3 动态结构与功能关系的理解，为全面理解 GPCR 信号通路多样性提供新视角。

关键字 核磁共振、化学交联质谱、G 蛋白偶联受体、固有无序蛋白

参考文献：

[1] R. Maggio, I. Fasciani, F. Petragnano, M.F. Coppolino, M. Scarsell, M. Rossi, *Biomolecules*., **2023**,13(10):1431.

[2] S. Maeda, Q.H. Qu, M.J. Robertson, G. Skiniotis, B.K. Kobilka, Science., **2019**, 364(6440).

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

分子内二酪氨酸交联影响细胞色素 c 的促凋亡能力及机制研究

占建华、张广庆、曾丹云、张许*、刘买利
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

细胞色素 c（Cytochrome c, cyt c）是一种重要的多功能蛋白质，不仅在呼吸链中传递电子，而且在细胞凋亡中发挥着重要作用。在线粒体中，cyt c 可传递电子，当 cyt c 释放到细胞质时，诱导细胞凋亡。研究发现，活性氧（Reactive oxygen species, ROS）可能参与调节 cyt c 的功能。由于 cyt c 是金属蛋白，在 ROS 环境中更易发生氧化修饰，进而导致其构象和功能发生改变。研究发现，cyt c 上不同的氧化修饰。但其分子机制尚未可知。

我们首次发现了人 cyt c 在氧化的时候会产生分子内二酪氨酸交联（dityrosine cross-linking），并且会影响结构与功能。人 cyt c 中有 5 个 Y，空间分布不一样，这 5 个 Y 两两之间产生 diY 的几率可能不一样，引发的结构和功能变化也可能存在差异。因此需要对 ROS 引起 cyt c 形成分子内 diY 的位点进行鉴定。但是目前仍缺少方法可实现活细胞内 diY 的直接检测，特别是原子分辨的检测。

在本研究中，我们在前期发现的新现象--cyt c 可形成分子内 diY 的基础上，发展了基于 NMR 的细胞内 diY 的检测技术，^{19}F 核的自旋为 1/2，天然丰度 100%，旋磁比与 ^{1}H 接近，灵敏度高，化学位移对局部环境敏感，同样的化学位移分散性好，另外，绝大部分生物体内都不含 ^{19}F，因而无背景干扰。我们首先对 ^{19}F 标记的 Y 能否用 NMR 检测进行了测试，结果表明研究思路可行。小分子的 3-氟酪氨酸（3FY）进行氧化处理后，在 ^{19}F NMR 中可以看到有新的信号出现，表明是一部分 3FY 在氧化处理后生成的 diY 的信号。随后通过 3FY 标记 cyt c 上的 Y，进行 ^{19}F 原子的 NMR 检测。发现在进行氧化处理后，^{19}F 谱图上出现新的信号，并且氧化程度越高，信号越强，后归属确定为 diY 的信号。因此，该技术为细胞内 diY 的研究提供有力工具。后续我们也将进一步将标记的 cyt c 导入细胞中进行检测，解析分子内 diY 调控 cty c 功能变化的分子机制。

关键字 细胞色素 c，二酪氨酸交联，结构，功能，NMR

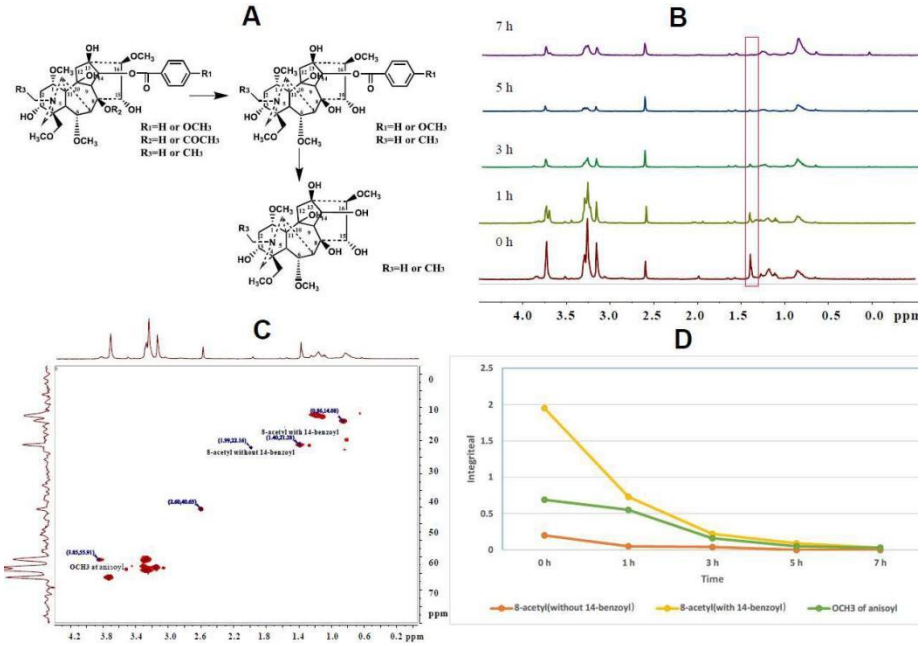
分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

乌头属药材炮制解毒过程的 MAXY-NMR 研究

江海鹏*[1]、张许[2]
1. 武汉工程大学化工与制药学院
2. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

乌头属药材在传统中医药治疗中具有重要的地位，该类药材具有毒性，需要经过炮制才可药用。然而，炮制过程具有一定的经验性，至今仍有服用未炮制完全的乌头属药材中毒的案例。

最高量子数相关/过滤谱(maximum-quantum correlation/filtering NMR spectroscopy, MAXY)在分析复杂天然产物有独特的优势，它能根据 CHn 自旋系统中碳原子上直接相连的氢原子的个数，生成仅含有 CH_3,CH_2,CH 基团中氢信号的亚谱，从而简化复杂混合物中的信号[1-2]。生乌头的毒性主要由 8-乙酰基、14-苯甲酰基的双酯型生物碱产生[3] (图 1-A)，由于母环上 14 位苯甲酰基的屏蔽作用，8 位乙酰基(8-COCH_3)的信号出现在高场 1.40 ppm 处；当母环上不存在 14 位苯甲酰基时，8-COCH_3 出现在 1.99 ppm 处，因此，MAXY-^{1}H NMR 谱中 δ_H 1.40 的信号强度可用于反映乌头属药材是否炮制完全的指标(图 1-B)。对 MAXY-HSQC NMR 关键信号进行强度分析，炮制过程中，以(δ_H 1.40, δ_C 21.28) 作为双酯型生物碱 8-COCH_3 的监测信号，(δ_H 1.99, δ_C 22.16)作为单酯型 8-COCH_3 的监测信号，表明乙酰基在炮制过程中快速水解；以茴香酰基上的甲氧基(δ_H 3.85, δ_C 55.91)作为苯甲酰型单酯生物碱指标，表明 14-Benzoyl 水解速度明显低于 8-COCH_3。该研究表明，MAXY-NMR 可用于乌头属药材炮制过程的毒性监控，保障其药用安全性。



关键字 乌头，MAXY-NMR，乙酰基

参考文献：

[1] M. Liu, R.D. Farrant, J.K. Nicholson, J.C. Lindon, *Journal of Magnetic Resonance*,**1995**, 112, 208-219.

[2] M. Liu, R.D. Farrant, J.K. Nicholson, J.C. Lindon, *Journal of Magnetic Resonance*, **1995**, 106, 270-278.

[3] J. Singhuber, M. Zhu, S. Prinz, B. Kopp, *Journal of Ethnopharmacology*, **2009**, 126, 18-30.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

基于中草药资源和核磁共振技术的药物筛选

黄滔、张许*、刘买利
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

天然产物结构类型丰富多样、生物活性广泛，是新药研发中苗头化合物或先导化合物的重要来源。在过去近 40 年批准上市的 1393 个小分子药物中，超过一半是天然产物、天然产物衍生物或以天然产物结构为基础的合成药物。我国中草药资源丰富，拥有数千年的应用历史，并积累了半个多世纪天然药物化学研究成果，因此，从中草药中筛选发现苗头化合物或先导化合物是一条命中率较高的药物发现途径。目前，中草药中活性成分的研究主要采用两种策略：一是传统的活性追踪策略，通过交替进行分离和活性检测，逐步缩小活性成分的范围，但该方法在分离纯化阶段的目标性不强、实验过程繁琐、周期长、效率底，并且分离过程中容易导致活性成分丢失。另一种是近些年来发展较快的配体垂钓策略，利用配体与靶蛋白的亲和力将活性成分从复杂的中草药提取物中分离。该方法有效的提高了活性成分发现效率，但是存在需要固定蛋白、只能发现强结合配体、结构鉴定需要标准品等缺点。针对这些问题，若能直接从中草药提取物中筛选活性成分，并鉴定其化学结构，建立筛选、鉴别一体化的方法，将显著提升活性成分的发现效率。

核磁共振（NMR）具有无需样品分离，便可检测复杂混合物分子结构以及分子间相互作用等特点，具有集结构鉴定和活性成分筛选于一身的特点，是实现中草药活性成分筛选和结构鉴定一体化极具发展潜力的工具。针对中草药活性成分发现的难题，我们利用活性成分与靶标蛋白结合后弛豫性质的变化，发展了高灵敏的横向弛豫编辑检测新方法，直接利用复杂中草药提取物进行筛选，快速发现作用于靶标蛋白的活性成分信号。然后利用中草药提取物二维谱提供的碳氢基团化学位移和连接关系数据，获得活性成分的结构片段信息以及化学位移数据。此外我们还构建了大型中草药化学成分 NMR 数据库，通过活性成分的结构片段和碳氢基团的化学位移数据进行检索和匹配，快速实现活性成分的结构鉴别。本方法避免了繁琐的分离纯化过程，直接从中草药提取物中筛选并鉴别活性成分，集成了活性成分筛选和结构鉴定，具有简单、快速的优点，能从中草药提取物中有效发现作用于药物靶标的活性成分，展现出在新药研发中的广阔应用前景。

关键字 核磁共振，药物筛选，中草药

参考文献：

T. Huang, et al. *Anal. Chem.*, **2024**, DOI: 10.1021/acs.analchem.4c02255

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

利用神经网络同时获取血液样本中的小分子和大分子谱图

肖雄杰、张许、蒋滨、刘买利*
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

代谢组学在理解生物体的代谢过程方面发挥着至关重要的作用，1H NMR 是代谢组学使用的主要分析技术之一。血液作为与全身代谢相关的主要体液，是基于 NMR 的代谢组学研究各种生理状态的理想选择。然而，含有白蛋白、脂类、脂蛋白亚类和其他大分子的血液样本会产生广泛的 NMR 信号，与小分子信号重叠并使之复杂化，从而妨碍分子鉴定和定量。为了克服这一挑战，可根据不同分子的扩散和弛豫特性选择性地编辑其信号。一维扩散编辑实验用于研究血液中的脂蛋白，而一维弛豫编辑实验则用于分析小分子代谢物。

在血液样本的代谢组学研究领域，用于大规模队列研究的核磁共振实验通常涉及额外的技术，如 1D CPMG 实验收集小分子光谱，以及 1D 扩散编辑实验收集大分子光谱，此外还有标准的 1D NOESY-presat 实验。因此，开发一种能同时捕获小分子和大分子代谢物信号的方法对基于 NMR 的血液代谢组学研究具有重要意义。

我们引入谱编辑神经网络模型，它可以根据谱峰的半高线宽来区分小分子和大分子信号，并从血液 1H NOESY-presat 谱中同时生成小分子和大分子的谱，以缩短基于 NMR 的代谢组学研究的实验时间。在分析核磁共振谱时，重要的是要解决小分子峰重叠造成的宽包络。为了考虑这些因素，本研究相应地设计了神经网络架构和损失函数。

如图 1 所示，模型有效地区分了 NOESY-presat 光谱中的小分子和大分子信号。在δ0.7-1.3 区域，它能准确区分来自乳酸和脂链的高强度信号，同时检测到来自游离氨基酸的低强度信号。在δ3.0-4.5 区域，该模型在复杂的重叠区域内准确地分离出了几种小分子代谢物。此外，在δ6.5-8.5 区域，该模型在低信噪比、低强度区域内有效地识别了来自芳香环和白蛋白的信号。

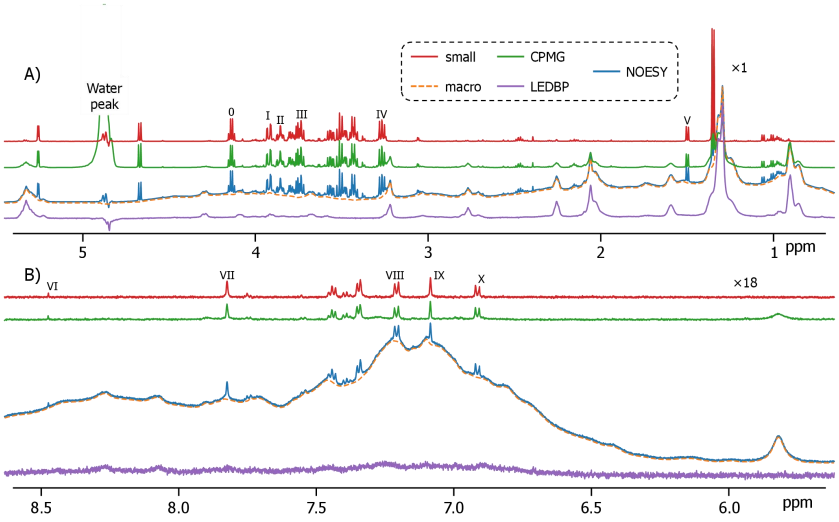


图 1.模型处理 600 MHz NMR 谱仪上获取的血浆样品的 NOESY-presat 谱图。该模型有效地分离了半高线宽较大的峰，从而提取出与 CPMG-presat 实验类似的小分子谱。

关键字 神经网络，血液样本，小分子和大分子谱图

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：墙报

从核磁共振视角研究轮烷分子的动力学行为

李昱、罗曼、周睿、陈世桢、江中兴*
中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

轮烷类机械互锁分子因其独特的分子结构与运动特性，已成为超分子化学领域的热门研究对象，并广泛应用于药物递送、分子传感和材料科学等多个领域[1]。深入解析轮烷的分子结构和动力学行为，揭示其分子组装的机理和规律，不仅有助于推动轮烷的结构优化，还能为其应用拓展提供理论指导。为此，我们开发了一种含氟冠醚及其超分子组装体[2]轮烷和[3]轮烷，通过结合传统的氢-1 核磁共振（^{1}H NMR）技术与无背景干扰的氟-19 核磁共振/磁共振成像（^{19}F NMR/MRI）技术[2]，既可以获取轮烷的分子结构、构象信息，也可以通过特异性测定氟原子的弛豫率、旋转相关时间和成像信息等重要参数，从而反映轮烷分子的动力学行为。

我们以含有 9 个化学等价 ^{19}F 的全氟叔丁基作为敏感的 ^{19}F NMR/MRI 报告基团，设计并合成了一系列具有不同位阻的氟化轮烷（图 1）。通过一维、二维和固体 NMR，以及分子动力学模拟等方法，全面研究了这些轮烷的稳定构象、^{1}H/^{19}F 弛豫率和旋转相关时间，揭示了轮烷中机械键、氢键、位阻效应和π-π作用对轮烷稳定构象和分子运动的影响，最后，通过 ^{19}F MRI 技术，灵敏地将机械键和空间位阻对分子运动的影响以图像的形式呈现，为轮烷分子的全面解析提供了新视角。

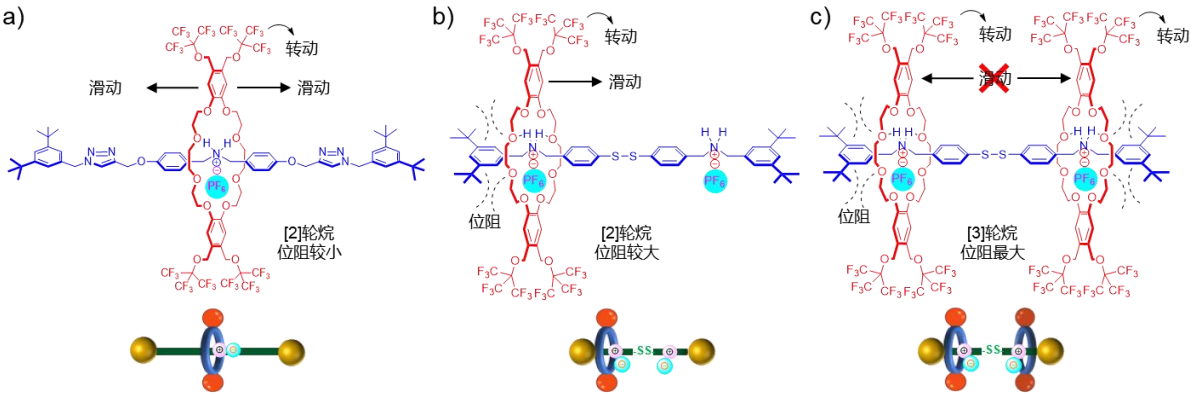


图 1 系列氟化轮烷的结构示意图。

关键字 核磁共振；氟-19 核磁共振；轮烷；动力学

参考文献：

[1] K. Zhu, G. Baggi, S.J. Loeb, *Nature Chem.*, **2018**, 10, 625-630.
[2] J. Ruiz-Cabello, B.P. Barnett, P.A. Bottomley, J.W.M. Bulte, *NMR Biomed.*, **2011**, *24*, 114-129.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

低场磁共振下的快速自旋回波成像

朱载民、宗芳荣*
北京邮电大学

快速自旋回波（fast spin echo, FSE）成像是一种快速磁共振成像（magnetic resonance imaging, MRI）技术[1]。它通过在 90°射频（radio frequency, RF）脉冲后使用多个 180°RF 脉冲来采集多行 k 空间信号，从而显著缩短成像时间。临床上，FSE 已广泛应用于脑部、脊柱及软组织的成像。近年来，低场、可移动 MRI 设备的研究成为一大热点。相比常规 MRI 设备，此类设备具有横向弛豫时间长、信噪比低、易累积相位误差等特点。目前，在低场、可移动 MRI 设备上实现快速且精确的 FSE 成像仍然面临重大挑战。

本研究的实验在 0.33 T MRI 扫描仪（ilumr, 北京青檬艾柯科技有限公司）上进行,成像区域直径 10 mm，单轴最大梯度大小 150 mT/m。图 1 为本研究的 FSE 成像序列时序图。每次 180°RF 脉冲产生的自旋回波用于填充 k 空间中的一行数据，仅需一次 90°RF 脉冲激发即可完成整个 k 空间的填充。为了最小化由梯度系统误差导致的相位误差累积，相位编码和频率编码方向上每一个梯度波形都有相同的幅度，波形面积完全由持续时间控制。

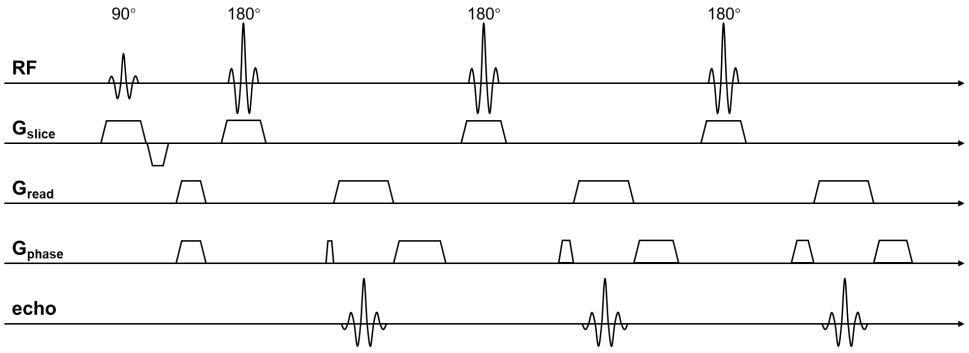


图 1. FSE 序列时序图。

我们采用 FSE 成像序列，采集了直径 10 mm 的平底试管中纯水在不同方向的切片影像，其 k 空间图像与重建图像如图 2 所示。每张图像的分辨率为 64×64，采集时间约为 750 ms。成像结果中背景噪声较低，边缘轮廓清晰，且图像无明显扭曲或伪影。

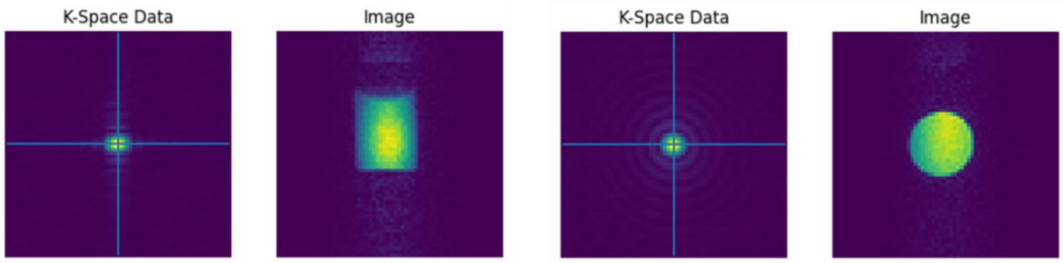


图 2. 直径 10 mm 的平底试管中纯水的轴向（左）和径向（右）切面成像。

本研究证明了低场、可移动的 MRI 设备上进行高质量 FSE 成像的可行性，对推动低场、便携 MRI 设备在临床和科研中的应用具有重要参考价值。

关键字 低场；可移动磁共振；快速自旋回波；

参考文献：

[1] Hennig, Jürgen, A. Nauerth, and H. R. A. R. E. Friedburg. "RARE imaging: a fast imaging method for clinical MR." Magnetic resonance in medicine 3.6 (1986): 823-833.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

肺部超灵敏 MRI 用于探究肺癌演进中肺功能的变化及分子机制

骆盈盈[1]、李枫[2]、陈世桢*[1,3]、周欣[1,3]

1. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院，磁共振波谱与成像重点实验室，武汉磁共振中心，武汉 430071

2. 武汉大学，泰康医学院（基础医学院），医学遗传系，过敏及免疫相关疾病湖北省重点实验室，武汉 430071

3. 中国科学院大学，北京 100049

肺癌的发病率和死亡率位居我国恶性肿瘤的首位[1]，早期诊断和基于标志物的精准治疗对于降低肺癌的死亡率至关重要。^{129}Xe肺部气体磁共振成像（Magnetic resonance imaging, MRI）是一种前沿的影像方法，灵敏度提高 80000 倍以上，点亮了传统^{1}H MRI影像上的肺部“黑洞”，能定量评估早于结构病变的气血交换功能的损伤。因此，作为一种新的无创影像学方法，^{129}Xe MRI 有潜力检测到肺癌早期的肺功能损伤，从而为肺癌的早诊提供灵敏、无创、无辐射的定量指标，推动肺癌诊断的窗口前移。

我们构建了KRAS突变的原位移植肺腺癌模型，应用129Xe MRI探测演进过程中的肺交换功能，发现肺交换功能参数可预测IL-6及其引发的炎性微环境的水平，并与患者不良预后显著相关，进一步应用肺交换功能参数指导了抗炎精准治疗的方案制定和疗效评估（图1）。我们发现该亚型肺癌小鼠的气血交换功能在早中期损伤严重，表现为毛细血管血液驻留时间（Tau; 图1a）、肺泡间隔厚度（d; 图1b）和肺实质/肺泡体积比（Vs/Va;图1c）等参数的显著升高。并且炎症因子IL-6和巨噬细胞的水平与肺功能参数Tau显著相关。还应用单细胞测序方法验证了肺癌早中期炎性微环境的形成。因此，我们阐明了肺癌早中期气血交换功能损伤的分子机制，即早中期炎症因子IL-6的上调导致炎性微环境形成，炎性巨噬细胞浸润增多，从而导致肺泡间隔增厚，毛细血管中血液驻留时间延长，最终影响了肺部通气-灌注失调，肺交换功能损伤。进一步，我们在肺癌患者中发现，IL-6和巨噬细胞仅与早中期患者的不良预后相关。因此，我们在早中期前进行了IL-6通路靶向治疗，发现小鼠肺组织中巨噬细胞的浸润显著减少（图1d），肺交换功能显著恢复（图 1e），并能增强临床批准的MEK抑制剂曲美替尼（trametinib）的抗肿瘤作用（图1f）。

以上结果表明，^{129}Xe MRI 探测的肺功能参数可以预测 IL-6 水平及其引发的炎性微环境，并指导肺癌的抗炎精准治疗并预测患者预后。我们初步证实了 ^{129}Xe MRI 探测的肺功能对于肺癌炎症标志物的预测能力，及用于精准治疗和预后预测的潜能。

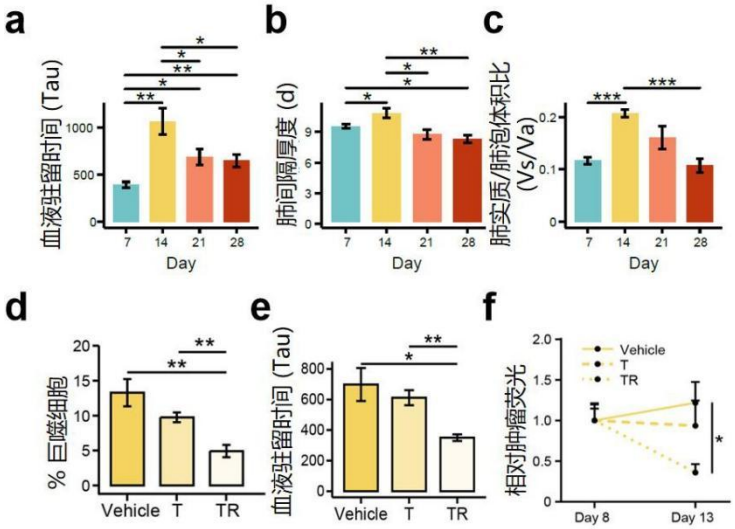


图1 **(a-c)** ^{129}Xe MRI检测的原位肺癌小鼠肺部气体交换功能参数，即血液驻留时间Tau **(a)**、肺间隔厚度d **(b)**、肺实质/肺泡体积比Vs/Va **(c)**。**(d)** 不同治疗组肺癌小鼠治疗后肺部巨噬细胞百分比。**(d)** 不同治疗组肺癌小鼠治疗后气体交换功能参数 Tau。**(e)**不同治疗组肺癌小鼠治疗前后的肿瘤相对荧光。T，曲美替尼（trametinib）；TR，曲美替尼联合鲁索利替尼（trametinib combined with ruxolitinib）。条形图显示了平均值±SEM。*P < 0.05，**P < 0.01，***P < 0.001，双边t检验。

关键字 129Xe MRI，肺癌，肺功能，微环境，炎症标志物

参考文献：

[1] Han B, Zheng R, Zeng H, Wang S, Sun K, Chen R, Li L, Wei W, He J, *J Natl Cancer Cent.*,**2024**;4(1):47-53.

分会场：10.磁共振波谱与成像
交流形式：报告

基于核磁共振技术监测高温含氟熔盐氟酸碱性与熔盐性能关系

付晓彬*
中国科学院上海应用物理研究所

新一代钍基熔盐堆核能系统未来将以钍为燃料，并具有本征安全性以及无水冷却等特点，是解决未来能源问题的重要途径之一。高温氟化熔盐是钍基熔盐堆中冷却剂以及燃料盐载体的主要候选，在役过程中熔盐性能的稳定是确保反应堆安全的重要保障之一。通常情况下，熔盐的微观结构对熔盐宏观性能有重要影响。然而，由于高温熔盐极端的高温环境以及强腐蚀挥发等特性，导致相关高温原位表征手段难以进行，相关研究亟待开展。

本工作基于高温原位核磁共振技术，针对钍基熔盐堆中使用的氟化熔盐体系微观结构进行了系统研究。分析了不同配比下氟离子配位结构的演化过程，并探讨了在不同配位离子存在下氟离子的配位结构以及信号归属问题。此外，基于对氟离子结构的认识，进一步验证了自由氟离子与络合氟离子对金属反应性以及腐蚀性的影响，并结合定量核磁共振技术提出检测氟盐氟酸度的分析方法，用于检测熔盐的在役性能原位监测。

关键字 高温熔盐，核磁共振，微观离子络合

参考文献：

[1] Y. Liu, R. Lan, C. Dong, et al., *J. Phy. Chem. C*, **2021**, 125, 4704-4709.
[2] H. Wu, H. Huang, L. Cao, et al., *J. Phy. Chem. C*, **2023**, 127, 3093-3098.
[3] X. Fu, Y. Liu, H. Huang, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2023**, 25, 19446-19452.
[4] J. Sun, H. Huang, H. Wu, et al., *JACS Au*, **2024**, 4, 2211-221

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

同步辐射 X 射线衍射细胞成像仪器研制与应用

高学云*
北京工业大学

基于荧光显微镜的单细胞功能成像已被广泛应用于细胞内分子与细胞器功能研究，但是实现单细胞及内含细胞器高分辨结构成像的仪器少有报道，这大大制约了研究者探索单细胞结构与生物功能。我们提出了基于同步辐射大科学装置提供的高亮度相干 X 射线实现单细胞高分辨结构成像的仪器方法，其核心是实现 X 射线照射单细胞获得衍射信号和建立衍射信号相位恢复算法，实现单细胞三维结构全景成像，获得优于 20 nm 的空间分辨和细胞结构密度的绝对定量。在上海光源研制了一台包含八个子系统的同步辐射相干衍射细胞成像装置，建立了细胞成像的实验操作流程，实现了三种不同类型细胞的三位高分辨结构成像，分辨率优于 20 nm。基于该分析仪器，生物学家实现了胰岛 B 细胞结构成像，发现了细胞内锌离子的分布规律和化学状态，为糖尿病的发生与演化机制探索提供了独特的结构成像信息。

关键字 同步辐射；大科学装置；X 射线衍射；单细胞高分辨成像

参考文献

1. A. Guo, J. Zhang, B. He, A. Li, T. Sun, W. Li, J. Wang, R. Tai, Y. Liu, Z. Qian, J. Fan, A. Sali, R. C. Stevens, and H. Jiang, *PNAS*, **2022**, 119, e2202695119.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

基于固态纳米孔/通道的分析检测

夏帆*
中国地质大学（武汉）

人们在细胞中发现，1-100 nm 范围内种类不同的跨膜孔和离子通道。这些跨膜孔和离子通道在诸如维持细胞渗透压平衡和稳定细胞体积等生理活性起着至关重要的作用。受此自然现象的启发，科学家们制备了具有不同特征的仿生纳米器件（纳米孔/通道）。这些仿生纳米器件已经成为一个有吸引力的平台，具有广泛的应用。一般来说，基于固态纳米孔/通道分析的原则如下：分子进入或附着在纳米孔/通道的内表面，改变纳米孔/通道的有效直径，或影响电荷转移以及内表面的润湿性，从而导致离子电流的变化。

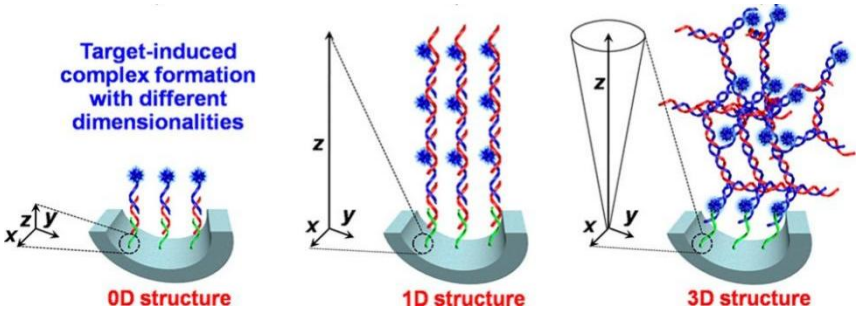


图 1 基于固态纳米孔/通道的分析检测中 0D、1D 和 3D 靶标结构的示意图

关键字 纳米孔/通道；仿生；分析检测；分子识别

参考文献

1. Q. Ma, Y. Li, R. S. Wang, H. Q. Xu, Q. J. Du, P. C. Gao, F. Xia, *Nat. Commun.*, **2021**, 12, 1573.
2. P. C. Gao, D. G. Wang, C. Che, Q. Ma, X. Q. Wu, Y. J. Chen, H. Q. Xu, X. C. Li, Y. Lin, D. F. Ding, X. D. Lou, F. Xia, *Nat. Protoc.*, **2021**, 16, 4201-4226.
3. P. C. Gao, Q. Ma, D. F. Ding, D. G. Wang, X. D. Lou, T. Y. Zhai, F. Xia, *Nat. Commun.*, **2018**, 9, 4557.
4. X. C. Li, T. Y. Zhai, P. C. Gao, H. L. Cheng, R. Z. Hou, X. D. Lou, F. Xia, *Nat. Commun.*, **2018**, 9, 40.
5. Z. Long, S. S. Zhan, P. C. Gao, Y. Q. Wang, X. D. Lou, F. Xia, *Anal. Chem.*, **2018**, 90, 577.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

脑化学活体离电传感

于萍*
中科院化学所

脑化学活体离电传感不仅对于认识和了解生命过程的离子通道具有重要意义，同时也为发展新的电化学分析原理和方法带来了新的机遇。如基于蛋白孔发展起来的单分子测序技术引起了越来越多的关注。报告者长期从事离子传输的基础和应用研究，本报告拟结合多年的研究基础，拟从调控微纳尺度的离子传输和固相离子传输两个方面来阐述脑化学活体离电传感发展电化学分析原理和方法。

1) 利用玻璃微纳米管的尖端限域效应，通过合理设计和调控尖端的尺寸和内壁修饰，可以实现非电化学活性物种的活体分析；同时，利用发展的玻璃纳米管的碰撞技术，发展了可用于单颗粒分析的电化学分析新原理和新方法，并研究了其在原位分析胞内囊泡和尺寸中的适用性。同时，发现了微米管的整流，并提出了微米管整流模型，并基于此，建立了活体分析新原理。

2）基于固相离子传输的限域效应，通过调控固相离子传输的行为，发展了可用于气相传感的新型传感模式。通过设计合成咪唑阳离子和阴离子的新型离子化合物，发现其在不同湿度的气体中，离子传输电阻不同，基于此，发展了调控固相离子传输的湿度传感器。在此基础上，进一步利用氧化石墨炔与质子的结合能力，发展了超快的湿度传感，并可用于大鼠呼吸频率的实时监测。

关键字 脑化学；离电学；活体分析；传感；离子传输

参考文献

1. T. Xiong, C. Li, X. He, B. Xie, J. Zong, Y. Jiang, W. Ma, F. Wu, J. Fei, Ping Yu*, L. Mao*, Science, 379.156-161(**2023**).
2. K. Zhang, H. Wei, T. Xiong， Y Jiang, W. Ma, F. Wu, P. Yu*, L. Mao, Chem. Sci., 12, 7369 (**2021**).
3. T, Xiong, K. Zhang, Y. Jiang, P. Yu*, L. Mao*H, Wei, Sci China-Chem., 61, 1346 (**2019**).
4. X. He, Y. Liu, K. Zhang, F. Wu, P. Yu*, L. Mao, Angew. Chem. Int. Ed., 57, 4590 (**2018**).
5. He X., Zhang K., Li T., Jiang Y., Yu P.*, Mao L., J. Am. Chem. Soc., 139, 1396-1399(**2017**).

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

奇特的微液滴化学

张新星*
南开大学

水对很多化学反应来说是稳定的溶剂，然而近年来人们发现一些原本在水溶液中难以进行的化学反应，在通过鞘气喷雾或者超声雾化产生的微小水滴中可以自发发生，甚至可以被加速到原本的一百万倍。现有理论认为，微液滴的表面自然带有高达 10^9 V/m 的电场，该电场是如此庞大，甚至可以撕裂水中的氢氧根（OH^-），生成一个电子和一个羟基自由基（OH）。电子具有极高的还原性，而 OH 具有极高的氧化性，看似 完全矛盾的氧化和还原性质居然同时存在，使得微液滴成为了神奇的矛盾统一体。在本报告中，张新星总结了其课题组开展的 40 余个例子：利用水微液滴表面自发产生的电子导致还原反应，利用水微液滴表面自发产生的 OH 导致的氧化反应，以及水微液滴表面的电场导致的电场加速的化学反应，打开了一扇“神奇”的微液滴化学的大门。

关键字 微液滴

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

拉曼光谱超快成像检测与识别装备研制及应用

杨惠茹、史亚飞、李翔、陈洁茹、王琰淇、方吉祥*
西安交通大学

拉曼光谱技术具有原位、快速、操作简单、样本无损、无需标记物、多分子同时检测等优势，可以提供目标物分子的组分及精准指纹谱学信息。拉曼光谱成像是拉曼光谱技术功能的进一步扩展与延伸，不仅能提供光谱信息，还能够提供时间分辨和空间分辨的信息。这意味着拉曼光谱成像不仅可以获得样品的化学信息，还可以获得样品空间分布和动态信息。拉曼光谱成像的这些特征对应微量、痕量的检测，尤其是在更大面积或者多点同时检测的应用场景下，对于降低漏检率，提高准确率，获得二维或者三维的分子信息具有至关重要的研究价值。

然而，在诸如远程拉曼光谱检测或者生物医学在体成像诊断中，易受日光或生物组织等荧光及环境光干扰，存在信号强度低，噪声大的问题。同时，现有基于显微系统的逐点扫描成像模式，拉曼光谱成像速度慢，无法满足快速、在体成像诊断的要求，阻碍了拉曼光谱的组分分析和指纹谱学识别优势的有效发挥。

本课题组在前期远程爆炸物检测与识别装备研制，及拉曼光谱成像关键技术突破基础上，提出基于时间门控时序选通技术与空间分辨独立选通技术的时-空分辨选通关键技术，并将其应用于危险化学物质及生物组织样品的研究，发挥时间门控时序选通技术在日光、白光抑制优势及空间分辨独立技术在快速、高分辨拉曼成像优势，研制拉曼超快成像与检测装备，通过机器学习及智能算法的开发，加快推进快速拉曼成像领域的关键技术研发，服务国家在国防建设及精准医疗领域的重大需求。

关键字 时间门控时序选通技术；空间分辨独立选通技术；拉曼光谱成像；精准诊疗

参考文献

[1] 赵家炜，马建乐，郝锐，李铃薇，方吉祥. 远程增强拉曼光谱技术及其应用, 光散射学报, **2021**, **83**: 112
[2] 谢昭达，张佰超，王琰淇，李翔，方吉祥, 浓缩富集与分子定位型表面增强拉曼光谱, 光散射学部，**2023**, 35(2): 108-122
[3] Rui Hao, Jiawei Zhao, Jiakai Liu, Hongjun You, Jixiang Fang*, Remote Raman Detection of Trace Chemicals Using Convex Convex lens and Plasmonic Enhanced Spray, Analytical Chemistry, **2022**, 94(32), 11230-11237

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

活细胞内蛋白质定位定量分析的一种通用型平台

娄筱叮*、吴霞
中国地质大学材料与化学学院，生物地质与环境地质国家重点实验室，武汉 430078

活细胞细胞器中存在着多种不同功能的蛋白质，一旦机体发生病变，胞内蛋白质的表达量或活性往往也会随之变化。因此，实现活细胞、特别是细胞器中特定蛋白质的分析对于开发重大疾病的诊断和治疗具有重要意义。目前，应用最广泛的蛋白质检测技术主要是基于抗体识别的，荧光标记抗体作为蛋白质识别的核心工具，主要依靠抗体可变区的特定位点与蛋白质特异性靶向识别，结合抗体修饰的信号分子进行信号输出。然而，荧光抗体应用于活细胞时常常存在以下几个问题：（1）大尺寸的传统荧光抗体分子难以穿过活细胞的细胞膜；（2）抗体荧光化学修饰过程中其修饰位点不可控，可能导致抗体失活；（3）荧光抗体结构在一定程度上缺乏普遍性，如识别不同的蛋白质靶点时，必须重新设计荧光抗体。因此，目前迫切需要开发一种新的技术来进行活细胞中蛋白质的分析检测。

受荧光抗体生物结构的启发，本课题组前期已经在多肽蛋白质检查方面取得一些进展1-2。在本工作中，我们基于荧光转子型的分子支架，结合蛋白质识别序列、细胞穿膜模块及细胞器定位模块，成功构建基于模块化肽偶联探针的多细胞器蛋白质通用检测平台(TP-TPE-TO)3。如图 1 所示，该通用性检测平台集成了蛋白质识别单元和细胞膜穿透单元，优化了信号单元，引入了细胞器靶向单元，通过识别和靶向单元的简单转换来实现不同细胞器中的蛋白质分析。该肽偶联探针进入活细胞后，定位于特定的亚细胞器进行蛋白特异性识别，从而共同导致转子型荧光分子的旋转受限释放荧光信号。为了验证该设计策略的可行性，本课题选取了三种典型细胞器中的六种蛋白质(包括内质网中的 GRP78 和 GRP94，线粒体中的 MAO A 和 Bcl-2，高尔基体中的 COX-2 和 giantin)。在活细胞中追踪相关荧光信号的位置和强度，证明了多个探针的特异性。通过替换蛋白质识别序列和匹配细胞器靶向单元，实现了对细胞器内特定靶蛋白的检测，设计和合成简单，有望拓宽其应用范围，是活细胞内靶蛋白检测的一个里程碑。

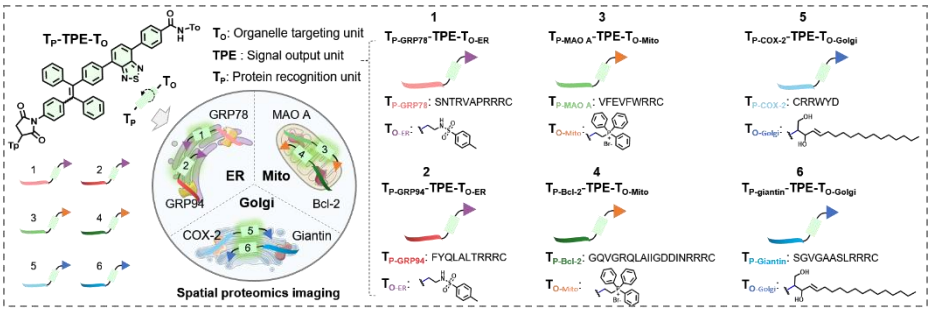


Fig. 1 The design strategy and schematic diagram of six peptide-conjugated probes for organelle protein imaging.

关键字 模块化多肽探针；转子型荧光分子；活细胞蛋白质分析；细胞器

参考文献

1. J. Yang, J. Dai, Q. Wang, Y. Cheng, J. Guo, Z. Zhao, Y. Hong, X. Lou, F. Xia, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 20405-20410.
2. C. Duan, J -J. Hu, R. Liu, J. Dai, M. Duan, L. Yuan, F. Xia, X. Lou, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60: 18280-18288.
3. X. Wu, J -J. Hu, C. Duan, R. Liu, F. Xia, X. Lou, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63: e202400766.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

可拉伸电化学传感器实时监测形变细胞

刘艳玲*
武汉大学

细胞能灵敏感应微环境中的机械力信号，通过激活胞内信号通路引发一系列生物化学反应，最终调节细胞形态和功能，该过程被称为力学信号转导。尽管电分析化学方法在生物体系检测方面发挥了重要作用，但常规电极缺乏弹性，难以顺应细胞形变以准确获取生化信息。为了适应细胞动态形变，我们研制了电化学性能优异的金纳米管、碳纳米管和导电聚合物，构建了系列基于一维纳米电极材料网络结构的柔性可拉伸电极；然后，通过在电极表面引入超小尺寸金属纳米颗粒、酞菁钴仿生分子和光催化剂纳米材料，显著提升了传感器检测灵敏度、细胞黏附性、抗污染等性能；在此基础上，利用柔性可拉伸电化学传感器原位诱导细胞/组织形变，在单/群体细胞、模拟组织以及真实组织层次实时监测了机械力触发的信号分子瞬态释放，为细胞力学信号转导研究提供了一种仿生实时动态监测技术。

关键字 电分析；柔性电极；细胞

参考文献

1. Qin, Y.; Liu, Y. L.; Huang, W. H. *et al*. *Adv. Sci.* **2021, 8,** 2003738.
2. Liu, Y. L.; Huang, W. H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**, 2757.
3. Yan, L. P.; Huang, W. H.; Liu, Y. L. *et al*. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022, 61,** e202203757.
4. Zhao, Y.; Huang, W. H.; Liu, Y. L. *et al*. *Adv. Mater.* **2023,** 2305917.
5. Zhao, Y.; Huang, W. H.; Liu, Y. L. *et al*. *ACS Nano*, **2024, 18,** 6176.
6. Yan, J., Huang, W. H.; Liu, Y. L. *et al*. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024, 63,** e202403241.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

核素标记与放射免疫响应分析

汪勇*
苏州大学

肿瘤放射治疗诱发的免疫响应是时空动态变化的，该过程中免疫激活与抑制效应此消彼长，涉及免疫分子与细胞等多重因素之间的复杂相互作用。深刻理解放射免疫响应过程至关重要，是优化治疗方案的基石。关键问题包括溯源与增强放射免疫激活效应以及监测与控制放射免疫抑制效应。髓源性抑制细胞（MDSC）是一种具有强大免疫抑制能力的低分化细胞，现有报道其调控抗肿瘤效应呈现截然相反的结论，明确解析放疗诱导 MDSC 浸润并控制其免疫抑制功能迫在眉睫。我们意外发现放疗导致 MDSC 表面表达的免疫抑制分子 PD-L1 显著上调。为此，发展了一种核素标记的多模态分子探针 89Zr-Fe3O4-αPD-L1，实现了放疗驱动 MDSC 浸润肿瘤过程的活体成像分析与探针控制 MDSC 的铁死亡，为优化肿瘤放射免疫联合治疗提供了先进解决方案。

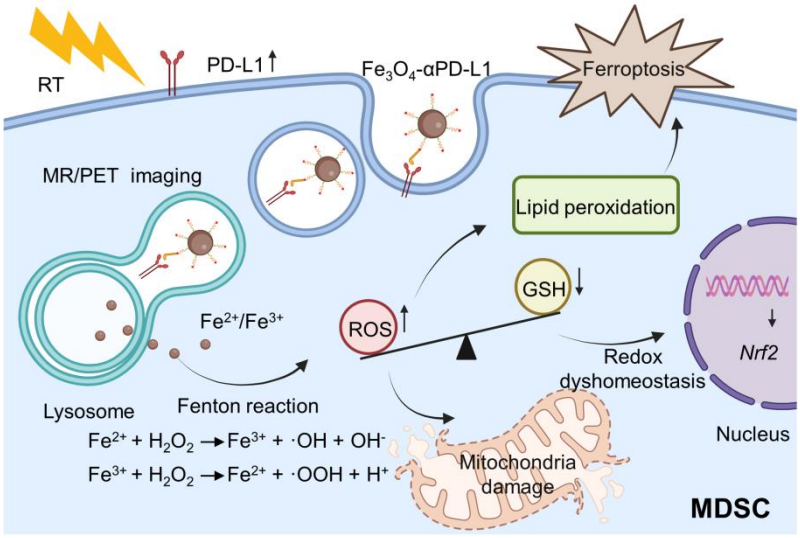


图 1 肿瘤放射免疫响应过程

关键字 放射免疫响应；免疫抑制细胞；核素标记；成像分析；铁死亡

参考文献

[1] Zhu, W.; Wang, Y., et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146 (32): 22455-22468.
[2] Xu, P.; Wang, Y., et al. *ACS Nano* **2024**, 18 (28): 18425-18443.
[3] Wu, Y. X.; Wang, Y., et al. *ACS Nano* **2024**, 18(4): 2800-2814.
[4] Xu, P.; Wang, Y.; Gao, M., et al. *ACS Nano* **2024**, 18(1): 1022-1040.
[5] Yu, H.; Zhang, L. W.; Wang, Y., *ACS Nano* **2024**, 18 (34): 23741-23756.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

基于 CRISPR/Cas13a 数字层析试纸的 HIV-1 RNA 无扩增核酸检测方法的研究

张鹏飞[1]、严万年[1]、韩焕兴*[2]
1. 同济大学附属皮肤病医院
2. 中国人民解放军海军军医大学第二附属医院

研究目的：
基于 CRISPR/Cas 系统的核酸检测方法是分子诊断的重要发展方向。但单独使用 CRISPR/Cas 系统的检测灵敏度有限，仍需依赖于核酸预扩增，因而与传统的 qPCR 和 Taqman 探针法相比优势不明显。本研究，我们报道了一种基于 CRISPR/Cas13a 系统和数字层析试纸的超灵敏无扩增核酸检测方法，用于 HIV-1 RNA 的现场快速检测。
方法：
根据中国 HIV 基因数据库中 CRF07_BC 亚型的 gag 基因区域，设计相应的 crRNA 序列；优化 CRISPR/Cas13a-层析试纸检测体系中荧光量子点探针和核酸探针的浓度；以 HIV-1 假病毒 0-10^9 拷贝/mL 评估该检测方法的灵敏度，分别采用模拟荧光分析仪和单颗粒计数的数字荧光分析方法，检测层析试纸检测区域的荧光信号强度和荧光颗粒数量，分别建立病毒浓度与荧光信号强度、荧光颗粒数量的关系曲线，比较荧光层析试纸模拟信号和数字信号对检测灵敏度的影响。
结果：
由于采用单颗粒数字层析的检测方式，可显著降低荧光量子点标记颗粒浓度的使用；优化后的 CRISPR/Cas13a-数字层析系统中，核酸探针浓度从 10 μM 降至 0.01 nM；对 HIV-1 假病毒样本检测，采用传统的模拟荧光层析分析仪检测试纸的荧光信号，最低检测限约 5600 拷贝/mL，而采用数字荧光信号分析，最低检测限可达 89 拷贝/mL。
结论：
建立的 CRISPR/Cas13a-数字层析系统检测 HIV-1 RNA，具有经济、快速、无扩增等特点，为现场快速分子诊断提供了一种新的思路和方法。

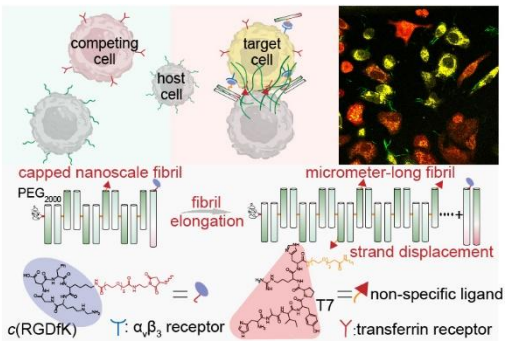
关键字 无扩增核酸检测，CRISPR，数字层析，HIV-1 RNA，量子点

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

基于多肽组装识别缺少特有受体癌细胞的策略

姜涛*、郭潘
厦门大学化学化工学院

癌细胞的特异性识别是肿瘤诊断和抗癌药物开发的关键。为应对难以区分具有相同受体且受体含量差异较小的癌细胞的挑战，我们提出了一种通过多价结合界面实现选择性细胞识别的策略。基于组分和结构可控的多肽纳米组装，我们已构建了多种结合界面：可在纳米尺度精准调控配体空间分布的一维界面[1]，能自适应目标细胞受体分布的动态界面[2]，以及可高密度展示配体的二维结合界面[3]。基于这些结果，我们近期设计了尺寸可变的触发型动态细胞结合界面，通过与目标细胞接触时诱导界面的尺寸由纳米级扩大至微米尺度，从而使得非特异性配体在目标癌细胞表面选择性地富集，增强对该细胞的多价结合力，实现选择性细胞识别[4]。该方法也成功用于引导广谱自然杀伤细胞对癌细胞的选择性杀伤。这些结果为不同类型以及发展阶段的癌细胞识别提供了新的可能，并为未来的活体内肿瘤标记和靶向治疗奠定了基础。



关键字 癌细胞识别；多肽自组装；识别界面

参考文献

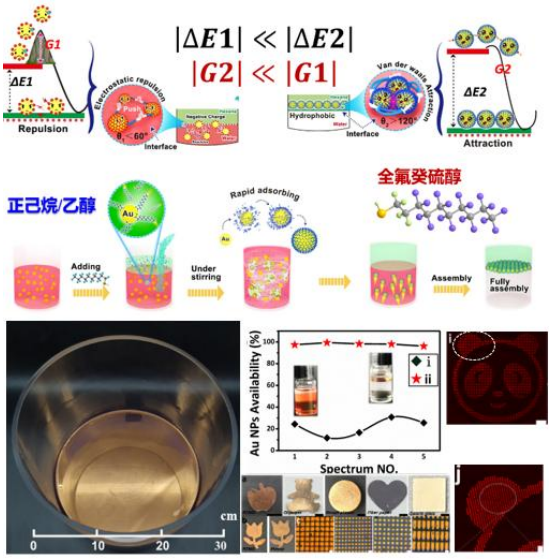
1. D. Cheng, X. Chen, W.J. Zhang, P. Guo, W.H. Xue, J.F. Xia, S.Y. Wu, J.H. Shi, D. Ma, X.B. Zuo, B. Jiang, S.W. Li, N.S. Xia, Y.B. Jiang, V.P. Conticello*, T. Jiang*, Angew. Chem. Int. Ed., **2023**, 62, e202303684.
2. P. Guo, D. Wang, S.M. Zhang, D. Cheng, S.Y. Wu, X.B. Zuo, Y.B. Jiang, T. Jiang*, Nano Lett., **2023**, 23, 14, 6386-6392.
3. X. Chen, C. Xia, P. Guo, C.R. Wang, X.B. Zuo, Y.B. Jiang, T. Jiang*, Angew. Chem. Int. Ed., **2024**, 63, e202315296.
4. P. Guo, T. Jiang*, and el al. **2024**, submitted.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

液-液界面超快自组装构筑高性能 SERS 基底及其生物检测应用

黄又举*
杭州师范大学

由于难以克服的动力学和热力学吸附势垒，传统液-液界面自组装往往呈现耗时、重复性差、无法大面积制备等不足，并导致纳米粒子界面自组装尚未用于纳米薄膜工程化技术开发，进而限制了其功能应用。本报告在纳米粒子组装体系中引入具有超低表面能的全氟分子，赋予纳米粒子超高接触角，将动力学和热力学吸附势垒降低至极限，可以在 5 秒内实现超快速、宏观大面积、二维单层膜组装结构的构建。组装面积可满足工程技术成本要求(>4 英寸)，粒子成膜利用率高达 97.5%。与传统组装策略不同，这种组装技术可普适到多种纳米及微米粒子的快速大面积界面自组装。此外，本报告提出了多种高效纳米探针多维度组装策略，包括“高分子软硬协同”调控粒子间弱作用力平衡、“界面第三相微环境”加速超晶格畴愈合等，实现了大面积、单层及莫尔转角可控、基元组分及尺寸可调的纳米粒子超晶格膜材料的构筑。纳米粒子二维膜基底进一步被设计成高性能 SERS 生物传感器，应用于人体健康检测监测领域。



关键字 纳米探针；自组装；生物检测

参考文献

1. L. Song, B. B. Xu, Q. Cheng, X. Wang, X. Luo, X. Chen, T. Chen, Y. Huang,* *Science Advances*, **2021**, 7, eabk2852
2. L. Song, B. B. Xu,* Y. Huang,* *ACS Nano*, **2021**, 15 (12), 18822-18847.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

肿瘤免疫微环境光学分子精准测量

张燕*
华中科技大学

肿瘤免疫治疗作为变革性的技术，通过动员病人自体免疫系统杀死肿瘤细胞，实现治愈肿瘤的目的。然而其存在响应率不高的缺点。因此，可视化、实时、在体研究肿瘤免疫微环境中免疫细胞的类型、丰度为药物筛选、精准治疗和预测患者的生存提供了有效的策略。本报告将介绍我们在肿瘤免疫微环境可视化的光学分子探针开发和响应成像及治疗等工作：1）基于自组装策略构建多种光学成像探针，实现了活体肿瘤组织细胞毒性 T 淋巴细胞和肿瘤相关中性粒细胞的精准检测和分析，为预测免疫治疗疗效和筛选合适的免疫药物提供新策略；2）利用高信背比的光学探针实现药物递送可视化示踪，实时、动态揭示药物释放与肿瘤治疗疗效相关性的同时，实现了药物精准、可控释放，为肿瘤精准治疗提供检测和评估平台。

关键字 光学探针；活体成像；免疫细胞特异标志物；肿瘤微环境

参考文献

[1] Huang, J.; Zhang, X.; Li, S.; Qu, F.; Huang, B.; Cui, R.; Liu, Y.; Hu, W.; Yang, X.; Zhang, Y. *Anal. Chem*. **2023**, 95:3761-3768.
[2] Qin, W.; Huang, J.; Yang, C.; Yue, Q.; Chen, S.; Wang, M.; Gao, S.; Zhou, X.; Yang, X.; Zhang, Y. *Adv. Funct. Mater.*, **2023**, 33: 202209748.
[3] Huang, J.; Cheng, P.; Xu, C.; Liew, S. S.; He, S.; Zhang, Y.; Pu. K.; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61: e202203235.
[4] Zhang, Y.; He, S.; Xu, C.; Jiang, Y.; Miao, Q.; Pu. K.; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61: e202203184.
[5] Zhang, Y.; He, S; Chen, W.; Liu, Y.; Zhang, X.; Miao, Q.; Pu. K.; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60: 5921-5927.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

超构表面调控电化学发光策略的研究与外泌体检测应用

马强*、梁子慧、王培琳、李贞润、李文延
吉林大学

超构表面（Metasurface）是由大量亚波长单元在二维平面上设计排布而成的人工结构阵列，能够对电磁波的振幅、相位、偏振态和光谱等特性进行灵活调控。超构表面支持多种光学模式，如局部表面等离子体共振（LSPR）、表面晶格共振（SLR）、法诺（Fano）共振和连续介质中的准束缚态（准 BIC）等。由于将光限制在亚波长范围和高度局部场增强，超构表面对周围的目标分析物极为敏感，在生物传感领域展现出巨大潜力。电化学发光(electrochemiluminescence, ECL) 是一种由电化学氧化还原反应引发的发光现象。ECL 结合了电化学和化学发光，具有低背景噪声，时空可控，快速响应等优点，是化学测量学研究中极具竞争力的分析检测技术，同时也可以作为超构表面独特的无背景干扰光源。细胞外囊泡（extracellular vesicle）是几乎所有类型细胞分泌的纳米级磷脂双层囊泡，携带多种来源于母细胞的生物大分子（如脂质、蛋白质、mRNA/microRNA 和 DNA 、多糖等），已经成为肿瘤液体活检中一类重要的靶标，在肿瘤早期诊断和预后评价中具有临床意义和应用价值。

这项工作开发了一种超构表面调控电化学发光（MECL）的策略，并应用于细胞外囊泡检测。以蛋黄壳结构的金包四氧化三铁纳米粒子为结构单元，通过液液界面自组装技术在玻碳电极上构筑超构表面。采用微波辅助水热法合成的氮点作为 MECL 体系的光源。超构表面纳米粒子的紧密堆积和空腔结构，可以产生基于等离子体共振耦合效应和珀塞尔效应的电磁“热点”。超构表面的光学响应可以通过外部磁场进行调节。外磁场调节具有亚纳秒级超快响应、非接触式、连续调节、环境友好等优点。在外加磁场的作用下，四氧化三铁纳米粒子可以被磁化并为超构表面提供局部磁场，进而产生作用在运动电子上的洛伦兹力，改变电子运动方向。在超构表面和外磁场的调节下，MECL 系统获得了高度定向和增强的 电化学发光信号。由于粘蛋白 1 适配体与胃癌来源细胞外囊泡的高亲和性和特异性结合以及催化发夹自组装策略，MECL 传感系统可用于检测腹水样本中的细胞外囊泡。

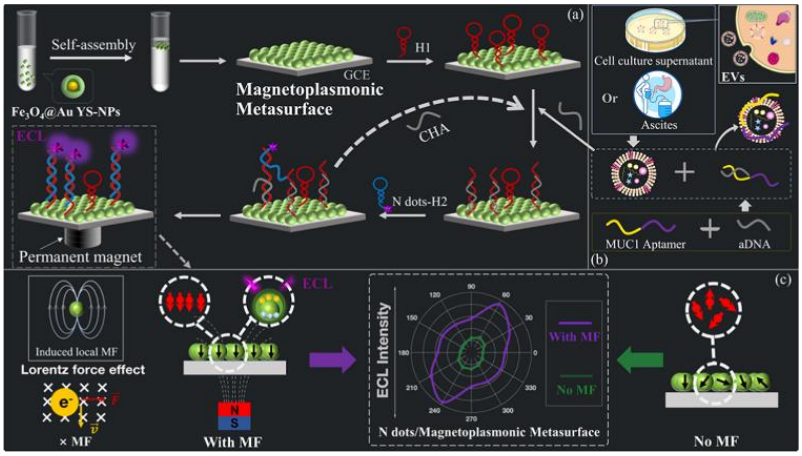


图 1：超构表面调控电化学发光信号的机制与细胞外囊泡检测应用示意图。

关键字 超表面；电化学发光；外泌体检测

参考文献

[1] Huang, L., Chen, X., Muehlenbernd, H., Nat. Commun. 4, 2808 (**2013**).

[2] Miao, W., Chem. Rev. 108, 7 (**2008**).

[3] Kalluri, R., LeBleu, V. S., Science 367, 6478 (**2020**).

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

基于生物反应网络的高性能生物传感应用

周志新*
东南大学

细胞生命活动不仅由生物分子的组成与成分决定，更依赖生物分子相互作用。细胞内相互作用的生物分子组成复杂分子网络，进而调控生命各项活动，产生复杂生命现象，例如由核酸组成的基因调控网络控制基因转录过程，由蛋白构成的蛋白质互作网络调控生命代谢过程等。细胞内复杂分子网络是天然的生物敏感元件，通过精确、灵敏、实时动态的响应环境变化，从而实现细胞生化事件的调控。通过向生命体内生物网络传感机制学习，从而发展细胞水平的多层次、多尺度、高灵敏实时动态分析传感新方法，将为生物分析化学与化学测量学带来新的机遇。然而，利用生物分子构筑协同作用的复杂生物分子网络，并将其应用于具有高灵敏、高通量、高选择性、实时动态分析，仍然是一项非常具有挑战性的新型课题。

针对以上关键科学问题，我们以生物分子为基本结构工具，结合分子工程技术和生物传感技术，构建了系列生物反应网络，并将其应用于高性能生物传感器的设计和活细胞内精准化学测量，开展了系列创新性研究（图 1）：（1）构建了系列生物反应网络体系，揭示细胞内复杂分子网络的作用机制，进而建立基于生物反应网络的多元组分识别、多信号协同响应和时间选择性传感新原理；（2）发展基于空间限域效应的生物反应网络生物传感探针，通过提高局域浓度显著提高了生物传感的灵敏度、响应速度和选择性；（3）将新型生物传感器应用于活细胞内的精准测量，实现活细胞微环境，疾病相关分子智能检测和精准成像分析，为科学研究和临床诊断提供新的工具。[1-5]

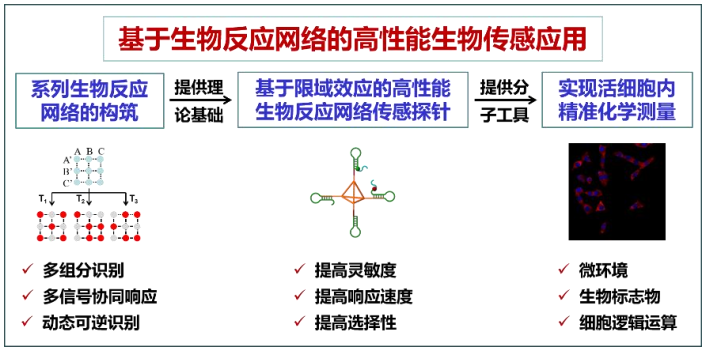


图 1.构建系列生物反应网络，发展高性能生物传感。

关键字 纳米分析

参考文献

[1] Lin, N., Zhang, Y.,* Willner, I.,* Zhou, Z.,* J. Am. Chem. Soc. **2024**, 146: 20685.
[2] Zhou, Z.,* Lin, N., Ouyang, Y., Zhang, Y.,* Willner, I.,* J. Am. Chem. Soc. **2023**, 145: 12617.
[3] Zhou, Z., Wang, J., Willner, I.,* J. Am. Chem. Soc. **2021**, 143: 241.
[4] Zhou, Z., Ouyang, Y., Wang, J., Willner, I.,* J. Am. Chem. Soc. **2021**, 143: 5071.
[5] Zhou, Z., Yue, L., Wang, S., Lehn, J., Willner, I.,* J. Am. Chem. Soc. **2018**, 140: 12077.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

纳米孔道单分子蛋白-蛋白相互作用实时追踪

马慧[1,2]、龙亿涛[1]、应佚伦*[1]
1. 南京大学
2. 浙江理工大学

近年来，SARS-CoV-2 病毒引发的新冠肺炎疫情席卷全球，持续威胁着公共健康。这一病毒依赖其表面的三聚体刺突蛋白，可同时与多个宿主细胞表面血管紧张素转换酶 2 受体结合，完成侵入细胞的关键步骤。这种多价结合不仅增强了病毒的感染能力，还为其带来了显著的免疫逃逸优势。然而，刺突蛋白与 ACE2 的每一次具有异质性。不同的配体与受体的取向变化，显著影响了结合过程中的动力学表现。这种复杂性使得在单分子水平上实时监测和解析这些多价相互作用极具挑战[1-2]。针对这一技术难题，本研究开发了一种基于纳米孔道的单分子电化学分析方法，利用配体-受体结合引发的体积变化效应，将配体与受体的解离与结合过程转化为高时间分辨率的离子流电信号(图 1)，实现了对 SARS-CoV-2 多种突变体刺突蛋白与可溶性 ACE2 受体之间多价相互作用的实时追踪与分析。解析了刺突蛋白每一个亚基与 sACE2 的结合和解离速率，在单亚基水平揭示了 SARS-CoV-2 变体刺突蛋白与受体浓度依赖的结合路径差异。值得注意的是，Omicron S 的三个亚基均展现出对 sACE2 受体同等且极大的亲和能力，倾向于同时与三个受体结合，而 WT S 和 Delta S 则分别倾向于仅与一个或两个受体结合，且在与第一个 sACE2 结合后，其第二个亚基的结合能力显著下降。本研究提供了一种在单分子水平追踪复杂蛋白-蛋白复杂动态相互作用网络的新方法，为理解病新冠毒感染的分子机制，以及靶向药物设计和治疗策略提供了重要参考。

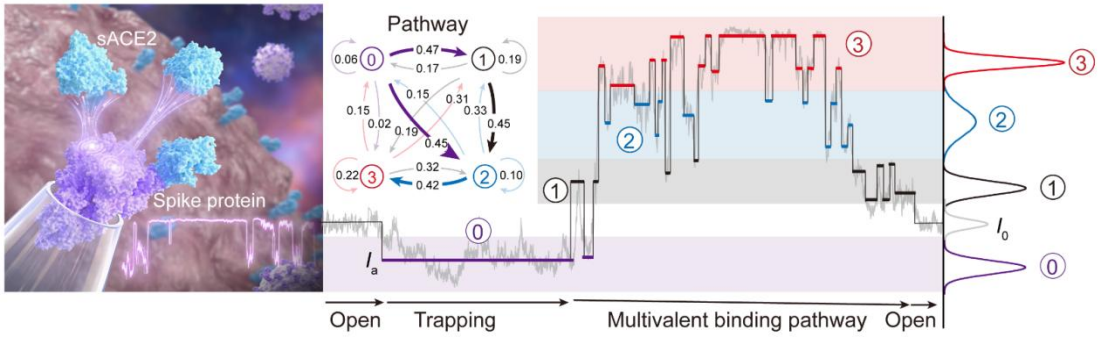


图 1. 纳米孔道单分子电化学分析实时追踪蛋白-蛋白多价相互作用。

关键字 纳米孔道；单分子分析；蛋白-蛋白相互作用；结合路径；刺突蛋白

参考文献

[1] Ma, H., Wang, Y. Y, Li, Y. X., Xie B. K., Hu Z. L., Yu J. Y., Long, Y. T., Ying, Y. L. *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, DOI: org/10.1021/jacs.4c04934.
[2] Wang, Y., Ma, H., Ma, L., Ying, Y. L., Long, Y. T. *Biophys. J.*, **2024**, 123(3), 344a-345a.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

光诱导 Ag/碳点荧光材料的光学性能研究及其衍生传感功能

郑保战*、刘荔芝、王钰玮、李业、杜娟、郭勇
四川大学

碳点（CDs）因其独特的发光特性、良好的生物相容性和稳定性而受到广泛的关注。然而，CDs 仍存在量子产率（QY）低的不足，因此开发高量子荧光产率的 CDs 并扩展其应用仍然是一个挑战[1]。

基于此，本研究提出了一种新颖简便的光诱导银调制策略，有效地提高了碳点的荧光特性，同时也赋予其良好的传感性能[2]。如图 1a 所示，采用紫外光照射 Ag+和疏水性碳点（h-CDs）的混合溶液，可简单合成光诱导 Ag 调制的 CDs（p-Ag/CDs）。与原始 h-CDs 相比，p-Ag/CDs 产生了明显的荧光蓝移和增强现象（图 1b），其 QY 为 51.1%，是 h-CDs（4.9%）的 10.4 倍，表明光诱导 Ag 调制可以有效提升 CDs 的光学性能。本工作还对 p-Ag/CDs 的荧光增强和蓝移机理进行了深入研究，结果表明其荧光蓝移是光照射导致含氧基团的增加引起的，同时产生的 Ag 纳米颗粒可以使 CDs 的荧光强度大大增强。更有意思的是，和 h-CDs 相比，p-Ag/CDs 对 S2−表现出良好的荧光响应，基于此构建了 p-Ag/CDs 荧光探针（图 1c），实现了对 S2−的定量检测，线性响应范围为 2.5~400 μM，检出限为 0.11 μM，其灵敏度远高于 h-CDs。该体系可成功用于实际复杂样品中 S2−的分析。本工作不仅为提高材料的荧光性能提供了新的策略，而且赋予了材料新的功能，从而拓宽了荧光材料的应用领域。

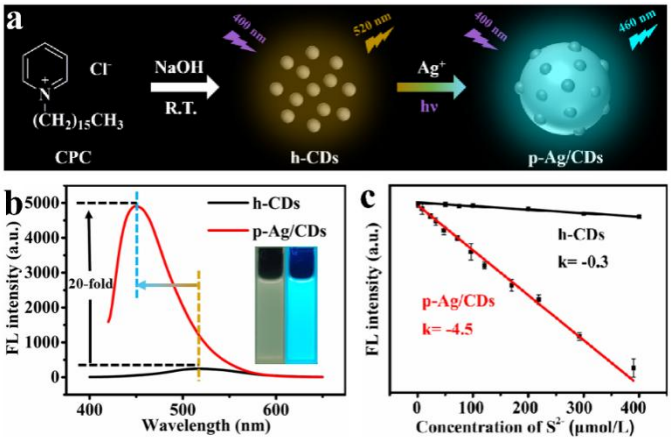


图 1（a）p-Ag/CDs 的合成路线示意图。（b）h-CDs 和 p-Ag/CDs 的荧光谱图。插图：h-CDs（左）和 p-Ag/CDs（右）溶液在 365 nm 紫外光照射下的照片。（c）h-CDs 和 p-Ag/CDs 对 S^{2-}（2.5~400 μM）的线性响应。

关键字 银/碳点，荧光，硫离子，检测

参考文献

1. L. Jiang, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 132, 10072-10077.
2. Wang Y, et al. *Chinese Chem. Lett.*, **2024**, 35,108277.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

无机离子对氮掺杂碳量子点荧光淬灭机制的研究

张普敦*、董锡鹏，齐红霞，李婉晴，陈雪
北京化工大学

碳量子点（CQDs）是 2004 年发现的一种粒径小于 10 nm 的 0 维碳纳米颗粒，其合成简单、荧光亮度高、水分散性和光稳定性好、无毒、生物相容性好，并且具有很高的化学惰性。通过改变制备条件和原料，可以获得性能各异、用途不同的 CQDs[1-4]，因此在很多领域都有非常好的应用前景。荧光淬灭是碳量子点（CQDs）的一种常见现象，并被用来检测各种化合物。由于 CQDs 的合成路径多种多样，原料来源广泛，获得的 CQDs 内部和表面结构也有较大差异，导致目前有各种不同的荧光淬灭机理被提出，让研究者无所适从，很有种“盲人摸象”的感觉。本工作中，我们用柠檬酸和乙二胺作为前驱体合成了一种具有荧光量子效率高达 44%的蓝色发光氮掺杂碳量子点（N-CQDs），并系统研究了各种无机离子对这种 N-CQDs 荧光的淬灭行为。我们发现，只有那些具有氧化性的无机离子（包括 Fe3+, MnO4-, Cr2O72-, CrO42-, ClO-, BrO3-, BrO3-+Br-和 S2O82-等）才能显著地淬灭荧光。进一步通过对每个反应体系的紫外-可见光谱、荧光寿命谱、电子自旋共振谱、zeta 电位谱以及 X 射线光电子能谱等进行系统分析，提出了一种无机离子对 N-CQDs 的氧化还原淬灭机制。此外，我们还发现，当不同离子的 UV-vis 吸收谱与 N-CQDs 的激发和/或发射谱有重叠时，内滤效应（IFE）也会发生。不过我们经过计算可以知道，各种无机离子的 IFE 效应对 N-CQDs 荧光淬灭率的贡献最多不超过 20%，因此仅起辅助淬灭作用，起主导荧光淬灭作用的依然是氧化还原效应。本工作有助于人们深刻理解 CQDs 在化学传感领域中的应用。

关键字 氮掺杂碳量子点（N-CQDs）；荧光淬灭；无机离子；氧化还原淬灭；内滤效应

参考文献

[1] H. X. Qi, Z. Z. Zhai, X. P. Dong, P. D. Zhang, Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc., **2022**, 279,121456.
[2] Z. Z. Zhai, X. P. Dong, H. X. Qi, R. T. Tao, P. D. Zhang, ACS Appl. Bio. Mater., **2023**, 6 (9), 3395–3405.
[3] X. P. Dong, H. X. Qi, Z. Z. Zhai, W. Q. Li, P. D. Zhang, Microchem. J., **2024**, 197, 109854.
[4] X. P. Dong, W. Q. Li, X. Chen, E. Zhuo, Z. Z. Zhai, H. X. Qi, P. D. Zhang, Adv. Opt. Mater., revised.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

基于可编程框架核酸的单分子生物感知

张宏陆*、樊春海
上海交通大学

在单分子水平研究生命，可对基因、蛋白质等分子的结构信息、构象变化、相互作用等过程进行实时、动态感知，实现精准生物分析和疾病诊断。框架核酸技术利用 DNA 自组装来构建具有精准框架的核酸结构，在单分子生物分析方面具有独特的优势：核酸分子卓越的可编程性和识别能力，可精确设计构建特定结构和力学性质的框架材料；感知探针分子的价态和排布可精准调控；与动态自组装方法结合，可实现动态感知和智能分析。本报告主要内容是通过构建可编程性的框架核酸结构，结合原子力显微镜、光镊等单分子工具，实现了多种遗传疾病长片段基因的高精度、高特异性

单倍型基因分型，为发展基因诊断技术提供了新思路；设计和构建力学传感探针，发展了具有超高时空分辨率的单分子操控和分析系统，对钙结合蛋白折叠过程进行实时动态观测和操控，捕获到了之前方法所无法分辨的“隐藏”中间态。

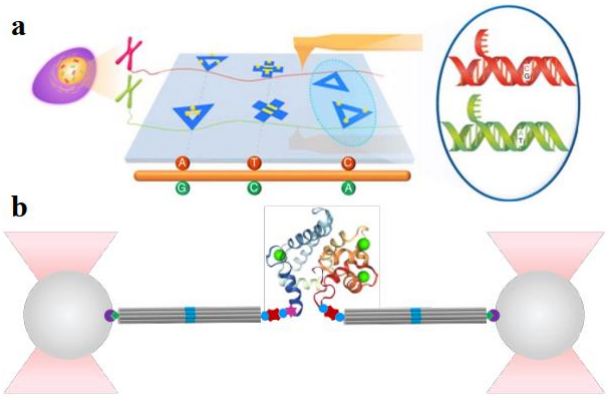


Fig. 1 DNA self-assembly technology enabled single-molecule analysis of genomic variations (a) and protein folding (b).

关键字 单分子分析；框架核酸；蛋白；光镊

参考文献

[1] H. X. Qi, Z. Z. Zhai, X. P. Dong, P. D. Zhang, Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc., **2022**, 279,121456.
[2] Z. Z. Zhai, X. P. Dong, H. X. Qi, R. T. Tao, P. D. Zhang, ACS Appl. Bio. Mater., **2023**, 6 (9), 3395–3405.
[3] X. P. Dong, H. X. Qi, Z. Z. Zhai, W. Q. Li, P. D. Zhang, Microchem. J., **2024**, 197, 109854.
[4] X. P. Dong, W. Q. Li, X. Chen, E. Zhuo, Z. Z. Zhai, H. X. Qi, P. D. Zhang, Adv. Opt. Mater., revised.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

限域单分子巯基化学反应的精准测量与调控

刘威[1]、杨超男[1]、张吉昌[1]、刘昊天[1]、龙亿涛[1]、应佚伦*[1,2]
1. 南京大学化学化工学院
2. 南京大学化学和生物医药创新研究院

生物分子限域的单分子化学反应是其执行生物学功能的重要途径，具有接近 100%的电荷转移效率与反应选择性。解析蛋白质限域单分子化学反应动态，有望揭示生物分子限域环境与反应效率之间的“构-效”关系，指导精准化学合成体系设计。然而，在蛋白质限域环境下原位测量单个分子动态仍然是亟待解决的挑战。纳米孔道单分子电化学测量是获得单个分子物理及化学信息最直接和最有效的手段之一[1]，其关键在于构建与生物分子反应空间相匹配的限域反应环境和精准的单分子测量界面，将单个分子的化学反应过程转化为可测量的时序性电信号。基于此，我们设计了半胱氨酸突变的 Aerolysin 纳米孔道，实时测量了其与巯基多肽反应物的共价结合和解离过程的动力学，提出了纳米孔道内单分子反应的“四态”动力学分析测量模型，建立了单分子化学反应速率的外场调控新方法[2,3]，解析了限域氧气介导下的二硫键氧化断裂新路径[4]。在此基础上，提出了“边合成边测量”的异聚体纳米孔道制备新策略[5]，运用高时间分辨的纳米孔道单分子电化学测量技术，通过实时测量一系列马来酰亚胺反应物与 Aerolysin 纳米孔道内壁巯基残基的单分子 Micheal 加成反应进程，原位监测了异聚体蛋白质纳米孔道的合成过程，并成功识别出具有相同修饰基团数量的位置异构体。结合外电场智能调控技术，操控了每一步共价修饰反应进程，在单分子水平上精准合成了化学计量比、区域及亚基构象可控的异聚体蛋白质纳米孔道，并进一步指导并实现了异聚体纳米孔道的规模化制备，首次获得了纳米孔道单分子反应产物的冷冻电镜证据，解析了孔道内部异源亚基的高分辨结构。利用该异聚体纳米孔道内横向非对称亲疏水立体识别域，在单分子水平上精准识别与定量测量系列多肽的对映异构体和非对应异构体，识别精度大于 95%。

关键字 生物纳米孔道，纳米孔道电化学测量，单分子化学反应，巯基化学反应，异聚体纳米孔道

参考文献

1. Y.-L. Ying, Z.-L. Hu, S. Zhang, Y. Qing, A. Fragasso, G. Maglia, A. Meller, H. Bayley, Y.-T. Long, *Nat. Nanotechnol.*, **2022**, 17, 1136-1146.
2. W. Liu, Z-L. Yang, C-N. Yang, Y-T. Long, Y-L. Ying, *Chem. Sci.* **2022**, 13, 4109-4115.
3. C-N. Yang, W. Liu, H-T. Liu, J-C. Zhang, Y-L. Ying, Y-T. Long, *Faraday Discuss.* **2024**, DOI:10.1039/D4FD00133H.
4. W. Liu, C-N. Yang, Z-L. Yang, R-J. Yu, Y-T. Long, Y-L. Ying, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, e202304023.
5. W. Liu, Q. Zhu, C-N. Yang, Y-H. Fu, J-C. Zhang, M-Y. Li, K-L. Xin, J. Ma, M. Winterhalter, Y-L. Ying, Y-T. Long, *Nat. Nanotechnol.* 2024, 10.1038/s41565-024-01721-2.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

DNA 编码金属纳米簇的性质调控与应用

任江涛*、汪尔康
中国科学院长春应用化学研究所

纳米材料以其优良的发光、催化等性能，以及卓越的稳定性与易合成特性，在生物分析和纳米医疗领域获得广泛关注。各种生物分子作为保护剂已用于纳米材料的合成，其中，脱氧核糖核酸（DNA）以其结构、长度和结合亲和力的可调性，为纳米材料形貌和性质的调控提供了更多可能。人们基于 DNA 结构、DNA-金属离子和 DNA-纳米材料相互作用开发了多种多样的 DNA 编码纳米材料[1]。金属纳米簇是一类尺寸在亚纳米范围的金属纳米材料，具有高比表面与量子效应等特点，以及突出的光学、催化性质。以 DNA 为模板合成的金属纳米簇是一类重要的 DNA 编码纳米材料，人们可以通过改变 DNA 模板的结构和序列来调节其性质并实现应用[2]。据此，我们从 DNA 银纳米簇（DNA-AgNCs）的荧光共振能量转移出发，以分子夹 DNA 为模板，制备了一种具有双重荧光发射特性的 DNA-AgNCs；结合 DNA 分子识别反应，控制其双波长荧光发生此消彼长的强度变化；运用该新型银纳米簇作为通用型双信号输出生成器，构建了多种具有相反功能的伴生逻辑门以及扩展型级联逻辑线路[3]。纳米催化剂固有催化活性不可控的弊端，是纳米探针及药物产生副作用的重要原因之一。因此，我们系统探究了如何利用 DNA 分子反应操控纳米簇的催化活性，围绕 DNA-AgNCs、DNA 铜纳米簇等 DNA 金属纳米簇，揭示了一系列不同长度和种类的 DNA 对纳米簇催化活性的影响规律，更重要的是利用 DNA 结构变化实现了对纳米簇催化活性的响应性与可逆性调控[4]。另外，我们基于该响应性催化调节机制，不仅设计了多样分子逻辑运算线路，而且通过偶联 DNA 适配体，构建了新型疾病标志物变构纳米探针，实现多种重要疾病生物标志物（如心肌肌钙蛋白 I）的灵敏、选择性分析[5]。研究成果有望对未来开发更多用于精准检测与治疗的纳米探针及药物产生重要的指导与借鉴意义。

关键字 DNA，金属纳米簇，荧光，催化，生物标志物

参考文献

1. Y. Guo, J. Ren, E. Wang, Analysis & Sensing **2023**, 3, e202200067.
2. F. Yin, J. Ren, E. Wang, Chemistry **2023**, 5, 2418-2440.
3. M. Lv, W. Zhou, D. Fan, Y. Guo, X. Zhu, J. Ren, E. Wang, Advanced Materials **2020**, 32, 1908480.
4. Y. Guo, M. Lv, J. Ren, E. Wang, Small **2021**, 17, e2006553.
5. Y. Guo, J. Ren, E. Wang, Nano Today **2022**, 44, 101476.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

用于分子运输的可逆开关 DNA 仿生纳米通道的构建

吕诚*
同济大学

生物膜通道为离子和分子通过细胞膜提供了一个可控的通道，在活细胞的传感、信号、通讯和分子运输过程中起着重要的作用[1]。离子通过这些门控通道的可逆打开，进行有序的受控交换，严格调节细胞的分化、成熟、活化和抑制等各种生理功能。因此，离子跨膜运输的精确循环调控在疾病治疗、组织工程和细胞仿生学中具有重要的技术意义。在我们前期工作中，设计合成了一种可以自主插入磷脂双分子层的开放型 DNA 纳米孔结构。该 DNA 纳米孔具有较小的中空尺寸（约 2 nm）及在细胞质膜较短的停留窗口，使得该人工纳米通道在实现神经元调控的同时最大程度的保持了细胞的活性[2,3]。然而，生物离子通道的复杂结构限制了各种基于化学（药物）和物理（电刺激）的调控方案的靶向精度和干预效率，难以实现循环控制的通道激活和离子转运。因此，精确的门控操作将推动人工仿生纳米通道成为天然离子通道的更可控的替代品，为精确控制离子运输的细胞调节提供可能。

基于此我们提出了一种外场调控可逆开放的仿生 DNA 纳米通道，在活细胞体系实现多次离子跨膜运输。该仿生纳米通道由具有温度响应可逆开放的 DNA 纳米通道和金铁异质结纳米颗粒构建而成。利用金铁异质结纳米颗粒优异的光热转换效率，可在 808 nm 的激光照射下，使局部温度在 5 分钟内上升到 45℃，从而实现 DNA 纳米通道的可控开放。此外，在停止激光照射后，DNA 纳米通道可恢复到关闭状态，并可以被激活重新打开。基于此，在金铁异质结纳米颗粒的介导下，可实现外加激光对 DNA 纳米通道实时可逆地开放，从而实现 DRG 神经元中多重精确的离子传输调节。该策略有望拓宽神经细胞生理调节的视野，并为神经系统疾病提供新的治疗方法。

关键字 分子运输、可逆开关、DNA 仿生纳米通道

参考文献

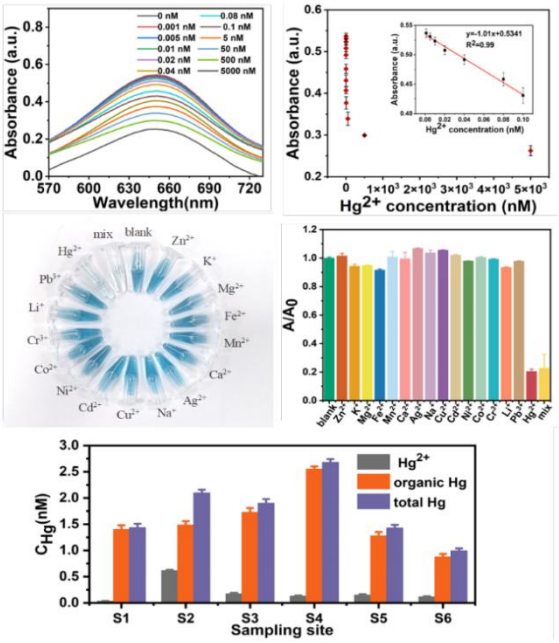
1. Lv, C.; Li, Y.; Zhang, M.; Cheng, Y.;* Han, D.;* Tan, W.* *Nano lett.* **2023**, 23: 1167.
2. Lv, C.; Gu, X.; Li, H.; Zhao, Y.; Yang, D.; Yu, W.;* Han, D.;* Li, J.; Tan, W.* *ACS Nano* **2020**, 14: 14616.
3. Li, Y.; Chen, X.; Lv, C.;* Cheng, Y.* *Front. Chem.* **2023**, 11: 1148699.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

超分子纳米材料应用于汞形态分析方法研究

张帆*[1]、郭恬语[1]、栾天罡[1,2,3]
1. 广东工业大学
2. 五邑大学
3. 中山大学

监测汞的各种形态分布特征对于理解其生物地球化学循环特性和评估健康风险至关重要。传统分析方法如原子吸收光谱法（CVAAS）、电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）或液相色谱-电感耦合等离子体质谱（LC-ICP-MS）复杂、成本高、不适合快速分析，还对汞有严重的记忆效应，但它们具有优异的灵敏度和较低的检测限，并且能够准确分析和区分汞的不同形态。针对传统汞检测方法的局限性，同时为了满足高通量环境样本检测便捷、快速、准确等需求，我们开发了一种快速、准确且极其灵敏的汞及总汞比色检测方法。该方法以一类高致密的铂纳米粒子组装体（Pt nanoparticles assemblies, PNAs）为基础，利用其强大的类过氧化物酶活性和对 Hg2+的特异亲和力，在 0.001-5000 nM Hg2+范围内实现对汞离子的准确检测，检测限为 0.0006 nM（相当于 0.12 ng/L），且仅需三分钟即可获得分析结果。这些 PNAs 纳米酶形成的介孔纳米球，其多孔结构不仅保护了催化活性中心，还促进了底物的结合，从而提高比色响应的灵敏度。此外，单位面积内高致密的铂纳米颗粒聚集后改善了汞银齐化（Pt-Hg）相互作用，加速了显色底物的颜色变化过程。在适当的样本预处理后，这种分析方法还能够量化样本中总汞的含量，其准确度可与传统 ICP-MS 相媲美。鉴于 PNAs 的比色方法能够准确测量 Hg2+和总汞，我们不仅使用河流、人工湖水、污染水体、土壤浸出液进行了该方法的确证分析，还在河流流域的六个不同样本进行了 Hg2+和总汞的评估，分析了这一河段中 Hg2+和有机汞的环境分布特征。总体而言，这种使用 PNAs 的比色法是一种极其灵敏的汞检测技术，非常适合 Hg2+和总汞的快速、准确分析，为环境样本中多类型汞的分析提供了一种创新策略。



关键字 铂纳米材料，超分子化学，汞，超灵敏

参考文献

[1] Aragay, G.; Pons, J.; Merkoci, A., Recent trends in macro-, micro-, and nanomaterial-based tools and strategies for heavy-metal detection. Chem Rev **2011**, 111 (5), 3433-3458.

[2] Mishra, P.; Lee, J.; Kumar, D.; Louro, R. O.; Costa, N.; Pathania, D.; Kumar, S.; Lee, J.; Singh, L., Engineered Nanoenzymes with Multifunctional Properties for Next-Generation Biological and Environmental Applications. Advanced Functional Materials **2021**, 32 (8), 2108650 .

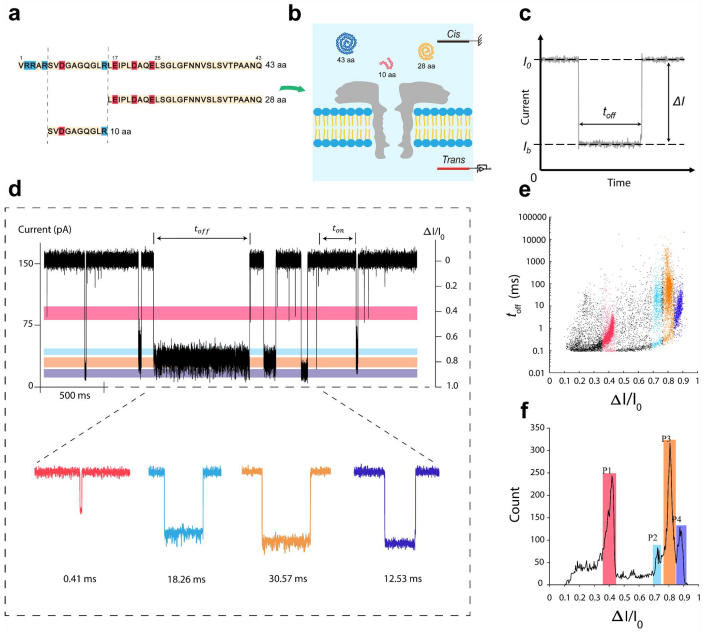
[3] Zhang, F.; Feng, L.; Jia, C.; Wu, Y.; Liu, J.; Shuai, X.; Cao, Z., Mixed-valence Pt(0)/Pt2+ nanoassemblies as high-Z radiosensitizers and metalloimmune regulators for potent radiotherapy of breast cancer. Nano Today **2023**, 48, 101708.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

基于生物纳米孔传感技术的无序蛋白折叠行为分析

汪海燕*
东南大学

生物体内的内在无序蛋白区域（Intrinsically disordered proteins, IDPRs）在细胞内转录调控和促进基因表达时的信号转导过程中起着关键作用。其结构常表现为无序且构象变化灵活的状态，目前针对蛋白质结构研究的技术很难对其生物学结构进行表征。因此，我们采用野生型（WT）气溶素纳米孔单分子传感技术用于实时识别和监测含有 IDPR 的长肽的蛋白质结构。该传感器通过区分识别三条链长长度高达 43 个氨基酸的无序肽的特征阻断电流和持续时间分析无序肽在纳米孔限域空间内的结构，并通过孔-蛋白结合常数分析表明，纳米孔与多肽表面氨基酸的作用对于研究多肽的易位行为非常重要。研究结果表面在纳米孔限域空间环境下，单个分子由于体积排阻作用产生的阻断电流变化并不是唯一调节因素，测试的分子对象与孔内壁的作用机制也同样重要。此外，我们能够通过分析不同长度 IDPR 的在通过纳米孔时产生的亚电流信号研究多肽分子在纳米孔内结构改变的动力学机理。上述研究结果扩宽现有纳米孔传感技术对蛋白质构象变化的理解，同时也对 IDPRs 在生物体跨膜运输的动力学机制提供新的作用模型，并有望为相关生物药物的研究提供理论研究依据。



关键字 纳米孔技术，蛋白折叠

参考文献

1.G. Huang, K. Willems, M. Soskine, C. Wloka, G. Maglia, *Nat. Commun.* **2017**, 8, 935.
2. M.-Y. Li, Y.-Q. Wang, Y.-L. Ying, Y.-T. Long, *Chem. Sci.* **2019**, 10, 10400-10404.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

电化学发光多重免疫分析

郭维亮*
南京师范大学

电化学发光（Electrochemiluminescence，简称 ECL）是由电化学反应触发的化学发光现象，当前最先进的体外诊断技术之一。基于钌/铱金属配合物分子探针，发展了电位调制的多色电化学发光分析技术，实现了同一样本中与宫颈癌相关的 3 种蛋白标志物的同时检测。其次，提出了基于导电金微球的邻近电化学发光反应机制，将发光探针的翻转频率提高了 20 倍，从而提高了检测灵敏度。基于此，邻近电化学发光突破了短寿命自由基扩散距离受限的问题，实现了粒径分辨的电化学发光多重免疫分析，并完成了与急性心肌梗死相关的 4 种标志物的同时检测。

关键字 电化学发光，纳米分析，免疫分析，疾病标志物检测

参考文献

[1] Guo, W.; Ding, H.; Zhou, P.; Wang, Y.; Su, B. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59: 6745.
[2] Guo, W.; Zhou, P.; Sun, L.; Ding, H.; Su, B. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60: 2089.
[3] Guo, W.; Ding, H.; Gu, C.; Liu, Y.; Jiang, X.; Su, B.; Shao, Y. *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, 140: 15904.
[4] Yang, X.; Xu, Y.; Huang, X.; Hang, J.; Guo, W.; Dai, Z.; *Anal. Chem.*, **2023**, 95: 4543.
[5] Yang, X.; Hang, J.; Qu, W.; Wang, Y.; Wang, L.; Zhou, P.; Ding, H.; Su, B.; Lei, J.; Guo, W.; Dai, Z. *J. Am. Chem. Soc.*, **2023**, 145: 16026.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：报告

通用型微区关联成像技术

刘金超*、杨贤锋、尹诗衡、崔洁、梁庆优、杨辑、王安迪
华南理工大学分析测试中心

电子显微镜是研究材料在微观尺度物性信息的必备工具。现阶段电镜仅能提供有限的形貌、元素组成和结构信息。如需获取材料的力学性能、电磁学性能以及光谱学等方面的全方位微区信息，则要借助于仪器联用技术。现售商品化的仪器联用设备成套售卖，价格昂贵；此外，仅能在特定品牌型号的设备间实现联用，通用性不足，功能扩展受限，不能充分利用现有的存量设备。本论文研发了基于电镜的低成本、高效率、通用型的微区同位测试系统[1]，创造性地实现了在扫描电镜（SEM）、原子力显微镜（AFM）、透射电镜（TEM）、显微激光拉曼光谱仪以及红外线显微镜等存量科学仪器上微区同位测试。该系统通用性好，不依赖于特定品牌、指定型号的仪器；定位精度较现有商品化仪器提高了近一个数量级，达到在±700 nm；工作效率高，可在半小时内实现纳米尺度样品的寻回。该系统盘活了存量设备，促进了仪器共享，提高了仪器的利用率。该技术已成功应用在放疗用医疗器械聚己内酯体膜材料的快速无损光谱检测方法开发[2]、复合光催化剂成分与原位光响应性能表征[3]、锂离子电池正极材料衰减机制研究等领域[4]，在科研和工程领域展现出极大的应用前景。

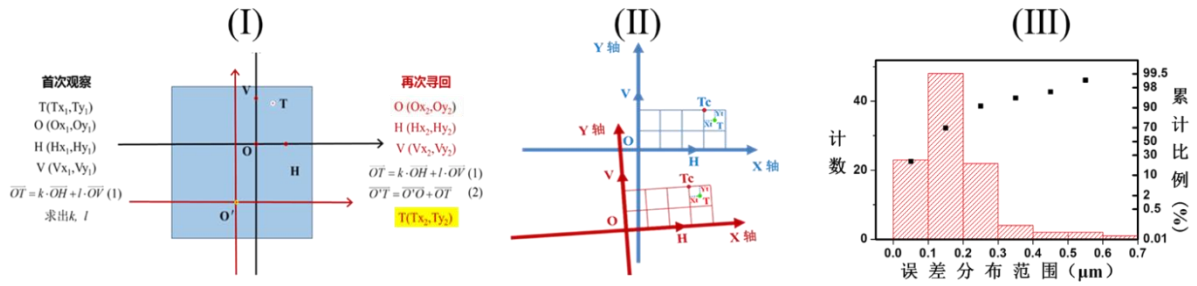


图1 通用型微区关联成像系统的定位原理示意图及定位误差分布[1]
（I）坐标转换算法示意图；（II）两步定位法原理示意图；（III）关联成像系统定位误差分布

关键字 微区关联成像；电镜；高精度定位；材料表征

参考文献

[1] Liu J. Yang Y., Yin s., et al., Scanning, **2021**, 5550311: 1-10.
[2] Dong J., Liu J., Liang Q., et al., Global Challenges, **2020**, 4: 1-5.
[3] Su H., Lou H., Yang D., et al., Green Chemistry, **2022**,24:2027-2035.
[4] Liu J., Yin S., Song S., et al., Energy & Fuels, **2023**, 37: 9662-9671.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

光子上转换超分子组装体及其无背景生物传感

冯红娟[1]、曾乐[1]、李嘉尧[1]、林雯月[1]、齐放[1]、姜林汗[1]、张铭宇[1]、赵阳[2]、黄灵*[1]、庞代文[1]
1. 南开大学
2. 天津医科大学第二医院

生物标志物的检测对于疾病早期诊断、进程监测和预后评估至关重要。然而，具有背景荧光、复杂成分和异质性的生物样品为可靠的生物传感造成了巨大挑战。本研究报道了一种通过天然蛋白质和 TTA-UC 的多层级组装形成的近红外光子上转换超分子组装体（PUSA），成功实现了对前列腺癌（PCa）患者尿肌氨酸的无背景生物传感。这种 PUSA 具有尺寸小、耐氧、生物安全性高、且易于冻干储存的优势。光谱分析表明，湮灭剂的立体位阻抑制了其在 PUSA 内的分子堆积，这对于维持 PUSA 的水分散性和提高 PUSA 的上转换性能至关重要。在 NIR-LED 照射下，这种纳米探针可以与肌氨酸氧化酶结合，对前列腺癌（PCa）患者的尿液样本中肌氨酸浓度进行定性及定量测定。本研究将光子上转换材料推向了新的发展阶段，加速了上转换生物传感在临床诊断中的进展。

关键字 三重态-三重态湮灭上转换；超分子组装体；无背景生物传感

参考文献

1. X. Liu, C. H. Yan, J. A. Capobianco, Photon upconversion nano-materials. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, 44, 1299-1301.
2. M. Adamaki, V. Zoumpourlis, Prostate Cancer Biomarkers: From diagnosis to prognosis and precision-guided therapeutics. *Pharma-col. Ther.* **2021**, 228, 107932.
3. L. Huang, T. Le, K. Huang, G. Han, Enzymatic enhancing of triplet-triplet anihilation upconversion by breaking oxygen quenching for background-free biological sensing. *Nat. Commun.* **2021**, 12 (1), 1898.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

原位自组装多肽调控细胞凋亡

贾帆、罗天、庄金燕、郭潘、江云宝、方宁、姜涛*
厦门大学

多肽超分子自组装纳米材料作为一种有广阔应用前景的载体，因其负载量高、可修饰性强及生物相容性好等优势目前正广泛应用于分析传感和药物递送等领域。目前已有研究将细胞膜受体的特异性配体修饰于多肽自组装纳米片或纳米水凝胶表面，初步探讨并分析特定的膜受体分布对某一细胞行为的影响。此外，DNA 和蛋白分子组装领域也有研究通过控制膜表面受体有规则的聚集从而调控细胞行为。目前，针对膜外表面受体聚集的研究中，其受体聚集度和配体标记的灵活性有待提高。基于前期工作中设计的多肽，我们构建了一种组分间距可调节的一维多肽纳米纤维，其具有较强可编程性和高配体负载量。我们将标记了凋亡配体的多肽与癌细胞特异性结合，并进一步在细胞表面原位自组装微米级的多肽纤维，调控膜外表面受体有序多聚，从而促进癌细胞凋亡。我们利用细胞表面原位自组装多肽纳米纤维，研究并分析了不同凋亡受体间距对 MDA-MB-231 细胞凋亡的诱导效果，为研究细胞表面受体可控多聚和分析受体聚集对细胞行为影响提供了数据支持和研究思路。

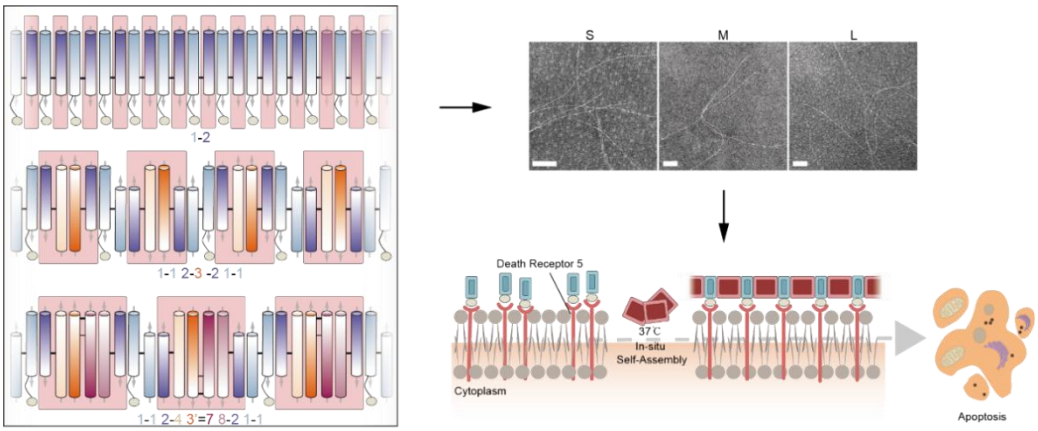


图 1. 三种不同配体间距的多肽纳米纤维及其诱导凋亡示意图

关键字 多肽，原位自组装，细胞凋亡

参考文献

1. Y. Leng, H. P. Wei, Z. P. Zhang, Y. F. Zhou, J. Y. Deng, Z. Q. Cui, D. Men, X. Y. You, Z. N. Yu, M. Luo, X. E. Zhang, *Angew. Chem. Int. Ed*., **2010**, 49, 7243–7246.
2. V. A. Kumar, N. L. Taylor, S. Y. Shi, N. C. Wickremasinghe, R. N. D'Souza, J. D. Hartgerink, *Biomaterials*., **2015**, 52, 71–78.
3. A. Battigelli, J. H. Kim, D. C.Dehigaspitiya, C. Proulx, E. J. Robertson, D. J. Nurray, B. Rad, K. Kirshenbaum, R. N. Zuckermann, *ACS Nano.*, **2018**, 12, 2455−2465.
4. E. T. Pashuck, B. J. R. Duchet, C. S. Hansel, S. A. Maynard, L. W. Chow, and M. M. Stevens, *ACS Nano.*, **2016**, 10, 11096−11104
5. K. X. Zhang, R. J. Deng, Y. P. Sun, L Zhang, J. H. Li, *Chem. Sci.*, **2017**, 8, 7098-7105

6. A. J. Ben-Sasson, J. L. Watson, W. Sheffler, M. C. Johnson, A. Bittleston, L.Somasundaram, J. Decarreau, F, Jiao, J. J. Chen, J. Mela, A. A. Drabek, S. M. Jarrett, S. C. Blaklow, C. F. Kaminski, G. L. Hura, J. J. D. Yoreo, J. M. Kollman, H. Ruohola-Baker, E. Derivery, D. Baker, *Nature*., **2021**, 589, 468–473.
7. D. Cheng, X. Chen, W. J. Zhang, P, Guo, W. H. Xue, J. F. Xia, S. Y. Wu, J. H. Shi, D. Ma, X. B. Zuo, B. Jiang, S. W. Li, N. S. Xia, Y. B. Jiang, V. P. Conticello, and T. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62, e202303684.
8. P. Guo, D. Wang, S. M. Zhang, D. Cheng, S. Y. Wu, X. B. Zuo, Y. B. Jiang, T. Jiang, *Nano Lett.*, **2023**, 23, 6386-6392.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

限域诱导多肽在生物表界面原位可控自组装及其在癌症信号检测中的应用研究

王迪、陈小勇、吴易旻、罗天、卢俊杰、刘一民、尤振龙、方宁、江云宝、姜涛*
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

多肽超分子材料凭借其优越的自组装特性、生物相容性和生物可降解性，在组织工程和生物医学领域具有广泛的应用前景。尤其是针对特定位点的自组装策略在靶向治疗、组织修复和生物传感中的应用变得愈发重要。传统的特定位点多肽自组装方式通常依赖于光响应、热响应等外部刺激或 pH 响应、酶响应等内在条件，这些方法虽然能引发自组装过程，但对组装效率和稳定性存在一定的限制。为了克服这些问题，我们开发了一种基于液-液相分离机制的自组装实现多肽在特定位点自组装的新策略。通过调控局部环境中的多肽浓度，我们实现了在无需复杂外界刺激的条件下进行高效的自组装，这种方法显著降低了组装过程中的能量依赖性，展现了良好的环境适应性和组装效率。我们利用此策略成功将课题组前期已报道的多肽纤维条带定点自组装在金纳米颗粒表面。特别是在将金纳米颗粒修饰上特异性 T7 配体后，该系统能够选择性地靶向 MDA-MB-231 癌细胞，在多种细胞共存环境中，通过局部多肽浓度控制，在低于 CAC（临界组装浓度）的条件下，实现了纤维状多肽超分子条带的精确原位组装。该方法为多细胞体系中靶向特定细胞或受体提供了一种全新的自组装策略，能够在低浓度条件下实现高效的分子组装和信号放大，并为未来的疾病标志物检测和智能药物输送系统开发提供全新思路。

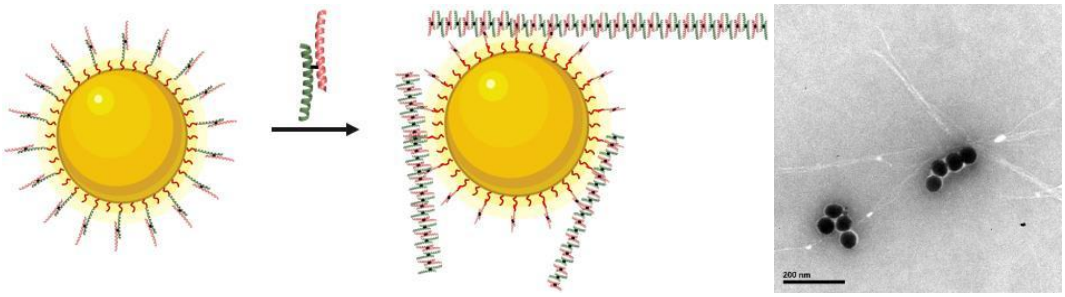


图 1. AuNPs 诱导多肽生长示意图及 TEM 图

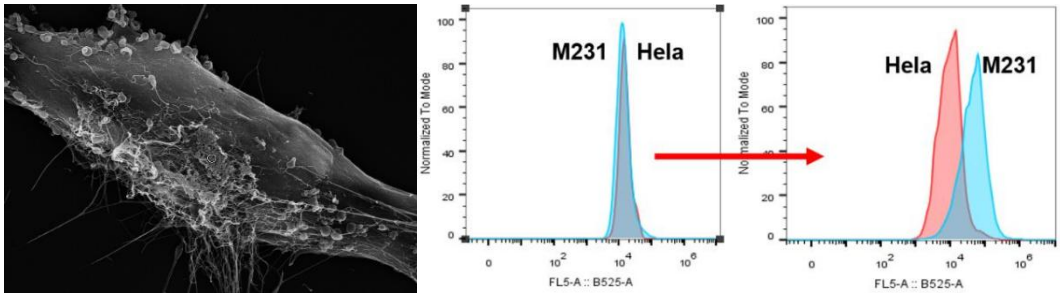


图 2. AuNPs 诱导多肽在 MDA-MB-231 细胞生长 SEM 图及多细胞混合流式图

关键字 *限域 多肽 自组装*

参考文献

1. Mu, R.; Zhu, D.; Abdulmalik, S.; Wijekoon, S.; Wei, G.; Kumbar, S. G., Stimuli-responsive

peptide assemblies: Design, self-assembly, modulation, and biomedical applications. Bioactive Materials **2024,** 35, 181-207.

2. Liu, F.-H.; Cong, Y.; Qi, G.-B.; Ji, L.; Qiao, Z.-Y.; Wang, H., Near-Infrared Laser-Driven in Situ Self- Assembly as a General Strategy for Deep Tumor Therapy. Nano Letters **2018,** 18 (10), 6577-6584.

3. Mozhdehi, D.; Luginbuhl, K. M.; Simon, J. R.; Dzuricky, M.; Berger, R.; Varol, H. S.; Huang, F. C.; Buehne, K. L.; Mayne, N. R.; Weitzhandler, I.; Bonn, M.; Parekh, S. H.; Chilkoti, A., Genetically encoded lipid–polypeptide hybrid biomaterials that exhibit temperature-triggered hierarchical self-assembly. Nature Chemistry **2018,** 10 (5), 496-505.

4. Qian, Y.; Wang, W.; Wang, Z.; Jia, X.; Han, Q.; Rostami, I.; Wang, Y.; Hu, Z., pH-Triggered Peptide Self- Assembly for Targeting Imaging and Therapy toward Angiogenesis with Enhanced Signals. ACS Applied Materials & Interfaces **2018,** 10 (9), 7871-7881.

5. Hu, L.; Li, Y.; Lin, X.; Huo, Y.; Zhang, H.; Wang, H., Structure-Based Programming of Supramolecular Assemblies in Living Cells for Selective Cancer Cell Inhibition. Angewandte Chemie International Edition **2021,** 60 (40), 21807-21816.

6. Yuan, C.; Li, Q.; Xing, R.; Li, J.; Yan, X., Peptide self-assembly through liquid-liquid phase separation. Chem **2023,** 9 (9), 2425-2445.

7. Cheng, D.; Chen, X.; Zhang, W.; Guo, P.; Xue, W.; Xia, J.; Wu, S.; Shi, J.; Ma, D.; Zuo, X.; Jiang, B.; Li, S.; Xia, N.; Jiang, Y.; Conticello, V. P.; Jiang, T., Design of Multicomponent Peptide Fibrils with Ordered and Programmable Compositional Patterns. Angewandte Chemie International Edition **2023,** 62 (22), e202303684.

8. Guo, P.; Wang, D.; Zhang, S.; Cheng, D.; Wu, S.; Zuo, X.; Jiang, Y.-B.; Jiang, T., Reassembly of Peptide Nanofibrils on Live Cell Surfaces Promotes Cell–Cell Interactions. Nano Letters **2023,** 23 (14), 6386-6392.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

双孔串联电阻脉冲传感器用于纳米颗粒多维特征分析

高瑞雪、田思玉、陈颖、张欣伟、黄卫华*
武汉大学

纳米颗粒存在广泛，实现纳米颗粒的检测与表征对于疾病诊断、能源催化及环境监测等领域具有重要意义[1-2]。发展单颗粒分析方法有助于揭示颗粒间的个体差异，为分析纳米颗粒的结构与功能关系提供更为有力的工具。近年来，纳米孔传感技术因其灵敏度高、无需标记且快速实时等优点，已发展成为单实体检测的重要工具[3]。但目前用于颗粒分析的纳米孔传感器多停留在对颗粒尺寸及浓度的测定，而缺乏对颗粒表面性质的识别能力，且单一的孔道传感界面往往难以将性质相似的颗粒物准确区分[4]。为此，我们构建了一种可用于纳米颗粒多维特征分析的双孔串联电阻脉冲传感器（SNRPS）。将不同探针分子功能化的两类玻璃纳米孔借助显微操作进行嵌套组装，成功实现了传感器的双传感界面集成。以聚苯乙烯纳米颗粒为检测模型对传感器的性能进行验证。结果表明，该传感器不仅可以对纳米颗粒的数量和尺寸进行快速分析。更重要的是，通过分析双孔孔道传感界面探针分子与纳米颗粒表面的相互作用所引起的颗粒过孔行为变化，SNRPS 还能够实现对不同表面生化性质颗粒的快速区分，且其区分效果显著优于常规的功能化单孔。此外，通过调整双孔内壁的带电情况，SNNRP 还可对不同表面电性的纳米颗粒进行识别和区分。该方法为单颗粒多维特征分析提供了新的思路，同时也为基于细胞器、细胞外囊泡及病毒颗粒的相关疾病诊断提供了一个有前景的工具。

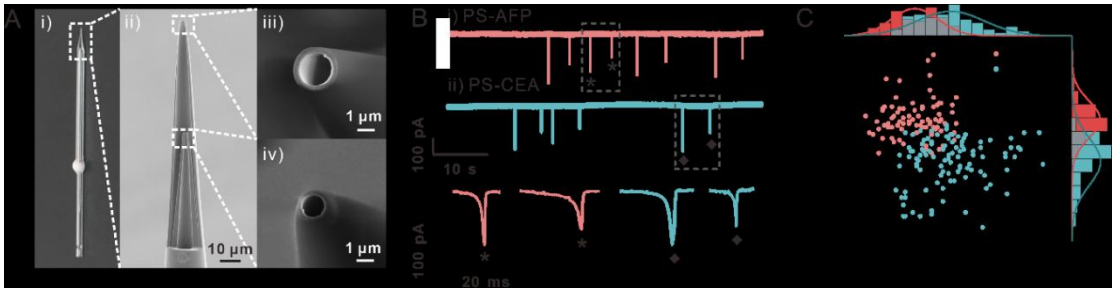


Fig. 1 (A) Image and SEM images of the SNRPS. (B) Current-time traces for the presence of PS-AFP (i) and PS-CEA (ii) in 10 mM PBST at -0.10 V using the antibody-modified-SNRPS and enlarged view of representative signals in the current−time traces. (C) The dwell time distribution of two kinds of particles (PS-AFP, red; PS-CEA, green) translocating through the inner-pore and outer-pore.

关键字 玻璃纳米管、单颗粒分析、孔道修饰

参考文献

1. J. Zhou, A.I. Chizhik, S. Chu, D. Jin, Nature, **2020**, 579, 41–50.
2. G. Bordanaba-Florit, F. Royo, S. Kruglik, J. Falcón-Pérez, Nat. Protoc., **2021**, 16, 3163–3185.
3. R. Yu, Y. Ying, R. Gao, Y. Long, Angew. Chem. Int. Ed., **2019**, 58, 3706-3714.
4. A. Arima, I. Harlisa, T. Yoshida, M. Tsutsui, M. Tanaka, K. Yokota, W. Tonomura, J. Yasuda, M. Taniguchi, T. Washio, M. Okochi, T. Kawai, J. Am. Chem. Soc., **2018**, 140, 16834−16841.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

双模式免疫层析疾病标志物检测新方法的研究

舒韵*、沈瑾、王影、胡效亚
扬州大学

近几十年来，侧流免疫层析条带（LFICS）由于其简单、快速、灵敏度和特异性等优势，越来越多地被用作现场即时诊断（POCT）的工具。为了满足不同的检测要求，开发了不同信号标记的试纸条，之前大部分 LFICS 工作侧重于单信号快速读出检测物，为了提高准确性，越来越多的研究工作更倾向于 LFICS 多信号的读出。

首先，我们基于高稳定性钙钛矿纳米晶体（$CsPbBr_3$/OPA+OAm NCs）与金纳米颗粒开发了一种 LFICS，通过读出荧光与比色双信号快速检测肿瘤标志物癌胚抗原（CEA）。由于金纳米颗粒紫外吸收峰与钙钛矿纳米晶体的发射峰在 520 nm 处重叠产生荧光内滤效应，钙钛矿的绿色荧光被猝灭作为荧光信号进行定量分析，而日光下金纳米颗粒的比色信号可用于定性分析，从而实现人血清中 CEA 快速灵敏检测。

其次，我们开发了一种基于铂-镍双金属纳米颗粒负载的金属有机框架复合材料（PCN-224-PtNi）的免疫层析（LFIA）法，用于检测血清中的 H-IgG。带正电荷的 PCN-224-PtNi 通过静电吸附与抗体（Ab）偶联形成免疫探针（PCN-224-PtNi-Ab）。待测试样中的 H-IgG 与检测线（T line）上固定的 H-IgG 会竞争免疫探针上 Ab 的结合位点，未与 H-IgG 结合的免疫探针会被固定的 H-IgG 捕获，在 T line 上显示出有色条带。加入 TMB 后，由于 PCN-224-PtNi 具有类氧化酶活性从而催化氧化 TMB，使得有色条带颜色加深。通过肉眼进行半定量检测，也可通过软件分析有色条带从而实现定量检测。

总之，该双模式免疫层析方法具有高灵敏度、低检出限、高选择性和环境储存稳定性等优势，在今后的 POCT 诊断中具有良好的应用前景。

关键字 钙钛矿；MOF；免疫层析；即时诊断

参考文献

1. Ye, Q.; Yuan, E.; Shen, J.; Ye, M.; Xu, Q.; Hu, X.; Shu, Y.*; Pang, H.*, *Adv. Sci*. **2023, 10(31):** e2304149.
2. Shu, Y.*; Wang, Y.; Guan, J.; Ji, Z.; Xu, Q.*; Hu, X., *Anal. Chem.* **2022, 94 (13)**: 5415-5424.
3. Shu, Y.*; Ye, Q.; Dai, T.; Guan, J.; Ji, Z.; Xu, Q.; Hu, X*. *J. Hazard. Mater.* **2022, 430**: 128360.
4. Wang, Y.; Shen, J.; Song, R. L.; Xu, Q.; Hu, X. Y.; Shu, Y., *Talanta,* **2024,** *266*, 125017.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

滚环扩增技术在生物传感领域的应用研究进展

赖祥德*
海南医科大学第二附属医院

目的

滚环扩增（RCA）是一种高效的恒温扩增技术，近年来受到人们的广泛关注和研究，目前已应用于生物传感、分化化学、材料科学、食品科学、植物学、农学等领域。本文旨在综述 RCA 技术的基本原理及其类型和不同信号输出方式的 RCA 生物传感器的特点，探讨 RCA 技术未来的发展趋势并提出展望。

方法

本综述通过查阅近年来关于 RCA 生物传感器的相关文献，分析其结构特征、反应条件及实际应用。文献来源包括学术期刊、综述文章和科研报告，重点关注不同信号输出方式的 RCA 生物传感器的研究进展。同时，深入分析 RCA 生物传感器的优势和存在的缺点，探讨 RCA 生物传感器的潜在应用领域和功能。

结果

RCA 是一种高效扩增、操作简单的恒温扩增技术，通过一个环状 DNA 分子便能扩增出一条具有无数个串联重复序列的长链 DNA，扩增方式包括线性方式扩增、多引物方式扩增和指数方式扩增，对标靶的扩增效果可达 10^5 至 10^9 倍。基于各种生物材料和化学物质的 RCA 生物传感器蓬勃发展，衍生出了一系列以不同的输出信号检测靶标物质的 RCA 生物传感检测平台，包括荧光 RCA 生物传感器、比色 RCA 生物传感器、化学发光 RCA 生物传感器、电化学 RCA 生物传感器、光磁 RCA 生物传感器、表面增强拉曼散射 RCA 生物传感器等，目前已广泛应用于生物传感、分化化学、材料科学、食品科学、植物学、农学等领域。

结论

RCA 技术作为目前研究最为广泛的恒温扩增技术之一，具有引物数量少、设计简单、扩增反应效率高、可达到识别一个碱基突变的特异性等优点，其应用价值仍不可小觑，RCA 必将在未来核酸技术中不断发展，得到更加广泛的应用。

关键字 滚环扩增，生物传感，恒温扩增技术

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于 DNAzyme 功能化玻璃纳米管的单细胞内锌离子定量分析

韩雪琪[1,2]、郭文婷[1,2]、王勇[1,2]、刘霖[1,2]、任江涛[1]、汪尔康*[1,2]
1. 中国科学院长春应用化学研究所
2. 中国科学技术大学

玻璃纳米孔具有纳米级的孔径尖端、易于制造和修饰，扎入细胞时不会对细胞造成损伤，因此在单细胞检测上展现出巨大优势。锌是一种参与维持细胞氧化还原平衡的元素，在各种组织和器官中锌离子发挥着重要作用。DNAzyme 是一类在金属离子协同存在时具有催化功能的 DNA 分子，对金属离子具有极高的选择性。在本研究中我们构造了一种 DNAzyme 功能化的玻璃纳米管，基于 DNAzyme 与 Zn^{2+}的特异性相互作用，检测了单细胞内的 Zn^{2+}。我们首先通过硅烷化反应将羧基修饰在纳米管内壁，之后通过酰胺化反应修饰上底物链，最后通过双链杂交将 DNAzyme 功能化的金纳米粒子（DNAzyme-AuNPs）固定在玻璃纳米管壁上。DNAzyme-AuNPs 携带的大量负电荷会使得玻璃纳米管展现出较强的负整流效应，当锌离子存在时，底物链发生裂解，导致 DNAzyme-AuNPs 脱落，从而大大降低纳米管内壁的负电荷密度并且减弱负整流效应，实现传感信号的输出。我们将构造的功能化纳米管传感器用于单细胞水平上的 Zn^{2+}检测。实验结果表明，DNAzyme 功能化的纳米管传感器表现出在 HeLa 细胞中对 Zn^{2+}的显著定量分析能力，能有效反映 HeLa 细胞中 Zn^{2+}在电刺激凋亡过程中的浓度变化。本研究成果有助于人们在分子水平上揭示细胞凋亡的病理生理过程，从而为细胞凋亡的生物学研究提供有利的工具与手段。

关键字 玻璃纳米管，单细胞检测，锌离子

参考文献

1. X. Guan, H. Li, L. Chen, G. Qi and Y. Jin, ACS Sens., **2023**, 8, 427-442.
2. S. A. Dabravolski, N. K. Sadykhov, A. G. Kartuesov, E. E. Borisov, V. N. Sukhorukov and A. N. Orekhov, Int. J. Mol. Sci., **2022**, 23, 6890.
3. R. R. Breaker, G. F. Joyce, Chem. Biol., **1994**, 1, 223-229.
4. E. M. McConnell, I. Cozma, Q. B. Mou, J. D. Brennan, Y. Lu and Y. F. Li, Chem. Soc. Rev., **2021**, 50, 8954-8994.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

精准构建双界面纳米孔道电化学屏蔽干扰物

田思玉、高瑞雪、闫瑜、张欣伟、黄卫华*
武汉大学 化学与分子科学学院

电化学传感器常用于复杂体系的检测（如活体或细胞检测），这些复杂体系中往往存在大量电化学活性生物分子对目标物的检测产生干扰[1]，因此电化学传感器选择性的提高仍是一个长期的目标。然而，目前用于提高电化学传感器选择性的策略大多局限于对单一传感界面的材料修饰[2,3]，难以区分不同来源的同一种物质。特别是对于基于氧化酶型电化学传感器的胞内检测[4]，传感器难以区分酶催化反应得到的 H_2O_2 和胞内产生的 H_2O_2，从而导致胞内的 H_2O_2 对酶底物的检测产生不可避免的干扰。本文首次提出了具有抗干扰功能的双界面纳米孔道电极（DINE），也称作电化学法拉第笼。通过不对称气相沉积和刻蚀技术在石英纳米孔道内壁分别构建了相互独立的传感界面和抗干扰界面。以抗坏血酸（AA）和尿酸（UA）为模型，结合实验和有限元模拟评估了该 DINE 的抗干扰性能。此外，对 DINE 的传感界面进一步修饰葡萄糖氧化酶（GOD）构建 GOD-DINE，可以在 H_2O_2 和葡萄糖共存的情况下，高效清除 H_2O_2，从而实现葡萄糖的准确检测。单细胞检测结果表明，GOD-DINE 能够实现氧化应激状态下胞内葡萄糖的准确检测，验证了药物联合治疗可以下调葡萄糖水平来逆转耐药性提高治疗效果。

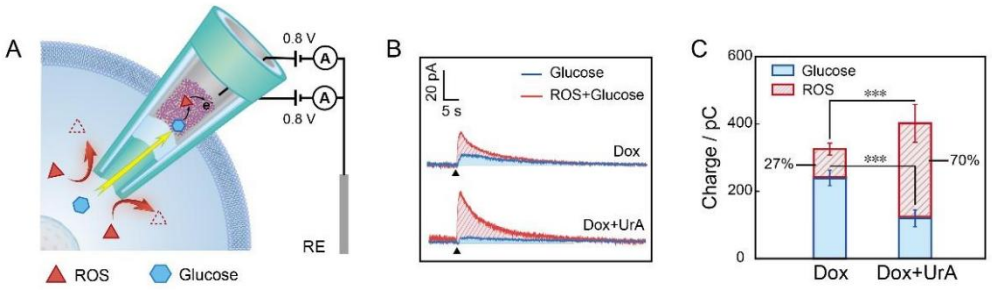


Fig. 1 (A) Schematic diagram describing the glucose detection using the GOD-DINE. (B) Amperometric traces and (C) the corresponding charge statistics (n=6, ***P<0.001) obtained from MCF-7/ADR cells under different incubation conditions. The triangles indicate the moment of the GOD-DINE insertion.

关键字 纳米孔道 双界面构建 抗干扰 葡萄糖检测

参考文献

1. T Tsai, C Guo, H Han, Y Li, Y Huang, C Li, J Chen. Analyst, **2012**, 137, 2813–2820.
2. H Hou, Y Jin, H Wei, W Ji, Y Xue, J Hu, M Zhang, Y Jiang, L Mao. Angew. Chem. Int. Ed., **2020**, 59, 18996–19000.
3. S Li, A Zhu, T Zhu, J Zhang, Y Tian. Anal. Chem., **2017**, 89, 6656–6662.
4. X Yang, F Zhang, W Wu, Y Tang, Y Liu, C Amatore, W Huang. Angew. Chem. Int. Ed., **2021**, 133, 15937- 15942

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

功能化玻璃纳米孔原位单细胞检测纳米塑料诱导的氧化应激过程中的羟基自由基

刘霖[1,2]、王勇[1,2]、韩雪琪[1,2]、任江涛[1]、汪尔康*[1,2]
1. 中国科学院长春应用化学研究所
2. 中国科学技术大学

自 19 世纪 50 年代塑料制品问世以来，其在我们的生活和生产方面被广泛使用，然而，由于废弃塑料制品的随意丢弃和微生物有限的降解能力，已造成严重的环境污染。塑料在自然环境下会逐渐被化学、热、光解或机械降解为塑料颗粒，对环境和生态系统安全与稳定造成了巨大威胁。纳米塑料是一类由塑料降解而来尺寸在 1 nm-1 μm 之间[1]的聚合物，包括聚乙烯（PE）、聚苯乙烯（PS）、聚氯乙烯（PVC）、聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）、聚酰胺（PA）、聚丙烯（PP）和聚羟基丁酸酯（PHB）等。这些纳米塑料广泛存在于人类生活的环境中[2]，通过呼吸和饮食而进入人体[3]。研究证实，纳米塑料在被人体摄入后会被积累在细胞内，可严重破坏细胞稳态与诱发肌体损伤[4]，而因活性氧（ROS）积累而产生的氧化应激在该过程中发挥重要作用[5]。

为此，我们构建了一种基于功能化玻璃纳米孔的电化学传感平台，用于原位检测在纳米塑料刺激下人类正常肝脏细胞（HL7702）中活性氧羟基自由基（·OH）的浓度变化。首先我们在玻璃纳米管的内壁上化学还原沉积一层金膜，然后通过金硫键修饰疏水性的正己硫醇。·OH 能够将正己硫醇从管壁切割下来，引发纳米管内表面疏水性减弱，导致离子电流降低，整流比变小，进而实现·OH 的特异性检测。随后我们将该功能化纳米管用于了 HL7702 细胞在纳米塑料刺激下单细胞内·OH 的含量变化。实验结果表明纳米塑料可诱发细胞内活性氧过量表达。本工作提供了一种研究纳米塑料细胞毒性的有效方法。

关键字 玻璃纳米孔、单细胞检测、活性氧

参考文献

1. J.G.B Derraik, *Marine Pollution Bulletin*, **2002**, 44, 842-852.
2. S. Moon, L. M. A. Martin, S. Kim, Q. Zhang, R. Zhang, W. Xu, *Science Advances*, **2024**, 10, eadh1675.
3. S. Liu, L. Li, S. Liu, L. Liu, X. Xiao, D. Zhou, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **2024**, 173, 117648.
4. L. Liu, K. X. Xu, B. W. Zhang, Q. Zhang and W. Jiang, *Science of the Total Environment*, **2021**, 779, 146523.
5. A. Das, *Science of The Total Environment*, **2023**, 895, 165076.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

碳点的表面分析、理化性质调控及生物医学应用

刘翠*、夏之宁
重庆大学

碳点是一类以碳元素为主体的零维纳米材料，因其理化性质独特、生物相容性良好、制造成本低等优点而受到广泛研究关注，并在传感、成像、生物催化、光电器件等领域展现出广阔的应用前景。我们课题组一直围绕碳点领域的关键科学问题开展研究工作，包括碳点表面结构的准确分析、荧光及催化性质的有效调控，以及其在体内成像和炎症疾病治疗中的应用。通过开发高效的表面修饰方法，实现了碳点表面基团的深度分析与精准调控，发现碳点的羰基和π-体系强烈耦合决定其表面态能级结构，最终影响荧光发射波长。同时，碳点表面与π-体系共轭的基团决定着其激发态跃迁类型，控制着荧光量子产率。同时，我们发现碳点具有类超氧化物歧化酶（SOD）活性，将其与荧光特性相结合将为疾病治疗提供新思路。但由于大多数碳点的催化活性较低，或荧光性质较差，难以实现荧光、催化双功能独特性质的协同应用。为此，我们对碳点 SOD 纳米酶的构-效关系进行了深入研究，阐明了参与催化过程的关键结构，并解析了催化反应的详细物理化学过程。基于此，成功设计了具有超过天然 SOD 酶活性的碳点并将其应用于小鼠缺血性中风的有效治疗中。我们证实羰基是催化反应的主导因素，但会显著降低其荧光性能。为了平衡碳点的荧光性质与 SOD 酶活性，通过氮掺杂技术，在碳点表面构建能够代替羰基发挥电子传递功能的含氮基团，成功制备了兼具高 SOD 酶活性和良好荧光性质的氮掺杂碳点纳米酶。此外，基于碳点与金属离子的相互作用，制备了一系列金属掺杂碳点，实现了荧光与生物催化性质的同时提升。研究结果显示，碳点可以靶向并保护氧化损伤的细胞，能够作为广谱型抗氧化剂应用于脑/肾缺血再灌注损伤、急性肺损伤、特应性皮炎等氧化应激相关疾病的治疗。上述工作有助于深入理解碳点的结构特点，阐明了其结构与荧光、生物催化活性之间的依赖关系，为碳点在生物医学领域中的应用奠定了重要基础。

关键字 碳点，催化机制，发光机理，体内成像，炎症治疗

参考文献

1. W. Gao, J. He, L. Chen, X. Meng, Y. Ma, L. Cheng, K. Tu, X. Gao, C. Liu, M. Zhang, K. Fan, D.-W. Pang, X. Yan, Nat. Commun. **2023**, 14, 160.
2. C. Liu, G. Xiao, M. Yang, B. Zou, Z.-L. Zhang, D.-W. Pang, Angew. Chem. Int. Ed. **2018**, 57, 1893-1897.
3. C. Liu, W. Fan, W.-X. Cheng, Y. Gu, Y. Chen, W. Zhou, X.-F. Yu, M. Chen, M. Zhu, K. Fan, Q.-Y. Luo, Adv. Funct. Mater. **2023**, 33, 2213856.
4. C. Liu, L. Bao, B. Tang, J.-Y. Zhao, Z.-L. Zhang, L.-H. Xiong, J. Hu, L.-L. Wu, D.-W. Pang, Small **2016**, 12, 4702-4706.
5. Y. Zhang, W. Gao, Y. Ma, L. Cheng, L. Zhang, Q. Liu, J. Chen, Y. Zhao, K. Tu, M. Zhang, C. Liu, Nano Today **2023**, 49, 101768.
8. J.-L. Zhao, Q.-Y. Luo, Q. Ruan, K. Chen, C. Liu, C. Redshaw, Z. Jin, Chemistry of Materials **2021**, 33, 6091-6098.
9. Y. Ma, J. Zhao, L. Cheng, C. Li, X. Yan, Z. Deng, Y. Zhang, J. Liang, C. Liu, M. Zhang, Carbon **2023**, 204, 526-537.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

便携式纸基分子印迹传感器快速可视化检测烟草花叶病毒

龚行*[1]、阳茜[2]、蔡昌群[2]
1. 云南师范大学
2. 湘潭大学

快速检测植物病毒对于确保农业生产安全至关重要[1,2]。在本研究中，开发了一种基于纸的分子印迹聚合物(MIPs)传感器，用于烟草花叶病毒(TMV)的可视化检测。两种类型的分子印迹聚合物被合成为人工抗体:纸基分子印迹聚合物和单克隆分子印迹聚合物。我们采用夹心策略实现了 TMV 的高灵敏度(检测限为 4.8 fM)和高选择性(印迹因子为 5.25)检测。这种传感器不需要昂贵和不稳定的生物制剂，如天然抗体和 DNA，能够在 10-20 分钟内进行肉眼可见的检测。总体而言，纸质 MIPs 传感器的成本仅为 0.623 元 (小尺寸仅需 0.07 元)，并且易于储存和切割。该方法为 TMV 等植物病毒的现场快速检测提供了一种新方法，对确保农业生产安全至关重要。

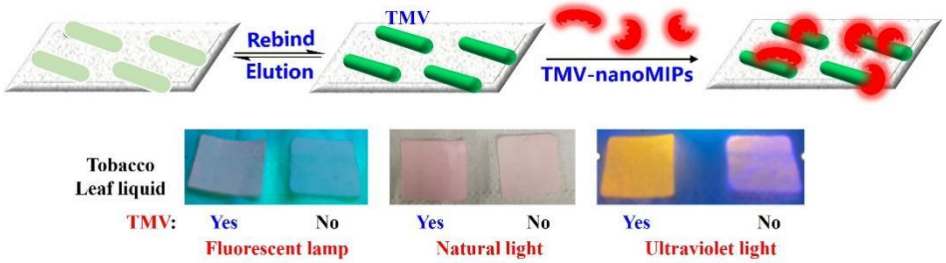


Fig. 1 Construction principle.

关键字 Visual detection; tobacco mosaic virus; MIPs; paper-based sensor

参考文献

1. F. Zhu, M.-Y. Cao, Q.-P. Zhang, R. Mohan, J. Schar, M. Mitchell, H. Chen, F. Liu, D. Wang, Z. Q. Fu, *J. Adv. Res.*, **2024**, 57, 15.
2. Q. Zhang, Z. Wen, X. Zhang, J. She, X. Wang, Z. Gao, R. Wang, X. Zhao, Z. Su, Z. Li, D. Li, X. Wang, Y. Zhang, *Plant Cell*, **2023**, 35, 3127–3151.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

一种设计三发光中心全色域可调发光 Ln-MOFs 的通用策略及其在污染物识别中的应用

熊丽[1,2]、赵利霞*[1,2]、王亚韡[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学中丹学院

镧系金属-有机骨架（Ln-MOFs）是一种优异的发光材料，由于其高度多孔的结构、大的比表面积、以及独特的主客体相互作用，Ln-MOFs 在污染物识别与检测中得到了广泛的应用。然而，目前的 Ln-MOFs 大部分都是单发射或双发射，发光性质难以调节，且与分析物之间的作用位点单一，难以提供多维的荧光信息，因而在污染物识别、信息加密等领域的应用受到局限。基于此，本工作提出一种通用型设计策略，制备同时具有红、绿、蓝三发光中心的 Ln-MOFs 材料，并将其应用于硝基呋喃和四环素类抗生素的识别。在 Ln-MOFs 中，镧系离子的发光一般通过配体敏化而产生，其结果要么是配体发光（未发生敏化），要么是镧系离子发光（发生敏化），很难在单一 Ln-MOF 中同时获得红、绿、蓝三发光中心。本工作则通过引入另一种能级水平较高的镧系离子（Gd^{3+}），作为配体能量传递的壁垒，成功在 Eu/Tb-MOF 中保留了配体的蓝光发射，从而得到同时具有红（Eu^{3+}）、绿（Tb^{3+}）、蓝（配体）三发光中心的 Ln-MOF 材料，并进一步通过改变 Eu/Tb/Gd 三种金属离子的比例，实现了全色域范围内发光颜色的调节。该策略成功在多个 Ln-MOFs 中得到了应用，包括 Eu/Tb/Gd-TCA、Eu/Tb/Gd-BDC-NH_2、Eu/Tb/Gd-BDC-OH，证明了该策略的通用性。随后，两种不同比例的 Eu/Tb/Gd-TCA（$Gd_{0.8}Tb_{0.03}Eu_{0.17}$-TCA 和 $Gd_{0.9}Tb_{0.09}Eu_{0.01}$-TCA）被用来构建传感器阵列，该传感器阵列共有 5 个信号输出通道，利用不同信号通道与抗生素之间的差异性相互作用，结合 LDA 分析，识别了 4 种常见的硝基呋喃和 4 种四环素类抗生素。结果表明，在不同浓度水平下，该传感器阵列都能成功识别以上 8 种抗生素，且在实际水样中得到了成功应用。

关键字 镧系金属-有机骨架；三发光中心；可调发光；抗生素识别；通用策略

参考文献

[1] X. Wang, Y. Jiang, A. Tissot, C. Serre, Luminescent sensing platforms based on lanthanide metal-organic frameworks: Current strategies and perspectives, Coordination Chemistry Reviews, 497 (2023) 215454.
[2] H.Q. Yin, X.B. Yin, Multi-emission from single metal-organic frameworks under single excitation, Small, 18 (2021).

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于 Fe-CDs 的类过氧化物纳米酶比色传感器阵列用于茶叶品质的鉴定

郑颜盈[1,2]、张娅[2]、杨晓霖[2]、袁亚利*[1,2]
1. 广西电磁化学功能物质重点实验室
2. 桂林理工大学

茶具有抗氧化、抗衰老等功能，茶多酚的检测对于茶叶种类的鉴定和质量控制具有重要意义。本文合成了一种具有类过氧化物酶活性的 Fe-CDs 纳米酶，Fe-CDs 通过氧化 3,3',5,5'-四甲基联苯胺（TMB）生成蓝色氧化产物（ox-TMB），而不同茶多酚的加入会导致 Fe-CDs 的类过氧化物酶活性不同程度的增强，并对此进行了反应机理的探究。本文以反应产生的颜色差异作为比色传感通道，利用 PCA 方法对产生的比色信号进行聚类判别，以此构建了一种检测多酚单体的比色传感器阵列。成功通过模式识别方法区分不同种类、浓度和比例的五种茶多酚。基于此方法，还进一步实现了对不同年份和种类茶叶的区分，进而精确鉴定更为复杂的茶叶饮品，为有效、快速地检测和鉴别茶叶品质提供了一种新的策略。

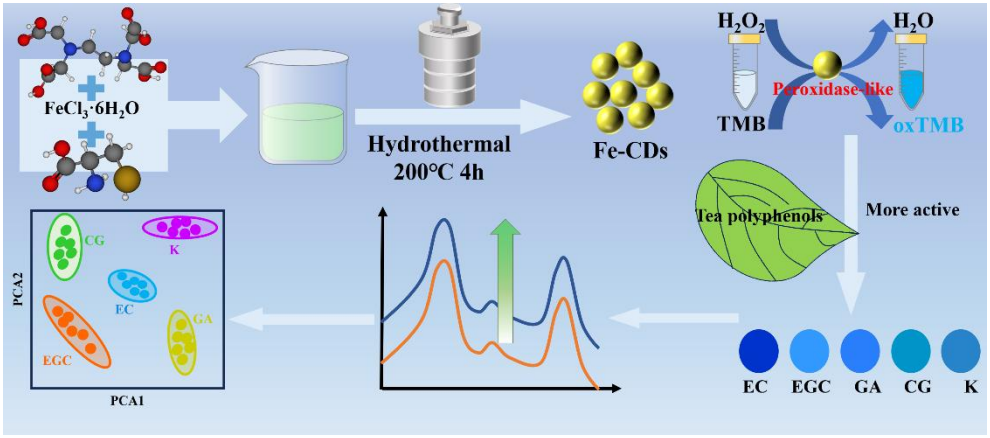


Fig. 1 Schematic illustration of sensor array based on Fe-CDs nanozyme with peroxidase activity for the identification of tea.

关键字 纳米酶；类过氧化物酶；比色传感器阵列；茶多酚

参考文献

1. Jing W, Yang Y, Shi Q. *Food Chem*. **2024**, 450: 139326.
2. Zhou X, Li L, Wang Y. *Anal Chem*. **2023**, 95(23): 8906-8913.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

纳米红外光谱系统在多层膜材料表征时的应用

李春晖*、马小婷
吉林大学

多层膜结构材料是近年来科学研究的重点，是高分子领域十分重要的研究课题。其中各层结构的化学组成是分析多层膜合成情况以及进一步研究其他性能的关键。所以，获取截面处各层的红外光谱便变得至关重要。然而，由于多层膜材料位置的特殊性，以及普通红外光谱测试时的局限性，包括对样品形态的要求以及传统红外光谱分辨率较低等问题。多层膜材料无法通过传统红外光谱仪获取各层结构的化学信息。纳米红外光谱系统（Atomic Force Microscope based Infrared，AFM-IR)是近年来新兴的对样品进行微区表征分析的仪器，可提供纳米水平的分辨能力。本文归纳整理了使用纳米红外扫描系统获取多层材料截面处红外信息的方法，包括测试前样品制备、样品形态选择；测试时信号峰选择、红外激发聚焦位置调整；测试后数据输出及分析处理等。为多层膜结构材料的化学组成研究提供全新的获取途径以及纳米红外光谱系统的应用开发出新的可能。

关键字 纳米红外光谱系统，多层膜结构

参考文献

1. Dazzi.A, Prater.CB, *Chemical Reviews*, **2017**,7,5146-5173.
2. Kurouski.D, Dazzi. A, Zenobi. R, Centrone. A, *Chemical Society Reviews*, **2020**,49,3315-3347.
3. Mathurin. J , Deniset-Besseau. A, Bazin. D, Dartois. E, Wagner. M, Dazzi. A, *Journal of Applied Physics*, **2022**,113,1.
4. Xiao. LF, Schultz. ZD, *Analytical Chemistry*, **2018**, 90, 440-458.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

自循环纳米体系通过多途径放大氧化应激增强肿瘤铁死亡

谢君雨、杨耿、刘霄凡、王维才、李雪梅*
临沂大学

铁死亡是近年来发现的一种新的程序性细胞死亡方式，铁死亡在抗肿瘤治疗上具有巨大的潜在优势。因此，我们首先合成了负载荧光染料 IR780 的 Cu^{2+}掺杂 ZIF-8，随后在其表面包裹单宁酸（TA）和 Fe^{3+}络合的金属-多酚网络构建了自循环纳米体系，通过多途径放大氧化应激实现肿瘤的持续性铁死亡。其治疗策略主要如下：（I）肿瘤细胞内过量的谷胱甘肽（GSH）将 Fe^{3+}还原为 Fe^{2+}，Fe^{2+}在微酸性条件下和肿瘤细胞内 H_2O_2 发生 Fenton 反应生成高活性的 ROS，触发细胞发生铁死亡；（II）酸性降解会将包封于核内的 IR780 释放出来，并在近红外光的照射下实现光热治疗（PTT）及产生 ROS，从而进一步增强细胞的铁死亡。（III）大量引入的 TA 可以将铁死亡过程中被氧化的 Fe^{3+}继续还原为 Fe^{2+}持续性诱导铁死的发生。（IV）Cu^{2+}可以进一步通过消耗肿瘤细胞内的 GSH 下调 GPX4 的表达，增强铁死亡。体外和体内研究结果均显示该纳米体系可以通过持续铁死亡实现高效的乳腺癌治疗，为铁死亡用于肿瘤的治疗提供了新的范式。

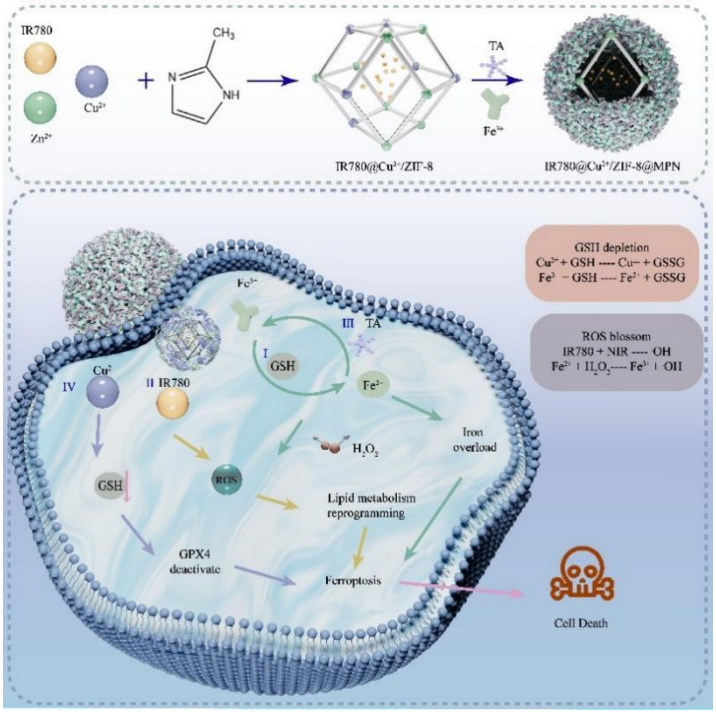


图 1 自循环纳米体系合成及其通过多途径放大氧化应激增强肿瘤铁死亡示意图

关键字 铁死亡；氧化应激; Fenton 反应；光热治疗；自循环纳米体系

参考文献

1. M. Jia, D. Zhang, C. Zhang, C. Li, *J. Nanobiotechnol.*,**2021**, 19 (1) 384.
2. J. Debnath, N. Gammoh, K.M. Ryan, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, **2023**, 24 (8)5, 60–575.
3. X. Wang, P. Hua, C. He, M. Chen, *Acta Pharm. Sin. B*, **2022,** 12 (9), 3567–3593

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

核酸介导的量子点动态组装体探针用于活细胞内 RNA 的成像分析

孙洁*
苏州大学

对活细胞和活体内肿瘤相关标志物小微 RNA（microRNA）进行灵敏准确地成像检测对于癌症的早期诊断和治疗具有重要意义。本工作设计了一种称为 UCNP-QDs-GNP 的多级卫星状纳米组装体探针，其中以具有近红外光（NIR）激发的上转换纳米颗粒（UCNP）作为核心，以具有宽吸收和高量子产率的量子点（QD）和强烈猝灭荧光的金纳米颗粒（GNP）作为卫星进行围绕，可以实现对小微 RNA 的精准成像和成像引导的癌症治疗。通过磷酸酯键-硫代磷酸酯键构成的嵌段 DNA 序列介导量子点的合成获得单一 DNA 价态的量子点，与 DNA 修饰的 GNP 和 UCNP 进行程序可控组装，产生初始荧光猝灭的具有特定多级结构的 UCNP-QD-GNP 纳米组装体探针。在识别小微 RNA-21 靶标的过程中，通过 DNA 的链取代反应，GNP 被程序化地催化解离，导致 QDs 和 UCNP 的荧光信号同时获得恢复和放大，从而实现对活细胞内小微 RNA-21 的灵敏成像和定量检测分析。此外，具有二硫醇基团的聚集诱导发光（AIE）光敏剂分子，在量子点的合成过程中作为表面配体分子，紧密结合在量子点表面，可以被量子点的发光进行高效地光敏化。因此，由 UCNP 纳米粒在近红外光激发后可以将能量高效地转移给量子点，进而敏化其表面聚集的 AIE 光敏剂，可以实现在深部肿瘤区域显著增强的成像引导的光动力治疗效果。这种 DNA 程序化组装与去组装策略有助于将近红外激发光转化为准确灵敏的成像信号和光动力活性，为恶性肿瘤的早期治疗提供了一条新的策略。



Fig. 1 A hierarchical UCNP-QDs-GNPs nanoprobe for catalytic microRNA imaging and image-guided cancer therapy

关键字 量子点；上转化纳米粒子；核酸放大循环反应；聚集诱导发光光敏剂；小微 RNA；近红外；

参考文献

[1] Sun, J.; Geng, J.; Tang, B.; He, X.; Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2315299. Doi: 10.1002/adfm.202315299

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

杂交链式反应辅助 COFs@PEI@Au NPs 传感器构建及其对 p53 基因的荧光-SERS 双模式检测

陈攀攀*[1,2]、袁丛政[2]、肖逸[2]、张丽颖[2]、都述虎[2]
1. 西南医科大学药学院，四川泸州，646000
2. 南京医科大学药学院，江苏南京，210000

癌症标志物在人体内丰度极低，其检测易受到复杂生物基质的影响。因此，癌症生物标志物的灵敏和准确分析仍然具有挑战性[1]。在本工作中，首先将金纳米粒子(Gold nanoparticles，Au NPs)包覆在聚乙烯亚胺(Polyethyleneimine，PEI)修饰的共价有机骨架(Covalent organic frameworks，COFs)表面，制备 COFs@PEI@Au NPs 复合体(简称为 C@P@A) (图 1A 和图 1B)，并将其用作荧光猝灭剂和 SERS 衬底。两种发夹 DNA (Hairpin DNA，H1 和 H2)用于参与目标物诱导的杂交链式反应(Hybridization chain reaction，HCR) H1-Cy5 和 H2-Cy5 通过π-π堆积、氢键和静电相互作用吸附在 C@P@A 表面[2,3]。吸附作用缩短 Cy5 与 C@P@A 之间的距离，从而产生强烈的荧光共振能量转移(Fluorescence resonance energy transfer，FRET)、局域表面等离子体共振(Localized surface plasmon resonance，LSPR)和电荷转移(Charge transfer，CT)，导致 Cy5 荧光“关闭”和 SERS“打开”。相反，在存在 p53 基因时，它触发 HCR 形成具有多个 Cy5 标记的长双链 DNA。这些长双链 DNA 不易吸附在 C@P@A 表面，增加 Cy5 和 C@P@A 之间的距离，并破坏了 FRET、LSPR 和 CT 效应，导致 Cy5 荧光“开启”和 SERS“关闭”(图 1C)。基于 C@P@A 对 H-Cy5 和双链 DNA 的不同吸附亲和力，构建了一种 HCR 辅助的 C@P@A 传感器，用于 p53 基因的荧光和 SERS 检测。得益于 HCR 的信号放大能力，荧光和 SERS 分析方法对 p53 基因的检测限分别低至 2.65 pM 和 6.72 pM，比非 HCR 辅助传感方法低约 1 个数量级。构建的传感器也可用于人血清和 Hela 细胞裂解物样本中 p53 基因的灵敏定量，回收率令人满意(92.2-106%)。本项工作为癌症标志物检测提供了一种新的方法，对开发癌症早期临床诊断传感器具有一定的指导意义。

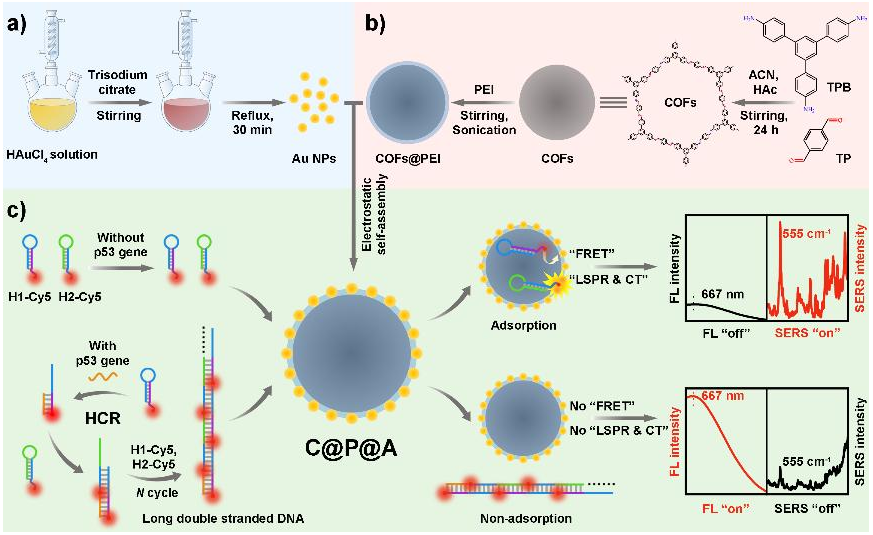


图 1 使用通过在 COFs@PEI 上组装 Au NPs 制备的 C@P@A 对 p53 基因的 HCR 辅助荧光-SERS 双模式检测原理示意图

关键字 共价有机框架，杂交链式反应，p53 基因，荧光，SERS

参考文献

1. D. Crosby, S. Bhatia, K. M. Brindle, L. M. Coussens, C. Dive, M. Emberton, S. Esener, R. C. Fitzgerald, S. S. Gambhir, P. Kuhn, T. R. Rebbeck, S. Balasubramanian, Science, **2022**, 375 (6586), eaay9040.
2. H. Y. He, D. W. Sun, H. B. Pu, Z. H. Wu, Talanta, **2023**, 253, 123962.
3. W. Li, C. X. Yang, X. P. Yan, Chem. Commun., **2017**, 53(83), 11469-11471.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于碳氟烷基链自组装的仿生催化体系的 ATP 传感研究

黄爱芳、沈江珊*
华侨大学

三磷酸腺苷(ATP)是一种高能化合物，可为生命体提供能量，在细胞代谢和生化反应中起到至关重要作用[1-3]。通常 ATP 是通过水解反应释放一个或两个磷酸基团来输出能量的，从而分别形成二磷酸腺苷(ADP)和单磷酸腺苷(AMP)[4]。ATP、ADP 和 AMP 的结构十分相似，因此，发展一种有效的光谱传感方法来检测区分 ATP、ADP 和 AMP 具有十分重要的研究意义。本课题组前期研究带有碳氟烷基链的 1,4,7-三氮杂环壬烷(TACN)·Zn^{2+}组装，发现其具有较低的临界聚集浓度(CAC)，且相对其全碳氢烷基链的对照化合物组装体而言，该类碳氟烷基链的组装体能够高效地催化磷酸酯 2-羟丙基-4-硝基苯基磷酸钠(HPNP)水解反应[5]。本研究在课题组上述发现的基础上，利用 ATP、ADP 和 AMP 分别带有 3、2 和 1 个阴电荷的性质，考虑这三者通过静电作用诱导碳氟烷基链的 C_8F_{17}-C_3H_6-TACN·Zn^{2+}组装可能存在显著的差异性，并且催化头 TACN·Zn^{2+}对 ATP、ADP 和 AMP 的亲和力不同，进一步合成了含有香豆素基团的磷酸酯 (7HC-P-E)底物，便于用荧光光谱监测 C_8F_{17}-C_3H_6-TACN·Zn^{2+}组装体催化其水解反应。由于诱导组装的差异性，以及底物 7HC-P-E 与之竞争和组装体上的催化头 TACN·Zn^{2+}结合，可发展新的光谱传感体系来实现 ATP、ADP 和 AMP 区分之目的。

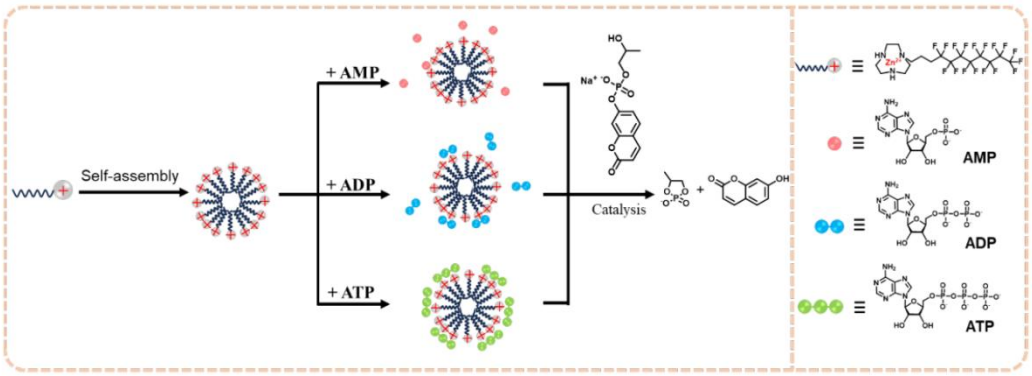


图 1.1 基于碳氟烷基链构建以 7HC-P-E 为底物的磷酸酯水解酶检测 ATP 的示意图

关键字 自组装；磷酸酯；临界聚集浓度；ATP 传感

参考文献

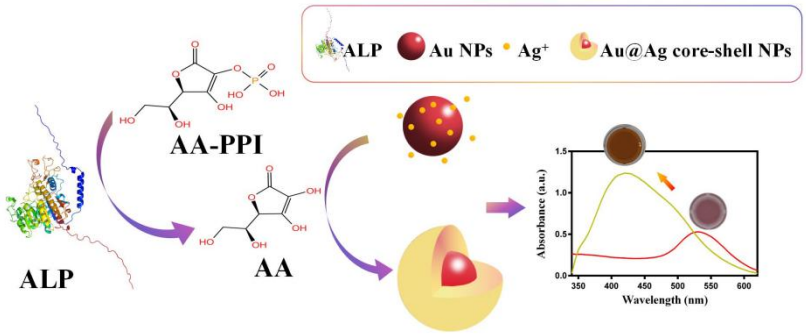
[1] L. Peng, J. Zhou, G. Liu, et al. Sensor. Actuat. B-Chem., **2020**, 320, 128164.
[2] W. Zhiming, T. Jing, L. Mengxuan, et al. Anal. Chem., **2023**, 95, 17533-17540.
[3] F. Xiyun, J. Yi, C. Peng, et al. ACS. Nano., **2016**, 10(1), 556-61.
[4] B. Rene, T. Camille, R Valentine, et al. Int. J. Mol. Sci., **2021**, 22(6), 2948-2948.
[5] L. Ning, G. Ping, L. HaiYan, et al. Chem. Eur. J., **2023**, 30(1), e202302669-e202302669.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于金纳米颗粒的碱性磷酸酶检测新方法的研究

李嘉伟*
重庆市老年疾病临床医学中心

碱性磷酸酶（ALP）是重要的骨转换生物标志物，在骨质疏松症临床诊断中具有重要作用，对其检测方法的探究具有重要临床意义。研究者成功构建了纳米金（Au NPs）/L-抗坏血酸-2-磷酸三钠盐（AA-PPI）体系对 ALP 进行检测。其利用 ALP 在碱性条件下除去磷酸基团的性能，将 AA-PPI 去磷酸化形成抗坏血酸（AA）,而 AA 能将 Au NPs 表面 Ag+原位还原成纳米银（Ag NPs）形成 Au@Ag 核壳结构，产生剧烈的紫外吸收光谱迁移和颜色变化，允许对 ALP 进行定量分析。利用透射电子显微镜分析体系与高低剂量 ALP 反应后的纳米颗粒，能发现纳米颗粒平均粒径显著增大，利用 EDS 对元素进行表征，确认 Au@Ag NPs 的形成。利用紫外可见光谱在 425 nm 处的吸收峰，对反应条件进行优化，得到 37℃下 ALP 与 AA-PPI 孵育时间为 15 min、Ag+添加量为 60 μM、Ag NPs 形成时间为 15 min。在最优条件下，利用紫外光谱仪对体系的检测能力进行评估（图 5A、B），该体系的线性检测范围为 10-200 U/L，理论检测下限(LOD)为 3.2123 U/L。该反应会产生显著的颜色变化，随着 Au@Ag NPs 表面纳米银壳的加厚，颜色变黄，利用智能手机拍照后分析红、绿、蓝三原色信号（RGB），该检测体系在 20-200 U/L 范围内的欧式距离呈现明显的线性 R2=0.9830，可以建立相应的裸眼检测方法，如：智能手机 APP 对该体系进行分析，脱离大型仪器的限制。



图：基于 Au NPs/AA PPI 的 ALP 检测体系示意图

关键字 金纳米颗粒；碱性磷酸酶；比色检测

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

常温常压下光催化纳米氧化锌产生水自由基阳离子

刘思敏[1,2]、龚轩[1,2]、朱腾高[1,2]、陈焕文*[1,2]
1. 江西中医药大学生命样品直接质谱分析研究室
2. 恶性肿瘤中医药诊疗与康复江西省重点实验室

近年来，水自由基阳离子（$H_2O^{+\cdot}$）已经在质谱分析、生命科学以及化学合成等方面发挥出重要作用。传统制备 $H_2O^{+\cdot}$需要在高真空、超低温的环境，装置复杂、耗能高、产率低并产生具有危害性副产物等问题。为此，我们提出利用光催化纳米材料产生的电子-空穴与纳米材料表面吸附的水分子发生氧化反应进而生成 $H_2O^{+\cdot}$的新方法。本研究，采用波长为 365nm 的紫外灯，照射纳米氧化锌（ZnO），制备了高活性的 $H_2O^{+\cdot}$。由于水自由基阳离子的寿命较短，实验利用 $H_2O^{+\cdot}$与氮气反应生成次硝酸（HNO）的机理对产生的水自由基阳离子进行检测，发现紫外光照射的实验组产生了显著高于无紫外光照射的对照组的 HNO。本研究提出了一种常温常压下制备 $H_2O^{+\cdot}$的新方法，该方法具有装置简单，绿色环保，成本低廉的特点，为 $H_2O^{+\cdot}$的研究和应用提供了新途径。

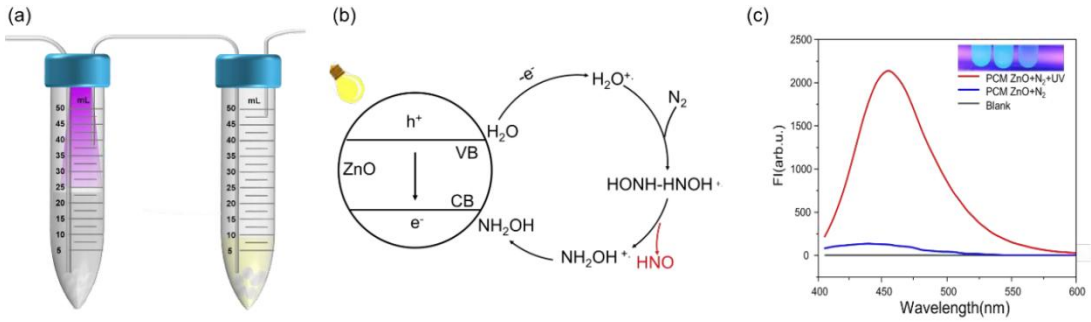


图 1 光催化纳米材料产生水自由基阳离子 (a) 实验装置图(b)纳米 ZnO 产生水自由基阳离子与氮气的反应机理(c)荧光探针与 HNO 的荧光光谱图

关键字 水自由基阳离子；次硝酸；氧化锌；荧光探针

参考文献

1. Zhang X, Ren X, Zhong Y, Chingin K, Chen H.Analyst, 2021, 146: 5037–5044
2. Gao X, He P, Chen H.ACTACHIM SINICA, 2018, 76: 802–806
3. Zhang X, Hu P, Duan M, Chingin K, Balabin RM, Zhang X, Chen H. Chem Sci, 2024
4. GoodA, Durden DA, Kebarle P. J. Chem. Phys, 1970, 52: 212–221
5. Radi PP, Beaud P, Franzke D, Frey H-M, Gerber T, Mischler B, Tzannis A-P. J. Chem. Phys, 1999, 111: 512–518
6. Yang S, Brereton SM, Nandhra S, Ellis AM, Shang B, Yuan L-F, Yang J. J. Chem. Phys, 2007, 127: 134303
7. Zhang X, Su R, Li J, Huang L, Yang W, Chingin K, Balabin R, Wang J, Zhang X, Zhu W, Huang K, Feng S, Chen H. Nat Commun, 2024, 15: 1535

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于环糊精衍生碳点的荧光传感阵列实现有机分子和无机离子的同时鉴别

颜文菊[1,2]、郑颜盈[2]、李南盛[2]、张娅[2]、杨晓霖[2]、袁亚利*[1,2]
1. 广西电磁化学功能物质重点实验室
2. 桂林理工大学化学与生物工程学院

荧光传感阵列能够借助荧光探针与相似物之间产生的信号差异，采用多变量统计分析以实现对相似物高灵敏度的精确识别。分别用于氨基酸分子和金属离子的荧光传感阵列因其高通量且便携的优点已得到广泛的关注，然而能够同时实现对复杂体系中这两种分析物精准识别的传感阵列却鲜有报道。受到环糊精优越的主客体作用的启发，本文分别以甲基-β-环糊精（M-β-CD）和 L-丙氨酸(L-Ala)为碳源和氮源，改变碳源配比和反应条件，采用正交试验设计法对碳点的合成条件进行探究。该系列碳点继承了 M-β-CD 特殊的空腔结构，具有理想的多选择性能，与不同的分析物作用后可产生不同的荧光响应信号。以不同的碳点为信号探针，在化学计量学方法的辅助下，仅仅通过调整体系的 pH 就能够实现对氨基酸分子和金属离子的准确识别。通过该方法构建的高效荧光传感平台，将在实际复杂样品中化合物快速鉴别领域发挥巨大潜力。

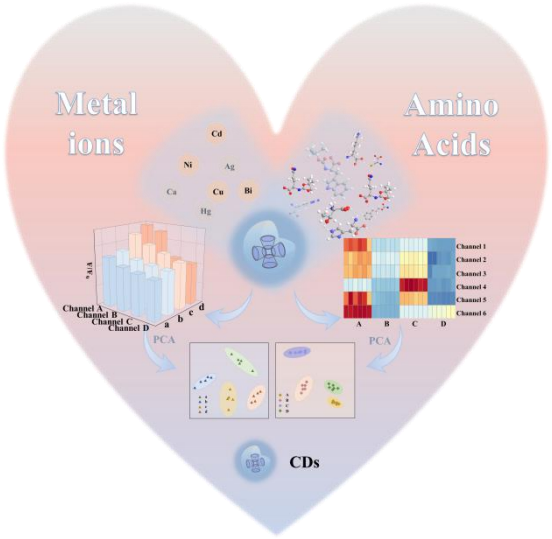


Fig. 1 Schematic diagram of fluorescence sensing array for amino acids and metal ions

关键词：荧光传感阵列；多组分分析；环糊精衍生碳点

关键字 荧光传感阵列；多组分分析；环糊精衍生碳点

参考文献

1. X. Hu, Z. Hu, J. Tian, L. Shi, F. Ding, H. Li, D. Guo, *Chem. Commun.*, **2022**, 58, 13198-13201.
2. H. Meng, Y. Wang, R. Wu, Y. Li, D. Wei, M. Li, N. Zhu, F. Zhu, Z. Zhang, H. Zhao, *J. Hazard. Mater.*, **2023**, 455, 131546.
3. B. Wang, J. Han, N.M. Bojanowski, M. Bender, C. Ma, K. Seehafer, A. Herrmann, U.H.F. Bunz, *ACS Sens.*, **2018**, 3, 1562-1568.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

双功能碳点用于成像引导肥胖治疗

魏晨、田印琪、王建华、王则君*
东北大学

肥胖是一种全球性的疾病，可导致代谢紊乱并引起多种并发症，如II型糖尿病[1]。肥胖治疗过程中，生活习惯、代谢和体重基数等个体化差异，增加了给药剂量及终点判定的难度，而用药过量则会导致一系列副作用。因此精确控制药物的用量、掌握药物药效和毒理性质显得尤为重要。此外肥胖是一种慢性疾病，治疗过程需要长期给药，因此通过体内视觉成像跟踪药物的代谢，有助于确定安全剂量，确保药物以安全的方式代谢和排出[2]。

碳点是一种生物安全性高、成本低廉的荧光纳米材料，有望用于肥胖的临床诊断和治疗。本研究成功制备了一种双功能碳点（B-CDs），该碳点具有优异的荧光特性和脂滴靶向能力，具有信噪比高、无需洗涤等优点。可实现细胞水平成像或活体实时观测，以获取脂肪细胞内脂滴的动态变化以及体内药物的分布和代谢，指导肥胖治疗的方案调整。

此外，B-CDs 本身还具有治疗肥胖的效果，无需额外修饰或者借助其他药物。利用高脂饮食（HFD）建立肥胖动物模型。经过一个疗程（一个月）B-CDs 的治疗后，肥胖小鼠体重有效降低 10.7%，并且慢性炎症得到控制。相关数据表明，B-CDs 在体内无毒无害。综上所述，集成像与治疗双功能的 B-CDs 是一种安全有效纳米材料，有望用于成像引导肥胖治疗。

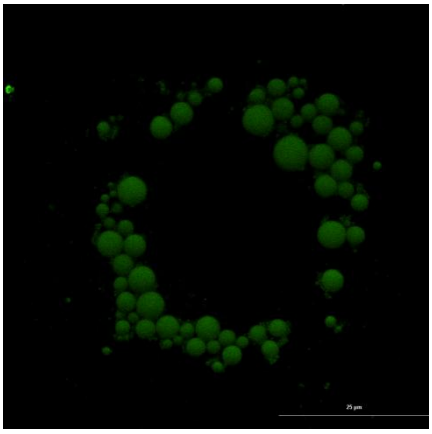


图 1. 碳点的脂滴靶向性

关键字 碳点，肥胖治疗，脂滴靶向性

参考文献

1. Y. Zhang, Q. Liu, J. Yu, S. Yu, J. Wang, L. Qiang, Z. Gu, *ACS Nano*, **2017**, 11, 9223-9230.
2. S. Zeng, Y. Wang, C. Chen, H. Kim, X. Liu, M. Jiang, Y. Yu, Y. Kafuti, Q. Chen, J. Wang, X. Peng, H. Li, J. Yoon, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, e202316487.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

铜基金属有机框架纳米酶的尺寸调控及其类酶活性研究

孙雪醇、任秀燕、刘思佳、徐章润*
东北大学

摘要：金属有机框架(metal-organic frameworks, MOFs)的尺寸对自身性质会产生明显的影响，通过调控其尺寸可显著提高其性能。我们发展了一种简单的基于水溶液的室温合成策略，用于制备 MOFs 纳米晶体。首先通过自组装 Cu^{2+}和 H_2DBPP 配体制备了一种新的金属-有机框架，之后在乙酸钠与乙酸的双重调控下制备了良好分散性的 Cu-DBPP 纳米晶体，其粒径低至 30 nm，并且具有良好的结晶度和孔隙率。通过各种表征以阐明影响调控尺寸的主要因素，并确定了 Cu-DBPP 的过氧化氢酶性质。更小的尺寸提供了更多的活性金属位点，使得 Cu-DBPP 纳米酶表现出更突出的催化性能。本工作为纳米酶的设计提供了新思路。

关键字 金属有机框架，纳米酶，尺寸调控

参考文献

1. Dai S, Simms C, Patriarche G, et al. Highly defective ultra-small tetravalent MOF nanocrystals[J]. *Nat. Commun.*, **2024,** 15(1), 3434.
2. Yuan X, Xiong J, Wu X, et al. Ultrasmall Ce-based metal–organic frameworks nanozyme with hydrolytic activity for boosting antibiofilm therapy[J]. *Chem. Eng. J.*, **2024**, 480, 148246.
3. Dai S, Nouar F, Zhang S, et al. One-step room-temperature synthesis of metal (IV) carboxylate metal-organic frameworks[J]. *Angew. Chem., Int. Ed.,* **2021**, 60, 4282-4288.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

高效自级联 $PdCu_3$ 尿酸酶/过氧化物酶模拟物降解并检测尿酸

范亚杰、董江雪、张赛美、申世刚*
河北大学

人类的尿酸水平是许多疾病状态的重要生物标志物。例如，生物体液中尿酸浓度过高会导致肥胖、痛风、心血管疾病、高尿酸败血症等 1。尿酸酶是一种外源性酶，可以催化尿酸氧化为尿囊素，后者的水溶性更强 2。基于尿酸酶的治疗策略被认为是有效的，特别是针对由尿酸升高引起的痛风等疾病。然而，在临床治疗中，尿酸酶的催化活性以及稳定性有限，催化尿酸降解本身并不令人满意 3。此外，尿酸在尿酸酶的作用下降解时，产生的副产物过氧化氢会在人体内积累，导致细胞的氧化应激及其他健康问题 4，因此，快速降解尿酸和清除过氧化氢是成功治疗由高尿酸水平引起的疾病的关键。

为了解决这一问题，本研究基于一锅法在室温条件下制备了一种聚乙烯吡咯烷酮包被的球形 $PdCu_3$ 合金纳米酶，实现尿酸降解和 H_2O_2 消除的双重催化。此外，我们还利用 $PdCu_3$ 合金纳米酶的过氧化物酶样活性，在尿酸几乎不发生降解的条件下，成功建立了尿酸传感器，在 5 μM - 1 mM（$R^2 = 0.9894$）和 1 - 4.5 mM（$R^2 = 0.9914$）之间具有较好的线性关系，检出限为 2.5 μM。本研究不仅提供了一种简单的制备高效自联级尿酸酶/过氧化物酶模拟物的方法，还可应用于血清中尿酸的检测。

关键字 自联级纳米酶；尿酸降解与检测；过氧化氢消除；铂族金属

参考文献

1. F. Li, J. Chen, J. Wen, Y. Peng, X. Tang, P. Qiu, *Sensors Actuators B: Chem.* **2022**, 369.
2. Z. Xi; J. Xie, J. Hu, Q. C. Wang, Z. Wang, X. Yang, L. Zong, M. Zhang, X. Sun, S. Sun, J. Han, *Nano Lett.* **2024**, 24, 3432-3440.
3. J. Hu, R. Zhao, J. Gu, Z. Xi, Y. Wang, X. Sun, Z. Xu, K. Sha, J. Xi, Y. Liu, J. Han, R. Guo, *Nano Lett.* **2024**, 24, 6634-6643.
4. A. Lin, Z. Sun, X. Xu, S. Zhao, J. Li, H. Sun, Q. Wang, Q. Jiang, H. Wei, D. Shi, *Nano Lett.* **2021**, 22, 508-516.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

纳米羟基磷灰石优化大豆耐旱性与土壤环境

张天宇[1]、张文轩[2]、李云桂[2]、李青青*[1]
1. 北京师范大学文理学院
2. 西南科技大学环境与资源学院

每年农业需要消耗约 70%淡水资源以满足人类对粮食需求，与此同时，全球气候变化和极端天气导致的干旱和缺水对农业生产造成越来越大的威胁[1]，约 96%的耕地受到影响，干旱对粮食损失的贡献高达 50%[2-4]。目前，除了优化灌溉用水策略之外，筛选抗旱品种，利用抗蒸腾剂等助剂在面临干旱问题的植物生长中表现出生长发育的促进作用[9]。近年研究表明，工程纳米材料在促进现代农业的可持续发展方面表现出了巨大的潜力，纳米农业应运而生。铜、锌、铁、镁等微量金属元素纳米材料已被用于减轻干旱对植物的影响[10-15]。相较含植物必需微量元素的纳米材料，针对大量元素纳米材料的研究较少，也存在较大的工程化难度。Liu 和 Lal 首次报道了含磷纳米材料，纳米羟基磷灰石（nHAP）的合成及其对大豆生长的显著促进作用[16]。nHAP 在提升植物的营养利用率、缓解养分浸出、改善土壤质量方面的优势进一步得到证实[17-18]。

本研究中，通过调控结晶时间，合成了两种长度的棒状 nHAP（n-P1，n-P2），并将其用作干旱胁迫条件下大豆的磷肥，对大豆进行全生命周期评价，重点关注大豆生长及产量。相较于未处理的大豆，施用离子磷组（i-P）、n-P1、n-P2 的大豆叶鲜重分别增加 44.1%、71.7%和 80.4%；大豆茎叶干重显著提高，分别增加了 113.3%、171.4%和 187.6%，nHAP 极大程度地提高了干旱条件下大豆的生物量积累。与 i-P 组相比，nP-1 组和 nP-2 组大豆果实总糖含量增加 10.8%和 89.2%，果实脯氨酸含量增加 21.5%和 20.4%。可溶性蛋白质、糖和蛋白质含量的提高是大豆细胞增强细胞的渗透调节能力与抗干旱的重要保证。此外，与 i-P 组相比，nHAP 组也具有更高的抗氧化酶（CAT）活性。n-P1 和 n-P2 组茎叶中的 CAT 活性提高 65.3%和 63.5%；根系中提高 312.9%和 96.4%。nHAP 的应用促进 APX 活性的提高，减轻逆境下的氧化损害。本研究将为纳米磷肥的应用提供数据参考。

关键字 纳米羟基磷灰石；纳米肥料；磷肥；抗旱；大豆

参考文献：

1. Hoegh-Guldberg O. In Climate Change 2014: Impacts, Adaptation, and Vulnerability[J]. Contribution of Working Group, 2.
2. The State of the Global Climate (United Nations, World Meteorological Organization), 2020. https://public.wmo.int/en/ourmandate/climate/wmo-statement-state-ofglobal-climate.
3. Davis K F, Downs S, Gephart J A. Towards food supply chain resilience to environmental shocks. Nat Food 2, 54–65[J]. 2021.
4. Kurunc A. Effects of water and salinity stresses on growth, yield, and water use of iceberg lettuce[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2021, 101(13): 5688-5696.
5. Asada K. Production and scavenging of reactive oxygen species in chloroplasts and their functions[J]. Plant physiology, 2006, 141(2): 391-396.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

SPASER 纳米探针在微量皮质醇检测中的应用研究

王建花、王婷、李晓春*
太原理工大学

皮质醇作为一种重要的类固醇激素与炎症、慢性疲劳综合征和创伤后应激障碍等多种疾病相关，准确的定量检测对疾病监测具有重要意义。基于光谱的检测技术是一种常用的检测方法，然而现有检测方法灵敏度有限。三能级受激辐射表面等离激元放大（Surface Plasmon Amplification by Stimulated Emission of Radiation，SPASER）纳米发光探针，具有纳米尺度的粒径（<100 nm）、超窄的发射线宽（~5 nm）和微秒尺度的发光寿命（~10 μs），是一种具有优异光学性能的新型纳米发光探针。与使用传统荧光探针材料相比，采用三能级 SPASER 纳米探针有望显著提高现有光谱检测技术的精度和灵敏度。鉴于此，本文拟采用三能级 SPASER 纳米发光探针来构建对微量皮质醇的高灵敏、快速检测方法。本研究采用皮质醇适配体对自主合成的三能级 SPASER 纳米发光探针进行表面修饰，利用竞争法和磁分离技术构建了一种对微量皮质醇的高灵敏、快速检测系统。该体系仅需 5 μL 的待测溶液样本就可以实现对皮质醇的定量检测，检测范围为 0.1-20 nM，检测限低至 0.8074 nM。此外，实验结果表明该探针具有良好的特异性和抗干扰性。这种基于三能级 SPASER 纳米发光探针的检测系统，不仅为微量皮质醇的定量检测提供了一种操作简单快速、高灵敏、高准确度的策略，也为生物医学检测技术领域带来了新的工具和方法。

关键字 皮质醇，SPASER，纳米探针，高灵敏检测

参考文献

1. Ajeet Kaushik et al. *Biosens. Bioelectron*, **2014**, 53, 499-512
2. Alexander Gaudl M.Sc et al. *J. chroma.* **2016**.07.087
3. Masjkur et al. *J Clin Endocrinol Metab*, **2019,** 104(10):4331–4340
4. M. A. Noginov et al. *Nature* **2009**, Vol 460,1110–1112
5. Chen H-Y. et al. *Sci Adv* **2018**, 4(8): eaat0292.
6. Chen H-Y. et al. *Chin. J. Chem.* **2022**, 40, 507—514.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

利用等离子体标尺区分内源性、外源性 EPO 兴奋剂的研究

毛锦鹏*
北京体育大学

竞技体育运动的高质量发展对建立　实时、快速、高灵敏的反兴奋剂研究方法提出了新的要求。作为一种优异的单分子水平研究手段，等离子体标尺已经被成功应用于蛋白质吸附引起的蛋白层厚度变化和 DNA 杂交反应的监测。首此启发，我们考虑能否将等离子体标尺应用到结构相似的内源性、外源性 EPO（促红细胞生成素）兴奋剂的区分。基于该猜想，结合功能核酸，我们构建了基于功能核酸的等离子体标尺用于内源性和外源性兴奋剂快速区分的分析方法。我们合成了功能核酸连接的纳米颗粒二聚体作为等离子体标尺，将具有不同 DNA 纳米结构并能与靶标兴奋剂特异性结合的功能核酸作为识别探针。通过检测功能核酸与兴奋剂发生相互作用后的构型变化，获得靶标兴奋剂 EPO 的响应信号，在此基础上实现对 EPO 的高灵敏检测。利用一维和三维等离子体标尺，构建等离子体标尺阵列，分别获取内源性和外源性促红细胞生成素（EPO）的指纹图谱，结合模式识别实现对内源性和外源性 EPO 的区分。本研究有希望建立普适性的内源性、外源性兴奋剂快速区分方法，　为反兴奋剂研究提供新的方法和技术手段。

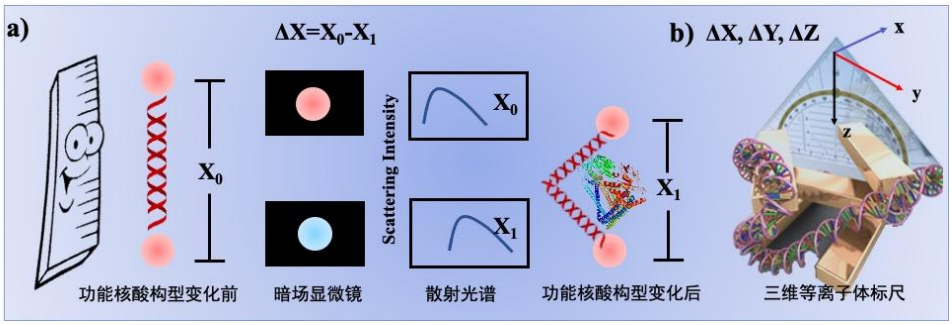


图 1. 一维和三维等离子体标尺区分 EPO 兴奋剂分子的原理示意图。（a）功能核酸连接的纳米颗粒二聚体作为一维等离子体标尺识别原理示意图，通过一维的ΔX 获取分子响应信号。（b）三维等离子体标尺示意图，通过三维的ΔX，ΔY，ΔZ 获取分子响应信号。

关键字　等离子体标尺，功能核酸，EPO 兴奋剂

参考文献

[1] Nan, J.; Zhu, S.; Ye, S.; Sun, W.; Yue, Y.; Tang, X.; Shi, J.; Xu, X.; Zhang, J.; Yang, B. Adv. Mater., **2020**, 32, e1905927.
[2] Yao, G.; Li, J.; Li, Q.; Chen, X.; Liu, X.; Wang, F.; Qu, Z.; Ge, Z.; Narayanan, R. P.; Williams, D.et al. Nat. Mater., **2020**, 19, 781-788.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于铜掺杂共价有机聚合物类漆酶活性的福美双可视化检测

杨雅伟、邵鑫鑫、刘广州、肖赛金*
东华理工大学

福美双是现代农业中广泛使用的杀菌剂，用于保护作物（如蔬菜和水果）免受害虫的侵害。然而，福美双残留会导致生物毒性，因此迫切需要开发简单有效的现场监测福美双的方法，以确保食品安全和人类健康。目前，荧光法[1]、高效液相色谱法[2]、表面增强拉曼光谱法[3]和酶联免疫吸附法[4]等已用于食品中的福美双检测，但耗时复杂的预处理、昂贵的设备以及操作和结果分析需要专业人员等限制了这些方法的现场应用。为了实现福美双的现场分析，基于铜掺杂共价有机聚合物（Cu@COP）类漆酶活性，构建了一个简单的“开启”比色平台，用于蔬菜和水果样品中福美双的现场检测。如下图所示，Cu@COP 具有与天然漆酶活性位点相似的 Cu-N 和 Cu-S 键，显示出类漆酶活性，可催化 2,4-二氯苯酚（2,4-DP）氧化产生半醌自由基，并进一步与 4-氨基安替比林（4-AP）反应，在 1 小时内形成在 510 nm 处具有特征吸收的酒红色产物。但是，随着福美双的加入，Cu@COP 的类漆酶活性显著增强，5 分钟内即可清楚地观察到溶液变为酒红色。基于吸收和颜色的变化，即可实现福美双的灵敏检测，检测限为 0.1 μg/mL（3σ/K）。进一步结合智能手机，成功的测定了芒果、白菜和湖水样品中福美双残留的浓度，回收率为 90.9%至 106.8%，表明本方法准确性高，有望用于实际样品中福美双残留的现场分析。

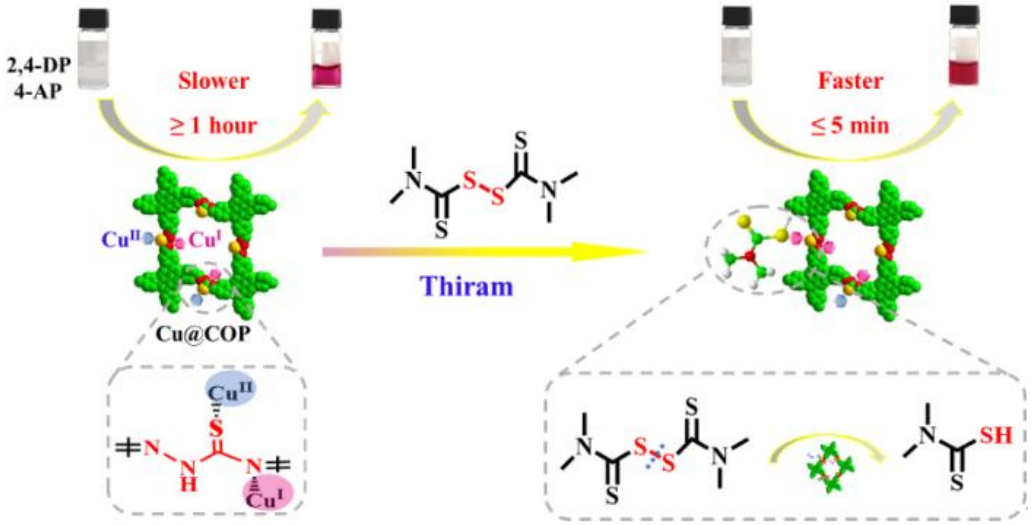


图 1：福美双可视化检测示意图

致谢：感谢国家自然科学基金委（22064001 和 22366002）和核资源与环境国家重点实验室开放基金（2022NRE26）的资助。

关键字 共价有机聚合物；类漆酶活性；福美双；可视化检测

参考文献

[1]. S. Erdemir, M. Oguz, S. Malkondu, *J. Hazard. Mater.*, 2023, 452: 131278.

[2] J. Zhao, J.J. Pu, X.P. Wu, *et. al.*, *Microchem. J.*, 2021, 168: 106375.
[3] T.K. Naqvi, A. Bajpai, S. Dwivedi, *et. al.*, Sensor. Actuat. A-Phys., 2023, 356: 131278.
[4] F. Gueguen, F. Boisdé, A.L. Queffelec, J.P., J. Agric. Food Chem., 2000, 48: 4492.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

DNA 模板化铂纳米颗粒的合成影响因素及酶活性调控探究

杨泽阳、于丽红、雷艳丽*
长沙理工大学

在已开发的纳米酶中，铂纳米颗粒（Pt NP）因其具有显著的类酶活性和多样的理化性质在生物医学领域的潜在应用而备受关注。DNA 序列的高度可编程性使得 Pt NP 可以通过设计特定的 DNA 序列来精确控制其结构和功能。这种可编程性为 Pt NP 的合成设计提供了可能，使其能够针对特定的生物标记物进行优化。我们的工作系统地考察了合成条件对 DNA 模板化 Pt NP 的影响，在 DNA 模板化的 Pt NP 合成过程中，通过稳定剂和改变温度对 DNA 模板化 Pt NP 的形成、稳定性和酶催化进行了相应地考察。

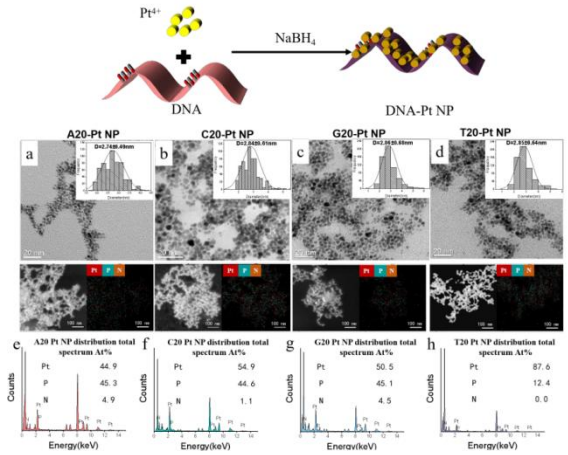


Figure 1. TEM images of different DNA templated Pt NPs; (the illustration shows the corresponding particle size distribution diagram); (a) A20 Pt NP; (b) C20 Pt NP; (c) G20 Pt NP; (d) T20 Pt NP; High angle annular dark field scanning transmission electron microscope (HAADF-STEM) image and corresponding element mapping image; (e) A20 Pt NP; (f) C20 Pt NP; (g) G20 Pt NP; (h) T20 Pt NP; Energy dispersive X-ray spectrogram (EDX) (i) A20 Pt NP; (j) C20 Pt NP; (k) G20 Pt NP; (l) T20 Pt NP.

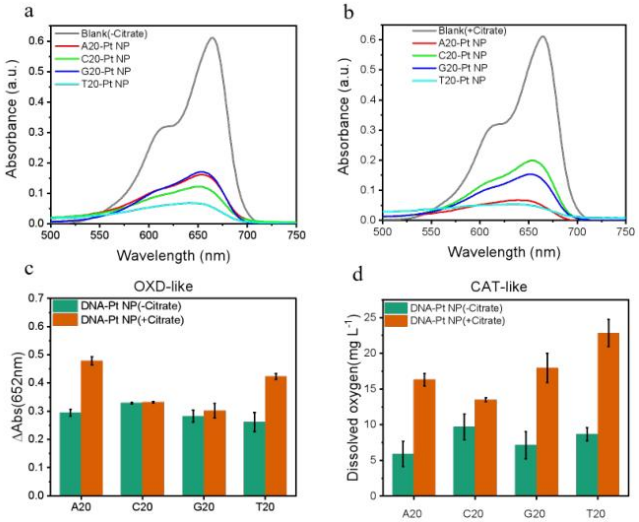


Figure 2. The ultraviolet absorption spectra of MB after degradation of H_2O_2 to ·OH catalyzed by

DNA Pt NP synthesized in different ways; (a) DNA Pt NP synthesized without stabilizer; (b) DNA Pt NP synthesized with stabilizer; (c) Peroxidase activity of DNA Pt NP (± citrate); (d) DNA Pt NP oxidase activity. (H_2O_2 : 100 mM; MB: 2.5 mg/ml; TMB:0.5 mM; DNA Pt NP: 0.2 mM; pH 4; 37 ℃; 4 h).

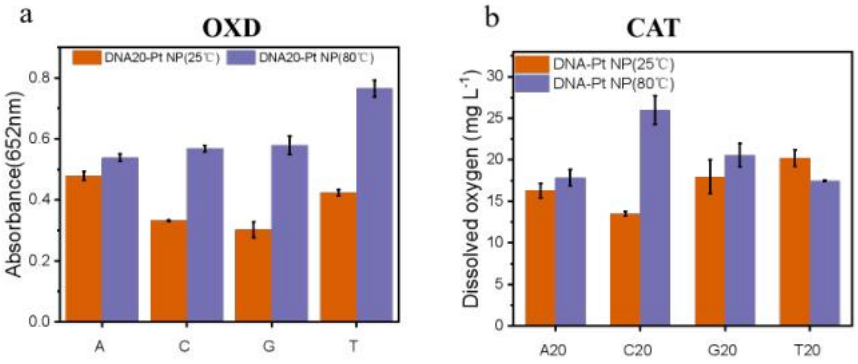


Figure 3. Effect of temperature on DNA templated Pt NP like enzyme activity; (a) DNA-Pt NP peroxidase activity; (b) DNA-Pt NP oxidase activity (H_2O_2 : 100 mM; MB: 2.5 mg/mL; TMB: 0.5 mM; DNA-Pt NP: 0.2 mM; pH 4; 37 °C; 4 h).

Table1. Nucleic acid sequence used

Name	Sequence (from 5 to 3)
A20	AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA
C20	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
G20	GGGGGGGGGGGGGGGGGGGG
T20	TTTTTTTTTTTTTTTTTTTT

关键字 铂纳米颗粒；纳米酶；脱氧核糖核苷酸；生物矿化；活性调控

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

聚合物修饰介导的表面电荷重整策略：逆转 MOF 生物矿化行为

许燕宾[1]、陈国胜[2]、易伟[1]、黄思铭*[1]、欧阳钢锋[2]
1. 广州医科大学药学院，广东省广州市番禺区新造路 1 号，511436
2. 中山大学化学学院，广东省广州市番禺区大学城外环东路 132 号，510006

在酶分子表面诱导金属-有机框架（MOF）前驱体富集的仿生矿化方法是合成新型稳定、高效生物-纳米杂交催化剂的有效策略[1]。近年来，酶@MOF 生物-纳米复合物的开发已成为催化、分析和医学等领域的前沿研究热点。其中，沸石咪唑框架（ZIF，如 ZIF-8）由于具有温和的结晶条件和极高的孔隙率，在稳定脆弱酶分子的同时可保证底物传质[2-4]。然而，ZIF 仿生矿化与酶的界面化学高度相关[5]，表面带正电的酶由于与金属离子存在静电斥力，不能诱导 ZIF 在其表面进行仿生矿化。本研究开发了一种聚合物修饰介导的表面电荷重整策略用于逆转 ZIF 的生物矿化行为。在该策略中，富含-SO_3H 和-COOH 基团的聚合物（聚苯乙烯磺酸、聚丙烯酸、透明质酸和海藻酸钠）通过静电作用沉积至酶分子表面，为 ZIF-8 前体在酶表面的富集提供了丰富位点，并进一步促进多孔 ZIF 在酶上的生物矿化（图 1A）。所开发的聚合物修饰酶@ZIF-8 具有高度专一的生物活性和高结构稳定性，基于此，本文进而构建了一种基于硫化氢（H_2S）可以抑制 PSSA-HRP@ZIF-8 催化鲁米诺化学发光能力的化学发光传感平台，用于 H_2S 生物标志物的分析，检出限可低至 0.09 nM（图 1B）。

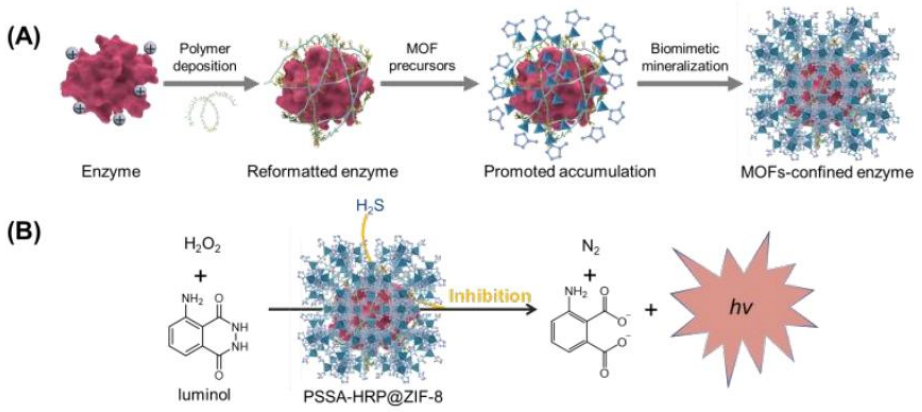


Figure 1. (A) Schematic representation of the polymer deposition-mediated surface-charge reformation strategy for promoting biomineralization of MOFs on fragile enzymes with positive surface charges. (B) Schematic illustration of the H_2S sensing based on the PSSA-HRP@ZIF-8 composite combined with luminol-H_2O_2 system.

关键字 金属有机框架，仿生矿化，聚合物，表面电荷重整，生物标志物

参考文献：

1. L. A. Estroff, Chem. Rev., 2008, 108, 4329-4331.
2. K. S. Park, Z. Ni, A. P. Côté, J. Y. Choi, R. Huang, F. J. Uribe-Romo, H. K. Chae, M. O'Keeffe and O. M. Yaghi, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 2006, 103, 10186-10191.

3. G. Chen, S. Huang, X. Kou, S. Wei, S. Huang, S. Jiang, J. Shen, F. Zhu and G. Ouyang, Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58, 1463-1467.
4. L. Tong, S. Huang, Y. Shen, S. Liu, X. Ma, F. Zhu, G. Chen and G. Ouyang, Nat. Commun., 2022, 13, 951.
5. N. K. Maddigan, A. Tarzia, D. M. Huang, C. J. Sumby, S. G. Bell, P. Falcaro, C. J. Doonan, Chem. Sci., 2018, 9, 4217-4223.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于层流组装的纳米线生物传感器的开发及其应用

林海锋[1,2,3]、许柠[2]、内山一美[2]、毛思锋[2]、林金明[3]、林玲*[1]
1. 北京工商大学
2. 东京都立大学
3. 清华大学

相较于传统的纳米材料合成方法（如化学还原法、溶剂热法、模板法等），微流控层流组装技术有效克服了反应条件控制不精确、颗粒聚集、形貌不均匀以及反应效率低等问题。通过在微尺度上精确调控流体与反应物，微流控技术可实现高均匀性、高可控性与高效合成的纳米材料，尤其在多功能材料和复杂结构的纳米线与纳米网络生成中表现出显著优势。

本研究开发了一系列基于层流组装的一维纳米线生物传感器，并探索其在生物检测中的应用。通过优化不同层流模式、传感结构、功能修饰，针对多种生物分子进行检测，展现了层流组装技术在纳米线传感器制备中的巨大潜力，为可控纳米结构设计和实际应用提供了新的方向。

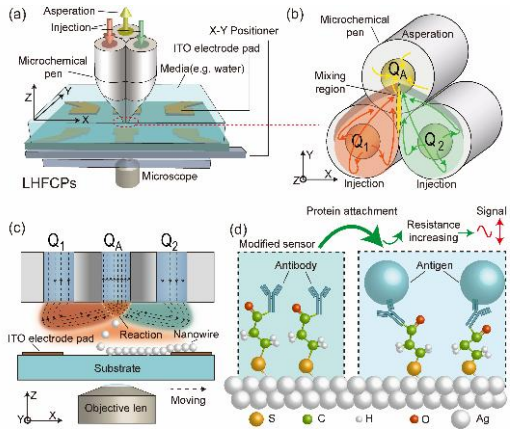


图.基于层流组装的纳米传感器制备及其应用

关键字 层流组装、纳米线、生物传感器

参考文献

1.Haifeng Lin; Ning Xu; Sifeng Mao; et al. Robust Long-Nanowire Fabrication by Clean-Phase-Assisted Micro Chemical Pen for Enhanced Bioassay Sensitivity, *Analytical Chemistry*, **2024**, 96, 36, 14339

2.Haifeng Lin; Nahoko Kasai; Ning Xu; et al. Localized hydrodynamic flow confinement assisted nanowire sensor for ultrasensitive protein detection, *Biosensors and Bioelectronics*, **2022**, 218: 114788

3.Haifeng Lin; Sifeng Mao; Hulie Zeng; et al. Selective Fabrication of Nanowires with High Aspect-Ratios using a Diffusion Mixing Reaction System for Applications in Temperature Sensing, *Analytical Chemistry*, **2019**, 91(11): 7346

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

仿生矿化合成金属有机框架纳米探针用于 ATP 比色检测

金焕、陈国胜*
中山大学

三磷酸腺苷（ATP）是生物体内的主要能量载体，在能量转换、细胞呼吸、酶催化和细胞内信号转导等多个生物过程中发挥着至关重要的作用[1]。作为生物体内的一种疾病标志物，人体细胞内 ATP 水平的变化与各种病理过程或疾病有关。因此，准确测定人体液或组织中 ATP 的浓度对疾病研究和临床诊断大有裨益[2]。本研究提出一种基于金属有机框架（MOF）的纳米探针（GOx-Pt@ZIF-90）用于 ATP 的高灵敏比色检测。在该策略中，具有类氧化酶活力的 GOx-Pt 生物复合物通过仿生矿化技术原位包埋于 Zn 基的 MOF—ZIF-90（图 1a）。ATP 与 Zn^{2+}的强配位作用会导致 ZIF-90 框架分解，并释放出 GOx-Pt 纳米酶。GOx-Pt 具有类氧化物酶活力，可催化氧气氧化 3, 3', 5, 5'-四甲基联苯胺（TMB）产生可视化的蓝色信号，实现检查信号的转化、放大（图 1b）。该比色纳米传感平台对 ATP 具有较宽的线性范围（1 μM ~ 1000 μM）和优异的选择性，可用于生物样品中 ATP 的灵敏分析。

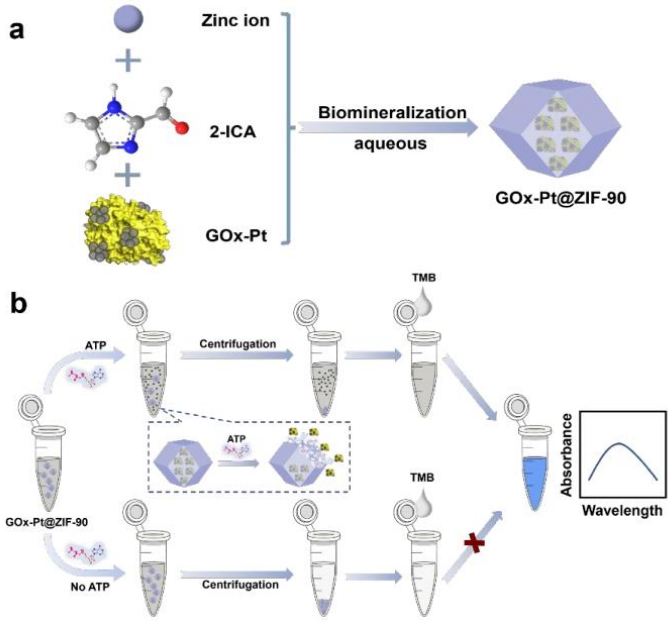


图 1. (a) GOx-Pt@ZIF-90 生物复合材料的制备示意图；(b) 高灵敏 ATP 检测平台的构建示意图。

关键字 Zn 基 MOF；纳米酶；仿生矿化；比色检测；

参考文献

1. C. Li, M. Numata, M. Takeuchi, S. Shinkai, Angew. Chem., Int. Ed., 2005, 44: 6371-6374.
2. Y. Liu, Z. Wu, D. W.Armstrong, Nat. Rev. Chem., 2023, 7, 355-373.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

基于机器学习辅助多价态球形核酸传感器用于肝癌早期精准诊断

武娜*、黄嘉彬
福建医科大学医学技术与工程学院，精准医学研究院

肝细胞癌（Hepatocellular Carcinoma, HCC）是全球常见的恶性肿瘤之一，尤其在我国，发病率高，对公共健康构成严重威胁 1-2。HCC 早期症状不明显，难以发现。外泌体作为细胞间信息传递的重要载体，携带的分子与肿瘤细胞高度一致 3。研究表明，肿瘤细胞分泌的外泌体明显多于正常细胞，且癌症患者血清中外泌体含量高于健康人 4。此外，肿瘤来源的外泌体富含蛋白质和 miRNA 等癌症相关分子，且其脂质双层膜提供了更高的稳定性和丰度，因此外泌体在肿瘤早期诊断中具有广阔的应用前景 5。本研究开发了一种基于机器学习的磁性多价态球形核酸传感器，用于检测肝癌来源外泌体中的多种蛋白生物标志物。通过将引物链负载到 50 nm 磁珠上，并结合特异性适配体和挂锁探针进行滚环扩增反应，生成大量 G-四链体和适配体。磁性球形核酸上的多价态适配体能特异性识别并富集外泌体表面的目标蛋白。通过纳米酶催化反应，实现 TMB 氧化产生颜色变化，定量分析外泌体蛋白。同时，利用多种适配体可以对外泌体表面蛋白进行表型分析。

关键字 多价态球形核酸，肝癌外泌体，分离分析，机器学习

参考文献

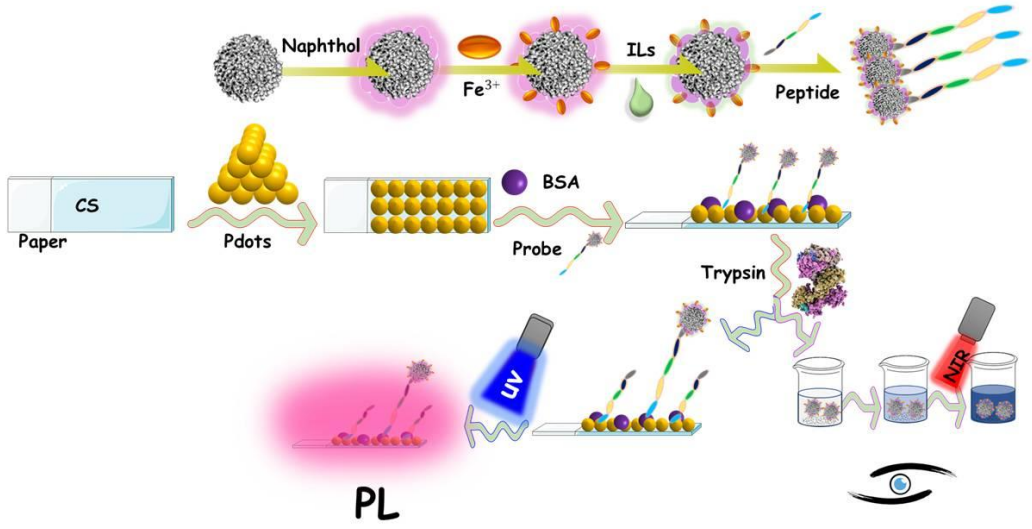
1. Y. Yu, L. Hao, Y. C. Yang, Y. T. Ding, X. Z. Wang, G. X. Li, *Anal. Chem.* 2016, 88, 24, 12287-12293.
2. Y. X. Zhao, Z. Y. Ye, Y. L. Liu, J. J. Zhang, S. Kuermanbayi, Y. Z. Hui, F. Guo, X. F.Li, *Anal. Chem.* 2024, 96, 3, 1102-1111.
3. R. Xu, D. W. Greening, H. J. Zhu, N. Takahashi, R. J. Simpson, *The Journal of clinical investigation.* 2016, 126(4): 1152-62.
4. G. H. Zhang, X. D. Huang, Y. L. Gong, Y. Ding, H. Wang, H. M. Zhang, L. L. Wu, R. Su, C. Y. Yang, Z. Zhu. *DOI: 10.1021/jacs.4c10390.*
5. J. Li, Y. Y. Li, Q. Li, L. Sun, Q. Q. Tan, L. Y. Zheng, Y. Lu, J. Q. Zhu, F. L. Qu, W. H. Tan, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202314262.

分会场：11.纳米分析化学
交流类型：墙报

利用碳纳米洋葱作为比色和荧光信号输出的便携式多模平台检测胰蛋白酶

李怡萱、张书培、戴宏*
衢州学院

Multimodal biosensors with independent signaling pathways can self-calibrate and improve the reliability of disease biomarker detection. Herein, a colorimetric-fluorescent dual-mode paper-based biosensor with PAN/Fe(III)-CNOs (FPCs) as core components has been developed, which information is recognized by smartphone and naked eye. Using 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol (PAN) as a mediator, Fe(III) is enriched on the surface of carbon nano-onions (CNOs), endowing FPCs with excellent mimetic enzyme activity and photothermal conversion ability, which allows it to output amplified colorimetric signals under laser irradiation. In addition, the complexation of PAN with Fe(III) broadens its absorption spectrum, which makes FPCs more suitable to be energy acceptors to quench fluorescence of polymer dots (Pdots), resulting in the changes of output fluorescent signal. Based on the above design, a portable colorimetric-fluorescent dual-mode biosensor is proposed for trypsin detection with Pdots as fluorescence sources and FPCs as fluorescence quenchers and nanoenzymes. This work provides a convenient way for constructing portable visual multimodal biosensors, which is expected to applied in various disease diagnosis.



Scheme 1. Schematic illustration for the construction of paper-based colorimetric-fluorescent dual-mode biosensor for trypsin detection.

关键字 trypsin, multimodal biosensors, nanoenzymes, energy transfer, carbon nano-onions

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

智能传感与精准医疗—-无尽的科学前沿

张学记*
深圳大学

智能传感器是一种能够感知并获取外部信息的装置。它采用先进的信号处理技术和算法，将感知的信息转化为数字信号以供后续处理和分析，智能传感器具有自我学习、自我矫正、自我修复、自我决策等新功能。智能传感器同时具有高精度。高灵敏度、高稳定性等特点，可广泛应用于精准医疗领域。智能传感技术与精准医疗是现代医疗科技领域中的两大重大突破，两者的结合代表了无尽的科学前沿。智能传感器的发展推动了医疗领域的数据收集与分析能力，结合先进的医疗技术，如大数据分析、人工智能、医学影像等技术，实现了对疾病的精准诊断、精准治疗和精准监控. 智能传感技术在精准医疗中有广泛的应用，例如精准诊断智能传感器可用于医学影像技术中，如超声，CT，MRI 等，提高图像的分辨率和准确性，帮助医生更准确的诊断疾病，也可以用于精准治疗。智能传感器可用于药物传递系统，实现药物的精准投放，提高治疗效果。同时智能传感器还可以监测患者的生理参数，为医生调整治疗方案提供依据。智能传感器还可以做到精准监测。这种传感器可实时监测患者的生理状态，如血糖、血压、心率、血氧等，为医生提供实时反馈，帮助医生及时调整治疗方案。尽管智能传感技术与精准医疗的结合带来了巨大的机遇，但也面临着巨大的挑战，如数据安全与隐私保护问题、技术成本问题。技术标准化问题等，未来需要进一步加强技术的研发和规范管理，推动智能传感技术与精准医疗的健康发展。未来随着技术的不断进步，智能传感技术与精准医疗将带来更多的突破与创新，为人类健康事业的发展做出更大的贡献。

本文将详细探讨智能传感理论，技术路线图以及在精准医疗中的应用，展望未来的发展趋势，并阐述其带来的挑战与机遇。

关键字 智慧传感 精准医疗 可穿戴设备 人工智能

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

电化学发光生物传感与单分子测量

刘宝红*、黄雪栋、李彬晓、卢延伟
复旦大学

电化学发光测量由电化学反应激发，不需外加光源、几乎零背景干扰，在生物传感、化学及物理测量中被广泛应用。限域效应可以显著改变分子传输和反应动力学，已被广泛应用于催化能源等领域。然而，纳米尺度空间的受限反应环境十分复杂，发展高灵敏度化学测量方法，对探索电化学反应在纳米受限空间的限域效应及多孔材料的设计具有重要的意义。我们开发了基于介孔材料负载三联吡啶钌纳米反应器的电化学发光成像技术，从单分子水平原位观察和验证了纳米限域孔道对电化学发光反应的增强效应和传质过程，实现了复杂体系中单颗粒的电化学动态测量，进一步应用于生物体系实现了蛋白质等分子的单颗粒测量和可视化分析。

关键字 电化学发光分析，生物传感，单分子测量

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

等离激元增强红外光谱电化学

夏兴华*
南京大学

局域表面等离激元共振（LSPR）是纳米结构表面自由电子随能量匹配的入射光而发生集体震荡的一种现象，在纳米结构表面产生增强的电磁场，能显著增强相邻分子的荧光、拉曼、红外等信号。我们探索了如何利用 LSPR 特性构建高性能的光谱电化学分析，包括：1）为解决现有红外光谱灵敏度和空间分辨率不足的问题，我们通过在红外光窗表面构建中红外区等离激元共振特性的微纳米结构，研制基于内反射的表面增强红外光谱分析平台，实现高灵敏界面分子识别、反应过程的监测；同时，利用纳米探针探测红外光生力，构建了高灵敏和高空间分辨红外光谱分析平台，实现了优于 10 nm 的空间分辨成像和数百分子的检测灵敏度。2）利用界面电场或半导体能级实现 LSPR 热电荷分离与参与界面电化学反应，探索了带内和带间电荷跃迁参与电化学反应的机制。

关键字 等离激元共振；超分辨红外光谱；电化学

参考文献

1. Li, J.; Liang, J.; Lan, M. H.; Xia, X. H. *Sci. Bull.*, **2024**, *69*, 151-153.
2. Li, J.; Wu, D.; Li, J.; Zhou, Y.; Yan, Z. D.; Liang, J.; Zhang, Q. Y.; Xia, X. H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, *63*, e2023192.
3. Li, J.; Jahng, J. H.; Ma, X. Z.; Liang, J.; Zhang, X.; Min, Q. H.; Wang, X. L.; Chen, S. J.; Lee, E. S.; Xia, X. H. *Natl. Sci. Rev.*, **2024**, *11*, nwae101.
4. Liang, J.; Pang, J.; Lan, M. H.; Li, J.; Xia, X. H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, *63*, e202410557.
5. Biswas, S; Zhou, J. W.; Chen, X. L.; Chi, C.; Pan, Y. A.; Li, J.; Liu, C. G.; Xia, X. H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, *63*, e202405493.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于表面增强拉曼技术的生物医学传感研究

戴宗*、雷雨田、郭剑和
中山大学

表面增强拉曼（SERS）技术因其无损性和高灵敏度，在生物医学领域具有广泛应用前景。当前，因衬底的稳定性和重复性、信号重现性和信噪比不佳，SERS 在体外和体内检测的应用受到限制。我们通过研究金包银纳米立方体（Ag@Au NCs）的生长模式，证明大尺寸银核更易得到兼具稳定性和 SERS 活性的 Ag@Au NCs。进一步组装 Ag@Au NCs 成二维衬底，开发了一体 SERS 卡盒对人血浆中多重 miRNA 高效分析，实现宫颈癌诊断 100%的准确率。为提高 SERS 在体内检测中的信噪比，我们提出了靶触发拉链反应的高亮近红外 SERS 探针，不对称修饰的金纳米棒（AuNR）在靶标触发下生成大量二聚体，形成的亚纳米间隙不仅可构建强电磁热点，还能使氰基拉曼分子共轭进一步提升信号，实现体内 miRNA 的高灵敏稳定 SERS 成像。

关键字 表面增强拉曼；体外检测；体内成像；稳定性

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

荧光探针创制在生命健康研究中应用

唐波*
1.崂山实验室
2.山东师范大学

氧化应激是生物体内氧化与抗氧化作用的失衡，会导致生物大分子损伤，成为衰老与疾病的重要因素之一。在氧化应激过程中，细胞内活性分子的水平发生浮动，与疾病的发生与发展密切相关。因此对这些生物分子的精准检测受到广泛关注。针对它们浓度低、连续变化、半衰期短，相互作用与转化的特点，我们构建了一系列新型荧光探针，建立了细胞活性分子（活性氧自由基、酶等）超高灵敏度、实时原位、动态、多组分同时成像的新方法，获取了相关活性分子参与生物体氧化应激过程，以及它们调控心血管疾病、脑部疾病演进的重要信息。

关键字 荧光成像　氧化应激　生物活性分子

参考文献

1. Liu, J.; Zhang, W.; Zhou, C.; Li, M.; Wang, X.; Zhang, W.; Liu, Z.; Wu, L.; James, T.; Li, P.*; Tang, B.*. *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, *144*, 30, 13586–13599.

2. Wu, L.; Liu, J.; Tian, X.; Groleau, R. R.; Feng, B.; Yang, Y.; Sessler, J. L.* *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, *144*, 174-183.

3. Wu, L.; Liu, J.; Li, P.; Tang, B.* James, T.*, *Chem. Soc. Rev.*, **2021**, *50*, 702-734.

4. Ding, Q.; Tian, Y.; Wang, X.; Li, P.*; Su, D.; Wu, C.; Zhang, W.; Tang, B.*. *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, *142*, 20735–20743.

5. Xiao, H.; Zhang, W.; Li, P.; Zhang, W.; Wang, X.; Tang, B.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *132*, 4244-4258.

6. Wang, X.; Li, P.*; Ding, Q.; Wu, C.; Zhang, W.; Tang, B.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 2061-2068.

7. Wang, X.; Li, P.*; Ding, Q.; Wu, C.; Zhang, W.; Tang, B.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 4674-4678.

8. Zhang, W.; Lu, J.; Gao, X.; Li, P.*; Zhang, W.; Ma, Y.; Wang, H.; Bo Tang*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, *57*, 4891-4896.

9. Li, Y.; Shu, Y.; Liang, M.; Xie, X.; Jiao, X.; Wang*, X.; Bo Tang*. *Angew. Chem. Int.Ed.*, **2018**, *57*, 12415-12419.

10. Li, P.; Liu, L.; Xiao, H.; Zhang, W.; Wang, L.; Bo Tang*. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 2893-2896.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

面向临床的分子成像新探针与新技术

张晓兵*
湖南大学

基于分子探针的光学成像（包括荧光、化学发光、长余辉和光声成像等）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。针对这些关键科学问题，本课题组开展了系列研究工作： 1）为了实现了复杂病理样本中生化信息的高特异性获取，提出分子结构调控开发高选择性荧光探针的策略，发展高选择性生物成像分析新方法，成功实现临床疾病样本的精准分型；2）为了降低临床样本的背景信号干扰并增强传统光学探针的组织成像深度，基于富电子蒽衍生物开发新型高亮度长余辉发光材料，发展有机长余辉发光共振能量转移精准成像分析方法，首次实现清醒动物的长余辉成像；在国际上首次提出超声发光成像技术，降低了临床样本检测中的背景信号干扰，并提升组织成像穿透深度，为实现小动物长时程成像及深层肿瘤 PDT 治疗提供新思路。

关键字 分子成像；光学探针；超声发光；有机余辉发光；精准成像

参考文献

1. Ke Li, Yifan Lv, Yan Huang, Shuai Xu, Hong-Wen Liu, Lanlan Chen, Tian-Bing Ren, Mengyi Xiong, Shuangyan Huan, Lin Yuan, Xiao-Bing Zhang*, and Weihong Tan, *Proc. Natl. Acad. Sci.U.S.A.*, **2021**, *118*, e2018033118.
2. Tian-Bing Ren, Zhi-Yao Wang, Zhen Xiang, Peng Lu, Huan-Hua Lai, Lin Yuan, Xiao-Bing Zhang*, Weihong Tan, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, *60*, 800.
3. Youjuan Wang, Jing Guo, Shiyi Liao, Li Xu, Qian Chen, Guosheng Song*, Xiao-Bing Zhang*, *Nat. Biomed. Eng.* **2024**, In press.
4. Youjuan Wang, Shiyi Liao, Li Xu, Qian Chen, Guosheng Song*, Xiao-Bing Zhang*, Weihong Tan*. *Nat. photon.* **2024**, *18*, 334-343.
5. Cheng Zhang, Bin Nan, Juntao Xu, Tengxiang Yang, Li Xu, Chang Lu, Jianghong Rao*, Xiao-Bing Zhang*, Guosheng Song*, *Nat. Biomed. Eng.* **2024**, In press.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

生物电化学传感-一种 IVD 技术探索

牛利*
中山大学

生物分析技术在医疗诊断领域中正在得到越来越广泛的应用，特别是各种生物标志物的使用极大地提高了疾病的早期诊断率和准确度，为治疗提高了重要的依据。在过去的数十年间，多种技术方法已经应用于生物标志物的检测分析中，如比色分析、荧光分析、化学发光分析、质谱分析、光谱分析等。在我们的研究工作中，一直致力于电化学分析技术方法的应用，近年来，我们通过使用多种化学及天然聚合物材料，在生物传感器的表面引入电活性探针，从而实现了对核酸和蛋白质等生物标志物的简便、快速、低成本、高灵敏的电化学分析检测。 研究工作围绕（1）基于可控自由基聚合的电化学生物传感、（2）基于天然聚合物材料的电化学生物传感以及（3）基于靶标自身聚糖链的电化学生物传感等方面，在功能应用方面，我们也探索了基于聚合物材料的电化学生物传感器在恶性肿瘤等重大疾病体外诊断（IVD）中的潜在应用。

关键字 生物传感、电化学传感、体外诊断

参考文献

1. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(16), 6200-6205.
2. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(22), 7936-7943.
3. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(26), 9481-9486.
4. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(28), 10206-10212.
5. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(37), 12860-12865.
6. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(39), 13516-13521.
7. Niu L, et al. *Anal Chem* **2022**, *94*(50), 17733-17738.
8. Niu L, et al. *Anal Chem* **2023**, *95*(9), 4570-4575.
9. Niu L, et al. *Anal Chem* **2023**, *95*(12), 5463-5469.
10. Niu L, et al. *Anal Chem* **2023**, *95*(37), 14094-14100.
11. Niu L, et al. *Anal Chem* **2024**, *96*(22), 9278-9284.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

生物标记用量子点的精确调控

庞代文*
南开大学

量子点荧光性质极为优异，是研究复杂生命动态过程的极好标记物。但是，由于量子点是无机纳米晶体，因此其生物兼容性并不好，极大地限制了其生物医学应用。为了解决量子点的生物兼容性难题，我们另辟蹊径，开创了量子点的活细胞合成方法。我们先后在真菌细胞（酵母）、细菌细胞（金黄色葡萄球菌、大肠杆菌等）和哺乳动物细胞（肿瘤细胞、犬肾细胞等）中实现了量子点的合成，甚至实现了合成的亚细胞定位及特定位点的定位，选择性地在细胞核、线粒体、内质网等细胞器中合成出荧光量子点。通过这种突破传统思维的探索，发现了超小量子点表面富阳离子结构特征以及配体精确调控量子点结构和性质的新规律，修正了表述量子点带隙能的 Brus 公式的配体项缺失。借助性能优异的量子点，建立了量子点单病毒动态示踪方法，揭示了禽流感病毒等感染动态过程的新机制。更值得一提的是，相关的量子点结构设计和调控原理，指导解决了量子点耐 250℃高温共熔挤出加工及非隔离环境下耐光、热、水、氧的稳定性世界难题，全球首创的量子点光扩散板技术已装备数百万台电视机（即量子点电视）。

关键字 量子点；生物；标记；调控

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

面向生物医学诊疗的智能微纳材料

汪联辉*
南京邮电大学

近年来，我国心脑血管等重大疾病的发病率呈逐年上升和年轻化趋势，严重威胁国民的生命健康。本工作针对心脑血管和肿瘤等疾病的临床治疗迫切需求，开展面向生物医学诊疗的智能微纳材料/机器精准设计及可控组装技术研究。通过限域界面自组装、DNA 可编程自组装、生物自组装等策略构建 DNA 自组装材料、细胞-脂质体融合材料、细胞仿生等三类智能微纳材料；研发用于血栓药物载体和肿瘤治疗的多种智能微纳递药机器或疫苗，并在动物活体实验验证了其高效的血栓和肿瘤治疗效果，为重大疾病的治疗提供新思路。

关键字 生物医学诊疗，纳米生物医学，溶栓，肿瘤诊疗

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

Ag(I)-硫醇配位聚合物的光谱和手性

江云宝*
厦门大学

pH5 的水溶液中混合 L-或 D-半胱氨酸和 Ag^+，我们观察到位于 350 nm 的吸收和相应的 CD 信号，改变半胱氨酸的手性得到镜像对称的 CD 光谱，该吸收和 CD 信号不能被指认为离子或配体自身，表明形成了手性新物种，其手性源于配体半胱氨酸。Job 实验表明离子与配体的结合计量比为 1:1；溶液 pH 远高于氨基酸配体的 pI 时，350nm 处吸收和 CD 信号消失；DLS 结果指示在 pH5 和 9 两种情形下溶液中均存在大尺寸物种。我们因此推测溶液中形成了 Ag^+-半胱氨酸配位聚合物，氨基酸侧链之间的静电作用与聚合物链上 Ag^+...Ag^+相互作用共同维系配位聚合物，远离 Ag^+...Ag^+相互作用相关的生色团的氨基酸残基的分子手性得以传递至聚合物链上，后者呈现超分子手性，其 CD-*ee* 关系曲线呈现罕见的反 S-型。进一步拓展至 *N*-酰基半胱氨酸乙酯的配位聚合物，我们发现其具有发光特性，且吸收、CD、发光和 CD-*ee* 曲线均具有一定的酰基结构相关性，从而形成了结构丰富、光谱和手性特性变化范围较宽的配位聚合物库。

感谢国家基金重大研究计划集成项目和学部科学专项的资助，感谢实验室研究生、本科生同学的辛勤努力！

关键字 配位聚合物，Ag(I)，半胱氨酸，超分子手性，CD-ee

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

时空选择性分子传感与成像

李乐乐*
国家纳米科学中心

原位分子成像已成为基础研究和疾病诊断的重要工具。核酸分子因其优异的可编程性和靶标识别能力被广泛应用于传感器设计。然而，传统核酸传感器在遇到靶标分子后立即响应并输出成像信号，缺乏时空特异性，限制了其生物医学应用。为此，我们率先提出了时空选择性分子传感概念，结合上转换发光技术利用近红外光远程调控光敏型核酸传感器的传感能力，实现了不同靶标分子的时空选择性成像分析[1]。进一步，我们将该设计与细胞器靶向策略相结合，实现了亚细胞分辨的关键生物分子特异性检测[2]。另一方面，我们开发了一系列利用酶类标志物作为内源性触发要素的激活型传感器，可以选择性地成像疾病细胞内的靶标分子，实现对特定疾病的早期诊断和动态病程追踪[3]。

关键字 传感器，分子成像，时空控制，特异性

参考文献

1. Zhao J, Di Z, Li L. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*(32), e202204277.
2. Yi D, Zhao H, Zhao J, Li L. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*(3), 1678.
3. Li M, Li L. *Acc. Chem. Res.* **2023**, *56*(12), 1482.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

RNA 成像分子工具研究

聂舟*
湖南大学

RNA 是遗传信息表达的桥梁，在多种生理病理过程中行使重要调控功能。RNA 成像在生命健康研究中具有重要意义。然而，传统 RNA 检测手段难以实现活细胞中多个 RNA 目标分子实时动态检测。近年来，我们通过改造荧光蛋白生色团，成功开发出多种功能性荧光蛋白核酸模拟物，实现了对活细胞甚至活体中 RNA 的原位成像。一方面，我们针对 G-四链体的特殊二级结构，开发了具有高倍率点亮和近红外发射性质的荧光探针，成功实现了对丙肝活病毒基因组中 RNA 在活细胞和活体中的成像。另一方面，通过分析和突变荧光 RNA 序列和结构，以及对荧光分子的改造，我们成功实现了对多个遗传编码的 RNA 的正交检测和正交光激活的时空特异性检测。这些成果为实时动态测量活体内 RNA 提供了强有力的工具。

关键字 RNA 活细胞成像 疾病监测 近红外 正交检测

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

活细胞内的定向旋转与跷跷板运动的动态成像

方宁*
厦门大学

一个细胞可被视为许多分子马达在多层面上协同工作的工厂。单颗粒旋转追踪技术（Single Particle Orientation and Rotational Tracking, SPORT）以极高的空间、时间与角度的分辨率来研究细胞内的旋转运动，并同步了相关蛋白的实时监测。通过可视化活细胞内特异性的定向旋转与跷跷板运动，可以前所未有地揭示分子马达的工作机制，理解细胞内吞、运输的原理。

关键字 单颗粒追踪、分子马达、单颗粒旋转追踪技术

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于自由基可控性量模拟功能界面的光电化学分析传感研究

韩冬雪*、范英英、王伟、马英明、刘振邦
广州大学

光电化学方法利用光作为能量激发源，将光化学与电化学方法合并运用研究，一般来说光催化主要包括光电转换这一核心过程和界面转换这一应用过程，光生载流子发生电荷分离和电荷迁移，实现由“光能”到“电能”的转换，分离的电子和空穴可分别在材料界面处发生氧化还原反应，形成光电压或光电流，最终实现化学能的转化。在这一过程中，如何实现能量的定量获取和可控应用将对实际体系的研究有着非常重要的意义，而光电敏感材料载流子调控策略研究是有效利用太阳能及实现分析传感应用的重要手段。本研究中基于光敏材料研究体系构建，采用半导体敏化、固溶体掺杂等策略，设计及制备了系列金属/非金属、半导体复合物、量子点等光电敏材料。通过进一步尺寸、表面态、晶面、等调控手段，研究了光敏材料体系的各向异性载流子行为，并将以上光敏平台应用于小分子目标物的化学测量研究中，基于此开展了食品抗氧化营养分析及其作用机制研究、食品添加剂及人体代谢物特异性光电分析及小分子光催化转化等方面的分析，并基于核心功能界面基础研究开发系列光电化学分析快检仪器设备。

关键字 光电化学；自由基模拟；分析传感；仪器集成

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

微纳界面散射成像测量

徐静娟*
南京大学

金纳米粒子由于其可调谐的局域表面等离子体共振特性和良好的生物相容性等，在生物传感和测量领域引起了广泛关注。我们课题组基于 Au 纳米粒子散射信号随介质折射率和探针耦合程度等变化的特性，探究了其在单酶反应动力学、细胞内单分子捕获和单分子反应动力学测量方面的应用，以及在激光调制下细胞内传热系数测量和电场调制下微纳尺度双电层形成过程测量等方面的工作。

关键字 金纳米粒子，散射成像，动力学测量

参考文献

1. Li, M.X.; Xu, C.H.; Zhang, N.; Qian. G.S.; Zhao, W.; Xu, J.J.; Chen, H.Y. *ACS Nano* **2018**, *12*: 3341.
2. Gao, H.; Wu, P.; Song, P.; Kang, P.; Chen, H.Y.; Xu, J.J. *Chem. Sci.*, **2021**, *12*: 3017
3. Song, P.; Gao, H.; Gao, Z.S.; Liu, J.X.; Zhang, R.P.; Kang, B.; Xu, J.J.; Chen, H.Y. *Chem*, **2021**, *7*: 1569
4. Wang, L.X.; Sun, C.; Huang, S.L.; Kang, B.; Chen, H.Y.; Xu, J.J. *Nano Lett.*, **2024**, *24*, 9743-9749
5. Wang, L.X.; Huang, S.L.; Liu, X.R.; Wu, P.; Kang, B.; Chen, H.Y.; Xu, J.J. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, *62*, e2023158
6. Wang, L.X.; Zhang, M.; Sun, C.; Yin, L.X.; Kang, B.; Chen, H.Y.; Xu, J.J. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, *61*, e202117177
7. Wang, J.; Song, J.; Zhang, X.; Wang, S.M.; Kang, B.; Li, X.L.; Chen, H.Y.; Xu, J.J. *J. Am. Chem. Soc.*, **2023**, *145*, 1273–1284

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

细胞膜功能结构域分布调控的 DNA 分子工具

李迪*
华东师范大学

细胞膜表面膜蛋白的分布以及相互作用过程的研究是深入理解其在细胞活动过程中生物功能关系的关键。脂筏作为细胞膜的微结构域，富含胆固醇和饱和鞘磷脂，具有高度流动性，尺寸约为 10-100 nm，是膜蛋白停泊的平台，在信号转导和蛋白转运等生理过程中起着重要作用。然而，由于脂筏的纳米级尺寸和高度流动性，目前尚没有方法能够定点捕获和调控脂筏域。DNA 纳米结构具有尺寸与结构可控、生物相容性好、易于修饰等特性，在脂筏定点捕获和调控方面具有独特优势。本报告将介绍我们设计的多种 DNA 纳米结构，用于标记编码脂筏区，结合单分子荧光技术，原位实时监测其细胞信号传导过程中在细胞膜动态扩散行为，探索脂筏空间分布与细胞信号传导过程的关联（Fig.1）。首先，发展了一种胆固醇功能化的 DNA 分子镊，利用胆固醇分子间的疏水相互作用，改变细胞膜上饱和磷脂和胆固醇扩散速度，诱导脂筏相关组分的聚集，进而激活 T 细胞。为实现脂筏域空间分布的定点调控，我们设计了核酸适配体识别脂筏标志物霍乱毒(CTxB)，通过 ATP 激活的 DNA 杂交链式反应（HCR）调控脂筏分布，展示了其调控细胞迁移行为的可行性。进一步，我们设计了与脂筏尺寸匹配的矩形 DNA 纳米折纸（60 nm × 90 nm)，利用 DNA 折纸的杂交聚集脂筏区，为操纵多种细胞功能提供了新的可能性，有利于建立脂筏分布规律和细胞功能之间的关联

关键字 细胞膜，DNA，细胞功能

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

从单分子荧光到单分子化学发光

冯建东*
浙江大学

单分子化学反应信号微弱，反应过程和位置具有随机性，很难有效追踪和控制。直接成像单分子反应是一个长久科学挑战。荧光成像无法完全避免激发光背景，我们利用化学发光替代光学激发，提出单分子时空隔离策略，发明了单分子电致化学发光显微镜，在全暗背景下直接观察到了溶液单分子电化学反应，实现了成像技术的创新。进一步开发了不依赖电激发的单分子化学发光显微镜，可进行溶液深层次的化学成像。利用化学发光实现单分子成像的单分子化学显微术是一个新的单分子技术，已被应用于生物成像、催化测量、定量分析，为化学测量和生物成像提供了一个新工具。

关键字 单分子，化学发光，显微镜

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于电化学发光成像的单颗粒和细胞分析

朱俊杰*
南京大学

电化学发光 (ECL) 是一种可控的化学发光形式，其发射强度受电极表面电压的影响。通过与光学显微镜的结合，ECL 成像技术在研究高时空分辨率的生物相关事件方面显示出较好的应用潜力。我们课题组在自制 ECL 显微镜的基础上开发了一系列单颗粒和细胞的分析的成像技术。例如通过调节 ECL 显微镜可以监测蛋白冠的形成动力学，在比较了不同复杂体系和不同纳米药物载体的蛋白冠形成动力学后，通过钌联吡啶和多种蛋白质在不同载体表面的竞争吸附，证明了该技术的通用性和准确性。为了提高 ECL 成像的灵敏度，我们采用了温度调节的 ECL 成像策略。由于 ECL 发射层受 ECL 反应路径的影响，我们记录了温度升高的细胞的 ECL 图像，从而提供了在特定高度内灵活调节成像范围的方法。为了提高空间选择性，我们报道了一种位点选择性热增强电化学发光显微镜，通过在电极-溶液界面处原位产生微米级的热点使得发光强度提高 63 倍，外加电压提高 0.2 V。为了提高空间分辨率，我们也开发了单细胞成像的受激发射路径，该显微镜使用聚焦的红移光束将自发 ECL 转移到受激 ECL，从而可以选择性和可逆地调整来自均质溶液、单个颗粒和单个细胞的 ECL 发射。此外，与共聚焦 ECL 模式相比，单细胞基质粘附的清晰度提高了 2～3 倍。结果表明，ECL 显微镜提供了一种新的单颗粒和细胞可视化方法，拓展了 ECL 技术在生物分析领域的应用。

关键字 单颗粒；细胞分析；电化学发光成像

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

细胞活性连续实时动态监测仪

吴爱国*、杨方、姜波
中国科学院宁波材料技术与工程研究所

细胞活性是指细胞在正常生理或病理状态下增殖、迁移、分化和代谢的能力。而细胞活性异常与重大疾病的发生、发展及其演进过程密切相关，例如肿瘤转移侵袭、组织修复再生等，因此，监测细胞活性状态变化对揭示重大疾病演进机制具有重要科学意义。现有细胞活性监测主要依赖分子标志物的光学信息[1]，难以准确反映细胞活性状态变化。以细胞黏附力和牵引力等为代表的细胞力学物理信息同样也是评价细胞活性的重要指标[2]。因此，细胞力学物理信息的获取及其与分子标志物光学信息的有效融合能够为细胞活性评价提供更准确全面的信息。

细胞黏附力是细胞与基质之间的作用力，作为细胞的主要力学特征，在细胞增殖、迁移等动态变化过程中黏附力的变化范围在 pN~nN 之间，变化时间在μs~ms 之间。而现有的细胞黏附力检测方法如 AFM 主要是通过非动态瞬时点接触进行测定，难以全面反映黏附力变化过程；而传统的微悬臂梁检测方法主要是基于频率检测，难以达到 pN 级检测灵敏度，因此亟需发展高精度、实时监测细胞黏附力的新原理与新方法。目前，细胞黏附力的检测仪器，主要有原子力显微镜和光镊等，这些仪器难以实现 pN 级实时动态监测；而分子标志物光学测量仪器，无法直接获取细胞黏附力等物理信息，并且国内外尚无细胞黏附力与分子标志物同步监测分析平台。

微悬臂梁力学传感具有无标记、连续实时监测的优势，我们团队经过 7 年多的研究，在国际上率先提出了基于微悬臂梁振幅变化原理来测定细胞黏附力的新方法，并于 2020 年获得了美国专利的授权（US 11333661B2）。而多模光学检测在分子标志物检测方面具有高灵敏和高特异性，通过将明场、荧光、相位等信息融合，有望实现细胞黏附力与分子标志物同步监测，发展出具有自主知识产权的黏附力与多模光学信息同步测量细胞活性的仪器。

因此，我们提出基于微悬臂梁的高灵敏黏附力检测方法；研发基于高杨氏模量材料的微悬臂梁结构，提高其动态响应特性；同步获取细胞活性、黏附力与多模光学动态信息，并建立基于数据驱动的关联关系模型；研制融合黏附力与多模光学信息一体化同步测量的细胞活性实时监测仪器，实现细胞活性的高精度实时动态监测。本仪器包括两个主体模块：黏附力监测分析模块和多模式光学成像模块，以及两个辅助模块：细胞培养与筛选分离模块、数据采集和分析模块。通过研制专业化、高度集成的细胞动态活性连续实时监测仪器，实现细胞黏附力与分子标志物同平台测量，推动相关领域研究。

关键字 细胞活性、 连续实时动态监测、微悬臂梁技术

参考文献

1. D. Hanahan, R. A. Weinberg, *Cell*, **2011**, *144*(4), 646-670
2. H. T. Nia, L. L. Munn, R. K. Jain, *Science*, **2020**, *370*, 546-549

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

DNA 动态自组装用于调控亚细胞结构与功能

毕赛*
青岛大学

作为一个复杂的生物体系，细胞的环境、结构和功能始终处于动态平衡中。线粒体是与新陈代谢、氧化还原和信号传导等密切相关的亚细胞结构，线粒体动态平衡失调会影响其正常的生理功能，并与多种疾病的发生和发展密切相关，如引发神经退行性疾病、糖尿病、癌症等。因此，合理干预线粒体，进而调节细胞行为和命运可为疾病治疗提供有效策略。目前，构建与细胞内生理活动相耦合的动态组装体系，实现对细胞功能的精确调控仍面临巨大挑战。本工作设计了具有刺激响应性和靶向性的两种 DNA 发夹探针，经过脂质体转染进入细胞后，在内源性物质（miRNA-21）的诱导下，发夹探针原位发生杂交链反应（hybridization chain reaction，HCR），形成一维线性 DNA 纳米结构。修饰于 DNA 发夹探针上的花菁染料（Cy3/ Cy5）可诱导纳米结构靶向线粒体表面并干扰线粒体的正常功能，引起活性氧和 Ca2+ 水平异常升高、膜电位下降、三磷酸腺苷（ATP）减少等。同时，ATP 的缺乏导致 miRNA-21 高表达的 MCF-7 细胞的迁移受到显著抑制。这种原位刺激响应自组装策略能够在活细胞水平上实现对线粒体功能的有效干预，进而对细胞行为进行动态调控，为癌症等重大疾病的精准治疗提供新思路和新方法。

关键字 线粒体；杂交链反应；原位自组装；细胞行为动态调控

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

单实体碰撞电分析化学

周一歌*
湖南大学

单颗粒碰撞电化学是近年来发展的一种新型电分析化学技术，该技术利用电解液中进行布朗运动的纳米颗粒与超微电极表面碰撞时刻发生的电化学反应，可实现纳米限域条件下单个纳米颗粒性质的高时间分辨率、高通量的原位、动态考察及相应反应动力学和机理的探索。除此之外，单颗粒碰撞电化学在反应过程上与颗粒修饰的固定电极具有显著区别。首先，单颗粒碰撞过程中反应分子的物质传输为高效球形扩散，传质效率相对固定电极明显提升；其次，单颗粒只在碰撞过程中反应，因此反应模式由固定电极的长时间、连续性模式转变为短时间、间断性模式。本报告将基于单颗粒碰撞电分析化学，对复杂电化学反应过程及机制进行解析与阐述，并将单颗粒碰撞电化学概念拓展至单细胞电化学分析。

关键字 单颗粒碰撞电化学；等离激元增强电化学；电化学反应动力学与机制；反应选择性；红细胞

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

核酸单碱基分辨率可视化检测

邓锐杰*
四川大学

基因单碱基突变是驱动人类疾病发生和病原进化的重要因素，例如，人体约 60%的致病性基因变异是单碱基突变，同时，单碱基突变可引发细菌、病毒等病原体耐药性和免疫逃逸。发展复杂生物体系中单碱基分辨的核酸分子测量方法，对疾病解析、诊断和传染病监控具有重要意义。我们致力于发展单碱基分辨的核酸分子检测技术，针对复杂的长链 RNA 靶标，通过热力学计算辅助，综合以靶标核酸结构与序列杂交综合指导设计，构建高特异性的突变识别探针；发展探针与酶的偶联以及核酸编码扩展，建立了核酸单碱基分辨的可视化检测方法，提升了核酸检测的精度、时效性和适用性，成功应用于病原现场检测和肿瘤分型。

关键字 病原微生物；基因突变；耐药；生物安全

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

DNA 纳米器件用于 DNA/RNA 甲基化的定量分析与原位成像

卓颖*、唐家豪、赵美玲、雷燕梅、袁若
西南大学

作为基因表达途径的关键参与者，DNA 和 RNA 的表观遗传修饰水平及其相关蛋白酶的表达水平对评估疾病的发生、发展进程具有重要意义。因此，对于 DNA 和 RNA 表观遗传的研究有助于推进表观遗传学的研究和分析疾病与基因组的关系，从而更好地预防、诊断和治疗疾病。随着核酸纳米技术的发展，DNA 纳米器件由于其优异的生物相容性和精确的可编程性在生物传感，分子成像等方面表现出卓越的优势。最近，我们基于 DNA 纳米器件构建了多种生物传感器用于 DNA 表观遗传修饰相关酶的研究，包括以下方面：①基于目标物转换与有序 DNA 轨道构建电化学发光生物传感策略 1,2,3；②基于表观遗传修饰相关蛋白酶介导的 DNA 构型转换构建电化学发光传感策略 4,5,6；③基于生物正交反应原位靶向构建荧光生物传感策略 7,8。以上策略的构建为 DNA/RNA 表观遗传的研究发展了高效位点识别和信号扩增的甲基化定量分析体系，为实现精准时空分辨成像提供了有力的基础支撑。

关键字 DNA/RNA 表观遗传修饰；DNA 纳米器件；DNA 甲基化转移酶；电化学发光生物传感器

参考文献

1. X. R. Li, L. Wang, W. B. Liang, R. Yuan, Y. Zhuo, *Anal. Chem.*, **2022**, *94*, 3313-3319.
2. F. Yang, W. B. Liang, X. Yang, R. Yuan, Y. Zhuo, *Anal. Chem.*, **2022**, *94*, 16402-16410.
3. M. C. Pan, M. H. Gao, W. B. Liang, X. Yang, R. Yuan, Y. Zhuo, *ACS Sens.*, **2022**, *7*, 2475-2482.
4. H. Gao, M. C. Pan, P. Zhang, W. B. Liang, X. Zhong, Y. Zhuo, *Anal. Chem.*, **2023**, *95*, 9598-9604.
5. W. Li, W. Liu, X. Yang, W. B. Liang, R. Yuan, Y. Zhuo, *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 1651-1658.
6. W. W. Yang, M. L. Zhao, M. L. Liu, W. B. Liang, X. Zhong, Y. Zhuo, *ACS Sens.*, **2024**, *9*, 344-350.
7. W. J. Zeng, X. R. Li, W. Liu, R. Yuan, W. B. Liang, Y. Zhuo, *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 2117-2123.
8. M. H. Gao, X. H. Yang, J. H. Tang, X. M. Zhou, Y. M. Lei, Y. Zhuo, *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 12546-12552.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

DNA 纳米探针与生物标志物原位测量

刘颖*、毕诗艺、王彩霞、方燕云、王莹菲、鞠熀先
南京大学

DNA 作为自然存在的聚合物大分子，不仅是生物遗传信息的载体，由于其良好的生物相容性、低毒性和严格遵循的碱基互补配对原则，更可作为有序的结构单元自组装构建纳米材料。智能响应 DNA 纳米机器能够利用生物信号或外部刺激调控 DNA 的杂交与解离，进而引发材料整体构型与运动状态的“刺激-响应”变化，在生命分析、疾病精准诊疗与医学仿生领域具有重要价值。

生物标志物分子在活体中含量偏低，同时分布广泛。在为其设计信号放大策略的同时需要防止其被非特异性激活，产生成像过程中的假阳性信号或治疗过程中的“脱靶效应”。针对这一问题，我们一方面设计 DNA 级联反应放大测量信号，实现生物标志物分子近红外二区的原位成像。另一方面利用上转换纳米材料在近红外光照下发射紫外/可见光的特点，设计智能响应策略提高诊疗可控性与选择性。结合光照构型改变的有机小分子设计了一系列自组装 DNA 纳米机器，通过光照响应断裂的小分子调控 DNA 纳米机器的运行，实现了肿瘤细胞中 miRNA 的高灵敏检测与高效肿瘤治疗。同时，我们进一步提高智能响应的精确度，克服光照面积难以实现单个细胞区分的局限，设计“跨细胞膜 DNA 逻辑运算”策略与具有肿瘤细胞选择性的受体聚集调控策略，实现了肿瘤细胞选择性的靶标分子降解。有效提高了 DNA 探针对靶标细胞的识别特异性与治疗准确度，在高效精准诊疗中具有应用潜力。

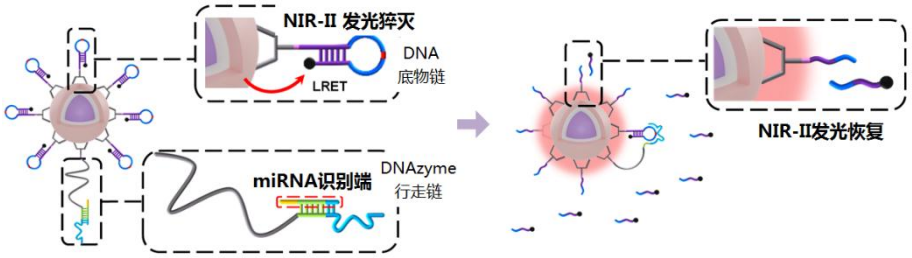


Fig. 1 NIR-II signal amplification for miRNA *in vivo* imaging.

关键字 DNA 纳米机器；上转换纳米材料；DNA 逻辑门；miRNA 检测；肿瘤治疗

参考文献

1. Wang, C.; Xie, Y. X.; Song, X. F.; Chao, Z. C.; Wu, K.; Fang, Y. Y.; Zhao, H. X.; Ju, H. X.; Liu, Y.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, e202312665.
2. Zhang, Y.; Chen, W.; Zhang, Y.; Zhang, X.; Liu, Y.*, Ju, H.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 21454-21459.
3. Zhang, Y.; Chen, W.; Fang, Y.; Zhang, X.; Liu, Y.*, Ju, H. X.* *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 15233-15242.
4. Bi, S.; Chen, W.; Fang, Y.; Wang, Y.; Zhang, Q.; Guo, H. Q.; Ju, H. X., Liu, Y.* *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 5041-5052.
5. Bi, S.; Chen, W.; Fang, Y. Y.; Shen, J. Y.; Zhang, Q.; Guo, H. Q.; Ju, H. X.; Liu, Y.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202402522.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

实时多维度单分子动态示踪显微成像

侯尚国*
深圳湾实验室

细胞内生物分子之间的动态相互作用构成了生命活动的基础，研究其相互作用动态过程有望揭示最本质的生命活动的分子机制。而在多个维度上对生物分子的动态行为进行观测可以提供更全面的信息。其中，荧光光谱可以提供丰富的关于分子环境和相互作用的物理化学性质信息，如 pH、极性和分子手性等。然而，长时间观察快速移动的生物分子的荧光光谱动态仍然是一个重大挑战。近期，我们开发了一种基于目标锁定机制的实时三维单分子动态示踪成像技术（3D-SMART）。3D-SMART 利用电光偏转器和可调声梯度透镜实现激光焦点的快速三维扫描，通过关联荧光光子的探测时间信息和激光焦点的位置信息实现实时三维单分子定位，并通过主动反馈控制纳米位移台，使得目标荧光分子被锁定在激发区域之内。这种基于目标锁定机制的单分子示踪方法有效的解决了时间精度、空间定位精度和观测时长之间难以平衡问题。此外，我们还开发了一种增强型深度学习的单分子光谱成像方法，称为 SpecGAN。在 SpecGAN 中，提取单分子荧光光谱所需的光子通量可以减少 100 倍。与传统单分子光谱仪相比，其时间分辨率提高了两个数量级。结合 3D-SMART 和 SpecGAN，我们能够实现多维单分子追踪，可以同时揭示生物分子的三维位置动态和光谱动态。这种多维单分子追踪方法有望成为研究生物分子相互作用动态的强大工具。

关键字 单分子示踪；单颗粒示踪；单分子光谱；荧光光谱；多维成像

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

新型 NIR、自发光探针的成像及治疗研究

唐艳丽*
陕西师范大学

共轭聚合物具有长程π电子共轭体系，因而具强的吸光性能及高的荧光量子产率，并且在光照下可产生大量活性氧物质，近年来，共轭聚合物在生物传感、细胞成像、光动力学疗法等方面的研究受到了人们的普遍关注。本课题组近年来设计合成了系列功能化共轭聚合物荧光探针，利用探针优异的荧光发光特性，建立了多种高选择性、高灵敏、超快速响应的疾病标志物成像、传感新方法。并且，为了解决激发光组织穿透深度有限、生物组织背景荧光干扰等问题，本课题组首次设计合成了自发光型共轭聚合物探针，通过分子内的化学发光共振能量转移机制（CRET），实现了高灵敏的深层组织化学发光炎症成像及肿瘤成像，并进一步实现了无需激发光的高效光动力抗肿瘤治疗。在此基础上，为了避免由于 CRET 机制导致的能量损失，提高化学发光效率，我们通过电子给体工程策略设计了系列单分子化学发光探针，合成得到了具有 NIR-I 区发光特性的单分子探针 TTBL 和具有超高荧光量子产率的化学发光探针 FTBL，实现了腹膜炎、结肠炎等炎症小鼠模型的高灵敏化学发光成像。进一步地，设计合成了具有高荧光量子产率的 NIR-II 探针以及具有 NIR-II 成像、Type-I 型 PDT/PTT 为一体的光诊疗新型探针，实现了高灵敏活体成像及高效诊疗一体化。我们的研究为生物成像及治疗提供了新材料、新思路。

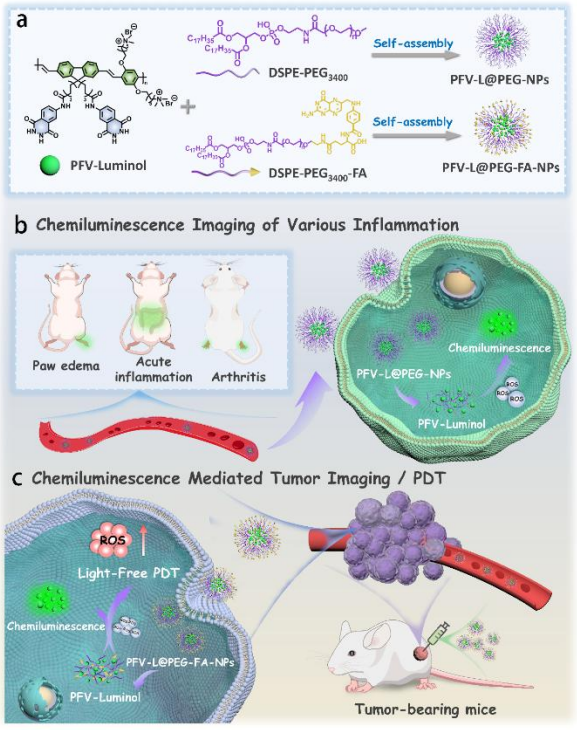


图 1. 化学发光共轭聚合物纳米粒子的合成及其在炎症成像、肿瘤治疗方面的应用示意图。

关键字 共轭聚合物、自发光探针、NIR-II 探针、化学发光成像、诊疗一体化

参考文献

1. L. Li, X. Zhang, Y. Ren, Q. Yuan, Y. Wang, B. Bao, M. Li, Y. Tang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, *146*, 5927.
2. B. Bao, Q. Yuan, Q. Feng, L. Li, M. Li, Y. Tang, *CCS Chem.*, **2024**, *6*, 693.
3. Q. Yuan, J. Yin, L. Li, B. Bao, X. Zhang, M. Li, Y. Tang, *Adv. Sci*, **2024**, *11*, 2304048.
4. J. He,Y. Wang, Y. Ren, Q. Yuan, Z. Zhang, L. Li, B. Bao, W. Jia, X. Zhang, M. Li, Y. Tang, *ACS Nano*, **2024**, *18*, 24953.
5. Y. Wang, Q. Yuan, M. Li, Y. Tang, *Adv. Funct. Mater.*, **2023**, *33*, 2213440.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基因编码 RNA 自组装用于细胞成像研究

任克维*
南京理工大学

基因编码技术可以在细胞内原位转录生成 RNA，利用荧光 RNA 适配体作为信号分子，能够被用于设计传感器，实现细胞内生物分子检测与成像。基于基因编码 RNA 自组装技术和荧光 RNA 适配体，我们发展了多种细胞成像新方法。通过在细胞内原位构建 RNA 级联反应线路，实现了信号放大，提高了检测的灵敏度；通过构建三维结构的 RNA 凝聚体传感器，提供分子拥挤的局域环境，改善了 RNA 适配体的性能，提高了传感器的稳定性。另外，RNA 凝聚体传感器可以使多个荧光分子聚集，提高了信号强度，比均相自由分散的传感器有更强的亮度和灵敏度。这些设计在细胞成像和调控中有很好的应用前景。

关键字 基因编码 RNA 自组装；荧光 RNA 适配体；RNA 级联反应；RNA 凝聚体

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

人造细胞的构建、可控组装及其组织模拟研究

韩晓军*
哈尔滨工业大学

生命从细胞开始。人造细胞是指能模拟细胞部分（或全部）功能的类细胞结构。通过自下而上构建人造细胞可揭示细胞的运行机制，为生命起源提供理论基础。由于磷脂分子本身就是细胞膜的重要组分，因此用其构建人造细胞具有天然的优势。我们课题组长期从事基于磷脂分子的人造细胞研究[1]，针对本领域存在的问题，近年来开展了如下研究：1）在非球形细胞器的模拟方面，提出了囊状堆叠人工细胞器的构建方法[2]，制备出能捕获光能的人工叶绿体基粒和具有螺旋结构的人工内质网；2）在人造细胞内构建了糖酵解代谢途径[3]，实现了能量的可控生成、及其驱动的人造细胞形变[4]；3）利用 Par 蛋白系统实现了遗传物质质粒分离以及子代遗传[5]，构建了可分裂的人造“真核细胞”[6]，实现了人造细胞内两个“细胞器”之间的化学信息交流； 4）在人造细胞的群体行为方面，利用外场（如声场等）建立了研究人造细胞群的构建方法，实现了人工组织的血管舒张和肌肉收缩功能作用。[5-8]

关键字 人造细胞，磷脂囊泡，分裂，代谢

参考文献

1. Wang, X.; Du, H.; Wang, Z.; Mu, W.; Han, X.* *Adv. Mater.*, **2021**, *33*, 2002635
2. Li, Q.; Han, X.*, *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1707482.
3. B. Yang, C. Li, R. Ren, W. Wang, X. Zhang*, X. Han*, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 31, 21847.
4. Li, C.; Zhang, X.; Yang, B.; Wei, F.; Ren, Y.; Mu, W.; Han, X.*, *Adv. Mater.*, **2022**, *34*, 2204039.
5. Zhao, J.; Han, X.* *Nat. Commun.*, **2024**, *15*, 4956.
6. Zong, W.; Ma, S.; Zhang, X.; Wang, X.; Li, Q.; Han, X.* *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 9955.
7. Li, Q. Li S.; Zhang, X.; Xu, W.; Han, X.* *Nat. Commun.*, **2020**, *11*, 232.
8. Zhang, X.; Li, C.; Liu, F.; Mu, W.; Ren, Y.; Yang, B.; Han, X.* *Nat. Commun.*, **2022**, *13*, 2148.
9. Li, S.; Zhao, Y.; Wu, S.; Zhang, X.; Yang, B.; Tian, L.*;, Han, X.*, *Nat. Commun.*, **2023**, *14*, 7507.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

框架材料电化学发光机制与单晶成像

雷建平*
南京大学

电化学发光（ECL）的关键步骤是控制阴阳离子自由基之间的湮灭。本文设计了一系列包括 MOFs 和 COFs 在内的电活性框架材料作为晶态 ECL 纳米发光体，澄清了各种拓扑框架结构的 ECL 发光增强机制。另一方面，设计了一种新型混配 MOF，创建了一种框架晶体多色 ECL 成像方式。

关键字 框架材料，电化学发光，，传感机制，多色成像

参考文献

1. R. G. Luo, X. Luo, H. C. Xu, S. S. Wan, H. F. Lv, B. E. Zou, Y. F. Wang, T. R. Liu, ... Y. X. Tian, K. Xi, S. Yuan, X. J. Wu, H. X. Ju, J. P. Lei, J. Am. Chem. Soc., **2024**, *146*, 16681.
2. T. R. Liu, Q. T. Tao, Y. F. Wang, R. G. Luo, J. Ma, J. P. Lei, J. Am. Chem. Soc., **2024**, *146*, 18958.
3. X. X. Meng, L. F. Zheng, R. G. Luo, W. S. Kong, Z. Y. Xu, P. F. Dong, J. Ma, J. P. Lei, Angew. Chem., Int. Ed., **2024**, *63*, e202402373.
4. R. G. Luo, D. Zhu, H. X. Ju, J. P. Lei, Acc. Chem. Res., **2023**, *56*, 1920.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于菁类分子探针的活体成像分析

林静*
深圳大学

运用影像学技术对生命体内的生物分子和变化过程进行可视化的测量，亟需开发可精准灵敏示踪疾病相关生物标志物的活体成像探针，从而实现疾病的早期诊断，诊疗以及预后评估。我们课题组围绕“如何提升活体成像示踪的精准性和灵敏度”，设计和开发了一系列智能响应的花菁、半花菁、克酮酸菁等菁类分子探针，分别用于活体近红外二区荧光/光声双模态实时成像；亚稳态 Fe2+、Cu+等活体递送监测；以及一系列生物离子、酶、气体信号分子等活体成像分析。

关键字 活体分析、智能传感、荧光成像、光声成像、分子探针

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

活细胞动态分析

钱若灿*
华东理工大学

细胞生理状态与行为的动态变化与重大疾病的发生发展密切相关。目前构建活细胞动态分析的方法有限，已有方法多是对细胞进行快照式静态检测，难以实现持续动态分析，制约了对细胞生命过程的深入理解和应用前景。针对上述问题，申请人聚焦活细胞动态分析，取得系列创新性研究成果：①基于超微玻璃电极纳米人工通道，提出亚细胞精准动态分析新方法；②构建金属离子特异性激活的 DNA 功能结构，发展细胞内外识别动态分析新策略；③基于超微玻璃电极构建内壁性质可调的跨膜通道，建立跨膜传递动态监测新体系。近五年以第一/通讯作者发表论文 39 篇（Nat. Commun. 1 篇、JACS 1 篇、Angew. Chem. 2 篇、Anal. Chem. 9 篇），总引用 2000 余次。

关键字 细胞分析

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于酶分子工具创建的生物分析新方法

雷春阳*
湖南大学

生物分子工具对靶标的精准识别与高效信号放大是生物分析化学的方法学基础。然而，天然生物大分子在响应功能上存在的局限已成为制约该领域发展的瓶颈之一。酶是生物分析化学中广泛应用的信号放大分子工具，但缺乏活性开关机制与靶标识别能力。针对酶分子工具在响应功能上存在的局限，运用分子工程对酶催化体系中酶蛋白及底物分子进行理性改造，开展基于酶分子工具创建的生物分析方法研究。主要研究包括：（1）建立了计算指导的蛋白质工程体系，提升了面向生物分析化学的酶分子改造效率与精准性；（2）创建了靶标响应的酶分子开关，实现了临床样品中蛋白酶标志物的高灵敏分析；（3）发展响应型底物化学协同传感策略，建立了基于 CRISPR/Cas 酶的通用性生物传感体系。

关键字 酶分子工程；生物传感；生物分析；CRISPR-Cas

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

胞内细菌感染的靶向识别、成像与高效清除

何学文*[1]、张静[1]、唐本忠[2]
1. 苏州大学
2. 香港中文大学（深圳）

胞内细菌感染因为其能逃避细胞和机体的免疫清除以及严重的耐药性问题，对人类的生命健康造成了严重的威胁。本论文提出了一种基于聚集诱导发光光敏剂与核酸共同修饰的多功能活性噬菌体偶联物探针(MS2-DNA-AIEgen)应用于细胞内细菌成像和消除的新策略。将 DNA 共价修饰到噬菌体外壳蛋白的表面，使噬菌体偶联物转化为核酸纳米球结构，能够快速地进入哺乳动物细胞，进而特异性地识别胞内感染的细菌，并对其进行荧光标记成像。同时借助聚集诱导发光光敏剂的优异光动力活性和噬菌体对宿主细菌本身的侵染性能，在白光照射下产生的 ROS 可以对细胞内靶标细菌进行高效地协同杀伤，并恢复受感染细胞的活性。此外，对于细菌感染的糖尿病伤口模型，噬菌体偶联物能够起到良好的杀菌与促进伤口愈合的效果，也能激发受感染细胞的免疫活力，证明所构建的多功能 MS2-DNA-AIEgen 偶联物结合了噬菌体的特异性靶向能力、核酸纳米球的快速细胞膜穿透能力和聚集诱导发光光敏剂的优异荧光成像和光动力活性，可协同成像和消灭胞内细菌。这种多功能的活性噬菌体偶联物为对付胞内细菌感染提供了一种新的策略，非常有潜力应用于胞内细菌感染引起的相关疾病的研究与诊断治疗。

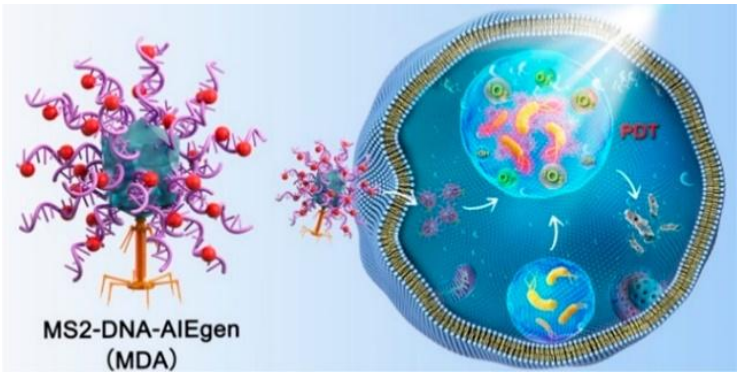


Fig. 1 Bacteriophage bioconjugate for specific targeting and synergistic elimination of intracellular bacteria

关键字 胞内细菌感染；噬菌体；荧光成像标记；聚集诱导发光光敏剂；靶向；

参考文献

1. J. Zhang, X. He, B. Z. Tang, *ACS Nano*, **2024,** 18, 3199- 3213.
2. X. He, Y. Yang, G. Xie, B. Z. Tang, et al. *J. Am. Chem. Soc.,* **2020,** 142, 3959-3969.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

肼通过取代基诱导卟啉氢键有机框架调节外部微环境来增强电化学发光和传感应用

崔琳*[1]、杨云聪[1]、宋琳琳[1]、曹雪婷[1]、楚文琪[1]、张春阳[2]
1. 山东师范大学
2. 东南大学

基于卟啉的氢键有机框架（HOF）由于其更高的溶解度、化学稳定性和可调节的框架行为，为研究电荷转移的电化学发光（ECL）基础提供了一个优越的平台。本文基于修饰有2,4-二氨基三嗪基（DAT）、羧基和腈基团的卟啉构造板，合成了三种 HOF，包括 TDPP-HOF、TCPP-HOF 和 TCNPP-HOF，以研究它们的 ECL 性能。肼可以在低激发正电势下引发 TDPP-HOF 的 ECL 发光，产生比 TCNPP-HOF 和 TCPP-HOF 增强 15.8 倍和 112.9 倍的 ECL 信号。实验结果和密度泛函理论计算表明，电子空穴复合受到更多抑制，肼和 HOF 的结合能（ΔE）更强，可以增强 ECL 性能。因此，肼通过取代基诱导卟啉氢键有机框架调节外部微环境来增强电化学发光。我们构建了一种简单的基于 TDPP-HOF 的 ECL 传感器，用于灵敏检测双酚 A。该传感器具有良好的重现性、出色的稳定性和高灵敏度，检测限 (LOD) 为 0.75 nM。该研究为通过调节 HOFs 外部微环境来提高 ECL 性能提供了新途径。

关键字 电化学发光，卟啉氢键有机骨架，取代基，外部微环境调节，传感，酚类化合物

参考文献

1. Q.-Q. Jiang, X. Wang, Q. Wu, Y.-J. Li, Q.-X. Luo, X.-L. Mao, Y.-J. Cai, X. Liu, R.-P. Liang, J.-D. Qiu, *Angew. Chem. Inter. Ed.* **2023**, 62, e202313970;
2. J. Xue, L. Yang, Y. Jia, H. Wang, N. Zhang, X. Ren, H. Ma, Q. Wei, H. Ju, *ACS Sens.* **2019**, 4, 2825.
3. M. Mayer, S. Takegami, M. Neumeier, S. Rink, A. Jacobivon Wangelin, S. Schulte, M. Vollmer, A. G. Griesbeck, A. Duerkop, A. J. Baeumner, *Angew. Chem. Inter. Ed.* **2018**, 57, 408.
4. J. Shu, Z. Han, T. Zheng, D. Du, G. Zou, H. Cui, *Anal. Chem.* **2017**, 89, 12636.
5. R. Zhang, F. Tong, L. Yang, J. R. Adsetts, T. Yan, R. Wang, Z. Ding, H.-B. Wang, *Chem. Commun.* **2018**, 54, 9897.
6. Z. Han, Y. Deng, X. Liu, P. Zhang, X. Lu, *Anal. Chem.* **2022**, 94, 17709.
7. G.-F. Gui, Y. Zhuo, Y.-Q. Chai, Y. Xiang, R. Yuan, *Anal. Chem.* **2014**, 86, 5873.
8.X.-L. Cai, B. Zheng, Y. Zhou, M. R. Younis, F.-B. Wang, W.-M. Zhang, Y.-G. Zhou, X.-H. Xia, *Chem. Sci.* **2018**, 9, 6080.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于 DNA 的仿生细胞外基质体系用于细胞功能的干预与分析

郑娇、毕赛*
青岛大学

细胞外基质（ECM）是维持细胞结构与代谢平衡的三维生物网络。作为调制细胞应答的关键介质，该结构通过参与物质运输与信号传导，对细胞行为干预与功能重塑至关重要。受到该启发，我们设计了具有长效、稳定细胞包封效应的自适型 DNA 仿生 ECM 模型，为细胞应答过程的动态监测与高效调控建立了通用平台。该仿生体系以 DNA 框架单元模拟 ECM 结构蛋白，并修饰了柔性的 DNA 功能单元以增强体系的特异性与功能性。作为概念验证，所设计的药物负载型仿生 ECM 体系，在酸性肿瘤微环境刺激响应下，原位搭建多价的 ATP 分子传感平台，用于实时监测细胞凋亡行为。进一步，基于 T 细胞免疫应答对细胞代谢与疾病防御具有关键调控作用，通过原位诱导 CD3 蛋白的特异性聚集，构建的 T 细胞激活型 ECM 仿生平台可用于 T 细胞对肿瘤细胞的靶向干预与杀伤。综上，我们提出了一种多功能、可编程的通用型仿生 ECM 模型，为揭示肿瘤细胞的生理病理及免疫干预具有重要意义。

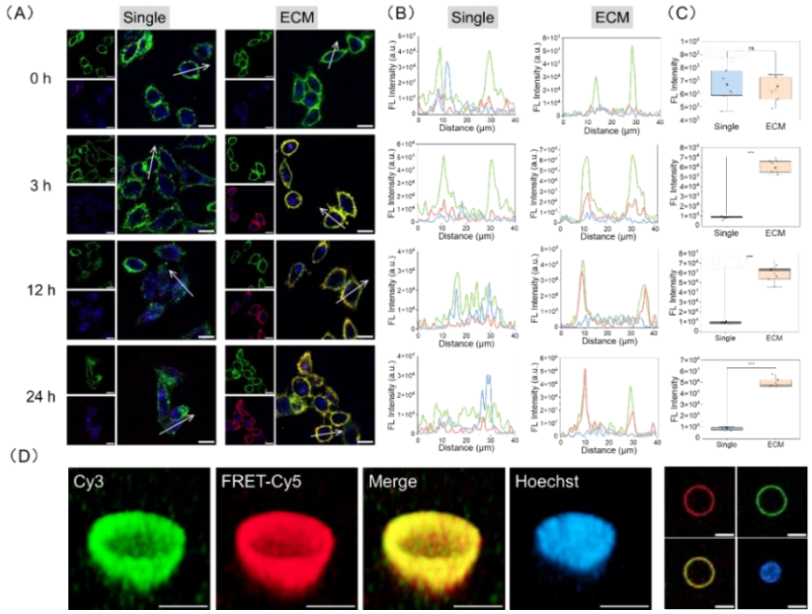


图 1. 基于 DNA 的仿生 ECM 体系的构建与表征。

关键字 细胞外基质；功能框架核酸；细胞功能；免疫干预

参考文献

1. X. Zhou, H. Geng, P. Shi, H. Wang, G. Zhang, Z. Cui, S. Lv, S. Bi. *Biosens. Bioelectron.*, **2023**, 247, 115916.
2. J. Zheng, Q. Wang, L. Shi, P. Peng, T. Li. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60, 20858-20864.
3. J. Zheng, Q. Wang, L. Shi, L. Shi, T. Li. *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 9097-9105.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

稀土配合物分子探针及其在生物传感和生物成像中的应用

宋波*、袁景利
大连理工大学

稀土元素因其独特的物理化学性质吸引了化学家、生物学家和医学研究者的广泛关注，特别是稀土配合物分子探针为生物医学研究和临床诊断提供了一个十分有力的工具。本报告着重介绍稀土配合物分子探针在荧光成像和磁共振成像中的应用研究。首先，使用长寿命发光的稀土配合物为探针，采用时间分辨荧光检测技术，本课题组开发了一系列时间分辨荧光（TGL）探针。该探针有效消除了短寿命生物背景荧光对测定的干扰，可用于各种生物活性分子（如 ROS、RNS、RSS 等）的高灵敏度 TGL 生物传感和生物成像。这些探针的开发将为理解生物活性分子的生理和病理功能以及相关疾病的诊断和治疗提供有用的工具。

此外，为了将 MRI 技术（高空间分辨率和深组织穿透性）的优点与时间分辨荧光成像（TGLI）技术（高灵敏度和高选择性）的优点有机的结合起来，本课题组开发了一系列基于稀土配合物的双模式 TGLI-MRI 探针，用于体外和体内肿瘤细胞和生物活性分子的 TGLI-MRI 检测。建立的 TGLI-MRI 方法在生物医学和生命科学研究以及临床诊断和治疗中具有良好的应用前景。

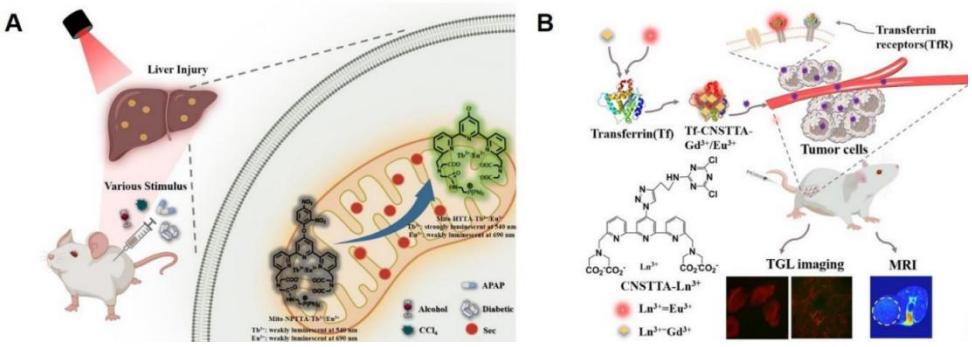


图 1. A） 可检测线粒体中硒代半胱氨酸的比率型 TGL 探针。（B） 基于铕(III)/钆(III)配 合物的肿瘤靶向 MRI/TGLI 双模式探针。

关键字 分子探针，稀土配合物，时间分辨荧光成像，磁共振成像，双模式生物成像

参考文献

1. Heffern, M.C., Matosziuk, L.M., Mead, T.J., *Chem. Rev.* **2014**, 114, 4496-4539
2. Zhang, R. Yuan J., *Acc. Chem. Res.* **2020**, 53, 1316-1329.
3. Song B., Jiang J., Yan H., Huang S., Yuan J., J. Mater. *Chem. B*, **2023**, 11, 4346-4353.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

生物分子探针设计与功能调控

张立兵*
天津大学

发展高性能生物纳米探针，提高特异性识别作用和检测灵敏度，降低其生物毒性，在生命分析领域颇具挑战性。DNA 分子由于其独特的结构，稳定精确的互补配对能力、序列的可编程性、结构的多样性在纳米材料合成方面充当很好的生物模板。我们以 DNA 为基础，设计构筑了一系列 DNA 纳米材料分子探针，并应用于生物成像与分子传递等领域。通过一步法成功制备了 DNA 量子点水凝胶，成功应用于特异性识别癌细胞、调控蛋白质的表达和药物传递。构建了 DNA 量子点与金纳米粒子“核-壳”功能一体化的复合纳米结构，通过 DNA 置换技术，成功克服了细胞的抗药性，有效提高癌症的治疗效果。其次，设计了激活响应型 DNA 纳米探针，可通过外源性或内源性因素调节其成像和传感，成功应用于多种 miRNA 的灵敏分析检测和成像。

关键字 分子探针，DNA，生物传感，生物成像

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

单碱基分辨的 RNA m6A 修饰单细胞成像

滕续聪*[1]、章秋爽[2]、戴依聪[2]、李景虹[2]
1. 中国科学技术大学
2. 清华大学

N6-甲基腺苷（m6A）修饰是 RNA 修饰中最丰富的一种修饰类型，在 mRNAs、tRNAs、rRNAs、IncRNAs 中均有分布。细胞内的 m6A 修饰是动态可逆的，其写入和擦除是调控 RNA 剪切、翻译、降解等生物过程的分子开关之一，参与了癌症、神经退行性疾病等疾病的发生发展。生物体中 RNA 的生物过程在时间和空间上都受到严格调控，因此需要在组织原位水平揭示其空间异质性信息。然而，传统 m6A 修饰的检测方法虽然能够实现高通量和高效率，但依赖于细胞裂解液，缺乏细胞原位信息；基于 m6A 抗体的成像技术可以在单细胞水平上可视化 RNA 碱基修饰，但无法达到单碱基分辨率，也就无法揭示准确的修饰位点。因此，在原位以单碱基分辨率实现 m6A 可视化仍是一项挑战。

在这项工作中，我们引入了 TARS 方法，实现了单碱基分辨下细胞原位特定 RNA 位点的 A 和 m6A 修饰的同时成像。（1）通过使用 TadA8. 20 的选择性脱氨基作用，区分了 A 位点和 m6A 位点；(2)此外，通过间隙填充和连接策略，我们实现了高特异性和高信号转换效率；(3)最后，通过单核苷酸变异检测策略，有效地可视化了不同的信号。TARS 可以对 RNA 上的 A 位点和 m6A 位点进行成像，有助于准确定量 m6A 修饰比例。使用 TARS 方法，我们分别对 Hela 细胞中 MALAT1 lncRNA 的 m6A2515、m6A2577 和 m6A2611 位点进行成像，得到其修饰比例与 SCARLET 所测方法一致。此外，通过测定三个乳腺细胞系中 CCND1 mRNA 上 3974nt 位点的 m6A 修饰，我们观察到其 m6A 比例与 RNA 丰度呈负相关。这表明，m6A 修饰可能在一定程度上有助于 CCND1 mRNA 的稳定，从而促进癌细胞的增殖。

综上，我们开发的 TARS 方法实现了单碱基分辨率的 m6A 原位可视化。此外，我们开发的单核苷酸变异检测策略简单且高效，具有在 m6A 可视化以外的各种应用中检测单核苷酸变异的潜力。重要的是，TARS 并不局限于固定细胞，还有望应用于以单碱基分辨率绘制组织中 m6A 修饰的空间图谱。利用 TARS 阐明 m6A 在不同组织中的空间分布将极大地推动我们对 m6A 介导的生物过程的了解。

关键字 m6A 修饰，表观遗传，单细胞成像，单碱基分辨

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

功能性纳米技术在生物分子可视化检测中的应用

丁彩萍*
杭州师范大学

随着纳米技术不断发展,纳米材料在分析领域得到了广泛的应用。生物传感器的发展主要依赖于开发功能性纳米材料。在可视化生物传感器中，纳米功能材料被用作可视化敏感响应剂以提高检测性能，或用作载体以固定特异性生物分子。其中，纳米材料自身独特的光学、电学、磁学性能有利于构建高灵敏、高选择性的可视化敏感元件。良好的生物相容性以及尺寸结构可控性进一步增强了表面生物分子的固定效果。本报告介绍近红外荧光量子点和贵金属纳米粒子的可控合成及其功能化实现生物分子的可控灵敏可视化响应。

关键字 纳米探针，可视化，生物传感

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于 ATP 响应的受体寡聚的 T 细胞免疫激活

贺建军*
湖南大学

Receptor oligomerization plays a pivotal role in the regulation of cellular behaviors and functionalities. Stimuli-responsive artificial circuits are often programmed to rewire cell signaling by fine-tuning receptor interactions through targeted stimulation. Notably, the integration of tumor microenvironment (TME)-responsive systems capable of locally altering cancer cell phenotypes or transforming anti-tumor responses of immune cells offers a novel and promising strategy for enhancing the therapeutic effectiveness and safety of cancer treatments. In this paper, we introduce an adenosine triphosphate (ATP)-inducible receptor oligomerization (ATIRO) approach to facilitate the clustering of CD3 and CD8 of T cell and the engagement of CD3 and tumor marker of T cells and targeted cancer cells, to prompt anti-tumor immunity. ATIRO enables the specific in-situ activation of T cells by the high-level ATP presented in TME, thereby effectively suppressing tumor growth in vivo. ATIRO presents a versatile and readily adaptable strategy for the in-situ reconfiguration of T cell immunity, holding significant potential for advancing cancer therapeutic interventions.

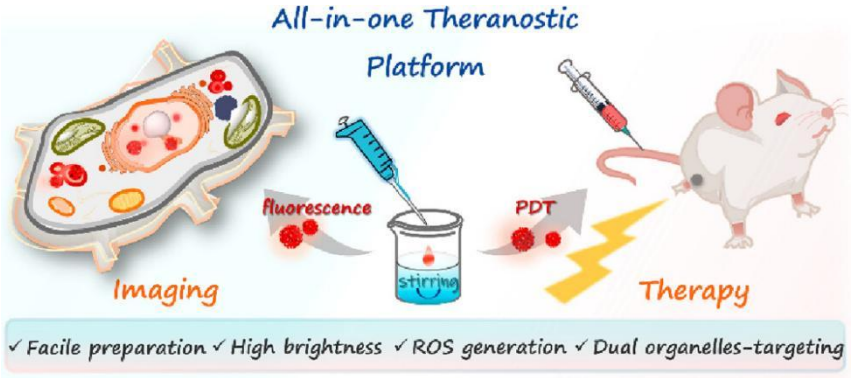
关键字 ATP • Receptor Oligomerization • Tumor microenvironment • T cell activation • tumor treatment

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

超高分辨和高亮度荧光探针在光诊疗中的应用

孟令杰*[1,2]、胥艳子[1]、徐若寒[1]、党东锋[1]
1. 西安交通大学
2. 西安交通大学分析测试中心

光诊疗包括荧光成像、光声成像、光热疗和光动力治疗等技术，具有非侵入、多模态、可选择性和重复诊疗等优势，合理设计荧光探针分子结构及其聚集状态，才能有效调控相互竞争的能量弛豫过程，实现多模光诊疗的目的。近年来，本团队通过合理的分子设计和聚集状态调控，初步实现了 NIR-II 有机染料在荧光、光声和光热等能量弛豫通道上的特定性能优化：通过选择合适的给体单元和受体单元，可构筑出给受体型小分子染料，并利用分子内电荷转移作用将发光波长红移至 NIR-II 区。此前，我们已成功制备了一系列具有优异发光亮度和效率的 NIR-II 染料分子。同时通过引入分子内苯环等转子单元，我们可以调控分子聚集程度，进而改变分子运动和能量弛豫方式。例如，紧密聚集可限制分子内旋转和振动，实现较强的荧光发射；而疏松聚集则保留分子内运动能力，有利于产生良好的光热及光声信号。通过引入大位阻单元及氟原子等功能单元，我们可以进一步优化分子内平面性和分子间作用力，为激发态能量的平衡转化提供可能。上述研究为开发高性能光光诊疗试剂提供了新思路。



关键字 超高分辨；近红外；光诊疗

参考文献

1. R. H. Xu, W. J. Chi, Y. Z. Zhao, Y. Tang, X. N. Jing, Z. Wang, Y. Zhou, Q. F. Shen, J. Zhang, Z. W. Yang, D. F. Dang*, L. J. Meng*, *ACS Nano*, **2022**, 16, 12, 20151-20162.
2. R. H. Xu, D. F. Dang*, Z. Wang, Y. Zhou, Y. Z. Xu, Y. Z. Zhao, X. C. Wang, Z. W. Yang, L. J. Meng*, *Chemical Science*, **2022**,13, 1270-1280.
3. R. H. Xu, Q. F. Shen, P. Zhang, Z. Wang, Y. Z. Xu, L. J. Meng*, D. F. Dang*, *Advanced Materials*, **2024**, 36, 2402434.
4. X. P. Zhao, Y. Chen, R. X. Niu, Y. Tang, Y. N. Chen, H. N. Su, Z. W. Yang, X. N. Jing, H. Guan*, R. Gao*, L. J. Meng*, *Advanced Materials*, 2024, 36(8), 2307839.
5. Y. Z. Xu, R. H. Xu, Z. Wang, Y. Zhou, Q. F. Shen, W. C. Ji, D. F. Dang*, L. J. Meng*, B. Z., Tang*, *Chemical Society Reviews*, **2021**, 50, 667-690.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

太赫兹生物医学检测技术

王化斌*
中国科学院重庆绿色智能技术研究院

近年来，太赫兹（THz）科学与技术迅速发展，特别是 THz 生物光谱和生物成像技术引起了科学界的高度重视。在本报告中，首先介绍太赫兹生物医学检测的研究背景；接着，展示几项传统远场 THz 光谱及成像技术在生物医学检测领域的应用实例；之后，重点介绍三种先进的 THz 近场检测技术。第一种是 THz 时域衰减全反射技术，利用该技术可以检测溶液中化学物质对神经细胞的影响；第二种是基于光电导微探针的 THz 近场技术，采用该技术能在微米水平检测生物组织和单细胞；第三种是散射式 THz 扫描近场光学显微技术，借助该技术可实现单个蛋白分子的纳米分辨检测。最后，对报告进行一个总结，指出面临的挑战和展望将来的研究方向。总之，现有研究结果表明，THz 生物医学检测具有良好发展前景。

关键字 太赫兹，生物，光谱，成像

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于单分子电子学的生物分析化学研究

李玥琪*
中国科学技术大学

随着分析化学研究的不断深入，对单个分子的测量、追踪和操控成为这一领域未来重要的发展方向，将帮助人们在单分子层面观察和理解物质的化学行为、物理变化和生物过程。单分子电子学针对单分子的电学特性实施测量，提供了原位表征单分子异质结动态变化的直接手段。然而，由于目前相关测量方法的确立十分有限，在工况条件或生物活性环境下高重现性地探测、表征单分子的技术瓶颈使得许多单分子尺度的现象仍难以得到观测和解析。我们以单分子的电学和力学特性为依据，发展了一系列针对单分子理化特性的测量方法，聚焦电解质和生物活性环境、复杂分子结构、非共价作用、动态追踪等技术难点，实现了对单分子内化学反应的动态观测，捕捉并调控了单分子的量子干涉效应和非共价作用，提高了生物活性单分子体系测量的重现性，解析了其动态相互作用机制，在微观层面为理解一系列化学反应和生物过程提供了基础、直接的证据。这些工作丰富了单分子分析研究方法，促进了其在生物医学研究领域的应用。

关键字 单分子分析；分子电子学；生物大分子；非共价相互作用。

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于灰度频率的 HeLa 细胞损伤程度检测方法研究

徐晓龙*、李安琪、赵琳莹
五邑大学

细胞损伤评估对疾病诊断[1]、药物开发[2]及环境毒性研究[3]至关重要。研究发现，细胞受刺激后，其形态可能会发生变化，影响光的散射和反射，导致显微图像亮度变化，基于此，提出了用图像亮度量化细胞损伤的新假设，并开发了一种基于灰度频率分析的评估方法，用于量化细胞损伤程度。

本研究通过显微图像处理获得目标区域的灰度曲线，分析灰度分布计算异常细胞的占比，量化细胞损伤程度（图 1）。该方法与传统损伤指标高度相关。应用该方法评估了五种三唑类杀菌剂的细胞损伤程度，量化其毒性，结果与文献一致。该方法将细胞损伤的可视化与量化评估相结合，为环境毒性研究提供了一种有效、潜在的工具。

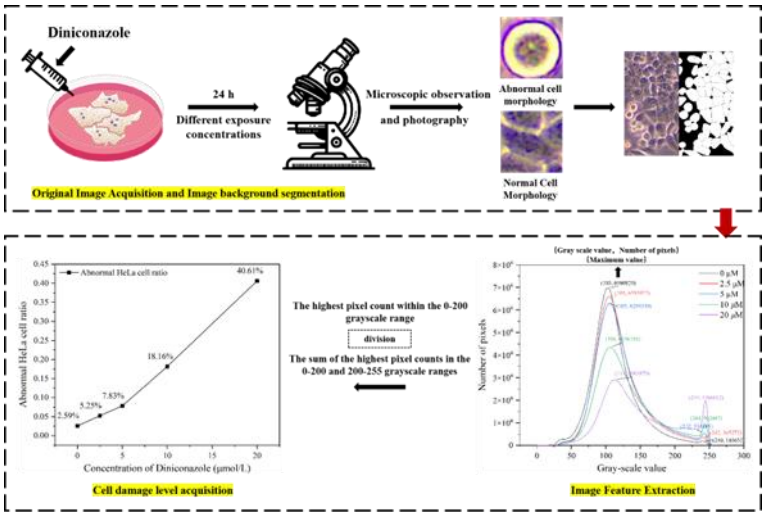


图 1. 检测方法结构图

关键字 细胞损伤、图像灰度、毒性检测

参考文献

1. Peluso M, Russo V, Mello T, Galli A. *Int J Mol Sci.*, **2020**, 21(18): 6936.
2. Miyake K, McNeil PL, *Crit Care Med.*, **2003**, 31(8 Suppl): S496-501.
3. Rubio L, Barguilla I, Domenech J, Marcos R, Hernández A, *J Hazard Mater.*, **2020**, 398: 122900.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于新型核酸杂交指示剂的电化学生物传感器的构建及应用

樊艳茹*、黄宇
宁夏医科大学药学院

基于电化学分析技术和多种传感策略构建的电化学传感器具有灵敏度高、专属性强、成本低廉以及仪器易于小型化等优点。因此，电化学传感器在医学分析、药物分析、食品检测、农业和生物研究等领域都有着较广阔的应用[1]。以核酸分子作为识别元件，固载到电极界面构建的传感器称为电化学核酸传感器，其检测原理主要基于已知序列的探针分子可与其互补链目标核酸、蛋白质或多种小分子化合物等发生高特异性结合，通过结合前后传感界面电信号的改变，实现对目标物的定量检测。根据提供电化学信号的基团-电化学指示剂与探针分子的关系，电化学核酸传感器分为标记型和非标记型两类。标记型是指将电活性基团固定在探针分子片段上，起到“标记”的作用。非标记型则无需对探针分子进行标记，其中一种识别原理是基于电化学杂交指示剂与单、双链核酸分子的非共价结合方式和结合能力存在差异，导致探针分子与目标物杂交/结合前后杂交指示剂产生电信号改变，实现对目标物的定量检测。电化学杂交指示剂是非标记型电化学核酸传感器的关键组件之一，它的结构及性质决定了其与单、双链 DNA 非共价结合方式及结合能力的强弱，以及对 DNA 特定序列和碱基错配的精准识别能力。这直接影响了传感器的分析性能。课题组基于设计合成的新型萘酰亚胺-二茂铁双嵌入指示剂优越的结合能力和识别能力[2-3]，开发不同信号放大策略，构建多种性能优良的电化学生物传感器用于检测核酸、蛋白及药物小分子[4-6]。

关键字 电化学杂交指示剂；非标记；电化学生物传感器

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

FRAME：flap 核酸内切酶 1 工程化 PAM 模块以精准、灵敏调控 CRISPR/Cas12a 的反式切割活性

岑瑶*
南京医科大学

CRISPR/Cas12a 系统以其精确识别和高效核酸切割能力而著称，在分子诊断和生物传感领域表现出卓越的性能。然而，已报道的 Cas12a 活性调控方法往往涉及复杂的 CRISPR RNA（crRNA）结构调整或昂贵的化学修饰，这限制了它们的应用。我们展示了一种独特 FRAME 策略，即利用 FEN1 来调节双链 DNA 激活剂中原间隔相邻基序（PAM）模块的可及性来工程化酶的活性。通过识别目标输入和底物之间形成的三碱基重叠结构，FEN1 选择性地裂解并释放含有“TTTN”序列的 5’皮瓣，该皮瓣在形成一个有缺口的 PAM 的同时，可以引发 FEN1 的二次裂解，最终实现 Cas12a 活性的灵敏切换。FRAME 策略体现了“一石二鸟”的原则，因为它不仅精确地编程了 Cas12a 的活性，还同时触发了等温循环扩增。此外 FRAME 策略还被应用于构建检测髓过氧化物酶和 miR-155 的传感平台，该平台具有高灵敏度和特异性。重要的是，该方法证明了它在使用单个 crRNA 检测多个靶标方面的多功能性，而无需重新设计。总之，FRAME 策略为调节 Cas12a 的活性开辟了一条新途径，有望在医学诊断领域发挥巨大潜力。

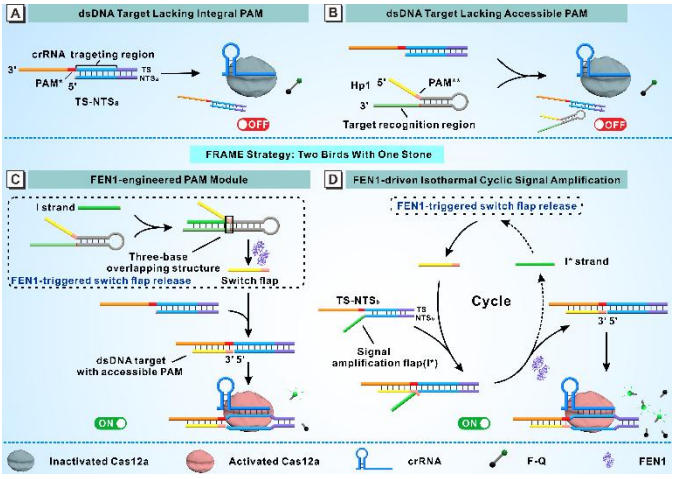


Fig. 1. Schematic illustration of the FRAME strategy. (A) dsDNA target lacking integral PAM. (B) dsDNA target lacking accessible PAM. (C) FEN1-engineered PAM module. (D) FEN1-driven isothermal cyclic signal amplification.

关键字 CRISPR/Cas12a 系统；FEN1；PAM 模块工程化；等温循环放大

参考文献

1. T. Zuo, C. Shen, Z. Xie, G. Xu, F. Wei, J. Yang, X. Zhu, Q. Hu*, Z. Zhao*, B. Z. Tang*, Y. Cen*. *Nucleic Acids Res.*, **2024**, 52, 11884-11894.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

高灵敏 DNA 电化学传感器在疾病精确诊断中的应用研究

于莎*、王春燕、蔡婧怡
西安建筑科技大学

生物标志物的精准分析对疾病的早期诊断、早期预防和最终干预具有重要意义。然而，传统分析方法的灵敏度和准确性往往受到生物标志物丰度低和环境复杂性的限制。因此，开发有效的核酸扩增策略和高度精确的新型生物分析方法至关重要。基于此，我们以操作简单、响应快速且灵敏度高的电化学技术为主要分析手段，结合具有高效信号放大功能的 DNA 纳米探针，开发了系列高灵敏 DNA 电化学传感器用于疾病标志物的精准检测。首先，将核酸内切酶辅助的引物交换反应（PER）级联扩增策略和 DNA 纳米球（DNS）介导的电化学信号增强系统有机结合，构建了一种超灵敏的 DNA 电化学生物传感器。该传感器不仅可以实现靶标信号的高效扩增，还可以突破二维电极界面限制，有效提高电化学信号输出强度，从而实现 microRNAs 的超灵敏检测 1。随后，将连接酶辅助的 DNAzyme 级联扩增逻辑电路与 MXene-Au 功能化的电极界面耦合，构建了用于 FEN1 酶活性分析的高灵敏电化学生物传感平台，同时还发展了 AND、INHIBIT-AND 以及 AND-OR 等逻辑电路用于多靶标的逻辑分析 2。此外，还利用三维 DNA walker 的特异性信号扩增性能和磁性纳米粒子的磁分离特性，开发了一种三维磁性 DNA 步行器介导的电化学传感器用于痕量抗生素的高灵敏检测 3。这些研究工作为分子诊断探针的设计和高灵敏电化学传感平台的开发提供新的思路，将在疾病标志物的精准分析和预后预测具有很大的潜力。

关键字 DNA 电化学传感器；疾病标志物；精确诊断

参考文献

1. S. Yu, S. Chen, Y. Dang, Y. Zhou, J.-J. Zhu, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 14349.
2. S. Yu, C. Wang, T. Gu, Y. Dang, J.-J. Zhu, J. Ma, Y. Zhou, *Sensor Actuat B chem*, **2024**, 415, 135986.
3. J. Cai, J. Ma, Y. Dang, S. Chen, J. Tang, S. Yu, Y. Zhou, *Sens. Actuators B Chem.*, **2023**, 393, 134215.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

单分子核酸力学测量

张晨*
浙江大学

我们主要聚焦在单分子核酸力学的测量与分析，旨在揭示环境因素对 DNA 和 RNA 结构与功能的精细调控机制。通过高精度的单分子磁镊实验结合分子动力学模拟，测量分析单个核酸分子在不同环境条件下的结构力学性质变化。

拉力、温度和离子强度等环境因素均能够显著影响核酸的扭转角度，微小的扭转角变化在超长的 DNA 分子中积累，最终导致显著的结构变化。对 DNA 来说，环境因素变化首先改变了 DNA 的直径，并通过扭曲-直径耦合转化为 DNA 的扭曲变化[1]。对于 RNA，环境因素变化首先改变大沟槽宽度，通过扭转-沟槽耦合转导成扭转变化[2]。扭转-沟槽耦合和扭转-直径耦合可以降低蛋白质结合时 DNA 和 RNA 形变的能量成本。我们不仅阐明了 DNA 和 RNA 的结构和力学性质对环境变化不同响应的具体分子机制，还建立了双链核酸形变途径选择模型。该模型也能很好解释高价阳离子结合导致 DNA 和 RNA 多种力学性质变化相反的这一反常现象。

此外，基于核酸的已知力学性质，针对不同测量需求，设计标定了多功能、可设计、可调节、生物相容性好的核酸力学可视化探针，实现了对活细胞运动过程中的力信号的实时动态空间成像[3]。

关键字 单分子，核酸，力学测量，扭转，磁镊

参考文献

1.Zhang，C.#; Tian, F#; Lu，Y.; Yuan，B.; Tan，Z.-J.; Zhang, X.-H.*; Dai，L. * *Science Advances* 2022，8, eabn1384

2.Tian, F#; Zhang, C.#; Zhou，E#. C.; Dong，H.-L; Tan，Z.-J.; Zhang, X.-H.*; Dai，L. * *PNAS* **2023**, 120 (20), e2218425120

3.Hu, Y.-R#, Li, H.-Y#*, Zhang, C#, Feng, J.-J#, Wang, W.-X, Chen, W, Yu, M, Zhang, X.-H.*, Liu, Z*, ***Cell* 2024,** 187(13), 1–15

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

脑部成像功能分子的设计合成与应用研究

王卓*
北京化工大学

由于大脑的复杂性和特殊性，脑部疾病的早期诊断和治疗药物的研发是生物医学领域的热点和难点问题。血脑屏障是保护大脑的重要防线，同时也是向脑部输送分子的主要壁垒。如何实现脑部无创成像先要解决的是穿越血脑屏障（BBB）问题。在近期工作中，我们设计合成了系列可以穿越 BBB 实现脑部疾病生物标志物成像的功能分子。基于半花菁和硅罗丹明的荧光探针 Mindo-SiR 具有良好的 BBB 穿透能力，可以实现精神分裂症小鼠脑中 H2S 通量改变的可视化；基于二氰基异佛尔酮衍生物的荧光探针 CT-CF3 成功应用于神经炎症和精神分裂症小鼠脑中 O2.-的成像监测。β-淀粉样蛋白（Aβ）是阿尔兹海默病（AD）的生物标志物。我们基于硼氟二吡咯甲烷（BODIPY）荧光团，设计合成了一系列用于 Aβ活体成像的荧光探针。具有六元环胺椅式构象的荧光探针 TPipBDP 能够穿越 BBB 对 AD 小鼠脑部 Aβ斑块进行实时成像。氢键能够增强荧光分子与蛋白质之间的相互作用力。具有[4-(叔丁氧碳基氨基)苯]结构的荧光探针 BocBDP，能够与 Aβ形成氢键，提高结合亲和力。氢键相互作用力使得 BocBDP 能够长时间的对 AD 小鼠脑部的 Aβ斑块进行成像。设计合成用于脑部成像功能分子为脑部疾病的早期诊断提供帮助。

关键字 荧光成像，血脑屏障，分子探针，淀粉样蛋白

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

纳米光遗传学探针用于疾病的闭环调控

梅青松*
暨南大学

ATP 在调节抑郁症相关的各类神经生物学机制中发挥着关键作用，可快速缓解抑郁症。然而，现有研究发现，mPFC 脑区星形胶质细胞外的 ATP 在不同浓度下发挥不同的，甚至是相互矛盾的作用。因此，明晰细胞外 ATP 的浓度与抑郁症的关联，对缓解抑郁行为提供新的解决思路。我们运用星形胶质细胞特异性启动子慢病毒体系，于该细胞上表达光敏蛋白 C1V1，并融合生物素小分子，通过链霉亲和反应，将 ATP 可逆响应的链霉素修饰的上转换发光（UCNPs）探针连接至细胞膜上。病毒感染区植入传感光纤，在近红外光照射下，借助纤维光度法记录目标区域 UCNPs 内在的 F540nm 和 F650nm 的荧光比值，并转化为 ATP 浓度。其次植入激光光纤，激活星形胶质细胞，可以释放 ATP，从而实现激活与监测的同步进行，便于深入探究细胞外 ATP 的浓度与抑郁症的关系。此外，我们还通过组学方式解析不同浓度梯度的 ATP 所导致抑郁情况的潜在机制。通过监测发现正常小鼠与抑郁小鼠的 mPFC 脑区 ATP 浓度存在显著差异，正常小鼠约为 70 μM，而抑郁小鼠则约为 30 μM。此外，采用激光器对抑郁小鼠脑区的 ATP 浓度进行调控，当 ATP 浓度从 30 μM 左右逐渐恢复至 70 μM 过程中，小鼠的抑郁状态迅速回归至正常状态，而当小鼠的 ATP 浓度超过 70 μM 时，小鼠又逐渐恢复至抑郁状态。组学分析证明 ATP 从低浓度恢复到正常浓度时,主要激活神经配体相互作用达到治疗效果，而高浓度是引起免疫，炎症等反应再次造成抑郁。

关键字 上转换发光探针；光遗传学；ATP；抑郁

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

DNA 自组装的精确调控与应用

陈杰林[1]、周俊[3]、刘小果[2]、鞠焜先[3]、樊春海*[2]
1. 医工交叉研究院，福州大学，福州，350108
2. 上海交通大学化工学院，上海交通大学，上海，200240
3. 南京大学化工学院，南京大学，南京，210023

DNA 自组装是 DNA 分子通过碱基配对和氢键相互作用，组装形成特定结构或组装成复杂超分子结构的过程。由于 DNA 自组装具备原子级别的空间和信息精度特性，因此在纳米材料和器件构建、生物医学、分子计算和信息存储等领域具有广泛的应用前景。随着 DNA 纳米技术的发展，原子级精度的单碱基突变与修饰提供了强大的可设计性和可操作性，为 DNA 自组装过程的精确调控和应用提供了有力工具。研究表明，DNA 组装序列和碱基层面的设计可以影响组装过程和结构，但如何在不改变 DNA 序列设计的前提下进行程序调控仍然具有挑战性。

为解决这一难题，我们以 G-四链体和 DNA 自组装晶体为研究对象。结合光谱技术、核磁技术以及单分子荧光技术等方法，发现 G-四链体微结构域的单碱基突变不仅调节构象 1，还影响 G-平面的完整形成 2。这种结构调控进一步影响了 G-四链体-卟啉 DNA 仿生酶的催化性能 3。通过合理的单碱基突变与修饰，我们获得了高活性、高稳定性的 DNA 仿生酶 4,5，并将其应用于高灵敏、可视化探针的构建 6。我们还对 DNA 自组装基元的粘性末端进行了单碱基修饰，实现了对 DNA 自组装晶体结晶动力学和宏观生长特性的精准调控 7。通过特定轴向上的单碱基修饰，我们成功调控了 DNA 自组装晶体的优势生长方向，获得具有可控形貌特征的 DNA 自组装晶体。

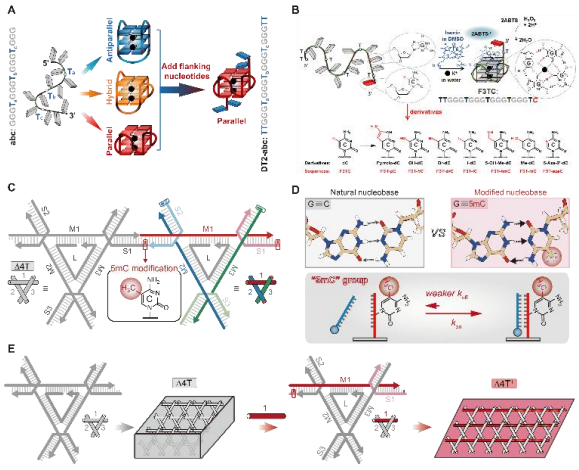


图 1. 单碱基调控 DNA 结构、组装及其应用。

关键字 DNA 自组装，单碱基修饰，G-四链体，DNA 自组装晶体

参考文献

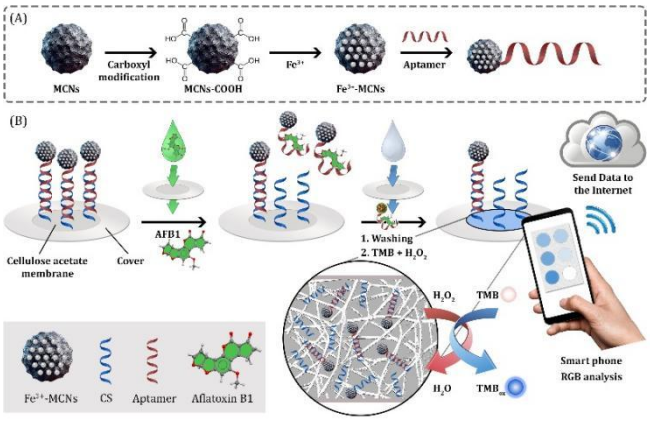
1. J. Chen, M. Cheng, G. F. Salgado, P. Stadlbauer, X. Zhang, S. Amrane, A. Guédin, F. He, J. Šponer, H. Ju, J.-L. Mergny, J. Zhou. *Nucleic Acids Res.* **2021**, *49*, 9548–9559.
2. J. Chen, M. Cheng, J. Wang, D. Qiu, D. Monchaud, J.-L. Mergny, H. Ju, J. Zhou, *Chin. J. Catal.* **2021**, *42,* 1102-1107.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

集成可限域的一体化纸基芯片比色生物传感器，用于农业产品安全检测

Sareh Sadat Moshirian Farahi、Hamidreza rahmanian、荣艳娜、傅迎春*
zhejiang university

本研究开发了一种安装在纳米纤维片上的便携式比色适配体传感器，用于现场检测黄曲霉毒素 B1 (AFB1)。该适配体传感器的机制依赖于特异性与 AFB1 结合的适配体和掺杂 Fe3+的介孔碳纳米球（Apt/Fe3+-MCNs）的结合，并与互补链（CS）杂交，创建基于纳米纤维作为主体段的客体捕集特性的纳米限域结构。Fe3+-MCNs 作为一种具有过氧化物酶类活性的纳米酶，能够催化 TMB 在过氧化氢（H2O2）存在下氧化成 TMB 氧化物的反应。在没有 AFB1 的情况下，纳米限域传感芯片在加入 TMB 和 H2O2 后会发生颜色变化，由无色变为蓝色，这是由于纸结构中被困 Fe3+-MCNs 的催化活性。当 AFB1 存在时，AFB1 与适配体的相互作用导致 AFB1/Apt/Fe3+-MCNs 复合物从纳米纤维-CS 结构中释放并被洗脱。由于纳米纤维结构中 Fe3+-MCNs 的缺失和催化功能的消失，加入 TMB 和 H2O2 后，生物传感器变为无色。采用智能手机成像的读数策略对 AFB1 进行定量，该适配体传感器显示出 0.01 - 1000 ng mL-1 的检测范围 (R2 = 0.9962)和 0.0039 ng mL-1 的检测限。成功分析鸡饲料样品中的 AFB1 含量，凸显了该适配体传感器在实现高效、便携、现场、简便和实时目标检测方面的潜力，有助于提升食品安全监测。



关键字 黄曲霉毒素 B1，纳米限域效应，Fe3+掺杂介孔碳纳米酶，类过氧化物酶活性，适配体传感器，比色检测

参考文献

1. T. Ma, Q. Zhang, L. Yuan, Z. Li, L. Zhang, J. Zhang, S. Yan, X. Xu, Y. Ying, Y. Fu, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, 16, 25333−25342.
2. Y. Li, X. Ma, W. Zhu, Q. Huang, Y. Liu, J. Pan, Y. Ying, X. Xu, Y. Fu, *Small*, **2023**, 19, 2300900.
3. J. Zhang, Z. Li, Q. Zhang, L. Zhang, T. Ma, X. Ma, K. Liang, Y. Ying, Y. Fu, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2023**, 15, 17222−17232.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

等离激元纳米探针用于细胞信号转导过程调控及可视化研究

王瑾*
南京师范大学

受体酪氨酸激酶（RTKs）在维持和调节细胞各项生理功能中发挥着重要作用。精准调控和连续监测单个 RTKs 受体水平的聚集过程对解析 RTKs 聚集动力学，破译信号转导过程及其发生机制具有重要意义。我们开发了一系列通过 DNA 杂交程序化调控膜蛋白聚集状态的纳米探针，它可以直接将 RTK 信号转导过程与 DNA 杂交诱导的等离子体耦合效应建立对应关系，所产生的散射信号变化具有良好的光学分辨率和光稳定性，可用于长时间监测细胞信号转导行为。通过这种方法，我们首次制备出能够以化学计量比单价结合 RTKs 的等离激元纳米探针，该方法具有较高的灵敏度、特异性和准确性，可对活细胞表面的受体二聚状态进行可逆调控和连续监测。此外，研究结果表明，这些纳米探针在调节 RTKs 蛋白二聚化和磷酸化，以及激活下游细胞通路方面表现出巨大的实际应用价值。所构建的纳米探针和可视化调控方法在阐明单分子水平受体二聚化的分子机制以及二聚化后的构象转变方面具有相当大的潜力，将为生物系统中特定受体聚集事件的精确操作和监测提供重要的技术支撑和理论参考。

关键字 受体酪氨酸激酶；可逆调控；等离子体标尺；细胞信号通路，实时监测

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

光片显微成像技术和肿瘤免疫应用

费鹏*
华中科技大学

肿瘤免疫治疗近年来取得革命性突破，但仍存在响应率低、持续时间短、疗效无法精准预测等关键痛点。由于缺乏看得清、看得全且分析准的定量成像工具，目前对免疫细胞杀伤肿瘤细胞的行为模式和特定功能这一影响疗效的关键因素知之甚少。本报告面向上述复杂生命分析问题，介绍我们发展的光片荧光成像新技术及高维动态荧光图像重建分析新算法，结合荧光探针标记和微流控大规模细胞操控技术，在单免疫细胞尺度精确刻画关键亚细胞结构/分子的三维动态行为。以新型计算光片显微成像推动肿瘤免疫中细胞杀伤功能的评估，通过跨尺度成像揭示免疫治疗差异化的本质，推动生命健康的科学前沿。

关键字 光片显微成像技术，荧光显微成像，免疫治疗功能评估，智能图像分析

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

具有多重免疫激活功能的粒子用于靶向治疗与成像分析

郭英姝*、张继
齐鲁工业大学

细胞先天免疫应答与 cGAS-STING 通路和 PD-1/PD-L1 免疫检查点阻断(ICB)密切相关。cGAS-STING 信号通路在许多肿瘤细胞中是沉默的，无法发挥其作用。在这里，本文开发了一种基于气泡推进的二氧化硅纳米电机。它的中空结构中填充了光敏剂 Ce6 分子。在 808 nm 激光照射下，Ce6 产生 $^1O_2$，导致细胞内 DNA 损伤，进一步激活 cGAS-STING 通路，刺激 DC 细胞成熟，增强 CD8+ T 细胞的肿瘤浸润。纳米马达的一侧用纳米铂修饰。这种不对称修饰可以催化环境中的 H_2O_2，产生不对称浓度的 O_2，实现气泡驱动纳米运动，增强纳米运动对肿瘤组织的渗透。纳米马达的另一侧修饰了肽 CLP002，它特异性结合 PD-L1 与 PD-1 相互作用残基，阻断 PD-1 与 PD-L1 的相互结合，进一步提高肿瘤浸润性 T 细胞的免疫应答能力。本研究开发了一种多管齐下的免疫治疗策略，利用纳米运动来增强穿透性，为肿瘤靶向治疗提供了新的思路。

关键字 cGAS-STING 通路，免疫检查点阻断，生物成像

参考文献

1. L. Sun, T. Li, B. Li, Y. Guo, ACS Appl. *Nano Mater.*, **2023**, 6, 17626-17636.
2. D. Wu, W. Zhang, T. Li, F. Li, Q. Feng, X. Cheng, Y. Guo, *Chem. Commun.*, **2023**, 59, 1987-1990.
3. W. Li, L. Sun, X. Zheng, F. Li, W. Zhang, T. Li, Y. Guo, D. Tang, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 9654-9662.
4. Y. Guo, D. Jing, S. Liu, Q. Yuan, *Theranostics*, **2023**, 13, 2993-3020.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

针对危险和有害物质的生物传感策略、芯片及仪器

李冰凌*[1]、刘一辰[1,2]、唐艺丹[1]、鲍引[1]、蔡开维[1]、吕佰阳[1]
1. 中国科学院长春应用化学研究所
2. 四川大学华西医院

致病微生物和抗生素等危险或有害物质亟需兼具高精准度和便携化的快速检测方法和仪器；为此，我们已开发了一系列基于核酸放大器和分子线路探针的危险和有害物质传感策略。其中电分析化学信号因具有灵敏度高、集成和数字化能力强等技术优势，有望成为代替传统光学响应的“下一代”理想信号模式，在便携化，甚至是现场即时检测（POCT）领域展现出巨大的研究价值和应用前景。为满足上述现实应用需求，我们设计研制了一款适配于可抛式生物传感芯片的便携性、多通道实时电化学恒温检测仪器，名为 BioAlex PHE-T。该仪器 1）引入 STM32 控制板编辑并控制 CD4051 芯片，可在低成本下实现 8 个信号通路（工作电极）的可编程连接和导通；2）采用高性能 ARM 嵌入式处理器和高精度数模转换芯片和精密程控电源，兼顾了整体信号传输和抗干扰问题；3）内置循环伏安法（CV）和方波伏安法（SWV）两种测量方法和算法，支持图形曲线实时显示及检测结果处理；4）可在室温-200oC 下精准控温，因此能够满足不同的电化学检测定制化需求。我们根据新开发的适配体开关和 Iso-E-Codelock 核酸密码锁设计了两款 BioAlex PHE-T 样机，已分别用于抗生素和病毒核酸的高灵敏检测，为多场景下危险和有害物质的现场快速鉴定提供了创新原理和技术储备。

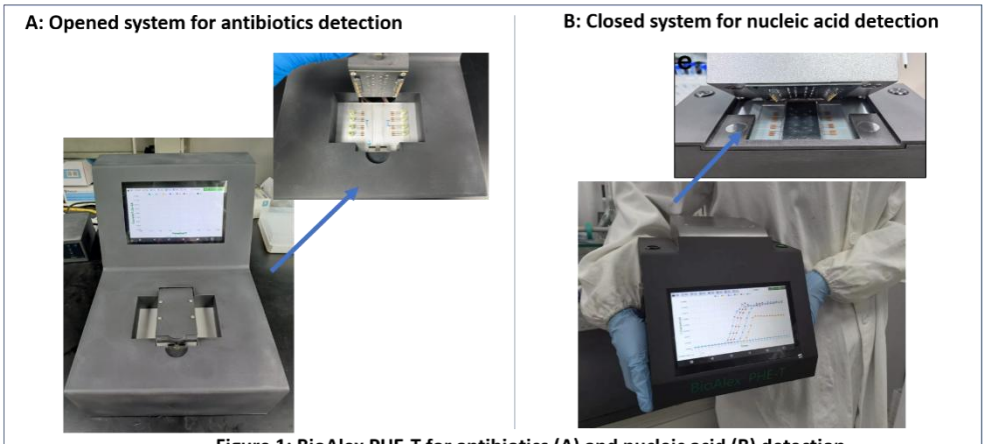


Figure 1: BioAlex PHE-T for antibiotics (A) and nucleic acid (B) detection

关键字 生物传感；传感芯片；实时电化学检测仪器；致病微生物；抗生素；核酸

参考文献

1. Y. Liu, Y. Tang, Y. Bao, K. Cai, B. Lu, R. Zhao, C. Yu, Y. Du, B. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202400340
2. Y. Bao, K. Cai, Y. Liu, B. Li, *Chin. J. Chem.* **2024**, 42, 171-176.
3. R. Wu, Y. Wang, J. Yu, H. Li, C. Yu, H. Wang, M. Wang, B. Li, Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e 202304891
4. H. Li, H. Lu, Y. Tang, H. Wang, B. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 62, e202209496

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

基于金属-AIEgen 骨架材料的超灵敏侧流层析免疫检测

张江江*
北京理工大学

侧流层析免疫检测（LFIAs）是当前应用最为广泛的一种可视化即时检测（POCT）技术，操作简单、可裸眼直观定性判断并且成本较低，拥有巨大的市场前景和价值。传统 LFIAs 灵敏度低（ng/mL 级别），极大限制 LFIAs 在高灵敏疾病标志物（pg/mL 级别）体外诊断领域的发展[1]。文献报道中各种增强 LFIAs 策略，要么可视化灵敏度提升有限，要么显著提升可视化灵敏度但需要额外的试剂反应和操作或者仪器设备，牺牲了 LFIAs 根本的便捷性、可视性和低成本优势。不损失 LFIAs 本身固有优势前提下，高效提升其可视化灵敏度是艰巨的挑战和终极目标。聚集诱导发光分子（AIEgen）,在聚集态或固态因其分子内运动受限、极大削弱非辐射能量损失而发出强烈荧光。我们探索利用金属-AIEgen 骨架（MAFs）纳米颗粒作为抗体标记荧光材料，开发超灵敏 LFIAs 体系，区别于传统荧光量子点，AIEgen 作为发光中心，具有高量子产率、高稳定性、抗光漂白等优点[2]。同时我们发现 MAFs 纳米颗粒具有免化学修饰、直接吸附抗体的特点，简化荧光 LFIAs 制备工艺。MAFs LFIAs 拥有超高灵敏度，对 IL-6 和 PCT 等高灵敏疾病标志物的可视化检测灵敏度为 1~10 pg/mL，其检测限低至 fg/mL 级别，比传统 LFIAs 体系灵敏度提升 100~1000 倍[3]。进一步我们以 MAFs 为模板与 AuNPs 进行自组装获得比色-荧光双信号 MAF@AunPs 复合物，构建动态超灵敏、宽区间可视化双模 LFIAs 体系，其荧光灵敏度优于比色灵敏度~1000 倍，该双模 LFIA 体系非常适合不同灵敏度、多指标检测需求，如心血管疾病广泛筛查标志物 D-dimer、NT-proBNP 和 cTnI，低灵敏度但最便捷的比色模式适用于 D-dimer，高灵敏度稍复杂的荧光模式适用于 NT-proBNP/cTnI[4]。基于 MAFs 的荧光 LFIAs，具有巨大的应用前景，有望成为新一代超灵敏 POCT 平台。

关键字 金属-AIEgen 骨架；疾病标志物超灵敏检测；体外诊断；侧流层析免疫检测

参考文献

1. Zhang, J.*; Chai, F.; Li, J.; Wang, S.; Zhang, S.; Li, F.; Liang, A.; Luo, A.; Wang, D.*; Jiang, X.* *Sci. Adv.* **2024**, 10, eadn5698.
2. Zhang, J.; Li, Y.; Chai, F.; Li, Q.; Wang, D.; Liu, L.*; Tang, B.Z.*; Jiang, X.* *Sci. Adv.* **2022**, 8, eabo1874.
3. Chai, F.; Wang, D.; Shi, F.; Zheng, W.; Zhao, X.; Chen, Y.; Mao, C.; Zhang, J. *; Jiang, X.* *Nano Lett.* **2023**, 23, 19, 9056–9064.
4. Chai, F.; Zhang, S.; Wang, D.; Li, F.; Wang, S.; Huang, Z.; Qu, J.*; Zhang, J.*; Jiang, X.* (Unpublished).

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

光化学长余辉与生命健康

徐明*、李富友
上海交通大学

多重标记的发光探针能够实现对不同目标的实时可视化研究，为揭示复杂生命活动现象与相互关联提供了有力的化学生物学工具。通常，发光探针利用波长或寿命维度进行目标的区分标记，因此迫切需要发展波长/寿命调控方法与材料体系。基于光化学能量储存与转移机制，光化学长余辉探针体系近年来逐步建立和发展，其具有激发波长、发射波长和发光寿命可按需灵活调控的独特性质。其中，所述三种核心参量分别由光敏剂、缓存剂和发光体三种功能单元组分独立控制，打破了其在传统发光探针中受制于同一化学结构的瓶颈限制，极大地拓展了发光探针的标记维度与编码空间。借助理性设计与分子剪裁，获得了多种面向生物医用的光化学长余辉发光探针，推动了时域多通道发光成像与检测研究。相关进展为多重发光标记奠定了理论基础，在生理病理等研究领域展现了巨大的应用前景。

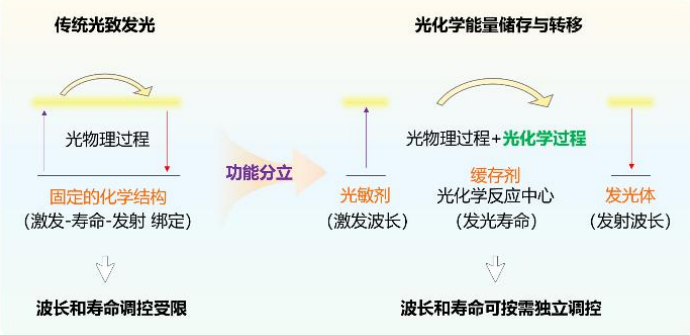


Fig. 1 Schematic of the photochemical reaction-based energy storage and transfer (PCREST) mechanism. Photochemical afterglow system is promising for the design and synthesis of multiple-labeled luminescent probes in the wavelength and lifetime dimensions.

关键字 光化学长余辉；多重标记；生物成像；发光检测

参考文献

1. Xu Ming, Liu Jia, Su Xianlong, Zhou Qianwen, Yuan Hang, Wen Yue, Cheng Yihang, Li Fuyou. *Sci. China Chem.*, **2021**, 64, 2125-2133.
2. Su Xianlong, Kong Xiaoyan, Sun Kuangshi, Liu Qian, Pei Yuetian, Hu Donghao, Xu Ming, Feng Wei, Li Fuyou. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61, e202201630.
3. Chen Lei, Sun Kuangshi, Hu Donghao, Su Xianlong, Guo Linna, Yin Jiamiao, Pei Yuetian, Fan Yiwei, Liu Qian, Xu Ming, Feng Wei, Li Fuyou. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62, e202218670.
4. Huang Hanwen, Yin Jiamiao, Zhou Qianwen, Li Huateng, Yang Junying, Wang Yaoben, Xu Ming, Wang Changchun. *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 3999.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

半导体 SERS 纳米生物传感器

林杰*、吴爱国
中国科学院宁波材料技术与工程研究所

恶性肿瘤严重危害人类生命健康，“早发现、早诊断、早治疗”是目前根治实体恶性肿瘤的最佳途径。与组织活检相比，体外液体活检技术具有快速、简便和无损伤等优势。当影像学检查还没有发现任何病灶前，外周血液中循环肿瘤细胞检测可为肿瘤早期诊断和预后评估提供重要依据。循环肿瘤细胞（CTCs）的高效检测可有效地应用于体外早期诊断、预后及存活时间判断、快速判断治疗效果、体内耐药性检测、肿瘤分子分型鉴定、个体化治疗、肿瘤复发检测等，具有重要的科学意义和临床应用价值。表面增强拉曼散射光谱（SERS）技术是高灵敏的指纹光谱分析技术，具有快速、精准、无损检测等优势，可适用于固相、液相等复杂的检测体系。SERS 纳米生物探针与谱学/影像技术的结合，为实现循环肿瘤细胞的精准诊断带来新的契机。研发功能型 SERS 纳米生物探针，随后结合具有光、电、磁场响应的 SERS 探针试剂盒仪器设备，完成外周血样中循环肿瘤细胞的快速富集、高效分离、准确检测和分型鉴定，从而通过 SERS 光谱/图像分析实现肿瘤的精准诊断应用突破，并开发可推广的检测试剂盒。重点突破液体活检发展中检测成本高、耗时长、细胞富集难和靶向性差等难题。

关键字 SERS，纳米生物材料，探针试剂盒，循环肿瘤细胞，液体活检

参考文献

1. J. Lin*, A. G. Wu*, et. al, Fund. Res., **2022**, DOI: 10.1016/j.fmre.2022.04.018.
2. J. Lin, A. G. Wu*, et. al, Anal. Chem., **2023**, 95, 4671. (Cover).
3. X. Y. Meng, J. Lin*, L. Guo*, et. al, Angew. Chem. Int. Ed., **2024**, DOI: 10.1002/anie.202407597.
4. J. Y. Pei, J. Lin*, W. X. Chen*, et. al, Angew. Chem. Int. Ed., **2024**, 63, e202316123.
5. H. F. Gu, J. Lin*, W. X. Chen*, et. al, ACS Nano, **2023**, 17, 21838.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

电致变色分子的设计及其活体影像

吴鲁艳*
有机电子与信息显示国家重点实验室，南京邮电大学
南京邮电大学材料科学与工程学院

生物功能分子响应的光学影像探针在高灵敏度和高精度的活体分析中扮演着至关重要的角色，有助于疾病的精准诊断和治疗效果的早期干预。在活体影像分析中，如何提高生物分子的检测速率和精准定量检测是实现疾病标志物精准检测分析的巨大挑战。电致变色分子是一类在电场作用下，能够发生快速电子转移而产生颜色可逆变化的材料，已被广泛用作光学存储器和电致变色器件，其在电子转移过程中发生显著颜色变化的特性将为监测生物体系的氧化还原过程提供有力的分子影像工具。基于此，我们从电致变色分子响应速率的调控、分子精准定量、气体递送系统等开展了系统研究，1）提出了电致变色分子的物理应用到生物分子检测的跨界应用，发展了响应速率的调节机制，实现了生物分子从数十分钟到秒级的快速检测；2）基于电致变色分子构建了激活型光学比率影像探针，揭示了比率信号与疾病发生发展的关联机制；3）设计了基于电致变色分子的气体递送系统，解决了探针在肿瘤蓄积不足的难题，提高了成像的精准度。这些研究为实现生物分子的精准检测提供了有效的分子影像平台。

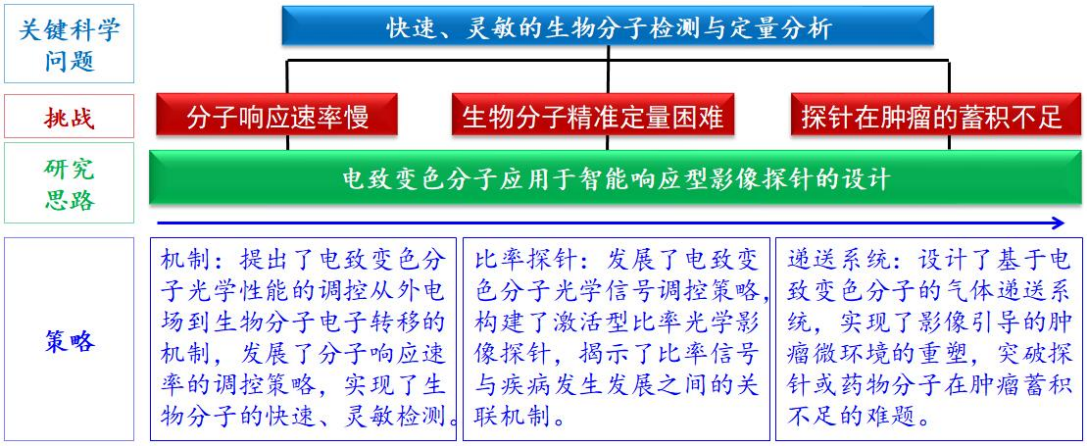


图1. 电致变色分子的设计与活体影像

关键字 光学影像；长余辉影像；光声影像

参考文献

1. L. Wu, Y. Liu, W. Zeng, Y. Ishigaki, S. Zhou, X. Wang, Y. Sun, Y. Zhang, X. Jiang, T. Suzuki, D. Ye, *J. Am. Chem. Soc.*, **2023**, 145, 27838-27849.
2. L. Wu, H. Lin, X. Cao, Q. Tong, F. Yang, Y. Miao, D. Ye, Q. Fan, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 136, e202405937.
3. L. Wu, W. Zeng, Y. Ishigaki, J. Zhang, H. Bai, T. Harimoto, T. Suzuki, D. Ye, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61, e202209248
4. L. Wu, Y. Sun, Z. Luo, K. Pu, T. Suzuki, H-Y. Chen, D. Ye, *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, 140, 16340.

5. L. Wu, Y. Ishigaki, Y. Hu, W. Zeng, T. Suzuki, X. Jiang, H-Y. Chen, & D. Ye, *Nat. Commun.*, **2020**, 11, 446.
6. L. Wu, W. Zeng, Y. Chen, Y. Liu, T. Suzuki, G. Song, Q. Fan, D. Ye, *Nat. Commun.*, **2021**, 12, 6145.
7. W. Zeng, # L. Wu, # Y. Ishigaki, T. Harimoto, Y. Hu, Y. Sun, Y. Wang, T Suzuki, H.-Y. Chen, D. Ye, *Angew. Chem. Int. Ed*., **2022**, 61, e202111759.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

融合光场技术的快速容积拉曼成像

王楠、冯巩、陈雪利*
西安电子科技大学

容积成像技术能够可视化从全脑到亚细胞水平的生物系统的三维结构，对研究脑功能、发育生物学及细胞代谢具有重要价值。现阶段，容积成像的主要方式基于荧光成像，但缺乏化学组分信息，且依赖于荧光标记，可能造成细胞毒性、光漂白等问题。拉曼显微成像技术可以无标记方式提供样本化学键振动的独特指纹信息，具有非破坏性、高特异性等优势，被广泛应用于生物样品的测量。然而，目前基于自发拉曼散射的共聚焦显微成像技术、光片显微成像技术等方法，受限于拉曼散射截面小、信号弱的问题，往往需要在并行化、分辨率以及光毒性之间权衡。基于相干拉曼散射的三维成像技术，具有成像速度快、高分辨等优点，但设备昂贵，极大限制了其在生物学与医学中的应用。基于此，本文提出融合光场技术的快速容积拉曼显微成像技术，通过将光场技术与拉曼显微成像技术相结合，利用微透镜阵列，可在单次快照采集过程中捕获包含样本空间信息的样本图像，同时结合基于多阶段数据先验引导的快速高分辨光场重建算法，能够以约 2.71 μm 和 3.64 μm 的横向与轴向分辨率实现样本的快速、高质量三维重建。实验结果表明，该技术可以实现约 600 μm×600 μm×200 μm 体积的斑马鱼生化组分空间分布，在生物样本的快速三维拉曼成像中极具潜力。

关键字 光场拉曼成像，高分辨，快速，免标记

参考文献

1. Niis Wagner, Fynn Beuttenmueller, Niis Norlin, et al, Nat. Methods, 2021, 18, 557-563.
2. Yuanlong Zhang, Mingrui Wang, Qiyu Zhu, et al. Cell, 2024, 187, 1-19.
3. Tobisa Nobauer, Yuanlong Zhang, Hyewon Kim, et al. Nat. methods, 2023, 20, 600-609.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：报告

糖化 RNA 的原位成像与结构鉴定

陈云龙*、任艺、刘惠普、鞠熀先
南京大学

糖化 RNA 是一种新发现的糖缀合物[1]，细胞表面的糖化 RNA 可以利用杂交介导的邻近分析[2]和分级编码策略[3]对其 N-聚糖进行成像。然而其具体的结构和聚糖修饰位点仍然未知。我们进一步发现细胞内的 RNA 也修饰有 GlcNAc 单糖。利用代谢标记和定制的荧光 DNA 探针，我们首先通过荧光共振能量转移技术对细胞核内 GlcNAc 修饰的 Y5 RNA 进行成像，然后通过专门设计的收集程序对其进行收集。通过凝胶电泳和质谱分析，我们准确鉴定了 GlcNAc 结合的核糖核苷酸的结构，并推测了 RNA 序列上的糖基修饰位点。我们发现细胞内 Y5 RNA 被 GlcNAc 单糖修饰在 pi6Aptm5s2U 结构上，且位于 5'端的第一个 AU 位点。这些发现极大地补充了糖化 RNA 的分布和结构信息，促进了其功能研究。

关键字 糖化 RNA，成像，结构鉴定，荧光，质谱

参考文献

1. R. A. Flynn, K. Pedram, S. A. Malaker, P. J. Batista, B. A. H. Smith, A. G. Johnson, B. M. George, K. Majzoub, P. W. Villalta, J. E. Carette, C. R. Bertozzi, *Cell*, **2021**, 184, 3109-3124.
2. Y. Ma, W. Guo, Q. Mou, X. Shao, M. Lyu, V. Garcia, L. Kong, W. Lewis, C. Ward, Z. Yang, X. Pan, S. S. Yi, Y. Lu, *Nat. Biotechnol.*, **2024**, 42, 608-616.
3. H. Liu, X. Li, Y. Ren, Y. Yang, Y. Chen, H. Ju, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 8780-8786.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

模块化工程DNA纳米器件用于精确分析端粒酶RNA分布及活性

张诗翊[1]、吕键[1]、周泽蕊[1]、耿小鹏[2]、钱若灿*[1]、鞠熀先[3]
1. 华东理工大学
2. 北京大学
3. 南京大学

端粒酶活性的增加被认为是人类癌症的一个显著标志。端粒酶的催化核心包括逆转录酶和人类端粒酶 RNA(hTR)。然而，目前端粒酶的检测主要局限于其在组织和单细胞水平的活性。为了揭示亚细胞 hTR 和端粒酶活性的精确分布，我们在这里设计了能够成像细胞质和细胞核中的 hTR 和端粒酶活性的模块化工程 DNA 纳米装置(DNA-ND)，使共定位分析成为可能。DNA-ND 是包含 hTR 和端粒酶活性检测模块的模块化 DNA 复合物，其通过 DNA 开关的靶敏感变构转换分别感知细胞间 hTR 和端粒酶活性，激活荧光信号以实现 hTR 和端粒酶活性的原位共成像。通过将 DNA-ND 与特定的定位信号整合，我们已经证明了基于 DNA-ND 的不同细胞系中 hTR 和端粒酶活性共定位的精确分析以及它们在药理学干预期间的动态变化。值得注意的是，我们的研究结果表明，hTR 和端粒酶活性的位置并不完全重叠，表明细胞内环境对 hTR 与端粒酶结合的影响。这项工作扩展了对 hTR 错综复杂的时空分布和端粒酶活性的理解，为端粒酶动力学的研究提供了新的思路。

关键字 端粒酶 hTR，端粒酶活性， DNA 探针

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

羧酸酯酶类两亲性双光子荧光探针的构建及其在不同病理下的应用

王亚甫、崔振慧、仉华*
河南师范大学

羧酸酯酶（CES）作为酯类代谢的关键生物酶，在包括肿瘤、药物性肝损伤在内的众多疾病中存在异常表达。1-3 这使其可作为一种有效且通用的生物学靶点用于多种临床疾病的诊断和治疗。然而，CES 高灵敏、特异性通用检测工具的缺乏严重限制相关研究的进行。基于此，本工作以两亲性 azulene 衍生物（Azu）为荧光团构建 CES 双光子荧光探针 Azu-B，以监测不同病理环境下的 CES 活性变化。Azu-B 遵循“保护-去保护”策略，引入特异性识别基团—乙酰酯，结合分子内电子转移过程，实现 CES 活性变化的特异性、高灵敏、快速（约 10 s）监测。此外，通过一系列光学、生物性能测试验证，Azu-B 在以上高灵敏监测性能的介导下，能够对肿瘤、药物性肝损伤等不同病理环境下的 CES 活性波动进行监测成像。对此，Azu-B 有望成为 CES 相关疾病病理以及诊疗方法研究的普适工具。

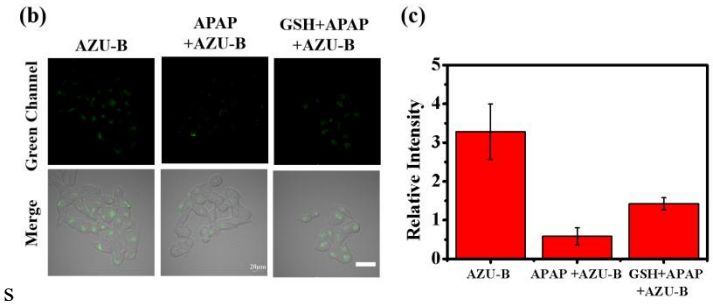


Fig. 1 Reaction of AZU-B to CES activity in solution and living cell

关键字 羧酸酯酶；两亲性；双光子荧光探针

参考文献

1. A. Singh, M. Gao, M. W. Beck, *RSC Med. Chem.*, **2021**,*12*, 1142-1153.
2. H. M. Chen, K. Li, L. Yuan, X. B. Zhang. *Chem. Commun.*, **2023**, *59*, 10520-10523.
3. N. Li , W. J. Yang, R. X. Liu, Q. Y. Chen, J. H. Yang, Z. Y. Ni, X. M. Yin, Q. Zhou, Z. X. Tang, *Sensor. Actuat. B-Chem.*, **2024**, *402*, 135133-135140.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

稀土红外荧光探针用于活体成像分析

张洪新*
复旦大学

近年来人们发现生物组织对近红外二区（NIR II： 1000 ~ 1700 nm）的光子具有更低的散射和吸收（特定区域）[1]。因此，基于近红外二区光子进行活体荧光成像可以得到穿透深度更深和分辨率更高的成像结果。在众多的荧光探针中，稀土纳米探针由于具有较高的光稳定性、低的毒性、丰富的发射、大的斯托克斯位移等性质广泛用于活体荧光成像中[2-3]。但是其仍然存在激发/发射波长较短、检测通量较为单一、检测响应性较差等科学问题，限制了高分辨多通量的活体成像分析。

为了解决上述问题，我们从以下四个方面展开研究：1. 设计了 Tm3+敏化的 Er3+发射的系列纳米探针，可实现稀土探针的长波激发（1208nm），利用时间门技术得到信噪比更高的荧光成像效果[4]；2. 开发发射波长 1700nm 之后的稀土荧光探针，相较于早期报道的 1525nm 发射荧光探针，该类探针活体成像分辨率提高 11%[5]；3. 设计 Er3+、Yb3+、Ce3+共掺的多层纳米体系，得到荧光强度和寿命相对独立的纳米探针，实现了高保真的多通道数据解析和检测，并成功在活体中，对小鼠三种模拟给药方式进行检测[6] ；4. 设计长波吸收的多金属氧化物（POM），利用其与稀土探针之间的能量共振传递，成功开发出活性氧响应的稀土高稳定性纳米传感器，实现化疗药物引起肠炎的早期检测[7]。

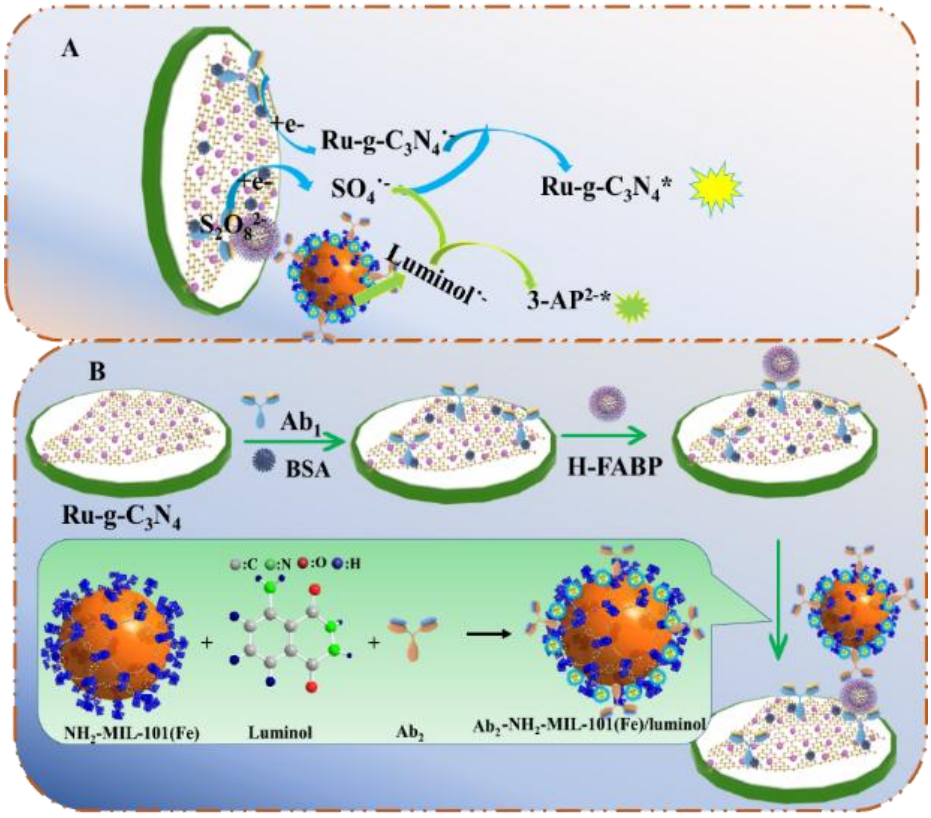


图 1 免疫传感器的构建过程

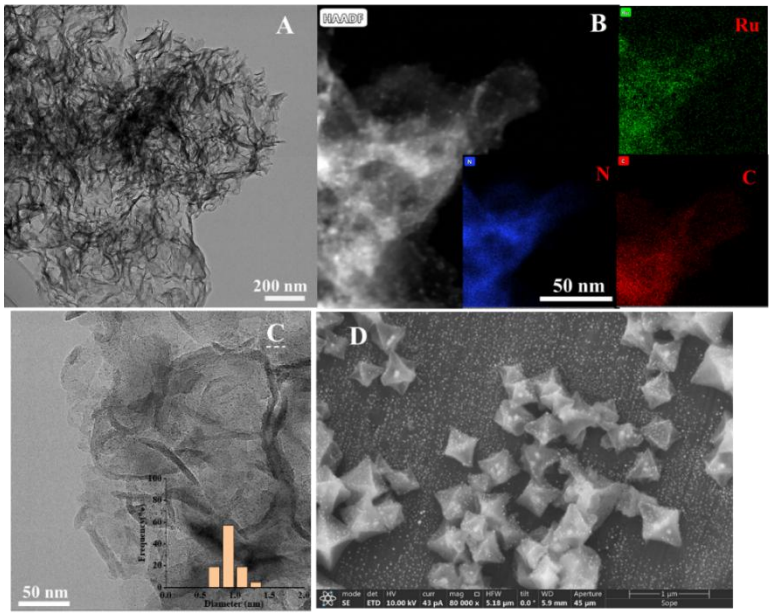


图 2 g–C_3N_4 (A)和 Ru–g–C_3N_4 (C)的 TEM 图像;C、N、Ru 的 SEM 图像(B)和相应的 EDX 元素映射图；NH_2-MIL-101(Fe)@Luminol 的 SEM(D)

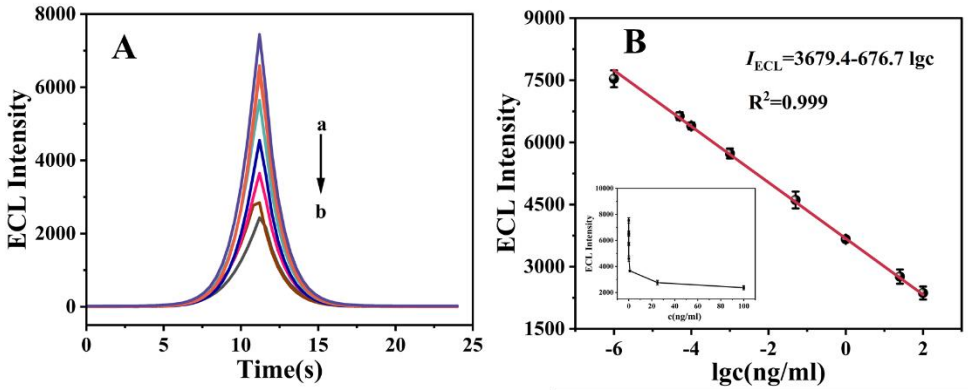


图 3 构建的免疫传感器对 h-FABP 抗原检测的定量分析

关键字 二区激发发射；活体光学检测；荧光寿命成像；多通道检测

参考文献

1. Y. Peng, B. Lu, L. Chen, N. Wang, J.E. Lu, Y. Ping, S. Chen, Journal of Materials Chemistry A, **2017**, 5, 18261-18269.

2. Z. Ding, Z. Li, X. Zhao, Y. Miao, Z. Yuan, Y. Jiang, Y. Lu, Journal of Colloid and Interface Science, **2023**, 631, 86-95.

3. J. Song, M. Huang, X. Lin, S.F.Y. Li, N. Jiang, Y. Liu, H. Guo, Y. Li, Chemical Engineering Journal, **2022**, 427, 130913-130926.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

单分子荧光共振能量转移分析核酸内切酶 Artemis 切割 DNA 的分子机制

赵柏林*、张晨阳、刘迪
西安交通大学

核酸内切酶 Artemis 在非同源末端连接（NHEJ）修复中发挥着重要作用，并参与 V(D)J 重组过程中发夹结构的打开。Artemis 功能缺失会导致免疫缺陷和细胞对放射线的敏感性。Artemis 能够处理多种 DNA 末端，包括 5'和 3'凸出、平末端、缺口和发夹结构。研究报道 Artemis 对不同的 DNA 末端具有特定的切割偏好，因此被认为是一种结构特异性内切酶。然而，目前尚不清楚 Artemis 如何识别并改变不同 DNA 末端的构象。在本研究中，我们开发了一种单分子荧光共振能量转移（smFRET）方法，并以此研究 Artemis 对多种 DNA 结构切割的分子机制。我们表达并纯化了重组的人源 Artemis 蛋白，并设计了一系列荧光标记的 DNA，以分别监测 Artemis 在不同 DNA 结构上的活性。smFRET 实验显示，荧光标记的 DNA 底物在 Artemis 结合和切割时发生了 FRET 变化，表明 DNA 末端在切割过程中发生了构象变化。这些结果揭示了 Artemis 在非同源末端连接（NHEJ）修复中对 DNA 结构特异性的作用机制。

关键字 单分子荧光, FRET, DNA 结构, Artemis, DNA 修复

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于 Ru–g–C_3N_4 和鲁米诺构建竞争型电化学发光免疫传感器用于灵敏检测心肌型脂肪酸结合蛋白

李小建*、贾丽萍、马荣娜
聊城大学

设计出将 Ru 纳米粒子固定在 g–C3N4 表面（Ru–g–C3N4），实现 g–C3N4 超低电位的电化学发光（ECL）发射，并且能产生优异的 ECL 信号；在相同的负电压下，鲁米诺与体系中的硫酸根自由基发生 ECL 反应，产生阴极发光，使得 Ru–g–C3N4 的 ECL 强度明显降低，基于此构建了竞争型的 ECL 传感器应用于急性心肌梗死的标记物心肌型脂肪酸结合蛋白（h-FABP）的检测，如图 1 所示。在最佳条件下，我们测定了该生物传感器对不同浓度的 h-FABP 抗原的 ECL 反应。Ru–g–C3N4 是通过 g–C3N4 和 RuCl3 之间的简单自发氧化还原反应制备的。在制备过程中，g–C3N4 纳米片既是 Ru 纳米颗粒沉积的还原剂，也是衬底。如图 2A 所示，g–C3N4 表现出具有多层的二维纳米片结构，为金属纳米颗粒的沉积提供了丰富的位点。与 Ru3+盐反应后，g–C3N4 纳米片表现出超小纳米颗粒，其特征如图 2B 所示的扫描电子显微镜（SEM）测量。元素映射表明 Ru 纳米颗粒均匀分布在 g–C3N4 纳米片表面上。此外，g–C3N4 的 C 和 N 元素也显示在元素映射中。Ru–g–C3N4 的透射电子显微镜（TEM）测量（图 2C）揭示了 g–C3N4 的典型层状纳米片形态，其中散布的 Ru 纳米颗粒大小约为 0.92 nm。如图 2D 所示，NH2-MIL-101(Fe)@Luminol 呈现出一个八面体状，边长大约为 500 nm。在图 3A 中，在 1.00 fg/mL ~100 ng/mL 的浓度范围内，ECL 强度随着目标浓度的增加而降低。此外，在此浓度范围内，测量的 ECL 强度与目标浓度的对数之间存在良好的线性关系（图 3B），工作曲线方程为 IECL = 3679.4-676.7 lgc，R2=0.999。检测限为 0.33 fg/mL（S/N = 3）。本研究为高性能 ECL 材料的研究提供了新的思路，为超灵敏度 ECL 生物传感器的研制提供了新的视角。

关键字 Ru 纳米粒子；g-C3N4；心肌型脂肪酸结合蛋白；低电位；鲁米诺

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

小细胞外囊泡上糖基化 RNA 的 FRET 成像

任廷举[1]、张濛之[2]、童宇逍[1]、张琪[1]、王天昊[1]、王月[1]、杨春光[1]、徐章润*[1]
1. 东北大学
2. 中国医科大学第一附属医院

小细胞外囊泡（small extracellular vesicles，sEVs）作为一种重要的疾病生物标志物，通过转运遗传物质（如 RNA 和 DNA）和关键蛋白在细胞间通讯和表观遗传调控中发挥着重要作用，已经被用于疾病的早期筛查和诊疗[1-3]。糖基化 RNA（glycoRNAs）是最近发现的一类糖基化分子，由于缺乏可视化检测方法，人们对其生物学作用知之甚少。在此，我们开发了一种基于核酸探针的双识别 Förster 共振能量转移（drFRET）策略，用于检测 RNA 上的 N-乙酰神经氨酸，实现了 sEVs 表面 glycoRNA 的高灵敏和选择性分析。drFRET 依赖于通过偶极-偶极耦合从激发态供体荧光团到基态受体发生的非辐射能量转移，可以有效地避免产生假阳性信号。通过 drFRET，我们成功地检测到了癌细胞分泌和血清来源的 sEVs 上的多种 glycoRNA 的 FRET 信号。通过将非线性降维分析算法与自动分类技术相结合，基于 sEVs 上多种糖基化 RNA 的差异表达，实现了对肿瘤细胞（100%）以及临床血清样本（85%）的精准分类。

关键字 小细胞外囊泡，糖基化，RNA，Förster 共振能量转移，成像

参考文献

1. Y.Z. Zhang, J.Y. Jiao, Y.Y. Wei, D.N. Wang, C.G. Yang, Z.R. Xu, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 15244–15252.
2. Q. Zhang, R.F. Ma, Y.Z. Zhang, J. Zhao, Y. Wang, Z.R. Xu, *ACS Sens.*, **2023**, 8, 875–883.
3. Y.Z. Zhang, J.Y. Fan, J. Zhao, Z.R. Xu, *Biosens. Bioelectron.*, **2022**, 216, 114373.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于电化学发光阻抗显微平台的可视化细胞凋亡研究

周诗懿、马诚*
扬州大学

癌症是人类健康安全的一大重要威胁，其治疗方式多为使用特效药物诱导癌细胞凋亡，因此研究细胞凋亡对于评估早期抗肿瘤治疗的效果非常重要。由于每个细胞存在特有的生理周期和显著的异质性，开发研究细胞凋亡的单细胞分析技术，对于从微观角度认识宏观生理与病理现象具有重要的科学意义和实际应用价值。在此，我们建立了基于电致化学发光的阻抗显微成像体系，实现了对药物治疗癌细胞效果的可视化监测。首先，我们探究了电阻与电致化学发光强度的关系，随后构建了基于电致发光的阻抗显微镜成像系统，利用 CCD 记录像素点的电化学发光强度随时间的变化趋势，并转换为阻抗值，以此还原阻抗空间分布状态。在此基础上，我们使用了抑制肿瘤细胞生长的 EGCG 诱导宫颈癌细胞凋亡，观察到细胞凋亡的不同周期形态，并通过电化学发光成像图反映凋亡细胞及凋亡小体的阻抗变化，从而判断药物治疗效果。相对于传统检测细胞凋亡的方法，该方法具有可视化、排除自发光源的干扰等优势，有望为评估药物治疗效果与加快癌症新药研发提供新技术和新方法。

关键字 电化学发光，显微成像，细胞凋亡

参考文献

1. Cheng Ma+ , Shaojun Wu+ , Yang Zhou+ , Hui-Fang Wei, Jianrong Zhang, Zixuan Chen,* Jun-Jie Zhu, Yuehe Lin,* and Wenlei Zhu* , *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 4907– 4914
2. Cheng Ma, Wanwan Wu, Lingling Li, Shaojun Wu, Jianrong Zhang, Zixuan Chen*, Jun-Jie Zhu*. *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 6167-6175
3.Zhichen Zhang,Cheng Ma,*Qin Xu,*Jun-Jie Zhu*. *Analyst*.**2022**, **147**, 2884

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

细胞膜仿生纳米探针用于脑部糖基化代谢成像分析

李毅然*、张开羽、丁霖、鞠熀先
南京大学化学化工学院

近十年来对糖基化功能的研究揭示了蛋白糖基化在缺血性脑卒中发生和预后中的关键作用。蛋白糖基化参与动脉粥样硬化病变和心房颤动的发展。动脉粥样硬化斑块的大小和组成受多种糖基转移酶的调节。缺血性卒中后，脑蛋白糖基化水平受到动态调节，显著影响缺血区域的炎症反应、兴奋毒性、神经元凋亡和血脑屏障破坏。更重要的是，靶向聚糖的药物，如葡萄糖胺（glucosamine, GlcN）和硫胺-G（thiamet-G, TMG），在实验性脑卒中模型中显示出对缺血性脑卒中预后的有益作用。因此，对脑部聚糖进行成像分析有助于阐明缺血性脑卒中发生和转归的相关机制，从而指导卒中防治新药的开发。

基于细胞膜介导的仿生纳米递送技术有机整合了天然生物膜的低免疫原性、靶向性和智能纳米载体设计的可调控性、多功能性，成为纳米技术在疾病靶向治疗的一种有前景的递送策略。针对活体脑部糖基化分析成像存在突破血脑屏障难，糖代谢标记周期长，标记效果差等问题，利用结合寡糖代谢工程、纳米生物、细胞工程化等技术，我们设计了用于突破血脑屏障、成像分析脑部糖基化动态变化的生物膜仿生纳米探针。利用巨噬细胞的靶向趋化性能，得到具有快速循环能力和脑部靶向性的跨血脑屏障细胞膜仿生纳米探针。在细胞膜仿生纳米探针中包裹非天然代谢寡糖，通过血液循环快速递送到脑部，进一步经过荧光标记探针对脑部的不同糖型进行成像，来评估缺血性卒中模型不同时期糖型的表达变化。该方法生物毒性低，标记效率高，是一种有前景的脑部糖基化成像技术。

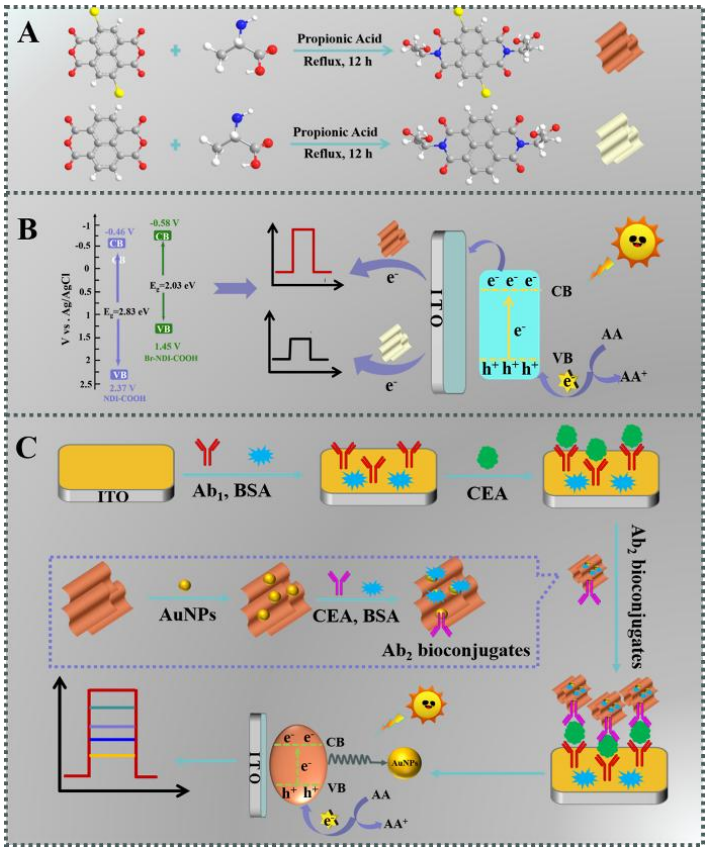
关键字 聚糖 脑 代谢标记 成像

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于新型萘二酰亚胺材料构建 PEC 免疫传感器用于 CEA 超灵敏检测

赵令玉[1,2]、申国栋[2]、马荣娜[2]、李霞[2]、赵怀庆[1]、王怀生*[2]
1. 济南大学
2. 聊城大学

萘二甲酰亚胺（NDIs）因其半导体特性备受瞩目，在光催化领域扮演着重要角色。然而，作为光电化学（PEC）传感材料的应用鲜有研究。在这项研究中，我们合成了两种新型的 NDIs 衍生物：$C_{20}H_{14}N_2O_8$（NDI-COOH）及 $C_{20}H_{12}Br_2N_2O_8$（Br-NDI-COOH），并对它们作为 PEC 传感材料的性能进行了研究。理论和实验分析表明，溴原子的取代扩展了其对可见光的吸收谱，从而显著提高了 Br-NDI-COOH 的光电化学性能。此外，将金纳米粒子(AuNPs)与 Br-NDI-COOH 结合，显著增强了光电化学信号，并将其应用于 PEC 免疫传感器检测癌症生物标志物——癌胚抗原(CEA)。该传感器具有较高的灵敏度，最低检测限为 1.22fg·mL^{-1} (S/N=3)，线性响应范围为 10fg·mL^{-1}~100ng·mL^{-1}。研究结果表明，AuNPs/Br-NDI-COOH 平台在复杂生物样品中敏感检测生物标志物具有巨大潜力。这项工作开拓了 NDIs 在 PEC 免疫传感中的应用，并强调了官能团工程对优化有机半导体 PEC 性能起到关键作用。



Scheme 1. Preparation Process of (A) Br-NDI-COOH and NDI-COOH; (B) PEC mechanism of Br-NDI-COOH and NDI-COOH in ascorbic acid (AA)/PBS system; (C) Fabrication Process of the PEC Immunosensor.

关键字 光电化学传感；萘二甲酰亚胺；信号放大；超灵敏检测

参考文献

1. C. Mao, Y. Qin, X. Zhou, R. Dai, L. Zhao, Late-model Bi-MOF & CdS-QDs materials: Excellent properties and performance in PEC sensors for lung cancer markers, *Chem. Eng. J.*, **2024**, 490, 151560.

2. W. Tu, Z. Wang, Z. Dai, Selective photoelectrochemical architectures for biosensing: Design, mechanism and responsibility, TrAC Trends in *Anal. Chem.*, **2018**, 105, 470-483.

3. Y. Wang, Y. Rong, T. Ma, L. Li, X. Li, P. Zhu, S. Zhou, J. Yu, Y. Zhang, Photoelectrochemical sensors based on paper and their emerging applications in point-of-care testing, *Biosens. Bioelectron.*, **2023**, 236 115400.

4. J.T. Kirner, R.G. Finke, Water-oxidation photoanodes using organic light-harvesting materials: a review, *J. Mater. Chem. A*, **2017**, 5(37) 19560-19592.

5. J. Hopkins, K. Fidanovski, A. Lauto, D. Mawad, All-Organic Semiconductors for Electrochemical Biosensors: An Overview of Recent Progress in Material Design, *Front. Bioeng. Biotech.*, **2019**,7.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于功能化细菌的肿瘤免疫治疗及其原位拉曼疗效监测

王钰如、陈云龙、鞠熀先*
南京大学

细菌由于其厌氧性可以主动突破肿瘤表面的屏障进入肿瘤内部，在肿瘤诊断和免疫治疗方面显示出巨大的潜力。本工作构建了以透明质酸包裹的氢键有机框架涂层的金纳米粒子(Au@HOF)、半乳糖与趋化因子受体（CXCR3）功能化的变色细菌 CV026 为载体的新型靶向性肿瘤免疫治疗探针。功能化的细菌会首先会通过透明质酸靶向到肿瘤区域，肿瘤分泌的透明质酸酶会将细菌表面的透明质酸壳层裂解掉。当细菌进入肿瘤内部后，肿瘤内部分泌的半乳糖凝集素利用细菌表面的半乳糖将细菌聚集和滞留在肿瘤内部，从而招募更多的巨噬细胞。细菌表面的脂多糖（LPS）会刺激巨噬细胞从 M2 型转化为 M1 型；细菌表面修饰的 CXCR3 也会抑制调节性 T 细胞进入肿瘤免疫微环境，降低免疫抑制，从而增强免疫治疗效果；当细菌接触到 N-酰基高丝氨酸内酯（AHL）时会发生变色，抑制细菌的进一步增值，并且其分泌的紫色杆菌素会降低炎症反应。同时，免疫治疗过程中相关分子会被 Au@HOF 捕获并通过表面增强拉曼效应产生强的拉曼信号，实现疗效的原位拉曼可视化监测。本工作开发的新型肿瘤免疫治疗与疗效监测一体化技术为肿瘤的精准治疗和动态疗效评估提供了新的解决方案。

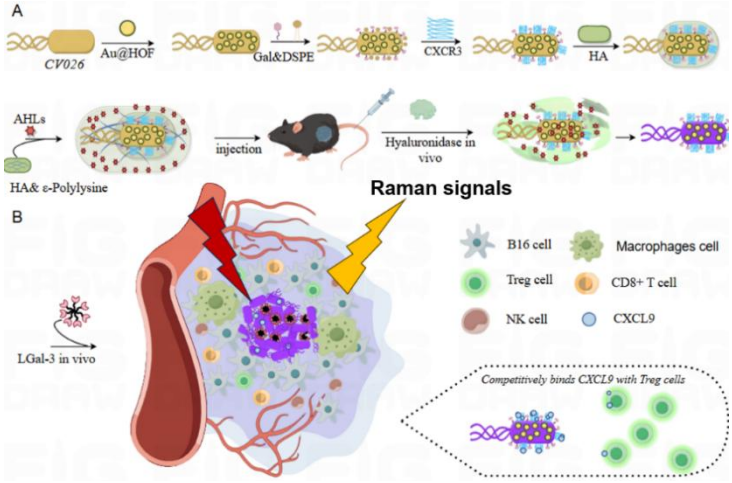


Fig. 1 Schematic illustration of preparing tumor-resident living immunotherapeutics by decorating bacteria. (A) Preparation of CV-GCA. (B) Post-assembly bacterial immunotherapy and in situ Raman efficacy monitoring.

关键字 细菌，肿瘤靶向，免疫治疗，拉曼成像，疗效监测

参考文献

1. N. Durán, G. Z. Justo, M. Durán, M. Brocchi, L. Cordi, L. Tasic, G. R. Castro, G. Nakazato. *Biotechnology Advances* **2016**, 34, 1030–1045.
2. M. A. M.Ayala, T. F. Campbell, C. Zhang, N. Dahan, A. Bockman, V. Prakash, L. Feng, T. Sher, M. DuPage . *Immunity* **2023**, 56, 1613–1630.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

单颗粒细胞外囊泡表面蛋白质与 miRNA 多重分析及其在癌症诊断中的应用

李宗博、钟文婉*
中国科学技术大学

细胞外囊泡（EVs）在细胞通讯中扮演着重要角色。然而每个囊泡的尺寸小于 200 纳米，导致携带的生物标志物非常有限，因此常规的检测手段很难灵敏地检测到这些少量的生物标志物。另外高度异质性也是细胞外囊泡的一个显著特征。我们开发了一种利用纳米磁棒辅助的单粒子分析的技术（称为 NOBEL-SPA）。该技术可进行单个细胞外囊泡的分析，在同一囊泡上利用滚环扩增技术（RCA）实现几种不同生物标志物的同时检测。最终，通过在共聚焦荧光显微镜下对大量的单个 EV 进行快速且高灵敏度的蛋白质和 microRNA 共定位评估，我们可以将细胞外囊泡划分成不同的亚群，并且发现具有特定蛋白和 miRNA 组合的囊泡亚群有助于早期（I 或 II 期）乳腺癌（Breast Cancer）的诊断。除此之外 NOBEL-SPA 还可以用来分析囊泡所携带的其他类型的生物分子或其他的与囊泡大小或结构类似的亚微米生物颗粒。研究细胞外囊泡的分子组成可以揭示囊泡的细胞起源和不同亚型囊泡对其所携带的生物分子的选择机理，加深对细胞外囊泡生成与功能的认知；还可以帮助发现在临床检查和治疗开发中有价值的独特囊泡亚群作为生物标记物。这些研究对癌症的早期诊断、个性化治疗以及精准医疗等领域都具有重要的意义。

关键字 细胞外囊泡；单颗粒分析；多重分析；纳米材料；癌症诊断

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

纳米 MOF 改性微电极检测多巴胺

赵祥龙*
重庆医科大学

Carbon fiber electrodes were first invented by Franc ois Gonon and his colleagues in the late 1970s. After the advent of CFE, the potential of CFE was shown in a variety of applications. CFE can be monitored in sub-second time and recorded in real time. Because CFEs are typically less than 10 mm in diameter, they are easy to implant and cause less tissue damage than conventional electrodes. At the same time, CFE is biocompatible and non-toxic to cells. Therefore, CFE is often used to measure the concentration of neurochemicals in the body. 1

Dopamine (DA) is a main representative of neurotransmitters, it belongs to the catecholamine group, and it is implicated in many functions of the human brain, including emotional balance, heart control, motor control, cognition, or reward.

Nano-MOFs have the advantages of adjustable porosity, chemical stability, high specific surface area and the ability to regulate surface chemistry. Tannic acid stabilizes Nano-MOFs

Based on the Co-MOF, we developed a strategy to modify Co-MOF on carbon fiber microelectrodes (CFEs) to prepare high biosafety electrodes for DA detection.

Materials & Methods:

The Co-MOF were modified on carbon fiber by Chemical growth. Tannic acid stabilizes Nano-MOFs

Results & Discussion:

FIG. 1A shows the CV of the Bare CF , Co-MOF/CF , TA/Co-MOF/CF in aCSF. New current peaks appear in the Co-MOF/CF at 0.6V and 0.8V. After etching, the current peak of Co-MOF only appeared at 0.8V.

FIG. 2 shows that DA is continuously added to 10 mL , 20 mL , 50 mL in aCSF . The Co-MOF after etching shows better stability.

Conclusions:

The results show that the sensor can realize the monitoring of DA.

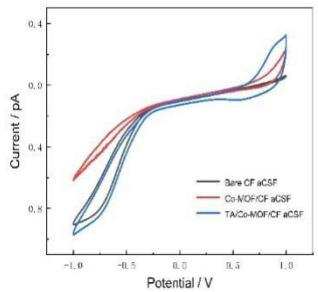


Fig. 1. CV of Bare CF , Co-MOF/CF , TA/Co-MOF/CF in aCSF.

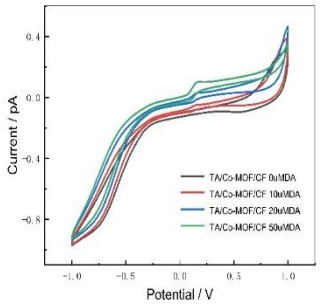


Fig. 2. The CV of TA/Co-MOF/CF after adding 10 mL , 20 mL , 50 mL DA to aCSF.

关键字 Carbon fiber microelectrode, Dopamine, Co-MOF

参考文献

1. Wang Y, Qian Y, Zhang L, et al. Conductive metal–organic framework microelectrodes regulated by conjugated molecular wires for monitoring of dopamine in the mouse brain[J]. Journal of the American Chemical Society, 2023, 145(4): 2118-2126.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于活泼羧酸酯硫醇解反应的乙酰胆碱酯酶传感研究

陈震、沈江珊*
华侨大学

传统的羧酸酯是相对稳定的，其水解反应、醇解反应或者酰胺化反应一般都需要催化剂参与或者在高温高压条件下进行[1]。本课题组在前期研究中发现，通过在芳香族羧酸酯的结构上引入一些强拉电子基团如-NO2，制备出一些活泼羧酸酯，使得其甲醇醇解反应可以在温和的实验条件下进行，结合同位素动力学效应，可实现甲醇和氘代甲醇的识别与传感[2]。本研究基于课题组的上述发现，考虑到乙酰胆碱酯酶(AChE)能够高效地催化硫代乙酰胆碱(ATCh)底物水解反应释放出硫代胆碱(TCh)，并考虑到 TCh 作为硫醇分子是一种比甲醇更强的亲核试剂[3]，尝试研究活泼羧酸酯的硫醇解反应，由此建立 AchE 新的传感体系。合成了三种羧酸酯被用作检测乙酰胆碱酯酶及其抑制剂的反应底物，成功地发展出 AChE 活性的光谱传感系统。此外，这种传感方法还可用于检测 AChE 抑制剂和有机磷试剂。

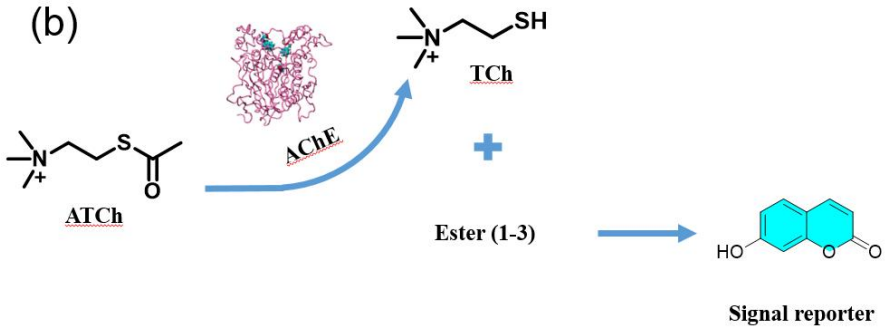


Fig. 1 (a) Structures of Esters (1-3) and (b) Illustration of the mechanism of this novel assay for AChE.

关键字 活泼羧酸酯；硫醇解反应；AChE

参考文献

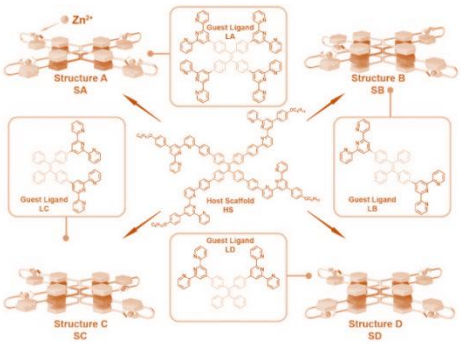
1. Johnson S L. *A d v. Phys O rg Chem* , **1967**, 5: 237.
2. M.Y. zhang, R.X. Ji, et al. *The Journal of Physical Chemistry B*,**2024**,128,7605-7614.
3. K.Cui, Z. Chen, Z. Wang, et al. *Analyst*, **2011**, 136(1): 191-195.

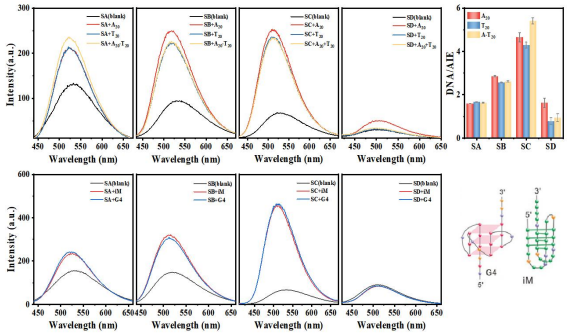
分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

精准可控荧光探针的构建及其用于核酸构象分析

杨昕、祝振童、王明、卢小泉*
西北师范大学

DNA 构象变化是遗传发育过程中基因调控的重要环节，基因组中 DNA 结构的微小畸变都会导致 DNA 结构的紊乱，从而引发各种遗传性疾病。表征 DNA 结构的一般方法有透射电子显微镜（TEM）、原子显微镜（AFM）、小角 X 射线散射（SAXS）等，这些需要对样品进行复杂的前处理，非原位进行的测试也会影响原始生物信息，更重要的是只能捕获 DNA 的静态信息。荧光法具有灵敏度高、选择性强、样品消耗量少、可进行原位实时分析等优势，因此，在此基础上开发具有免标记、原位、特异性强等特点的结构探针对 DNA 构象和精细结构分析测量至关重要。传统寡聚发光染料与 DNA 作用时由于其结构无规律、堆积数量不可控、空间排布不明确等不足，阻碍了“探针-DNA”作用机理的研究，而本文的寡聚发光体具有堆积数量可控、空间排布明确等优点在 DNA 构象分析总表现出巨大潜力。本文通过一系列具有明确堆积数量和空间排布的寡聚发光体与 DNA 结构作用，分析探针结合 DNA 前后荧光信号变化规律并筛选优化探针特异性，从而构建出具有免标记、高空间分辨可控寡聚发光体探针，并进行 DNA 精细结构分析。





关键字 荧光探针 DNA 构象 寡聚发光体

参考文献

1. Y Gao, Z He, X He, H Zhang, J Weng, X Yang, F Meng, L Luo, B Tang. Dual-color emissive AIEgen for specific and label-free double-stranded DNA recognition and single-nucleotide polymorphisms detection. *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, 141(51): 20097-20106.

2. B. Chen, Q. Huang, Z. Qu, C. Li, Q. Li, J. Shi, C. Fan, L. Wang, X. Zuo, J. Shen* and J. Li*, Probing Transient DNA Conformation Changes with an Intercalative Fluorescent Excimer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 12, 6624-6630.

3. Z. Zhu, C. Zeng, Y. Zhao, J. Ma, X. Yao, S. Huo, Y. Feng, M. Wang*, X. Lu*, Precise Modulation of Intramolecular Aggregation-induced Electrochemiluminescence by Tetraphenylethylene-based Supramolecular Architectures, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, 46, e202312692.

4. J Ma, N Han, H Yu, J Li, J Shi, S Wang, H Zhang, M Wang. Multi-Decker Emissive Supramolecular Architectures Based on Shape-Complementary Ligands Pair. *Small*, **2022**, 18(26): 2202167.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

温度和 pH 双重响应荧光星形聚合物的合成及其细胞成像

刘卫卫*、邹涛、赵瑾、杨超杰、邓平晔
北京市科学技术研究院分析测试研究所（北京市理化分析测试中心）

荧光显微镜辅助细胞成像是高分辨和无创成像中使用最广泛的方法之一。高性能荧光材料的开发是荧光成像技术发展的关键。其中，有机荧光染料，尤其是荧光聚合物，因其发光强、细胞相容性好、易于获取等优点，在生物传感和生物成像中得到了广泛的应用。与线性或支链聚合物相比，荧光星形聚合物的聚合物链长和分支密度易于修饰，从而实现了光物理性质的微调，因此越来越受到人们的关注。然而，一种具有精确分子结构和良好再现性的绿色高效荧光星形聚合物的合成方法仍然是需要的。本工作描述了在连续流微反应器中通过可逆加成-断裂链转移（RAFT）聚合制备荧光星形聚 N-异丙基丙烯酰胺（FLU-PNIPAM）聚合物。该连续流微反应器聚合技术具有精度、效率和可重复性。具体工作为首先合成一种四官能 RAFT 试剂和功能单体十一烯酰荧光素（FLU-UE），之后与 NIPAM 单体一起泵入微反应器进行 RAFT 聚合。通过优化微反应器聚合工艺参数，得到性能良好的 FLU-PNIPAM。产物中的 NIPAM 和 FLU-UE 单元分别赋予其温度和 pH 响应性。透射电镜和动态光散射分析显示，FLU-PNIPAM 水溶液在 37 °C 自组装成均匀大小的纳米颗粒。荧光分光光度计分析显示，Flu-PNIPAM 水溶液的荧光具有 pH 响应性，在 pH≥6.0 时，荧光强度达到最大值。这些纳米颗粒在浓度高达 100 μg/mL 的情况下保持了显著的细胞活性，并且具有良好的细胞摄取和优异的细胞成像性能。本工作为具有精确分子结构的荧光星形聚合物的合成提供了一种绿色、高效、可重复的合成方法，有助于促进高分子荧光染料的实际应用。



关键字 连续流聚合；荧光星形聚合物；温度响应性；pH 响应性；细胞成像

参考文献

1. H. Lian, Y. Li, S. Saravanakumar, H. Jiang, Z. Li, J. Wang, L. Xu, W. Zhao, G. Han. Coord. Chem. Rev., 2022, 452, 214313.
2. S. Munan, Y.-T. Chang, A. Samanta. Chem. Commun., 2024, 60, 501-521.
3. S. Dolui, B. Sahu, S. A. Mohammad, S. Banerjee. JACS Au, 2023, (8), 2117-2122.
4. S. Zhang, T. Junkers, S. Kuhn. Chemical science, 2022, 13, 12326-12331.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

金属有机框架晶面活化增强电化学发光

武泰慷、雷建平*
南京大学

电化学发光（ECL）效率由共反应剂与发光体间的电荷转移决定，但共反应物在发光体表界面反应的动力学较为缓慢[1-2]。从分子层面看，发光体表界面的电化学发光反应能力取决于其表面原子和分子结构。晶面作为调节发光体表面和界面结构的重要参数。在本研究中，分别将高结晶性苝基 MOF 纳米盘，纳米棒和纳米块作为模型来研究不同晶面 ECL 反应活性位点的几何结构特性（Fig. 1）。分析测试表明其中最优（110）晶面暴露的 MOF 的 ECL 强度相比配体 ECL 强度约提高 60 倍，且因内部快速电荷转移，ECL 强度自增强约 1000 倍。理论计算结果指出（110）晶面显著提高了共反应物的活化分解，极大地增强了 ECL 信号。本文阐明了晶面 ECL 反应活性位点的几何结构特性，为高性能 ECL 发光体的晶面设计工程提供了新思路。

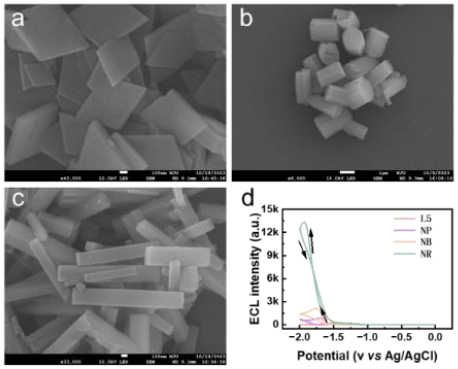


Fig. 1 ECL response of Perylene-based MOFs with different crystal facet exposure.

关键字 晶面；金属有机框架；电化学发光；发光机制

参考文献

1. Luo, R. G.; Zhu, D.; Ju, H. X.; Lei, J. P. *Acc. Chem. Res*. **2023**, 56, 1920.
2. Liu, T, R.; Tao, Q, T.; Wang, Y, F,; Luo, R. G.; Ma, J.; Lei, J. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 28, 18958.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于 MOFs 的脲酶纳米马达的持续自驱动增强膀胱癌疗效

孙鋆、雷建平*
南京大学仙林校区化学化工学院

脲酶驱动的微纳米马达具备优良的生物相容性和底物可及性，在生命分析领域应用潜力突出。然而脲酶催化存在活力衰减问题，导致马达运动寿命短暂，极大限制了脲酶马达的应用场景。MOF 材料由于其可调的分子结构，可稳定酶的活性，因而在酶的固定化方面具有独特的优势[1-2]。本文利用结构相近的咪唑酯类框架材料作为马达载体，合成了一类脲酶驱动的 MOF 马达（Fig. 1）。原位红外光谱和 DFT 计算结果佐证了 MOF 微环境（孔径，氢键位点）对于有效稳定脲酶活性，并极大延长脲酶马达运动寿命的重要作用。该 MOF 马达对生理水平尿素的正向趋化作用使其在膀胱内给药期间能够自发靶向并长时间停留，在原位膀胱癌小鼠膀胱内灌注疗法模型中表现出较为满意的治疗效果。

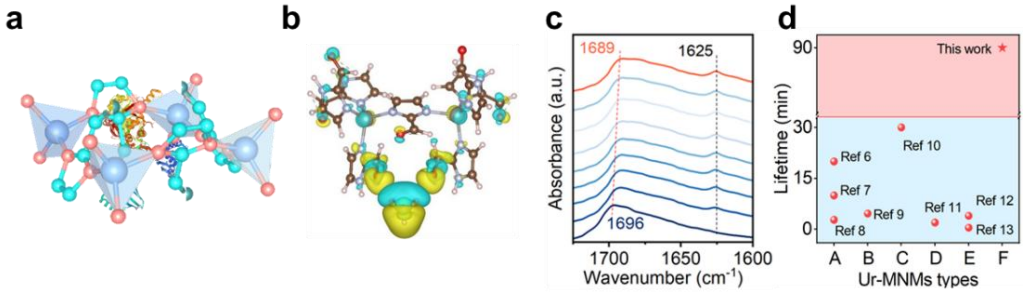


Fig. 1. Sustainable motion of the Ur-Motors and molecular mechanism.

关键字 脲酶；MOFs；微纳米马达；长时间运动寿命；膀胱癌治疗

参考文献

1. J. T. Liu, J. Huang, L. Zhang, J. P. Lei, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, 50, 1188.
2. J. T. Liu, T. R. Liu, P. Du, L. Zhang, J. P. Lei, *Angew.Chem. Int. Ed.* **2019**, 58,7808–7812.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

近红外二区光控水凝胶纳米马达用于肿瘤免疫化疗

王莹菲[1,2]、鞠焜先[2]、刘宏[1]、刘颖*[2]
1. 东南大学
2. 南京大学

纳米马达是一种能够将其它形式能量转换为自主运动能力的智能仿生器件，相比于依赖 EPR 效应被动靶向至肿瘤部位的传统纳米材料，具有自推进运动、自主导航、功能多样性等优点，在药物运输领域有着潜在的应用。纳米马达的自主运动有助于提高治疗制剂在肿瘤组织处的穿透深度，有望克服实体瘤肿瘤微环境形成的生物屏障，增强治疗效果。在众多的纳米马达驱动方式中，光作为一种稳定可控的物理驱动方式，不依赖高精尖设备简单且操作简单，因而得到广泛研究与关注。然而近红外一区光的组织穿透能力受到与生物分子相互作用的限制，受其驱动的纳米马达在生物医学领域难以取得进一步的应用。近红外二区光（900-1700 nm）与近红外一区光（< 900 nm）相比具有分辨率高、穿透深、自荧光低的显著优点，在乳腺癌这类浅表实体肿瘤更具应用潜力。基于此，我们设计了一种 1064 nm 近红外二区光驱动的水凝胶纳米马达（AHNMs），负载化疗药物阿霉素（AHNMs-DOX）用于肿瘤增强免疫治疗。在外部磁场作用下，磁性纳米粒子 Fe3O4@Cu9S8 在水凝胶纳米马达内不对称分布。近红外二区（1064 nm）光照下 Fe3O4@Cu9S8 产热，AHNMs 内形成温度梯度，产生自热泳现象，推动马达运动。AHNMs 上同时功能化了多巴胺基团，用于捕获肿瘤细胞在 DOX 化疗作用下免疫原性死亡产生的相关抗原，加速激活免疫应答。近红外二区光驱动的水凝胶纳米马达生物相容性好，具有自主运动能力，可以提高药物分子在肿瘤组织处的穿透深度，增强免疫化疗效果，促进了纳米马达临床应用的发展。

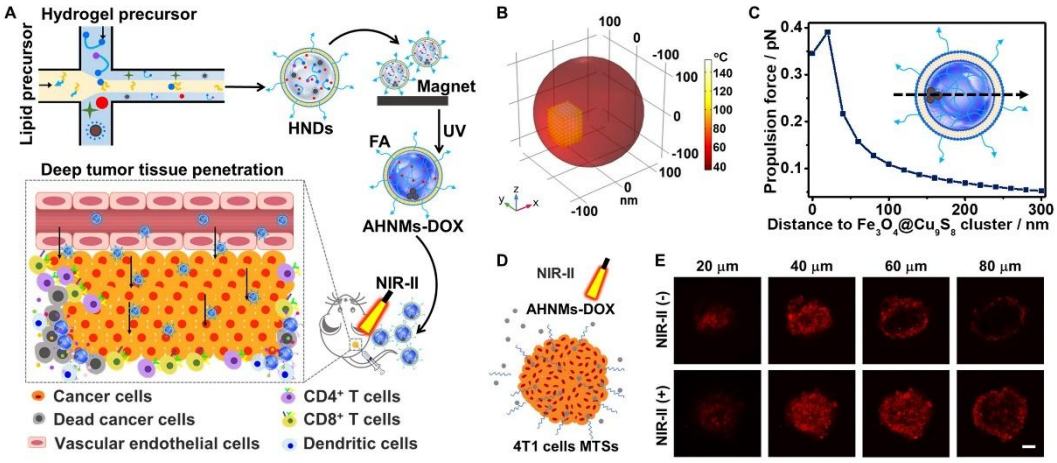


Fig. 1 (A) Schematic illustrations for synthesis of DOX encapsulated asymmetric hydrogel nanomotors (AHNMs-DOX), and its application for enhanced cancer chemoimmunotherapy. (B) Simulated temperature distribution for AHNMs and (C) corresponding propulsion force exerted on AHNMs along the central line across Fe_3O_4@Cu_9S_8 cluster. Inset: schematic illustration of propulsion force exerted on AHNMs. (D) Schematic illustration of 4T1 cells 3D MTSs model incubated with AHNMs-DOX and (E) Z-stack CLSM images of 3D MTSs planes with different distances to the bottom of 3D MTSs in the presence (NIR-II (+)) and absence (NIR-II (-)) of NIR-II irradiation (scale bar: 50 μm).

关键字 NIR-II，纳米马达，水凝胶，免疫化疗，癌症治疗

参考文献

1. Nat. Commun., 2019, 10: 966-77;
2. Adv. Sci., 2021, 8: 2002525
3. Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60: 16139-48;
4. Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59: 16918-25
5. Angew. Chem. Int. Ed. e202212866.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

一种基于生物正交化学的钌催化的化学发光探针用于体内癌症可视化成像

郭东男、胥丹、侯晓芳、王嗣岑*
西安交通大学

研究目的：硫化氢（H_2S）在癌症生物学中起着至关重要的作用，参与细胞增殖、血管生成、凋亡等多个过程，尤其是其水平升高与乳腺癌的快速生长和转移密切相关。然而，现有的 H_2S 检测手段，特别是在体内成像中，面临灵敏度不高、选择性差以及半衰期短的问题，难以实现对 H_2S 的实时、精确检测。**研究方法：**为了解决这些问题，我们开发了一种新型的生物正交活化化学发光（BAC）探针，能够在体内实时高效地检测乳腺癌中的 H_2S。该探针是通过将具有高化学发光效率的 1,2-二氧杂环丁烷类（PAD）结构与生物正交化学（BCC）模块精心设计结合而成，并在钌催化的脱烯丙基反应下，通过 H_2S 激发自裂解，生成化学激发的光信号。在开发过程中，我们首先设计并优化了一条高效的合成路线，仅需两步反应即可生成探针的核心化学发光基团。与当前常见的合成方法相比，该路线简化了合成步骤，显著降低了生产成本（约降低 300-400 倍），并且合成产率高达 98%。**研究结果：**实验结果表明，BAC 探针在生理条件下具有极高的灵敏度和优异的 H_2S 选择性，半衰期长达 18.5 小时，响应时间仅为 1 分钟，检测限低至 87 nmol/L。更重要的是，该探针在乳腺癌细胞中展现出极低的毒性，确保了其在体内应用的安全性和有效性。在乳腺癌小鼠模型中，BAC 探针成功激发了强烈的化学发光信号，能够精确检测肿瘤微环境中的 H_2S 水平，其发光强度是对照组的 5 倍以上，持续时间长达数小时。通过进一步的体内成像实验，我们发现该探针能够实现肿瘤组织与健康组织的显著区分，验证了其在癌症诊断和手术导航中的潜力。此外，该探针的生物相容性和选择性使其成为研究 H_2S 相关疾病的理想工具。**研究结论：**总而言之，我们开发的 BAC 探针是一种高效的成像工具，不仅可以实时、非侵入性地检测体内 H_2S 水平，还为癌症诊断、治疗监测及影像引导下的手术提供了新的可能性。此外，优化后的高效合成路线不仅降低了生产成本、提高了合成效率，还适用于其他化学发光探针的开发，推动了其在生物医学研究和临床应用中的广泛应用。

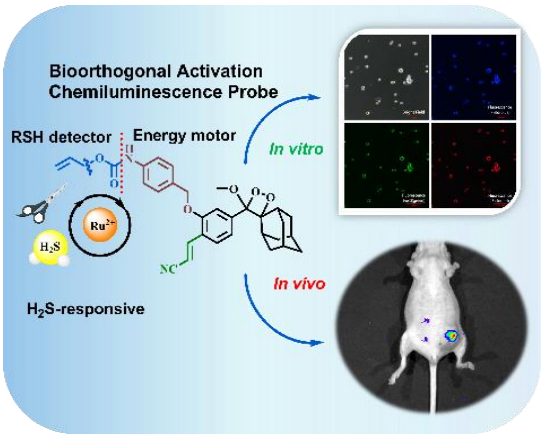


图 1 钌催化的 BAC 化学发光探针用于体内外可视化成像

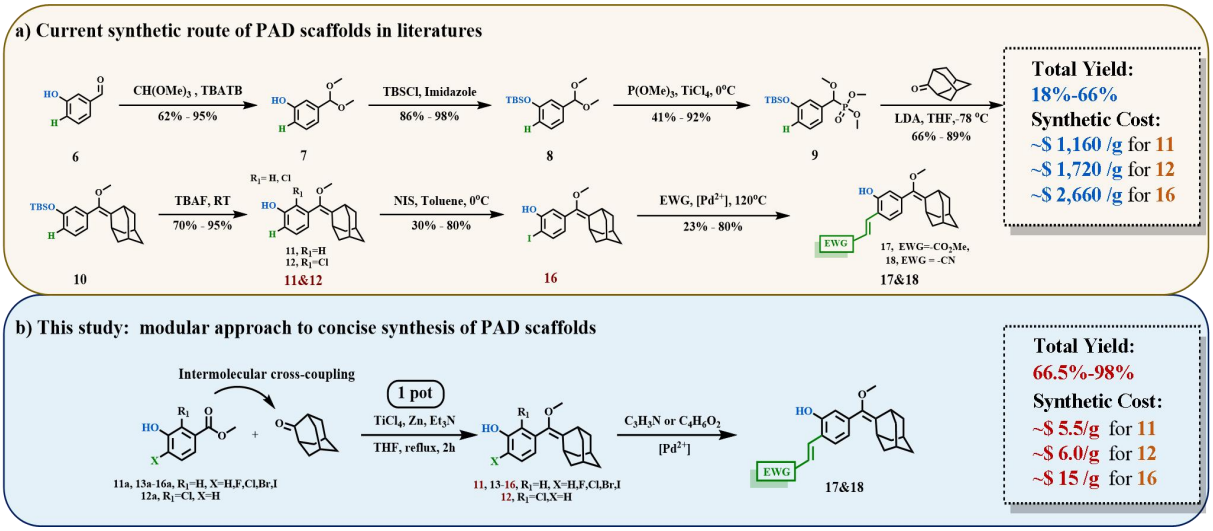


图 2 不同 PAD 及其衍生物的合成方案对比 （a） 当前报道的 PAD 骨架的合成方法 （b） 本研究中优化后的 PAD 及其衍生物的高效合成路线

关键字 化学发光，硫化氢，肿瘤诊断，体内成像

参考文献

1. a) Z. Zhao, L. Chen, C. Yang, W. Guo, Y. Huang, W. Wang, M. Wan, C. Mao, J. Shen, *Bioactive Materials* **2024**, *31*, 578-589; b) G. K. Kolluru, R. E. Shackelford, X. G. Shen, P. Dominic, C. G. Kevil, *Nature Reviews Cardiology* **2023**, *20*, 109-125; c) E. Disbrow, K. Y. Stokes, C. Ledbetter, J. Patterson, R. Kelley, S. Pardue, T. Reekes, L. Larmeu, V. Batra, S. Yuan, U. Cvek, M. Trutschl, P. Kilgore, J. S. Alexander, C. G. Kevil, *Alzheimers & Dementia* **2021**, *17*, 1391-1402; d) W. Y. Kim, M. Won, S. Koo, X. Zhang, J. S. Kim, *Nano-Micro Letters* **2021**, *13*; e) L. D. Yu, P. Hu, Y. Chen, *Adv. Mater.* **2018**, *30*; f) C. Szabo, *Nature Reviews Drug Discovery* **2016**, *15*, 185-203; g) C. Szabó, *Nature Reviews Drug Discovery* **2007**, *6*, 917-935.

2. a) C. Y. Jiang, H. J. Huang, X. Y. Kang, L. Yang, Z. Xi, H. Y. Sun, M. D. Pluth, L. Yi, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 7436-7495; b) H. Ibrahim, A. Serag, M. A. Farag, *Journal of Advanced Research* **2021**, *27*, 137-153.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于三层超表面传感芯片的外泌体检测方法

罗鑫明、张婉姗、吴嘉衍、姚旭*
福建医科大学药学院

外泌体近年来被广泛认为是一种极具潜力的癌症早筛标志物，而开发高特异性和高灵敏度的检测方法仍面临巨大挑战[1]。本研究发展了一种基于表面等离激元共振（Surface Plasmon Resonance, SPR）传感技术的外泌体检测方法[2]。通过 FDTD 模拟计算和聚苯乙烯微球自组装技术，设计并制备了一种金/二氧化硅/金孔阵列三层构型的超表面 SPR 传感芯片，从而通过光学模式耦合同时利用 SPR 的高增强和空腔共振的低损耗，以实现无需信号放大步骤的高灵敏度检测。修饰 CD63 或 EpCAM 核酸适配体后，该芯片不仅能够有效区分健康肝细胞与肝癌细胞来源的外泌体，还在血清样品检测中展现出优异的重现性，为传感芯片的设计及基于外泌体的癌症早期筛查提供了新的研究思路。

关键字 外泌体、表面等离激元共振、模式耦合、核酸适配体

参考文献

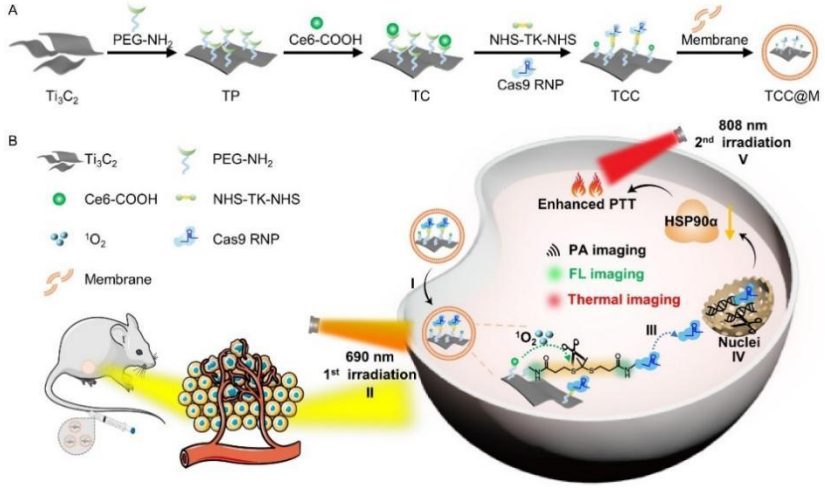
1. Möller A., Lobb R. J. The evolving translational potential of small extracellular vesicles in cancer[J]. Nature Reviews Cancer, 2020, 20(12): 697-709.
2. Luo X., Yan S., Chen G., et al. A cavity induced mode hybridization plasmonic sensor for portable detection of exosomes[J]. Biosensors and Bioelectronics, 2024: 116492.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

可远程次序激活的生物功能化 MXene 用于时空可控的肿瘤光热治疗及多模态成像

贾静、张晓波、李毅然、鞠熀先*
南京大学

肿瘤微环境的复杂性和多样性使得癌症治疗疗效不佳，尽管联合治疗策略可以降低肿瘤对单一疗法的耐药性，但不同药物间的代谢差异，靶点难以共定位，以及递送过程缺乏实时监控等问题仍然制约着癌症诊疗的发展[1]。时空可控的次序激活策略可以实现更精准的给药，给癌症治疗带来巨大优势[2]。本工作利用先进的纳米载体技术和基因编辑技术对 MXene 材料进行生物功能化，精心设计了一种可多模态监测的次序激活基因调控与时空可控光热治疗探针（TCC@M）。具体而言，该纳米探针以 MXene 材料 Ti_3C_2 作为载体，上面修饰了光敏剂 Ce6 以及可光动力激活的 CRISPR-Cas9，最后包覆癌细胞膜以增强靶向递送。通过两次近红外光照射该探针可实现时空控制的靶基因降解，以增强后续光热治疗。其中，第一次光照可以激活 TCC@M 上 Ce6 的光动力效应，从而释放 Cas9 核糖核蛋白，释放出的 Cas9 核糖核蛋白在 Cas9 上核定位序列的引导下进入细胞核，特异性裂解热休克蛋白（HSP）90α 基因，大大降低了 HSP90α蛋白的表达，从而有效地使癌细胞对热敏感，使得在第二次照射下，Ti_3C_2 MXenes 能有效地在温和温度（<45 °C）[3]下实现对肿瘤的光热杀伤作用。同时，TCC@M 还能产生荧光、光声和热成像信号，以指导最佳光照时机。体内研究显示，该设计的 TCC@M 被次序激活后具有时空选择性疗效。这种创新方法将基因调控和增强的光热治疗有效地结合在一起，为实现精准的癌症治疗提供思路。



关键字 光热治疗，次序激活，生物功能化 MXene，时空可控，CRISPR-Cas9

参考文献

1. W. Fan, B. Yung, P. Huang, X. Chen, *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 13566-13638.
2. A. Zakharchenko, N. Guz, A. M. Laradji, E. Katz, S. Minko, *Nat. Catal.* **2018**, *1*, 73-81.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

低自限反应的中熵纳米酶持续催化增强化学发光用于成像分析

罗帅、王钰如、鞠熀先*
南京大学

化学发光 (CL) 成像因其较低的背景干扰已在生物医学和分析传感中得到了广泛的关注和应用，但大部分 CL 体系受限于闪光特性或较低的发光效率难以应用于成像，如何实现 CL 的持续及高强度发射对其进一步发展至关重要。催化剂的参与可以显著提高信号强度，但由于自限反应的存在，导致难以实现持续、高效地催化 CL 发射。本研究基于普鲁士蓝类似物设计并合成了一种具有钴、镍、铜三核构型的中熵 (ME)纳米酶，其具备持续催化 H_2O_2 分解的能力，因而可与鲁米诺反应产生持续的 CL 发射。与游离的离子相比，ME 纳米酶实现了从闪光 CL 信号的增强变为持续的 CL 增强，即由点到线的转变。在机制研究中发现电荷可以通过框架中的氰基桥在不同位点之间发生转移，从而加速了 ME 纳米酶中金属位点的活性价态循环，降低了自限反应。传统的类芬顿反应需要消耗大量 H_2O_2 实现活性价态的转化，而 ME 纳米酶在低浓度 H_2O_2 下即可实现持续的 CL 信号增强，发光时间至少持续 4 h，并且在此之后加入反应剂后可继续发光。为了验证 ME 纳米酶的应用潜力，将其作为信号探针，建立了一种简便的直读式 CL 成像方法来动态评估细菌的运动活性。这项工作为开发新型 ME 纳米酶和提出不同于减缓接触延长 CL 的新机制提供了思路。

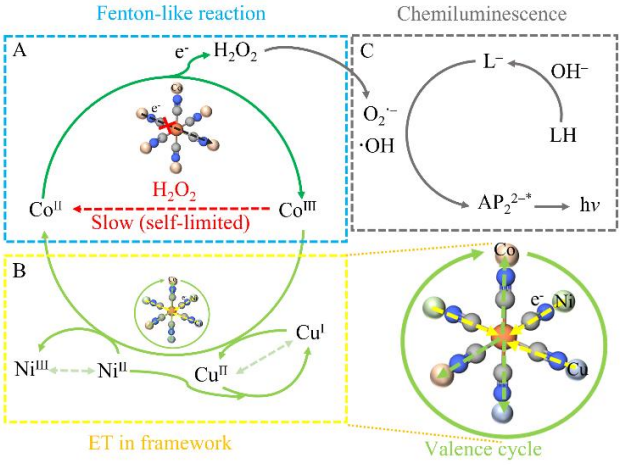


Fig. 1 (A) Schematic illustration of Fenton-like reaction processes of Co species. (B) The regeneration of active valence of Co through ET in framework of ME nanozyme. (C) Schematic illustration of ME nanozyme-participated CL reaction.

关键字 ME 纳米酶，CL 成像，自限反应，价态循环，细菌运动

参考文献

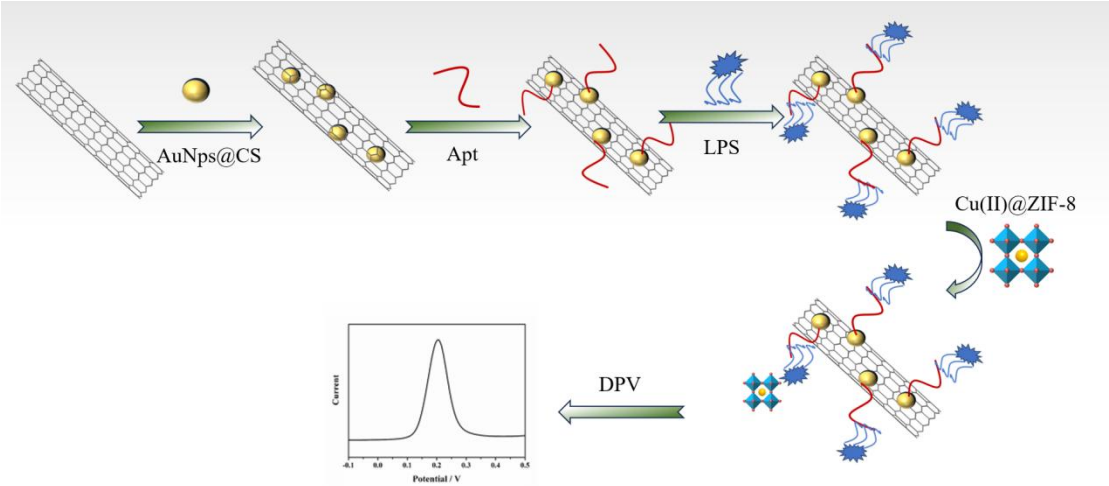
1. Y. Liu, W. Shen, Q. Li, J. Shu, L. Gao, M. Ma, W. Wang, H. Cui, *Nat. Commun.* **2017**, 8, 1003.
2. M. Zandieh, J. W. Liu, *ACS Nano* **2021**, 4, 7451-7458.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于铜掺杂的 ZIF-8 标记的电化学适配体传感器用于内毒素（LPS）的灵敏检测

陈晓华、贺晓、苏明*
河北大学

内毒素是入侵的革兰氏阴性病原体的标志。虽然内毒素本身在化学上是惰性的，但它是最有效的致炎微生物之一，可以引发一系列的宿主反应。感染者可能会出现发烧、哮喘、咳嗽、呼吸困难、腹泻、休克等症状，过量的内毒素可以产生过度的炎症反应，从而导致多器官衰竭、内毒素休克甚至死亡[1]。因此，灵敏的内毒素检测在药物、食品安全监测和临床诊断中具有重要意义[2]。本研究构建了一种用于超灵敏检测内毒素(LPS)的电化学适配体传感器，该传感器基于适配体作为捕获探针，铜掺杂的 ZIF-8 作为标记探针，实现对内毒素的特异性捕获和信号放大。用掺杂 AuNps@CS 的碳纳米管修饰电极表面，利用 Au-S 键实现适配体的固定，从而特异性捕获 LPS。LPS 分子中碳水化合物部分的阴离子基团可以捕获铜掺杂的 ZIF-8，该夹心型生物传感器利用铜掺杂的 ZIF-8 的类过氧化物酶活性显著地放大电化学信号，通过差分脉冲伏安法(DPV)考察该电化学传感器的传感性能，并利用其类过氧化物酶活性催化底物的电化学信号来监测 LPS 的水平。该传感器对 LPS 表现出优异的选择性和灵敏度，是一种充满希望的、环境友好的、快速和经济的内毒素检测方法。



关键字 适配体，生物传感，纳米酶，内毒素

参考文献

1. Miao P . Electrochemical sensing strategies for the detection of endotoxin: a review [J]. RSC Advances, **2013**.

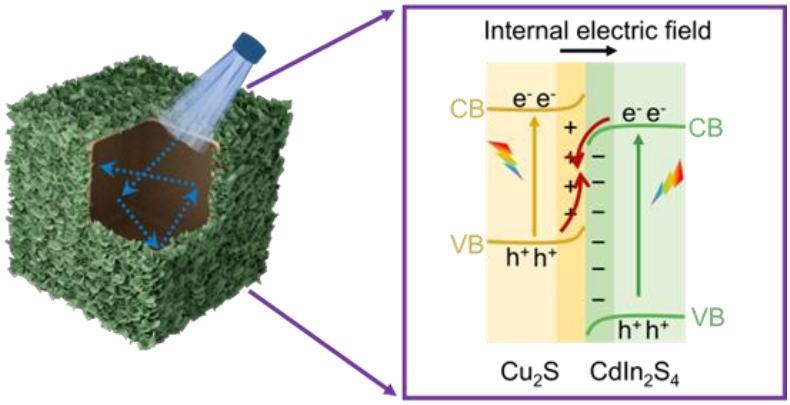
2. Haritha K ,Teena T ,V. R N , et al. Label-free detection of endotoxin and gram-negative bacteria from water using copper (I) oxide anchored reduced graphene oxide [J]. Analytica Chimica Acta, **2023**, 1237.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

$Cu_2S/CdIn_2S_4$ 空心立方体的 Z-Scheme 异质结提高光电化学性能

Si Zhang、Jiahui Sun、Huangxian Ju*、张思
南京大学

The exaltation of light-harvesting efficiency and the inhibition of fast charge recombination are pivotal to the improvement of photoelectrochemical (PEC) performance. Herein, a direct Z-scheme heterojunction is designed of $Cu_2S/CdIn_2S_4$ by in situ growth of $CdIn_2S_4$ nanosheets on the surface of hollow CuS cubes and then annealing at 400 °C. The constructed Z-scheme heterojunction is demonstrated with electron paramagnetic resonance and redox couple (*p*-nitrophenol/*p*-aminophenol) measurements. Under illumination, it shows the photocurrent 6 times larger than that of hollow Cu_2S cubes, and affords outstanding PEC performance over the known Cu_2S and $CdIn_2S_4$-based photocatalysts. X-ray photoelectron spectroscopy and density functional theory results demonstrate a strong internal electric field formed in $Cu_2S/CdIn_2S_4$ Z-scheme heterojunction, which accelerates the Z-scheme charge migration, thereby promoting electron-hole separation and enhancing their utilization efficiency. Moreover, the hollow structure of Cu_2S is conducive to shortening the charge transport distance and improving light-harvesting capability. In proof-of-concept PEC application, a PEC detection method for miRNA-141 based on the sensitivity of benzo-4-chloro-hexadienone to light absorption on $Cu_2S/CdIn_2S_4$ modified electrode is developed with good selectivity and a limit of detection of 32 aM. This work provides a simple approach for designing photoactive materials with highly efficient PEC performance.



关键字 photoelectrochemistry, Z-scheme heterojunction, hollow Cu2S cubes, Cu2S/CdIn2S4 hollow cubes, photocatalysts

参考文献

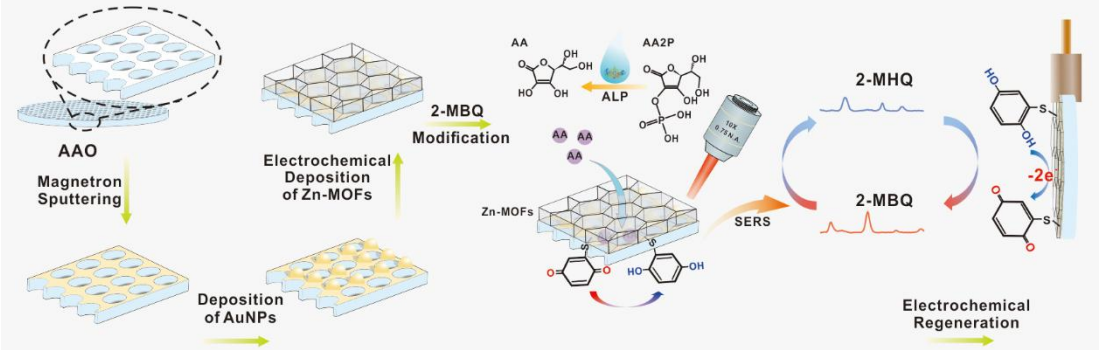
1. S. Zhang, J. Sun, H. Ju, *Small,* **2024**, 2405712.
2. M. Liu, W. Yang, R. Xiao, Y. Qin, R. Tan, Y. Chen, W. Gu, L. Hu, Y. Lin, C. Zhu, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2024**, 63, e202407481.
3. Y. J. Chen, J. Z. Zhang, Z. X. Wu, Y. X. Qiao, L. Zheng, F. Wondu Dagnaw, Q. X. Tong, J. X. Jian, *Angew. Chem., Int. Ed.,* **2023**, 63, e2023182.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

用于碱性磷酸酶活性检测的可再生 MOFs 功能化 SERS 传感器

奚成业、李大伟*
华东理工大学

碱性磷酸酶（ALP）广泛分布于人体中，与多种肝脏和骨骼疾病相关 1,2。本文通过在阳极铝氧化膜（AAO）上电化学自组装金纳米颗粒（AuNPs）与锌基金属有机框架（Zn-MOFs），设计并制备了一种可重复使用的表面增强拉曼散射（SERS）传感器，并建立了一种 ALP 活性的检测方法。在 ALP 的存在下，抗坏血酸 2-磷酸（AA2P）发生磷酸化反应生成抗坏血酸（AA），该方法通过 AuNPs 表面的 2-巯基对苯二醌（2-MBQ）在对 AA 快速灵敏的响应实现了对 ALP 活性的检测。得益于 Zn-MOFs 的功能化和 SERS 的优势，如光谱指纹和高灵敏度等，所开发的传感器表现出良好的抗干扰性能，和较宽的检测范围（1 至 300 U/L），其检测限为 0.38 U/L，并且能够直接检测血清样本中的 ALP 活性，无需稀释等前处理。此外，基于 2-MBQ 的氧化还原可逆性，通过电化学氧化还原反应使传感器实现再生，且再生后的传感器仍保持结构完整性和对 ALP 活性的敏感响应，从而提高了使用效率并降低测试成本。这工作为 ALP 相关疾病的早期诊断提供了一个新平台，有望用于灵敏且无需预处理的血清生物标志物自动化检测。



Scheme 1. Illustration of the reusable MOFs-functionalized SERS sensor for ALP activity detection.

关键字 金属有机框架、表面增强拉曼、碱性磷酸酶

参考文献

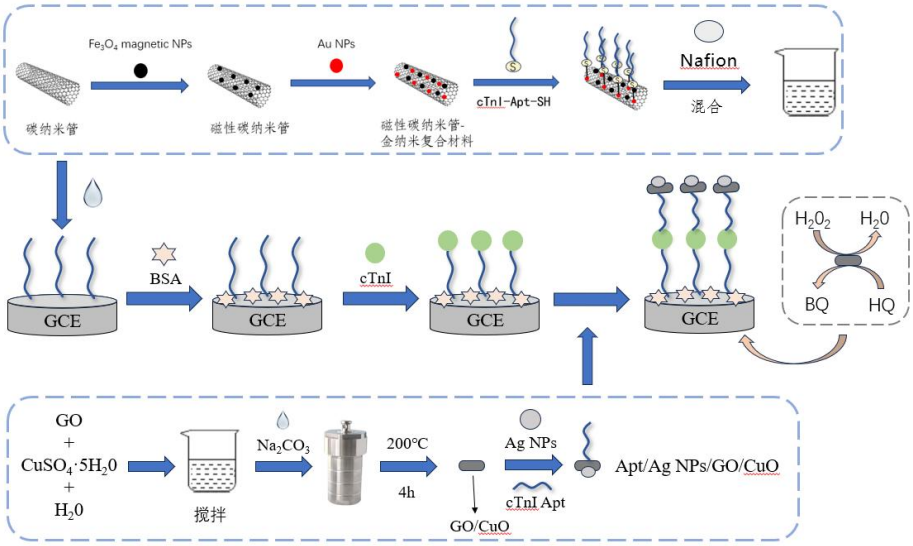
1. K. Ooi, K. Shiraki, Y. Morishita, T. Nobori. J. Clin. Lab. Anal. **2007**, *21 (3)*, 133-139.
2. S. Goggins, C. Naz, B.J. Marsh, C.G. Frost. Chem. Comm. **2015**, *51(3)*: 561-564.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于掺金磁性碳纳米管和 AgNPs/CuO/GO 纳米复合材料的新型电化学夹心适配体传感器用于检测 cTnI

贺晓、陈晓华、苏明*
河北大学

急性心肌梗死(AMI)是一种严重的心血管疾病，而心肌肌钙蛋白 I (cTnI)已被证明是诊断该疾病的“金标准生物标志物”[1]。本研究首次采用 Apt1 修饰的掺金磁性碳纳米管作为捕获探针，以 Apt2 和银纳米颗粒修饰的氧化铜及氧化石墨烯复合材料作为信号探针，构建一种新型的夹心式电化学适配体传感器用于 cTnI 的灵敏检测。当目标物 cTnI 存在时，其先与电极上掺金磁性碳纳米管纳米复合材料上的 Apt1 结合，从而固定在电极上，再向电极上滴加信号探针材料，AgNPs/CuO/GO 纳米复合材料通过 Apt2 与 cTnI 的结合作用从而固定在电极上，形成一个“三明治”夹心结构。本研究根据 CuO/G0 纳米复合材料能催化过氧化氢与对苯二酚的反应产生强电流响应的原理从而实现对目标物 cTnI 的定性、定量检测[2]。在最佳实验条件下，该传感器的电流响应与心肌肌钙蛋白 I 浓度呈线性相关。该传感器对于临床上急性心肌梗死疾病的即时监测具有重要研究意义，同时在生物医学分析方面具有较大的应用潜力。



关键字 适配体，电化学，传感，夹心

参考文献

1. Jianfeng Ma , Lin Feng, Jie Li, Dan Zhu, Lianhui Wang * and Shao Su *. Biological Recognition-Based Electrochemical Aptasensor for Point-of-Care Detection of cTnI. Biosensors **2023**, *13*, 746.

2.Yuanyuan Hui, Haishuai Peng, Fuxin Zhang, Lei Zhang, Yufang Liu, Rong Jia, Yuxuan Song, Bini Wang. An ultrasensitive sandwich-type electrochemical aptasensor using silver nanoparticle/titanium carbide nanocomposites for the determination of Staphylococcus aureus in milk. Microchimica Acta (**2022**) 189: 276.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

二维纳流体毒素传感器制备及应用

徐辛睿、柳凌霄、杨倩玉、杜斌、刘志伟、童朝阳*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

实现毒素的高灵敏、准确、快速检测有着重要的现实意义和研究价值。金属有机骨架材料(metal-organic frameworks，MOFs)作为一种优异的纳米流体平台，具有广阔的应用前景[1-3]。MOFs 的孔径可以达到亚纳米级，其组成、结构和功能的多样性及可调控等优势是其他多孔材料所无法比拟的，基于 MOFs 的纳流体系统在海水淡化、浓差发电、生化传感等领域已有报道。本研究利用溶剂热法合成 CuTCPP MOF 纳米片，通过真空辅助抽滤构建了一种自支撑二维 MOFs 膜纳流体，采用物理气相沉积 Au 层，通过 Au-S 共价键将带巯基的 AFB1 适配体修饰在 CuTCPPMOF 纳米孔道外表面，用于检测 AFB1，该二维纳流体毒素传感器对 AFB1 检测限（LOD）低至 2.92 pg/mL，线性范围为 10 pg/mL ~7.5 ng/mL

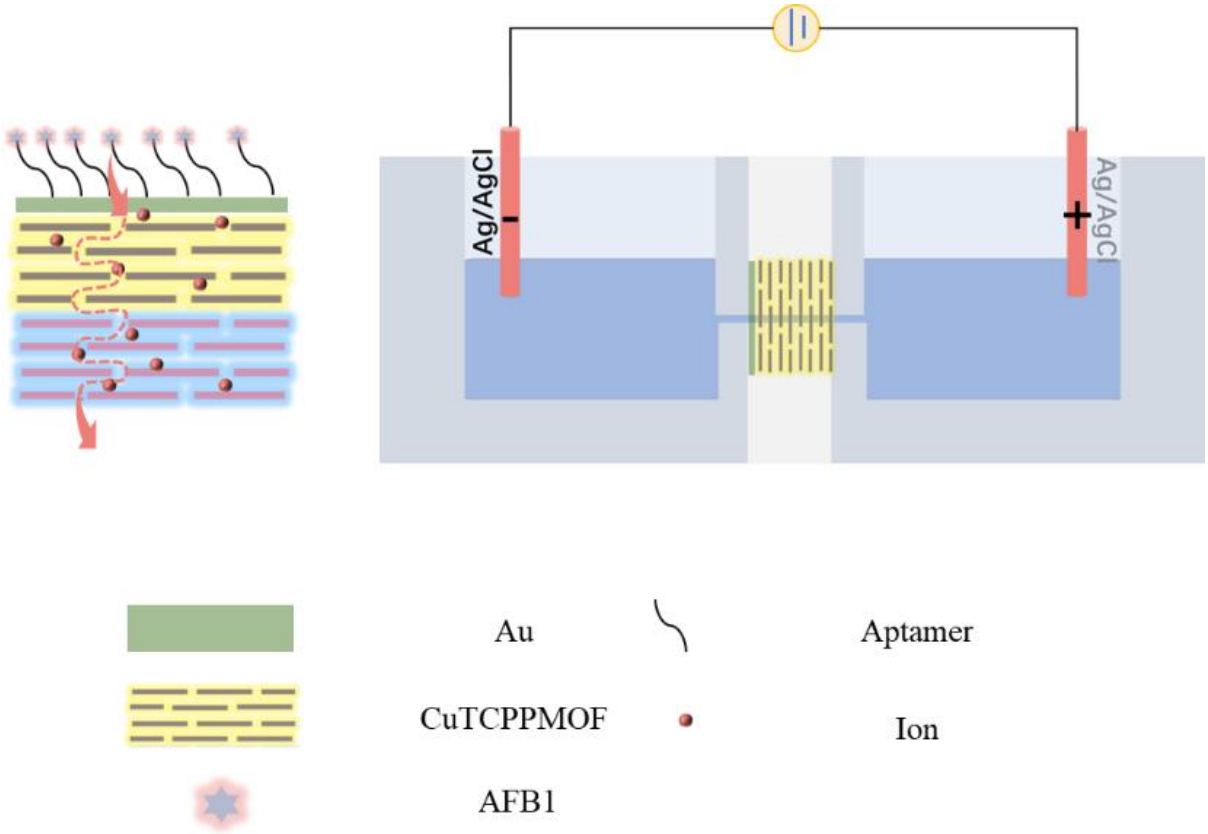


图 1 基于 CuTCPPMOF 二维纳流体传感器示意图

关键字 纳流体；MOFs；AFB1；生物传感

参考文献

1. H. C. Zhang, J. Hou, Y. X. Hu, P. Y. Wang, R. W. Ou, L. Jiang, J. Z. Liu, B. D. Freeman, A. J. Hill, H. T.
Wang, Sci. Adv. **2018**, *4*, eaaq0066.

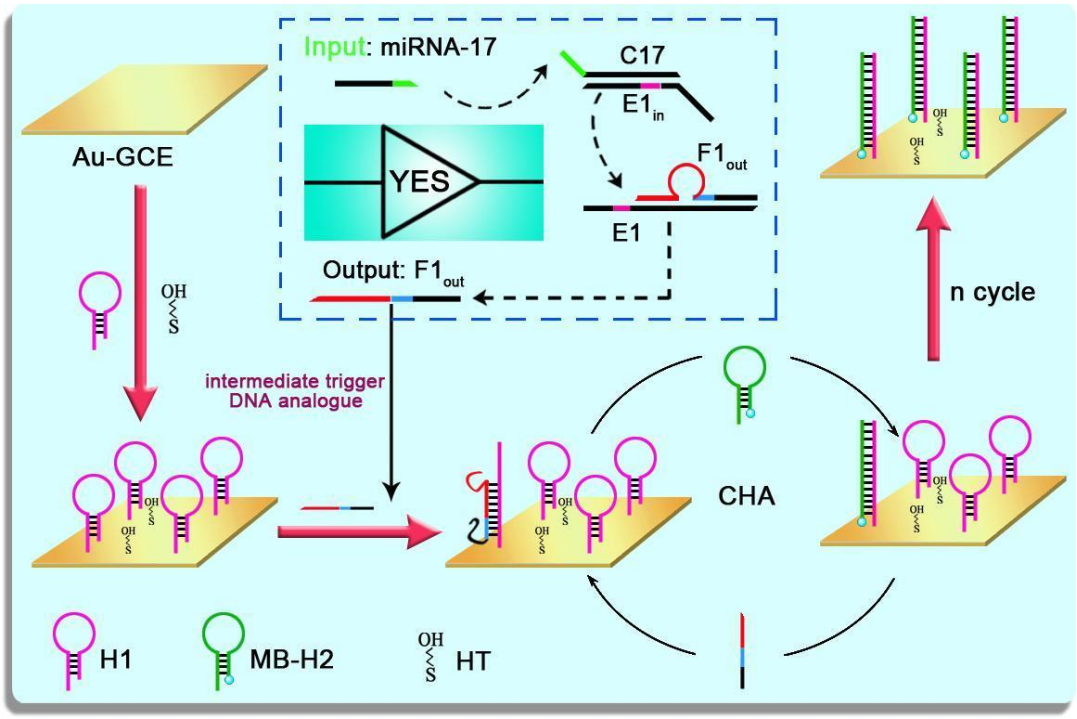
2. X. Li, H. Zhang, P. Wang, J. Hou, J. Lu, C. D. Easton, X. Zhang, M. R. Hill, A. W. Thornton, J. Z. Liu, B.
D. Freeman, A. J. Hill, L. Jiang, H. Wang, Nat. Commun. **2019**, *10*, 24903.
3. Z. Y. Jiang, H. L. Liu, S. A. Ahmed, S. Hanif, S. B. Ren, J. J. Xu, H. Y. Chen, X. H. Xia, K. Wang, Angew.
Chem. Int. Ed. 2017, 56, 4767 – 4771; Angew. Chem. **2017**, *129*, 4845 – 4849.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于可编程的DNA生物计算电路和DNA放大技术的电化学miRNA生物传感器的研究

谢本婷、何浩楠、高和军、张娟*、付洪权、廖运文
西华师范大学

拟构建一个等温非酶可预测杂交链反应的 DNA 逻辑运算电化学分析系统，用于敏感和同时分析细胞中的多种内源性 miRNAs。该 DNA 逻辑运算平台由引入 DNA 逻辑传感模块和功能强大的电化学处理模块组成。DNA 逻辑传感模块识别不同的 miRNA 输入模式，产生下一层处理模块的中间触发器。电化学处理模块通过级联的 CHA 程序放大主要的识别事件，促进有效的信号转导，得到放大的电化学信号，导致选择性放大的 miRNAs 检测。值得注意的是，使用级联 CHA 策略能够形成中间触发器的循环利用，加速电活性物质在电极上的定位放大电化学信号。通过设计不同的逻辑元件，选择多种细胞特异性内源性 miRNA 作为生物逻辑运算的输入，构建一系列逻辑门和串联逻辑电路，以提高不同 miRNA 检测的可靠性。基于等温非酶可预测杂交链反应的 DNA 逻辑运算 电化学分析系统能够连续保证识别和协同加速电化学信号放大，可以提高恶性肿瘤诊断的可靠性，从而有效地治疗与 miRNA 相关的疾病，也为提高恶性肿瘤的早期诊断效率提供一种新的检测方法。



关键字 miRNA 电化学 DNA 逻辑传感

参考文献

1. Ferlay J, Soerjomataram I, Dikshit R, Eser S, Mathers C, Rebelo M, Parkin DM, Forman D, Bray F. Cancer incidence and mortality worldwide: sources, methods and major patterns in

GLOBOCAN 2012. Int. J. Cancer, **2015**, *136*, E359-E386.
2. Bray F, Ferlay J, Soerjomataram I, Siegel RL, Torre LA, Jemal A. Global cancer statistics 2018: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. Ca-Cancer J. Clin., **2018**, *68*, 394-424.
3. Siegel RL, Miller KD, Jemal A. Cancer statistics, 2016. Ca-Cancer J. Clin., **2016**, *66*, 7-30.
4. Siegel RL, Miller KD, Jemal A. Cancer statistics, 2017. Ca-Cancer J. Clin., **2017**, *67*, 7-30.
5. Bray F, Ferlay J, Soerjomataram I, et al. Global cancer statistics 2018: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. Ca-Cancer J. Clin., **2018**, *68*, 394-424.
6. Tricoli JV, Jacobson JW. MicroRNA: potential for cancer detection, diagnosis, and prognosis. Cancer Res., **2007**, *67*, 4553.
7. Lin SB, Gregory RI. MicroRNA biogenesis pathways in cancer. Nat. Rev. Cancer,
8. Dong H, Lei J, Ding L, Wen Y, Ju H, Zhang X, Chem. Rev., **2013**, *113*, 6207-6233.
9. Katz E, Privman V. Enzyme-Based Logic Gates and Networks with Output Signals Analyzed by Various Methods. Chem. Soc. Rev. **2010**, *39*, 1835-1857.
10. Ge L, Wang WX, Sun XM, Hou T, Li F. Versatile and Programmable DNA Logic Gates on Universal and Label-Free Homogeneous Electrochemical Platform. Anal. Chem. **2016**, *88*, 9691-9698.
11. Yang J, Wu R, Li Y, Wang Z, Pan L, Zhang Q, Lu Z, Zhang C. Entropy-driven DNA logic circuits regulated by DNAzyme. Nucleic Acids Res. **2018**, *46*, 8532-8541.
12. Shlyahovsky B, Li Y, Lioubashevski O, Elbaz J, Willner I. Logic gates and antisense DNA devices operating on a translator nucleic acid scaffold. ACS nano 2009, 3, 1831-1843.
13. Zhu JB, Zhang LB, Dong SJ, Wang EK. Four-way junction-driven DNA strand displacement and its application in building majority logic circuit. ACS nano **2013**, *7*, 10211-10217.
14. Zhang C, Yang J, Jiang SX, Liu Y, Yan H. DNAzyme-based logic gate-mediated DNA self-assembly. Nano Lett. **2016**, *16*, 736-741.
15. Hemphill J, Deiters A. DNA computation in mammalian cells: microRNA logic operations. J. Am. Chem. Soc. **2013**, *135*, 10512-10518.
16. Gong X, Wei J, Liu J. Li RM, Liu XQ, Wang FA. Programmable intracellular DNA biocomputing circuits for reliable cell recognitions. Chem. Sci. **2019**, *10*, 2989-2997.
17. Mi YS, Zhao J, Chu HQ, Li ZX, Yu MM, Li LL. Construction of a Ternary Complex Based DNA Logic Nanomachine for a Highly Accurate Imaging Analysis of Cancer Cells. Anal. Chem. **2021**, *93*, 2500-2509.
18. Feng C, Chen TS, Mao DS, Zhang F, Tian B, Zhu XL. ACS sensors **2020**, 3116-3123.
19. Zhang JH, Qiu ZY, Fan JH, He F, Kang WY, Yang SH, Wang HH, Huang J, Nie Z. Scan and Unlock: A Programmable DNA Molecular Au-tomaton for Cell-Selective Activation of Ligand-Based Signaling. Angew. Chem. Int. Ed. **2021**, *60*, 6733-6743.
20. Miao P, Tang YG. Cascade Strand Displacement and Bipedal Walking Based DNA Logic System for miRNA Diagnostics. ACS Cent. Sci. **2021**, *7*, 1036-1044.
21. Liu L, Liu JW, Wu H, Wang X N, Yu RQ, Jiang JH. Branched hybridization chain reaction circuit for ultrasensitive localizable imaging of mRNA in living cells. Anal. Chem., **2018**, *90*, 1502-1505.
22. Wang HM, Li CX, Liu XQ, Zhou X, Wang F. Construction of an enzyme-free concatenated DNA circuit for signal amplification and intracellular imaging. Chem. Sci., **2018**, *9*, 5842-5849.

23. Liu Y, Shen T, Li J, Gong H, Chen CY, Chen XM, Cai CQ. Ratiometric Fluorescence Sensor for the MicroRNA Determination by Catalyzed Hairpin Assembly. ACS Sens. **2017**, *2*, 1430-1434
24. Dong H, Zhang J, Ju H, Lu H, Wang S, Jin S, Hao K, Du H, Zhang X. Highly Sensitive Multiple MicroRNA Detection Based on Fluorescence Quenching of Graphene Oxide and Isothermal Strand-Displacement Polymerase Reaction. Anal. Chem. **2012**, *84*, 4587-4593.
25. He L, Lu DQ, Liang H, Xie ST, Zhang XB, Liu QL, Yuan Q, Tan WQ. A mRNA-initiated, three-dimensional DNA amplifier able to function inside living cells. J. Am. Chem. Soc. **2018**, *140*, 258-263.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于虚拟筛选 DNA 功能配基的免疫传感器在毒素检测中的应用

杨倩玉、刘志伟、徐辛睿、杜斌、汪将、徐继伟、刘冰、穆晞惠、童朝阳*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

生物毒素是由生物体所产生的一类化学活性物质，极少量即可引起动物中毒，影响着人类生命健康安全。同时，毒素还可作为生物战剂使用，给国家安全带来严重威胁，因此，发展出具有高度特异性的毒素灵敏快速检测生物传感器具有重要意义。近年来，免疫传感器备受青睐，在单位面积传感器表面增加固定化抗体的数量并保持活性是提高其检测性能的关键。针对这一问题，本课题组前期通过分子对接方法虚拟筛选出一系列结合于抗体 Fc 段的 DNA 功能配基（DNA functional ligands，DNAFL）[1]，并测得其亲和活性达到微摩尔级别。因此，本研究通过生物素-亲和素法将前期筛选得到的高亲和 DNAFL 固定在传感器表面，再通过 DNAFL 与抗体 Fc 段的特异结合实现抗体在传感器表面的定向固定，构筑出一种新型免疫传感界面。随后，通过薄膜干涉法（TFI）对免疫传感界面识别毒素的“结合-解离”过程进行了监测，根据结合信号与目标物浓度建立标准曲线，得到新型免疫传感器检测毒素的检测限及线性检测范围。因此，本研究中基于 DNA 功能配基这类新型抗体固定材料所构筑的免疫传感器为高性能生物传感器的设计与开发提供新的思路，在毒素检测等领域中具有广阔前景。

关键字 DNA 功能配基；免疫传感器；毒素检测

参考文献

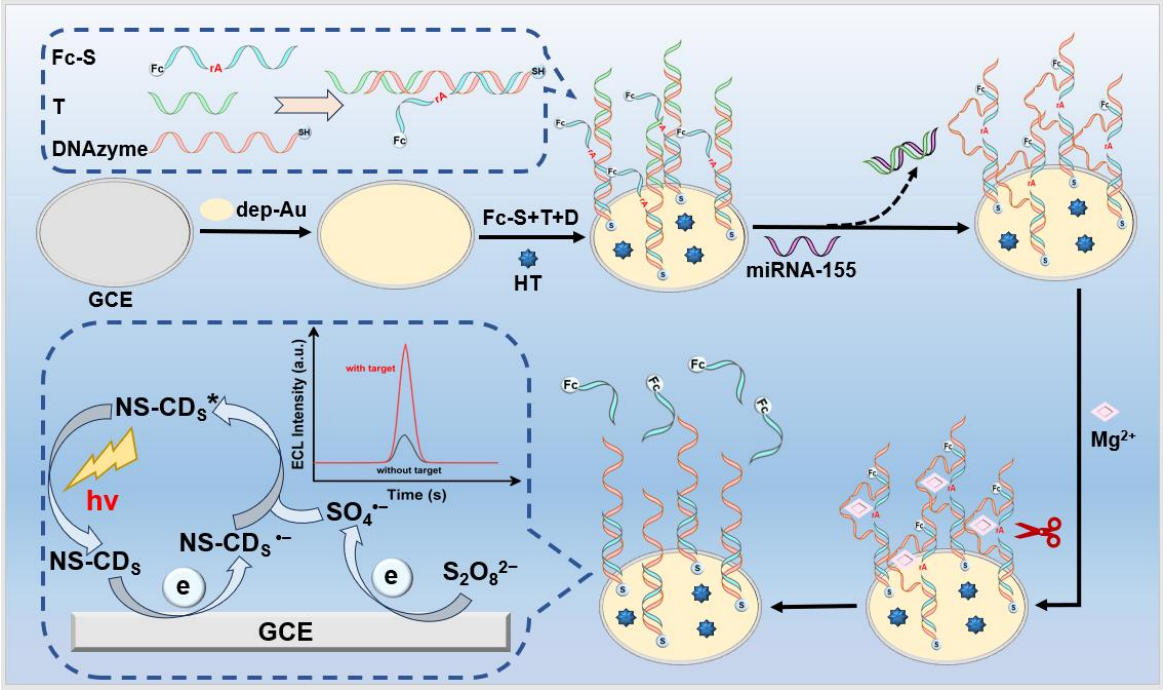
1. Q Yang, Z Liu, X Xu, J Wang, B Du, P Zhang, B Liu, X Mu, Z Tong. Virtual Screening and Validation of Affinity DNA Functional Ligands for IgG Fc Segment[J]. Int. J. Mol. Sci., **2024**, *25*, 8681.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

近红外电化学发光的掺杂碳量子点用于 miRNA-155 的灵敏分析

何浩楠、谢本婷、高和军、张娟*、付洪权
西华师范大学

在这项工作中，我们对已报道的方法稍作修改，合成了一种低激发电位，近红外电化学发光的氮硫共掺杂碳量子点(NS-CDs)。其低激发点位与近红外电化学发光的特性降低了对生物分子的光损伤。此外，NS-CDs 与 $K_2S_2O_8$ 通过"还原-氧化"共反应型机理可以产生显著的 ECL 信号。将镁离子(Mg^{2+})依赖性 DNAzyme、Fc-S 及 T 链共同组装的三链复合物固定在金纳米颗粒覆盖的电极上，构建生物传感器。猝灭基团二茂铁(Fc)在电极表面的固定使该生物传感平台处于信号关闭状态。T 链的存在阻碍了 Mg^{2+}依赖性 DNAzyme 环状催化区域的形成。仅在目标物 miRNA-155 和 Mg^{2+}同时输入时，T 链与 miRNA-155 结合，被激活的 DNAzyme 折叠出具有催化功能的二级结构，对底物链进行切割，大量标记有 Fc 的 DNA 片段从电极表面释放，ECL 信号得以恢复。因此，NS-CDs 与 Mg^{2+}依赖性 DNAzyme 所构建的生物传感器具有良好的选择性，可以实现对 miRNA-155 的灵敏分析，并成功应用于实际人体血清分析。本研究为 mRNA 相关检测提供新的简便策略。



关键字 电化学发光；碳量子点；DNAzyme；生物传感器

参考文献

1. Valenti, G.; Fiorani, A.; Li, H.; Sojic, N.; Paolucci, F., Essential Role of Electrode Materials in Electrochemiluminescence Applications. *ChemElectroChem* **2016,** *3* (12), 1990-1997.
2. Ru, Z.; Jia, Y.; Du, Y.; Han, Y.; Zhang, N.; Ren, X.; Wei, Q., Intramolecular Enhancement of

a Zirconium-Based Metal–Organic Framework for Coordination-Induced Electrochemiluminescence Bleomycin Analysis. *Analytical Chemistry* **2023,** *95* (27), 10178-10185.

3. Wang, Electrochemiluminescence Distance and Reactivity of Coreactants Determine the Sensitivity of Bead-Based Immunoassays. *Angewandte Chemie-International Edition* **2023,** *62* (16).

4. Li, Recent Advances in Electrochemiluminescence Analysis. *Analytical Chemistry* **2017,** *89* (1).

5. Lee, Electrogenerated chemiluminescence .61. Near-IR electrogenerated chemiluminescence, electrochemistry, and spectroscopic properties of a heptamethine cyanine dye in MeCN. *Analytical Chemistry* **1997,** *69* (20).

6. Zhou, Recent advances in near infrared (NIR) electrochemiluminescence luminophores. *Chinese Chemical Letters* **2024,** *35* (11).

7. Spehar-Deleze, Electrochemiluminescent metallopolymers: Tuning the emission wavelength by energy transfer between two bound centres. *Electrochemistry Communications* **2008,** *10* (7).

8. Sun, Electrogenerated Chemiluminescence from PbS Quantum Dots. *Nano Letters* **2009,** *9* (2).

9. Chen, M.; Sun, Y.; Ji, H.; Jiang, M.; Liu, W.; Shao, M.; Hao, Z.; Zhang, H.; Li, X.; Dang, Y.; Zhang, R.; Zhang, L., Near-infrared electrochemiluminescence of defect-rich molybdenum disulfide quantum dots for sensitive bioanalysis. *Chemical Engineering Journal* **2023,** *478*, 147397.

10. Ding, Interrogating Near-Infrared Electrogenerated Chemiluminescence of $Au_{25}(SC_2H_4Ph)_{18}^+$ Clusters. *Journal Of The American Chemical Society* **2012,** *134* (37).

11. Sun, Ligand-induced Assembly of Copper Nanoclusters with Enhanced Electrochemcial Excitation and Radiative Transition for Electrochemiluminescence. *Angewandte Chemie-International Edition* **2023,** *62* (44).

12. Hesari, Efficient electrochemiluminescence of a boron-dipyrromethene (BODIPY) dye. *Chemical Communications* **2015,** *51* (6).

13. Guo, Y.-Z.; Liu, R.; Zeng, Y.; Liao, Y.-Y.; Liu, J.-L.;Chai, Y.-Q.; Yuan, R., The carbon dots with near-infrared electrochemiluminescence emission and low excitation potential for ultrasensitive analysis of microRNA-222. *Chemical Engineering Journal* **2024,** *488*.

14. Been, RNA as an RNA-Polymerase-net Elongation of an RNA Primer Catalyzed by the Tetrahymena Ribozyme. *Science* **1988,** *239* (4846).

15. Breaker, A DNA enzyme that cleaves RNA. *Chemistry and Biology* **1994,** *1* (4).

16. Cairns, Target site selection for an RNA-cleaving catalytic DNA. *Nature Biotechnology* **1999,** *17* (5).

17. Carmi, In vitro selection of self-cleaving DNAs. *Chemistry & Biology* **1996,** *3* (12).

18. Santoro, A general purpose RNA-cleaving DNA enzyme. *Proceedings Of The National Academy Of Sciences Of The United States Of America* **1997,** *94* (9).

19. Cuenoud, A DNA Metalloenzyme with DNA-Ligase Activity. *Nature* **1995,** *375* (6532).

20. Xiang, Expanding DNAzyme functionality through enzyme cascades with applications in single nucleotide repair and tunable DNA-directed assembly of nanomaterials. *Chemical Science* **2013,** *4* (1).

21. Wang, Self-Phosphorylating Deoxyribozyme Initiated Cascade Enzymatic Amplification for

Guanosine-5'-triphosphate Detection. *Analytical Chemistry* **2014,** *86* (15).

22. Morrison, DNAzymes: Selected for Applications. *Small Methods* **2018,** *2* (3).

23. Du, Self-Powered DNAzyme Walker Enables Dual-Mode Biosensor Construction for Electrochemiluminescence and Electrochemical Detection of MicroRNA. *Analytical Chemistry* **2023,** *95* (17).

24. Xie, Photoactivated Controlled Dnazyme Platform for on-Demand Activation Sensitive Electrochemiluminescence mRNA Analysis. *Analytical Chemistry* **2024,** *96* (21).

25. Witten, miR-155 drives oncogenesis by promoting and cooperating with mutations in the c-Kit oncogene. *Oncogene [Oncogene]* **2019,** *38* (12).

26. Liu, C.; Fan, W.; Cheng, W. X.; Gu, Y.; Chen, Y.; Zhou, W.; Yu, X. F.; Chen, M.; Zhu, M.; Fan, K.; Luo, Q. Y., Red Emissive Carbon Dot Superoxide Dismutase Nanozyme for Bioimaging and Ameliorating Acute Lung Injury. *Advanced Functional Materials* **2023,** *33* (19).

27. Zhang, R.; Adsetts, J. R.; Nie, Y.; Sun, X.; Ding, Z., Electrochemiluminescence of nitrogen- and sulfur-doped graphene quantum dots. *Carbon* **2018,** *129*, 45-53.

28. Liu, J.; Yu, H.; Wang, G.; Yang, S.; Li, M.; Zhang, X.; Jia, Y.; Gao, Y., Photophysical properties of nitrogen-doped carbon quantum dots synthesized by graphite. *Journal of Materiomics* **2024,** *10* (4), 828-836.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

CDs@UiO-66-NH_2@$B(OH)_2$ 复合材料的比率荧光探针检测多巴胺

段练练、吕运开*
河北大学

多巴胺(DA)作为参与多种生命进程的重要神经递质，在控制机体多种生命活动中起着独一无二的作用。目前检测 DA 的方法一般需要复杂的样品前处理过程、检测耗时长，并且对从业人员要求较高等不足之处。因此，需要开发一种易于操作、高效且灵敏的多巴胺检测方法。荧光法作为一种经典的分析手段，以高灵敏度、低成本、方便快捷等优点，尤其是高灵敏荧光材料开发成为重要研究领域。本研究将发红光的碳点（R-CDs）封装在多孔有机骨架（MOFs）中，合成双发射比率荧光探针。MOFs 可以提高吸附能力和荧光发射的稳定性；硼酸基团解决了选择性识别多巴胺的问题；发展多孔材料封装 R-CDs 的合成方法，解决 R-CDs 易聚集、发光稳定性差、非辐射衰减、负载能力差等问题；构建双发射比率荧光探针，解决灵敏度和准确度问题。采用溶剂热法合成了发蓝光的 UiO-66-NH_2@$B(OH)_2$，然后在 MOFs 中引入 R-CDs 的前驱体邻苯二胺，通过孔限域合成法成功制备了双发射荧光探针（CDs@UiO-66-NH_2@$B(OH)_2$），用于 DA 的检测。荧光强度比随 DA 浓度的增加不断增大，在 2-1000 μM 的浓度范围内，线性相关系数为 0.997，检出限为 0.92 μM。其检出机理为 UiO-66-NH_2@$B(OH)_2$ 作为识别位点，与 DA 反应生成五元环硼酸酯，发生静态猝灭，导致该探针在 437 nm 处的荧光被猝灭。而 R-CDs 的荧光几乎不变，作为一个内参比，检测了人血清样品中 DA 的含量。其回收率为 99.5%-103.4%，RSD 小于 1.09%。

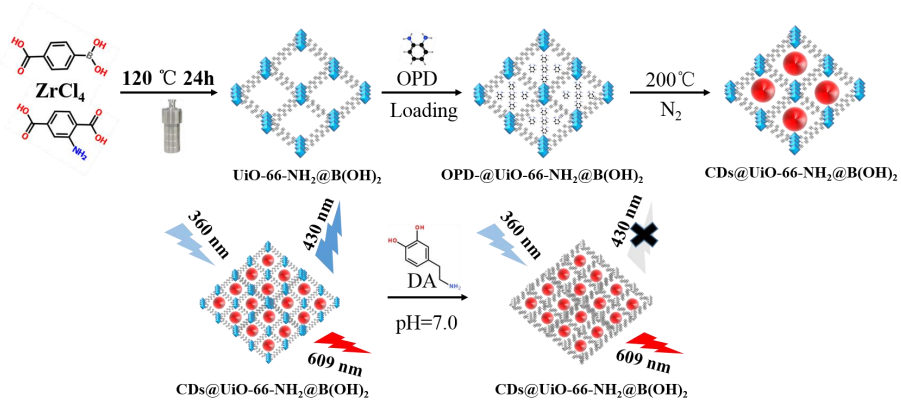


图 1 复合荧光探针的合成过程和检测 DA 的示意图

关键字 比率荧光探针，碳点，金属有机骨架，多巴胺

参考文献

1. Ji, X.; Palui, G.; Avellini, T.; Na, H. B.; Yi, C, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134* (13), 6006–6017.
2. Meng, Z.; Sun, S.; Pu, X.; Wang, J.; Liao, X.; Huang, Z.; Deng, Y.; Yin, G, *Nanotechnology* **2024**, *35* (23), 235502.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

主族原子取代罗丹明染料的构建及其超高信噪比成像

汪亭*
同济大学附属皮肤病医院

主族原子（碳、硅、磷等）修饰取代传统荧光染料结构中的氧原子，是荧光染料发展的一次重要变革，形成的取代荧光染料不仅保留了传统染料的优异性质：高摩尔消光系数与荧光量子产率，同时也赋予了染料特殊性能：光谱红移、稳定性提升、信噪比提高等。基于染料的结构特点利用钯催化偶联反应构建“碳-杂原子”键，普适、灵活、高效、便捷地合成杂原子取代呫吨荧光染料分子，高通量、模块化地构建结构多样性导向的染料库。以染料库为物质基础，全面、系统、深入地发掘荧光染料的优异性能，结合理论模拟计算，明确染料结构与性能之间的联系。发展独特的烷基修饰技术，构建一系列不同原子取代、不同疏水烷基修饰的蛋白激活型取代罗丹明荧光探针，精确调节其理化性质，大幅提升荧光探针的检测成像信噪比，实现活体、动态、精准、多色的超高分辨率荧光成像。

关键字 硅，罗丹明，超高信噪比

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

用于靶向识别、成像示踪和高效消除胞内细菌感染的 AIE-噬菌体-DNA 纳米生物偶联物

张静[1]、何学文*[1]、唐本忠[2]
1. 苏州大学
2. 香港中文大学（深圳）

胞内细菌感染因为其能逃避细胞和机体的免疫清除以及严重的耐药性问题，对人类的生命健康造成了严重的威胁[1,2]。因此对付胞内细菌感染面临着严峻的挑战。本课题组最近开发了一种基于聚集诱导发光光敏剂以及核酸修饰的多功能活性噬菌体偶联物，此偶联物具有经典的核酸纳米球结构，能够快速地进入哺乳动物细胞，进而特异性地识别胞内感染的细菌，并对其进行荧光点亮标记成像。同时，借助聚集诱导发光光敏剂的优异的光动力活性和噬菌体对宿主细菌本身的侵染性能，可以对细胞内靶标细菌进行高效地协同杀伤，并恢复受感染细胞的活性。此外，对于细菌感染的糖尿病伤口模型，我们观察到噬菌体纳米偶联物也能够获得很好的杀菌与促进伤口愈合的效果，同时也能激发受感染细胞以及体内的免疫活力。这些研究结果表明，我们构建的新型多功能 MS2-DNA-AIEgen 纳米生物偶联物结合了噬菌体的特异性靶向能力、核酸纳米球结构的快速细胞膜穿透能力和 AIEgen 光敏剂的卓越荧光成像和光动力活性，可协同成像和消灭胞内细菌。这样一种多功能的活性噬菌体偶联物为对付严重的胞内细菌感染提供了一种全新的策略，非常有潜力适用于开发成对抗胞内细菌感染的新型药物，以及胞内细菌感染引起的相关疾病的研究与诊断治疗。

关键字 聚集诱导发光，抗菌，荧光成像，噬菌体，靶向，光动力学治疗

参考文献

1. Bussi, C.; Gutierrez, M. G. Mycobacterium Tuberculosis Infection of Host Cells in Space and Time. *FEMS Microbiol. Rev.* **2019,** *43*, 341−361.
2. Mellouk, N.; Enninga, J. Cytosolic Access of Intracellular Bacterial Pathogens: The *Shigella* Paradigm. *Front. Cell. Infect. Microbiol.* **2016,** *6*, 35.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

以液态金属纳米颗粒为核心的智能“核-壳”DNA 微凝胶的构建

谷青雨、陈宇、郭玮炜*
南开大学

将功能核酸单元引入微凝胶网络结构可构建具有多种功能的智能 DNA 微凝胶。镓基液态金属可以引发自由基聚合反应制备凝胶类材料，为实现液态金属纳米颗粒 (LMNPs) 与功能核酸水凝胶复合提供了契机，有望构建具有可序列编码功能和结合液态金属固有性质的新型软材料。本工作通过液态金属纳米颗粒引发自由基聚合将聚合物单体与 DNA 共同交联制备了具有核壳结构的液态金属 DNA 微凝胶，并考察了所结合 DNA 结构的功能，为发展基于镓基液态金属微凝胶的生物传感器件建立了基础。

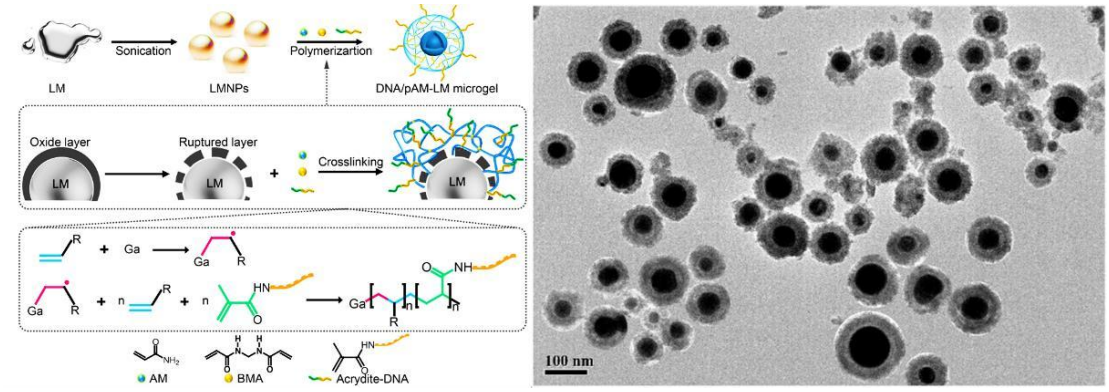


图 1. DNA 微凝胶合成示意图（左）和透射电镜图（右）

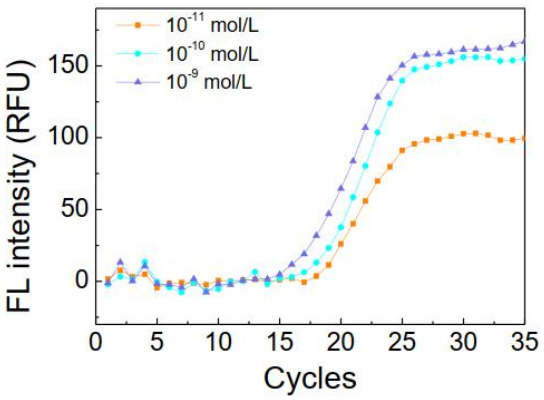


图 2. 液态金属 DNA 微凝胶对目标 DNA 的识别和扩增

关键字 微凝胶；液态金属；功能核酸；生物传感

参考文献

1. F. Y. Li, C. Y. Wang, W. W. Guo, Adv. Funct. Mater., **2018**, *28*, 1705876.
2. S Ma, P. Xue, C. Valenzuela, et al., Adv. Funct. Mater. **2024**, *34*, 2309899.
3. Y. Zhang, C. Wang, M. Yin, et al., Angew. Chem. Int. Ed., **2024**, *63*, e202311678.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于动态生物分子网络的高性能传感分析

林妮娜、周志新*
东南大学

细胞生命活动不仅由生物分子的组成与成分决定，更依赖生物分子相互作用。细胞内相互作用的生物分子组成复杂分子网络，进而调控生命各项活动，产生复杂生命现象。细胞内复杂分子网络是天然的生物敏感元件，通过精确、灵敏、实时动态的响应环境变化，从而实现细胞生化事件的调控。通过向生命体内生物网络传感机制学习，发展细胞水平的多层次、多尺度、高灵敏实时动态分析传感新方法，将为生物分析化学与化学测量学带来新的机遇。我们以生物分子作为基本构筑单元，构筑了多种仿生动态生物分子网络，建立了多信号协同响应多组分同时识别传感新机制，进一步结合无酶催化发夹组装反应和熵驱动反应，实现了快速灵敏体外检测和活细胞原位多组分成像分析。

受细胞内动态生物分子网络启发，我们分别利用无酶催化核酸发夹组装反应和熵驱动反应的动态生物分子网络，建立了基于动态生物分子网络多信号协同响应的新型超灵敏分析检测和智能成像分析以及在基因治疗方面的应用。我们将级联、反馈和限域效应等生物放大功能和动态生物分子网络的特性相融合，结合 miRNA 刺激循环放大反应，发展了多种基于生物分子动态网络多信号协同响应的超灵敏体外检测、活细胞原位多组分成像分析的方法以及基因治疗方面的应用 (图 1)。该方法具有以下优点：(i)动态生物分子网络具有多信号协同响应的特性，这种“一对多”信号响应模式（一个靶标触发多个协同响应信号）的核酸分析方法能够提高分析研究可靠性，有效避免假阳性结果；（ii）利用 DNAzyme 信号放大、催化发夹组装循环放大和自催化驱动的反馈回路放大、熵驱动回路放大功能，实现基于动态核酸分子网络的超高灵敏分析；[1]（iii）构建了具有多 miRNA 响应动态核酸分子网络探针，并结合限域功能，实现了多 miRNA 检测、活细胞原位成像分析以及基因治疗。[2]该方法有望提高低丰度靶标检测时的可靠性，为重大疾病的早期诊断提供技术支持和方法支持。

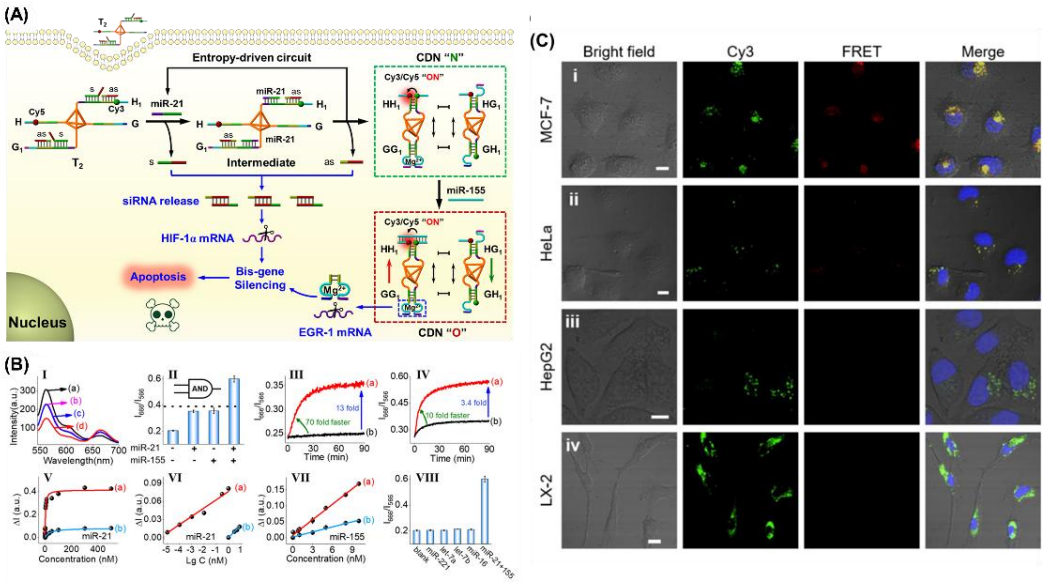


图1 基于熵驱动反应的动态生物分子的智能成像分析和基因表达调控

关键字 动态生物分子网络；智能成像分析；miRNA 检测；基因表达调控

参考文献

1. Zhou, Z.,* Lin, N., Ouyang, Y., Zhang, Y.,* Willner, I.,* J. Am. Chem. Soc. 2023, *145*, 23,12617
2. Lin, N., Zhang, Y., Willner, I.,* Zhou, Z.,* J. Am. Chem. Soc. 2024, *146*, 30, 20685

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

核酸仿生时序逻辑电路用于模拟记忆过程

孙洪志*、孟红敏、李朝辉
郑州大学

天然的生理系统能够在时空维度上识别外部环境和物质含量的变化并通过信息存储记录这一系列事件的发生。因此如何利用人工合成的分子电路将这些精巧的生理过程复刻并进一步应用成为功能仿生领域的研究热点。核酸由于自身的碱基序列具有储存信息的功能在众多生物材料中脱颖而出，而精准的碱基互补配对杂交和立足点介导的链置换反应赋予了核酸动态反应网络对这些信息的处理能力。然而目前已报道的核酸仿生电路和器件缺乏在时间维度上对信息的分辨，忽略了生物信息在不同时间节点输入对电路响应结果的影响。在本工作中，基于脱氧核酶和核酸链置换构建了一种信号多次输入可激活的“双击”电路用于模拟生理记忆过程。该核酸电路对于同一核酸信号（如 miRNAs）在不同时间节点的输入具有不同程度的响应，表现为荧光信号强度随反应时间和信号输入次的激增。同时，序列转换模块的引入可以将该“双击”电路拓展至任意 miRNA 作为信号输入。通过解析各反应步骤的动力学，可以实现时间分辨率、输入信号强度分辨率和信号输出信噪比的可控调节。因此，该用于模拟记忆过程的核酸时序逻辑电路为研究生理记忆过程中的分子机制及进一步仿生应用提供了新思路。

关键字 核酸电路，仿生学，记忆模拟，反应动力学

参考文献

1. A. P. Lapteva, N. Sarraf and L. Qian, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 12443−12449.
2. Z. Li, J. Wang and I. Willner, *Adv. Funct. Mater.* **2022**, 32, 2200799.
3. J. Bucci, P. Irmisch, E. Del Grosso, R. Seidel and F. Ricci, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 20968−20974.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

极性可切换光电化学生物传感器的双极猝灭策略用于铅离子检测

江颖、奚芷怡、邓寒梅、袁若、袁亚利*
西南大学

发展对铅离子（Pb^{2+}）准确灵敏检测的方法具有重要的实际应用价值[1]，在此，我们提出极性可切换光电化学（PEC）生物传感器的双极猝灭策略实现对 Pb^{2+}的超灵敏、准确检测[2-3]。首先利用 $CuBi_2O_4$ 敏化光电活性材料 g-C_3N_4，形成具有高初始阴极光电流的复合材料（CNCBO），并利用 L-半胱氨酸独特的极性切换能力，获得反向阳极光电流。这一极性切换过程不仅可以降低复杂体系所带来的干扰，还能有效降低背景信号，从而提高检测灵敏度。于此同时，我们设计了一种包含两个 Pb^{2+}特异性切割位点的 Y 型 DNA 纳米结构，通过 Pb^{2+}剪切酶活性切割暴露粘性末端，引发催化发夹反应形成 DNA 树状结构用于固载大量猝灭分子罗丹明 B（RhB）。由于 RhB 能够竞争光生电子，双极信号得到了有效猝灭。实验结果表明，所构建的传感器具有良好的灵敏度和准确度，对 Pb^{2+}的检测限低至 0.05 fM。本研究旨在提供新的策略来优化极性可切换 PEC 检测平台，在环境监测领域具有潜在的应用前景。

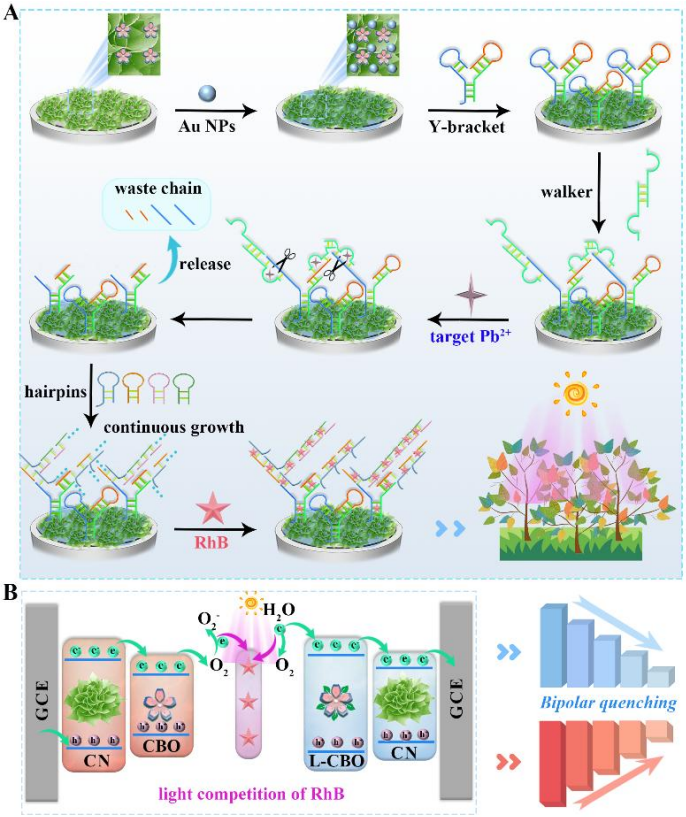


图 1 PEC 生物传感器示意图：（A）复合材料 CNCBO 制备过程；（B）生物传感器的制备过程。

关键字 铅离子，极性切换，光致电化学，灵敏检测

参考文献

1. M. Yang, Y. Tan, G. Yang, X. Chang, T. Tian, W. Li, Y. Fang, J. Shen, S. Yang and W. Q. Wu, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **2024**, e202415966.
2. B. Li, L. I. Oldham, L. Tian, G. Zhou, S. Selim, L. Steier and J. R. Durrant, J. Am. Chem. Soc. **2024**, *146* (18), 12324-12328.
3. M. Wang, M. Langer, R. Altieri, M. Crisci, S. Osella and T. Gatti, ACS Nano **2024**, *18 (13)*, 9245-9284.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

DNA 发夹开关构象变换调控级联置换反应及应用研究

张宇晴、杨春丽、何佳洋、袁若、许文菊*
西南大学

G4 分体、i-motif、三链体等常规 DNA 开关，在钥匙（Key）和锁（Blocker）作用下发生“开”与“关”构象变换，已用于药物输送、智能计算、生物传感等领域。然而，其结构依赖性具有单一响应模式，导致可编程性和应用受限等问题。基于此，我们首次提出了由 Key 控制的 DNA 发夹开关（HS）快速调控级联置换反应（CDR）。初始 HS 被 Blocker 锁定而处于关闭状态（OFF），Key 的引入触发 toehold 介导的 DNA 分支迁移，HS 去杂交后自折叠为发夹构象为打开状态（ON）。而 HS 的杂交茎部将两个 toehold 拉近，引发快速和高效的邻近杂交反应。CDR 包括两个链置换反应：DNA 开关激活和邻近杂交。因此，通过变换 HS 中的特定 DNA 识别序列，可实现对不同 DNA、RNA、小分子等 Key 的特异性响应，并诱导邻近杂交输出荧光信号。结果表明，Key 和 Blocker 能对 HS 进行动态调控，且 CDR 对 DNA、RNA 和 ATP 均具有快速反应动力学和高的转换效率。该策略有望应用于生物传感分析及细胞成像，并为开发多种功能 DNA 智能开关分子提供新的研究范式。

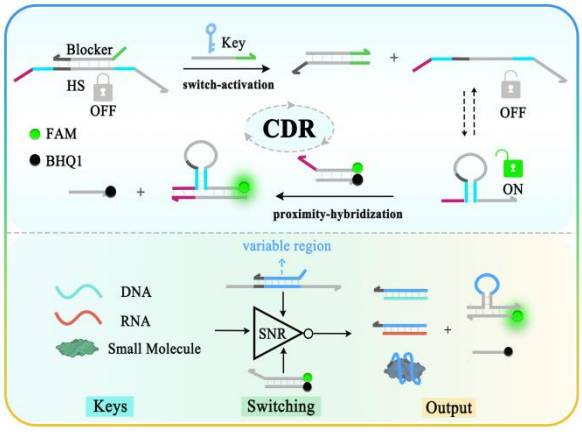


图 1. DNA 发夹开关构象变换调控级联置换反应、响应不同生物分子示意图。

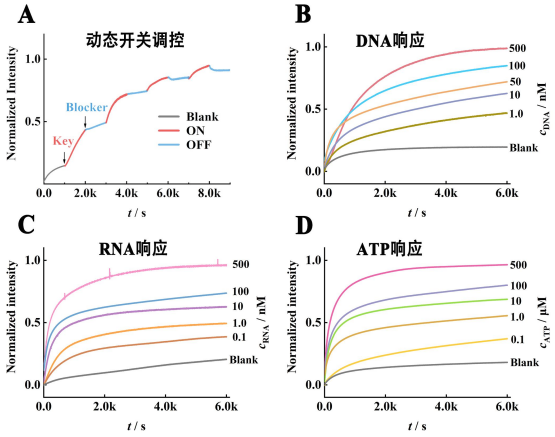


图 2. （A）开关动态调控及实时荧光响应，（B）DNA，（C）RNA，（D）ATP。

关键字 DNA 开关；动态调控；邻近杂交；生物传感；细胞成像

参考文献

1. F.A. Wang, X.Q. Liu, I. Willner, Angew. Chem. Int. Ed. **2015**, *54*, 1098-1129.
2. M.Y. Cao, X.W. Xiong, Y. Zhu, M.S. Xiao, L. Li, H. Pei, TrAC, Trends Anal. Chem., **2023**, *159*, 116911.
3. Q. Tang, W. Lai, P.P. Wang, X.W. Xiong, M.S. Xiao, L. Li, C.H. Fan, H. Pei, Angew. Chem. Int. Ed. **2021**, *60*, 15013-15019.

分会场：12.生物传感与成像分析
交流形式：墙报

基于远端脚点控制的 DNA walker 可调谐检测 MicroRNA 及细胞成像

张赛美、范亚杰、董江雪*
河北大学

作为癌症早期诊断的重要生物标志物，microRNA 的可调检测和在癌细胞中的高分辨成像变得十分重要且具有挑战性。在这项研究中，我们开发了一种由 Zn2+辅助的 DNA walker，其通过 microRNA-21 (miR-21)和入侵链触发，实现 microRNA 的可调检测和肿瘤细胞的特异性识别。没有 miR-21 存在时，DNA 行走链 W 被锁定，保持无活性状态。引入 miR-21 和入侵链后，miR-21 和入侵链分别结合到 W-L1-L2 的 L1 和 L2，触发 DNA 行走器，解锁 W。此外，在 L1 链的远端脚点与位移域之间插入间隔器，以控制链置换速率，从而调节 DNA walker 的行走速率，实现 miR-21 的可调检测。此外，利用构建的 DNA walker 生物传感器，可以实现癌细胞中 miRNA-21 的快速准确成像。该策略为肿瘤细胞中生物标志物的检测和成像提供了一种创新方法，有望成为人类疾病生物分析、诊断和预后的有力工具。

关键字 MicroRNA；远端脚点；可调谐检测；DNA walker；细胞成像

参考文献

1. L. L. Zheng, J. Z. Li, M. Wen, D. M. Xi, Y. X. Zhu, Q. Wei, X. B. Zhang, G. L. Ke, F. Xia, Z. F. Gao, *Sci. Adv.* 2023, 9, eadf5868.
2. J. X. Dong, S. M. Zhang, Y. L. Li, X. Zhang, Y. J. Fan, M. Su, Z. G. Wang, H. Li, S. G. Shen, Z. F. Gao, et al. *Anal. Chem.* **2023**, 95, 16744-16753.
3. Y. L. Li, X. H. Min, Y. J. Fan, J. X. Dong, D. Wu, X. Ren, H. M. Ma, Z. F. Gao, Q. Wei, F. Xia, et al. *Anal. Chem.* **2024**, 96, 2983-2989.
4. Z. Ye, M. Ma, Y. Chen, R. Liu, Y. Zhang, P. Ma, D. Song, *Anal. Chem*. **2024**, 96, 3636-3644.
5. H. H. Yan, M. Huang, F. Zhu, R. Cheng, S. Wen, L. T. Li, H. Liu, X. H. Zhao, F. K. Luo, C. Z. Huang, et al. *Anal. Chem.* 2023, 95, 3968-3975.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

化学计量学与新型光谱仪研制

邵学广*
南开大学

化学计量学已成为光谱分析的重要手段，特别是复杂光谱信号的解析与建模。传统的光谱分析一般利用光谱的峰位置和峰形状进行定性分析，利用峰强度或峰面积进行定量分析。而化学计量学一般采用多元校正方法，利用光谱中多个波长甚至整体光谱的信息，采用数学方法对重叠的光谱信号直接进行分析，实现对样品的准确定量或判别。近年来，发展了一系列的化学计量学方法，特别是以深度学习为代表的人工智能技术，为复杂体系的分析建立了新的方法和技术。随着高光谱成像等新兴光谱技术的出现和发展，如何获取并处理大量的光谱数据仍是分析化学的难点问题。光谱仪器的结构、光谱测量的方式以及数据处理的方法都亟需新的变革。

多元光学计算（MOC）是一种在光学测量过程中实现光学计算的方法，基于 MOC 的分析仪器通过单点检测器即可获得定性定量分析结果 1。MOC 的关键是实现光学计算的滤波器，需要根据分析目标进行设计，而滤波器设计的原理与建立多元校正模型基本一致。因此，基于多元光学计算的光谱仪是化学计量学和仪器设计的完美结合，被称为“下一代光谱仪”2。针对近红外光谱的定性和定量分析，我们分别设计了定量和判别分析滤波器 3,4，并设计了基于数字微镜阵列（DMD）的近红外光谱仪。随着人工智能技术的发展，仍需要建立新的光谱计算原理和新的光谱仪器。

关键字 化学计量学，光谱仪，多元光学计算，近红外光谱

参考文献

1. M P Nelson, J F Aust, J A Dobrowolski, P G Verly, M L Myrick. *Anal. Chem*., **1998**, 70: 73-82
2. 段潮舒，蔡文生，邵学广，*分析化学*，**2021**, 49: 593-601
3. X Y Li, Z H Xu, W S Cai, X G Shao, *Anal. Chim. Acta*, **2015**, 880: 26-31
4. Y Liu, W S Cai, X G Shao, *Chemometr. Intell. Lab. Syst*., **2015**, 149: 22-27

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

连续固相萃取光谱仪器装置构建及其定量分析方法

杜一平*
华东理工大学

设计构建了一套基于膜上连续固相萃取光谱（Continuous Solid-Phase Extraction Spectroscopy，CSPES）的在线检测装置。该装置具有自动进样、膜固相萃取和在线光谱信号采集等功能。基于 CSPES 技术，根据吸附动力学理论建立了在线光谱与组分浓度之间的定量分析模型，并构建了基于最小二乘法的浓度计算方法。对同一样品溶液，通过 CSPES 技术采集一系列不同富集时间的荧光光谱，发现荧光强度与富集时间可以用二次函数进行定量描述。根据该特点，设计和建立了利用标准溶液对二次函数参数进行估计，进而对未知样品浓度进行预测的定量分析方法。分别采用含有荧蒽、苯并[k]荧蒽、罗丹明 6G 的单组分和双组分样品体系，对所建立定量分析方法进行验证。结果显示，模型 预测效果良好，相对误差 RE 在 0.45% - 8.75%之间， RSD 均小于 3%，并成功应用于实 际样品检测中，加标回收率在 86.8% - 124.4%的范围内，RSD 小于 6.1%。

关键字 连续固相萃取，荧光光谱，最小二乘法，校正

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

基于虚拟样本产生技术提升光谱分析中的模型性能

谭超*[1]、陈慧[1]、谭成[1,2]、林璨[3]、薛智[2]
1. 宜宾学院过程分析与控制四川省高校重点实验室 四川宜宾 644007
2. 阿坝师范学院资源与环境学院 四川汶川 623002
3. 四川省骨科医院 四川成都 610041

当前，各类新型和高维仪器的不断出现和普及应用，为一个待测样品提供海量数据成为了可能。从海量数据中提取有价值的信息并建立需要的定性与定量模型，是获得最终分析结果的关键步骤。在各类光谱分析中，无论是为了构建用于定性分析的分类器，还是构建为定量分析的校正模型，都可能遇到某类相对不足或总体样本不足的问题，使得一些算法的应用受到限制。对于分类问题，这类现象也被称为类别不平衡。增加样本当然是解决这类问题的最好手段，但是，现实中往往不能实现或难于实现，比如，在疾病诊断与分类问题中，某种病例十分罕见，病例数就显著的低于对照组。常用的解决方法是基于已有的关于样本集的先验分布信息，通过人工干预方式，使得少数类样本数量增加或多数类样本减少。前者更为流行，也被称为虚拟样本产生。对于定量分析任务，没有所谓的类别信息，在样本整体不足或局部分布信息不平衡的情况下，也可认为是这类现象的推广。基于虚拟样本技术，利用已有样本分布信息产生一些虚拟样本，可以保证算法的有效应用。总之，采用虚拟样本技术可在低成本的情况下，快速增加建模样本量，保证基于数据驱动的算法高效运行的外部数据需求。由于虚拟样本的产生过程具有随机性，借此还可建立多组虚拟样本，进而提供建立组合模型的多样性。本团队探索了近红外光谱结合虚拟样本技术和集成策略在肿瘤诊断、中药材道地性识别及茶叶掺假等体系的应用，取得了一定的效果。肿瘤诊断实验结果表明，所有虚拟样本产生方法都能显著提高诊断的灵敏度。定量分析体系的稳定性还有待进一步研究与探索。

关键字 虚拟样本，光谱分析，数据驱动，集成

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

一种基于个性化联邦学习策略的医学图像分割模型

李益洲*、雷颖、丁一凡、马代川、李梦龙
四川大学

联邦学习为医学数据的共享利用与隐私保护提供了有效的策略。在数字病理分析中，细胞核的分割作为关键步骤，其准确性受到了数据异质性等非独立同分布特性的影响。为应对该挑战，本文提出一种新颖的细胞分割双分支 UNet 联邦学习框架（Federated Learning Dual-Branch UNet, FL-DBUNet）。设计了一种双分支架构用于增强细胞核前后背景区分；提出了一种基于对比学习的策略加速模型收敛。针对联邦学习中的非独立同分布问题，设计了全局编码和局部解码的特征解耦的方法，并通过基于梯度相似性的自适应权重聚合，有效提升模型对异质数据的泛化能力。

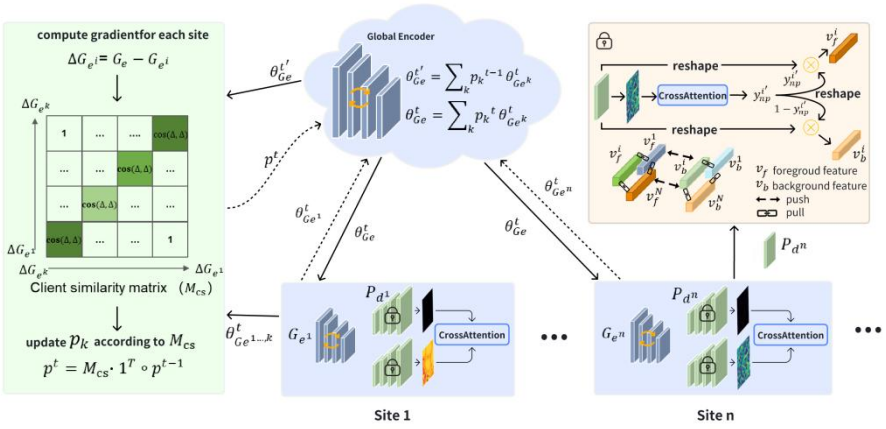


图 1. 双分支 UNet 联邦学习框架

关键字 双分支 UNet，对比学习，个性化联邦学习，非独立同分布，自适应聚合

参考文献

1.G. A. Kaissis, M. R. Makowski, D. Rückert, R. F. Braren, *Nature Machine Intelligence,* **2020**, 2, 305–311.
2. I. Dayan, H. R. Roth, A. Zhong, A. Harouni, A. Gentili, et al., *Nature medicine*, **2021**, 27, 1735–1743.
3. H. Guan, P.-T. Yap, A. Bozoki, M. Liu, *Pattern Recognition,* **2024**, 110424.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

复杂体系样品细分类及相应高端量测仪器化学计量学分析策略研究

吴海龙*
湖南大学

现代分析化学正在经历快速发展，其发展趋势主要包括提高分析方法的准确度、灵敏度，加快分析速度，实现自动化和遥感分析等，以及分析仪器微机化。同时注重发展基础理论和应用基础的研究,吸取其它学科的新成就,不断开拓新的分析方法，尤其注重现场、在线、原位、快速的精准快速定量分析。也即进行未知干扰共存下的感兴趣多组分的精准快速高效定量分析。随着分析对象的越来越广泛，分析体系也越来越复杂，越来越复杂的量测对于分析策略的要求也越来越高。我们必须因样施策。我们首先要先按样品的特点进行分类，在白灰黑组分基础上，进一步细分，尤其是灰色部分进行有效可靠的细分，然后采取相应的分析仪器及分析策略，达到真正的精准快速高效绿色定量分析等目的。近年来快速发展的数学分离策略一旦结合现代分析仪器，恰好为我们解决这一分析难题提供了可能。本报告将报告复杂体系样品细分类及相应高端量测仪器化学计量学分析策略研究。

关键字 分析仪器；化学计量学；多维数据分析；人工智能；模式识别；精准、快速、高效、绿色定量分析

参考文献

1. H. L. Wu, T. Wang, R. Q. Yu, *TrAC Trend. Anal. Chem.*, **2020**, 130, 115954.
2. A. Q. Chen, H. L. Wu, T. Wang, X. Z. Wang, H. B. Sun, R. Q. Yu, *Talanta*, **2023**, 251, 123733.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

构建特殊空穴转移通道提高光电化学水分解性能的研究

卢小泉*
西北师范大学

构建空穴传输层（HTL）是提高光电化学（PEC）水分解性能的主要策略。考虑到 Mn 具有丰富的价态，其氧化物（MnOx）可以转移空穴，而氧空位（Vo）可以调节金属氧化物的电子结构。在这项研究中，Vo-MnOx 作为半导体和助催化剂之间的有效空穴传输通道。展示了 Vo 显著优化锰价态变化的成功例子，主要归因于 Vo 增强了空穴捕获和迁移效应，促进了电荷分离。在此，Vo-MnOx 是通过水热法制备，复合光阳极在 1.23 V vs. RHE 下显示出令人印象深刻的光电流密度，比单纯的半导体光电流密度高 4 倍以上，同时也展现出 91.91%的表面电荷分离效率。此外，析氧反应模型表明，有缺陷的 HTL 可以增强助催化剂/溶液界面处的表面催化动力学。这项工作表明，Vo 在优化 PEC 水分解 HTL 候选材料的价态变化方面具有巨大的潜力。我们利用高分辨率测量方法（扫描光电化学显微镜）从微观水平阐明电荷转移行为，证明氧空位的存在极大的优化了价态的变化，更能促进载流子的转移（图 1a、1b），因而有深远意义。本研究的新发现为 PEC 水分解设计超高速空穴传输通道提供了一种简单有效的策略。

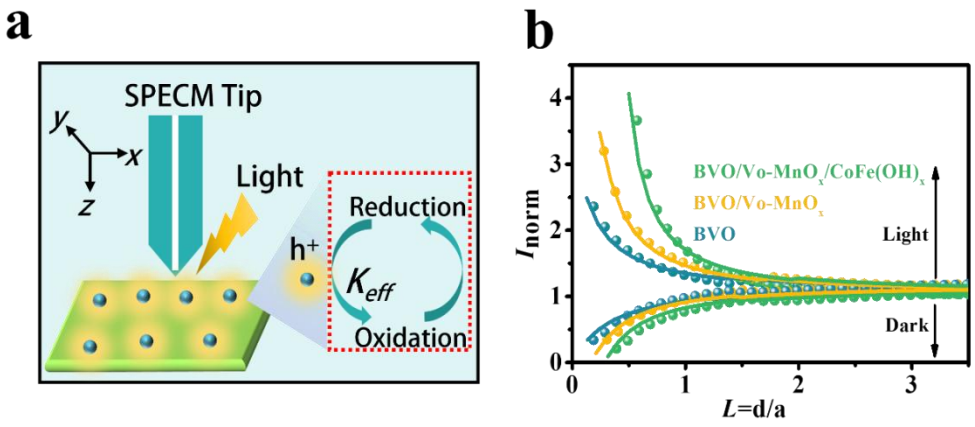


图 1 a)扫描光电化学显微镜的模型图；b)不同光阳极在光照和黑暗条件下的逼近曲线。

关键字 空穴传输层；氧空位；价态；表面催化动力学

参考文献

1. Haase, F. T.; Ortega, E.; Saddeler, S.; Schmidt, F.-P.; Cruz, D.; Scholten, F.; Rüscher, M.; Martini, A.; Jeon, H. S.; Herzog, A.; Hejral, U.; Davis, E. M.; Timoshenko, J.; Knop-Gericke, A.; Lunkenbein, T.; Schulz, S.; Bergmann, A.; Roldan Cuenya, B., Role of Fe decoration on the oxygen evolving state of Co_3O_4 nanocatalysts. *Energy & Environmental Science,* **2024,** *17* (5), 2046-2058.

2. Wang, P.; Fu, P.; Ma, J.; Gao, Y.; Li, Z.; Wang, H.; Fan, F.; Shi, J.; Li, C., Ultrathin Cobalt Oxide Interlayer Facilitated Hole Storage for Sustained Water Oxidation over Composited Tantalum Nitride Photoanodes. *ACS Catalysis.* **2021,** *11* (20), 12736-12744.

3. Zhong, X.; He, H.; Du, J.; Ren, Q.; Huang, J.; Tang, Y.; Wang, J.; Yang, L.; Dong, F.; Bian, L.; Zhou, Y., Boosting solar water oxidation activity and stability of $BiVO_4$ photoanode through the Co-catalytic effect of $CuCoO_2$. *Electrochimica Acta.,* **2019,** *304*, 301-311.
4. Dou, X.; Yuan, D.; Liang, X.; Song, K.; Hu, R.; Zhang, L.; Chandra Roy, J.; Jiang, X.; Kun Liu, H.; Dou, Y.; Yu, L., Synergy between Mo dopants and Ni vacancies in NiOOH for enhanced oxygen evolution reaction. *Chemical Engineering Journal,* **2023,** *468*, 143715.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

近场光谱成像设备研发、算法与应用

余向阳*[1]、万文秀[1]、余自如[2]、刘致远[1]、彭心影[1]、蔡烨帆[3]、洪伟槟[3]
1. 中山大学
2. 华南理工大学
3. 广州光信科技有限公司

相对于传统遥感领域的“远场”光谱成像而言的，小型化的高光谱相机通常是近距离测量的，我们称之为近场光谱成像。近年来，由于微光电系统(MOEMS)和人工智能高效算法的迅速发展，使得我们可以制造出更加高性价比的微型高光谱相机。本论文报告了我们在近场高光谱设备的小型化、智能化、算法模型及在食品、中药材、文物数据保护、智慧农业及工业在线检测方面的工作。

图 1 展示了我们研发的其中一款手持式高光谱相机及其算法模型、应用系统平台。图中的光谱相机集成了先进的 MEMS 光谱芯片，提供实时算法可视化、内置模型和标记工具等高级功能，适合户外或无电源环境下的现场快速分析和应用，采用先进人工智能算法可实现高速成像技术，确保图像质量和精确分析，可适用于多类复杂场景的应用。

图 2 是近场光谱应用的一个示例。在点近红外光谱的基础上，采用光谱成像方法建立了陈皮的年份、产品、自然陈化与人工老化等的现场快速检测方法与系统。所建立的方法与系统，已在普洱茶杂质分拣、中药炮制、咖啡生豆分类等领域实现了落地应用。

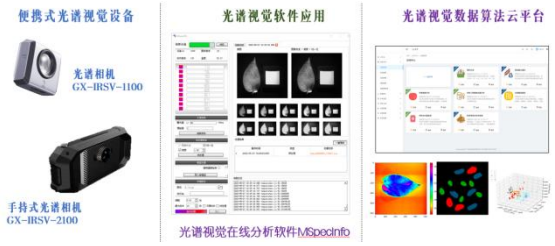


图 1 智能手持式光谱相机及软件系统

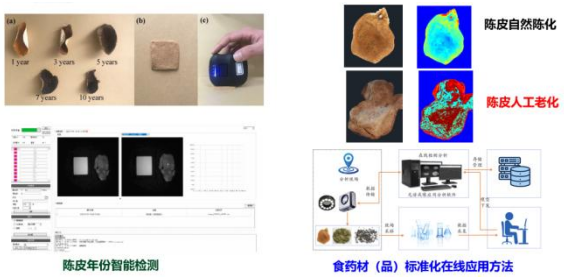


图 2 基于光谱成像方法的陈皮品质检测

关键字 近场光谱，小型高光谱相机，人工智能算法，快速检测

参考文献

1. Guo, Y., Yu Z, Yu. X, *et al.* , *LWT - Food Science and Technology*, **2024**, 205, 116519 .
2. Yu, Z., & Cui, W., *Computers and Electronics in Agriculture*, **2023**, 215, 108382 .
3. Yu, Z., & Cui, W., *Information Sciences*, **2024**, 666, 120452 .

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

光谱新视界:赛默飞在线拉曼技术创新与拓展

汪军*
赛默飞世尔科技（中国）有限公司

在线拉曼光谱作为一种先进的过程分析技术，具有非破坏性、实时、原位、连续以及高灵敏度检测的特点。赛默飞推出的 MarqMetrix All-In-One（AIO）作为一款优秀的在线拉曼产品，采用了最新的硬件和软件技术，具有高分辨率、高集成、小巧简洁的特点，专利球形探头技术确保了采集光谱的稳定和高质量，对于优化工艺、精益生产具有重要意义。

在细胞培养过程中，AIO 被用来实时监测培养体系中葡萄糖、乳酸盐、谷氨酰胺等指标的变化。在化学制药有效成分的合成工艺中，AIO 被用来监测奥美拉唑的合成过程，为最佳合成终点的判断提供依据。在化工行业，AIO 被用来实时监测硝基苯胺的硝化过程。AIO 还被用来准确分析汽油、柴油和喷气燃料中的各项指标。除此之外，AIO 在聚合物材料、电池生产、氢气液化、液化天然气等领域也有应用，并为企业带来显著效益。

关键字 赛默飞、在线拉曼、应用

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

基于激光诱导击穿光谱技术的稀土和金属材料精准智能分析及应用示范

李华*
西北大学/西安石油大学

稀土作为国家战略性资源，稀土和金属材料在国防军工、航空航天、电子产品等高新产业有着不可替代的作用。面向稀土以及金属材料精准智能分析的实际需求，借助化学信息学、人工智能、激光诱导击穿光谱(Laser-induced breakdown spectroscopy，简称 LIBS)等策略，发展了稀土和金属材料精准智能分析的化学信息学理论和方法；搭建了稀土和金属材料以及金属单颗粒物精准分析的 LIBS 光谱智能采集平台，开展了基于人工智能的 LIBS 稀土和金属材料精准分析方法研究，重点研究了多光谱数据融合、智能分辨与表征、数据挖掘、模型转移与校正等关键技术，建立了基于 LIBS 技术结合人工智能的稀土和金属材料智能精准分析技术，研发了稀土和金属材料精准智能分析的 LIBS 分析系统。目前已在包头稀土研究院、河钢集团等单位的工艺现场得到了初步应用验证，获得了较好的分析及应用结果。本研究及相关技术可为稀土和金属材料工业的智能分析与精准控制提供理论基础与技术支撑。

关键字 激光诱导击穿光谱、人工智能、精准智能分析、应用示范

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

现代光谱融合分析技术中的化学计量学方法研究

褚小立*
中石化石油化工科学研究院有限公司

传统光谱学是一种通过观测选择性波长的电磁辐射与物质物体的相互作用来研究原子和分子结构的学科。迄今几乎所用的电磁辐射谱段，从波长较短的X射线到波长较长的微波，都用于了光谱分析，主要包括分子光谱和原子光谱，例如紫外-可见光谱、分子荧光光谱、近红外光谱、中红外光谱、拉曼光谱、太赫兹谱、X射线荧光光谱、激光诱导击穿光谱等，及其它们的成像技术（成像光谱）。传统光谱分析技术在化学分析、材料科学、生物医学、环境监测等多个领域发挥着重要作用，为物质成分与结构确定、材料表征、疾病诊断、环境监测等提供关键手段[1]。

现代光谱分析技术起始于上世纪九十年代，是随着计算机的兴起和应用逐渐发展起来的。其显著的特征之一是采用化学计量学/机器学习方法处理光谱数据，从而可以对复杂的混合物（例如石油、农产品、中药、烟草、食品、土壤、矿物、煤炭、金属等）进行无损、快速和准确的定量或定性分析[2]。尤其是近十年来，微电子机械系统制造工艺（MEMS）、大数据、深度学习、云计算平台、物联网等技术的快速发展，对现代光谱分析技术起到了积极的推动作用，已在实验室高通量分析、现场快速分析、工业在线分析等领域得到了实际应用，逐渐形成了一支独立的分析技术新门类[3]。

多光谱融合是现代光谱分析技术的一个重要研究和发展方向，它将不同类型的光谱进行优化和整合，实现单光谱优势互补，以获得更全面、更可靠、更丰富的特征数据，再结合化学计量学方法构建回归或识别模型，对样品进行定量和定性分析[4]。多光谱融合通过综合多种来源的信息以充分发挥多种光谱之间的互补性和协同性，可全面、深度挖掘的信息，达到提高模型预测准确性和稳定性的目的。许多研究表明，与仅使用单光谱相比，多光谱融合可提高模型的分类和定量预测性能[5]。

近几年，多光谱融合分析技术在方法策略、算法和应用等方面都得到了广泛和深入的研究，取得了显著性进展。国内外已有专著和综述论文对多光谱融合方法学以及在农产品、中药材、食品、奶制品、医学和工业过程分析等领域的应用研究进展进行了评述[6-8]，在此基础上，本文系统梳理了多光谱融合策略和算法，总结了近五年的多光谱融合分析技术应用研究新进展，并对该技术面临的挑战和未来的发展趋势展开了深入讨论，旨在为相关领域的研发和应用人员提供新颖的研究视角和应用思路，从而进一步推动多光谱融合分析技术的完善，提升其应用的成熟度。

关键字 多光谱融合；化学计量学；近红外光谱；拉曼光谱；LIBS

参考文献

[1] Wang H P, Chen P, Dai J W, et al. Recent advances of chemometric calibration methods in modern spectroscopy: Algorithms, strategy, and related issues[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2022, 153: 116648.

[2] Xuesong H, Pu C, Jingyan L, et al. Commentary on the review articles of spectroscopy technology combined with chemometrics in the last three years[J]. Applied Spectroscopy Reviews, 2024, 59(4): 423-482.

[3] Mclean A, Veettil T C P, Giergiel M, et al. Evolution of Vibrational Biospectroscopy: Multimodal techniques and Miniaturisation supported by Machine Learning[J]. Vibrational Spectroscopy, 2024: 103708.
[4] Smilde, Age K., Tormod Næs, and Kristian Hovde Liland. Multiblock data fusion in statistics and machine learning: Applications in the natural and life sciences. John Wiley & Sons, 2022.
[5] Cocchi M. Data Fusion Methodology and Application, Data Handling in Science and Technology. Elsevier, Oxford, 2019
[6] Yao S, Yu Z, Hou Z, et al. Development of laser-induced breakdown spectroscopy based spectral tandem technology: a topical review[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2024: 117795.
[7] Xu Y, Zhang J, Wang Y. Recent trends of multi-source and non-destructive information for quality authentication of herbs and spices[J]. Food Chemistry, 2023, 398: 133939.
[8] Guo M, Wang K, Lin H, et al. Spectral data fusion in nondestructive detection of food products: Strategies, recent applications, and future perspectives[J]. Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, 2024, 23(1): e13301.3.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

化学计量学算法研究进展及其图形界面设计实现

卞希慧*、刘宇霞、刘雨、张可欣、谭小耀
天津工业大学

化学计量学结合分析仪器在复杂样本分析中引起了越来越多的关注[1,2]。采用化学计量学对复杂样本进行定性定量分析的过程如图 1(a)所示。首先采集一定数目的样本，测量仪器信号及目标含量，去掉奇异样本，对数据进行分组。然后对训练集仪器信号进行预处理、变量选择后建立模型，预测集信号进行同样的处理后代入模型中得到最终的预测结果。围绕整个过程发展了一系列的化学计量学方法（图 1b），包括实验设计、代表性样品选择、奇异样本识别、预处理、变量选择、化学模式识别和多元校正方法等。

本课题组系统总结已有化学计量学方法的同时也提出了一些化学计量学新方法。总结了代表性样本选择方法的原理、优缺点以及适用范围，并首次将这些方法分为基于抽样、距离、源于聚类、实验设计、变量选择、奇异样本检测和预处理的方法等七类。在预处理方面，提出了选择性集成预处理方法[2]；将希尔伯特黄变换（HHT）与 F 检验结合[3]、EMD 与 t 检验结合[4]、引入变分模态分解（VMD）[5,6]、提出分段镜像扩展的局部均值分解方法[7]，分别用于 X 射线衍射（XRD）、X 射线光电子能谱（XPS）、拉曼光谱和近红外光谱的去噪。在变量选择方面，将萤火虫优化算法（FA）[8]、灰狼优化算法（GWO）[9]、鲸鱼优化算法（WOA）[10]和蝴蝶优化算法（BOA）[11]等引入到复杂样本光谱变量选择，总结了 102 种群体智能优化算法以及用于分析仪器变量选择的 25 种群体智能优化算法。在建模方法方面，引入极限学习机（ELM）[8,12]和宽度学习（BLS），提出基于分解的集成建模[13-15]和样本、变量方向的双集成建模[16-18]。

尽管目前已经发展了很多化学计量学算法，但这些方法涉及很多数学公式以及计算机编程，对于化学人员来说具有很大的难度，因此大大限制了这些方法的普及以及使用。本课题组将课题组发展在 MATLAB 环境下开发运行的.m 格式的算法通过图形界面设计（GUI）可视化并封装（图 1c），将其从 MATLAB 工作环境中脱离出来，提升了软件的流通性和商业性，助力分析仪器的智能化。

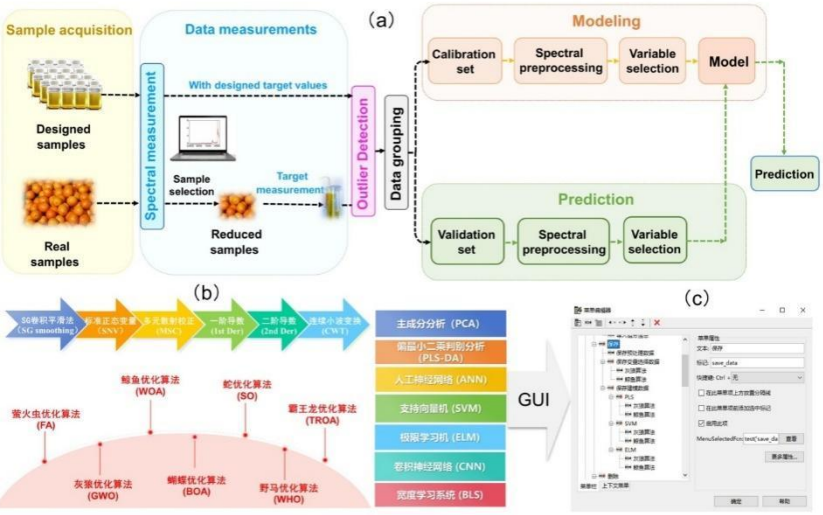


图 1 化学计量学分析复杂样本的过程(a)涉及的算法(b)及其 GUI 实现(c)

关键字 预处理；数据分组；变量选择；群体智能优化；集成建模；图形界面设计

参考文献

1. Y. Wang, Z.H. Li, W.Q. Wang, P. Liu, X.Y. Tan, X.H. Bian, *Spectrochim. Acta A*, 2024, 321, 124710.
2. X.H. Bian, K.Y. Wang, E.X. Tan, P.Y. Diwu, F. Zhang, Y.G. Guo, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 2020, 197, 103916.
3. X.H. Bian, M.X. Ling, Y.Y. Chu, P. Liu, X.Y. Tan, *Frontiers Chem.*, 2022, 10, 949461.
4. M.X. Ling, S.M. Lu, H. Sun, X.H. Bian, *Chin. J. Anal. Chem.*, 2023, 51, 445.
5. X.H. Bian, Z.T. Shi, Y.J. Shao, Y.Y. Chu, X.Y. Tan, *Molecules*, 2023, 28, 6406.
6. S.M. Lu, Y. Hao, Z.T. Shi, Y.Y. Chu, X.H. Bian, Y. Zhang, *Chin. J. Anal. Chem.*, **2024**, 52, 1275-1284.
7. M.X. Ling, X.H. Bian, S.S. Wang, T. Huang, P. Liu, S.Y. Wang, X.Y. Tan, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **2022**, 230, 10465.
8. S.Y. Wang, X.D. Zhang, P. Mpango, H. Sun, X.H. Bian, *J. Chemom.*, 2024, 38, 3578.
9. R.L. Zhang, X.Y. Wu, Y.J. Chen, Y. Xiang, D. Liu, X.H. Bian, *Molecules*, 2022, 27, 5141.
10. X.H. Bian, R.L. Zhang, P. Liu, Y. Xiang, S.Y. Wang, X.Y. Tan. *Spectrochim. Acta A*, 2023, 284, 121788.
11. X.H. Bian, Z.Z. Zhao, J.W. Liu, P. Liu, D. Liu, X.Y. Tan. *Anal. Methods*, 2023, 15, 5190.
12. Y.X. Liu, H. Sun, C.Y. Zhao, C.K. Ai, X.H. Bian, *J. Chemom.*, 2024, 38, 3590.
13. X.Y. Wu, X.H. Bian, E. Lin, H.T. Wang, Y.G. Guo, X.Y. Tan, *Food Chem.*, 2021, 342, 128245.
14. X.H. Bian, D.Y. Wu, K. Zhang, P. Liu, H.B. Shi, X.Y. Tan, Z.G. Wang *Biosensors*, 2022, 12, 586.
15. D.Y. Wu, J.B. Johnson, K. Zhang, Y.G. Guo, D. Liu, Z.G. Wang, X.H. Bian. *Microchemical J.*, 2024, 196, 109587.
16. K.Y. Wang, X.H. Bian, M. Zheng, P. Liu, L.G. Lin, X.Y. Tan, *Spectrochim. Acta A*, 2021, 263, 120138.
17. K.Y. Wang, X.H. Bian, X.Y. Tan, H.T. Wang, Y.K. Li, *Anal. Methods*, 2021, 13, 1374-1380.
18. X.H. Bian, Y.X. Liu, R.L. Zhang, H. Sun, P. Liu, X.Y. Tan, *Spectrochim. Acta A*, 2024, 311, 124016.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

果蔬产地智能分等分选关键技术及装备研发

刘燕德*
华东交通大学

在现代农业生产中，果蔬品质的高效智能分选技术对于提升农产品的市场竞争力至关重要。旨在探讨果蔬产地高效智能分选的关键技术及其装备研发，以期解决果蔬产后损失高、上行不畅及技术装备缺失等问题。通过综合分析国内外分选装备的研究进展，详细阐述了无损检测技术、多源信息融合解析、虚拟队列动态配准协同控制等关键技术，这些技术在提高果蔬分选效率和准确性方面具有显著优势。

首先回顾了果蔬分等分级产业政策背景，明确了果蔬产业面临的主要挑战。在此基础上，系统介绍了包括机器视觉、介电特性、声学特性及超声波、力学特性、软 X 射线、核磁共振、生物传感器、电子鼻与电子舌等在内的多种无损检测技术，并对其应用领域和优缺点进行了深入分析。同时，报告展示了国内外多家公司的分选装备特点。

进一步地深入探讨了分等分选机理方法与技术，包括无损检测机理、关键核心技术突破、核心部件与装备创制等。通过构建蒙特卡洛仿真模型，研究了光在水果内部的穿透深度和能量分布规律，为果蔬内部品质的检测提供了理论基础。此外，研究开发了多种分等分选模型，如苹果、贡梨、脐橙、柚子等内部糖度在线检测模型，以及苹果霉心病、鸭梨黑心病等在线检测模型，这些模型在实际应用中取得了显著效果。

在装备研发及应用方面，展示了大尺寸厚皮果车间智能在线分选装备、带包装中等果车间智能在线分选装备、小尺寸易损果车间智能在线分选装备以及可移动式模块化产地智能分选设备等。这些装备不仅提高了分选效率，还降低了果品损伤率，实现了果蔬品质的高效分选。

未来果蔬分级技术的发展趋势朝着智能化、多元化、精准化和定制化的方向发展，利用 AI 和大数据进行果品品质分析，结合传感器和 GPS 技术实现全程监控和追溯，满足不同消费者对外观、口感等的多样化需求。

关键字 果蔬分选；智能装备；无损检测；检测机理；在线检测模型

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

食用植物油真实性鉴别技术研究进展

张良晓*
中国农业科学院油料作物研究所

食用植物油是居民膳食结构中不可缺少的组成部分，为人体提供能量和必需脂肪酸、植物甾醇、脂溶性维生素等营养功能成分。食用植物油掺假已成为政府重视、社会关注的世界性难点热点问题。本研究提出了“只识真美元”研究思路，建立了基于全谱脂肪酸和单类偏最小二乘的食用植物油真实性鉴别模型。进而，针对模型适用性差的问题，提出了利用同一批次抽检样品中真实样品识别掺假样品的研究思路，发展了单类分类方法-模型集群分析的新算法，建立了食用植物油真实性鉴别方法。该方法无需预先建立真实性鉴别模型，可实现市场食用油样品的真实性鉴别。

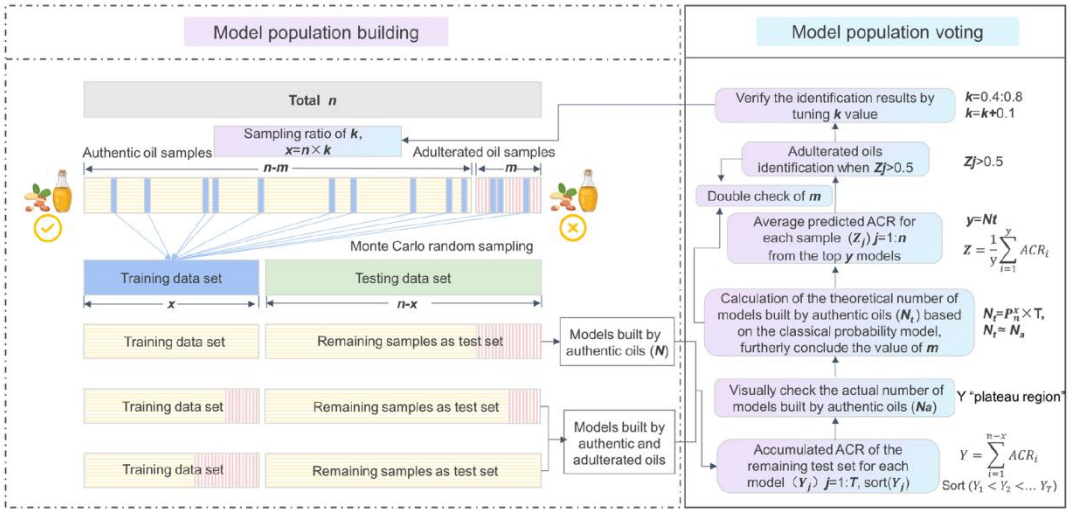


图 1 食用植物油真实性鉴别工作流图[5]

参考文献

1. X. Li, D. Wang, L. Yu, F. Ma, X.F. Wang, D. Pérez-Marín, P.W. Li, L.X. Zhang, *Food Frontiers*, **2024**, 5(2), 237-244.
2. X.J. Dou, X.F. Wang, F. Ma, L. Yu, J. Mao, J. Jiang, L.X. Zhang, P.W. Li, *Food Chem.* **2024**, 433, 137306.
3. X.J. Wang, L.X. Zhang, Z. Chen, X.F. Wang, F. Ma, L. Yu, J. Mao, P.W. Li, *Food Chem.*, **2023**, 406, 135050.
4. X. Li, D. Wang, F. Ma, L. Yu, J. Mao, W. Zhang, J. Jiang, L.X. Zhang, P.W. Li, *Food Chem.*, **2023**, 405, 134884.
5. X.J. Dou, F.Q. Tu, L. Yu, Y. Yang, F. Ma, X.F. Wang, D. Wang, L.X. Zhang, X.M. Jiang, P.W. Li, *Food Frontiers*, **2024**, 5(4), 1806-1818.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

茶叶滋味与香气成分分析与风味调控

易伦朝*
昆明理工大学

课题组重点围绕茶叶风味品质研究中所涉及的分析方法学问题，微生物发酵新菌种筛选，新型发酵工艺开发，酶反应技术研发等开展研究工作。在茶叶相关产品的质量控制和新产品开发方面取得一系列研究成果，建立了同时分析茶叶中几百种滋味成分和香气成分的分析方法，构建了茶叶风味成分知识驱动的质谱识别与鉴定策略；从昔归、困鹿山等名山茶中分离、纯化、鉴定获得上百种可培养微生物，包括细菌、真菌、酵母等，多种菌株可改善夏秋茶苦涩味，提升夏秋茶鲜味、甜味和香气；开发了固态和液态相结合的发酵工艺，可弥补单独使用液态发酵茶叶利用率低，风味单一且容易染菌的问题，同时可节约生产时间和生产成本，提高茶叶利用率。

关键字 茶叶风味；微生物发酵；质谱；化学计量学

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

基于质谱多维数据智能解析的小分子鉴定

卢红梅*、张志敏
中南大学

质谱技术的高度集成和自动化为深度覆盖、高通量表征小分子化合物提供了新手段，如何快速、准确地从其产生的多维数据中获取化合物信息已成为化学、生物等研究领域的瓶颈。课题组针对质谱联用仪器数据维度高、数据量大、结构复杂等特点，基于高性能计算技术，引入人工智能最新成果，充分整合公共数据库（HMDB、METLIN 和 PubChem 等）资源，以 Transformer 和 BERT 的编码器为主干网络，开发波谱与分子结构的大规模预训练方法，得到谱构高阶表征，充分利用仪器所提供多维信息的约束，从而提高未知化合物鉴定的准确性、覆盖率、自动化，降低质谱解析对谱库数据库的依赖，突破质谱多维数据向化学信息转化的瓶颈，促进人工智能与化学测量的深度交叉，加速化学创新与发现。

关键字 深度学习；多维信息；小分子鉴定；质谱联用

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

光谱技术结合化学计量学对健儿消食口服液快速含量分析和质量评价

胡乐乾*、吕凯迪、踞茨、陈梦瑶、刘志敏、尹春玲
河南工业大学

本研究探讨了基于光谱技术结合多种化学计量学对健儿消食口服液中主要活性成分进行快速含量分析和质量评价的可行性。分别采集六个厂家 120 份健儿消食口服液样本的红外和近红外光谱数据，采用全光谱 PLS、CARS-PLS 和 SVM 方法对光谱数据解析处理。结果表明与两种 PLS 法构建的模型相比，SVM 模型对健儿消食口服液中三种活性成分的含量预测准确性最高。基于 SVM 定量分析结果，采用 TOPSIS 和一致性分析方法对不同厂家的健儿消食口服液样品进行质量排序和分级，结果表明，不同厂家和同一厂家不同批次的健儿消食口服液样品质量均存在一定的差异。

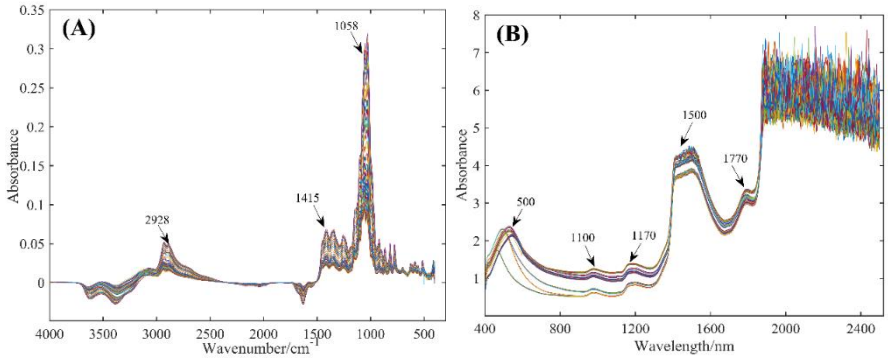


图1. 120批健儿消食口服液样品的原始红外光谱 (A); 120批健儿消食口服液样品样品的原始近红外光谱 (B).

表 1. 六个不同厂家的健儿消食口服液样品 TOPSIS 分析结果

生产厂家	D_j^+	D_j^-	C_j	排序
A	1.441	0.657	0.313	4
B	0.584	1.294	0.689	2
C	1.695	0.060	0.034	6
D	1.187	1.042	0.468	3
E	0.574	1.477	0.720	1
F	1.494	0.305	0.170	5

关键字 化学计量学；健儿消食口服液；快速含量分析；质量评价

参考文献

1. Ju Ying, Yin Chunling, Zhang Yan, Meng Xiangru, Zhao Liuchuang, Hu Leqian, *Spectrochimica Acta Part a-Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **2023**, 286,122008
2. Hu Leqian, Zhang Yan, Ju Ying, Meng Xiangru, Yin Chunling. *Food Control*, **2023**, 146, 109547
3. Lv Kaidi, Yin Chunling, Li Fang, Chen Wenbo, Zhao Liuchuang, Liu Zhimin, Hu Leqian, *Phytochemical Analysis*, **2024**, 35, 1587-1599.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

近红外光谱分析技术在药物智能制造中的研究与应用

臧恒昌*
山东大学

围绕药物智能制造领域的关键问题，基于质量源于设计（QbD）理念，将近红外光谱分析技术与化学计量学相结合，开展了近红外光谱技术在药物智能制造中的研究与应用，主要包括数据获取、数据挖掘、系统建模、模型转移及更新、在线检测与控制及专用仪研制等方面。采用数据均值化及吸光度-浓度变化率方法，提升了近红外光谱质量及建模性能[1]；基于水光谱探针从水光谱角度阐释了山楂“炒炭存性、炒炭止血”的炮制机理[2]；通过深度学习算法建立中药提取物有效成份定量模型，实现了特征提取过程的可视化和解释性[3]；建立模型转移及更新的新方法策略，确保模型的适用性和稳健性[4,5]；建立近红外光谱在线分析及控制模型，实现药物生产过程关键质量属性的在线检测和控制；研制多通道、多功能近红外在线检测装备，兼具温度检测补偿、实时取样、除泡和去固形物的预处理功能，确保了在线检测数据的准确性；研制中药口服液指纹图谱快检设备，实现近红外光谱向色谱指纹图谱的转换，为中药生产过程的实时评价与放行提供了技术及装备支撑。通过上述研究，能够高效利用数据信息，提升药物制造智能化水平，体现新质生产力特征，推动制药产业高质量发展。

关键字 数据获取、数据挖掘、系统建模、模型转移及更新、在线检测

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

化学信息学中的小样本人工智能算法研究

曹东升*
中南大学

在化学信息学领域，小样本人工智能（AI）算法的研究正逐渐受到重视。这类算法的优势在于能够在数据稀缺的情况下，提取有效信息并进行准确预测。这对化学领域尤其重要，因为在药物发现、材料设计和化合物性质预测等任务中，获取大量标注数据往往具有挑战性。本次报告将探讨如何发展基于小样本的人工智能算法来解决目前众多化学医药领域中面临的数据稀缺挑战。作者将重点讨论各种新型人工智能技术如迁移学习、多任务学习、对比学习、自监督学习、伪标签学习、主动学习、数据增强策略、生成式学习、少样本学习等在药物发现、性质预测、分子设计等方面的优缺点和应用。小样本人工智能算法在化学信息学中的研究展现出广阔的前景。通过不断改进算法、优化模型，以及提升数据质量，能够有效推动药物发现、材料设计等领域的发展。这不仅有助于提高研究效率，还能为化学信息学的未来发展注入新的活力。同时，加强跨学科合作，以整合化学、计算机科学和数据科学的资源与知识，将是实现小样本学习技术突破的关键。

关键字 化学信息学、小样本、人工智能、化学计量学

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

一维卷积神经网络分类应用的多视角解释

刘曙*、严承琳、闵红、刘芳
上海海关工业品与原材料检测技术中心

一维卷积神经网络（1D-CNN）是复杂物质光谱分类领域的研究热点，基于“黑箱”特性，可解释性是制约其实际应用的技术关键。聚焦进出境贸易环节激光诱导击穿光谱筛查含铁固体废物、拉曼光谱鉴别再生涤纶面料 2 个 1D-CNN 应用场景，本团队提出了一种集成变量重要性分析、卷积层可视化、逐层可视化 CNN 决策过程的多视角解释方法，以便模型使用者更好地理解决策过程，信任模型使用。具体包括：采用类激活映射算法获取模型的特征波段，识别对规则构建起到主要作用的特征变量，理解光谱数据的关键特征信息；通过可视化卷积核学习到的特征图，揭示不同卷积层提取的局部特征；采用 t 分布随机邻域嵌入算法，实时监控光谱数据变换情况，从输入、卷积、最大平均池化、决策到输出，观察模型是如何逐步提取特征，直至最终预测。本研究归属于深度学习的主流研究方向，是深度学习引入光谱分析的应用探索，当光谱分析“拥抱”深度学习，可解释性必然是“应用道路”上关键一环。

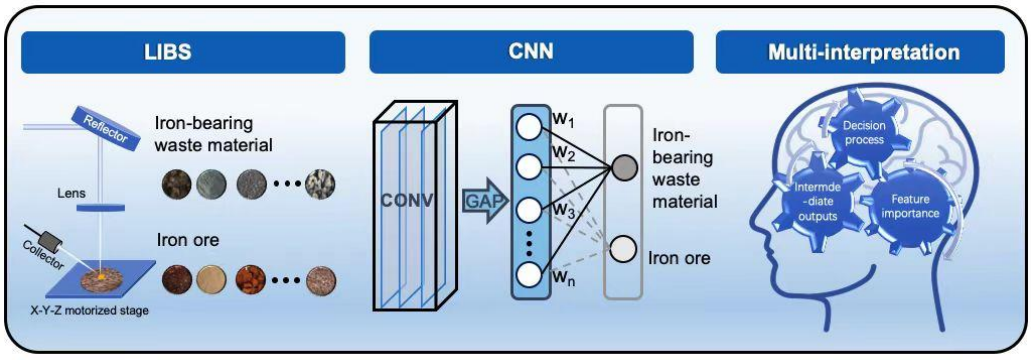


图 1 激光诱导击穿光谱结合 1D-CNN 筛查含铁固体废物

关键字 卷积神经网络；光谱分析；模式识别；可解释性

参考文献

1. C. Yan, S. Liu, Z. Zhu, H. Min, Q. Zhang, W. Zhao, P. Su, Y. An, C. Li, X. Wu, *J. Environ. Chem. Eng.*, **2024**, 12, 112580.
2. W. Zhao, C. Li, C. Yan, H. Min, Y. An, S. Liu, *Anal. Chim. Acta*, **2021**, 1166, 338574.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

AntDAS：色质谱数据解析及应用

于永杰*
宁夏医科大学

基于色质谱技术的组学研究受到广泛关注，并在诸多研究领域得到了成功应用。复杂样本中海量化合物信息的精准识别是组学研究中的关键环节。近年来，课题组发展了一系列化学计量学解析算法，如背景漂移校准、色谱峰自动化提取、重叠峰解析、源内裂解碎片离子识别、时间漂移校正等，并构建了针对气质联用的数据分析软件 AntDAS-GCMS 和针对液质联用的数据分析软件 AntDAS-DDA。目前，AntDAS 已用于复杂样本中挥发、半挥发、以及难挥发性成分构成的解析，并在中药材、天然香料等复杂样本中的物质基础剖析、产地溯源、加工过程监控、产品质量控制等方面得到验证。AntDAS 为基于色质谱分析的研究提供了新的技术手段。

关键字 色质谱数据分析；化学计量学；代谢组学；AntDAS

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

化学计量学结合高光谱的天然样品识别方法研究

焦龙*
西安石油大学

通过高光谱结合化学计量学，建立了天然样品的识别方法。收集了砂岩、麦冬等天然样品的高光谱数据。用于高光谱数据的预处理技术包括 Savitzky-Golay 平滑方法、多次散射校正和标准正态变量变换。通过线性判别分析、支持向量机、随机森林等机器学习方法建立分类模型。研究结果表明，采用合理的光谱预处理结合机器学习方法可以建立正确的分类模型，高光谱与化学计量学相结合是识别不同天然样品的一种有效方法。

关键字 化学计量学；高光谱；分类

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

从标量像素到矩阵像素：不同成像数据识别与解析的模型与应用

王童*、吴海龙、俞汝勤
湖南大学

传统上，成像数据通常以标量像素形式表示，每个像素点包含单一的亮度或灰度值。然而，随着技术的不断进步，成像数据的复杂性日益增加，单个像素的数据可引入多维数据（如光谱矢量信息、时间序列信息、激发-发射矩阵荧光信息等），显著提高了成像数据的信息量与表征能力，如何处理复杂的高维成像数据十分具有挑战。本工作按照每个像素的数据类型（包括标量、短矢量、长矢量、矩阵）对成像数据进行了划分，并从图像识别和纯信号提取的角度介绍了适用于不同成像数据的深度学习算法和多元分辨与校正算法，同时介绍本实验室近期的相关应用。

关键字 光谱成像；深度学习；计算机视觉；多元分辨与校正

参考文献

1. H. L. Wu, T. Wang, R. Q. Yu, *TrAC Trend. Anal. Chem.*, **2020**, 130, 115954.
2. X. Liu, H. An,W. Cai, X. Shao, *TrAC Trend. Anal. Chem.*, **2024**, 172, 117612.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

化学计量学在水体微塑料识别及环境风险评估中的应用

崔晓宇*、万希哲、李梁
天津大学

微塑料作为一种新兴污染物，能够在环境中长期存在，对水生态系统构成严重威胁。近年来，微塑料污染已成为全球范围内的重要环境问题，尤其在水体中的影响愈发显著。为了对微塑料污染相关的生态风险进行准确且科学的评估，提升微塑料的识别简便性和可靠性显得尤为重要。这包括系统性地分析水体中微塑料的污染特征，并明确其环境影响。化学计量学作为一种数据分析技术，通过对大量数据的学习与分析，建立结果评价或预测模型，已在微塑料研究领域受到广泛关注。利用化学计量学可以提高水体中微塑料的视觉与光谱识别的自动化程度和识别效率，为追踪微塑料污染源提供科学支持，并有助于揭示其对水生态系统的复杂环境效应。本文综述了化学计量学在水体中微塑料光谱识别中的应用特点与局限性，回顾了该技术在微塑料识别和水生态风险评估中的研究进展。此外，研究结果将为化学计量学在相关领域的发展与应用提供建议和展望。

关键字 微塑料，水生态系统，光谱分析，风险评估，化学计量学

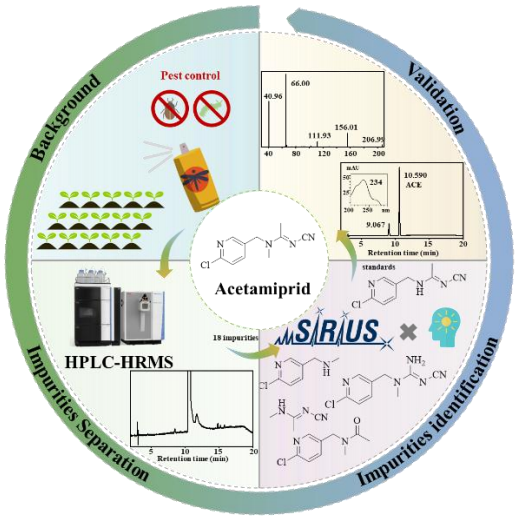
分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

SIRIUS 辅助解析高纯啶虫脒中全杂质

涂梦灵[1]、朱云霄[2]、刘阳[3]、李先江*[1]
1. 中国计量科学研究院
2. 中国石油大学
3. 中国计量大学

啶虫脒属于第一代新烟碱类杀虫剂，近年来因其在环境和食品中的高检出率而备受关注。多项研究表明，长期接触啶虫脒会对人体神经系统、免疫系统、生殖系统等产生负面影响。中国实施的食品安全国家标准(GB-2763-2021 和 GB 2763.1-2022)中，对 87 种不同食品中的啶虫脒含量进行了严格限制。为了保证食品中啶虫脒检测结果的准确可靠，急需研制纯度标准物质。而结构相关杂质的鉴定是纯度标准物质开发中的重要一环。

本研究采用液相色谱-高分辨率质谱联用技术(LC-HRMS)和质谱解析软件(SIRIUS)对高纯 ACE 材料中的杂质进行了分析。首先优化色谱条件使各杂质充分分离；然后分析 MS 和 MS/MS 数据，预测潜在的化学分子式，根据主要成分 ACE 的特征碎片推断杂质的化学结构。最终鉴定出 18 个杂质，其中 4 个杂质具有 CAS 注册号，1 个杂质通过标准样品采用 HPLC-UV 和 MS/MS 法进行了验证。本研究结果展示了啶虫脒在生产和储存过程中可能产生的杂质，这对农药的稳定性监测和降解机制的阐明具有重要意义。



关键字 啶虫脒；SIRIUS；高分辨质谱

参考文献

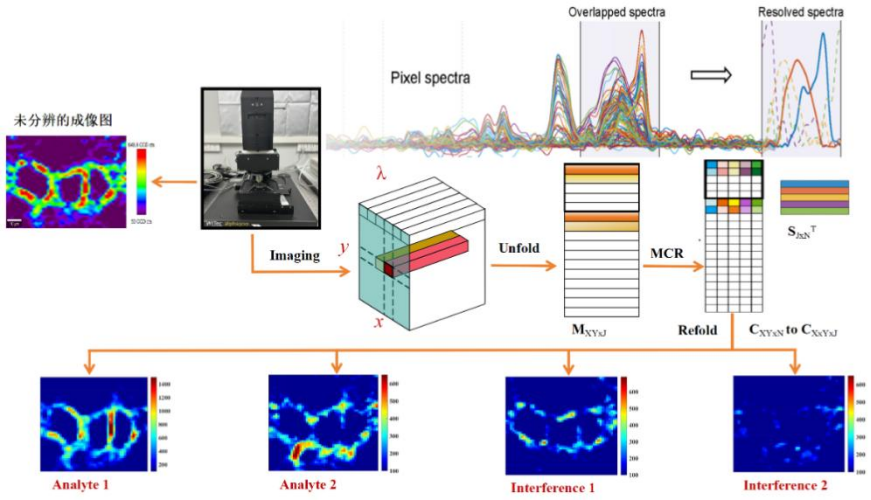
1. B. Yang, M. Tu, S. Wang, W. Ma, Y. Zhu, Z. Ma, X. Li, *Food Chem.*, **2024**, 444, 138695.
2. X. Li, M. Tu, B. Yang, W. Ma, H. Li, *Microchem. J.*, **2023**, 193, 109123.
3. X. Li, B. Yang, W. Ma, M. Tu, Y. Zhang, Z. Ma, Q. Zhang, H. Li, *Anal. Bioanal. Chem.*, **2022**, 414, 7203-7210.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

拉曼显微成像结合化学计量学在植物病菌侵染中的应用

陈冬梅*、康超
贵州大学

细胞是生命体形态、结构、功能和生理的基本单位。细胞、亚细胞结构和其中生物分子的微观成像研究，可从更深层次揭示生命活动的本质和规律、了解疾病的起因和发展，并为精准特效药的研发提供更可靠依据，已成为生命科学领域的研究前沿与热点。常见细胞成像技术包括扫描探针显微成像、质谱成像、荧光显微成像、拉曼显微成像等，其中拉曼显微成像技术具有非标记、高通量、无损、原位检测等独特优势，但高通量优势需准确分辨出不同物质相互重叠的拉曼峰。基于拉曼显微成像技术，结合化学计量学算法，我们分别对葡萄座腔菌侵染猕猴桃导致软腐病以及侵染苹果导致轮纹病等植物病菌侵染过程，构建了拉曼显微技术结合多元曲线分辨算法的细胞成像分析方法，研究了细胞壁的主要结构成分（包括低甲氧基果胶、高甲氧基果胶、纤维素和木质素等）的微观时空分布与变化规律。另外，结合机器学习还构建了无损早期（在目视可见之前）判别方法。拉曼共聚焦显微技术结合化学计量学分辨与分类算法在植物病菌侵染的细胞层面动态表征和早期预警方面具有可行性和应用前景。



关键字 拉曼显微成像；化学计量学；植物病理学；植物；细胞壁

参考文献

1. E. Coen, D.J. Cosgrove, *Science*, **2023**, 379, eade8055.
2. X.X. Han, R.S. Rodriguez, C.L. Haynes, Y. Ozaki, B. Zhao, *Nat. Rev. Methods Primers*, **2022**, 1, 87.
3. K. Dodo, K. Fujita, M. Sodeoka, *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 144, 19651-19667.
4. M. Li, L. Zhang, L.L. Jiang, Z.B. Zhao, Y.H. Long, D.M. Chen, J. Bin, C. Kang, Y.J. Liu, *Talanta*, **2024**, 267, 125212.
5. L.H. Luo, L.L. Jiang, T.T. Chen, Z.B. Zhao, C. Kang, D.M. Chen, Y.H. Long, *Spectrochim. Acta A.*, **2024**, 322, 124837.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

小波包变换用于近红外光谱高分辨信号提取

韩丽[1,2]、蔡文生[2]、邵学广*[2]
1. 天津医科大学药学院
2. 南开大学化学学院

提高分辨率是分析化学中普遍关注的问题，特别是在光谱分析中，需要具有高分辨率的光谱来识别具有细微差异的结构或构象变化。对于近红外光谱而言，光谱谱峰重叠严重，即使对于简单的水分子，也很难从原始光谱中直接获取不同结构及其随实验条件和分子环境变化的信息。小波变换已被广泛用于信号处理，是增强信号分辨率的有效手段。其中，离散小波变换可以将信号分解为代表不同频率信息的局部贡献，分别称为离散细节和离散逼近，在每一级尺度计算中离散逼近会被进一步分解。对于包含基线、信号和噪声的化学信号，频率高于基线和低于噪声的部分为不同分辨率的信号。小波包变换（wavelet packet transform, WPT）是离散小波变换的进一步发展，在 WPT 中，离散细节和离散逼近在更大尺度的计算中都进行了分解，因此可以获得分辨效果更好的光谱成分。

在近红外光谱对含水体系的结构分析中，为了获取水-重水混合物中不同氢键结构信息，对光谱进行 WPT 处理，获得了高分辨光谱。通过观察峰强度随摩尔分数的变化规律，识别出了不同氢键结构 OH 基团的光谱特征，并且在不同频率的光谱成分中区分出了水和重水中的 OH 基团信息。为了理解抗冻体系中抗冻剂与冰的结合机制，分析了不同浓度聚脯氨酸（polyproline, PPro）溶液中冰生长的近红外光谱。通过 WPT 获取高分辨光谱，获取了冰晶生长过程水结构的变化信息，并提供了 PPro 与冰之间存在界面水的证据，这层界面水由含有三或四个氢键的类冰结构组成，该界面水的稳定存在对于 PPro 的抗冻活性起到了关键作用。因此，WPT 为获取高分辨光谱以及获取化学和生物体系中的物质结构和相互作用信息提供了有力工具。

关键字 近红外光谱，小波包变换，水结构

参考文献

1. L. Han, Y. Sun, Y. Wang, H. Fu, C. Duan, M. Wang, W. Cai, X. Shao, *Spectrochim. Acta, Part A*, **2023**, 289, 122233.
2. L. Han, H. Wang, W. Cai, X. Shao, *J. Phys. Chem. Lett.* **2023**, 14, 4127-4133.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

一种通用、准确和高效的混合物红外光谱组份识别方法

谭琳、张志敏、卢红梅*
中南大学

基于中红外光谱的物质识别通常由谱峰的手动解析或图谱的搜库来实现，然而对于混合物，这两类方法因物质的光谱重叠而基本无法实现组份的识别。本研究提出的 DeepMIR 方法，可准确、高效、通用地实现基于红外光谱的混合物组份识别。通过引入伪伴生卷积神经网络、空洞卷积神经网络和空间金字塔池化等深度学习技术，DeepMIR 显著提高了特征峰重叠的混合物光谱上识别效率和准确率。通过光谱扩增技术，构建了 21,006 对基于透射模式测量的光谱，用于模型的训练、验证和测试。在模型评估中，DeepMIR 与传统匹配算法和其他深度学习算法进行了比较，在测试集上的准确度高达 99.24%，较反向匹配(RM)、命中质量指数(HQI)和 DeepRaman 分别提高了 30%、26%和 3%。此外，还应用了三个数据集来测试模型的不同用途。结果表明，DeepMIR 不仅能够处理不同长度的光谱输入，还适用于衰减全反射(ATR)模式下测量的光谱，在混合物数据集上体现出超越传统匹配算法和其他深度学习算法的优越性能，其中在四元有机溶剂混合物数据集的准确率高达 98.3%。DeepMIR 在多种光谱采集模式下的通用性和网络架构的先进性可实现准确高效的组份识别，呈现出广泛的应用潜力。

关键字 中红外光谱；混合物光谱；组份识别；深度学习

参考文献

1. Zagoruyko, S.; Komodakis, N. CVPR, **2015**, pp 4353-4361.
2. Chen, L.-C.; Papandreou, G.; Schroff, F.; Adam, H. arXiv, **2017**, 1706.05587.
3. He, K.; Zhang, X.; Ren, S.; Sun, J. TPAMI, **2015**, 37 (9), 1904-1916.
4. Ma, P.; Li, M.; Lu, H.; Zhang, Z. Chemom. Intell. Lab. Syst., **2019**, 191, 12-20.
5. Rodriguez, J. D.; Westenberger, B. J.; Buhse, L. F.; Kauffman, J. F., Anal. Chem., **2011**, 83 (11), 4061-4067.
6. Fan, X.; Wang, Y.; Yu, C.; Lv, Y.; Zhang, H.; Yang, Q.; Wen, M.; Lu, H.; Zhang, Z. Anal. Chem., **2023**, 95 (11), 4863-4870.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

制冷自动进样器的研制及测试方法

袁野[1,2]、周新颖[2]、衣欣[2]、王丰琳[2]、李彤*[2]
1. 苏州依利特分析仪器有限公司
2. 大连依利特分析仪器有限公司

本文研发的制冷自动进样器相较于传统的自动进样器，采用了 X、Y、Z 轴三维联动轴技术，可以同时实现自动进样、稀释及衍生等一系列过程。高精度步进电机与精密导轨的结合，显著提升了系统的定位精度。此外，独特的双弹簧 Z 轴设计实现了空瓶检测和误扎报警功能，有效的防止设备受到损害。通过引入双帕尔贴半导体与风循环结合的方式，能够精确管理样品室温度，温控范围广（4℃至 40℃），可满足生物医药领域对样品冷却的多样化需求。在确保温度稳定性和精确度的同时，该设备的进样重复性 RSD＜0.2%，线性 r＞0.999，样品残留＜0.005%。凭借精准的温度控制技术以及卓越的进样性能，为生物医药、食品安全检测及化工等多个领域的样品处理和实验分析提供了强大的技术支持，是推动相关行业技术进步的重要力量。

关键字 制冷自动进样器；误扎报警；空瓶检测；风循环；

参考文献

1.张也,亓学奎,张习志,等.分析仪器, **2020**, (05):120-125.
2.刘洋,色谱自动进样器和自动进样方法.安徽省,安徽皖仪科技股份有限公司, **2020**-10-23.
3.陈永艳, 吕佳, 张岚,等. 色谱, **2022**, 40(12): 1064-1075.
3. Chen Y, Lu J, Zhang L, et al. Chinese Journal of Chromatography, **2022**, 40(12): 1064-1075.
4. 任吉存. 色谱最新研究亮点（第 7 期）.色谱
5. Yinan W ,Wan C .Journal of agricultural and food chemistry, **2016**, 64(13): 2802-8.
6. Ratti B, Toselli A, Beretta E, et al. **1982** Jul; 37(7): 226-34. PMID: 7128773.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

基于便携式能量散射 X 射线荧光结合二阶校正算法同时定量食品中的轻元素

夏阿林*[1]、耿涛[2]、肖健[1]
1. 邵阳学院
2. 海宁物熙科技有限公司

食品中的微量元素在维持人体健康、促进生长发育和调节代谢中发挥着关键作用。为了评估食品的营养价值及对健康的影响，本工作提出了一种基于便携式能量散射 X 荧光（XRF）技术结合二阶校正算法同时定量不同食品样本中磷、硫、钾和钙的方法。首先，通过改变测试电流和电压从而得到每个样本在不同测试条件下的 XRF 响应信号，进而将每个样本的 XRF 光谱数据输出为一个矩阵。其次，使用交替惩罚三线性分解（APTLD）算法和平行因子分析（PARAFAC）算法对多个样本堆叠而成的三维数据矩阵进行解析。结果表明，即使存在严重的背景干扰和信号重叠，两种算法均可以准确实现对目标元素光谱信号的准确提取。两种算法得到的校正方程的相关系数（R2）均大于 0.98，对测试样中目标元素的预测回收率分别在 98.15%~103.45%和 97.43%~102.62%，预测均方根误差（RMSEP）均小于 0.01%（100 ppm）。对食品标样的定量预测结果和其参考值之间的偏差小于 20%，RMSEP 小于 0.03%（300 ppm），证实了该方法能够实现对食品样本中轻元素的准确定量。这一研究对于食品中轻元素的测定提供了一定的理论依据，具有广阔的实际应用前景。

关键字 XRF；二阶校正；食品；轻元素

参考文献

1. L. Herreros-Chavez, M. L. Cervera, A. Morales-Rubio, *Direct determination by portable ED-XRF of mineral profile in cocoa powder samples*[J]. *Food Chemistry*., **2019**, 279, 373–379.
2. X. Feng, H. Zhang, P. Yu, *X-ray fluorescence application in food, feed, and agricultural science: a critical review*[J]. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition.*, **2020**, *61*(14), 2340–2350.
3. A. Frydrych, K. Jurowski, *Portable X-ray fluorescence (pXRF) as a powerful and trending analytical tool for in situ food samples analysis: A comprehensive review of application - State of the art*[J]. *Trends in Analytical Chemistry*., **2023**, 166, 117165.
4.苏莹,周陶鸿,刘杰,等. 便携式 X 射线荧光光谱仪对粉丝中 KAl（SO4）2 的快速检测技术研究[J]. 光谱学与光谱分析., 2024, 44(04): 1067-1072.
5.雷渊雄,夏阿林,黄炜,等. 分子荧光结合多维校正测定小龙虾中氨基脲残留量[J]. 中国食品学报., **2023**, 23(03): 339-346. DOI:10.16429/j.1009-7848.2023.03.035.
6.吴海龙,王童,俞汝勤. 化学多维校正理论及其绿色分析应用的新进展[J]. 中国科学:化学., **2022**, 52(09): 1557-1579.
7. L. Perring, M. Nicolas, D. Andrey, et al. *Development and validation of an ED-XRF method for the fast quantification of mineral elements in dry pet food samples*[J]. *Food Analytical Methods*., 2017, 10: 1469-1478.
8. H. L. Byers, L. J. McHenry, T. J. Grundl. *XRF techniques to quantify heavy metals in vegetables at low detection limits*[J]. *Food Chemistry: X.*, **2019**, 1: 100001.

9. M. Antonio, F. A. Chiappini, H. C. Goicoechea, et al. *The advantages behind the efforts of performing higher-order calibration methods–A case study*[J]. *Analytica Chimica Acta.*, **2024**, 1319: 342970.
10. H. L. Wu, T. Wang, R. Q. Yu. *Recent advances in chemical multi-way calibration with second-order or higher-order advantages: Multilinear models, algorithms, related issues and applications*[J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry.*, **2020**, 130: 115954.
11. E. Visentin, G. Niero, M. Cassandro, et al. *Assessment of the ED-XRF technique to quantify mineral elements in nonlyophilised milk and cheese*[J]. *International Journal of Dairy Technology.*, **2023**, 76(1): 102-110.
12. G. Cottenet, D. Andrey, S. Dubascoux. *Evaluation of ED-XRF for the detection of inorganic adulterants in turmeric, paprika and oregano*[J]. *Food Additives & Contaminants: Part A.*, **2024**, 41(5): 461-467.
13. L. B. Oliveira, W. P. C. dos Santos, L. S. G. Teixeira, et al. *Direct analysis of cocoa powder, chocolate powder, and powdered chocolate drink for multi-element determination by energy dispersive X-ray fluorescence spectrometry*[J]. *Food Analytical Methods.*, **2020**, 13: 195-202.
14. M. Pozza, M. De Marchi, E. Visentin, et al. *Effectiveness of energy dispersive X-ray fluorescence for the quantification of mineral elements in skim milk and whey powders*[J]. *Journal of Dairy Science.*, 2024.
15. G. E. Guild, J. C. R. Stangoulis. *Screening Ca concentration in staple food crops with energy dispersive x-ray fluorescence (EDXRF)*[J]. *Plant and Soil.*, **2022**, 473(1): 659-667.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

纳米酶比色传感器结合云端机器学习算法的手机 APP 智能识别中国绿茶

龙婉君*
中南民族大学

绿茶以其独特的风味口感和高营养价值而深受消费者喜爱[1-2]。绿茶的品种、品质与价格之间紧密相关[3]。本文首先对不同品种绿茶的化学成分差异进行了深入探究，发现茶多酚为不同品种绿茶的差异性标志化合物。根据其优异的抗氧化活性，利用其对·OH 清除作用以及对蓝色氧化产物 oxTMB 还原作用的双重机理，设计并合成了具有拟过氧化物酶活性的纳米金（GSH-AuNPs），构建了一种比色传感器。该传感器放大了不同品种绿茶之间的颜色差异，产生从深蓝绿色、浅绿色到无色的变化，能实现不同品种绿茶的肉眼判别。利用 PLS-DA 算法对传感方法的准确性进行验证，判别准确率从原始的 75.8 %提高到 100 %，实现了不同品种绿茶的准确鉴别。最后，开发了基于云端的机器学习算法辅助的手机 APP，对不同品种绿茶鉴别准确率高达 97.9%，结果说明构建的比色传感器与智能手机 APP 实现了对不同品种绿茶的快速准确免仪器判别，为快速、可靠鉴定绿茶品种奠定了基础，使行业能够更有效地应对欺诈行为。

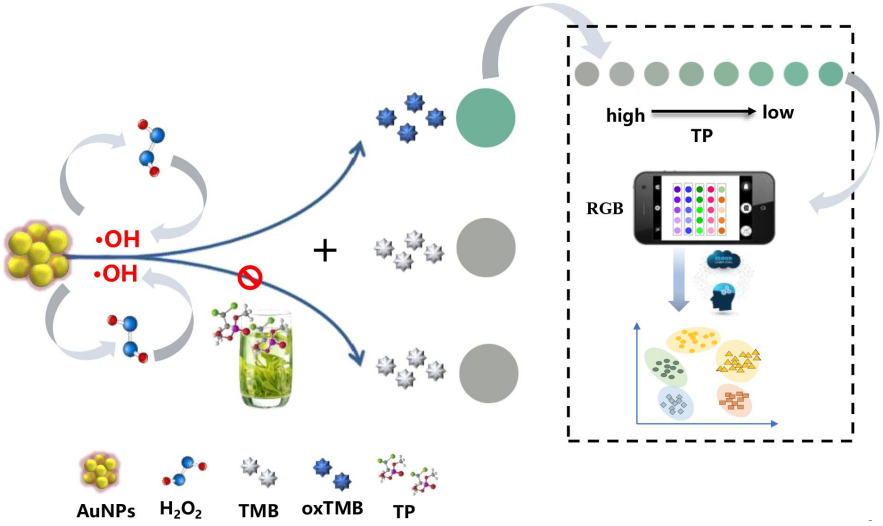


图 1 纳米酶比色传感器鉴别中国绿茶示意图

关键字 中国绿茶；比色传感；AuNPs；机器学习算法；手机 APP

参考文献

1. D. Sidhu , M. Vasundhara, P. Dey, *Phytomedicine*, **2024**, 123: 155207.
2. Y. Yu, X. Zhu, W. Ouyang, *Food Chemistry: X*, **2023**, 19: 100844.
3. Y. He, Q. Zhang, A. Inostroza, *Food Control*, **2024**, 160: 110361.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

通用质谱大模型开发

纪宏超*
中国农业科学院深圳农业基因组研究所

质谱（MS）在针对生命组学等复杂体系的仪器分析中至关重要，但质谱谱图解析未知代谢物的结构仍然是一个亟待解决的难题。标准谱图的缺乏，使很多化合物无法通过库匹配的方式注释其确切结构。因此，通过化学信息学手段，基于谱图推断未知化合物潜在的结构和性质，成为另一种可行的策略。既往研究已经能够实现从质谱预测其子结构 1、相似化合物 2、成药性、毒性 3 等方面的预测，但缺少一种能够通用的模型实现多用途、多功能的预测。近年来，大模型技术的兴起为许多领域带来快速发展，生物、化学等垂直领域出现了很多多用途大模型研究。因此，我们采用类似的方案，将质谱数据转化成一种独特的自然语言构建指令集，并以 Llama3 模型为基础进行微调，开发了通用质谱大模型，使之能够在无法鉴定化合物结构的情况下，对其多种性质进行预测。

关键字 化学计量学，质谱分析，人工智能

参考文献

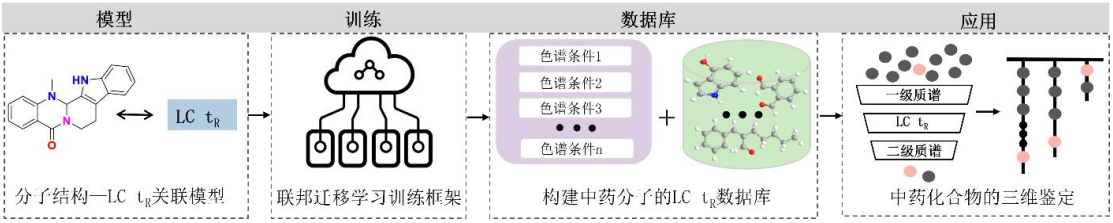
1. Ji, H.; Deng, H.; Lu, H.; Zhang, Z. Predicting a Molecular Fingerprint from an Electron Ionization Mass Spectrum with Deep Neural Networks. Anal. Chem. **2020**, 92 (13), 8649–8653.
2. Ji, H.; Xu, Y.; Lu, H.; Zhang, Z. Deep MS/MS-Aided Structural-Similarity Scoring for Unknown Metabolite Identification. Anal. Chem. **2019**, 91 (9), 5629–5637.
3. Peets, P.; Wang, W.-C.; MacLeod, M.; Breitholtz, M.; Martin, J. W.; Kruve, A. MS2Tox Machine Learning Tool for Predicting the Ecotoxicity of Unidentified Chemicals in Water by Nontarget LC-HRMS. Environ. Sci. Technol. **2022**, 56 (22), 15508–15517.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

液相色谱保留时间预测新方法研究

杨琼*
湖南中医药大学

目前正值化合物结构鉴定从质谱检索向多维鉴定转型的关键时期，开发高性能的液相色谱保留时间预测新方法、针对性建立高覆盖率的液相色谱保留时间数据库，实现液质联用数据的化合物多维鉴定，将有助于解决复杂体系中的结构鉴定难题。针对液相色谱保留时间预测中面临的液相色谱条件覆盖不足、预测精度低及跨实验室应用受限的核心技术问题，拟采用新型图神经网络（GNN）模型与联邦迁移学习训练框架结合的方式，整合公开的液相色谱保留时间数据集和各实验室私有的液相色谱保留时间数据，开发高精度的液相色谱保留时间预测模型。高精度液相色谱保留时间预测可以覆盖色谱研究领域的所有液相色谱条件，突破现有液相色谱保留时间化学空间覆盖率低、液相色谱保留时间预测跨实验室间应用受限的瓶颈，在化合物鉴定中提供与质谱正交的结构信息，实现更精准的化合物结构鉴定，为后续分子活性研究、药物筛选、药理研究及代谢途径确定等科学研究提供基础。



关键字 液相色谱保留时间预测；液质联用数据；化合物鉴定

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

中国 6 个不同产地甘草的灰色因子分析（GFA）和灰色因子聚类分析（GFCA）

周利兵*
广西科技师范学院

本研究旨在为甘草的质量控制和市场定位提供理论和实践支持。该研究建立了六种甘草的多指标综合分析评价体系，从而为大规模开发甘草资源提供了坚实的科学基础，并推进了甘草分类研究。此外，它还通过严谨的科学分析方法全面评估了甘草的品质。本研究选取产自山西临县、甘肃省平凉市灵台县、甘肃省定西市安定区、甘肃省定西市陇西县、甘肃省岷县和甘肃省张掖市甘州区的 6 种甘草为研究对象，测定了 6 种甘草的燃烧热、燃烧稳定性、脂肪、粗纤维、灰分、微量元素和氨基酸含量。通过灰色因子分析（GFA），在燃烧稳定性、燃烧热、灰分、粗纤维、脂肪、微量元素和氨基酸等 39 个变量的基础上，对 6 个甘草样品的质量排序如下：甘肃省定西市安定区甘草>陕西省临县甘草>甘肃省岷县甘草>甘肃省张掖市甘州区甘草>甘肃省定西市陇西县甘草>甘肃省平凉市灵台县甘草。39 个变量的多指标评价结果显示甘肃省定西市安定区的甘草质量最好，其次是陕西临县的甘草。在 39 个变量的基础上，可将 6 个甘草样品分为两组，并通过灰色因子聚类分析（GFCA）将 39 个变量分为两组。本研究采用灰色模式识别（GPR）、灰色因子分析（GFA）、灰色因子聚类分析（GFCA）等方法，以营养指标为基础，包括燃烧热、可燃性（甘草燃烧稳定性）、脂肪含量、氨基酸含量、灰分含量、粗纤维含量、微量元素含量等多个指标，建立了六种甘草样品的综合评价体系。该研究建立了六种不同产地甘草的多指标分析评价体系，为甘草的质量评价和综合利用提供了一定的理论依据和科学指导。

关键字 甘草；热重分析；灰色因子分析（GFA）；氨基酸；灰色因子聚类分析（GFCA）

参考文献

1.Zhou L, Jiang C, Zhang Y. COMBUSTION STABILITY AND METROLOGICAL ANALYSIS OF MULTIPLE INDEXES OF 5 KINDS OF RICE[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(6):5499-5514.

2.Zhou L, Jiang C, Lin Q. ENTROPY ANALYSIS AND GREY CLUSTER ANALYSIS OF 8 CHINESE MEDICINAL HERBS[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(8B):9045-9062.

3.Zhou L, Jiang C, Lin Q. Entropy analysis and grey cluster analysis of multiple indexes of 5 kinds of genuine medicinal materials[J]. SCIENTIFIC REPORTS, **2022**,12(1):6618.

4.Zhou L, Jiang C, Zhong T, et al. Entropy analysis and grey correlation coefficient cluster analysis of multiple indexes of 5 kinds of condiments[J]. FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY, **2022**,42:e81122.

5.Zhou L, Jiang C, Shi J, et al. GRAY PATTERN RECOGNITION AND GREY SYSTEM CLUSTER ANALYSIS OF MULTI-INDEXES OF FIVE KINDS OF TEA[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(3):2510-2521.

6.Zhou L, Zhang Q. MULTI-INDEX CHEMOMETRICS ANALYSIS OF FIVE KINDS OF TEA

PRODUCED IN YUNNAN, CHINA[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(10):10342-10354.

7.Zhou L, Hou S. Multi-indicator analytical study of 18 trace elements and fat in 5 beans based on entropy analysis (EA) and gray pattern recognition (GPR)[J]. INTERNATIONAL JOURNAL OF FOOD PROPERTIES, **2024**,27(1):616-631.

8.Zhou L, Zhang Q. Multiple indicators metrological analysis for 5 kinds of tea produced in Yunnan, China[J]. FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY, **2022**,42:e70922.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：报告

模仿活性追踪的算法设计在中亚苦蒿抗肝癌药效物质的研究

夏静静*、王晓婷、李娟、李金耀
新疆大学

现有谱-效关系的数据分析方法是将已有的算法应用在药效成分的挖掘，缺乏灵活性、针对性和稳定性。亟需符合中药药效成分分离过程，可以处理高维和低自由度的数据挖掘模式。 本项目在现有谱-效数据分析方法的基础上，引入集成算法和阈值设置，增强模型稳定性和药效物质筛选的准确性；基于自举采样算法，综合考虑成分间的协同作用对药效整体的影响，提高谱效的预测精度；利用权重自举采样和循环寻优法，创建多个活性成分与各成分间的组合数据集，模仿“活性追踪”的实验过程，以实现与中药分离过程一致的算法设计。将以上算法策略应用于新疆特色维药-中亚苦蒿抗肝癌活性成分的挖掘，分别从数据分析方法（现有谱效- 关系算法对比）和抗癌活性实验两个方面验证所提策略的有效性。本项目旨在为系统的研究中药谱-效关系提供技术支撑，加快药效成分的开发。为提高中医药数据挖掘的精度性、稳定性 、泛化性探索新的思路，也将为中药现代化的深入研究提供有益的借鉴。

关键字 化学计量学在分析化学中的应用；数据挖掘；谱-效关系；药效物质基础；中亚苦蒿

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

EEM- PARAFAC 方法应用于α-葡萄糖苷酶与污染物的相互作用研究

张静*
厦门大学嘉庚学院

α-葡萄糖苷酶（GAA）作为一类重要的糖苷水解酶，是维持人体血糖平衡的重要功能性蛋白质。长期以来，为实现高血糖人群的降糖，研究人员多关注于探寻具有 GAA 活性抑制作用的食品、药品，但鲜有研究关注于人体非主动摄取的外源物质对 GAA 正常生理功能可能产生的影响。鉴于此，本研究选取典型多环芳烃类物质—菲的羟基代谢产物 9-羟基菲（9-OHPhe），探究其对 GAA 活性功能的影响及潜在机制。为获得 9-OHPhe 与 GAA 的结合作用信息，PARAFAC 法被应用于光谱重叠的 9-OHPhe 和 GAA 的三维荧光光谱（EEM）数据的解析。9-OHPhe 对 GAA 的活性有抑制作用，相应的 IC50 值为 7.59±1.91 μmol L-1；PARAFAC 可有效应用于荧光光谱重叠的 GAA 和 9-OHPhe 反应体系的荧光数据解析，进一步分析表明 9-OHPhe 可引起 GAA 内源荧光的静态猝灭，两者能形成 1:1 复合物，在 298 K 下其结合常数为(8.91±0.68)×103 L mol-1；低浓度的 9-OHPhe 可使 GAA 的二级结构变得稳定，但过高浓度的 9-OHPhe 则会破坏 GAA 的结构稳定性。9-OHPhe 对 GAA 活性有明显抑制效应，提示相关外源污染物进入健康人体后经这一途径所可能引起的血糖平衡紊乱值得关注和深入研究。

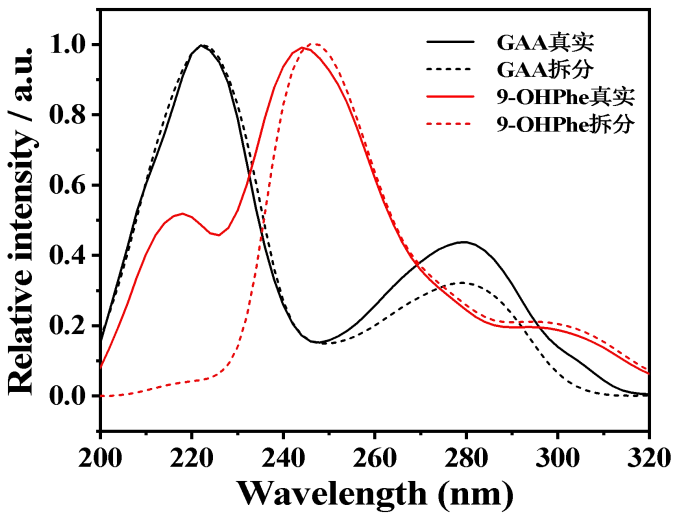


图 1 归一化后的 GAA 和 9-OHPhe 的真实激发光谱和 PARAFAC 拆分光谱对比

关键字 α-葡萄糖苷酶；9-羟基菲；三维荧光光谱；平行因子分析法；结合作用；活性抑制

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

化学计量学：实现基于拉曼光谱的大气颗粒物 pH 通用测量

崔晓宇*
天津大学

大气气溶胶的酸碱度对环境和气候有着深远的影响，但传统的光谱方法在测定海盐等大气颗粒物的 pH 值时存在显著困难。这些方法往往依赖于特定的化学组分或假设，可能会改变颗粒物的本质，从而无法准确反映颗粒物的实际状态。为了克服这些挑战，本研究开发了一种新的通用方法，利用微拉曼光谱技术结合化学计量学，以水作为光谱探针来直接测量单个颗粒物中的氢离子浓度([H+])。在本研究中，我们采用了多元曲线解析分析方法，从溶液光谱中提取出包含离子振动带和受离子影响的水的振动带的标准光谱。通过计算拉曼光谱与标准光谱之间的水合离子比率，我们能够评估每种离子的浓度分布。实验结果表明，可以为所有离子（包括 H+）建立具有高相关系数（R2 > 0.95）的定量模型。通过该方法对传统硫酸盐气溶胶颗粒的 pH 值进行了计算，并使用[HSO4-]/[SO42-]的比值作为参考，得出的标准误差为 0.09。进一步，对海盐气溶胶进行了检测，证明了该方法的广泛适用性。通过这项研究，我们展示了一种不受限于特定离子系统的通用方法，利用水这一最常见物质作为光谱探针，测量大气颗粒物的 pH 值。尽管如此，为了提高该方法的灵敏度，未来的工作仍需进一步优化。这一方法的开发为大气化学和环境监测领域提供了一种新的工具，有助于更准确地理解和预测气溶胶对环境的影响。

关键字 水探针，水合氢离子，pH 值，单个颗粒，化学计量学

参考文献

1. Cui, X., Tang, M., Wang, M., Zhu, T., **2021**. Water as a probe for pH measurement in individual particles using micro-Raman spectroscopy. Anal Chim Acta, 1186, 339089. https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.339089
2. Cui, X., Tang, M., Zhu, T., **2023**. A water probe for direct pH measurement of individual particles via micro-Raman spectroscopy. J Environ Sci, 149, 200–208. https://doi.org/10.1016/j.jes.2023.10.037

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

比色传感阵列结合机器学习对岩茶等级的快速鉴别研究

陈瑶[1,2]、王童*[2]
1. 湖南工业大学
2. 湖南大学

随着中国饮茶群体的不断扩大以及人们生活质量的提高，名优茶叶越来越受到人们的青睐，人们对名优茶叶的需求量也迅速增加。本研究利用智能手机开发了一种简单、廉价的基于指示剂置换原理的比色传感器阵列，用于快速识别不同种类岩茶（如牛栏坑肉桂，水仙，品种，普通肉桂）。利用不同种类岩茶中茶多酚和氨基酸含量的不同，使用苯硼酸和金属离子作为受体，以溴邻苯三酚红、邻苯二酚紫、锌试剂等为指示剂构建了一个 4×3 的比色传感器阵列，并应用该阵列对 4 类武夷山岩茶进行了检测。通过手机拍照生成比色传感阵列数据集，再将比色传感阵列数据集与机器学习相结合建立岩茶分类模型，并对数据进行分析。结果表明，该阵列能快速准确的分辨不同种类岩茶，分类准确度达到 100%。本研究的方法具有操作简单，无需使用大型仪器，视觉效果好等特点，在实时快速检测茶叶品质方面有潜在的应用价值。另外对探讨武夷岩茶分类的重要性，凝聚武夷岩茶的品牌力量，促进武夷山茶产业持续健康高质量发展具有一定的作用。

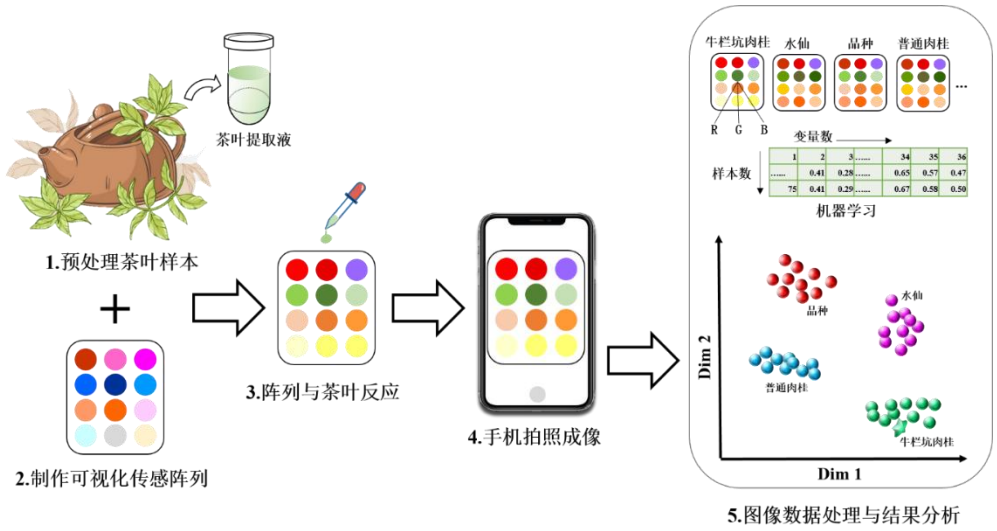


图 1 实验流程图

关键字 比色传感阵列；机器学习；岩茶等级；鉴别

参考文献

1. M. Yang, X. Zhai, X. Huang, M. Battino. *Food Chem.*, **2021**, 363, 130297.
2. 周有祥, 赵明明, 丁华, 严伟, 张毅, 王婧, 胡西洲, 龚艳胡, 定金. *湖北农业科学*, **2012**, 51(23), 5463.
3. S. Sun, K. Tu, X. Yan. *Analyst*, **2012**, 137(9), 2124-2128.
4. Y. Y. Chang, H. L. Wu, T. Wang. *J. Food Compos. Anal.*, **2023**, 121, 105365.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

近红外光谱检测癌细胞的研究进展

韩丽*、朗韦玮、董林毅
天津医科大学

近红外光谱主要反映含氢基团的振动信息，因此蛋白质、脂质、核酸等生物分子以及水分子的含量和结构信息均可以体现在近红外光谱上。恶性肿瘤细胞与正常细胞的化学结构和成分存在明显差异，并且癌症引起的异常代谢功能会导致生物组织和体液成分发生变化，从而影响光谱吸收，这使得近红外光谱有望成为探测生物体内癌变信息的有效工具。然而，近红外光谱的谱峰重叠严重，因此往往需要借助化学计量学方法对光谱进行解析，以有效提取癌症信息。在提高光谱分辨率方面，采用连续小波变换对正常肺上皮细胞和两种肺癌细胞(A549 和 H1975)培养液的光谱进行处理，获取了高分辨光谱信息，并发现三种细胞培养液在蛋白质酰胺基团的吸收强度存在差异。由于癌细胞的强代谢能力使得培养液中蛋白质的消耗较多，因此光谱强度降低。另一方面，水分子间的氢键作用容易受到分子周围环境变化的影响，因此利用水的光谱变化信息同样可以反映癌症信息。通过主成分分析对 HeLa 等三种细胞的光谱进行分类，发现不同氢键水结构的特征波长对于区分癌细胞和正常细胞具有重要价值。利用细胞培养基和反胶束分别模拟细胞外和细胞内的液体环境，结合连续小波变换和偏最小二乘回归对水的吸收波段建立 pH 定量模型，通过测定 pH 有望实现细胞癌变的检测。因此，利用近红外光谱变化可以探测肿瘤细胞与正常细胞之间的差异，这对于癌症的非侵入性、高灵敏度检测具有潜在的应用价值。

关键字 近红外光谱，化学计量学方法，癌症检测

参考文献

1. 朗韦玮，李嘉晨，董林毅，韩丽，*分析化学*, **2024**, 52, 1225-1233.
2. M. E. Raypah, J. Muncan, S. Sudik, A. F. Omar, M. H. Mail, R. Tsenkova, A. Seeni. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **2022**, 227, 104611.
3. J. Li, F. Liang, L. Han, X. Yu, D. Liu, W. Cai, X. Shao, *Chemosensors*, **2023**, 11, 425.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于 HPLC-DAD 指纹图谱结合化学计量学的肉桂掺假鉴定

孙小东*、张敏、高秀丽
贵州医科大学

由于受经济利益驱使的肉桂掺假事件的增加，确定肉桂的真实性具有重要意义。本研究提出采用非靶向 HPLC-DAD 指纹图谱结合化学计量学用于掺杂低廉中国肉桂的锡兰肉桂的真实性鉴定。选取 HPLC-DAD 和 HPLC-UV 指纹图谱作为肉桂表征的化学描述符，以评估肉桂的真实性并量化其掺假水平。采用主成分分析（PCA）、随机森林（RF）、偏最小二乘-判别分析（PLS-DA）和 N 维偏最小二乘-判别分析（NPLS-DA）对锡兰肉桂样品进行真实性鉴别。相较于 RF 模型，PLS-DA 和 NPLS-DA 模型获得了更令人满意的分类结果，训练集和内部验证集的分类准确率均达到了 100%。此外，采用偏最小二乘（PLS）和 N 维偏最小二乘（N-PLS）回归算法用于三个锡兰肉桂掺假案例中廉价中国肉桂掺假水平的量化。基于 250 nm 和 290 nm 的 HPLC-UV 指纹图谱构建的 PLS 回归模型的定量预测性能优于 N-PLS 回归模型，其决定系数 R^2 大于 0.988，验证集的预测均方根误差（RMSEV）低于 13.03%。结果表明，非靶向 HPLC-DAD 指纹图谱结合化学计量学可以成为鉴定和定量锡兰肉桂掺假的有前景的方法。

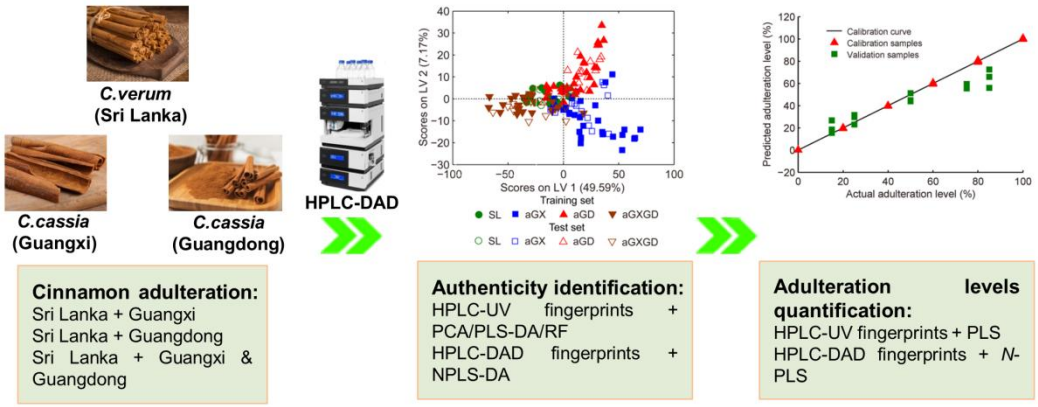


Fig. 1 Schematization of the global analysis flow chart

关键字 肉桂；HPLC-DAD 指纹图谱；化学计量学；掺假；食品真实性

参考文献

1. Cantarelli M Á, Moldes C A, Marchevsky E J, et al. Low-cost analytic method for the identification of Cinnamon adulteration[J]. *Microchemical Journal*, 2020, 159: 105513.

2. Pages-Rebull J, Pérez-Ràfols C, Serrano N, et al. Analytical methods for cinnamon authentication[J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2024: 104388.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于激发-发射矩阵荧光高光谱成像的信息加密和解密

董明月、吴海龙*、王童、任航、贺烨、俞汝勤
湖南大学

加强化学防伪体系对信息安全至关重要，需要跨学科的合作与创新以应对不断发展的防伪技术和日益严格的安全要求。荧光防伪作为一种光谱防伪技术得到了广泛的研究。但当不同荧光组分的峰位接近时，容易引起串色效应，阻碍了其在实际应用中的广泛推广。本工作提出了基于激发-发射矩阵荧光高光谱成像（EEM-HSI）的信息加密与解密用于防伪，并利用三线性分解算法，三向切除-交叉交替三线性分解算法（TDR-ATLD）解决了荧光峰重叠的问题。本工作首先通过模拟荧光成像数据说明了所提方法的可行性，包括荧光峰轻微重叠和严重重叠的 2D 和 3D 防伪。模拟结果表明，所提方法比其他方法更适合处理不同的重叠情况。此外通过实验证明了所提方法的实用性。本工作将三种罗丹明荧光染料（罗丹明 123、罗丹明 6G、罗丹明 B）加入红色水彩中制备防伪油墨，并制作复合防伪图案。然后利用 TDR-ATLD 辅助 EEM-HSI 获取不同罗丹明荧光染料对应的防伪信息。结果表明所提方法可用于荧光防伪，使荧光材料得到更加广泛和有效的应用。

关键字 化学防伪；荧光材料；激发发射矩阵荧光高光谱成像；三线性分解算法

参考文献

1. X. Yu, H. Zhang, J. Yu, *Aggregate*, **2021**, 2(1), 20-34.
2. M.Y. Dong, H.L. Wu, T. Wang, et al., *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **2023**, 237, 104823.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

三线性分解算法与深度学习算法在定量校正方面的比较

王小芝、吴海龙*、王童、张嫣然、俞汝勤
湖南大学

本工作从实际应用的角度出发，系统地比较了三线性分解（TLD）算法与深度学习（DL）算法在不同数据集上的性能表现。TLD 算法选取了代表性的交替三线性分解（ATLD）和平行因子分析（PARAFAC）。DL 算法选取了经典的卷积神经网络（CNN）和深度神经网络（DNN）。ATLD 和 PARAFAC 因具有“二阶优势”，在分析化学复杂体系的精准定性和定量研究中取得了显著的成功。CNN 和 DNN 因具有较强的性能，近年来在各个领域得到了广泛的关注。本工作利用 6 组模拟数据和 4 组真实数据，考察了校正集的样本数、未知干扰的存在和组分间的共线性程度等因素对上述算法性能的影响。通过预测集的平均加标回收率、标准偏差和预测均方根误差等指标来评价各算法的性能。研究结果表明：（1）无未知干扰存在时，即使组分间存在严重共线性，TLD 算法和 DL 算法均能获得令人满意的定量结果；（2）存在未知干扰时，即使增加校正集样本数，DL 算法也难以直接精准定量感兴趣分析物的浓度，而 TLD 算法因具有“二阶优势”，不仅能精准定量分析物浓度，还能提供具有物理化学意义的定性信息。本工作比较了主流 TLD 算法与 DL 算法在复杂体系中的实际应用价值，为分析研究者在不同场景中选择合适算法提供了理论依据和参考指南。

关键字 三线性分解算法；深度学习算法；复杂体系；定量

参考文献

1. H. L. Wu, T. Wang, R. Q. Yu, *TrAC Trend. Anal. Chem.*, **2020**, 130, 115954.
2. Y. LeCun, Y. Bengio, G. Hinton, *nature*, **2015**, 521(7553), 436-444.
3. V. K. Chauhan, J. Zhou, P. Lu, S. Molaei, D. A. Clifton, *Artif. Intell. Rev.*, **2024**, 57(9), 1-29.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

Aptamer 增敏三维荧光结合“数学分离”用于食品中的三种四环素的高灵敏高选择性定量

张嫣然、吴海龙*
湖南大学

四环素类抗生素（TCs）具有广谱抗菌性和动物生长促进作用，使其在医疗和畜牧养殖业得到了广泛的应用，然而，TCs 在动物源性食品中的过度残留会使得人体器官受到损害，因此为防止具有 TCs 抗生素残留的动物产品流入市场，预先对产品进行高灵敏度检测是非常有必要的。荧光（FL）方法具有操作简单、成本低、灵敏度高和响应快等优点，它被认为是 TCs 检测的有前途的分析工具之一。核酸适配体（Aptamer）的本质是单链 DNA 或 RNA 寡核苷酸，一种特定的 Aptamer 能够通过与 TCs 特异性结合增强其荧光信号，达到对抗生素的痕量分析。PARAFACM 二阶校正算法可以高效、准确地对具有缺失值的三维数据阵列进行“数学分离”，提取目标分析物的完全选择性信号，实现存在未知干扰的情况下多组分同时定量检测。本研究选择四环素（TC）、金霉素（CTC）和土霉素（OTC）为研究对象，通过筛选确定能够选择性结合 TCs 的核酸适配体，以增强其在三维荧光光谱下的强度，并采用 PARAFACM 二阶校正方法对鸡蛋和猪肝中的多组分 TCs 进行高灵敏度高选择性同时定量检测。

关键字 四环素；核酸适配体；三维荧光；化学计量学；定量分析

参考文献

1. Y C Zhao, B W Gao, Y J Chen, J W Liu, *Analyst.*, **2023**, 148, 1507-1513.
2. X Q Tan, Y P Liang, Y Y Ye, Z H Liu, J X Meng, F Y Li, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 829-836.
3. M Ntakatsane, P Chen, J S Liu, P Mosebi, L L Xu, P Matebesi, W W Cui, Y H Wang, *J. Food Meas. Charact. Charact.*, **2020**, 14, 1892-1900.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

视频智能目标检测实现中药饮片的快速在线鉴定

贺烨、王童*、吴海龙、董明月、俞汝勤
湖南大学

鉴于中药饮片品质鉴别对中医药产业的重要性及传统检测方法的局限性，本研究依托 YOLOv8 人工智能算法的高效实时目标检测能力，探索其在中药材视频目标检测中的应用。首先使用智能手机进行视频拍摄，收集了大量不同中药饮片的视频数据，并从中提取关键帧对预训练的 YOLOv8 进行微调。结果表明，微调后的 YOLOv8 算法在复杂背景和动态场景下仍能保持良好的检测性能，能够有效识别视频中的药材，并输出其类别。综上所述，利用智能手机进行拍摄，再基于 YOLO 算法可以实现对不同中药饮片的自动化鉴定，为药材的鉴别、质量控制和监管提供了新的分析技术手段。未来，将继续探索目标检测算法在更多应用场景中的潜力，推动目标检测技术的进一步发展。

关键字 YOLO 算法，视频分析，人工智能，目标检测，药材鉴定

参考文献

1. Qiu H.; Zhang J.; Zhuo L; et al. Herit Sci. **2024,**12: 231.
2. Li M.; Xiao Y.Y.; Zong W.Y; et al. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering. **2024**,40: 201-209.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

前表面激发-发射矩阵荧光光谱结合化学计量学用于西洋参的真伪鉴别

尹小玥、王童、吴海龙*
湖南大学

人参，是指西洋参（Panax quinquefolium L.）等人参物种的根部。作为全球广泛消费的草药产品，其主要功效在于缓解疲劳及增强免疫系统功能，同时，它还具有一些新的治疗功能，例如抗癌、抗氧化剂、降糖作用、免疫调节和壮阳效果。在商业市场上，不良商家会在高价的西洋参中掺入便宜的桔梗，这不仅降低了疗效，甚至对患者的健康造成了危害。因此，为了更好地保护消费者权益，本研究提出了一种结合三向切除交替三线性分解（TDR-ATLD）解卷重构、N 维偏最小二乘判别分析法（N-PLS-DA）与前表面激发-发射矩阵（FF-EEM）荧光光谱法的新策略，用于西洋参的真伪鉴别。FF-EEM 是一种快速、绿色的检测技术，可以快速无损地检测不透明的液体或固体样品，无需复杂预处理，实验样品也得到回收利用。而 TDR-ATLD 算法凭借其“数学分离”功能，能够有效排除未知背景干扰对分类的影响。本研究提出的方法为西洋参的真伪鉴别提供了一种新的、有效的技术手段，有望为规范人参市场秩序、保障消费者权益提供有力支持。

关键字 西洋参；前表面激发-发射矩阵荧光光谱；三向切除交替三线性分解；真伪鉴别

参考文献

1. Kim, Y.; Lee, J.-W.; Jo, I.-H.; Kwon, N.; Kim, D.; Chung, J.-W.; Bang, K.-H.; Sung, J. *Foods*, **2023**, 12, 136.
2. Y. Pan, M. Yang, M. Zhang, M. Jia, *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2019**, 294, 48-54.
3. Guo, C.; Dong, J.; Deng, L.; Cheng, K.; Xu, Y.; Zhu, H.; Deng, A.; Zhou, X.; Qin, H.; Wang, Y. *Molecules*, **2023**, 28, 4332.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

1D-2D 融合卷积神经网络结合激发-发射矩阵荧光光谱用于六安瓜片的采集时间鉴别

任航*、吴海龙
湖南大学

不同采集时间的绿茶品质不同，价格也有差异，若混淆不同采集时间的绿茶出售，消费者们也难以区分，不少商家以此来获取利润。而传统鉴别茶叶采集时间的方法耗时长，试剂消耗也大。随着深度学习技术的快速发展，其在多个领域的应用日益广泛，特别是在图像识别、信号处理等方面展现出强大的能力。本研究构建了一个创新的卷积神经网络（CNN）模型，该模型结合了 1D-CNN 和 2D-CNN 的优势，使得该模型能够更全面、深入地挖掘数据中的特征信息。这种技术能够捕捉到茶叶在特定激发光下的荧光发射特性，为茶叶品质的鉴别提供有力的数据支持。我们将这些光谱信息输入到构建的 CNN 模型中，通过模型的训练和学习，实现了对清明节前后六安瓜片信息的有效提取和区分。这一研究成果不仅有助于提升茶叶产业的智能化水平，也为深度学习技术在农产品品质鉴别领域的应用提供了新的思路和方向。

关键字 卷积神经网络；六安瓜片；模式识别

参考文献

1. A.P. Pagani, G. Camargo, G.A. Ibañez, et al. *Analytical Chemistry*, **2024**, 96, 4845-4853.
2. Gu, H.W., Yin, X.L., Ma, Y.X., et al. *LWT.* **2020**, 130, 109688.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

化学计量学方法结合三维荧光技术用于桃仁中苦杏仁苷的测定

常海燕、吴海龙*
湖南大学

桃仁是蔷薇科植物桃或山桃的成熟干燥种子，具有丰富的药用价值。它主要用于治疗经闭、癥瘕、热病蓄血、风痹、疟疾、跌打损伤以及瘀血肿痛和血燥便秘等症状。作为我国传统医学中重要的活血化瘀药物，桃仁的药理活性明确，临床疗效显著，已广泛应用于各类成方制剂中。桃仁中的主要成分苦杏仁苷是一种糖苷化合物，由两种葡萄糖和一种腈组成。食用后，苦杏仁苷会在体内被酶促代谢为氰化氢。适量的氰化物可以被人体解毒，但短时间内大量接触则可能导致严重健康问题。因此，为了更好地保护消费者的身体健康，亟需开发和验证可靠的分析方法，以准确测量桃仁中的苦杏仁苷含量。为此，本研究提出了一种结合交替三线性分解算法（ATLD）与荧光分光光度法的新策略，用于定量测定桃仁中的苦杏仁苷。ATLD 算法具有“二阶优势”，能够有效应对背景干扰与待分析物荧光光谱的严重重叠，通过化学计量学的“数学分离”方法，替代传统的物理化学分离技术，从而实现感兴趣组分的有效定量。该实验过程简便迅速，避免了复杂的样本预处理，显著提高了分析结果的准确性。

关键字 交替三线性分解算法; 苦杏仁苷; 定量分析

参考文献

1. Carolyn M Makovi, Christine H Parker, Z Kai, *Journal of Aoac International.*, **2023**, 106(2): 457–463,
2. W. HaiLong, Shibukawa M, Oguma K. *Journal of Chemometrics.*, **1998**, 12(1): 1-26

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

通过数据质量导航的机器学习策略结合化学直觉提升泛化能力

杨松燃、孙明、石超杰、蒲雪梅*
四川大学

准确泛化在真实世界数据上是机器学习在现实应用中面临的最困难的挑战之一。大部分机器学习工作都聚焦于算法以及特征表征上。然而，数据质量作为机器学习的基础往往受到很大程度地忽视，这也导致机器学习领域缺乏数据评估及处理的方法。在这些挑战和需求的驱动下，我们选取了有关有机半导体分子电荷迁移率的重要参数重组能作为预测案例，提出了一种基于化学直觉的数据质量导航策略以提升机器学习模型的泛化能力。我们开发了基于有机半导体分子结构特点的数据多样性评估策略、基于预测准确度的数据质量评估方法、基于 K 折交叉验证不确定度的数据过滤方法以及基于聚类与分层抽样的数据划分技术。由此获得了一个可靠且多样的代表性重组能数据集（15989 个分子）。在特征表征方面，通过考虑重组能的化学机理、有机半导体分子的结构特点以及模型算法，我们提出了一种特征互补策略。此外，我们还设计了由两个深度学习网络构成的集成学习框架，以避免单一模型陷入局部最小值的风险。我们的模型在面对多样的化学结构、广泛的分布的重组能标签以及真实有机半导体分子时，展现出了强大的鲁棒性和泛化能力，显著优于 8 个竞争模型。我们的研究不仅提供了一个快速筛选高性能有机半导体分子的可靠工具，还为机器学习模型泛化能力的提高提供了方法上的参考和指导。

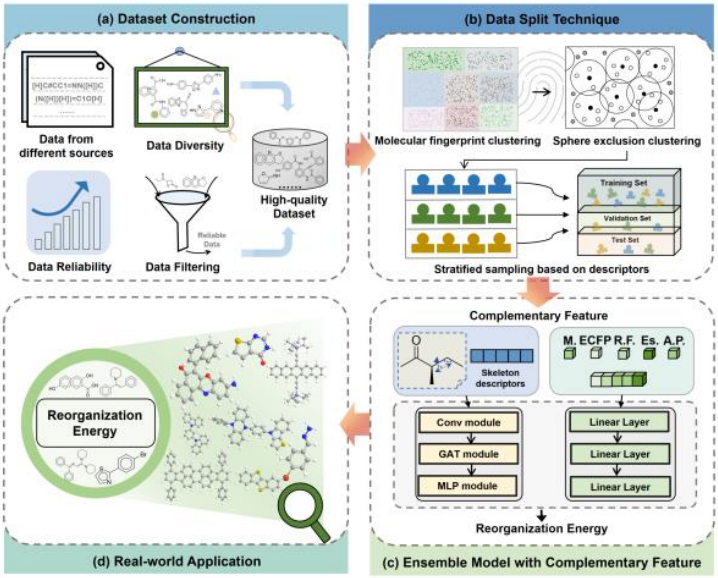


Figure 1. Workflow of constructing an universal reorganization energy prediction model.

关键字 机器学习；模型泛化；数据质量；数据划分；集成学习

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

语言模型助力纳米抗体的热稳定性预测

毛俊、宋远鹏、刘静、蒲雪梅*
四川大学

纳米抗体是一种单结构域小型抗体，近年来，在多个领域中开展了广泛的研究和应用。在纳米抗体的工程与设计中，为了保证其功能性和有效性，热稳定性至关重要[1]。随着纳米抗体数据的快速增长[2, 3]，湿实验和分子模拟方法通常伴随着高成本、时间周期长、 数据质量有限以及批次效应等挑战，却为数据驱动的人工智能方法提供了新的机遇。 在这项研究中，我们构建了实验数据集 Tm-514 和理论数据集 Q-704，并开发了两个深度学习预测模型。 NBsTem_Tm 和 NBsTem_Q 使用语言模型结合深度学习方法，分别用于预测纳米抗体的熔融温度 Tm 和纳米抗体热稳 定性程度 Qclass。五重交叉验证结果显示，NBsTem_Tm 的 Pearson 为 0.920，MAE 为 2.524 ℃，NBsTem_Q 的 Accuracy 为 0.855。比较研究发现，NBsTem_Tm 不但优于最近报道的纳米抗体 Tm 预测模型 TEMPRO[1]，也显著优于蛋白质 Tm 预测模型 DeepSTABp [4]。此外，结合抗体语言模型的序列补齐功能，两个模型还支持对缺失残基序列进行预测。值得注意的是，Qclass 是我们基于大型分子动力学模拟的[5, 6]结合自定义规则而提出的一个新指标，用于衡量纳米抗体的热稳定性程度。研究表明，Qclass 能够与 Tm 有效互补，用于综合评估纳米抗体的热稳定性。最后，我们还对 INDI 数据库[7]的千万级纳米抗体序列进行了预测和分析，填补了热稳定性性质的空白。综上所述，NBsTem_Tm 的出色性能和 NBsTem_Q 的辅助作用能够作为纳米抗体热稳定性快速预测和筛选的解决方案，并促进纳米抗体的研究和设计。

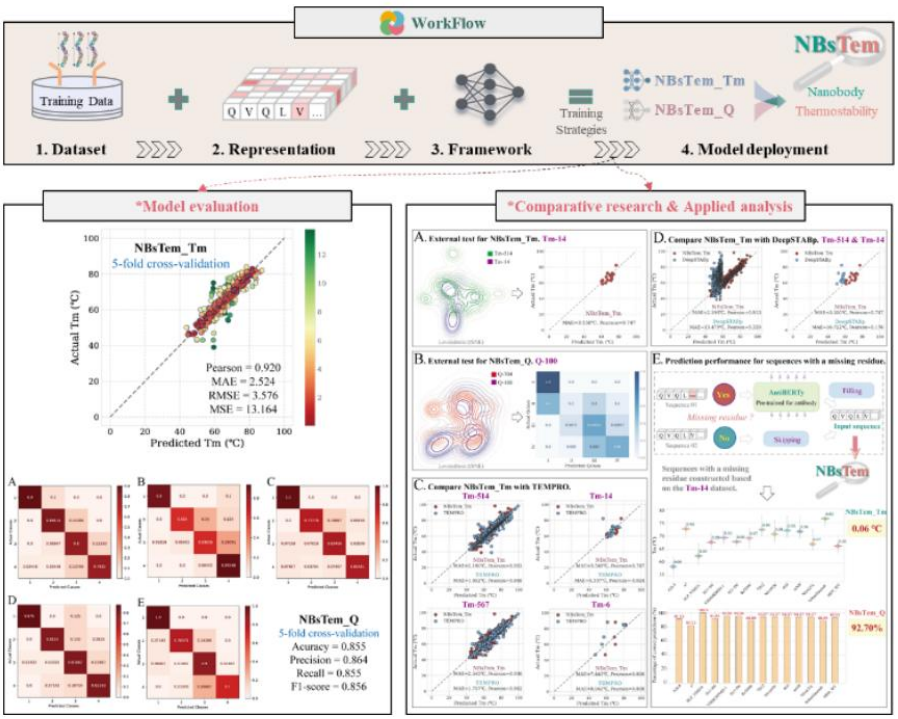


Figure 1. Overview of research framework.

关键字 纳米抗体，热稳定性，分子动力学，深度学习，网络服务器

参考文献

1.Alvarez, J.A.E. and Dean, S.N., Sci Rep, **2024**. 14(1): 19074.

2.Feng, X. and Wang, H., ACS Pharmacol Transl Sci, **2023**. 6(7): 925-942.

3.Schneider, C., Raybould, M.I.J., and Deane, C.M., Nucleic Acids Res, **2022**. 50(D1): D1368-D1372

4.Jung, F., Frey, K., Zimmer, D., et al., Int J Mol Sci, **2023.** 24(8).

5.Zabetakis, D., Shriver-Lake, L.C., Olson, M.A., et al., Protein Sci, **2019**. 28(10): 1909-1912.

6.Bekker, G.J., Ma, B., and Kamiya, N., Protein Sci, **2019**. 28(2): 429-438.

7.Deszynski, P., Mlokosiewicz, J., Volanakis, A., et al., Nucleic Acids Res, **2022**. 50(D1): D1273-D1281.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于机器学习的含能共晶筛选

刘静、胡亦晨、李尚明、蒲雪梅*
四川大学

共晶工程是一种通过分子间非共价键相互作用在分子层面上改善材料物理化学性能的技术，已广泛应用于药物、有机功能材料和含能材料等领域。尽管共晶配体分子具有巨大的潜在开发空间，但在含能材料领域，受限于现有共晶样本的数量和质量，虚拟筛选方法的应用仍十分有限。这种匮乏与对高能低感含能材料日益增长的需求形成了鲜明的对比。

针对这一挑战，本研究基于含能分子的化学结构提出了一种新的机器学习筛选策略，旨在加速含能共晶材料的发现。在研究中，我们从知识驱动，物理模型和机器学习三个角度探讨虚拟筛选方法的可靠性与局限性。鉴于机器学习在方法评估中展现出的优异性能以及现有含能共晶小样本数据的局限，我们通过定义特定的化学键和官能团构建了一个高质量，多样且具有代表性的类含能共晶数据集（共 1572 个样本）。此外，我们通过融合特征获得信息丰富的样本表征，并引入迁移学习和数据增强策略来解决数据集中正负样本不平衡的问题。我们所构建的模型在训练集和测试集上均表现出较高的准确度。最终，利用该模型在 CL-20 含能分子的潜在配体空间中进行筛选，并成功通过实验合成 4 种新的含能共晶。

综上所述，本研究不仅为含能共晶的筛选提供了一个高效准确的工具，同时所构建的高质量数据集为进一步推进机器学习在含能共晶领域的应用奠定了坚实的基础，提供了宝贵的数据参考。

关键字 机器学习，数据增强，共晶预测，含能材料

参考文献

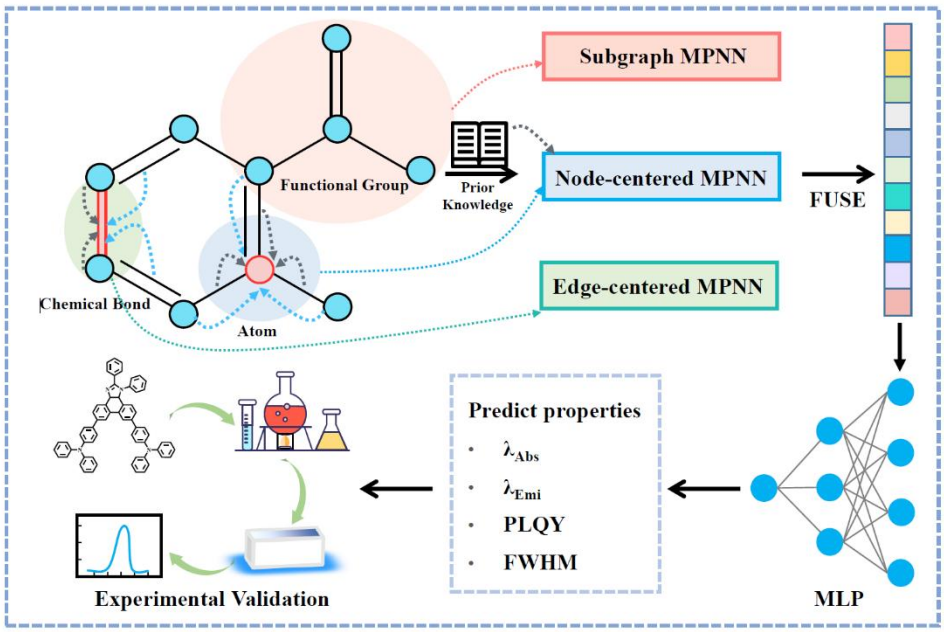
1. Bennion J C, Matzger A J.,*Acc. Chem. Res*., **2021**, 54, 1699-1710.
2. Andrea Erxleben, *Pharmaceutics*, **2020**, 12, 834.
3. Michael K., Bellas, Adam J., *Angew. Chem. Int. Ed*., **2019**, 58, 17185-17188.
4. Yuanyuan Jiang, Zong wei Yang, Xuemei Pu, *Nat. Commun*.,**2021**,12:5950.
5. Devogelaer J-J, Meekes H, Tinnemans P, *Angew. Chem. Int. Ed*, **2020**, 59,21711-21718.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

增强化学直觉的特征学习以提升光学性质的预测性能

孙明、富彩霞、石超杰、粟皓铭、蒲雪梅*
四川大学

发光分子因其光学特性而广泛应用于多个领域。因此，探索一种快速准确的光学性质预测方法具有重要意义。为此，我们通过增强化学直觉的子图和边的学习，并结合先验领域知识，在经典消息传递神经网络（MPNN）的基础上，开发了一种最先进的深度学习框架，从而可以从有限的数据集中更充分地捕获与光学特性相关的结构特征。受益于技术优势，我们的模型在五个不同的光学性质数据集上，明显优于的八个竞争的机器学习模型，在预测四个重要光学特性（吸收波长、发射波长、光致发光量子产率和发射半峰宽）方面达到了迄今为止的最高精度，展示了其健壮性和通用性。更重要的是，基于我们的预测结果，成功合成并表征了一种新的深蓝色发光分子 PPI-2TPA。实验结果与我们的预测一致，清楚地证实了我们的模型作为光学性质的快速可靠预测工具的应用潜力。



关键字 发光分子 深度学习 性质预测

参考文献

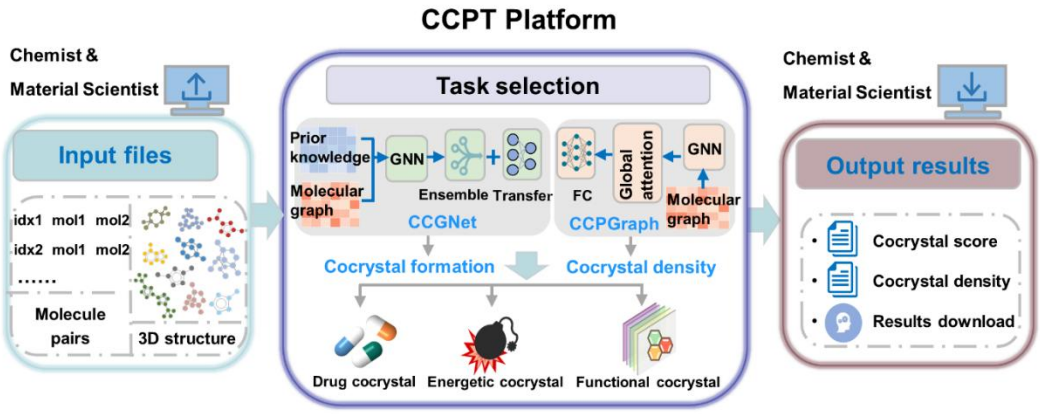
1. M. Sun, C. Fu, H. Su, R. Xiao, C. Shi, Z. Lu and X. Pu, Chem. Sci., **2024**, Advance Article, DOI: 10.1039/D4SC02781G.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

共晶预测工具(CCPT):基于深度学习辅助共晶筛选和密度评估的 Web Server

郭佳丽[1]、杨松燃[1]、王程辉[1]、刘静[1]、郭延芝[1]、杨宗纬[2]、赵雪燕[2]、蒲雪梅*[1]
1. 四川大学
2. 中国工程物理研究院化学材料研究所

共晶工程作为一种分子修饰策略，在化学和材料领域都取得了巨大的成功。近年来，为了减少实验的时间和人工成本，研究者开始引入人工智能的机器学习来加速共晶的开发。尽管这些模型的开发在理论上是成功的，但它们的使用需要专业的计算机操作和大量的人为干预，从而阻碍了模型在实际中的应用。为了填补理论与实际应用之间的空白，我们开发了一个一站式的共晶预测 web server (CCPT)，该 web server 集成了两款先进的深度学习模型，具有高泛化能力和准确性，包括一个共晶筛选模型和一个共晶密度模型。用户只需上传潜在分子对文件并选择任务类型，CCPT 就能自动执行相关特征描述符的计算和预测任务（共晶形成预测及共晶密度预测）。当预测完成后，所有预测结果将自动整理成文件格式，用户可以在网页上查看结果并下载。在整个预测过程无代码操作，工作流程精简，仅需要少量的人为干预，因此对于用户，特别是实验研究者来说非常简单友好。CCPT 可在 http://www.scuccpt.cn 免费访问。我们希望 CCPT 将成为一个有用的设计工具，用于各种共晶领域。



关键字 机器学习；共晶预测

参考文献

1. Y. Jiang, Yang, Z. Yang, J. Guo, H. Li, Y. Liu, Y. Guo, M. Li, X. Pu, *Nat. Commun.*, **2021**, 12, 5950.
2. J. Guo, M. Sun, X. Zhao, C. Shi, H. Su, Y. Guo, X. Pu, *J. Chem. Inf. Model.*, **2023**, 63, 1143-1156.
3. J. Guo, S. Yang, C. Wang, J. Liu, Y. Guo, Z. Yang, X. Zhao, X. Pu, *Cryst. Growth Des.*, **2024**, Doi: 10.1021/acs.cgd.4c00915.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于疾病-基因-药物异构网络预测药物靶向基因

何键、李梦龙、郭延芝*
四川大学

阐明药物与基因间的相互作用对于提高药物治疗的有效性与安全性至关重要。通过计算机方法辅助基因药物关联对的发现可以解决传统实验成本高昂、耗时且风险较大的问题。现有基因药物关联预测研究面临数据稀疏、特征提取复杂和模型缺乏可解释性等问题，基于此我们开发了一个结合图嵌入算法和集成学习的潜在基因药物关联对预测模型——DGIMPHX。DGIMPHX 通过利用基因-疾病-药物网络、基因表达谱和药物结构序列实现基因和药物的表征，与现有研究方法比较 DGIMPHX 预测准确率达到了 0.8870，表现出明显的优越性。除此之外，DGIMPHX 提出利用节点信息的相似性对未出现在训练数据中的新节点进行预测的新思路，实现了在归纳学习场景下的目标交互预测。最后，针对白血病进行的案例研究和分子对接结果也进一步证明了 DGIMPHX 在推断作用于基因的候选药物方面具有很强的可行性。

关键字 关联预测；机器学习；药物再利用；白血病

参考文献

1. Bai, P., Miljković, F., John, B. Nat Mach Intell. **2023**, 5: 126–136.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于激光诱导击穿光谱结合随机森林的钕铁硼合金中稀土元素快速定量分析

张容玲[1]、周嘉俊[1]、任旭东[2]、张天龙[1]、汤宏胜[1]、李华*[1,3]
1. 西北大学
2. 包头稀土研究院
3. 西安石油大学

钕铁硼（NdFeB）材料具有优异的综合磁性能，在稀土磁性材料领域中发挥着关键作用，是支撑现代高新技术产业的重要基础材料之一。在 NdFeB 合金的生产中，稀土元素（REEs）的控制直接关系到 NdFeB 材料的质量和资源利用效率。因此，预测 NdFeB 合金中稀土元素含量对于产品质量控制、提高生产效率以及减少稀土材料行业的能耗具有重要的研究意义和应用价值。本研究采用激光诱导击穿光谱（LIBS）结合随机森林（RF）方法，对 NdFeB 合金中的四种稀土元素（Nd、Pr、Tb 和 Dy）进行定量分析。首先，利用主成分分析-马氏距离（PCA-MD）对原始 LIBS 光谱进行筛选；其次，考察了不同数据处理方法对筛选后 LIBS 光谱的影响，并从预处理后的光谱数据中进行变量重要性测量（VIM）特征变量的提取。为了进一步验证模型的预测性能，对比了基于不同方法的 RF 模型的预测结果。最终，基于优化后的光谱、选定的特征变量和参数，建立 PCA-VIM-RF 校正模型。在校正模型的构建过程中，使用留一交叉验证（LOOCV）作为优化 PCA-MD 方法、光谱预处理方法和变量重要性阈值的评价指标。结果表明，PCA-VIM-RF 模型的预测性能优于基于原始光谱的 RF 校正模型。对于 Nd、Pr、Tb 和 Dy 元素的 PCA-VIM-RF 校正方法，R^2_{CV} 分别为 0.9991、0.9998、0.9986 和 0.9984，$RMSE_{CV}$ 值分别为 0.06296%、0.02788%、0.04647%和 0.05252%。R^2_P 值分别为 0.9508、0.9975、0.9691 和 0.9457，$RMSE_P$ 值分别为 0.6082%、0.09205%、0.5776%和 0.2631%。因此，LIBS 结合 PCA-VIM-RF 算法是一种有前景的 NdFeB 合金稀土元素快速定量分析方法，为未来稀土材料的研究、开发和质量控制提供新的思路和新策略。

关键字 激光诱导击穿光谱；稀土元素；钕铁硼合金；机器学习

参考文献

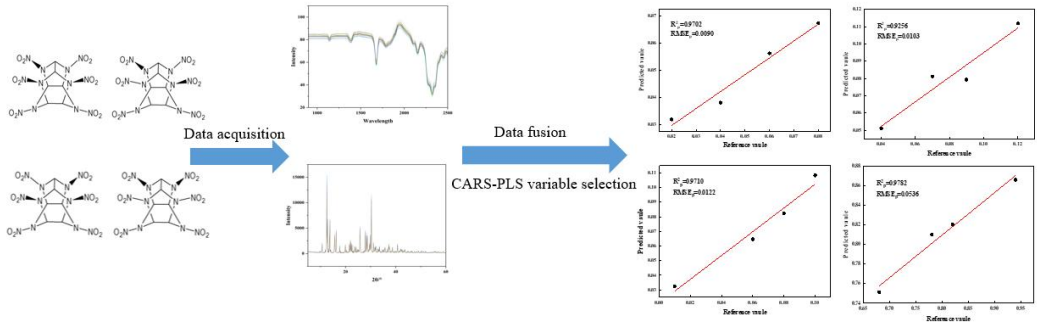
1. T. T. Chen, T. L. Zhang, H. Li, et al., *TrAC-Trends Anal. Chem.*, **2020**, 133, 116113.
2. J. J. Zhou, S. F. Hu, X. D. Ren, et al., *Spectrochim. Acta B*, **2024**, 217, 106957.
3. 周嘉俊，李茂刚，张天龙，等. 中国激光, **2024**, 51, 179-187.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于 NIR-XRD 光谱融合结合偏最小二乘（PLS）的 CL-20 不同晶型定量分析

周利园[1]、张群[1]、王德祥[1]、张天龙[1]、刘国权[2]、李华[1]、汤宏胜*[1]
1. 西北大学
2. 西安近代化学研究所

六硝基六氮杂异伍兹烷(CL-20)是目前已应用的能量密度最高的单质炸药之一，在常温常压下存在α、β、γ以及ε四种晶型，其中ε-CL-20 因其卓越的能量密度与安全稳定性，成为应用和研究的重点[1]。然而，ε-CL-20 在不同环境条件及外部刺激时，容易发生晶型转变，从而影响到 CL-20 基复合含能材料的稳定性及安全性，进而影响到武器系统的可靠性[2]。因此，精确分析与预测复合含能材料中 CL-20 的晶型含量，对于优化 CL-20 基复合含能材料制备工艺、提升产品质量与安全性具有重要意义。本研究致力于探索一种 CL-20 中不同晶型的快速定量分析方法，通过近红外光谱(NIR)与 X-射线衍射(XRD)技术实现了 CL-20 中不同晶型的快速定量分析。首先，采集了混合晶型样品的 NIR 和 XRD 光谱数据，并基于 NIR 和 XRD 数据分别建立了偏最小二乘(PLS)校正模型，探讨了不同预处理方法及其组合对模型性能的影响。其次，利用协同区间偏最小二乘法(SIPLS)、向后区间偏最小二乘法(BIPLS)和竞争性自适应重加权采样法(CARS)的变量选择方法对校正模型进行了优化，提升了α-CL-20、β-CL-20 以及ε-CL-20 定量分析的准确性。最后，将 NIR 与 XRD 数据进行融合[3]，在最优的光谱预处理和变量选择方法条件下，进一步优化了α-CL-20、β-CL-20、γ-CL-20、ε-CL-20 的定量分析模型。研究结果表明，通过数据融合建立的模型相较单一光谱模型的性能具有显著提升，对四种 CL-20 晶型（α、β、γ和ε）的定量分析均取得了较好的预测效果，特别是γ-CL-20 的预测性能得到显著提升，其所建立的 CARS-PLS 模型对α-CL-20、β-CL-20、γ-CL-20 和ε-CL-20 的预测集决定系数(R2P)分别达到了 0.9256、0.9702、0.9710 和 0.9782，对应的均方根误差(RMSEP)分别为 0.0103、0.0090、0.0122 和 0.0536。该方法具有较高的准确性和可靠性，为含能材料中 CL-20 晶型分析提供了一种有效的分析策略。



关键字 CL-20；偏最小二乘；定量分析；X-射线衍射；近红外光谱；数据融合

参考文献

1. Jin J, Lou S, Wang Q, et al. An overview on CL-20 synthesis and key issues with the TAIW

route, along with improvement strategies[J]. Journal of Energetic Materials, **2024**: 1-36.
2. 王志强,张浩斌,刘渝,等.不同晶体特性 CL-20 热晶变规律与动力学[J].含能材料,**2023**,31(02):142-151.
3. Jingwen Zhu, Yu Chen, Jihong Deng, Hui Jiang,Improve the accuracy of FT-NIR for determination of zearalenone content in wheat by using the characteristic wavelength optimization algorithm,Spectrochimica acta. Part A, Molecular spectroscopy, **2024**, 313:124169

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

拉曼光谱结合偏最小二乘法定量分析水中聚乙烯和聚苯乙烯两种微塑料

王鑫、丁建明、赵文敏、张容玲、周利园、张天龙、汤宏胜、李华*
西北大学

微塑料(MPs)作为一种水环境的新兴污染物，具有极性结构、粒径小(通常小于 5 mm)、比表面积大、稳定性好和生物降解难等特点，能够对水生生物的正常生理活动产生不利影响，并在包括人类在内的生物体内积聚，进而对心血管[1]、消化[2]和呼吸系统[3]等产生严重危害。因此亟需建立水环境中 MPs 的快速且准确的定量分析方法。本研究将拉曼光谱结合偏最小二乘（Partial least squares， PLS）用于实际水样中聚乙烯（Polyethylene，PE）和聚苯乙烯（Polystyrene，PS）的快速准确的定量分析。首先，制备了 33 个含有不同浓度 MPs 的模拟水样，并采集其拉曼光谱；其次，考察了 6 种光谱预处理方法（归一化、多元散射校正、标准正态变换、一阶导数、二阶导数和小波变换）对 PLS 校正模型预测性能的影响，并分别利用协同区间偏最小二乘算法（Synergy interval partial least squares， SiPLS）、变量重要性投影（Variable importance in projection， VIP）和互信息（Mutual information， MI）3 种变量选择方法对 PLS 校正模型的输入变量进行选择与优化，采用留一法对 PLS 校正模型的预测能力进行考察与验证。在最优的光谱预处理、变量选择、输入变量和潜变量等条件下，建立了基于蒸馏水的小波变换-偏最小二乘（WT-PLS）校正模型，并对实际水样中 PE 和 PS 的含量进行了预测（PE 和 PS 的预测相关系数（R2p）分别为 0.9540 和 0.8472，预测误差（Errorp）分别 0.0690 和 0.1126）；建立了基于混合水样的 MI-PLS 校正模型，对实际水样具有最佳的预测性能（PE 和 PS 的 R2p 分别为 0.9776 和 0.9755，Errorp 分别为 0.0360 和 0.0392）。本方法为实际水样中 MPs 以及其它有机污染物的定量分析提供了新思路与新方法。

关键字 微塑料；偏最小二乘法；拉曼光谱；化学计量学

参考文献

1. LESLIE H A, VAN VELZEN M J M, BRANDSMA S H, VETHAAK A D, GARCIA-VALLEJO J J, LAMOREE M H. *Environ. Int.*, **2022,** 163: 107199.
2. BLACKBURN K, GREEN D. *Ambio*, **2022**, 51(3): 518-530.
3. VASSE G F, MELGERT B N. *Eur. Respir. Rev.*, **2024,** 33(172): 230226.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

LIBS 结合机器学习的铁尾矿组分快速定量分析方法研究

蔡琪[1]、李茂刚[1]、周奎[1]、张梦璠[1]、张天龙[2]、李华*[1]
1. 西安石油大学
2. 西北大学

我国铁尾矿的存量和增量均十分庞大，受技术限制，通常采用堆填处理，这不仅浪费了大量土地资源，还严重破坏了周边生态环境。由于铁矿产地和选矿工艺的不同，铁尾矿的成分与含量也有所差异。因此，只有在深入分析铁尾矿特性的基础上，才能选择最适合的资源化利用途径，实现二次资源的再利用，从而达到铁尾矿的高效综合利用。本研究提出了一种基于激光诱导击穿光谱（LIBS）结合机器学习算法的铁尾矿组分定量分析方法。首先，采集了 30 个铁尾矿样品的 LIBS 光谱，并通过美国国家标准技术研究院（NIST）数据库鉴定了 Fe、Si、Mg、Al、Ca 元素的特征谱线。然后，考察了不同光谱预处理方法对 PLS 模型预测性能的影响。随即，为获得更好的 PLS 校正模型，基于最佳光谱预处理方法，使用鲸鱼优化算法（WOA）算法从 LIBS 光谱数据中选择输入变量，并选择最佳鲸鱼数量，迭代次数和阈值作为输入变量以建立 PLS 校正模型。结果显示，最优的交叉验证决定系数 R2cv 与基于原始光谱的 PLS 模型相比分别提高 12.6%、32.6%、19.4%、25.9%、36.2%，预测集 R2p 分别达到 0.9795、0.9570、0.9514、0.8905、0.9597，预测集 RMSEp 分别为 0.7276%、1.7056%、0.3837%、0.7087%、1.3004%。该研究表明，LIBS 技术结合机器学习算法在尾矿复杂基质分析中具有良好的应用前景，可为尾矿资源的高效开发利用提供一定的理论依据与技术参考。

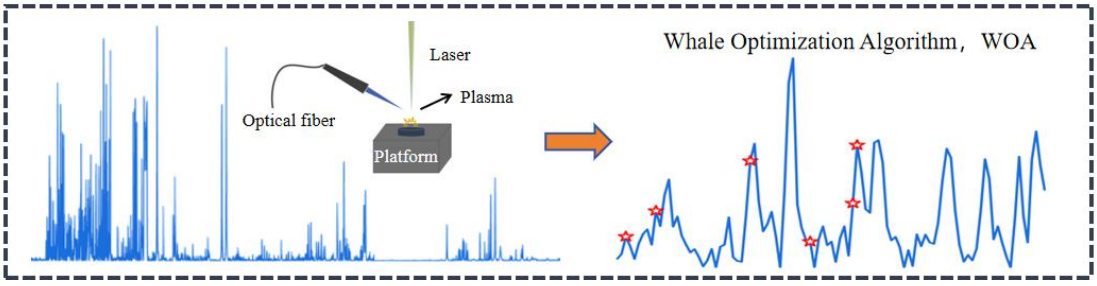


Fig. 1 Scheme flow chart

关键字 尾矿，LIBS，机器学习，变量选择

参考文献

1. M.G.Li, H.Fu,Y.Du, T. L.Zhang, H.Li, *J. Anal. At. Spectrom.* **2022**, 37: 1099.
2. S.J.Long, M.G.Li, J.J.Zhou, T. L. Zhang, H.Li, *Chin. J. Anal. Chem.* **2023**, 51: 10021.
3. X. Zhang, N.Li, C.H.Yan, T. L. Zhang, H.Li, *J. Anal. At. Spectrom.* **2020**, 35: 403.
4. T.Feng, T.T.Chen, M.G.Li, T. L. Zhang, H.Li, *J. Anal. Methods.* **2021**, 13: 3424

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

LIBS 结合机器学习的熔融态锌液成分快速定量分析方法研究

李茂刚*
西安石油大学

热浸镀锌是防止金属腐蚀的一种常见且经济高效的方法，在众多行业中均有广泛应用。针对热浸镀锌过程中定量化学元素分析的研究与开发，不仅有助于提高工艺效率，还能有效降低能耗。本研究提出一种结合可编程逻辑控制器（PLC）与机器学习技术辅助的激光诱导击穿光谱（LIBS）系统，以实现对热浸镀锌溶液中多种元素的同时在线分析及现场监测。该系统通过 PLC 与 LIBS 技术的整合，能够在实际生产环境中对热浸镀锌溶液成分进行实时原位分析。在经过优化条件获取的现场 LIBS 光谱数据基础上，通过预处理手段如归一化处理和马氏距离主成分分析（PCA-MD），有效地减少了实验噪声对数据的影响，并识别出异常数据。基于上述优化后的数据集，本研究构建了热浸镀锌溶液主要成分-铝、镁、铁的预测模型。采用 Python 结合 LabVIEW 进行模型的储存与调用，实现了对热浸镀锌溶液成分含量的实时预测。结果表明，随机森林（RF）算法在预测精度方面表现最佳，对于铝、镁、铁三种元素，其决定系数（R^2）分别为 0.9978、0.9984 和 0.9932，均方根误差（RMSE）分别为 0.0013%、0.0011%和 0.0001%，平均相对误差（MRE）分别为 0.0098、0.0236 和 0.2102。由此可见，本研究所建立的基于集成机器学习技术的热浸镀锌溶液在线分析系统展示了优异的性能，满足了工业现场对热浸镀锌溶液成分监控的实际需求。

关键字 熔融态锌液，LIBS，机器学习，在线分析

参考文献

1. T. Chen, L. Sun, H. Yu, P. Zeng, L. Qi, *Spectrochim. Acta B* ***2023***, 210: 106821.
2. C. Yan, Y. Su, Y. Liu, T. Zhang, H. Li, *J. Anal. Atom. Spectrom.* ***2023***, 38: 2424-2432.
3. S. Long, M. Li, J. Zhou, T. Zhang, H. Li, *Chin. J. Anal. Chem.* **2023**, 51: 10021.

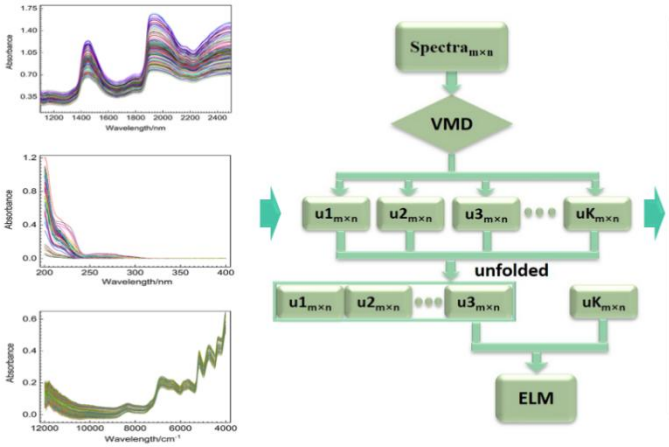
分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

变分模态分解展开极限学习机用于复杂样品的光谱定量分析

沈亮亮、刘强、吴德云、刘鹏、卞希慧*
天津工业大学

复杂样品由于成分复杂多样，对其进行定量分析是一项具有挑战性的任务。发展快速、准确且可靠的分析技术对于复杂样品的定量分析具有重要意义。光谱分析结合化学计量学方法已在食品、医药、石油、环境等领域中广泛应用，为复杂样品的定量分析提供了有效的工具。其中，建立高质量的多元校正模型，是光谱定量分析的核心所在。传统的多元校正方法在原始光谱和目标值之间建立单一模型，是对整体信息的一个大致反映。然而，当相关信息被嵌入到背景和噪声中时，从复杂样品光谱中充分提取有用信息就变得困难，其模型的准确性往往不令人满意。数学分解方法将信号从原始数据空间转换到其他空间，揭示原始光谱中可能被掩盖的信息，提高校正过程的准确性和可靠性。

基于变分模态分解（variational mode decomposition，VMD）[1]和极限学习机[2] (Extreme learning machine，ELM)的优势，本文提出了一种变分模态分解展开极限学习机方法，称为VMD-UELM。利用 VMD 将每个光谱分解为多个模态分量，将模态分量展开成一个扩展矩阵，ELM 用于建立定量模型。将其应用于血液、燃料油和二元中药数据集的光谱中，并分别对血红蛋白、双环芳烃和三七的含量进行定量分析，过程如图 1 所示。与 ELM 和偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression，PLS)相比，该方法有更低的 RMSEP 和更高的相关系数 R，表明了其在定量分析中具有更高的准确性。



Dataset	method	RMSEP	R
blood	PLS	0.4310	0.9613
	ELM	0.3373	0.9766
	VMD-UELM	0.3217	0.9808
gasoil	PLS	0.1935	0.9896
	ELM	0.1907	0.9885
	VMD-UELM	0.1718	0.9901
Chinese traditional medicine	PLS	4.4467	0.9929
	ELM	2.3846	0.9979
	VMD-UELM	2.1734	0.9985

图 1 变分模态分解展开极限学习机用于复杂样品的光谱定量分析过程

关键字 变分模态分解；多元校正；定量分析；集成建模

参考文献

1. X.H. Bian, D.Y. Wu, K. Zhang, P. Liu, H.B. Shi, X.Y. Tan, Z.G. Wang *Biosensors*, **2022**, 12, 586.
2. Y.X. Liu, H. Sun, C.Y. Zhao, C.K. Ai, X.H. Bian, *J. Chemom.*, **2024**, 38, 3590.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于霸王龙优化算法的复杂样品近红外光谱变量选择方法研究

杨文博、刘雨、赵春焱、刘鹏、卞希慧*
天津工业大学

近红外光谱分析技术以其操作简便、快速无损、环境友好等优势，与多元校正方法相结合在复杂样本的定量分析中得到了广泛应用[1,2]。然而，复杂样品的光谱数据常常面临谱峰重叠、变量冗余等问题，这些因素可能影响分析结果的准确性。为了提高模型的预测能力，通常需要在建模前对光谱数据进行变量选择，即筛选出对模型贡献度最高的变量，使预测结果更加准确。尽管已有许多变量选择算法被提出[3]，但在面对光谱数据中的数千个变量时，这一过程仍然充满挑战。霸王龙优化算法（TROA）[4]概念简单，易于实施，收敛速度快且能避免局部最优，但还没有应用于复杂样品近红外光谱变量选择。

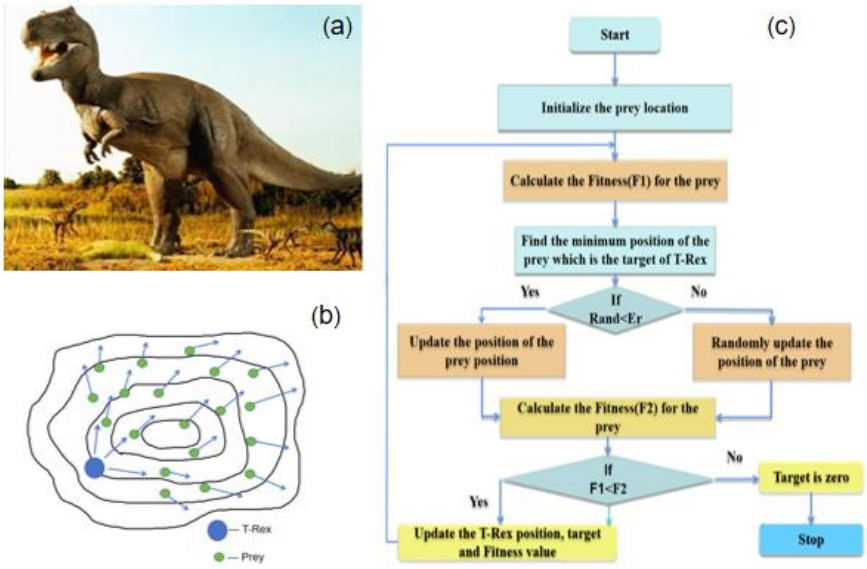


图 1 霸王龙(a)猎物和霸王龙的狩猎区(b)及其 TROA 的流程图(c)

将霸王龙优化算法离散化，与偏最小二乘法（PLS）结合，用于药片、六元调和油、橘汁和土壤样品的近红外光谱定量分析。为验证该方法的有效性，将该方法与全光谱 PLS，以及六种变量选择方法相比较，包括无信息变量消除法（UVE）、蒙特卡罗-无信息变量消除法（MC-UVE）、随机检验（RT）、竞争性自适应加权采样（CARS）、灰狼优化算法（GWO）和鲸鱼优化算法（WOA）。结果表明，霸王龙优化算法在这四组数据的近红外光谱变量中选择的变量最少且所选变量更具代表性。通过与 GWO 和 WOA 两种群体智能优化算法相比，进一步表明了霸王龙优化算法在收敛速度和预测精度方面的优势。因此，霸王龙优化算法是一种有效和高效的复杂样品近红外光谱变量选择方法，为分析化学领域的数据处理提供了一种新方法。

关键字 偏最小二乘；变量选择；光谱分析；霸王龙优化算法；离散化

参考文献

1 H.P. Wang, P. Chen, J.W. Dai, D. Liu, J.Y. Li, Y.P. Xu, X.L. Chu, *TRAC-Trend Anal Chem.*, **2022**, 153, 116648.

2 X.Y. Liu, H.L. An, W.S. Cai, X.G. Shao, *TRAC-Trend Anal Chem.*, **2024**, 172, 117612-.

3 Y.H. Yun; H.D. Li; B.C. Deng; D.S. Cao, *TRAC-Trend Anal Chem.*, **2019**, 113, 102-115.

4 D.S.V.S. Manohar, S. Padarbinda, C.P. Kumar, *e-Prime.*, **2023**, 5, 100243.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于鲸鱼优化算法的复杂样品近红外光谱变量选择和建模方法研究

刘宇霞、张露文、赵春焱、谢佳琦、卞希慧*
天津工业大学

复杂样品的定量分析在环境化学、医学和食品等许多领域发挥着重要的作用。对于复杂样品的定量分析，常用的方法有色谱法、光谱法、质谱法等。由于光谱分析的简单性和广泛的可用性，其在的制药、医学、食品、环境、微生物学等方面的应用显著增加。然而，复杂样品中的多种化合物和组分可能会相互干扰或在光谱中发生重叠，这使得仅用光谱数据进行分析变得困难。因此，非常需要化学计量学的帮助。

鲸鱼优化算法（WOA）[1]是一种受座头鲸捕食行为启发的高效搜索和优化算法。我们课题组成功将 WOA 离散化用于变量选择问题。将离散化的 WOA 与偏最小二乘法（PLS）结合[2]，用于高阶食用调和油的近红外光谱定量分析，并与连续小波变换（CWT）、无信息变量消除法（UVE）、蒙特卡罗-无信息变量消除法（MC-UVE）、随机检验（RT）进行比较。将离散化的 WOA 与极限学习机（ELM）结合[3]，用于血液、汽油、三元混合物、玉米样本的光谱定量分析。为了进一步得到更好的结果，我们引入了双集成策略，从样本和变量方向生成训练子集。将蒙特卡罗（MC）取样与 WOA、PLS 相结合[4]，用于掺假葡萄籽油的近红外光谱定量分析，并与标准正态分布（SNV）、UVE、MC-UVE、RT、变量投影重要性（VIP）进行比较。通过 MC 采样和 WOA 变量选择，模型的预测精度和稳定性得到了有效提高。因此，WOA 在复杂样品的近红外光谱变量选择方面具有很大的潜力，值得在未来的研究和应用中进一步探索和推广。

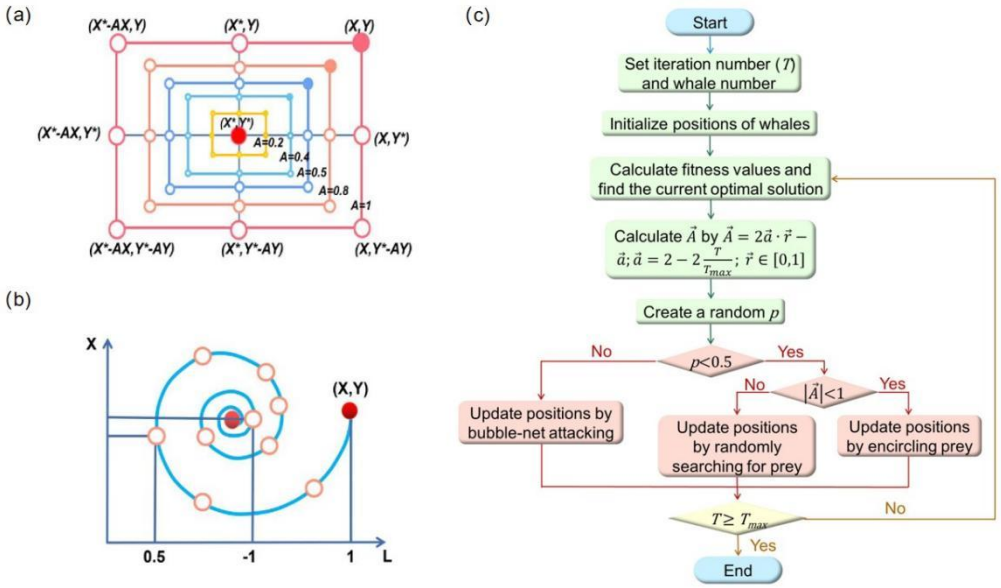


图 1 鲸鱼优化算法两种更新位置的方式(a)收缩包围机制、(b)螺旋更新位置及其(c)原理图

关键字 集成建模；化学计量学；鲸鱼优化算法；变量选择；光谱分析

参考文献

1 S. Mirjalili, A. Lewis, *Adv Eng Softw.*, **2016**, 95, 51-67.

2 X.H. Bian, R.L. Zhang, P. Liu, Y. Xiang, S.Y. Wang, X.Y. Tan, *Spectrochim. Acta A*, **2023**, 284, 121788.

3 Y.X. Liu, H. Sun, C.Y. Zhao, C.K. Ai, X.H. Bian, *J Chemom.*, **2024**, 38, 3590.

4 X.H. Bian, Y.X. Liu, R.L. Zhang, H. Sun, P. Liu, X.Y. Tan, *Spectrochim. Acta A*, **2024**, 311, 124016.

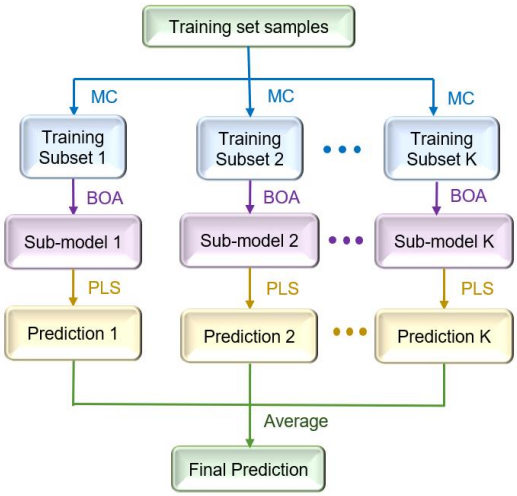
分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

近红外光谱结合新型双集成建模方法快速测定土壤有机质含量

李莹霞、黄海平，赵子贞，谭小耀，卞希慧*
天津工业大学

近红外光谱技术因快速、无损、环保等优点，常与多元校正方法结合用于复杂样品的定量分析。然而，使用全光谱建模时，会有许多无关变量（例如噪音）对建模效果产生影响，从而降低建模精度，增加计算负担。集成建模可以通过融合多个子模型来提高单个模型的稳定性和预测精度[1]。因此成为了热门研究课题。

本文提出了一种基于蒙特卡洛（MC）-蝴蝶优化算法（BOA）的双系综偏最小二乘（PLS）建模方法，并将其与近红外光谱相结合，用于土壤样本中有机质含量的定量分析。该方法首先在训练集中使用 MC 采样，随机选择一定数量的样本形成样本子集。然后对样本子集进行 BOA 变量选择，去除无关变量，得到训练子集，用于 PLS 建模。重复该过程 K 次，建立 K 个子模型，得到 K 个预测结果。最后，对所有子模型的结果进行简单的平均，以获得最终的预测结果。为了验证该方法的有效性，将其应用于土壤有机质成分的定量分析。结果表明，BOA-PLS 在建模性能上优于 PLS，而 MC-BOA-PLS 进一步提高了 BOA-PLS 的性能。因此，MC-BOA-PLS 方法可以显著提高 PLS 模型的预测性能。



关键字 蒙特卡洛；蝴蝶优化算法；偏最小二乘；集成建模；多元校正

参考文献

1 K.Y. Wang, X.H. Bian, M. Zheng, P. Liu, L.G. Lin, X.Y. Tan, *Spectrochim Acta A.*, **2021**, 263, 120138.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于图神经网络的分子拓扑和几何信息的高精度碰撞截面积预测

廖宇璇、陈睿熹、王炯钰、张志敏、卢红梅*
中南大学

碰撞截面积（Collision cross section, CCS）是一种用于表征和鉴定化合物的物理化学特性。本研究开发了一种能直接从分子三维构象预测 CCS 值的方法（SigmaCCS2）。该方法将分子的拓扑结构和几何结构分别编码为分子图和线图，利用图神经网络来提取高维特征。超过 8000 个实验 CCS 值被用于训练、验证和测试 SigmaCCS2。该方法在测试集上实现了 0.9932 的决定系数和 1.1939%的中位相对误差。消融实验验证了分子图和线图都有助于提高 CCS 值预测的准确性。外部测试集的对比分析结果表明，SigmaCCS2 在不同仪器和化合物类别上都优于其他预测方法，证明了其卓越的准确性和通用性。通过在 Github 库提供源代码和构建一个用户友好型网站，增加了 SigmaCCS2 的可访问性，为广大用户进行 CCS 值预测提供了便利。因此，SigmaCCS2 是一种准确、可靠且易于使用的方法，可用于扩大 CCS 数据库的覆盖范围。

关键字 碰撞截面积 图神经网络 离子迁移谱

参考文献

1. R. Guo, Y. Zhang, Y. Liao, Q. Yang, T. Xie, X. Fan, Z. Lin, Y. Chen, H. Lu and Z. Zhang, *Commun Chem*, **2023**, 6, 139.
2. T. Xie, Q. Yang, J. Sun, H. Zhang, Y. Wang, Z. Zhang and H. Lu, *Chemometr Intell Lab*, **2024**, 252, 105177.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于机器学习方法的液态乳中全氟化合物的半定量预测

孙沈正、李瑶瑶、高燕、张庆合*
中国计量科学研究院

全氟及多氟化合物是一类广泛应用于工业和消费品中的合成化学物质 1。研究表明，长期暴露于 PFASs 可能对人类健康产生多种不利影响，包括内分泌干扰、免疫系统抑制、肝脏损害和某些癌症的风险增加等。液态乳是儿童和成人饮食的重要组成部分，也是 PFASs 进入人体的可能途径之一。定量检测液态乳中的 PFASs，可以有效监测 PFASs 的摄入量，帮助制定和执行更加严格的食品安全标准，从而降低公众健康风险。

本研究使用机器学习的方法构建了相对电离效率和分子描述符的半定量预测模型，通过 LC-Orbitrap-HRMS 测定了 58 种全氟化合物标准品的校准曲线，选取其中一个化合物作为校正化合物计算各化合物的相对电离效率值 2；分子描述符通过 PaDEL3 等开源软件计算得到，通过随机森林等算法构建多元回归模型。为进一步提升模型的预测化学空间和预测准确度，引入了谷本系数对数据集进行划分。最终建立的标准溶液半定量预测模型的训练集和测试集的 RMSE 分别为 0.0470 和 0.0974，R^2分别为 0.9918 和 0.9634。

模型在基质加标溶液和实际样品中进一步验证，在基质加标溶液中各梯度浓度的相对残差的中位数范围为-0.08—0.37，说明模型能很好的解决基质效应的影响。在不同品牌的液态乳中对检出的全氟化合物进行预测，其中 PFBS 的误差均在 10 倍以内，PFOA 的误差均在 3 倍以内。综上所述，新开发的模型能较准确的预测液态乳中的全氟化合物，本研究能为食品中的新污染物的定量提供可靠手段。

关键字 非靶标筛查，机器学习，全氟化合物，有机污染物

参考文献

1. Barbosa Machado Torres, F.; Guida, Y.; Weber, R.; Machado Torres, J. P. Brazilian Overview of Per- and Polyfluoroalkyl Substances Listed as Persistent Organic Pollutants in the Stockholm Convention. *Chemosphere* **2022**, *291*, 132674. https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.132674.

2. Aalizadeh, R.; Nikolopoulou, V.; Alygizakis, N.; Slobodnik, J.; Thomaidis, N. S. A Novel Workflow for Semi-Quantification of Emerging Contaminants in Environmental Samples Analyzed by LC-HRMS. *Anal Bioanal Chem* **2022**, *414* (25), 7435–7450. https://doi.org/10.1007/s00216-022-04084-6.

3. Yap, C. W. PaDEL-descriptor: An Open Source Software to Calculate Molecular Descriptors and Fingerprints. *J Comput Chem* **2011**, *32* (7), 1466–1474. https://doi.org/10.1002/jcc.21707.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

高性能近红外光谱燃油牌号识别仪的研制

张鑫[1,2]、李轲*[2]、刘帆[2]、郭小岩[3]、丁超民[1,2]、张正东[2]
1. 西南石油大学化学化工学院
2. 中国计量科学研究院
3. 辽宁省计量科学研究院

当前燃油市场存在品质参差不齐的现象，传统检测方法因耗时长、场地限制等问题，难以满足现场快速检测需求，导致劣质油品进入市场，危及发动机寿命和行车安全。因此，亟需一种简便、快捷且可靠的燃油牌号现场识别方法。近红外光谱技术凭借其快速、高效、环保的特点，在成品油分析中展现出巨大潜力[1]。但现有方法大多基于线性模型，在燃油化学成分和物理特性的非线性特征关系中表现较差。此外，高性能近红外光谱仪器依赖进口，影响我国能源安全。本研究开发了基于先验分布的非线性燃油牌号识别技术并研制了具备透反射式和比色皿式分析功能的高性能便携式近红外光谱仪。仪器光谱范围覆盖 900-1670 nm，波长准确度和重复性均优于 0.5 nm，能够通过调控样品池温度实现高质量光谱数据采集。同时，为有效获取光谱间非线性关系，本研究通过向 BP-ANN 中引入贝叶斯统计推断技术，对网络权重参数进行先验分布建模，降低了 BP-ANN 计算复杂度高、易过拟合和权重初始化敏感等风险，借助二阶导数(2^{nd} D) 实现基线校正并丰富了建模时的输入变量所包含的信息[2]，提出了一种基于先验分布的非线性燃油牌号识别方法。实际应用中，使用搭载 2^{nd} D-BR-BP-ANN 模型的高性能近红外光谱燃油牌号识别仪对 18 组随机选取的喷气燃料、柴油和汽油共 3 种燃油 9 种牌号进行识别，牌号识别准确率近 100%，该仪器具有准确的识别能力，能够满足现场快速检测分析的需求。本研究成功研制了兼具高性能硬件和非线性分析方法的便携式近红外光谱油品牌号识别仪，可以满足各种应用场合的油品快速分析需求。基于先验分布的非线性模型为喷气燃料、柴油和汽油牌号进行准确快速识别提供了一种有效的方法，同时也展示了非线性模型在光谱分析领域的优势。该仪器有望在石化行业的更多企业和政府机构中得到应用，有效提高相关企业的经济效益，保证我国的燃油质量安全。

关键字 近红外光谱仪；先验分布；非线性模型；燃油；牌号识别

参考文献

1. Li K, Ding C. M, Zhang J, et al. *Talanta*, **2024**, 274: 125961.
2. Li K, Zhang X, Zhang J, et al. *ACS Omega*, **2024**, 9(14): 16138−16146.

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

HPLC 法同时测定冬瓜中丙醇二酸、苹果酸和柠檬酸的含量

李慧玲、何洁、韦宇宁、周其峰、王海军、陈泳锍、程亮、劳水兵、罗丽红、覃国新*
广西壮族自治区农业科学院农产品质量安全与检测技术研究所

研究建立了冬瓜中丙醇二酸、苹果酸和柠檬酸含量的测定方法。样品经水溶液提取，Oasis PRiME HLB 固相萃取柱净化，高效液相色谱（HPLC）同时进行检测。色谱柱为 Orca C18（250×4.6 mm，5 μm），以甲醇和 0.1%磷酸溶液为流动相，梯度洗脱，流速 1.0 mL/min，柱温 35 ℃，检测波长 210 nm。丙醇二酸、苹果酸和柠檬酸在 50~1000 mg/L 范围内与峰面积呈良好的线性关系，相关系数均大于 0.9996。平均添加回收率为 82.00%~103.00%，相对标准偏差（RSD）在 0.49%~0.93%之间。丙醇二酸、苹果酸和柠檬酸在冬瓜中检出限分别为 5.0，50.0 和 100.0 mg/kg，定量限分别为 20.0，200.0 和 250.0 mg/kg。该方法简便、快速、准确，重复性好，可用于冬瓜中丙醇二酸、苹果酸和柠檬酸的含量测定。

关键字 冬瓜；高效液相色谱；丙醇二酸；苹果酸；柠檬酸

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于计算机筛选的的 DES 特异性结合抗生素的机制研究

唐甜甜、李巧巧、曾金、李丽仙*
重庆大学附属肿瘤医院

目的：随着水环境中抗生素污染日益严重，其诱导产生的抗生素抗性已成为威胁人类健康的重大问题。目前城市污水处理工艺是以去除化学需氧量、氮、磷等常规污染物为主要目的，无法有效去除污水中的抗生素。本研究拟针对喹诺酮类抗生素（QA）分子结构和官能团特性，筛选对其具有高特异性识别能力的低共熔溶剂（DES）分子，为设计和开发新型抗生素的去除材料提供更多的思路和选择，并为深层次机制探究提供重要的科学依据和技术支撑。方法：基于 Materials Studio 软件中的 Forcite 模块构建分子模型，经过 Geometric optimization、Energy 和 Dynamics 动态拟合获得稳定的构象。采用 Adsorption Locator 模块构建氢键供体与氢键受体结合的 DES 结构。利用 Dmol3 模块进一步完成对 DES 和 QA 原子和官能团相对贡献的分析，并计算 DES 与 QA 的结合能（Ebinding）。结果：以氧氟沙星（OFL）为代表性 QA 抗生素，其分子中羰基氧（O12、O14）、哌嗪氮（N20、N23）和 F18 易被亲电攻击，而 O4 和 N7 易被亲核攻击。DES 分子中负电荷基团主要集中在含氧基和氯原子上，这些基团可以作为丰富的氢键受体参与氢键形成。因此，可以预测 OFL 与 DES 的结合主要通过氢键相互作用。通过构建不同 DES 与 OFL 的结合模型，计算其结合能。其中[ALA][2CA]-OFL 的结合能最低，表明两者间的结合作用最强，[ALA][2CA]可作为吸附结合 OFL 的最佳 DES。结论：该研究有针对性的筛选对 QA 具有高特异性识别能力的 DES 分子，为进一步实现特异性、定向性吸附抗生素材料的开发奠定基础。

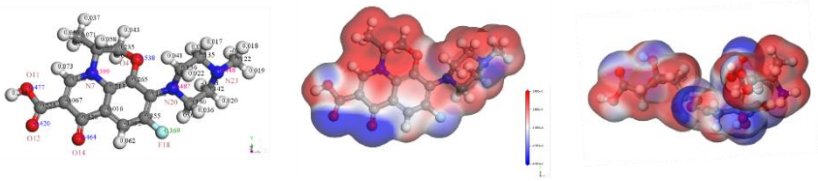


图 1 OFL 分子中的原子电荷图（左）、表面静电势图（中）和[ALA][2CA]的表面静电势图（右）。

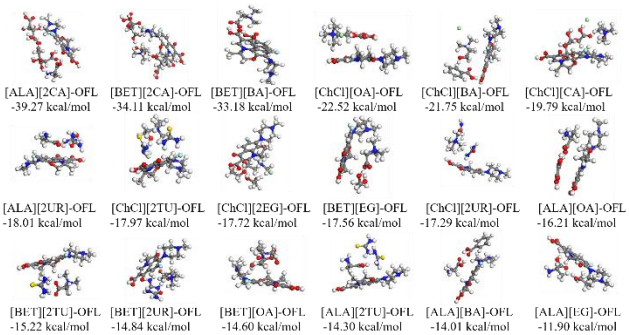


图 2 构建的 DES-OFL 模型的优化结构和 Ebinding。（注：Alanine, ALA; Citric acid, CA; Choline chloride, ChCl; Ethylene glycol, EG; Betaine, BET; Urea, UR; Oxalic acid, OA; Benzoic acid, BA; Thiourea, TU）

关键字 抗生素，低共熔溶剂，计算机筛选，特异性结合

分会场：13.化学计量学与分析仪器
交流形式：墙报

基于高光谱技术的物证鉴定现场智能快检研究

余自如*
华南理工大学

近年来，由于微光电技术和人工智能的强大背景支撑，微型高光谱相机得到了迅速的发展，使我们可以近距离的测量光谱及光谱成像数据，结合先进的人工智能算法，使其在现场快检领域的应用得以可行。本论文展示了我们在微型高光谱的设备研发、智能化方案及物证鉴定中的应用所做的工作。

图 1 是对印油高光谱相机采集的光谱图像数据，然后建立了卷积注意力网络，实现了印油分类方法。采集了 50 种不同类别的印油的高光谱图像，对高光谱图像进行数据预处理后将光谱数据输入进卷积注意力网络，神经网络便能够对不同成分的印油进行准确的检测和识别，为印油的快速、高效检测提供了一种新的方法。研究结果表明卷积注意网络在印章印泥分类任务中表现出高达 95.98%的准确率。

图 2 是刑事侦查中复杂背景的血迹检测，将光谱成像技术与深度学习语义分割模型相结合，提出基于光谱图像处理技术的在血迹可视化方法。该模型的平均交并比达到 96.42%、平均像素准确率达到 98.2%、准确率达到 99.51%。并被成功用于黑色布料中血迹的预测，为提高血迹识别的准确性和效率提供了新的可能性。

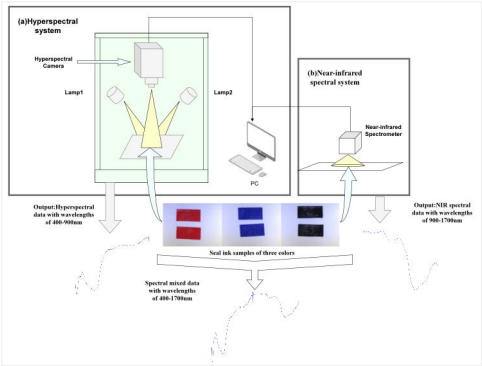


图 1 印油高光谱成像探测系统

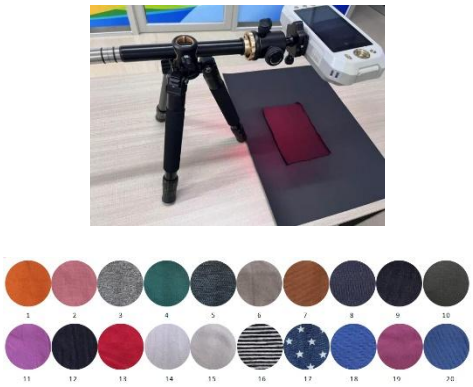


图 2 实验装置及布料种类

关键字 高光谱，物证鉴定，血迹检测，深度学习

参考文献

1. Yu, Z., & Cui, W., *Computers and Electronics in Agriculture*, **2023**, 215, 108382.
2. Xie, Z., Yu, Z., Duan, X., Han, X., Qin, D., Cui, W., Yu, X., *Microchemical Journal*, 2024, (in print)

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

MXene 磁性二维复合物的制备及其在磷酸化肽富集中的应用

练鸿振*、张森
南京大学

MXenes 自从被发现以来，由于其二维的结构以及独特的性质，受到了广泛的关注并被广泛应用在能源[1]、生物医药[2]等领域，近年来在分离科学中的表现也受到了越来越多人的重视。磷酸化作为一种最重要的蛋白质翻译后修饰的方式，在质谱分析中常受到低丰度、离子化效率低等问题，使得直接分析受到影响。而目前少有基于 MXenes 的磁固相萃取（MSPE）材料在蛋白质磷酸化分析中的应用相关的报道。

我们使用 HF 将 Ti3AlC2 MAX 相中的 Al 层刻蚀之后，用四甲基氢氧化铵（TMAOH）插层，得到剥落的 Ti3C2 MXene 少层纳米片。在 TMAOH 处理过程中，不仅四甲基铵根离子（TMA+）作为插层离子促使多层的 Ti3C2Tx 剥落，而且碱性条件使得纳米片上的 F 原子被–OH 取代，使得剥落后的纳米片具有更多的作用位点。最后使用原位氧化沉淀的方法，以 FeSO4 作为铁源，空气中的氧气为氧化剂，在 Ti3C2 MXene 纳米片表面点缀 Fe3O4 纳米粒子，得到表面具有大量 Ti–O、Ti–OH 以及 Fe–O 等基团的磁性二维复合物 Ti3C2–Fe3O4。Ti3C2–Fe3O4 可通过金属氧化物亲和色谱（MOAC）和亲水相互作用色谱（HILIC）的机理实现对牛奶、加标中药注射剂等样品中的磷酸化肽的分离富集。我们又通过最低强度分层（MILD）方法合成 Ti3C2 MXene 少层纳米片，使用原位合成的方法，以 Zr4+为中心离子、2-氨基对苯二甲酸为配体，在 MXene 纳米片表面合成 UiO-66–NH2，得到 MXene-MOF 二维复合物。该二维复合物经过煅烧氧化，生成双金属氧化物纳米片。在煅烧的过程中，金属框架被保留的同时，Ti3C2 被氧化为 TiO2，UiO-66–NH2 被氧化为 ZrO2，原来的 MXene-MOF 成分转变成 TiO2-ZrO2。最后再利用原位氧化沉淀的方法，以 FeSO4 作为铁源，空气中的氧气为氧化剂，在 TiO2-ZrO2 双金属氧化物纳米片上点缀 Fe3O4 纳米粒子以获得磁性的三金属氧化物纳米片（MTMO）。MTMO 通过三种金属氧化物协同的 MOAC 作用，可实现对牛奶、加标中药注射剂等样品中磷酸化肽的分离富集。

关键字 MXenes；磁固相萃取（MSPE）；磷酸化肽；金属氧化物亲和色谱（MOAC）；亲水相互作用色谱（HILIC）

参考文献

1. N. R. Hemanth, B. Kandasubramanian, *Chem. Eng. J.*, **2020**, 392, 123678.
2. N. H. Solangi, S. A. Mazari, N. M. Mubarak, R. R. Karri, N. Rajamohan, D. V. N. Vo, *Environ. Res.*, **2023**, 222, 115337.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

样品处理策略提升微型化原子光谱的分析性能

王建华*、于永亮、蔡继颖、刘双
东北大学

重金属污染物监测面临着严峻挑战，样品种类繁多、分布广泛。目前的原子光谱仪器不适于现场分析和原位检测，因此需要发展微型化原子光谱仪器。我们在前期的研究中，建立了基于介质阻挡放电 DBD 的微型化原发射光谱，其分析性能可媲美现有的 ICP-OES 仪器。然而，由于现有样品引入模式的限制，仪器的实际应用仍受到一定程度的限制。本研究提出了一系列新型样品预处理和引入策略，可以有效地应用于重金属污染物的现场分析，并显著提高检测的灵敏度。

关键字 微型化原子光谱，样品预处理，介质阻挡放电，重金属检测

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

环境污染物快检的材料设计及分析方法构建

龚正君*
西南交通大学

发光金属有机框架(LMOFs)是一种具有光致发光特性的多孔纳米材料，通过改变 LMOFs 的配体和金属中心可对 LMOFs 材料光致发光特性进行调控，从而为定向设计可用于复杂介质中高风险污染物的分析检测传感器提供可能。本团队通过控制辅助配体苯甲酸(BA)的掺杂含量，精确调节 BA-NU LMOFs 材料的光辐射转换效率，颗粒间的相互作用限制了 BA-NU 分子内苯环的旋转和振动，使其荧光增强。基于巧妙的结构设计，BA-NU 被成功地用于区分不同尺寸的聚苯乙烯纳米塑料。

通过将具有相反电子调节能力的基团(-F 和-NH_2)引入到 Fe/Zn-BDC MOF 材料中，以调整 Fe 金属中心的配位环境，进而有效调控纳米酶的活性，实现了复杂环境介质中全氟辛基磺酸(PFOS)的快速、灵敏比色分析。本团队利用高级氧化手段对磷酸三苯酯(TPHP)进行前处理，通过产生活性氧而间接实现 TPHP 的高效化学发光传感。本团队开发了一种巧妙的基于催化发光(CTL)原理的多维比率传感识别策略，实现了 10 种有机磷阻燃剂的高效识别，包括对同系物和同分异构体的区分，为污染物的实时监测提供了一种有潜力的传感方法，也为化学传感器技术的发展提供了新视角。

关键字 发光金属有机框架，纳米塑料，全氟化合物，有机磷阻燃剂

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于智能响应材料的分离分析方法设计

贾琼*
吉林大学

智能响应材料可对外界刺激做出响应，发生结构和性质上的变化，将光、电、热、机械等信号转化为生物化学信号。由于具有卓越的响应性、可逆的构象转换以及可调控性等显著优势，已被广泛地应用在离子交换、药物递送、癌症生物成像等领域。与传统材料相比，智能响应材料可以可逆地“打开”和“关闭”，具有更好的可调控性。本工作针对蛋白质翻译后修饰（包括糖基化、磷酸化、棕榈酰化）的分离富集，设计了一系列智能响应材料（pH 响应、光响应、温度响应），结合质谱检测，开发了用于血清、细胞等复杂生物样品中蛋白质翻译后修饰的高灵敏、高选择性检测方法 [1-4]。

关键字 智能响应材料，蛋白质翻译后修饰，富集，分析

参考文献

1. Y. Zhao, W. Xu, H. Zheng, Q. Jia, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 9043.
2. H. Zheng, Z. Wang, Q. Jia, *Small Methods*, **2023**, 7, 2300254.
3. Z. Guo, W. Xu, G. Xu, Q. Jia, *TrAC Tends Anal. Chem.*, **2023**, 167, 117275.
4. H. Zheng, Jia, J.; Li, Z.; Q. Jia, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 2680.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

磁增强管内固相微萃取技术在重金属及其形态分析中的应用研究

黄晓佳*
厦门大学

重金属通常是指与污染相关、具有潜在毒性和生态毒性的金属，重金属的累积能力和生物毒性与其化学形态密切相关。因此，对环境样品中的重金属形态进行灵敏而准确的检测具有重要的意义。由于环境样品中重金属浓度极低，且基底中存在其他物质的干扰，需要在分析前选择合适的样品前处理方法。目前，已有一些样品前处理技术如液相微萃取、固相萃取、磁固相萃取用于提取各种复杂样品中的重金属形态。然而，这些方法存在操作复杂、有机试剂消耗量大、富集效率低的问题。

本课题组开发了基于整体材料的磁增强管内固相微萃取技术，并将其应用于实际环境样品中多种重金属包括汞、锡、钒、铬的形态分析[1-3]。针对不同类金属-有机络合物的化学性质和分子结构等特点，筛选合适的功能单体制备磁性整体固相微萃取柱，并将其作为管内固相微萃取的萃取介质，在吸附和解吸阶段对微萃取柱施加不同方向和强度的磁场，利用磁微流及金属-有机络合物的反磁性原理，有效提高重金属的萃取效率并缩短萃取时间。同时与色谱仪器在线联用，构建磁场辅助管内固相微萃取-色谱在线联用体系，为复杂环境样品中痕量重金属及其形态分析提供简便、灵敏、环境友好且低成本的在线检测体系。

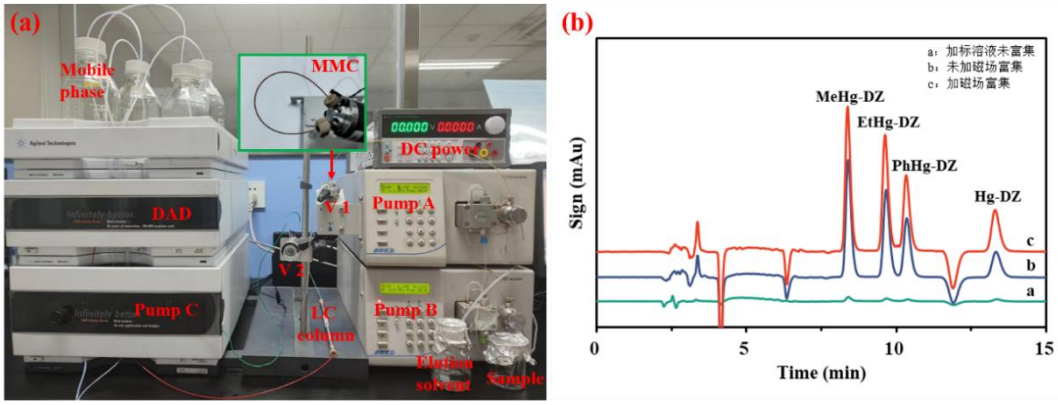


图 1 磁增强管内固相微萃取-色谱在线联用装置图（a）及汞形态富集效果对比色谱图（b）

关键字 管内固相微萃取；形态分析；整体材料；重金属‘吸附剂

参考文献

1. XC Song, JY Wu, JL Pang, YF Wu, XJ Huang*. *J. Hazard. Mater.* **2021**, 411: 125141.
2. XC Song, Q Luo, XJ Huang*. *Anal. Chim. Acta* **2022**, 1223: 340175.
3. XC Song, MM Peng, Q Luo, XJ Huang*. *Talanta* **2024**, 270: 125528.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

限容凝胶电膜萃取系统构建及其在寡核苷酸提取中的应用

黄垂秀*、刘子龙、刘聪、刘杰
华中科技大学

电膜萃取技术（EME）是由 Pedersen Bjergaard 和 Rasmussen 于 2006 年提出的一种由液相微萃取技术发展起来的新兴的样品前处理技术[1]。EME 的基本原理是离子化的目标物在电场的驱动下选择性的实现跨膜迁移，所以 EME 主要包含样本相、有机溶剂即支撑液膜（SLM）、支撑液膜载体和接收相这四大核心元素。2017 年，Tabani 等人[2]提出了凝胶电膜萃取技术（G-EME），即用琼脂糖凝胶取代支撑液膜载体和 SLM。G-EME 因为无需有机溶剂更加绿色环保，已经受到环境、制药和食品分析的广泛关注。然而，与 G-EME 相关的电渗（EEO）流动极大地限制了该技术的发展[3]。

为了应对这一挑战，本研究提出了空间受限 G-EME（CG-EME）的概念，并精心设计 3D 打印模块化设备来实现这一概念。该装置通过限制样品室的体积来阻断 EEO 的流动。此外，接收相模块底部的网状结构有助于制备薄而稳定的凝胶膜，从而增强电迁移驱动力并缩短迁移路径。此外，本工作首次利用 CG-EME 研究了 EME 分离核酸分析物的可行性，并且分别从真实样本中回收 DNA 引物和分析精神分裂症患者外周血中疾病生物标志物（miRNA-181b）对该方法进行验证。

研究首次发现，CG-EME 可以减少 EEO（图 1）[4]。经过对 3D 打印模块以及 CG-EME 分离条件进行系统优化后，使用 3mm 厚的琼脂糖（3%）凝胶膜在 50V 电压下和 15min 内，寡核苷酸的回收率为 62%。该 CG-EME 分离寡核苷酸的方法可以从真实样本中回收 DNA 引物，而且回收的引物可以继续用于 PCR 扩增。同时，该 CG-EME 分离寡核苷酸的方法可以从外周血中分离精神分裂症疾病生物标志物（miRNA-181b），结合定量聚合酶链式反应（qPCR）分析，发现精神分裂症患者外周血中 miRNA-181b 的表达上调。

总之，本研究提出了一种对抗 EEO 的方法，并将 EME 推向临床领域，以分离核酸生物标志物，这将大大扩展这项新兴技术的应用场景。

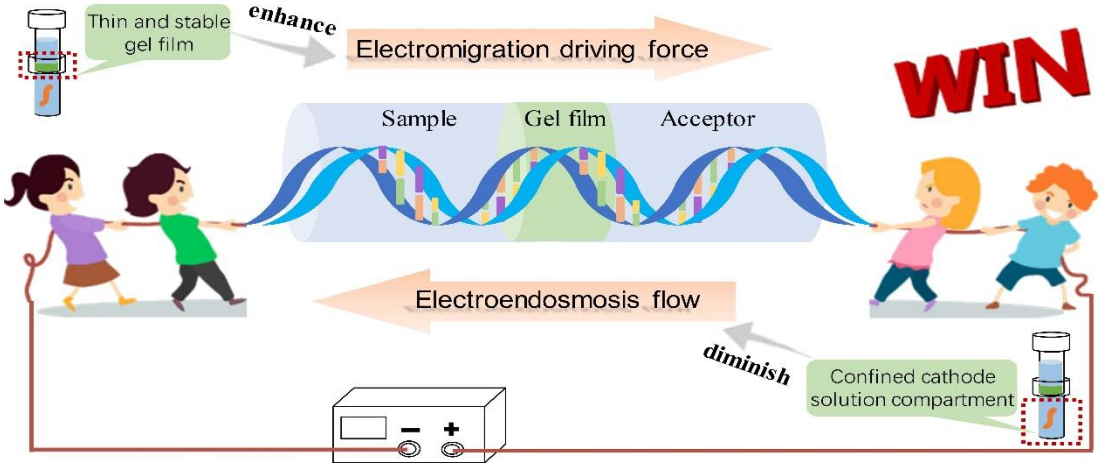


图 1 CG-EME 对抗 EEO 的示意图。

关键字 限容；电膜萃取技术；电渗;寡核苷酸；生物标志物

参考文献

1. Pedersen-Bjergaard, S.; Rasmussen, K. E. J. Chromatogr. A **2006**, *1109 (2)*, 183.

2.Tabani, H.; Asadi, S.; Nojavan, S.; Parsa, M. J. Chromatogr. A **2017**, *1497*, 47.

3. Tabani, H.; Dorabadizare, F.; Pedersen-Bjergaard, S. Trac Trends Anal. Chem. **2023**, *160*, 116990.

4. Liu, C.; Liu, J.; Liu, Q.; Zhu, Q.; Wang, H.; Fang, X.; Zhang, W.; Liu, Z.;* Huang, C.* Anal. Chem. **2024**, *96*, 13217

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于金属有机骨架材料的微固相萃取研究与应用

卢明华*
河南大学

金属-有机框架（MOF）材料作为一类新兴的多孔材料，因容易合成、结构多样、数量庞大、比表面积高且孔容大、表面易于修饰和改性，在吸附方面具有较大的引用潜力，被认为是一种理想的吸附剂。我们课题组合成制备了多种金属有机骨架及其复合材料，并将其作为样品前处理如分散固相萃取、磁性固相萃取等的吸附剂，用于环境和食品中痕量有机小分子化合物的净化和富集。

基于混合配体策略，通过调节 TCPP 和 4,4'-二羧基联苯砜（DCDPS）两种有机配体的掺杂比例，采用一锅溶剂热法合成了一系列稳定的多元金属有机骨架材料（PCN-224-DCDPSx）。与单组分 PCN-224 材料相比较而言，PCN-224-DCDPSx 材料表现出对磺胺类抗生素（SAs）更高的萃取性能。采用原位构建策略，将富含不饱和金属位点的棒状 MIL-88B 组装生长在具有优异稳定性的 UiO-66 表面，成功制备了 MIL-on-UiO 复合材料。结果表明 MIL-on-UiO 对 PCBs 的吸附效率优于单一组分的 MOF。这种高吸附性可归因于协同效应、π-π堆积效应、空间位阻效应、孔隙填充效应以及卤键等多重相互作用。设计了一种双金属节点和配体的 ZnNi-MOF-NH2。通过煅烧去除热敏性配体衍生出缺陷多孔海胆状 ZnO/NiO (50)微球材料（如 Fig. 1 所示）。将其作为涂层材料，开发了基于顶空固相微萃取（HS-SPME）高效富集牛奶样品中多氯联苯的技术，结合气相色谱-串联质谱技术，建立了多氯联苯高灵敏分析检测技术。

关键字 样品前处理，固相微萃取，金属有机骨架材料

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于微反应器构建的样品前处理方法

唐盛*
江苏科技大学

传统的样品前处理方法受限于富集机理，导致信号放大倍数有限。为实现痕量分析物的高灵敏检测，我们将纳米刻蚀、催化、核酸扩增等反应引入前处理过程。为实现各类反应中信号的稳定产生，在前处理体系中构建了宏观-介观-微观体系的微反应器。反应微区的引入在保证了有效隔绝复杂基质干扰的同时，使得样品前处理方法中的检测信号得到指数级扩增。

关键字 样品前处理，微反应器

参考文献

1. Tang Sheng* et al, Spatial confinement of single-drop system to enhance aggregation-induced emission for detection of microRNAs, Analytical Chemistry, 95 (**2023**) 5346-5353
2. Tang Sheng* et al, Three-dimensional printed microdevice to enhance headspace microextraction for enrichment of histamine in milk, Analytical Chemistry, 94 (**2022**) 10595-10600
3. Tang Sheng* et al, Can direct-immersion aqueous-aqueous microextraction be achieved when using a single-drop system? Analytical Chemistry, 94 (**2022**) 12538-12545
4. Tang Sheng* et al, Magnetic three-phase single-drop microextraction for rapid amplification of the signals of DNA and microRNA analysis, Analytical Chemistry, 92 (**2020**) 12290-12296

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于单细胞分析的污染物环境行为与效应研究

邓洁薇[1]、李心砚[1]、杨运云[2]、栾天罡*[3]
1. 广东工业大学生物医药学院
2. 广东省科学院测试分析研究所（中国广州分析测试中心）
3. 五邑大学环境与化学工程学院

在单细胞层面研究环境污染物的累积特征和异质性，获得更准确、更全面的细胞信息，有助于为研究污染物的微观环境行为和细胞毒性提供重要见解。生命体不同细胞对环境暴露往往会表现出异质性反应，不同细胞个体甚至不同亚细胞区室之间的物质和变化差异均有可能导致变异性和敏感性反应。如果仅对生物样本大量细胞群体进行暴露与组学研究，则有可能忽略细胞个体特有的生理属性，无法获得不同细胞个体之间的差异信息，以及单个细胞对整体生命体功能造成的影响。因此，开展基于单细胞分析的污染物环境行为和效应研究具有重要的意义。基于此，我们开发了一系列单细胞中痕量污染物与多组分代谢物的高效、高灵敏、高选择性分析方法，精准识别环境暴露导致的细胞代谢调控变化和异质性规律，揭示污染物在细胞层面的积累与效应特征。

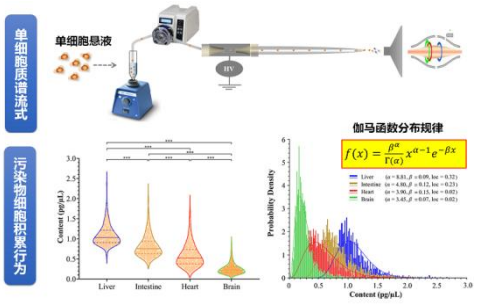


图 1 单细胞中痕量污染物的高通量分析

关键字 环境分析；有机污染物；单细胞分析；质谱

参考文献

1. Rappaport S M, et al. Environment and disease risks. *Science* **2010**, *330*: 460-461.
2. Gao P. Exploring single-cell exposomics by mass spectrometry *Environ. Sci. Technol.*, **2023**, *57*: 12201-12209
3. Liu N, et al. Exogenous metals atlas in spermatozoa at single-cell resolution in relation to human semen quality. *Environ. Sci. Technol.* **2023**, *57*, 7358−7369

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

新型有机污染物的富集机制及分析方法研究

郑娟*
中山大学

随着各类化学物质的大量生产和使用，内分泌干扰物、全氟化合物和抗生素等新近发现或引起关注的新污染物在环境中的检出频率不断增加。由于这些物质具备抗降解性、生物积累能力以及潜在的神经毒性、生殖毒性等，即便在较低浓度下亦可能对生态系统及人类健康造成不利影响。此外，这些有机污染物通常存在于复杂的环境介质中，需要样品前处理技术使其与复杂介质高效分离、富集。固相微萃取（SPME）是基于固相萃取原理的微型化且环境友好的绿色化样品前处理技术，能够一步实现采样、样品净化、分离和富集等步骤，对分析物进行高效、快速的萃取。该技术的核心是萃取材料，高性能萃取材料的研制大幅提升了 SPME 的富集能力，推动 SPME 在环境、食品及生命分析中的广泛应用。而如何将这些粉末状吸附剂发展成实用的 SPME 涂层或薄膜，对于其性能和机制研究也很关键。

基于厘清的吸附机理，我们设计了系列高性能吸附剂；进一步通过溶剂界面挥发、物理涂覆和原位生长等普适的器件化方法，将粉末吸附剂制备为 SPME 探针涂层和薄膜；将实用萃取器件与质谱联用，建立了系列新型有机污染物的高灵敏分析方法，并用于环境水样、日化用品、生物体液及食品中痕量邻苯二甲酸酯等新型有机污染物的精确定量；进一步地，基于这些高灵敏分析方法发展了环境水体中有机污染物的原位监测及活体跟踪技术。

关键字 固相微萃取、有机污染物、吸附剂、原位生长

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

全自动固相微萃取液相色谱进样器研制和应用

郭治安*
西北大学

全自动固相微萃取液相色谱进样器，利用固相萃取原理，改变了固相萃取操作中为加快萃取速度抽真空的方法，采用正压萃取，使原固相萃取时萃取柱两端的压力△P≤1bar 增大至≥6bar，大大提高了萃取速度。从而，使萃取时间和色谱分析时间相适配，能用一种易实施、高效、灵敏、检出下限低、分析误差小、无附带环境污染的在线自动装置来实现。

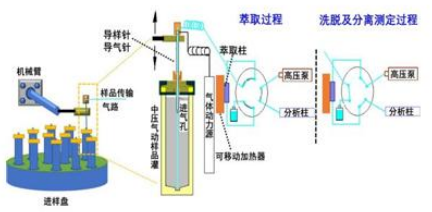
经典的固相萃取在重力下自流淋洗。上样和萃取时间长。改进的已经有商品仪器的固相萃取，是在萃取柱的出口连接真空系统抽真空，以加快萃取淋洗洗脱速度。但无论如何其动力△P≤1bar，且得到的萃取液体积大，需反复浓缩定容后测定。新兴的固相萃取，是在线的萃取、分析一体的分析测定法。在这种方法中，萃取柱是一根较短的色谱柱。用色谱柱萃取，由于其较大的阻力，无法用普通的注射器和蠕动泵上样方式加载样品，所以需采用附加一台高压泵上样，或另加一套高效液相色谱仪。高压液相泵单冲程上样体积有限，难于富集，多冲程时整个系统被当前样品污染，样品切换时上样管路易吸入气泡使单向阀工作失常，另外多加一台高压泵及其控制系统或附加一套高效液相色谱仪费用很大。

研制的全自动固相微萃取液相色谱进样器是在一个耐压封闭的容器中加入确定量的样品，让一根能引入气体和导出液体样品的光滑双通路针插入其中，伴随着气体的压入，液体样品流出并进入接在色谱六通阀样品环（loop）位置的萃取柱萃取。若忽略管路阻力，气体的给定压力就是样品溶液进入萃取柱的压力。样品瓶中样品全部进入萃取柱后，inject 状态下流动相淋洗萃取柱中富集的待测物进入分析柱达到洗脱分离和测试一体化。由于专门制作的萃取柱极短：在等度洗脱中，当前样品测试时间的三到五分之一、萃取柱中的全部待测组分进入分析柱时，切换六通阀再回到 load 位置进行下一个样品的萃取，色谱仪仍在分析当前样品；梯度洗脱中，强洗脱剂比例最高时切换六通阀萃取下一个样品。在以上两种情况下萃取、洗脱测试穿插进行，固相萃取时间能包含在色谱分析之中。

酚 取代酚国标方法测试和全自动固相微萃取液相色谱进样测试比较

	苯酚	间甲酚	β 萘酚	双酚 A	2.4-二氯酚	2.4.6-三氯酚	五氯酚
新方法方程 (r)	0.9993	0.9995	0.9998	0.9999	0.9996	0.9997	0.9994
国标限值(mg/L)	\	\	0.400	0.010	\	0.200	0.009
新法检出限(mg/L)	0.0007	0.0007	0.0001	0.00005	0.0005	0.0006	0.0004
国标测定时间(min)	200	200	200	200	200	200	200
新法测定时间(min)	22	22	22	22	22	22	22
RSD（0.01mg/L) %	2.8	2.4	1.7	1.4	1.5	1.7	1.6

萃取进样器原理图



萃取进样器原型机



关键字 固相微萃取　全自动　进样器

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

镧系荧光敏化与标记策略在环境污染物的识别应用

童圆君*
西南交通大学

镧系离子由于具有荧光量子产率高、荧光寿命长、Stokes 位移大、半峰宽窄等优点而在光致发光材料应用领域受到大量关注。然而，由于镧系离子的 f→f 跃迁是宇称禁阻跃迁，导致镧系离子在自由状态下对激发光的吸收效率极低，导致光致发光效率较差。利用具有较高吸光系数的有机配体与镧系离子配位，得到镧系有机配位材料，而后通过有机配体至镧系离子的能量传递，可得到具有较高发光效率的镧系配位材料。镧系配位材料的配体分子选择丰富，纳米结构可调，使得镧系有机配位荧光材料在环境污染物的分析检测领域具备广阔的应用前景。近年来，我们通过设计制备具有敏化特性的配体或辅助纳米材料等实现镧系纳米材料光致发光性能与结构稳定性的调控，基于这些具备优异性能的镧系配位材料发展出一系列新型的污染物分析方法，实现了环境污染物的现场快速分析与精准识别。

关键字 镧系荧光，光谱识别，荧光标记

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

分子印迹石蜡

沈先涛*、骆曜宇、黄垂秀
华中科技大学

样品前处理是环境分析过程中实现样品目标物定性和定量分析的基础。固相萃取（Solid-phase extraction, SPE）是一种利用固体吸附剂对目标物进行分离、富集和纯化的样品前处理方法。为了提高 SPE 材料对目标物的识别选择性，环境分析科学家以分子印迹聚合物（Molecularly imprinted polymers, MIPs）为吸附材料开发了 MIP-SPE 技术。然而，传统 MIPs 的制备以化学合成为主，制备过程耗时长、产率低。为了解决这些难题，我们以物理法（熔化-凝固）制备了一系列基于分子印迹石蜡（molecularly imprinted wax, MIW）材料。

研究一，我们在熔融石蜡中加入烷基脂肪酸功能单体，采用乳液法合成了 MIW 微球（对目标物印迹因子为 6.3），并基于此材料开发了一种能显著减少萃取过程中有机溶剂的消耗，且简化分析流程的免洗脱 SPE 方法。研究二，我们采用盐模板法制备了大比表面积的连通孔 MIW 整体柱，与荧光联用实现生物和环境样品中的快速微量检测，其中普萘洛尔的检测限能达到 0.03 ng mL-1。该基于 MIW 的免洗脱 SPE 策略使得样品前处理操作更便捷、溶剂消耗量更低。总之，上述系列研究推动了新型 MIPs 在样品前处理领域的应用与发展。

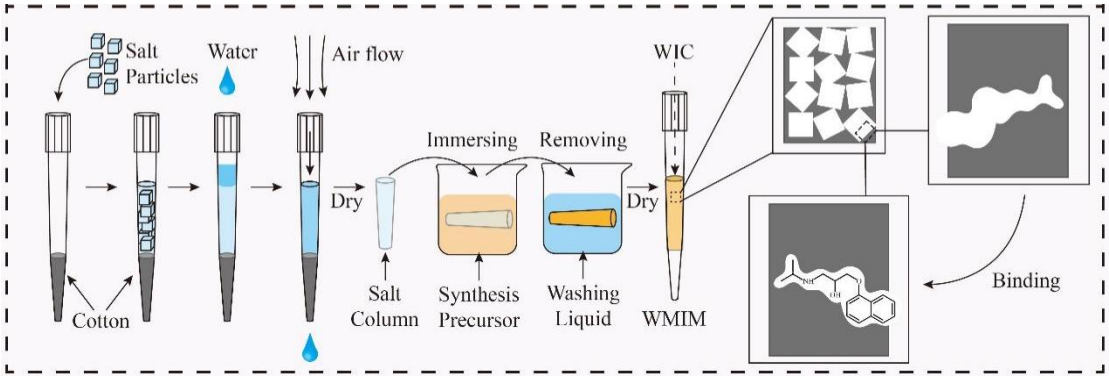


图1 分子印迹石蜡免洗脱固相萃取及分子印迹石蜡整体柱制备示意图[2]

关键字 样品前处理；分子印迹材料；固相萃取；整体柱

参考文献

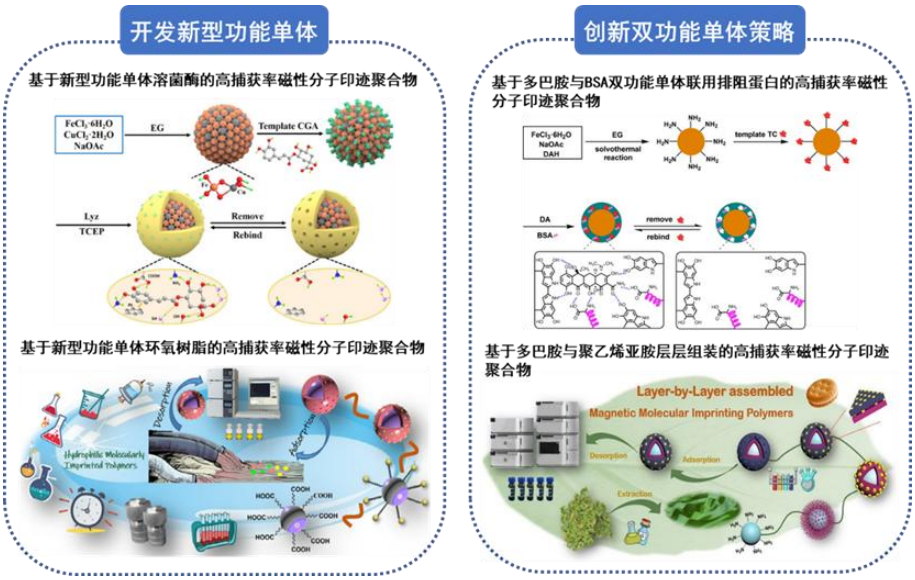
1. L. Jiang, T. Jing, X. Shen. Molecularly imprinted wax. *Journal of Materials Chemistry B*, **2022**, 10: 6742-6751.
2. Y. Luo, L. Yang, L. Jiang, C. Huang, X. Shen. Preparation of wax-based molecularly imprinted monolith for pipette-tip solid-phase extraction: a hybrid method. *Microchimica Acta* **2023**, 190: 151.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

功能化磁性纳米材料的构建及应用初探

赵婧宇[1]、王悦[1,2]、高瑞霞*[1]
1. 西安交通大学化学学院
2. 西安交通大学药学院

食品和环境样品等基质的多样性和复杂性，严重影响了复杂样品中痕量抗生素的富集程度或检测灵敏度。因此，建立高吸附容量和高选择性的抗生素分离-检测方法已经成为分离分析科学领域的研究热点。分子印迹磁性固相萃取技术由于萃取操作简单、分离效率高和选择性好等优点，已被广泛应用于复杂基质中目标物的分离[1,2]。但目前的分子印迹磁性固相萃取剂存在功能单体种类单一、亲和性低、基质相容性差、印迹位点数目少、吸附容量低等问题，使其制备过程和实际应用范围常常受限。基于此，本课题组通过开发天然、功能基团丰富、结构独特的新型功能单体（酚醛树脂、改性溶菌酶等），丰富印迹位点数目的同时增强材料基质相容性；提出新型印迹策略（固定模板印迹、多模板印迹、双亲和联用印迹等），提高功能基团的接枝率和接枝密度，形成高密度识别位点；设计新型轻质磁性载体（表面雕蚀、载体镂空、轻质赋磁等），减弱或消除载体核的同时增大印迹比表面积，从而显著提高分子印迹纳米材料的吸附容量，增加材料特异性识别性能，为制备具有高密度识别位点和良好基质相容性的磁性分子印迹纳米材料提供了新途径，为复杂样品中目标物的高效分离提供了新材料。以制备的新型分子印迹磁性纳米材料作为固相萃取剂，建立了对食品和环境中目标物的高效识别-分离-分析/去除的新方法，对快速高效、高选择性地分离分析食品及环境样品中的目标物具有特殊的意义和应用价值。



高吸附容量磁性分子印迹聚合物的构建及应用

关键字 分子印迹；磁性分离；功能单体；轻质磁性载体

参考文献

1. SOBIECH M, LULINSKI P. Molecularly imprinted solid phase extraction–recent strategies, future prospects and forthcoming challenges in complex sample pretreatment process. *TrAC,*

Trends Anal. Chem.,**2024**,174:11769.

2. FAROOQ S, XU L Z, OSTOVAN A, et al. Assessing the greenification potential of cyclodextrin-based molecularly imprinted polymers for pesticides detection. *Food Chem.*,**2023**,429:136822.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

酶@多孔晶态框架复合纳米探针的设计及传感应用

黄思铭*[1]、陈国胜[2]、欧阳钢锋[2]
1. 广州医科大学
2. 中山大学

具有超高活性和特异性的酶分子在环境分析与治理、疾病诊疗、食品分析和药物合成等许多领域发挥着极为重要的作用[1]。然而，天然酶的结构稳定性差，极大地限制了其大规模体外应用。将酶固定在固相载体上是一种用于提高酶稳定性的主流策略，但传统的酶固定化方法存在载体对酶构象束缚不紧密的问题，导致固定化的酶的稳定性仍不理想；此外，还存在酶负载率低和普适性差等挑战[2,3]。本研究发展了通用型的仿生固定化策略，通过在酶分子表面诱导多孔晶态框架组装，将酶分子紧密束缚于结构匹配的纳米空腔，设计出具有高稳定性的酶@多孔晶态框架复合纳米探针。此外，将开发的高性能生物纳米复合探针作为信号催化转化及放大元件，并与设计的信号报告探针级联，高效催化目标分析物定量地转换成光学信号，实现对重金属离子、生物活性小分子等的高特异性和灵敏传感分析[4-8]。

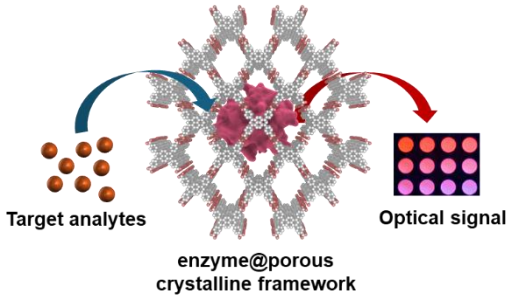


Fig. 1. Construction of enzyme@porous crystalline framework nanoprobe for sensing applications.

关键字 酶，多孔晶态框架，纳米探针，传感分析

参考文献

1. S. K. Wu, R. Snajdrova, J. C. Moore, K. Baldenius, U. T. Bornscheuer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 88-119.
2. A. Küchler, M. Yoshimoto, S. Luginbühl, F. Mavelli, P. Walde, *Nat. Nanotech.* **2016**, 11, 409-420.
3. S. Huang, G. Chen, G. Ouyang, *Chem. Soc. Rev.* **2022**, 51, 6824-6863.
4. G. Chen, S. Huang, Y. Shen, X. Kou, X. Ma, S. Huang, Q. Tong, K. Ma, W. Chen, P. Wang, J. Shen, F. Zhu, G. Ouyang, *Chem* **2021**, 7, 2722-2742.
5. S. Huang, J. Li, Y. Lin, L. Tong, N. Zhong, A. Huang, X. Ma, S. Huang, W. Yi, Y. Shen, G. Chen, G. Ouyang, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 1967-1976.
6. L. Guo, R. He, G. Chen, H. Yang, X. Kou, W. Huang, R. Gao, S. Huang, S. Huang, F. Zhu, G. Ouyang, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 17189-17200.
7. Z. Tang, X. Li, L. Tong, H. Yang, J. Wu, X. Zhang, T. Song, S. Huang, F. Zhu, G. Chen, G. Ouyang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 23608-23613.

8. H. Chen, H. Huang, H. Xu, T. Wu, Y. Xu, X. Ma, W. Yi, G. Chen, S. Huang, G. Ouyang. *Small* **2024**, 20, 202308716.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

用于蛋白组学样品前处理的硼亲合材料的制备

刘照胜*
天津医科大学

亲合分离与蛋白质前处理技术的结合是提高生物样品蛋白质翻译后修饰鉴定能力的有效手段。硼亲合材料（Boronate affinity material，BAM）利用硼酸与顺式二羟基化合物共价可逆反应，可选择性分离富集顺式二羟基生物分子，具有对样本要求低、灵敏度高、特异性高的特点，近年在糖基化修饰的识别检测方面展现了巨大的潜力。我们在常规硼亲合材料的基础上，以解决非特异性吸附、增加有效亲合位点、提高硼亲合吸附容量等目标，发展了基于无机有机杂化单体、低聚倍半硅氧烷、分子筛掺杂及分子印迹的结构新颖、功能独特的硼亲合材料用于蛋白组学样品前处理，并对硼亲合材料在分离富集，疾病诊断，药物传递和生物传感等方面的应用进行了展望。

关键字 硼亲合材料；样品前处理；蛋白质组学

参考文献

1. Y.-F. Shen, F.-F. Yuan, X.-Y. Liu, Y.-P. Huang, Z.-S. Liu, *Microchim. Acta*, **2019**, 186(12):812.
2. Y. Wang, X. Zhang, Z.-H. Wei, Y.-J. Jiao, D.-Y. An, Y.-P. Huang, Z.-S. Liu, C. Yan, *J. Chromatogr. A*, **2022**, 1666, 462848.
3. X. Zhang, Q. Wei, X. Meng, L. Zhao, Z.-S. Liu, Y.-P. Huang, *Anal. Chem.*, **2023**, 95(2), 1241-1250.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

双模板分子印迹复合磁性共价有机骨架对提升双酚萃取选择性研究

霍淑慧*、秦梦雅、卢小泉
西北师范大学

双酚类化合物是一种新型的持久性有机污染物，常见的双酚类化合物有双酚 A（BPA）、双酚 B（BPB）、双酚 F（BPF）、双酚 AF（BPAF）等, 广泛用于生产聚碳酸酯塑料、热敏纸、食品接触材料。双酚污染物具有生物累积性且难以降解，长时间接触双酚会导致人患肥胖[1]、癌症[2]、高尿酸血症[3]等多种疾病。因此，为降低双酚类污染物对人类健康造成的风险，对食品和水中的双酚类污染物进行检测有重要意义。在项研究采用 BPA、BPB 为模板分子的双模板分子印迹复合磁性共价有机骨架材料，研究其对于双酚类化合物萃取选择性提高的路径并研究相关机理，进一步将其应用于环境水样中双酚类化合物的磁固相萃取(MSPE)，实验结果显示，双模板策略能更好的促进双酚类分子的萃取选择性，该材料对四种双酚均具有宽线性范围(1~1000 μg L^{-1})和低检测限(0.22~0.85 μg L^{-1})。该方法应用于环境水样中双酚污染物的检测具有出色的回收率，且操作简便，在双酚污染物的富集和提取中有广阔的前景。

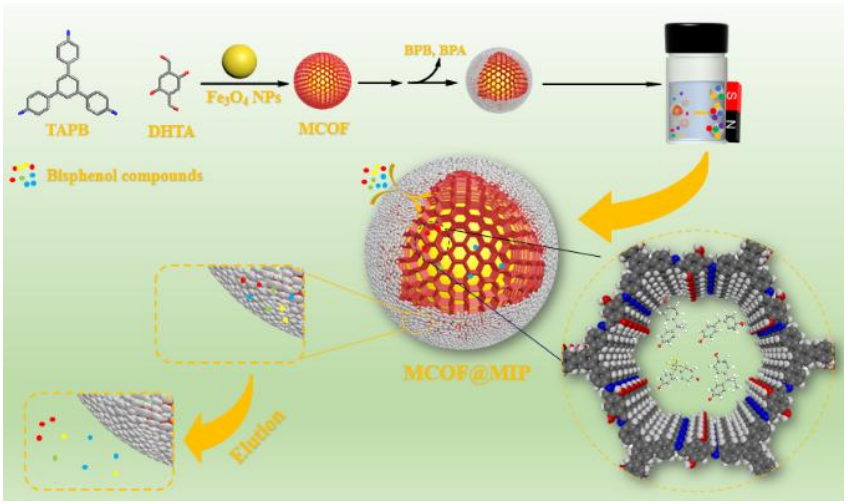


图 1 MCOF@MIP 的制备及 MSPE 流程示意图

关键字 磁固相萃取　共价有机骨架　双模板分子印迹　双酚类污染物

参考文献

1. Trasande, L. (2017). "Exploring regrettable substitution: replacements for bisphenol A." *Lancet Planet.* 1(3): e88-e89.

2. Maćczak, A., et al. (2017). "Bisphenol A, bisphenol S, bisphenol F and bisphenol AF induce different oxidative stress and damage in human red blood cells (in vitro study)." *Toxicol in vitro* 41: 143-149.

3. Lee, Y. J., et al. (2022). "Relationship between bisphenol A, bisphenol S, and bisphenol F and serum uric acid concentrations among school-aged children." *PLOS ONE* 17(6): e0268503.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

敞开式大气压直接电离离子化技术及前处理方法

熊伟[1,2]、葛苗秀[1]、苏航[1]、赵丹[1,2]、孙逸菲[1]、甘剑勤[2]、闻路红*[1,2]、张新荣[3]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司
3. 清华大学

近些年，随着生活品质的提升，食品安全和公共安全逐渐成为公众关注的焦点。如何快速、准确地检测非法添加物和危害物是一个重要的问题。敞开式大气压直接电离技术无需复杂的样品前处理，可以直接在常压环境下对样品进行检测，大大简化了检测流程，提高了检测效率，使得现场快速检测成为可能。

介质阻挡放电电离（Dielectric Barrier Discharge Ionization，DBDI）作为一种直接电离技术，在快速原位检测领域发挥了重要的作用，能够实现对各类形态样品的快速解吸附和离子化。然而，传统的 DBDI 离子源主要依赖惰性气体形成低温等离子体束，极大地限制了其在现场快速检测领域的应用。针对以上问题，通过引入热解吸技术和分体式进样技术，构建分体式 DBDI 离子源，并耦合固相微萃取模块，满足对复杂基质样品的快速、高效解吸附和离子化检测。这种设计不仅提高了离子化的效率和稳定性，还增强了对复杂基质目标物的检测能力。

三嗪类、氨基甲酸酯类以及乙酰苯胺类除草剂（甲草胺、乙草胺、丙草胺、丁草胺、扑草净和禾草敌）是三类常用的水稻除草剂，快速检测分析水稻中除草剂含量有助于评估水稻的安全性。通过研磨溶剂提取法对水稻叶子中的成分进行提取，采用分体式离子源对提取液进行检测分析，建立了六种除草剂在水稻基质加标的定量曲线，得到甲草胺、乙草胺、丙草胺、丁草胺、扑草净和禾草敌的线性相关系数 R2 分别为 0.9968、0.9990、0.9999、0.9957、0.9998 和 0.9871，及其检出限（Limit of Detections, LOD）分别为 5、5、0.5、1、0.5 和 5 μg/kg，低于国家标准限量值。此外，直接从水稻上摘下稻穗或叶片，剪切成长度为 1 cm 左右的片段，放在加热平台上检测，验证离子源应用于现场检测的能力。实验结果表明，该敞开式大气压直接电离离子源在非法添加物的检测中表现出良好的应用前景，为现场原位快速检测需求提供了新的技术支撑。

关键字 敞开式大气压，直接电离，离子化技术，前处理方法

参考文献

1. Na, N.; Zhao, M.; Zhang, S.; Yang, C.; Zhang, X. Development of a dielectric barrier discharge ion source for ambient mass spectrometry. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2007,** 18, 1859-1862.
2. Mirabelli, M. F.; Wolf, J. C.; Zenobi, R. Direct coupling of solid-phase microextraction with mass spectrometry: sub-pg/g sensitivity achieved using a dielectric barrier discharge ionization source. *Anal. Chem.*, **2016,** 88, 7252-7258.
3. Sun, Y.; Tang, Y.; Chen, Z.; Ge, M.; Xiong, W.; Wen, L. A Facile Determination of Herbicide Residues and Its Application in On-Site Analysis. *Foods*, **2024**, 13, 1280.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

MOFs 基材料作为吸附剂富集环境中的痕量分析物

张宁*
河南大学

环境中痕量污染物或者生物体中痕量生物标志物的灵敏分析一直是科研人员的追求。但由于痕量存在、基质复杂、干扰严重导致直接进样检测时难以得到系统全面的分析结果 1。因此，在检测前对其进行有效的样品前处理可对降低基质效应提高检测方法灵敏度提供有效的技术支撑。作为富集技术最核心的部分，新型吸附材料的设计与开发一直是样品预处理领域的一项重要研究内容。

金属有机框架（metal-organic frameworks, MOFs）材料作为一类由有机桥联分子（即配体）与金属离子/金属氧簇通过配位键合构筑而成的具有拓扑结构的多孔聚合物，由于多样化的结构形貌、可变的孔径大小、良好的可设计性、较高的孔隙率、可调节的比表面积、多元化的组分及丰富的功能基团，使得其在样品预处理领域拥有广阔的应用前景 2。基于此，课题组设计制备了多种 MOFs 基材料，并将其作为复杂基质中痕量分析物的分离和富集吸附剂，基于固相微萃取和固相萃取技术构建了痕量化合物的灵敏分析策略。课题组将氟化金属有机骨架材料（MOFs）策略引入样品制备领域，验证了该方法制备的材料在提高稳定性和对环境污染物提取性能方面的潜力 3。采用溶剂热法与煅烧技术及后处理技术结合，制备了纳米多孔碳微球材料(Ni@C-acid)。与未经酸处理的材料相比(Ni@C)，酸洗步骤增加了材料（(Ni@C-acid)）的比表面积、孔体积和吸附性能 4。采用简单的方法可控制备了磁性 MOF 基异质结材料，其作为吸附剂富集内源性磷酸肽，并成功的应用于人体液中痕量内源性肽的检测 5。

关键字 样品前处理，富集，金属有机框架材料

参考文献

1. Lorenzo M., Campo J., Picó Y., *TrAC Trends Anal. Chem.* **2018**, 103, 137-155.
2. Li X., Ma W., Li H., Zhang Q., Liu H., *Coordin. Chem. Rev.* **2020**, 408, 213191.
3. Zhang N., Li D., Mu M.Y., Lu M.H., Chem. Eng. J. 2020, 448, 137467.
4. Qin M.J., Li D.X., Zhu J.W., Lou X.J., Tian X., Ma W.D., Zhang N., Lu M.H., J. Chromatogr. A 2024, 1726, 464961.
5. Zhang N., Qin M.J., Zhu J.W., Lou X.J., Tian X., Ma W.D., Wang Y.M., Lu M.H., Cai Z.W., Chin. Chem. Lett. 2024. DOI: 10.1016/j.cclet.2024.110177

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

新型样品前处理方法结合色谱质谱联用技术在食品和环境分析中的应用研究

李祖光*
浙江工业大学

随着分析化学面对的研究样品日益复杂，特别是食品科学、环境科学等研究的迅速发展，对分析的 灵敏度、准确度、精密度和自动化程度等要求越来越高。复杂样品中目标待测物在测定时往往会被杂质干扰；同时，待测物的浓度越来越低，给分析检测带来了困难，因此，新型样品前处理方法是制约现代分析测试技术发展的关键之一。近年来，新型萃取技术例如分散液液微萃取以及新型绿色溶剂（如低共熔溶剂）成为样品前处理方法研究中的热点，这也符合现代绿色分析化学发展的趋势。报告人课题组针对食品和环境分析中存在的样品前处理关键问题，开展了各种样品前处理方法（包括固相微萃取、分散液液微萃取、磁性固相萃取、微波萃取、超声萃取、微波超声协同萃取、可切换溶剂和低共熔溶剂等）研究，并结合气相色谱质谱联用和液相色谱质谱联用技术，用于食品和环境等复杂样品中目标分析物的分析测试。

关键字 样品前处理；固相微萃取；分散液液微萃取；微波超声协同萃取；可切换溶剂；低共熔溶剂

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于活体固相微萃取技术研究田间豇豆中多农药的消解行为

李秀娟*、郑腾飞、陈舒妍、车近松
华中农业大学

豇豆是消费者最喜爱的蔬菜之一，但是它在生长过程中会遭受病虫害的侵袭，为确保豇豆的质量和产量，农户经常喷施农药。研究农药在农作物中的消散动力学和最终残留量对于科学指导农药应用和确保农产品的安全非常关键。目前大多数关于农药消散动力学的研究不能对同一植物体进行重复或长期监测，而且无法反映真实生物体内物质含量的准确动态变化。因此，有必要开发一种简便、准确和非致命的方法追踪监测活体植物中农药的吸收和消散规律。本研究以豇豆中检出率和超标率较高的 9 种农药为目标分析物，分别建立了豇豆中 5 种菊酯类农药的活体固相微萃取/气相色谱-质谱检测方法（in vivo SPME-GC-MS/MS）和灭蝇胺及 3 种新烟碱农药的活体固相微萃取/超高效液相色谱-质谱检测方法（in vivo SPME-UPLC-MS/MS），探究了活体采样速率与个体差异、采样时间和样品中分析物浓度之间的关系，并对方法的准确性进行了验证，考察了不同施药浓度、不同栽培条件和采摘后不同贮藏温度下豇豆中农药的消解规律。结果表明，在活体中获得的采样速率高于匀浆中的采样速率；在一定采样时间和浓度范围内，对于豇豆中的同一目标分析物可以用同一个活体采样速率值进行定量，无需重复测定。活体 SPME 分析快速、准确，为田间种植豇豆中农药的动态监测及合理使用提供理论指导和技术支持。

关键字 豇豆；农药残留；活体固相微萃取；采样速率校准法；消解规律；田间试验

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于分子印迹的 SERS 传感器在新兴环境污染物高选择性检测中的应用

李原婷*、李怡妹、王芳、赵静、韩生
上海应用技术大学

表面增强拉曼光谱（SERS）凭借其检测速度快、操作简单、“指纹”信息丰富、可直接原位检测等优点，已逐渐成为水体新兴污染物识别和定量分析的有力工具。然而 SERS 方法并非分离方法，传统的 SERS 基底也不具备选择性，因而对实际复杂样品的谱峰辨别能力较弱，从而影响 SERS 技术在实际样品分析中的广泛应用。如何将分析物从复杂组分中快速、选择性地“牵引”至 SERS 增强区域成为了研究热点[1]。

分子印迹聚合物技术（MIP）作为一种重要的仿生识别材料制备技术，能形成与目标分子空间结构和尺寸相匹配的“记忆”空穴，因而对目标分子具有高度选择识别特性，能在复杂基体中特异性分离和识别出目标物[2]。同时，MIP 具有热稳定性高和制备成本低等优点。因此，将 MIP 与 SERS 技术相结合，能有效提高分析方法的分离富集能力和检测选择性（图 1）。

本文针对实际环境样品中新兴污染物现场分析面临的挑战，构建了一系列基于分子印迹的多功能 SERS 传感器及传感方法，旨在实现复杂水环境中新兴污染物的现场、快速、高灵敏和高选择性检测。

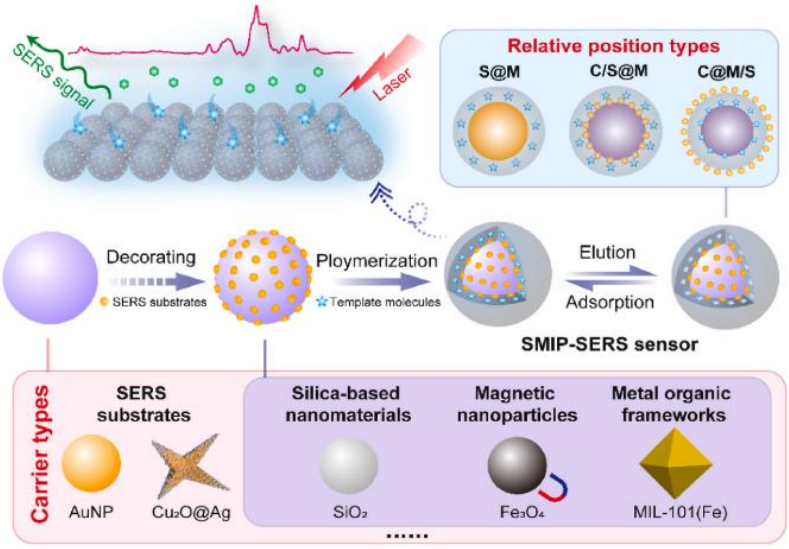


图1 基于分子印迹的SERS传感器构建方法

关键字 分子印迹聚合物；表面增强拉曼；分离；富集；新兴污染物

参考文献

1. Y.Y. Yang, Y.T. Li*, et al., *Anal. Chem.* **2021**, 93, 946−955.
2. Y.T. Li *, Y.Y. Yang, S. Han, *Trends Anal. Chem.* **2024**, 179, 117866.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于三唑啉酮类物质修饰的磁性纳米粒子分离富集血红蛋白及其在糖尿病人血液组学中的应用分析

陈晴*、吴欣泽、张龄兮
沈阳医学院

三唑啉酮（3H-1,2,4-Triazol-3-one）是一种三唑啉酮类衍生物，具有良好的生物活性，在医学及农业方面具有广泛的应用[1,2]。本研究通过有机合成的方法，将 3-氯甲基-1,2,4-三唑啉-5-酮（CMTO）结合到 PEI 修饰的磁性纳米粒子上，得到新型复合材料 CMTO@Fe_3O_4-NH_2，采用 FT-IR、Raman 等技术对该复合物进行表征，证明成功将 CMTO 结合在磁性纳米材料表面。利用 CMTO 在 pH=7.0 条件下烯醇式结构中三唑环与血红蛋白β亚基的结合及羰基与血红蛋白较高的结合力，将 CMTO@Fe_3O_4-NH_2 作为吸附剂对血红蛋白进行分离纯化的研究。在温度 20℃、pH7.0 的条件下，使用 1.0mg CMTO@Fe_3O_4-NH_2 作为吸附剂，吸附 45min 后，对 0.5mL100 μg mL^{-1} 血红蛋白时吸附效率为 93.8%，最大吸附容量为 344.83 mg g^{-1}；而对于细胞色素 C、人血清白蛋白、转铁蛋白的吸附效率较低。吸附后的血红蛋白可以通过 200mg mL^{-1} 咪唑溶液回收，洗脱效率为 100.0%。重复以上步骤 5 次，材料的吸附效率仍可达 88.13%。SDS-PAGE 结果表明，CMTO@Fe_3O_4-NH_2 可有效的洗去全血样品中的血红蛋白。质谱数据分析经过该种方法检测蛋白质共鉴定出 1114 种，对比糖尿病人和正常人的检测结果，共找到差异蛋白 252 种。

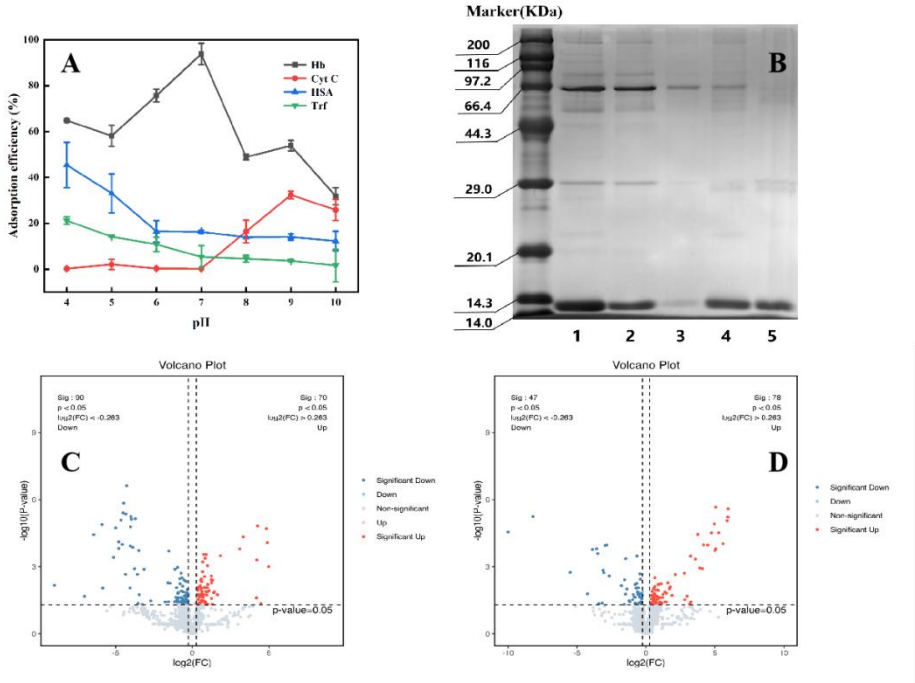


Figure 1. Effect of pH on adsorption efficiency of Hb、HSA、Trf、Cyt-C onto CMTO@Fe_3O_4-NH_2 (A). SDS-PAGE results: lane 1: Protein extract of hemoglobin in human blood; Lane 2: Supernatant after adsorption by CMTO@Fe_3O_4-NH_2; Lane 3: Supernatant pre-cleaned with secondary water; Lane 4: Supernatant after elution with 0.2 mol L^{-1} imidazole solution, Lane 5:100μg mL^{-1} hemoglobin solution. (B). Differential protein volcano map. (C, D)

关键字 三唑啉酮；磁性纳米粒子；血红蛋白；分离纯化；蛋白组学

参考文献

1. Chang LL, Ashton WT, Flanagan KL, et al. *J Med Chem.* **1993**, 20, 36(17):2558-68.
2. Côté B, Burch JD, Asante-Appiah E, et al. *Bioorg Med Chem Lett.* **2014**, 24(3):917-22.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于超亲水印迹材料的痕量有机污染物精准萃取检测新方法

王明伟[1]、李鹏飞[1]、乔凤霞[2]、闫宏远*[1]
1. 河北大学
2. 保定学院

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。有机污染物的精准检测是研究其分布、迁移、去除及人群健康效应评价的基础，是新污染物治理、保障生态环境安全和公众健康的第一步。然而，由于环境样品组成复杂，其检测存在特异性弱和基质干扰严重等问题。目前报道的有机污染物检测方法主要包括索氏提取-多层吸附色谱柱净化-气相色谱-质谱联用法、超声辅助液液萃取-多层硅胶-弗罗里硅土复合柱净化-气相色谱-质谱联用法等，这些方法存在前处理步骤繁琐耗时，消耗大量有毒试剂污染环境等问题[1]。因此亟需开发特异性好、抗基质干扰能力强、灵敏度高的环境分析新方法用于痕量有机污染物的准确检测[2]。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高选择性为中心，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，在极性体系下制备特异识别性好、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。以合成的材料为吸附剂，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分析新方法，实现了环境水中全氟化合物、农残等有机污染物的准确快速检测，为环境监测提供新的研究思路。

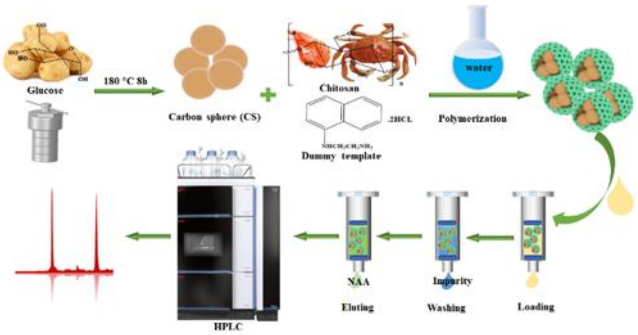


图 1 超亲水印迹材料制备及有机污染物萃取检测流程图

关键字 超亲水；分子印迹；精准萃取

参考文献

1. X. Chen, T. He, X. Yang, Y. Gan, X. Qing, J. Wang, Y. Huang, *J. Hazard. Mater.*, **2023**, 452, 131245.
2. M. Wang, F. Qiao, H. Yan, *Green Chem.*, **2021**, 23, 5179–5188.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

固相微萃取材料绿色分析化学(GAC)制备策略及其在样品前处理领域中的应用

雷霄云*、王欣、余露、蒙思盈
陕西理工大学

自 2012 年绿色分析化学技术（Green Analytical Chemistry, GAC）提出以来，已广泛应用于分析化学领域[1]。GAC 原则提倡使用节能仪器、减少有毒试剂，尽量降低有害废物产生。目前，符合 GAC 原则的绿色萃取技术发展策略[2]主要包括：i）使用低毒性且生物可降解的绿色溶剂；ii）开发“微”萃取技术，实现自动化和微型化，如：分散微固相萃取、磁分散微固相萃取、棒吸附微萃取、转盘吸附萃取、织物相吸附萃取、固相微萃取（SPME）、薄膜微萃取等。管内固相微萃取技术（IT-SPME）因其样品、试剂和能源消耗少、操作简便性、分析时间短、自动化能力强且兼容多种分析仪器，得到广泛应用。

基于以上“绿色”原则，本团队近期主要开展了以下工作：开发具有良好生物相容性的天然仿生 IT-SPME 材料，以减少样品基质效应，并通过绿色溶剂替代有机溶剂，提高制备方法的高效性和简便性，进而提高检测灵敏度，最终将制备的材料应用于生物和动物源性样品中残留抗生素的分析检测。

首先，团队引入生物膜磷脂结构类似物磷脂酰胆碱（PC）作为主要功能单体，使用绿色溶剂离子液体（ILs）快速制备了两性离子仿生微萃取整体柱，并与 cLC-LIF 耦合实现动物源性食品中多肽类抗生素的高效前处理富集检测。随后，引入无毒且可生物降解的天然产物羟丙基-γ-环糊精（HP-γ-CD），通过开环反应进行烯基功能化，结合 PC 类两性离子单体[3]，通过“一锅煮”方法制备了具有良好生物相容性的两性离子修饰环糊精功能化“绿色”IT-SPME 整体柱，用于水环境中残留抗生素的富集检测。

此外，团队还引入磷基甜菜碱（PC）和磺基甜菜碱（SB）类两性离子聚合物作为功能单体，以绿色溶剂离子液体（ILs）为介质，快速制备了不同两性离子杂化微萃取整体柱。结合 HPLC-UV 方法，该技术用于乳制品中多肽类抗生素（PPTs）的富集检测，线性范围为 8-1000 μg/L，检测限（LOD）≥5.4 μg/L。通过密度泛函理论（DFT）分析了 PC 和 SB 聚合物微萃取材料与三种目标物的结合力，揭示了富集过程中的作用机制。上述仿生天然材料的制备及其优异的分析检测结果，为绿色萃取技术在复杂样品痕量残留检测中的应用提供了新思路。

关键字 绿色分析化学、固相微萃取、两性离子、环糊精功能化

参考文献

1. J. Werner, et al. Green sorbents in sample preparation techniques-naturally occurring materials and biowastes. *TrAC-Trend Anal. Chem.*, 176 (**2024**) 117772.
2. Francesc A, et al. Green extraction techniques in green analytical chemistry: A 2019-2023 up-date. TrAC-*Trend Anal. Chem.*, 170 (**2024**) 117464.
3. Q.S. Li, et al. Zwitterionic biomaterials. *Chem. Rev.*, 122 (**2022**) 17073-17154.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

用于修饰蛋白质组学样品前处理的分子印迹聚合物制备

黄艳萍*
天津医科大学

分子印迹聚合物（Molecularly Imprinted Polymer，MIP）有与目标分子形状和大小一致的三维空穴，同时还具有高分子抗腐蚀、良好可设计性、预定选择性和高度稳定性等优点，因而已开始用于翻译后修饰肽段的富集，如磷酸化肽、乙酰化肽段及糖肽，显示了良好的富集选择性。近期我们从发展设计新型功能单体、交联剂、致孔剂以及聚合模式等方面出发，构建了包括大分子拥挤体系、低聚倍半硅氧烷、以及液晶单体的一系列 MIP 制备新方法，发展了基于印迹整体柱的乙酰化、豆蔻酰化、戊二酰化、苯甲酰化、糖基化及泛素化多肽特异性富集材料，结果显示印迹整体柱在修饰蛋白质组学前处理的较大的应用潜力，有望为癌症生物标记物的寻找提供有效途径。

关键字 分子印迹聚合物；修饰蛋白质组学；样品前处理

参考文献

1. X. Zhang, Y. Wang, Z.-H. Wei, D.-Y. An, W.-R. Pu, Z.-S. Liu, Y.-P. Huang, *J. Proteome Res.*, **2022**, 21, 325-338..
2. W.-J. Hao, W.-J. Chen, M.-H. Chai, F.-F. Yuan, L.-M. Huang, Z.-H. Wei, X. Zhang, Y.-P. Huang, Z.-S. Liu, *Sens. Actuat. B: Chem.*, **2022**, 356, 131338.
3. W.-R. Pu, D.-Y. An, Y. Wang, X. Zhang, Y.-P. Huang, Z.-S. Liu, *Anal. Chim. Acta*, **2022**, 1204, 339697

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：报告

基于低共熔溶剂/体系的样品处理技术研究

毕文韬*[1]、陈大勇[2]
1. 南京师范大学
2. University of British Columbia

低共熔溶剂（Deep Eutectic Solvent，DES）是由氢键受体（Hydrogen Bond Acceptor，HBA）与氢键供体（Hydrogen Bond Donor，HBD）通过混合作用形成的一种新型绿色溶剂。DES 凭借其低毒性、良好的生物相容性、出色的热稳定性以及低廉的成本，成为了替代有害有机溶剂的可持续选择。在样品处理领域，包括提取和材料合成等方面，DES 展现出了广泛的应用前景。然而，在采用 DES 进行提取操作时，通常需要预先制备 DES，这一过程可能带来提取时间延长、溶剂损失增加、杂质含量提升以及 DES 在转移过程中结晶等问题。为解决这些挑战，我们提出了基于低共熔体系（DESys）的提取方法。该方法创新地将目标化合物视为 DES 的组成部分之一，直接将 HBA（或当目标化合物本身就是 HBA 时，则为 HBD）加入样品中，促使 DES 的原位形成与天然产物的同步提取。研究证实，目标化合物与 HBAs（或 HBDs）之间能够发生直接的相互作用，这不仅缩短了形成稳定氢键所需的时间，还显著提高了提取效率。基于这一原理，通过将反应物与溶剂以 HBD 和 HBA 的形式巧妙混合，构建出 DESys，进而降低整个体系的熔点。在温和的液态条件下，这一体系不仅便于功能化材料的制备与改性，还使得这些材料在样品处理中展现出卓越的分析性能。这些研究成果不仅为低共熔溶剂的传统应用方式带来了变革，更为基于 DESys 的新型应用领域开发提供了广阔的空间和可能性。

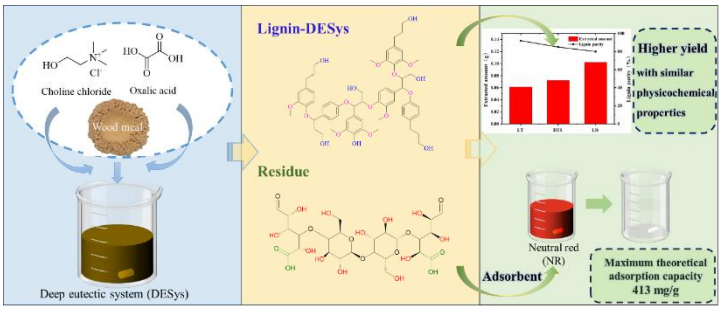


Fig. 1 基于 DESys 的材料改性

关键字 低共熔溶剂；低共熔体系；样品处理

参考文献

1. Z. Wang, W. Ge, W. Bi, D.D.Y. Chen, *Food Chem.*, **2024**, 447, 139004.
2. Z. Wang, S. Wang, Y. Zhang, W. Bi, *Green Chem. Eng.* **2024**, in press.
3. Z. Wang, T. Li, W. Bi, W. Zhang, *Chem. Eng. J.*, **2023**, 461, 141859.
4. Z. Xiao, M. Liu, W. Bi, D.D.Y. Chen, *Food Chem.*, **2023**, 412, 135589.
5. M. Liu, S.Wang, W. Bi, D.D.Y. Chen, *Food Chem.,* **2023**, 399, 133941.
6. M. Liu, D. Cao, W. Bi, D.D.Y. Chen, *ACS Sustain. Chem. Eng.*, **2021**, 9(36), 12049-12057.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

氨基修饰的三维阳离子共价有机骨架用于六氟双酚 A 的高效去除

夏炎*
南开大学

本文使用四(4-甲酰基苯基)硅烷(TFS)四面体配体，分别与 1,3-二氨基胍盐酸盐(DGCl)和三氨基胍盐酸盐(TGCl)进行席夫碱反应，制备了两种氨基功能化的 3D iCOFs——DG-TFS 和 TG-TFS。DG-TFS 和 TG-TFS 对 BPAF 的吸附过程遵循伪二级动力学模型和 Langmuir 等温线模型，说明该过程属于化学吸附，BPAF 倾向于在吸附剂表面形成紧密的单层分布。据 Langmuir 模型预测，DG-TFS 和 TG-TFS 对 BPAF 的理论最大吸附量分别为 1250mg g^{-1} 和 1193 mg g^{-1}，远高于现有的吸附剂[4]。尽管 DG-TFS 的比表面积（9.02 m^2 g^{-1}）远小于 TG-TFS（254.94 m^2 g^{-1}），但因其结晶度更好、孔径更大、电荷密度更高，反而表现出更优异的吸附能力。此外，DG-TFS 和 TG-TFS 均在宽 pH 范围内（2≤pH≤10）表现出稳定的吸附能力，可适用于不同的酸碱环境；经过六次吸附-解析循环后，对 BPAF 的去除率仍能保持在 91% 和 89%，表现出良好的再生性能；应用于实际水体和水果样本时，其吸附能力也可达到以纯水基质时的 90%以上，具有实际应用的潜力。

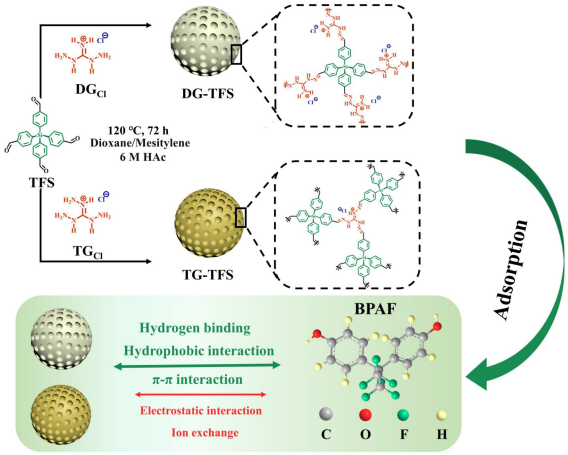


图 1 DG-TFS 和 TG-TFS 的制备及其吸附 BPAF 的机理

关键字 3D iCOFs；六氟双酚 A；高效去除

参考文献

1. H. G. Moon, S. Bae, H. J. Lee, Y. Chae, W. Kang, J. Min, H. M. Kim, J. S. Seo, J. D. Heo, M. Hyun, S. Kim, *Ecotox. Environ. Safe.*, **2024**, 281, 116598.
2. J. Xiang, P. Zhou, H. Mei, X. Liu, H. Wang, X. Wang, Y. Li, *Microchim. Acta*, **2023**, 190(5), 200.
3. Y. Zhang, H. Li, J. Chang, X. Guan, L. Tang, Q. Fang, V. Valtchev, Y. Yan, S. Qiu, *Small*, **2021**, 17(22), 2006112.
4. H. Zhang, G. L. Li, Q. Q. Zhu, P. Xiong, R. B. Li, S. J. Liu, A. Q. Zhang, C. Y. Liao, G. B. Jiang, *J. Hazard. Mater.* **2022**, 439, 129584.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

氨基修饰的三维阳离子共价有机骨架用于六氟双酚 A 的高效吸附

张静、毕孟姿、王春晓、夏炎*
南开大学

六氟双酚 A（BPAF）是一种广泛存在于塑料和食品包装中的内分泌干扰物，它会干扰人体免疫系统，影响婴幼儿发育。BPAF 易在水中富集，且难以降解，而目前的吸附剂普遍存在活性位点少、吸附容量低和化学稳定性差等问题。因此，亟需设计一种高效稳定的材料用于吸附水体中的 BPAF。三维离子共价有机骨架（3D iCOFs）因其较高的孔隙率和丰富的活性位点，在吸附领域展现出巨大的潜力。然而，3D iCOFs 的合成难度高，关于其功能化设计的报道较少，这限制了它的实际应用。

为解决这一问题，本文使用四（4-甲酰基苯基）硅烷（TFS）四面体配体，分别与 1,3-二氨基胍盐酸盐（DG_{Cl}）和三氨基胍盐酸盐（TG_{Cl}）进行席夫碱反应，制备了两种氨基功能化的 3D iCOFs——DG-TFS 和 TG-TFS。DG-TFS 和 TG-TFS 对 BPAF 的吸附过程遵循伪二级动力学模型和 Langmuir 等温线模型，说明该过程属于化学吸附，BPAF 倾向于在吸附剂表面形成紧密的单层分布。据 Langmuir 模型预测，DG-TFS 和 TG-TFS 对 BPAF 的理论最大吸附量分别为 1250 mg g^{-1} 和 1193 mg g^{-1}，远高于现有的吸附剂。尽管 DG-TFS 的比表面积（9.02 m^2 g^{-1}）远小于 TG-TFS（254.94 m^2 g^{-1}），但因其结晶度更好、孔径更大、电荷密度更高，反而表现出更优异的吸附能力。此外，DG-TFS 和 TG-TFS 均在宽 pH 范围内（2≤pH≤10）表现出稳定的吸附能力，可适用于不同的酸碱环境；经过六次吸附-解析循环后，对 BPAF 的去除率仍能保持在 91%和 89%，表现出良好的再生性能；应用于实际水体和水果样本时，其吸附能力也可达到以纯水基质时的 90%以上，具有实际应用的潜力。

两种 3D iCOFs 对 BPAF 高效的吸附能力归因于它们之间的多种相互作用。富含氨基的胍盐配体能在宽 pH 范围内提供稳定的氢键供体，从而与 BPAF 的羟基和氟基团形成较强的氢键；富含苯环的 TFS 配体可以提高疏水相互作用，同时为 BPAF 提供丰富的π-π相互作用位点。此外，静电效应和阴离子交换作用也促进了吸附能力的提高。

综上，本文提出了一种稳定高效去除水体中 BPAF 的新方法，并深入探讨了吸附机理，为 3D iCOFs 在水体净化和食品安全检测中的进一步应用奠定了基础。

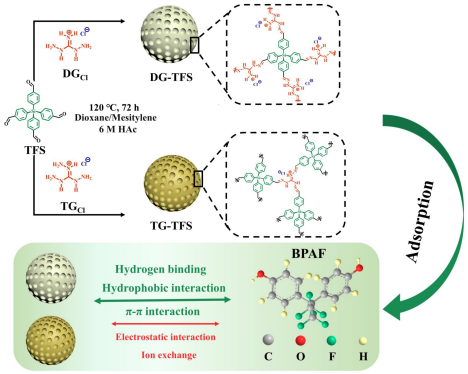


图 1 DG-TFS 和 TG-TFS 的制备及其吸附 BPAF 的机理

关键字 3D COF；iCOF；胍基；功能化；六氟双酚 A；高效吸附

参考文献

1. H. G. Moon, S. Bae, H. J. Lee, Y. Chae, W. Kang, J. Min, H. M. Kim, J. S. Seo, J. D. Heo, M. Hyun, S. Kim, *Ecotox. Environ. Safe.*, **2024**, 281, 116598.

2. J. Xiang, P. Zhou, H. Mei, X. Liu, H. Wang, X. Wang, Y. Li, *Microchim. Acta*, **2023**, 190(5), 200.

3. Y. Zhang, H. Li, J. Chang, X. Guan, L. Tang, Q. Fang, V. Valtchev, Y. Yan, S. Qiu, *Small*, **2021**, 17(22), 2006112.

4. H. Zhang, G. L. Li, Q. Q. Zhu, P. Xiong, R. B. Li, S. J. Liu, A. Q. Zhang, C. Y. Liao, G. B. Jiang, *J. Hazard. Mater.* **2022**, 439, 129584.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

具有缺失簇缺陷的 UiO-66 用于从土壤样品中高效提取和富集苯甲酰脲类杀虫剂

娄雪静、卢明华*
河南大学

在晶体结构中制造缺陷可以调整金属有机框架（MOFs）的性能，例如通过产生更多的孔隙和活性位点来进一步改善其吸附和催化性能。本研究首先制备了含有 Zn 和 Zr 的双金属 UiO-66，随后通过简单的酸洗去除 Zn^{2+}，得到了仅含 Zr 的具有缺失簇缺陷的 UiO-66（UiO-66-1/3）。具有簇缺陷的 UiO-66-1/3 比表面积（1177 $m^2 \cdot g^{-1}$）大于未酸洗的 Zn/Zr-UiO-66-1/3 的比表面积（678 $m^2 \cdot g^{-1}$）。将 UiO-66-1/3 用作分散固相萃取（dSPE）的吸附剂与高效液相色谱-二极管阵列检测器（HPLC-DAD）结合，用于土壤样品中的痕量苯甲酰脲类杀虫剂的富集和分析检测，3 分钟便可以达到吸附平衡，富集因子高（202.33- 324.89），检出限低（0.005-0.04 $ng \cdot mL^{-1}$）和线性范围宽（0.02-200 $ng \cdot mL^{-1}$）等优点。此外，UiO-66-1/3 作为吸附剂在重复使用 16 次后，回收率仍保持在 95%以上。这项工作为富集和检测环境中的苯甲酰脲类杀虫剂提供了一种新材料。

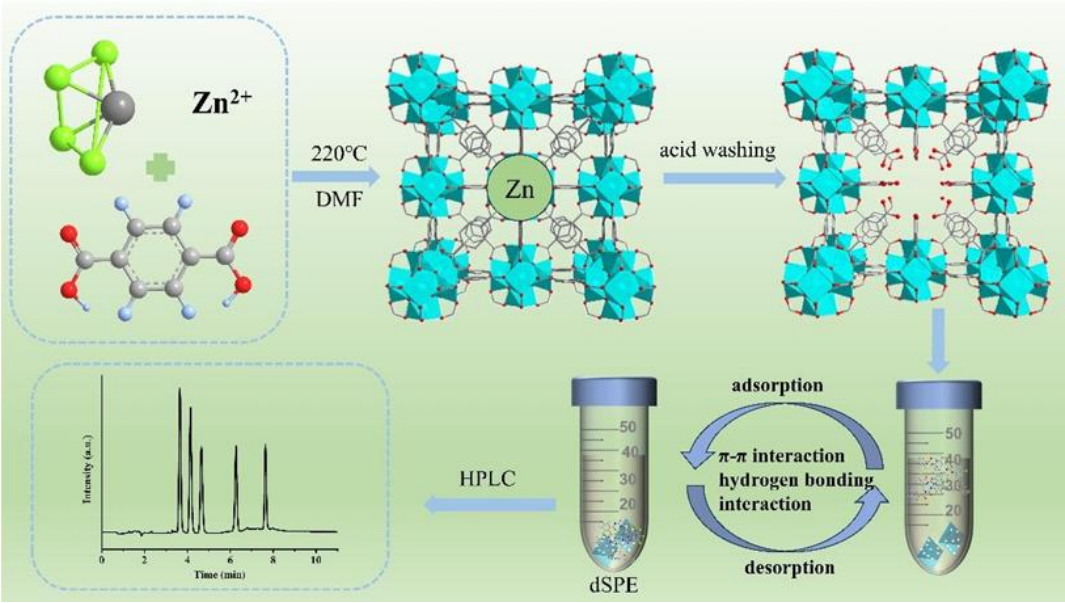


图 1 基于 UiO-66-1/3 为吸附剂的 dSPE-HPLC 示意图

关键字 金属有机框架;UiO-66；簇缺陷；苯甲酰脲类杀虫剂；分散固相萃取

参考文献

1. X. Feng, H. Jena, C. Krishnaraj, D. Arenas-Esteban, K. Leus, G. Wang, J. Sun, M. Rüscher, J. Timoshenko, B. Cuenya, S. Bals, P. Voort, *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, 143, 21511-21518.
2. J. Wang, L. Liu, C. Chen, X. Dong, Q. Wang, L. Alfilfil, M. AlAlouni, K. Yao, J. Huang, D. Zhang, Y. Han, *J. Mater. Chem. A*, **2020**, 8, 4464-4472.
3. J. Yu, X. Wang, G. Lu, H. Xie, X. Xie, J. Sun, J. *Hazard. Mater.*, **2024**, 469, 134055.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

富介孔中空碳纳米球作为顶空固相微萃取纤维涂层从水和蜂蜜中萃取多环芳烃

朱嘉玟、卢明华*
河南大学

多孔中空碳纳米球（PHCNs）由于具有化学稳定性好、比表面积大、孔隙结构丰富等固有优点而备受关注。在这项工作中，通过简单有效的方法制备了富介孔的 PHCNs，而无需引入涂层和蚀刻等繁琐的操作。采用 PHCNs 作为纤维涂层材料，建立了顶空固相微萃取（HS-SPME）与气相色谱-火焰离子化检测器（GC-FID）相结合的分析方法，提取并富集多环芳烃。所建立的分析方法具有宽的线性范围（0.01-30 ng·mL^{-1}），低的检出限（0.003-0.006 ng·mL^{-1}），高的富集因子（5420-9211）。PHCNs 对多环芳烃（PAHs）的高效富集能力主要归因于其独特的内置空腔结构、π-π堆积相互作用以及含氧基团的存在。在真实样品检测中，校园湖水和蜂蜜的加标回收率为 80.93-118.0%，相对标准偏差不大于 10.6%。研究结果表明，PHCNs 作为一种吸附材料，在复杂基质中痕量污染物的提取和富集方面具有广阔的应用前景。

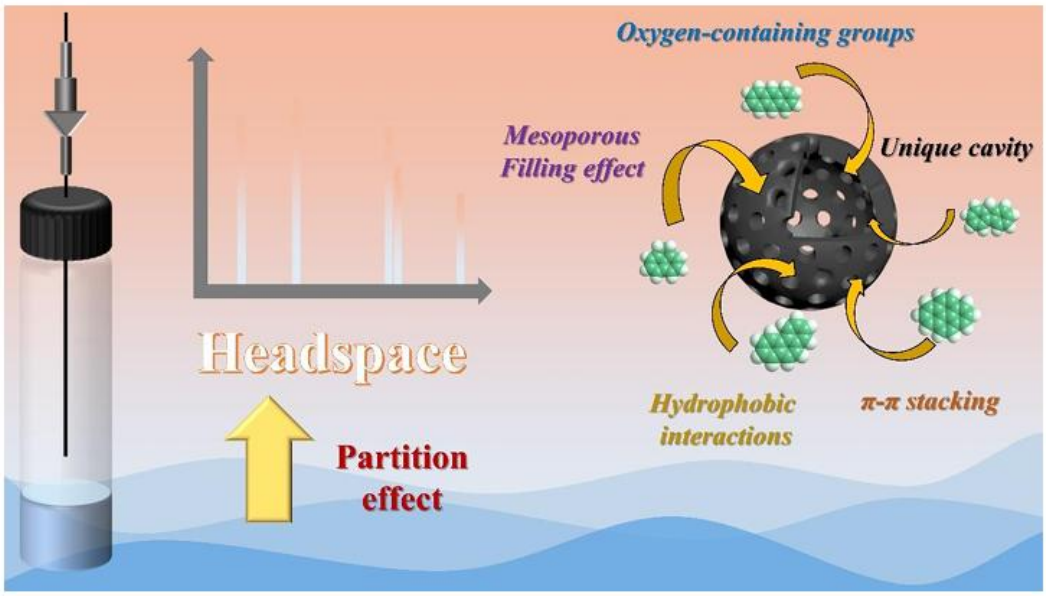


图 1 基于 PHCNs 纤维的 HS-SPME 示意图

关键字 样品前处理；顶空固相微萃取；多环芳烃；多孔中空碳纳米球

参考文献

1. Z. Lou, Y. Wang, Y. Yang, Y. Wang, L. Zhu, J. *Nanomater.*, **2020**, 10, 378-410.
2. N. Reyes-Garces, E. Gionfriddo, G.A. Gómez-Ríos, M.N. Alam, E. Boyacı, B. Bojko, V. Singh, J. Grandy and J. Pawliszyn, *Anal. Chem*, **2017**, 90, 302-360.
3. D. Bin, Z. Chi, Y. Li, K. Zhang, X. Yang, Y. Sun, J. Piao, A. Cao, L. Wan, *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 13492-13498.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

MOF 衍生多孔碳微球 Ni@C-acid 作为固相微萃取涂层从茶汤中提取多环芳烃

秦梦洁、张宁*
河南大学

多环芳烃（PAHs）是一类具有多个芳香环的有机化合物，其中许多种类已经被证实具有致癌性和致突变性。长期接触 PAHs 会对人体和生物造成不利的健康影响和生态影响，这是现代社会普遍存在的问题。因此，生活中 PAHs 的监测一直是人们极为关注的问题。由于 PAHs 在环境中伴随着复杂基质的影响，开发具有高吸附性能、良好稳定性的新型吸附材料用于检测复杂基质中痕量 PAHs 的含量和种类是必要的。课题组首次以聚乙烯吡咯烷酮为理想的模板剂、稳定剂和纳米粒子分散剂，采用溶剂热法合成了金属有机骨架前驱体。将前驱体通过碳化和酸洗获得优异吸附性能的纳米多孔碳微球（Ni@C-acid）作为固相微萃取（SPME）的纤维涂层用于提取和预富集 PAHs。与未经过酸洗材料（Ni@C）相比，Ni@C-acid 吸附性能得到很大提升，这一现象可归因于酸洗后的材料表面积、孔隙体积有所增加。Ni@C-acid 作为 SPME 涂层用于气相-火焰离子化检测器（GC-FID）富集 PAHs 的实验结果表明建立的方法具有较宽的线性范围（0.01-30 ng mL^{-1}）、良好的相关系数（0.9916-0.9984）、较低的检测限（0.003-0.011 ng mL^{-1}）和较高的富集因子（5273-13793）。建立的方法成功地用于实际茶汤样品中痕量 PAHs 的检测，回收率为 80.94-118.62%。本工作的合成策略提供了一种制备良好稳定性和高吸附性能的多孔碳材料方法，在提取污染物方面具有潜在的应用前景。

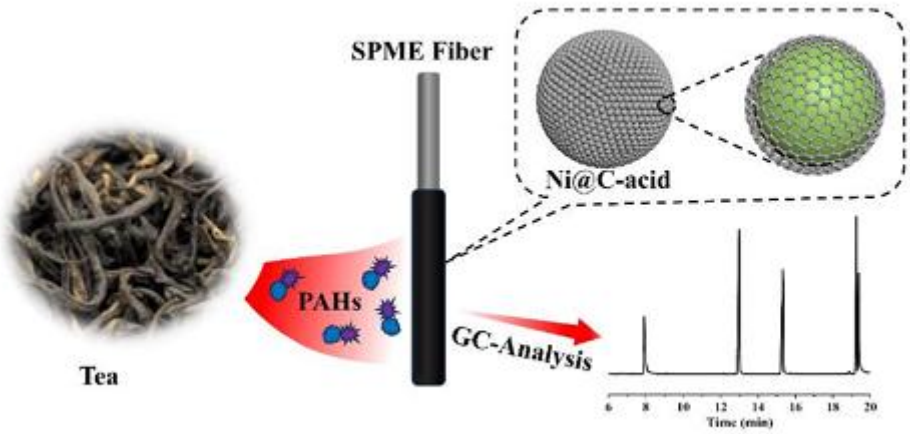


图 1 基于 Ni@C-acid 涂层纤维的 HS-SPME 示意图

关键字 金属有机框架；多孔碳微球；固相微萃取；多环芳烃；样品前处理

参考文献

1. T. Zhou, L. Ding, G. Che, W. Jiang, L. Sang, *TrAC-Trends Anal. Chem.*, **2019**, 114, 11-28.

2. W. Guo, H. Tao, H. Tao, Q. Shuai, L. Huang, *Anal. Chim. Acta*, **2023**, 1287, 341953.
3. L. Yin, Q. Hu, S. Mondal, J. Xu, G. Ouyang, *Talanta*, **2019**, 202, 90-95.
4. Y. Yang, P. Qin, X. Zhang, J. Niu, S. Tian, M. Lu, J. Zhu, Z. Cai, *Anal. Methods-Uk*, **2018**, 10, 322-329.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

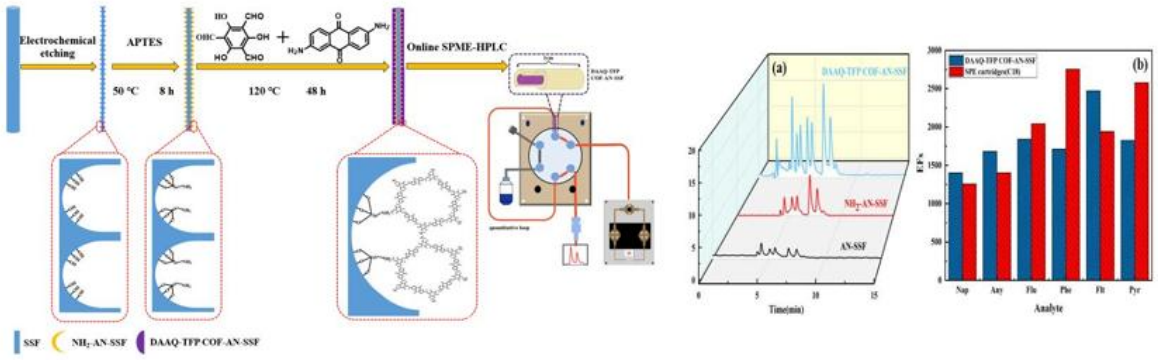
DAAQ-TFP-COF 键合金属纤维作为萃取剂用于 PAHs 的在线μSPE-HPLC 研究

李保会*、吕炳志
华北电力大学（保定）

作为一类典型的致癌物，多环芳烃(PAHs)广泛存在于诸如河流、土壤等环境中，由于性质稳定，水体中的 PAHs 会因食物链进入人体而危害人类健康。本文以 DAAQ-TFP-COF 键合金属纤维为吸附剂，实现了μSPE 与 HPLC 在线联用分析水中多种 PAHs。

以电化学蚀刻的不锈钢纤维为基体，将 DAAQ-TFP COF 作为 SPME 萃取涂层，通过化学键和的方式固定在不锈钢纤维的微孔和表面，将其作为 SPME 萃取纤维，放入高效液相色谱(HPLC)的定量环内，构成在线μSPE-HPLC 联用系统，以水体中 6 种 PAHs 为目标分析物，考察了纤维的富集性能。

研究发现通过在线μSPE-HPLC 联用的方式，所制备的纤维可作为μSPE 萃取纤维用于水体中 PAHs 的富集。该涂层制备策略简单可靠，有效地提高了纤维的化学稳定性、可重复使用性和使用寿命。与传统的 SPE cartridges (C_{18})相比，DAAQ-TFP-COF 键合纤维对多环芳烃的富集效率更高，这主要是由于多环芳烃的相互作用包括π-π堆叠作用。所制备的 DAAQ-TFP COF 键合纤维用于在线μSPE-HPLC 的方法具有良好的线性度、低 LODs、和较好的准确度，是一种很有潜力的固相微萃取纤维。在线 SPME-HPLC 联用系统的优越特性有利于更多在线富集μSPE 纤维的开发



关键字 在线富集；液相色谱；微固相萃取；有家有机框架材料

参考文献

1. C. L. Arthur, J. Pawliszyn. *Analytical Chemistry*, **1990**, 62(19): 2145-2148.
2. H. L. Lord, J. Pawliszyn. *Journal of Chromatography A*, **2000**, 885(1-2): 153-193.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

Magnetic preconcentration and probe-based immunoassay coupling to inductively coupled plasma mass spectrometry for protein analysis

陈若虹*、林里、杨丽华、方玲、谢强
中山大学

Application of magnetic preconcentration and probe-based signal amplification strategy coupling to inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) is a more accurate, sensitive and specific detection method for protein in complex biological samples compared to conventional methods. We described an element-labelling strategy based on magnetic preconcentration and probe-based immunoassay coupling to ICP-MS detection. The magnetic beads (MBs) modified with epoxy groups were capable of enriching target proteins and separating them from complex matrices. The probe constructed by conjugating anti-AQP1 antibody molecules on the surface of gold nanoparticles could specifically recognize target proteins attached on MBs and be analyzed by ICP-MS. The concentration of target protein could be precisely quantified and amplified by 14,000 times through the corresponding signal of Au atoms. This assay for AQP1 protein quantification achieved a detection limit down to 0.023 ng mL− 1, a broad linear calibration curve between 0.3 ng/mL and 30 ng/mL, as well as outstanding specificity. The proposed method was successfully applied to detect AQP1 protein in human urine samples, showing the potential for its applications concerning accurate protein quantification provided the antibodies specific to these target proteins are available.

关键字 Protein detection ; Probe; Signal amplification; Inductively coupled plasma mass spectrometry

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

界面辅助合成的共价有机骨架薄膜用于高效萃取微囊藻毒素

张文敏[1]、汪志勇[2]、张兰*[2]
1. 闽江师范高等专科学校
2. 福州大学

薄膜固相萃取（F-SPE）是传统固相萃取（SPE）衍生出来的一种新型的样品前处理技术。相比于磁性固相萃取（MSPE）、分散固相萃取等技术（DSPE），F-SPE 避免了由吸附剂分散性差而引起的萃取效果不佳等问题[1]。同时，该技术还能有效简化吸附剂与溶液分离时所需离心等繁琐步骤，显著提高前处理的效率和便捷性。显然，薄膜在萃取过程起着核心作用，它决定着萃取效率的高低。

共价有机骨架（COFs）作为一种新兴的多孔晶体化合物，主要由 C、O、N、H 等轻元素组成。由于 COFs 具有可调的孔径、高的比表面积、周期性骨架以及优异的热化学稳定性，被广泛的应用于样品前处理领域[2]。尽管 COFs 作为吸附剂用于目标物的分离与富集一直是研究热点，但是 COFs 薄膜在样品前处理领域却并不多见。这是因为 COFs 在大多数溶剂中溶解度较差，导致其形态多为微晶粉末形态、难以加工，将 COFs 由粉末形态转化为膜状更是一大挑战。目前，COFs 薄膜的生长通常需要借助平面基底[3]，但是基底在高温高压等合成条件下容易损坏，并且 COFs 薄膜也可能因此失去部分结晶度而塌陷，这严重阻碍了 COFs 应用前景。

本研究采用一种温和条件下的液-液界面辅助合成方法，制备了一种 COF 薄膜（TPB-DMTP）（图 1a）。由于其多孔结构、高比表面积和丰富的可接触吸附位点，PB-DMTP 薄膜对微囊藻毒素（MCs，一种藻类毒素）表现出优异的萃取性能。将基于 TPB-DMTP 薄膜的 F-SPE 与高效液相色谱串联质谱法（HPLC-MS/MS）相结合，建立了一种高灵敏的分析方法用于检测 MCs。在最佳条件下，该方法具有较宽的线性范围（2.0~800.0 pg mL^{-1}），良好线性关系（$R \geq 0.9991$），低检测限（0.8~3.0 pg mL^{-1}）和令人满意的精密度（$RSD \leq 7.1\%$），并成功应用于实际生物样品中 MCs 的检测。在贻贝中检测到微量 MC -RR（42.4 pg mL^{-1}）和 MC-YR(14 .6 pgmL^{-1})（图 1b）。研究结果显示 COFs 薄膜在样品预处理中具有出色的应用潜力。

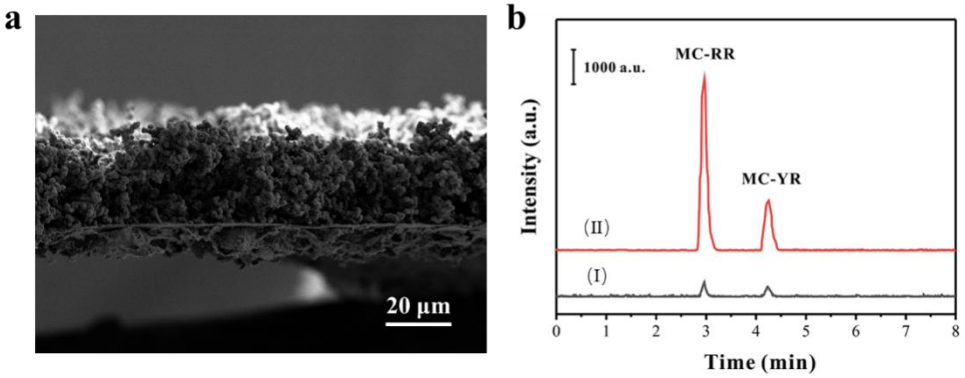


图 1 （a）PB-DMTP 薄膜的扫描电镜图和（b）贻贝样品经 F-SPE 处理前后的色谱图
（I）未经 F-SPE 处理；（II）经 F-SPE 处理

关键字 共价有机骨架；薄膜固相萃取；高效液相色谱串联质谱法；微囊藻毒素

参考文献：

1. R. Karami, F. Ahmadpoor, M. Nasrollahzadeh, et al. Food Chem., **2022**, 377, 131967.
2. F. Tan, S. Han, D. Peng, et al. J. Am. Chem. Soc., **2021**, 143, 3927-3933.
3. J. Shen, R. Zhang, Y. Su, et al. J. Mater. Chem. A, **2019**, 7, 18063-18071.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

NH2-MON-SPME-GC-MS/MS 法高灵敏检测人体呼出气中痕量醛类生物标志物

闫宏远*、张飞然、刘雪松、白立改、王明伟
河北大学

呼出气中痕量生物标志物高灵敏检测技术对肺癌的早期发现、治疗干预和预后监测具有重要意义 1,2。但由于疾病生物标志物往往为痕量水平，而且呼出气组分复杂、湿度大，分析过程面临着重大挑战 3。本研究将氨基微孔有机网络（NH2-MON）作为固相微萃取（SPME）纤维涂层，采用顶空固相微萃取结合气相色谱-三重四极杆质谱建立了人体呼出气中醛类生物标志物的高灵敏检测方法。该方法创新性地将样品采集和固相微萃取相结合，不仅实现了两步富集过程，显著增强了肺癌生物标志物检测的萃取富集效率和重现性，同时有效避免呼出气中水蒸气带来的基质干扰。NH2-MON 作为 SPME 纤维涂层，对 5 种关键的醛类肺癌生物标志物表现出优异的萃取富集能力，为人体呼出气中醛类生物标志物的高灵敏检测提供了新方法。

关键字 固相微萃取，气相色谱-质谱，呼出气，生物标志物

参考文献：

1. M. Khoubnasabjafari, M.R.A. Mogaddam, E. Rahimpour, J. Soleymani, A.A. Saei, A. Jouyban. *Crit. Rev. Anal. Chem.* **2022**, 52(7), 1461-1487.
2. D. Marzorati, L. Mainardi, G. Sedda, R. Gasparri, L. Spaggiari, P. Cerveri. *J. Breath Res.* **2019**, 13(3), 034001.
3. S. Das, M. Pal. *J. Electrochem. Soc.* **2020**, 167(3), 037562.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

基于印迹型共价有机框架的铅离子高选择性分离体系研究

霍安然、张依、何紫彤、赵佳、尤雨桐、杨怡、李伟涛*
邢台学院

金属污染物的大量排放对环境造成了巨大威胁，针对这类金属污染物的检测和处理技术不断革新，分子印迹技术在分离领域一直备受关注，将分子印迹技术应用到金属污染物的分析治理可提供一种高效的金属污染物分析手段，选择合适的印迹组分基体材料是关键，本项目将印迹技术和共价有机框架材料相结合，以铅离子为模板离子，硅胶为载体，壳聚糖和 COF 为功能单体，γ-（2,3 环氧丙氧）丙基三甲氧基硅烷（KH-560）为偶联剂，基于溶胶-凝胶法获得了获得了对铅离子具有高选择性的印迹型共价有机框架材料，通过 SEM、TEM、PXRD、FTIR、TGA 等表征手段对获得的材料组分进行了研究，并考察了 pH、温度、离子强度等条件对新型铅离子印迹材料吸附性能的影响，优化了洗脱条件。最佳实验条件下获得了方法的分析性能参数：检出限为 0.134 μg L^{-1}，精密度为 5.6%，考察了体系的抗干扰能力，回收率介于 95%~105%之间，表明该材料对其他共存离子有较好的抗干扰能力。最后构建的体系用于环境实际水样和标准品中铅离子的测定，得到了满意的回收率，证明了方法良好的可行性和准确度。该检测体系的构建也为其他环境污染物的分析检测提供了一种合适的印迹型共价有机框架备选材料和灵敏可靠的分析手段。

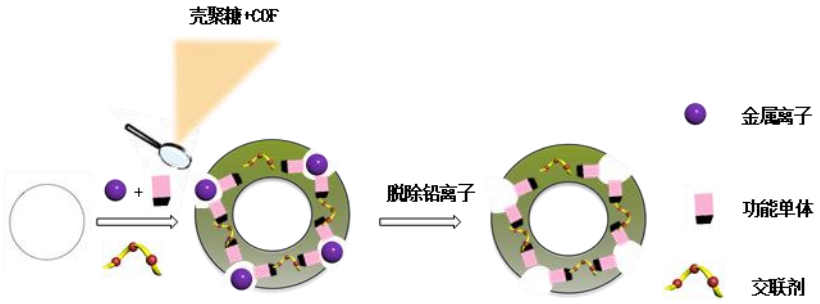


图 1 铅离子印迹型共价有机框架的制备

关键字 印迹型共价有机框架；痕量铅离子；分离富集

参考文献

1. Li.-H. Su, H.-L. Qian, C. Yang, X.-P. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 476, 135111.
2. J. Li, D. Sun, Y. Wen, X. Chen, H. Wang, S. Li, Z. Song, H. Liu, J. Ma, L. Chen, *Environ. Pollut.*, **2024**, 356, 124249.
3. C. Meng, S. Li, D. Zhang, H. Liu, *Spectrochim. Acta. A,* **2024**, 316, 124357

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

基于双金属基 MOF-COFs 的痕量铅离子多模式检测体系的构建

郭晋、高鹏博、寇梦涵、黄怡静、向悉然、张欣言、李伟涛*
邢台学院

随着金属污染物在环境中的毒理效应复杂性加剧，针对金属污染物的检测技术要求更加严格，为了有效提升检测结果的可靠性，多模式的检测手段不断发展，本项目借助多样可调结构的双金属基 MOF-COFs 构建了集原子光谱、电化学、比色等多模式的铅离子检测体系。该体系选用钴和铜离子双金属作为中心离子，搭配经典 MOF-COF 杂化材料获得结构和性能可调的异质结构，通过控制中心金属离子比例，筛选有机配体的基团，获得对金属铅离子具有高分离选择性的框架基复合材料，作为固相萃取剂，构建石墨炉原子光谱分析方法用于痕量铅的检测；此外，选用的双金属基 MOF-COFs 具有良好的电子传输效率，电极表面能够有效吸附和富集铅，结合差分脉冲阳极溶出伏安法，构建了铅离子的电化学检测体系；最后借助金属基 MOF-COF 良好的催化特性，通过铅试剂获得比色传感模式。该体系集成了多模式的检测优势，能够为环境样品中铅离子的分析提供了一种准确可靠的多模式检测体系。实验通过 XRD、SEM、FTIR、XPS 等表征手段对材料进行分析，讨论材料成分对金属离子分离及检测灵敏度的影响，最后将构建的多模式检测体系用于环境水样及食品中痕量铅离子的分析。

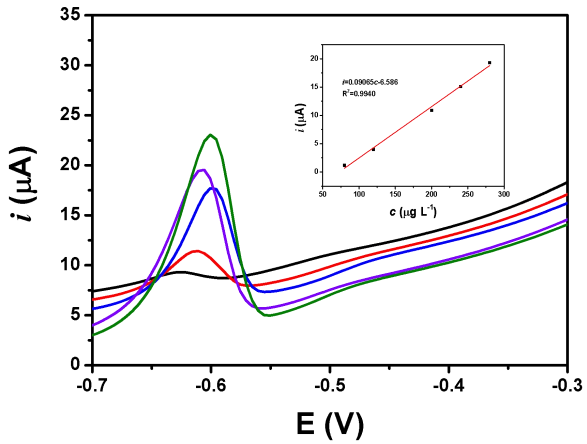


图 1 基于双金属基 MOF-COFs 的 Pb^{2+}电化学检测线性范围

关键字 金属共价有机框架；铅离子；多模式检测；

参考文献

1. Y. Zhang, Y. Xu, Y. Ma, H. Luo, J. Hou, C. Hou, D. Huo, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 1289, 342155.
2. X. Liu, P. Fan, X. Su, L. Cai, C. Wu, Y. Qiu, W. Yu, F. Xu, J. Ping, P. Wang, H. Wan, Y. Pan, *TrAC Trend. Anal. Chem.*, **2024**, 172, 117603.

分会场：14.SPME 及样品前处理分析
交流类型：墙报

基于 MIL-101(FeII)衍生的磁性多孔碳磁固相萃取-高效液相色谱法测定拟除虫菊酯

杨强、张茂森、杨秀培*
西华师范大学

拟除虫菊酯(Pyrethroids，PYs)是一类人工合成杀虫剂，具有高疏水性、广谱等特点。是世界上使用量第二大的杀虫剂。但全球大量使用拟除虫菊酯类农药，导致拟 PYs 对环境造成了污染。研究表明，长期接触拟除虫菊酯可能导致流产等不良生殖结果，还可能引发神经退行性疾病；此外，PYs 对水生生物存在较高毒性。PYs 被欧盟列入欧盟人类生物监测计划中高度关注的 18 种物质之一[1]。因此，建立对 PYs 的检测方法十分必要。

磁性多孔碳是通过热解或化学转化处理金属有机框架材料得到的碳材料。该材料既保留了原有孔隙结构，具有较高比表面积和孔体积，热解过程中的孔径分布和均匀性也得到提高。因此，它具有高孔隙度、孔径可调节、高的化学和热稳定性等特点。这些特点有助于增强吸附效果，使其广泛应用于食品样品的预浓缩、提取和纯化[2]。

本工作采用溶剂热法合成 MIL-101(FeII)并将其作为前驱体，通过一步热解法转化为磁性多孔碳(MIL-101(FeII)-600)，将其作为磁固相萃取吸附剂，用于茶水浸出液中 4 种 PYs 的磁固相萃取，并结合高效液相色谱紫外检测器进行分离检测，对色谱条件和萃取条件进行了优化。在最佳条件下建立了测定茶叶中 PYs 的检测方法，为检测茶叶中 PYs 提供了新方法。

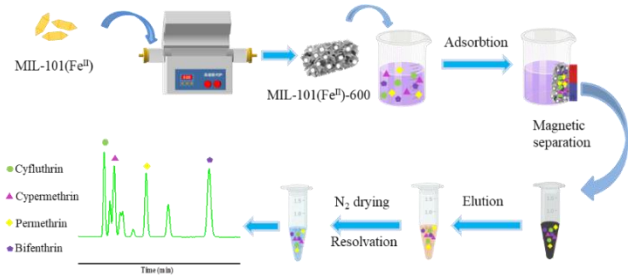


图 1 MIL-101(Fe^{II})-600 萃取拟除虫菊酯过程示意图

关键字 MIL-101(FeII)，磁性多孔碳，磁固相萃取，高效液相色谱，拟除虫菊酯

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

高性能糖胺聚糖裂解酶创制及其标准化研究

邢新会*
清华大学

肝素酶和硫酸软骨素酶是低分子量肝素类药物工业生产与产品质量分析检测的关键用酶制剂。然而，其酶制剂市场长期被国外垄断，相关产品价格昂贵。本团队通过优化以大肠杆菌和毕赤酵母为底盘细胞的肝素酶和硫酸软骨素酶表达体系，大幅提升了酶活力与产量，形成了工业级、检测级两个级别 6 个品种的工业酶产品，实现了国外同类产品的国产化替代，产品销售覆盖国内 90%以上应用企业，并出口国外。此外，团队牵头制定了肝素酶/硫酸软骨素裂解酶活力测定方法等 2 项团体标准，并推进了 2 项相关国家标准立项，从标准高度推进了国产酶制剂产业化布局和发展，为相关酶制剂的生产、流通及监管提供依据，对促进我国肝素行业以及肝素酶与硫酸软骨素酶相关医药行业的健康发展，具有非常重要的现实意义。

关键字 糖胺聚糖；标准化

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

制备质谱研究

陈焕文*
江西中医药大学

质谱仪作为分析化学中的关键工具，凭借其多样化的样品适应性、高灵敏度、高准确性以及良好的定性和定量分析能力，广泛应用于科学研究、食品安全、医药开发、环境分析和合成化学等多个领域，持续推动着科技的进步，为科学研究和工业应用提供强有力的支持。

然而，作为分析工具，仅仅只是质谱科学与技术在分析化学领域的重要应用。实际上，将分子温和、可控地赋能后，分子的反应活性将大幅度增加，从而触发一些其它条件下难以发生的化学反应。通常，这类利用质谱原理而发展起来的制备技术统称为制备质谱技术。值得注意的是，这类应用一般涉及到质谱离子化及质量分析等原理，尤其是在特定的时空序列中可控地将分子活化，使之成为激发态分子离子，然后再进行反应，同时在线对反应过程进行表征。一旦新的反应被确立，且反应机理都比较明确后，相应的反应可脱离经典的质谱仪器独立发展。因此，质谱技术可成为具有广泛前景的低成本化学制备技术。

在前期研究的基础上，本文将综述制备质谱的基本原理、重要仪器、典型案例，分析其方法特点，介绍其适用领域，展望其发展前景，并与各位专家一起探讨质谱技术标准化方面的可行性。

关键字 质谱仪；标准化

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

小型质谱仪关键技术及应用

徐伟*
北京理工大学

类似于计算机的小型化，质谱仪器的小型化可以极大的拓展其在实验室外，尤其是现场的应用。但是仪器的小型化不能简单的将各个部件做小，需要依据仪器小型化的需求，突破新的原理与技术。仪器的小型化过程中，由于功耗、体积等的限制，会极大的降低其分析性能。本项工作中，主要针对质谱小型化以后的定量准确性和通量等问题，介绍基于时频变换的 pseudo-MRM 质谱操作原理，通过实时离子选择与操控，实现高效离子富集和干扰离子的去除，最终实现高定量准确性和通量。在仪器应用方面，需要开发快速、使用简便的样品采样、预处理手段，这样才能满足非专业人员的操作需求。为此，工作中开发操作相对简便的离子采样探头，只需要对样品触碰、微萃取，就可实现实际样品中化学成分的快速检测。

关键字 质谱仪；定量准确性

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

核酸计量的跨尺度标准物质研究与应用

刘刚*
上海市计量测试技术研究院

构建多方法联合的核酸计量溯源方案，通过开发数字 PCR 方法，实现病原微生物核酸分子拷贝数精准定量；研发磷元素浓度定量新方法，实现 DNA 定磷法检出限和精密度的提升，解决微生物核酸浓度量值计量溯源难题，研制核酸标准物质 77 项，涵盖高纯度质粒 DNA 标准物质、病毒基因组、淋巴细胞标准物质、灭活病毒标准物质、高分辨率 DNA 纳米标尺标准物质。标准物质广泛应用于诊断试剂和分析仪质量控制，开展上海地区 PCR 仪质量风险监控 1 次，开展长三角区域的病原微生物标准物质定值能力计量比对 1 次，为公共卫生与生物医药领域提供可靠的核酸计量支撑。

关键字 核酸；溯源性；计量

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

生物标准物质定值技术研究进展及应用

罗氏闻、杨彬、武利庆*
中国计量科学研究院

随着生命科学与生物产业的发展，生物标准物质在保障生物检测结果准确与互认方面发挥出越来越重要的作用。生物标准物质定值技术是为标准物质赋予准确且可溯源的量值，从而为各类生物检测提供统一的参考标尺，近年来已取得显著发展。当前，数字 PCR、质量平衡、定量核磁、同位素稀释质谱等高准确度分析技术已被广泛应用于核酸、蛋白质等生物标准物质的定值过程中，同时也开发出高效液相色谱-圆二色光谱、同位素稀释红外光谱、电喷雾-微分电迁移-颗粒计数等蛋白质定值新手段，有助于提高定值结果的准确性与一致性。当前生物标准物质定值技术研究重点集中在复杂基质中目标物质的精确定值技术、可溯源到 SI 单位的蛋白质活性标准物质定值技术以及标准物质互换性调控与评价技术等研究，致力于全球范围内的实验室能够在一致的标准框架下进行准确测量。相关定值技术已经成功用于体外诊断、生物医药、生物安全、食品安全、生物农业等领域标准物质的研制中，将为疾病的早期诊断、疗效监测和个性化治疗等提供坚实的技术基础。随着更多新型生物标准物质的开发，定值技术将在更多领域推动生物精准检测和标准化进程，为生命科学研究和产业应用提供更强大的支撑。

关键字 生物标准物质；定值技术；应用；综述

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

药品微生物微液滴培养快速检测方法标准化

张翀*
清华大学

基于实验室前期研发的微升级单细胞液滴筛选系统，开发一种基于微液滴培养技术的药品微生物快速检测方法。根据我国药典指导原则，选取 8 株典型的菌株对本方法进行性能测试，结果表明本方法检出时间在 10-96 h 之间，除生孢梭菌外，其余菌株测试结果均优于药典法和部分已商业化的微生物快速检测方法。进一步选取重组人促卵泡激素注射液作为样品来模拟实际应用场景，对方法的专属性、检测限和耐用性等参数进行了适用性验证。上述研究结果表明，基于微升级液滴培养技术的药品微生物快速检测法可以满足药典规定的微生物快速检测需求，具在批产量低、需要快速放行的生物制品微生物快检领域具有重要应用前景。

关键字 药品微生物；标准化

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

原子光谱分析标准研制及在环境监测中应用

郭鹏然*
广东省科学院测试分析研究所

介绍原子光谱分析的原子发射光谱、原子吸收光谱、原子荧光光谱和原子质谱等技术类别和相关分析技术、方法等方面的标准现状，并分析原子光谱分析标准研制的着力点；介绍团队在原子发射光谱（微波等离子体原子发射光谱）、原子吸收光谱（汞测定方法及仪器）和无机质谱（HPLC-MS）等 3 个原子光谱技术类别方面研制发布的分析方法和相关分析仪器的国家、行业和地方标准的内容；同时，介绍团队依托研制的以上标准，分别采用不同的原子光谱分析技术在水质重金属自动在线监测、地表水中汞快速检测和土壤中金属形态分析方面开展的技术应用。

关键字 原子光谱；标准；应用

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

农业技术标准体系与发展需求

毛雪飞*
中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所

标准是对重复性事物和概念所做的统一规定，他以科学技术和实践经验的结合成果为基础，经有关方面协商一致，由主管机构批准，以特定形式发布作为共同遵守的准则和依据。农业行业标准是国务院农业农村行政主管部门负责组织、审定、发布、实施，并经国家标准化管理部门备案、编号的行业标准体系。目前，全国标委会 14 个：专业领域包括种子、果品、蔬菜、蚕桑、畜牧业、屠宰加工、伴侣动物、动物卫生、沼气、水产、渔船、植物新品种测试、土壤标委会和农药；分技术委员会 15 个，专业领域包括种子 4 个，果品贮藏加工 1 个，农机 1 个，水产 8 个，水生生物湿地保护 1 个。新形势下我国农产品质量安全监管科技需求与任务：实施乡村振兴战略、推动农业高质量发展，为农产品质量安全赋予了新内涵，提出了新要求；多项要求并举，加快建设农业高质量发展，标准体系，大力推进标准化生产；坚持“保底线、拉高线”并重，构建以安全标、绿色标、优质标、营养标为梯次的高质量标准体系；高标准实施对标达标提质行动，为乡村振兴和农业高质量发展提供新助力。

关键字 农业标准；分析技术；标准化

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

氩-氩同位素定年分析系列标准物质研制

陈文*、张彦、李洁、刘新宇、张斌、赵双丰、孙敬博、沈泽、王芳川
中国地质科学院地质研究所

氩-氩同位素定年方法对标准物质具有极大的依赖性。氩-氩同位素定年分析过程中被测样品必须和标准样品同时在核反应堆中进行快中子照射，且标准样品的年龄直接参与被测样品年龄的计算。可见，标准物质不仅是获得氩-氩同位素年龄所必不可缺少的，也是影响氩-氩同位素年龄数据质量的主要因素。我国迫切需要研制能够达到国家标准物质规范要求、并为国际普遍接受的氩-氩同位素定年分析标准物质，特别是急需研制适合于新生代和古生代地质样品氩-氩同位素定年使用的标准物质。近年来，我们开展了一系列氩-氩年龄标准物质研制工作，取得了如下进展：（1）按照国家一级标准物质研制规范的要求对新生代透长石 SK01 样品进行了包括样品制备、均匀性检验、稳定性检验、定值计算以及标准值的确定等研究工作，最终研制出适合于新生代地质样品氩-氩同位素定年分析用的氩-氩年龄标准物质 SK01 透长石。SK01 透长石单矿物量超过 1000g，以每瓶 5g 进行分装装瓶，总瓶数达 200 瓶，其特性量值 Ar-Ar 年龄的标准值最终表达为：t=27.60±0.46Ma（2σ）；（2）通过对矿物样品进行 Ar-Ar 年龄特性量值的均匀度检验、初值分析测试等，选定产出于新疆干沟南行线花岗伟晶岩中的斜长石（TG1701）作为研制岛状硅酸岩矿物 Ar-Ar 年龄标准物质的候选样品源。TG1701 斜长石的 Ar-Ar 坪年龄（300.3±3.6 Ma）、总气体年龄（299.6±2.8 Ma）、正等时线年龄（298.5±5.1 Ma）、反等时线年龄（299.0±5.2 Ma）在误差范围内完全一致；10 组 Ar-Ar 全融年龄的平均值为 298.8±3.3Ma，相对标准偏差仅为 1%左右，表明该矿物 Ar-Ar 年龄均匀性良好；（3）按照国家一级标准物质研制规范的要求，完成了古生代样品氩-氩年龄标准物质 TG1104 全部研制工作。所研制的标准物质为纯净的白云母矿物，样品总量大于 1000 克，最小包装单元数 210 瓶，其特性量值 Ar-Ar 年龄的标准值最终表达为：t=354.0±2.8Ma（2σ）。上述 SK01 透长石和 TG1104 白云母等两种氩-氩年龄标准物质已经在国内外多个实验室得到应用。

本项研究得到了国家自然科学基金资助（项目号：42127801，41403046）

关键字 氩-氩同位素定年；标准物质；新生代；古生代

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：报告

与高效液相色谱法结合的定量核磁共振高准确度新方法进展

黄挺*[1]、张伟[1]、吴华鑫[2]、李雪瑶[2]
1. 中国计量科学研究院
2. 北京化工大学

定量核磁共振法（qNMR）是用于有机纯度标准物质定值的潜在基准方法，具有普遍适用性、分析时间短、不破坏样品、除结构相关杂质外无需识别或检测杂质等优点，可用几个具有计量溯源性的标准物质建立绝大部分有机化合物的计量溯源性。qNMR 的原理是基于共振峰的强度与产生共振峰的原子核数量成正比的关系，这意味着 qNMR 的基本前提是待测物与内标物用于定量的峰与杂质的峰完全分离，所以 qNMR 的主要挑战是减少未分离的结构相关杂质峰导致的系统误差。与分离能力强的高效液相色谱法（HPLC）的联用，可以解决这个问题。

Saito 等人[1]采用两种氘代溶剂作为流动相，用于直接 HPLC-qNMR 在线联用分析，但这需要大量的氘代试剂，成本极高。

马瑞安等[2,3]建立了 HPLC-qNMR-HPLC 法，通过非氘代溶剂作流动相的 HPLC 纯化原始样品，以获得有机纯度高纯样品，然后使用 qNMR 测定高纯样品的纯度，最后使用纯化样品作为校准品，通过 HPLC 外标法测定原始样品的纯度。

张伟等[4]开发了一种内标回收校正的 HPLC-qNMR 方法（ISRC-HPLC-qNMR），使用非氘代流动相进行 HPLC 分离，并且只收集含有待测分析物和内标的洗脱液，通过冻干、更换氘代溶剂、qNMR 以及前后溶液 HPLC 测定等步骤，校正后得到准确的纯度结果，而且该方法成本低，即使被测物与杂质在是部分 HPLC 也能得到准确结果。孙小楠等[5]在 ISRC-HPLC-qNMR 方法的基础上改进为 ISC（内标校正）-HPLC qNMR 方法，将冷冻干燥时间缩短了一半。李雪瑶等[6]通过收集后纯度校正，改进了 ISC-HPLC qNMR，将其应用范围扩展到难以纯化至有机纯度 100%的化合物。

这些先进的方法结合了 HPLC 的高分离能力和 qNMR 的优点，低成本、高效率、高准确度地测定了低纯度有机化合物，提高了 qNMR 方法的准确性，拓展了其应用范围。

关键字 定量核磁共振; 高效液相色谱法; 高准确度

参考文献：

1. T. Saito, R. Iwasawa, T. Ihara, et al. *Chromatography*, 2003, 24, 117-120.
2. R. Ma, T. Huang, W. Zhang, et al. *J. Liq. Chromatogr. R. T.*, 2018, 41, 170-179.
3. W. Zhang, T. Huang, H. Li, et al. *Int. J. Pept. Res. Ther.*, 2018, 24, 391-396.
4. W. Zhang, T. Huang. H. Li, et al, *Talanta*, 2017, 172, 78-85.
5. X. Sun, W. Zhang, T. Huang, et al. *Anal. Bioanal. Chem.*, 2020, 412, 6983-6993.
6. X. Li, W. Zhang T. Huang, et al. *Anal. Methods*, 2024, 16, 4775-4782.

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

基于磁性分子印迹聚合物的固相萃取-液相色谱-质谱联用检测血清中多奈哌齐浓度

吴世伟、李红梅、张炜飞*
中国计量科学研究院

多奈哌齐是一种用于治疗阿尔兹海默症的药物，其疗效与血清中的药物浓度密切相关。因此，监测血清中多奈哌齐的浓度对于评估治疗效果和避免不良反应至关重要。本研究采用磁性分子印迹聚合物（MMIPs）和液相色谱-串联质谱（LC-MS/MS）技术结合，建立了一种测定血清中多奈哌齐浓度的新方法。采用扫描电镜（SEM）、傅里叶变换红外光谱仪（FT-IR）和透射电镜（TEM）等仪器，对所制备的磁性分子印迹聚合物进行表征，证实了该聚合物具有有效的印迹和良好的磁响应性。吸附试验表明，MMIPs 对多奈哌齐的饱和吸附量达到 15.4 mg/g 且吸附行为符合准二级动力学模型（化学吸附过程）。最后，结合 LC-MS/MS 技术，成功地实现了从血清中快速、高选择性、高特异性的分离富集检测多奈哌齐。该方法对血清多奈哌齐的线性范围为 25 -200 ng/g，最低检测限为 2.95 ng/g，回收率为 98.7-102.6%，精密度 RSD 为≤4.5%（n=3）。实验证实该方法检测血清中多奈哌齐简便且有效。

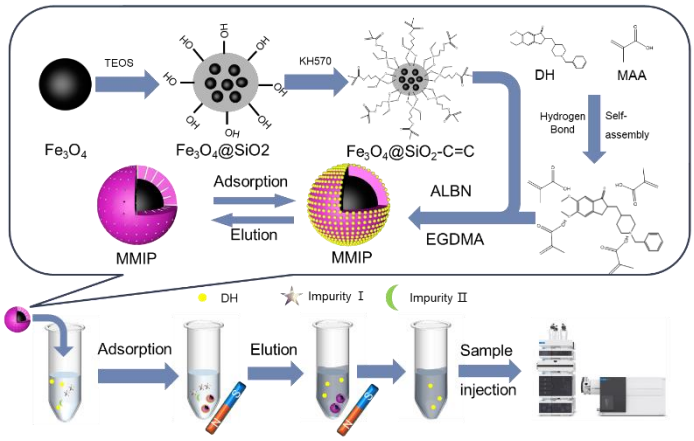


Fig.1 The Schematic of MMIPs synthesis and LC-MS/MS detection of donepezil in serum.

关键字 磁性分子印迹聚合物；LC-MS/MS；多奈哌齐；血药浓度检测

参考文献：

1. Besin V, Humardani FM, Mulyanata LT. Neurogenomics of Alzheimer's disease (AD): An Asian population review. *Clinica Chimica Acta.* 2023;546.
2. Hiemke C, Bergemann N, Clement HW, Conca A, Deckert J, Domschke K, et al. Consensus Guidelines for Therapeutic Drug Monitoring in Neuropsychopharmacology: Update 2017. Pharmacopsychiatry. 2018;51(1-02):9-62.

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

血清乳酸标准物质的研制及其应用

孟娇然、朱天翼、夏娃、段嫚雷、丁敏*
上海市计量测试技术研究院

乳酸是人体内糖和丙酮酸代谢重要的中间产物。血液中的乳酸主要由肝脏、肌肉、红细胞和脑组织等产生。在正常情况下，人体中乳酸的产生和消耗处于平衡的状态，但在某些生理和病理条件下，血液中乳酸水平会发生变化。临床上血液乳酸水平异常可能与糖尿病等多种代谢性疾病以及感染、缺血或创伤性休克有关[1-2]，同时乳酸水平的监测也广泛应用于运动医学的相关代谢研究 3。因此，动态监测患者体内的血液乳酸水平可以及时掌握患者的病理状态，对预测病情的严重程度、指导合理治疗和疾病预后具有重要的意义。

为保证临床血乳酸检测结果的准确，需要有效评价临床乳酸分析仪的性能。然而目前国内外尚无血乳酸标准物质，对临床乳酸分析仪的性能评价和量值溯源工作一直难以开展。为此，本文研制了一系列不同浓度水平的血清乳酸标准物质，乳酸量值范围覆盖 5 mmol/L~15 mmol/L。该标准物质采用同位素稀释-气相色谱-质谱联用法和同位素稀释-液相色谱-串联质谱法两种方法准确定值。两种定值方法均经充分优化后进行方法学评价，证明其具有良好的精密度（RSD<3%，n=9）和加标回收率（100%±3%），基质效应的影响可以忽略不计。标准物质经均匀性评估和稳定性评价认为其足够均匀，且在-70℃条件下可稳定保存一年以上。各个浓度水平的标准物质量值的不确定度均在 4%以内。

为进一步验证该系列标准物质的适用性，我们将其应用于酶法、比色法等不同原理的临床乳酸分析仪，试验结果证明该标准物质可有效评价仪器的示值误差、重复性等各项性能，有利于提升乳酸检验结果的可靠性和可比性，增强不同实验室测量结果互认、提升我国临床乳酸检验水平，推动相关疾病的医学诊断和评价顺利开展。

关键字 乳酸；标准物质

参考文献：

1. 刘云升.血清乳酸水平对 LVEF 降低急性心力衰竭病人短期预后的影响[J].中西医结合心脑血管病杂志,2021,19(14), 2400-2402.
2. Franco EJ，Hofstetter H，Hofstetter O. Determination of lactic acid enantiomers in human urine by high-performance immunoaffinity LC-MS[J]. J. Pharm. Biomed. Anal., 2009, 49(4), 1088-1091.
3. 白录军,郝万鹏.血乳酸测定的医学价值[J].现代检验医学杂志, 2007, 22(1),112-114.

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

地下水中多种类新污染物高通量靶向快速分析方法研究及应用

黄毅*
国家地质实验测试中心

地下水是重要的战略资源，随着经济高速发展和城市化、城镇化加速，大量工业废弃物、城市生活垃圾、农药化肥排入环境，这些污染物通过大气、降雨、淋滤等途径污染地表水、地下水。尤其是一些迁移性较大的组分，更容易污染地表水、地下水，部分有机污染物已经被证明具有致癌、致畸和致突变的作用。本文主要从样品前处理、有机物高通量快速分析等方面介绍水中新污染物分析及应用。

关键字 新污染物；液相色谱串联质谱；地下水

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

重组 III 型人源化胶原蛋白关键质量参数分析方法建立

崔新玲、阚莹、李红梅*
中国计量科学研究院

重组胶原蛋白是通过将胶原蛋白的天然基因序列或重新优化设计的基因序列，导入选定的宿主细胞中（如大肠杆菌和酵母菌），经过培养、发酵、分离纯化等工艺，获得的具有一定天然胶原蛋白特征和主要功能的蛋白质。与天然胶原蛋白相比，利用该技术生产的胶原蛋白解决了传统提取法存在的病毒隐患缺陷，同时又显著提高了胶原蛋白的稳定性、亲水性和生物相容性[1, 2]。由于重组胶原蛋白分子单一、结构清晰、易于控制，因此在生物医学及组织工程领域具有很好的潜在应用价值[3]。

2023 年 7 月 20 日国家药品监督管理局颁布了重组人源化胶原蛋白最新版行业标准（YY/T 1888-2023）[4]。文件规定了重组人源化胶原蛋白的质量控制、技术要求、实验方法、稳定性、生物学评价以及包装、运输和存储等。针对重组 III 型人源化胶原蛋白的研究中并未对其关键质量参数方法进行报道，本研究建立了重组 III 型人源化胶原蛋白关键质量参数检测与分析方法，旨在为我国重组 III 型人源化胶原蛋白的质量检测提供参考依据。

采用 MALDI-TOF 及 SEC-HPLC-UV-MALS 法测定分子量及其分布；采用毛细管 SDS 凝胶电泳（CE-SDS）和分子排阻高效液相色谱（SEC-HPLC）分析纯度；采用离子交换法和毛细管区带电泳（CZE）分离分析电荷异构体；采用双酶切肽图法进行一级结构鉴别试验和序列覆盖率分析。MALDI-TOF 测得分子量为 45.01 kDa；SEC-UV-MALS 得到其单体分子量为 45.17 kDa（±0.226%）；两种分子量测定方法结果一致。CE-SDS（非还原）纯度为 98.77%，其它成分 1.23%；SEC-HPLC 纯度为 98.07%，其它成分 1.93%；两种纯度测定方法结果一致。强阳离子交换共鉴定到 14 种电荷异构体组分，其中酸性峰占比 52.08%，主峰占比 26.22%，碱性峰占比 21.70%；CZE 鉴定到 8 种电荷异构体组分，其中酸性峰占比 52.10%，主峰占比 25.27%，碱性峰占比 22.63%；两种电荷异构体鉴别方法，酸性组分、主峰与碱性组分，分布规律一致。双酶切肽图法实现重组 III 型人源化胶原蛋白的序列 100%覆盖，实测序列与预期序列一致。

建立了重组 III 型人源化胶原蛋白关键质量参数分析方法，该方法具有保证产品安全、有效、质量可控的特点，为我国重组 III 型人源化胶原蛋白的质量控制提供了参考依据。

关键字 重组 III 型人源化胶原蛋白；分子量分布；电荷异构体；序列覆盖率；质量控制

参考文献：

1．TANG Y P, ZHENG Q, HU B, et al. *Sci. Technol. Food Ind.*, 2016, 37(18): 384-6.
2．SAMANTHA L, BUSRA F M. *Pharmaceutics*, 2021, 13(3).
3．SUN L, LI B, JIANG D, et al. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2017, 159.
4．Fudan University, Sichuan University, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences, et al. Recombinant human collagen [Z]. 国家药品监督管理局. 2023: 1-20.

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

聚乙二醇二缩水甘油醚（PEGDE）交联透明质酸水凝胶结构表征方法的开发

吴一阳、张天际*、阚莹、李红梅
中国计量科学研究院

Hyaluronic acid (HA) is a linear, high molecular weight polysaccharide widely found in connective tissues and body fluids. The chemical composition and flexible polymer conformation endows HA with unique physicochemical and biological activities, leading to extensive applications in the medical, pharmaceutical, food and cosmetic fields1. Despite so, natural HA has a short in vivo residence time due to the presence of endogenous hyaluronidases and reactive oxygen species (ROS). Thus, cross-linking methods have been developed to extend in vivo half-life or further expand the functionalities. PEGDE is a new generation of crosslinker, which offers improved gel elasticity and reduced cytotoxicity2. The physical and chemical properties of cross-linked HA are closely related to the degree of modification (MoD), effective cross-linker ratio (CrR), the modification types (mono- or cross-linked) and the modification sites/residues. Hence, the methods for accurately determining these parameters are very important.

In this work, an HPLC-MS/MS method is developed for the first time to accurately determine important parameters such as MoD, CrR, and substitution position of PEGDE cross-linked HA. The oligosaccharides obtained through HAase-B degradation of PEGDE modified HA hydrogel are firstly separated and precisely quantified by UPLC-SEC-HRMS. The major residue fragments such as 2-P, intra-chain 2-P, 4-P and 2-P-2 (Fig. 1) are reduced with NaBH4 and separated by a porous graphitic carbon (PGC) column for structural identification. This robust method enables finger-printing analysis of chemically modified HA structure, which can help to resolve the chemical reaction process of cross-linkers with HA. On this basis, different production processes can be designed to guide the synthesis and quality control of HA-based products.

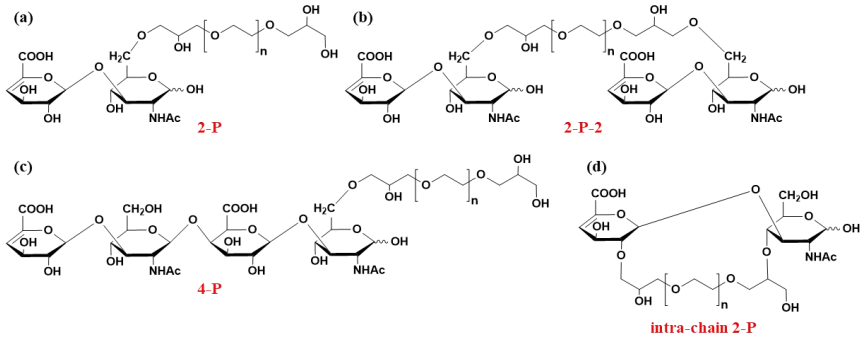


Figure. 1. Major PEGDE linked fragments resulted from enzymatic degradation. Note that other substitution positions could be present in each species.

关键字 Hyaluronic acid, PEGDE cross-linking, HPLC, MS/MS

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

海水基底营养盐的研制

沈玥、朱勇*
自然资源部第二海洋研究所

营养盐作为海洋生态系统的重要物质基础，参与浮游植物的生长和繁殖过程，为海洋中其他生物提供赖以生存的有机物质，是构成海洋食物链的基础环节。通常来说营养盐丰富的地方生物的种类和数量都更加丰富，适宜的营养盐水平及结构能促进浮游植物的生长和繁殖，反之则会影响海洋生态系统结构（梁生康，2022）。当营养盐含量不足时，会限制海域的初级生产力，而当水体中氮、磷等营养盐含量过高时，会引起藻类及其他浮游生物迅速繁殖，消耗水中的氧气导致鱼类和其他生物大量死亡，死亡的海洋生物尸体被细菌分解，在释放出营养盐污染水质的同时进一步消耗水中的氧气，破坏了海洋中原有的生态平衡（Glibert，2017），引发了一系列环境问题。因此，对于海水中营养盐的监测则显得十分重要。而海水营养盐标准物质的准确性及稳定性会对海水营养盐的监测造成重要的影响。

目前，我国用于配制海水营养盐标准物质的基底主要为超纯水或 3.05%的 NaCl 溶液，但在国际上通常使用天然海水作为配制海水营养盐标准物质的基底。其相较于人造海水来说有着更低的的变异性和更好的稳定性（Anne Daniel，2012），对于超纯水而言，其离子强度和天然海水不同，这会导致加入试剂的化学反应速率受到影响，同时，由于纯水与天然海水间盐度的差异，使得利用分光光度法对海水营养进行检测时产生 Schlieren 效应，影响低浓度样品的准确测量，而天然海水的 pH 值和碳酸盐缓冲体系与纯水不同，这亦会影响定量结果。因此，最好使用海水作为基底配制海水营养盐标准物质。

本研究将利用海水作为基地进行海水营养盐标准的配置，以填补国内在海水营养盐标准物质的空白，提升海水营养盐监测的准确度

关键字 海水营养盐；标准物质；海水基底

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

时间分辨荧光有机增敏球的制备及性能评价

黄梓宸[1,2]、李奕辉[3]、周瑾艳*[1,2]、陈玲[1,2]
1. 广东省计量科学研究院
2. 国家碳计量中心（广东）
3. 广州万孚生物技术股份有限公司

提出了一种时间分辨荧光有机增敏球（以下简称荧光增敏球）的制备方法，并对使用该方法制备的荧光增敏球进行了性能评价。荧光增敏球通过将基质与三价铕盐及增强剂混合并冻干后得到，可以显著增强铕螯合物的稳定性。通过改变原料配比筛选了合适的冻干基质。使用四种不同的增强剂分别进行了荧光增敏球制备，荧光信号的测试结果显示 BHHCT 的增强效果最佳。对筛选后方法所制备的荧光增敏球进行了性能测试，结果表明含不同 Eu3+浓度的梯度系列荧光增敏球线性、均匀性良好，在常温下贮存 6 个月后性能无显著变化。

关键字 免疫分析；时间分辨荧光；三价铕；增敏球；冷冻干燥

分会场：15.标准物质与仪器分析测试标准化
交流类型：墙报

汽油中甲基叔丁基醚含量测定系列标准物质研制

章然*
中石化石油化工科学研究院有限公司

甲基叔丁基醚（MTBE）常被作为一种含氧化合物调合组分加入车用汽油中用于提高汽油的辛烷值。本标准物质以 MBTE、DME、异辛烷和二甲苯为原料。标准物质采用重量法配制，以配制值作为特性值。并对标准物质的均匀性和稳定性进行评估。结果表明，所研制的标准物质的标准值及不确定度见表 1。有效期 36 个月。该标准物质可用于汽油中甲基叔丁基醚含量的测定、质量控制及方法验证等。

表 1　汽油中 MTBE、DME 标准值及不确定度

标准物质	MTBE		DME	
	质量分数/%	U/%(k=2)	质量分数/%	U/%(k=2)
1#	1.97	0.07	4.35	0.18
2#	19.55	0.52	4.47	0.13
3#	4.99	0.14	4.42	0.13
4#	14.43	0.37	4.46	0.18
5#	0.28	0.04	4.40	0.12

关键字 汽油　甲基叔丁基醚　标准物质　重量法

参考文献：

1.任丹华,张艾蕊,王梅玲等. 轻质油品中磷元素标准物质研制, **2022**, 66 (10): 41-45+9.
2.标准物质的定制及均匀性、稳定性评估：JJF 1343-2022[S]. **2022**

分会场：16.绿色实验室技术与科学管理发展
交流类型：报告

气液多相态一体化环境污染物实时监测与预警系统

段忆翔*[1]、赵忠俊[1]、郭星[1]、代渐雄[2]、杨燕婷[2]
1. 四川大学
2. 成都艾立本科技有限公司

近年来，随着我国快速的城市化和工业化发展，大量污染物排放到空气及水体环境中，导致环境污染日趋恶化，给人体健康带来严重影响[1]。探究环境污染的时空格局，揭示其关键影响因素，评估各类不同相态污染物对人体健康的影响，对于系统了解我国环境污染的时空演化机制及其健康效应，并制定具有针对性的防控对策具有重要意义。

鉴于传统离线式气相色谱技术及气相色谱-质谱联用技术应用于空气及水体环境中有机物监测时，所固有的分离时间长、分离度不足以及操作复杂等方面的局限[2-3]，本研究基于多试剂离子-飞行时间质谱技术[4-5]，采用一种能够同时分析气相和液相样品的多通路质谱进样系统，提出气液多相态一体化环境污染物实时监测与预警系统，创新性地将原本仅能够进行气相样品直接快速分析的质子转移反应质谱技术扩展至能够同时进行气液样品中挥发性有机物，甚至半/难挥发性有机物的在线快速分析。

气液多相态一体化环境污染物在线监测与预警系统突破了传统分析方法的局限性，有助于减少传统离线式实验室分析过程中的的资源消耗和污染排放，顺应了绿色实验室技术与科学管理发展的趋势，为环境治理和公共健康保护提供了强有力的技术支持。通过精准地了解有机污染物的分布和变化趋势，将帮助更有针对性地政策制定，及时应对环境问题，推动环境保护工作向更高水平迈进。

关键字 质子转移反应；飞行时间质谱仪；在线质谱技术

参考文献

1. Liu K, Lin B. *Journal of Cleaner Production*, **2019**, *206*, 356-364.
2. Stock R, Rice C B F. *Chromatographic methods*. Springer, **2013**.
3. Wahab M F, O'Haver T C, Gritti F, et al. *Talanta*, **2019**, *192*: 492-499.
4. Guo, X.; Pu, J.; Dai, J.; Wang, X.; Zhang, X.; Yang, Y.; Zhao, Z.*; Duan, Y.*; *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, **2023**, *38*, 619-628.
5. Z.J. Zhao, J.X. Dai, T.Z. Wang, G.H. Niu, F.Y. He, Y.X. Duan*. *Talanta*, **2020**, *208*:120468.

分会场：16.绿色实验室技术与科学管理发展
交流类型：墙报

铜铁掺杂氮化碳纳米酶用于检测食品总抗氧化能力

赵腾祎[1]、穆建帅*[1,2]
1. 天津师范大学
2. 天津塞纳酶科技有限公司

纳米酶相较于天然酶具有催化活性高、稳定性好、价格低廉等特点，多金属基纳米酶由于存在不同金属的协同作用，提供了更多的纳米酶设计方案和更好性能的催化剂。因此，我们采用超分子自组装法制备了铜铁合金掺杂氮化碳纳米酶（CuFeCN）。CuFeCN 的类过氧化物酶活性高达 63.56 U/mg，超过市面上在售的天然辣根过氧化物酶（50 U/mg），并且在广泛的 pH 值范围、高温、长期储存的条件下都保持高活性。将其用于调节人体正常生理功能的重要维生素（抗坏血酸）的比色检测，结果显示其灵敏度（0.11 μM）高于近期发表的大多数研究成果，且有较宽的检测线性范围（0-80 μM）。此外，还进一步实现了在维生素 C 药品和果汁中 TAC 的测定，与商业比色法检测试剂盒的测试结果吻合。这项工作为 TAC 检测提供了一种快速经济的方法，同时有助于指导人们制备多功能高稳定性的纳米酶。

关键字　纳米酶；总抗氧化能力

参考文献

1. 张浩钰. 浅谈酶在果蔬加工与保鲜中的应用. *食品安全导刊*, **2021**, *15*, 186-188.
2. Heo N. S., Song H. P., Lee S. M., et al. Rosette-shaped graphitic carbon nitride acts as a peroxidase mimic in a wide pH range for fluorescence-based determination of glucose with glucose oxidase. *Microchimica Acta*, **2020**, *187*, 286-297.
3. Parohan M, Anjom-Shoae J, Nasiri M, et al. Dietary total antioxidant capacity and mortality from all causes, cardiovascular disease and cancer: a systematic review and dose-response meta-analysis of prospective cohort studies. *European Joural of Mutrition*, **2019**, *58*, 2175-2189.

分会场：17.实验室数智化
交流形式：墙报

全自动智能化毒物筛查“熄灯实验室”建设及应用

谢伟宏、应剑波、程建波*、唐磊、李晓飞、张建伟
杭州市公安局刑事科学技术研究所

针对当前刑事技术检验鉴定实验室全自动、智能化进行检材提取、设备管理、环境监控、结果分析、物资补给等方面的问题，充分融合大数据、RFID 及人工智能等前沿技术，建设智慧的“熄灯实验室”，不受时间限制、无需人员值守，全自动完成对非正常死亡案（事）件中死者的生物体液进行多领域、全项目的检验鉴定，实现法庭科学刑事技术的管理高效化、资源集约化、鉴定过程自动化，并通过检测数据的 AI 处理研判、自动预警，为刻画死者特征及研判死亡原因做好预警防治支撑，解决了当下公安检验鉴定的痛点、难点问题，构建了智慧警务在刑事技术领域的新模式。

关键字 智慧警务；刑事技术；熄灯实验室；自动化；智能化；检验鉴定；非正常死亡

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

提升服务科研能力 可持续支撑一流科研

张莉*
北京大学

高校分析测试平台的核心竞争力在于持续提升其服务科研的能力。近十年来，北京大学分析测试中心在这一领域不断明确自身的使命与定位，即致力于提升服务科研能力，为北大化学及相关学科的一流科研工作提供坚实的技术支撑。

首先，作为国家检验检测资质认定的机构，他们建立了完备的质量管理体系，确保仪器和测试方法的标准化与先进性，同时严格规范数据的准确性和可靠性。每年，中心都会积极参与能力验证和实验室间比对，且均获得满意结果，充分证明了其数据的高质量。

其次，在高效、高质量地完成日常测试任务的同时，平台的技术人员还深入钻研用户需求，不断探索特色测试项目，精进分析测试技术，为校内外的高水平科研工作提供了强有力的支持。

再者，他们在多年的分析测试工作中，积累了丰富的经验，并注重仪器的改造与定制，以最大限度地发挥仪器整合和搭建的能力，从而更好地满足科研工作的需求，提升科研效率。

最后，平台的技术人员与特色用户建立了紧密的合作关系，围绕分析测试技术共同开展了一系列具有创新和前瞻性的研究工作。这不仅提升了分析测试水平，还将相关技术拓展到了更多的应用场景中，从而赢得了更为广阔的发展空间。

综上所述，北京大学分析测试中心在提升持续支撑科研能力方面取得了显著的成效。其成功经验对于其他高校分析测试平台而言，具有重要的借鉴与启示意义。

关键字 高校分析测试平台，支撑科研，核心竞争力

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

构建可持续分析测试平台的实践与思考

王雨松*
中国科学技术大学

在技术快速变革迭代和国家加大科研投入的背景下，分析测试平台作为推动科研创新的关键支撑力量，其可持续发展的重要性日益凸显。推动学校或科研院所对平台整体定位和政策的持续贯彻，从制度建设、人才梯队建设、服务学科方向和仪器规划、紧贴科研的技术创新、人才激励政策、国产仪器应用与推广、测试方式转变等方面如何进行持续改进和优化。AI 时代来临的当下，在加强信息化建设、促进传统仪器与 AI 紧密结合等方面做了一些思考。提升分析测试平台的管理水平，促进其可持续良性发展。

关键字 可持续发展 技术创新 制度建设 开放共享

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

服务科研，服务地方，培养人才——高校测试中心的多重功能

夏炎*
南开大学

高校分析测试中心是学校服务社会的窗口，具有教学培训、科研支撑、设备咨询、学科交叉四大平台作用。因此高校分析测试中心的定位，既可以是教学培训的平台，用于开展创新性实验教学，操作人员培训，仪器分析专业人才培养，科普基地及各类讲座；又是科研支撑平台，支撑科研基础条件、功能开发与方法研究；也是设备咨询平台，用于学校设备布局、规划规范运行和仪器功能与分析方法的开发；还是学科的一个交叉平台，中心了解社会需求，支撑多学科发展，促进相近学科间交流，助力重大成果发现。因此如何发挥高校测试中心在上述功能和定位上的作用，本报告以南开大学中心实验室及沧州分中心为例，介绍我们在实施以上平台功能中的一些经验和体会。

关键字 高校测试中心，开放共享，科研服务，产学研，人才培养

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

校级学科公共平台建设管理与分析服务能力提升

黄玲凌、吴丁财*
中山大学

大型仪器公共服务平台是一流大学建设不可或缺的重要组成部分，是重要条件支撑和基础保障，大部分高校成立了分析测试中心。本报告以中山大学分析测试中心为切入点，总结了近年来中山大学分析测试中心顺应学校发展所采取的建设管理模式，探索了提升分析服务能力的措施和方向，包括积极进行机构改革，成立校级学科公共平台，在不同校区（园）设立分中心；大力加强平台建设，引进人才队伍，提升分析服务能力等。最后，还对中山大学分析测试中心未来发展提出了几点思考和目标，包括突破常规、协同创新、升级改造等，形成一流分析能力，建成多层次、跨学科、错位发展的校级学科公共平台，助力中山大学学科交叉和科研创新。

关键字 大型仪器公共服务平台　机构改革 分析服务能力提升

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

新形势下哈尔滨工业大学公共测试服务平台的建设与发展

张杰*
哈尔滨工业大学

围绕哈工大的发展规划与目标，助力龙江和东北的科技进步与经济发展，构建布局合理，具有共享性、系统性和创新性的独具特色、高通量集成化的分析测试服务平台。

形成极端环境下超高分辨率、多维跨尺度、无损原位高通量表征、测试方法与海量数据超快计算与存储、人工智能集成的特色平台，为哈工大航天特色重大工程技术攻关、军民型号快速研制评估提供条件保障，为解决重大基础前沿科学问题、中小企业创新提供技术支撑。

关键字 公共测试平台，建设，发展

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

校院两级大型仪器公共服务平台的资质赋能与高质量管理实施

薛涛*[1]、邓小娟[1]、王意[1]、罗铭[2]、黄建军[3]、晋兴华[4]
1. 天津大学分析测试中心
2. 天津大学地球系统科学学院
3. 天津大学环境科学与工程学院
4. 天津大学药物科学与技术学院

通过高校校级大型仪器公共技术服务平台的引领和示范作用，基于校级平台 CMA 检验检测资质认定主体，研究资质赋能的可行性，以资质拓展与赋能为抓手，通过质量管理体系延伸，打通校院两级平台的同类型从业人员的互通共享渠道，实现校级资质功能在院级平台转化落地，促进校院两级平台管理体系高水平的协同提升，规范人、机、料、法、环、测全领域全流程的质量控制，保障管理体系有效运行。汇聚校内各平台的智力优势，建设适合高校发展的共享平台，为技术服务、科研支撑、人才培养、行业共享等方面奠定制度保障。建立校院协同共进的良好生态，提升大型仪器的共享效率和技术服务水平。促进实验技术队伍的水平提升，为精准实现高质量学科服务，提供制度保障。

关键字 高校，大型仪器公共技术平台，CMA，资质赋能

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

集聚资源，打造可成长的测试服务平台

闫肃*、徐强
大连理工大学

大连理工大学分析测试中心成立于 2021 年底，以“先进、集约、共享、高效”为理念，集聚资金与资源，布局涵盖多学科需求的分析仪器，组建稳定有后劲的技术人才队伍，打造校级公共测试服务平台，提升支撑理科、工科研究能力。报告介绍中心建设的进展、经验及展望。

关键字 公共平台；分析测试

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

基于 COSO 框架的设备验收内控体系优化研究

朱娜*
上海交通大学

高校实验仪器设备是实验教学和科学研究的核心物质基础，其性能、安全及合规性对科研的质量和进度具有决定性影响。因此，设备验收是设备管理中不容忽视的环节。本研究在 COSO 理论框架下，运用风险指数矩阵等工具，系统地识别、评估并控制设备安装与验收过程中的潜在风险，针对性提出设备验收内控体系优化策略，以提升验收工作的效率与安全性。通过这一综合性内控体系的优化，使设备验收工作更加规范、高效，将为教学科研活动的顺利进行提供有力保障，进而推动高校教学科研事业的持续发展。

关键字 设备验收，COSO 框架，风险指数矩阵，内控体系

参考文献

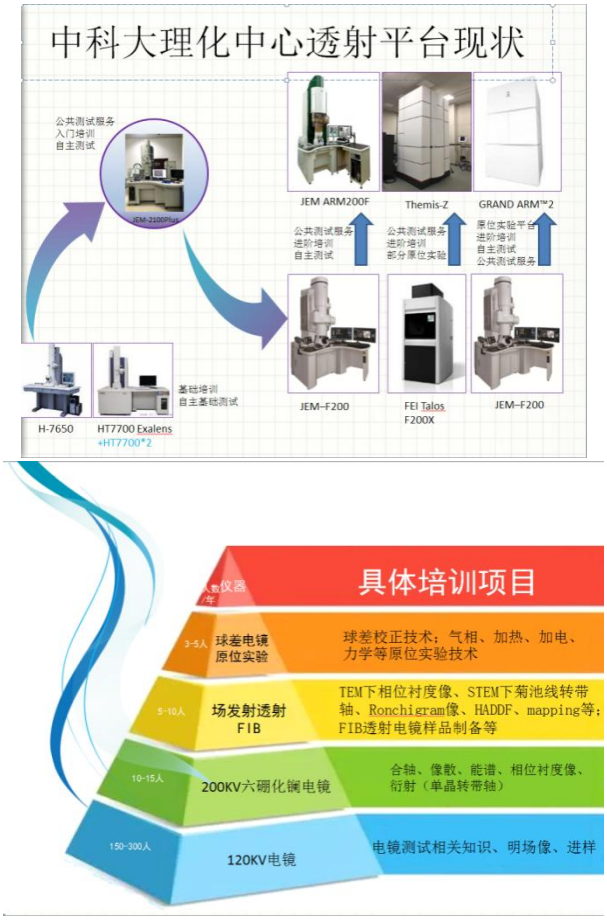
1. 朱娜,张兆国.高校设备采购的风险分析与防范 J. .实验室研究与探索,2021,40(04):284-286.
2. 康建新,郭丽杰.高校化学实验室安全分析方法研究 J. .实验技术与管理,2014,31(12):203-206.
3. 刘音,胡文静.高校电子实验室风险评价体系构建与分析 J. .实验技术与管理,2020,37(06):281-284.
4. 厉小燕,谢俊,管浩铮,姜侃,李帮辉,周慧忠,葛凌慧.内部控制系统在检验检测设备采购中的应用 J. .中国标准化,2021(15):228-232+237.
5. 蔡炽柳,钟艺峰,董润喜,苏秋成.新形势下科研仪器设备验收工作的思考 J. .科技管理研究,2020, 40(20):111-116.

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

关于公共实验平台电镜人才来源的一些探索

李探微*
中国科学技术大学

公共实验平台需要面对各种各样的测试与实验需求，对电镜工作者的全面性要求较高。然而，现在的电镜人才通常出自一些特定实验方向的课题组，一专但不一定多能；而公共实验平台通常没有自己的研究生队伍，在招聘和培养人才方面有一定局限性。　　中科大理化中心透射平台将测试和人才培养结合起来，在制度和软硬件条件方面形成了一套梯级培训体系，同步推进了公共测试、机时利用、专项研究、学生能力培养以及电镜人才选拔。并尝试建立以原位实验为核心的透射电镜实验技术与人才区域性交流节点。



关键字 公共实验平台　透射电镜　梯级培养　制度建设　技术与人才交流节点

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

电子顺磁共振技术与扫描 NV 显微镜：最新进展及多学科应用探索

代映秋*
国仪量子

电子顺磁共振技术可以快速、准确、无损地检测被的测定物质中的未成对电子数量，并分析其周围环境的结构和动力学信息，是进行物质组成和结构分析、化学反应过程研究的强有力工具，在化学、材料、物理、环境、医学等领域具有重要应用价值。扫描 NV 显微镜是一款量子精密测量仪器，结合了金刚石氮-空位色心光探测磁共振技术和原子力显微镜扫描成像技术，通过将金刚石 NV 色心嵌入到扫描探针中，能够实现高灵敏度、高空间分辨率的磁成像，可进行定量磁学分析，在超导磁通涡旋表征、二维磁性材料研究、反铁磁、斯格明子、纳米电流研究等领域中具有重要应用。国仪量子公司是一家以量子精密测量为核心技术的高新技术企业，获批国家重点研发计划“重大科学仪器设备开发”重点专项。本报告介绍国仪量子电子顺磁共振技术与扫描 NV 显微镜的最新研究进展，并介绍相关技术在多学科中的最新应用成果。

关键字 顺磁共振 扫描 NV 显微镜

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

赛默飞分析科学整体解决方案

郝维慧*
赛默飞世尔科技

赛默飞世尔科技有限公司在清洁能源领域提供全面的分析科学整体解决方案，旨在支持和推动该领域的技术创新与发展。我们的解决方案涵盖从样品准备、数据采集到数据分析和报告生成的全流程，确保客户在清洁能源研究和应用中获得高精度、高效率和高可靠性的分析结果。通过整合赛默飞各个部门先进的仪器设备，如 TEM，FIB-SEM，SEM 材料结构可视化分析仪器，ICP-OES/MS、GC-MS、HPLC-MS、 FTIR 和 Raman 等各类谱学分析检测仪器，以及针对于材料分析的惰性气体互联解决方案，创新的软件平台和专业的技术支持，帮助客户在锂离子电池、太阳能电池、燃料电池和其他清洁能源技术的研究、质量监控和失效分析中提供了全面综合的分析平台。赛默飞的分析科学整体解决方案不仅提升了实验室的操作效率，还推动了清洁能源领域的科学研究和工业应用的前沿发展，为实现可持续发展的能源未来作出了重要贡献。

关键字 清洁能源，惰性气体样品转移工作流程，电子显微镜，谱学分析

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：报告

科研仪器自动化管理的整体解决方案

胡林彦*
中国科学院大连化学物理研究所

仪器设备相当于科研人员的眼睛和耳朵，在科研工作中具有举足轻重的作用，仪器设备的科学管理与高效运行是众多科研机构长期面临的难题之一，这个问题处理的好坏直接影响科研工作的效率和质量。经过十余年的实践和经验积累，基于实验室科研技术平台，作者开发完成科研仪器自动化管理系统，建立了软硬件一体的整体解决方案。系统基于网络软硬件构架，将仪器设备的管理通过网络平台实现。通过管理系统软件、仪器终端软件和专门搭建的服务器、存储器等网络硬件环境，构建成仪器管理系统。系统包含用户管理、仪器管理、预约管理、审核管理、实验管理、数据管理、信息提醒管理、统计管理、门禁管理等模块，各模块之间相互协调，实现从预约、审批、实验、数据传输全流程管理。此外，各模块功能紧贴现实，实现软件刚性要求高、实际需求弹性要求高、实验室情况多变的协调统一。在用户管理方面，系统根据用户实际情况自动动态调整用户级别，实现不同级别用户拥有不同仪器使用权限的自动化动态管理；在预约管理方面，根据不同仪器特点，系统包括时间预约、项目预约、综合预约三种预约方式满足各类仪器的使用要求；在预约审核方面，系统具备根据审核人设定的条件自动完成审批操作的功能，极大提高了效率减少了人力；在实验数据管理方面，系统保障实验数据从仪器计算机直接高速传输至云端存储器，实验人员从因特网凭个人 ID 下载数据，保证实验数据的真实性和唯一性；在实验管理方面，系统根据预约情况允许特定实验人员在特定时间进入特定实验室开展试验，其他时间则无权进入实验室，保证实验室无人值守情况下安全有序运行。该系统有效解决了科研仪器设备的科学管理与高效运行所面临的所有问题。此外，系统各模块功能可独立设置，自由度大，系统建设也容易操作且成本较低。6 年时间的运行检验表明，系统实现稳定运行并发挥了强大作用，大大提高了科研工作效率，同时减轻了科研人员的工作负担，已具备广泛推广使用的条件。

关键字 仪器设备，自动化，管理

参考文献

1. 胡林彦，范峰滔，仪器管理系统 V1.0, 2953686，原始取得，全部权利, 2018-4-4.
2. 胡林彦，范峰滔，仪器管理系统 V2.0, 9050867，原始取得，全部权利, 2021-11-10.
3. 胡林彦，范峰滔，仪器管理系统 V3.0, 11591783，原始取得，全部权利, 2022-12-1.

分会场：18.分析测试平台建设与管理
交流类型：墙报

人工智能体在分析测试平台建设中的创新实践：以危险化学品专家“长安”为例

黄青*、纪宇
江苏省食品药品监督检验研究院

在当前科技飞速发展的背景下，人工智能技术已经成为推动各行各业数字化转型的关键力量。特别是在实验室分析测试领域，人工智能的应用不仅能够提升工作效率，还能在确保安全方面发挥关键作用。本研究专注于基于人工智能的危险化学品管理专家系统“长安”，旨在深入探讨和展示人工智能技术在分析测试平台管理中的创新应用。

“长安”智能体平台的构建，融合了机器学习、大数据语言模型和物联网技术，这些技术的结合为危险化学品的管理提供了一个全新的视角。平台通过调用智能体模型中的工作流、知识库、多样化的插件组，能够自动识别危险化学品的基本信息、存储条件和使用情况。这种智能化的识别能力，不仅提高了数据采集的准确性，还为实验室工作人员提供了实时的决策支持。此外，智能体通过先进的数据分析算法，能够预测潜在的风险因素，并可在紧急情况下自动启动应急响应程序，提高事故处理的响应速度。

“长安”智能体的开发，不仅为实验室危险化学品管理提供了一种新的解决方案，我们还将继续优化智能体的性能，并探索其在更广泛领域的应用潜力。我们坚信，随着技术的不断进步和应用的深入，人工智能体将在实验室数字化转型中发挥越来越重要的作用。

关键字 数智化，人工智能，实验室管理，分析测试平台，危化品

分会场：19.分析仪器高质量发展
交流类型：墙报

一种硝基类炸药组分 HPLC 分析方法及两种不同仪器的性能对比

王丹、黄晓冬、孙元社*、李彤
依利特(苏州)分析仪器有限公司

炸药及与其具有结构相关性的硝基化合物是一类具有全身毒性的化合物[1]。环境机构严格监控它的使用。检测炸药的仪器主要有气味扫描仪，气相色谱-质谱联用仪和液相色谱-质谱联用仪等[2-4]。目前尚缺乏相应的高效液相色谱(HPLC)分析方法。

本文对黑索今(环三亚甲基三硝铵)、2,4-二硝基甲苯、2,4,6-三硝基甲苯、1,3,5-三硝基苯、硝基苯、间二硝基苯和奥克托今共 7 种炸药组分的液相色谱分离条件进行了优化。色谱条件为：色谱柱为 Supersil ODS2 5μm, ID4.6mm×250mm，检测波长为 230nm，流动相为乙腈/水(30/70)，流速为 1 mL/min。并考察对比了国产和进口两种不同高效液相色谱仪对 7 种炸药组分的分离分析性能进行对比。

结果表明：两种不同 HPLC 仪器对 7 种炸药组分混合物的分离表现基本一致。国产依利特 E3200 高效液相色谱仪连续 5 次进样，2,4,6-三硝基甲苯峰面积 RSD 值为 0.31%；进口某品牌高效液相色谱仪连续 5 次进样，2,4,6-三硝基甲苯峰面积 RSD 值为 0.22%，两台仪器所测 7 种物质线性关系均良好，r 值均大于 0.999。两种不同 HPLC 系统对硝基化合物炸药组分混合物的分离效果一致，重复性好，线性相关性好，均满足分析检测需求。

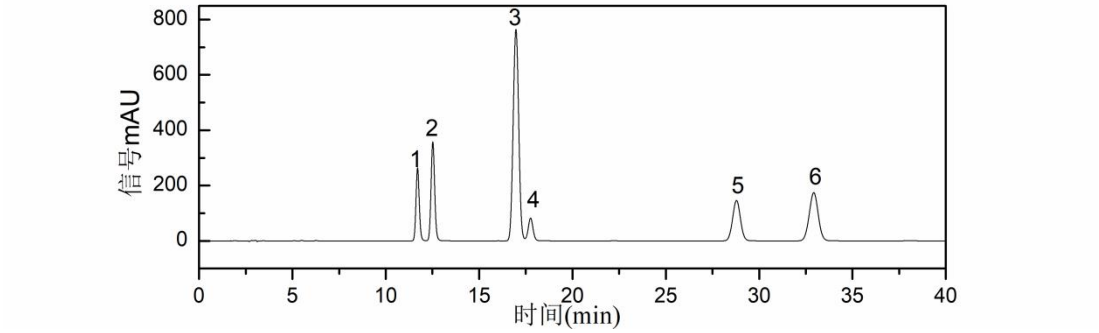


图1 硝基炸药组分色谱图

1. 黑索今 2. 奥克托 3. 1,3,5-三硝基苯+间二硝基苯 4. 硝基苯 5. 2,4-二硝基甲苯 6. 2,4,6-三硝基甲苯

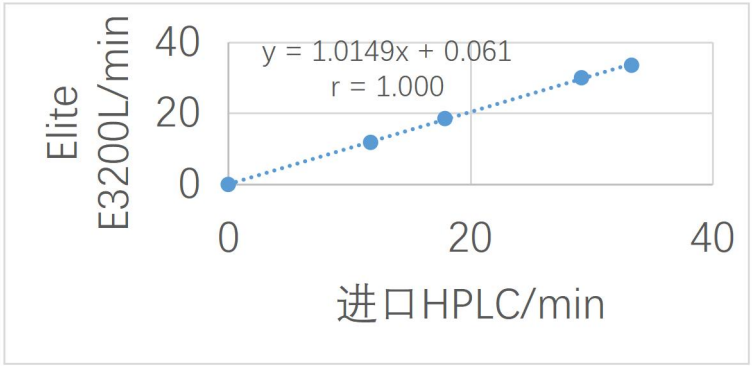


图 2 两种HPLC仪器保留时间一致性

表1 两种不同HPLC仪器性能对比表

序号	项目	Elite E3200L	进口HPLC	备注说明
1	保留时间(min)	33.500	33.313	一致
2	保留时间RSD(%)	0.40	0.09	均小于1%
3	峰面积时间RSD(%)	0.31	0.22	均小于2%
4	线性相关性(r)	≥0.999	≥0.999	一致
6	基线噪声(mAU)	0.050	0.075	优于
7	LOD(mg/L)	0.20	0.45	优于
8	LOQ(mg/L)	0.65	1.48	优于

关键字 高效液相色谱，性能对比，分析方法，炸药

参考文献

1. 刘秀华, 朱方华, 何小波等. 硝基化合物的高效液相色谱(HPLC)分析[J]. 环境化学, **2012**, *31(3)*: 385-389.
2. 汪行.常见炸药的挥发性成分分析及其应用研究[J].中国人民公安大学, **2020**.
3. Jeffery A, Steevens B, Maurice Duke, et al. Toxicity of the explosives 2,4,6-trinitrotoluene, hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine, and octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine in sediments to Chironomus tentans and Hyalella azteca: Low-dose hormesis and high-dose mortality[J]. Environmental Toxicology and Chemistry, **2002**, *21(7):*1475-1482.
4. 张艳林,高翠莲,杨业全等.固相萃取-高效液相色谱法检测水中硝基苯[J].贵州农业科学, **2009**,*37(7)*:238-239.

分会场：19.分析仪器高质量发展
交流类型：墙报

实验室级高效液相色谱分离纯化用馏分收集器性能测试方法研究

贡丹平、曹佳佳、孙元社*、李彤
苏州依利特科技有限公司

高效液相色谱(HPLC)是一种非常高效的复杂样品分离技术，制备纯化得到的化合物纯度特别高，适合于精制，已经广泛应用在生物医药等行业。馏分收集器在液相色谱分离系统的自动化方面扮演着至关重要的角色，其精度和稳定性直接影响到有效组分的制备纯化。馏分收集器是制备液相色谱仪的重要辅助装置，主要用于自动收集色谱分离后的组分，馏分收集器可按色谱峰流出的信号进行手动或自动收集。然而，目前针对馏分收集器准确性和稳定性测试还没有相应的标准方法。

本文以依利特公司研发的 F3310 型馏分收集器为例，建立一套性能测试方法，为其产品的质量检验奠定了基础。测试方法：以纯水作为流动相，在流速范围 0.5mL/min-50mL/min 内，馏分收集器设定按时间自动收集，运行结束后，计算实际收集体积与理论收集体积的偏差作为收集准确性，一般应小于±5%。另外模拟实际收集功能，以纯甲醇作为流动相，采用常规合格 C18 色谱柱，将 1.0×10-4 g/mL 萘溶液连续进样测试 7 针，馏分收集器设定按时间自动收集，计算 7 针采集样品重量的 RSD 值，以此检验馏分收集器的稳定性，一般应小于 3%。

该馏分收集器性能测试方法实用、有效，可以作为同类产品检验方法参考。

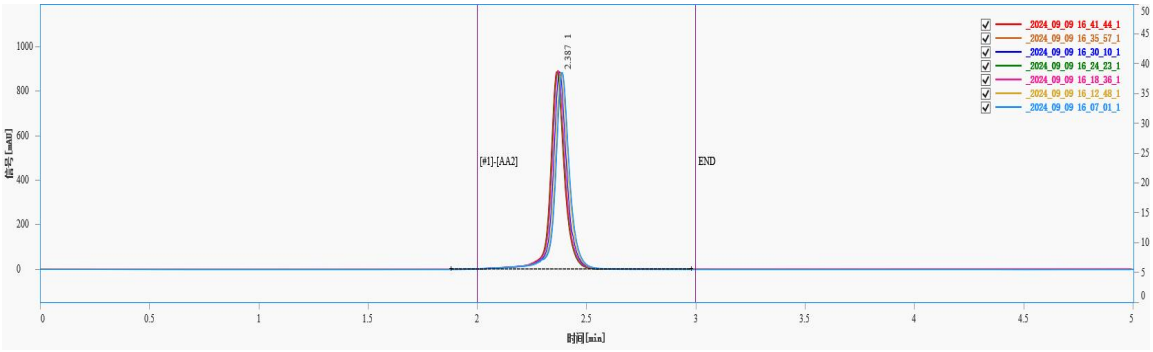


图1 稳定性检验馏分收集色谱图

关键字 馏分收集器，高效液相色谱，性能测试，分离纯化

参考文献

1. 江林，周建，张晓辉等. 现代科学仪器, **2008**(*02*) 8-9.
2. GB/T26792-2019 高效液相色谱仪.

分会场：20.Sino-US Forum on Nano and Analytical Science
交流形式：报告

金属化合物作用下持久性自由基的生成转化与控制机制

刘书廷[2]、郑明辉*[1]、刘猛[2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 大连理工大学

持久性自由基（persistent free radicals, PFRs）相较于瞬时性自由基具有较强的持久性，在环境中的持久存在增加了其暴露风险。PFRs 携带的未成对电子使其相较于非自由基具有较强的反应性，易发生电子转移或参与氧化还原反应。PFRs 作为一种新污染物引起广泛关注，已经在多种环境介质中被普遍检测到，探明其生成和控制机制具有重要意义。前期的研究表明，金属化合物作为催化活性物质在热化学反应过程中对持久性自由基的生成起着关键作用，不同的金属化合物催化作用下有机自由基的种类、浓度和寿命有显著差异。目前，金属化合物对持久性自由基的催化机理尚不明晰。阻滞剂如何与金属催化剂以及自由基相互作用从而实现阻滞也缺乏论证，不同金属氧化物催化剂参与下持久性自由基的生成和控制机制有待阐明。本研究通过实验室模拟实际热过程，通过多谱学手段进行原位检测，结合理论计算实现了持久性自由基的准确定性，基于此探明了不同金属化合物作用下持久性自由基的生成与控制机理。对不同金属化合物主导的实际热相关工业过程中产生的优先污染物的靶向控制具有指导意义。

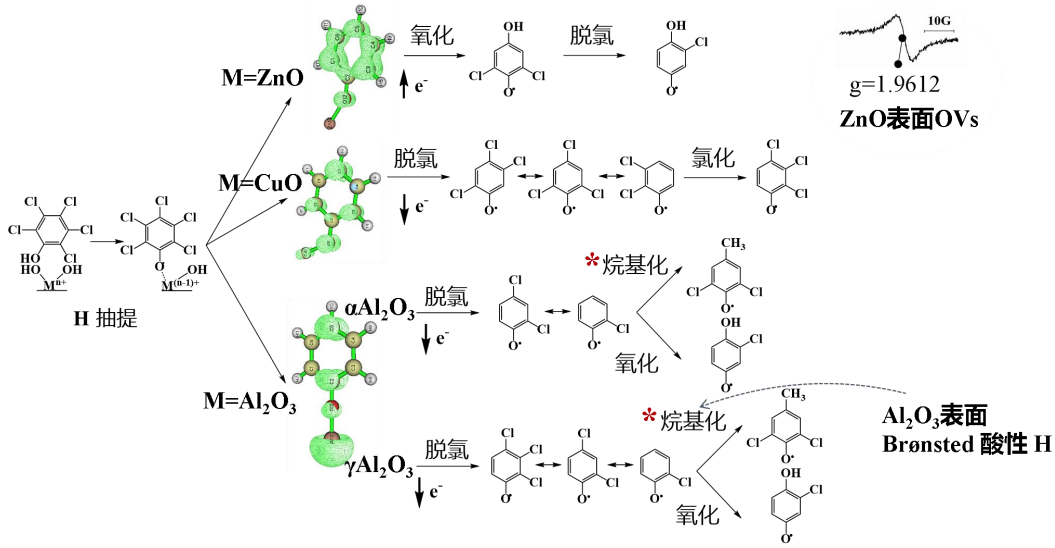


图 1 不同金属氧化物作用下的持久性自由基生成机制。

本研究发现，金属氧化物在催化反应中以氯化物的形态作为更强的 Lewis 酸催化剂存在，因其具有不同的催化性质，激活碳-卤键并催化生成差异化的有机自由基中间体和产物。阻滞剂硫酸铵与金属催化剂发生不同的配位反应，改变了有机自由基中间体的种类和寿命。硫酸铵加入热反应降低了自由基的表面浓度，增强了自由基在表面的稳定化作用，从而抑制了自由基中间体的进一步偶联。同时硫酸铵对金属催化剂的胺化反应使得氨基掺杂到有机自由基中间体中，导致产物中胺/硝基或 N 杂环化合物占比增多。

关键字 持久性自由基，工业热过程，金属催化作用，原位 EPR 检测，自由基机制

参考文献

1. Lili Yang, et al. Pivotal Roles of Metal Oxides in the Formation of Environmentally Persistent Free Radicals. Environ. Sci. Technol. 2017, 51, 12329-12336.
2. Shuting. Liu, et al. Metal-Catalyzed Formation of Organic Pollutants Intermediated by Organic Free Radicals. Environ. Sci. Technol. 2022, 56, 14550-14561.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

教学型仪器的研制与应用

郑兰荪*
厦门大学

培养能够开展科学仪器原理创新、设计制造和应用开发的高端人才是建设创新型国家必须着力解决的重大基础性、战略性问题。由于进口仪器价格昂贵，且仪器的设计和功能并没有考虑教学的需求，高校本科实验教学过程中学生对仪器结构和原理的认识大多停留在理论上，难以不能满足人才培养的需要。自制教学仪器不仅具有成本低、性能稳定、仪器内部结构可视化等优势，而且使用灵活、学生可以自主调试与拆装，为提升实验教学质量和培养学生创新能力提供了新的途径。本文介绍了厦门大学自主研制的教学质谱仪、教学型多功能拉曼光谱仪、教学型恒电位仪等高端教学仪器，并阐述了其在高校本科实验教学中的应用效果。最后，总结自制教学仪器在高校人才培养过程中的应用前景和意义，强调了其在推动高等教育实验教学改革和创新方面的重要作用。

关键字 自制教学仪器 教学质谱仪; 实验教学; 实验教学改革

参考文献

1. 张树永, 朱亚先, 郑兰荪. 大学化学, **2020**, *35* , 2.
2. 张树永, 朱亚先, 郑兰荪, 霍冀川, 宋丽娟, 徐华龙. 高等工程教育研究, **2021**, *21*, 3.
3. 霍冀川, 张树永, 朱亚先, 李攻科, 杨屹, 李梦龙, 王玉枝, 郑兰荪. 大学化学, **2020**, *35*, 11.
4. 苏海峰, 邓顺柳, 李云凯, 吴迪, 林志敏, 黄晓圳, 梁曼玉, 卢文和, 邱源, 郑兰荪. 大学化学,**2023**, *38*, 225.
5. 邓顺柳，苏海峰，朱亚先，王玉枝，翁玉华，陈招斌，彭淑女，吕银云，洪歆怡，王翊如，黄晓圳，林志敏，郑兰荪. 大学化学, **2024**, *39*, c127.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

基于 LEGO 积木的激光诱导荧光毛细管电泳仪的研究

潘建章*、张梦婷、方群
浙江大学

基于市售乐高(LEGO)积木和 3D 打印积木构建的光学模块，发展了适用于本科生仪器分析教学实验的模块化毛细管电泳-激光诱导荧光检测系统(CE-LIFGO)。CE-LIFGO 系统由模块化激光诱导荧光(LIFGO)检测系统、安装在乐高玩具车上的缺口管阵列样品进样模块、高压电源模块、分离毛细管以及智能手机控制和数据采集模块组成。该 CE-LIFGO 系统在 75 μm 内径毛细管中的荧光素钠检测限为 5.8 nM，可在 2 分钟内实现三种异硫氰酸荧光素(FITC)标记氨基酸混合物样品的 CE 分离，四个峰(包括三种氨基酸和 FITC)峰高的相对标准偏差(RSD，n=10)均低于 5.9%，峰面积的 RSD(n=10)不超过 7.2%。CE-LIFGO 系统还在 150 秒内分离了 DNA Marker 中的 7 个 DNA 片段，每个 DNA 片段的理论塔板数均超过 1000000 /m，与许多商业仪器相当。得益于模块化结构理念、基于手机的仪器控制方法、以乐高玩具车为载体的缺口管阵列进样装置以及 3D 打印制造技术，该 CE-LIFGO 系统具有组装简单、操作灵活、生产成本低、使用趣味性强等特点。CE-LIFGO 系统初步应用于仪器分析实验教学中，有利于促进学生对仪器原理的理解，锻炼学生的动手能力，提高学生发现问题和解决问题的能力。

关键字 LEGO 积木；激光诱导荧光检测器；毛细管电泳；教学

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

纳米孔道单分子电化学测量仪的实验教学设计及应用

胡正利、钟诚兵、应佚伦、龙亿涛*
南京大学

现有本科仪器分析实验教材主要以分子集合体作为分析研究对象，将单分子科学知识和相关分析测量技术引入大学实验课堂具有重要意义，主要挑战在于开发适用于本科教学的仪器及方案。纳米孔道单分子分析技术通过测量在电解质溶液中唯一纳米级孔道的电导值变化实现对单个分子的分析 1，化学测量概念清晰、实验现象明确，便于学生理解和掌握。本文探讨了自制便携式仪器在“科研融合型”纳米孔道电化学单分子测量实验教学中的应用，经过五年多在南京大学仪器分析实验和化学原理与测量实验的教学实践，设计了可拓展的纳米孔道单分子实验教学方案 2,3，构建了“验证学习”到“自主探索”的两段式教学模式 4,5。本科二、三年级学生基本能够独立完成单分子实验数据收集与分析，学生反馈这门课程“让我用一种新的视角去看待化学这门学科”、“让我有种近距离接触科研的感受”。在教学过程中，引导鼓励学生将课堂知识延伸至自主科研探索，落实了价值-知识-能力“三位一体”育人目标，为科研融合型实验设计和教学改革提供了借鉴。

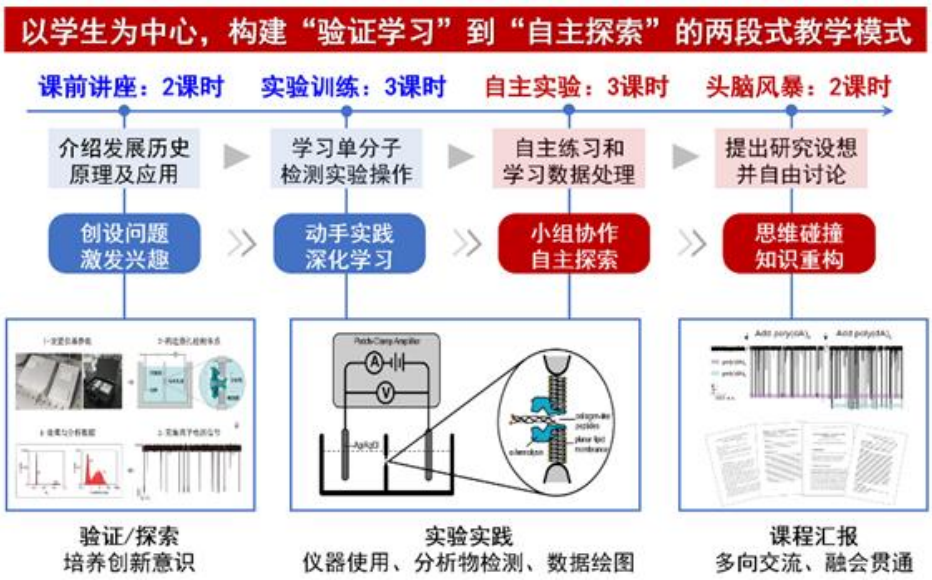


图 1. 纳米孔道电化学单分子测量实验教学整体设计思路

关键字 纳米孔道电化学；单分子测量；仪器分析实验；本科教学；科研融合

参考文献

1. Y. Ying, Z., Hu, S., Zhang, Y., Qing, A. Fragasso, G. Maglia, A. Meller, H. Bayley, C. Dekker, Y. Long, Nat. Nanotechnol., **2022**, *17*, 1136-1146.
2. Z. Hu, Y., Ying M. Huo, X. Kong, X. Yu, J. Zhang, Y. Long, J. Chem, Educ., **2020**, *97*, 4345-4354.
3. 胡正利，辛凯莉，刘少创，钟诚兵，武雪原，应佚伦，孔璇凤，余晓冬，张剑荣，龙亿涛. 大学化学, **2022**, *37*, 2111089.

4. 胡正利, 王佳, 应佚伦, 刘少创, 马慧, 章文伟, 张剑荣, 龙亿涛. 大学化学, **2024**, *39*, 344-350.
5. 胡正利, 应佚伦, 王佳, 钟诚兵, 孔璇凤, 余晓冬, 章文伟, 张剑荣, 龙亿涛. 大学化学, **2024**.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

多功能拉曼光谱仪器的研发与教学应用

徐蔚青*[1,3]、刘川[1,2]、周鹤[1,3]、任斌[1,2]
1. 嘉庚创新实验室
2. 厦门大学化学化工学院
3. 鹭翔嘉仪（厦门）科技有限公司

以模块化、开放结构、多功能和高适用性为特点研发的多功能拉曼光谱仪，集拉曼光谱、吸收光谱、荧光光谱、发光光谱等检测于一体；具有显微镜观察功能，可实现对样品的同一点进行白光成像和灵敏度高、高分辨率的光谱采集，适合各个领域的研究与检测分析应用。在教学应用方面，仪器的模块化和开放式基本构造，可以按照不同的教学需求进行组合和切换，形成不同类型的实验教学演示配置，可提高教学设备的使用效率并使学生了解不同类型的光谱探测系统的基本结构和工作原理，同时提供了更多实际操作的机会。与仪器配套设计的多个实验教学方案，本着“看得见，摸得着，懂原理，能学会”的理念，采用原理演示-自主实验双模式教学，让学生能够自主搭建和调试看起来高不可攀的分析仪器，进而掌握仪器的工作原理及应用，不仅能激发学生的学习积极性，也是培养学生动手能力和创造力最直接和有效的途径，有助于培养学生的实践创新能力。

关键字 拉曼光谱；教学仪器；光谱仪器

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

面向智能化学时代的《化学自动化》课程

林昶旭*、陈招斌、吴平平、方宁
厦门大学

智能分子制造是一个新型的化学与信息技术的交叉学科。也对兼具信息技术与分子科学两方面知识的人才培养提出了数量和质量上的新的需求。厦门大学“化学测量学”新工科专业，将《化学自动化》列为专业先导课程，为智能分子制造对于兼具化学专业与相关软硬件信息技术综合应用能力的中坚执行力量。培养学生在工程思维、系统思维、自驱动的学习、动手能力、数字化思维、展示传播等方面的能力。使学生获得面向社会需求的能力矩阵。探索智能化学交叉学科的培养体系与标准。课程内容包括：串口通信、Arduino 最小系统、自动控制入门、机械臂、流动化学、代码体系与用户界面、实验室物联网、人工智能算法等。课程形式结合授课、飞行讲师、实验课、大作业等。并成功对接选派同学到相关智能化学企业实习，获得良好效果。课程成果进一步向竞赛延伸。报告还将介绍一系列自研教学仪器、首届数字化实验邀请赛、流动化学教学在大学中学阶段的系统性探索。

关键字 化学自动化；交叉学科；人工智能

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：墙报

基于自主搭建离子源的原位质谱创新实验课程建设

邵伟*、张万群、周强、朱平平
中国科学技术大学化学实验教学中心

Ambient ionization mass spectrometry is one of the most important fields in mass spectrometry research, With the characteristics of real-time, non-destructive, high throughput, no need for pretreatment and so on. the National Experimental Teaching Center of Chemistry at the University of Science and Technology of China has introduced ambient ionization mass spectrometry technologies into experimental teaching.Students use the materials at hand to build a simple ion source, and then gradually improve it according to the actual needs. At present, it has been iterated to the third edition of the ambient ionization mass spectrometry teaching platform, whose equipment includes ion source fixing plate, ion source positioning device, ion source, high voltage power line, flow injection pump, gas pipeline and so on. The ion source is held by a robotic arm, which can be independently constructed by students in the experiment. just like building blocks, it can be easily switched (Figure 1). On the basis of this platform, our group tried to set up a number of innovative ambient mass spectrometry experiments such as ESI, nanoESI, Paperspray, DESI, and mass spectrometry imaging (MSI) in the course of Comprehensive Instrumental Analysis Experiment for graduate students, which is helpful to enhance students' interest in learning, make them understand the frontier direction of mass spectrometry, and cultivate their ability to solve problems in practice.

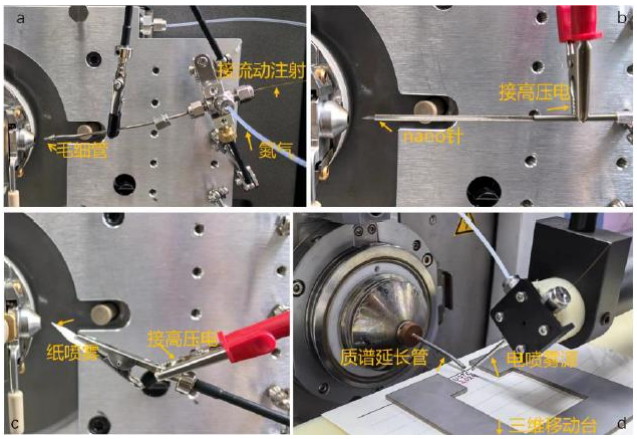


图 1. 原位电离质谱工作示意图。a 电喷雾；b 纳升电喷雾；c 纸喷雾；d 解析电喷雾/质谱成像

关键字 原位电离质谱；离子；自主搭建

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

基于计算机视觉的 AI 滴定仪

张永策*、石青玉、王艺清、苏自乾、傅旦赞、秦家骏、宿艳
大连理工大学

本项目通过结合单片机控制技术和步进电机，实现了对滴定管开关的精确操控，进而构建了一个基于计算机视觉的人工智能滴定分析系统。该系统采纳了两种创新的机器视觉方案：一是通过 RestNet 神经网络分类算法，依据指示剂颜色变化智能判定滴定终点；二是利用 OCR 技术识别电位计读数，进而绘制二阶微商曲线。通过将卷积神经网络的训练结果与电位突跃进行比较，验证了 RestNet 算法在酸碱滴定、配位滴定、沉淀滴定以及氧化还原滴定中的有效性和准确性。在 23 级分析化学实验课中，40 名学生在 4 个学时内成功完成了实验，显示出该系统易于操作和学习。在首届智能实验挑战校赛中，57 名学生组成的 19 支队伍不仅完成了比赛，更有 4 支队伍自主设计了新的硬件系统和软件算法，展现创新潜力。为了降低成本并便于推广，项目采用了商品化组件和 3D 打印技术。这些技术的融合不仅为分析化学基础实验的教学创新提供了新的方向，也为未来在智能实验领域的探索研究打下了坚实的基础。

关键字 卷积神经网络；机器视觉；智能滴定；光学字符识别

参考文献

1. Li Fei-Fei, TI Searching for Computer Vision North Stars, DAEDALUS, **2022**, *151*, 85-99.
2. A Lamb, T.D, Photoreceptor physiology and evolution: cellular and molecular basis of rod and cone phototransduction. J Physiol, **2022**, *600*, 4585-4601.
3. Liang Siwen, ResNet14Attention network for identifying the titration end-point of potassium dichromate, Heliyon, **2023**, *9*, e1899.
4. Kosenkov, Vision in Chemistry: Automatic Titration, J. Chem. Educ, **2021**, *98*, 4067- 4073.
5.百度飞桨深度学习平台，https://www.paddlepaddle.org.cn/.
6. Idrisov, B.，Schlippe, T, Algorithms, **2024**, *17*, 62.
7.孟长功，田福平，宿艳，徐铁齐，王春燕，姜文凤. 基础化学实验. 第 3 版.高等教育出版社, **2019**, *3*.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

用于扫描电镜仿真实验教学的实体控制设备的研制

何攀、严军林*、漆红兰、陈志刚、代恩鸣、赵鑫、王蕊娟
陕西师范大学

扫描电镜作为材料微观形貌及元素分析的重要工具，在化学及材料科学研究中起着重要作用。然而，高校中的扫描电镜通常数量有限且机时紧张，加之操作复杂、维修成本高，致使实体实验难以充分满足实验教学需求。扫描电镜虚拟仿真实验虽能在一定程度上弥补实体实验的不足，提升实验教学效果[1-2]，但在成像调节过程的模拟上较为简单，主要依赖鼠标操作，不仅使用不便，且与实机操作方式差异较大，难以有效训练学生的真实电镜操作技能，导致虚拟仿真考试中成绩优异的学生在面对实机时仍需耗费较多机时进行成像练习。

为进一步提升虚拟仿真实验教学效果，研制了一款实体控制设备。该设备集成了电镜控制面板与轨迹球的全部功能，并通过优化算法与软件数值绑定，能够模拟实机上旋钮的旋转、轨迹球滚动等操作，实现样品位置移动、放大倍数调整、合轴、像散校正、聚焦、亮度对比度调节以及数据保存等真实场景的模拟操作，并在软件上实时生成图像。在不占用实机宝贵机时的前提下，有效训练学生仪器操作技能，使其更顺利地过渡到实机操作。该设备的成功研制实现了对实机实验内容及操作方式的低成本、高保真模拟，对透射电镜等仪器的实验教学具有重要的示范作用。



图 1. 扫描电镜仿真实验教学的实体控制设备

关键字 扫描电镜；实验教学；设备研制

参考文献

1. 来婧娟，武元鹏，张晓燕，西宇辰，关中原，刘丽，实验科学与技术，**2023**，*21*，97.
2. 杨雅静，刘志广，张永策，赵丽妮，实验室研究与探索，**2018**，*37*，272.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

自搭建红外变温透射装置在实验教学中的应用

胡万群、邵伟、杨凯平、周强、何家庆*
中国科学技术大学

变温红外光谱技术作为一种有效的结构表征手段，主要反映分子结构随温度变化的相关信息，已有大量的关于变温红外光谱技术应用的研究报道。为使得科研成果与实验教学更好地融合，并帮助学生深入理解化学分析仪器的构造和工作原理，培养学生实践创新能力和团队协作能力，自主设计了自搭建红外变温透射装置（图 1），并将此装置应用于实验教学中（图 2）；同时和商品化的附件装置比较，使学生体验自制化装置的可行性，大大激发了学生的学习兴趣。

As an effective means of structure characterization, variable temperature infrared spectroscopy mainly reflects the relevant information of molecular structure changes with temperature, and there have been a large number of research reports on the application of variable temperature infrared spectroscopy. In order to better integrate the scientific research achievements with the experimental teaching, help students deeply understand the structure and working principle of chemical analysis instruments, and cultivate students' practical innovation ability and team cooperation ability, an infrared variable temperature transmission device was designed and applied to the experimental teaching; At the same time, compared with the commercialized accessory device, it enables students to experience the feasibility of the self-made device, which greatly stimulates students' interest in learning.



图 1. 自搭建红外变温透射装置

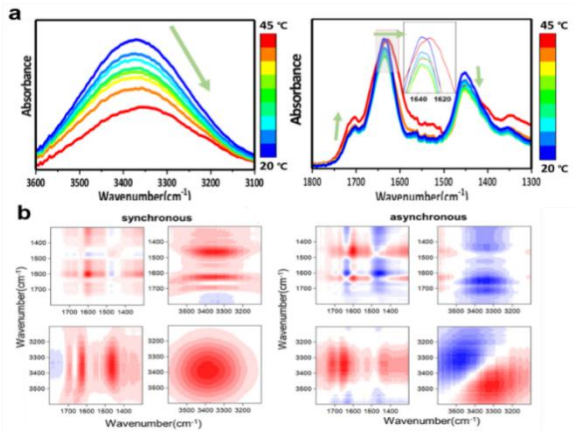


图 2. 教学实验数据图

关键字 自搭建；变温红外光谱；实验教学

参考文献

1. C. O. Areán, O,V, Manoilova, G. T. Palomino, M. R. Delgado, A. A. Tsyganenko, B. Bonellic , E. Garrone Phys. Chem. Chem. Phys., **2002**, *4*, 5713–5715.
2. E. Garrone, C. O. Areán, Chem. Soc. Rev., **2005**, *34*, 846–857.
3. M. F. Alfonso, C. G. Andrew, A.P. Jordan, W. Rebecca, S. D. M. John , I. T. Corrie, RSC Adv., **2016**, *6*, 108164–108179.
4. J. Singh, R.L. white, Vibrational Spectroscopy, **2018**, *94*, 37-42.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

模块化自组装 DIY 毛细管电泳教学仪的研制及实践教学应用

杨丽*、杨巾栏
东北师范大学

当前高校仪器分析实验课程中，基本采用针对科研设计的商品化毛细管电泳仪器，由于仪器高度集成化和自动化且价格昂贵，实验教学基本上都停留在理论教学结合实验教师仪器操作演示阶段，学生动手机会少，只能停留在设置某些参数阶段，不利于基础教学实践和学生综合能力的培养。我们研发一种新型仪器分析实验教学仪--“模块化自组装 DIY 毛细管电泳教学仪”，并应用于本科生仪器分析实验课程教学实践。相比于目前教学中使用的商品化的毛细管电泳仪[1-2]，该教学仪采用全透明机箱设计和手机采集数据，并具有便携式、简单直观、模块化、自组装、价格低廉、便于推广的特点，能有效地将理论知识与对应的实践课程相结合，学生通过对仪器的动手组装深入了解其构造及功能，分析分离原理和熟悉仪器操作，达到了提高教学效果和培养学生综合能力的目的。

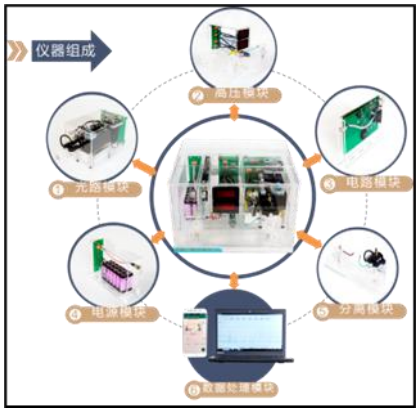


图 1 教学仪器的结构组成



图 2 教学仪器实物照片

关键字 毛细管电泳; 教学仪器; DIY

参考文献

1. 刘可心，陈旭疆，冯云祥，周仕东，杨丽,《化学教育》（封面）**2020**, *41*, 36-40.
2. 国家实用新型专利, ZL201920188459.7, **2019**.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

自主设计教具助力仪器分析实验教学初探

李维维*、胡万群、邵伟、张万群、杨凯平、孙晴
中国科学技术大学

摘要：原子光谱作为一种常用的仪器分析方法，广泛应用于化学材料、环境卫生、食品安全、新能源等领域，是学生必须掌握的仪器分析方法之一。然而，随着仪器分析技术的飞速发展，仪器的灵敏度、精密度、准确度等各种性能参数提高的同时，仪器的结构越来越像一个“黑匣子”，学生很难直观、深入地学习和理解仪器的内部构造和工作原理。为了解决这一问题，我们利用报废的原子吸收光谱仪，对其进行拆解、设计及组装，制作成可视化、交互式的实验教学教具（图 1）。实验教学过程中，使用该实验教具，讲解主要部件的功能，使学生直观了解仪器的内部结构，加深对其工作原理的理解，提升教学过程的趣味性。通过多年教学实践发现，将可视化、交互式的教具应用于实验教学中，不仅有助于学生深入理解仪器分析方法的原理，还可以提升学习兴趣，培养学生学习主动性。

As a common instrument analysis method, atomic spectroscopy is widely used in chemical materials, environmental health, food safety, new energy and other fields. It is one of the instrumental analysis methods that students must master.However, with the rapid development of instrumental analysis technology, the sensitivity, precision, accuracy and other performance parameters of the instrument are improved. At the same time, the structure of the instrument is is more and more like a “black box”.It is rather difficult for students to have an intuitive and in-depth learning and understanding of the internal structure and working principles of the instruments. In order to solve this problem, we use the scrapped atomic absorption spectrometer to disassemble, design and assemble it into a visual and interactive experimental teaching aid (Fig.1).In the process of experimental teaching, the experimental teaching aid is used to explain the functions of the main components, so that students can intuitively understand the internal structure of the instrument, deepen their understanding of its working principle, and enhance the interest of the teaching process.Through years of teaching practice, it is found that the application of visual and interactive teaching aids in experimental teaching can not only help students to deeply understand the principle of instrumental analysis methods, but also enhance their interest in learning and cultivate their learning initiative.



图 1. 原子吸收光谱仪可视化、交互式教具

关键字 自主设计；实验教具；仪器分析实验

参考文献

1. 赵浩，郭鑫，吴忠云，杨玲，徐金荣，郑俊荣. 实验技术与管理, **2023**, *40*, 154-159.
2. 邓顺柳，苏海峰，朱亚先，王玉枝，翁玉华，陈招斌等.大学化学, **2024**, *39*, 127-132.
3. 赵浩，郭鑫，吴忠云，徐金荣，杨玲，郑俊荣. 实验室研究与探索, **2023**, *42*, 251-254.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

教学型流控分析仪的搭建及碳点纳米酶检测抗坏血酸

张国麒、蒋文彩、徐丽瑶、徐志宏、张燕、陈明军*
西华大学

传统“照方抓药”的实验教学思路陈旧、器械落后、学生参与度低，不能满足综合能力和创新思维培养的当代人才培养需求。流动化学技术符合化工行业产业升级、新质生产力培养的的需求，然而，高校开设此类型实验项目数量稀少，其主要原因在于适配的仪器设备较少，市面仪器价格昂贵。针对以上实验教学痛点问题，本研究用集成式注射泵、温控反应器、分光光度计等常用设备组装了教学型流控分析仪。为验证仪器的适用性，将纳米酶检测抗坏血酸的反应导入该仪器设计了设计了综合性分析化学创新实验。具体而言，首先，设计合成有类似过氧化物酶活性的碳点纳米酶。其次，研究还原性物质对碳点纳米酶催化过程的抑制作用，再将其导入自制的教学型流控分析仪。整个过程学生深度参与仪器组装、调试和新分析方法构建。本实验项目内容兼具高阶性、创新性和挑战度，有助于提高学生化学综合技能，树立科学探究精神，让学生对科学仪器和创新实验从“想动手”变成“敢动手”和“会动手”，提高解决实际问题的能力。另外，引入我国科学家发明及主导的纳米酶技术到实验教学中，能较好的融入课程思政的元素，以培养学生的民族自豪感和历史使命感。

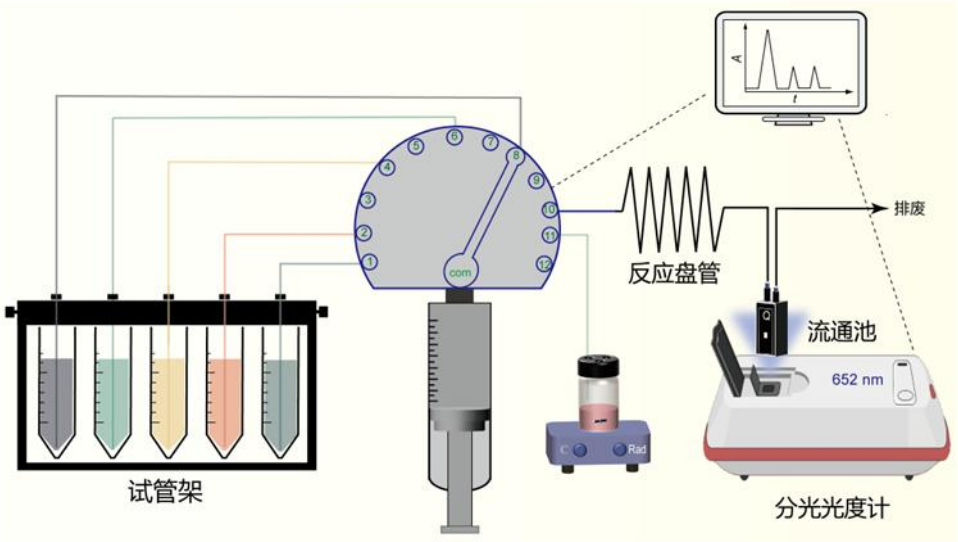


图 1

关键字 创新实验设计；流动化学；纳米酶；流控分析仪

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

膜分离实验教学仪器研制与应用

冯红艳、高明丽*、蒋晨啸、吴亮、汪耀明
中国科学技术大学

作为理科院校的化工实验，教学理念上，理科化学专业化工实验除了工程意识的培养，更要让学生体会到工程中蕴含的前沿技术，和前沿技术中亟待解决的基础研究。结合我院化工发展方向，多年来积极将功能膜研究室的科研成果转化为实验教学内容，同时打破了理科化工教学设备跟着工科院校走的瓶颈。针对目前还不成熟的膜分离教学设备市场，结合自身的需求，和其它单位合作开发（新型实验教学设备）。已经完成系列膜分离教学仪器并用于本科教学。

关键字 化学工程基础实验；微滤；超滤；扩散渗析；电渗析；双极膜电渗析

参考文献

1. 高明丽，冯红艳，蒋晨啸，纪文根，徐婷婷，王钰熙. 大学化学, **2018**, *33*, 82-87.
2. 冯红艳，徐铜文，杨伟华，高明丽. 化工高等教育，**2017**, *34*, 59-62.
3. 冯红艳，徐铜文，高明丽. 大学化学，**2016**, *31*, 56-60.
4. 冯红艳，徐铜文，王晓林，杨伟华. 大学化学，**2015**, *30*, 59-63.
5. 冯红艳，杨伟华，徐铜文. 化工高等教育, **2014**, *1*, 67-70.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：报告

氢氧化亚铁制备实验的改进

王鹏*、曹优卓
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验

在传统的教学方法下，制备 $Fe(OH)_2$ 的实验中，观察到白色絮状沉淀并不常见，使得 $Fe(OH)_2$ 的制备一直成为高中化学教学内容的教学难点。因此需要对传统的 $Fe(OH)_2$ 的制备实验进行改进和创新，以提供更加稳定、高效、环保的实验方案。我们采用 3V 形玻璃管结合针筒注射器组装反应实验装置，并选用亚铁离子不易被氧化的硫酸亚铁铵与氢氧化钠溶液在 CO_2 气体氛围中反应制备氢氧化亚铁，实现装置一体化和试剂微量化，确保在反应过程中基本无氧气的参与，提高氢氧化亚铁制备及其性质实验的效果。

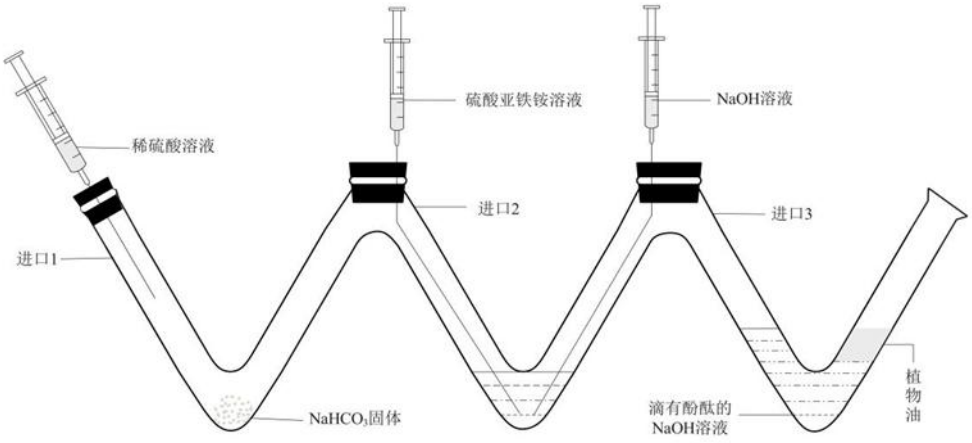


图 1. 制备氢氧化亚铁的装置（夹具略）示意图

关键字 教学; 实验; 改进

参考文献

1. 陈彩凤, 陈迪妹, 胡加烽等. 氢氧化亚铁制备实验的改进与创新[J]. 化学教学, **2016**, *09*, 46-48.
2. 刘彩虹, 张文兰, 刘丽君. 氢氧化亚铁制备实验的设计[J]. 化学教学, **2014**, *09*, 52-53.
3. 李周平. 氢氧化亚铁制备及氧化实验的改进[J]. 化学教学, **2023**, *02*, 68-71.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：墙报

基于流动注射的模块式分光光度计的搭建与教学应用

张尚青*、可迪、杨婷、陈旭伟
东北大学

仪器制造的创新是科技强国的关键，也是推动国家科技发展与产业升级的引擎。高校作为创新型人才培养的重要基地，在仪器制造方面的基础教育改革仍需大力推进。物质对可见光的吸收是一种经典的光学现象，吸光度 A 常被当作仪器分析实验定量的指示信号。而传统的基于分光光度计的仪器分析实验的教学重点在于光学吸收发生的原理及吸光光度法的应用，对于分光光度计的构造和原理则一带而过。且因教学仪器均为成熟的集成化商品，在规定的教学时间内教师无法快速清晰地让学生了解仪器的内部构造，导致学生难以掌握仪器原理、结构及关键部件作用 1-2。

东北大学化学系在流动注射分析方面研究历史悠久，结下累累硕果。中心基于科教融合的教育理念利用科研平台和创新团队资源优势开发了专门化实验项目《流动分析系统中的分散效应》，成功搭建了基于流动注射的模块式分光光度计，通过检测亚甲基蓝（MB）在 560 nm 处的吸光度信号分析影响分散度的因素。正如图 1 所示，学生可以了解分光光度计的基本部件：光源（卤钨灯）、样品池（Z 型流通式检测池）和检测器（光纤光谱仪）；学习分光光度计的运行原理。不仅如此，学生还能初步了解流动分析技术的原理、相关概念和基本操作，掌握流动技术中分散度的概念及测试方法，了解影响分散程度的相关因素。该实验项目的开展成功将院系自身的科研优势转变为教学优势，实现科研成果反哺教学，提高了本科实验教学质量，满足高校创新人才培养的目标。

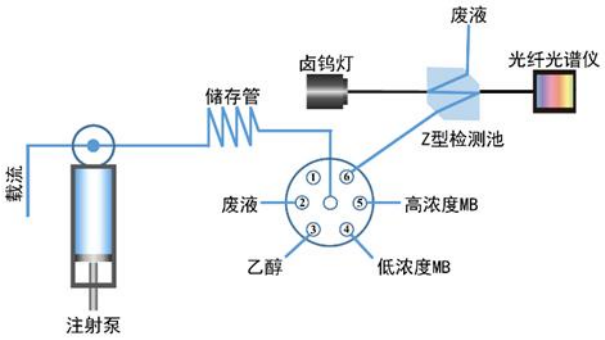


图 1. 基于流动注射的模块式分光光度计的示意图

关键字 模块式；分光光度计；流动注射；搭建与应用

参考文献

1. Diawati C., Liliasari, Setiabudi A, Buchari. J. Chem. Educ., **2018**, *95*, 468-475.
2. 苏海峰，邓顺柳，李云凯，吴迪，林志敏，黄晓圳，梁曼玉，卢文和，邱源，郑兰荪. 大学化学, **2023**, *38*, 225-234.

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：墙报

基于“三全育人”高校仪器分析实验室创新管理实践探究

杨凯平、张万群、胡万群、李维维、周强、刘斯、邵伟*
中国科学技术大学

高校实验室是组织实验教学、培养学生实践能力、开展科学研究、激发学生创新精神和创新活力的重要基地。中国科学技术大学化学实验教学中心仪器分析实验室拥有核磁、XRD、热分析、光谱、色谱等大型仪器，承担实验教学及科研测试双重重任。仪器实验室将“三全育人”的教育理念作为指引，从科学管理模式的建全、打造良好的实验环境、加强安全管理、建设教学信息化平台和提高教师育人素养等五个方面着手，就如何创新仪器分析实验室管理模式进行实践探究。始终把高校立德树人的理念融入实验室建设及实验教学过程中，让学生在实验、实践、学习、交流于一体的环境中得到安全意识、环保意识、审美意识、责任意识与科学精神的全方位培养，打造集实践教学、实验安全、在线课程、管理育人工作于一体的全员全过程全方位育人平台。

关键字 “三全育人”; 仪器分析实验; 创新管理

分会场：21.教学型实验仪器及应用
交流形式：墙报

基于高分子材料 3D 打印实验的拔尖人才培养探索

计志娜*、王宏光、杨婷、王铁强
东北大学

为了培养高素质的拔尖创新型人才，深化学生对高分子化学的理解，并激发学生学习兴趣与科研探索能力，设计了高分子材料 3D 打印的创新型实验。本实验的核心目标在于使学生掌握使用 3D 打印技术进行部件打印，深入理解光固化反应的基本原理，进而深化他们对聚合物结构与性能之间关系的认知。同时，通过实践操作，学生将亲身体验高分子材料在前沿科技--特别是 3D 打印技术中的创新应用。

本实验专为拔尖班开设，课程设置个性化，将课下预习与课上实操相结合。通过差异化的实验结果，有效激发学生学习动力。在课前预习阶段，学生运用 3D MAX 等三维绘图软件建立打印模型；在课堂中，他们将这些 3D 模型转化为立体光刻文件，并在对应的 3D 打印机中加载所需耗材，自主设计并完成图形打印。随后，他们还将进行后续处理，包括固化、去支撑及上色等步骤。

通过本实验，学生不仅能够获得宝贵的实践经验和技能，还能拓宽学术视野，理解高分子科学如何与现代制造技术相结合，推动科技进步与产业发展。

关键字 拔尖人才培养; 3D 打印; 高分子化学

参考文献

1.刘兴好, 沈永雯, 王宝燕等. 光敏树脂合成 3D 打印的综合实验教学设计与实践[J]. 化学教育, **2023**, *44*, 49-55.
2.卢秉恒, 李涤尘. 增材制造(3D 打印)技术发展[J].机械制造与自动化, **2013**, *42*, 4.
3.陈硕平, 易和平, 罗志虹等. 高分子 3D 打印材料和打印工艺[J].材料导报, **2016**, *30*, 6.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

便携式液相色谱仪：从基础研究到仪器构建

王秋泉*
厦门大学

环境分析需要便携式小型仪器进行现场检测。我将简要地谈一谈我们实验室在构建便携式液相色谱仪过程中的基础研究工作，重点谈一谈便携式液相色谱仪的整体结构和相关部件的设计制作，特别是毛细管整体柱材料的设计制备，以及便携式液相色谱仪与原子光谱检测联用并应用于元素形态分析的研究工作。

关键字 环境分析；便携式液相色谱仪

参考文献

1.王秋泉，付强，徐振东，便携式液相色谱仪，发明专利，200610055109.0
2.付强，王秋泉，罗世鹏，紫外－可见吸收/荧光两用流通池，发明专利，200610009153.8
3.付强，王秋泉，徐振东，用于便携式液相色谱仪检测系统的光纤组件，实用新型专，200620006301.6
4.徐振东， 王秋泉， 付强， 十八烷基型整体式液相色谱微柱的制备方法，发明专利，200610054640.6
5. 徐振东，付强，王秋泉，可调式色谱微柱—流通池安装架，实用新型专利，200620005095.7
6. Z. D. Xu, L. M. Yang, Q. Q. Wang, Different alkyl dimethacrylate mediated stearyl methacrylate monoliths for improving separation efficiency of typical alkylbenzenes and proteins, *J. Chromatogr. A*, **2009**, 1216, 3098-3106.
7. L. C. Zhao, L. M. Yang, Q. Q. Wang, Silica-based polypeptide-monolithic stationary phase for hydrophilic chromatography and chiral separation, *J. Chromatogr. A*, **2016**, 1446, 125-133.
8. J. Su, L. M. Yang, Q. Q. Wang, Dual polyhedral oligomeric silsesquioxanes polymerization approach to mutually-mediated separation mechanisms of hybrid monolithic stationary and mobile phases towards small molecules, *J. Chromatogr. A*, **2018**, 1533, 136-142.
9. M. Ding, L. M. Yang, J. H. Zeng, X. W. Yan, Q. Q. Wang, Orderly MOF-Assembled Hybrid Monolithic
Stationary Phases for Nano-Flow HPLC, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 15757-15765.
10. 付 强，杨利民，王秋泉，便携式微型液相色谱仪的研制，色谱，**2021**，39,1030-1039.

分会场：22.环境分析与仪器

2205

地下水卤代新污染物电化学原位传感技术与设备研发

王颖*

同济大学

针对地下水中全氟辛酸检测过程中存在靶向识别难、灵敏度低、原位分析存在瓶颈的关键难题，利用β-环糊精包埋亚甲基蓝活性探针研发了基于主客体识别的全氟辛酸分子印迹敏感膜，协同两性离子抗干扰功能分子多肽，通过自组装技术构建具有亲水性的抗干扰界面，构建了β-环糊精包埋亚甲基蓝活性探针主客体抗干扰分子印迹聚合物电化学传感器，其中由βCD 和两亲性多肽的亲水性协同诱导了稳定水合层的产生，在抑制污染物黏附的同时保持了 MB 的电子转移，具有显著的电流响应和优异的防污性能；所制备的传感器在 4.14~41.4 mg/mL 浓度范围内对 PFOA 具有良好的检测性能，回归方程为 y=0.3434ln(x)+2.0876，相关系数（R2）为 0.9905，最低检测限 1.57 pg/mL（低于美国环境保护署（EPA）规定《国家主要饮用水法规》中 PFOA 的浓度（4 ng/L））；该传感器对 PFOA 识别具有亲和力强的特点，其解离平衡常数 KD 为 86.72×10-9 M；该传感器对 PFOA 具有较高的选择性，其印迹因子是 6.5，高于目前文献报道的 4.95，是其他全氟类似物的 5~7 倍（PFNA、PFHPA、PFDA 的 IF 分别为 1.2、1.1、0.9），且对以水环境中常见的干扰离子（K+、Na+、Mg2+、Cl-）和干扰物（HA 和 FA 的混合物）无明显响应，这是由于βCD-MB MIPs 传感器在功能和空间结构上对 PFOA 识别的协同效应；该传感器具有良好的重复性和长期稳定性，6 次重复制备的电流响应值 RSD＜3%，21 天的室温储存期间表现出良好的储存稳定性（RSD=1.03%）。本研究制备了一种具有氧化还原活性的抗干扰分子印迹电化学传感器，为实现 PFAS 的快速现场检测提供一种方案，且为开发集成式 PFAS 传感器实现地下水等真实水环境中 PFAS 的连续监测奠定了基础。

关键字 地下水 卤代 新污染物 原位 检测

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

微纳传感及新污染物现场检测

黄羽*、夏帆
中国地质大学（武汉）

近年来，我国饮用水水源地常被检出含有微囊藻毒素等多种新污染物，严重危害公众健康。申请人针对饮用水水源地新污染物现场检测不精准的缺陷，提出考虑“微/纳界面”对新污染物-探针相互作用的影响，发展“界面匹配”的微/纳传感体系，实现饮用水水源地微囊藻毒素-LR等多种新污染物的快速、精准现场检测。以第一或通讯作者发表SCI论文34篇（17篇影响因子>10），包括*J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., Natl. Sci. Rev., Environ. Sci. Nano, ACS Nano, Anal. Chem.*等，总引2500余次，入选湖北省高层次人才引进计划。未来拟围绕天然水体微塑料污染，通过构筑纳米孔道检测芯片、建立信号采集系统、集合硬件和软件系统，探索微/纳传感新方法，开发单个纳米颗粒检测仪器，实现天然水体中纳米塑料颗粒尺寸、电荷和浓度的精准测量。

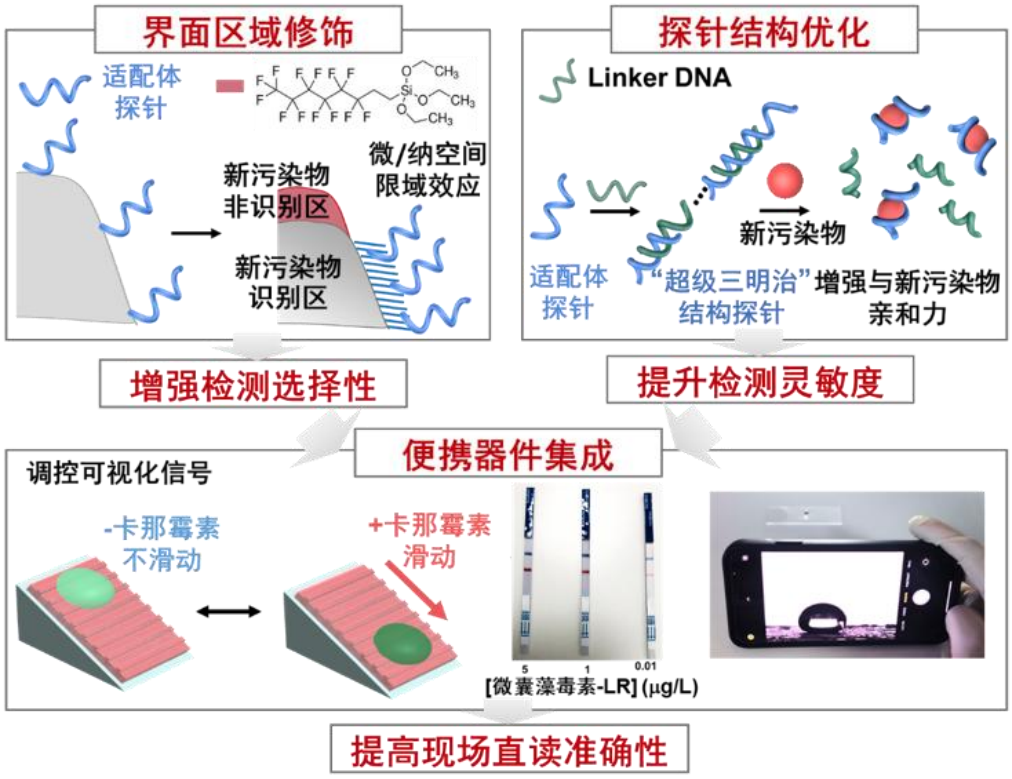


图 1. 主要研究内容。

关键字 电化学分析；化学传感；纳米材料；现场检测；新污染物

参考文献

1. W.-Q. Zhang, Y.-D. Tu, H. Liu, R. Liu, X.-J. Zhang, L. Jiang, Y. Huang*, F. Xia*. A Single Set

of Well-Designed Aptamer Probes for Reliable On-site Qualitative and Ultra-Sensitive Quantitative Detection, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, *63*, e202316434.

2. Yu Huang,[#] Linxiao Liu,[#] Cihui Luo, Wei Liu, Xiaoding Lou, Lei Jiang, Fan Xia,* Solid-State Nanochannels for Bio-markers Analysis, *Chem. Soc. Rev.*, 2023, *52*, 6270-6293
3. X. Yang[#], J.-H. Wang[#], Z.-F. Gao[#], W.-Q. Zhang, H. Zhu, Y.-J. Song, Q. Wang, M.-J. Liu, L. Jiang, Y. Huang*, F. Xia*. An Orthogonal Dual-Regulation Strategy for Sensitive Biosensing Applications, *Natl. Sci. Rev.*, 2022, *9*, nwac048.
4. Q. Ma[#], W.-J. Chu[#], X.-L. Nong, J. Zhao, H. Liu, Q.-J. Du, J.-L Sun, J.-L. Shen, S.-M. Lu, M.-H. Lin*, Y. Huang*, F. Xia. Local Electric Potential-Driven Nanofluidic Ion Transport for Ultrasensitive Biochemical Sensing, *ACS Nano*, 2024, *18*, 6570-6578.
5. L. Dai, Z.-H. Liu, H. Zhu, Y.-Y. Wang, Y. Shen, L.-C. Wang, Y. Huang*, F. Xia, Nano-Structural Superwetting Surfaces for Highly Reliable On-Site Detection of Bisphenol A, *Anal. Chem.*, 2023, *95*, 16263-16271.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

顺次电离质谱技术在环境分析中的应用

徐加泉*[1]、宋丽丽[1]、李慧[1]、陈焕文[2]
1. 东华理工大学
2. 江西中医药大学

获取环境样品中的化学指纹信息对于评估环境污染危害、研究污染形成机理、溯查污染源均具有重要意义。但是传统分析方法通常需要复杂样品预处理，这不仅会导致分析耗时长，而且有可能导致一些关键信息丢失。

为此，本课题组提出了一种顺次电离质谱分析策略：通过顺次调控能量及试剂与样品作用的强度和选择性，在线顺次提取和电离样品中有机化合物、金属化合物及金属单质等多种不同理化性质组分用于质谱检测；与此同时，通过对组分提取过程中样品形貌进行记录和分析，获得提取组分在样品中的空间分布信息；结合质谱分析结果及样品形貌分析结果，即可获得样品中组分的分子结构、含量、空间分布及化学关联等多维信息。在此基础上，我们将理论物化为仪器，研制了一款“顺次电离”装置，该装置包含试剂调控、能量调控、微量样品池、高效电离、显微成像分析以及时序控制等六个系统，可与商品化质谱仪联用，获取样品中不同理化性质组分信息。基于顺次电离质谱技术和装置，开展了大气、水样、土壤等典型环境样品中的有机组分和无机组分的顺次电离质谱分析[1-4]。实验结果显示，仅需单次进样分析，便可获得样品中水溶性组分、脂溶性组分、难溶性金属组分等数十种化合物的结构、含量、空间分布及化学关联等信息，为评估评估环境污染情况、研究污染物的形成机理、溯查污染源等提供了一种重要的研究手段。

关键字 顺次电离，质谱分析，化学关联，PM2.5

参考文献

1. J. Q. Xu, Z. D. Yu, N. Liu, T. Li, K. Chingin, S. L. Wang, H. Li, L. L. Song, Anal. Chem., **2023**, 95, 4728-4734.
2. X. L. Zhang, Y. Xu, T. Li, H. Li, Z. D. Yu, L. L. Song, J. Q. Xu, J. Anal. Atom. Spectrom., **2023**, 38, 716-720.
3. L. L. Song, H. Li, T. Li, J. Q. Xu, H. W Chen, Chem. Res. Chinese Univ., **2022**, 38, 774-781.
4. J. Q.Xu, F. L. Li, T. G. Zhu, D. B. Wu, K. Chingin, H. W. Chen, Sci. China Chem., **2021**, 64, 642-649.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

荧光材料光学性能调控策略研究及其环境分析应用

张金懿、林瑶、叶斯敏、陈雪杉、张展阔、郑成斌*
四川大学

及时检测可迅速发现问题、预防风险、提高效率，是近年来国际纯粹和应用化学联合会（IUPAC）认为最具发展前景的应用之一，对保障公共健康、维护社会稳定和推动科技创新具有重要意义。其中，比色和荧光法由于其高灵敏度、快速反应能力、简单快捷和广泛适用性，在及时检测中展现出巨大潜力。然而，目前的比色和荧光及时检测策略依旧可能面临特异性挑战、灵敏度限制、复杂样品基质影响和成本要求。本文以荧光材料的光学性能调控机制为基础，构建高选择性、高灵敏度和便携分析策略并用于环境分析。主要包括两方面研究内容：1、金属离子调控碳点和金属有机框架材料光学活性，构建高效光激活模拟酶催化显色和高灵敏荧光传感体系[1-5]；2、化学蒸气发生耦合顶空固相萃取，构建高灵敏和免干扰的固相荧光内滤分析策略[6-9]。两种策略很大程度上突破了传统分析方法的固有局限，在抗干扰能力、灵敏度和经济性方面有显著的提升，结合 3D 打印构建便携式检测设备和开发手机智能程序可实现环境污染物的现场快速检测。该策略为水质监测提供了新的技术手段，具有广泛的社会和经济价值。

关键字 荧光材料、性能调控、环境分析、及时检测

参考文献

1. J. Y. Zhang, et al. ACS Nano, **2019**, 13, 14152-14161.
2. J. Y. Zhang, et al. Nano Letters, **2019**, 19, 3214-3220.
3. J. Liao, et al. J. Hazard. Mater., **2022**, 440, 129812.
4. X. S. Chen, et al. J. Mater. Chem. B, **2023**, 11, 6697-6703.
5. R. X. Lu, et al. Anal. Chem., **2024**, 96, 11525-11532.
6. S. M. Ye, et al. Environ. Sci. Technol. Lett., **2023**, 10, 604-610.
7. S. M. Ye, et al. Anal. Chem., **2023**, 95, 13949-13956.
8. Y. Lin, et al. J. Hazard. Mater., **2023**, 459, 132201.
9. W. H. Yang, et al. J. Hazard. Mater., **2024**, 470, 134038.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

同位素标记衍生化技术在代谢/暴露液-质分析应用

赵先恩[1,2]*，范珈彤[1,2]，朱树芸[1]，李思[2]，黄姹[2]，刘倩[2]*，江桂斌[2]
1.曲阜师范大学
2.中国科学院生态环境研究中心

代谢组和暴露组的质谱分析在环境＆健康研究中具有重要科学价值。但是，由于人体样本中的代谢物和外源化合物的化学结构、理化性质的多样性和样品基质复杂性，代谢组和暴露组的全面分析面临巨大挑战。质谱，特别是高分辨质谱，具有强大的定性和定量能力，但其单独使用时无法为所有分析物提供足够的灵敏度等关键分析性能。化学同位素标记（CIL）技术结合质谱不仅可以弥补灵敏度方面的不足，还可带来选择性（特异性）、准确度、组学覆盖率、分析通量、内标替代等方面的强大助力。因此，基于质谱的 CIL 技术被越来越多的应用于代谢组学和暴露组学的研究中，极大地推动了相关研究进展。我们总结了该领域近十年来的研究工作，并讨论了其潜在优缺点及其与同行工作的比较。更重要的是，围绕着含有胺、羧酸、羰基、羟基和巯基化学官能团的五类代表性代谢物与外源性物质，过去十年内基于质谱的 CIL 技术在代谢组和暴露组的靶向和非靶向分析中取得了较大的进展(Fig. 1)。而且，有趣的是，中子编码策略和特征同位素模式策略等新出现的 CIL-MS 技术开始被应用于 CIL 试剂的结构设计中，这对 CIL 技术的分析性能的提升有着极大的帮助[1]。CIL 技术结合 MS 在代谢组和暴露组相关的领域具有广阔发展前景[2, 3]。

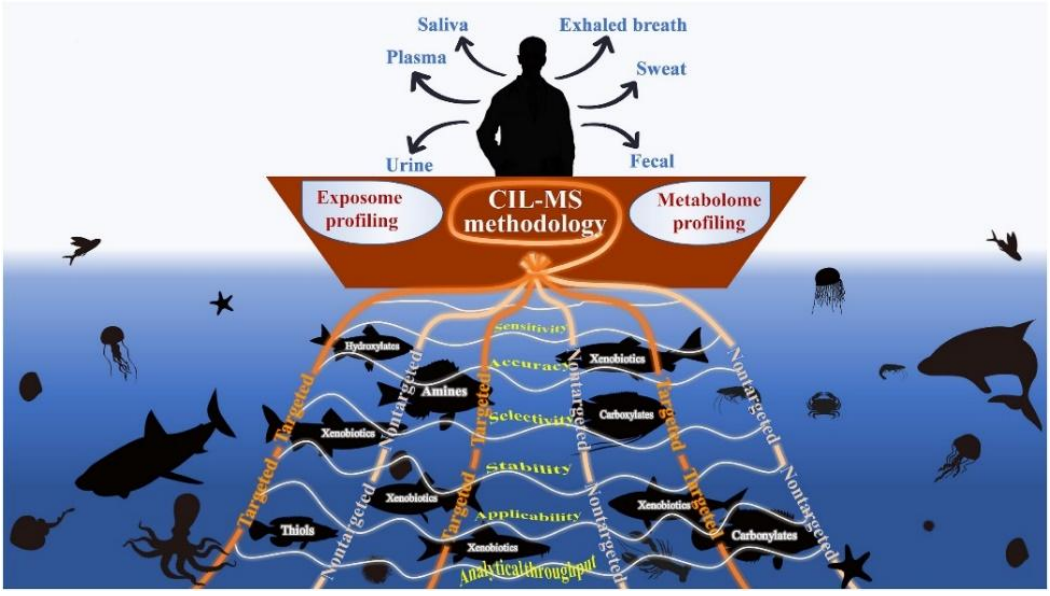


图. 1 The combined strategy of CIL technique with MS for targeted and non-targeted analysis of metabolites and xenobiotics, and its methodological considerations.

致谢：国家重点研发计划（2023YFC3708302），国家自然科学基金（No.22176109, 22076097）。

关键字 化学同位素标记；衍生化；代谢组；暴露组；质谱

参考文献

1. M. Yue, X. Zhou, J. Fan, S. Gao, X.-E. Zhao, S. Zhu, Q. Liu, G.B. Jiang, TrAC Trend. Anal. Chem., **2024**, 171, 117523.
2. S. Gao, X. Zhou, M. Yue, S. Zhu, Q. Liu, X.-E. Zhao, TrAC Trend. Anal. Chem., **2023**, 162, 117022.
3. X. Zhou, S. Gao, M. Yue, S. Zhu, Q. Liu, X.-E. Zhao, TrAC Trend. Anal. Chem., **2023**, 160, 116978.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

界面反应机制的光谱学探究

王县伟*
中国科学院生态环境研究中心

环境污染通常会涉及不同界面之间的相互作用，例如气-固、液-固或液-液界面上的化学反应和传质过程。界面反应可以影响温室气体和污染物的转化、传输和去除，对生态系统和人类健康具有深远影响。

调制激发光谱（MES）作为一种动态红外光谱技术，相较于传统红外光谱，具有更高的信噪比和时间分辨率。结合相敏检测技术（PSD），能够将时域光谱转化为相域光谱，有效去除界面反应过程中惰性组分的干扰，仅保留活性组分的信息。通过 MES，我们可以监测表面物种的细微变化，精准识别反应活性物种随时间的演变过程，更深入地理解化学反应机理。

在对于多相催化反应机理的研究中，传统方法往往集中于催化材料的结构及活性位点，即构效关系，得到的反应机理比较单一，而时间尺度对催化机制的影响却常常被忽视。基于此，本研究开发了快速 MES 技术，主要探讨在微秒级和亚秒级时间尺度下的催化反应机理。研究发现，Au/TiO2 催化剂表面出现瞬态失活效应，该效应由反应物（CO 和 O2）引发的 Au/TiO2 结构变化所导致。UV-Vis 分析表明，反应物导致 Au/TiO2 表面结构发生可逆变化，进而阻碍了 Au 对氧的吸附，从而降低了催化剂的活性。通过控制反应时间，进一步研究了不同时间尺度对催化反应机理的影响。在短反应周期内，吸附在 Au 上的 CO 是唯一的活性物种；随着反应时间的延长，催化剂的电子-金属-载体相互作用（EMSI）逐渐参与反应，形成双活性位点。这些发现表明，研究毫秒及亚秒级短时间内表面物种的反应动力学信息，对机理研究具有重要意义。

关键字 MES，界面反应，红外光谱

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

便携式气压计在现场环境分析中的应用

邹志荣*、肖静、唐嘉源、卓大力
四川师范大学

气压计是一种新型的小型化/便携式分析新装置，具有便携性、信号放大、容易使用、成本低等优点，基于气压计的分析方法/分析体系是一种十分理想的现场快速分析检测方法。基于气压计的分析原理为：在密闭的反应瓶内，目标分析物与化学试剂发生反应，产生一定量的气体，气体反应可以使反应瓶内的气压值发生显著变化，该气压数值的变化可以通过一个便携式的气体压力计进行数据读取，从而实现对目标物的现场快速分析。

本工作发展了一个基于气压计的小型化/便携式分析体系，通过化学蒸气发生技术将目标分析物转化为气体，通过便携式气压计实现对环境样品中亚硝酸盐（NO2-）、Ca2+和化学需氧量（chemical oxygen demand, COD）的现场快速分析检测。如图 1 所示，通过高锰酸钾氧化法或紫外光照法将水体中的有机污染物氧化降解为气体，通过便携式气压计对密闭反应瓶内的气压值进行检测，从而间接测定水体中化学需氧量（COD）的含量。同时，在酸性条件下，NO2-和甜蜜素发生特异性反应，产生氮气和环己烯气体，通过对密闭反应瓶内气压值的测定，从而实现对环境水样品中 NO2-的分析检测。

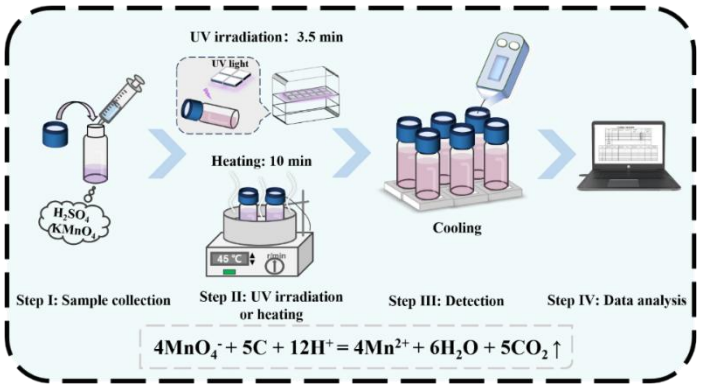


图 1. 便携式气压计测定化学需氧量的示意图

关键字 便携式气压计；现场分析；环境分析；化学需氧量

参考文献

1. Jing Xiao, Jiayuan Tang, Jihong Chen, Lanlan Li, Shu Zhang, Xiaoli Xiong, Zhirong Zou*. Rapid and selective detection of nitrite in ham sausage and water samples by a portable gas pressure meter. *Sensors & Actuators: B. Chemical,* 2024, 400, 134914.
2. Jiayuan Tang, Dali Zhuo, Xiaoyu Dong, Jing Xiao, Shu Zhang, Xiaoli Xiong, Chao Tan *, Zhirong Zou*. Bottle-in-bottle reaction device: Portable gas pressure meter for rapid and on-site analysis of oxalate in spinach and tea beverages. *Food Chemistry: X*, 2024, 23, 101638.
3. Jing Xiao, Dali Zhuo, Jiayuan Tang, Jihong Chen, Chao Tan, Shu Zhang, Shichao Li*, Zhirong Zou*. Selective and sensitive detection of cyclamate in beverages using a portable pressure meter: A specific reaction-based analytical kit. *Microchemical Journal,* 2024, 204, 110959.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

碳中和背景下的锂污染研究

杨学志[1]、刘倩*[2]、江桂斌[1,2]
1. 国科大杭州高等研究院
2. 中国科学院生态环境研究中心

在碳中和的背景下，新能源的迅速发展显著提高了全球对锂资源的需求。根据国际能源署（IEA）的预测，全球对锂资源的需求量将从 2020 年的 73.4 千吨/年增长至 2040 年的 1160.7 千吨/年。这一需求水平远超地壳中自然过程生成的锂循环通量（226 千吨/年），显示人类活动对全球锂循环的影响日益加剧。然而，目前尚不明确冶炼工业区中锂及其伴生毒性元素的污染水平，以及这些污染对生态环境和人体健康的影响。

2023 年我们以“Emerging Research Needs for Characterizing the Risks of Global Lithium Pollution under Carbon Neutrality Strategies” 为题在 Environ. Sci. Technol.发表文章呼吁重视和加强碳中和战略背景下的锂污染研究，并提出了未来研究需求[1]。随后，针对多环境介质（河水、污水、大气颗粒物、沙尘暴颗粒、土壤、植物、动物、锂离子电池正极材料），我们开发了锂的高精度定量分析方法，并初步探究了我国多种环境介质中的锂污染水平[2]。

进一步，我们研究了中国最大的锂碳酸盐生产区——晋江流域的锂污染特征、来源、暴露水平及相关健康风险[3]。研究结果表明，锂提取活动是该地区水体污染的主要来源，超过 95%的溶解锂源自此。此外，水生植物（如水葫芦）和动物（如鱼类）的锂浓度从上游向下游显著上升，指示出对当地水生态系统的严重威胁。更为关键的是，研究发现当地居民在饮用受到污染的水和食用蔬菜时，面临潜在的慢性非致癌健康风险。同时，还调查了锂矿石中相关元素（如铷、铯、镍和氟）的污染特征。通过首次揭示锂提取活动对生态系统中锂含量的显著影响，本文强调了评估锂相关工业活动（包括采矿、提取和回收）导致的锂污染的重要性。

关键字 碳中和，锂污染，溯源，工业排放，暴露风险

参考文献

1. Xuezhi Yang, Haonan Wen, Yue Lin, Haiyan Zhang, Yin Liu, Jianjie Fu, Qian Liu*, and Guibin Jiang. Emerging Research Needs for Characterizing the Risks of Global Lithium Pollution under Carbon Neutrality Strategies, Environmental Science & Technology **2023**, 57 (13), 5103-5106.
2. 杨学志,齐甜雨,文昊楠,刘倩*,江桂斌*等.高精度锂分析方法及我国多种环境介质中锂污染初探[J].科学通报, **2023**, 68(15):1959-1970.
3. Xuezhi Yang, Haonan Wen, Yin Liu, Ying Huang, Qun Zhang, Weichao Wang, Haiyan Zhang, Jianjie Fu, Gang Li, Qian Liu*, and Guibin Jiang*. Lithium Pollution and Its Associated Health Risks in the Largest Lithium Extraction Industrial Area in China, Environmental Science & Technology **2024**, 58 (26), 11637-11648.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

面向环境现场分析的机器人质谱技术与方法

胡斌*
暨南大学

环境中有毒、有害、易燃、易爆的危化品污染物对生态环境和生命健康具有毁灭性的作用特征。因此，环境中危化品污染物的现场、快速、精准的测定在污染物的作用特征、影响评估、处置措施等过程具有重要的科学意义和应用价值。质谱分析技术是众多环境分析方法中具有灵敏度高、鉴定精准、信息丰富的技术，然而，传统环境质谱分析策略主要依赖于人员的现场采样与实验室的质谱分析，极大地限制了危化环境的现场采样，也极大了限制了环境污染物现场分析的时效性。

在前期研究中，针对现场环境分析的需求，我们团队发展了原位采样与现场质谱分析技术，实现了复杂环境的快速质谱分析 1-5。在本工作中，我们进一步地整合了多种机器人技术和微型质谱技术的优势和特色，建立了新型的、远程的、智能的机器人质谱分析系统与方法学，适用于陆地、大气、和水体环境的现场分析。

关键字 机器人质谱，现场分析，环境分析，质谱分析

参考文献

1. Liu, XM.; Huang, Q.; Deng, J.; Liu, X.; Hu, B. Anal.Chem. **2024**, 96, 9325-9331.
2. Zhang, J.; Huang, W.; Wu, R.; Yan, Z.; Tan, G.; Zhu, C.; Gao, W.; Hu, B. Environ. Sci. Technol. **2023**, 57, 20864-20870.
3. Chen, W.; Zou, Y.; Mo, W.; Di, D.; Wang, B.; Wu, M.; Huang, Z.; Hu, B. Environ. Sci. Technol. **2022**, 56, 17100-17107.
4. Liu, X.; Yi, M.; Mo, W.; Huang, Q.; Huang, Z.; Hu, B. Anal. Chem. **2023**, 95, 10769-10776.
5. Hu, B. TrAC Trends Anal. Chem. **2022**, 151, 116600.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

基于高分辨质谱的高通量疑似靶向分析揭示疫情感染高峰期药物及其转化产物的环境健康风险

高伟*
青岛大学

目的：环境中药物活性物质(APIs)的存在及其相关风险已成为人们关心的重要环境健康问题。中国 2022 年 12 月对新冠管控措施的放开使得 90%以上人群在一个月内感染，在此期间，相关药物使用量剧增，部分 APIs 经污水处理厂(WWTP)处理后不能有效去除，污水排放是 APIs 进入水生环境的主要途径，对生态环境及人类健康造成潜在风险。COVID-19 等公共卫生事件爆发期，相关 APIs 的环境释放量大增，需要有力的手段来评估病毒感染之外的环境健康影响。

方法：在感染高峰期和高峰后时期对生活污水处理厂的进水和出水进行连续采样，利用液相色谱串联高分辨质谱对处理后水样进行化学分析。整合处方列表、文献报道数据和机器学习转化产物（TPs）预测的高通量疑似靶向分析流程，鉴定已知和未知的药物及其转化产物。针对入水样品反算推演人群药物消耗量，针对出水依据识别的药物的 PMT 特性及风险阈值评估其排放进入环境造成的环境健康影响。

结果：应用所建立的疑似靶向分析流程，共鉴定出 116 种药物和 TPs（在 WWTP 中首次检测到 13 种药物 TPs），对其中 30 种药物和 9 种 TPs 通过标准品定量，其他药物通过预测响应因子进行了半定量。进水和流出物中药物和 TPs 的浓度范围分别为未检出（ND）至 74.3 μg/L 和 ND 至 15.5 μg/L。通过反算推演计算药物消耗量表明，大多数主要药物是非甾体类抗炎药。根据浓度、检测频率和 PMT 特性进一步评估风险，结果显示氯苯那敏和厄贝沙坦构成的潜在生态风险最高 （ERQ （生态风险商数） ＞0.7），而阿奇霉素的风险优先级最高 （ToxPi 评分＞0.83）。

结论：揭示了疾病流行导致的药物排放环境健康风险以及 TPs 监测的必要性。

关键字 高分辨质谱；疑似靶标分析；药物转化产物；环境健康风险

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

基于碳氮纳米片的开启和关闭式荧光传感器的构建及其用于痕量检测全氟化合物

郭欣荣、张艳华、姚文*
广东医科大学

水体中全氟化合物（PFASs）的迁移、富集与转化严重危害生态和人类健康，快速筛查至关重要。现有 PFASs 检测技术存在前处理复杂、灵敏度低、选择性差等缺点，难以满足现场快速检测需求，亟待开发新方法。因此，本研究利用催化氧化法和酸聚合法分别制备了具有出色的化学惰性、优异的抗光漂白和低毒的黄色/红色荧光的碳氮纳米片（Y-CNNS）/（R-CNNS），并构建基于 Y-CNNS 和 R-CNNS 的新型开启式和关闭式荧光传感器（图 1），用于实际水体中全氟辛酸（PFOA）和全氟辛烷磺酸（PFOS）的痕量检测。Y-CNNS 检测 PFOS 线性范围为 0.05 ~ 9 nM，检出限为 0.0007 nM；检测 PFOA 线性范围为 0.01 ~ 9 nM，检出限为 0.0002 nM。R-CNNS 构建关闭式传感器检测 PFOS 线性范围为 0.5 ~ 25 nM，检出限为 0.005 nM；检测 PFOA 线性范围为 0.5 ~ 25 nM，检出限为 0.010 nM。此外，水体中常见金属离子共存时，Y-CNNS 或 R-CNNS 与 PFOS 或 PFOA 相互作用后，其荧光强度几乎没有变化，表明该方法将为水体中 PFASs 现场精准筛查提供新技术。

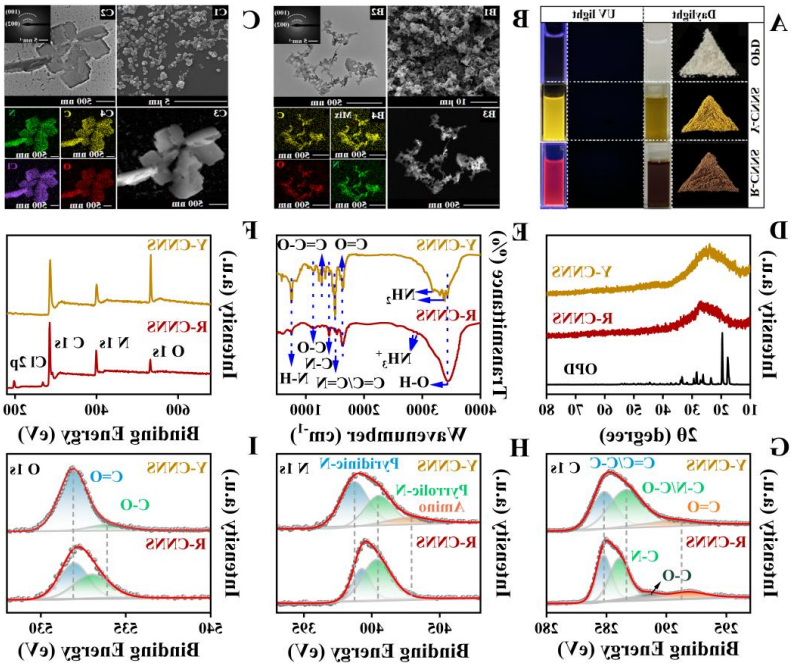


图 1. 碳氮纳米片荧光探针的制备及表征

关键字 全氟化合物;精准筛查

参考文献

1. Tang L, Ai L, Song Z, et al., *Adv. Funct. Materials*, **2023**, 33, 2303363.
2. Ma Y, Wu L, Ren X, Zhang Y, Lu S., *Adv. Funct. Materials*, **2023**, 33, 2305867.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

高通量多靶点毒性测试方法的建立及应用

杨晓溪*、周群芳、曲广波、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

新化学品的不断合成及使用不可避免地会形成新的污染，在此过程中产生的新污染物毒性未知、作用隐蔽、赋存不明，对人类健康造成潜在威胁，其毒性筛查与识别是我国新污染物治理与防控重大需求的关键内容。

本研究依托我国自主研制的成组毒理学分析系统[1]，建立了基于离体细胞的多种核受体活性内分泌干扰效应筛查方法，以及基于活体模式生物的心血管毒性测试方法，可实现离体细胞自动化铺板、暴露及测试，可完成基于活体模式生物的心血管发育毒性高内涵分析。利用建立的核受体高通量多靶点毒性测试方法，本研究针对新型污染物及复杂环境介质进行了毒性筛查与效应物质识别研究。例如，利用维甲酸受体高通量活性测试方法，筛查了多种具有拮抗或激动作用的新污染物[2]；基于效应导向分析策略，通过高通量雌激素或雄激素受体活性测试、靶向和非靶向化学分析，分别识别了电子垃圾拆解地底泥中的雌激素效应化合物、我国多个城市污水处理厂污泥中雄激素效应化合物等[3,4]。本研究建立的高通量多靶点毒性测试方法具有测试效率高、通量大、人力物力消耗小等优势，在新污染物筛查与评估方面具有重要的应用价值。

关键字 成组毒理学分析仪，高通量，多靶点

参考文献

1. 杨晓溪，李姿慷，郭云鹤，刘艳娜，王易，聂童，周群芳，史建波，曲广波，江桂斌*，*分析测试学报*，**2022**，41，1279-1285.
2. J.H., Su, X.X., Yang,* Q.F., Zhou, G.B., Jiang. *Sci. Total Environ.*, **2024**, 947:174717.
3. Q.C., Ma, X.X., Yang,* G.B., Qu, G.B., Jiang. *Environ. Pollut.*, **2022**, 306: 119369.
4. T.T., Xiang, C.Z., Shi,* X.X., Yang,* G.B., Qu, G.B., Jiang. *Water Res.*, **2024**, 256: 121652.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

共价有机框架增强 LDI-MSI 技术在新污染物毒性机制研究中的应用

马文德[1]、刘倩*[2]
1. 河南大学
2. 中国科学院生态环境研究中心

新污染物已给生态环境和人类健康造成巨大风险 1。研究错综复杂的新污染物毒性效应，对其风险评估、污染控制等具有重要研究意义。当前，针对新污染物的毒性研究主要利用传统分析化学和分子生物学分析技术，通常将研究对象看作“均一”整体，无法从空间上准确定位污染物及代谢产物，限制了从时间和空间上解析污染物的毒性机制。因此，开发能够提供更多信息的分析技术，从而深入探讨新污染物毒性机制所涉及的各种生物学过程，并从时间和空间上解析污染物新的毒性机制已成为当前的研究热点和难点。

质谱成像（MSI）是伴随质谱发展而产生的一种新型分子成像技术，可以实现复杂固体样品中分析物的空间定位 2。基质辅助激光解吸电离质谱成像（MALDI-MSI），因其具有分辨率高、无需预先标记、可进行原位分析等优点，成为基于质谱成像分析策略解析新型污染物新毒性机制的有效工具 3。然而，常规有机基质在 $m/z < 1000$ 的质量区域存在强烈的背景噪音，阻碍了 MALDI-MSI 在小分子成像中的应用 4。近年来研究发现，以固体纳米材料作为基质的表面辅助激光解吸电离质谱成像（SALDI-MSI）不仅克服了常规有机基质背景干扰严重的局限性，而且能够提高检测灵敏度和重现性。

针对 LDI-MSI 分析技术中现有基质在新型污染物毒性机制研究中存在的不足，课题组首先采用简单的室温合成法制备了超均一共价有机框架（COFs）颗粒。接着，基于均一 COFs 设计合成了多功能 COFs 基质膜用于 LDI-MSI 技术揭示新型污染物在生物体内的空间分布、代谢通路及毒性靶点，阐明新型污染物在生物体内的毒性机制。这项研究不仅对污染物的环境暴露风险评估、污染控制等具有重要研究价值，也能够促进 LDI-MSI 技术的发展。

关键字 新污染物，共价有机框架，质谱成像

参考文献

1. 江桂斌，宋茂勇等。环境暴露与健康效应，北京：*科学出版社*，**2020**.
2. A. Doerr. *Nat. Methods*, **2018**, 15, 32-32.
3. C. Zhao, T. Yong, Y. Zhang, Y. Jin, Y. Xiao, H. Wang, B. Zhao, Z. Cai, *Environment International*, **2020**, 135, 105378.
4. R.Shi, X. Dai, W. Li , F. Lu, Y. Liu, H. Qu, H. Li, Q. Chen, H. Tian, E. Wu, Y. Wang, R. Zhou, S. T. Lee, Y. Lifshitz, Z. Kang, J. Liu, *ACS Nano*, **2017**, 11, 9500-9513.

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

氧化石墨烯-多壁碳纳米管水凝胶固相微萃取阵列结合在线解吸微等离子体诱导蒸气发生原子荧光法测定镉

苏宇彬[1,2]、林瑶[2]、郑成斌*[2]
1. 西南交通大学
2. 四川大学

微等离子体诱导蒸气发生（μPIVG）由于无需使用有毒或不稳定试剂、蒸气发生速度快等优点已成为一种很有应用前景的新型绿色蒸气发生方法。然而，溶液中的某些共存离子通常会对μPIVG 过程产生干扰：例如溶液中 NO_3^-的浓度为 Cd^{2+}浓度的 2000 倍时，回收率下降至 41%~85%；K^+、Na^+等阳离子则会影响分析物从溶液到微等离子体相的传输效率。此外，重金属污染物的毒性具有累积性和持久性，即使在较低的浓度下暴露也具有极高的风险，因此需对环境中痕量水平 Cd^{2+}进行高灵敏度监测。基于以上两方面原因，亟待发展可与μPIVG 方法联用的简单快速的分离富集技术从而消除基质中阴阳离子带来的干扰，并进一步提升对痕量重金属分析检测的灵敏度。

氧化石墨烯（GO）与碳纳米管（CNTs）交联形成的三维网络结水凝胶具有比表面积大、吸附位点多、在强酸、强碱中保持稳定的优点，因此十分适用于复杂基质中痕量重金属的分离富集。本工作建立了氧化石墨烯-多壁碳纳米管水凝胶（GO/MWCNTs）制备的固相微萃取（SPME）阵列，对二十份自然水样或尿液中的 Cd^{2+}同时进行富集，随后 SPME 纤维作为一端电极形成μPIVG，依次进行在线洗脱并产生挥发性物质，通过原子荧光光谱法进行检测。该方法利用 GO/MWCNTs 水凝胶静电吸附和络合吸附的原理，显著降低了 NO_3^-等阴离子和 K^+、Na^+等阳离子的基质干扰；通过 SPME 阵列实现了 Cd^{2+}的高通量分离富集；利用水凝胶本身易吸水溶胀却不溶解的性质，实现了快速在线洗脱的μPIVG。此外，本方法通过固相微萃取技术实现了消除基质干扰、富集、在线μPIVG 三合一效果，进一步简化了实验操作流程。

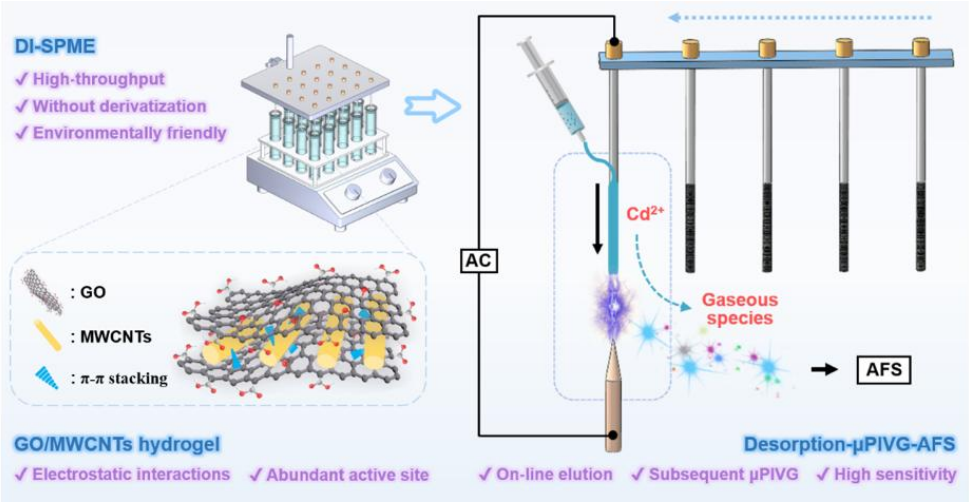


图 1 实验流程示意图

关键字 水凝胶固相微萃取，在线解吸微等离子体诱导蒸气发生，高通量分离富集

参考文献

1. Z. Zhu, Q. Wu, Z. Liu, *Analytical Chemistry.*, **2013**, 85, 4150–4156.
2. K. Greda, A. Szymczycha-Madeja, P. Pohl, *Analytica Chimica Acta.*, **2020**, 1123, 81–90.
3. L. Qiu, X. Yang, X. Gou, *Chemistry–A European Journal.*, **2010**, 16, 10653–10658

分会场：22.环境分析与仪器
交流形式：报告

岛津新污染物检测应用方案

尹戈*
岛津企业管理（中国）有限公司

新污染物（“Emerging contaminants”），是指新近发现或者被关注，对生态环境或者人体健康存在较大风险，但尚未纳入管理或者现有管理措施不足以有效防控其风险的有毒有害化学物质”。新污染物具有生物毒性、生物累积性等基本特征。此外，还具有风险隐蔽性、来源广泛性，因此治理难度大。目前国际上广受关注的新污染物主要包含四大类：（1）持久性有机污染物（POPs），（2）内分泌干扰物（EDCs），（3）抗生素，（4）微塑料（MPs）。

我国 2023 年版的重点管控新污染物清单包含了 14 类物质，其中大多数为《斯德哥尔摩公约》名单中的 POPs，此外还包括其他有毒有害物质（如二氯甲烷、三氯甲烷等）、抗生素和壬基酚等。新污染物治理已成为生态环境部当前及未来的重点工作之一，多次在政府工作报告中提及。且需要指出的是，新污染物种类繁多，且是一个开放式的清单，随着监测技术的进步、认知的提升、和传统法规的逐步健全完善，新污染物数量总体会源源不断的持续增加。新污染物在环境介质中浓度偏低，受基质影响较大，因此对分析仪器的灵敏度、选择性、准确度等指标提出了很高的要求；同时自动化也是未来环境监测领域的趋势之一。

结合以上行业特点与趋势，岛津人迎难而上，从分析化学专业“3S2A”角度出发，钻研开发了高灵敏度（Sensitivity: 如 BEIS 离子源）、快速（Speed: 如全谱二维、红外拉曼一体机）、高选择性（Selectivity: 如 LC-QTOF）、高准确度(Accuracy: 串接质谱)、自动化（Automatic: 如 AOE 系统、MAP-100）等立足客户需求，引领时代潮流的先进技术。同时针对微塑料、PFAS、氯化石蜡等热点新污染物，推出岛津多机种组合式解决方案。

关键字 新污染物 质谱数据库 PFAS 微塑料

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

便携式光子晶体传感器及其在环境分析中的应用

蔡仲雨*[1]、赵芳媛[1]、刘睿祥[2]、张玉琦[3]、蒋孟飞[1]
1. 北京航空航天大学
2. 天津大学
3. 延安大学

环境中有害物质的存在以及大量有害化学品的使用给环境带来了巨大的风险，并危及人类健康。各种真菌或者细菌在人体内适度生长并不危害健康，然而过度生长，将对人类健康带来危害。某些蛋白质或者化学品，比如蓖麻毒素，本身就是剧毒物质。当人类长期暴露在高浓度微生物环境中或者痕量化学品残留在食物链中，也将危害人类的生命健康，导致败血症、神经癌症等各种疾病的发生[1-3]。

目前环境分析常用的方法是仪器分析。传统仪器检测精度高，但是存在样品预处理复杂，成本高，且需要专业人员进行操作，难以实现实时在线监测等难题。因此，开发便携式及实时在线的传感器及装置成为目前迫切需求。我们师法自然，受变色龙在不同环境下显示不同颜色的现象出发，我们首创了一种基于二维光子晶体的传感器，该传感器具有高信噪比、低成本、高灵敏度和选择性的优势。

我们创新了光子晶体德拜衍射理论，将德拜环用作光子晶体传感器的信号，首次创制了全自动的光子晶体传感装置，该装置可以实现自动进样、摄像头获取取数据以及全自动数据分析并上传至云端，从而实现了高灵敏度和低成本的环境及其他物质的分析和检测。基于该传感器，我们制备得到的聚刀豆蛋白，聚辣根过氧化酶和聚乙酰乙酰胆碱酶等三种不同的智能凝胶材料，分别与二维光子晶体结合，将其制备成光子晶体凝胶传感器，实现了对白色念珠菌、双氧水以及有机磷神经毒剂等有害物质的高选择性和高灵敏度的检测[4, 5]。

研究发现，聚刀豆蛋白凝胶传感器可以选择性地检测白色念珠菌，其检测限可以达到32 CFU/mL[6]；辣根过氧化酶基复合凝胶传感器，可以高选择性和高灵敏度地检测过氧化氢，其检测限为 8.8×10-6 M [7]；而乙酰乙酰胆碱酶凝胶传感器则可以检测极低浓度的有机磷农药敌百虫（2.3 × 10–13 M）[8]。将上述传感器可以在 5 °C -50 °C 范围内很好的工作。此外，这些光子晶体传感器具有常强的光衍射信号，展现出极高的灵敏度和很高的选择性，有望在环境、食品安全和化学威胁监测等应用中实现可视化高效检测。

关键字 光子晶体传感器；便携式传感装置；真菌检测；过氧化氢；农药；有机磷毒剂

参考文献

1. S.N. Baxi, J.M. Portnoy, D. Larenas-Linnemann, W. Phipatanakul, C. Barnes, S. Baxi, C. Grimes, W.E. Horner, K. Kennedy, D. Larenas-Linnemann, E. Levetin, J.D. Miller, W. Phipatanakul, J.M. Portnoy, J. Scott, P.B. Williams, Exposure and Health Effects of Fungi on Humans, The Journal of Allergy and Clinical Immunology: In Practice, 4 (2016) 396-404.
2. D.-H. Kim, Y. Ait Bamai, L. Belova, J. Bessems, G. Poma, A. Covaci, Human exposure to persistent and mobile chemicals: A review of sources, internal levels and health implications, Science of The Total Environment, 893 (2023) 164764.
3. D. Li, S. Suh, Health risks of chemicals in consumer products: A review, Environment International, 123 (2019) 580-587.
4. Z. Cai, N.L. Smith, J.-T. Zhang, S.A. Asher, Two-Dimensional Photonic Crystal Chemical and Biomolecular Sensors, Analytical Chemistry, 87 (2015) 5013-5025.
5. Z. Cai, Z. Li, S. Ravaine, M. He, Y. Song, Y. Yin, H. Zheng, J. Teng, A. Zhang, From colloidal particles to photonic crystals: advances in self-assembly and their emerging applications, Chemical Society Reviews, 50 (2021) 5898-5951.
6. Z. Cai, D.H. Kwak, D. Punihaole, Z. Hong, S.S. Velankar, X. Liu, S.A. Asher, A Photonic Crystal Protein Hydrogel Sensor for Candida albicans, Angewandte Chemie International Edition, 54 (2015) 13036-13040.
7. R. Liu, Z. Cai, Q. Zhang, H. Yuan, G. Zhang, D.a. Yang, Colorimetric two-dimensional photonic crystal biosensors for label-free detection of hydrogen peroxide, Sensors and Actuators B: Chemical, 354 (2022) 131236.
8. F. Zhao, X. Liu, X. Li, Z. Cai, Y. Zhang, Two-dimensional photonic crystal acetylcholinesterase biosensor for efficient detection of organophosphorus compounds, Biosensors and Bioelectronics, (2024).

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

细颗粒物的多维表征及其降解机制研究

黄秀*[1]、刘倩[2]、江桂斌[2]
1. 四川大学
2. 中国科学院生态环境研究中心

细颗粒物的生物降解及其毒理机制是环境卫生领域中重要的科学问题 1。高通量质谱和质谱成像在颗粒物的分析监测、来源追溯、暴露水平和风险评估等方面具有巨大的应用潜力 2。本研究以高通量质谱为工具，建立了高效的颗粒物检测与表征的分析平台 3-4。该平台不仅可以表征颗粒物的分子结构，揭示其在环境中的降解机制，还可以通过颗粒物在实际环境中的特性来评价其生物安全性，为颗粒物的环境健康效应提供理论依据 3-4。与其他技术平台相比，由于质谱法可以提供准确的反应中间体和产物的质量信息，因此该平台可以直接解构颗粒物的复杂降解途径，不需要任何的化学标记，在分子水平上揭示颗粒物的降解途径。该平台具有推广到实际环境和生物应用中颗粒物表征的潜力，在环境卫生和公共安全领域具有广阔的应用前景 5。

关键字 细颗粒物，降解，质谱，分子机制

参考文献

1. K. Kim, E. Kabir, S. Kabir, Environ. Int., **2015**, 74, 136-143.
2. X. Huang, Q. Liu,* S. Yao,* G. Jiang, Anal. Methods, **2017**, 9, 2768-2783.
3. X. Huang, Y. Li, G. Qu, X. Yu, D. Cao, Q. Liu,* G. Jiang, Chem. Sci., **2023**, 14, 6669-6678.
4. X. Huang, Y. Li, Z. Shu, L. Huang, Q. Liu,* G. Jiang, Environ. Sci. Technol. **2024**, 58, 13358−13369.
5. X. Huang, H. Liu, D. Lu, Y. Lin, J. Liu, Q. Liu,* Z. Nie, G. Jiang, Chem. Soc. Rev., **2021**, 50, 5243-5280.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

气相色谱-微等离子体原子发射光谱联用仪在环境监测中的应用

杨媛[1]、吴小丽[1]、郑成斌*[2]
1. 西华大学
2. 四川大学

气相色谱（gas chromatography，GC）因其卓越的分离能力，广泛应用于元素形态分析和挥发性有机污染物检测。尽管现有的商品化原子光谱和质谱检测器能够满足元素形态分析和挥发性有机污染物的常规分析需求，但其高能耗和大体积等缺点限制了在野外进行现场分析的可行性。此外，质谱设备的高昂价格也进一步制约了其普遍应用。基于此，我们开发了一种基于尖端放电微等离子体原子发射光谱（point discharge optical emission spectrometer，PD-OES）的 GC 检测器，实现了金属元素形态分析 1。我们进一步研究了该检测器激发非金属元素硅（Si）所产生的原子发射光谱，发现其能够有效激发 Si 的原子发射光谱，这一发现将 GC-PD-OES 的应用扩展至挥发性甲基硅氧烷等新型环境污染物的测定 2。为了提升 GC-PD-OES 的通用性，我们考察了微等离子体激发碳原子的发射光谱情况，发现尖端放电微等离子体能够将含碳有机物中的碳元素原子化并激发，获得特征原子发射光谱。这使得 PD-OES 得以发展为一种通用型气相色谱检测器，适用于各种易挥发含碳污染物的测定。在此基础上，我们利用 3D 打印技术构建了 PD-OES 检测器。与早期搭建的 GC-PD-OES 相比，3D 打印技术使得新检测器更具集成化和紧凑性，减少了死体积，提高了气密性，降低了气体消耗，从而显著减少样品稀释并降低成本 3。结合吹扫捕集和固相微萃取的样品前处理技术，GC-PD-OES 实现了环境中易衍生元素的高灵敏度形态分析和易挥发污染物的监测。与传统气相色谱检测器相比，该检测器的主要优势在于低成本、低能耗和小体积，同时能够提供强信号的光谱信息，具备较强的抗干扰能力，适用于复杂基质样品的分析。

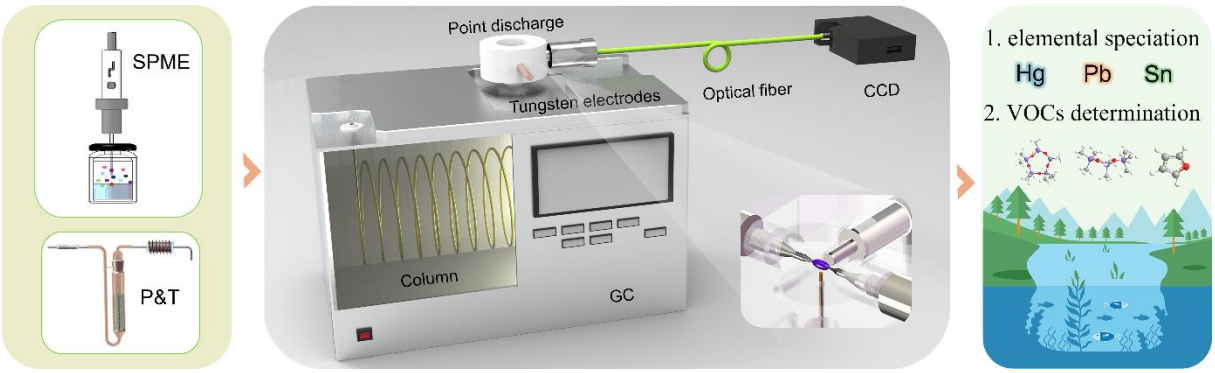


图 1. 气相色谱-微等离子体原子发射光谱联用仪（GC-PD-OES）及其在环境监测中的应用。

关键字 微等离子体原子发射光谱；气相色谱；元素形态分析；挥发性有机污染物

参考文献：

1. Y. Yang, Q. Tan, Y. Lin, Y. F. Tian, L. Wu, X. D. Hou, C. B. Cheng, *Anal. Chem.*, **2018**, 90, 11996-12003.
2. Y. Yang, Y. Wang, X. L. Hou, Y. Lin, L. Yang, X. D. Hou, C. B. Cheng, *Anal. Chim. Acta*, **2020**,1124, 121-128.
3. Y. Yang, Y. Lin, J. H. Yang, Y. B. Su, Y. Y. Li, Y. R. Deng, C. B. Cheng, *Anal. Chim. Acta*, **2022**,1191, 339288.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

碳原子发射光谱的环境分析应用：从 TOC 到微纳米塑料的检测

杨蕊*、杨璐吉
成都理工大学

原子发射光谱因其具有多元素同时分析、灵敏度高、选择性好等优点，而广泛用于环境分析领域。由于非金属元素发射谱线第一激发能高，其特征原子发射光谱谱线处于真空紫外区，易被氧气和水蒸气所吸收，导致分析灵敏度低和干扰严重。因而，传统原子发射光谱难以用于灵敏检测非金属元素。我们团队一直致力于微等离子体激发气态含碳化合物产生碳的原子发射光谱的研究，并建立了小型化微等离子体碳原子发射光谱及其装置。我们先后将尖端放电微等离子体碳原子发射光谱用于碳材料表面羧基官能团、亚硝酸盐氮、溶解氧的检测以及构建酸碱滴定分析装置。近两年，我们进一步拓展了碳原子发射光谱的应用范围，成功将其用于环境水体中总有机碳以及微纳米塑料的检测，该体系有望形成商品化仪器用于多指标含碳化合物的现场检测。

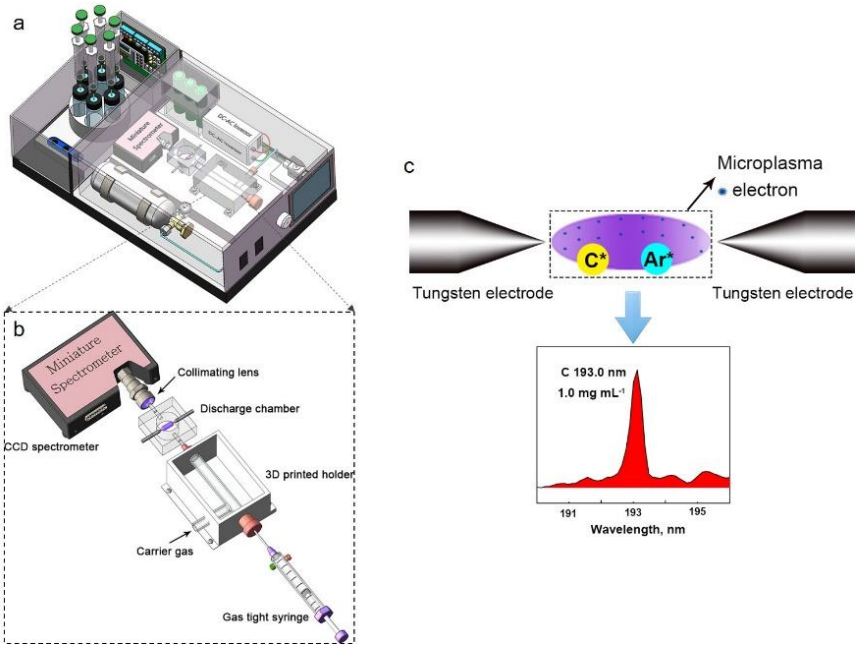


图 1. 小型化微等离子体碳原子发射光谱装置图。（a）装置整体设计图；（b）放电部分细节图；（c）放电原理图。

关键字 原子发射光谱，微等离子体，含碳化合物，总有机碳，微纳米塑料

参考文献

1. R. Yang, Y. Lin, J. Yang, L. He, Y. Tian, X. Hou, C. Zheng, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 6972–6979.
2. R. Yang, S. Yang, Y. Lin, Y. Su, Y. Li, C. Zheng, *Microchem. J.*, **2021**, 171, 106862.
3. R. Yang, Y. Su, T. Ren, Y. Li, Y. Deng, C. Zheng, *Anal. Chem.*, **2023,** 95, 17238–17245.
4. R. Yang, C. Ye, Y. Su, J. Yang, Q. Liu, C. Zheng, *Talanta*, **2024**, 282, 126974

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

城市污水处理厂中三嗪类除草剂及其转化产物污染特征与生态风险

张青*、杨莹莹、夏星辉
北京师范大学

为了改善街道及绿化带绿化质量，三嗪类除草剂被广泛应用于城市多种场景控制杂草。城市相当一部分地表具有不易透水特性，例如车道和街道小径，大部分使用的除草剂沿城市不透水地表进入污水处理厂。尚未完全处理的三嗪类除草剂及其转化产物沿污水进入受纳水体，严重威胁城市淡水生态系统。三嗪类除草剂具有较强水溶性和持久性，其进入环境介质将发生生物或非生物转化形成种类繁多转化产物。由于缺乏除草剂转化产物相应的标准品，目前关于城市污水处理厂中三嗪类除草剂及其转化产物污染特征与潜在风险尚不清晰。本研究利用目标分析、疑似目标和非目标分析相结合，系统对城市污水处理厂三嗪类除草剂转化产物进行识别分析。识别了 41 种三嗪类除草剂转化产物，首次城市在水环境中发现 36 种转化产物。该研究结果表明必须将转化产物纳入农药生态风险评估的范畴。

关键字 城市污水处理厂，三嗪类除草剂，转化产物，疑似目标和非目标分析，生态风险

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

燃烧源黑碳助力激光解吸电离质谱高效、经济、便捷地筛选多种新污染物

舒钊、刘倩*、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

环境新污染物的高效筛选和检测对评估新污染物的人群暴露水平和健康防护具有重要意义。然而，由于新污染物种类繁多、浓度低，传统分析方法难以满足多种新污染物同时快速筛选的需求 1。因此，开发高效、经济、便捷的新污染物分析方法对筛选环境多种新污染物尤为重要。本研究基于激光解吸电离质谱（LDI-MS）技术，提出了一种高效、经济、便捷地多种新污染物筛选方法。利用直接燃烧产生的黑碳作为基质，LDI-MS 技术可将样品中新污染物（如全氟化合物、溴代阻燃剂等）直接电离分析，而无需复杂预处理过程。该方法每秒可分析数十个样品，新污染物的检出限达 ng/ml。此外，本研究还探讨了 LDI-MS 在复杂基质中的应用潜力。通过优化质谱参数，本方法能够有效区分新污染物与基质的质谱背景峰，提高了检测的特异性，表现出较高的抗干扰能力。LDI-MS 以上优点使其在新污染物的现场分析、快速筛查等场景中具有广泛的应用前景，对环境中新污染物暴露水平评估和污染防控具有重要意义。

关键字 激光解吸电离质谱，新污染物，环境监测，黑碳

参考文献

1. Ting Ruan, Pengyang Li, Haotian Wang, Tingyu Li, and Guibin Jiang, Identification and Prioritization of Environmental Organic Pollutants: From an Analytical and Toxicological Perspective. Chemical Reviews 2023 123 (17), 10584-10640.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

脑部外源性颗粒态污染物的识别与追踪

李翔宇[1]、白佶[1]、易慧喧[2]、陆达伟*[1]、刘倩[1]、江桂斌[1]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 哈尔滨工业大学（威海）

大量流行病学研究表明，大气细颗粒物污染的长期暴露与脑血管、行为障碍、神经退行性疾病等脑部疾病的发生或恶化关系密切，然而，目前关于脑部外源性颗粒态污染物的认识仍近乎“黑箱”状态，这已成为准确认识环境污染对脑部健康风险研究的瓶颈问题。随着非靶向分析技术、暴露组学、原位成像技术和敏感的生物屏障模型等环境分析和环境毒理学技术的快速发展，可尝试针对脑部外源性颗粒态污染物建立“识别-暴露-表征-追踪”的全流程研究路线，以厘清脑部颗粒态污染物的赋存特征，辨识具体暴露途径，阐明代谢转化行为机制等。本研究筛查了当前脑部外源性污染物，特别是颗粒态污染物的人体组织赋存情况，提出基于非靶向分析技术、同位素追踪技术等建立脑部外源性颗粒态污染物识别、表征和溯源的系统研究方法，解析入脑外源性颗粒态污染物信息，追踪典型污染物入脑的暴露途径、跨生物屏障转运、代谢归趋及生命周期。为进一步阐明外源性颗粒态污染物对脑部重要生理功能及生命过程的扰动机制提供方法学支撑和科学支持。

关键字 脑，外源性污染物，识别，追踪

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

环境磁性颗粒的类过氧化物酶活性研究

刘琳、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

人工合成的磁性颗粒，具有类过氧化物酶特性，已被证明是在过氧化氢存在下降解有机污染物的有效催化剂。同时，磁性颗粒也是易于分离及回收的天然材料，天然磁性颗粒也被证明了具有过氧化物酶活性，其在催化降解有机污染物方面有极大的应用潜力。但自然界中的磁性颗粒有诸多来源，不同来源磁性颗粒的性质具有一定差异，主要体现在粒径分布、形貌结构、伴生元素等方面。因此，寻找易于回收且催化效果好的天然磁性颗粒，在污染物降解及环境可持续发展中，有重要启示意义。

本研究通过对环境中不同来源磁性颗粒的类过氧化物酶活性进行分析，发现其过氧化物酶活性存在差异，主要表现为交通源磁性颗粒物强于燃煤源磁性颗粒强于天然来源磁性颗粒物。我们进一步分析了导致不同来源磁性颗粒物类过氧化物酶活性差异的原因，发现粒径、形貌、伴生元素等可能是其主要的影响因素。之后，对环境介质（以土壤为例）中的磁性颗粒物进行回收，并对其类过氧化物酶活性进行分析，寻找导致不同地区磁性颗粒物类过氧化物酶活性差异的因素。最后，我们将两种人为源的磁性颗粒用于过氧化氢条件下的苯酚及苯胺降解，发现其表现良好，其中交通源磁性颗粒物的催化效果更明显。

磁性颗粒物由于在人体内被发现且具有生物毒性，因此近年来作为一种环境污染物被人们所认知。通过本研究，发现环境中的磁性颗粒由于其独特的过氧化物酶活性，及可回收性质，在有机污染物降解中可以起到良好的催化作用。因此，在尾气排放或燃煤飞灰处理装置中，加入磁性回收模块对磁性颗粒进行回收利用。既可以减轻磁性颗粒的排放和其对人体健康的影响；也可以实现污染物的重新利用，对环境可持续发展有重要意义。

关键字 磁性颗粒，类过氧化物酶，环境催化剂

参考文献

1.Polshettiwar, V.; Luque, R.; Fihri, A.; Zhu, H. B.; Bouhrara, M.; Bassett, J. M., Magnetically Recoverable
Nanocatalysts. Chem. Rev. 2011, 111, (5), 3036-3075.
2. Maher, B. A.; Ahmed, I. A. M.; Karloukovski, V.; MacLaren, D. A.; Foulds, P. G.; Allsop, D.; Mann, D. M. A.; Torres-Jardon, R.; Calderon-Garciduenas, L., Magnetite pollution nanoparticles in the human brain. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2016, 113, (39), 10797-10801.
3. Gao, L. Z.; Zhuang, J.; Nie, L.; Zhang, J. B.; Zhang, Y.; Gu, N.; Wang, T. H.; Feng, J.; Yang, D. L.; Perrett,
S.; Yan, X., Intrinsic peroxidase-like activity of ferromagnetic nanoparticles. Nat. Nanotechnol. 2007, 2, (9),
577-583.
4. Safarik, I.; Prochazkova, J., Magnetic enzyme-mimetic minerals with peroxidase-like activity can contribute to measured soil peroxidase activity. Soil Biol. Biochem. 2022, 168, 108639.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

多卤代荧光素类探针检测抗蚜威

金璐悦、瞿港、赵宇新、刘石磊、杨旸*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

抗蚜威（Pirimicarb）作为一种能有效防治蚜虫害的中毒性氨基甲酸酯农药，被普遍用于农业种植中。但其能够抑制乙酰胆碱酯酶的活性，且具有致癌和致死风险，对人体有致癌、致畸、致突变作用，在环境中的残留也会污染土壤、表面水和地下水，对人类健康和自然环境构成潜在威胁，因此有必要研究针对抗蚜威的现场快速检测方法，实现抗蚜威的使用监控。目前抗蚜威的检测方法主要为实验室分析方法，现场快速检测方法较少，且大部分报道都依靠酶作为媒介，其检测灵敏度和方法稳定性取决于酶的活性，对环境比较苛刻。针对以上问题，本研究基于一种多卤代荧光素类探针，建立了抗蚜威的可视快速检测方法。由于多卤代荧光素类探针与抗蚜威之间存在卤素键作用，探针与抗蚜威基于卤素键结合后形成电荷转移络合物，体系颜色由橙红色转变为紫红色，并且随着抗蚜威浓度增大，紫红色加深，结合紫外可见分光光度计可实现抗蚜威的定性定量检测。水溶液中，该方法检出限为 0.11 $mg·L^{-1}$，对于实际样品黄瓜和梨子，检出限分别为 0.11 $mg·L^{-1}$、0.15 $mg·L^{-1}$，回收率在 90.65%-99.78%之间，RSD<0.623%。同时该方法对抗蚜威有较好选择性，抗干扰性强，其它氨基甲酸酯类农药和蔬果中的糖类、氨基酸等对探针检测干扰较小。总之，该方法可实现抗蚜威的现场快速检测，并提供一种有效的快速分析技术手段。

关键字 抗蚜威；多卤代荧光素类探针；现场快速检测

参考文献

1. Hu D, Jiang M, Ge T, Liu X, et al. International Journal of Food Properties, 2020, 23(1), 1150–1157.
2. Bini Dhouib I, Annabi A, Jallouli M, et al. Journal of Applied Biomedicine, 2016, 14(2): 85-90.
3. Cao J, Wang M, Yu H, et al. Journal of Agricultural and Food Chemistry. 2020, 68(28): 7298-7315.
4. Lin Y, Sun J, Tang M, et al. Anal Chem, 2021, 93(16): 6544-6550.
5. Chai Y, Niu X, Chen C, Zhao H, et al. Analytical Letters, 2013, 46 (5), 803-817.
6. Apilux A, Siangproh W, Insin N, et al. Analytical Methods 2017, 9 (3), 519-527,
7. Jing X, Wu J, Wang H, et al. Food Chemistry, 2022, 370, 131360.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

工业源磁性铁氧化合物排放及其全球排放评估

代思波、燕少玮、张伟灿、杨航、严子栋、孙宏蕾、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

2024 年颗粒物污染被列为全球疾病主要因素，其中工业源颗粒物是颗粒物健康效应的重要研究对象。工业源颗粒物具有较高的毒性效应与氧化潜势，其金属组分对氧化潜势的贡献高达 84.6%。铁氧化物在金属组分中占比最多，并且磁性铁氧化物已在人体脑组织、胎盘、血液、胸腔积液中被发现，因此磁性铁氧化物的研究对颗粒物健康效应有着重要意义。但是，目前对工业源磁性铁氧化物排放的研究较少。我将分析来自 12 种工业源，共计 101 份样本中的磁性铁氧化合物，经过循环磁萃取后使用 ICP-MS 进行定量分析；随后结合工业源排放情况，使用联合国环境规划署推荐的排放因子方法，对 12 种工业源的排放因子进行计算，最终依据全球工业排放数据制定磁性铁氧化合物的全球排放清单。

关键字 磁性铁氧化合物，工业源

参考文献

1.Brauer M, Roth GA, Aravkin AY, et al. Global burden and strength of evidence for 88 risk factors in 204 countries and 811 subnational locations, 1990–2021: a systematic analysis for the Global Burden of Disease Study 2021. *The Lancet.* **2024**;403(10440):2162-2203.
2.Wu D, Zheng H, Li Q, et al. Achieving health-oriented air pollution control requires integrating unequal toxicities of industrial particles. *Nat Commun*. **2023**;14(1):6491.
3.Maher BA, Ahmed IAM, Karloukovski V, et al. Magnetite pollution nanoparticles in the human brain. *Proc Natl Acad Sci.* **2016**;113(39):10797-10801.
4.Liu NM, Miyashita L, Maher BA, et al. Evidence for the presence of air pollution nanoparticles in placental tissue cells. *Sci Total Environ.* **2021**;751:142235.
5.Lu D, Luo Q, Chen R, et al. Chemical multi-fingerprinting of exogenous ultrafine particles in human serum and pleural effusion. *Nat Commun*. **2020**;11(1):2567.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

PM2.5 致红细胞毒性的效应物质识别

张雨竹[1]、周群芳[2]、宋善军*[1]
1. 中国计量科学研究院
2. 中国科学院生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室

大气细颗粒物（fine particulate matter，PM2.5）来源众多、组成复杂，可造成心血管疾病风险。1 红细胞是血液中的重要组成成分，参与血栓形成，并容易受到外源污染物的影响。研究 PM2.5 对红细胞潜在的毒理学效应，并识别其中的关键致毒成分，对评价 PM2.5 的健康风险具有重要意义。

本研究以 2022 年北京朝阳、顺义和延庆 3 个城区 4 个季节采集的 PM2.5 作为研究对象，通过制备小鼠红细胞悬液开展模拟暴露实验，结合化学成分检测与相关性分析，识别 PM2.5 中诱导红细胞损伤的主要成分。实验结果显示，PM2.5 暴露可诱导红细胞出现轻微溶血现象，红细胞内 ATP 含量降低，红细胞磷脂酰丝氨酸（phosphatidylserine，PS）出现外翻，细胞形态发生显著变化，并且不同 PM2.5 样品的红细胞毒性效应存在明显不同。基于毒性分析结果，结合不同 PM2.5 的化学分析数据进行 Pearson 相关性分析，发现 PM2.5 样品中芳香性溶解有机质（dissolved organic matter，DOM）和 PM2.5 表面电势与其造成的红细胞损伤程度呈正相关（如图 1）。通过使用炭黑（carbon black，CB）和氧化炭黑（oxidized CB，OCB）进行验证，发现表面氧化程度越高的 OCB 表面电势越低，其对红细胞的损伤影响也越大。综上，PM2.5 对红细胞损伤效应的大小，可能与样品中 DOM 成分与含碳细颗粒物表面氧化程度有关。本研究首次揭示了 PM2.5 对红细胞的损伤效应，且追踪分析了其中潜在的毒性成分，研究结果可望为系统评估 PM2.5 的血液毒理学效应与活性成分解析提供科学数据支持。



图 1 PM2.5 成分对红细胞的损伤效应及关键效应成分识别

关键字 PM2.5，红细胞毒性，化学成分分析，效应物质识别

参考文献

1. Zhang, Y.; Pei, Y.; Liu, Q. S.; Gao, Y.; Min, K.; Chen, Z.; Shu, Z.; Liu, Q.; Zhou, Q.; Jiang, G., Tracing the plasma kallikrein-kinin system-activating component in the atmospheric particulate matter with different origins. J Hazard Mater **2023**, 458, 132044.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

高性能水凝胶基个体 NO_2 暴露监测传感器的研制

祝严欢、孙宏蕾、于皓、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

二氧化氮(NO_2)作为一种影响大气质量、危害人类健康的痕量气态污染物[1]。由交通运输和室内烹饪等人为活动排放的 NO_2 对个体的健康影响难以准确量化[2]。开发可在室温条件下工作的高性能、实时监测可穿戴传感器对于评估生活场景下个体暴露的 NO_2 风险具有重要意义。本研究开发了一种基于聚乙烯醇-纳米纤维素纤丝的双网络有机水凝胶，通过在水凝胶中引入不同的分散介质，探究了不同多元醇功能组分(乙二醇、丙三醇、D-山梨醇)对 NO_2 气体传感性能的影响。结果表明，在传感性能方面，添加 D-山梨醇的水凝胶传感器具有最高的灵敏度(75.2%/ppm)，较低的理论检测限(30.2 ppb)，相对较快的响应/恢复时间(1 ppm NO_2: 189 s/127 s)，对多种干扰气体(SO_2、CO、NH_3、乙醇、甲醇和水)良好的选择性、出色的可逆性、可重复性。其次，为实现该水凝胶基可穿戴传感器在真实场景下的稳定运行，我们测试了三种水凝胶材料的力学强度。其中，添加了 D-山梨醇的水凝胶的断裂伸长率（654%）、断裂能（2502 J/m^2）、和杨氏模量（945 kPa）都明显优于乙二醇和丙三醇水凝胶，表明其具有最强的力学性能及韧性。最后，我们还发现 D-山梨醇有机水凝胶具有优异的自愈合、抗冻(-170℃)、及可降解性能(90℃加热)性能，证明了该传感器具有在极端环境(机械损伤、低温)下的应用潜力。

关键字 水凝胶，柔性传感器，二氧化氮，气态污染物

参考文献

1. WHO global air quality guidelines: particulate matter ($PM_{2.5}$ and PM_{10}), ozone, nitrogen dioxide, sulfur dioxide and carbon monoxide[M]. World Health Organization, **2021**.
2. Huang T., Zhu X., Zhong Q., et al. Spatial and Temporal Trends in Global Emissions of Nitrogen Oxides from 1960 to 2014[J]. Environmental Science & Technology, American Chemical Society, **2017**, 51(14): 7992–8000.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

被动吸烟的健康监测可穿戴传感器

孙宏蕾、祝严欢、于皓、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室

可穿戴传感器在人体基本特征的监测已实现大规模以光学原理的应用，同时其关于人体其它生物标志物的监测值得研究，例如呼吸气体和皮肤表面汗液的监测。关于香烟的危害已研究 50 余年，研究证明香烟有足够的能力造成癌症、慢性阻塞性肺病和心血管疾病等疾病。但迄今为止，30%左右的人群正在吸烟。二手烟、三手烟的暴露造成群体被动吸烟，而有害物质的摄入浓度不明。因此本研究聚焦被动吸烟的被动暴露引起的急性毒性监测，结合慢性毒性生物标志物进行长时间健康监测，减少癌症和慢性阻塞性肺病等疾病的发生。尼古丁和特异性烟草烟酰胺是被动吸烟中的突出性物质，其可以被人肝中的 UGT2B10 所代谢，本研究设计汗液皮质醇和心率异常的监测系统，对皮肤表面摄入的尼古丁和特异性烟草烟酰胺进行表征，从而实现健康风险的有效甄别。

关键字 被动吸烟，可穿戴的，电化学，柔性，传感器

参考文献

1. Son, D. *et al.* An integrated self-healable electronic skin system fabricated via dynamic reconstruction of a nanostructured conducting network. *Nature Nanotech.*, **2018**, 13, 1057–1065.
2. Onor, I. O. *et al.* Clinical Effects of Cigarette Smoking: Epidemiologic Impact and Review of Pharmacotherapy Options. *International Journal of Environmental Research and Public Health.*, **2017**, 14, 1147.
3. Alter, P. *et al.* Characteristics of Current Smokers versus Former Smokers with COPD and Their Associations with Smoking Cessation Within 4.5 Years: Results from COSYCONET. *COPD.*, **2023**, 18, 2911–2923.
4. Tourancheau, A. *et al.* Unravelling the transcriptomic landscape of the major phase II UDP-glucuronosyltransferase drug metabolizing pathway using targeted RNA sequencing. *Pharmacogenomics J.*, **2016**, 16, 60–70.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

MOF MIL-101(Cr)对植物生长的剂量依赖效应

刘娅聪、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

随着 MOFs 在多个领域的应用日益增加，其对环境的影响成为不容忽视的问题。与动物和微生物相比，MOFs 对植物影响的研究相对较少。因此，MIL-101(Cr)作为 MOFs 模型。大豆被暴露在不同剂量的 MIL-101(Cr)中 7 天后，结果发现在低剂量（200 mg/L）下大豆的生长没有受到影响。高剂量（500 mg/L）的 MIL-101(Cr)对植物生长有明显的毒性。同时，将 Cr 作为指示剂去定量植物中的 MIL-101(Cr)。结果发现 MIL-101(Cr)主要集中在大豆根部，有少量进入茎部，但在叶和子叶中几乎没有检测到 MIL-101(Cr)。LA-ICP-MS 进一步对根部组织成像，结果表明暴露组的 Cr 强度高于对照组。在暴露组中，MIL-101(Cr)主要分布在皮层部，在木质部没有检测到 Cr 的强度。因此 MIL-101(Cr)很难向上长距离迁移。最后通过代谢途径分析，发现 MIL-101(Cr)诱导糖酵解和 TCA 循环途径发生改变，特别是蔗糖含量的增加，这对植物生长有着积极的作用。另外，MIL-101(Cr)可能会影响细胞壁的结构与功能，改变植物体内的 C 和 N 的重新分布，激活植物的抗氧化系统（抗坏血酸和糖醛酸代谢途径）。这一研究为 MOFs 的安全性评估及其农业应用提供了参考数据。未来，需要在考虑收益的同时控制风险。建立安全阈值的标准。在一定安全阈值下，将 MOFs 应用于农业生产，包括纳米肥料、药物传递等。同时，需开发生物可降解性或低毒性的 MOFs。

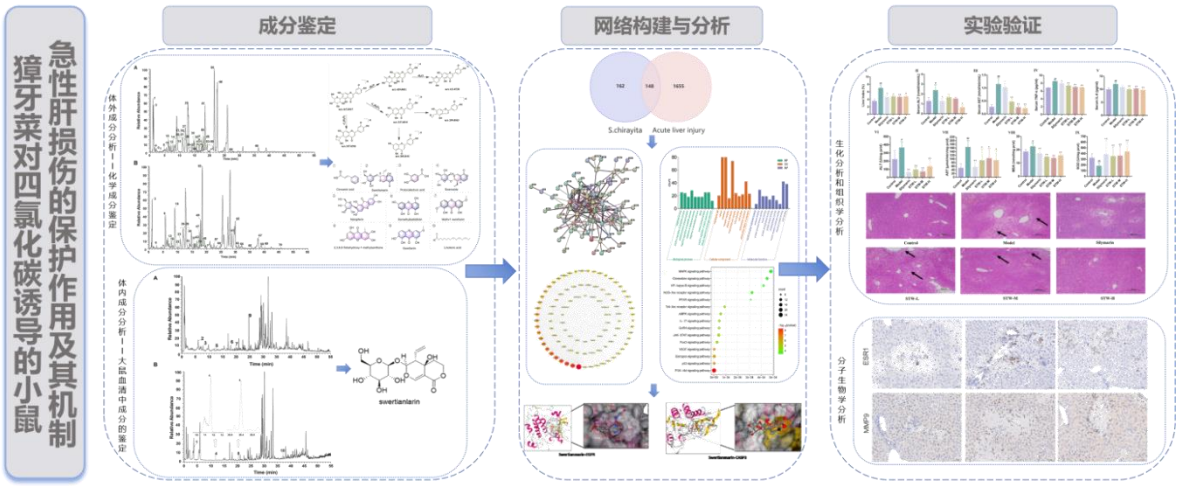
关键字 金属有机骨架，植物生长，代谢，分布，LA-ICP-MS

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

獐牙菜对四氯化碳诱导的小鼠急性肝损伤的保护作用及其机制

刘馨蔚、黄秀*
四川大学华西公共卫生学院/华西第四医院

急性肝损伤（Acute Liver Injury, ALI）是全球范围内引起重大健康问题的肝病之一，通常由多种毒物引起，其中四氯化碳（Carbon Tetrachloride, CCl_4）是常见的化学毒素之一。尽管獐牙菜在传统医学中用于治疗肝病，但其在 CCl_4 诱导的 ALI 中的保护作用尚未得到充分研究。本研究旨在评估獐牙菜的活性成分獐牙菜苦甙（Swertimarin, STW）在小鼠暴露于 CCl_4 后的肝脏保护潜力。研究结果显示，通过 UPLC-Q-Exactive Orbitrap MS 方法鉴定得到獐牙菜化学成分 49 个，其中原型入血成分有 10 个；功能富集分析和分子对接结果表明獐牙菜具有治疗 CCl_4 诱导的 ALI 的“多成分-多通路-多靶点”特征；生化指标检测显示，STW 显著改善了 CCl_4 诱导的 ALI 小鼠模型中的 AST、ALT、MDA、SOD、TNF-α和 IL-6 水平；H&E 染色结果表明，STW 显著减轻了小鼠的细胞坏死、炎症浸润和其他形式的病理肝损伤；qRT-PCR 分析揭示 STW 通过调节 EGFR、CASP3、STAT3 等关键分子靶点的表达来改善 CCl_4 诱导的 ALI。综上所述，STW 作为一种潜在的肝脏保护剂，通过调节关键的生化指标和分子靶点，能够有效缓解 CCl_4 诱导的 ALI，为肝脏损伤的治疗提供新的策略。



关键字 獐牙菜，四氯化碳，急性肝损伤

参考文献

1. Wu Y, He Y, Wang R, et al. Preventive effect of flavonoid extract from the peel of Gonggan (Citrus reticulata Blanco Var. Gonggan) on CCl_4-induced acute liver injury in mice[J]. Journal of Inflammation Research, **2021**: 5111-5121.
2. Bekkouch O, Dalli M, Harnafi M, et al. Ginger (*Zingiber officinale* Roscoe), Lemon (*Citrus limon* L.) Juices as Preventive Agents from Chronic Liver Damage Induced by CCl_4: A Biochemical and Histological Study.*Antioxidants*. **2022**; 11(2):390.
3. Wang B, Cui S, Mao B, et al. Cyanidin alleviated CCl_4-induced acute liver injury by regulating the Nrf2 and NF-κB signaling pathways[J]. Antioxidants, **2022**, 11(12): 2383.

分会场：22.环境分析与仪器
868

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

自然光驱动的光催化剂增强鲁米诺化学发光用于检测多巴胺

蔚成卓、赵利霞*
中科院生态环境研究中心

鲁米诺化学发光（CL）在线检测生物和化学物质对环境检测与分析领域有着重要作用，但经典的 H_2O_2-鲁米诺体系复杂，不稳定等缺点抑制着其应用的发展。自然光驱动的光催化剂在温和的自然光下即能与鲁米诺反应并发出强烈的 CL，在鲁米诺 CL 增强领域具有很大潜力。我们通过经典半导体与 MIL-100 (Fe)的结合，成功制备出一类仅需自然光就可驱动的光催化剂，实现了方便、稳定、灵敏的 CL 快速检测。其中，MIL-100(Fe)/TiO2 表现出最优异的性能，MIL-100(Fe)/TiO_2-鲁米诺体系在相同浓度下比 H_2O_2-鲁米诺体系的 CL 高 100 倍。利用 N2 鼓泡实验、自由基清除实验、紫外-可见光谱、电子自旋共振光谱和密度泛函理论计算等方法阐明了 MIL-100(Fe)/TiO_2-鲁米诺体系可能的 CL 机制。由于 MIL-100(Fe)/TiO_2 与裸 TiO_2 相比可以更有效地吸收和利用自然光，对 O2 的吸附也更强，所以在温和自然光（室内光源）的激活下，MIL-100(Fe)/TiO2 表面就可产生光生 e-和 h+，e-与吸附的 O_2 发生反应，分别生成 $O_2^{\bullet-}$、$^1O_2$、·OH 和 H_2O_2 等活性氧（ROS）。然而由于 MIL-100(Fe)/TiO_2 的能带位置，h+不能与 H_2O 反应，因此 h+被大量滞留在材料表面。根据直接 CL 机制，这些生成的 ROS 和 h+与鲁米诺阴离子(L2−)反应产生激发态 AP_2^{2-*}，激发态向 AP_2^{2-}释放能量，就产生了强烈的 CL 发射。利用多巴胺（DA）对 CL 强度的抑制作用，研制了定量检测 DA 的方法。CL 强度与 DA 浓度线性范围为 1~1000μM，检出限为 10.3 μM。本研究无需外加催化剂，仅在自然光下系统就获得了良好的 CL 检测性能，这为化学发光技术在环境检测领域的发展提供了新的可能性。

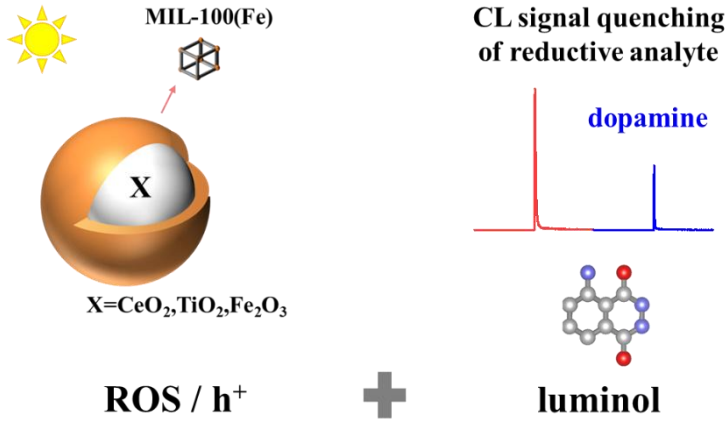


图 1. MIL-100(Fe)/半导体-鲁米诺化学发光增强体系及其对多巴胺的检测示意图

关键字 化学发光，自然光，光催化剂，多巴胺

参考文献

1. Chengzhuo Yu, Jin Xu, Yarui Wang, Silong Wang, Li Xiong, Fanglan Geng, Zesen Shang, Huasheng Wu, Jitao Lv, Lixia Zhao, Yawei Wang, *Biomed. Chromatogr.*, **2024**, 16, 19.

，

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

气相光催化中气-固界面羟基自由基生成与检测

许金、赵利霞*
中国科学院生态环境研究中心

羟基自由基（•OH）的产生和利用是光催化降解污染物和杀菌消毒的基础。尤其对于应用广泛的气相光催化而言，实现气相光催化中气固界面•OH 的准确检测尤为关键。目前对于气相光催化反应中生成的•OH 还没有有效的检测方法，针对这一空白，我们利用化学发光方法，搭建了可用于检测气相光催化负载中气固界面产生的羟基自由基的装置。首先我们使用石英管、紫外灯和负载在金属网上的 TiO_2 作为催化剂搭建了一套气相光催化反应装置。然后将一定浓度的探针溶液加入到洗气瓶中，利用空气作为载气将探针雾化带入光催化反应室，经光催化反应后通入到含有一定量相同浓度的探针溶液中，通过化学发光装置检测吸收液的化学发光信号并对•OH 进行定量。同时我们对反应过程中的空气流速和探针浓度等条件进行了优化，实验结果表明此方法能够成功地检测气相光催化反应中产生的•OH。除此之外，我们还进行了甲醛降解与杀菌实验，并且将甲醛降解效率与•OH 生成量做了线性回归分析，结果两者之间有很好的线性关系，进一步表明了该检测方法对于检测气相光催化反应中产生的•OH 有很好的选择性。该方法为气相光催化反应过程中 ROS 的检测提供了新的思路，并且为了解 ROS 在气固界面对污染物降解的作用和光催化降解机制提供了便利。

关键字 气相光催化；气固界面；羟基自由基检测；化学发光

参考文献

1. D.B. Wang, L.X. Zhao, L.H. Guo, H. Zhang, Online Detection of Reactive Oxygen Species in Ultraviolet (UV)-Irradiated Nano-TiO_2 Suspensions by Continuous Flow Chemiluminescence, Anal Chem **2014**, 86: 10535.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

合理设计多功能 MOF 混合基质膜用于四环素的协同传感与去除

熊丽[1,2]、赵利霞*[1,2]、王亚韡[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学中丹学院

四环素（TCs）是一类重要的广谱抗生素，具有抗菌性能好、成本低廉等优点，被广泛应用于医疗健康及畜牧养殖业等领域。然而，过度使用 TCs 也会引发很多环境问题，如污染水源、危害公共健康、催生耐药菌的形成。目前，对四环素的风险管控与污染治理已成为国家高度重视的课题之一。本工作合理设计并制备了一种具有独特中空球壳结构的 Eu-Luminol@ZIF-8（Eu-L/ZIF-8）复合材料，用于 TCs 的协同比率传感与吸附去除。Eu-Luminol 作为 TCs 的荧光响应单元，当存在 TCs 时，Eu^{3+}的红色荧光开启，Luminol 的蓝色荧光淬灭。ZIF-8 作为 TCs 的吸附单元，由于 ZIF-8 独特的中空球壳结构，该复合材料对 TCs 表现出了增强的吸附效果，吸附量高达 833.3 mg g^{-1}，且在较宽的 pH 范围内（pH 4-11）维持吸附量的最大值。吸附行为同时对 TCs 起到了预富集作用，提高了材料周围局部 TCs 浓度，使检测灵敏度进一步提高（检测限低至 5 nM），达到了“1+1＞2”的效果。我们进一步采用相转化法将 Eu-L/ZIF-8 制备成了混合基质膜（MMMs）。基于 Eu-L/ZIF-8 MMMs，设计了一种便携式检测试剂盒，可在 10 min 之内现场测定 TCs 浓度。此外，结合流动式水滤装置，Eu-L/ZIF-8 MMMs 也被成功应用于养殖废水中 TCs 的在线吸附去除，去除效率可达 90%以上。以上结果表明，Eu-L/ZIF-8 MMMs 在 TCs 的便携式检测与去除中具有很大的应用潜力，本工作也为新型多功能材料的设计与污染物的协同检测与去除提供了新的思路与方案。

关键字 四环素；金属-有机骨架；混合基质膜；可视化检测，吸附去除

参考文献

1. F. Ahmadijokani, H. Molavi, S. Tajahmadi, et al., Coordination Chemistry Reviews 464 (2022) 214562.
2. C. Peiris, S.R. Gunatilake, T.E. Mlsna, et al., Bioresource Technology 246 (2017) 150.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

共价有机框架材料作为质谱探针用于复杂样品中痕量污染物的高通量灵敏筛选

黄丽、王茜、黄秀*
四川大学华西公共卫生学院

痕量污染物的检测和分析是环境暴露和健康风险评估领域的重要课题。由于环境样品中有机污染物种类多，浓度低且缺乏合适的分析方法，导致复杂环境介质中污染物的高通量筛查及风险评估方法还有待完善[1]。为了高效地筛选和分析环境介质中痕量的有机污染物，本研究采用芘和偶氮基团修饰的共价有机框架材料（Py-Azo-COF）作为表面增强基质辅助激光解吸飞行时间质谱（SELDI-TOF MS）的质谱探针对复杂环境样品中痕量有机污染物进行高灵敏度和高通量的定性与定量分析。首先，利用透射电子显微镜和红外光谱等技术对 Py-Azo-COF 进行物理和化学结构分析。随后，利用 Py-Azo-COF 作为 SELDI 探针，对实验室加标样品和实际环境样品中的有机污染物进行检测和筛选，通过人工检索和质谱数据库比对的方法进行 SELDI-TOF MS 中目标物检测。研究发现 Py-Azo-COF 具有表面积大、孔隙结构规则和激光吸收及能量传递体系高效等特性[2]，作为 SELDI 探针能同时选择性富集和高通量筛选复杂环境样品中多种痕量有机污染物，包括全氟化合物和溴代阻燃剂等目前重点关注的新型污染物[3]。值得注意的是，该方法的样品前处理简单快速，检测限低至 fg/mL 水平，具有高亲和性、稳定性和较少背景干扰等优势。因此，Py-Azo-COF 作为 SELDI 探针能够选择性富集和高通量筛选复杂环境样品中多种痕量有机污染物，在污染物化学分析和环境监测方面具有广泛的应用前景。

关键字 共价有机框架；痕量有机污染物；高通量筛查；质谱探针

参考文献

1. Kortenkamp, A.; Faust, M. *Science* **2018**, *361* (6399), 224–226.
2. Fu, C.-W.; Lirio, S.; Shih, Y.-H.; Liu, W.-L.; Lin, C.-H.; Huang, H.-Y. *Chem-Eur. J.* **2018**, *24* (38), 9598-9605.
3. Escher, B. I.; Stapleton, H. M.; Schymanski, E. L. *Science* **2020**, *367* (6476), 388–392.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

原位热解质谱法快速分析纳米微塑料

许世缘、张将乐*
成都理工大学

微塑料广泛存在于土壤中，但很难提取，尤其是纳米塑料。使用有机溶剂从土壤中提取微塑料可以忽略微塑料的大小。将传统的浮选法与溶剂萃取法相结合，可以分析大量的土壤样本。Tof 分辨率高，可同时识别多种物质。对于微塑料的分析，Py-MS 检测具有方便快捷的优点。使用电阻加热程序进行温度控制，更容易区分混合微塑料。热分解质谱法可以有效地对微塑料进行定性和定量分析，当 PS 低于 1 μg 时，仍有明显的特征峰。

关键字 微塑料；纳塑料；溶剂提取；热解飞行时间质谱

分会场：22.环境分析与仪器
1128 交流类型：报告

双功能银针敞开源质谱灵敏快速分析 1,2-双(2,4,6-三溴苯氧基)乙烷

高硕、田永*、韩小璇、刘浩楠
青岛理工大学

随着传统溴代阻燃剂（如：多溴联苯醚和六溴环十二烷等）被证实具有持久性、生物蓄积性和高毒性，并被列入《关于持久性有机污染物的斯德哥尔摩公约》在全球范围内禁止生产和使用。1,2-双(2,4,6-三溴苯氧基)乙烷（BTBPE）等未受公约限制并具备高效阻燃性能的阻燃剂，在建材、涂料、合成纤维纺织品、塑料制品、电子电路板和其它电子设备材料中大量使用并呈逐年递增趋势。已有环境研究表明，BTBPE 已成为当前环境介质中检出频率最高的新型溴代阻燃剂之一。

目前，BTBPE 的灵敏快速质谱分析仍然受到电离效率的严重限制。由于分子极性较小，常规质谱电喷雾（ESI）电离源无法实现 BTBPE 电离。同时，由于分子热稳定性较差，大气压化学电离（APCI）、电子轰击电离（EI）和化学电离（CI）等需要加热气化待测组分的电离方式容易造成 BTBPE 热分解，导致其检测灵敏度下降，并且难以获得分子离子或准分子离子。此外，常见的电喷雾解析电离（DESI）和实时直接电离（DART）等敞开式电离方式均不适于 BTBPE 高效电离。因此，开发 BTBPE 高效电离技术，已成为灵敏快速质谱分析该类组分的关键。基于课题组 Ag^+反应电喷雾萃取电离的研究基础，初步测试 Ag^+可与 BTBPE 反应可形成$[BTBPE+Ag]^+$（m/z=788.5 - 802.6）。因此，本研究设计利用银针富集水样品中痕量 BTBPE，再将银针施加高电压并利用甲醇溶液解析，实现 BTBPE 的高效解析和电离。实验结果如附件图 1 所示，水样品中痕量的 BTBPE 经过银针富集解析敞开源质谱分析，可获得较高信噪比的一级、二级质谱信号。该方法有望为环境水样中痕量 BTBPE 的快速、灵敏分析提供可靠技术支持。

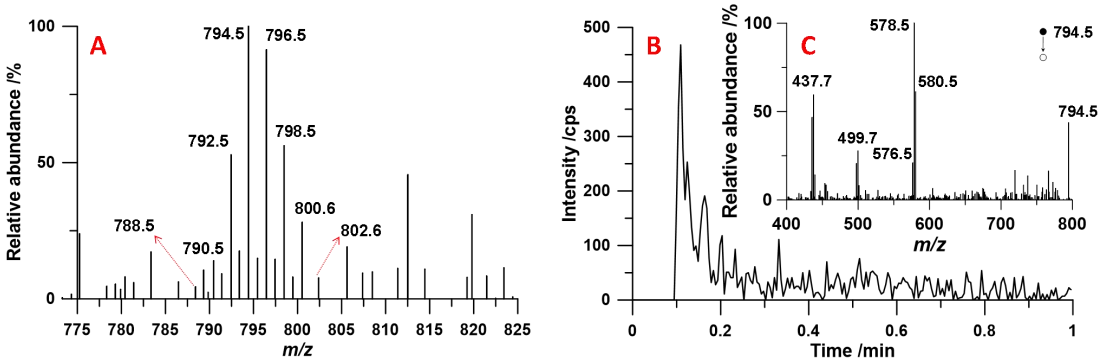


图 1. 银针敞开源质谱分析 BTBPE 一级质谱图（A，cBTBPE=10 ng/mL），银针敞开源质谱分析 BTBPE 串联质谱选择离子流图（B，母离子 m/z=794.5，产物离子 m/z=578.5，cBTBPE=1.0 ng/mL）和二级质谱图（C，cBTBPE=1.0 ng/mL）

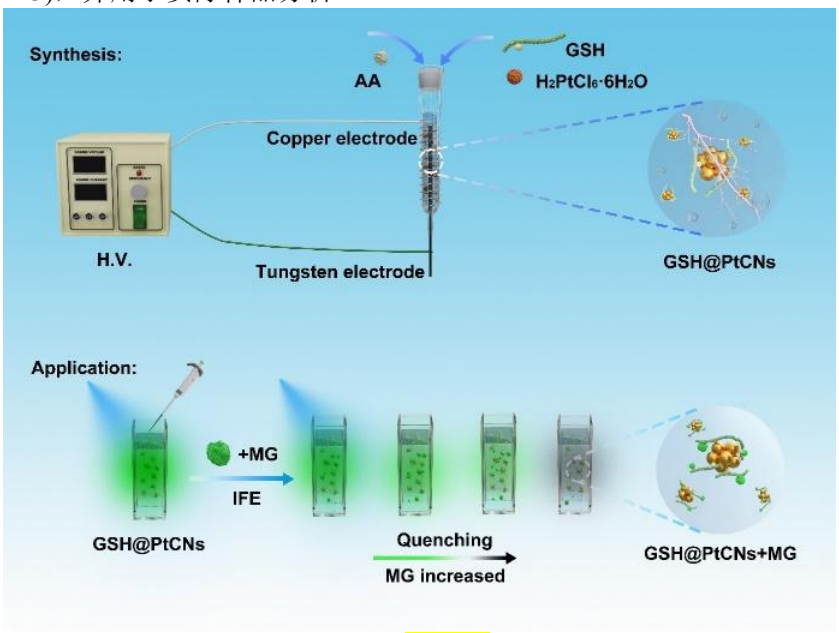
关键字 双功能银针，敞开源，质谱，新型溴代阻燃剂，快速分析

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

介质阻挡放电一步法快速合成铂纳米团簇：孔雀石绿的荧光传感

马冰欣、王博东、李宇琦、蒋连爽、侯贤灯、徐开来*
四川大学

孔雀石绿（MG）作为一种杀菌和杀寄生虫的化学物质，在水产养殖的防治中起着重要作用。然而，孔雀石绿很容易被鱼类吸收，其代谢产物在水产品和水体中长期存在，会对人体产生一系列不良反应。因此，探索一种可靠、灵敏的孔雀石绿检测方法具有重要意义。铂纳米团簇（PtNCs）因其优异的反应活性、光学特性、催化活性、导电性和生物相容性等特点，在化学传感和分析检测领域备受关注。然而，铂纳米团簇的合成过程通常面临着使用潜在有毒的化学试剂、反应时间长、步骤繁琐等局限；而介质阻挡放电（DBD）等离子体作为一种相对较新且前景广阔的反应器，其产生的平均电子能量可打破化学键并将分子激发为原子、离子和自由基，可用于许多纳米材料的绿色合成，具有结构简单、能在室温和大气压下工作、能耗低等优点，为铂纳米簇的合成提供了新的思路。本研究借助介质阻挡放电微等离子体反应器以谷胱甘肽（GSH）为配体，抗坏血酸（AA）为还原剂一步法快速便捷地制备了具有绿色荧光发射的 GSH@PtNCs。基于有效的内滤效应(IFE)，孔雀石绿可以显著地选择性猝灭 GSH@PtNCs 的绿色荧光 。该方法的线性范围为 10—600 μM，检出限为 250 nM (S/N = 3)，并用于实际样品分析。



无图名

关键字 孔雀石绿；荧光传感；铂纳米团簇；介质阻挡放电

参考文献

1. M. S. Gharavi-nakhjavani, A. Niazi, H. Hosseini, M. Aminzare, R. Dizaji, B. Tajdar-oranj and A. Mirza Alizadeh, *Environmental Science and Pollution Research*, **2023**, 30, 48911-48927.
2. Y. Wang, Z. Xiao, X. Feng, S. Shi, D. Liu, R. Li, F. Jiang and J. Liu, *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2024**, 405, 135343.
3. Y. Shen, Y. Zhao, Y. Zhu and J. Wang, *Microchimica Acta*, **2021**, 189, 1-11.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

微塑料介导蚯蚓肠道病原体外溢及环境活性分析

刘轶伦、罗子佩、李永*
中南林业科技大学

微塑料（MPs）在土壤环境中引起了广泛关注，对土壤微生物造成了严重干扰。尽管微塑料具有自生的生物效应或毒性，但它们可以作为微生物载体，促进环境微生物的传播，而详细的传播途径和机制仍不清楚。在本研究中，我们将典型的微塑料（PET 和 PS）暴露于蚯蚓模型中，以研究微塑料载体对肠道菌群的溢出效应。研究验证了蚯蚓能够摄取 PET 和 PS 微塑料，肠道菌群能够在微塑料表面定殖并形成生物膜。值得注意的是，PET 更倾向于吸附球菌，而 PS 则倾向于吸附杆菌。气单胞菌等菌属在 PET 上更为丰富，这是由于 PET 表面较为粗糙，提供了更多的附着点；而 PS 则主要吸附拉乌尔菌等菌属，原因在于其提供了更稳定的 pH 环境。更长时间的蚯蚓肠道环境模拟实验表明，PET-MPs 和 PS-MPs 在细菌粘附、保留和生物膜形成方面存在显著差异。PET-MPs 初期细菌增殖迅速，但长期生存不佳；而 PS-MPs 则提供了更稳定的环境，延长了细菌的存活时间，这可能对生态系统和人类健康构成威胁。所有结果表明，微塑料作为微生物生存和溢出的载体，具有改变土壤微生物动态和促进病原体传播的潜力。本研究提高了对微塑料污染对环境健康影响的认识，这对于后续的微塑料污染控制和修复具有重要意义。

关键字 微塑料，蚯蚓，肠道菌群

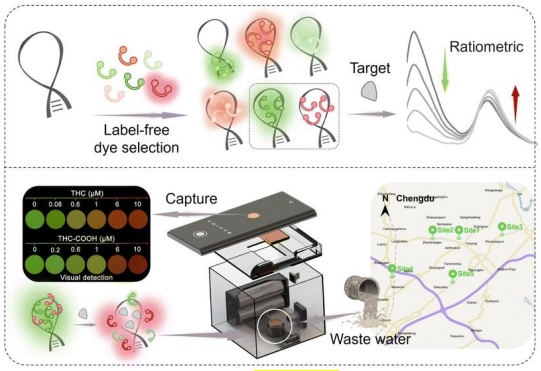
分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

一种简单的适配体荧光传感器用于检测城市污水中的四氢大麻酚及其代谢物

魏颖南、林瑶、郑成斌*
四川大学

监测城市污水中毒品的含量对于了解毒品使用趋势、评估政策效果、制定公共卫生干预措施以及打击犯罪活动具有重要意义。开发一种易于使用和便携式的检测方法可以高效地实现城市污水中毒物及其代谢物现场快速监测，有助于快速评估城市人口中毒物的滥用程度，也能为执法机构提供线索，帮助他们追踪和打击毒品犯罪活动，并及时制定干预措施。大麻是人类最早开始滥用的毒品之一。目前部分国家大麻合法化，且近年来种植大麻的国家数目呈增加趋势，导致大麻流入国内的可能性增加，因此对其的检测十分必要。大麻主要活性成分来自于各类大麻酚类，其中以Δ9-四氢大麻酚(Δ9-THC)为主 1, 2。大量或长期使用大麻，会对人的身体健康造成严重损害 3, 4。

本工作通过染料筛选，得到了免标记的硫黄素 T/甲酚紫/THC 适配体荧光探针（ThT/CV/THC1.2）5，由于目标物与适配体的强结合力，目标物的加入会与染料形成竞争，染料与 THC1.2 结合发生变化。在没有目标物时适配体与染料结合，主要呈现绿色荧光，而暴露于越来越多的靶标后染料脱落，绿色荧光逐渐减弱而红色荧光恢复，以此实现 THC 及其代谢物的可视化检测。该探针简单且成本较低，污水样品通过简单的过滤处理即可使用该探针实现 THC 及其代谢物的检测，整个检测可在四分钟内完成。与复杂的样品预处理和实验室仪器检测相比，本方法构建的免标记比率荧光探针结合便携式分析装置，可快速评估城市污水中大麻的使用趋势。该研究成果为非法滥用药物的现场快速监测提供了新的思路。



无图名

关键字 适配体　免标记荧光传感　便携式分析检测

参考文献

1. Lin, Y. et al., Anal. Chem. **2023**, 95, 7363-7371.
2. Kekedy-Nagy, L. et al., Biosens. Bioelectron. **2023**, 222, 114998.
3. Celia Campos-Manas, M. et al., Water Res. **2022**, 223, 119020.
4. Hall, W. et al., **2009**, 374, 1383-1391.
5. Yu, H. et al., Anal. Chem. **2021**, 93, 3172-3180.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

成都市不同水体中邻苯二甲酸酯赋存现状及暴露风险评估

王茜、黄丽、张遵真、黄秀、张静*
四川大学

鉴于不同水体中邻苯二甲酸酯的来源、主要检出类别及浓度水平均存在显著差异，构建不同水体介质的污染图谱，为水生态保护及人群用水安全精准预防策略制定提供基础数据。本研究分别采集成都市典型城市水体及自来水不同时间和地点的样品，并同时收集市面上最常见的 5 个品牌的饮用瓶装水，经固相萃取（SPE）前处理净化浓缩后，借助气相色谱-串联三重四级杆质谱（GC-MS/MS）准确标定常见的 13 种 PAEs 浓度水平，并以此为依据计算地表水体潜在的生态风险及地表水、自来水和瓶装饮用水的人群暴露风险。三种不同水体中 PAEs 检出率为 100%，且主要优势物质均为 DBP；生态风险评价结果表明 DBP 和 DEHP 对贝类物种的风险不可忽略，DBP 对藻类物种及 DNOP 对贝类物种的风险值得关注；健康风险评价结果可知三种水体通过不同暴露途径对人体的健康风险较低。PAEs 以水体为介质的生态及人群暴露风险均较低，但水环境中的贝类可能受到威胁，需要关注。此外，地表水和自来水中 PAEs 的污染状况均存在时间异质性，进行环境监测过程中应将以时间为干扰因素分层采样应纳入考虑。

关键字 风险评估；邻苯二甲酸酯；健康风险评估

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

小型化热裂解-尖端放电微等离子体碳光发射光谱用于水中微纳米塑料的检测

杨璐吉、杨蕊*
成都理工大学

塑料就像一把双刃剑，它为人类生活带来了诸多便利，但同时也会分解成微塑料和纳米塑料（MNPs），从而对环境和人类健康造成不利影响。尽管人们对 MNPs 的污染评估越来越感兴趣，但由于现有测定 MNPs 的仪器设备昂贵、笨重，完成水样中 MNPs 的现场测定仍然面临挑战。鉴于此，本文提出了将小型化尖端放电微等离子体原子发射光谱仪（μPD-OES）与便携式热解装置联用用于测定水样中 MNPs 含量的简单方法。总有机碳作为 MNPs 的定量指标，经过磺化和芬顿消解，MNPs 等颗粒状非黑碳有机物被去除，只剩下颗粒黑碳（PBC）。MNPs 和 PBC 通过过硫酸钾氧化和芬顿消解后一起收集，MNPs 的值可通过差减法得到。消解后，MNPs 在热解装置中分解生成热解产物，将其吹扫到μPD-OES 中进行测定。在最佳条件下，该方法检出限为 0.43 ~ 8.56 μg C L-1，精密度优于 4.0%。该方法成功用于自来水、河水和海水样品中 MNPs 的检测，结果与商用总有机碳分析仪一致，证实了该方法的灵敏度和准确性。

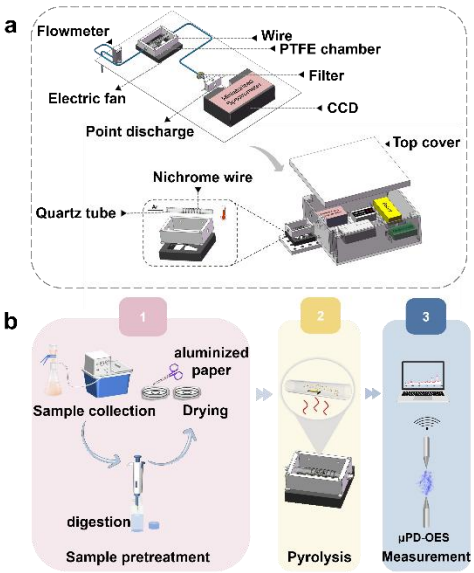


图 1.（a）Pyr-μPD-OES 实验装置图；（b）微纳米塑料样品分析流程图。

关键字 尖端放电微等离子体；小型化；总有机碳；微纳米塑料

参考文献

1. R. Yang, Y. Lin, J. Yang, L. He, Y. Tian, X. Hou, C. Zheng, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 6972–6979.
2. R. Yang, Y. Su, T. Ren, Y. Li, Y. Deng, C. Zheng, *Anal. Chem.*, **2023,** 95, 17238–17245.
3. R. Yang, C. Ye, Y. Su, J. Yang, Q. Liu, C. Zheng, *Talanta*, **2024**, 282, 126974.
4. Y. Hong, J. Oh, I. Lee, C. Fan, S. Y. Pan, M. Jang, Y. K. Park, H. Kim, *Chem. Eng. J.*, **2021,** 423, 130182.
5. P. Li, Y. J. Lai, Q. C. Li, L. J. Dong, Z. Q. Tan, S. J. Yu, Y. S. Chen, V. K. Sharma, J. F. Liu, G. B. Jiang, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 740–747.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

中国茶叶中的增塑剂：分布特征、来源分析及暴露风险评估

潘奕彤、付慧洋、朱青青、廖春阳*、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

随着增塑剂在各类产品中的广泛应用，评估人群接触这些物质的必要性日益凸显。常见增塑剂主要为邻苯二甲酸酯类（phthalates, PAEs），约占全球增塑剂消费的 80%以上。这类化合物常用于改善聚氯乙烯材料的柔韧性，广泛应用于涂料、个人护理产品等领域。然而，PAEs 易释放到环境中，并通过多种途径进入人体，导致生殖毒性、内分泌干扰等健康问题。由于典型 PAEs 已在多个国家及地区受到管制，所以替代型增塑剂（alternative plasticizers, APs）的产量随之增加，但其对人类健康的影响尚未得到充分了解。饮食摄入是接触 PAEs 和 APs 的重要途径。茶作为全球最受欢迎的饮品之一，可能成为增塑剂暴露的重要来源。然而，目前关于中国茶叶中增塑剂污染的研究仍然较为有限。

本研究旨在分析中国茶叶中的增塑剂污染情况，特别是 PAEs 和 APs 的暴露水平。我们对来自中国 18 个省份的 204 个茶样进行了分析，检测了 20 种增塑剂，包括 10 种 PAEs 和 10 种 APs。重点探讨了增塑剂的污染来源，包括农业环境、生产过程和包装材料。研究结果显示，所有茶样中均检测到了 PAEs 和 APs，浓度范围分别为 309 至 8150 ng/g 和 42.2 至 899 ng/g。主要增塑剂为邻苯二甲酸二丁酯（DBP）和邻苯二甲酸二（2-乙基己酯）（DEHP），分别占总浓度的 39.0%和 34.2%。邻苯二甲酸二异丁酯（DiBP）、邻苯二甲酸苄基丁酯（BzBP）和偏苯三酸三辛酯（TOTM）的污染与包装材料密切相关（相关系数：0.414-0.465，$p < 0.01$）。污染水平与茶叶制作工艺的复杂性及经济发展水平呈正相关，而在经济发达地区，PAEs 在增塑剂中的比例更低。因此，本研究为了解中国茶叶中增塑剂的分布及其对人群健康的潜在影响提供了重要数据。

关键字 邻苯二甲酸酯及其替代物，非靶标筛查，茶叶，暴露风险评估

参考文献

1. Shi, S.; Zhang, J.; Gong, J.; Zhao, B., Benefits from disease-burden reduction for type 2 diabetes and obesity through comprehensive regulatory restrictions on phthalate use in China. *One Earth* **2022,** *5* (4), 380-391.
2. Koch, H. M.; Lorber, M.; Christensen, K. L. Y.; Pälmke, C.; Koslitz, S.; Brüning, T., Identifying sources of phthalate exposure with human biomonitoring: Results of a 48h fasting study with urine collection and personal activity patterns. *Int. J. Hyg. Environ. Health* **2013,** *216* (6), 672-681.
3. Morgenstern, R.; Whyatt, R. M.; Insel, B. J.; Calafat, A. M.; Liu, X.; Rauh, V. A.; Herbstman, J.; Bradwin, G.; Factor-Litvak, P., Phthalates and thyroid function in preschool age children: Sex specific associations. *Environ. Int.* **2017,** *106*, 11-18.
4. Ketema, R. M.; Kasper-Sonnenberg, M.; Ait Bamai, Y.; Miyashita, C.; Koch, H. M.; Pälmke, C.; Kishi, R.; Ikeda, A., Exposure Trends to the Non-phthalate Plasticizers DEHTP, DINCH, and DEHA in Children from 2012 to 2017: The Hokkaido Study. *Environ. Sci. Technol.* **2023**, 57 (32), 11926-11936.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

原位-热解质谱法快速分析纳米微塑料

许世缘、张将乐*
成都理工大学

微塑料广泛存在于土壤中，但很难提取，尤其是纳米塑料 1。使用有机溶剂从土壤中提取微塑料可以忽略微塑料的大小。将传统的浮选法与溶剂萃取法相结合，可以分析大量的土壤样本。Tof 分辨率高，可同时识别多种物质。对于微塑料的分析，Py-MS 检测具有方便快捷的优点。使用电阻加热程序进行温度控制，更容易区分混合微塑料。热分解质谱法可以有效地对微塑料进行定性和定量分析，当 PS 低于 1 μg 时，仍有明显的特征峰。有机溶剂溶解微塑料并能用热解质谱法进行快速检测。热解质谱可以对环境中的纳米微塑料进行定性和定量分析。通过程序加热，不同类型的微塑料可依次热解。

关键字 热解质谱，微塑料，新污染物

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

“猕猴桃”型磁-荧光组装体用于超灵敏侧流免疫层析

李大权*
国科大杭州高等研究院

心血管疾病在我国城乡居民死因中高居首位，约合每 7 秒钟就有 1 名心血管疾病患者离世。心血管疾病中，急性心肌梗死（acute myocardial infarction，AMI）是心源性猝死最大的病因，医学研究显示有一半患者因为各种原因错过了急救的最佳时机。针对心梗标志物的传统仪器检测方法，虽具有较高的灵敏度，但需满足专业仪器、技术人员，以及实验室检测场所等要求，因而限制了其现场、即时检测应用。开发快速、高灵敏度以及廉价的检测方法用以分析血清中的心梗标志物对于 AMI 的及时诊断和治疗尤为重要。侧流免疫层析技术（lateral flow immunoassay，LFIA）因其操作简单和结果的即时视觉判读而广泛应用于疾病诊断和家庭自检中。传统的 LFIA 通常基于金纳米粒子作为信号探针，其灵敏度低，只能提供“是/否”的定性结果，难以实现准确的定量分析。因此，增强 LFIA 的分析检测性能，在疾病快速检测领域具有重要意义。本文聚焦 LFIA 灵敏度低的问题，采用空间分层组装策略构筑“猕猴桃”型磁性-荧光双功能纳米微球，解决了传统磁-荧光组装体难以同时实现强磁性和高荧光的难点。通过组装放大、样本预浓缩、降低噪声协同信号放大突破了传统“三明治型”免疫层析由于低浓度分析物响应不灵敏的问题，实现了对血清中 AMI 疾病标志物心肌肌钙蛋白 I（cardiac troponin I，cTnI）的快速、高灵敏检测，灵敏度低至 8.4 pg/mL。该研究成果为血清中低浓度疾病标志物的即时检测提供了新思路。

关键字 侧向流动免疫层析，即时检测，磁-荧光，心肌肌钙蛋白 I

参考文献

1. Daquan Li, Lijiao Ao, Rong Hu, Xueqiang Zhang, Liang Huang, Chenxing Jiang, Guosheng Gao, Zhenlu Shen, Jun Hu, and Jing Wang. *Small* **2024**, *2402676*.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

铁锰矿物微界面有机质转化反应过程与机制研究

方涵*
中国科学院生态环境研究中心

长期以来，腐殖质的概念及腐殖化理论已经在各种文献和教科书中广泛存在，被广大土壤科学工作者认可并沿用至今。但 Johannes Lehmann 等人在 2015 年 Nature 文章中认为这些“腐殖质”还没有被现代分析技术观察到，这种证据的缺乏意味着“腐殖化”越来越受到质疑，提出了土壤连续体模型来否定了腐殖化过程。腐殖化反应（由小分子聚合生成大分子的反应）是否真实存在？引起了学术界的广泛讨论，形成了两大阵营。课题组之前的工作揭示了通过美拉德反应和铁酚反应将简单有机小分子生成复杂有机质的过程和机制。最新的 Nature 文章中也表明 Fe、Mn 矿物能够催化美拉德反应生成稳定大分子，促进有机质长期稳定。但这些模拟实验都存在一个问题，反应物浓度都远高于实际环境中的浓度，在真实环境中能否发生仍存在疑问。

我们基于美拉德反应和酚偶联反应进行开展，通过搭建不同铁锰矿物负载的多孔介质填料柱，开展不同前体小分子在矿物微界面中的反应研究。以二氧化锰矿物，甘氨酸、乙醇醛、葡萄糖等羰基、氨基小分子作为前体物在远低于此前文献报道浓度（100uM）反应 24 小时，反应后样品经固相萃取浓缩除盐后通过 FT-ICR-MS 表征发现发生由小分子聚合生成大分子的反应。

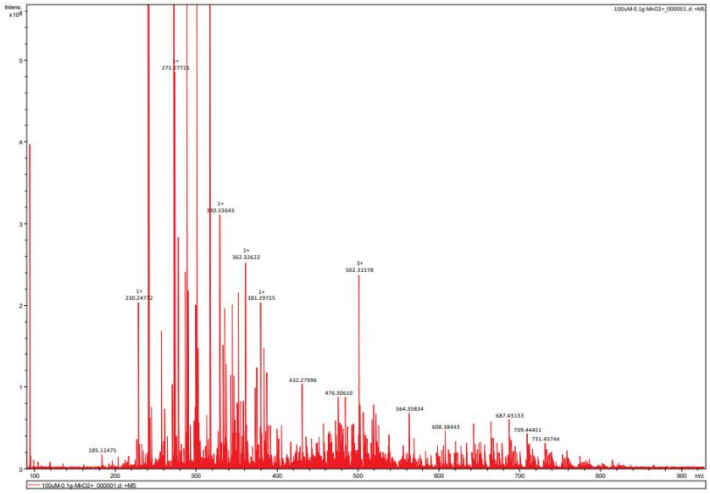


图 1. 甘氨酸与乙醇醛 100uM（V:V=1:1）浓度下 FT-ICR-MS 在正离子模式检测后谱图。

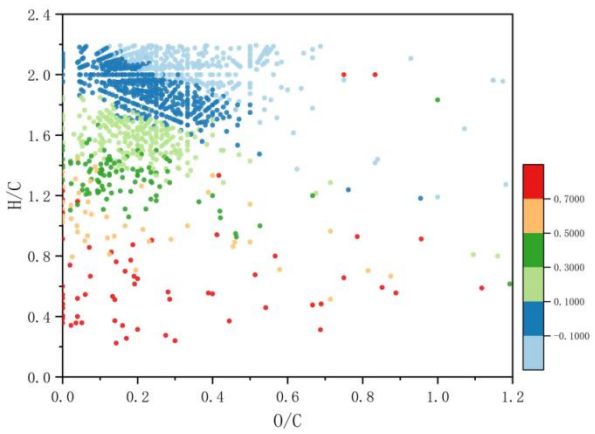


图 2. 甘氨酸与乙醇醛 100uM（V:V=1:1）浓度下 FT-IC。

关键字 美拉德反应，铁锰矿物，腐殖化反应
分会场：22.环境分析与仪器

交流类型：墙报

气候变化背景下黑碳老化毒性的增效机制与人群健康风险

严子栋、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

气候变化导致极端气象事件频发，尤其是热浪高温天气的频率增加，使得大气环境成分和行为变得愈发复杂。在这一背景下，黑碳颗粒在大气中的老化特性与毒性表现出显著变化。黑碳作为一种主要的空气污染物，对气候和人类健康具有重要影响，尤其在高温环境中，其物理化学性质的变化可能会加剧健康风险。为准确评估此变化对人群健康的潜在影响，本研究通过模拟真实大气条件下黑碳的老化过程，探讨其在复杂气候情景下的毒性演变。

本研究利用大气模拟装置再现了现实和极端气候条件下的黑碳老化过程。通过在模拟系统中控制黑碳暴露于不同气候条件下，系统性地观测了其物理化学性质的变化及毒性特征。同时，采用德国 Vitrocell 细胞云暴露装置，以气液界面培养细胞的方式，精准模拟人类呼吸道细胞直接暴露于空气污染物的情况，测量老化后的黑碳颗粒对细胞的氧化应激反应、炎症因子释放及细胞毒性水平。通过多参数指标和暴露实验结果，本研究揭示了不同气候条件下黑碳颗粒老化导致的毒性效应差异。

结果表明，高温高湿条件显著加速了黑碳的物理化学老化过程，表现为表面官能团增多、比表面积增大和氧化特性增强，从而加剧了黑碳颗粒对细胞的毒性作用。与未老化的黑碳相比，老化黑碳颗粒更易诱发细胞的氧化应激和炎症反应，增加了细胞损伤的风险。此外，在当前减排政策背景下，虽然大气中黑碳含量有所降低，但高温条件下其毒性却有加剧的趋势，这种拮抗作用为未来复合污染情景下的健康风险评估提供了新的视角。

本研究为未来大气污染物的健康风险管理提供了科学依据，强调了气候变化背景下进行细致、准确的毒性评价的必要性，对未来环境污染的监管及相关健康防护政策的制定具有一定的指导意义。

关键字 黑碳、毒性老化、极端气候、气液界面细胞暴露、健康风险评估

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

一种基于碘介导的比率荧光试纸用于现场检测 CODMn

刘圆圆、叶斯敏、林瑶、张金懿、郑成斌*
四川大学

众所周知，饮用水中的有机化合物正对人类健康构成严重威胁。而高锰酸盐指数（又称 CODMn），作为水质评估的参数之一，在确定地表水有机物含量方面发挥着至关重要的作用。1 目前用于快速检测 CODMn 的方法包括滴定法、分光光度法和化学发光法。2 受限于实验室分析，部分有机物在样品运输过程中可能会产生降解，从而影响 CODMn 的精确定量。3 因此，急需一种分析方法用于对大量水样进行快速、准确和高效的 CODMn 检测。

为解决这一问题，我们开发了一种基于碘介导的比率荧光法的试纸方法，与无人船采样技术相结合，可在现场对 CODMn 进行比色可视化检测。采用 3D 打印技术，设计了一种基于智能手机的便携式设备，集成了样品预处理和可视化检测单元，操作方便，测定速度快（每个样品 10 分钟）。该传感器灵敏度极高，检测限低至 CODMn = 0.04 mg/L，且可以直观地检测试纸从橙红色到蓝色的明显颜色变化，肉眼可见，无需像滴定法那样需要熟练的操作人员。与标准方法对比，得出的结果证实了试纸法用于测定 CODMn 的准确性。进一步，为了评估其实用性，我们将其与无人船采样技术相结合，分析了几个大型湖泊中 CODMn 的分布情况。卓越的性能和令人满意的结果表明，试纸法在现场 CODMn 分析和大量水质分类方面具有巨大潜力。

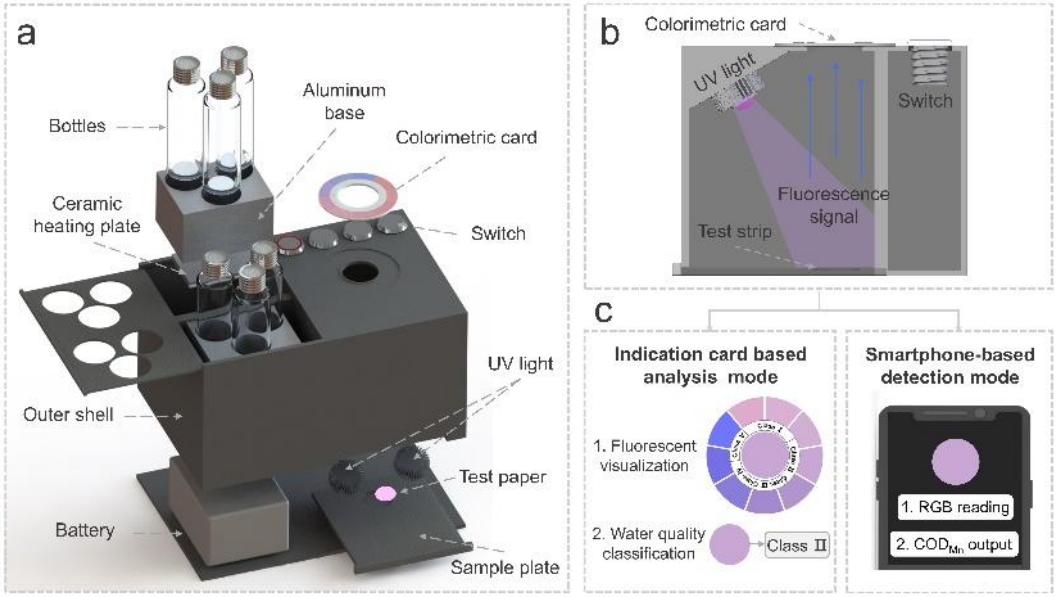


图 1：一种基于比率荧光试纸检测 COD_{Mn} 的便携式装置

关键字 比率荧光试纸 CODMn

参考文献

1. Ruff, M.; Mueller, M. S.; Loos, M.; Singer, H. P. *Water Res*. **2015**, 87, 145-154.
2. Geerdink, R. B.; Sebastiaan van den Hurk, R.; Epema, O. J. *Anal. Chim. Acta* **2017**, *961*, 1-11.
3. Walpen, N.; Lau, M. P.; Fiskal, A.; Getzinger, G. J.; Meyer, S. A.; Nelson, T. F.; Lever, M. A.; Schroth, M. H.; Sander, M. *Environ. Sci. Technol*. **2018**, 52 (19), 11151-11160.

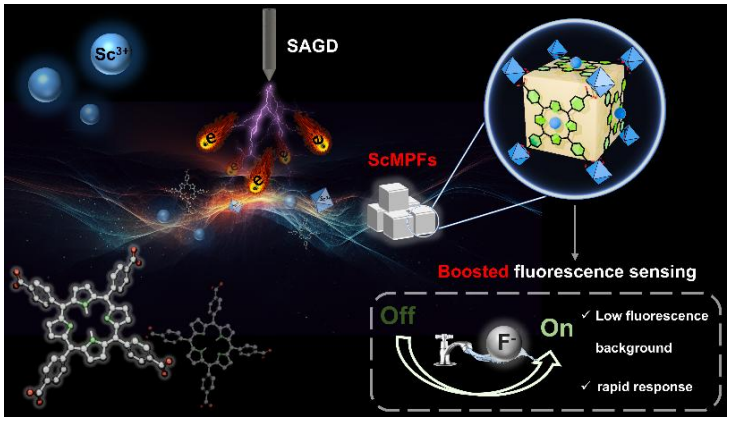
分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

溶液阳极辉光放电合成钪-金属卟啉框架用于增强的 F-传感

张展阔、刘展昕、陈雪杉、张金懿*、郑成斌
四川大学

卟啉及其衍生物因其独特的光电化学性质、在可见光谱中的宽吸收性和优异的对称性，已被广泛应用于金属有机框架（MOFs）的合成。通过改变取代基和选择卟啉环中的中心金属可以便捷的调整卟啉基 MOF 的光学和催化特性。此外，在卟啉环中插入金属还能提供与基质相互作用的路易斯酸位点[1]。通常，金属-金属卟啉框架的制备常利用金属卟啉作为配体或后合成金属修饰。然而，如何直接、快速、高能效地合成卟啉环高度金属化的卟啉基 MOFs 仍然是一项挑战。

近年来，微等离子体被越来越多地用于合成纳米材料。这种策略解决了传统合成的局限性，并可以通过调节参数实现对纳米材料的精确控制[2]。溶液阳极辉光放电（SAGD）是一种典型的冷等离子体，可在室温下促进多种化学反应。通常情况下，金属尖端产生的微等离子体可以稳定存在于金属电极和液体之间，并将生成的自由基和电子注入溶液，从而诱导溶液中的还原反应。金属在构建金属卟啉框架中具有重要意义，因为其适当的离子半径助于与卟啉环平面上的氮原子配位。钪（Sc）具有相对较小的阳离子半径、较强的配位能力和硬路易斯酸性质[3]。它极佳的配位数会提供与底物相互作用的更多结合位点。因此，可以合理地推断，等离子体-液体界面产生的电子可能会加速卟啉框架的形成并促进 Sc^{3+}的环内金属化过程。



本文利用 Sc^{3+}和一种卟啉分子，通过 SAGD 方法成功合成了钪-金属卟啉框架（SAGD-ScMPFs）。SAGD-ScMPFs 具有制备时间短，粒度大，晶体结构优越等特点。实验结果表明，Sc^{3+}既是 ScMPFs 的框架节点，又进入了卟啉环。此外，SAGD-ScMPFs 具有较高的 Sc^{3+}含量和极低的荧光背景。基于此，我们将其用于水中氟离子的灵敏可视化检测，检测限低至 0.24 μM。该方法为高效、快速生产多功能卟啉金属化 MOFs 提供了一条新的合成途径。

关键字 金属有机框架；金属卟啉；等离子体；氟离子

参考文献

1. M. Liu, Y, Chen, X, Huang, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61, e202115308.
2. J. He, X. Jiang, F. Xu, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60, 9984-9989.
3. M. Barsukova, S. Sapchenko, D, Dybtsev et al. *Russ. Chem. Rev.*, **2018**, 87, 1139-1167.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：报告

便携式嗅觉可视化比色传感装置用于禽舍环境多种有害气体的快速识别检测

袁磊、马彤彤、孙裕鑫、黄俏、荣艳娜、应义斌、傅迎春*
浙江大学

研究目的

畜禽生产和养殖过程中会产生多种刺激性有害气体，如挥发性有机物（VOCs）、氨气（NH3）、硫化氢（H2S）、二氧化碳（CO2）及微生物气溶胶等，对畜禽和人体健康构成严重威胁；同时，上述指标作为重要的信息参数反映畜禽舍中空气质量和动物健康/疫病状态。因此，基于多指标协同分析的需求，开发一种便携式有害气体快速识别检测装置，集成三个功能模块：功能化纸基 VOCs 比色传感器芯片、商业化气体传感器及自研的微生物气溶胶采集单元，用于实现禽舍中多种有害气体的分类识别和定量检测。

研究方法

借助激光切割技术和化学染料滴染，制备功能化纸基 VOCs 比色传感器芯片，预筛选的化学染料对不同种类 VOCs 有害气体快速响应，实现对禽舍中多种 VOCs 的有效定性及定量分析检测。装置集成了多种商业气体传感器，开发基于树莓派等智能终端及云共享平台的便携式智能检测系统，实现对多种无机气体的灵敏传感。借助预先制备的磁珠溶液采集微生物气溶胶，特异性吸附目标微生物。

结果与讨论

便携式有害气体快速识别检测装置有效实现三个功能模块的协同工作，实现了对禽舍环境中多种有害气体的分类识别和比色定量检测。功能化纸基 VOCs 比色传感器芯片在混合 VOCs 环境中展现出良好的线性响应，表明其在复杂气体环境中具备稳定准确的检测性能。商业 NH_3、H_2S 和 CO_2 传感器有效集成，增强了装置在多种气体监测中的适用性。微生物气溶胶有效采集，拓展了装置在复杂环境下的功能性及作业能力。便携式有害气体快速识别检测装置的开发，为畜禽安全生产养殖、环境监测、安全防护和公共卫生等应用领域提供了一种高效且灵活的解决方案。



图 1. 便携式有害气体快速识别检测设备示意图。

关键字 便携式检测装置；有害气体；纸基比色传感芯片；协同检测

参考文献

1. Lin Zhang, Li Peng, Yuanchao Lu, Xin Ming, Yuxin Sun, Xiaoyi Xu, Yuxing Xia, Kai Pang, Wenzhang Fang, Zhen Xu, Yibin Ying, Yingjun Liu*, Yingchun Fu* and Chao Gao*. *Nat. Commun.* 2023, 14, 5015.

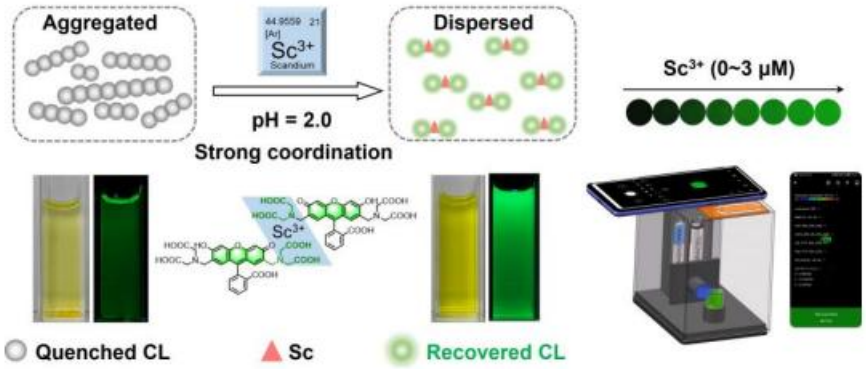
分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

基于强路易斯酸碱配位的便携式荧光仪检测矿石与水中的 Sc3+

陈雪杉、张展阔、张金懿、郑成斌*
四川大学

钪（Sc）、钇和镧系元素被统称为稀土元素，由于物理化学性质相似，这些元素经常分散在相同的矿床或附属矿物中[1]。由于 Sc 具有独特的物化性质，在各个高科技产业中具有很高的应用价值，例如航空航天工业、超导体生产、固体氧化物燃料电池等[2]。同时钪基产品的生产会导致其工业废料排放到环境基质中，从而对人类健康和生态系统产生负面影响[3]。因此对钪元素高灵敏度和高选择性的检测具有重要意义。目前已有多种方法用于定量监测 Sc^{3+}，但是大多都需要实验室大型仪器、繁琐的前处理程序和专业的技术人员，这限制了检测的时效性和快速性。

本工作提出了一种基于主客体强路易斯酸碱相互作用的方法，结合 3D 打印和智能手机设备取色分析，构建了便携式荧光检测仪，实现了 Sc^{3+}高灵敏、高选择性现场检测，为快速有效地保护稀土资源和环境提供新的思路[4]。酸性条件下（pH = 2.0），作为路易斯碱的钙黄绿素（CL）会发生聚集并伴随着荧光的淬灭，Sc^{3+}作为强路易斯酸加入后会阻止这种聚集同时恢复荧光，产生“off-on”的荧光模式（图一）。实验和理论计算结果表明，富羧基位点的 CL 与 Sc^{3+}发生强烈的金属-配体络合，结合比为 2:1，通过 Benesi-Hildebrand 方程计算络合常数为 $2.7 \times 10^4\ M^{-1}$，在最佳实验条件下，基于便携式荧光检测仪的策略对 Sc^{3+}的线性范围为 0.04-2.25 μM，检测限为 20 nM。以实际矿石样品和水样作为检测模型，并与标准方法 ICP-MS/MS 对比，结果具有良好的一致性，这表明便携式传感平台表现出令人满意的性能，能够快速、简便、有效地检测实际样品中的 Sc^{3+}。



图一 检测机理与检测装置示意图

关键字 便携荧光检测；稀土钪离子；路易斯酸碱作用；高选择；高灵敏

参考文献

1. Yuan, Y.; Yang, Y.; Meihaus, K. R.; Zhang, S.; Ge, X.; Zhang, W.; Faller, R.; Long, J. R.; Zhu, G. *Nat. Chem.*, **2023**, 15 (11), 1599-1606.
2. Haque, N.; Hughes, A.; Lim, S.; Vernon, C. *Resources,* **2014**, 3 (4), 614-635.
3. Xu, T.; Zhang, M.; Hu, J.; Li, Z.; Wu, T.; Bao, J.; Wu, S.; Lei, L.; He, D. *Chemosphere*, **2017**, 181, 55-62.
4. Chen, X.; Zhang, Z.; Wu, Y.; Zhou, J.; Wei, Y.; Zhang, J.; Zheng, C. *Anal. Chem.*, **2024**, 96 (11), 4665-4672.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

基于流动液滴的真空紫外光化学反应器用于儿童全血高通量消解

杨晓芳[1,2]、杨嘉慧[1,3]、苏宇彬[1,4]、邓羽蓉[1]、温晓东[2]、郑成斌*[1]
1. 四川大学化学学院
2. 大理大学药学院
3. 四川大学分析与测试中心
4. 西南交通大学化学学院

在通过原子光谱法进行元素分析之前，对有限数量的样品进行高通量消解仍然具有挑战性。在本工作中，一种由插入低压汞灯的石英管组成的新型光化学反应器被用来制造用于少量样品高通量消解的流动液滴光消解（FD-PD）装置（图 1）。在氢化物发生原子荧光光谱法（HG-AFS）进行在线分析之前，泵送 50 μL 含有 20 μL 血液样品、20 μL H2O2 和 10 μL HNO3 的混合物并通过反应器。开发的光化学反应器提供了比传统紫外光化学反应器更高的氧化能力，因为来自低压汞灯的低于 200 nm 的真空紫外线直接照射样品，具有高透射率，允许在 2 分钟内完全消解样品。与传统的消解方法相比，所提出的方法保留了几个独特的优点，即更高的样品通量，更低的样品、强酸和氧化剂消耗，以及更短的消解时间，便于儿童无痛血液分析。在最佳条件下，As 和 Hg 的检出限分别为 0.10 和 0.06 μg L−1，精确度（RSD，n=11，2.0 μg L−1）优于 4%。FD-PD-HG-AFS 的实用性通过检测标准物质（CRMs）以及几个儿童血液样本中的 As 和 Hg 得到了证实，样品加标回收率令人满意（93%-109%）。

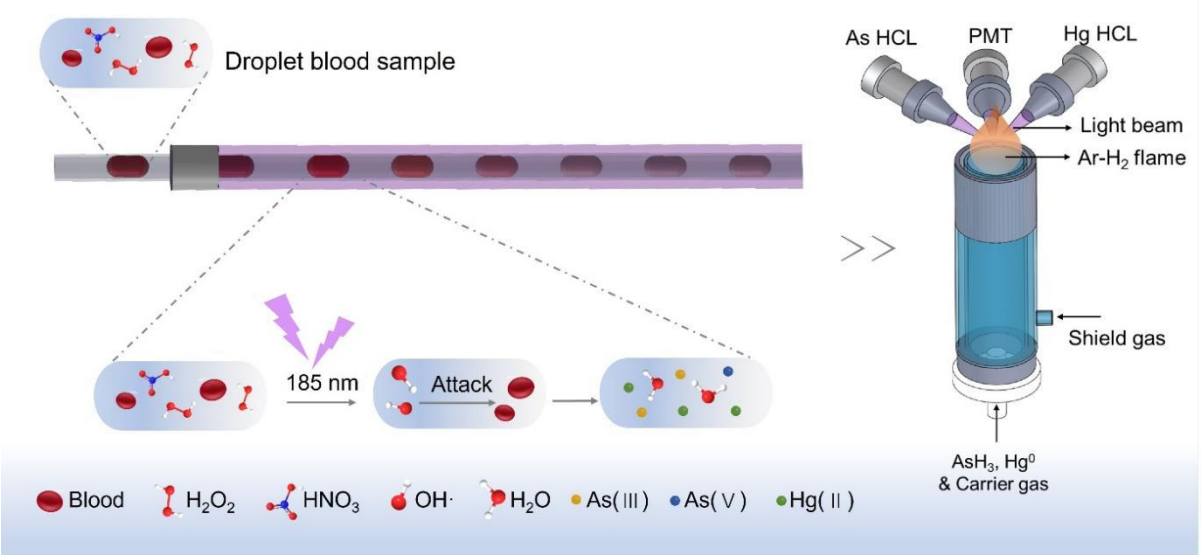


图 1 单液滴全血高通量消解过程示意图

关键字 光化学反应器，消解，高通量，全血

参考文献

1. X. Zhang, X.Y. Jiang, S. Chen, Y.L. Yu, J.H. Wang, *Anal. Chem.*, **2023**, 95 (4), 2375-2381.
2. Y. Luo, Y. Yang, Y. Lin, Y. Tian, L. Wu, L. Yang, X. Hou, C. Zheng, *Anal. Chem.,* **2018,** 90 (3), 1547-1553.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

基于便携式分光光度计的溶解氧在线检测仪

张莹、刘圆圆、郜睿琪、张金懿、郑成斌*
四川大学

如今，微型光谱仪的发展极大地推进了光谱分析技术小型化的进程[1]。便携式光谱分析技术突破了传统实验室大型仪器的局限，能够在野外环境和基础设施有限的地区开展快速检测。这种灵活的优势使其在环境分析领域展现出独特价值,备受科研人员的关注。许多环境指标都需要发展原位实时的监测方法来确保监测结果的真实性和时效性，例如溶解氧（DO）的检测。水体中的 DO 含量可能在极短时间内急剧下降,从鱼类生存的理想水平骤降至致命水平,这一过程有时仅需数小时,甚至可能在几分钟内发生[2]。因此开发能够准确、实时监测水体 DO 含量的技术方法非常具有实际应用价值。

本工作主要提出了一种基于便携式分光光度计的溶解氧在线检测仪，该仪器能用智能手机实时监测水体中的 DO 含量。装置通过微型蠕动泵泵入反应试剂，实现基于碘量法的管道流动反应，将水中的 DO 通过氧化还原反应转化为的 I2，I2 与淀粉溶液形成在 600 nm 处有吸收的蓝色络合物，最后用便携式分光光度计检测流动比色皿中的溶液在 600 nm 处的吸光度来定量 DO。此外，还设计了一款可以直接读取 DO 浓度的手机 APP，这让检测过程更加方便、快捷。以上这些功能全部集成在一个 3D 打印的便携装置（尺寸：262 mm×196 mm×146 mm）中，用较低的成本实现了溶解氧的原位在线检测。

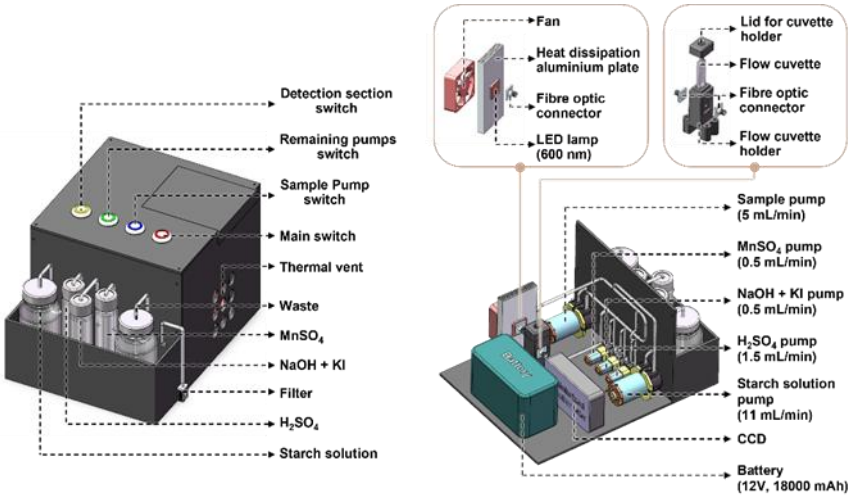


图 1 装置示意图

关键字 便携式分光光度计、在线检测、溶解氧

参考文献

1. Z. Yang, T. Albrow-Owen, W. Cai, T. Hasan, *Science*, **2021,** *371* (6528), eabe0722.
2. Y. Wei, Y. Jiao, D. An, D. Li, W. Li, Q. Wei, *Sensors*, **2019**, *19*, 3995

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

超高效液相色谱-串联质谱法测定热塑性聚合物(PC/ABS)中 5 种双酚类化合物

韩卓[1,2]、张雨竹[1]、魏晓菲[1,2]、李彭辉[2]、宋善军*[1]
1. 中国计量科学研究院
2. 天津理工大学环境科学与安全工程学院

热塑性聚合物是重要的高分子材料，其中聚碳酸酯（Polycarbonate，PC）和丙烯腈-丁二烯-苯乙烯塑料（acrylonitrile-butadiene-styrene，ABS）凭借优异的性能，得到了广泛应用[1]。其中的添加剂，双酚类化合物（Bisphenols，BPs）是典型的内分泌干扰物，对生态环境和人体健康产生不良影响[2]。热塑性聚合物中 BPs 的浓度水平检测可为其健康效应研究提供基础数据支撑。

为了准确检测热塑性聚合物中的 BPs，本研究基于液相色谱-串联质谱（Liquid chromatography-tandem mass spectrometry，LC-MS/MS）建立了热塑性聚合物（PC/ABS）中 5 种双酚类物质（双酚 S、双酚 F、双酚 A、双酚 B、双酚 AF）的测定方法。其中，PC/ABS 样品用四氢呋喃超声萃取，萃取液经甲醇-水（1：1，V:V）混合液稀释定容后离心，取上清液过 0.22 μm 玻璃纤维滤膜，采用 Luna Omega C18 色谱柱（50 mm × 2.1 mm，1.6 μm）进行分离，甲醇和水流动相梯度洗脱，并采用质谱在负离子扫描模式下进行多反应监测模式实现定性定量分析。5 种双酚类物质在 6 min 内可完成分离，线性关系良好，相关系数 R2 均大于 0.99，检出限为 0.001-0.098 μg/kg，定量限为 0.002-0.327 μg/kg，该方法成功应用于 PC/ABS 样品中 5 种 PBs 的测定。结果表明，在 PC/ABS 样品中均检出了双酚 S、双酚 F、双酚 A、双酚 B 和双酚 AF，平均质量浓度分别为 30.36mg/kg、33.28 mg/kg、37.20 mg/kg、22.32 mg/kg 和 16.35 mg/kg。相对标准偏差（n=3）为 0.7%-9.3%，加标回收率为 64.2%-106.4%，具有良好的稳定性和重复性。该法操作较简便、灵敏度高，可为热塑性聚合物其制品中双酚类物质的风险监测提供技术支持。

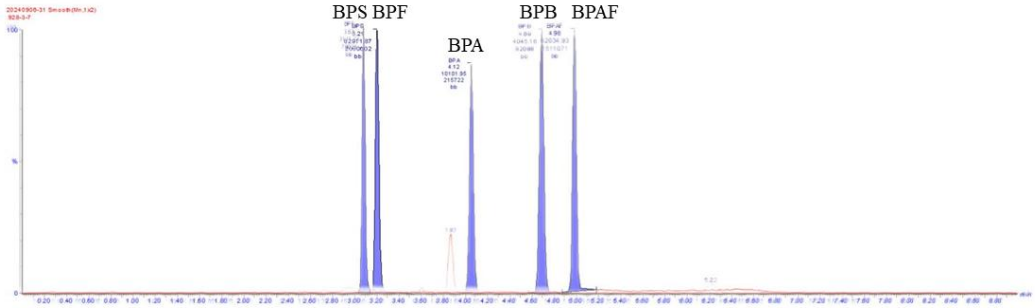


图 1：样品中 5 种 BPs 色谱图

关键字 热塑性聚合物；双酚类化合物；液相色谱-串联质谱

参考文献

[1] 李连荣,郑晓茜,刘永超,等.PC/ABS 共混材料的制备及性能研究[J].塑料科技,2024,52(08):24-27.
[2] 薛钰凡,商婷,崔君涛,等.固相支撑液液萃取-液相色谱-串联质谱测定尿液中 10 种双酚类化合物和 5 种对羟基苯甲酸酯[J].色谱,2024,42(09):827-836.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

m6A 结合蛋白 YTHDF2 的液液相分离在砷诱导皮肤细胞恶性转化中的作用及机制探究

赵田禾*
四川大学

目的：本研究旨在探讨 N6-甲基腺苷（m6A）结合蛋白 YTHDF2 的相分离在砷诱导皮肤细胞恶性转化中的作用及其潜在机制。

方法：通过构建突变低复杂度结构域的 YTHDF2 表达模型，建立干预 YTHDF2 蛋白相分离的皮肤细胞模型，并与表达野生型 YTHDF2 的模型进行比较。将细胞处理 1 μM 砷，采用激光扫描共聚焦显微镜进行荧光漂白恢复实验（FRAP）及免疫荧光检测。此外，利用集落形成、克隆形成及 MTT 实验评估砷处理后细胞的增殖及克隆形成能力，并通过 Co-IP-MS 分析筛选与 YTHDF2 结合的蛋白。

结果：免疫荧光结果显示，在 1 μM 砷处理 HaCaT 细胞 4 周后，内源性 YTHDF2 蛋白出现液滴样聚集，且随着处理时间延长，液滴数量显著增加。尤其在 22 周的处理后，细胞内 YTHDF2 液滴明显增多。表明在砷处理的 4、8 及 22 周中，表达野生型 YTHDF2 的细胞内液滴数量及荧光强度均逐渐增强，而表达突变型 YTHDF2 的细胞则未观察到液滴形成。进一步的增殖和克隆形成实验表明，表达野生型 YTHDF2 的 HaCaT 细胞（DF2-wt）在 22 周后表现出显著增强的增殖和存活能力，而表达突变型 YTHDF2 的细胞（DF2-mut）未见明显变化。免疫荧光分析表明，砷诱导的恶性转化皮肤细胞中，YTHDF2 与由生物大分子相分离驱动的应激颗粒标志蛋白 G3BP1 共定位，且 G3BP1 阳性颗粒的细胞数量随时间增加。通过 Co-IP-MS 检测并进行 GO 分析，发现砷诱导细胞恶性转化过程中，YTHDF2 结合的蛋白调控翻译起始和应激颗粒组装等生物学过程。关键蛋白筛选结果显示，真核翻译起始因子 2α（eIF2α，基因为 EIF2S1）及其磷酸化激酶 EIF2AK1 与 YTHDF2 的结合能力在砷诱导的细胞中显著增强，且 EIF2AK1 与 YTHDF2 的结合在不同处理组间差异显著。Co-IP 结合 Western blot 验证了砷诱导的恶性转化皮肤细胞中，YTHDF2 与 EIF2AK1 及磷酸化的 eIF2α（Ser51）结合能力较对照组显著增强。

结论：在砷诱导的皮肤细胞恶性转化过程中，野生型 YTHDF2 蛋白发生相分离，而突变型 YTHDF2 则无法实现相分离。YTHDF2 的相分离可能促进砷诱导的恶性表型形成，且 YTHDF2 可能通过调控翻译过程发挥作用，而 EIF2AK1 可能是其影响翻译的重要调节因子。

关键字 m6A；YTHDF2；相分离；恶性转化；砷

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

双酚类新污染物 BPS 诱导小鼠肝脏炎症及脂质代谢紊乱研究

王裕田、刘涵、维丽斯、戚瑞麟、许静、李玉苗、周子怡、唐志*
广东医科大学

目的：双酚 S（Bisphenol S, BPS）作为双酚 A（Bisphenol A, BPA）的新型替代品，具有与内源性激素相似的结构骨架，其人体暴露可能干扰机体的内分泌稳态[1]。已有部分研究证实[2-3]，BPS 暴露与肝脏脂质代谢紊乱有关。本研究基于 BPS 暴露的小鼠模型，采用非靶向代谢组学方法探讨双酚类新污染物 BPS 暴露对肝脏损伤及脂质代谢的影响，以期为双酚类物质的安全评价提供科学依据。材料与方法：将 30 只 C57BL/6J 小鼠随机分为三组：对照组（CON），低剂量 BPS 组（BPS-L）（0.05 mg/kg/day）和高剂量 BPS 组（BPS-H）（5.0 mg/kg/day），每组 10 只小鼠，对照组给予等量溶媒。实验期间，小鼠每天称重一次，28 天后收集肝脏组织及血清样本，并检测各项相关指标。通过组织病理学染色、qRT-PCR、ELISA、GC-MS 等多种实验方法，检测各组小鼠肝脏的组织学特征、炎症浸润、基因表达情况及代谢组的变化。结果：BPS 暴露导致肝功能受损，肝脏组织结构的完整性被破坏，并产生大量炎症因子，呈现肝脏组织炎症性病变。同时，代谢组学分析发现不饱和脂肪酸代谢通路显著富集，肝脏脂质合成相关基因 Acacb，Srebf-1，Cebpa 的表达水平显著改变。结论：BPS 暴露导致小鼠肝功能受损，肝脏发生炎症性病变。BPS 暴露诱导肝脏脂质代谢紊乱，与脂质合成相关基因的异常表达有关。

关键字 双酚 S（Bisphenol S），肝脏损伤，脂质代谢紊乱，代谢组学

参考文献

1. Rochester J R, Bolden A L. Bisphenol S and F: A Systematic Review and Comparison of the Hormonal Activity of Bisphenol A Substitutes[J]. Environ. *Health Perspect*. 2015, 123(7):643–650.
2. Pu C, Liu Y, Zhu J, Ma J, Cui M, Mehdi OM, Wang B, Wang A, Zhang C. Mechanisms insights into bisphenol S-induced oxidative stress, lipid metabolism disruption, and autophagy dysfunction in freshwater crayfish[J]. *J. Hazard. Mater.* 2024, 479:135704.
3. Lin Y, Ding D, Huang Q, Liu Q, Lu H, Lu Y, Chi Y, Sun X, Ye G, Zhu H, Wei J, Dong S. Downregulation of miR-192 causes hepatic steatosis and lipid accumulation by inducing SREBF1: Novel mechanism for bisphenol A-triggered non-alcoholic fatty liver disease[J]. *Biochim. Biophys. Acta. Mol. Cell Biol. Lipids.* 2017, 1862(9):869–882.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

职业暴露工人血液中镉的暴露水平、分布特征及结合蛋白鉴定

苑敏、刘丽红、何滨、胡立刚*
中国科学院生态环境研究中心

镉(Cd)是与全球公共卫生相关的最令人关注的化学品之一 1。长期接触会损害免疫系统、泌尿系统、神经系统和生殖系统，并与某些类型癌症的发生有关 2。镉(Cd)在血液中的半衰期约为 3-4 个月，比在人体器官中的半衰期 30 年短得多。血液是促进外源性环境污染物运输到这些靶器官的主要运输介质。血液中的镉水平是人类潜在健康风险的重要指标。然而，血液并不是 Cd 的主要毒性靶点。大多数 Cd 通过血液循环在组织和器官中代谢，最终排出体外。促进血液中 Cd 的清除是减少体内 Cd 负担的关键一步。然而，目前还没有有效的方法来促进这一进程。在本研究中，我们旨在利用职业环境中镉暴露工人的血液样本，探讨镉在血液成分中的分布及其与主要结合蛋白的相互作用机制。我们试图确定血液中调节 Cd 代谢的关键因素。通过研究血液中镉代谢的调控因素，我们希望为及时清除人体中的镉提供一种潜在的策略

我们利用来自铅锌矿区 301 份职业暴露工人和 6 例慢性 Cd 中毒病人的血液样品，利用 ICP-MS 测定了 Cd 在血液各组分的含量。结果发现血液中几乎所有(>98%)的 Cd 都集中在职业暴露工人和中毒病人的血细胞中。血红蛋白(Hb)被确定为这些细胞中主要的 Cd 结合蛋白。进一步的研究表明，pH 是血液代谢过程的关键调节因子，在改变 Cd 与 Hb 的结合能力方面起着至关重要的作用。我们从紫外光谱和等温滴定的结果观察到，随着 pH 的降低，Cd 在 Hb 上的结合能力和可用结合位点的数量显著减少。血细胞实验证实，较低的 pH 值可以促进 Cd 从血细胞中释放，促进其转移到血清中。这些发现表明，控制血液 pH 值可以提高体内 Cd 排泄率，为减少 Cd 负担提供了一种潜在的策略。

关键字 血镉;血红蛋白;亲和力;pH 值的依赖;排泄

参考文献

1. Human health effects of benzene, arsenic, cadmium, nickel, lead and mercury: report of an expert consultation. WHO 2024.
2. Filippini, T.; Wise, L. A.; Vinceti, M., Cadmium exposure and risk of diabetes and prediabetes: A systematic review and dose-response meta-analysis. Environment International 2022, 158

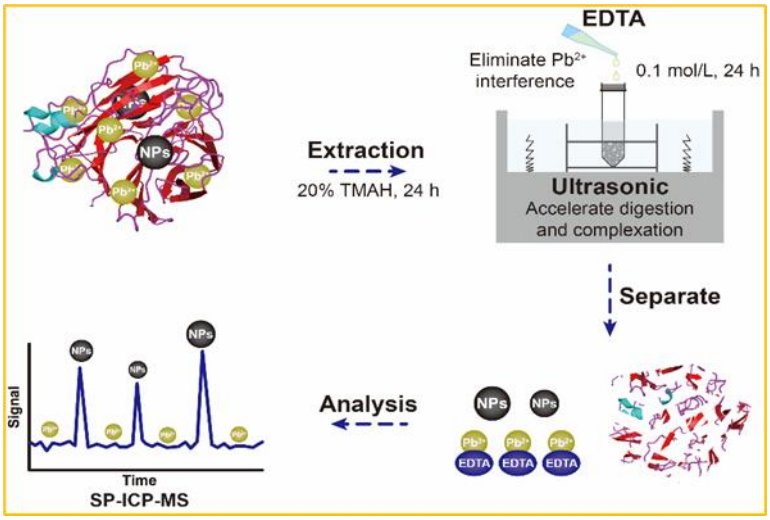
分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

复杂基质中痕量含铅纳米颗粒提取分析方法的建立

周钦飞、刘丽红、何滨、胡立刚*、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

铅（Pb）是一种具有高生物累积性的有毒重金属 1。已被国际癌症研究机构 （IARC） 归类为人类 II 类致癌物，被世界卫生组织列为十大危害公共卫生安全的化学物质之一，其毒性程度取决于暴露浓度和赋存形态。长期以来，关于环境介质和生物体中铅的研究大多集中在总量水平，而对含铅纳米颗粒（Pb-NPs）在环境中的分布及其在生物体的传输赋存研究较少。主要原因是生物样体中 Pb 金属形态多样、生物基质复杂，Pb-NPs 的含量很低，提取分离检测非常困难，同时存在离子和生物基质的干扰。目前，四甲基氢氧化铵（TMAH）的提取方法和单颗粒电感耦合等离子体质谱法（SP-ICP-MS）被应用于生物样品中金属纳米颗粒的分析 2。本研究考察了 TMAH 提取方法中不同生物基质对 Pb-NPs 的干扰效应，提出了 Pb-NPs 提取的最优策略，并建立了复杂生物基质中 Pb-NPs 的分析方法。

研究发现，传统 TMAH 提取方法中，Pb2+与多种生物基质中（脑、肝、肠等）会产生假阳性颗粒干扰信号。通过添加 EDTA 和超声辅助的策略消除了产生的干扰信号，并确定了 EDTA（0.1 mol/L，24h）最佳提取方法参数。此外用 PbS -NPs 加标回收证明了方法的可行性和准确性，方法回收率为 93%±2.4%。基于上述优化的前处理方法和 SP-ICP-MS 技术建立了 Pb-NPs 的分析方法，并成功应用于发电厂区域生物组织中 Pb-NPs 的研究。在发电厂附近 2 只狗的胃（N1：52±24 nm，N2：34±12 nm）、肠道（N1：34±6 nm，N2：34±6 nm）和肝脏（N1：35±6 nm）中检出 Pb-NPs，其他组织（肺、肾、脑等）没有检出。结合高分辨率透射电子显微镜和能量色散光谱（HRTEM-EDS）肝组织中 Pb-NPs 被鉴定为 PbSO4 颗粒。最后，根据颗粒和总量的结果，推测 Pb-NPs 是外源颗粒通过经口摄入进入生物组织的。上述研究为生物样品中 Pb-NPs 的赋存、传输、健康风险等相关研究提供了可靠、准确的分析方法基础。



关键字 Pb-NPs；离子干扰；EDTA；SP-ICP-MS

参考文献

[1] Lee Haena, Lee Mark W, et al. Childhood lead exposure is associated with lower cognitive functioning at older ages[J]. Science Advances, 2022, 8(45).
[2] Zhou Qinfei, Hu Ligang, et al. Determination and characterization of metal nanoparticles in clams and oysters[J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2020, 198.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

汉江水体中微塑料的组成与分布

张硕、陈天宇、黎娟、吕继涛、王亚韡*
中科院生态环境研究中心

环境中的塑料随着其不断老化和破碎，进而演变成为微塑料。微塑料具有粒径小、比表面积大的特点，可以吸附环境中的污染物，并且其本身成分可能存在毒性，可对生物体造成潜在危害。河流作为内陆微塑料进入海洋的重要途径，其微塑料污染问题也受到广泛关注，为了解汉江地表水微塑料的污染程度和分布特征，以汉江（湖北段）干流的 18 个监测断面水样为研究对象，调查了其微塑料的丰度、分布以及组成特征。结果表明：①汉江（湖北段）表层水体微塑料的丰度为 0~（6000±2828.43）$n \cdot m^{-3}$，平均丰度为 1952.38±1359.27 $n \cdot m^{-3}$。②汉江（湖北段）表层水体中微塑料粒径主要分布在[1.0，2.0)mm，占比为 36.6%。③汉江（湖北段）表层水体中观测到的微塑料以纤维为主，占比为 80.5%；颜色主要为黑色。④汉江（湖北段）表层水体中微塑料共检出 11 种塑料材质，丰度最高的前 3 种微塑料聚合物类型为聚苯乙烯、聚对苯二甲酸丁二酯和聚丙烯。上述结果为进一步摸清湖北地表水中微塑料的污染底数与风险评估提供了基础支撑。

关键字 微塑料，汉江，组成，分布

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

粪便中幽门螺杆菌的比色生物传感检测方法

方蓉、黄秀*
四川大学华西公共卫生学院

目的：幽门螺杆菌与慢性胃炎、消化性溃疡、胃癌等胃部疾病的发生密切相关，及早检测幽门螺杆菌感染并进行治疗可以有效降低幽门螺杆菌所致相关疾患对人体造成的损害，保护人群健康。本研究旨在建立粪便中幽门螺杆菌的比色生物传感检测法，为检测幽门螺杆菌感染情况提供新的方式。

方法：使用柠檬酸钠还原法制备纳米金颗粒，通过紫外-可见分光光度法和透射电子显微镜对纳米金颗粒进行表征。利用寡核苷酸探针与纳米金颗粒偶联，功能化纳米金颗粒。将偶联纳米金颗粒的寡核苷酸探针与幽门螺杆菌特异性适配体结合，用于粪便样品检测，并通过肉眼观察溶液颜色变化（红色或紫色的变化）实现对粪便样品中幽门螺杆菌的定性检测，进一步通过紫外光谱法实现对其定量检测。通过对其他细菌（大肠杆菌、金黄色葡萄球菌、铜绿假单胞菌、单增李斯特菌和鼠伤寒沙门氏菌等）的检测对比，利用分光光度计测量吸光度值评估检测方法的特异性。

结果：对纳米金颗粒进行表征显示其呈椭圆形，尺寸均匀，分离良好。将纳米金颗粒溶液与粪便混合观察显示，在无幽门螺杆菌存在时，纳米金颗粒呈现聚集状态，溶液呈紫红色，在幽门螺杆菌存在时，适配体与细菌结合导致探针脱落，纳米金颗粒呈现“解聚”状态，溶液颜色由紫红色变为深红色。该方法的检测限为 25 CFU / m L (S / N = 3)，具有较高的灵敏度，与检测其他细菌对比显示方法具有较高的特异度以及良好的重现性。

结论：本研究开发的比色生物传感方法可基于颜色变化而识别粪便中幽门螺杆菌，并且在与其他细菌检测对比中表现出高选择性，具有检测速度快、成本低、不受检测对象限制等优势，未来有望成为一种临床使用的幽门螺杆菌检测方法。

关键字 生物传感器；纳米金颗粒；比色传感方法；适配体；幽门螺杆菌

参考文献

1. FEI Y, FANG R, XIAO L, et al. The development of a colorimetric biosensing assay for the detection of Helicobacter pylori in feces [J]. Anal Biochem, 2022, 651:114737.
2. OCSOY I, YUSUFBEYOGLU S, YıLMAZ V, et al. DNA aptamer functionalized gold nanostructures for molecular recognition and photothermal inactivation of methicillin-Resistant Staphylococcus aureus [J]. Colloids Surf B Biointerfaces, 2017, 159: 16-22.
3. ZHAO W, BROOK M A, LI Y. Design of gold nanoparticle-based colorimetric biosensing assays [J]. Chembiochem, 2008, 9(15): 2363-2371.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

含钛纳米颗粒二维同位素指纹溯源方法开发及环境应用

燕少玮[1,2]、杨学志[1,3]、刘倩*[1,2]、江桂斌[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学资源与环境学院
3. 国科大杭州高等研究院环境学院

纳米二氧化钛是使用量最大的纳米材料之一，但其安全性问题仍然存在很大争议。二氧化钛用途广泛且释放途径众多，如建筑立面涂层风化、食品添加、个人护理品使用、纺织品洗涤、可生物降解塑料降解、污水处理厂排放等过程均会导致其进入大气、地表水体、沉积物、土壤等环境介质中，造成了不容忽视的环境与健康风险。

然而，环境介质中天然源含钛纳米颗粒的丰度很高，这对人为源工程纳米颗粒的识别与定量造成了很大困难。前人在区分工程与天然纳米颗粒的方向上做出了许多尝试，结果显示，采用总钛含量、粒径、形态、晶体结构等指标以及单颗粒 ICP-MS 技术手段，均无法有效甄别含钛纳米颗粒的来源。

因此，本研究拟开发基于同位素指纹的工程与天然纳米颗粒来源甄别方法。首先建立分析方法，包括钛元素的分离纯化方法、基于 MC-ICP-MS 的钛同位素比值高精度分析方法；其次，采集不同来源的二氧化钛工程纳米颗粒、含钛天然纳米颗粒，测量其钛、氧同位素比值，建立二维同位素指纹信息库，探讨自然转化及人工合成过程中的同位素分馏行为；最后，基于钛—氧二维同位素指纹信息库建立合适的机器学习模型，实现基于同位素指纹的含钛纳米颗粒的来源甄别方法，并应用于实际环境及生物体系中痕量含钛纳米颗粒的来源判断。本方法可以对二氧化钛纳米材料的环境与健康风险进行评估，为其安全性评价及污染控制提供方法学支撑。

关键字 稳定同位素比值；二氧化钛；工程纳米颗粒；溯源

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

基于磁性纳米复合基底的外磁场调控 SERS 热点研究

张艺严、孙振丽*
华北电力大学

表面增强拉曼散射（SERS）作为环境分析领域一项极具潜力且备受关注的技术，可以在极低浓度下检测和识别环境污染物，但面临着信号可重复性和灵敏度等挑战。通过引入外磁场，可以动态调控磁性纳米复合材料的SERS“热点”，即调节金属纳米粒子之间的电磁场效应，这对于增强SERS信号至关重要。本研究使用 4-巯基吡啶（4-MPY）修饰的 Fe_3O_4@SiO_2@Au 磁性纳米复合基底（FA-4MPY），研究施加外部磁场对 FA-4MPY 基底的热点调控作用。结果表明，在外磁场作用下，4-MPY 的 SERS 信号强度提升 30 倍，增强因子（EF）提高了 8-39 倍，且信号均匀性显著改善，EF 的相对标准偏差从 59.15%–9.44%降至 28.70%–1.14%。通过系统研究外部磁场强度、热点密度和探针分子密度对 EF 的影响，构建了高灵敏的磁性 SERS 分析方法。有限元 COMSOL 模拟结果显示，80 mT 至 120 mT 的外加磁场最有利于 FA-4MPY 纳米复合材料的高效热点形成。研究结果为磁性 SERS 基底热点调控及高灵敏分析提供了理论基础，提高了 SERS 技术在环境监测中的应用潜力，也为未来环境污染治理提供了新的技术手段和理论支持。

关键字 表面增强拉曼散射；磁场；热点；局部表面等离子共振

参考文献

1. Z. Sun, N. Wang, Y. Zhang, X. Ji, Z. Hong, D. Xie, W. Zhang, W. Liu, J. Du *, *J. Mater. Chem. A*, **2024**, 12, 17151-17157.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

基于柔性可穿戴传感器的大气污染个体暴露监测系统的研究与应用

龙才成[2]、刘倩*[1]、江桂斌[1]
1. 中国科学院生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室
2. 湘潭大学

大气污染既是环境问题，也是与民众生活息息相关的民生问题。大气污染的暴露评估是开展大气污染对人群健康影响研究的必要环节，也是厘清我国不同人群暴露水平与健康风险评估的关键基础。传统大气污染物个体暴露评价主要依赖于个体活动区域内固定站点污染物浓度的监测，然而固定点监测的浓度在反映个体真实环境下的暴露情况存在一定的局限性，往往环境监测点的浓度水平和实际活动过程的个体暴露水平因人口和地点的原因会存在一定的差异，直接利用环境监测站点的污染浓度数据进行个体暴露评估，其结论在一定程度上尚不足以描述真实环境下大气污染物健康效应的真实情况。现有的研究方法主要通过动物或细胞实验进行短期高剂量暴露的毒理学实验，其结论机制推至人体的长期低剂量暴露时存在较大的不确定性。目前，缺乏有效的个体评估技术是探究真实环境下大气污染健康危害的瓶颈之一。具有便携性和非侵入性的柔性可穿戴传感技术有望为突破这一瓶颈提供有力工具，通过合理的设计能有效克服目前真实环境下大气污染个体暴露监测中存在的局限。本研究将柔性可穿戴传感技术与大气污染暴露监测相结合，研制具有气态污染物和汗液生物标志物同步实时在线监测的大气污染个体暴露监测系统，建立基于柔性可穿戴传感技术的大气污染诱导健康效应的个体监测方法，探索真实环境下大气污染物个体暴露的早期生物学效应，揭示个体暴露污染物与健康效应的因果关联与量效关系，为大气污染对我国人群的健康危害效应的精准评价和防控提供科学依据。

关键字 大气污染；个体暴露；健康效应；柔性可穿戴传感器

参考文献

S. Rajagopalan, P. J. Landrigan, *New Engl.. J. Med.*, 2021, 385:1881-1892.

Y. Tian, H. Liu, Y. Wu, Y. Si, J. Song, Y. Cao, Y. Hu, *BMJ*, 2019: 367.

W. Gao, S. Emaminejad, H. Y. Y. Nyein, S. Challa, K. Chen, A. Peck, A. Javey, *Nature*, 2016, 529: 509-514.

J. R. Sempionatto, J. A. Lasalde-Ramírez, K. Mahato, J. Wang, W. Gao, *Nat. Rev. Chem.*, 2022, 6: 1-17.

H.C. Ates, P.Q. L. NguyenGonzalez-Macia, E. Morales-Narváez, F. Güder, J. J. Collins, C. Dincer, *Nat. Rev. Chem.*, 2022: 7, 887-907.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

高效液相色谱-电感耦合等离子体质谱法测定松针中的十溴二苯醚和十溴二苯乙烷

魏晓菲[1,2]、韩卓[1,2]、张雨竹[2]、李彭辉[1]、宋善军*[2]
1. 天津理工大学
2. 中国计量科学研究院

十溴二苯醚（BDE-209）和十溴二苯乙烷（DBDPE）是使用广泛的溴代阻燃剂，目前在在大气、水体、土壤以及各种生物体内都有检出[1]。针叶植物作为常绿属种，能够有效的累积环境中的BDE-209和DBDPE[2]，是该类污染物环境赋存评估的重要样品。

BDE-209和DBDPE是高溴代化合物，常用气相色谱质谱法在检测过程中易发生脱溴，进而影响检测结果的准确性。本研究基于高效液相色谱-电感耦合等离子体质谱（High performance liquid chromatography-inductively coupled plasma-mass spectrometry, HPLC-ICP-MS）建立了松针中BDE-209和DBDPE的测定方法。首先，采用加速溶剂萃取仪（Accelerated solvent extraction，ASE）提取松针中的目标物，萃取溶剂为正己烷和二氯甲烷（1:1，V:V）。萃取液加入浓硫酸除脂后，取上清液旋转蒸发浓缩，进一步采用复合硅胶柱（弗罗里土、中性硅胶、酸性硅胶和无水硫酸钠）净化，氮吹至近干，用环己烷定容至500μL。使用TC-C18(2)（4.6×250mm，5μm）色谱柱进行分离，以甲醇：异丙醇：水=89:6:5（V:V:V）为流动相进行等度洗脱，样品可在30min内实现分离。样品通过雾化室汽化后进入ICP-MS，通过对Br元素定量，对目标物进行分析检测。经优化后，BDE-209和DBDPE在0.5-100ng/mL的范围内有良好的线性关系（R^2>0.99），定量限为0.1-0.5ng/mL，相对标准偏差（RSD，n=5）小于10%，回收率在可接受范围内（85%-95.4%）。通过基质加标实验发现，其基质效应可有效控制在10%以内。与现有方法相比，该方法操作灵敏度高，基质效应去除效率高。通过对采集自广西、安徽、湖北等区域的实际样品分析，BDE-209和DBDPE浓度水平在3.34-62.7ng/g范围内，表明其能满足实际样品的检测需要。

关键字 高效液相色谱-电感耦合等离子体质谱；松针；十溴二苯醚；十溴二苯乙烷

参考文献

1. Harrad, S.; Drage, D. S.; Sharkey, M.; Berresheim, H., Perfluoroalkyl substances and brominated flame retardants in landfill-related air, soil, and groundwater from Ireland. *Science of the Total Environment* **2020**, 705.
2. 2.Jia, H. H.; Wang, X. T.; Cheng, H. X.; Zhou, Y.; Fu, R., Pine needles as biomonitors of polybrominated diphenyl ethers and emerging flame retardants in the atmosphere of Shanghai, China: occurrence, spatial distributions, and possible sources. *Environmental Science and Pollution Research* **2019**, 26 (12), 12171-12180.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

复杂基质中黑碳颗粒的识别与表征

林悦[1]、刘倩*[2]
1. 福州大学
2. 中国科学院生态环境研究中心

黑碳颗粒已成为全球性的环境污染物，它们在自然界中无处不在，引起了严重的全球疾病负担[1,2]。环境中的黑碳来源广泛且成分复杂，它们能够通过呼吸道、皮肤及胃肠道等途径进入人体内。然而它们在人体内的累积、迁移以及对健康的影响仍不明确。因此，黑碳的生物毒性机制研究和健康暴露风险评估是我们必须面对的挑战。环境和生物基质的复杂性是颗粒污染物的分析和表征时的巨大阻碍。这使得我们必须开发具有出色的抗干扰能力和强大定性定量性能的分析技术[3]。本工作针对复杂介质中黑碳颗粒分析所面临的技术瓶颈，开发了一种基于 LDI-MS（激光解吸/电离质谱）指纹的新方法，用于环境介质中黑碳颗粒的免标记识别和定量。我们发现，不同环境来源和不同形态的黑碳颗粒显示出高度一致的碳簇阴离子质谱指纹。利用该指纹可以对 $PM_{2.5}$ 样品和土壤样本中的黑碳进行半定量分析，且其定量结果与传统的热光法一致。与其他技术相比，质谱技术展现出了出色的抗干扰能力和强大的定性定量分析性能。并利用该质谱方法建立的黑碳质谱指纹，进一步实现了对生物介质中黑碳颗粒的分析，利用该技术，我们对暴露于 $PM_{2.5}$ 后的小鼠体内黑碳颗粒进行了亚器官分布成像实验。本研究有助于更好地了解黑碳的生物毒理学，并为元素碳基纳米材料的鉴定、追踪和毒理学研究提供了一个实用的新方法平台。最后我们通过对真实环境暴露的人体样本的研究，为目前关于环境超细颗粒（UFPs）可穿透气血屏障和胎盘屏障的观点提供充分的证据。我们在人肺组织、胎盘组织和血液样本中发现了外源性纳米颗粒。我们利用多种技术对纳米颗粒的形态、大小、组成和浓度进行了表征，以验证它们是源于环境而非生物体自身。此外，本章节首次提出了在人体样本中使用 LDI-MS 质谱成像方法对黑碳进行鉴定和定量。我们发现肺组织、胎盘屏障和血液样本中存在着类似的颗粒。因此，我们证实了环境纳米颗粒在肺内积聚，并可能通过气血屏障和胎盘屏障进行运输，进而影响整个生命周期的人体健康。

关键字 黑碳，质谱成像，生物屏障，免标记

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

柔性可穿戴传感器实现气溶胶内的病原体感知

于皓、祝严欢、孙宏蕾、刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

气溶胶作为多种病原体如细菌、真菌和病毒的重要传播媒介，近年来引起了研究者的广泛关注。多种呼吸道感染疾病如流感、COVID-19 等，都是通过气溶胶传播。对气溶胶内的病原体进行实时监测，有助于及时发现潜在的健康威胁，尤其是在医院、车站等人流量密集的场所，对病原体的监测更是具有重要意义。近年来，柔性可穿戴传感器技术迅速发展，能够与智能手机结合，实现监测数据的实时查看与分析，从而用于疾病的早期监测。本研究拟构建一种具备高灵敏度和高选择性的集成式可穿戴柔性传感器，实现气溶胶内多种病原体的监测，将多种监测功能集成于单一小型可穿戴检测设备中，通过与智能云端技术的结合，促进人体健康数据的数字化管理，增强个体对健康状况的了解与管理。

关键字 气溶胶、病原体、可穿戴、传感

参考文献

1. G Y. Qiu, X L. Zhang, A J. deMello, M S. Yao, J J. Cao, J. Wang. *Chem. Soc. Rev.*, **2023**, 52(24), 8531-8579.
2. J. Tu, M. Torrente Rodríguez R, M. Wang, W. Gao. *Adv. Funct. Mater.*, **2019**, 30(29), 1906713.
3. H. Lukas, C H. Xu, Y. Yu, W. Gao. *Acs Nano*, **2020**, 14(12): 16180-16193.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

铬诱发肺癌细胞增值的作用靶点及分子机制研究

李芸、黄小锋、范焕彩、梁秋菊、高明*
中国科学院生态环境研究中心

肺癌是全球最为常见的癌症之一，被称为“第一致死癌症”，每年约有 210 万例新发病例和 180 万例死亡病例，几乎是第二大致死癌种（结直肠癌）死亡人数的 2.5 倍。2023 年，在美国 127070 例肺癌死亡病例中，约有 103000 例癌症将由直接吸烟导致，3560 例癌症由二手烟导致。尽管吸烟被确认为肺癌的主要危险因素之一，其他环境因素和遗传因素在肺癌发病中也扮演着重要角色。

重金属元素作为一类潜在的致癌物质备受关注，其中铬（Cr）元素因其在工业生产和燃烧过程中的广泛存在以及其潜在的致癌性质而引起广泛关注。本研究收集了 554 例肺癌患者和 110 例健康人群的血清样本，运用电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）技术对其中的 11 种重金属元素进行了测定。结果显示，肺癌患者中 Cr 元素浓度显著升高，并且与正常人血清相比具有最高的比例。通过对 554 例肺癌患者的背景调查，发现其中 80%的患者具有吸烟史，这提示吸烟可能与 Cr 元素在肺癌发展中的关联性。此外，我们通过细胞增殖实验和动物实验，发现 Cr 元素能显著提高肺癌细胞的增殖能力。

综上所述，我们的研究结果揭示了 Cr 元素在肺癌发展中的潜在作用，为肺癌的发病机制提供了新的视角。未来，我们将进一步探索 Cr 元素的价态与肺癌发展之间的关联及分子机制，以及在临床上如何利用这一发现来改善肺癌患者的预后和生存率，包括针对 Cr 元素的新型治疗策略或者在肺癌筛查和预防中的应用。

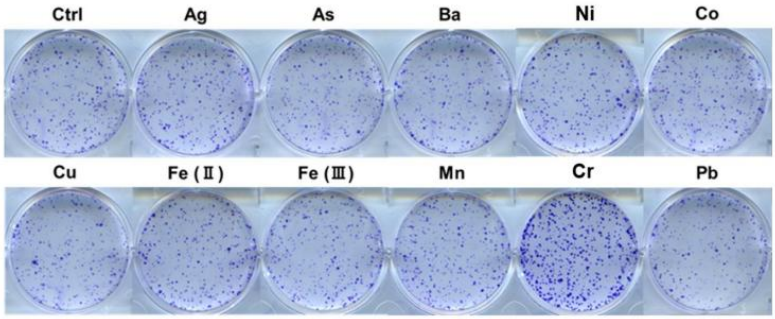


图 1：不同重金属对肺癌细胞的影响

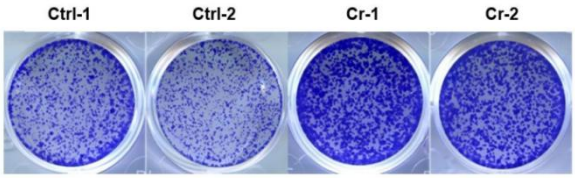


图 2：Cr 元素对肺癌细胞增值能力的影响

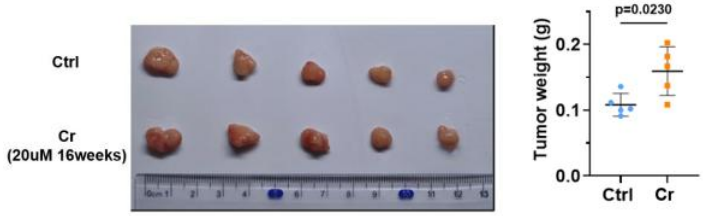


图 3:：Cr 元素能够增大肿瘤的体积

关键字 ICP-MS，肺癌， 重金属暴露，铬，环境因素

参考文献

1. Bade BC, Dela Cruz CS. Lung Cancer 2020: Epidemiology, Etiology, and Prevention. Clin Chest Med. 2020 Mar;41(1):1-24.
2. Schabath MB, Cote ML. Cancer Progress and Priorities: Lung Cancer. Cancer Epidemiol Biomarkers

Prev.
2019 Oct;28(10):1563-1579.
3. Hirsch FR, Scagliotti GV, Mulshine JL, et al. Lung cancer: current therapies and new targeted treatments. Lancet. 2017;389(10066):299-311.
4. Alexander M, Kim SY, Cheng H. Update 2020: Management of Non-Small Cell Lung Cancer. Lung. 2020;198(6):897-907.
5. Mao Y, Yang D, He J, Krasna MJ. Epidemiology of Lung Cancer. Surg Oncol Clin N Am. 2016;25(3):439-
445.
6. Collins LG, Haines C, Perkel R, Enck RE. Lung cancer: diagnosis and management. Am Fam Physician. 2007;75(1):56-63.
7. Rodriguez-Canales J, Parra-Cuentas E, Wistuba II. Diagnosis and Molecular Classification of Lung Cancer. Cancer Treat Res. 2016;170:25-46.
8. Hoy H, Lynch T, Beck M. Surgical Treatment of Lung Cancer. Crit Care Nurs Clin North Am. 2019;31(3):303-313.
9. Romaszko AM, Doboszyńska A. Multiple primary lung cancer: A literature review. Adv Clin Exp Med. 2018;27(5):725-730.
10. Toumazis I, Bastani M, Han SS, Plevritis SK. Risk-Based lung cancer screening: A systematic review. Lung Cancer. 2020;147:154-186.
11. Pei Q, Luo Y, Chen Y, Li J, Xie D, Ye T. Artificial intelligence in clinical applications for lung cancer: diagnosis, treatment and prognosis. Clin Chem Lab Med. 2022;60(12):1974-1983.
12. Jonna S, Subramaniam DS. Molecular diagnostics and targeted therapies in non-small cell lung cancer (NSCLC): an update. Discov Med. 2019;27(148):167-170.
13. Qi C, Sun SW, Xiong XZ. From COPD to Lung Cancer: Mechanisms Linking, Diagnosis, Treatment, and
Prognosis. Int J Chron Obstruct Pulmon Dis. 2022;17:2603-2621.
14. Thakur SK, Singh DP, Choudhary J. Lung cancer identification: a review on detection and classification. Cancer Metastasis Rev. 2020;39(3):989-998.
15. Villalobos P, Wistuba II. Lung Cancer Biomarkers. Hematol Oncol Clin North Am. 2017;31(1):13-29.
16. Wang Y, Zou S, Zhao Z, Liu P, Ke C, Xu S. New insights into small-cell lung cancer development and therapy. Cell Biol Int. 2020;44(8):1564-1576.
17. Cheung CHY, Juan HF. Quantitative proteomics in lung cancer. J Biomed Sci. 2017;24(1):37. Published
2017 Jun 14.
18. Berg CD, Schiller JH, Boffetta P, et al. Air Pollution and Lung Cancer: A Review by International Association for the Study of Lung Cancer Early Detection and Screening Committee. J Thorac Oncol. 2023;18(10):1277-1289.
19. Daylan AEC, Miao E, Tang K, Chiu G, Cheng H. Lung Cancer in Never Smokers: Delving into Epidemiology, Genomic and Immune Landscape, Prognosis, Treatment, and Screening. Lung.
20. Florez N, Kiel L, Riano I, et al. Lung Cancer in Women: The Past, Present, and Future. Clin Lung Cancer.
2024;25(1):1-8.
21. Jain D, Roy-Chowdhuri S. Advances in cytology of lung cancer. Semin Diagn Pathol. 2021;38(5):109115.
22. Succony L, Rassl DM, Barker AP, McCaughan FM, Rintoul RC. Adenocarcinoma spectrum lesions of the lung: Detection, pathology and treatment strategies. Cancer Treat Rev. 2021;99:102237.
23. Roy-Chowdhuri S. Molecular Pathology of Lung Cancer. Clin Lab Med. 2024;44(2):137-147.
24. Dhanasopon AP, Kim AW. Lung Cancer Screening and Its Impact on Surgical Volume. Surg Clin North Am. 2017;97(4):751-762.
25. Wang C, Tan S, Li J, Liu WR, Peng Y, Li W. CircRNAs in lung cancer - Biogenesis, function and clinical
implication. Cancer Lett. 2020;492:106-115.
26. Yadav S, Agrawal S, Divya Ravali SS, Pandey A. Lung cancer: analysis of biomarkers and methods of diagnostic and prognostic value. Cell Mol Biol (Noisy-le-grand). 2017;63(6):88-92. Published 2017 Jul
31.
27. Graham PD, Thigpen SC, Geraci SA. Lung cancer in women. South Med J. 2013;106(10):582-587.
28. Nanavaty P, Alvarez MS, Alberts WM. Lung cancer screening: advantages, controversies, and

applications. Cancer Control. 2014;21(1):9-14.
29. Salehi-Rad R, Li R, Paul MK, Dubinett SM, Liu B. The Biology of Lung Cancer: Development of More
Effective Methods for Prevention, Diagnosis, and Treatment. Clin Chest Med. 2020;41(1):25-38.
30. Drula R, Braicu C, Harangus A, et al. Critical function of circular RNAs in lung cancer. Wiley Interdiscip
Rev RNA. 2020;11(5):e1592.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

锂镍钴锰氧化物纳米材料在自然水体中的溶解过程与机制

刘娅、杨学志*、刘寅
国科大杭州高等研究院

作为一种新兴的储能设备，锂离子电池广泛应用于消费电子产品、新能源汽车和电网储能等领域。目前，我国已迎来首批废旧锂离子电池退役潮，然而相关回收处置政策尚不完善，导致许多废旧电池材料通过垃圾填埋和不规范处置等途径进入环境 1。锂镍钴锰氧化物材料（NCM）是一类广泛应用的三元电池材料。本研究基于实验分析和模型计算的方式探究环境因素对镍钴锰氧化物(LixNiyCozMn1-x-y-zO2, 0 < x, y, z < 1)纳米材料溶解的影响及机制。为研究四种 NCM 纳米材料(NCM111、NCM523、NCM622、NCM811) 在水体中的金属离子溶解过程，将所有材料在 25℃条件下培养 144 h 后，然后基于质谱仪分析各元素的释放程度。结果表明，储能纳米材料的骨架元素 Ni、Co、Mn 基本不溶解，总释放率均不足 0.5%，而材料中的 Li 元素溶解迅速。进一步，我们探究了多种环境因素(温度、pH、离子强度、有机质浓度)对 NCM 纳米材料溶解影响，结果显示，除酸性条件(pH=2)外，NCM 纳米材料中 Ni、Co、Mn 三种元素在各种环境条件下的总释放率均不足 1%，说明骨架金属很难溶解。进一步地，我们计算了各种影响条件下 NCM111 中过渡金属的表面溶解自由能ΔG，当溶液中存在一定浓度的离子或有机质时，Ni、Co 的ΔG≈0，Mn 的ΔG>0，解释了过渡金属离子不易溶解的实验结果。最后，本研究选取五种环境水体(垃圾渗滤液、井水、湖水、海水、河水)模拟 NCM 纳米材料在不同水体中的溶解过程。结果显示，相较于其他四种环境水体，镍钴锰氧化物在垃圾渗滤液中更容易溶解，可能是由于垃圾渗滤液含有大量还原性物质，且溶液呈弱酸性的原因。本研究揭示了锂镍钴锰氧化物纳米材料在自然水体中的溶解过程与机制，为废旧锂离子电池材料的环境风险评估提供重要参考。

关键字 锂镍钴锰氧化物，环境因素，溶解过程，机制

参考文献

(1) Yang, X. Z.; Qi, T. Y.; Wen, H. N.; Liu, Y.; Liu, F. Y.; Zhang, H. Y.; Fu, J. J.; Liu, Q.; Jiang, G. B. Development of high-precision analytical method for lithium and the preliminary investigation on lithium pollution in environmental media in China. *CHINESE SCIENCE BULLETIN-CHINESE* **2023**, *68* (15), 1959-1970. DOI: 10.1360/TB-2023-0286.
(2) Bennett, J. W.; Jones, D.; Huang, X.; Hamers, R. J.; Mason, S. E. Dissolution of Complex Metal Oxides from First-Principles and Thermodynamics: Cation Removal from the (001) Surface of Li(Ni1/3Mn1/3Co1/3)O2. *ENVIRONMENTAL SCIENCE & TECHNOLOGY* **2018**, *52* (10), 5792-5802. DOI: 10.1021/acs.est.8b00054.
(3) Huang, X.; Bennett, J. W.; Hang, M. M. N.; Laudadio, E. D.; Hamers, R. J.; Mason, S. E. Ab Initio Atomistic Thermodynamics Study of the (001) Surface of LiCoO2 in a Water Environment and Implications for Reactivity under Ambient Conditions. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C* **2017**, *121* (9), 5069-5080. DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b12163.
(4) Hang, M. N.; Hudson-Smith, N. V.; Clement, P. L.; Zhang, Y. Q.; Wang, C. Y.; Haynes, C. L.; Hamers, R. J. Influence of Nanoparticle Morphology on Ion Release and Biological Impact of Nickel Manganese Cobalt Oxide (NMC) Complex Oxide Nanomaterials. *ACS APPLIED NANO MATERIALS* **2018**, *1* (4), 1721-1730. DOI: 10.1021/acsanm.8b00187.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

典型锂工业区锂污染特征与生态环境风险评估

文昊楠[1]、杨学志*[1]、刘倩[2]、江桂斌[1,2]
1. 国科大杭州高等研究院
2. 生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室

近年来，在“碳中和”政策的背景下，新能源行业蓬勃发展，Li 的使用量逐年攀升。随着 Li 的相关产业（采矿、提取和回收）规模不断扩大，日益严重的 Li 污染成为了不容忽视的环境问题[1]。江西省宜春市拥有亚洲最大的 Li 工业区，位于工业区旁的锦江及袁河流域是十分典型的 Li 工业污染区。团队此前的研究已经就锦江流域的 Li 污染现状及沿线各点居民的 Li 暴露健康风险进行了系统评估，证实了 Li 工业区对锦江沿线河水、生物及植物的污染以及对当地居民造成了潜在健康风险[2]。本研究进一步研究了锂工业活动对长江支流-赣江的影响，通过之前建立的分析方法[3]，进一步揭示了 Li 工业活动对赣江和长江流域锂赋存的影响。研究结果表明，流经 Li 工业区后，锦江及袁河河水中 Li 元素含量大幅上升，河水汇入赣江后，赣江的河水 Li 含量也有显著上升，在赣江汇入长江后 Li 浓度逐渐下降至正常值。不仅如此，锦江、袁河下游（污染区）水生植物（水葫芦）、动物（鱼类）及水稻的 Li 含量明显高于上游。相关性分析显示，河水中 Li 分布与铷（Rb）、铯（Cs）等 Li 工业伴生元素具有强相关性，揭示了 Li 工业对环境的复合污染。进一步地，利用正定矩阵因子分解模型（PMF）溯源河水中的 Li，结果表明 Li 工业源贡献达 91.1%，证实了当地 Li 工业对周边环境的污染。同时，PMF 的预测结果显示 Li 工业源对赣江下游点位（锦江、袁河汇入后）河水 Li 的贡献较高，占比 60.1~81.1%，对长江点位贡献为 0，这表明 Li 工业造成的污染会随河流对较远的赣江造成影响，至长江干流才被河水的自净作用消除。此外，我们评估了沿线各点 Li 的摄入暴露风险，结果显示工业区的居民存在显著的健康风险（THQ=2.22）。结合本团队此前研究结果，本研究进一步证明了该区域 Li 工业活动可对长江流域锂赋存水平产生显著影响，相关环境风险需要进一步关注。

关键字 锂污染，PMF，健康风险

参考文献

1. Yang, X., et al., Emerging Research Needs for Characterizing the Risks of Global Lithium Pollution under Carbon Neutrality Strategies. Environmental Science & Technology, **2023**, 57(13): p. 5103-5106.
2. Yang, X., et al., Lithium Pollution and Its Associated Health Risks in the Largest Lithium Extraction Industrial Area in China. Environmental Science & Technology, **2024**, 58(26): p. 11637-11648.
3. Yang, X., et al., Development of high-precision analytical method for lithium and the preliminary investigation on lithium pollution in environmental media in China. Chinese Science Bulletin-Chinese, **2023**, 68(15): p. 1959-1970.

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

基于网络分析框架识别空气化学暴露组中的关键心血管毒性组分

张伟灿 [1,2]、刘倩*[1,2]、江桂斌 [1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心 环境化学与生态毒理学国家重点实验室
2. 中国科学院大学 资源与环境学院

空气污染已成为全球疾病负担的主要因素之一。然而，人类通过呼吸暴露于复杂化学物质的多样性，使得识别引发疾病的特定化合物变得困难。在本研究中，我们构建了一个基于网络拓扑的框架，旨在识别空气中化学暴露组中的关键有毒化合物。以心血管疾病为研究模型，我们发现不同化合物构成的有毒网络模块与心血管疾病模块之间存在密切联系。化合物目标模块与疾病模块之间的接近性，能够指示化合物引起的毒性程度。我们通过结合质谱技术测定的外部暴露浓度和机器学习预测的内部暴露浓度，建立了一个全面的联系，将暴露与疾病相关风险相连接，以识别有毒化合物。这些发现随后在区域层面的暴露和疾病数据中得到了验证。本研究不仅提供了一种有效的策略来识别环境暴露组中的关键化合物，而且为理解空气污染的致病机制提供了新的视角。

关键字 暴露组学，网络科学，疾病，化学品，大气细颗粒物

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

新型磁性β-环糊精聚合物的制备及其对水体微塑料的净化

盘昱良*、刘紫微、唐牡丹、陈泽凯、李永
中南林业科技大学

近年来，在全球水环境中广泛检测到微塑料，这一新型污染物会对全球生态环境产生一系列负面影响。开发环保且高效的方法清除水体中 MPs 目前备受关注。

在本研究中，首先制备出大小均匀且磁性稳定的 Fe3O4 纳米颗粒和β-环糊精聚合物，通过共价交联得到磁性β-环糊精聚合物（Fe3O4@T-E-CDP)。然后再分析其理化性质。结果表明成功制备了 Fe3O4@T-E-CDP。随后在纯水、人工海水和生活污水中分别加入 50 μm、75 μm 和 150 μm 三种粒径的聚丙烯、聚苯乙烯、聚乙烯和聚氯乙烯四种常见类型的微塑料，再使用 Fe3O4@T-E-CDP 对水体中的微塑料进行吸附净化。通过分析不同条件对微塑料去除效果的影响，发现当 Fe3O4@T-E-CDP 与微塑料的浓度比例为 6:5，pH=7 的情况下，吸附效果最佳，去除率最高可达 98%。随着 pH 的增高或降低，去除效率均有所下降，最低为 71%。对四种微塑料进行去除实验，结果显示，平均去除率为 PS>PVC>PE>PP，大粒径微塑料的去除率普遍高于小粒径微塑料。此外，在人工海水和生活污水中，微塑料的去除率明显低于在纯水中的情况。这些发现为进一步优化微塑料去除过程提供了重要参考，并强调了不同条件下吸附效果的差异性。最后，进一步研究了 Fe3O4@T-E-CDP 对微塑料的吸附机制，结果在 Langmuir 模型和 Freundlich 模型上均得到较好的拟合结果。在进行动力学分析时发现，吸附过程符合拟一级反应动力学和拟二级反应动力学。这些结果揭示了 Fe3O4@T-E-CDP 在吸附微塑料过程中的复杂性和多样性，为进一步研究和优化吸附过程提供了重要参考。

总之，本研究成功制备了一种新型磁性β-环糊精聚合物 Fe3O4@T-E-CDP，其对水体中的微塑料具有较强的吸附净化能力，能够用于水体中微塑料的清除净化。研究开发的清除水体中 MPs 的方法环保且高效，具有一定的实用价值和理论价值。

关键字 微塑料；磁性β-环糊精聚合物；吸附动力学；水体吸附

参考文献

1.Long Y, Zhou Z, Wen X, et al. Microplastics removal and characteristics of a typical multi-combination and multi-stage constructed wetlands wastewater treatment plant in Changsha, China[J]. Chemosphere, 2023,312(Pt 2):137199.
2. Wang H, Huang X, Chen J, et al. Modified superhydrophobic magnetic Fe_3O_4 nanoparticles for removal of microplastics in liquid foods[J]. Chemical Engineering Journal, 2023,476:146562.
3.Forero L A, Truchet D M, Rimondino G N, et al. Microplastics and suspended particles in a strongly impacted coastal environment: Composition, abundance, surface texture, and interaction with metal ions[J]. Science of The Total Environment, 2021,754:142413.
4.Ali S S, Elsamahy T, Koutra E, et al. Degradation of conventional plastic wastes in the environment:A review on current status of knowledge and future perspectives of disposal[J]. Science of The Total Environment, 2021,771:144-719

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

全氟烷基羧酸前体氟烷基硅烷物质和氟烷基烯酸酯的氧化降解机理探究

朱飞越[1,2]、傅建捷*[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

多氟烷基硅烷和多氟烷基烯酸酯是两类在表面涂层中应用广泛的人工化学物质，凭借着出色的防水防油性能，大量用于地毯，纺织和造纸工业的防湿和防污表面保护剂。在广泛应用生产的同时，多氟烷基硅烷和多氟烷基烯酸酯也存在着潜在的环境健康危害。

本研究以市售含氟防指纹液样品，1H, 1H，2H，2H 全氟癸基三甲氧基硅烷和 2-（全氟辛基）乙基甲基丙烯酸酯标准品为研究对象，探究在基于羟基自由基的前体物氧化过程中，温度、pH、反应时间等因素对降解产物碳链长度的影响和末端基团的摩尔产率差异。通过靶向和非靶检测识别产物结构并阐述氧化降解机理。初步实验表明，前体物氧化后，1H, 1H，2H，2H 全氟癸基三甲氧基硅烷的总 PFCA 浓度达到 1481ng/g。其中 PFHpA、PFPeA 和 PFOA 在产物中占比最多，分别达到 43.8%、30.1%和 24.5%。2-（全氟辛基）乙基甲基丙烯酸酯的氧化产物中浓度最高的分别是 PFHpA、PFOA 和 PFPeA，浓度分别为 816 ng/g、363 ng/g 和 337 ng/g。同时，在市售含氟防指纹液样品的降解产物中检测出大量 PFPeA（373ng/g）。

关键字 多氟烷基硅烷，多氟烷基烯酸酯，总前体物氧化

分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

中国典型城市 PM2.5 AhR 毒性效应归因研究

贺勇*[1]、白皓月[1,2]、李姿慷[1,3]、杨晓溪[1]、金灵[4]、李向东[4]、曲广波[1,2,3]、江桂斌[1,2,3]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院
3. 中国科学院大学
4. 香港理工大学深圳研究院

$PM_{2.5}$ 污染是当前面临的重大全球性环境问题，$PM_{2.5}$ 所致的许多不良健康结局与芳香烃受体(AhR)介导的毒性效应有关。$PM_{2.5}$ 的毒性效应不仅仅由效应物贡献，还与物质间相互作用有关。为精准防控 $PM_{2.5}$ 对人群造成的不良健康结局，就需要对 $PM_{2.5}$ AhR 介导的毒性效应进行有效归因。然而，以加和作用为基本假设的效应物质筛查往往忽略了拮抗、协同、增强等相互作用。此外，为降低物质鉴定的难度，通常会对样品提取液进行组分分离以得到尽可能多的组分，使得开展组分间相互作用研究的工作量呈现指数级增长，难以量化激活、拮抗、增强等作用的贡献。对此，本研究选取 2013 年至 2021 年间北京、南京、广州等城市 $PM_{2.5}$ 样品为研究对象，通过优化样品制备及组分分离方法实现对 $PM_{2.5}$ AhR 毒性效应的归因。本研究主要结果如下：

(1)开发了高通量半自动化样品提取及组分分离方法，$PM_{2.5}$ 样品经有机溶剂提取、QuEChERS 净化、浓缩、过滤等步骤后，使用配备分析型硅胶色谱柱的液相色谱仪进行自动化组分分离，使用不同有机溶剂进行分步洗脱，馏分收集器自动收集 3 个组分，可在 24 h 内实现 72 个样品的高通量半自动化制备与分离，AhR 毒性当量的平均回收率为 91.2%±31%(均值±标准差)。

(2)在选取的 54 个 $PM_{2.5}$ 样品中，49 份样品表现出明显的 AhR 活性(ECmax>20%)。2013 年至 2021 年间北京、南京、广州等城市 $PM_{2.5}$ 的 AhR 毒性当量在 0.9 至 358 pg TCDD·m^{-3} 之间，中位数为 13 pg TCDD·m^{-3}。空间分布上，$PM_{2.5}$ AhR 毒性当量呈现出北京>南京>广州的自北向南逐渐递减的规律；季节分布上，三个城市 $PM_{2.5}$ AhR 毒性当量均呈现夏秋季节低、春冬季节高的特点。

(3)对分离得到的三个组分进行效应测试，发现 AhR 活性主要分布在 F2 组分，疑似靶向分析也证实了 AhR 激动剂主要存在于 F2 中。大部分样品 F1 组分无 AhR 活性，F3 组分 AhR 活性低于 F2。将三个组分进行两两联合暴露，发现大部分样品中均存在不同程度的组分间相互作用，如：F2 和 F3 组分存在相互协同作用，F1 组分则在部分样品中表现出对 F2 和 F3 较为明显的拮抗或增强作用。

关键字 PM2.5；芳香烃受体；组分间相互作用

分分会场：22.环境分析与仪器
交流类型：墙报

室内灰尘中氯化石蜡结构类似物的非靶向识别

陈伟芳[1,2]、刘稷燕*[1,2]、江桂斌[1,2]
1. 国科大杭州高等研究院
2. 中国科学院生态环境研究中心

现代人有超过 70%的时间在室内环境中度过并长期暴露于众多化学品中，灰尘是大多数化学物质的汇，是人类接触室内污染物的重要途径 1，因此开展室内灰尘中污染物的研究是评估化学品风险的重要环节。氯化石蜡（chlorinated paraffins, CPs）是由正构烷烃氯化衍生而成的混合工业产品，是一类广受关注的持久性有机污染物 2，在全球各地室内灰尘中高浓度赋存，对居民尤其是婴幼儿都具有较高的健康风险。CPs 在环境中还存在大量结构类似物，即与 CPs 具有相似的氯代正构烷烃骨架并包含其他官能团的化合物，由于结构相似，这些化合物可能与 CPs 具有类似的环境行为和风险 3。但是目前对这类化合物整体认知还比较有限，我国室内灰尘中 CPs 结构类似物的研究更是匮乏，亟需对其展开系统性研究。

本课题基于高分辨质谱数据建立 CPs 结构类似物的非靶向识别分析策略，一方面编写 R 语言脚本将与含氯化合物特征碎片离子[Cl]-或者[Cl2]-具有相同保留时间的质量数提取出来，结合峰强度比例，分析相同保留时间高分子量的精确质量数中含有的 Cl 原子个数，识别氯代化合物的分子组成，推测潜在的 CPs 结构类似物；另一方面借鉴前期识别 CPs 转化产物的筛查策略，即不同的转化类型在质谱行为上的成对质量差值（PMD）不同：两个准分子离子的特定 PMD 值往往代表某一类特定转化反应，例如 PMD 为 15.995 Da，说明两个化合物分子组成之间相差一个 O 原子，可能是羟基化的 CPs 结构类似物。初步鉴定到包括二羟基氯化石蜡，硫酸化氯化石蜡等多种 CPs 结构类似物，后续将进一步进行数据挖掘识别更多的结构类似物。

关键字 氯化石蜡结构类似物，非靶向识别，室内灰尘

参考文献

1. Aksenov, A. A.; Salido, R. A.; Melnik, A. V., et al. The Molecular Impact of Life in An Indoor Environment. *Sci. Adv.* **2022**, 8, eabn8016
2. UNEP Stockolm Convention on Persistent Organic Pollutants, Eight Meeting. 2017, http://chm.pops.int/Implementation/Alternatives/AlternativestoPOPs/ChemicalslistedinAnnexA/Shortchainchlorinatedparaffins(SCCPs)/tabid/5986/Default.aspx (accessed February 18, 2024).
3. Chen, W.F.; Ren, D.Z.; Liu, Q.; Zhou, Q.F.; Liu, J.Y.*; and Jiang, G.B. Enhanced Research Needed on the Structural Analogues of Chlorinated Paraffins as Emerging Contaminants of Concern. *Environment & Health*, **2024**, 2, 10, 681-683

分会场：23.环境监测与仪器
交流类型：报告

工业烟气中可凝结颗粒物的在线监测与质控技术

李庆*
复旦大学

我国在“十三五”五期间已完成电力行业的超低排放改造，并在钢铁、水泥、玻璃生产等行业逐步推行超低排放标准，一次排放的颗粒物实现了大幅减排。然而，近期研究显示超低排放改造后的工业烟气中可凝结颗粒物（CPM）的贡献日益凸显，甚至超过了一次烟尘（可过滤颗粒物，FPM）。目前国内外市场上无相应的在线监测技术，出现环保市场的产品需求与技术现状之间的脱节。本研究基于烟气的控制冷凝原理，开发出了适用于我国工业烟气的CPM 在线测量技术及装备；装备已经通过开展典型现场测试和各种质量控制验证，完成了原型机论证，并获得专利授权及国家科技部“十四五”期间重点研发计划的课题资助。若基于改技术的产品走向广泛应用，预期将填补国内外烟气监测技术空白，引领新时期我国大气污染治理市场。

关键字 超低排放，工业烟气，大气污染，可凝结颗粒物

分会场：23.环境监测与仪器
交流类型：报告

固废焚烧烟气中挥发性有机物和二噁英在线监测

任美慧、蒋吉春、花磊、李海洋*
中国科学院大连化学物理研究所

焚烧已经逐渐替代垃圾填埋成为固体废物安全处置的主要方式。然而在固废焚烧过程中不可避免的会释放挥发性有机污染物（VOCs）和二噁英（PCDD/Fs）等持久性有机污染物（UP-POPs），威胁生态环境和人体健康。

传统的 VOCs 和 PCDD/Fs 检测方法均为离线分析方法，需经历样品采集、样品预处理、仪器分析和结果计算等步骤，存在采样受限、前处理流程复杂、分析周期长、检测结果滞后等问题。在线监测技术无需样品采集和样品预处理、仪器分析时间短、数据处理简单，可连续监测固废焚烧烟气中污染物的排放特征。实时反馈的排放结果在保障污染物达标排放的同时，可指导工业焚烧过程减污降碳协同增效。

本研究基于自行研制的高灵敏光电离飞行时间质谱（PI-TOFMS），基于国内某大型垃圾焚烧厂，发展了固废焚烧烟气中污染物在线监测技术。结合离线分析手段，在不同采样位点，对不同工况下焚烧烟气中 VOCs 和 PCDD/Fs 分别进行直接和间接的在线监测。探究了工况和烟气净化系统对烟气中 VOCs 和 PCDD/Fs 排放特征的影响。以烟气中高丰度 VOCs 作为指示物建立了 PCDD/Fs 在线监测的相关性模型。所获得的结果可为工业焚烧等排放源污染物排放监控和清单筛查提供新工具和新方法，为大气污染防控和减排控制策略制定提供数据支持。

关键字 挥发性有机污染物，二噁英，在线监测，相关性模型，光电离飞行时间质谱

参考文献

1. B.K. Gullett, L. Oudejans, D. Tabor, et al. Near-Real-Time Combustion Monitoring for PCDD/PCDF Indicators by GC-REMPI-TOFMS. *Environ. Sci. Technol.*, **2012**, 46, 923-928
2. X. Cao, W.R. Stevens, S. Tang, et al. Atline measurement of 1, 2, 4-trichlorobenzene for polychlorinated dibenzo-p-dioxin and dibenzofuran International Toxic Equivalent Quantity prediction in the stack gas. *Environ Pollut*, **2019**, 244, 202-208

分会场：23.环境监测与仪器
交流类型：报告

黑碳气溶胶质谱仪及其在大气环境化学中的应用

盖鑫磊*[1]、汪俊峰[1]、崔世杰[2]、叶招莲[3]
1. 南京信息工程大学
2. 四川轻化工大学
3. 江苏理工学院

黑碳气溶胶飞行时间质谱仪（SP-AMS）是当前世界上最为先进的能够实现对包含黑碳组分在内的大气细粒子进行在线快速检测的仪器设备。该仪器近年来在大气环境监测和污染化学研究中获得了十分广泛的应用。本报告将侧重介绍研究团队近年来利用该仪器设备取得几个方面的主要进展。首先，利用该仪器，我们在我国大气中检测到了一类特殊黑碳即富勒烯碳簇的存在，并实现了其定量和来源解析，相应检测技术在其他环境介质中富勒烯的分析也有较好应用价值；其次，通过对质谱仪腔体的物理改造，我们实现了对大气中仅包含黑碳的细粒子的选择性检测，并在北京、南京、上海及偏远地区如西藏等地进行了外场实测，更为细致准确地厘清了黑碳气溶胶的包覆层组成来源、老化机制以及其对吸光性、吸湿性的影响规律；最后，利用 SP-AMS 能够获得的海量的气溶胶化学组成信息，我们对外场数据进行了深入解析，发现了大气细粒子中重要二次组分生成的化学机制，包括硫酸盐液相生成的新的两步反应新机制，以及化石燃料排放一次气溶胶快速液相转化生成二次气溶胶的新机制，对于解释重霾成因并进行高效调控具有重要意义。

关键字 气溶胶质谱仪；黑碳；富勒烯；液相氧化；二次气溶胶

说

分会场：23.环境监测与仪器

交流类型：墙报

基于注射泵的集成式水环境分析仪研发与应用

马剑*、郑书露、李佩聪、方腾越、邓瑶、李杭茜、上官琦佩、薄光永、朱相宇

厦门大学环境与生态学院，近海海洋环境科学国家重点实验室，福建厦门，361102

本研究旨在开发一种新型自动化系统——基于注射泵的集成式水环境分析仪（*i*ntegrated Syringe-pump-based Environmental-water Analyzer，简称 *i*SEA），以实现对水环境中关键参数的高效、准确监测。*i*SEA 系统由微型注射泵、选择阀和 LabVIEW 编写的软件组成，具有体积小巧、操作简便和试剂消耗量少等优点，其紧凑的结构设计便于携带，适合于船载走航观测、定点在线监测、离散样品分析等多种应用场景。*i*SEA 系统采用分光光度检测技术，能够现场快速测定营养盐、碳酸盐体系、重金属等多种水环境参数，包括氨氮、硝酸盐、亚硝酸盐、磷酸盐、硅酸盐、pH、碳酸根、总碱度、形态砷、六价铬等。系统支持单参数测定和多参数集成测定，可与液芯波导毛细管流通池结合使用，实现纳摩尔级别的痕量分析物检测，并可与在线过滤系统联用，实现水样的自动过滤和测定。目前，*i*SEA 系统已在南北极、西太平洋、南海、珠江口、渤海湾、福建近海等航次中开展了大量的现场走航应用，在恶劣条件下进行自主环境监测表现出了稳定性和可靠性。在 1 个月的营养盐多参数定点测定中，获取了高频监测数据，为研究氮循环等科学问题提供了宝贵的信息，监测过程中数据比对和质控结果均良好。*i*SEA 系统的开发为水体环境监测提供了一种新的工具，显著提高了现场监测的频率和准确性，为研究生物地球化学循环、生态效应提供了重要的数据支持，有助于海洋资源的合理开发和利用。此外，*i*SEA 在帮助开发碳捕获、利用和储存技术，实现碳中和目标方面也具有潜在的应用价值。

关键字 流动分析；分光光度法；营养盐；碳酸盐体系；现场分析；自动化监测；高频监测

参考文献

1. P. Li, Y. Deng, H. Shu, K. Lin, N. Chen, Y. Jiang, J. Chen, D. Yuan, J. Ma*, *Talanta*, **2019**, 195, 638-646.
2. T. Fang, P. Li, K. Lin, N. Chen, Y. Jiang, J. Chen, D. Yuan, J. Ma*, *Anal. Chim. Acta.*, **2019**, 1076, 100-109.
3. T. Fang, G. Bo, Z. Zhang, J. Ma*, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 11307−11314.
4. T. Fang, G. Bo, J. Ma*, *Talanta*, **2022**, 248, 123629.
5. Y. Deng, P. Li, T. Fang, Y. Jiang, J. Chen, N. Chen, D. Yuan, J. Ma*, *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 4379-4386.
6. H. Li, S. Wang, S. Zheng, T. Fang, H. Shu, Y. Xu, X. Guo, E. P. Achterberg, L. Zhan, J. Ma*, *Talanta*, **2024**, 278, 126532.
7. Q. Shangguan, H. Shu, P. Li, K. Lin, R. H. Byrne, Q. Li, D. Yuan, J. Ma*, *Marine Chemistry*, **2019**, 209, 120-127.
8. G. Bo, T. Fang, Y. Duan, Y. Zheng, J. Ma*, *J. Environ. Sci.*, **2024**, 36, 1-12.
9. X. Zhu, Y. Deng, P. Li, D. Yuan, J. Ma*, *Microchem. J.*, **2019**, 145, 1135-1142.

分会场：23.环境监测与仪器
交流类型：墙报

湖北省地下水中 PFASs 的分布特征和暴露风险：长江、汉江和水源地在丰水期和枯水期的新证据

付雨*
中国科学院生态环境研究中心

利用超高效液相色谱串联质谱仪对检出率大于 60%的 PFASs 单体进行测定，分析其赋存浓度特征，在此基础上估算 PFASs 暴露的生态及人群健康风险。相关研究结果如下：（1）丰水期：在长江 23 个断面所采集的水样中，主要的单体为 PFOA（平均值：2.67 ng/L），其次为 PFBS（平均值：2.12 ng/L）和 PFHxS（平均值：1.50 ng/L）；在汉江 21 个断面所采集的水样中，主要单体为 PFOA（平均值：8.26 ng/L）和 FPePA（5：3）（平均值：9.74 ng/L），其次为 PFBS（平均值：2.18 ng/L）和 PFHxS（平均值：1.38 ng/L）；在湖北省 13 个市共 38 个水源地的水样中，主要的单体为 PFOA（平均值为 5.86 ng/L），其次为 PFBS（平均值：1.54 ng/L）和 HPFO-DA（平均值：1.36 ng/L）；就生态风险而言，选取 8 种单体评估其生态风险，丰水期长江和汉江断面采集的单体浓度均小于急性淡水水生生物基准值，故无生态风险；对于健康风险，选取 7 种单体评估其健康风险，其中只有 PFDS 在随州存在健康风险；（2）枯水期：在长江 23 个断面所采集的水样中，主要的单体为 PFOA（平均值：111.98 ng/L），其次为 PFOS（平均值：57.71 ng/L）和 HFPO-DA（平均值：53.42 ng/L）；在汉江 21 个断面所采集的水样中，主要的单体为 PFOA（平均值：81.66 ng/L），其次为 PFOS（平均值：14.37ng/L）和 HFPO-DA（平均值：14.06 ng/L）；在湖北省 13 个市共 38 个水源地的水样中，主要的单体与长江汉江一致，均为 PFOA(61.68 ng/L)、PFOS(25.89 ng/L)和 HFPO-DA(20.43 ng/L)；就生态风险而言，选取 8 种单体评估其生态风险，与丰水期结果一致，长江和汉江断面采集的单体浓度均小于急性淡水水生生物基准值，故无生态风险；对于健康风险，选取 6 种单体评估其健康风险，其中 PFOA（荆门、襄阳和十堰）和 PFOS（十堰和武汉）存在健康风险。

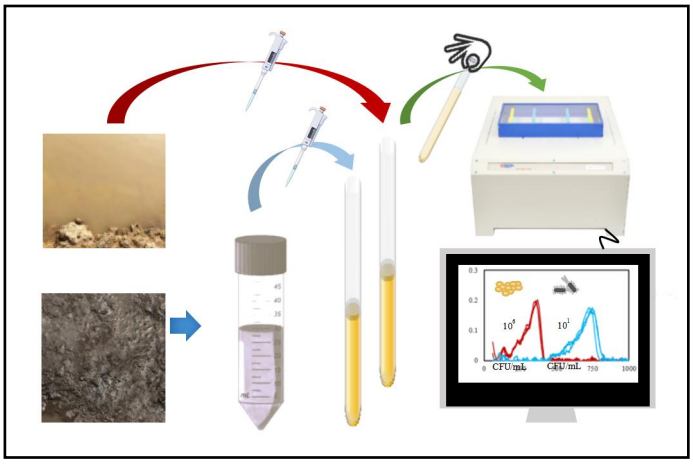
关键字 长江 汉江 水源地 生态风险 健康风险

分会场：23.环境监测与仪器
交流类型：墙报

水体和沉积物中粪大肠菌群的快检方法

杨倩倩、普小丹、卢峰、张艳、陈剑磊、张旭志*
黄海水产研究所

粪大肠菌群在一定程度上代表着环境受粪便污染的程度，是国际通行的水质监测指标。目前我国环境监测部门采用的多管发酵法、膜过滤法和酶底物法存在检测周期长（一般≥24 h）、步骤繁琐、必需专业实验室等问题，数据时效较性差且无法实现现场监测。电子微生物生长分析仪能够通过非侵入式在线监测污水、污泥、血液、牛奶等复杂基质中微生物生长过程的电容耦合非接触电导变化，自动绘制出具有超高时间分辨率的生长动力学曲线，并自动报告生长速率曲线和动力学参数，从而精确展现微生物生长的过程信息。基于该分析仪，我们建立了一种快速检测水体和沉积物中粪大肠菌群的方法。将水样和沉积物稀释样品加入预装有等体积选择性培养基（EC 肉汤）的检测管中，置入电子微生物生长分析仪实时在线监测 44.5℃下微生物生长动力学曲线并自动化报告达到最大生长速率所需时长（Tmr）值。该值与待测样品中粪大肠菌群的浓度在一定浓度范围内具有稳定的关系，因此根据测定的 Tmr 值和对应的函数公式即可计算出粪大肠菌群的浓度。对于水样，线性检测范围是 100～109 个/mL；对于沉积物样品，线性检测范围是 101～108 个/mL。本方法不需要将微生物从待测样品中分离，操作简便，且无需专业实验室和其它辅助设备，可以实现水体和沉积物样品中粪大肠菌群的现场检测，从取样到获得定量数据的全部周期一般不大于 7 h。



关键字 水体；沉积物；粪大肠菌群；监测；电子微生物生长分析仪

参考文献

1. Xu, G., Wang, T., Wei, Y., Zhang, Y., & Chen, J. *J Hydrol.*, **2022**, 604, 127204.
2. Zhang, X., Yang, Q., Ma, L., Zhang, D., Lin, W., Schlensky, N., Qu, K. *Biosens. Bioelectron.*, **2023**, 239, 115626.
3. Zhang, Y., Yang, Q., Lu, F., Wang, X., Liang, R., Pu, X., Zhang, X. *Int. Dairy J.*, **2024**, 159, 106073.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

硝基芳香污染物的非靶向超高通量识别：从大气到人体

邱兴华*
北京大学

大气化学的核心是臭氧生成循环，生成大量的多官能团的极性硝基芳香组分（pNACs）是该过程的重要副产物，具有重要的环境和健康意义；但受分析方法限制，目前缺乏对于大气中 pNACs 及其人体暴露的系统认识。本研究结合电子捕获负电离与串联质谱技术，开发出无需标样的 pNACs 分析技术。基于这一方法，从大气细颗粒物中识别出超过 4400 种 pNACs，根据硝基取代位特征，获取硝基水杨酸类组分液相自由基生成机制的观测证据。将这一技术用于人体尿液样品，识别出近二百种 pNACs，基于化学组成特征，判定这一类物质为直接吸收和（未经一相代谢）排泄的暴露标志物；发现 pNACs 暴露与硝化应激存在显著关联，且在高污染地区这一关联更加显著。

关键字 硝基芳香组分；大气细颗粒物；尿液；暴露标志物；硝化应激

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

快速效应导向分析：机器学习辅助环境中 AhR 效应物 HRMS 非目标筛查

游静*、程飞、李慧珍
暨南大学环境与气候学院

芳烃受体（AhR）活性在全球水体沉积物样品中常常被检测到，尤其是在城市河道沉积物中，需要建立快速有效的方法来筛查复杂环境中引起这类效应的主要致毒物质。前期研究显示效应导向分析（EDA）适合于识别环境中引起特定生物活性的新污染物，但是因为 EDA 往往涉及繁琐费时的化学分离和生物测定工作，EDA 的实际应用受到了一定限制。为了在新污染物监测中能有效识别关键致毒物，EDA 的快速化发展迫在眉睫。根据我们前期提出的事件驱动分类法（EDT）的概念（1-2），我们构建了两个高分辨率质谱（HRMS）数据库，即事件驱动子（ED）和事件驱动离子（EDION）数据库，将其集成开发了一种快速 EDA 策略，并有效用于识别城市河道沉积物中具有 AhR 活性的疑似（即已知未知）和非目标（即未知未知）新污染物。该数据库在 ToxCast 中 AhR 活性物的基础上，通过深度学习模型发展而成。沉积物萃取物，不再需要分离和生物测定循环，在 Thermo Scientific Orbitrap Exploris 240 LC-MS/MS 采集分析数据后，在 Compound Discoverer 模板中嵌入的 AhR-ED 和 AhR-EDION 数据库，直接检测具有 AhR 活性污染物。与常用的 ChemSpider 数据库相比，不仅可鉴定出更多 AhR 活性物，并且假阳性出现概率较低。AhR-EDION 库的使用有效发现未报道的新 AhR 活性化合物，其中增量最多的是工业中间体和转化产品，这体现了新建快速 EDA 策略在发现“未知未知”AhR 活性物有积极作用。总而言之，基于 EDT 的 HRMS 数据库的构建为识别复杂化学混合物中具有特定生物活性的新污染物提供了一种快速、有效的解决方案。

关键字 效应导向分析；非目标筛查；芳烃受体活性物；高分辨质谱；复合污染物

参考文献：

1. Cheng F., Li H.-Z., Brooks B.W., You J.* Retrospective risk assessment of chemical mixtures in the big data era: An alternative classification strategy to integrate chemical and toxicological data. Environmental Science & Technology, 2020. 54(10), 5925–5927
2. Cheng F., Escher B.I., Li H.-Z.*, König M., Tong Y.-J., Huang J.-H., He L.W., Lou X.H., Wu X.Y., Wang D.-L, Wu F., Pei Y.-Y., Yu Z.-Q., Brooks B.W., Zeng E.Y., You J.*, Deep learning bridged bioactivity, structure, and GC-HRMS-readable evidence to decipher non-target toxicants in sediments, Environmental Science & Technology, 2024, 58, 15415-15427

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

内分泌干扰物的识别和健康风险

金静、陈吉平*
中国科学院大连化学物理研究所

2021 年，全国十三届全国人大第四次会议提出重视新污染物治理，生态环境部一直在持续推进新污染物协同治理和风险管控。“新污染物识别、溯源和健康风险管控”入选 2024 年我国科协十大前沿科学问题。内分泌干扰物（EDCs）作为新污染物的典型代表，应用范围广，可通过模拟/拮抗激素等作用，影响内分泌腺体。近年来，与 EDCs 有关的疾病和失调近年来呈上升趋势。Nature 和 The lancet 顶级刊物报道了 EDCs 产前暴露易致儿童认知和注意力缺陷，危害人体荷尔蒙激素健康。Science 最新期刊发表我国生殖健康受损与环境风险有关，更是把关注内分泌干扰物健康推上建设美丽健康中国的日程。

随着世界范围内注册化学品数量的增长，EDCs 种类呈现指数型增长。未被识别的 EDCs 数量更大，而且其转化产物更加复杂，引起的疾病风险可能被低估。然后，与疾病相关联的暴露组分尚不明确，高危害组分的暴露来源依然不清楚。要回答上述科学问题，就要搞清楚影响人群健康的关键危害物是什么。基于高分辨质谱技术的靶标、可疑物和非靶标筛查作为现阶段污染物筛查与识别的重要技术手段，已广泛应用于人体生物监测、环境健康和风险评估领域。随着高分辨质谱技术的发展和非靶向分析技术的开发，EDCs 的非靶向筛查逐渐兴起。目前，在人体尿液中筛查出内源性代谢物和以酞酸酯、苯甲酮、酚类为代表的外源性物质，主要来自于化妆品、个人护理品、食品添加剂，塑料等化工中间体等。非靶向分析在污染物多样性和未知物识别具有巨大潜力，但是与疾病相关联的可疑物和非靶标筛查数据相对缺乏。基于高分辨质谱（LC-Orbitrap-HRMS, GC- Orbitrap-HRMS, LC-TOF-HRMS 等）与效应导向分析的筛查技术，提出了非靶向毒性分析的理念和方法学，可实现从“非靶向化合物分析”到“非靶向毒性分析”的跨越，从而揭示关键危害物与人群健康风险之间的关系，促进健康风险评估提供技术和数据支撑。

关键字 内分泌干扰物，非靶向筛查，毒性效应，健康风险

参考文献：

1. L.G. Kahn, C. Philippat, S.F. Nakayama, R. Slama, The Lancet Diabetes & Endocrinology, 2020, 8, 703-718.
2. R.Feng, B.Chen, Nature Reviews Endocrinology, 2024, 20, 187-188.
3. M.J. Yue, X.L. Zhou, J.T. Fan, S. Gao, X.E. Zhao, S.Y. Zhu, Q. Liu, G.B. Jiang, Trac-Trends in Analytical Chemistry, 2024, 171.
4. S. Hong, J. Lee, J. Cha, J. Gwak, J.S. Khim, Environmental Science & Technology, 2023, 57,19148-17155

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

一种水体新污染物采样装置及筛查技术

傅建捷*
国科大杭州高等研究院

环境水体中新污染物的监测是保护水生生态和保障水质安全的重要前提 1。在水体新污染物的监测中，水样的采集和前处理是十分重要的环节。传统方法需要将大量水样（通常需要 1 L 以上）采集后运输至实验室进行前处理，整个过程不仅费时费力，还有引入二次污染的风险。此外，传统的水样前处理技术（如液液萃取和固相萃取）通常只能针对某一类或有限的几种污染物，在分析不同类别的污染物时则需要采用不同的前处理方法，水样消耗量大且过程繁琐 2。针对上述问题，本研究设计了一种基于分散固相萃取的水样采集-前处理一体化装置。该装置由采样和过滤装置两部分组成，可实现水样中新污染物的现场富集，避免了常规水质监测中水样的运输和储存过程，具有便捷、高效、无二次污染的优点。在此基础上，通过亲水亲脂平衡吸附剂（HLB）、弱阳离子交换吸附剂（WCX）和弱阴离子交换吸附剂（WAX）的优化组合，开发了一种水体中新污染物的高通量分散固相萃取前处理方法。该方法对包括全氟化合物、有机磷酸酯、药物、农药等在内的 123 种新污染物（Log Kow 在-2~10 范围内，pKa 在 0~14 范围内）的回收率在 60%~130%之间。此外，通过液相色谱-质谱联用技术建立了水体中新污染物的高灵敏靶标分析和高通量非靶标筛查方法，并且成功应用于某饮用水源地新污染物的筛查。靶标分析结果显示，该水源地地表水中主要检出的污染物为全氟辛酸、磷酸三乙酯、磷酸三（1-氯-2-丙基）酯、地氟沙星等，其平均浓度在 2.18~22.59 ng/L 范围内。非靶标筛查发现 14 种置信等级为 Level 2 的新污染物，包含聚乙二醇类物质、苯达松、氟磺胺草醚、甲氧虫酰肼等农药。本研究开发的水体新污染物采样装置具有快速、便捷、广谱、无交叉污染的优势，结合靶标和非靶标分析技术，能够应用于水体新污染物的筛查。

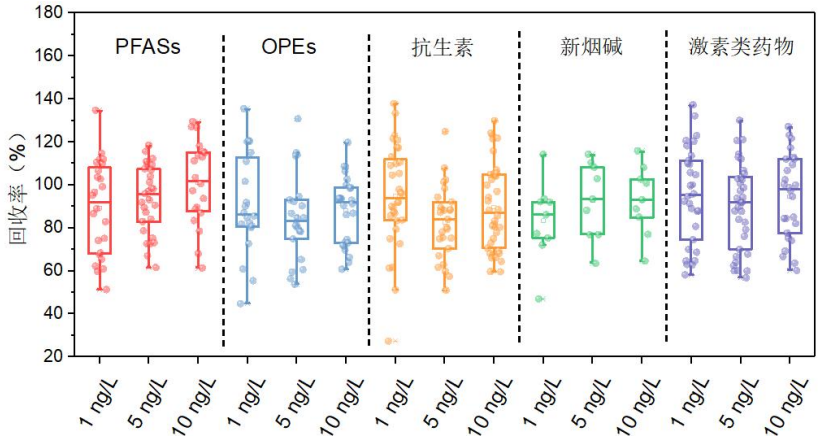


图 1. 水样现场富集装置对 123 种新污染物的回收率

参考文献：

1. N. Morin-Crini, E. Lichtfouse, G. Liu, et al., *Environ Chem Lett*, **2022**, 20, 2311-2338.
2. K. M. Dimpe, P. N. Nomngongo, TrAC Trend Anal. Chem. **2016**, 82, 199-207.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

大气细颗粒物中半挥发性有机污染物的非靶向筛查

高丽荣*、乔林、徐驰
中国科学院生态环境研究中心

空气污染与心血管疾病、呼吸道疾病、肿瘤发病及相关疾病恶化有密切关系。但是，大气颗粒物组分和来源极其复杂，其诱发疾病的毒性组分及健康危害机制仍不清楚，这给有针对性地控制大气污染引起健康风险带来了极大困难。因此，大气细颗粒物中毒性组分的识别尤为重要。

基于全二维气相色谱-飞行时间质谱首先开展了对北京大气细颗粒物中芳烃类化合物的筛查，识别出 386 种化合物，利用标准物质定量了 10 余种芳烃，并结合毒性当量因子识别出高风险的芳烃，为更准确评估此类化合物健康风险提供了依据。不局限于芳烃类物质，通过 EPA ToxCast 数据库识别出大气中 76 种毒性效应化合物，其中 5 个在大气中为首次报道。通过计算各污染物在人体 6 组织 50 靶点的毒性贡献，筛选出 29 个需优先关注的污染物，并通过系统生物学方法构建二分网络对复杂的化合物-生物效应关系进行可视化，揭示了大气中高风险污染物的 12 个主要有害结局路径。因气固分配和粒径分布会影响大气污染物的环境行为和人体暴露风险，结合化学计量学手段，筛查出了 88 个在气相和 PM1 中具有显著性差异的有机组分，50 个 PM1 和 1-2.5μm 颗粒物中显著差异性组分。通过 ICRP 模型和皮肤渗透模型估算了这些污染物的人体日暴露量，并利用计算毒理学方法对其进行毒性评估，发现大气中 10 种比常规监测的 PAH 具有更高毒性的新污染物。

这些研究从非靶向筛查角度突破了对大气中传统有机组分的认识，前瞻性地识别出了一些先前未知的高风险污染物，可为推动国家新污染物治理工作，以及提出面向人民生命健康为导向的空气质量管理方案提供一定的数据支持。

关键字 大气，非靶向筛查，全二维气相色谱-飞行时间质谱，半挥发性污染物

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

计算机辅助高分辨质谱用于有机磷酸酯类新污染物的筛查

吴婷*、熊闾然、杜一平
华东理工大学

有机磷酸酯(OPEs) 是一类被广泛添加到塑料、建材、家具、电子产品和纺织用品等中作为阻燃剂、增塑剂和防沫剂的化合物，因其对环境和人类健康造成的不良影响而引起人们的广泛关注和重视。迄今为止，文献中尚无专门的自动化筛查软件用于非靶向筛查有机磷酸酯类污染物。本研究开发了一种 OPEs-ID 的工作流程和软件，用于自动筛查和鉴定所采集的液相色谱-高分辨质谱数据中的有机磷酸酯。OPEs-ID 的主要工作流程包括特征诊断离子筛选，元素组成确定，正负提取离子流对比，以及 MetFrag 理论模拟碎片匹配等策略。实验结果表明，OPEs-ID 针对 17 个有机磷酸酯混合标准品的鉴定成功率为 100%，其中在本地数据库中检索排名第 1 位的正确率为 94.1% (在 PubChem 中为 41.2%)。该结果相比传统的计算机碎片模拟匹配算法有了显著改善。通过分析空气中的细颗粒物样本(PM2.5)的高分辨质谱数据，OPEs-ID 自动检索到 22 条有候选分子结构的记录，经过人工确认发现其中 9 个为首次鉴定到的有机磷酸酯类污染物。在收集到的 32 个 PM2.5 样本中，9 种新有机磷酸酯的检出率在 13%～100%之间，其半定量浓度与一些传统的有机磷酸酯的含量相当。总之，OPEs-ID 可以显著提高有机磷酸酯的筛查效率和准确度，并将成为发现新污染物的强有力工具。

关键字 有机磷酸酯，新污染物筛查，化学信息学，高分辨液质联用

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

我国茶叶中有机磷酸酯的污染来源、包装迁移和暴露评估

王鑫、朱青青*、廖春阳、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

茶叶是全球消费量最大的饮料之一，尤其是在中国。然而，茶叶中有机磷阻燃剂（OPFRs）的污染状况和潜在来源仍不清楚。本研究，我们分析了中国 6 类茶叶样品中的 15 种 OPFRs。所有茶叶样品中都检测到 OPFRs，总浓度（∑OPFRs）为 3.44−432 ng/g（几何均值：17.6 ng/g）。TPhP 是主要的 OPFR，占所有茶叶类别中∑OPFRs 的 39.0%−76.2%。茶叶包装材料（TPMs）是茶叶中 OPFRs 的主要来源。迁移测试表明，分子量和 LogKow 值较低的 OPFRs 更容易从 TPMs 迁移到茶叶中。虽然一些国家的普通人群每天从茶叶中摄入的 OPFRs 估算值（4.41−7.55 ng/kg bw/day）相对高于中国（3.72 ng/kg bw/day），但中国茶叶中的 OPFRs 对健康的危害较小。这项研究首次确定了中国茶叶中 OPFRs 的基准浓度，并探究了 OPFRs 的污染源。为减少茶叶产品中 OPFRs 的存在，重点在于提高 TPMs 的安全标准。

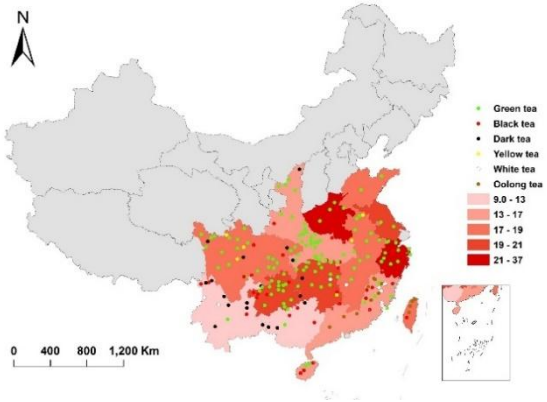


图 1. 6 种茶叶样品中在我国 18 个省份中∑OPFRs 的浓度分布

关键字 茶叶，有机磷酸酯，污染来源，包装迁移

参考文献：

1. Fernández-Arribas, J.; Moreno, T.; Eljarrat, E. Human exposure to organophosphate esters in water and packed beverages. *Environ. Int.*, 175: 107936 (2023).
2. He, C.; Wang, X.; Tang, S.; Phong, T.; Li, Z.; Baduel, C.; Mueller, J.F. Concentrations of organophosphate esters and their specific metabolites in food in southeast Queensland, Australia: Is dietary exposure an important pathway of organophosphate esters and their metabolites? . *Environ. Sci. Technol.*, 52: 12765-12773 (2018).
3. Wang, X.; Wang, W.; Zhu, Q.; Wang, Y.; Liao, C.; Jiang, G. Organophosphate esters in foodstuffs from multiple provinces in China: Possible sources during food processing and implications for human exposure. *J. Agric. Food Chem.*, 2022, 8609-8618 (2022).
4. Zhang, X.; Zou, W.; Mu, L.; Chen, Y.; Ren, C.; Hu, X.; Zhou, Q. Rice ingestion is a major pathway for human exposure to organophosphate flame retardants (OPFRs) in China. *J. Hazard. Mater.*, 318: 686-693 (2016).

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

黄河沉积物中新污染物筛查与风险评估

杨舒萍[1,2]、杨振[1,2]、朱豹[1]、李鹏扬[1]、黄凯[1]、符杰[1]、张海燕[1]、傅建捷*[1,2]、江桂斌[1,2]
1. 国科大杭州高等研究院
2. 中国科学院生态环境研究中心

新污染物在环境中普遍存在，沉积物中新污染物的吸附与释放会对水质产生显著影响[1,2]。目前对于我国主要流域沉积物中新污染物赋存特征及环境风险的相关研究十分缺乏，迫切需要开展流域尺度的全面调查。本研究基于高分辨率质谱，建立了沉积物中新污染物广谱提取前处理方法和非靶标筛查方法，以揭示黄河源头及河口沉积物中新污染物的赋存特征。最终鉴定出 179 种化学品，涉及 11 种用途类别，其中高频检出化合物 54 种，主要为药物（n = 6）、个人护理用品（n = 11）和季铵盐类化合物（n = 7）。受畜牧业、农业生产和人类活动等因素影响，黄河沉积物中检出化合物在上下游间呈现差异性分布。毒性当量风险评估表明，农药、季铵盐、药物及个人护理品是高风险化合物类别，季铵结构和芳香胺结构化合物需要重点关注和进一步研究，可能对黄河水生生物构成生态风险。本研究成功构建流域环境新污染物筛查和风险评估技术框架，提出流域新污染物优控清单，为流域新污染管控和治理提供科学数据支撑。

关键字 沉积物，新污染物，非靶向筛查，生态风险评估，化合物优选

参考文献：

1. Guo, J.; Li, Z.; Ranasinghe, P.; Bonina, S.; Hosseini, S.; Corcoran, M. B.; Smalley, C.; Kaliappan, R.; Wu, Y.; Chen, D.; et al. Occurrence of atrazine and related compounds in sediments of upper Great Lakes. *Environ. Sci. Technol*. **2016**, 50(14), 7335−7343.
2. Li, P.; Su, W.; Zhong, L.; Wang, H.; Huang, X.; Ruan, T.; and Jiang, G.; *Environ. Sci. Technol*. **2024**, 58 (15), 6814−6824.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

水样中污染物的非靶向筛查方法与质量控制

张庆合*、张燕
中国计量科学研究院

水环境中存在多种复杂的、新出现的污染物（NEPs），这些污染物具有多样的化学特性和浓度水平，跨度可达多个数量级。现有的靶向化合物分析方法，如液-液萃取（LLE）和QuEChERS 方法，存在溶剂消耗高和易乳化等问题，不适用于大体积样品的处理。先进的技术如固相萃取（SPE）、超临界流体萃取（SFE）、固相微萃取（SPME）和微波辅助萃取（MAE）虽然在效率上有所提升，但在处理化学性质多样的污染物方面缺乏多功能性。

关键字 非靶向筛查，污染物，前处理，质量控制

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

基于全二维气相色谱保留行为筛查母乳中具有生物蓄积潜力的化合物

张濛心、郑明辉、高丽荣*
生态环境研究中心

人类暴露于环境污染物会对健康造成不利影响。具有生物蓄积潜力的化合物需要优先关注，它们进入生物体内会持续积累，对健康产生长期危害。[1,2] 母乳是监测人体暴露有机污染物水平常用的生物基质。目前对母乳中污染物的研究主要集中在传统污染物的生物监测，而对于新污染物的监测存在滞后性，为了主动识别未知风险的化合物，开展非靶标筛查是十分必要的。[3,4] 但是对于新污染物，缺乏详尽的物化数据，使得筛查具有生物蓄积潜力的化合物具有一定挑战。[5] 因此，开发有效的数据筛选方法实现生物蓄积潜力化合物的快速筛选十分必要。[6,7]

本研究提出了一种筛选具有生物蓄积潜力化合物的方法。通过构建全二维气相色谱保留行为与分配特性模型，将分配特性映射到 GC×GC 色谱图上，可在化合物结构鉴定前快速锁定具有生物蓄积潜力的化合物，有效的减少了需要结构鉴定的化合物数量。对来自中国 7 个省份的 20 份母乳混样进行分析。从 3000 多个化合物中筛选出 1286 个具有生物蓄积潜力的化合物。其中 62 种化合物具有较高的置信水平，包括芳香族化合物、邻苯二甲酸酯和酚类化合物等，其中 27 种化合物首次在母乳中发现。对其进行定量分析，三种邻苯二甲酸酯增塑剂和两种酚类抗氧化剂的浓度明显高于其他化合物。采用毒理学优先指数法，基于浓度、检测频率和 8 种毒性效应对化合物进行优先排序。结果表明，邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯、邻苯二甲酸二丁酯、1,3-二叔丁基苯、菲、2,6-二叔丁基-1,4-苯醌、2,4-二叔丁基苯酚等 13 种化合物具有较高的健康风险。同时，一些具有特定毒性作用的化合物，如苯并噻唑和香叶丙酮，仍然需要关注。这项研究有助于了解人体暴露于环境污染物的风险。

关键字 GC×GC、分配特性、生物蓄积潜力、母乳、优先级排序

参考文献：

1 Strempel S, Scheringer M, Ng CA, Hungerbühler K. Screening for PBT Chemicals among the “Existing” and “New” Chemicals of the EU. Environ Sci Technol. 2012 Jun;46(11):5680–7.

2 McLachlan MS. Bioaccumulation of Hydrophobic Chemicals in Agricultural Food Chains. Environ Sci Technol. 1996 Dec;30(1):252–9.

3 Pourchet M, Narduzzi L, Jean A, Guiffard I, Bichon E, Cariou R, et al. Non-targeted screening methodology to characterise human internal chemical exposure: Application to halogenated compounds in human milk. Talanta. 2021 Apr;225:121979.

4 Tran CD, Dodder NG, Quintana PJE, Watanabe K, Kim JH, Hovell MF, et al. Organic contaminants in human breast milk identified by non-targeted analysis. Chemosphere. 2020 Jan;238:124677.

5 Escher BI, Stapleton HM, Schymanski EL. Tracking complex mixtures of chemicals in our changing environment. Science. 2020 Jan;367(6476):388–92.

6 Nabi D, Arey JS. Predicting Partitioning and Diffusion Properties of Nonpolar Chemicals in Biotic Media and Passive Sampler Phases by GC × GC. Environ Sci Technol. 2017

Mar;51(5):3001–11.

7 Nabi D, Gros J, Dimitriou-Christidis P, Arey JS. Mapping Environmental Partitioning Properties of Nonpolar Complex Mixtures by Use of GC × GC. Environ Sci Technol. 2014 Jun;48(12):6814–26.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

安捷伦高分辨质谱技术在新污染物筛查中的应用

王雯雯*
安捷伦科技（中国）有限公司

新污染物不同于常规污染物，指新近被发现或被关注，对生态环境或人体健康存在风险，尚未纳入管理或者现有管理措施不足以有效防控其风险的污染物。随着大量化学品进入生产和使用，新污染物的种类越来越多。如何对潜在新污染物进行可靠的高通量分析，也是环境领域面临的挑战。安捷伦高分辨质谱可以提供高灵敏度和高分辨率的全扫描采集，完美适配可疑物和未知物的分析，助力环境潜在污染物的全面筛查。以 GC/Q-TOF 平台为例，通过建立当前备受关注的全/多氟烷基化合物（PFAS）GC/Q-TOF 高分辨质谱数据库，对不同环境基质开展 PFAS 类化合物的可疑筛查，并且采用创新的 Suremass 解卷积模式结合 NIST23 谱库，对样品中其他污染物进行未知物分析。通过该策略，不仅筛查出五种 PFAS 污染物，并且筛查出多种其他诸如农药，多氯联苯和多溴联苯醚等污染物。

关键字 赞助报告

参考文献：

1.Wong, L.; Black, G.; Young, T.; Nieto, S.使用高分辨 GC/Q-TOF 分析土壤和燕麦植株中的 PFAS 和其他环境污染物，安捷伦科技公司应用简报，出版号 5994-7351ZHCN，2024

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

光控环介导等温扩增结合试纸条快速检测抗性基因 mecA

张毅*、高玉娥、黄晴
江南大学

研究目的： 本研究聚焦于抗生素抗性基因（ARGs）的快速检测，特别是针对 *mecA* 基因的监控，该基因是导致细菌对抗生素产生耐药性的关键因素。旨在通过创新技术手段，提高检测效率与便捷性，以有效阻断耐药菌及其抗性的传播。核心在于开发一种结合金纳米粒子（AuNPs）介导的光控环介导等温扩增技术（LAMP）与试纸的快速可视化检测方法。

方法：首先，制备 AuNPs 并对其结构和性质进行详细表征，确保其作为能量转换介质的有效性；利用 532 nm 激光手电作为光源，AuNPs 作为光能到热能的转换媒介，系统优化 LAMP 反应体系，包括调整 AuNPs 的用量、dNTPs 浓度、内外环引物比例、BSA 添加量、Mg^{2+}浓度及 Bst 酶用量，同时精细调控激光功率和光照时间，以达到最佳扩增效率。设计夹心型胶体金试纸，用于 LAMP 产物的快速可视化检测。通过优化探针用量及探针与扩增产物的孵育时间等参数，确保试纸的灵敏度和准确性。

结果：光控 LAMP 技术在 15 分钟内完成了 *mecA* 基因的快速扩增，相比传统金属浴 LAMP 的 40 分钟以上，效率提高了约 2.1 倍。针对 LAMP 产物的试纸在 5 分钟内即可输出检测结果，可视化检出限达到 13.8 copies/μL，相当于耐甲氧西林金黄色葡萄球菌约 350 CFU/mL，展现了高度的灵敏性和实用性。

结论：本研究成功建立了一种基于 AuNPs 介导的光控 LAMP 结合试纸的快速可视化检测抗性基因 *mecA* 的新方法。该方法不仅显著提升了等温扩增技术的效率，还实现了现场快速检测的需求，为抗生素抗性基因的监控提供了新的技术手段和思路。

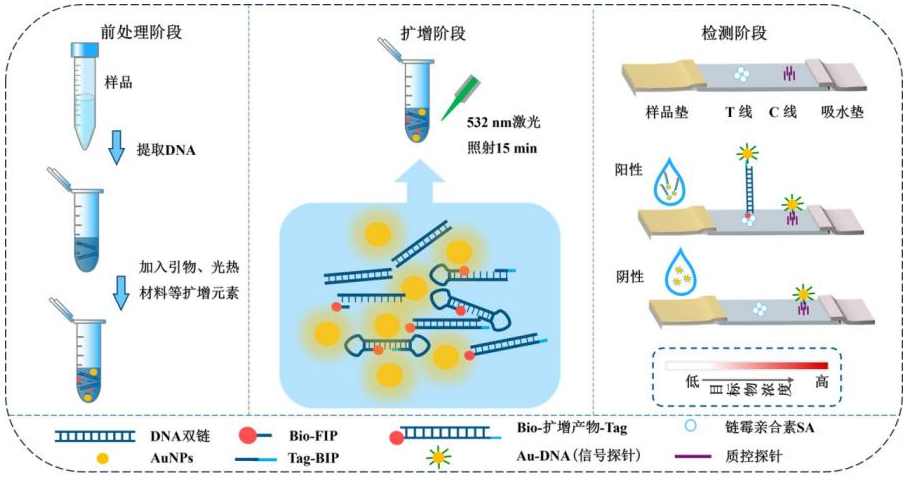


Fig. 1 Schematic flow of laser-controlled LAMP combined with test strips for rapid visual detection of *mecA*.

关键字 光控 LAMP；试纸；抗性基因；mecA；AuNPs

参考文献

[1] Gao J; Jiao Y; Zhou J, et al. *Talanta* **2024**, **270**: 125553.
[2] Liu D; Li W; Yang M, et al. *Biosensors and Bioelectronics* 2021, 192: 113507.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

新污染物快速分析及应用

张祯*
江苏大学

环境中的新污染物，具有浓度低、分布广、基质复杂等特点。以液相色谱-质谱联用等为代表的仪器分析方法，结合固相萃取等前处理手段，可对污染物进行准确定量。但是，由于所用仪器极其昂贵，且存在测试成本高、分析时间长、检测所需样品量大及前处理步骤繁琐等不足，无法在较大范围内系统、全面、快速分析污染物的含量。与此相比，基于抗体（或其它具有识别功能的生物大分子）的生物分析方法具有前处理简单、分析过程快捷、高通量的优势，可以弥补仪器分析的不足。本研究受辣根过氧化物酶天然结构的启发，选取氯化血红素和 BSA 共组装合成了一种新型仿生纳米酶，并以沸石咪唑框架材料的外壳进行包裹。得益于 ZIF-8 的限域效应，所合成的纳米酶有较高的类过氧化物酶催化活性，同时对高温、强酸/强碱、有机溶剂等非生理条件的耐受性也得到了极大地提高，结合生物识别分子所构建的生物分析方法，显示出优异的分析性能 1；此外，我们传统的免疫分析反应进行了改进，通过引入过氧化铜纳米点实现自供给 H2O2，可有效避免免疫分析中 H2O2 直接加入所导致的底物溶液不稳定，及对生物分子活性的抑制 2。在基于核酸适配体的生物分析中，我们系统研究了纳米材料与核酸材料的合作效应，在新型生物分析方法构建及性能提升方面提供了一些新的思路

关键字 新污染物，快速检测，生物分析，生物识别元件

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

纳米酶基新污染物均相电化学/比色双模传感研究

朱刚兵*
江苏大学

新污染物是指人类活动引起的，最近发现或者被关注，但尚未纳入管理或者现有管理措施不足以有效防控其风险，对生态环境和人类健康造成严重危害的污染物[1]。其具有“危害严重、风险隐蔽、来源广泛、治理复杂和环境持久性”的特点[2]。然而，目前对于新污染物的检测尚缺乏有效方法。此外，纳米酶是一类既有纳米材料的独特性能，又有催化功能的模拟酶。相比于自然酶，纳米酶具有催化效率高、稳定、经济和规模化制备的特点[3]。最近，我们制备了多种纳米酶，基于一些新污染物与纳米酶的特定作用，构建了几种新污染物如去多氟/全氟烷基类化合物和四环素类的均相电化学/比色双模传感研究工作。

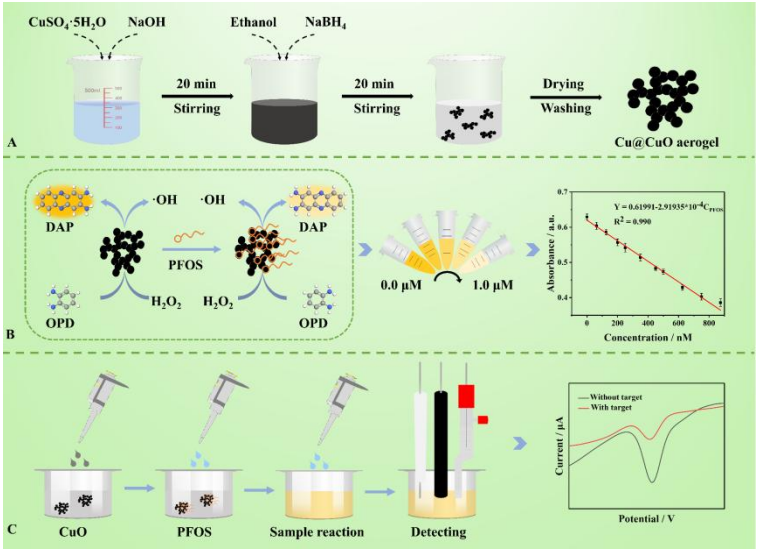


图 1 各基于 Cu@CuO 的 PFOS 均相电化学/比色双模传感研究

关键字 新污染物，纳米酶，电化学传感，比色传感

参考文献：

1. M. Scheringer, Science, 2023, 381, 251-251
2. Kazemi R, Potts EI, Dick JE. Analytical chemistry. 2020;92(15):10597-605.
3. Nature Nanotechnology, 2007, 2, 577-583.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

城市道路环境中橡胶衍生化合物的归趋

刘悦弘、赵建亮*
华南师范大学

城市道路建设和使用过程中产生大量化学污染物，以诸多方式释放到道路环境。降雨时，大气中的毒害污染物通过湿沉降进入路面，并与路面原有赋存污染物一起“汇聚”成道路地表径流，携带道路上的污染物向自然环境迁移。结果表明，地表径流中橡胶衍生化合物（RDCs）在商业区浓度最高，城中村次之，绿地最小，总浓度可达数十至数百微克每升。其中 DPG 的污染水平在μg/L 级别，最高可达 178 μg/L（商业区）。RDCs 随降雨时间的推移，浓度水平呈现出相似的规律：前期低，中期高，后期低。中小强度的降雨可能会导致更严重的 RDCs 污染。地表水中，各类目标化合物中最主要的是 N-（1,3-二甲基丁基）-N'-苯基对苯二胺（6PPD）、6PPD-醌、2-苯并噻唑啉酮和 1,3-二苯基胍。降雨后，地表水中的 RDCs 含量明显下降（$P < 0.01$），表明降水有助于减轻受纳流域的 RDCs 污染。据我们所知，这是首次报道中国地表水中的 N,N'-二羟基对苯二胺醌（DTPD-Q）含量。监测雨水径流是预测河流中 RDCs 污染负荷的有效措施。风险评估表明，大多数 RDCs 至少会对水生生物造成中等程度的风险，尤其是 6PPD-Q。这些研究结果有助于了解降水事件后 RDCs 在地表径流和受纳环境中的环境归宿和风险。

关键字 橡胶衍生化合物；地表径流；地表水

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

典型工业过程高风险新污染物筛查识别与优先监测清单建立

金蓉*、刘雅慧、虞哲富、郑明辉
国科大杭州高等研究院

研究目的：工业热过程是许多高风险有机污染物，如二恶英、多氯联苯等的重要来源。尽管现有的管控技术将该过程排放的多种有毒有害污染物，如多环芳烃、二恶英等纳入了监测范围，并发展了降低其排放的技术方法，但近年来有大量研究发现，该过程排放的污染物可对周边环境造成显著健康风险。主要原因是这些工业过程可排放大量目前未能识别却具有高环境风险的新污染物。全面识别该过程排放的新污染物，并评估其毒性效应是发展管控措施，并降低其环境风险的重要前提。因此，本研究对典型工业过程排放的高风险新污染物进行全面的筛查与评估，旨在明晰该过程新污染物的排放特征，并对其风险进行全面评估，最终提出优先监测清单。

方法：本研究以垃圾焚烧过程作为代表，采集了 29 个焚烧炉的 174 个垃圾焚烧厂烟气样品。利用气相色谱-轨道阱质谱仪器，对烟气样品进行全面的分析筛查识别。基于结构效应模型，对筛查识别出的新污染物进行毒性效应的评估和环境特性评估，最终提出高风险新污染物清单。

结果：本研究采用非靶标筛查技术对样本进行全面的分析，共识别出 646 种有机化合物。然后，根据美国环保署的 TOXCAST 数据库和结构效应模型，对化合物的特性（即毒性效应、毒性浓度、持久性和生物累积性等）进行了评估和优先排序，结合固体废弃物季节和类型的变化，提出了涵盖了 28 种有机污染物的优先监测清单。最后，通过我国不同地区的固体废弃物焚烧相关排放风险进行评估发现，若对优先监测清单上的污染物进行控制，可将排放风险平均降低 71.4%。

关键字 典型工业过程；新污染物；优先监测

参考文献：

1. Yahui Liu, Guohua Zhu, Zhefu Yu, Changliang Li, Bingcheng Lin, Guorui Liu, Rong Jin*, Minghui Zheng, *Environmental Science & Technology*, **2024**, https://doi.org/10.1021/acs.est.4c06169

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

环境和人体中卤代有机污染物的识别方法研究

林泳峰*、林欢、李晶晶
青岛大学

化学品在大量使用过程中的释放/排放已经引起了严重的环境与健康问题。《斯德哥尔摩公约》已对多种卤代有机污染物（如全氟/多氟烷基化合物、多氯联苯等）的使用进行管控。但由于结构和数量的多样性、“改良”替代品的产生以及代谢转化行为，目前对环境和人体中卤代有机污染物的认识仅是冰山一角，导致无法准确评估卤代有机污染物的环境与健康风险。本研究建立了基于高分辨质谱分析卤代有机污染物的靶标、疑似靶标和非靶标识别体系：（1）实现了环境水体中新型全氟/多氟烷基化合物（PFAS）的同步定性和定量分析；（2）结合实验室模拟转化实验，首次在环境中发现一类新型 PFAS，可能为氯代多氟醚基磺酸的转化产物；（3）采用重要化学品清单引导的疑似靶标分析方法，首次揭示了颗粒物中 12 类具有潜在毒性效应的关键有机组分；（4）基于质量亏损和同位素分布的非靶标分析方法，在新生儿脐带血中识别出 70 种卤代有机污染物；（5）采用多重线性回归和贝叶斯核机回归模型探究了卤代有机污染物单体和混合物暴露对新生儿出生结局（出生体重、出生体长和身体指数）的影响。结果显示，部分单体和混合物暴露均可增加新生儿的肥胖风险。通过以上研究，系统建立了环境和人体中卤代有机污染物的识别体系，为后续的环境行为、人群流行病学和毒理学研究提供了关键科学数据。

关键字 卤代有机污染物、高分辨质谱、筛查识别

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：报告

养殖场地抗微生物药物及其转化产物的污染特征研究

黄争*、赵建亮
华南师范大学

养猪场广泛使用多种抗微生物药物用于疾病治疗和促进生长，包括抗生素、抗真菌药物、抗寄生虫药物和抗病毒药物，这些抗微生物药物可能通过粪肥回用和沼液灌溉等形式进入周围环境[1]。过去，研究主要集中在养殖场地特定抗生素的定量分析上[2]。然而，目前对养殖环境中抗微生物药物及其转化产物进行全面鉴定的研究非常有限。

本研究采用靶向定量与非靶向筛查的方法，全面解析了典型养猪场中抗微生物药物及其转化产物的污染特征。本研究于 2021 年针对一个以沼液灌溉周围环境植物的养猪场（浙江），采集了新鲜粪便、堆肥、沼气污泥、表层土壤/土壤柱、地下水和植物样品。在 98 种目标化合物中，共定量检测出 29 种，其中以四环素类（TCs）检出频率最高（>90%），而且在表层土壤中的浓度高达 4251 ng/g。同时，这些物质在场地土壤中大量向下蓄积迁移，最大迁移深度约为 1 米，其中强力霉素和恩诺沙星迁移深度最深。非靶向筛查共匹配到 75 种抗微生物药物，其中有 10 种首次在养殖环境中检出。同时，恩诺沙星和 8-羟基喹啉在所有样品中都有检出。对无标准品的物质进行半定量分析显示，首次检出的克拉沙星在沼液中浓度超过 5000 ng/L。各环境介质中共识别出 320 种 TPs，这些 TPs 来源于微生物/酶代谢途径。本研究首次全面展示了典型养猪场中抗微生物药物及其 TPs 的整体情况，并提供了一个值得关注的物质清单。同时，结果强调了对以前关注较少的养殖场中过度使用的 ADs 的发生和分布进行定量调查的重要性。

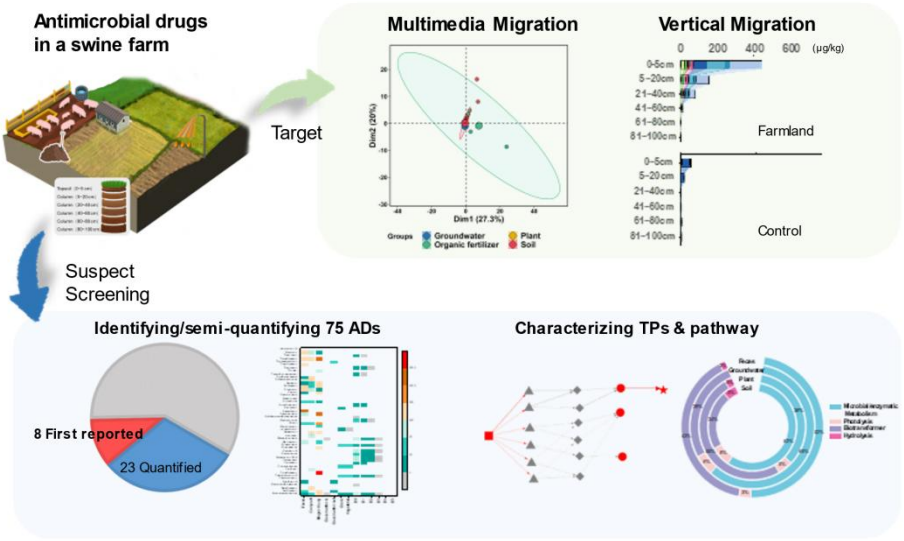


图. 1 养殖场地抗微生物药物及其转化产物的污染特征

关键字 抗微生物药物；典型养猪场；非靶向筛查；转化产物；纵向迁移

参考文献

1. Cycon, M., Mrozik, A. and Piotrowska-Seget, Z. 2019. Antibiotics in the Soil Environment-Degradation and Their Impact on Microbial Activity and Diversity. Front. Microbiol.

10, 338.
2. Gu, D., Feng, Q., Guo, C., Hou, S., Lv, J., Zhang, Y., Yuan, S. and Zhao, X. 2019. Occurrence and Risk Assessment of Antibiotics in Manure, Soil, Wastewater, Groundwater from Livestock and Poultry Farms in Xuzhou, China. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 103(4), 590-596.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

水体中多氯丁二烯和多氯苯的环境界面行为研究

范哲[1,2]、李欣洋[1,2]、俞泽臣[2]、傅建捷[1,2]、张海燕*[2]、江桂斌[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

多氯丁二烯（CBDs）及多氯苯（CBs）都是具有环境持久性、生物累积性和潜在毒性危害的有机污染物。这些物质会通过工业排放、农业活动和城市径流等途径进入水环境，并可能通过水体接触甚至食物链对人类健康构成威胁。因此，研究 CBDs 和 CBs 在水环境中的环境行为对于其来源与归趋解析、环境修复和风险评估至关重要。

本研究构建了水-气-沉积物三相水环境介质系统，探究了 9 种 CBDs (Cl4-Cl6)和 11 种 CBs (Cl2-Cl6)在该系统中的动态迁移过程及其影响因素。实验结果表明，在 20℃无光照条件下，CBDs、CBs 在气相中的百分比含量普遍较低，最高未超过 18.8%，与 EQC Level III 模型拟合结果存在差异，这可能与实验条件的控制和模型参数的设定有关[1-2]。辛醇/水分配系数（$LogK_{OW}$）大于 4.5 的 CBDs、CBs 主要分布在沉积物中，占三相赋存总量的 45.9%至 92.7%之间，而在水相中的占比较低（平均值为 30.4%），表明沉积物是水体这类污染物的主要汇。相比之下，$LogK_{OW}$≤4.5 的 CBDs、CBs 主要分布在水相中。沉积物-水分配系数对数值（$LogK_d$）的大小可以反映化合物与沉积物亲和力的强弱。本研究观察到氯原子取代数与 LogKd 值之间存在显著的正相关性（R^2＞0.90，p＜0.001），暗示氯原子数量的增加会提升化合物的疏水性。温度相较于 pH 对目标物质在水环境中的环境界面行为影响较大。水体温度由 10℃提升至 30℃时，CBDs、CBs 从水相向沉积物迁移，且迁移程度随着化合物 $LogK_{OW}$ 值的减小而增强，说明温度对 $logK_{OW}$ 较小的物质影响较大。而在广泛的 pH 范围内（6.0~9.0），CBDs、CBs 在各相中的含量相对稳定，在各相中的百分比含量变化均小于 5.8%。进一步吸附解吸实验表明，$LogK_{OW}$＞4.5 的 CBDs、CBs 的吸附过程以化学吸附为主，而 $LogK_{OW}$≤4.5 的化合物吸附过程的速控步骤是液膜扩散，Freundlich 模型能够准确描述目标化合物的平衡吸附-解吸特性（R^2＞0.98）。以上研究结果揭示了 CBDs、CBs 的水环境界面分配和归趋，为进一步的环境风险评估和修复提供了理论依据。

关键字 多氯丁二烯；多氯苯；环境界面行为；吸附解吸；

参考文献：

1. DMER, AEL 1996: Pathways analysis using fugacity modelling of hexachlorobutadiene for the second Priority Substances List Report prepared for Chemicals Evaluation Division commercial Chemicals Evaluation Branch, Environment Canada, by Don Mackay Environmental Research (DMER), Peterborough, Ontario, and Angus Environmental Limited (AEL), Don Mills, Ontario, Canada.
2. Eva W ,Don M ,Antonio G D , et al.Regional differences in chemical fate model outcome.[J].Chemosphere,2004,55(10):1361-76.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

新污染物光引发剂的职业人体暴露

沈捷、纪晓萌、刘润增*
山东大学

光引发剂（PIs）是一类广泛用于各种商业产品中的化学添加剂，可以在紫外光下产生自由基来引发聚合反应。现有的研究不仅在商业产品和环境基质中检测到了 PIs，多种人体基质中也检出了一定量的 PIs。例如，美国收集的人体血清样本里检测到了一定量的 PIs，其浓度为 423-2870 pg/mL（几何平均浓度：836 pg/mL）。来自美国的人母乳样品中 PIs 的检测浓度范围为 0.46-81.7 ng/mL（几何平均浓度：10.9 ng/mL）。PIs 在人体基质中的广泛检出表明了其在大规模人群中的显著暴露情况。更有研究发现美甲店的室内灰尘中检测到了高浓度的 PIs，其总浓度为 610-1.04×10^7 ng/g（中位浓度：2.31×10^5 ng/g），这表明了 PIs 对美甲店工作人员的职业暴露风险，引起了更深的担忧。皮肤吸收和手-口接触是有害化学品进入人体的关键途径。手擦中的污染物水平可以用作反映内部污染的指标。为更深入地研究 PIs 对美甲店工作人员的危害，采集 50 位美甲店员工和 50 位非美甲店员工的手擦样品。将所有样品进行前处理后用 HPLC-MS/MS 检测，在美甲店员工的手擦样品中检测到了 24 种 PIs，浓度范围为 133 至 5.06×10^4 ng/wipe（中位浓度：4.26×10^3 ng/wipe），显著高于非美甲店员工的手擦样品浓度（中位浓度：59.4 ng/ wipe）。考虑到 PIs 的毒性效应（内分泌干扰效应、遗传毒性、神经毒性、致癌性和肝毒性），以及美甲店工作人员多为育龄女性的实际情况，PIs 对职业人员的危害和共同暴露风险值得更多的关注和更深入的研究。

关键字 光引发剂，美甲店员工，手擦，皮肤渗透，职业暴露

参考文献：

1. Liu R, Mabury SA., *Environ. Sci. Technol.*, **2019**, 53:4109-4118.
2. Liu R, Mabury SA., *Environ. Sci. Technol.*, **2018**, 52:10089-10096.
3. Liu R, Mabury SA., *Environ. Sci. Technol. Lett.*, **2019**, 6:702-707.
4. Shen, J., Liu, J., Ji, X., et al., *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 475, No. 134913.
5. Ji, X., Liang, J., Liu, J., et al., *Environ. Sci. Technol.*, **2023**, 57 (32), 11704−11717.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

北极环境中多氯萘的赋存水平、分布特征与生物富集

李英明*、董程、张庆华
中国科学院生态环境研究中心

多氯萘（polychlorinated naphthalenes，PCNs）作为新被列入《斯德哥尔摩公约》控制清单中的持久性有机污染物，其环境赋存与毒性暴露在近年来受到广泛关注。由于历史上工业生产的遗留以及工业热过程的无意排放，PCNs 进入到大气、土壤及水体等环境基质中，继而长距离迁移至极地地区。北极地区人类活动及污染物的工业排放极少，是研究污染物全球行为的重要区域。目前北极地区 PCNs 污染的相关研究较少、年限较早，主要集中在大气及生物样品的高氯代同族物检测上。土壤、植物作为陆地生态系统污染物的源和汇，具备研究的必要性，然而尚未发现土壤、植物中 PCNs 含量及分布特征的研究。PCNs 的生物积累及放大行为近年来逐渐引起关注，但极少有研究报道极地海洋食物网中 PCNs 的分布及营养级传输特征。

本研究分析了北极斯瓦尔巴地区土壤与植物以及南北极沉积物与底栖海洋生物样品中 PCNs 的含量及分布特征。结果表明，北极土壤、植物及底栖海洋食物网中 PCNs 的浓度与毒性当量仍处于较低水平。在同族物分布方面，一至三氯代 PCNs 占据主要成分。在北极陆地空间分布上，科学考察站周边和斯瓦尔巴首府朗伊尔城的 PCNs 污染水平相对较高，表明其分布受当地人为排放源的影响较大。PCNs 在食物网中的传输呈现出北极营养级稀释、南极营养级放大的趋势，这可能由环境条件、食物网与生物种群特性、单体理化性质等相互作用决定。亲脂性较强的 PCNs 单体更趋于从土壤至植物以及沿食物网进行积累。本研究首次揭示了北极地区土壤、植物以及南北极底栖海洋食物网中总 PCNs 的水平、分布与潜在来源，为探究 PCNs 在极地地区的赋存现状及环境行为提供了数据支持。

关键字 多氯萘，北极，赋存水平，生物富集

参考文献：

1. Cheng Dong, Qinghua Zhang, Siyuan Xiong, Ruiqiang Yang, Zhiguo Pei, Yingming Li*, Guibin Jiang, *Environ. Sci. Technol.*, **2023**, 57, 17076-17086.
2. Cheng Dong, Siyuan Xiong, Ruiqiang Yang, Zhiguo Pei, Yingming Li*, Qinghua Zhang, Guibin Jiang, *Sci. Total Environ.*, **2022**, 849, 157883.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

空心分层棒状碳纳米管@PmPD@NiFe-LDH 复合材料的构建及其对布洛芬的吸附性能与机理研究

徐海华[1,2]、夏明珠[2]、傅建捷*[1]
1. 国科大杭州高等研究院
2. 南京理工大学

本研究开发了一种高效的吸附材料 PPyC@PmPD@NiFe-LDH，用于从水介质中去除布洛芬(Ibuprofen, IBP)。布洛芬是一种常见的非甾体抗炎药(Non-steroidal anti-inflammatory drug, NSAID)，在环境中广泛存在，并对水生生物及人类健康产生不利影响[1]。由于布洛芬具有高迁移性和生物活性，其浓度在饮用水、地表水等水体中从纳克每升(ng/L)到微克每升(μg/L)不等，会导致内分泌干扰和神经毒性，且对水生生物表现出急性和慢性毒性[2]。

为此，本工作通过创新的材料设计，利用甲基橙-FeCl3 反应性自降解模板合成聚吡咯纳米管(Polypyrrole, PPy)，并将其碳化得到空心碳纳米管[3]。随后，采用化学氧化法将聚间苯二胺(Poly(m-phenylenediamine, PmPD)包覆在空心碳纳米管表面，最后通过水热工艺在其表面原位生长镍铁层状双氢氧化物(Nickel-iron layered double hydroxides, NiFe-LDH)，形成了空心棒状分层结构的复合材料 PPyC@PmPD@NiFe-LDH。

这种独特的分层棒状结构使得复合材料的吸附位点充分暴露，在水溶液中对布洛芬的吸附表现出卓越性能。在 298 K 和 pH 7.0 条件下，PPyC@PmPD@NiFe-LDH 对布洛芬的最大吸附容量达到 388 mg/g，吸附过程符合准二级动力学模型和 Langmuir 等温吸附模型，表明该过程主要由化学吸附主导，且为单层吸附。复合材料的分层结构充分发挥了 PmPD 和 NiFe-LDH 的协同作用，显著提升了吸附性能。

通过傅里叶变换红外光谱(FT-IR)和 X 射线光电子能谱(XPS)分析，初步揭示了吸附机理涉及静电相互作用、π-π相互作用和氢键相互作用。量子化学理论计算进一步定量分析了布洛芬分子的反应位点，证实了静电和π-π相互作用的存在。基于 Hirshfeld 分子密度划分的独立梯度模型(IGMH)和指纹图分析揭示了布洛芬的羧基氧与 NiFe-LDH 中的羟基氢之间的氢键相互作用。这些深入的机理探究为理解复合材料的吸附行为提供了理论支持。

综上所述，PPyC@PmPD@NiFe-LDH 复合材料展示出优异的吸附性能、结构稳定性和可再生性，为水溶液中布洛芬的去除提供了高效解决方案，同时对吸附去除机理的深入研究为未来相关研究提供了重要的指导意义。

关键字 新污染物，层状双氢氧化物，吸附机理，空心分层结构

参考文献：

1. M. Parolini, *Science of The Total Environment*, **2020,** 740, 140043.
2. A. Ayati, B. Tanhaei, H. Beiki, P. Krivoshapkin, E. Krivoshapkina, C. Tracey, *Chemosphere*, **2023**, 323,
138241.
3. R. Madhuvilakku, Y. Yen, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **2022**, 924, 116882.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

肺癌干细胞模型的建立及其在环境污染物肺毒性探究中的应用

杨珺涵、殷诺雅*、杨仁君、Francesco Faiola
中国科学院生态环境研究中心

肺癌，作为全球范围内最常见的一种癌症类型，已有大量的流行病学研究，各种细胞、动物模型研究表明环境污染物，尤其空气污染物是肺癌发生、发展的一大风险因素。目前，针对环境污染物和肺癌的关系研究均未重点考虑肿瘤细胞内部的差异性，实际上，在癌组织中还存在一类特别的细胞群体——癌症干细胞（CSCs）。这类细胞能够自我更新、维持干性，且通常处于静息状态。但污染物暴露作为一个刺激因素，可导致其异常增殖激活并最终参与到癌症的发生、发展、恶化、转移等多过程中。因而，为阐明环境污染物对癌症干细胞的影响机制，亟需建立稳定高效的肺癌症干细胞毒理学研究模型。我们利用诱导多能干细胞技术对肺癌细胞进行重编程；基于癌症干细胞通过表达 ATP 结合盒转运蛋白来拒染核染料 Hoechst 33342 的特性来进行流式筛选；基于无血清培养基成球实验富集癌症干细胞，分别获得了三种侧重点与优势不同的稳定表达且更为纯化的肺癌干模型，其中各种癌干标志基因、蛋白的表达量有明显提高。利用上述模型，可进一步探究各环境污染物以肺癌干细胞为介导的促肺癌发生机制。同时，考虑到肺癌干细胞自身对于常规肺癌疗法的抵抗作用会导致较差的预后性，也可将此模型用于以肺癌干细胞为靶点的抗肺癌药物研究。

关键字 肺癌，环境污染，癌症干细胞，重编程，诱导多能干细胞，流式分选

参考文献:

1. de Groot P, Munden R F, *Radiol Clin N Am*., **2012**, 50, 863-876.
2. Nassar D, Blanpain C, *Annu Rev Pathol-Mech*., **2016**, 11, 47-76.
3. Shi Y, Inoue H, Wu J C, Yamanaka S, *Nat. Rev. Drug Discov*., **2017**, 16, 15-130.
4. Singh S K, Clarke I D, Terasaki M, Bonn V E, Hawkins C, Squire J, Dirks P B, *Cancer Res*., **2003**, 63,
5821-5828.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

基于多能干细胞的环境污染评估肺模型

张淑娴、杨仁君、殷诺雅、Francesco Faiola*
中国科学院生态环境研究中心

肺分化模型在研究肺发育过程中发挥着关键作用。研究表明，通过各种细胞生长因子和小分子的协同作用，多能干细胞可以逐步诱导为定形内胚层、前肠内胚层、肺祖细胞及肺泡上皮细胞，最终形成肺泡类器官。这一过程不仅为理解肺发育提供了基础，也为再生医学和肺病研究开辟了新的方向。近年来，随着环境污染问题的日益严重，人们愈发关注环境污染物对肺发育产生的不利影响。为了更深入的探讨肺分化模型与环境污染物之间的关系，本研究首先对比了现有的多种肺相关细胞谱系的分化方案，详细概述了人多能干细胞向肺发育不同阶段的推进过程。通过对比所添加的细胞生长因子和小分子，清晰地了解了肺细胞成熟过程中每个阶段特定的分子信号和调控因子，从而更有效地指导不同类型肺细胞的形成。考虑到污染物对肺细胞分化和功能的影响可能导致发育异常和疾病发生，考虑到污染物对肺细胞分化和功能的影响可能导致发育异常和疾病发生，本研究系统总结了环境污染物对肺祖细胞、肺泡上皮细胞及成熟肺器官等不同分化阶段的影响。多项研究显示通过调节多种信号通路变化，目前已发展出多种从细胞水平到器官水平的不同层次的肺分化模型。然而当利用这些模型进行环境污染物的肺毒性评估时，发现颗粒物、持久性有机污染物和重金属等环境污染物可能会对肺部发育产生不利影响。环境污染物可能会破坏肺细胞的分化和功能，导致发育异常和疾病。因此，了解肺模型与环境污染物之间的关系对于探索肺发育的危险因素和机制至关重要。总的来说本研究主要阐述了人肺分化的体外培养方案和生物学过程，并总结了环境污染物在不同分化阶段的不利影响，旨在为进一步研究环境污染对肺部健康的影响提供科学依据，为保护公众健康提供重要参考。

关键字 肺分化模型；多能干细胞；环境污染物；肺毒性评价

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

高分辨质谱非靶向分析中筛查参数阈值研究

胡静蕾、高燕*、张庆合
中国计量科学研究院

基于高分辨率质谱技术的非靶向分析方法（Non-targeted Analysis, NTA）广泛应用于环境、生物体和食品中的污染物筛查[1]。但在实际应用中，由于实验室之间研究目标、仪器类型、样品前处理方法和数据处理具有多样性，使得非靶向分析的可靠性和可比性面临挑战[2,3]。

为了减少基于高分辨质谱的非靶向分析结果的假阳性率和假阴性率，本研究开展了筛查参数阈值的研究。采用多组分混合溶液，对质量偏差、保留时间窗口、同位素质量偏差和同位素分布相似度、峰高等筛查参数的阈值进行考察和优化。首先是质量偏差阈值，多组分混合溶液中所有化合物的质量偏差均在±5ppm 以内，考虑到假阳性和假阴性最终选取了 5ppm 的质量偏差阈值。同样也分析了保留时间的极差和 RSD%，其中化合物极差最大为 0.29min，RSD%最大为 0.69%，最终选取保留时间窗口阈值为 0.3min。对同位素匹配的阈值进行分析，同位素匹配的质量偏差阈值基于上述的 5ppm，对于同位素分布相似度，75%的化合物相似度得分为 100，部分化合物得分在 77-98 之间，故最终将同位素分布相似度的阈值设为 70。另外通过研究所有化合物在多个浓度下的峰高与同位素匹配成功的比率，发现峰高 1E5 是精确的同位素比值所必需的，这对于在非靶向分析中分子式的生成至关重要。通过以上阈值的研究，降低了筛查结果的假阳性率和假阴性率，为非靶向分析中筛查参数阈值的设定提供参考。

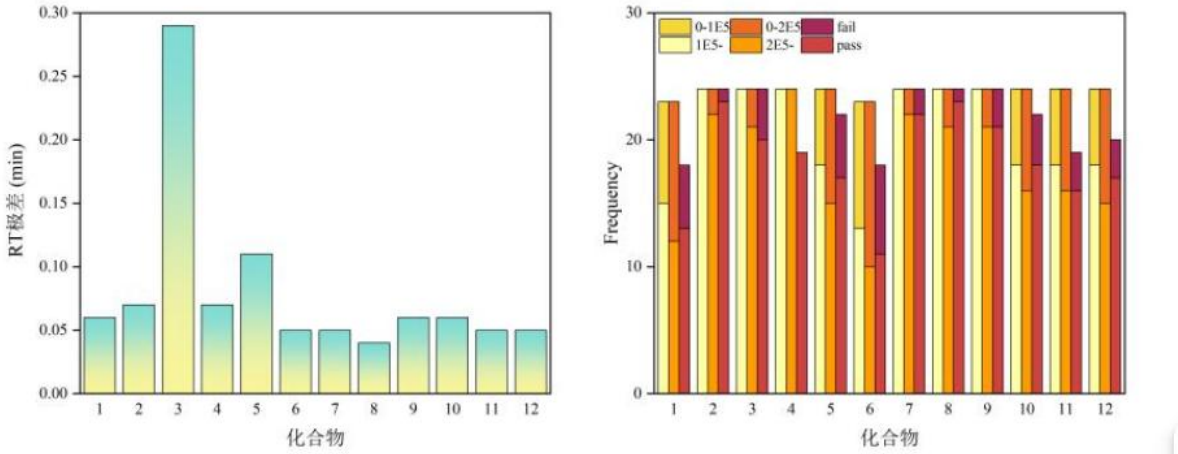


图 **1** 化合物的保留时间和同位素匹配情况

关键字 非靶向分析；高分辨质谱；筛查方法

参考文献：

1. E. M. Ulrich, J. R. Sobus, C. M. Grulke, A. M. Richard, S. Newton, M. J. Strynar, K. Mansouri, A. J. Williams, *EPA's non-targeted analysis collaborative trial (ENTACT): genesis, design, and initial findings*. *Analytical and bioanalytical chemistry*, **2019**, 411: 853-866.

2. B. Ng, N. Quinete, P. R. Gardinali, *Assessing accuracy, precision and selectivity using quality controls for non-targeted analysis*. *Science of The Total Environment*, **2020**, 713: 136568.
3. T. N. Clark, H. Joëlle, W. S. Vidar, J. J. Kellogg, D. A. Todd, N. B. Cech, and R. G. Linington,
Interlaboratory Comparison of Untargeted Mass Spectrometry Data Uncovers Underlying Causes for Variability. *Journal of Natural Products*. *Journal of natural products*, **2021**, 84(3): 824-835.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

抗生素暴露与不孕不育症的相关性研究

翁雪昱[1]、张娜[2]、刘双[1]、廖春阳*[1]、江桂斌[1]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 首都医科大学附属北京妇产医院

近年来，作为一种新型污染物，抗生素的广泛使用和多途径暴露引起了人们对其潜在健康风险的担忧。据报道，全球不孕不育平均水平约为 9%，且呈上升趋势。然而，现有人群监测缺乏关于女性血清中抗生素检测数据，尤其是关于抗生素暴露与女性不孕不育相关性的流行病学研究更是寥寥无几。因此，本研究通过收集首都医科大学附属北京妇产医院就医的 78 位正常女性和 62 位不孕女性的血清样品，建立了能同时分析七类 31 种抗生素的固相萃取-超高效液相色谱-串联质谱法。在研究中，31 种抗生素均被检测出，检出率范围为 0.714%～85.7%，浓度范围为 0.876 ng/ mL～28.5 ng/ mL。Spearman 相关性检验显示 100% 的样本有一种以上抗生素被检出，正常组和不孕组血清样本中抗生素大部分呈现正相关性，这代表着抗生素普遍在正常和不孕女性中共同存在。MannWhitney *U* 检验显示不孕女性血清中罗红霉素、甲氧苄氨嘧啶和脱水红霉素等 8 种抗生素检出率高于正常女性，同时浓度差异具有显著性（$p < 0.05$）（图 1）。二元 Logistic 回归分析中发现罗红霉素、氟苯尼考和氯霉素浓度的第 1 至第 4 个四分位数的不孕不育风险增加（图 2A）。结合二元 Logistic 回归分析和随机森林模型（图 2B 和图 2C）的结果发现，磺胺类抗生素（对于七类抗生素），林可霉素、氯霉素、氟苯尼考（对于 31 钟抗生素）与不孕不育症的发生具有一定的相关性。其中氯霉素、氟苯尼考第 1 至第 4 个四分位数的不孕不育风险增加，说明其暴露存在剂量-效应关系。本研究建立了母体血清抗生素固相萃取-超高效液相色谱-串联质谱检测方法，并通过多模型分析揭示了女性血清中抗生素含量和分布与不孕不育间的统计学关联，这为深入研究抗生素暴露对女性不孕不育症的影响过程和作用机制提供了数据支持。

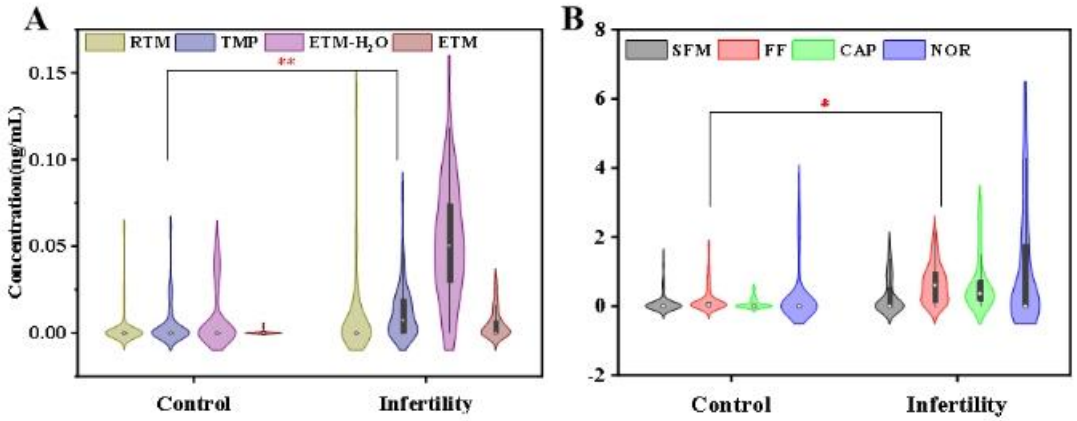


图1：具有极显著性差异（A）和显著性差异（B）的8种抗生素的浓度小提琴图
*表示有显著性差异（$p < 0.05$）；**表示有极显著性差异（$p < 0.01$）
（SFM，磺胺嘧特；TMP, 甲氧苄氨嘧啶；NOR，诺氟沙星；RTM，罗红霉素；ETM-H_2O，脱水红霉素；ETM，红霉素；FF，氟苯尼考；CAP，氯霉素）

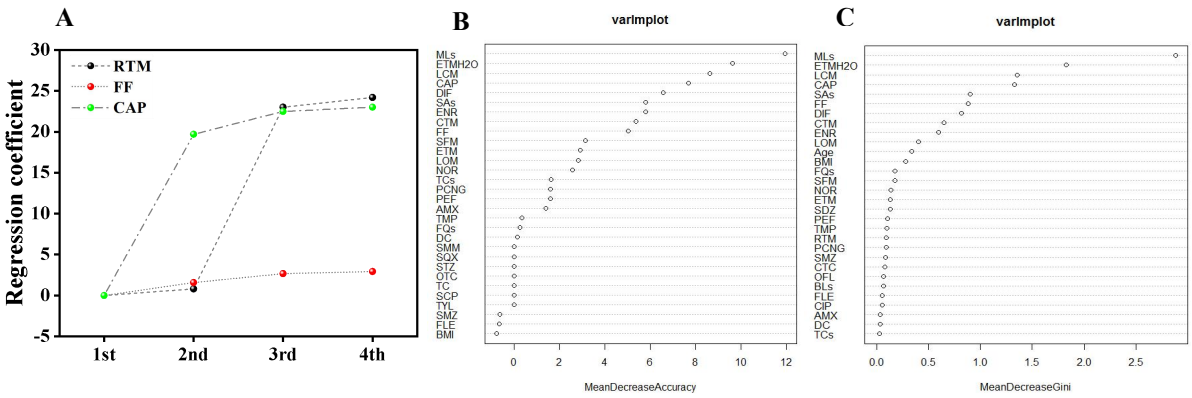


图 2：（A）血清中抗生素的四分位数浓度和不孕不育的风险（RTM，罗红霉素；FF，氟苯尼考；CAP，氯霉素）（B）对于不孕不育症，随机森林从分类结果的正确率下降指标表示每个变量对随机森林结果齐性的贡献（C）对于不孕不育症，随机森林从分支不纯度降低指标表示每个变量对随机森林结果齐性的贡献

关键字 抗生素暴露；不孕不育症；超高效液相色谱-串联质谱法；病例对照研究

参考文献：

1. H. Sun, T.T. Gong, Y.T. Jiang, S. Zhang, Y.H. Zhao, Q.J. Wu, *Aging*, **2019**, 11, (23), 10952-10991.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

有机磷阻燃剂的神经毒性：阻断 PC12 细胞的钠通道和钾通道

王甲迎[1,2]、高佳[1]、朱青青[1]、刘双[1]、廖春阳*[1]、江桂斌[1]
1. 生态环境研究中心
2. 中国科学院大学中丹学院

磷酸三（1,3-二氯-2-丙基）酯（TDCP）、磷酸三苯酯（TPhP）和磷酸三乙酯（TEP）等有机磷阻燃剂（OPFRs）因其较低的毒性，已成为传统溴化阻燃剂的替代品。它们的广泛使用导致其在空气、水、灰尘和土壤等各种环境介质中被大量检出，甚至在食品和人体样本中也发现了其踪迹。因此，随着环境暴露量的持续攀升，人们对 OPFRs 的潜在神经毒性产生了担忧。有证据表明，离子通道是环境污染物诱发神经毒性的潜在靶点，而膜片钳技术是研究这些通道的金标准。利用全自动膜片钳技术，在 PC12 细胞模型中系统研究了 OPFRs 对离子通道功能的影响。结果表明，TDCP 和 TPhP 能显著阻断电压门控钾通道和钠通道，使通道动力学、激活特性和失活过程发生显著变化，且抑制作用还具有浓度依赖性、使用依赖性和状态依赖性。此外，与烷基取代相比，含有卤素和芳香取代基的 OPFRs 表现出更大的神经毒性。这些发现进一步强调了开展深入研究的迫切性，旨在全面评估 OPFRs 的神经毒性机制及其对人类健康的潜在影响，尤其是对儿童等易感人群的风险。

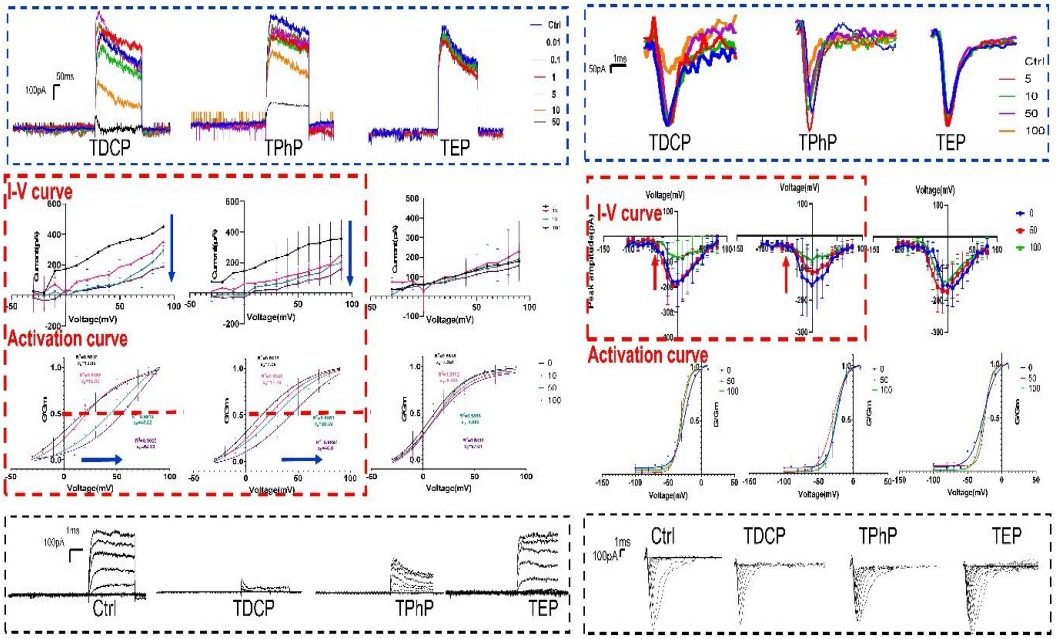


图 1 OPFRs 对 PC12 细胞电压门控钾通道和电压门控钠通道的电流峰值、电流-电压曲线以及激活动力学的影响

关键字 有机磷阻燃剂；膜片钳；电压门控钾通道；电压门控钠通道；环境毒理学；食品健康

参考文献：

1. Huang J, Ye L, Fang M and Su G. Bull Environ *Contam Toxicol* **2022**; 108: 809-818.
2. Sundkvist AM, Olofsson U and Haglund P. J *Environ Monit* **2010**; 12: 943-951.
3. Sühring R, Diamond ML, Scheringer M, Wong F, Pućko M, Stern G, Burt A, Hung H, Fellin P, Li H and Jantunen LM. *Environ. Sci. Technol.* **2016**; 50: 7409-7415.
4. Li J, Xie Z, Mi W, Lai S, Tian C, Emeis K-C and Ebinghaus R. *Environ Sci Technol* **2017**; 51: 6887-6896.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

双酚类化合物对动脉粥样硬化的影响及其机制研究

杨冰薇、宋杨*
中国科学院生态环境研究中心

双酚 A（Bisphenol A，BPA）是典型的内分泌干扰物之一，曾作为一种塑料合成单体而广泛应用。随着双酚 A 的广泛应用，其潜在的健康风险也不断被报道，而由于双酚 A 的限制使用导致了与其结构类似的双酚类化合物的生产和应用，双酚 A 及其替代品的安全性仍值得去评估。已有文献研究报道 BPA 与心血管疾病的发生密切相关，但其具体的机制尚未清楚，而引发心血管疾病的一个重要因素就是脂质代谢紊乱。为了探究内分泌干扰物双酚类化合物 BPA 及其替代品包括双酚 F（Bisphenol F，BPF）、双酚 S（Bisphenol S，BPS），以及相关卤代衍生物如四溴双酚 A（Tetrabromobisphenol A，TBBPA）、四氯双酚 A（Tetrachlorobisphenol A，TCBPA）和四溴双酚 S（Tetrabromobisphenol S，TBBPS）对动脉粥样硬化的促进作用和潜在的分子生物学机制。该研究采用了 RAW264.7 小鼠巨噬细胞作为体外实验模型，评估了上述六种不同的双酚类化合物如何影响巨噬细胞内的脂质积累，并进一步探究它们将巨噬细胞转化为泡沫细胞的潜在能力。实时荧光定量 PCR（Real-time quantitative PCR，RT-qPCR）技术检测了胆固醇摄取与排出相关基因在 mRNA 水平上的表达情况，从而揭示了这些双酚类化合物是如何通过影响特定基因表达来促进动脉粥样硬化形成的。此外，利用分子对接模拟分析方法，进一步对比和分析了这些化合物与胆固醇受体 CD36 之间的相互作用。同时，还使用载脂蛋白 E 基因敲除（ApoE-/-）小鼠和载脂蛋白 E 基因敲除/CD36 基因敲除（ApoE-/-/CD36-/-）小鼠模型来评估这些双酚类化合物在体内对 AS 发展的影响。结果发现 BPA 和 TBBPA 及其替代品均不同程度地促进了 ApoE-/-小鼠动脉粥样硬化的形成，并且其替代品促进动脉粥样硬化形成的能力更强。综上，双酚类化合物及其替代品存在潜在健康风险，替代品的安全性问题值得我们思考和进一步探究。

关键字 双酚类化合物，动脉粥样硬化，脂质积累，CD36

参考文献：

1. Karrer C, Roiss T, Von Goetz N, et al. Physiologically Based Pharmacokinetic (PBPK) Modeling of the Bisphenols BPA, BPS, BPF, and BPAF with New Experimental Metabolic Parameters: Comparing the Pharmacokinetic Behavior of BPA with Its Substitutes[J]. Environmental Health Perspectives, 2018, 126(7).
2. Schaffert A, Krieg L, Weiner J, et al. Alternatives for the worse: Molecular insights into adverse effects of bisphenol a and substitutes during human adipocyte differentiation[J]. Environment International, 2021, 156(6):106730.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

燃煤电厂和钢铁工业颗粒物中稀土元素的大气排放

云江慧[1,2]、杨秋婷[1,2]、赵晨妍[1,2,3]、陈常智[1,2,3]、刘国瑞*[1,2,3]

1. 中科院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学，资源与环境学院
3. 国科大杭州高等研究院，环境学院

稀土元素（REEs）是环境中发现的新污染物，全球范围内持续进行的工业活动的意外排放可能导致 REEs 的大气污染。工业颗粒物（PM）作为大气 PM 中 REEs 的主要来源之一，尚未得到充分的认识。在本研究中，我们识别了来自燃煤电厂和钢铁厂排放的细颗粒物中稀土元素的特征，从而可以对 REEs 的来源进行分配并为优先控制提供建议。 燃煤电厂和钢铁厂的细颗粒物样品中 REYs 的平均浓度分别为 240.89 和 11.93 μg/g。根据导出的排放因子，在中国，这两个工业源每年共排放 13415 kg REEs，其中燃煤电厂和钢铁厂每年分别排放 12635 和 780 kg REEs。这项研究对于工业的可持续发展和人类健康具有重要意义。

关键字 稀土元素；大气排放；燃煤电厂；钢铁厂

参考文献

1. W. Gwenzi, L. Mangori, C. Danha, N. Chaukura, N. Dunjana, E. Sanganyado. *Sci. Total Environ.* **2018**, 636, 299–313.
2. G. Pagano, M. Guida, F. Tommasi, R. Oral. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* **2015**, 115, 40–48.
3. W. Franus, M. Wiatros-Motyka, M. Wdowin. *Environ. Sci. Pollut. Res.* **2015**, 22, 9464–9474.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

干细胞毒理学模型应用实例：双酚诱导的神经发育毒性

吴泽森[1,2]、殷诺雅[1,2]、梁小星[4]、梁胜贤[3]、Francesco Faiola*[1,2]

1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学
3. 河北大学
4. 中国大熊猫保护研究中心

近年来，胚胎干细胞在毒理学领域的应用为揭示污染物毒性机制提供了新的视角。在这项研究中，我们利用胚胎干细胞研究了三种典型环境污染物——双酚 A（BPA）、双酚 F（BPF）和双酚 S（BPS）的神经发育毒性。结果表明，在 100 nM 到 10 μM 的浓度范围内，这三种化学物质未对胚胎干细胞的自我更新能力造成干扰，也没有引起明显的细胞毒性，细胞活力和氧化应激的检测结果也证实了这一发现。然而，在拟胚体形成实验中，这三种化学物质均表现出了显著的神经发育毒性，经过 20 天的暴露处理后，拟胚体的外胚层分化受到明显影响，神经外胚层标志基因如 Pax6、Nestin、Sox1 和 Sox3 的表达水平大幅降低。除拟胚体形成外，其神经发育毒性作用还体现在单层条件下专门针对神经外胚层和/或神经祖细胞的分化进程中。通常认为，BPA 及其衍生物 BPF 和 BPS 的毒性作用是通过干扰雌激素受体通路引起的，然而，我们利用氟维司群的拮抗实验表明，其神经毒性并不与雌激素受体信号传导相关。此外，经 BPA/BPF/BPS 暴露的细胞样本的 RNA-Seq 结果表明，其神经毒性涉及多种分子机制，包括轴突形成干扰和 Wnt 信号通路的破坏。这项研究不仅证明了 BPA/BPF/BPS 在神经分化进程中具有显著的发育毒性，而且表明胚胎干细胞毒理学系统在细胞毒性检测方面较传统方法有较大优势。

关键字 胚胎干细胞、双酚 A、神经发育、毒理学

参考文献：

1. Q. Pang, Y. Li, L.Meng, *Chemosphere,* **2019**, 226, 545-553.2.
2. N. Yin, X. Yao, Z. Qin, *Journal of Environmental Sciences*, **2015,** 36, 181-187.
3. A. Kodila, N. Franko, *Arch Toxicol*, **2023**, 97, 1831–1846.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

三维多孔离子液体-壳聚糖-氧化石墨烯气凝胶高效提取和检测沉积物中多卤代咔唑

闫宏远*[1]、陈荣[1]、王磊[2]、刘爱琴[2]、马会春[2]
1. 河北大学化学与材料科学学院
2. 河北省地质实验测试中心

PHCZs 具有二恶英毒性、生殖毒性、发育毒性和内分泌干扰毒性等多种毒害效应，即使在痕量水平下也可污染环境或对人体健康造成严重危害 1。然而，到目前为止针对 PHCZs 测定方法的研究还鲜有报道，因此，有必要开发环境中 PHCZs 的快速灵敏检测方法，开展 PHCZs 污染情况的日常监测工作 2。本研究以天然壳聚糖为骨架，氧化石墨烯为支撑体 3，离子液体为致孔剂和改性剂，制备了具有通孔结构的三维气凝胶整体柱吸附剂。所得的吸附剂具有不同孔径的蓬松多孔结构、比表面积大和良好可再生能力，对 PHCZs 表现出快速传质和高吸附能力。将这种吸附剂采用滴管萃取结合气相色谱-质谱技术，建立了一种高效、准确测定沉积物中 PHCZs 的方法。在优化条件下，该方法线性范围宽（0.4~250 ng/g，$r \geq 0.9990$），检出限低（0.04~0.24 ng/g），回收率高（80.5%~93.8%）。本研究不仅为气凝胶吸附剂的制备提供了一种新策略，而且为环境污染物监测提供了技术支持。

关键字 环境污染物，卤代咔唑，三维气凝胶，滴管萃取，气相色谱-质谱

参考文献：

1. C. Ji, D. Chen, M. Zhao.*Environ. Pollut.* , **2021**, 268: 115717.
2. Y. Sun, L. Yang, C. Chen, C. Li, M. Zheng, R. Jin, W. Wang, N. Yang, Y. Li, G. Liu, *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2022**, 36, e9324.
3. F. Qiao, X. Wang, Y. Han, Y. Kang, H. Yan, *Anal. Chim. Acta*, **2023**, 1269, 341404.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

典型城市灰尘和橡胶消费品中的对苯二胺及其醌衍生物：来源分析、转化模式和毒性评价

毛天奥[1]、陈春赐[1]、刘文彬*[1,2]
1. 中国科学院大学
2. 国科大杭州高等研究院

对苯二胺(PPDs)作为一种广泛应用于橡胶工业的防老剂，可以有效对抗臭氧对于橡胶的氧化。据估计，全球每年生产 31 亿个轮胎，表明对 PPDs 的高需求。2021 年，首次在环境水体中鉴定出 N-(1,3-二甲基)丁基-N'-苯基对苯二胺(6PPD) 的氧化产物 6PPD-醌（6PPD-Q）[1]。6PPD-Q 对银鲑有急性毒性，6PPD-Q (<0.3-19 ug/L)在毒性浓度 (LC50 为 95ng/L)下广泛存在[2]。 因此，这些橡胶衍生的化学残留物似乎广泛分布于环境，并在接触人体时可能会引起健康问题。本研究对不同橡胶产品与环境灰尘中 PDDs 和 PPD-Qs 化学品的丰度和组成的进行全面的分析，对于我们了解释放到环境中的 PPDs 和 PPD-Qs 的环境行为，探讨基于环境浓度的人群的暴露风险具有重要意义。

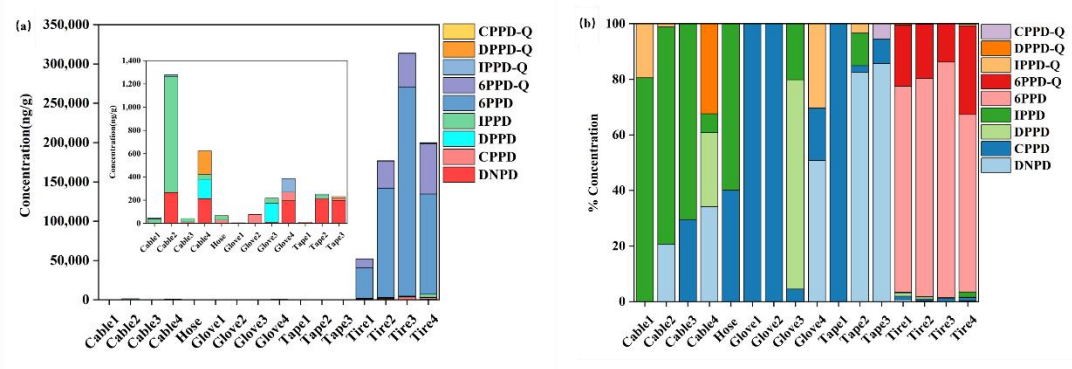


图 1 不同橡胶制品样品中的 PPDs 和 PPD-Qs 的浓度， (b) 不同橡胶制品中的 PPDs 和 PPD-Qs 成分。

汽车轮胎中检测到的 PPDs 和 PPD-Qs 的浓度（∑PPDs，40-270ug/g；∑PPD-Qs，12-65ug/g）比其他橡胶消费品高 2-4 个数量级，而 6PPD（39-266ug/g，中位数：133 ug/g）是汽车轮胎的主要成分，其他 PPDs 的浓度比 6PPD 低 2-3 个数量级。在橡胶电缆中，主要检测 IPPD 和 DNPD，而 DNPD 和 CPPD 主要用于胶带，CPPD 常见于手套和橡胶管中，深色橡胶中 PPDs 浓度通常高于浅色橡胶。

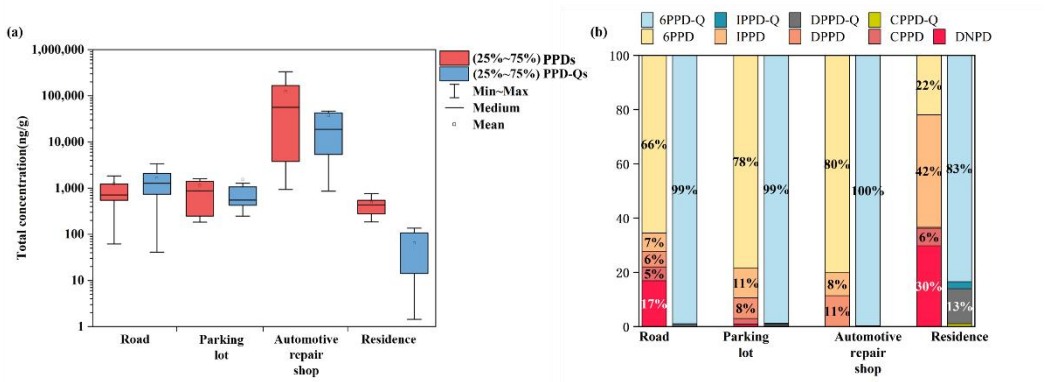


图 2 (a) 不同环境灰尘样本中的 PPDs 和 PPD-Qs 的浓度范围。(b) 不同环境灰尘样本中的 PPDs 和 PPD-Qs 成分。

此外，来自四种环境中的至少三种样品中都检出了浓度不低的PPDs，包括6PPD,6PPD-Q,IPPD,DPPD,CPPD,DNPD。灰尘中 PPDs 的主要来源是汽车轮胎的磨损化合物，且存在经过道路径流进入受纳水体的风险。在汽修厂灰尘中测得的 PPDs 浓度偏高，存在一定的职业暴露风险。在本研究中，使用 UHPLC-Q-TOF 从灰尘样品中筛选出了 N-1,3-二甲基丁基-N-苯基醌二胺（QDI）和 QDI-OH，推测它们是 6PPD 的转化产物。本研究提出了道路环境中 6PPD 转化为 6PPD-Q 的三步氧化方案，并提出除臭氧外，光、热和微生物也参与了道路灰尘中 6PPD 的转化过程。这些研究结果表明，在典型的城市环境中，PPDs 和 PPD-Qs 对环境造成的危害可能被低估了，因此需要进一步关注暴露风险。

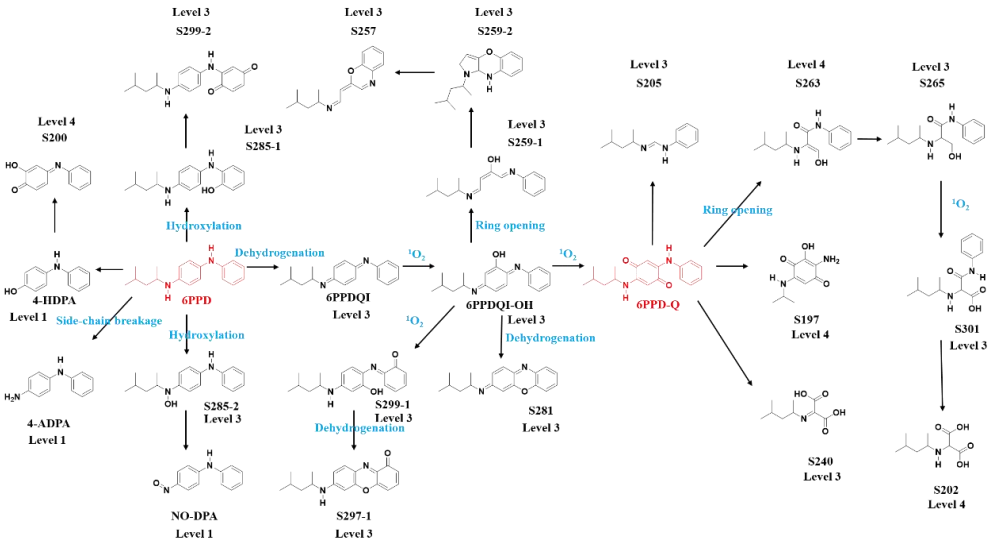


图 3 6PPD 和 6PPD-Q 在灰尘中的转化产物

关键字 PPD 抗氧化剂；PPD-醌；环境污染物；健康风险

参考文献：

1. Tian, Z. Y.; Zhao, H. Q.; Peter, K. T.; Gonzalez, M. Science. 2021, 371(6525): p. 185-189.

2. Li, C.G.; Zhang, Y.L.; Yin, S.Q.; Wang, Q. Journal of Hazardous Materials. 2023. 459: p. 132127.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

中国北京大气 PM2.5 中液晶单体的污染特征、季节变化和健康风险评估

杨倩玲[1]、高丽荣*[1,2]、郑明辉[1,2]
1. 中科院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

液晶单体(liquid crystal monomers, LCMs)是一类以二苯基或双环己烷作为骨干结构的有机化合物，广泛应用于各类电子产品的液晶显示器中。研究表明 LCMs 进入环境后具有水平不一的持久性、生物积累性和生物毒性，是环境中的一类新型有机污染物。空气是 LCMs 从液晶显示器传输到周围环境的主要介质。此外，大气中的细颗粒物（PM2.5）比粗颗粒物在肺部中沉积的更深，且其毒性主要取决于其所含的有机化合物，对人类带来严重健康威胁。然而，由于针对 LCMs 的研究始于 2018 年，目前关于 LCMs 在空气中的污染特征研究数据缺乏，且识别的目标化合物十分有限。因此，评估 LCMs 在 PM2.5 中的赋存情况，季节分布，以及普通人群通过呼吸吸入和皮肤接触 PM2.5 中的 LCMs 的潜在健康暴露风险成为当务之急。

本研究采用超声提取，固相萃取仪-C18 小柱对大气中的 LCMs 进行前处理，优化了提取和萃取溶剂及步骤，基于气相色谱-三重四极杆串联质谱仪(GC-QqQ-MS/MS)建立了大气中 78 种 LCMs 的分析方法，实现了目标物的有效分离。利用建立的方法对北京市全年 PM2.5 样品进行分析，检测到 PM2.5 中 LCMs 浓度水平（13.3–375.6 pg/m3）高于 PM2.5 中的传统卤代持久性有机污染物，包括多氯二苯并对二恶英和二苯并呋喃、二噁英类多氯联苯和多氯萘。对于大多数 LCMs，春季和夏季的赋存浓度较高，其浓度与温度呈正相关（$r = 0.35–0.72$，$p < 0.05$）。本研究中 LCMs 的污染分布特征与以往在电子垃圾污染地区的研究有所不同，反式反式-3,4-二氟-4'-（4'-戊基双环己基-4-基）联苯 （DPeBB）、反式-3,4-二氟-4'-（4'-丙基双环己基-4-基）联苯（DPrBB）和反式-3,4,5-三氟-4'-（4'-丙基双环 hex 基-4-基）联苯（TPrBB）首次成为主要组分。通过预测体内生物毒性，将 48 种 LCMs 归类为高优先级，因为它们具有很高的人体吸收潜力。值得注意的是，大多数高优先级 LCMs 以前很少受到研究人员的关注。当结合其浓度和生物毒性时，FBAs 值得更多关注，因为它们在八项毒性评估中的生物活性贡献更大。此外，通过吸入和皮肤暴露的∑LCM 的非致癌风险评估结果显示对儿童和成人的风险可以忽略不计。

关键字 液晶单体，PM2.5，风险评估，优先级排序

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

喜马拉雅山脉吉隆沟地区典型 POPs 赋存特征

郭庆宇[1,2]、杨莉莉*[1,2]、郑明辉[1,2,3]
1. 环境化学与生态毒理学国家重点实验室，中国科学院生态环境科学研究中心，北京 100085
2. 中国科学院大学资源与环境学院，北京 100049
3. 中国科学院大学杭州高等研究院环境学院，杭州 310024

持久性有机污染物（POPs）的高山冷凝效应、全球蒸馏效应等特性使得青藏高原成为 POPs 研究的热点区域。喜马拉雅山脉河谷是南亚跨境传输污染物的重要路径，本文阐述了尼泊尔加德满都至吉隆沿线典型河谷表层土壤中 PCDD/Fs 和 PCBs 的环境赋存特征。加德满都城市土壤中Σ_{17}PCDD/Fs 和Σ_{30}PCBs 浓度分别为 300 pg/g dw 和 267 pg/g dw。在远离城市的高山偏远地区，喜马拉雅的南坡迎风区有明显的富集，富集区土壤中 PCBs 和 PCDD/Fs 浓度是其他区域的 2~3 倍，这归因于海拔升高引起的温度下降、印度季风季节降水的湿沉降以及森林过滤作用。进一步研究了 PCDD/Fs 和 PCBs 随海拔变化在高山偏远地区的分配行为，发现低氯取代数的 POPs（4~5 氯代 PCDD/Fs，PCB-54 和 PCB-28 等）更容易随季风向高海拔偏远地区迁移，PCDD/Fs 的分配模式由大气长距离传输主导；正交矩阵因子分解（PMF）源解析结果表明喜马拉雅山区 PCBs 主要源于家庭煤炭和木材燃烧（26.6%），大气长距离传输（23.8%）及纺织品染料生产（42%），其余来自电气设备无意释放。POPs 对西藏生态系统，特别是藏南地区与南亚边境地区生态系统的影响有待持续开展。

关键字 POPs，高山冷凝效应，青藏高原

参考文献：

1. Y. Li, S. Hao, W. Ma, P. Yang, W. Li, Z. Zhang, R. Macdonald, *Environ. Sci. Ecotechnol.*, **2018**, 100311
2. P. Gong, X. Wang, B. Pokhrel, H. Wang, X. Liu, X. Liu, F. Wania, *Environ. Sci. Ecotechnol.*, **2018**,*53*(12), 6773-6783.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

微塑料在人体中的检出与健康风险评估

朱香玉、宋杨*
中国科学院生态环境研究中心

微塑料作为全球性新型环境污染问题，其对人体健康的潜在影响已引起广泛关注。本研究系统地阐述了微塑料在人体组织和器官中的检出情况，并评估其对人类健康的潜在风险。

微塑料的主要来源包括塑料制品的降解、个人护理用品中的微珠和合成纤维的脱落。人类通过摄入含有微塑料的食物（如海鲜、盐以及饮用水）和吸入空气中的微粒而暴露微塑料。通过（FTIR、PY-GC/MS、SEM、RMS 等方法）对多种人体样本的分析，包括骨髓、胎盘、肺、肝、母乳、尿液、血液等，均检出多种微塑料，如聚乙烯（PE）、聚丙烯（PP）和聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）等。肺组织样本中发现的微塑料颗粒表明它们可能通过空气传播，进而影响呼吸系统的健康。胎盘组织中检测到的微塑料表明其可能对发育中的胎儿构成潜在风险。人体骨髓中检出的微塑料提示了微塑料可能是血液肿瘤发生的一个新危险因素。此外，在成人粪便样本中普遍检测到至少一种微塑料，表明消化系统中微塑料的广泛存在。在男性精液样本中检测到的微塑料，平均每个样本含有 2 个微塑料颗粒,这强调了微塑料暴露对生殖健康的潜在影响。值得注意的是，58%的患者颈动脉斑块中存在聚氯乙烯（PVC），这增加了主要心血管事件的风险。在前列腺肿瘤旁组织和肿瘤组织中发现的三种类型的微塑料，揭示了微塑料对前列腺健康的潜在影响。

综上所述，微塑料在人体内的普遍存在可能对人类健康构成风险。微塑料的富集可能导致免疫系统反应、炎症和内分泌失调等健康问题，尤其是在孕妇和儿童群体中，这些问题需要特别关注。因此，微塑料的检测不仅揭示了其在人体内的普遍性，而且为评估人类健康风险提供了重要的基础数据。随着研究的深入，未来需要更多的研究探索微塑料对人体健康的长期影响。

关键字 微塑料；人体组织；环境暴露；健康影响

参考文献：

1. Krause, S.; Ouellet, V., The potential of micro- and nanoplastics to exacerbate the health impacts and global burden of non-communicable diseases. *Cell Rep Med* **2024,** *5* (6), 101581.
2. Yan, Z.; Liu, Y., Analysis of Microplastics in Human Feces Reveals a Correlation between Fecal Microplastics and Inflammatory Bowel Disease Status. *Environ Sci Technol* **2022,** *56* (1), 414-421.
3. Marfella, R.; Prattichizzo, F., Microplastics and Nanoplastics in Atheromas and Cardiovascular Events. *N Engl J Med* **2024,** *390* (10), 900-910.
4. Deng, C.; Zhu, J., Identification and analysis of microplastics in para-tumor and tumor of human prostate. *EBioMedicine* **2024,** *108*, 105360.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

沿环境梯度的 SOM 组分变化推动地表多介质间 CPs 迁移过程的主导机制研究

姜璐、王亚韡*
中国科学院生态环境研究中心

土壤，特别是背景土壤，是地表系统中 POPs 的主要贮存库，因此大气-土壤交换和分配行为是控制 POPs 在区域和全球范围内迁移及长期分布的关键过程。由于环境变化，土壤库中所储存的 POPs 有可能被“激活”，使得相应的地表介质从 POPs 的“汇”转变为“源”。本章研究工作针对南极长城站及青藏高原（山区-城市剖面）的背景地点对进行了大气及地表介质的样品采集，系统地研究了 CPs 在偏远地区近地面各介质中的赋存特征以及气-土交换、土壤-植物分配行为。研究结果表明：南极及藏东南地区整体上仍作为“汇”接收大气净输入的 CPs；然而不同 CPs 单体在藏东南地区的交换方向差异较大，SCCPs 在色季拉山趋于平衡，而在拉萨市有二次挥发的趋势。基于 SOM 的吸收是南极地区 CPs 气-土交换的重要过程；而对于藏东南地区，SOM 的吸收和热力学驱动的吸附不足以完全解释 CPs 在气-土之间的分配过程，其环境最终归宿受到多种机制的共同影响。在南极地表介质中，CPs 同族体分布在气体和苔藓之间以及颗粒和土壤之间呈现对称，类似于“镜像”。然而，由于土壤及植物内部组分的高度异质性，CPs 在南极苔藓/地衣-土壤分配与大气的气-粒分配行为之间存在明显差异。

关键字 土壤有机质，氯化石蜡，多介质迁移，二次释放

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

轮胎磨损颗粒相关新污染物在华北地区道路灰尘中的赋存与转化

杨茜元、傅建捷*、周伟、董玉婷、张爱茜
中国科学院生态环境研究中心

近年来，车辆尾气排放标准提高，传统的尾气排放造成的道路源污染得到缓解，然而轮胎磨损颗粒产生的新污染物未受法律法规监管，随着车辆的增长，轮胎磨损颗粒在产量增大，其毒性未知，赋存情况研究不足，需引起重视。轮胎制造过程中添加抗氧化剂、硫化促进剂等化学品，其中对苯二胺类化合物被广泛应用于轮胎的制造，N-(1,3-二甲基丁基)-N′-苯基-对苯二胺(6PPD)主要被作为轮胎抗氧化剂，易发生转化，转化产物毒性更高，其氧化产物 6PPD-Q 连续多年造成美国银大麻哈鱼的急性死亡。目前，已在多种介质中检测到 6PPD 和 6PPD-Q，包括大气颗粒、地表水、土壤、道路灰尘、饮用水、成人及儿童尿液，尤其孕妇尿液中含量较高。轮胎磨损颗粒相关新污染物及其转化产物在环境中大量存在，潜在的健康风险和赋存状况未知，在道路灰尘中的赋存状况亟需研究。本研究采集华北地区北京、天津、石家庄等 10 个城市的道路灰尘样品，将样品筛分后进行提取，使用 LC-MS/MS 检测对苯二胺类抗氧化剂、苯并噻唑类硫化促进剂和六（甲氧基甲基）三聚氰胺(HMMM)粘合剂及其转化产物。对苯二胺类抗氧化剂及其转化产物检出率 67 – 100 %，其中 6PPD、6PPD-Q 检出率为 100 %，苯并噻唑类硫化促进剂及其转化产物检出率 73 - 100 %，其中 1,3-二苯基胍(DPG)、1,3-二邻甲苯基胍(DTG)检出率为 100 %，HMMM 检出率为 97 %。山西临汾 6PPD 浓度最高，6PPD 和 6PPD-Q 最高检出浓度分别为 79.49 ng/g 和 42.62 ng/g。DPG 和 DTG 是产量较高的两类用于轮胎制造的苯并噻唑类硫化促进剂，检测了道路灰尘样品中的 DPG 和 DTG 含量，最高检出浓度分别为 1652.3 ng/g 和 1.8 ng/g。本研究对华北地区道路灰尘中轮胎相关新污染物及其转化产物进行了全面的赋存情况研究，轮胎生产过程中使用的抗氧化剂、硫化促进剂和粘合剂在我国华北地区道路灰尘中广泛存在，一些抗氧化剂易转化，转化产物浓度高，其危害不容忽视。目前毒理相关研究集中在 6PPD 等对苯二胺类抗氧化剂及其转化产物，本研究结果显示硫化促进剂 DPG 和 DTG 在道路灰尘中浓度较高，需重视其相关的毒理学研究。

关键字 道路灰尘；轮胎磨损颗粒；抗氧化剂；硫化促进剂

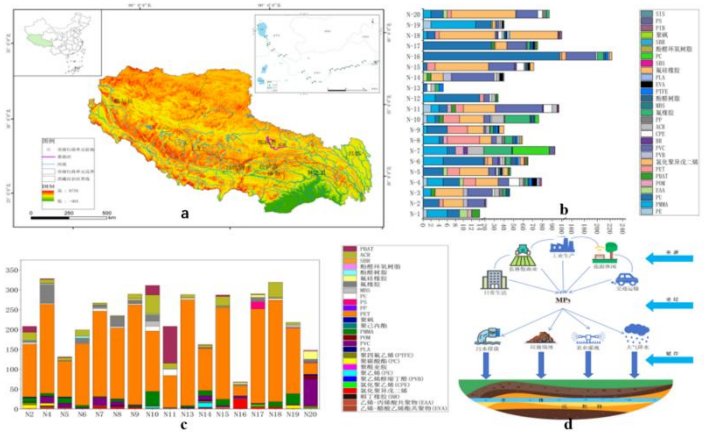
分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

怒江上游水体和底泥中微塑料赋存特征及来源分析

许耿[1,2]、毕玲丽[1,2]、崔小梅[1,2]、布多[1,2]、张强英*[1,2]
1. 西藏大学生态环境学院
2. 西藏大学分析测试中心

青藏高原那曲河-怒江源头因人类活动强度小，是研究微塑料背景的理想区域。研究采用激光红外成像系统方法对该区域内水体和沉积物的微塑料赋存特征和来源进行了研究。结果表明，水体中微塑料总丰度为 3816 个/立方米，共检出 28 种微塑料，聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）是丰度最高的微塑料。粒径分布主要集中在小粒径范围，20-100 粒径的微塑料丰度（3842 个/立方米）远远高于 100-500 μm 的微塑料丰度（240 个/立方米）。底泥中微塑料的丰度为 1508 个/千克。共检出 29 种微塑料，其中聚氨酯（PU）、氯化聚异戊二烯和聚氯乙烯（PVC）的丰度最高。20-100 μm 粒径的微塑料丰度（1170 个/千克）远远高于 100-500 μm 的微塑料丰度（156 个/千克）。怒江上游微塑料的来源以日常生活和交通运输为主。河边洗衣以及宗教习俗中用品（经幡、哈达）产生的微塑料是主要来源。其次，交通运输过程中车辆与地面摩擦产生的 PET 也是微塑料重要来源。研究结果为怒江上游 MPs 污染管理提供了理论基础和数据参考，为源头控制和河流 MPs 缓解策略提供了相关见解。

关键字 怒江源头；微塑料；赋存特征；来源分析



图：采样区域（a）,底泥（b）和水体(c)微塑料种类、丰度和微塑料来源（d）

参考文献：

1. Geyer R, Jambeck J R, Law K L. Science Advances,2017,3(7):1700782.

2. Jiang C, Yin L, Li Z, et al. Environment Pollution,2019,249:91-98.

3. Feng S.S, Lu H.W, Yao Y.L, et al. Journal of Hazardous Materials,2021,417.

4. Feng S.S, Lu H.W, Tian P, et al.Science of The Total Environment,2020,739(1):140087.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

一种基于 MSNs@Au 纳米复合材料修饰的双酚 A 电化学传感器

屈一鸣[1]、徐霞红*[2]
1. 浙江省农业科学院农产品安全与营养研究所
2. 国科大杭州高等研究院环境学院

双酚 A（Bisphenol A，BPA）是一种常见的内分泌干扰物，广泛应用于食品包装和婴儿奶瓶中，引发了公众对其潜在健康风险的关注。为评估 BPA 暴露风险并保障食品安全，本研究采用模板法合成了包覆胶体金的介孔二氧化硅（MSNs@Au）材料，并将其应用于修饰玻碳电极（GCE），制备了一种高效的电化学传感器。在此过程中，探究了孔径、金含量、金粒径等因素对传感器性能的影响，以优化材料的电化学特性。MSNs@Au 结合了介孔二氧化硅的大比表面积与有序孔道结构，显著增强了 BPA 分子的吸附与传质能力；同时，胶体金的高导电性提升了电催化性能，加速了 BPA 的电化学氧化反应。该传感器在 0.01 μM 至 40 μM 范围内对 BPA 具有良好的灵敏度，检测限为 3.3 nM。在实际样品如河水、牛奶和橙汁中检测 BPA 时，该装置展现出较强的稳定性和令人满意的回收率（96.37%-113.67%），显示了其广泛应用的潜力。研究结果表明，包覆胶体金的介孔二氧化硅在电化学传感领域，尤其是在 BPA 检测方面，具有显著的应用前景。

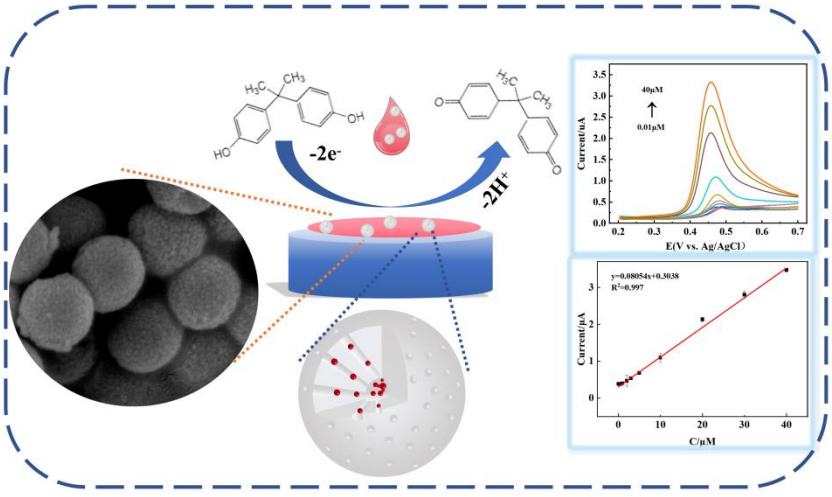


Fig. 1 Schematic illustration of MSNs@Au material for electrochemical detection of BPA

关键字 纳米复合材料；电化学传感器；双酚 A；食品检测

参考文献

1. ABRAHAM A, CHAKRABORTY P. A review on sources and health impacts of bisphenol A[J]. Reviews on Environmental Health, 2020, 35(2): 201-210.
2. HUANG S, SONG L, XIAO Z, et al. Graphene quantum dot-decorated mesoporous silica nanoparticles for high aspirin loading capacity and its pH-triggered release[J]. Analytical Methods, 2016, 8(12): 2561-2567.

3. HUANG J, ZHANG T, DONG G, et al. Direct and Sensitive Electrochemical Detection of Bisphenol A in Complex Environmental Samples Using a Simple and Convenient Nanochannel-Modified Electrode[J]. Frontiers in Chemistry, 2022, 10: 900282.
4. HUANG K J, LIU Y J, LIU Y M, et al. Molybdenum disulfide nanoflower-chitosan-Au nanoparticles composites based electrochemical sensing platform for bisphenol A determination[J]. Journal of Hazardous Materials, 2014, 276: 207-215.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

2,3,6,7-四氯咔唑肌肉发育毒性及机制探究

杨广磊[1,2]、郝迪[1,2]、徐丽[1,2]、赵斌[2]、谢群慧*[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学

卤代咔唑（PHCZs）是一类新污染物，具有、持久性和生物蓄积性等类二恶英毒性效应。由于 PHCZs 与 PCDD/Fs 的分子结构极为相似，PHCZs 的生态和健康风险评估成为亟待解决的问题[1]。PHCZs 通过激活芳香烃受体（AhR）对生物体产生毒性，这被认为是大多数二恶英同系物生物效应的经典机制。2367-四氯咔唑（2367-CCZ）与 2378-四氯二苯并-对二恶英（2378-TCDD）具有相似的卤素取代基，是一种具有 AhR 强激活效应的 PHCZs 类化合物[2]。已有研究表明，2367-CCZ 对斑马鱼心脏发育和下颌畸形的毒性效应与 2378-TCDD 相类似，已知骨骼肌发育是二恶英类化合物的毒性靶点。因此，研究 2367-CCZ 是否具有与 2378-TCDD 相同的骨骼肌发育毒性效应势在必行。

C2C12 小鼠成肌细胞系被用作肌发生模型，用于评估环境污染物，如 2378-TCDD、香烟烟雾和苯并[a]芘对骨骼肌分化和代谢的影响。在本研究中，我们观察到 2367-CCZ 以浓度依赖性的方式抑制 C2C12 细胞的成肌分化。通过流式细胞术分析和划痕实验，我们发现在分化早期 2367-CCZ 抑制 C2C12 细胞周期退出和迁移活性。2367-CCZ 上调细胞周期相关基因的表达，而抑制肌生成调节因子（MRFs）和肌管形成结构基因（MYH3 和 MYH4）的表达。2367-CCZ 可激活 AhR 信号通路，诱导 CYP1A1 和 CYP1B1 基因表达水平显著上调。沉默 AhR 逆转了 2367-CCZ 对 C2C12 肌源性分化的抑制作用，并通过上调 MRFs 的表达显著增强多核肌管的形成。此外，通过转录组测序分析，我们发现 2367-CCZ 在抑制 C2C12 肌管形成和收缩功能的同时伴有能量代谢紊乱和线粒体功能障碍。我们的数据表明，2367-CCZ 具有与二恶英相似的肌肉发育毒性，为评价 PHCZs 的毒性作用提供了新的靶点。

关键字 2367-CCZ；C2C12 细胞；肌源性分化；芳香烃受体

参考文献：

1. Dong, M., Wang, J., Liu, Y., He, Q., Sun, H., Xu, Z., Hong, H., Lin, H., Gao, P. 3-Bromocarbazole-Induced Developmental Neurotoxicity and Effect Mechanisms in Zebrafish. ACS ES&T Water., **2023** 3, 2471-2480.
2. Ji, C., Shen, C., Zhou, Y., Zhu, K., Sun, Z., Zuo, Z., Zhao, M. AhR Agonist Activity Confirmation of Polyhalogenated Carbazoles (PHCZs) Using an Integration of in Vitro, in Vivo, and in Silico Models. Environ. Sci. Technol., **2019** 53, 14716-14723.

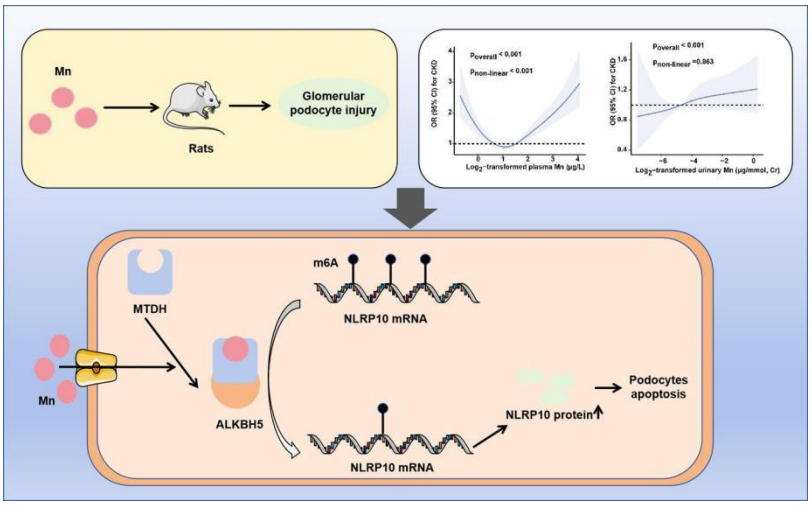
分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

锰通过调控 MTDH/ALKBH5/NLRP10 轴诱导足细胞损伤：基于流行病学和分子生物学层面的综合分析

梁秋菊[1,2]、经嘉俊[1,3]、何辉明[4]、黄小锋[1,5]、刘佳宁[3]、王明军[6]、齐自娟[1,7]、张丽娥[3]、黄子昂[8]、颜元良[2]、刘思金[1,5]、高明[1,5]、邹云锋*[3]

1. 中国科学院生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室
2. 中南大学湘雅医院药剂科
3. 广西医科大学公共卫生学院
4. 广西壮族自治区疾病预防控制中心寄生虫病防制所
5. 中国科学院大学资源与环境学院
6. 广西医科大学第一附属医院肾内科
7. 山东第一医科大学暨山东省医学科学院
8. 加利福尼亚大学戴维斯分校数学系

锰（Mn）是多种生物过程所必需的微量元素，但过量暴露于锰会引起神经毒性。然而，有关锰对肾脏毒性作用及其分子机制的报道较少。在本研究中，采用体内实验评估锰相关的毒性作用，发现慢性锰处理诱导了大鼠肾小球足细胞的损伤，而未对肾小管造成损伤。随后，使用全基因组 CRISPR/Cas9 敲除筛选来探索锰对足细胞毒性作用的生物靶点。通过对富集候选基因的功能分析，发现 NLRP10 显著上调，并介导了锰诱导的足细胞凋亡。进一步的机制研究表明，锰处理后，NLRP10 的表达由去甲基化酶 AlkB 同源物 5（ALKBH5）通过 m6A 依赖性方式调控。此外，锰可以直接与 Metadherin（MTDH）结合，促进其与 ALKBH5 的结合，从而促进 NLRP10 的表达和细胞凋亡。最后，采用逻辑回归、限制性立方样条回归和统一立方 B 样条来研究锰暴露与慢性肾病（CKD）风险之间的关系。在病例对照研究中，发现 CKD 风险与血浆锰水平之间呈 U 形非线性关系，而 CKD 风险与尿液锰水平呈正线性关系。总之，我们的研究结果表明，m6A 依赖性 NLRP10 调控在锰诱导的足细胞凋亡和肾毒性中不可或缺，为理解锰的健康风险提供了新的见解，并为预防锰中毒患者的肾损伤提供了新的靶点。



关键字 锰，足细胞损伤，CRISPR/Cas9 基因敲除筛选，NLRP10，m6A

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

纺织印染工业室内灰尘中光引发剂的识别

张伟[1,2]、郭辰琦[2]、朱豹[2]、傅建捷[1,2]、张海燕*[2]、江桂斌[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

光引发剂（photoinitiators, PIs）作为合成添加剂，因其广泛应用及内分泌干扰等有害效应而受到越来越多的关注。印染纺织工业是 PIs 的潜在污染源，也是国家新污染物治理的重点关注行业。然而，目前有关印染纺织工业释放 PIs 的信息仍十分有限。本研究采集了绍兴印染纺织工业区生产车间及厂内生活设施的室内灰尘样本（n=50），通过分散固相萃取法结合超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱（UHPLC-QTOF HRMS, SCIEX QTOF 7600）的高分辨多重反应监测模式（MRMHR）识别 24 种 PIs 化合物及其转化产物。在室内灰尘样本中检测到 22 种 PIs 单体，其总浓度范围为 85.8 ng/g 至 5193 ng/g（几何均值 392 ng/g），该赋存水平高于我们前期研究中义乌轻工业区（造纸、印染）道路灰尘中的浓度（93.2 ng/g），但低于华南电子垃圾拆解设施室内灰尘（1290 ng/g）。

不同 PIs 检出情况差异较大（2.0%～100%），苯酮类是主要污染物（几何均值 227 ng/g，平均占比 58.0%），其次为膦氧化物类（70.6 ng/g，20.0%）、胺类共引发剂（7.72 ng/g，19.0%）和硫杂蒽酮类（11.4 ng/g，3.0%），该组成特征与义乌轻工业区道路灰尘一致。主要单体物质包括 1-羟基环己基苯基甲酮（PI184，平均占比 25.0%）、1,2-二苯基-1,2-乙二酮（Benzil，17.1%）、4-(二甲基氨基)苯甲酸 2-乙基己酯（EHDAB，14.7%）、三苯基氧化膦（TPPO，14.3%）和二苯甲酮（BP，9.22%）。此外，还检测到 3 个 BP 的羟基化产物、3 个 4-甲基二苯甲酮（4MBP）的羟基化产物以及 2 个 4,4'-双（二乙基氨基）二苯甲酮（MEK）的脱烷基产物，这些转化产物的总体浓度较低，几何均值范围在低于方法定量限至 6.99 ng/g 之间。综上所述，研究结果证实了印染工业生产活动中 PIs 的源释放，并伴随其转化产物的生成。需要注意的是，由于印染厂内频繁的水洗及其他清洁活动，灰尘的数据可能低估了其生产过程中 PIs 的释放，相关职业暴露风险也需要进一步评估。

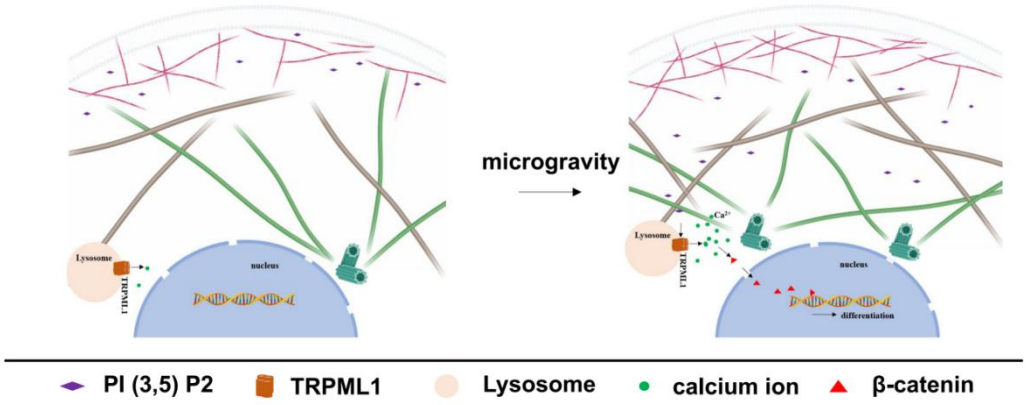
关键字 光引发剂、印染工业、室内灰尘、转化产物。

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

TRPML1 离子通道在模拟微重力条件下促进了 HepaRG 细胞的分化

范唤彩、高明*
中科院生态环境研究中心

干细胞分化必须通过细胞与其周围环境之间复杂的相互作用进行调控，以确保正常的器官和组织形态，如肝脏。虽然微重力为细胞命运提供必要的机械力信号已被认可，但由于缺乏实际实验场景和可重复性工具，微重力如何影响细胞生长、分化和通信仍未被充分了解。我们使用 Rotating Flat Chamber（RFC）模拟地基微重力效应，研究微重力如何影响 HepaRG（肝祖细胞）的分化。令人意外的是，我们发现模拟微重力可以促进 HepaRG 细胞的分化，表现为甲胎蛋白（AFP）、白蛋白（ALB）和重组细胞角蛋白 18（CK18）的表达增加。通过筛选一系列机械受体，我们发现离子通道 TRPML1 在模拟微重力下的分化促进效应中至关重要。一旦 TRPML1 被模拟微重力激活，溶酶体钙离子浓度增加，从而激活 Wnt/β-catenin 信号通路，最终增强 HepaRG 细胞的分化。此外，细胞骨架在模拟微重力条件下被重塑，进而影响 PI（3,5）P2 的表达，这是一种已知的 TRPML1 激活剂。总之，我们的研究发现了一种机制，即通过 TRPML1 信号通路，模拟微重力促进了 HepaRG 细胞的分化，这可能为在实际微重力条件下调控肝干/祖细胞分化及胚胎肝发育提供潜在靶点。



关键字 微重力，肝祖细胞，细胞分化，机械力学受体，TRPML1

参考文献：

1. Lu D, Sun S, Zhang F et al. Microgravity-induced hepatogenic differentiation of rBMSCs on board the SJ-10 satellite. FASEB J 2019;33:4273-4286.
2. Chen J, Liu R, Yang Y et al. The simulated microgravity enhances the differentiation of mesenchymal stem cells into neurons. Neurosci Lett 2011;505:171-5.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

乳酸通过抑制炎症水平减轻 LPS 引起的急性肺部损伤

丁子晗*
中国科学院生态环境研究中心

乳酸是一种天然存在的有机化合物，具有一定的生理活性。脂多糖（Lipopolysaccharide, LPS）是一种重要的免疫刺激物质，与炎症反应和感染反应密切相关。为了探究乳酸在免疫炎症中的作用，我们对细胞分别进行 LPS 和 LPS+乳酸处理，我们发现乳酸显著降低了 LPS 引起的炎症效应，并且 ROS 水平显著下降。此外，我们在实验动物验证中也得到了一致的结果，我们使用 LPS 对小鼠进行肺部感染，LPS 会显著引起小鼠肺部的炎症反应。而同时对小鼠施加 LPS 感染和乳酸处理时，肺部炎症水平显著下降，炎症因子表达量降低。我们的实验证明，乳酸可通过抑制炎症水平减轻 LPS 引起的急性肺部损伤。

关键字 乳酸；炎症；肺

参考文献：

1. Zhang D , Tang Z , Huang H ,et al.Metabolic regulation of gene expression by histone lactylation[J].Nature, 2019, 574(7779):575-580.DOI:10.1038/s41586-019-1678-1.
2. Sheen, K.; Myung, S.; Lee, D.-M.; Yu, S.; Choi, Y.; Kim, T.; Kim, J.; Ji, S.-G.; Kim, M.-S.; Kim, W.; et al. RNA-Seq of an LPS-Induced Inflammation Model Reveals Transcriptional Profile Patterns of Inflammatory Processes. Life 2024, 14, 558. https://doi.org/10.3390/life14050558.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

中国东部典型轻工业城镇多氯丁二烯和多氯苯的赋存与风险评估

盖筱雨[1,2]、郭辰琦[1,2]、俞泽臣[2]、傅建捷[1,2]、张海燕*[2]、江桂斌[1,2]
1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 国科大杭州高等研究院

多氯丁二烯（CBDs）和多氯苯（CBs）均具有持久性、生物可累积、潜在长距离传输能力和高毒性，其环境污染及健康危害受到全球广泛关注。这两类物质在工业上被用作有机合成中间体、溶剂等，橡胶、塑料、染料、造纸助剂等轻工业是潜在的污染源。为探究这些潜在污染源对当地环境 CBDs 和 CBs 赋存的影响，本研究选取浙江义乌某轻工业园区（造纸、印染为主）作为研究区域，系统采集并分析了园区及周边多环境介质样品（27 个表层土壤、29 个道路灰尘、9 个河水底泥、9 个河水表层土壤、49 个地下土、8 个河水、6 个地下水和 15 个废水）9 种 CBDs（Cl4-Cl6）和 11 种 CBs（Cl2-Cl6）。

结果显示，所采集样品中六氯丁二烯（HCBD）和多氯苯有广泛检出（平均检出率分别为 46%和 93%），四氯丁二烯（TeCBDs）和五氯丁二烯（PeCBDs）仅在部分道路灰尘和底泥中有检出（平均检出率分别为 3%和 4%）。道路灰尘中的目标化合物的含量显著高于其他固体介质，表明灰尘可能是反映 CBDs 和 CBs 污染的灵敏指示物，这与杭州某工业园区灰尘和土壤的前期研究发现的规律一致[1]。例如，HCBD 在道路灰尘中的浓度最高达 36.1 ng/g dw（平均浓度 4.54 ng/g dw），高出其他固体介质一至两个数量级（0.06 ng/g dw~0.51 ng/g dw）。废水中 HCBD（最高值 13.8 ng/L，平均值 2.12 ng/L）和 CBs（86.9 ng/L，15.9 ng/L）浓度远高于河水中 HCBD（1.06 ng/L，0.13 ng/L）和 CBs（5.02 ng/L，1.72 ng/L）浓度，且在流经废水处理厂的河流段采集的河水表层土壤和河水底泥中，均观察到 CBs 的含量升高，暗示废水处理厂是重要排放源之一。在不同点采集的地下土中，距离地表 4.5-5 米部分的地下土中 CBDs 的平均含量最高，距离地表 3-3.5 米部分的地下土中 CBs 的平均含量最高，证实这些物质在土壤中均会向下迁移。基于斯皮尔曼相关分析、线性回归分析和主成分分析可知，TOC、log Koc 和 log Koa 均是影响样品中目标物含量的重要因素，印染、造纸工业可能是当地 CBDs 和 CBs 的主要来源。尽管该园区介质中 CBDs 和 CBs 赋存水平要高于此前杭州某园区，但总体上仍处于较低水平。风险计算模型评估结果表明，研究区域的表层土壤和道路灰尘中的 CBDs 和 CBs 几乎不存在非致癌风险和致癌风险（HI < 1，TCR < 10-6）。以上研究结果补充了轻工业地区 CBDs 和 CBs 的基础数据，为进一步制定环境质量标准和风险管控政策提供了科学依据。

关键字 多氯丁二烯；多氯苯；轻工业城镇；赋存；风险评估

参考文献：

1. Wang Y, Guo C, Jiang L, et al. Occurrence differences of hexachlorobutadiene and chlorobenzenes in road dust and roadside soil media in an industrial and residential mixed area in Eastern China[J]. Environmental Pollution, 2024, 344: 123311.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

高效液相色谱串联质谱法分析多种环境介质中新型替代品阻燃剂

石喆元、刘文彬*
中国科学院大学

甲基八溴醚（2,2-Bis[3,5-dibromo-4-(2,3-dibromo-2-methylpropoxy)phenyl]propane, BDDMP）是一种添加型溴系阻燃剂，近年来作为六溴环十二烷（Hexabromocyclo-dodecane, HBCD）的替代品得到开发和应用。我国也于 2021 年 12 月彻底禁止了 HBCD 的生产和使用。HBCD 禁用后，为填补相应的市场空缺，以 BDDMP 为主的几种新型阻燃剂被逐步投入生产和使用。然而这些阻燃剂除需要满足建筑保温泡沫板的防火性能和保持替代过程中的商业优势外，其环境效应及健康影响也应受到相应的重视，并加以监管。

本文开发了环境水、土、沉积物介质中的 BDDMP 超高效液相色谱串联质谱联用分析方法，方法检出限达到 0.1 μg/L；工作曲线浓度区间为 0.5 ~ 100 μg/L；线性相关系数 R2=0.9996；七次 0.5 μg/L 浓度平行样品的标准偏差为 0.022。根据方法检出限和实际样品浓度范围，确立并优化前处理过程。水样前处理直接使用固相萃取(SPE)，土壤和沉积物样品经快速溶剂萃取(ASE)后再使用 SPE 净化。图 1 展示了常见固相萃取填料及常用洗脱溶剂对 BDDMP 的保留回收效果对比，最终确定使用 C18 填料 SPE 柱以甲醇洗脱。

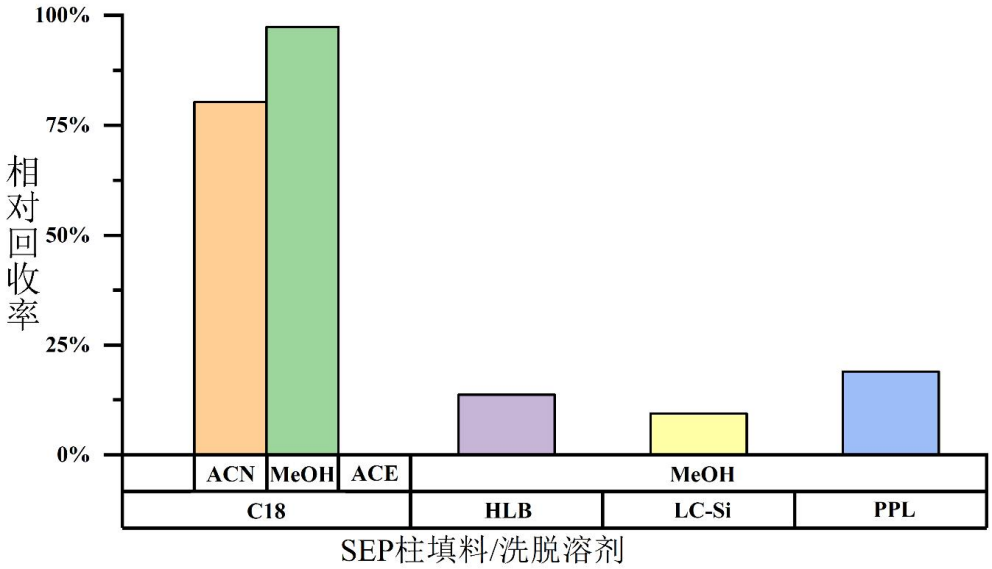


图 1. 不同填料固相萃取柱及洗脱溶剂的相对回收率

于山东省溴素化工产业集群周边采集河流地表水样品 16 个，沉积物样品 18 个，土壤样品 42 个，并应用上述方法分析样品中甲基八溴醚赋存状态。图 2，展示了水、土沉积物样品中甲基八溴醚的浓度水平。水中甲基八溴醚有两个样品低于检出限，最高浓度为 162 ng/L；土中甲基八溴醚有八个样品低于检出限，最高浓度为 275 ng/g；沉积物中甲基八溴醚有四个低于检出限，最高浓度为 2.31 ng/g。

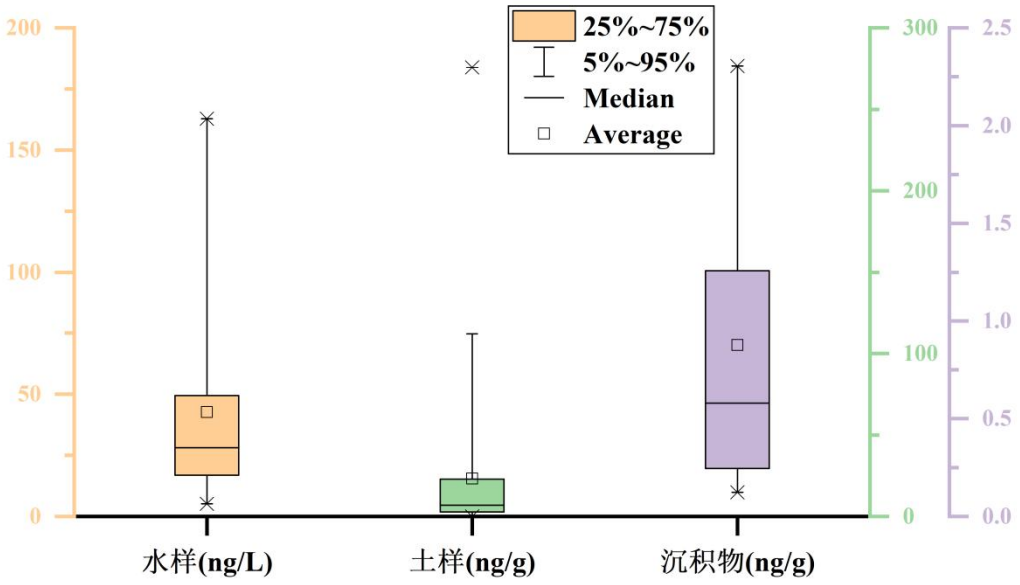


图 2. 不同介质中甲基八溴醚赋存状况

关键字 甲基八溴醚；UPLC-MS/MS；溴系阻燃剂；

参考文献：

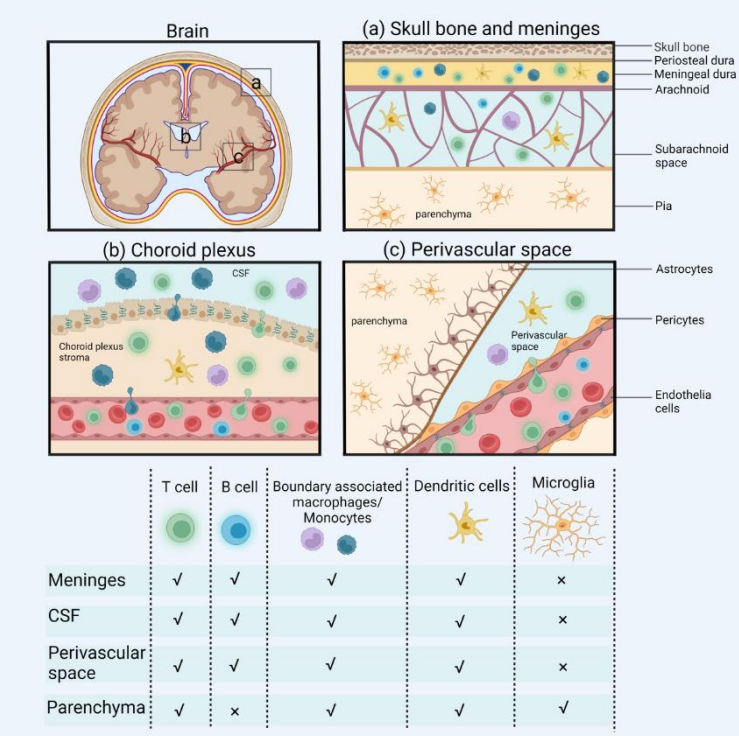
1. J. L. Deng, W. B. Liu, L. R. Gao, T. Q. Jia, Y. C. He, T. A. Mao, J. Hussain, Molecules, 2023, 29, 36.
2. Y. Y. Li, Z. Y. Shi, Y. M. Xiong, X. Y. Chen, L. Lv, H. Huang, W. Liu, J. Zhao, X. H. Li, Z. F. Qin, Environ Sci Technol, 2024.
3. F. Yin, Z. Ren, J. Hussain, Z. Tian, T. Jia, W. Liu, Sustainability, 2023, 15.
4. H. F. Li, Y. X. Liu, Y. Y. Lan, Y. N. Zhao, A. X. Lu, C. Li, R. R. Lei, J. C. Xue, W. Liu, Environmental Science and Pollution Research, 2022, 29, 58828-58842.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

了解大脑中免疫微环境的变化：对多种脑部疾病的诊断和治疗有希望

徐晓彤、马娟*
中国科学院生态环境研究中心

脑内炎症状态的改变已被发现与多种脑部疾病相关。脑脊液中免疫细胞数量和功能的动态变化在脑免疫性疾病的早期预测和诊断中显示出优势。炎性脑脊液中聚集的因子和细胞为治疗提供了候选靶点。脑内的生理屏障，如血脑屏障，为常驻免疫细胞的分布建立了一个最优的稳定环境。然而，外周免疫细胞如何涌入大脑以及维持脑脊液免疫稳态的调节机制尚不清楚。为了加深对脑脊液中免疫细胞状态变化与脑病因果关系的认识，本文阐述了脑脊液中免疫细胞变化的特点以及常见脑病病例中免疫细胞变化的分子机制。此外，本文还总结了以脑脊液中免疫细胞及相关细胞因子为靶点的脑部疾病诊治方法。进一步研究新的免疫细胞亚型以及每种免疫细胞在脑部疾病发生发展中的作用，有助于提高诊断和治疗的特异性。



关键字 脑疾病;免疫微环境;脑脊液;疾病诊断和治疗

参考文献：

1. Lucin KM, Wyss-Coray T: Immune activation in brain aging and neurodegeneration: too much or too little? Neuron 2009, 64:110-122.
2. Mapunda JA, Tibar H, Regragui W, Engelhardt B: How Does the Immune System Enter the Brain? Frontiers in Immunology 2022, 13.

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

对微纳塑料的定义与检测的再思考

王晶晶*[1]、李敦柱[2]
1. 浣江实验室
2. 浙江农林大学 暨阳学院环境与资源学院 诸暨 浙江 李敦柱

在全球范围内，日常生活对塑料制品的依赖程度极为显著。塑料制品在我们的日常生活中可谓无处不在，涵盖了从厨房用具、智能科技设备，再到食品包装、储存以及准备等各个方面。众所周知，塑料会分解成微小碎片，按照其尺度可划分为微塑料（MPs）以及纳米塑料（NPs），二者统称为微纳塑料（MNPs）。尽管微纳塑料的风险目前仍处于研究阶段，但是由于其微小的尺度，易于与其他有害物质以及病菌相结合，并且在大气和水系中能够广泛传播，这引发了人们对于微纳塑料对人体健康和环境影响的深层担忧。因此，对微纳塑料的形成、检测以及控制已然成为当前研究的重点。

我们的研究成果显示，诸如婴儿奶瓶（BFBs）、电热水壶、午餐盒以及塑料水杯等塑料制品，在食物准备过程中会向水中释放出大量颗粒（数量大于 8×10^5 颗粒 / 升），其中以用于配方奶粉准备的聚丙烯婴儿奶瓶（PP-BFBs）释放量最为突出 [1-3]。早期微塑料的研究主要聚焦于微塑料对环境和生态所产生的影响。只有呈高分子形态的塑料微粒才能够被回收检测，所以研究重点皆集中在以高分子材料形成的 “微塑料” 颗粒之上。然而，从塑料制品中释放的颗粒并不仅限于 “微塑料”，还涵盖了微添加剂颗粒（MAPs）等其他微纳颗粒。由于塑料添加剂种类繁多且分子量小，它们或许会带来额外的健康风险，并且其对环境影响的评估也远远不够完善。为了能够对微塑料进行准确的风险评估，区分微塑料和微添加剂颗粒显得至关重要。本次报告将围绕对 “微塑料” 的定义以及 “微塑料” 检测展开再思考，并介绍一种能够识别塑料所释放的微纳颗粒中高分子材料颗粒和添加剂颗粒的新方法 [4]。

关键字 微塑料，纳米塑料，微纳塑料，塑料添加剂

参考文献:

1. “Microplastic release from the degradation of polypropylene feeding bottles during infant formula preparation”, Dunzhu Li, Yunhong Shi, Luming Yang, Liwen Xiao, Daniel K. Kehoe, Yurii K. Gun’ko, John J. Boland, Jing Jing Wang, Nature Food, DOI: 10.1038/s43016-020-00171-y, 2020
2. “The Influence of Drinking Water Constituents on the Level of Microplastic Release from Plastic Kettles”, Yunhong Shi, Dunzhu Li, Liwen Xiao, Daragh Mullarkey, Emmet D. Sheerin, Luming Yang, Igor V. Shvets, John J. Boland, Jing Jing Wang, Journal of Hazardous Materials, DOI: 10.1016/j.jhazmat.2021.127997, 2022
3. “High levels of microparticles release from biodegradable polylactic acid paper cups compared with polyethylene-lined cups”, Luming Yang, Dunzhu Li, Yunhong Shi, Christopher Hill, Rekha Pilliadugula, Laura Page, Jing Jing Wang, John J. Boland, Liwen Xiao, Chemical Engineering Journal, DOI: 10.1016/j.cej.2023.143620, 2023
4. “Alcohol pre-treatment to eliminate the interference of micro additive particles in the identification of microplastics using Raman spectroscopy”, Dunzhu Li, Emmet D. Sheerin, Yunhong Shi, Luming Yang, Liwen Xiao, John J. Boland, Jing Jing Wang, Environmental Science & Technology, DOI: 10.1021/acs.est.2c01551, 2022

分会场：24.新污染物筛查技术与方法
交流形式：墙报

水中新污染物筛查的自动采样技术与装置

卢斌[2]、唐燕[1,2]、甘剑勤[2]、邵科敏[2]、闻路红*[1,2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

新污染物是一类对人类健康和环境构成潜在威胁的化学品，包括药品、内分泌干扰物、类固醇激素、杀菌剂、消毒剂、农药、兽药、阻燃剂等。新污染物通常以低浓度（ng/L~μg/L）存在于水和废水中，可以在食物链中进行生物积累，对生态系统和人类健康构成重大风险。因此，构建有效的水环境新污染物监测体系成为当前环境保护的迫切需求。

水中新污染物筛查重要的环节是科学化水样本采样。针对传统水质采样器采样不精准、采样信息、数据需人工记录，不便于进行后端分析，我们课题组提出了新型智能、互联的自动水样采样技术。全自动水样智能采样器可远程通过云端服务器或手持终端进行实时监控操作、采样现场状态实时反馈。通过中转采样技术，实现了任意采样深度（0 至 9 米）、任意采样量（≥5 mL）单采、多采采样精度≤±5%。第三方检测结果证明在设定单采 100 mL 采样量采样误差为-1%，多采 400 mL 采样量采样误差为-3%。新型的智能采样技术，可以满足连续 7 天每隔 2 小时采样至 500 mL 采样瓶；水样本存储仓可-22 ℃~20 ℃远程实时控温，实现即采即冻，提升了采样器使用寿命；采样数据实时云端存储，采样器摄像头具备人形检测、智能跟踪、自动跟拍，实时保存录像，保留关键证据。可实现采样追溯、防止数据作假。

本课题组研制的全自动水样智能采样器具备高采样精度、远程操作、即采即冻、采样数据可实时记录在云端服务器，实时远程监控采样现场状态等优势。已批量广泛运用在工业废水监测采样、水环境监测采样、污水流行性病学监测采样等领域，结合开发的液相色谱串联质谱方法识别了多种农药、药品等新污染物，评估低水平长期暴露于新污染物有对环境及人体健康的影响，对于制定有效的环境保护战略和监管政策，以保护水生生态系统和公众健康至关重要。

关键字 新污染物，水，筛查，自动采样，污水

参考文献：

1. L. Meng, S. Gao, S. Zhang, X. Che, Z. Jiao, Y. Ren, C. Wang, *Environ Int.*, **2024**,192,109027.
2. T. Jiang, W. Wu, M. Ma, Y. Hu, R. Li, *Sci Total Environ.*, **2024**,951,175664.
3. X. Li, X. Shen, W. Jiang, Y. Xi, S. Li, *Ecotoxicol Environ Saf.*, **2024**,278,116420

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

城市水体中对苯二胺醌类新型环境污染物的识别和健康风险研究

曹国栋
中国地质大学（武汉）

对苯二胺类物质（PPDs）是一类人工合成的抗氧化剂，目前被广泛地用于轮胎、皮带、软道和鞋底等多种橡胶制品的生产中。2021 年 1 月，Science 的一篇文章指出，PPDs 类抗氧化剂中的 6PPD 在与环境中臭氧接触时会生成醌类转化产物，6PPD-醌，该物质是造成太平洋西海岸等地洄游产卵的银鲑鱼大量死亡的主要原因。在本研究中，我们采用多种现代化的质谱分析检测技术，如高分辨电喷雾质谱和三重四级杆质谱等，结合多种数据采集模式，在我国香港地区的道路雨水、市政污水中鉴定到一系列与 6PPD-醌具有相似结构的新型环境污染物，将其命名 PPD-醌类新型环境污染物。通过标准品合成及质谱碎裂模式验证，我们确定了该类新型环境污染物的结构，并对其在不同市政水体样品中的含量进行了准确测定。分析结果表明，PPD-醌类污染物在在香港地区的道路雨水和市政污水中数倍高于其母体化合物，表明其具有更高的环境及暴露风险。随后，我们测定了该类污染物在香港 4 个污水处理厂中的含量及分布，系统地表征了不同污水处理技术对于该类环境污染物的去除效率，发现现有的污水处理系统不能实现该类污染物的完全去除。质量流量分析表明初级污水处理厂的混合工艺和二级处理厂中生物降解对 PPD-醌有较高的去除效率。毒理实验研究表明，PPD-醌类污染物暴露可在多种水生生物，包括微藻、深海鱼体内形成 DNA 加合产物，揭示其具有潜在的遗传和基因毒性。上述研究揭示了在我国香港市政水体中普遍赋存的对苯二胺类新型环境污染物，较高的环境丰度使其对多种水生生物以及城市居民健康造成威胁。考虑到该类污染物的普遍性，后续有必要开展我国其他城市或地区的水体样品中对苯二胺醌类新型污染物的环境赋存和长期暴露风险研究。

关键字 对苯二胺醌；新型环境污染物；城市径流；道路雨水；市政污水；暴露风险

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

典型地区地下水中多环芳烃及其衍生物赋存特征及健康风险研究

王淑婷，赵虎，宋弦静，郭峰*
国家地质实验测试中心

多环芳烃衍生物及母体在环境中表现出较高的毒性、持久性和生物可利用性。由于在大气和土壤中的普遍检出，其污染问题正成为环境科学领域的一项重要课题。多环芳烃衍生物较强的极性和迁移性对地下水质量构成潜在威胁，目前地下水中新型极性衍生的赋存状况尚不明确。因此本研究基于在线固相萃取技术，建立了地下水中多环芳烃衍生物及母体的高灵敏自动化分析方法，并对河北衡水、邢台地区的赋存特征及健康风险进行研究。结果显示：①针对地下水中的 15 种优控多环芳烃母体建立的全自动在线固相萃取-液相色谱荧光检测（Online SPE-UPLC-FLD）方法检出限低至 0.02 - 1.26 ng/L；②针对地下水中的 19 种多环芳烃衍生物开发的全自动在线固相萃取-液相色谱高分辨质谱联用（Online SPE-UPLC-Orbitrap HRMS）方法实现了不同取代基 SPAHs 的同时测定；③河北衡水、邢台地区地下水中共检出 16 种多环芳烃衍生物及 13 种母体，均值分别为 98.78 ng/L 和 29.94 ng/L，地下水中的多环芳烃母体以低环为主，衍生物以羟基衍生物为主。采用美国 EPA 致癌和非致癌风险评价方法进行健康风险评价，与国内外研究相比河北衡水、邢台地区地下水中多环芳烃衍生物及母体污染处于较低至中等水平。为地下水中新型极性多环芳烃衍生物及母体的预防控制提科学依据。

关键字 多环芳烃衍生物；多环芳烃；在线固相萃取；地下水

参考文献

1. Bandowe B A M, Wei C, Han Y M, et al. Science of the Total Environment, **2019**, *690*: 1268-1276.
2. Lin W, Wei S, Jiang R, et al. Analytical Chimica Acta, **2016**, *933*: 117-123.
3. Bandowe B A M, Bigalke M, Kobza J, et al. Science of the Total Environment, **2018**, *630*:83-95.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

地下水中砷的现场检测技术

杜晶晶，史建波*
中国科学院生态环境研究中心

砷是生物地球化学过程研究中最具代表性的剧毒重（类）金属元素，是当前国际环境地球化学研究的热点。山西省、内蒙古是我国地下水砷污染的典型地区。目前含砷井水仍是当地某些村庄的唯一引用水源，因此发展高效简便经济的砷污染预警体系，保护当地居民的健康，是一项亟待解决的现实问题。砷的形态转化主要体现为价态、配体分子改变或络合结构变化，其本质是化学键合变化。表面增强拉曼散射（SERS）作为分析化学领域一项极具潜力且备受关注的技术，面临信号可重复性和灵敏度等挑战。通过引入外磁场，可以动态调控磁性纳米复合材料的 SERS“热点”，即调节金属纳米粒子之间的电磁场效应，这对于增强 SERS 信号至关重要。本研究将贵金属纳米颗粒组装于 Fe_3O_4 等材料表面，得到具有磁性的卫星状结构三维复合材料，该磁性三维功能结构兼具 Fe_3O_4 核的磁学性质和贵金属纳米颗粒间高效电磁耦合的表面增强拉曼活性，可衍生出众多功能反应平台和通道，用于对砷的特异性主动富集与快速分离，实现采样和测量一体化。结合污染场地特点，在加载外磁场的检测条件下，该传感器可用于研究环境基质中砷的赋存形态、浓度水平及形态转化规律，可实现地下水、河水、工业废水等多种环境基质中砷的定性定量分析，检测时间仅需 1 分钟。

关键字 砷；地下水；表面增强拉曼；外磁场调控；原位检测

参考文献

1. Z. Sun, N. Wang, Y. Zhang, X. Ji, Z. Hong, D. Xie, W. Zhang, W. Liu, J. Du *, *J. Mater. Chem. A*, **2024**, *12*, 17151-17157.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

应用原位在线 QXAS 研究重金属在矿物-水界面的吸附动力学

莫昕欣
中国地质大学（武汉）

重金属是土壤与地下水等多介质环境中的关键元素及污染物。矿物-水界面的吸附反应在重金属的水环境迁移、转化及归趋中起着关键作用，因此，理解其反应机理显得尤为重要。长期以来，湿化学实验、表面配位模型及谱学表征技术等多种研究方法有效阐明了重金属在矿物-水界面上的吸附行为及其微观形态，然而，目前的难点与薄弱点主要在于：界面反应动力学过程中，不同形态之间是否存在相互转化的现象？如何实时监测及追踪这一动态过程？为应对这一学术挑战，本研究发展并应用了基于原位流动反应池的时间分辨快扫同步辐射实验（operando QXAS），成功突破了常规 XAFS 实验样品制备与采谱测试之间的时间差，实时追踪了金属锌离子在氧化铝与黏土矿物表面吸附-沉淀反应的动力学过程。结果显示，在氧化铝/锌体系中，反应初期（<15min）锌离子由六配位游离态转化为四配位内圈络合形态，随着反应的进行（>15min），逐渐转化为六配位层状双金属氢氧化物（LDH）的表面沉淀态；而在黏土矿物/锌体系中，反应初期（<5min）锌以四配位内圈络合态为主导，随着反应的推进（>5min）转化为六配位内圈络合态。本研究将界面反应的时间分辨提升至分钟尺度，从实验的角度深化了对固液界面吸附反应复杂性的理解，将对界面反应的理解从静态认知推向了动态认知，同时也为天然矿物材料应用于地下水重金属污染修复提供了理论基础。

关键字 重金属；矿物-水界面；原位表征；同步辐射；吸附动力学

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

热泉有机质的表征及其与微生物群落的相互作用

尹志鹏，景传勇，蔡勇*
山东大学

有机质（Organic matter，OM）在碳、氮及其它元素的生物地球化学循环中发挥着重要角色，与微生物群落存在复杂的相互作用。热泉具有极端的温度、pH 等理化参数，通常被认为是寡营养环境，其碳循环长期被忽视。近年来，越来越多的研究表明，热泉微生物具有独特的碳代谢策略。然而，陆地热泉环境中 OM 的分子组成及其与微生物群落的相互作用仍不清楚。我们利用超高分辨率的傅里叶变换离子回旋共振质谱（FT-ICR MS）对典型地热区域（云南腾冲）的水体和沉积物中的 OM 进行了分子水平表征。结合高通量扩增子测序和多变量分析，我们解析了 OM 组成与微生物群落之间的联系。如图 1 所示，水体和沉积物中 OM 的化学多样性较高，分别含有 11,088 与 7,772 种有机分子。含硫有机化合物是热泉 OM 的显著特征，在水体与沉积物中分别占 21%±5%和 33%±4%。多变量分析结果表明，活性与惰性有机质均影响了微生物群落的结构和功能。共现网络分析揭示了 Proteobacteria 与 Crenarchaeota 门的微生物物种与有机质组分之间相关性最为显著，在水体（33%和 15%）和沉积物体系（15%和 12%）贡献了主要的连接，证明了它们在热泉碳循环中的关键作用。该研究拓展了我们对热泉环境 OM 组成的认识，强调了其通过微生物碳循环在全球气候变化中的潜在作用。

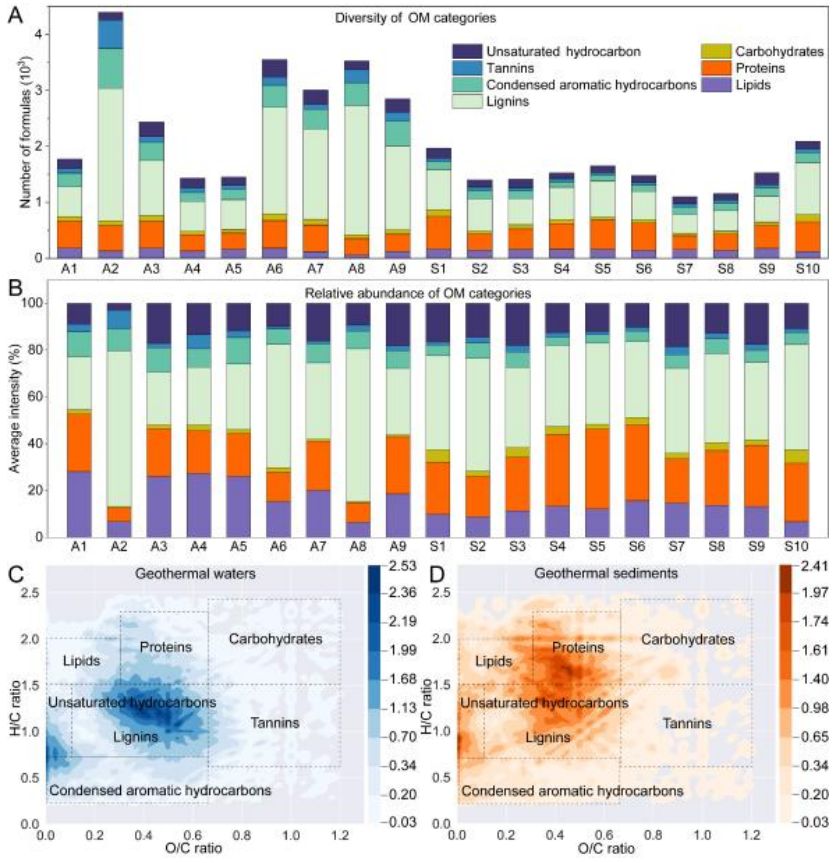


图 1. 热泉水体与沉积物中有机质的组成

关键字 热泉；有机质；FT-ICR MS；微生物组；碳循环

参考文献

1. Li, H.Y., Wang, H., Wang, H.T., Xin, P.Y., Xu, X.H., Ma, Y., Liu, W.P., Teng, C.Y., Jiang, C.L., Lou, L.P., Arnold, W., Cralle, L., Zhu, Y.G., Chu, J.F., Gilbert, J.A., Zhang, Z.J., Microbiome, **2018**, *6*, 187.

2. Levy-Booth, D.J., Hashimi, A., Roccor, R., Liu, L.Y., Renneckar, S., Eltis, L.D., Mohn, W.W., ISME J., **2021**, *15*, 879-893.

3. De Anda, V., Chen, L.X., Dombrowski, N., Hua, Z.S., Jiang, H.C., Banfield, J.F., Li, W.J., Baker, B.J., Nat. Commun., **2021**, *12*, 2404.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

亚砷酸盐 S-腺苷甲硫氨酸甲基转移酶催化蓝细菌 Nostoc sp. PCC7120 中的锑生物甲基化

李建伟，杜晶晶，史建波*
国科大杭州高等研究院
中国科学院生态环境研究中心

锑（Sb）的生物甲基化是锑生物地球化学循环中一个重要但鲜为人知的过程。环境中已广泛检测到甲基锑化合物，但锑甲基化的基因和酶仍未知。本研究发现，亚砷酸盐 S-腺苷甲硫氨酸甲基转移酶（ArsM）能够催化三价锑[Sb(III)]的甲基化。ArsM 通过逐步甲基化作用形成单甲基化、二甲基化和三甲基化的锑形态。Sb(III)易与谷胱甘肽结合，形成 ArsM 的优选底物，该底物锚定于三个保守的半胱氨酸残基上。在大肠杆菌 AW3110 中过表达 arsM 基因，可通过将细胞内 Sb(III)转化为气态甲基化物质而赋予其对 Sb(III)的抗性，这是一种解毒过程。在稻田土壤培养物中检测到甲基锑化合物，ArsM 的系统发育分析表明其在生态系统中具有高度的多样性，表明环境中三价锑甲基化的代谢潜力很高。本研究揭示了一个尚未发现的微生物过程，即水溶性的 Sb(III)被甲基化为气态，从而在区域乃至全球范围内迁移锑，使其成为重新出现的污染物。

关键字 锑；甲基化；分子动力学；甲基转移酶

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

典型城市化地表水环境中抗生素分布的人为因素驱动研究-以苏州为例

赵虎，宋弦静，郭峰*
国家地质实验测试中心

抗生素因其潜在的耐药性而成为一类典型的新兴污染物，引起了世界各国的广泛关注。水环境是抗生素迁移和传播的关键环境。开展水环境中抗生素的发生特征及风险评估，有利于水资源的预防、控制和管理，也有利于提高公共环境卫生管理水平，保护人类健康。本研究采用在线固相萃取-高效液相色谱-质谱联用自动分析方法，对苏州市长江、太湖地面水中抗生素的存在现状及生态风险进行了探讨。结果表明:抗生素平均浓度的空间分布趋势由城市人口集中区向郊区逐渐降低，城区可能受人类医源性及医药生产废水排放活动的影响而呈高值区，周围县市更多受农业活动的影响。生态风险评价结果显示，大部分地区为低风险区，少数地区为中、高风险区。本研究将为苏州市水资源管理提供基础数据支持。

关键字 抗生素；苏州；地表水；地理探测器

参考文献

1. Guo F, Wang Y,Peng J,et al. Occurence, Distribution, and Risk Assesment of Antibiotics in the Aquatic Environment of the Karst PlateauWetland of Yangtze River Basin, Southwestern China[1]. Intemational Journal of Environmental Research and Public Health, **2022**, *19(12)*:7211.
2. Wang J F, Zhang T L, Fu B J A measure of spatial stratified heterogeneity[J]. Ecological indicators, **2016**.*67*:250-256

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

$MoSe_2$ 的晶相调控及其去除水中有毒金属的研究

李诗宇,史建波,江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

环境水体中的有毒金属污染（如铅，汞等）是全球范围内长期存在的环境健康问题之一。例如，近年来美国多个地区数次发生自来水铅污染事件。由于人为管理不当或发生自然灾害，老化的含铅供水管道导致饮用水中的铅浓度升高至数十毫克每升，远超 US EPA 和 WHO 的安全限值。即使是低浓度铅和汞的慢性暴露，也会因其生物累积性而增加人体血铅/汞含量，对神经系统和大脑造成严重危害。

为了去除饮用水中的有毒金属（如 Pb(II)和 Hg(II)），特别是提供偏远地区的日常用水或应对紧急污染事件，吸附法因其灵活性、成本低和操作简单等优势，得到人们的广泛关注。二硒化钼（MoSe2）作为一种新兴二维过渡金属硫族材料，具有较高的比表面积和丰富的表面活性位点，是高效吸附 Pb(II)和 Hg(II)的潜在材料。然而，层间距不足、层间堆积等问题限制了 MoSe2 对重金属离子的吸附性能。克服上述问题，获得活性位点高度暴露的 MoSe2 材料以实现真实水环境中 Pb(II)的去除仍面临挑战。

本研究通过调节水热合成时还原剂 NaBH4 的用量，可控合成出不同形貌尺寸和晶相比例的少层 MoSe2 纳米片，用于多种实际水体中 Pb(II)的去除。研究发现，提高还原剂用量可有效减小纳米片尺寸，增加二维 MoSe2 的比表面积和边缘活性位点数量，同时提高金属 1T 相的比例。相比于商业块状 MoSe2 材料，制备的少层 MoSe2 纳米片对水中的 Pb(II)和 Hg(II)展现出更高的吸附容量和选择性，结合尺寸效应和晶相转化，可有效加快除铅的动力学过程。此外，开展多种表征分析发现，Pb(II)的去除机制主要包括 Pb-Se 表面络合和氧化还原反应形成 PbMoO4 沉淀。

关键字 MoSe2；结构调控；晶相；重金属去除；水处理

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：报告

潜流带中不同形态铁与抗生素间反应性共迁移机制

甘翠,丁晨,万向,徐思怡,吕紫悦,童蕾*
中国地质大学（武汉）

抗生素在环境中的残留已引起人们的广泛关注，河水潜流带是联结河流与地下水系统的重要界面，也是污染物富集、降解及转化的重要场所。潜流带中既富含针铁矿胶体也往往含有 Fe^{2+}，两者共存时对抗生素等污染物的作用机制并不清楚。因此，本研究通过室内柱实验模拟潜流带环境中不同形态铁与抗生素的共迁移行为。Fe^{2+}与抗生素共迁移的结果表明，Fe^{2+}对抗生素的迁移具有抑制作用，抑制强度为 OTC＞OFL＞SMX；Fe^{2+}可通过矿物包裹、吸附及络合转化等作用去除 OTC 及 OFL 而对 SMX 去除效果不显著。不同种类抗生素对 Fe^{2+}迁移的影响不同，低浓度 SMX 会抑制 Fe^{2+}迁移，但随着 SMX 浓度上升，抑制作用减弱；OTC 和 OFL 均能促进 Fe^{2+}迁移。选取 OTC 作为典型抗生素探究其与针铁矿胶体及 Fe^{2+}三者共存时迁移行为的结果显示，单物质迁移条件下，石英砂会通过静电引力作用吸附针铁矿胶体，抑制针铁矿胶体迁移；Fe2+快速氧化后形成的纤铁矿会加速 Fe^{2+}消耗，抑制 Fe^{2+}迁移。双物质迁移条件下，针铁矿胶体与 Fe^{2+}间的电子转移机制会促进 Fe^{2+}转化为 Fe^{3+}，并在模板定向成核生长的作用下生成新的针铁矿层，抑制 Fe^{2+}迁移。三者共迁移条件下，Fe-OTC 络合物会降低针铁矿胶体表面的 Zeta 电位，促进针铁矿胶体迁移；OTC 会削弱针铁矿胶体与 Fe^{2+}间的电子转移作用并通过 Fe 与 OTC 的络合机制主导 Fe^{2+}迁移。该研究结果，揭示了潜流带中不同形态铁与抗生素间反应性共迁移过程中物质的迁移转化规律，对水环境风险评估、深入认识交互过程物质循环与污染物转化机制具有重要意义。

关键字 潜流带；针铁矿胶体；亚铁；抗生素；共迁移

参考文献

1. S. Zhao, B. Zhang, C. Sun, L. Yang. L. Hot spots and hot moments of nitrogen removal from hyporheic and riparian zones: A review. *Sci. Total Environ.* **2021,** *762*, 144168.
2. C. Gan, Z. Luo, C. Su, L. Tong. Mechanism of reactive co-transport of Fe^{2+} and antibiotics in hyporheic zone simulated by quartz sand column. *J. Hydrol.* **2023,** *621*.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

水样中痕量汞的同位素组成分析

杨琳,江桂斌，史建波*
国科大杭州高等研究院
中国科学院生态环境研究中心

稳定汞同位素技术可为追踪汞的来源及环境过程提供指向性信息[1,2]，而环境水样中的汞浓度水平低，迫切需要灵敏可靠的同位素分析方法。目前水样的汞同位素测定通常需要预富集操作，而复杂的操作则可能引入干扰。

基于自动吹扫-金管捕集与多接收器电感耦合等离子体质谱（MC-ICP MS）在线联用，可实现水样中痕量汞快速、准确的同位素分析。本工作系统讨论并确定了系统气路参数及数据采集参数，获得了最佳的灵敏度（进样总量 1 ng Hg，^{202}Hg 最高信号 10 V）。结果表明线性回归法（LRS）可直接获得准确的同位素比值，无需数据筛选或时间差校正。在常规测试浓度下（40 ng L^{-1}），该系统与传统的冷蒸气法（CV-MC-ICP MS）具有水平相当的外精度而进样浓度从μg L^{-1} 降至 ng L^{-1} 级别，且在低浓度下（8 ng L^{-1}）也得到了准确结果（NIST SRM 3177，δ^{202}Hg -0.54 ± 0.25‰，Δ^{199}Hg -0.02 ± 0.20‰，Δ^{200}Hg 0.01 ± 0.17‰，Δ^{201}Hg -0.02 ± 0.16‰，2SD，N = 31）。该系统具有灵敏、准确、无需离线预富集、连接简便的优势，可为发展水样中痕量汞的同位素分析方法提供思路，并为拓展稳定汞同位素技术的应用场景提供技术支撑。

关键字 汞；同位素组成；水样

参考文献

1. Yu, B.; Yang, L.; Liu, H.; Xiao, C.; Bu, D.; Zhang, Q.; Fu, J.; Zhang, Q.; Cong, Z.; Liang, Y.; Hu, L.; Yin, Y.; Shi, J.; Jiang, G., *Environmental Science & Technology* **2022**, *56 (3)*, 1568-1577.
2. Yang, L.; Yu, B.; Han, D.; Zhang, K.; Liu, H.; Xiao, C.; Hu, L.; Yin, Y.; Shi, J.; Jiang, G., *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* **2023**, *53 (22)*, 1935-1956.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

地下水中砷污染的控制与去除：基于 MIL-101(Fe)不同官能团修饰的三价和五价砷吸附研究

柴嵩，闫莉，史建波
中国科学院生态环境研究中心

本研究系统评估了不同官能团修饰的 MIL-101(Fe)金属有机框架材料（MOFs）在去除地下水中三价砷（As(III)）和五价砷（As(V)）中的应用潜力。MIL-101(Fe)通过在邻位引入四种不同的官能团（羟基、氨基、硝基和甲基）进行修饰。通过等温吸附实验、pH 影响实验以及吸附动力学研究，分析了这些修饰 MOFs 对砷的吸附行为。材料的孔隙结构与比表面积通过 BET 表征，形态与结构通过 SEM 和 TEM 观察，结合 XPS 技术研究 MOFs 与砷的结合状态，并通过原位流动红外分析界面吸附过程中的化学变化。初步结果表明，MIL-101(Fe)对 As(V)的吸附能力显著优于 As(III)，其中硝基修饰的 MOF 表现出明显更快的吸附动力学，推测其吸附机制包括静电吸附与化学吸附的协同作用。吸附容量的变化主要由材料的比表面积决定，偏酸性条件下吸附量达到最大值。此外，官能团的引入对吸附等温线产生了显著影响，导致吸附行为发生变化，表明官能团对吸附性能的调控作用。本研究为 MIL-101(Fe) MOFs 在砷污染水体处理中的应用提供了关键理论依据与实验支持，展示了其作为高效吸附材料在水处理领域的潜力。

关键字 金属有机框架材料（MOFs）；砷污染；吸附动力学；官能团修饰；原位流动红外

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

二维 MOF 中低对称性配位对电催化硝酸盐还原的影响

陈衍澎，阎莉，郭蒙绮，史建波*
生态环境研究中心

硝酸盐电还原为氨是控制水中硝酸盐污染和解决能源问题的重要途径之一，但对氨选择性较差和法拉利效率较低是电催化硝酸盐还原一直面临的问题。通过改变金属原子的配位环境可能会提高催化剂的电催化性能和对氨选择性。二维有机金属框架由于其导电性以及平面型结构在电催化领域有着广泛的应用，在二维金属有机框架(MOFs)中，HHTP 和 HITP 是二维金属有机框架中的常用配体，其分别会形成 M-O_4 和 M-N_4 的配位结构。本研究通过一步合成得到了两种配体均匀分布的二维 MOFs 材料，除了常见的 M-O_4 和 M-N_4，还会出现 M-O_2N_2 这种对称性遭到一定破坏的配位结构出现，这种特殊的配位结构可能会提升电催化硝酸盐还原的性能。

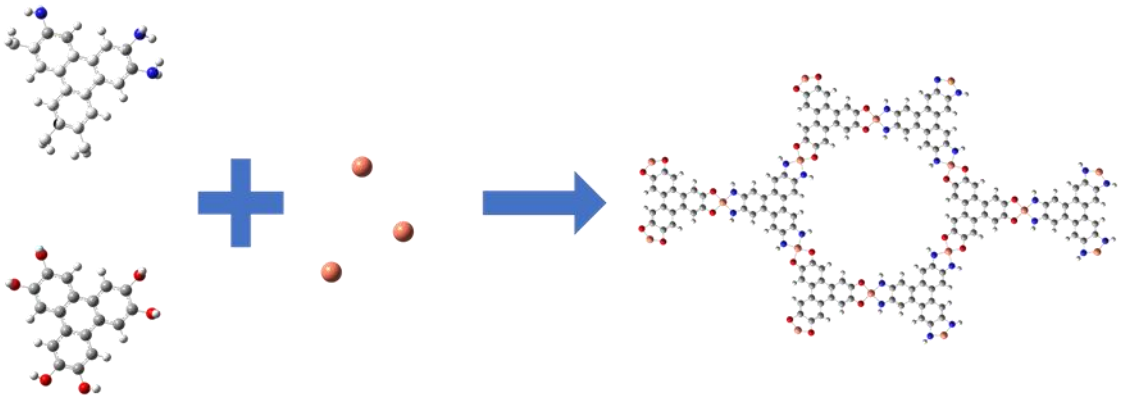


图 1

关键字 硝酸盐还原；配位环境；金属有机框架

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

HPLC 分离不同形态汞的同位素分析方法研究

张坤，江桂斌，史建波*
中国科学院生态环境研究中心

甲基汞是环境中最主要、分布最广的有机汞形态，具有强神经毒性。现有关于汞同位素的研究大多不区分形态，对环境样品中的总汞进行同位素分析。然而，很多环境样品表明甲基汞与无机汞端元的汞同位素组成并不相同，仅测定总汞同位素可能会忽略汞在环境和生物体内转化和累积过程的重要信息，进一步分析不同汞形态的同位素组成对于了解汞的来源和迁移转化十分必要。因此，建立不同汞形态的同位素分析方法是需要优先解决的关键问题。本文使用 HPLC 分离和收集不同馏分用于不同形态汞的同位素分析。使用 5‰ 2-ME 作为流动相的 HPLC 系统，在流速为 1.5 mL min^{-1} 的实验条件下，Hg(I)、MeHg 和 Hg(II)依次出峰，保留时间分别为 100~130 s，210~260 s 和 340~420 s。测定混合 MeHg 和 Hg(II)标液的线性曲线，表明该实验条件下可实现不同汞形态的有效分离和定量分析。然后在 MeHg 和 Hg(II)各自的保留时间收集馏分，并使用王水消解可将所有汞形态氧化为 Hg(II)，同时消除流动相（2-ME）对后续 Hg(II)还原反应可能产生的影响，消解后的 MeHg 和 Hg(II)馏分可直接用于汞同位素的测定。我们用两种标准溶液 NIST 3133 和 GBW 08675 去验证这一方法，使用吹扫捕集-原子荧光检测器对消解后的溶液回收率进行测定的结果为 98~105%，同位素分析结果也比较准确。相比于传统的液液萃取，该方法对不同形态汞的分离效果更好，但对环境样品浓度要求更高。目前针对不同汞形态同位素分析方法的研究还较为有限，如何进行汞形态的有效分离同时实现准确和精确的汞同位素比值测定仍然是需要解决的技术难题。

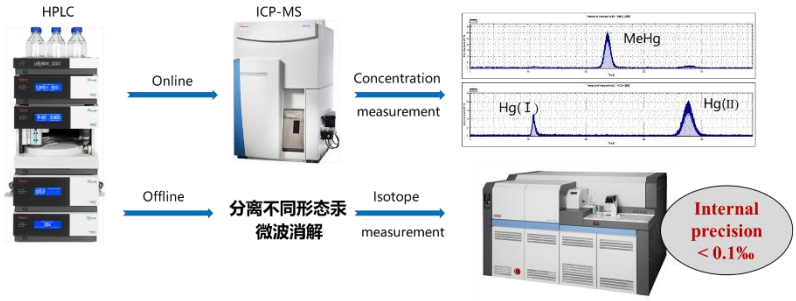


图 1. 离线 HPLC 分离汞形态的同位素分析方法示意图

表 1. 两种标准溶液的同位素分析测定结果

CRM	N	$\delta^{202}Hg$	$\Delta^{199}Hg$	$\Delta^{200}Hg$	$\Delta^{201}Hg$
GBW 08675	3	-0.80±0.06	0.04±0.02	0.02±0.01	0.08±0.03
NIST 3133	3	0.02±0.06	-0.01±0.04	-0.00±0.02	0.05±0.02

关键字 汞；汞形态；HPLC；汞同位素

参考文献

1. Wang Y, Liu G, Li Y, et al, Environmental Science & Technology Letters., **2020c**, *7*: 482-488.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

污泥陶粒在城市黑臭水体生态修复中的应用研究

余婷，陈冯杰，曹梦西，梁勇，史建波*
中国地质大学（武汉）
江汉大学

城市黑臭水体的生态修复对我国水环境健康具有重要意义。恢复水生植物群落尤其是沉水植物被广泛认为是水生态修复的有效途径。其中沉水植物种植面临着成本高、成活率低和扩繁困难的问题，而城市硬化沟渠也由于硬化的底质几乎无法种植沉水植物，这些问题都造成了城市黑臭水体生态修复收效甚微。因此，改良黑臭水体底质以提高沉水植物成活率，是实现水体生态功能恢复的关键问题。此外，微生物在黑臭水体原位生态修复中也发挥重要作用。基于此，本研究针对城市黑臭水体问题，深入研究污泥陶粒作为沉水植物固着基质和微生物定殖栖息地对城市黑臭水体的生态修复效果，初步探讨了其修复机理。

通过实验室和污水处理厂曝气池的微生物定殖实验结果表明，污泥陶粒可以用于微生物的定殖，其中活性污泥、污泥陶粒外层、内层的 Chao 1 指数分别为 961.03、1054.00、1826.00，Shannon 指数分别为 8.37、8.84、9.92，表明污泥陶粒的多孔结构显著提升了内部定殖微生物的丰富度和多样性，特别是内层微环境对微生物多样性的增益作用较外层显著。污泥陶粒外层更适宜于好氧微生物的生长，内部则更适合兼性厌氧微生物的定殖。定殖了功能微生物的污泥陶粒显示出氮转化活性。利用污泥陶粒种植沉水植物投入城市黑臭水体后，沉水植物存活率提高，且长势良好。水质从劣 V 类提升至近 III 类。与污水处理厂微生物定殖结果类似，污泥陶粒自身内、外层的微环境差异可以有效调控微生物群落分布，而沉水植物可能通过化感作用促进微生物群落的定向演替。

污泥陶粒定殖功能微生物和种植沉水植物的策略有利于水体生物多样性的恢复和溶解氧的提升，通过“下行效应”有效抑制水体富营养化—藻华—黑臭水体的演化过程，最终实现城市黑臭水体的原位生态修复。

关键字 城市黑臭水体；水生态修复；污泥陶粒；微生物定殖；沉水植物种植

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

对苯二胺醌类新污染物在水体中的赋存和降解机制研究

黄芷悦，曹国栋，史建波*
中国地质大学武汉

对苯二胺类（PPDs）抗氧化剂作为一类人工合成的橡胶添加剂，被广泛地用于轮胎、皮带、管道和鞋底等多种橡胶制品的生产中。随着橡胶制品的使用、磨损及老化，大量的PPDs 类物质被逐渐释放到环境当中，并分布在不同的区域和环境介质中。2021 年，Science 的一项研究表明，PPDs 类物质中的 6PPD 可经臭氧氧化产生一种醌类转化产物，即 6PPD-醌。该物质被发现普遍存在于美国洛杉矶、西雅图等地的地表径流水体中，可以极低的环境浓度造成美国西海岸溯游产卵银鲑鱼的大量死亡。这一现象被称为“城市径流死亡综合征”。随后我们的研究表明，除了 6PPD，其他种类的 PPDs 类物质也可以经过类似的反应，生成对应的醌类污染物，并成功地在我国香港地区的城市径流、道路雨水、市政污水和污水处理厂的不同单元中检测到该类新型环境污染物。定量分析显示，该醌类物质在上述不同城市水体中的浓度数十倍高于其母体化合物。为了探究该现象，我们开展了 PPDs-醌类污染物在水体中衰变行为及降解机制研究。研究发现，PPDs 抗氧化剂在水体中的半衰期在 4.11-45.3 小时之间（均值为 18.5 小时），而 PPDs-醌类物质的半衰期则在 83.4-632 小时之间（均值为 194 小时）。上述发现揭示了 PPDs-醌类物质在水体中与其母体化合物含量存在巨大差异的内在因素。随后，我们采用高分辨质谱和三重四级杆质谱联用技术，在水体样品中鉴定到了多种 PPDs-醌类物质的羟基化降解产物，包括一羟基和二羟基产物。上述发现为该类新型环境污染物的环境赋存和降解提供新视角。

关键字 新型环境污染物；对苯二胺醌；城市径流；衰变周期；降解机制

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

基于机器学习的区域重金属场地风险评价方法研究

才让什加，史建波，杜晶晶*
中国科学院生态环境研究中心

当前我国土壤重金属污染状况总体稳定，但区域尺度重金属污染具有隐蔽性、滞后性、累积性。做到土壤重金属污染风险识别、评估与预测是土壤重金属污染精准施控与科学管理的重要环节。本研究选取广东韶关曲江地区（有色金属采选冶炼区）为研究地点，旨在揭示该区域土壤、水体重金属变化规律与污染风险的内在关系。通过电感耦合等离子体质谱仪（ICP-MS）等技术，获取区域土壤重金属元素在各介质中的含量、形态分布特征，如图 1 所示；采集区域环境基础数据（环境基础数据、土壤类型、社会发展及经济状况、土地利用数据等），识别关键风险因子，构建区域土壤重金属数据库；基于区域土壤重金属实际暴露场景进行敏感生物的重金属复合暴露实验，获取污染风险评价参数，定量表征区域土壤重金属污染风险。研究结果将有利于提升我国区域土壤重金属污染风险管理水平，为土壤及水体环境质量改善和生态系统良性循环提供支撑。

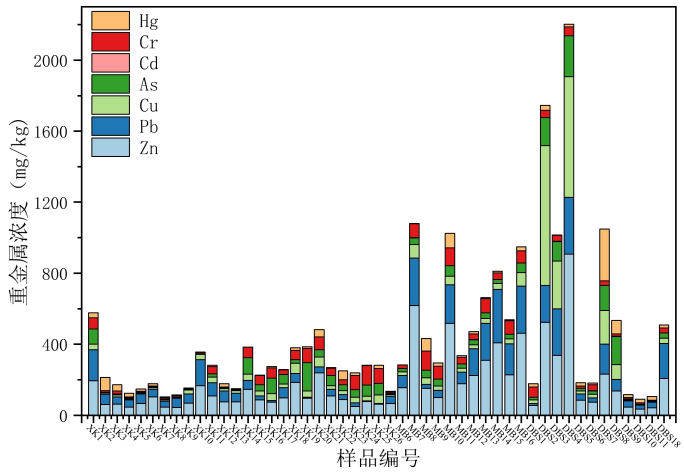


图1. 广东韶关曲江区域土壤金属浓度

关键字 土壤；重金属污染；场地风险；机器学习

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

原位可视化定量追踪浮游动物体内纳米塑料及其风险评估

王裕淮，颜能，史建波*
中国地质大学（武汉）

塑料经过风化、阳光辐射和生物降解等过程，会产生大量的微塑料 （1 μm-5 mm）和纳米塑料（1-1000 nm）。纳米塑料因其更小的尺寸和胶体特性，在水环境中的传播更加广泛，且更易穿透生物屏障，带来更严重的生态风险。近年来，研究通过生物成像技术检测到生物体内的纳米塑料，并监测了纳米塑料的摄入及分布。然而，由于缺乏在复杂生物基质中表征和定量纳米塑料的方法，如何实现生物体内纳米塑料的原位定量追踪仍是一大难题。

基于此，本研究合成了掺杂金属内标及聚集诱导发光荧光材料的纳米塑料，结合生物成像技术及电感耦合等离子质谱的定量检测技术，以大型溞（*Daphnia magna*）为模型，原位可视化定量追踪其对纳米塑料的摄入动力学，揭示纳米塑料对大型溞的毒性效应及机制，并评估了水环境中纳米塑料的生态风险。首先，本研究通过合成金属标记的特异性纳米塑料，定量测量了大型溞对于不同粒径的纳米塑料的生物积累量。结果显示，大型溞对于小粒径的纳米塑料的积累量较高。生物成像结果表明，小粒径的纳米塑料在大型溞的肠道、鳃及甲壳中均有分布，而大粒径的纳米塑料主要积累在肠道中。通过建立生物体内纳米塑料与生物积累量的相关性，实现了对大型溞体内纳米塑料的原位定量追踪。此外，结合定量分析及毒性结果，建立了毒代动力学/毒效动力学（TKTD）模型。结果表明，大型溞对于小粒径的纳米塑料的摄入速率更高、净化速率更慢，且对于小粒径的纳米塑料更为敏感。通过模型预测了不同暴露时间下纳米塑料的半致死浓度（LC50）以及无效应浓度（NEC），为纳米塑料的毒性预测和风险评估提供了依据。

综上所述，本研究提出了一种新型金属标记的聚集诱导发光纳米塑料的合成方法，揭示了纳米塑料的毒性机制及生态风险，对于纳米塑料的定量研究及风险管理具有重要意义。

关键字 纳米塑料；生物成像；定量；TKTD 模型；风险评估

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

静电纺丝制备BPTC/PVDF共混基质膜去除水体重金属离子

南康康，杜晶晶，史建波*
国科大杭州高等研究院

随着煤炭开采规模扩大，矿井水排放成为影响生态和水资源安全的重大问题，尤其是高矿化度和重金属离子污染的处理面临挑战。现有技术存在处理效果不佳和二次污染的风险。本研究结合静电纺丝技术与传统共混基质膜技术，利用联苯四羧酸（BPTC）与聚偏氟乙烯（PVDF）共混，通过静电纺丝技术制备新型膜材料。BPTC 相近的四个羧基能与金属离子通过螯合作用结合，增强膜对重金属的吸附能力。通过将不同比例（1%、2%、3%、4%）的 BPTC 与 14%的 PVDF 共混制膜。BPTC 不仅可提高膜的吸附性能，还显著改善了其亲水性和孔隙率。PVDF/BPTC 膜在多次吸附-解吸循环中表现出高去除率和良好再生性能，同时对牛血清白蛋白有排斥反应，具备规模化废水处理潜力。

关键字 矿井水；重金属离子；联苯四羧酸；聚偏氟乙烯；静电纺丝

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

特异性吸附水环境中全氟替代物的分子印迹聚合物研究

武嘉龙，史建波*
中国地质大学（武汉）

随着人们对全氟及多氟烷基化合物（PFAS）环境和健康影响的关注增加，许多国家和地区已逐步限制或禁止使用某些全氟化合物，导致全氟替代物的使用日益增多。这些替代物虽然在某些应用中表现出更低的生物累积性和毒性，但它们在环境中的持久性和潜在危害仍不容忽视。全氟替代物进入水环境后，传统的水处理技术难以有效去除，这为水生态系统带来了新的挑战。因此，开发针对这些替代物的高效去除技术显得尤为重要。

分子印迹聚合物（MIPs）作为一种具有高度选择性和稳定性的吸附材料，近年来在环境修复领域引起了广泛关注。MIPs 通过在聚合物基质中引入特定的分子识别位点，使其能够对目标分子表现出优异的识别和吸附性能。基于此，本研究旨在设计合成一种对全氟替代物具有特异性吸附能力的 MIP，以解决水环境中这些污染物的去除问题。

在本研究中，我们首先选择目标污染物为典型的全氟替代物：六氟环氧丙烷二聚酸（GenX）作为模板分子，然后选择合适的功能单体、交联剂及引发剂等。通过构建非共价键法合成了 MIP，并通过红外光谱（FTIR）等手段对其结构进行了表征。在吸附性能测试中，评估 MIP 在不同 pH、离子强度和温度条件下对目标全氟替代物的吸附能力。为了进一步理解 MIP 的吸附机制，我们进行了吸附动力学和等温线研究，也支持了其高选择性的特性。

综上所述，本研究成功开发了一种针对全氟替代物 GenX 的 MIP 材料，具备高选择性和吸附能力，能够在复杂水环境中有效去除这些污染物。该研究不仅为解决水环境中全氟替代物的去除提供了一种新的思路和方法，也为未来开发针对其他新兴污染物的高效吸附材料奠定了基础。随着进一步研究和优化，这种 MIP 材料有望在环境修复和水处理领域发挥重要作用，为实现水生态系统的可持续发展贡献力量。

关键字 全氟化合物；全氟化合物替代物；GenX；MIP 分子印迹聚合物

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

杭州亚运会前后黑碳颗粒物特征和来源

林健，史建波*
中国地质大学

黑碳（BC）是一种重要的环境细颗粒物，严重影响空气质量、人类健康和区域气候。本研究基于黑碳仪监测第十九届亚运会前后杭州地区的 BC 浓度，分析管控前、管控期和管控后 BC 浓度变化的特征，并通过 Aethalometer 模型和后向轨迹模型解析 BC 的时空分布及其潜在来源。结果表明，在减排措施的影响下，管控期间 BC 浓度下降至 1.40±0.87μg/m³，相较于管控前、后分别下降 10%和 71%。与 2016 年杭州 G20 峰会期间和 2020 年杭州疫情封控期间 BC 浓度呈现相似的变化特征。管控期间 BC 的日变化并未呈现出与管控前后相类似的双峰值特征，而是受到气象变化影响，在均值附近微幅波动。Aethalometer 模型的源解析结果显示，机动车排放在亚运会前后 BC 污染中占据主导地位（75.2%±8.6%）。管控期间，车辆减排导致 BC 浓度下降，而管控后城市周边农村地区生物质燃烧的 BC 贡献增加。后向轨迹聚类分析结果表明，亚运会期间长三角城市群和杭州本地排放是杭州地区 BC 主要贡献来源，同时受到海洋及朝鲜半岛的跨境运输影响。亚运会后，部分来自京津冀和中原地区的 BC 也传输至杭州。

亚运会期间杭州地区 BC 浓度较亚运会前后均有所降低，但 BC 的主要来源区域和传输模式未发生显著变化，揭示了亚运会期间杭州市 BC 对本地和周边区域管控措施的积极响应，为 BC 的区域精准防控提供依据。

关键字 杭州亚运会；黑碳；来源解析；区域传输

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

吴起北洛河流域地下水重金属浓度分布与健康风险评价

丁晨，甘翠，万向，史建波*
中国地质大学（武汉）

北洛河是延安市重要的水源和水质保障[1-2]，为研究其上游吴起县境内的水质状况，开展了重金属分布特征分析和健康风险评价。对北洛河流域内的主要干流和支流进行采样，利用电感耦合等离子体质谱法对 38 份地下水中的 7 种元素 Mn、Co、Ni、Cu、Zn、As 和 Ba 进行检测。采用单因子污染指数评价法和美国国家环境保护局（US EPA）提供的健康风险评价模型，分析了重金属的污染状况和健康风险[3]。研究结果表明，7 种重金属平均浓度为：Ba（38.63 μg·L^{-1}）>Zn（9.83 μg·L^{-1}>As（6.37 μg·L^{-1}）>Mn（5.18 μg·L^{-1}）>Cu（0.60 μg·L^{-1}）>Ni（0.26 μg·L^{-1}）>Co（0.08 μg·L^{-1}）。单因子污染指数显示，地下水中 As 属于中毒污染，其余 6 种金属总体上不存在污染风险。健康风险评价结果显示，儿童经饮用水途径受到的重金属危害要大于成人；致癌重金属 As 的健康风险值高于瑞典环境保护局推荐的最高风险临界值 1.0×10-6 a^{-1}，非致癌重金属 Mn、Co、Ni、Cu、Zn、Ba 的成人、儿童年平均个人健康风险数量级在 10^{-12}-10^{-9}，均远小于国际放射防护委员会（ICRP）和 US EPA 所规定的最大风险临界值[4]。

关键字 地下水；重金属;分布特征；健康风险评价

参考文献

1. 田起隆，许小明，吕渡等.北洛河流域植物多样性地理格局与环境关系[J].中国环境科学，**2021**，*41*(09)：4378-4387.
2. 康媛.陕北北洛河上游石油勘探开发的环境问题及信息系统建设[D].西北大学，**2008**.
3. 黄奕龙，王仰麟，谭启宇，等.城市饮用水源地水环境健康风险评价及风险管理[J].地学前缘，**2006**，*13*(3)：162-167.
4. 黄宏伟，肖河，王敦球，等.漓江流域水体中重金属污染特征及健康风险评价[J].环境科学，**2021**，*42*(4)：1714-1723.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

粤西沿海中低温地热水的水化学特征分析

于茂君，江桂斌，史建波*
中国科学院生态环境研究中心

粤西沿海地区中低温地热资源储量巨大，分布广泛，该地区中低温地热水具有高盐度高矿化度的特征，受海水混染的作用程度较明显，研究其形成原因对于高矿化度地热水的开发利用具有重要意义。本研究以广东省西部沿海中低温地热系统为研究区，开展中低温地热水水化学组分调查，分析其来源途径和循环演化过程。首先收集整理了研究区的基础地质资料，在此基础上系统性地采集了地热水样品，测试地热水样中的常量组分、微量组分、氢氧同位素和碳同位素特征。

通过分析研究区地热水的水化特征、水岩相互作用程度及矿物饱和指数发现，该地区的地热水具有分带性，从内陆到沿海地区，水化学类型由重碳酸盐型变为氯化物型。除 HCO^{3-} 外，地热水中的 Cl^- 与 Na^+、Mg^{2+}、Ca^{2+}、K^+、SO_4^{2-} 之间的相关性较为显著，说明这些离子有着共同的来源途径。而氢氧同位素特征表明大气降水是该地区地热水的主要来源。[1] 水岩相互作用增大了地热水中 F、Li 和 Sr 的含量，但 Na-K-Mg 三角图（图 1）表明大部分地热水未达到水岩平衡状态，[2] 可能是由地热水在上升的过程中与浅层地下冷水混合所致。利用 14C 测年法测得研究区地热水形成于晚更新世-全新世时期。K^+/Cl^-、Ca^{2+}/Cl^- 和 Na^+/Cl^- 等离子比值证明研究区地热水受到了海水混染的影响，[3] 结合研究区海平面的历史变化特征及水化学演化相图（图 2），推测在 6.5~4.4 ka B·P 期间，该地区地热系统的海水入侵程度达到最大，此后内陆地区的地热水逐渐淡化，沿海地区的地热水仍处在海水入侵的影响之下。

综上，本研究提出粤西沿海地区地热水的形成演化概念模式：古大气降水下渗至地表深处，经循环加热后，被古海水侵入混合，盐度升高，在上升运移至地表的过程中，部分地热水与地下冷水发生二次混合，使其温度和盐度有所下降。

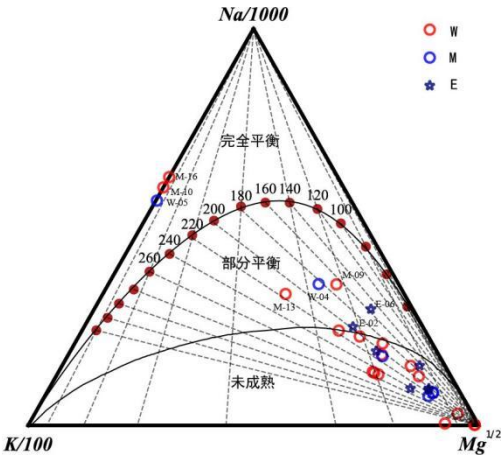


图 1. 研究区地热水水样 Na-K-Mg 三角图

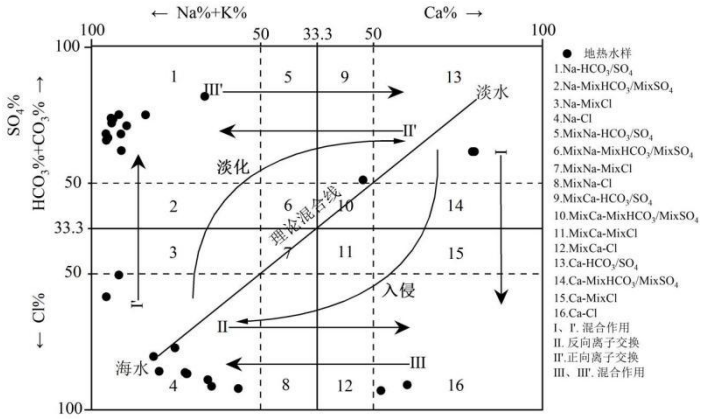


图 2. 研究区地热水水样水化学演化相图

关键字 地热水；水化特征；水岩相互作用；海水混染

参考文献

1. Ndikubwimana, I.; Mao, X. M.; Zhu, D. B.; He, Y. Y.; Shi, Z. D. Geothermal evolution of deep parent fluid in Western Guangdong, China: evidence from water chemistry, stable isotopes and geothermometry. *Hydrogeology Journal* **2020**, *28* (8), 2947-2961.

2. Giggenbach, W. F. Geothermal solute equilibria - derivation of Na-K-Mg-Ca geoindicators. *Geochim. Cosmochim. Acta* **1988**, *52* (12), 2749-2765.

3. Mao, X. M.; Zhu, D. B.; Ndikubwimana, I.; He, Y. Y.; Shi, Z. D. The mechanism of high-salinity thermal groundwater in Xinzhou geothermal field, South China: Insight from water chemistry and stable isotopes. *Journal of Hydrology* **2021**, *593*.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

LC-ICP-MS 同时测定湖泊水体和沉积物中多种磷

徐思怡，甘翠，万向，吕紫悦，童蕾*
中国地质大学（武汉）

磷是影响淡水生态系统富营养化的重要因素。有关湖泊环境磷含量的综合分析方法的缺乏限制了我们对其环境分布和结构的认识。基于以往的湖泊系统磷形态分析和磷的生物可利用性的研究成果，本研究建立了液相色谱-电感耦合等离子体质谱（LC-ICP-MS）的分析方法，同时测定总磷（TP）和 15 种特定磷，包含 3 种无机磷（IP）和 12 种有机磷（OP）。该方法根据 P 的保留时间来区分其疏水性和质子化特性，将其分为三组（疏水 P、亲水去质子化 P 和亲水质子化 P），对每个组实施量化措施，优化了沉积物中磷的提取条件，实现了湖泊水体和沉积物样品中磷形态的评价。对 ICP-MS 参数进行分组分析测试，以达到仪器的最佳分析性能。优化检测性能和提取技术，实现了湖水和沉积物样品的高灵敏度分析。沉积物中 P 的检出限和定量限为 30.4 ~ 246.0 μ P kg^{-1} 和 101.4 ~ 820.0 μ P kg^{-1}，水中 P 的检出限和定量限为 3.04 ~ 24.60 μP kg^{-1} 和 10.14 ~ 82.00 μ P L^{-1}。沉积物中 16 种目标化合物中有 10 种的回收率在 57.72% ~ 128.73%的可接受范围内，水样中 16 种目标化合物中有 14 种回收率为 73.2% ~ 121.6%。两种基质中所有目标化合物的日间相对标准偏差（RSD）均低于 15%。沉积物中所有目标化合物和水中除两种化合物（β-NADP 和 IHP6）外的其余目标化合物的基质效应极小（|ME| < 20%），证明了 LC-ICP-MS 对基质干扰的稳健性。

关键字 有机磷；LC-ICP-MS；湖泊沉积物

参考文献

1. Feng W, Wang T, Zhu Y, et al. Chemical composition, sources, and ecological effect of organic phosphorus in water ecosystems: a review [J]. Carbon Research, **2023**, *2*(1): 12.
2. Li X, Guo M, Wang Y, et al. Molecular insight into the release of phosphate from dissolved organic phosphorus photo-mineralization in shallow lakes based on FT-ICR MS analysis [J]. Water Research, **2022**, *222*(118859).
3. Carroll J J, Sprigg C, Chilvers G, et al. LC-ICP-MS analysis of inositol phosphate isomers in soil offers
improved sensitivity and fine-scale mapping of inositol phosphate distribution [J]. Methods in Ecology and
Evolution, **2024**, *15*(3): 530-43.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

蓝莓中花青素质谱成像技术方法研究

宋弦静，赵虎，郭峰*
国家地质实验测试中心

花青素作为一种天然且健康的营养成分，因其显著的抗氧化和自由基清除功能而备受关注，展现出潜在的临床应用前景。对花青素的研究不仅有助于深化对营养学的理解，还能通过探究其在人体内的代谢途径及生物利用度，揭示人体对营养素的吸收与利用规律，从而更好地满足公众对健康生活的追求。本研究采用解吸电喷雾电离质谱成像（DESI-MSI）技术，建立一种能够原位快速测定蓝莓中典型花青素分布的可视化分析方法。在正离子模式下，使用 95%（V/V）甲醇+0.2%甲酸+0.2μg/mL 亮氨酸脑啡肽作为喷雾溶剂时，花青素的电离程度和信号强度最高，能够全面检测蓝莓中的花青素成分。研究结果显示，蓝莓中的花青素主要集中于果皮部分，其中锦葵素类及其糖苷化合物含量尤为丰富。其原因是锦葵素类糖苷化合物的糖基化作用和酰基化作用较强，大大提高了花色苷的稳定性。本研究成功检测到 16 种花青素及其糖苷类物质，验证了所建立方法的可行性。值得注意的是，该方法无需复杂的样品前处理，冷冻切片后即可直接进行检测，操作简便快捷，为探究蓝莓中花青素的空间分布提供了一种高效的可视化分析手段，具有重要的学术价值和应用前景。

关键字 解吸电喷雾电离质谱成像；蓝莓；花青素

参考文献

1. Okan O T , Denz L, Yayli N ,et al. Notulae Botanicae Horti Agrobotanici Cluj-Napoca, **2018**, *46*(2):615.
2. Correa-Betanzo J, Allen-Vercoe E, Mcdonald J, et al. Food Chemistry, **2014**, *165*(dec.15):522-531.
3. 李云,赵昶灵,杨晓娜,等.花色苷分子结构与其稳定性以及呈色关系的研究进展[J].云南农业大学学报:自然科学版, **2010**.

分会场：25.地下水质与健康
交流类型：墙报

基于 OnlineSPE-LC-MS/MS 技术探究华北平原典型灌区地下水中抗生素的赋存特征和生态风险

付金洋，余岳，史建波*
中国地质大学（武汉）

本研究对地下水中抗生素测定的前处理过程进行优化，建立了一种在线固相萃取-液相色谱-三重四极杆质谱同时测定地下水中 28 种抗生素的方法。采用安捷伦 Bond Elut 在线固相萃取小柱 PLRP-S 柱代替常规的 HLB 柱富集地下水中的抗生素，并直接通过流动相反冲至液相色谱完成色谱柱分离以及质谱检测。28 种抗生素标准曲线相关系数 R^2均大于 0.995，检出限在 0.01~2.02ng/L 之间，加标回收率在 72.9%~117.7%之间。与传统前处理方法相比，在线固相萃取法所需样品量少，在线固相萃取柱可重复使用，有机试剂消耗少，前处理过程被大大简化、自动化程度高，具有高通量、高灵敏度、高准确度的优点，在环境水体中的实际应用价值较高。采用此方法对华北平原人民胜利渠灌区及周边地区地下水进行抽样调查，共检出 17 种抗生素，总浓度范围在 nd~168.45ng/L 之间。其中氟喹诺酮类抗生素在研究区中检出浓度最高。同时对抗生素的生态风险进行评估，发现部分氟喹诺酮类抗生素风险熵值较高，可能对地下水生态系统造成潜在风险。

关键字 抗生素；地下水；在线固相萃取；生态风险

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

辐射剂量和关键核素可视化探测研究

林健*，崔云怡，白尧尧，杨钧朴，马景奇
西安交通大学

为应对我国能源需求和“双碳政策”的双重压力，核能作为低碳能源在我国的能源格局中占比逐步上升。然而，随着核能的快速发展，核反应堆安全及核废物处理处置问题日益突出，长寿命放射性核素一旦泄漏，将对环境造成长期污染，严重威胁公共健康和安全。因此，提升核辐射和放射性核素的高灵敏检测能力是提高核应急能力和保障核安全的关键科学问题。本研究探讨了辐射剂量探测和关键放射性核素检测的新方法：（1）率先提出基于红绿蓝三原色的新型核辐射探测机制，通过辐致变色或辐致荧光变色，实现了辐射剂量实时、低成本探测。（2）开发新型荧光晶态多孔材料，基于荧光变色，实现了放射性核素的可视化、特异性检测。

关键字 放射性核素，检测，辐射探测，剂量，可视化

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

基于 ICP-MS/MS 测量的微量环境样品中 Pu 同位素分析及其示踪应用

徐仪红*[1]，李晨[1]，余海萍[1]，李晓菲[1]，邢闪[2,3]，侯小琳[3,4]
1. 安徽师范大学
2. 中国辐射防护研究院
3. 兰州大学核科学与技术学院
4. Technical University of Denmark, Department of Environmental Engineering

放射性核素 ^{239}Pu ($T_{1/2}$ = 24100 y)， ^{240}Pu ($T_{1/2}$ = 6561 y) 和 ^{241}Pu ($T_{1/2}$ =14.4 y) 由于其强的辐射和生物毒性在放射生态领域和核安全评估中备受关注，同时也由于其长的半衰期和强的颗粒亲和性在环境过程示踪研究中被广泛应用。 由于环境样品中 Pu 同位素一般是超痕量水平，使得小样品量样品中 Pu 同位素的精准测量一直极具挑战，而这对于 Pu 同位素在环境过程示踪研究中的应用却又非常重要。近年来，随着电感耦合等离子体串联质谱（ICP-MS/MS）技术的发展，由于 ICP-MS/MS 的碰撞反应池在 NH_3-He 模式下在保证显著的 Pu 信号测量灵敏度的同时还拥有非常高的 U 干扰去除效率，为实现小样品量样品中超痕量 ^{239}Pu， ^{240}Pu 和 ^{241}Pu 的同步超灵敏测量提供了可能[1-3]。 本研究在探究 ICP-MS/MS 在 NH_3-He 模式下高效去 U 和保持高 Pu 测量灵敏度机理的基础上，建立了一套适用于小样品量环境样品中 Pu 同位素精准分析测量的方法，并将该方法应用于 Pu 同位素环境过程示踪研究中。研究表明，在 NH_3-He 模式下，当以分别 0.4 mL/min 和速度通入 NH_3 作为反应气体时， U 和 UH^+干扰物主要生成 $U(NH_m)_n^+$ and $UH(NH_m)_n^+$，U 的干扰降低至<2.4×10-7，同时由于 He 离子聚焦作用，Pu 的信号灵敏度可保持在 13900 Mcps/(mg/L)。在此基础上，应用 AG1-×4 单柱分离提纯方法即可实现 1~2g 样品量环境样品中 Pu 同位素的精准测量 ^{239}Pu，^{240}Pu 和 ^{241}Pu 的方法探测限分别可低至 0.16 fg (0.4 μBq) 、0.046 fg (0.4 μBq) 和 0.039 fg (0.15 mBq)。进一步将该分析方法应用于分析超低水平环境样品（长江中下游吞吐型浅水湖泊沉积物）中 Pu 同位素分析，发现 Pu 分析结果可成功应用于沉积物现代计年研究中，表明所建立分析方法可靠有效。

关键字 Pu 同位素，ICP-MS/MS 测量，NH_3-He 模式，单一阴离子树脂柱分离，环境示踪

参考文献

1. S. Xing, W. Zhang, J. Qiao, X Hou. Detemination of ultra-low level plutonium isotopes (^{239}Pu, ^{240}Pu) in environmental samples with high uranium. Talanta. 2018, 187, 357-364.
2. W. Bu, M. Gu, X. Ding, Y. Ni, X. Shao, X. Liu, C. Yang, S. Hu. Exploring the ability of triple quadrupole
inductively coupled plasma mass spectrometry for the determination of Pu isotopes in environmental samples. J. Anal. At. Spectrom. 2021, DOI: 10.1039/D1JA00288K.
3. Y. Xu, C. Li, H. Yu, F Fang, X Hou, C. Zhang, X. Li, S. Xing. Rapid determination of plutonium isotopes
in small samples using single anion exchange separation and ICP-MS/MS measurement in NH3-He mode for sediment dating. Talanta. 2022, 240, 123152.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

南海和印度洋海域中 ^{237}Np 和 $^{239+240}Pu$ 的迁移特征

管永精*[1]，赖剑辉[1,2]，韦小敏[1,2],，王深圳[1]，王淑毅[1]，王凌一[1]，刘志勇[2]
1. 广西大学
2. 苏州大学

采用电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）对南海和印度洋沉积物中 ^{237}Np 与 $^{239+240}Pu$ 的含量进行了分析，并测定了对应沉积物中 $^{237}Np/^{239}Pu$ 及 $^{240}Pu/^{239}Pu$ 原子比。这些结果为研究从太平洋试验场到两大洋的运输途径提供了重要线索。本研究综合报道了南海沉积物中 ^{237}Np 活度分布及其 $^{237}Np/^{239}Pu$ 原子比，为评估海洋环境中 Np 的迁移与去除机制奠定了基础。在南海沉积物岩芯中，^{237}Np 和 $^{239+240}Pu$ 的储存量分别为 0.507 ~ 8.276 μBq/cm²和 0.444 ~ 4.393 μBq/cm²。随着水深增加，从浅海到深海，浓度呈现下降趋势。对沉积物岩芯中 $^{237}Np/^{239}Pu$ 及 $^{240}Pu/^{239}Pu$ 原子比的分析表明，Np 的迁移速率要高于 Pu，这主要是由于这两种元素具有不同的物理化学性质所导致。同时，我们还采用 S-ADE 模型模拟了海水中 Np 与 Pu 的浓度分布趋势。从表层开始，Np 的浓度随深度呈指数下降，而 Pu 浓度则表现出单峰分布，在约 500m 处达到峰值，导致这一差异的原因可能归因于它们在溶解度以及沉积物颗粒吸附去除特性上的不同。

关键字 ^{237}Np, $^{239+240}Pu$，传输路径，迁移机制，S-ADE 模型

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

超痕量放射性核素的分离与质谱分析技术研究

邢闪*，彭晨阳、苏寅，张峰，杜心雨，史克亮，侯小琳
兰州大学

20 世纪 50 年代以来，核武器的开发带动着我国核相关产业的大力发展。围绕核燃料循环、核材料生产以及核能工业的需求，我国先后建成了一系列大型核设施，这些核设施运行和退役过程中产生的中长寿命的难测放射性核素（尤其是一些易迁移、高毒性的纯α和β核素）一旦进入环境或人体内可能会带来长时间危害，如超铀核素和 ^{129}I 由于其半衰期长、高辐射和生物毒性等特点是职业人员内照剂量监测和环境放射性安全评估与监测中重点关注的核素。此外，长寿命放射性核素由于其来源时空特性，可作为独特的示踪核素应用于环境变化等研究。

在长寿命放射性核素的分析中，高灵敏质谱分析技术（包括加速器质谱 AMS、电感耦合等离子体质谱 ICP-MS 等）与传统的核衰变计数方法相比具有原子检测限低、同位素丰度灵敏度高、样品用量少及测量时间短等优势，近年来获得了广泛应用。本工作利用现代放化分离技术和高灵敏质谱测量技术建立了不同介质中的锕系核素及 ^{129}I 的分析方法。1）针对环境土壤样品中极低的钚浓度（<10-11 g/g），利用 ICP-MS/MS 的碰撞/反应池和串联质谱在氨氢模式下高效去除了 ^{238}U 对 ^{239}Pu 和 ^{240}Pu 精确测量的干扰，其探测限已达到亚 fg 量级；2）基于小型加速器质谱建立了一种分析模拟核材料中超铀核素的超灵敏分析方法，超铀核素的最低已达到 ag 量级；3）利用 ICP-MS/MS 分析了氟化钙残渣中痕量的铀同位素，在氦气模式下其分析灵敏度由传统 ICP-MS 的 150 Mcps/ppm 提高到了 750 Mcps/ppm，^{234}U、^{235}U 和 ^{238}U 的探测限分别为 0.65 pg、8.38 pg 和 1.13 ng，同时对碰撞反应池测量机理进行了研究；4）针对极低 ^{129}I 水平样品（$^{129}I/^{127}I$＜10-11）的分析不确定度较大的问题，基于无载体碘分离技术通过研究碘载体的加入量对 ^{127}I 信号强度及额外 ^{129}I 杂质引入的影响，建立了适用于极低 ^{129}I 水平样品的超灵敏分析方法法，并应用于南极样品中 ^{129}I 的分析。

关键字 AMS；ICP-MS/MS，长寿命放射性核素，放化分离

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

基于人工智能算法的γ辐射空气吸收剂量率可疑数据高效诊断技术

林武辉*[1]，李月文[2,3]，廖建华[4]，黄亚萍[5]，何贤文[6]
1. 集美大学
2. 广西大学
3. 自然资源部第三海洋研究所
4. 广东省环境辐射监测中心
5. 福建省辐射环境监督站
6. 广西壮族自治区辐射环境监督管理站

滨海核电是我国能源战略的重要组成，在“双碳”背景下为碳减排做出巨大贡献。然而，核电常规运行和事故状态下将以流出物的形式向环境排放一定量的人工放射性核素[1-4]。大气是滨海核电运行过程中气态流出物响应最快速的途径。γ辐射空气吸收剂量率是快速监测核电站周边辐射环境的重要指标，被广泛应用于滨海核电周边监测站和国内外在线实时辐射监测网络。然而，在福岛核污水排海的背景下[5]，γ辐射空气吸收剂量率的波动易被自媒体曲解，引起涉核网络舆情，造成公众恐慌，导致负面的经济社会级联效应。

γ辐射空气吸收剂量率的波动情况受自然事件(东亚季风、潮汐、降雨等)与核设施排放两个因素共同影响[6]。人工分析现存在影响机制复杂、工作量庞大等问题，很难在短时间内有效判断出可疑数据。故本研究利用人工智能算法，基于决策树模型，通过对海量历史数据的深度挖掘和机制分析，开发γ辐射空气吸收剂量率可疑数据的高效诊断技术，以准确解析γ辐射空气吸收剂量率的波动情况，快速判断并分析可疑数据。技术路线如图 1 所示。

首先输入γ辐射空气吸收剂量率、监测站位的经纬度以及监测时间。若输入的γ辐射空气吸收剂量率与过去 12 个月该站位γ辐射空气吸收剂量率的平均值相差小于一倍标准偏差，则视为正常值；否则，Python 会根据该站位过去一年数据调用函数 DecisionTreeClassifier，以东亚季风、潮高、降雨量为样本属性，以γ辐射空气吸收剂量率为样本值，训练决策树。决策树训练完毕后，根据监测时间段内的东亚季风、潮高和降雨量数据确定自然事件控制下，γ辐射空气吸收剂量率的理论范围。若输入的γ辐射空气吸收剂量率数据位于该范围内，则也可视为正常值；否则，该异常数据有可能是由人为事件(核爆、核泄漏等)诱发。

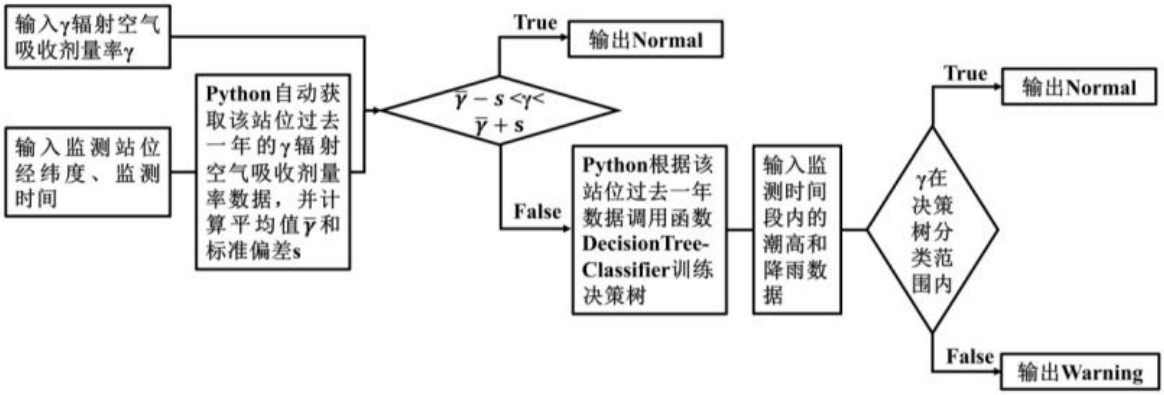


图 1 决策树算法诊断γ辐射空气吸收剂量率可疑数据示意图

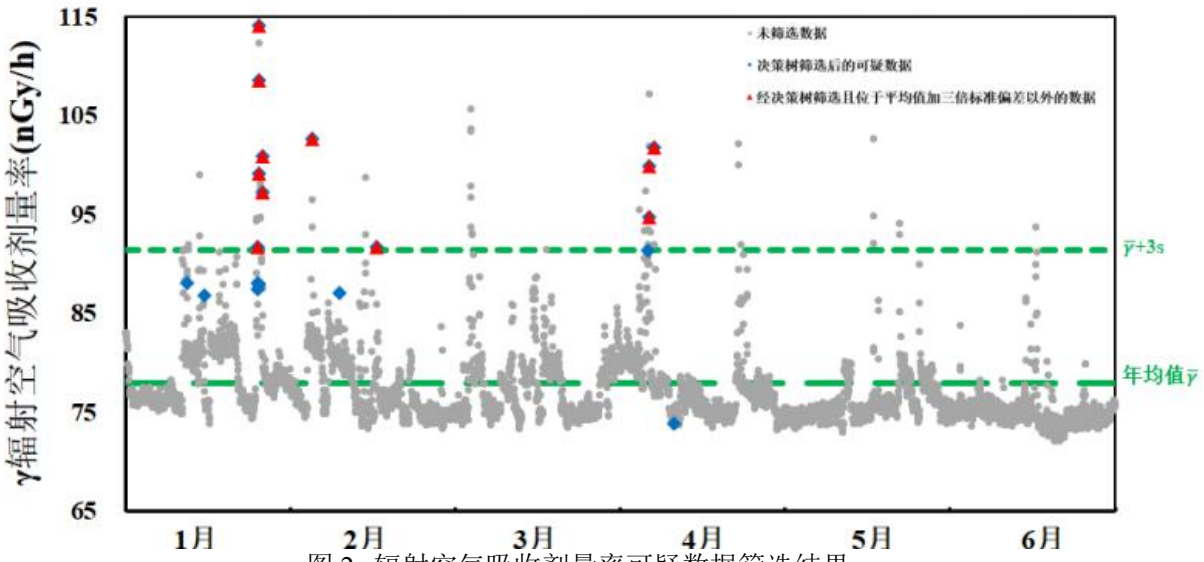


图 2 γ辐射空气吸收剂量率可疑数据筛选结果

以广西防城港核电沙螺寮站位2020年1月1日-6月30日γ辐射吸收剂量率的逐时数据(共计4368条)为例，运行本算法后，筛选出可疑数据 19 条(如图 2 蓝色标识点所示)。其中，位于平均值加三倍标准偏差以外的数据 11 条(如图 2 红色标识点所示)，甄别效率达 99.7%。总之，本研究可在分析大量γ辐射空气吸收剂量率数据时，大幅减轻人工分析工作量，为核运行、核监测过程中γ辐射空气吸收剂量率可疑数据诊断提供重要参考，对于保障滨海核电密集地区核安全具有重要意义。

关键字 γ辐射空气吸收剂量率，决策树,，核监测，可疑数据诊断

参考文献

1. Lin W., Chen L., Yu W., et al. Radioactivity impacts of the Fukushima Nuclear Accident on the atmosphere[J]. Atmospheric Environment. 2015, 102: 311-322.
2. Lin W., Zhang Y., Du J., et al. Deciphering decadal observation of Fukushima-derived radiocesium in the most polluted port nearby Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant: from seawater to marine fish[J]. Frontiers in Marine Science. 2024, 11: 1382229.
3. 林武辉, 陈立奇, 马豪, et al. 日本福岛核事故后的海洋放射性监测进展[J]. 中国环境科学. 2015, 35: 269-276.
4. 林武辉, 余克服, 杜金秋, et al. 日本福岛核废水排海情景下海洋生态环境影响与应对[J]. 科学通报. 2021, 66: 4500-4509.
5. 林武辉, 张翊邦, 余克服, et al. 2023 年日本福岛核污水站在历史的十字路口[J]. 环球财经. 2023, 267/268: 46-50.
6. 林武辉, 王诗玥, 黄亚萍, et al. 大气中 γ 辐射空气吸收剂量率的波动机制[J]. 中国环境科学. 2022, 42: 1097-1103.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

紧凑型 PGNAA 在线分析仪器的开发及其在铀矿采冶中的应用

黑大千*[1]，李佳桐[1]，蔡平坤[1]，陈炼[1]，张雄杰[2]，许影[3]
1. 兰州大学
2. 东华理工大学
3. 核工业北京化工冶金研究院

瞬发伽马射线中子活化分析（PGNAA）技术是利用中子激发被测样品原子核，产生具有原子核特征的瞬发伽马射线，进而实现对物质成分分析的一种核分析技术，由于其具有体分析、在线原位、实时测量等特点，已广泛应于与矿产资源开发的勘探与工业物料在线检测。面向深部稀有金属矿产连续智能化开采技术的发展趋势及现实需求，研究团队在多年深耕 PGNAA 方法研究与仪器开发的基础上，开展了多项面向战略矿产资源开采智能化感知的工作，完成了紧凑型创新仪器的开发，并在铀矿采冶中开展了示范性应用工作，对采冶过程中的关键环节进行元素成分动态实时分析与感知，为深部稀有金属矿产连续智能化开采提供有效分析手段及实时在线数据的支撑。

关键字 中子活化分析，战略矿产资源，实时在线检测

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

中子伽马多模探测与成像研究

韩纪锋[1,*]，龙逸洋[1]，汪鹏辉[1]，易楚琦[1]，赵朝阳[1]，
任晶[2]，王科[3]，钱森[3]，王志刚[3]，胡鹏[4]
1.四川大学原子核科学技术研究所，辐射物理及技术教育部重点实验室
2.哈尔滨工程大学物理与光电工程学院
3.中国科学院高能物理研究所北京
4.中核（北京）核仪器有限责任公司

钾冰晶石类探测器(CLYC,CLLB 等)具有优良的热中子、快中子探测能力和中子伽马甄别能力，本文研究了其中子伽马多模探测性能，结果表明使用单个晶体可实现对热中子、快中子、高能中子、伽马能谱和注量率的同时测量。基于 Li(n,t)α核反应，可实现对热中子的高效探测，淬灭因子约 0.65，伽马能量分辨率约 5%（@662 keV），热中子伽马甄别的优值因子（FOM）为 2.5；利用热中子峰位的移动可实现对 10-300 keV 快中子的探测。基于 Cl(n,p)S 等核反应可实现对 1-10 MeV 能区快中子的探测，具有良好的线性响应，淬灭因子为 0.9，快中子探测效率约 0.1%，中子能量分辨率约 15%，快中子和伽马的甄别 FOM 值为 1.3。图 1 所示为用 CLYC 测量 3.9 MeV 快中子的能谱和中子伽马甄别结果。基于卷积神经网络方法，实现了对 Li(n,t)α、Cl(n,p)S 等核反应通道的甄别，准确率约 97%，进而实现了相同能量沉积条件下快中子、热中子的甄别。使用残差网络实现对高计数率下复杂堆积信号类别的判断，显著提高 CLYC 可使用的计数率上限，FOM 值优于 1.1。

二维中子探测器在核成像、核安全等领域具有重要的应用价值，本文基于锂玻璃和 SiPM 光电阵列建立了二维中子探测器系统。通过 Geant4 开展光学输运模拟和系统性能研究，使用机器学习等算法实现了对中子入射位置的重建。结果表明对热中子的探测效率大于 95%，位置重建精度为 0.2mm，分辨率为 0.3mm；可同时实现对伴随 gamma 射线的成像，位置重建精度为 0.5mm，分辨率为 1mm；对“SCU”掩膜实现了成像，如图 2 所示。在实验方面，研制了 SiPM 批量性能测试系统，可实现对 512 个 SiPM 器件的同时老练和测试，使大量器件的性能快速稳定；基于商用 ASIC 电子学系统建立了 64 通道的探测器原型，通过准直孔和放射源对探测器系统进行了初步性能测试，实现了成像。

关键字 中子伽马多模探测，中子伽马甄别，中子成像；机器学习，重建算法

参考文献

1.1. Fast neutron response of 6Li enriched CLYC and CLLB scintillators within 0.9–5.2 MeV, ***Nuclear Instrument and Methods in Physics Research, A***, 1055 (2023) 168533
2.Simultaneous detection of energy and flux for neutron and gamma by CLYC scintillator, ***IEEE T Nucl Sci***, 70 (2023) 2148-2156
3.Discrimination of piled-up neutron-gamma pulses using charge comparison method and neural network for CLYC detectors, ***Nuclear Instrument and Methods in Physics Research, A***, 1055 (2023) 168561
4.Pulse characteristics of CLYC and piled-up neutron–gamma discrimination using a convolutional neural network, ***Nuclear Instrument and Methods in Physics Research, A***, 1028 (2022) 166328
5.Detection of 10 to 300 keV fast neutron using CLYC, CLLB and CLLBC cintillators, ***Journal of Instrumentation***, 2024, 19, P08025

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

放射性碘吸附剂的单颗粒光散射成像分析

何毅*
西南科技大学

核能乏燃料后处理、放射医学过程中常常释放出高危害性的放射性碘，通过吸附剂对其吸附是简单而有效的处理方法。目前，放射性碘吸附剂的分析方法主要依靠平均化的离线分析方法，存在空间分辨率差，无法在单颗粒水平上实时动态追踪中间反应过程等问题。针对上述问题，本研究利用金属/共价有机框架（MOFs/COFs）两类放射性碘吸附剂固有的光散射特征，结合暗场光学显微镜，建立了通用、具有高时空分辨的单颗粒动态成像新方法；在单颗粒水平上实现放射性碘吸附反应过程的实时与动态追踪；成功获得单个 MOFs/COFs 的反应动力学与热力学参数；结合其它表征手段，分析吸附剂内放射性碘的化学状态与相互间的作用力；通过实验结果和理论计算揭示其作用机制，阐明了对应的构效关系。进一步揭示 MOFs/COFs 放射性碘吸附剂的动态形变与柔性机制，并提出多种放射性碘吸附剂的设计新原理新方法。相关工作为动态、实时、统计学上深入理解放射性碘吸附剂的反应机理和构效关系提供先进手段。

关键字 放射性碘，吸附剂，光散射成像，作用机制

参考文献

1. Chi, H.; Liu, Y.; Li, Z.; Chen, W.; He, Y*. Nat. Commun.2023, 14: 5061.
2. Zhang, G.; Zou, X.; Wang, Q.; He, Y*. Angew. Chem. Int. Ed.2023, 62: e202214569.
3. Lei, Y.; Zhang, G.; Zhang, Q.; Yu, L.; Li, H.; Yu, H*.; He, Y*.Nat. Commun.2021, 12: 4483.
4. Li, X.; Wang, Q.; Tang, J.; Wu, J.; Ning, Q.; Yu, H.; Huo, J.; He, Y*. Nano Lett., 2024, 24: 9505-9510.
5. Wang, Q.; Yu, H.; Chen, X.; He, Y*. Adv. Funct. Mater. 2023, 33: 2300487.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

锕系元素分离与分析新方法的探索研究

陆跃翔*
清华大学

乏燃料后处理可以回收铀钚等关键核素，提取高价值的人工放射性核素，从而实现核废物的减容降级和资源化利用。铀、钚等锕系元素化学性质非常复杂，乏燃料中元素种类繁多，后处理工艺又经常涉及高温、高酸、高放射性等极端操作条件，为锕系元素的分离和分析带来了极大的挑战。针对后处理中的不同应用场景，我们提出了利用尺寸筛分效应进行核素分离的新策略，在高酸条件下实现了锕系与镧系元素的高效组分离；发展了在空气气氛下将铀酰离子转型为铀过氧化物的光催化辅助提铀新路径，显著提高了放射性废水中的铀提取容量；提出使用一种微等离子体气体电极代替固体电极的新思路，显著提高了电极的耐腐蚀性能，实现了熔盐中铀等金属离子的电化学分离和原位光谱分析。

关键字 乏燃料后处理，铀，，离子筛分，，光催化，微等离子体电化学

参考文献

1. Z. Wang, L. Huang, X. Dong, T. Wu, Q. Qing, J. Chen, Y, Lu, C. Xu, *Nat. Commun.* **2023**, 14, 261.
2. T. Wu, Z. Wang, Y. Lu, S. Liu, H. Li, G. Ye, J. Chen, *Adv. Sci.* **2021**, 8, 2002717.
3. S. Liu, Z. Wang, Y. Lu, H. Li, X. Chen, G. Wei, T. Wu, D. Maguire, G. Ye, J. Chen, *Appl. Catal. B-Environ.* 2021, 282, 119523.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

利用 SF-ICP-MS 技术快速测定海水样品（15-20L）中 ^{237}Np 和 ^{239,240}Pu 同位素

张帅*[1,2],刘志勇[3],郑建[4],潘少明[2]
1. 烟台大学环境与材料工程学院，山东烟台 264005
2. 南京大学地理与海洋科学学院，江苏南京 210023
3. 苏州大学辐射医学与防护国家重点实验室，放射与交叉科学学院(RAD-X)，江苏省高校辐射医学协同创新中心，江苏苏州 215123
4. 国立放射科学研究所 量子科学技术研究所，日本千叶 263-8555

镎-237（^{237}Np，半衰期 2.14×10^{6} 年）是超铀元素 Np 的一种长半衰期同位素。在海洋环境中，因其与 137Cs 相似的保守性，有潜力替代 137Cs 用于长期水循环研究[1]。为此，本研究提出了一种新的快速测定海水样品中 ^{237}Np 和 ^{239,240}Pu 的方法。

该方法采用阴离子交换色谱法进行吸附分离与提纯，随后利用 SF-ICP-MS 技术测定 ^{237}Np 及 ^{239,240}Pu 的含量。鉴于 ^{237}Np 的大部分同位素半衰期较短，且没有市售的 ^{236g}Np 同位素，本研究选择 ^{242}Pu 作为 Np 的伪同位素稀释示踪剂。通过精密控制氧化还原系统并优化色谱洗脱流程，得到 ^{237}Np 与 ^{242}Pu 之间的化学分馏因子为 1.02 ± 0.06 (k = 2)，表明 Np 和 Pu 之间几乎不产生化学分馏，证明了 ^{242}Pu 作为 ^{237}Np 定量分析伪同位素稀释示踪剂的可行性。为了进一步评价该方法，本研究对国际原子能机构认证参考物质（IAEA-443）中的 ^{237}Np 和 ^{239,240}Pu 同位素进行分析。结果显示，^{237}Np 和 $^{239+240}$Pu 的活度浓度及其原子比的分析结果与参考值一致。同时，^{242}Pu 的化学产率稳定在 65~88% 之间、U 去污系数高于 106 水平、且样品通量可以实现每 5 天处理 12 个样品的效率，在分析 15L 海水样品中，该方法对 ^{237}Np、^{239}Pu 和 ^{240}Pu 的方法检出下限（MDL）分别为 1.3×10^{-3}、0.065 和 0.15μBq L^{-1}。综上表明该方法适用于海水样品中超痕量 ^{237}Np 和 ^{239,240}Pu 同位素的快速分析。

最后，利用本研究所开发方法，我们首次分析并报道了福岛核电站附近海域海水样品中的 ^{237}Np 活性浓度，范围为 0.122－0.154 μBq L^{-1}，为太平洋海域及福岛核废水排放的监测提供了重要的基础数据。

关键字 海水，^{237}Np，^{239,240}Pu，AG MP-1M 树脂，SF-ICP-MS

参考文献

1.Bressac, M.; Levy, I.; Chamizo, E.; La Rosa, J. J.; Povinec, P. P.; Gastaud, J.; Oregioni, B. Sci. Total Environ. 2017, 595, 178−190.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

核事故污染环境 ^{137}Cs 源解析技术与应用

冯缤*
复旦大学放射医学研究所

目的：环境 ^{137}Cs（$T_{1/2}$=30.1 y）主要来自大气层核试验沉降和核反应堆释放。鉴于沉降 ^{137}Cs 普遍存在，核事故后遗留 ^{137}Cs 的源解析存在挑战，中欧阿尔卑斯山区野猪体内 ^{137}Cs 衰减显著慢于物理衰变这一异常现象尚无科学解释（即“野猪悖论”）。为此，本研究聚焦“野猪悖论”谜团，运用 $^{135}Cs/^{137}Cs$ 指纹的独特溯源优势，定量解析污染野猪体内 ^{137}Cs 的源项，系统解译 ^{137}Cs 在野猪体内的富集机制，期为历史遗留 ^{137}Cs 的长期环境影响评价提供理论和技术参考。

方法：利用γ谱仪、电感耦合等离子体串联质谱仪等分析仪器，测定德国巴伐利亚野猪肌肉 ^{137}Cs 活度和 $^{135}Cs/^{137}Cs$ 比值，通过端元模型解析 ^{137}Cs 污染贡献，基于统计模型和环境补充证据研究 ^{137}Cs 在野猪体内的污染途径和富集过程。

结果：巴伐利亚野猪 ^{137}Cs 污染水平当前仍远超安全限值；$^{135}Cs/^{137}Cs$ 指纹证实大气核试验仍是野猪 ^{137}Cs 污染的主要源项；发现历史遗留 ^{137}Cs 在地下混合形成活度浓度更高的“新污染源”，野猪通过摄入含“新污染源”的真菌导致辐射超标的污染途径。

结论：本研究为野猪悖论这一放射生态领域长期谜团提供科学解释，肯定了 $^{135}Cs/^{137}Cs$ 在 ^{137}Cs 源解析与定量影响评价的应用潜力，揭示了历史遗留 ^{137}Cs 污染在环境迁移转化过程中的叠加效应，提出 ^{137}Cs 长期生态影响被低估的观点。

关键字 放射性铯，核事故，核环境安全，源解析

参考文献

1. Feng, B., Onda, Y*., Wakiyama, Y., Taniguchi, K., Hashimoto, A., & Zhang, Y. (2022). Persistent impact of Fukushima decontamination on soil erosion and suspended sediment. Nature Sustainability, 5(10), 879-889.
2. Stäger, F., Zok, D., Schiller, A. K., Feng, B*., & Steinhauser, G*. (2023). Disproportionately high contributions of 60 year old weapons-^{137}Cs explain the persistence of radioactive contamination in bavarian wild boars. Environmental Science & Technology, 57(36), 13601-13611.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

一种快速组分离装置及其在真实高放废液核素分析中的应用

冯孝贵*，叶钢，贾建峰，，袁建华，何千舸，王建晨，陈靖
清华大学

超铀α核素、^{90}Sr 和 ^{137}Cs 是真实高放废液中需要重点关注的放射性核素。根据这些核素所发射的射线性质，可选用的分析技术常常有液闪法、α能谱法、γ能谱法等。现有分析策略往往着眼于单核素，用于多核素分析时工作量较大。另外由于子体 ^{90}Y 的影响， ^{90}Sr 的分析通常耗时较长。为了尽可能减少分离分析工作量，缩短分析时间，本研究室研发了对超铀α核素、^{90}Sr 和 ^{137}Cs 进行快速组分离的工艺和装置。利用该装置，结合液闪法、α能谱法、γ能谱法等分析技术各自的优点，推荐了同时分析这些核素的方法。该方法已成功应用于真实高放废液中的核素分析。经过组分离后，不需要进一步分离就可以得到 ^{237}Np、α-Pu、^{241,243}Am、$^{242\text{-}244}$Cm、^{90}Sr、^{137}Cs 等核素的活度。对总α、^{90}Sr、^{137}Cs 等三个分析项目，单样分离与测量总时间约为 2 hr，3 个平行样品分离与测量总时间约为 5 hr。组分离操作简单易行，分析结果准确可靠。

关键字 组分离，高放废液，核素分析，超铀α核素，^{90}Sr，^{137}Cs

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

基于物理加密与随机森林模型的军控核查方法

何小锁*
南京航空航天大学

核军控物理学领域长期存在一个悖论：核查人员需要在不获取核武器敏感信息的前提下，验证其真实性。尽管研究人员提出了多种加密辐射检测技术，但在确保敏感信息零泄露的基础上，进一步提高核查方法的准确性，仍然是军控核查技术发展的重要目标。本研究结合物理加密技术与机器学习方法，提出了一种用于核裁军的智能核查模型。我们利用伽马射线成像和中子活化分析原理，搭建了两个使用物理加密掩模的军控数据采集装置，并通过蒙卡模拟分别收集基于不同测量原理的加密数据，构建了一个多特征军控数据集，涵盖了真实核弹头及大部分可能存在的作弊核弹头的测量数据。基于此，我们建立了随机森林模型，并结合上述数据库对该模型进行训练和优化。通过交叉验证和网格搜索方法确定模型的最佳参数，并利用测试集对最佳模型进行评估。在鲁棒性分析中，我们在数据集中引入多个不同等级的噪声，并在含不同噪声的数据集上，依次完成随机森林模型的训练、优化和评估工作，以量化该方法的鲁棒性。在安全性分析中，我们设计了针对加密掩模的暴力破解实验，以真实样本在特定掩模下的测量数据作为破解对象，同时利用真实样本在一百万个随机构造的掩模作用下的测量数据，对该对象进行暴力破解，以评估加密掩模的安全性。本研究中的加密掩模能够有效规避敏感数据在软件中被窥探和篡改的风险，从而显著提升基于机器学习方法的军控核查技术的安全性。此外，机器学习强大的信息提取、自主学习与数据处理能力使得该方法更加准确与高效。结果显示，当数据含有 1%及以下噪声时，随机森林模型在验证集上的最佳结果均超过 98%，在测试集上的准确率均高于 98%，曲线下面积值均高于 99%。此外，加密掩模被成功破解的概率低达 6.6×10^{-54}，表明在本研究采用的物理加密方式下，相关人员几乎不可能获取被测物体的敏感数据。上述结果表明，基于物理加密与随机森林模型的军控核查方法能够在有效保护核弹头敏感信息的前提下，以高准确率和高效率鉴定其真实性。

关键字 加密辐射检测，核军控核查，机器学习，蒙特卡洛模拟

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

纳米限域高活性金属与放射性碘的相互作用机制研究

朱琳*，赵倩，段涛
西南科技大学

分离固化放射性碘对于乏燃料后处理和环境污染防治具有重要的科学价值和现实意义。附银沸石/硅胶材料由于对碘的高效吸附性能被广泛应用于实际碘气溶胶处理过程。然而在高温、高酸等极端条件下，材料中的有效活性成分会发生氧化或溶出现象，特别在高浓度 NOx 存在的条件下易发生老化效应，材料稳定性的降低使得其实际应用仍面临极大挑战。为克服传统表面负载型材料在吸附分离放射性碘方面存在的氧化失活、稳定性差、利用率低等应用瓶颈，我们提出设计纳米限域高活性金属材料体系，基于前期研究基础，团队系统地开展了关于金属基多孔材料对碘吸附性能的研究，提出“吸附-固定”一体化的新思路。

分子筛材料由于具有规则的微孔孔道结构以及优异的热稳定性，被认为是理想的限域制备纳米晶颗粒的载体。我们开展了关于全硅沸石原位限域 Cu 纳米颗粒实现高效碘捕获的研究。前期的研究结果表明，通过采用原位限域合成策略，充分发挥了限域体系中纳米铜的高化学亲和力和碘固化能力，以及全硅沸石基体赋予的高稳定性和快速的吸附动力学等综合优势。限域效应有效地降低了 Cu 纳米颗粒在高温或低酸条件下的热分解或溶出现象，解决了纳米颗粒利用率低的问题，同时疏水骨架的全硅沸石载体也进一步提升了材料的水热稳定性。这项工作拓展了纳米限域高活性金属材料在放射性核素吸附分离领域的应用，并为沸石限域金属吸附剂的设计和可控合成提供了新的思路。

关键字 放射性碘，分子筛材料，限域效应，吸附

参考文献

1.Qian Zhao, Guangyuan Chen, Zeru Wang, Mei Jiang, Jingruolan Lin, Ling Zhang, **Lin Zhu***, Tao Duan*. Efficient Removal and Immobilization of Radioactive Iodide and Iodate from Aqueous Solutions by Bismuth-based Composite Beads [J]. Chem. Eng. J., 2021, 426, 131629.
2. Guangyuan Cheng, Qian Zhao, Zeru Wang, Mei Jiang, Ling Zhang, Tao Duan, **Lin Zhu***, Pitch-based porous polymer beads for highly efficient iodine capture [J]. J. Hazard. Mater., 2022, 434, 128859.
3. Mei Jiang, **Lin Zhu***, Qian Zhao, Guangyuan Chen, Zeru Wang, Jingjing Zhang, Ling Zhang, Jiehong Lei*, Tao Duan*, Novel synthesis of NaY-NH4F-Bi2S3 composite for enhancing iodine capture [J]. Chem. Eng. J., 2022, 443, 136477.
4. Qian Zhao, Changzhong Liao, Guangyuan Chen, Ruixi Liu, Zeru Wang, Anhu Xu, Shiyin Ji, Kaimin Shih, **Lin Zhu***, and Tao Duan*, In Situ Confined Synthesis of a Copper-Encapsulated Silicalite-1 Zeolite for Highly Efficient Iodine Capture [J]. Inorg. Chem., 2022, 61, 49, 20133–20143.
5.Xuanhao Liang, Guanyuan Chen, Hao Zhang, Ling Zhang*, Tao Duan, **Lin Zhu***, Co-adsorption performance of iodine and NOx in iodine exhaust gas by NH2-MIL-125 [J]. J. Hazard. Mater., 2024, 470, 134237.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

面向锕系元素结构探测的 X 射线吸收谱仪开发及应用

于海生、吴佳兴、李松、张林娟、王建强*
中国科学院上海应用物理研究所

分析仪器在核能领域研究中扮演着至关重要的角色，为精确测量、监控及理解核反应过程提供不可或缺的技术支持。X 射线吸收谱技术利用 X 射线入射样品前后信号的变化，可精确测定不同形态物质中包括价态、电子态以及配位原子的种类、配位数、键长等局域配位结构和电子结构信息，具有其他分析技术无法替代的优势[1]。长期以来 X 射线吸收谱高度依托于大科学同步辐射装置，极大限制了科研人员常规的测试需求，近年来随着弯曲晶体及探测器等相关技术的发展，基于实验室光源的小型化 X 射线吸收谱仪正逐渐走向常规实验室[2]。



图 1 中能 X 射线吸收谱仪和硬 X 射线吸收谱仪

台式 X 射线吸收谱仪基于罗兰圆几何布局，通过球面弯晶单色器将 X 射线源发出的白光进行单色化，在子午和弧矢两个方向同时聚焦，通过光源、球面晶体和探测器在罗兰圆上的联动扫描，获取特定元素的 X 射线吸收谱图。本团队已开发了台式中能 X 射线吸收谱仪和硬 X 射线吸收谱仪，相比于现有商业化仪器具有更宽的能谱测试范围，已与核能、催化、材料等领域的用户开展了多项合作研究。例如本团队利用台式 X 射线吸收谱仪对一种新型的 $UCoO_4$ 析氧电催化剂进行了详细的表征[3]，测试结果表明在析氧过程中，初始 $UCoO_4$ 中的 Co^{2+}离子会转化为高价态的 $Co^{3+/4+}$，而 U^{6+}保持不变，说明只有 Co 位点是活性中心。

关键字 同步辐射，X 射线吸收谱，罗兰圆谱仪

参考文献

1. Glatzel, P.; Weng, T.-C.; Kvashnina, K., et al. 2013, 188, 17-25..
2. Jahrman, E P., Holden, W M., Ditter, A S., et al. ,2019, 90, 2, 024106.
3. Lin X., Huang Y C., Hu Z., et al. 2021, 144, 1, 416-423.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：报告

分离和检测一体化铀的闪烁树脂合成及应用

刘同环*
兰州大学

在核燃料循环中会产生各种放射性元素，而铀是其中较为重要的元素之一。铀具有很强的化学和放射性毒性，因此在核能开采和处置过程中对其进行监测具有重要意义。虽然我国目前环境监测站和核工业企业在铀监测技术上的检测能力已经相对成熟，但大部分放射性核素铀的分析仍然依赖于上世纪 70 至 90 年代的分离纯化方法和测量技术。这些方法在环境样品中应用时，因核素浓度水平低、基质复杂、干扰因素多以及测量仪器特性等因素的影响，其分析流程复杂、分析时间长的问题。难以满足的α放射性核素 238U 的快速测量需求。因此，如何缩短测量时间，设计一种能够快速分离和分析放射性核素的新型双功能材料，成为亟待解决的问题。基于以上考虑，本研究合成了集闪烁测量和吸附分离铀为一体的塑料闪烁树脂（U-PSresin），利用树脂对 U（VI）快速富集，通过液体闪烁计数法（LSC）对铀进行了快速测定。研究结果表明，U-PSresin 具有良好的辐照稳定性，利于液体闪烁谱仪的精确测量。该类闪烁树脂的吸附和测量重现性偏差小于 5%，可用于 1 mg 以上铀的精确测量。在不同类型的加标水样中 U-PSresin 的测量偏差小于 15%。该工作表明，U-PSresin 可以选择性地富集测量水环境中的铀，为核紧急情况和环境监测方面中铀的快速检测提供了新的思路。

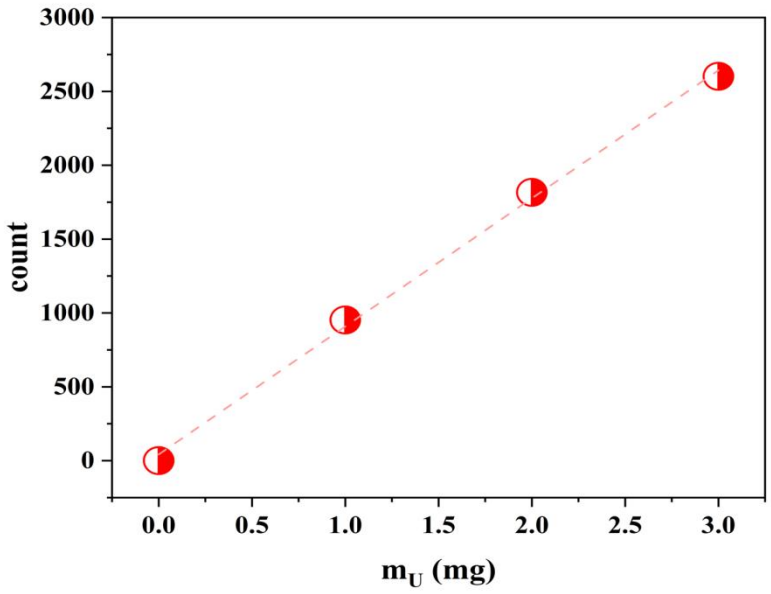


图 1 U-PSresin 对 U(VI)的连续测量

关键字 铀，废水，分离，探测

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：墙报

中国科学院地球化学研究所 1MV 串列加速器质谱仪

杨宪林*、刘彧、杨海全、王世杰、尹祚莹
中国科学院地球化学研究所

中国科学院地球化学研究所于 2022 年 2 月安装了一台由美国 National Electrostatics corporation（NEC）制造通用 1 MV 串列加速器质谱仪（AMS），该设备配备了 40 个靶位的铯溅射负离子源、一个 90°注入磁铁(质能积为：5 amu-MeV)、一台型号为 3SDH-1 的串列加速器（可以实现氦气和氩气两种剥离气体的切换）、一个 90°高能分析磁铁(质能积为 36 amu-MeV)，一个半径为 1.00 米的 90°球型静电分析器，一个用于 B/Be 分离的 45°分析磁铁(质能积为 36 amu-MeV)和一个二维气体电离室探测器。该仪器设计用于 ^{10}Be、^{14}C、^{26}Al 和 ^{41}Ca 等长寿命放射性核素的精确测量。为了开展宇生放射性核素在地质年代学中的应用，建立了制备 ^{10}Be 和 ^{26}Al 样品的超净实验室。为了快速完成 ^{14}C 样品的制备，购置了一个自动石墨化设备 Aeon CEGS 12X。目前验收阶段的 ^{10}Be/^{9}Be、^{14}C/^{12}C 和 ^{26}Al/^{27}Al 化学流程空白比值均低于 5x10^{-15}，这为开展环境放射性同位素示踪、考古年代学、医药开发示踪等多方面的应用研究奠定了基础。

关键字 1 MV 加速器质谱仪，长寿命放射性核素测量，年代学，示踪

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：墙报

环境水样中碘形态的 IC-ICP-MS 灵敏分析

姜欢、陈宁、王妍芸、范煜坤、张梦婷、张路远、侯小琳*
中国科学院地球环境研究所

碘是一种氧化还原敏感的元素，其在水环境中的形态变化极易受溶解氧含量、氧化还原电位、微生物活动等共同影响。对环境水样中碘形态的准确定量分析可以认识碘的地球化学循环，还可以示踪环境变化过程。本工作基于离子色谱与电感耦合等离子体质谱联用，建立了一种快速、灵敏的环境水样(海水、河水、湖水、雨水、地下水)中碘形态的分析方法。通过使用色谱保护柱 AG22 (4 mm ×50 mm)，采用 8 mmol/L $(NH_4)_2CO_3$ 作为流动相，可在 120 s 内快速分离海水样品的 IO_3^-及 I^-；针对可溶性有机碘含量较高的湖水、河水、降水样品等，在保护柱后串接柱效更高的 AS22 分离柱(4 mm ×250 mm)，采用 50 mmol/L $(NH_4)_2CO_3$ 流动相，将溶解态有机碘与 IO_3^-完全分开，实现 IO_3^-的准确定量。通过直接将内标同位素 ^{133}Cs 加入到$(NH_4)_2CO_3$ 流动相，实现了碘测量信号波动的准确校正。建立的碘形态分析方法精密度优于 3.5%。IO_3^-加标回收率为 92.3%~101.9%，I^-加标回收率 96.4%~105.3%。标准加入法实验表明分析方法准确可靠。对于 25 μL 的进样体积，IO_3^-及 I^-的检出限分别为 0.014～0.026 μg/L 和 0.018 μg/L。建立的方法已成功用于海水、河水、雨水、地下水等环境水样中 IO_3^-和 I^-的分析。

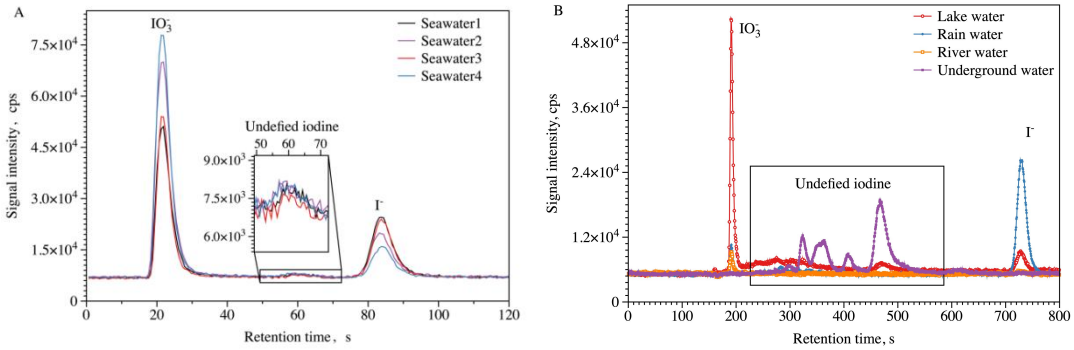


图 1 色谱保护柱(AG22)对海水样品中 IO_3^-和 I^-的分离(A)，色谱保护柱和分离柱串接(AG22-AS22)对淡水中 IO_3^-和 I^-的分离(B)

关键字 离子色谱，电感耦合等离子体质谱，碘形态，环境水样，铯-133 内标

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：墙报

锕系元素精准识别：分离提取、安全防护与资源化新策略

王殳凹*
苏州大学

近年来，我们课题组系统开展了以锕系元素化学为核心的核能放射化学研究：在苏州大学搭建了超铀元素化学实验室，部分填补了我国在该领域基础研究的平台空缺并在国内率先开展了钚和镅的实验配位化学研究；提出了基于配位识别稳定锕系非常规价态的思路，发展了镧系锕系精准分离新策略，获得了至今报道的六价镅与三价镧系的最好分离效果；系统开展了基于新型多孔框架的放射性核素分离材料应用基础研究，并获得了针对部分放射性核素目前报道的性能最为优越的吸附分离材料，为解决核污染水处理和核事故应急任务中的放射性核素深度净化问题提供了科学依据；发展了放射性核素生物体内精准识别理念，设计了系列新型高效、低毒的锕系促排剂，解决了锕系元素从人体骨组织中难以促排的瓶颈问题，为发展新一代核应急救治药物奠定了基础；开发了多种新型锕系高端功能材料，探索了其在核电池、辐射探测、核素成像等领域的应用，为放化诊断分析、太空能源供给等重要任务提供了新思路。

关键字 锕系元素，镧系元素，精准识别，分离提取，污染控制，促排药物，功能应用

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：墙报

磷酸化生物质的制备及其对铀尾矿废水中铀的高效去除

黄婧、林书海、石雅弟、肖赛金*
东华理工大学

随着核能的高速发展，铀资源不断被开采和利用，含铀废水也日益增多[1, 2]。如果不对这些含铀废水进行妥善处理而直接排放，将会对环境造成污染，并威胁人类健康[3]。因此，迫切需要开发低成本和效率高的铀分离技术。本研究以纤维素、木浆、竹粉等生物质为原料，通过烯丙基三甲基氯化铵（ATMAC）与无水草酸（Ox）组成的深共熔溶剂进行预处理，得到孔隙率高且富含烯基的生物质材料（图 1）。随后，通过乙烯磷酸的化学改性，得到了磷酸功能化的生物质材料，并进一步考察了它们对铀的吸附行为。结果表明，磷酸基团的引入，显著增强了生物质材料对铀的吸附能力。磷酸化生物质在 pH 2.0-7.0 范围内均展现出良好的铀吸附能力。在 pH 为 3.0 时，最大吸附容量为 392.75 mg/g，可将铀尾矿废水中的铀浓度从 0.878 mg/L 降低至 18 μg/L，去除率高达 97.99%，表明该材料在酸性环境中具有良好的铀去除效果。吸附动力学和热力学分析表明，磷酸化生物质对铀的吸附以多层化学吸附为主，在 298.15K 下，对铀的最大吸附容量高达 886.52 mg/g。此外，在多种金属离子存在下，磷酸化生物质对铀的去除率仍高达 93.40%。综上所述，本研究开发了一种新型的磷酸化生物质材料，并将其用于铀尾矿废水中铀的高效去除，为生物质废弃物的资源化利用和含铀废水的高效去除提供了新思路。

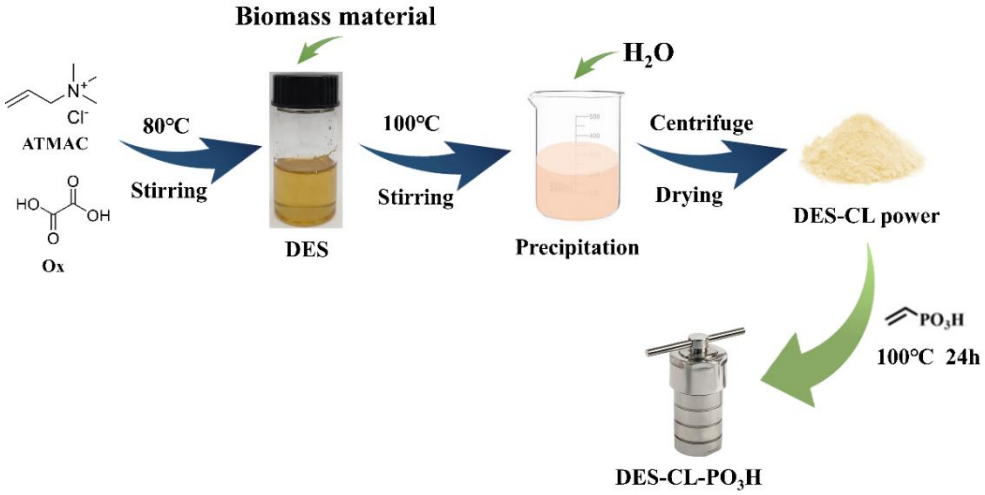


图 1：磷酸化生物质合成示意图

关键字 生物质，深共熔溶剂，铀尾矿废水，铀去除

参考文献

1. Cui W-R, Li Y-J, Jiang Q-Q, et al. *Analytical Chemistry* 2021; 93(48):16149-16157.
2. Sang K, Wang Y, Wang Y, Liu L, et al. Separation and Purification Technology 2023; 305.

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：墙报

黄饼溯源属性研究

王同兴*、张燕、赵兴红
中国原子能科学研究院

本文主要完成了通过标准分析方法对不同产地、不同工艺的黄饼样品的颜色、铀含量、铀同位素、微观形态、稀土元素含量等属性进行分析，结合分析结果及来源和工艺等已知信息，梳理了黄饼溯源可用的属性。

我国铀矿众多，矿床类型主要有花岗岩型、火山岩型、砂岩型、碳硅泥岩型 4 种，北方铀矿区以火山岩型为主，南方铀矿区则以花岗岩型。考虑到地理位置和纯化工艺对黄饼属性的影响，应用标准分析方法对国内黄饼样品铀含量、铀同位素、微观形态、稀土元素含量等属性进行分析，结合来源和工艺等已知信息，梳理黄饼溯源可用的属性。

应用电位滴定法对铀含量、应用 MC-ICP-MS 对铀同位素、应用化学分离-质谱法对稀土元素含量和铅锶同位素进行分析，通过 SEM 对黄饼样品的微观形态进行观测等工作的开展，可以得到不同产地、不同工艺、不同化学形态的黄饼样品中铀含量、^{234}U、$^{206}Pb/^{204}Pb$ 和稀土元素含量有所不同，14 种稀土元素含量变化趋势大致变化；不同工艺的黄饼样品的微观形态有所不同。

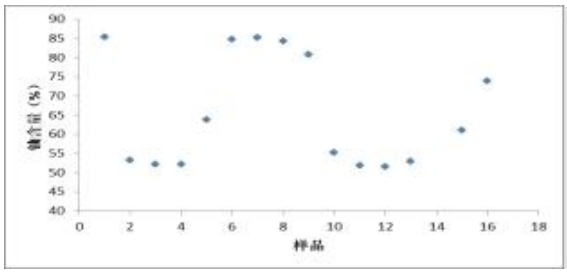


图 1 铀含量的分析结果

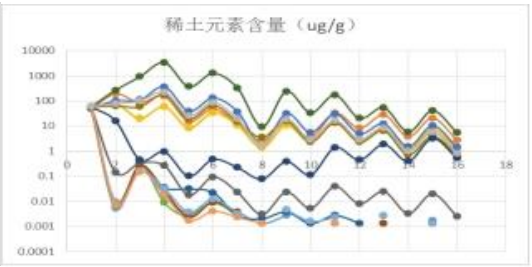


图 2 稀土含量分析结果

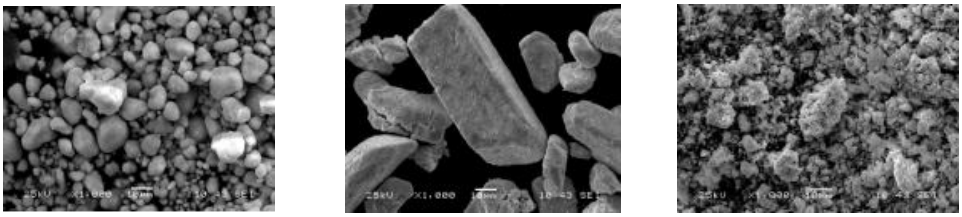


图 3 微观形态分析结果

因此，通过对黄饼样品微观形态、铀含量、铀同位素、稀土元素含量、铅同位素等属性进行了分析，结合样品的来源、工艺等信息，铀含量、铀同位素、稀土元素含量及铅同位素等属性可以作为样品来源溯源的特征属性；微观形态、颜色等可以作为样品加工工艺溯源的特征属性。该工作的开展，为后期黄饼数据库和黄饼样品的溯源提供了技术和数据储备。

关键字 核法证，黄饼，溯源，属性

分会场：26.核分析与核安全
交流形式：墙报

基于激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱的燃料材料中杂质元素原位分析方法研究

罗伊婧*、赵峰
中国核动力研究设计院

我国“十四五”规划指出，要加快构建现代能源体系，推进能源革命，建设清洁低碳、安全高效的能源体系。大力发展核能等清洁能源，实现反应堆安全、高效运行，对构建我国现代能源体系至关重要。核燃料元件是核反应堆的核心部件和最主要的组成部分。核燃料元件中的杂质元素将显著影响燃料性能，阻碍反应堆的高效、安全运行。采用非自耗电弧熔炼的方式进行满足杂质含量要求的铌合金纽扣锭熔炼，通过机加工的方式进行柱状标准物质的加工，获得实验室制铌金属工作标准物质。利用激光剥蚀-电感耦合等离子质谱仪（LA-ICP/MS）对获得的金属工作标准物质进行原位分析方法建立，并对实际铌金属样品进行测定，实现了铌金属样品中 Cr、Fe 和 Ni 的原位定量分析，Cr、Fe 和 Ni 元素的检出限分别为 0.12 mg/g、0.78 mg/g 和 0.04 mg/g。

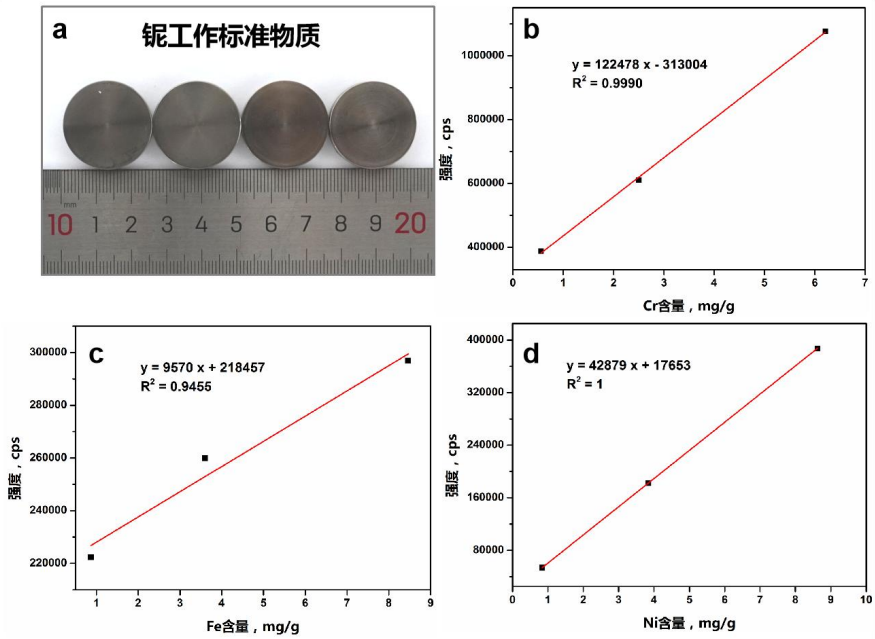


图 1 （a）铌工作标准物质；（b）Cr 标准曲线；（c）Fe 标准曲线；（d）Ni 标准曲线。

关键字 激光剥蚀-电感耦合等离子体质谱，核燃料，原位分析

参考文献

1. Y. Liu, Z. Hu, S. Gao, D. Günther, J. Xu, H. Chen, *Chem. Geo.*, **2008**, 257, 34-43.
2. U. K. Maity, P. Manoravi, M. Joseph, Manish Chandra, G. Natarajan, N. Sivaraman, *J. Anal. At. Spectrom.*, 2022,37, 910-918.
3. Y. Lu, L. Zhang, L. Liu, D. Zhu, J. Xie, Q. Wang, *J. Anal. At. Spectrom.*, 2024,39 829-840.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

被动采样技术及其在有机污染物区域分布及界面通量测定的应用

鲍恋君[1]、曾永平*[2]
1. 暨南大学
2. 华南理工大学

水体中只有自由态有机污染物才能通过细胞膜进入生物体，产生水生态效应。因此测量水体中自由态污染物，才能准确评估其潜在生态环境风险。被动采样技术是一项可以测量自由态有机物的新兴方法，但由于其定量体系及装置均存在些许不足限制其应用。本研究从理论层面阐明了应用行为参考物校正法原位定量水体自由态有机污染物的普适性与局限性，自主研制了一系列原位定量水体自由态有机污染物丰度及行为的被动采样装置，率先绘制了南极内陆湖及我国淡水流域自由态有机污染物的分布地图，揭示了我国淡水自由态有机污染物（多环芳烃及多环麝香）的生态风险较低，阐明人为活动显著影响水体有机污染物的分布，发现了典型点源区域污染物经水体传输过程中沉积物作为水体中污染物的源汇动态转变，阐明点源区域有机污染物经水体传输到周边环境不容忽视。

关键字 被动采样技术；自由态有机污染物；区域分布；界面传输

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

酶@多孔晶态框架杂化材料的设计及应用

陈国胜*[1]、黄思铭 [1,2]、欧阳钢锋 [1]
1. 中山大学
2. 广州医科大学

生物催化具有反应效率高、工作条件温和底物专一性好等优点，在分析测量及环境治理领域具有重要的应用前景。然而，酶分子在外界环境压力下极易发生构象扰乱，影响其在实际场合中的催化效能。受自然界中生物矿化启发，本研究发展了系列仿生组装策略，通过在酶分子表面原位生长类“盔甲”功能的多孔晶态框架，大幅提高了酶分子在复杂环境下的功能稳定性。同时，多孔晶态框架具有精准可调的多孔网格结构，有利于调控并促进传质动力学过程，实现生物催化效率及选择性的提升。基于此，本研究构建了系列基于生物（级联）催化的快速分析测量平台，开发了适用于复杂环境水体污染物降解的光-酶耦合催化体系。

关键字 酶固定；多孔晶态框架；分析检测；环境催化降解

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

高性能 Janus 蒸馏膜制备及抗润湿/抗污染性能分析

孟李君[1]、王志伟*[2]
1. 东华大学
2. 同济大学

引言

膜蒸馏是依靠疏水微孔膜两侧的温度差作为驱动力的膜分离工艺，具有无需外加压力、脱盐性能受盐浓度影响小等优点，在高盐水处理中具有独特的技术优势[1]。然而蒸馏膜易被低表面张力高盐废水润湿或污染是目前膜蒸馏技术发展的瓶颈问题[2]。本研究提出了一种制备具有纳米级孔道的超亲水表层和疏水基底的 Janus 蒸馏膜的新方法，并对膜的抗润湿/抗污染性能及机理进行了深入分析。

实验方法

具有 Janus 结构的蒸馏膜通过仿生矿化法制备。将多巴胺（DA，6 g/L）和聚乙烯亚胺（PEI，6 g/L）溶解在 Tris 缓冲液中得到共沉积溶液。将 PVDF 膜漂浮在沉积溶液（60°C）中自沉积 1 h。多巴胺的氧化自聚合过程使其能够在 PVDF 膜底部形成独立的 PDA/PEI 沉积层。通过硅酸四甲酯（0.75 wt%）与磷酸盐缓冲溶液混合制备矿化溶液。将干燥后的 PDA/PEI 膜漂浮在矿化溶液中震荡 4 h 后即制备得到仿生矿化膜。

结果与讨论

为表征膜的表面润湿性，测试了膜的不同表面张力液体接触角（水、甘油、二甲基亚砜）及膜的水下油接触角。结果表明，与原膜相比，仿生矿化膜亲水性显著提升，水接触角仅为 15.1°，水下油接触角高达 173.8°，具有超亲水性及水下疏油性。为探究仿生矿化 Janus 膜的抗润湿/抗污染性能，以含矿物油（1 g/L）、十二烷基硫酸钠（0.1 mM）和 NaCl（0.5 M）的溶液作为原料液，对其长时间运行性能进行测定，结果表明，原膜逐渐被润湿和污染，Janus 膜始终保持稳定的渗透通量，具有强抗润湿/抗污染性。分子动力学模拟证明了仿生矿化层的高表面能是抗润湿/抗污染性增强的主要机制。该研究能够为高性能 Janus 蒸馏膜的研制及膜蒸馏在高盐废水处理领域的应用提供理论与技术支持。

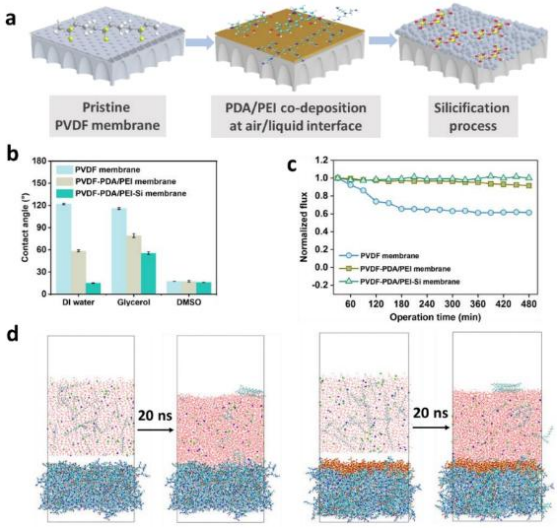


图 1. 仿生矿化 Janus 蒸馏膜制备（a），膜的接触角（b），膜的抗润湿/抗污染性能（c），膜-污染物相互作用的分子动力学模型（d）

关键字 Janus 膜；膜蒸馏；高盐废水处理；抗污染；抗润湿

参考文献

1. H. Chamani, J. Woloszyn, T. Matsuura, Prog. Mater Sci., **2021**, *122*, 100843
2. D. Feng, Y. Chen, Z. Wang, Environ. Sci. Technol., **2021**, *55*, 14156-14164

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

效应导向分析鉴定 UV/Cl_2 水处理中卤素离子存在下由酚类生成的毒害性消毒副产物

邱俊琅*
中山大学

UV/chlorine as an advanced oxidation process has been proposed for pollutant removal and deep disinfection. However, the coexistence of inorganic ions and natural organic matter (NOM) in the water body may affect the disinfection effect and participate in the formation of toxic disinfection byproducts (DBPs). Phenols were selected as the model compound for NOM to study the DBPs formation and toxicity during the treatment of UV/chlorine in the presence of bromide or iodide at actual water concentration levels. Known DBPs and total organic halogen results showed that phenol treated by UV/chlorine with bromide produced more disinfection byproducts than that of UV/chlorine alone and with iodide. The results of acute toxicity of luminescent bacteria indicated more toxic DBPs were produced during UV/chlorine treatment with bromide. Effect-directed analysis (EDA) was applied for the identification of toxicity drivers in the DBPs. Fractionation coupled to toxicity evaluation prioritized the fractions containing the toxic drives, and high-resolution mass spectrometry was used to identify their structures.

关键字 UV/Cl_2；消毒副产物；酚类；效应导向分析；质谱

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

体积排阻色谱联用型碳/氮检测器研制与应用

李文涛、李爱民*
南京大学

溶解性有机质（Dissolved Organic Matter, DOM）在生物地球化学过程以及全球碳/氮循环中扮演重要角色，同时也是饮用水与污水处理过程中重要的去除对象。DOM 的物化性质、环境行为效应和降解转化规律表现出较强的分子量依赖性，而液相体积排阻色谱是分析表征 DOM 组分及其分子量分布的高效便捷方法。由于 DOM 组成结构复杂，缺乏标准品，不同发色团和荧光团具有不同的摩尔吸光系数和荧光效应，现有光谱法检测器仅能对 DOM 进行定性或半定量分析，因此需要以碳氮元素浓度进行绝对定量的液相色谱检测器，即色谱联用型有机碳/有机氮检测器，特别是实现秒级时间分辨率的连续实时监测。

本项目采用“微流控连续流反应、分离和检测”设计思想替代传统“序批式反应和分离”设计，以空间结构的分离换取监测时间的连续，开发基于高效传质与疏水耐压毛细管材料的 CO_2 微流控真空脱除技术，研发基于硼掺杂金刚石薄膜电极材料和深紫外光源的电化学与光化学耦合的高效氧化技术，开发基于高效传质与疏水耐压薄膜材料的增强型 CO_2 选择性电导检测技术，研制具有秒级时间分辨率的高效快速色谱联用型或在线型有机碳检测器。进一步研制基于“光电协同催化氧化→微流控气体脱除→NO_3^-紫外检测”技术路线的色谱联用型有机氮检测器。在现有光谱法检测器基础上，通过构建体积排阻色谱-紫外吸收光谱、荧光光谱、有机碳检测器和有机氮检测器多检测器联用系统，定性与定量分析结合，以多维度分析表征 DOM 的发色团、荧光团、有机碳和有机氮组分的分子量分布，为区域生物圈碳/氮循环过程研究、水体污染溯源防控以及水处理工艺过程控制提供有力技术手段支撑。

关键字 溶解性有机质；有机碳检测器；有机氮检测器；体积排阻色谱

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

电催化含氮污染物高分辨原位表征及资源化利用研究

李盼盼*
四川大学

硝酸盐、氮氧化物等含氮污染物的大量排放会导致水体富营养化、光化学烟雾、温室效应、酸雨等的环境污染。特别是温室效应，研究表明，1 吨 N_2O 排放相当于 310 吨 CO_2 排放产生的温室效应，因此，为实现我国“双碳”目标、能源和环境可持续发展，含氮污染物的绿色去除和循环利用十分重要。硝酸盐是地表和地下水中一种常见的污染物，通过电催化技术将硝酸盐还原为氨不仅缓解了环境污染，氨又能被重新用作肥料或化工中间体，避免了传统合成氨工业的化石能源消耗，是一种“减污降碳”的新方法。硝酸根到氨的转化需经历多步电子转移耦合质子过程，动力学过程缓慢，其中又涉及多种潜在的副产物，此外，由于硝酸根还原的工作电位与水裂解析氢反应非常接近，两者的竞争导致合成氨的法拉第效率偏低[1]。因此，提高硝酸根还原制氨的活性和选择性、降低高过电位下的析氢竞争是目前电催化硝酸根合成氨所面临的主要挑战。基于此，我们聚焦电催化含氮污染物反应中的热点及难点问题，围绕表界面精准设计和原位表征技术[2]，从原子和分子水平揭示表界面结构与本征活性的构效规律[3]，建立含氮污染物资源化利用新技术[4,5]，为含氮废水绿色处理与资源化利用提供了科学与技术基础。

关键字 硝酸盐还原；高分辨电化学分析技术；表界面调控；合成氨

参考文献

1. P. H. van Langevelde, I. Katsounaros, M. T. M. Joule **2021**, *5*, 290.
2. Z. Jin, P. Li, Z. Fang, G. Yu, Acc. Chem. Res. **2022**, *55*, 759.
3. P. Li, Z. Jin, Z. Fang, G. Yu, Energy Environ. Sci. **2021**, *14*, 3522.
4. P. Li, R. Li, Y. Liu, M. Xie, Z. Jin, G. Yu, J. Am. Chem. Soc. **2023**, *145*, 6471.
5. P. Li, L. Liao, Z. Fang, G. Su, Z. Jin, G. Yu, Proc. Natl. Acad. Sci. **2023**, *120*, e2305489120.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

不同涂层电荷的纳米塑料在玉米植物中的叶面吸收及叶根转移

李锐龙*
广西大学

纳米塑料的叶面吸收可能是导致农作物中污染物负荷的一个途径，会对人类的健康构成威胁。但迄今为止，关于陆生植物中纳米塑料的叶面吸收、叶根转运的研究在很大程度上被忽视了。为了探究纳米塑料在叶面的吸收、叶根的转移这一过程，以及纳米塑料表面电荷如何影响其在植物体内的转移和植物生理反应，本研究对玉米（Zea mays L.）幼苗进行了实验，将幼苗的叶片分别暴露在羧基改性聚苯乙烯纳米塑料（PS-COOH）和氨基改性聚苯乙烯纳米塑料（PS-NH_2）的环境中。结果发现，这两种纳米塑料都能积累在玉米叶片上，并能观察到颗粒聚集现象。由于正负电荷之间的静电吸引，带正电荷的 PS-NH_2 比带负电荷的 PS-COOH 更容易附着在叶面上。部分进入叶片的纳米塑料可以通过气孔进入到维管束，然后输送到根部。但是，纳米塑料的聚集限制了它们向根部的转移，特别是 PS-NH_2 的聚集尺寸比较大，限制作用更为显著。研究还发现，与 PS-COOH 相比，PS-NH_2 对光合作用的抑制效果更明显，并且能更强烈地激活植物的抗氧化系统。总而言之，这些发现为评估空气中纳米塑料对植物系统中的影响提供了科学依据。

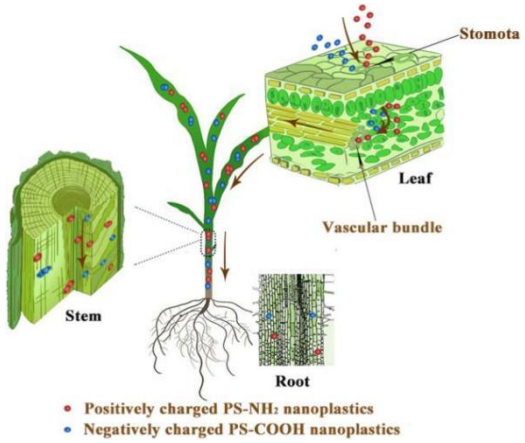


图 1

关键字 纳米塑料

参考文献：

1. Allen, Steve, et al. Atmospheric transport and deposition of microplastics in a remote mountain catchment. Nature Geoscience., **2019**, *12*, 339-344.
2. Wei, Yihua, et al. Secreted salt and hydrodynamic factors combine to affect dynamic fluctuations of microplastics on mangrove leaves. Journal of Hazardous Materials., **2024**, *467*, 133698.
3. Auta, Helen Shnada, Chijioke U. Emenike, and Shahul Hamid Fauziah. Distribution and importance of microplastics in the marine environment: a review of the sources, fate, effects, and potential solutions. Environment international., **2017**, *102*, 165-176.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：报告

基于两亲吸附材料的水体痕量新型污染物原位富集方法的研发和应用

焦伟、周庆*
南京大学

采用新型胶束-乳液聚合法制备了两亲多孔吸附材料作为固相萃取吸附剂，并且为其配套研制了一种可用于现场大体积富集水质中痕量污染物的全自动固相萃取采样装置（LVED）。使用新研制的装置建立了 LVED-HPLC-MS/MS 方法快速测定环境水样中 40 种痕量新型污染物的方法，实验优化了大体积固相萃取条件并进行方法学验证，证明该方法具有良好的线性关系（r^2≥0.992），以及较低的检出限为 0.002~0.10 ng/L。并将此方法用于实际环境水样中新型污染物的现场富集与检测，不同污染物的加标回收率分别为 78.0%~107%，部分污染物实际检测浓度在 0.05~90.5ng/L。该方法是一种简便、快速、高效地现场大体积萃取环境水样中痕量新型污染物的新方法，具有广阔的应用和推广前景。

关键字 新型污染物；痕量富集；原位固相萃取

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

阳离子 MOFs 材料对高锝酸根放射性阴离子的吸附研究

盛道鹏*
苏州大学

为应对能源需求和环境污染双重压力，我国已将发展核电定为国家战略目标，然而乏燃料后处理的压力和挑战空前巨大，成为我国核能安全高效可持续发展的关键因素之一。本人及其所在研究团队基于针对核燃料循环过程中产生放射性废物的富集分离，积极开发新颖的分离材料和方法以获得快速、高效和绿色的放射性核素去污效果，对放射性废液减量化和预防放射性污染扩散具有重要的意义。

关键字 核燃料循环；分离材料；福集

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

多孔富磷芒果生物炭用于水溶液中亚甲基蓝的吸附研究

张旭、徐丽*、李腾辉、欧阳金波、Hamza Shehzad
东华理工大学

含不可降解染料的废水，如果未经适当处理而直接排放，会对附近的水体和整体生态系统产生严重影响。在染料降解或完全去除方面的适当处理[1]，虽然具有挑战性，但却是极其重要的。本研究分别用芒果皮[2]和芒果核[3]为原料，采用氢氧化钾（KOH）和磷酸[4]（H_3PO_4）活化处理，制备了芒果核生物炭（MK）、芒果皮生物炭（MP）、氢氧化钾活化生物炭（MKK，MPK）和磷酸活化生物炭（MKP，MPP），并将其应用于水溶液中亚甲基蓝（MB）的吸附去除研究。利用扫描电子显微镜（SEM）、傅里叶变换-红外光谱（FT-IR）、X-射线光电子能谱（XPS）、Zeta 电位仪和 Raman 光谱分析等表征工具对不同方法制备的生物炭进行了全面分析。

结果表明，相比 KOH，H_3PO_4 活化处理过程中，引入了丰富的极性官能团如羧基（-COOH）、羟基（-OH）和磷酸盐（-O-PO_3）等，这些吸附位点通过静电相互作用、π-π配位、氢键及其它物理-化学相互作用，增强了对染料的吸附能力，从而促进了亚甲基蓝的有效去除。Brunauer-Emmett-Teller（BET）孔径分布数据表明，活化过程显著提高了生物炭的比表面积、孔径和总介孔率，从而增强了对亚甲基蓝（MB）的吸附去除能力。吸附动力学研究表明，拟二阶动力学模型（R^2=0.98）可以很好地拟合吸附动力学数据，而等温吸附研究表明，吸附等温线与 Langmuir 等温线（R^2=0.99）非常吻合。这表明酸和碱活化的生物炭对 MB 的吸附同时存在物理吸附和化学吸附过程。化学改性显著提高了 MP 和 MK 对亚甲基蓝的吸附能力。在 25 ℃，pH=11.0 条件下，MKP 和 MPP 对 MB 的最大吸附量分别为 418.14 mg/g 和 409.43 mg/g。这表明，通过磷酸处理可以显著提高低成本生物炭基吸附剂的吸附能力。该改性方法为有效去除 MB 染料提供了一种新的解决方案。此外，芒果制得的生物炭可作为一种用于有效去除 MB 染料的低成本吸附剂。

关键字 多孔富磷、改性生物炭；吸附；多重相互作用

参考文献：

1. Zhang, Y., et al., Preparation, characteristics and mechanisms of Cd (II) adsorption from aqueous solution by mango kernel-derived biochar. Biomass Conversion and Biorefinery, **2023**. *13*: p. 393-407.
2. Zhang, L., et al., Preparation of biochar by mango peel and its adsorption characteristics of Cd (II) in solution. RSC advances, **2020**. *10*: p. 35878-35888.
3. Xu, J., et al., Modification of biochar by phosphoric acid via wet pyrolysis and using it for adsorption of methylene blue. RSC advances, **2023**. *13*: p. 15327-15333.
4. Liu, L., Y. Li and S. Fan, Preparation of KOH and H3PO4 modified biochar and its application in methylene blue removal from aqueous solution. Processes, **2019**. *7*: p. 891

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

基于 Fe 改性 g-C_3N_4 的电极制备及其对 Cd(II)灵敏检测

江忠有、何丁莹、杨佳政、陈素华*
南昌航空大学环境与化学工程学院， 江西省持久性污染物控制与资源再利用重点实验室， 南昌 330063

环境中镉离子(Cd^{2+})可通过食物链富集危害人体健康，引起肾功能不全和代谢紊乱[1]，因此迫切需要一种能够快速、准确、灵敏的检测土壤和水样中 Cd^{2+}的方法。电化学检测具有高灵敏度、快速响应和小型化的明显优势[2]。本文基于 g-C_3N_4 具有比表面积大、吸附性好、制备简单等优点及导电性能不足的特点，通过铁掺杂氮化碳并进一步采用硝酸刻蚀制备了 EtCN-$Fe_{0.3}$ 的电极材料。铁掺杂和硝酸刻蚀等处理使氮化碳形成了 N 缺陷并且其表面的氨基转化为含氧官能团[3]，如羧基等，提高了电子传递能力和亲水性，同时电极材料 EtCN-$Fe_{0.3}$ 表面的羧基提供了 Cd^{2+}的结合位点。进一步构建三电极体系，采用伏安法(SWV)研究了新电极对 Cd^{2+}的检测性能并优化了影响检测性能的参数，如沉积时间、沉积电位和 pH 值等。在最优检测条件下，本文所构建的电化学传感器具有较宽的线性检测范围（1~500 ppb）、较高的灵敏度（22.34 /ppb•μA^{-1}•cm^{-2}）和较低的检出限（LOD=0.29 ug/L）。另外，该传感器具有优异的抗干扰性能，在 100 ppb 的 Cu^{2+}、150 ppb 的 Pb^{2+}和 150 ppb 的 Hg^{2+}同时存在时，其对 Cd^{2+}（3-100 pbb）的检测信号与离子浓度间线性相关系数 R^2=0.997、灵敏度为 21.56/ppb•μA^{-1}•cm^{-2}、LOD 为 0.56 ug/L。并且，传感器的重现性和稳定性也非常优异。通过对不同样品中 Cd^{2+}的电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)检测，验证了该传感器在实际应用中的可靠性。

关键字 电化学传感器；Cd^{2+}；铁改性氮化碳；选择性检测

参考文献：

1. Song Y, Xu Z, Yu X, et al. Raspberry-like bismuth oxychloride on mesoporous siliceous support for sensitive electrochemical stripping analysis of cadmium[J]. Molecules, **2017**, *22*: 797.
2. Bansod B K, Kumar T, Thakur R, et al. A review on various electrochemical techniques for heavy metal ions detection with different sensing platforms[J]. Biosensors and Bioelectronics, **2017**, *94*: 443-455.
3. Wang N, Cheng L, Liao Y, et al. Effect of Functional Group Modifications on the Photocatalytic Performance of g-C3N4[J]. Small, **2023**, *19*: 2300109.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

双肖特基异质结、界面电场和氧空位协同作用增强 $MXene/ZnS/Fe_3O_4$ 复合材料的压电光催化活性，从而降解氟喹诺酮类药物

林静、朱映西、王敏、曾佳、李舟、李邓、王丹丹*
西南医科大学

本文采用“三位一体”策略，开发了一种高效的压电光催化剂 MZF，该催化剂具有双肖特基异质结、界面电场和 氧空位（V），旨在高效降解 FQ。通过 SEM、EDS、TEM、FT-IR、XRD、VSM 和 TGA 对 MZF 进行了表征，证实了其成功制备。MZF 对 FQ 表现出良好的结合性能，从而防止了降解过程中的自腐蚀。MZF 在不同离子和 pH 条件下表现出稳定的压电和光催化协同效应。这种协同效应使 FQ 的去除率提高了近三倍，超过了单独使用光催化或压电所达到的去除率。此外，MZF 在压电光催化能力和光电性能方面均优于所有测试的单元材料和二元材料。通过分析材料的带隙能量、φ 和电荷转移，证实了 MZF 中的双肖特基异质结，这可以增强载流子的分离。通过 HRTEM 和 AFM 研究了 MZF 中 ZnS 和 Fe_3O_4 的压电性能，揭示了明显的表面起伏和粗糙度，这可能会增强压电效应。MZF 表现出优异的压电性，在 PFM 中以典型的蝴蝶曲线和磁滞回线为特征。 MX、ZnS、Fe_3O_4 之间建立了界面电场，稳定了体系，加速了载流子的产生、分离和迁移。此外，MZF 中大量的 V 有利于电荷捕获，增强了空穴和电子的分离。利用双肖特基异质结、界面电场和 V，MZF 展示了卓越的压电光催化性能，实现了近 100%的 FQ 去除。以加替沙星为代表性 FQ，通过 DTG 模拟和 HPLC-MS 分析了降解产物，提出了可能的途径，包括喹诺酮环断裂、哌嗪环断裂和脱氟。降解产物的毒性降低至接近低毒和无毒水平。抑菌试验证明了 MZF 具有有效的污染物处理能力。最后，1H NMR 分析证实了 FQ 通过 MZF 的压电光催化效应分解为无机小分子化合物，强调了其作为污染物处理非常有前景和高效的催化剂的潜力。

关键字 压电光催化；污染物；肖特基异质结；界面电场；氧空位

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

高原微芒藻种属鉴定及处理制革废水的效果评估

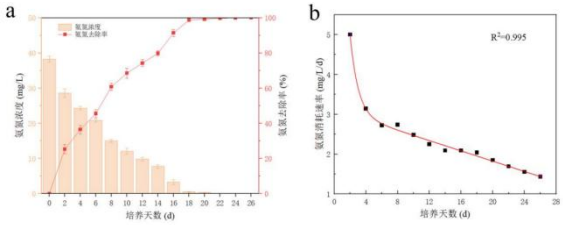
王浩宇、魏延丽、张强英、布多、崔小梅*
西藏大学

近年来，随着皮革产业的迅速发展，制革废水也成为了重要的污染源之一。为促进制革行业朝着绿色可持续的方向发展，大多数企业都积极采取了各种有效手段初步处理制革废水，以减少环境风险[1]。在经过了传统的物理化学处理后，制革废水中大部分的污染物都能得到有效去除，唯有氨氮值长期以来都难以达标。氨氮是主要的营养盐污染物之一，当水体中氨氮值过高时会污染水体，引起富营养化，甚至会导致生态环境失衡，在严重的情况下还会对水生生物产生致命的毒害作用[2~4]。微藻生物处理技术目前已经因成本低、效果好成为研究的热点方向[5~6]。本研究从拉萨市拉鲁湿地水域中分离出一株优势藻株，对其进行分类鉴定、絮凝采收及生长状况研究，并初步探索其对制革废水中氨氮的深度处理能力和机制。具体研究如下：

（1）利用稀释和平板划线法从拉鲁湿地水样中分离筛选出生物量较高的藻株 LL-1，采用显微镜观察其形态，构建基于 18S rRNA 基因序列的邻接法（Neighbour Joining，NJ）进化树，结果显示 LL-1 在进化树上呈现独立分支；利用透射电子显微镜和扫描电子显微镜对该藻株进行种属间形态学差异鉴定，推测其属于微芒藻属（Micractinium sp.）的一个新种，将其命名为 Micractiniumsp.LL-1。并通过全波长扫描确定此藻株的最大特征吸收峰位于 682 nm 处。

（2）将 Micractinium sp.LL-1 接种到制革废水后，结果显示废水中氨氮的浓度快速降低，在第 18 天氨氮的浓度降至 0.48 mg/L，去除率高达 98.7%，到第 22 天显示废水中的氨氮基本被彻底去除。Micractinium sp.LL-1 在 BG11 培养基和制革废水中培养的 26 天内，积累的最大生物量分别为 1641.68 mg/L 和 1461.28 mg/L。在 BG11 培养基中，Micractinium sp.LL-1 的平均比生长速率为 0.14 d -1，平均生物量产率为 81.62 mg/L/d，明显高于制革废水中 Micractinium sp.LL-1 的比生长速率（0.11 d -1）和生物量产率（51.09 mg/L/d）。

将 Micractinium sp. LL-1 接种到制革废水后，发现氨氮的浓度快速降低，到第 18 d 氨氮的浓度降至 0.48 mg/L，去除率为 98.7%。此外，Micractinium sp.LL-1 在 BG11 培养基和制革废水中均表现出较快的生长速率和较高的生物量产率，展示出将微藻培养和废水处理相结合的潜力。工业污染废水治理一直是一个挑战，特别是对复杂的制革废水的处理。本研究选择实际制革厂的出水作为研究对象，利用活体微芒藻进行处理，发现其对制革废水中的氨氮有良好的去除效果。



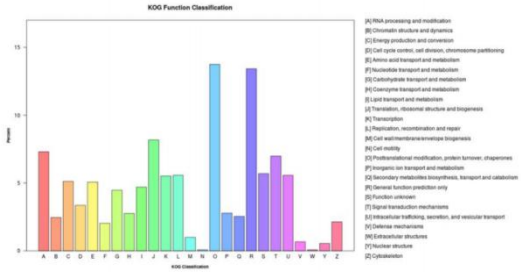


图 1（a）氨氮浓度变化图（b）氨氮消耗速率图　　图 2 转录本的 KOG 注释分类统计图

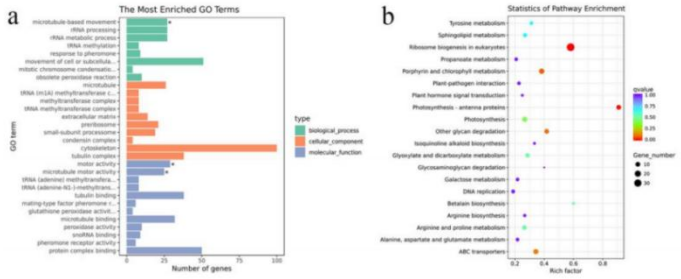


图 3（a）GO 通路富集柱状图；（b）KEGG 通路富集散点图

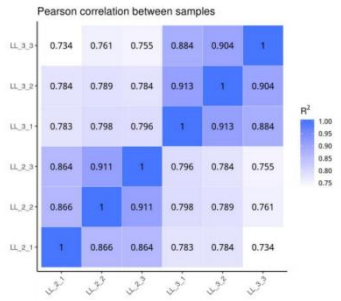


图 4 样品间相关系数热图

关键字 高原微芒藻；种属鉴定；制革废水；氨氮去除

参考文献：

1.Wang Y, Shi B. Chemical Industry and Engineering Progress, **2016**, *35*:1865

2.Nugraha A W, Suparno O, Indrasti N S. International Journal of Recent Technology and Engineering, **2019**.

3.Prabhavathy C, De S. Journal of Hazardous Materials, **2009**,*176*.

4.赵博玮. 哈尔滨工业大学, **2009**.

5.Georgianna R D, Mayfield P S. Nature, **2022**.

6.Forján E, Navarro F, Cuaresma M. Critical Reviews in Environmental Science and Technology, **2015**.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

Yb 掺杂 BiOBr 可见光催化降解盐酸四环素中间产物及机理探究

李霜、邓彩霞、Pran Gopal Karmaker、杨恺婧、唐艺窈、杨秀培*
西华师范大学

盐酸四环素（TCH）是一种典型的抗生素，具有杀菌和抗菌作用。由于抗生素在体内不会完全分解，它们会通过粪便和尿液排出体外。并与金属络合，导致人类畸变、癌症，危害水生系统[1]。光催化是解决这一问题的绿色有效方法。这种具有低能耗、高效、绿色等特性的技术一直被认为是解决有机污染物的有效策略[2]。由于 BiOBr 其合适的带隙、优良的可见光驱动，催化活性强，从而引起了越来越多的关注。

本研究使用简单的一锅合成水热法制备了一系列掺杂 Yb 的 BiOBr，增强了可见光响应，抑制了载流子复合，从而提高了光催化效率。并评价了不同 Yb 掺杂量的氧空位信号增强后 TCH 在可见光作用下的光催化活性。此外，通过液相色谱-质谱(LC-MS)分析了 TCH 光催化过程中的降解中间体，并推断了其主要的降解途径。通过电子自旋共振(EPR)验证了光催化过程中的活性物质，并分析了 TCH 在光催化过程中的降解机理。



图 1 可见光下 $Yb_{0.4}$/BiOBr 对 TCH 的降解机理图

关键字 Yb 掺杂；BiOBr；可见光催化；四环素；中间产物分析

参考文献：

1. B. Xue, C. Yang, M. Chang, D. Liu, J. Alloys Compd., **2023**, *973*, 172850–172860.
2. M. Gros, E. Marti, J.L. Balcazar, ´ M. Boy-Roura, A. Busquets, J. Colon, ´ A. S` anchez Melsio, ´ I. Lekunberri, C.M. Borrego, S. Pons´ a, M. Petrovic, J. Hazard. Mater., **2019**, *378*, 120716–120724.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

自主设计样品架提升微区原位观测样品的重现性

牟磊、朱亚先、张勇*
厦门大学

微区原位显微成像及定量的重现性对于保障污染物分布、赋存和环境行为研究与实际结果之间的一致性至关重要。现有方法在微区显微成像及定量的重现性方面仍有不足，这给准确获取目标物环境行为数据带来挑战。本文利用自建的深紫外多维激光共聚焦显微荧光光谱（LCMFSA）系统，结合新获专利的自制样品架，能够在 0.096 mm^2的观测微区内实现 0.1 mm 精度的定位，通过调节至相同的微区观测坐标，实现每次被观测区域的重现。实验结果表明，使用该样品架对红树林植物根进行显微成像时，显微图像的重合性超过 93%，重现的有效面积较传统定位方法提升了 1.48 倍，且操作时效显著提高。此外，利用该样品架所建的多环芳烃在红树根表定量检测方法的相对标准偏差为 8.7%-12.2%，明显低于未使用样品架时的 14.9%-20.1%。这一结果表明，自主设计的样品架提升、拓展了 LCMFSA 系统的功能和有效性。为进一步深入理解污染物在微区、微结构上的分布、赋存和环境行为，为提升环境监测和污染物的环境风险评估准确性提供了新的技术、方法支撑。

关键字 样品架；微区；显微成像；重现性

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

可视化追踪纳米塑料在秋茄植株中吸收和迁移

雷冰漫、万永杰、朱亚先、张勇*
厦门大学

红树林生态系统已成为微塑料重要的汇。纳米塑料能够通过根吸收进入红树植物体内，对红树林的固碳功能产生潜在风险。然而，纳米塑料如何突破红树根外部屏障进入内部组织并传输至地上组织的过程仍未知。本研究使用新获专利的切片机采集植物组织样品，通过自建激光共聚焦显微荧光光谱分析（LCMFSA）系统，调节针孔孔径以有效减弱植物本底荧光的干扰。在 0.096 mm2 显微面积和 311 nm 空间分辨率下，准确定位了荧光标记 200 nm 聚苯乙烯（PS）微球在秋茄根部和地上组织微结构中的分布，成功揭示了其在秋茄植株中的吸收和迁移路径。实验结果还证实，不同于桐花树，200 nm PS 微球无法穿透秋茄主根的外表皮进入皮层组织。以上结果为评估 MPs 污染对红树林固碳功能的影响提供了新的技术和见的。

关键字 纳米塑料；可视化；定量；吸收；迁移；秋茄

参考文献：

1. B. M. Lei, Y. X. Zhu and Y. Zhang. Combining a tunable pinhole with synchronous fluorescence spectrometry for visualization and quantification of benzo[*a*]pyrene at the root epidermis microstructure of Kandelia obovata. Environ. Sci-Proc. Imp. **2024**.

分会场：28.水环境材料与分析
交流类型：墙报

原位探究聚苯乙烯微塑料与芘/1-硝基芘对中肋骨条藻释放胞内和胞外溶解性有机质的影响

陈西雪、朱亚先、张勇*
厦门大学

藻类释放的胞内和胞外溶解性有机质（I-DOM 和 E-DOM）不仅是全球碳循环的重要组成部分，同时影响着持久性有机污染物和重金属等污染物的环境行为。芘（Pyr）和 1-硝基芘（1-NPyr）因其结构的差异，两者与微塑料（MPs）复合污染对藻类生长特性及对藻类释放 I-DOM 和 E-DOM 的影响亟待明晰。基于课题组自行搭建的激光共聚焦显微荧光光谱分析系统（CLMFSA）结合前期工作建立的荧光比值法[1]，在实验室模拟条件下原位测定了 Pyr 和 1-NPyr 单独暴露及与聚苯乙烯 MP（PS MP）复合暴露时，中肋骨条藻释放的 I-DOM 和 E-DOM 含量和性质变化。结果表明，相较于 Pyr，1-NPyr 对中肋骨条藻释放 E-DOM 和 I-DOM 性质的影响更显著。复合污染暴露时，PS MP 降低了高浓度 Pyr 和 1-NPyr 对 E-DOM 释放的抑制作用和 I-DOM 释放的刺激作用。PS MP 与 1-NPyr 复合污染对中肋骨条藻释放 E-DOM 和 I-DOM 的影响表现为更强的拮抗效应。上述研究结果揭示了 Pyr 和 1-NPyr 单独及与 PS MP 复合暴露下中肋骨条藻整个生长阶段释放的 I-DOM 和 E-DOM 含量和性质变化及差异，并提示在今后的研究中需要更加准确科学的方法用于研究污染物复合暴露对藻类释放 E-DOM 和 I-DOM 的长期影响效应及 E-DOM 和 I-DOM 对污染物环境行为的影响。

关键字 原位；微塑料；芘和 1-硝基芘；中肋骨条藻；胞内和胞外 DOM

参考文献：

1. Chen X X, Zhu Y X, Zhang Y. Effects of polystyrene microplastics on the extracellular and intracellular dissolved organic matter released by Skeletonema costatum using a novel in situ method[J]. Environmental Pollution, **2024**, *359*.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

核酸适体功能化筛选分析策略

张力勤*
北京大学

核酸适体技术发展至今 30 年以来，在药物开发和检测技术领域取得了巨大的进步。以 SELEX 技术为代表的核酸适体体外筛选技术可以在短时间内获得针对各类分子靶标的具有良好亲和力和特异性的核酸适体。然而，在药物开发领域，如何通过体外筛选技术直接获得具有生物活性的核酸适体一直未解的科学问题。

本课题团队开发了一种新的方法，结合了微珠展示技术和体外荧光测定，建立了一个高通量、功能化的筛选系统，用于发现核酸适体药物候选物。这种方法已成功证明其在识别能够靶向细胞内蛋白的适体方面的有效性。在识别这些适体之后，它们被送入细胞内，甚至到达细胞核，以在细胞水平上直接评估和确认它们的治疗潜力。

本方法的一项应用中，我们开发了一个吲哚修饰的 DNA 微珠库，用于针对 HIV-I TAR RNA 和 Tat 蛋白的靶向筛选。这旨在寻找能够阻断 RNA-蛋白复合物功能的适体。利用高通量固相合成，我们分析了 96 个序列的结合和置换效率，识别出能够有效抑制体外相互作用的适体。这些适体通过脂质体系统送入细胞，并在双荧光素酶测定中显示出在低剂量下高达 50% 的抑制率，超越了现有的核酸药物。这种方法突出了适体技术在细胞内靶标开发和递送方面的潜力，展示了一个强大的平台，用于未来的研究。

另外，我们的研究扩展到设计一种体外功能进化策略，用于工程化适体-E3 配体嵌合体，利用泛素蛋白酶体系统选择性降解靶蛋白。使用两个特定的 E3 配体，VHL032 和泊马利多胺，我们旨在降解如 BRD4 和 IRAK4 等突出的靶标。这种方法展示了基于适体的 PROTACs（Apt-PROTACs）的潜力，为细胞内蛋白质的靶向调控提供了一条新途径。

关键字 核酸适体，功能化筛选，蛋白调控，药物筛选

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

药物治疗的活体拉曼成像分析

肖泽宇*
上海交通大学

精准医学的发展推动了分子影像分析技术的发展。拉曼影像因其高特异性的“指纹图谱”信号有望在生物医学展示前景。但是，由于拉曼散射信号弱，传统理论中必需依靠金、银、铜等金属基底材料来增强信号（SERS），而这些基底材料的生物安全性问题阻碍了拉曼影像技术的活体生物医学应用及转化。我们报道了一类特定结构的小分子，不依赖基底，仅通过自身堆叠来增强拉曼信号。所形成的小分子拉曼纳米探针在活体中展示优于 SERS 的成像灵敏度、分辨率和深度。晶体结构及机理研究揭示，这些小分子通过自我堆叠，形成有序的空间排列，使得相邻分子之间能够发生三维电荷转移，以此增强拉曼散射（SICTERS), 为活体拉曼成像提供了安全灵敏的技术。进一步，我们发展了“DNA 碱基模块化”的方法实现了拉曼影像诊疗探针多功能整合时的精确构筑及性能调控。最后，拓展 SICTERS 技术用于术中微小病灶的原位可视化分析、药物剂量分布的动态可视化分析、治疗分子靶标的人体可视化分析，显著提升了肿瘤手术及药物治疗的有效性，为个性化精准诊治提供有转化价值的分析技术。

关键字 活体拉曼影像分析，SICTERS，小分子自增强，DNA 模块化

参考文献

1.Gao S, Zhang Y, Cui K, Zhang S, Qiu Y, Liao Y, Wang H, Yu S, Ma L, Chen H, Ji M, Fang X, Lu W, Xiao Z. Self-stacked small molecules for ultrasensitive substrate-free Raman imaging in vivo . *Nat Biotechnol*, **2024**.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

单分子检测仪器的研制及应用

张春阳*
东南大学

单分子荧光检测是一种新型超灵敏的检测技术，可在单分子水平上对生物分子和生化反应进行研究。与传统方法检测大量分子的平均值相比，单分子荧光检测可测量单个分子的信号，具有灵敏度高、分析时间短、样品消耗少、选择性好等显著优点，是对低浓度靶标分子进行简单、快速定量的理想方法，可达到理论上的检测极限。循环肿瘤细胞（CTC）是癌症诊断、患者分期和治疗评估的重要生物标志物。CTC 由于携带了实体肿瘤的遗传和表型信息，可作为液体活检的检测对象。准确灵敏地分析人体血液中的 CTC 可以为早期癌症转移检测提供了一种非侵入性方法。我们发展了基于 CRISPR/Cas12a 引导量子点可控组装的适配体传感器，将其用于直接测量人体血液中的 CTC。在该方法中，磁珠@激活剂/识别剂双链核壳结构被引入并用于构建捕获和直接检测 CTC 多功能平台，无需额外的 CTC 释放和重新鉴定步骤。该适体传感器具有高灵敏度，对 CTC 捕获效率高达 82.72%，在癌症的液体活检具有广阔应用前景。



Figure 1. Principle of the controllable assembly of a quantum dot-based aptasensor guided by CRISPR/Cas12a for direct measurement of CTCs in human blood

关键字 单分子检测，量子点，循环肿瘤细胞

参考文献

1. Q. Zhang, X. Gao, Y. P. Ho, M. Liu, Y. Han, D. L. Li, H. M. Yuan, C. Y. Zhang, *Nano Lett.*, **2024**, 24, 2360.
2. L. J. Wang, Q. Liu, Y. Y. Lu, L. Liang, C. Y. Zhang, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 2191.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

细胞膜界面分子测量

邱丽萍*
中国科学院杭州医学研究所

细胞膜界面是指细胞膜及靠近膜表面的微观区域，膜界面上的分子对调控细胞生命活动至关重要，其中，膜蛋白占已知药物靶点的 60%以上，而近膜区分子则是分析和调控膜蛋白生物学功能的关键。因此，细胞膜界面分子的精准测量，将对解析疾病机制、推动精准诊疗具有重要意义。我们围绕细胞膜界面精准分子测量这一难题，利用功能核酸的构效关系和可编程性，针对性进行分子识别与荧光传感探针的设计，建立了高特异性、实时动态、空间分辨的化学测量新方法和新技术。主要创新性成果包括： 1）发展了多参数调控的识别探针设计策略，利用细胞微环境特征调控功能核酸的分子识别构象，提高了细胞膜界面分子识别的特异性； 2）建立了微环境限域的三维生物传感平台，通过将功能核酸探针稳定修饰在细胞膜表面，实现了膜界面动态分子过程的有效监测； 3）构建了局域空间分辨的动态分子测量体系，实现了细胞互作界面中膜蛋白分布的实时原位测量，从新的维度解析了细胞信号转导机制。

关键字 功能核酸，细胞膜界面，生物传感，分子识别

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

基于相变的微液滴空腔自塑与细胞应用

王则君*、魏亚楠、黎佳祺
东北大学

仿细胞外基质的半开放式细胞微载体在探究细胞异质性、细胞间信息交流等领域发挥重要作用。针对不同类型的细胞应用，需要设计和优化仿生载体基质，以满足研究需求。然而，现有的开放式细胞载体受限于双水相相分离原理，其基质单一且无法独立控温。对此，我们提出了一种基于油相冻缩自成型的策略，可以制备基质、尺寸均可调的半开口微凝胶细胞载体，实现了多种多糖分子的基质掺杂以及单、多细胞的装载培养[1]。此方法通过对油包水微液滴的温度控制，使其油相冻缩而形成模板，水相预聚液保留在油相模板的凹陷处形成凹液面，继而被光固化形成开口微凝胶。掺杂了细胞外基质主要成分-透明质酸的微摇篮能够对 CD-44 阳性细胞进行选择性培养。此外，利用该策略首次制备出光热纳米材料掺杂的开口微摇篮，使得单细胞独立控温成为可能。这种基于油相冻缩的微摇篮成形策略使半开放式微凝胶能够均匀掺杂任何能够形成单分散水溶液的物质，从而有望用于细胞间通讯、药物递送、及 3D 打印结构单元。

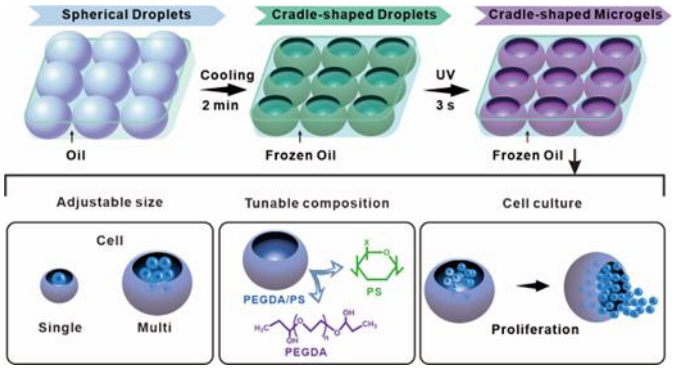


图 1 示意图。

关键字 微液滴，相变收缩，细胞培养，多糖掺杂，控温

参考文献

1. Y. Wei, F. Zhang, J. Li, Z. Qi, J-H. Wang, Z. Wang, *ACS Nano*, **2024**.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

神经化学信号传递的原位分析化学

李鲜婵*
北京大学

囊泡是执行胞吐的主要亚细胞器，发展单囊泡分析化学方法可以为脑神经科学研究提供有力工具。通过有效设计和构筑纳米尖端碳纤维锥电极，我们发展了单囊泡原位电化学计数法，在类神经细胞 PC12 细胞内，实现了单囊泡内包被神经递质多巴胺的定量检测。通过深入研究，我们提出了 IVIEC 的机理：囊泡首先吸附到电极表面，随后膜蛋白从电极表面迁移离开，从而使囊泡磷脂膜与电极接触更紧密，穿越磷脂膜的电场强度增大，继而发生电穿孔。通过形成的穿孔，囊泡内包裹的神经递质就被释放到电极表面从而实现电化学检测。通过与单细胞电流法检测的胞吐中囊泡释放神经递质的量比较，我们发现胞吐过程中大部分囊泡并没有释放出其所包被的全部神经递质，揭示了胞吐并不是“All-or-None”的量子过程。结合这两种方法，进一步研究了顺铂、锌离子、DJ-1 蛋白等对神经信号转导的调控或影响，我们发现这些化学物质对胞吐中囊泡释放神经递质的比例有显著影响。

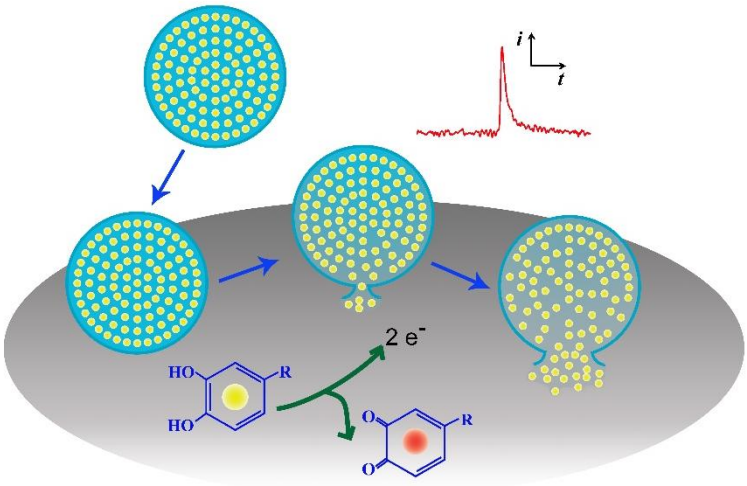


图 1.单囊泡电化学计数法原理图。含有神经递质的囊泡吸附在电极上，在电场作用下发生电穿孔，释放的儿茶酚胺类神经递质在极化电极上氧化产生电流峰。

关键字 囊泡，电化学，神经递质，胞吐，突触

参考文献

1. Li, X., Majdi, S., Dunevall, J., Fathali, H.; Ewing, A. G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 11978.
2. Li, X., Dunevall, J., Ren, L., Ewing A. G. *Anal. Chem.* **2017**, *89*, 9416.
3. Li, X., Ren, L.; Dunevall, J., Ye, D., White, H. S., Edwards, M. A.; Ewing, A. G. *ACS Nano*, **2018**, *12*, 3010.
4. Li, X, Dunevall, J., Ewing A. G. *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 2347.
5. Phan, N. T. N., Li, X., Ewing A. G. *Nat. Rev. Chem.* **2017**, *1*, 0048.
6. Li, X., Dunevall, J., Ewing, A. G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 9041.
7. Yue, Q., Li, X., Wu, F., Ji, W., Zhang, Y., Yu, P., Zhang, M., Ma, W., Wang, M., Mao, L. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 11061.

8. Liu, Y., Du, J., Wang, M., Zhang, J., Liu, C., Li, X. *Front. Chem.* **2021**, *8*, 591311.
9. Yue, Q., Wang, K.,Guan, M., Zhao, Z., Li, X.,Yu, P., Mao, L. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202117.
10. Zhou, J., Zhang, J., Cao, L., Liu, Y.; Liu, L., Liu, C., Li, X. *Chem. Commun.* **2023**, *59*, 3087.
11. Cao, L., Zhang, J., Li, M., Zhou, J., Liu, Y., Liu, C., Li, X., *Anal. Chem.* **2024**.
12. Nan, X.; Wang, M.; Du, J., Liu, Y., Cao, L., Zhou, J., Liu, L., Li, X., *Talanta*, **2024**, 125637.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

基于 La-MOF 聚集诱导电化学发光和共振能量转移双信号免疫传感器用于检测人血清淀粉样蛋白 A

胡圣兰、徐丽欣、黄敏兰、吴裕胜、覃雪敏、邓必阳*
广西师范大学

电化学发光（Electrochemiluminescence，ECL）具有灵敏度高、动态范围宽、背景信号低等优点而受到广泛关注[1]。尽管如此，但采用单信号模式的传统 ECL 检测系统，容易受到内在或外在因素的干扰，从而存在假阳性或假阴性信号[2]。为了有效地避免环境误差，提高可靠性和检测精度，双信号 ECL 免疫传感器因其可以自校准并消除干扰而备受关注。一般来说，双信号 ECL 传感器可分为双电位传感器、双波长传感器和空间分辨传感器。相比之下，电位分辨式 ECL 策略不需要复杂的光学仪器和操作，但双电位式 ECL 传感器的构建需要一对具有不同发射电位的 ECL 发光体[3]，因此选择兼容的阳极和阴极发光材料至关重要。具有聚集诱导电化学发光（AIECL）特性的分子聚集后表现出 ECL 信号增强的现象，因而可以显著提高 ECL 传感器的灵敏度[4]。本研究提出了一种用于检测人血清淀粉样蛋白 A（SAA）的新型双信号 ECL 免疫传感器。该免疫传感器由 g-C_3N_4@AuNPs 作为阴极，镧基金属有机框架（La-MOF）作为阳极，后者利用 AIECL 来克服 H4TBAPy 配体在电极表面的 ECL 强度低的问题。与 H4TBAPy 相比，刚性 MOF 结构大大提高了 La-MOF 的荧光量子产率以及荧光和 ECL 发光。此外，通过碱辅助合成的 g-C3N4@AuNPs 具有超薄的纳米片结构，阴极激发电位低至−0.72 V。采用双信号 ECL 免疫传感器检测 SAA 时，在 100 fg/mL-200 ng/mL 的范围内，阳极和阴极 ECL 信号之差与 SAA 浓度的对数具有良好的线性关系，检测限为 24.5 fg/mL。所构建的免疫传感器可用于人体血清中的 SAA 分析，在临床检测 SAA 方面具有应用潜力。

关键字 金属有机框架，聚集诱导电化学发光，双信号免疫传感器，共振能量转移，生物标志物

参考文献

1. J. Yang, D. Qin, N. Wang, Y. Wu, K. Fang, B. Deng, *Anal. Chem.*, **2023**, *95*, 7045.
2. Y. Ji, S. He, Y. Chen, P. Zhang, J. Sun, Y. Li, K. Kuang, N. Jia, *J. Mater. Chem. B*, **2023**, *11*, 2754.
3. Y. Zhou, Y. Wu, Z. Luo, L. Ling, M. Xi, J. Li, L. Hu, C. Wang, W. Gu, C. Zhu, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, *146,* 12197.
4. S. Hu, L. Xu, Y. Wu, J. Yang, N. Wang, B. Deng, *Chem. Eng. J.*, **2024**, *498*,155470.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

界面自由基分析与应用

李海梅、姜鹏*
武汉大学

活性氧是一类生物活性较强的自由基，常用于肿瘤治疗，包括光动力（PDT）、声动力（SDT）、化学动力（CDT）治疗等。然而，传统活性氧产生机制在应用于生物体系时，往往会受到肿瘤微环境乏氧等因素的限制。最近，我们建立了基于微液滴和纳米乳“固-液”、“液-液”界面分析体系，证实“固-液”和“液-液”界面接触过程中存在电子转移，引起界面的水分子发生氧化还原反应，生成·OH 等活性氧自由基[1,2]。在此基础上，制备了一种人血清白蛋白（HSA）修饰全氟化碳（PFC）纳米乳来构建 PFC-H_2O“液-液”界面体系，通过超声振荡过程中空化气泡的产生和破裂，实现 H_2O 与 PFC 纳米乳之间的高频接触/分离，引起 H_2O 分子中的氧原子失去电子生成·OH。基于该活性氧生成机制，建立了一种新型肿瘤疗法 Contact-electro-dynamic therapy（CEDT）[3]，利用 PFC 纳米乳在超声条件下产生的活性氧自由基，触发肿瘤细胞的免疫原性细胞死亡，促进树突状细胞成熟和巨噬细胞极化，激活 T 细胞介导的抗肿瘤免疫反应来消融肿瘤。由于该疗法产生·OH 的原料是生物体内大量存在的水，因此该疗法可不受肿瘤内源性物质（GSH、H_2O_2 等）的限制。本研究为阐明“固-液”、“液-液”接触过程中自由基的产生机制提供了新的视角，并提供了一种具有发展潜力的肿瘤治疗新方式。

关键字 活性氧，自由基，界面，纳米乳，肿瘤治疗

参考文献

1. Jiang, P.; Zhang, L.; Guo, H.; Chen, C.; Wu, C.; Zhang, S.; Wang, Z. L. *Adv. Mater.*, **2019**, *31*: 1902793.
2. Zhao, Y.; Liu, Y.; Wang, Y.; Li, S.; Liu, Y.; Wang Z. L.; Jiang, P. *Nano Energy*, **2023**, *112*: 10846.
3. Li, H.; Wang, Z.; Chu, X.; Zhao, Y.; He, G.; Hu, Y.; Liu, Y.; Wang Z. L.; Jiang, P. *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, *146*: 12087.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

异质性样本分离分析

张元庆*
中山大学

异质性广泛存在于自然界，异质性样本分离不足导致分析不准确的主要原因是不同样本对于分离试剂的亲和力不同导致，亲和力强的样本被充分富集，而亲和力弱的样本则损失较多。如何在样本界面和分离界面进行有序的位置调控或设计快速友好的化学反应增强被分离样本和分离试剂的亲和力一直是该领域的难题和重点。本研究围绕复杂样本异质性个体分离分析中上述关键科学问题展开，分别为：（1）如何提高分离效能：增强分离试剂与样本结合提升分离效能，基于生物膜上动态间距、快速友好的化学反应进行探针设计以增强分离试剂和异质性样本亲和力,实现高效的分离富集；（2）怎样提升分离分析效率：如何在复杂样本多目标物分离分析时，同时实现高通量、高灵敏度、无处理和不同检测范围的统一；（3）如何提升分离目标物利用率：在得到分离富集样本后，如何设计和制备模拟体内微环境的高通量培养装置进行长周期培养，提高分离目标物的有效利用率。

关键字 微流控芯片，类器官，单细胞分析

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

高效水相室温磷光材料的构建及其磷光分析

陈斌斌*、梁丽雅
华东理工大学

实现水溶液增强的室温磷光（RTP）对于室温磷光材料的溶液相应用至关重要，但这面临着巨大的挑战。在这个工作中，我们首次提出了一种配位诱导结构刚性化策略，以提高水溶液中铝/钪掺杂磷光微立方体（Al/Sc-PMCs）的量子效率（图 1）。[1] 干燥状态下的 Al/Sc-PMCs 表现出几乎不可见的蓝色室温磷光。然而，它们在水溶液中发出强烈的磷光发射，磷光强度增加了 22.16 倍，这与常见的水溶液猝灭磷光相反。磷光效率的增强机制归因于 Al/Sc-PMCs 表面丰富的金属位点（Al^{3+}和 Sc^{3+}离子），它们可以通过强配位与水分子紧密结合。随后，这些配位的水分子可以作为桥联剂通过氢键作用与表面基团结合，从而刚硬化表面基团并抑制其运动，导致非辐射衰变到辐射衰变的转变，这大大提高了 Al/Sc-PMCs 的磷光量子效率。由于良好的水增强磷光性质，所制备的 Al/Sc-PMCs 能够作为磷光探针，实现具有强烈自荧光生物样品中的铁离子的直接精准检测。这项工作不仅开发了一种配位刚性化策略来增强水溶液中的磷光强度，还构建了一种磷光探针来实现复杂生物基质中分析物的可靠和准确测定。

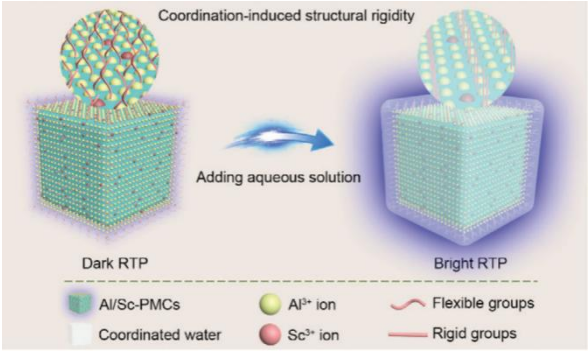


图1 基于配位诱导结构刚性化策略的Al/Sc-PMCs在水中磷光效率增强机制的示意图。

关键字 微立方，水溶液增强磷光，配位诱导结构刚性化，离子传感

参考文献

1. L. Y. Liang, B. B. Chen, Y. T. Gao, J. Lv, M. L. Liu, D. W. Li, *Adv. Mater.* **2024**, *36*, 2308180.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

微气泡驱动药物效应靶标分离分析微系统

杨帆*
广西医科大学

固态微气泡（GB）因自漂浮、廉价和良好的生物兼容性，正逐步发展为一种新兴的分离分析平台。虽然气泡解决了传统磁珠无序聚集、电子干扰、在细胞体系中易被内吞的问题，但如何用于药物效应靶标（如核酸、蛋白质、外泌体、稀有细胞及循环肿瘤细胞 CTC）的分离分析仍面临分离效能低、非特异性吸附强等问题。为此，我们在气泡表面利用 BSA 发展了一种透明的防污纳米涂层（图 1a），经生物正交功能化（Tz 修饰），并结合微阵列芯片，构建防污点击气泡微分离分析微系统。受章鱼吸盘结构启发，我们对 CTC 表面进行了 DNA 工程化修饰，大幅度提高细胞表面 TCO（吸盘）密度（图 1b），从而实现了 CTC 的高效分离捕获（图 1c），且被捕获的肿瘤细胞可以进行 3D 悬浮培养以及原位表型分析（图 1d）。最后我们实现了临床血液样品中 CTC 和外泌体的分离分析，并对肿瘤患者的治疗效果进行监测评估（图 1e）。

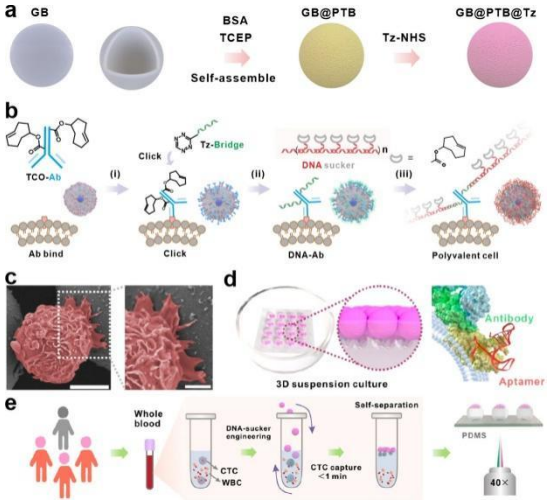


图 1. (a)具有生物正交功能的生物防污气泡的制备。(b)循环肿瘤细胞的表面工程化修饰。(c)点击气泡捕获的循环肿瘤细胞扫描电镜图。（d）循环肿瘤细胞的体外 3D 悬浮培养及表型分析。（e）点击气泡用于临床血液样本的循环肿瘤细胞和外泌体的捕获及检测。

关键字 微气泡，药物效应靶标，生物正交，循环肿瘤细胞，外泌体，阵列芯片

参考文献

1. *ACS Nano*, **2023**, *17(10)*, 9633.
2. *Advanced Functional Materials*, **2024**, *34*, 2310823.
3. *ACS Nano*, **2024**, *18(22)*, 14569.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

基于荧光聚合物点的酶活性与抑制剂分析

孙健*[1]、杨秀荣[2]
1. 新疆医科大学
2. 中国科学院长春应用化学研究所

生物酶是由细胞产生的具有催化活性和高度选择性的一类特殊有机物，它不仅本身可以作为疾病标志物和药物作用靶点，而且可以作为信号产生和放大元件来构建酶联免疫吸附测定等检测方法，因此酶活性的分析检测对于生物分析、疾病诊断和药物筛选等领域研究具有重要意义。但是，目前生物酶活性检测还存在底物和方法单一、灵敏度不足、稳定性差等诸多问题，限制了酶催化功能的生命分析与药物分析应用。

针对这些问题，我们一方面致力于发展基于荧光聚合物点等功能化纳米材料的新颖荧光/比色多模式探针，用于碱性磷酸酶、α-葡萄糖苷酶、乙酰胆碱酯酶等酶活性的检测，在此基础上，将酶活性的荧光/比色多模检测响应过程扩展到相关酶抑制剂的筛选、酶基免疫分析中。另一方面，通过天然酶催化中心的结构仿生，设计金属掺杂聚合物点纳米材料，融合调控荧光和催化性质，进一步提高相关生物活性分子的特异性灵敏检测能力。

关键字 抑制剂药物；荧光分析；酶活性

参考文献

1. D. Wu, Q. Zhao, Y. Wang, B. Zhang, X. Tang, J. Talap, J. Sun, X. Yang, *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 15682.
2. D. Wu, Q. Zhao, B. Zhang, X. Tang, Y. Li, J. Sun, X. Yang, *Anal. Chem.*, **2024**, *96*, 2929.
3. D. Wu, Q. Zhao, J. Sun, X. Yang, *Chin. Chem. Lett.*, **2023**, *34*, 107672.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：报告

配体工程赋能亲水性钙钛矿通过表面电位驱动阴离子交换用于 H_2S 多色传感

王硕、刘易、付海燕*
中南民族大学

近年来，全无机卤化铅钙钛矿纳米晶（$CsPbX_3$ NCs, X = Cl, Br, I）凭借快速阴离子交换（FAE）反应，成为可视化性能卓越的荧光探针，在分析化学等领域掀起了一阵“钙钛矿热潮”。[1] 然而，$CsPbX_3$ NCs 的离子型晶体结构对极性溶剂极为敏感，同时其 FAE 反应策略同质化问题严重，且在水相中 FAE 反应的机制尚不明晰，这限制了 $CsPbX_3$ NCs 的 FAE 反应在生物传感和食品分析等应用场景中的拓展。[2-3] 本项工作借助量子化学计算以及一系列实验表征，阐释了油胺的不饱和 C=C 双键与卤代烷酸的“bridge”效应对配体间 SN_2 反应原位形成两性离子配体调控机制。我们发现，以油胺和 5-溴戊酸为配体对可制备水稳定且分散的 $CsPbBr_3$ NCs，不仅拥有 100%的 PLQY 以及较高的表面正电荷，更能够通过表面点位驱动卤离子的吸附以及空位扩散过程，进而促进 FAE 反应。随后，我们设计一种隐性阴离子交换剂（AgI NPs），在模板分子（H_2S）存在的情况下，它可释放大量 I^-，从而启动 $CsPbBr_3$ NCs 的 FAE 反应。据此，我们以 H_2S 作为经典分析案例探讨该方案在生物传感和食品分析中的应用潜力。基于波长位移和荧光比色的双读方法具有良好的选择性与抗干扰能力，检测限分别低至 0.595 mM 和 0.678 mM，并实现了生物体液样本（血清和唾液）以及食品样本（虾肉和鸡肉）中 H_2S 的可视化检测。

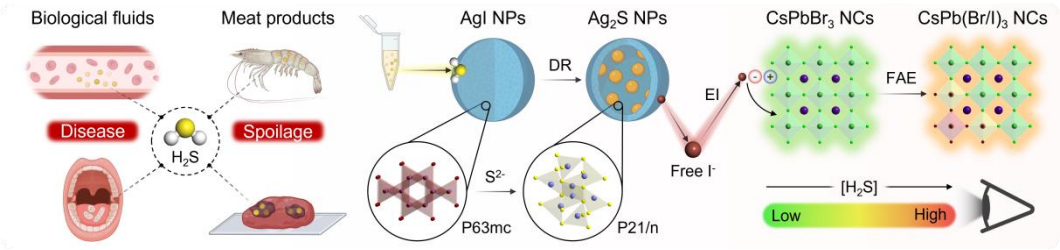


图 1 亲水性钙钛矿通过表面电位驱动 FAE 反应实现生物和食品样品中 H2S 多色传感的示意图。

关键字 钙钛矿，配体工程，阴离子交换，硫化氢，可视化检测

参考文献

1. Y. P. Huang, Y. F. Feng, F. M. Li, et al., *Trac-Trend Anal. Chem.*, **2021**, *134*, 116127.
2. X. Y. Jin, K. L. Ma, H. F. Gao, *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, *144*: 20411.
3. Z. Y. Wei, S. Wang, Q. Xu, S. et al., *Anal. Chem.*, **2023**, *95*: 11695.

分会场：29.分析药学与仪器
交流类型：墙报

基于纳米酶电化学传感生物标志物与体内活性物质分析研究

黄胜峰*、陈僖钰、刘绮雯、黄洋、陈嘉媚、梅雨丽
广州医科大学

纳米酶的高比表面积与体积比使其在催化反应中表现出优异的活性。与传统酶相比，纳米酶在高温、极端 pH 值和有机溶剂中表现出更好的稳定性。通过改变纳米酶的组成和结构，可以调节其催化特性，以适应不同的检测需求。基于纳米酶的电化学传感器在生物标志物和体内活性物质的分析中具有显著的优势，能够提供高灵敏度和高选择性的检测方法。本研究一方面开发了多种高性能的纳米酶电化学生物传感器，用于神经退行性相关疾病标志物（tau 蛋白以及 BACE 蛋白）的快速、灵敏检测，用于阿尔茨海默病的早期诊断。并且成功应用于实际临床样本分析，在区分潜在患者（高龄）与健康人群中体现了一定的潜力。此外，我们开发了纳米酶电化学传感器用于细胞裂解液中过氧化氢的快速灵敏检测，并建立药物治疗细胞模型。通过检测治疗过程中的过氧化氢浓度变化，可实现药物治疗疗效的快速评价。随着分析技术的不断进步，纳米酶电化学传感技术有望在临床诊断、疾病监测和个性化医疗中发挥更大的作用。

关键字 纳米酶，电化学检测，生物标志物，体内活性物质，疾病诊断

参考文献

1. X. Chen, Y. Huang, S. Yang, S. Wang, L. Chen, X. Yu, N. Gan, S. Huang, *Biosens. Bioelectron.*, **2024**, *266*, 116738.
2. X. Chen, S. Yang, H. Shao, S. Wang, J. Xie, Q. Liu, Y. Huang, N. Gan, S. Huang, *Chem. Eng. J.* **2024**, *498*, 155897.
3. R. Tang, S. Wang, H. Shao, S. Yang, Q. Liu, X. Chen, Y. Huang, N. Gan, S. Huang. *Sensor Actuat. B- Chem.*, **2024**, *410*, 135714.
4. Q. Liu, Y. Huang, S. Wang, S. Yang, Z. Jiang, S. Huang, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, *1320*, 342996.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

中国 6 个不同产地甘草的 20 种氨基酸、热重参数、微量元素等的熵因子分析（EFA）和系统聚类分析（SCA）

周利兵*、谭丽丽
广西科技师范学院

本研究旨在为甘草的质量控制和市场定位提供理论和实践支持，也为甘草的营养、健康和分类研究提供科学依据和研究意义。选取了来自内蒙古鄂尔多斯东胜区、内蒙古呼和浩特回民区、内蒙古包头固阳县、新疆巴彦淖尔市临河区、新疆喀什地区和新疆伊犁伊宁县的六种甘草作为研究对象，测定了它们的燃烧热、燃烧稳定性、脂肪、粗纤维、灰分含量、微量元素和氨基酸含量。本研究基于包括燃烧热、可燃性（甘草燃烧稳定性）、脂肪含量、氨基酸含量、灰分含量、粗纤维含量和微量元素含量等多个指标的营养指标，通过灰色模式识别（GPR）、熵因子分析（EFA）和系统聚类分析（SCA）构建了六个甘草样品的综合评价体系。结果表明，六种甘草的燃烧热含量在 850.69 至 38072.94 J/g 之间，平均含量为 15033.6444 J/g。六种甘草样品的燃烧稳定性排序为：新疆伊犁伊宁县的甘草>内蒙古巴彦淖尔市临河区的甘草>内蒙古鄂尔多斯东胜区的甘草>内蒙古呼和浩特回民区的甘草>新疆喀什地区的甘草>内蒙古包头固阳县的甘草。脂肪含量（%）在 0.34%至 1.31%之间，平均含量为 0.7418%。灰分含量（%）在 0.07%至 6.22%之间，平均含量为 3.1806%。粗纤维含量（%）在 17.04%至 42.04%之间，平均含量为 29.9614%。通过熵因子分析，基于包括燃烧稳定性、燃烧热、灰分、粗纤维、脂肪、铝、钡、铬、铜、铁、钾、锂、镁、锰、钠、镍、锶、锌、磺基丙氨酸、天冬氨酸、蛋氨酸亚砜、苏氨酸、丝氨酸、谷氨酸、甘氨酸、丙氨酸、半胱氨酸、缬氨酸、蛋氨酸、异亮氨酸、亮氨酸、酪氨酸、苯丙氨酸、组氨酸、赖氨酸、铵峰、精氨酸和脯氨酸等 38 个变量，六种甘草样品的质量排序为：内蒙古鄂尔多斯东胜区的甘草>内蒙古包头固阳县的甘草>内蒙古呼和浩特回民区的甘草>新疆伊犁伊宁县的甘草>内蒙古巴彦淖尔市临河区的甘草>新疆喀什地区的甘草。在 38 个变量的多指标评价中，质量最高的甘草为内蒙古鄂尔多斯东胜区的甘草，质量次高的为内蒙古包头固阳县的甘草。系统聚类分析（SCA）的结果表明，甘草样品可分为四个不同的类别，38 个变量也可分为四组。本研究对甘草质量的多指标测定和综合评价具有重要的理论和实践意义。本研究为甘草的营养、健康和分类研究提供了科学依据和研究意义。

关键字 甘草，热重分析，熵因子分析，氨基酸，微量元素

参考文献

1.Zhou L, Jiang C, Zhang Y. COMBUSTION STABILITY AND METROLOGICAL ANALYSIS OF MULTIPLE INDEXES OF 5 KINDS OF RICE[J]. *FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN*, **2022**, 31(6):5499.

2.Zhou L, Jiang C, Lin Q. ENTROPY ANALYSIS AND GREY CLUSTER ANALYSIS OF 8 CHINESE MEDICINAL HERBS[J]. *FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN*, **2022**, *31(8B)*:9045.

3.Zhou L, Jiang C, Lin Q. Entropy analysis and grey cluster analysis of multiple indexes of 5 kinds of genuine medicinal materials[J]. *SCIENTIFIC REPORTS*, **2022**, *12(1)*:6618.

4.Zhou L, Jiang C, Zhong T, et al. Entropy analysis and grey correlation coefficient cluster analysis of multiple indexes of 5 kinds of condiments[J]. *FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY*, **2022**, *42*:e81122.

5.Zhou L, Jiang C, Shi J, et al. GRAY PATTERN RECOGNITION AND GREY SYSTEM CLUSTER ANALYSIS OF MULTI-INDEXES OF FIVE KINDS OF TEA[J]. *FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN*, **2022**, 31(3):2510-2521.

6.Zhou L, Zhang Q. MULTI-INDEX CHEMOMETRICS ANALYSIS OF FIVE KINDS OF TEA PRODUCED IN YUNNAN, CHINA[J]. *FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN*, **2022,** *31(10)*:10342-10354.

7.Zhou L, Hou S. Multi-indicator analytical study of 18 trace elements and fat in 5 beans based on entropy analysis (EA) and gray pattern recognition (GPR)[J]. *INTERNATIONAL JOURNAL OF FOOD PROPERTIES*, **2024**, *27(1)*:616-631.

8.Zhou L, Zhang Q. Multiple indicators metrological analysis for 5 kinds of tea produced in Yunnan, China[J]. *FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY*, **2022** ,*42*:e70922.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

配体“开启”HIV-1 RNA 模板铜纳米簇荧光用于配体/RNA 相互作用分析

亓亮*、张佳运、刘巧宁
陕西科技大学 生物与医药学院

配体/RNA 相互作用分析能够为开发 RNA 为靶标的小分子提供基础。在本研究中，首先使用两种 HIV-1 RNA 靶标，即逆转录反应元件（RRE）RNA 和反式激活响应元件（TAR）RNA 作为新模板制备了荧光铜纳米簇（CuNCs），发现以单独 RNA 为模板的 CuNCs 荧光强度较弱。使用新霉素作为模型药物，以新霉素/RNA 模板的 CuNCs 荧光则可以增强（约 6 倍）。因此，通过观察使用 RNA 制备的 CuNCs 在加入配体前后的荧光变化，开发了一种配体/RNA 相互作用新方法。优化了新霉素/RNA-CuNCs 的制备参数。使用紫外-可见光谱、荧光光谱和高分辨率透射电子显微镜对制备的 CuNCs 进行了表征。使用所提出的方法研究了新霉素和三种试验药物（阿米卡星、庆大霉素和妥布霉素）与 RNA 的相互作用，并通过理论计算获得了结合常数和结合位点数。本研究为配体/RNA 相互作用分析提供了一种新思路。

关键字 配体/RNA 相互作用；荧光铜纳米簇

参考文献

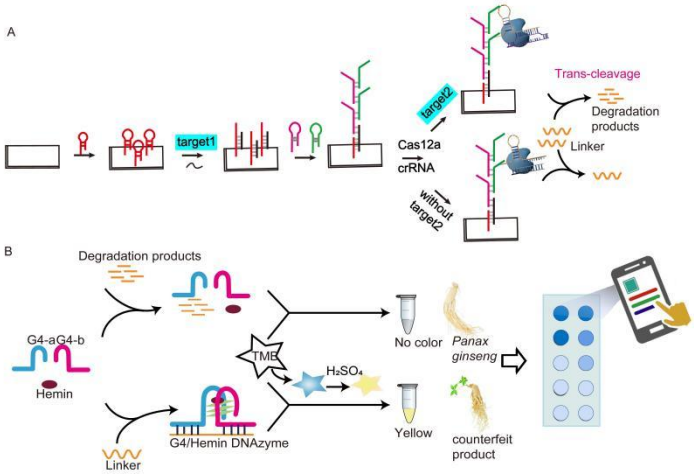
1. H.S. Haniff, L. Knerr, X. Liu, G. Crynen, et al, *Nat. Chem.,* **2020**, *1*, 952.
2. Z. Qing, X. He, D. He, et al. *Angew. Chem. Int. Edit.,* **2013**, *37*, 9719.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

基于 CRISPR/Cas12a 的双靶标核酸检测芯片用于人参配方颗粒的可视化分子鉴定

张玥*
南京中医药大学

中药配方颗粒具有携带方便、服用简单、易于调制、适合工业化生产的特点，目前已广泛应用于临床治疗，然而其品种鉴定与质量监管成为制约配方颗粒产业进一步推广和发展的关键瓶颈之一。尽管目前已有研究开发了一系列 DNA 分子鉴定方法以实现配方颗粒的基源鉴定，这些方法大多依赖于大型设备，难以实现市场中的现场实时分析。为此，本研究利用功能性 DNA 的显色催化性能，开发了一种基于 CRISPR/Cas12a 的可视化核酸检测芯片，用于人参配方颗粒的便携式现场鉴定。同时，为了防止近缘物种的假阳性信号，设计双靶标激活体系，选择两段人参特异性表达的 DNA 片段作为靶标，在靶标 1 的触发下，芯片表面发生杂交链式反应，使得 CRISPR/Cas12a 系统得以结合在表面；之后在靶标 2 的激活下，切割分解 Linker DNA，导致 G-四链体组装失败，阻碍显色反应的正常进行，从而产生双靶标响应的比色信号，进一步结合手机读色软件，实现对于人参配方颗粒的可视化便携式分析。通过双重靶标的设计以及信号放大模块的融合，该鉴定芯片有效提高了核酸检测的灵敏度与特异性，为中药配方颗粒的现场鉴定提供了一种便携可视化的分析工具，对于配方颗粒的质量控制与用药安全具有重要意义。



关键字 核酸探针，药物分析，中药鉴定

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

HPLC-ELSD/CAD 测定黄芪中黄芪甲苷含量的对比分析

孙元社*、黄高明、李彤
依利特(苏州)分析仪器有限公司

黄芪中的主要活性成分为黄芪多糖、黄芪皂苷和黄芪异黄酮,目前主要采用黄芪皂苷中的黄芪甲苷，作为评价黄芪药材质量优劣的标准。作为黄芪主要活性成分的黄芪甲苷，具有调节机体免疫力、保护组织器官、降低血糖、抗细胞凋亡和抗炎抗病毒等多方面的药理作用。2020 版《中国药典》修订了黄芪中黄芪甲苷的检测方法，并且其检测限度值从 2015 版的黄芪甲苷得高于 0.040%，变成了黄芪甲苷得高于 0.080%。本文采用配置蒸发光散射检测器(ELSD)或电喷雾检测器(CAD)两种通用型检测器的高效液相色谱系统进行对比实验。实验方法：在依利特 EClassical 3200L 高效液相色谱系统上，采用 Supersil ODS2 5 μm 120Å, ID 4.6×150 mm 色谱柱，以乙腈/水=32/68 为流动相，流量为 1.0 mL/min，柱温设置 35℃；配置的 D3270 蒸发光散射检测器雾化温度设定为 35℃，漂移管蒸发温度设定 45℃；esa Corona 电喷雾检测器雾化温度为室温，蒸发温度为 35℃。配制黄芪甲苷对照品溶液浓度为 0.5mg/mL，进样量分别为 1μL、2μL、3μL、5μL、7μL、10μL，黄芪供试品参照 2020 版中国药典中黄芪的前处理方法进行实验，进样量为 20uL。结果显示：ELSD 和 CAD 两种检测器所得双对数拟合曲线线性相关性均良好，相关系数 r 分别为 0.9991 和 0.9995；如下图 1 和图 2，实际黄芪中黄芪甲苷含量检测结果分别为 0.075%和 0.080%，结果基本一致；但是 CAD 检测器灵敏度明显高于 ELSD 检测器。

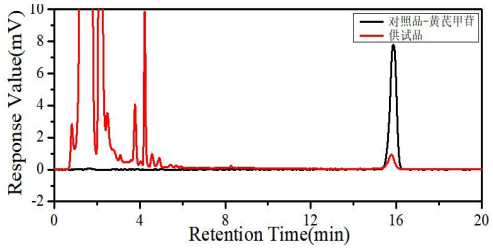


图 1　ELSD 检测色谱图

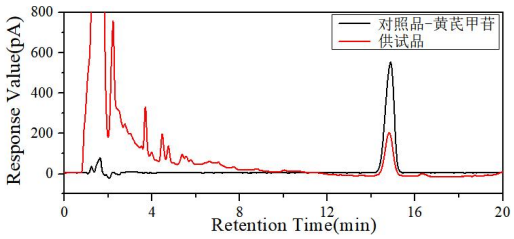


图2　CAD检测色谱图

关键字 黄芪甲苷，液相色谱，蒸发光检测器，电喷雾检测器

参考文献

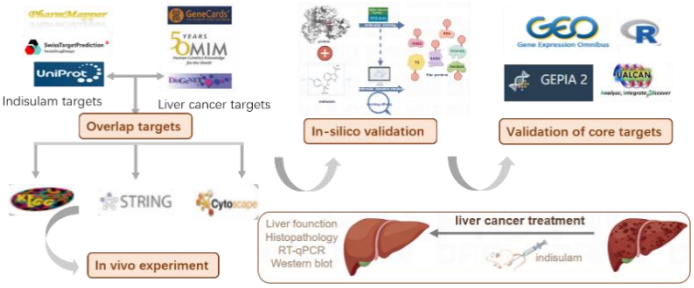
1. 周春玲,鲁静.高效液相色谱-蒸发光散射检测测定黄芪中黄芪甲甙的含量[J].中国中药杂志,**2000**, *(03)*:38.
2. 国家药典委员会.中华人民共和国药典 2020 年版.一部[S].北京：中国医药科技出版社,**2020** :315.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

揭示吲地磺胺抑制肝癌进展的分子机制：网络药理学、生物信息学和实验研究的综合应用

迟宝珠*、张秋梅、田苗苗、王一茗、庹浔
南昌大学

吲地磺胺（Indisulam，IDM），一种分子胶，是具有芳基磺酰胺结构的抗肿瘤药物。IDM 通过促进 RNA 结合基序蛋白 39（RBM39）的泛素化和降解来抑制癌细胞的增殖。因此，在癌症的治疗中，IDM 是一种有前景的治疗药物，但其对癌症的具体作用机制尚不清楚。本研究旨在通过网络药理学、分子对接、生物信息学研究 IDM 治疗肝癌的潜在作用靶点、信号通路和作用机制，并在实验中验证其核心靶点和通路。首先通过 PharmMapper 和 Swiss Target Prediction 数据库获取了 285 个 IDM 的作用靶点。利用 GeneCards、DrugBank 和 OMIM 数据库检索获得有关肝癌的靶点。再通过 Venn Diagram 网络工具取 IDM 和“liver cancer”的交集靶点，获得了 260 个与 IDM 相关的治疗肝癌的靶点。应用 Cytoscape 软件构建蛋白质相互作用的网络图，并筛选出 AKT1 等多个核心靶点，这些靶点可能在 IDM 的抗肝癌中起着关键作用。KEGG 通路分析表明，IDM 可能通过调节癌症相关通路、脂质代谢和动脉粥样硬化以及磷脂酰肌醇 3-激酶/蛋白激酶 B（PI3K-Akt）等信号通路来抑制肝癌的发展。体内外实验结果支持了这一发现。分子对接研究显示 IDM 与这些核心靶标具有较高的结合亲和力，而分子动力学模拟进一步证实了 IDM 与这些靶点之间的稳定相互作用。此外，我们通过对 GEO 数据库中与肝癌相关的数据集（GSE11996 和 GSE62232）进行差异表达分析，识别了关键的上调和下调基因，从而验证了网络药理学和实验分析结果。由此可见，IDM 通过作用于多个靶点和信号通路对肝癌发挥治疗作用，这为未来的临床应用和新药开发提供了有价值的参考。



关键字 吲地磺胺；肝癌；分子机制；网络药理学；计算模拟

参考文献

1. Y. Xu, S. Spear, Y. Ma, M.P. Lorentzen, M. Gruet, F. McKinney, Y. Xu, C. Wickremesinghe, M.R. Shepherd, I. McNeish, H.C. Keun, A. Nijhuis, *Cell Rep.* **2023**, *42*, 113307.
2. C. Hou, X. Wu, R. Shi, X. Xing, S. Tian, M. Eléouët, C. Qiao, J. Ma, G. Xu, *Biomed. Pharmacother.* **2024**, *172*, 116259.
3. D. Mossmann, C. Müller, S. Park, B. Ryback, M. Colombi, N. Ritter, D. Weißenberger, E. Dazert, M. Coto-Llerena, S. Nuciforo, L. Blukacz, C. Ercan, V. Jimenez, S. Piscuoglio, F. Bosch, L.M. Terracciano, U. Sauer, M.H. Heim, M.N. Hall, *Cell,* **2023**, *186*, 5068.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

甲钴胺 HPLC 到 UHPLC 分析方法的转移研究

黄晓冬、孙元社*、李彤
依利特(苏州)分析仪器有限公司

受液相色谱仪器和色谱填料的创新驱动，超高效液相色谱技术的使用呈现出一种持续增长的趋势。通常情况下，HPLC 分析方法转换到 UHPLC 系统的方法一般是使用更短更细的色谱柱装填更小粒径的色谱填料，在保持分离度不变的前提下，提高分析速度。

甲钴胺又称维生素 B12，是一种对人体至关重要的水溶性维生素。它在人体内的作用机理极为复杂，其对神经组织具有良好的传递性，可促进核酸-蛋白-脂肪的代谢，可修复损伤了的神经组织。临床上对糖尿病神经障碍、多发性神经炎等周围神经疾病有明显疗效[1]。目前对甲钴胺含量测定的研究报告相对较少[2-3]，本文研究了甲钴胺从 HPLC 到 UHPLC 的方法转换，在 HPLC 系统上采用 ID4.6mm×250mm 的色谱柱转换到 UHPLC 上采用 ID2.1mm×50mm 的色谱柱，进样量由 20μL 转换到 2μL，流速从 1.0mL/min 降到 0.2mL/min，同时调整梯度曲线，使甲钴胺的分析时间由原来的 50min 减少到 10min，分析时间缩短了 5 倍，分离度好，灵敏度高，大大提高了分析效率。

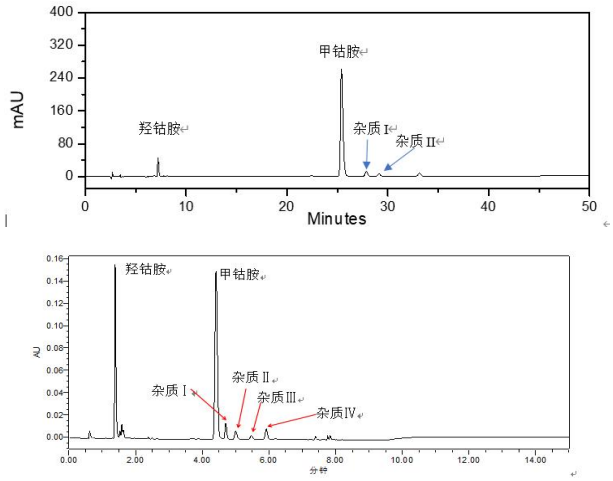


图 1 甲钴胺分别在 HPLC 与 UHPLC 系统上的典型分离色谱图

关键字 甲钴胺，高效液相色谱，超高效液相色谱，方法转移

参考文献

1. 陈家伦，宁光，罗邦尧. 甲钴胺治疗糖尿病神经病变临床观察[J]. 中国内分泌代谢杂志，**1997**，*13(4)*:197.
2. The Japanese Pharmacopoeia[S]. Vol 16.2012:1066.
3. 谢丽华，陈乔，陈晓艳. HPLC 测定甲钴胺中的有关物质[J]. 河北化工，**2011**，*34（3）*:51.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

同步热分析-质谱联用仪在药物分析中的应用

马小婷*、李春晖
吉林大学

近年来热分析方法在药物制剂研究中备受关注。热分析技术在药物含水量、理化性质、纯度分析、多晶及亚稳态分析、药物稳定性和储藏等相关分析中发挥重要作用。其中根据药物的热分解过程，进行动力学研究并分析中间态产物是进一步研究药物性能的关键。同步热分析技术将热重分析与差热分析或差示扫描量热法结合为一体，在程序控温下测量物质的物理、化学变化与温度之间的关系。同步热分析-质谱联用是热分析技术与质谱技术的串联，即样品加热过程中，除了产生热分析信号外，还对释放的气体进行分析，具有用量少、方法灵敏、快速的特点。本文归纳整理了同步热分析技术在药物分析中的常见方法，探讨同步热分析-质谱联用仪在药物分析中的应用。有益于开发相关同步热分析-质谱联用技术，为药物质量分析提供新的途径，进一步助力药品研发、质量分析和控制。

关键字 热分析，热稳定性，药物，应用

参考文献

1. Marek Wesolowski, Edyta Leyk, *Pharmaceutics*, **2023**, *15*, 1596.
2. Hongji Liu, Henry H. Y. Tong, Zhengzheng Zhou, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2022**, *147*, 12947.
3. Marta Worzakowska, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2017**, *127*, 2025.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

吴茱萸中乙酰胆碱酯酶抑制剂的综合筛选、优化提取、靶向分离及生物活性评价

梁佳祺、张语迟*、张雨桐
长春师范大学

目的：对吴茱萸中乙酰胆碱酯酶抑制剂进行精准筛选、多目标优化提取、高纯度分离及多角度活性验证

方法：为了筛选吴茱萸中的亲脂性生物碱活性成分，我们改进并优化了超滤系统。针对传统响应面方法在多目标筛选中的局限性，我们将响应面方法与非支配排序遗传算法 III 相结合，以实现这些活性成分的最佳提取。高速逆流色谱用于两相溶剂系统分离活性成分。核磁共振波谱证实了化合物的结构，分子对接和动力学模拟评估了化学成分对乙酰胆碱酯酶的抑制作用。进一步探究化合物对谷氨酸诱导的 PC12 细胞凋亡的神经保护作用。

结果：利用优化的超滤系统，得出三种化合物（去氢吴茱萸碱、吴茱萸碱和吴茱萸次碱）对乙酰胆碱酯酶表现出很强的抑制作用，并且随着酶浓度的增加而增加。使用响应面结合非支配排序遗传算法 III 提取目标活性化合物，同时提高了三种活性成分的产量。活性成分经高速逆流色谱分离，纯度超过 95%。使用分子对接和分子动力学模拟了活性成分与乙酰胆碱酯酶之间的相互作用，在分子水平上检测到的化合物活性与超滤结果一致。三种乙酰胆碱酯酶抑制剂对谷氨酸诱导的 PC12 细胞凋亡具有显著的保护作用。

结论：本研究实现了多靶点化合物提取和亲脂生物碱超滤筛选的系统优化，以及制备和活性验证，为从亲脂性生物碱中开发乙酰胆碱酯酶抑制剂奠定了基础。

关键字 吴茱萸，乙酰胆碱酯酶抑制剂，多目标提取，活性筛选与验证，高速逆流色谱

参考文献

1. L. Jose, F. Severino. Self-adaptive polynomial mutation in NSGA-II. *Soft Comput*. **2023**, *27*, 17711,

2. T. Zhao, G. Su, S. Wang, et al. Neuroprotective Effects of Acetylcholinesterase Inhibitory Peptides from Anchovy (Coilia mystus) against Glutamate-Induced Toxicity in PC12 Cells. *Agric Food Chem*. **2017**, *65*, 11192.

3. M. Wang, Y. Li, M. Cui, et al. Barium alginate as a skeleton coating graphene oxide and bentonite-derived composites: Excellent adsorbent based on predictive design for the enhanced adsorption of methylene blue. *J Colloid Interface Sci*. **2022**, *611*, 629.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

中药苦参中抗阿尔茨海默病活性成分的筛选及制备研究

张雨桐、张语迟*、梁佳祺
长春师范大学

目的：阿尔茨海默症（AD）是一种不可逆的、多因素的神经退行性疾病[1]。目前广泛使用于治疗 AD 的药物大多为乙酰胆碱酯酶（AChE）抑制剂，但这些药物大多存在半衰期短或有较严重的外周胆碱能系统损伤等缺点，长期服用会严重影响人体健康。通过抑制 AChE 活性来维持胆碱能传递神经递质乙酰胆碱的水平是治疗 AD 最有效的方法。苦参产地众多，黄酮类成分具有潜在抗阿尔兹海默症[2-3]。以 AChE 作为靶点，对苦参进行筛选、分离、提取优化、活性验证，实现中药活性物质的高通量筛选，为开发抗 AD 药物提供实验数据。

方法：以 AChE 作为生物靶分子，采用亲和超滤-质谱法筛选苦参中潜在的活性成分。首次采用正交试验结合 NSGA-III 多目标遗传算法优化活性成分的提取工艺。在活性成分分离方面，五个活性成分极性分布不同，使用单一溶剂体系不能全部分离，而选用三个溶剂体系分离五个活性成分的同时也能提高分离纯度。最后酶抑制动力学和分子对接技术进一步验证这些活性成分的潜在抗 AD 的作用。

结果：亲和超滤-质谱法筛选出了苦参醇 I、苦参酮、槐属二氢黄酮 G、异苦参酮、苦参醇 E 五个活性成分。三个溶剂体系正己烷/乙酸乙酯/甲醇/水（4.0/5.0/4.0/5.0，v/v/v/v）、正己烷/乙酸乙酯/甲醇/水（5.0/5.0/6.0/4.0，v/v/v/v）、正己烷/乙酸乙酯/甲醇/水（4.9/5.1/5.7/4.3，v/v/v/v）分离结果表明，五个化学成分纯度分别为 72.88%、98.55%、96.86%、96.74%、95.84%。分子对接技术和酶抑制动力学进一步验证了这些活性成分的抑制作用，其中苦参醇 E 的 IC_{50} 为 172 μM，对 AChE 的抑制效果最好。

结论：本研究有助于阐明苦参中五种活性成分对 AChE 的作用机制，为抗 AD 等治疗药物的筛选与开发提供了一定的理论基础。

关键字 苦参，阿尔茨海默症，乙酰胆碱酯酶抑制剂，NSGA-III 多目标遗传算法

参考文献

1. S. Maniam, S. Maniam. Screening Techniques for Drug Discovery in Alzheimer's Disease. *ACS Omega*. **2024**, *9*, 6059.

2. H A. Jung, T. Yokozawa, B W. Kim, J H. Jung, J S. Choi. Selective Inhibition of Prenylated Flavonoids from *Sophora flavescens* against BACE1 and Cholinesterases. *Am J Chin Med.* **2010**, *38*, 415.

3. P N T. Thang, V H. Tran, T A. Vu, N N .Vinh, D T M. Huynh, D T Pham. Determination of Antioxidant, Cytotoxicity, and Acetylcholinesterase Inhibitory Activities of Alkaloids Isolated from *Sophora flavescens* Ait. Grown in Dak Nong, Vietnam. *Pharmaceuticals.* **2022**, *15*, 1384.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

延胡索中乙酰胆碱酯酶抑制剂的综合筛选、优化提取、靶向分离及生物活性评价

梁佳祺、张语迟*、张雨桐
长春师范大学

目的：建立延胡索中乙酰胆碱酯酶抑制化合物的筛选、分离、提取优化和活性评价方法，实现中药活性物质的高通量筛选，为抗阿尔兹海默症药物的开发提供实验数据。

方法：以乙酰胆碱酯酶为靶分子，采用受体配体亲和超滤结合虚拟计算机实验，筛选和评价延胡索中抑制剂的活性。采用响应面结合非支配排序遗传算法 III 技术优化活性成分的提取[1]，并采用半制备高效液相色谱法分离纯化活性化合物。最后，通过酶反应动力学验证了它们对乙酰胆碱酯酶的抑制作用及其作用机制[2]。

结果：黄连碱、延胡索甲素、小檗碱、巴马汀、盐酸小檗碱和去氢延胡索甲素等 6 种活性化合物对 AChE 活性位点表现出显著的结合亲和力，黄连碱对延胡索的抑制作用与加兰他敏相当[3]。

结论：本研究为延胡索活性成分及其潜在的抗阿尔兹海默症特性提供了有价值的见解。此外，它还为从各种药用资源中探索和开发功能材料提供了宝贵的参考。

关键字 延胡索，乙酰胆碱酯酶抑制剂，多目标提取，活性筛选与验证，半制备高效液相色谱

参考文献

1. H. Geng, Z. Zhou, J. Shen, et al. A Dual-Population-Based NSGA-III for Constrained Many-Objective Optimization. *Entropy*. **2023**, *25*, 13.
2. D. Iqbal, M. Khan, M. Waiz, et al. Exploring the Binding Pattern of Geraniol with Acetylcholinesterase through In Silico Docking, Molecular Dynamics Simulation, and In Vitro Enzyme Inhibition Kinetics Studies. *Cells*. **2021**, *10(12)*, 3533.
3. Y. Zhao, X. Zhao, M. Guo, et al. Stilbenoids and Flavonoids from *Cajanus cajan* (L.) Millsp. and Their α-Glucosidase Inhibitory Activities. *Molecules*. **2023**, *28(9)*, 3779.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

HPLC 同时测定滴眼剂中 10 种抑菌剂

罗小梦[1]、牛龙青*[2]
1. 华中科技大学
2. 陕西省食品药品检验研究院

滴眼剂中抑菌剂大致可分为五类，如季铵盐类、尼泊金酯类、醇类、有机汞、纯氯氧复合物等[1-2]。临床研究发现，如果长期使用含有抑菌剂的眼用制剂会造成角膜炎、结膜炎、组织损伤、干眼症，甚至溃疡或糜烂。临床应用也更加关注抑菌剂对眼表的损害，尽量选择新型抑菌剂或不含抑菌剂的滴眼剂[3]。采用 HPLC 法同时对对硝基苯甲醛、硫柳汞、羟苯甲酯、羟苯乙酯、羟苯丙酯、羟苯丁酯、三叔氯丁醇、度米芬、苯扎氯铵、苯扎溴铵 10 种抑菌剂进行定性定量的方法很少有文献报道。我们建立了高效液相色谱对滴眼剂中多种抑菌剂同时进行定性定量测定的方法，以筛查滴眼剂中抑菌剂的种类及含量。该方法选取滴眼剂中常用的 10 种抑菌剂为研究对象，以出峰保留时间作为依据对 10 种抑菌剂进行定性筛查，并根据峰面积对所检出抑菌剂进行定量。结果表明，此方法标准曲线线性关系良好，相关系数均大于 0.9998，加标回收率均在 78.29%～116%范围内，精密度均在 0.1%～1.5%。此研究为滴眼剂中抑菌剂分析工作提供了一种比较高效、准确的支撑方法。

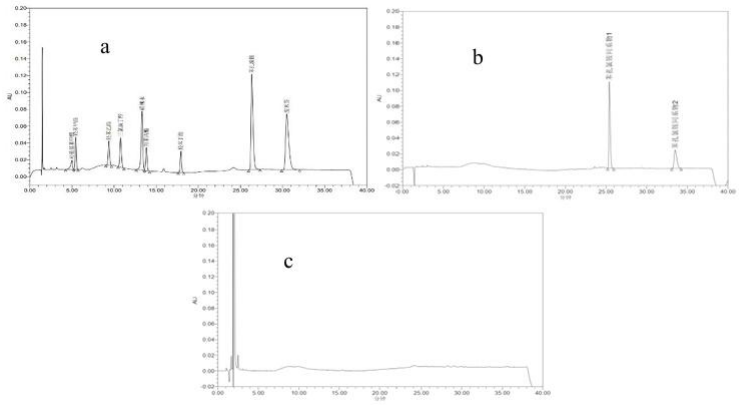


图 1. (a)混合对照品溶液色谱图，(b)苯扎氯铵对照溶液色谱图，(c)阴性对照溶液色谱图。

关键字 抑菌剂，滴眼剂，高效液相色谱法，定性，定量

参考文献

1. 杨梅，李欣，陈红. HPLC 同时测定萘敏维滴眼剂中的 9 种抑菌剂[J]. 华西药学杂志，**2017**, *32(5)*: 533.
2. 洪满珠，黄莹，李利，等. 滴眼剂中防腐剂成分分析及选用[J]. 眼科学报，**2019**, *34(2)*, 90.
3. 吴朝阳，浅谈注射剂中抑菌剂引起的不良反应[J]. 中国医学工程，**2012**, *20(3)*: 180.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

基于纳米酶电化学策略的生物标志物与活性物质分析研究

陈僖钰、刘绮雯、黄洋、陈嘉媚、梅雨丽、黄胜峰*
广州医科大学

纳米酶的高比表面积与体积比使其在催化反应中表现出优异的活性。与传统酶相比，纳米酶在高温、极端 pH 值和有机溶剂中表现出更好的稳定性。通过改变纳米酶的组成和结构，可以调节其催化特性，以适应不同的检测需求。基于纳米酶的电化学传感器在生物标志物和体内活性物质的分析中具有显著的优势，能够提供高灵敏度和高选择性的检测方法。本研究一方面开发了多种高性能的纳米酶电化学生物传感器，对神经退行性相关疾病标志物（tau 蛋白以及 BACE 蛋白）进行快速、灵敏检测，用于阿尔茨海默病的早期诊断。并且成功应用于实际临床样本分析，在区分潜在患者（高龄）与健康人群中体现了一定的潜力。此外，我们开发了纳米酶电化学传感器用于细胞裂解液中过氧化氢的快速灵敏检测，并建立药物治疗细胞模型。通过检测治疗过程中的过氧化氢浓度变化，可实现药物治疗疗效的快速评价。在未来的研究工作中，我们将探索开发神经退行性疾病相关生物标志物与氧化应激相关活性分子同时检测策略，为神经退行性疾病的精准诊疗提供新思路。

关键字 纳米酶，电化学检测，生物标志物，体内活性物质，疾病诊断

参考文献

1. X. Chen, Y. Huang, S. Yang, S. Wang, L. Chen, X. Yu*, N. Gan, S. Huang, *Biosens. Bioelectron.*, **2024**, 266, 116738.
2. X. Chen, S. Yang, H. Shao, S. Wang, J. Xie, Q. Liu, Y. Huang*, N. Gan, S. Huang, *Chem. Eng. J.* **2024**, 498, 155897.
3. R. Tang, S. Wang, H. Shao, S. Yang, Q. Liu, X. Chen, Y. Huang*, N. Gan, S. Huang. *Sensor Actuat. B- Chem.*, **2024**, 410, 135714.
4. Q. Liu, Y. Huang, S. Wang, S. Yang, Z. Jiang, S. Huang, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 1320, 342996.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

基于原位扩增纳米酶催化和通用抗体定位策略电化学免疫传感器用于 AD 相关生物标志物检测

陈僖钰、梅雨丽、余细勇、黄洋、黄胜峰*
广州医科大学

本文制备了一种原位纳米酶信号标签并提出一种DNA介导的通用型抗体定向固定策略，建立了一种用于阿尔茨海默症(AD)相关生物标志物检测的免疫传感平台。简单地说，合成了一种具有双过氧化物酶(POD)样活性的 Zr-MOF-MB-Au 纳米酶信号标签。进一步地，在 H2O2 催化下，产生大量羟基自由基，原位催化内部的亚甲基蓝（MB）分子，实现高效的信号放大。随后，提出了一种 DNA 适配体介导的通用抗体定向策略，以提高抗原(靶)的结合效率。DNA 适配体的末端加入了聚腺嘌呤，便于与金电极结合，自带磷酸基团的亲水性而具有防污性能。在最佳条件下，该平台成功用于 AD 相关标志物 Tau 蛋白和 BACE1 蛋白的高灵敏度检测，检测限分别为 3.34 fg/mL 和 1.67 fg/mL。在这种免疫传感模式下，我们分析了来自不同年龄阶段志愿者的 20 份临床样本，发现老年志愿者血液样本中的 Tau 表达水平明显高于年轻志愿者。这表明所开发的传感策略对 AD 潜在患者的早期诊断具有一定的应用潜力。

关键字 电化学免疫传感器，纳米酶信号标签，抗体定向策略，AD 相关生物标志物，POD-like 纳米酶

参考文献

1. X. Chen, Y. Huang, S. Yang, S. Wang, L. Chen, X. Yu*, N. Gan, S. Huang, *Biosens. Bioelectron.*, **2024**, *266*, 116738.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

人工介导的细胞内原位合成以诱导肿瘤细胞免疫源性死亡

徐韩斌、钱若灿、陈斌斌、李大伟*
华东理工大学

人工介导的细胞内原位合成在赋予细胞新功能、加深对生命系统的理解以及开发疾病治疗新策略等方面具有重要意义。本研究提出了一种由内源性偶氮还原酶（AzoR）触发的细胞内席夫碱反应，用于肿瘤细胞内合成尖刺状共价有机聚合物（SCOPs），以促进肿瘤细胞的免疫原性细胞死亡（ICD）。基于席夫碱反应调控的线性聚合和分子间自组装不仅实现了小分子单体的聚集，同时有利益于聚合物的空间延伸，从而在 AzoR 过表达的肿瘤细胞中形成了具有尖刺状的聚合物。所形成的 SCOs 通过损伤线粒体、溶酶体等主要亚细胞器使得细胞内的氧化还原状态失衡，导致胞内活性氧（ROS）水平显著升高，进一步触发 caspase-1 介导的程序性细胞焦亡，最终诱导 ICD。本研究所提出的酶触发席夫碱反应用于细胞内原位合成策略能够显著抑制肿瘤细胞的活性，为肿瘤细胞命运的调控及癌症免疫治疗的推进提供了新方法。

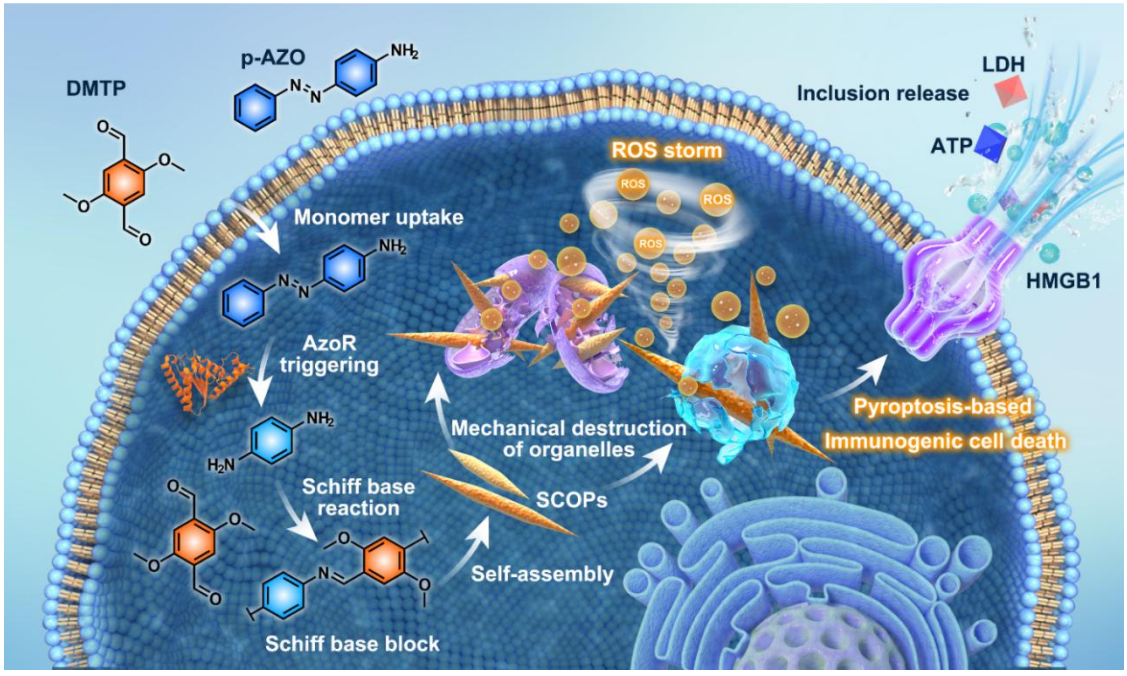


图1 内源性酶触发席夫碱反应机制及在细胞中原位合成SCOPs诱导ICD示意图。

关键字 细胞内合成，席夫碱反应，共价有机聚合物，免疫源性死亡，肿瘤治疗

参考文献

1. H. B. Xu, H. Y. Chen, J. Lv, B. B. Chen, Z. R. Zhou, S. Chang, Y. T. Gao, W. F. Huang, M. J. Ye, Z. J. Cheng, M. E. Hafez, R. C. Qian, D. W. Li, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2023**, 62, e202311002.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

肿瘤微环境激活的细胞内羧基卟啉自聚合及癌症光动力治疗潜力

叶鸣杰、徐韩斌、陈斌斌、李大伟*
华东理工大学

光动力疗法（PDT）是一种前景广阔的癌症治疗方法，但其疗效通常受光敏剂在肿瘤处积累不足和选择性差的限制。本文利用四（4-羧基苯基）卟啉（TCPP）对酸性肿瘤微环境的响应，成功实现了卟啉小分子在癌细胞内的选择性聚合，从而延长了光敏剂的保留时间并增强了 PDT 疗效。在白光照射下，聚合后的 TCPP 展现出显著的光动力性能，同时兼具 I 型和 II 型效应，产生大量活性氧物种（ROS），进一步激活 caspase-3 介导的程序性细胞焦亡，最终诱导肿瘤细胞的免疫原性死亡。这一通过响应肿瘤微环境，实现细胞内卟啉选择性自聚合的策略，展现了卓越且兼具特异性的 PDT 诱导免疫原性死亡的效果，为癌症治疗开辟了一条新的光动力学途径。

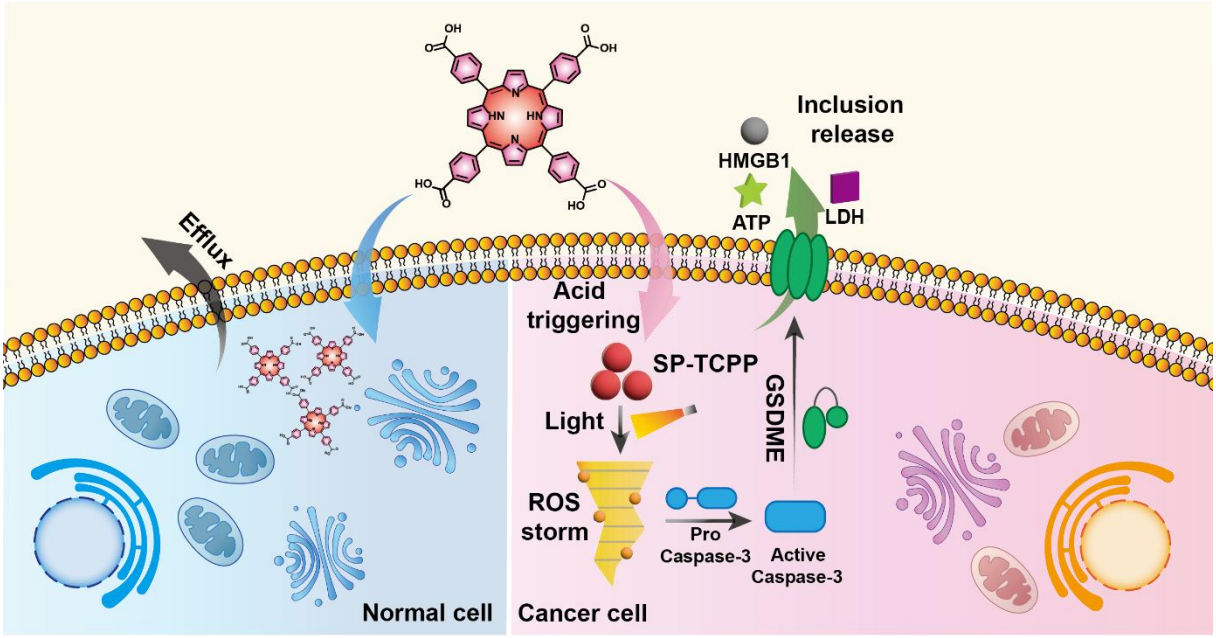


图1 肿瘤微环境激活的羧基卟啉聚合及其在选择性辐照下促进基于焦亡的免疫原性细胞死亡的机制。

关键字 肿瘤微环境响应，细胞内聚合，羧基卟啉，焦亡

参考文献

1. X. Y. Liu, W. J. Zhan, G. Gao, Q. C. Jiang, X. P. Zhang, H. B. Zhang, X. B. Sun, W. Han, F. G. Wu, G. L. Liang, *J. Am. Chem. Soc.***2023**, 145, 7918.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

基于共价有机框架的黄嘌呤无酶比色检测

岳子洋、吴含、吴婷、肖赛金*
东华理工大学

黄嘌呤监测对人类健康和食品工业都有意义[1,2]，但快速、低成本和不依赖于黄嘌呤氧化酶的检测仍然是一个巨大的挑战。基于此，开发了一种基于新型芘基共价有机框架（FPPy-TSC COF）的无酶比色检测黄嘌呤的新方法。如图所示，以 1,3,6,8-4（4-甲醛苯基）芘（FPPy）和氨基硫脲盐酸盐（TSC）为单体合成的 FPPy-TSC COF 具有扩展的供体-受体结构，表现出优异的光捕获能力和电荷分离效率。与已报道光诱导纳米酶一样[3,4]，FPPy-TSC COF 也无法在黑暗条件下产生电荷载体，因此其纳米酶活性在黑暗条件下将被抑制。然而，当黄嘌呤存在时，FPPy-TSC COF 在光照下产生的自由电子以长寿命有机自由基的形式储存在黄嘌呤中。随后，在黑暗条件下，储存的电子逐渐将溶解氧还原为氧自由基，最终催化 3,3'，5,5'-四甲基联苯胺（TMB）氧化为蓝色氧化 TMB（oxTMB）。基于溶液颜色变化，FPPy TSC COF-TMB 系统可用于黄嘌呤的无酶、灵敏和选择性检测，检测限低至 3.23μM（3σ/K）。此外，借助智能手机，还可实现黄嘌呤的现场检测，并成功检测了血清和猪肉样品中的黄嘌呤含量，回收率为 95.28%至 107.34%。本工作不仅扩展了 COF 纳米酶在黑暗条件下的应用，也为黄嘌呤的无酶检测提供了新的机制。

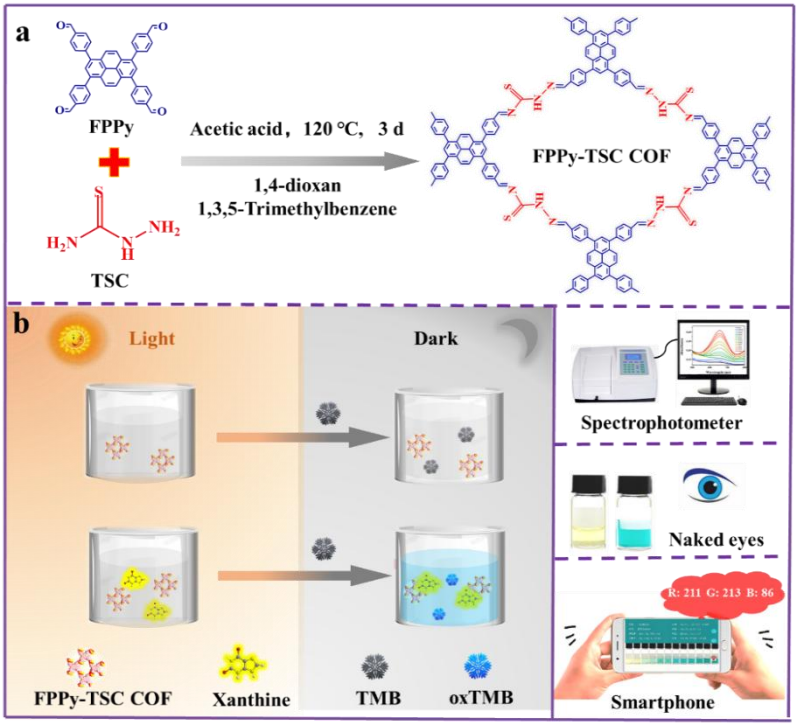


图 1.示意图。

关键字 共价有机框架，黄嘌呤，长寿命有机自由基，比色检测

参考文献

1. Xu, M., Liu, D., Yang, J., Zhu, Q., Wang, Y., Sha, J., *ACS Appl. Nano Mater.* **2021**. *4*, 7172.

2. Kant, R., Tabassum, R., Gupta, B. D., *Biosens. Bioelectron*. **2018**. *99*, 637.
3. Bai, T.T., Wang, L.H., Wang, M., Zhu, Y.F., Li, W.H., Guo, Z.R., et al., *Biosensor. Bioelectron.* **2022**. *208*, 114218.
4. Zhang, P., Sun, D., Cho, A., Weon, S., Lee, S., Lee, J., et al., *Nature Commun*. **2019**. *10*, 940.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

核酸适体信标探针的系统性进化方法的构建

程璇、姚盼竹、张力勤*
北京大学

利用抗体及核酸适体等进行基于亲和力的免疫测定方法在现代分子生物学中有着至关重要的作用。然而，这些基于亲和力探针的分析方法的方法的发展往往受到操作步骤复杂等问题的阻碍。多次的孵育与洗涤可能会引入错误，尤其是在一些比较复杂的体系中如细胞内环境和微流体环境中。因此，可以在检测到目标时随即激活信号而无需多次洗涤的免洗测定的分子探针的开发受到了人们的广泛关注。因此，我们提出了一种核酸适体信标探针的系统性进化方法，用于更为快速、标准化的开发免洗的核酸适体信标探针。

在本研究中，我们提出了一个核酸适体信标探针的系统性进化的平台，通过一系列酶反应，创新性地在磁珠上构建了核酸适体信标探针的文库，通过目标响应实现荧光激活，进行分选得到目标序列。

我们利用构建得到的核酸适体信标探针的系统性进化平台筛选得到了对于溶解蛋白 IL-2 和膜蛋白 HER2 有响应的适体信标，适体信标表现出很强的亲和力，仅在结合时触发荧光，从而实现免洗免疫测定以检测细胞内和膜蛋白。筛选所得的 IL-2 适体信标通过实验证明可以用于在不同的体系如缓冲液、培养基和细胞内检测 IL-2，继而可以用于表征免疫治疗过程中 IL-2 的变化。而筛选所得的 HER2 适体信标通过实验证明可以用于检测细胞、外泌体的 HER2 的含量，证明了该适体在肿瘤诊断与分型中的应用潜力。

我们建立了一个标准化的平台来生产可以变换结构的核酸适体信标探针，来进一步发挥核酸适体信标探针在诊断疾病、药物评价和科学研究中的应用潜力。

关键字 核酸适体信标探针，系统性筛选，蛋白检测与分析，免洗检测

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

基于机器学习辅助的 AuCu 双金属工程化 MOF 电化学纳米传感器用于同时检测和去除氟喹诺酮类抗生素

何穗穗*、王俊、张嘉恒、何俊琳、魏华、喻翠云
南华大学

抗生素滥用导致的“超级细菌”的出现对人类健康和安全构成重大威胁。然而，目前开发的方法通常只关注单一的检测或去除功能，合理设计兼具抗生素去除和检测双重适用性的功能材料仍然是一个挑战。在此，我们将金属纳米颗粒优异的催化活性与金属有机框架的大表面积和丰富的活性位点有机整合，构建了一种负载 AuCu 双金属的锆基金属有机框架纳米传感器（AuCu@Zr-MOF），用于同时捕获和电化学传感三种氟喹诺酮类抗生素：诺氟沙星（NOR）、环丙沙星（CIP）和氧氟沙星（OFL）。具体而言，该 AuCu@Zr-MOF 纳米传感器不仅能够通过配位结合和静电相互作用增强了对 NOR、CIP 和 OFL 的亲和能力，其最大吸附量分别为 458.0、469.5 和 480.8 mg/g；而且利用其出色的电导率和电催化活性显著提高了对 NOR、CIP 和 OFL 的检测灵敏度，其检测限分别为 0.168、0.180 和 0.113 nM。重要的是，结合机器学习算法，该纳米传感器成功实现了对难以区分的 NOR、CIP 和 OFL 进行准确且高分辨率的鉴别，在实际样品检测中表现出令人满意的可靠性和灵敏度。这项工作为开发同时捕获和检测多种抗生素残留的集成系统开辟了新途径。

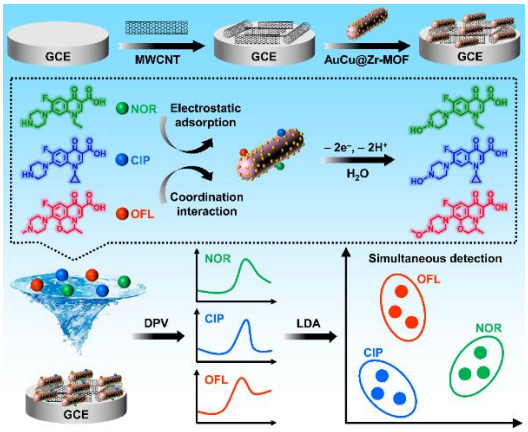


图 1.示意图。

关键字 金属有机框架，电化学传感器，氟喹诺酮类抗生素，机器学习，检测和去除

参考文献

1. K. Li, J. Wang, J. Wang, Z. Zheng, X. Liu, J. Wang, C. Zhang, S. He,* H. Wei,* C.-Y. Yu,* *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 12181.
2. M. Tian, J. Wang, W. Xiang, Z. Zheng, Z. Luo, S. Jing, Y. Zheng, S. He*, H. Wei*, C.-Y. Yu*, *Chem. Eng. J.*, **2024**, *486*, 150186.
3. J. Zhang, J. Wang, F. Ouyang, Z. Zheng, X. Huang, H. Zhang, D. He, S. He*, H. Wei*, C.-Y. Yu*, *Anal. Chim. Acta*, **2023**, *1279*, 341837.

分会场：29.分析药学与仪器
交流形式：墙报

阻断蛋白-蛋白相互作用的功能性核酸适体体外进化技术

李俊、张力勤*
北京大学

长期以来，研究者们为了将核酸适体转化为药物分子进行了许多努力，但是能够阻断靶标相互作用的适体药物开发仍然面临着许多挑战。目前报道的功能适体的开发通常需要亲和适体的获取和功能筛选两步进行，这不仅耗时，而且亲和筛选可能缩小功能适体候选药物的范围。此外，适体通常需要繁琐的后修饰来克服药代动力学限制，这通常会影响适体与靶标的结合亲和力。

针对以上功能核酸适体药物开发的瓶颈问题，本团队提出了一种新的功能核酸适体体外筛选平台(FAIVE)，该平台将亲和适体获取与功能筛选相结合，并在此过程中引入化学多样性修饰。之前的报道以 HIV-1 病毒细胞核内 Tat 蛋白和 TAR RNA 的 RNA-蛋白相互作用为模型，利用 FAIVE 平台开发了具有显著细胞内阻断相互作用的功能性核酸适体。[1]

为了验证该方法的普适性，在此，我们使用 FAIVE 平台获得能够干扰 SARS-CoV-2 刺突受体结合域（RBD）与 ACE2 相互作用的带有修饰碱基的 DNA 适体，以抑制蛋白-蛋白相互作用。此外，我们还通过对乳液 PCR 过程进行建模，研究了用于筛选的单克隆磁珠库的质量验证标准，从而为未来的应用提供理论见解。将荧光信号报告体系纳入到功能核酸适体筛选过程中，有可能促进具有不同功能的适体的开发，并普遍适用于各种研究背景。

关键字 功能核酸适体，蛋白-蛋白相互作用，乳液 PCR，建模

参考文献

1. Li, J.; Yao, P.; Tang, K.; Zhao, X.; Liu, X.; Liu, Q.; Wei, T.; Xuan, H.; Bian, S.; Guo, Y.; Yang, Z.; Zhang, Z.-Q.; Zhang, L., Functional Aptamers In Vitro Evolution for Intranuclear Blockage of RNA-Protein Interaction. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146 (35)*, 24654.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

只有科学仪器先行才有话语权

王智彪*
重庆医科大学超声医学工程国家重点实验室

科学仪器是人类探索自然、认识世界的重要工具，也是环境保护、食品安全、医疗卫生等社会发展的重要保障。科学技术的创新，基础在科学仪器。临床诊疗的创新思想常常来自于科学仪器，科学仪器的进一步发展是临床诊疗设备的雏形。本次报告《只有科学仪器先行才有话语权》旨在探讨以聚焦超声消融手术为代表，讲述在过去的两百年，治疗医学完成了从传统开腹到腹腔镜手术，再到非侵入性的聚焦超声消融手术（focused ultrasound ablation surgery，FUAS）的转变。分析美国科学家在上个世纪 40 年代就提出了用超声波从体外对体内开刀的想法，却没有成功走上临床，而本团队 1988 年研制出第 1 台聚焦超声试验设备，并于 1999 年成功研制出全球首台设备、治疗首例病人等的原因。

此外，报告将强调科学仪器先行是医学进步的根本保障，只有不断推进仪器的创新，才能在激烈的医疗市场和国际竞争中掌握话语权，确保在高标准、高质量的医疗实践中持续取得突破，报告将展示本团队 30 多年以来技术的不断突破与积累，在国家政策与基金委的大力支持下，解决的科学问题与不断迭代升级研制的科学仪器与关键核心技术，以及未来发展前景展望。

2018 年 5 月 28 日，习近平总书记在中国科学院第 19 次院士大会、中国工程院第十四次院士大会上讲话指出：实践反复告诉我们，关键核心技术是要不来、买不来、讨不来的！我们期待通过这场报告，能够启发更多的科学家和工程师投身于用于临床诊断和治疗的科学仪器前沿研究，共同推动医疗技术的革新，为全人类的健康福祉贡献力量。

关键字 聚焦超声消融手术；科学仪器；话语权

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

病原微生物 I.S.T.技术平台的构建及应用初探

周钦*
哈尔滨医科大学

即刻筛查检测（instant screening test，IST）是我们提出的一个新理念。IST 强调快速（5 min）获取检测结果和大规模人群筛查。该理念可以通过现代光电传感和微流控技术来实现，对慢性病和传染病的及时诊疗具有重要意义。我们结合电化学/表面增强拉曼光谱（SERS）技术和“病原微生物－聚糖”特异性识别原理来初步建立致病菌和病毒的 IST 新方法。首先，开发了“致病菌—聚糖”选择性识别研究的新型检测技术，实现了电化学阻抗信号的高效捕获，并结合弗鲁姆基等吸附（Frumkin isotherm）理论模型实现数据有效拟合与分析（Biosen. Bioelectron. 2018）。进一步，实现了电化学和 SERS 集成检测方法（Biosen. Bioelectron. 2022）。该技术与方法具有快速、准确且成本底的优点。创新性的发明糖基化外囊泡样识别受体（GlycoEVLR），作为病毒抗原检测的特异性敏感元件（Chem. Eng. J. 2023）。基于在这一领域的研究积累与学术贡献，受邀在 TrAC-Trend Anal. Chem.（2023）期刊发表题的综述文章。系统全面的讨论了聚糖/凝集素生物传感器的分子识别原理，构建策略。创新性的提出基于人工智能的聚糖/凝集素受体的筛选以及复合识别受体构建。为基于聚糖识别的 IST 新技术发展提出新见解、新观点与新方向。

关键字 即刻筛查检测；电化学；表面增强拉曼光谱

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

破译癌症的糖质密码初探

刘震*
南京大学

糖质是生命体系的核心组成成分，行使着重要的生理功能，同时也可能承载着关键的生命信息，被很多学者认为是继核酸链和蛋白多肽链之后的“第三条生命链”。糖基化是最重要和最广泛的翻译后修饰之一。人体内 50%以上的蛋白质均是糖基化的。糖基化与人体内的分子识别、免疫应答等等若干生理作用和功能密切相关。蛋白质的异常糖基化是癌症的重要标志，临床上常用的蛋白质癌症标志物也大多与糖基化相关。尽管已经文献报道了很多的基于特定糖型的糖蛋白精准诊断标志物，然而目前仅有基于甲胎蛋白（AFP）的能被凝集素 LCA 识别的 L3 异质体成功应用于临床早期筛查，潜在精准标志物的转化应用成功率极低。更为关键的是，糖基化的表达与异常与肿瘤微环境密切相关，目前却十分匮乏可用于破译活体病灶及病理切片上的糖基化特质或模式的方法与仪器。造成该局面的主要原因在于缺乏对糖基化精准识别的试剂和高灵敏的分析仪器。为了填补以上空白，笔者在十余年研究糖的仿生分子识别的基础上，基于分子印迹材料对糖质的精准识别，并结合荧光成像和增强拉曼检测，提出了破译癌症的糖质密码的技术路径，并已经在多种癌症的精准病理诊断和精准体外诊断方面取得进展。本报告将介绍相关的内容以及对相关分析仪器的设想与预期。

关键字 癌症、糖质密码、糖基化、分子识别、体外诊断、病理分析

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

高分辨医学超声成像与操控

马腾*
中国科学院深圳先进技术研究院

得益于超声丰富的生物学效应以及广泛的适用性，医学超声设备作为临床与科研中应用最广泛的科学仪器。清晰化、集成化、诊疗一体化的高端超声科学仪器与医疗设备有着广阔的发展前景。然而，我国高端超声影像设备及科研仪器仍处于外资主导，医学超声系统组成中的四大模块（超声换能器、鞘管与机械传动、硬件与逻辑控制、高性能成像算法）中包含大量的“卡脖子”理论设计与工艺技术是制约我国超声设备发展的瓶颈。报告围绕着高性能超声换能器研制、精密电路与逻辑控制、显微装配以及先进波束和图像处理算法四大关键技术的升级和协同创新的科研实践与应用展开。推动新一代超声科学仪器与医疗设备研发向着高分辨、多模态和多功能的方向迭代升级。

关键字 生物医学超声；多模态成像；全息声镊；介入诊疗

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

基于微流控芯片技术的肺癌循环肿瘤细胞捕获装置研发与应用

王琪*
大连医科大学附属第二医院

研究目的：
我国肺癌发病率和死亡率均居恶性肿瘤之首，且缺乏早期诊断的可靠手段。循环肿瘤细胞（CTC，Circulating Tumor Cell）可随血液循环系统遍及人体各个部位，参与肿瘤的发生、发展、转移和定植全程阶段，在多个癌种研究中被证实其不仅可以为转移性肿瘤的生物学研究提供独特见解，并且可以用于监测疾病进展乃至为患者提供个体化治疗。虽然 CTC 的捕获检测技术日渐成熟，但由于 CTC 数量稀少且异质性强，目前尚无能够对自体 CTC 进行高活性、特异性标记的设备，尚无法开展肿瘤转移在体可视化研究。为填补上述领域的空白，本研究构建了活体动物自体 CTC“捕获-标记-回输一体化”设备。
方法：
本研究应用高孔隙率、超薄微孔过滤技术建立“透析式”全身血液 CTC 捕获方法。结合原位电穿孔技术实现不同时间阶段、不同亚型 CTC 的高特异性、多模态精准标记。应用高生物兼容性材料修饰技术实现高活性 CTC 快速释放及体外回输。
结果：
本研究建立的基于微流控技术的 CTC 捕获方法，可实现对活体肺癌动物模型全血中 CTC 的高效捕获，以及肺癌患者外周血中 CTC 的高灵敏度检测。使用基于原位电穿孔探针导入原理，建立了对 CTC 的高活性、高特异性、多模态精准标记。使用基于高生物兼容性表面调制方法，建立高活性细胞释放及对体外会输。应用建立的“透析式”全身血液 CTC 捕获技术，完成对捕获的高转移潜能 CTC 亚型的单细胞代谢组学分析，发现在高转移潜能 CTC 相较于原位肿瘤细胞，差异代谢物主要集中于糖酵解、丙酮酸代谢中。
结论：
本研究构建了一种可广泛用于活体动物肿瘤转移及 CTC 时空异质性研究的体外功能化设备。在不改变细胞活性和生物学行为的前提下，连续地完成活体动物全身血液内 CTC 的高效捕获、高选择性标记及高活性回输入体一体化操控。该设备为肿瘤转移可视化研究提供了近生理平台，有助于实现肿瘤转移研究中体外与在体的有机融合，为 CTC 时空异质性与肿瘤转移可视化研究提供体内与体外、离体与在体融合的一体化平台，推动肿瘤转移机制深入研究发展。

关键字 肺癌，循环肿瘤细胞，微流控技术，液体活检

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

蛋白组学和空间多组学在癌症精准分子诊断中的应用探索

李顺成*
加拿大西安大略大学

Cancer is a complex disease marked by both intra- and interpatient heterogeneity, as well as dynamic interactions between tumor cells and their microenvironment. Current cancer molecular diagnostic approaches often rely on assessing the expression or mutational status of a single tumor driver or biomarker, which has limited effectiveness in guiding clinical decisions. Multiomics approaches—especially functional proteomics and spatial transcriptomics, including single-cell spatial profiling—have emerged as powerful tools for evaluating tumor complexity. These methods facilitate more accurate molecular diagnoses and the precise application of targeted therapies and immunotherapies.

We will discuss specific examples of how mass spectrometry-based analyses of the tumor proteome and phosphoproteome can identify mediators and biomarkers of metastasis and therapeutic resistance. Additionally, we will explore how spatial transcriptomics can elucidate the intricate interactions between tumor cells and their microenvironment that drive metastasis. Our studies, along with those of others, suggest that multiomics analysis may guide clinical decisions in precision oncology, ultimately benefiting more patients.

关键字 proteomics, phosphoproteomics, mass spectrometry, multi-omics, biomarker, precision medicine

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

面向肿瘤多模态数据分析的深度学习模型技术研究与应用

秦文健*
中国科学院深圳先进技术研究院

恶性肿瘤是一种复杂和高异质性的动态疾病，其异质性导致肿瘤细胞亚群在疾病部位之间和疾病部位内的不均匀分布(空间异质性)或癌细胞分子组成的时间变化(时间异质性)。肿瘤异质性的充分理解和准确评估对改善肿瘤诊断、预后和治疗反应预测有着重要的临床价值。然而，异质性涉及一系列微观和宏观的不同尺度变化，单一尺度数据难以全面和准确的描述肿瘤异质性表现，此外，不同数据采集方式受物理空间分辨率、化学敏感性或生物特异性等因素的影响，其捕获肿瘤异质性的信息表现也不相同，通常分子成像技术广泛用于更小尺度的深入肿瘤内表征，而放射成像量化更大尺度的肿瘤大小、扩散或形态等肿瘤间表征。因此需要借助于放射影像、病理和分子基因等多尺度数据对肿瘤异质性进行分析和建模。本报告将围绕跨尺度肿瘤数据计算中存在物理与解剖先验知识的利用和跨尺度融合有效性的关键技术问题进行报告。

关键字 肿瘤，异质性，深度学习

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

临床检验国产质谱仪研发及应用

闻路红*[1,2]、胡舜迪[1,2]、陈腊[1,2]、唐燕[1,2]、彭兵强[1]、刘海涛[2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

临床质谱是未来精准医疗的趋势。临床诊断对高灵敏度、高精准性和高通量的检测技术需求日益增长。质谱技术因其独特的优势，成为满足这些需求的关键技术之一。目前临床质谱在自动化和信息化方面要满足临床需求还有很大的距离，样品前处理和数据分析过程高度依赖人工，也严重制约了临床质谱的应用面和检测效率的提高。临床质谱技术的发展趋势指向了自动化、高通量、色谱质谱硬件提高与数据库的整合，我国尚无商品化的高通量全自动临床质谱检测系统。

本课题组针对临床质谱自动化程度低、精密度差、核心部件依赖进口等问题，创新国产化离子源、质量分析器和离子检测器等核心部件；开发全自动样品前处理装置，实现单管、急诊和常规进样；研制了质谱仪性能协同优化技术，提升连续真空中现场复杂基质痕量样品的检测能力，结合不同应用场景，建立微量进样下的质谱精准检测性能系统化适应性控制方法，实现临床样本快速、准确、可靠的精准串级全流程分析；研发了适用于临床检测的全自动样品前处理、色谱质谱仪于一体的新一代高通量全自动临床质谱检测系统，提高质谱检测系统的自动化、灵敏度和准确性。

本课题组研制的高通量全自动临床质谱检测系统能够对生物样本中的小分子激素、维生素、氨基酸、药物、毒物等进行精确定量分析，为疾病的早期诊断、治疗监测、药物代谢研究以及个性化医疗提供了强有力的技术支持。

关键字 临床检验，国产仪器，质谱仪

参考文献

1. Y. Ma, D.Wang, H. Li, X. Ma, Y. Zou, D. Mu, S. Yu, X. Cheng, L. Qiu, *Clin Chim Acta.*, **2024**,562,119846.
2. H. Zhang, Z. Ouyang, W. Zhang, *Trac-trend Anal Chem.*, **2023**,169,117380.
3. P. Yeung, P. Miller, T. Lai-Nyugen, P. Cheng, A. Ibrahim, R. Shi, R. Bowen, R. Luo, *J Mass Spectrom Adv Clin Lab.*, **2023**,7,99-104.
4.Q. Zhang, H. Xiao, N. An, Q. Zhu, Y. Feng, *Anal Methods.*, **2023**,15(44),6009-6014.
5. G. Li, M. Zhao, L. Zhao, *J Pharm Biomed Anal.*, **2021**,206,114380.
6. T. Liu, R. Kotha, J. Jones, J. Polli, M. Kane, *J Pharm Biomed Anal.*, **2019**,176,112816.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

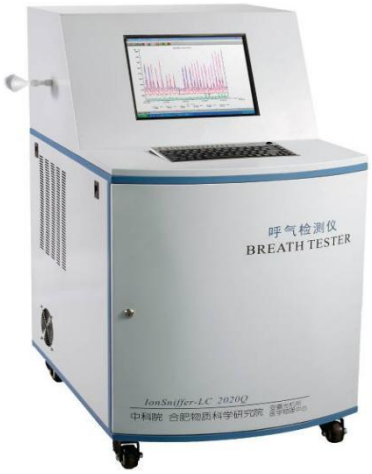
基于人体挥发物快检的疾病诊断质谱仪

邹雪、许伟、张强领、梁渠、鲍珣、陆燕、夏磊、黄超群、沈成银*、储焰南
中国科学院合肥物质科学研究院

人体挥发物活检因为安全无创、简单便捷、接受度高等特点，是组织活检、液体活检之后新的学科发展方向。发展人体挥发物检测疾病快速筛查新技术，对疾病的早发现和早治疗、提升愈后效果具有重要意义。

利用质子转移反应质谱（PTR-MS）原理，研制了可进行快速在线检测的呼气质谱仪、尿液检测质谱仪；在不同医院科室，开展了食管癌、糖尿病等患者挥发物的直接测量，经过统计和综合分析，获得了相应的人体挥发物质谱特征，以及筛查真阳性率和真阴性率。

本研究展示了自主研制的 PTR-MS 在人体挥发物检测中的高灵敏度与长期稳定性，为患者呼气、尿液检测的大规模试验，发展快速无创筛查与辅助诊断新技术方法，打下了坚实基础。



研制的人体挥发物快检质谱仪

关键字 人体挥发物；疾病筛查；质子转移反应质谱

参考文献

1.Xue Zou, Yan Lu, Lei Xia, et al., Detection of volatile organic compounds in a drop of urine by ultrasonic nebulization extraction proton transfer reaction mass spectrometry, *Analytical Chemistry*, 90(2018), 2210.

2.Xue Zou, Wenzhao Zhou, Yan Lu, et al., Exhaled gases online measurements for esophageal cancer patients and healthy people by proton transfer reaction mass spectrometry, *Journal of Gastroenterology and Hepatology*, 31(2016), 1837.

3.Wei Xu, Xue Zou, Houwen Ding, et al., Rapid and non-invasive diagnosis of type 2 diabetes through sniffing urinary acetone by a proton transfer reaction mass spectrometry, *Talanta*, 256 (2023), 124265.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

英盛生物合纵连横临床质谱多平台整体解决方案

王珺*
山东英盛生物技术有限公司

随着科学技术的发展，质谱技术逐渐被引入到生物医学领域。20 世纪 80 年代，质谱技术开始应用于蛋白质组学研究，为临床质谱技术的发展奠定了基础。近年来，随着质谱技术的不断进步和成本的降低，临床质谱技术在个体化医疗、精准医疗等领域的应用逐渐增多。临床质谱技术凭借高特异性、高灵敏度、多指标联检等优势，成为了体外诊断领域最富生命力的新技术之一。随着质谱技术的不断发展和完善，临床质谱技术将在临床诊断、治疗监测、疾病研究和精准医疗等领域发挥越来越重要的作用。

单一质谱平台已不能满足临床的需求，多技术平台布局已成为临床质谱的趋势。国家卫健委多次发布通知[1][2]，强调核心设备如全自动样品前处理系统、串联质谱仪、液质联用高分辨质谱仪，体现了临床质谱多平台的必要性。《医疗机构临床质谱实验室建设共识》也提出了对临床质谱一站式解决方案的多方面要求[3]。作为临床质谱服务专家，英盛生物在国内率先推动了临床质谱的 IVD 模式，目前我国临床机构对于临床质谱技术发展形成共识，即以英盛打造的一站式解决方案的 IVD 模式为主要发展方向全面推进。

英盛生物提供合纵连横临床质谱多平台整体解决方案,这一解决方案旨在为不同领域的分析需求提供全面的支持。

串联质谱技术已经成为小分子定量分析领域的重要工具,《液相色谱-质谱临床应用建议》《液相色谱串联质谱临床检测方法的开发与验证》等众多专家共识为其应用奠定了坚实的基础。以 YS EXACT 9900MD 为代表的串联质谱平台在临床上展现出广泛的应用价值，涵盖了多个关键领域，包括对维生素、同型半胱氨酸、胆汁酸等营养水平监测，与内分泌相关的类固醇激素和儿茶酚胺及其代谢物的精准检测，对免疫抑制剂、抗癫痫、抗肿瘤、抗感染等药物浓度监测方面，以新生儿遗传代谢病筛查为代表的出生缺陷防控。此外，配合 YS-600 等自动化前处理设备，可以显著简化质谱操作流程，提高检测的效率和准确性，进一步推动了串联质谱技术在临床领域的普及和应用。

目前，电感耦合等离子体质谱已成为痕量元素分析的一种高效手段，推动了痕量元素准确分析的发展。依据《质谱技术在临床微量元素检测中的应用共识》，英盛生物率先推出了国内第一台注册的 ICP-MS—— YS EXT 8600MD，该设备配备了全自动前处理设备 YS-IN-200。ICP-MS 的分析领域涉及重金属检测、杂质监控、基本元素分析和营养元素测定等方面。在临床应用中，ICP-MS 对于儿童的营养不良，孕妇妊娠高血压、先兆流产，老年人骨质疏松、心脑血管疾病及肿瘤人群、围手术期患者等重点人群的监测发挥着关键作用。

《中国核酸质谱应用专家共识》指出，核酸质谱的出现极大推进了基因组学、蛋白质组学的发展，并且给生物领域及医学领域带来了革命性的突破[4]。核酸质谱平台以其通量更高、效率更高、灵活设计、无需拼样、周期更短、自动解读等优势引领了多基因检测分析的发展，主要应用于药物基因组检测、遗传基因检测、多病原体检测以及营养代谢基因检测等领域。

高分辨质谱平台在临床应用中的需求源自精准中心、临床研究与转化中心、急诊科、职业病与中毒医学科、检验科、职业病防治医院等各临床科室对精准医学检测的日益增长，高分辨质谱平台具有超高分辨率、超高稳定性、超高质量精度、实时正负切换、超强定量性能等显著优势，可以应用于毒物筛查、单抗浓度测定、肽类激素检测、代谢组学等领域。

作为临床质谱服务专家，英盛生物合纵连横打造了临床质谱多平台整体解决方案，涵盖从校准与质控品、应用试剂、四大质谱平台、自动化设备到耗材等各个方面。我们致力于通过高度整合的产品和服务，满足临床质谱在不同应用领域的特定需求，提供临床质谱一站式解决方案，从而为临床诊断和治疗提供强有力的支持。

关键字 临床质谱 精准诊断 一站式解决方案 英盛生物

参考文献

1.国家卫生健康委办公厅.国家内分泌代谢病医学中心设置标准.医政医管局，2022-6-21.http://www.nhc.gov.cn/yzygj/s3594q/202207/c58176a4e56348a5880ac460c306ae53/files/2737cf38fa314068968be0dc3d0e9273.

2.国家卫生健康委办公厅.国家检验医学中心设置标准.医政医管局，2022-10-8.http://www.nhc.gov.cn/yzygj/s3594q/202211/dddbb1f887ca426ab45a1ac93e5a58e6/files/700ec71119d64f50a257f65546dd1461.

3. 中华医学会检验医学分会临床生化检验学组, 中国医学装备协会检验医学分会. 医疗机构临床质谱实验室建设共识[J] .中华检验医学杂志, 2023,46(8):783-791. DOI: 10.3760/cma.j.cn114452-20221122-00696.

4. 中国核酸质谱应用专家共识协作组.中国核酸质谱应用专家共识[J].中华医学杂志, 2018,98(12):895-900. DOI:10.3760/cma.j.issn.0376-2491.2018.12.004

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

一种 Co@/羧甲基壳聚糖/多粘菌素 B 纳米酶的制备及其对革兰氏阴性菌的快速诊断

李澧*[1]、王洪远[1,2]、陈静雯[1,2]、李少波[1,2]、刘晶[2]、吕晓兰[1]
1. 江苏省农业科学院
2. 中国药科大学

高密度、集约化畜禽养殖极易滋生各种致病菌,导致养殖动物大量死亡,给养殖业带来巨大损失[1]。致病菌的常规诊断方法包括：平板培养、DNA 聚合酶链反应(PCR)和免疫法[2]。平板培养法准确、稳定，但耗时长(24-74h)；PCR 检测灵敏、准确，但步骤繁琐、试剂昂贵；免疫法耗时短，特异性好、稳定，但试剂昂贵、假阳性率高。可见，常规诊断方法无法满足快速、准确诊断致病菌的养殖需求[3]。

70%临床分离得到的致病菌都是革兰氏阴性菌(G-菌)[4]。据此，本文设计、制备了一种无需标记、快速、精准识别 G-菌的 Co 纳米酶。多粘菌素 B(PMB)是一种强阳离子环状多肽类抗生素，只能与 G-菌外膜上的脂多糖作用，具有较强的选择性[5]。羧甲基壳聚糖(CMC)，一种水溶性壳聚糖衍生物，可作为纳米颗粒的稳定剂[6]。本文首先在 CMC 上接枝 PMB，得到专一识别 G-菌的 CMC/PMB；随后加入 Co2+，原位还原一步制备 Co@CMC/PMB 纳米酶。

与 CMC 对比，CMC/PMB 的 FTIR 谱图上出现了两个新的吸收峰，对应为 C-N 伸缩振动峰(1250-1200cm-1)和苯环的 C-H 面外弯曲振动峰(720-690 cm-1)[7]，表明 CMC 上成功接枝 PMB；CMC 的ζ-电势为-0.29±0.16 mV，接枝后 CMC/PMB(Sample 3)的电势达到 4.1±0.23 mV，证实 CMC 上接枝 PMB 成功，得到带正电的 CMC/PMB；Co@CMC/PMB 纳米酶具有强且稳定的化学发光信号，30 秒内完成一次检测；Co@CMC/PMB 纳米酶的微观形貌显示为光滑、均匀的球形颗粒，平均粒径 200nm 左右。

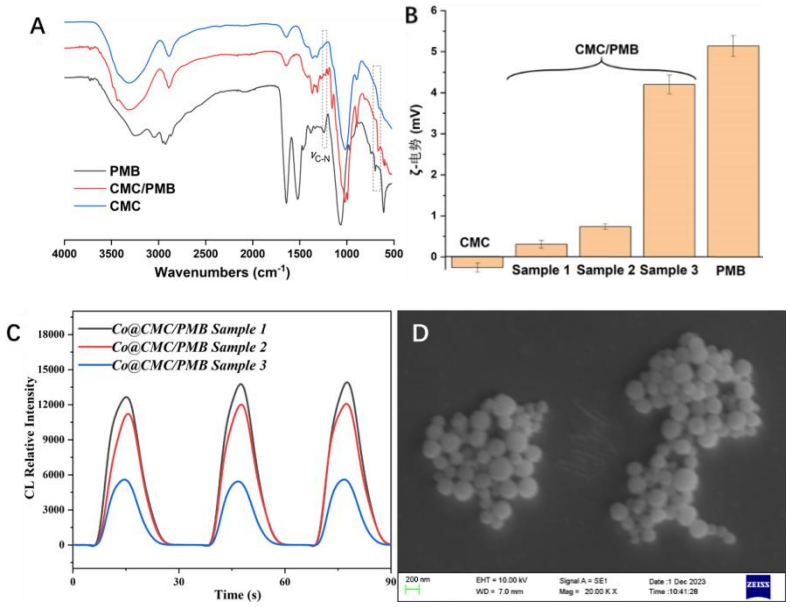


图 1 CMC/PMB 的 A)FTIR 和 B)ζ-电势；C) *Co@CMC/PMB* 纳米酶催化鲁米诺/H_2O_2 体系的 CL 发光；D) *Co@CMC/PMB* 纳米酶的 SEM

细菌检测实验表明：Co@CMC/PMB 纳米酶激发的 CL 光强与大肠杆菌、沙门氏菌的浓度呈线性负相关，与金黄色葡萄球菌、链球菌的浓度无线性相关。可见，Co@CMC/PMB 纳米酶是一种快速、灵敏、非标记定量检测 G-菌的新方法，完全满足畜禽养殖业快速、准确诊断 G-菌的产业需求。

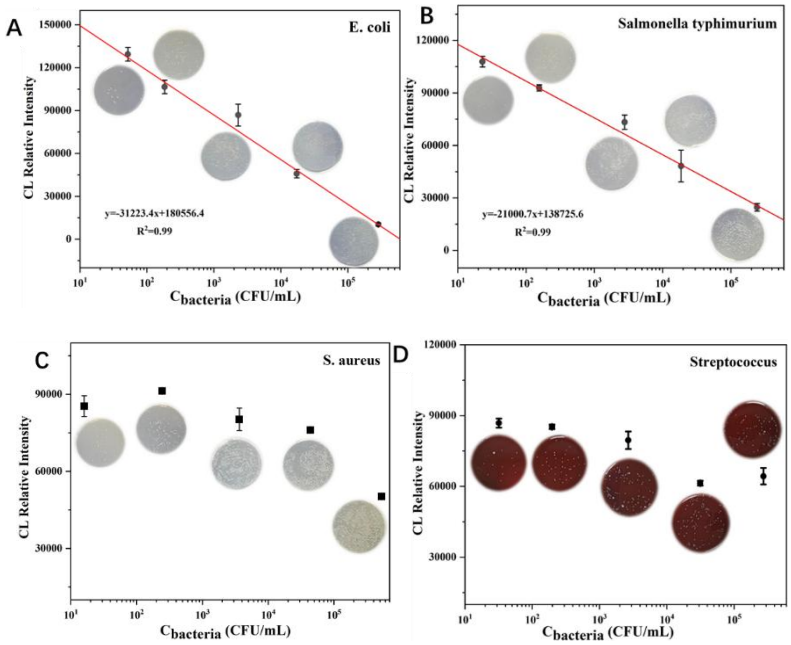


图 2 *Co@CMC/PMB* 纳米酶 CL 检测 A)大肠杆菌、B)鼠伤寒沙门氏菌、C)金黄色葡萄球菌和 D)链球菌

关键字 纳米酶，革兰氏阴性菌，化学发光

参考文献

1.CHENG M, LIU X, SHENG H, et al. MAPS: A new model using data fusion to enhance the accuracy of high-resolution mapping for livestock production systems[J]. One Earth, 2023,6(9): 1190-1201.

2.LIU Y, MENG X, LUO X, et al. Molecularly imprinted polymer combined with MOF-assisted redox recycling amplification: A powerful electrochemical sensing strategy for pathogenic bacteria[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2024,410: 135682.

3.SHEN J, ZHOU X, SHAN Y, et al. Sensitive detection of a bacterial pathogen using allosteric probe-initiated catalysis and CRISPR-Cas13a amplification reaction[J]. Nature Communications, 2020,11(1).

4.郭燕，胡付品，朱德妹，等. 2022 年 CHINET 三级医院细菌耐药监测[J]. 中国感染与化疗杂志, 2024,24(3): 277-286.

5.XU Y, CHEN H, ZHANG H, et al. The MCR-3 inside linker appears as a facilitator of colistin resistance[J]. Cell Reports, 2021,35(7): 109135.

6.SUN Y, LIU Y, LOU Z, et al. Enhanced performance for Hg(II) removal using biomaterial (CMC/gelatin/starch) stabilized FeS nanoparticles: Stabilization effects and removal mechanism[J]. Chemical Engineering Journal, 2018,344: 616-624.

7.AO H, DUAN K, ZHANG D, et al. Biofunctionalized bacterial cellulose grafted with bacitracin for wound healing[J]. Journal of Materials Science, 2024,59(24): 10987-10997.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

呼出气光谱增强的可挥发气体辨识与疾病诊断研究

朱建雄*
东南大学

呼出气的可挥发性有机化合物（VOCs）在医疗疾病早期诊断中发挥着重要的生物标志作用。大多数现有的 VOCs 传感器都使用半导体、光学和电化学方法，这些方法只能以缓慢的响应来测量 VOCs 的总浓度，导致 VOCs 检测缺乏选择性和低效率。红外光谱技术通过化学拉伸的特征振动引起的吸收指纹来检测 VOCs 分子的化学结构。利用纳米能源诱导的超高电场实现结构振动增强，改善光与物质的相互作用,它具有响应快、量化准确和选择性好的优点。中红外光谱之间的吸收和反射光谱将成为一种解决方案，利用红外光谱，通过傅里叶变换红外光谱（FTIR）设备在宽范围的挥发性有机物中进行吸收和反射，准确地实现了所有分子组分的表征。纳米能源诱导电荷积累逻辑的启发达到高电压输出,实现基于早期快速响应 VOCs 的机器学习辅助等离子体增强中红外吸收。我们提出呼出气混合挥发性有机物的环境中，挥发性有机物可以从中红外光谱中很好地定量，展示了纳米能源诱导光谱增强的分子相互作用基本的潜在价值，在医疗疾病诊断具有潜在应用价值。

关键字 光谱；疾病诊断；机器学习；气体检测；呼出气

参考文献

1.J. X. Zhu, S. Ji, Z. Ren, W. Wu, Z. Zhang, Z. Ni, L. Liu, Z. Zhang, A. Song, C. Lee. Triboelectric-induced ion mobility for artificial intelligence-enhanced mid-infrared gas spectroscopy. *Nature Communications*. 14 (2023):2524.
2.J. X. Zhu, Z. Sun, J. Xu, R. Walczak, J. Dziuban, C. Lee. Volatile Organic Compounds Sensing Based on Bennet Doubler-inspired Triboelectric Nanogenerator and Machine Learning-assisted Ion Mobility Analysis. *Science Bulletin*, 2021, 66, 1176-1185.
3.J. X. Zhu, Z. Ren, C. Lee. Toward Healthcare Diagnoses by Machine Learning-Enabled Volatile Organic Compound Identification. *ACS Nano,* 2021, 15, 1, 894–903.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

仿生识别纳米材料的可控合成及其在生物成像中的应用

郭展辰[1]、刘震*[2]
1. 西安电子科技大学
2. 南京大学

生物成像技术的发展推动生物、医学的重大发现和不断进步。发展高性能、高灵敏度、多模态和多功能的成像探针具有十分重要的意义。纳米材料由于具有独特的物理响应，能提供高灵敏度的检测信号，近十年来被广泛用于生物成像。这些生物成像应用成功的前提是需要可靠的纳米材料功能化手段。纳米材料本身缺乏分子识别的能力，其对靶标的识别往往需要利用抗体、凝集素和适配体等生物识别分子对其表面进行功能化。由于这些生物识别分子与纳米材料存在结构和稳定性上的显著差异，这样的表面功能化所赋予的性能往往不甚理想。一个比较理想的解决方案是直接在基底纳米材料的表面通过合理设计和可控合成构建具有分子识别能力的功能化材料层。基于此，报告人发展出能对各种纳米材料表面进行仿生分子识别功能化的可控分子印迹技术。这些技术是高效、通用和可控的技术，能对各种纳米材料表面进行仿生分子识别功能化，得到具有优异的分子识别性能的仿生识别纳米材料，用于识别各种各样的蛋白质及其糖基化和磷酸化等翻译后修饰。在此基础上，我们将该技术与先进纳米技术相结合，发展出一系列具备优异识别性能、良好生物兼容性和稳定性以及多重响应性的仿生识别纳米材料，用于生物成像。通过细胞和活体荧光成像，实现了对三阴性乳腺癌细胞的靶向和区分，并进一步对小鼠脑组织切片上神经节苷脂的分布进行成像分析。最近，我们还成功实现了对癌症病人细胞和组织切片上酪氨酸磷酸化的拉曼成像。除了生物成像应用，所制备的仿生分子识别纳米材料已被本人和课题组其他成员成功应用于疾病诊断、癌症治疗、新冠病毒抑制、复杂体系的分离分析以及仿生纳米酶等方面，并取得了重要进展。因此，该策略为具有靶向能力的先进纳米成像探针的设计和功能化开辟了新的途径，在生物医学应用中具有广阔的前景。

关键字 仿生识别；分子印迹；功能化；纳米材料；生物成像

参考文献

1. Z. Guo; R. Xing; M. Zhao; Y. Li; H. Lu; Z. Liu, *Adv. Sci.*, **2021**, 8, e2101713.
2. R. Xing; Z. Guo; H. Lu; Q. Zhang; Z. Liu, *Sci. Bull.*, **2022**, 67, 278-287.
3. Z. Guo; M. Zhao; Z. Liu, *Microchim. Acta*, **2022**, 189, 289.
4. Z. Guo; J. Zhao; H. He; Z. Liu, *Chem. Asian. J.*, **2022**, 17, e202200844.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

自动化小型质谱及其临床检测应用

霍新明*、周源浩、叶子、周建华
中山大学 生物医学工程学院

质谱技术凭借其高特异性、高灵敏度等优势，在现代化学分析检测行业发挥重要的作用。特别地，随着生命科学、精准医疗和家庭医疗等领域的高速发展，质谱仪器在现场化、快速检测方面的需求也越来越旺盛。虽然目前的质谱仪器性能越来越优，但已有临床质谱检测方案主要采用液相色谱和质谱联用的形式，其仪器相比昂贵、庞大，前处理复杂，通量低，而且对操作人员专业能力要求高，维护成本大，所以目前已有质谱方案很难满足临床急诊、社康现场快速检测和中小型药企的需求，如何开发自动化、高通量、高效率的前处理小型质谱联用方案与仪器设备是目前质谱发展的重要方向。在本报告中，我们将分享本团队及相关合作单位近期在临床质谱开发与应用领域的相关工作。我们联合开发了基于磁珠自动化富集分离前处理的小型质谱联用仪，结合自动化前处理设计-小型离子阱质谱分析-人工智能算法，成功实现了血液中多目标药物的自动化磁珠富集提取与质谱快速定性定量分析，并可实现多样本的高通量并行快速检测，为急诊检测提供了现场快速分析的创新型工具。

关键字 血液检测，临床质谱；小型化；自动化；智能化

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

一种基于光子晶体的尿糖检测仪器的研制

伍昱川[1]、王静[2]、孟子晖*[1,3]
1. 北京理工大学
2. 青岛盛瀚色谱技术有限公司
3. 北京理工大学长三角研究院

据 RESEARCH AND MARKETS 公布的《中国糖尿病市场报告:2024-2032》显示，中国目前是世界上糖尿病患者最多的国家，患病率已经上升到 12%左右，患者人数高达 1.43 亿，稳居全球首位，且有低龄发病的趋势[1]。糖尿病的诱因多维且复杂，尽早检出并确诊能有效地控制病情，且糖尿病患者需要长期的病症监控，两者对葡萄糖的检测都有较为严格的要求。

目前临床上会结合患者/准患者的需求综合考量血糖和尿糖指标[2]。血糖指标直接可靠但检出时间长易滞后，且属于侵入式检测，会造成卫生、健康、心理等多方面的附带问题[3,4]；而尿糖检测易被干扰，可靠性相对较差，其核心问题在于目前的主要的葡萄糖检测方式以酶催化结合电化学检测为主，电化学检测易受到尿液的复杂干扰因素影响，而酶催化检测则易因酶活性的不稳定而降低可靠性[5,6]。

本研究通过苯硼酸和光子晶体水凝胶传感器的结合，有效利用苯硼酸与葡萄糖的可逆结合提高葡萄糖检测的特异性，排除尿糖中复杂的干扰因素同时绕过酶催化的不稳定性，得到高可靠性的尿糖检测方式。

本研究还搭建了一种基于一维光子晶体布拉格衍射原理的光子晶体检测平台以用于上述苯硼酸光子晶体水凝胶传感器检出结果的快速数据化以适应实际的尿糖检测需要。

关键字 糖尿病，尿糖，葡萄糖，光子晶体，苯硼酸

参考文献

1.张杰,丁祥龙,龙妍,等.1990～2019 年中国 2 型糖尿病发病趋势及 2020～2030 年预测[J].华中科技大学学报(医学版),2024,53(03):315-320.
2.李莹,石红霞,孙文龙.血糖检测和尿糖检测在糖尿病患者中的诊断价值比较[J].糖尿病新世界,2024,27(12):56-59.
3.向鹏君,季晖,顾铭,等.糖尿病创面的炎症机制研究进展[J].药学研究,2017,36(11):667-670.
4.陈非,陈文姬,王和友,等.2 型糖尿病患者社会资本、心理健康与饮食依从性的关联性研究[J].实用预防医学,2024,31(10):1163-1167.
5.黄凯.过渡金属/多孔碳复合材料制备及其非酶葡萄糖电化学传感研究[D].河北大学,2024.
6.王翠英.糖尿病慢性肾衰竭患者血糖检验的方法[J].世界最新医学信息文摘,2015,15(73):143.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

融合自动编码器和影像组学方法识别 MRI 宫颈肿瘤亚型

何佳慧[1,2]、秦文健*[1]
1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. 宁波诺丁汉大学

宫颈癌肿瘤亚型的区分对于个性化治疗计划至关重要。我们的研究利用放射组学和自动编码器，通过分析磁共振成像（MRI）数据来实现这一目标。我们构建的模型整合了宫颈肿瘤的整体和局部区域的特征，从而提高亚型分类的准确性。旨在研究这些特征的表示如何影响我们模型的预测性能，最终有助于更细致地理解宫颈肿瘤异质性。

回顾性分析研究在 100 名宫颈癌患者数据上进行。我们利用 3D 自动编码器网络和影像组学工具从全局影像和影像肿瘤分割区域中提取特征。在进行特征选择的性能评估之后，生成训练机器学习算法，以预测病理确认的两种宫颈癌亚型-鳞状细胞癌和腺癌。模型的性能通过曲线下面积（AUC）、特异性、F1 评分和精确度来评估。

特征融合模型在支持向量机分类器中表现出最佳性能（融合模型 AUC 为 0.93 , 95% 置信区间[0.670, 1.0]; 自动编码器模型 AUC 为 0.53 ,95% 置信区间[0.354, 0.901]）。无论 MRI 轴位视图采用何种分类方法，融合模型相比与单一模型始终呈现较高的性能结果。

我们的方法表明融合 MRI 影像组学和自动编码器特征在临床诊断中具有显著优势，可有效实现非侵入性通过影像学分析宫颈癌肿瘤亚型，值得进一步研究和在宫颈癌诊断中的潜在应用。

关键字 宫颈肿瘤；影像诊断分析；亚型分类；特征表征

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

基于 iTRAQ 技术的三阴性乳腺癌及 HER2 高表达乳腺癌外泌体蛋白质组学研究

李丽仙、曾金、李巧巧、唐甜甜、陈万一*
重庆大学附属肿瘤医院

三阴性乳腺癌（TNBC）及 HER2 高表达乳腺癌具有恶性程度高，侵袭性强，治疗棘手及易复发等特征，缺乏特异性及灵敏度的肿瘤标志物及分子靶向治疗靶点。因此，寻找新的 TNBC 肿瘤标志物及分子靶向治疗靶点迫在眉睫。外泌体作为液态活检中的重要组成部分，近几年，在肿瘤诊断、治疗和预后具有巨大的潜能，有望成为新的肿瘤标志物或分子靶向治疗靶点。但目前，对于 TNBC 及 HER2 高表达乳腺癌患者中外泌体的蛋白质的研究还处于空白阶段。课题组依托本单位资源与病例随访系统，基于蛋白质组学的 iTRAQ 技术，对 TNBC 患者、HER2 高表达乳腺癌患者及正常人血浆中的外泌体蛋白质进行代蛋白质组学研究。首先分离和纯化术患者血浆及正常对照品的血浆的外泌体，采用电镜对所提取的外泌体进行形态鉴定；利用 LC-MS/MS 质谱技术结合蛋白质组学分析鉴定乳腺癌及其外泌体的主要蛋白，筛选共同表达蛋白及差异蛋白；本项目共鉴定到 159 个蛋白（按照至少包含两个 unique 肽段过滤，共鉴定到 109 个蛋白），其中定量结果分别为 139（HER2:NC），142（TNBC:HER2），144（TNBC:NC），定量结果中发现的存在显著差异的蛋白数分别为 29（HER2:NC），28（TNBC:HER2），26（TNBC:NC），（其中显著性差异蛋白质数目按照 up_regulate≥1.5 或 down_regulate≤0.67，P_value≤0.05 进行相应的筛选）。对所有鉴定蛋白和显著性差异蛋白质进行了功能注释（包括 GO、COG、Pathway 分析），对所有显著性差异蛋白质做了功能富集分析（GO 富集，Pathway 富集）。这些差异蛋白的发现，可以作为 TNBC 潜在的早期诊断 TNBC 的肿瘤标志物或者治疗靶点，也为后续临床分子标志物的建立和液体活检的可行性实施提供思路。

关键字 iTRAQ 技术；三阴性乳腺癌（TNBC）；HER2 高表达乳腺癌；外泌体蛋白质组学

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

微生物的质谱“嗅觉"检测技术与应用实例

朱建雄*[1]、邢云惠[2]、黄民[2]
1. 广东联捷生物科技有限公司
2. 中山大学药学院

微生物检测目前常用 MALDI-TOF 核酸检测以及传统的培育/显微镜观察两种方法，本报告提供一种用质谱原位电离离子源直接"嗅"出微生物种类及数量的新方法，其中涉及一种新型离子源，原理是利用质谱自身的真空将气体样品吸入一个辉光放电装置，在高频高压的激发下，吸入的样品气体与载气一同形成等离子体，其中的待测物自然也被离子化，质谱仪的真空及其入口处的收集电压随时把产生的离子吸进其内部的质量分离器，随后被检测器检测而产生质谱信号。用这种检测方式测微生物，一秒钟就能检测一个样品。报告中将详述工作原理、实验设计、及应用实例。

关键字 微生物检测、质谱检测微生物、嗅觉离子源、原位电离、气体物质检测、气味标识物研究

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

阿尔兹海默症血浆标志物的检测和标准化

周明*
深圳安赛诊断技术有限公司

随着人口老化和预期寿命的延长，老年痴呆全球患者的数目预计将从目前的 5 千 5 百万增至 2050 年的一亿三千万，其中约 70%属于阿尔兹海默症 (AD) 患者。而中国是世界上痴呆症患者人数最多的国家，患者数量占全球患者的 25%。AD 临床诊断的金标准是 PET 和脑脊液(CSF)标志物免疫检测，但由于 PET 的高昂诊断费用以及脑脊液取样的不方便和高风险，大多数老年痴呆的病人并没有得到确诊，也没有得到治疗。

作为免疫检测的对象，以 Aβ 和 磷酸化 Tau 蛋白为主的 AD 标志物在脑脊液的浓度足够高，能被常规免疫分析方法定量检测。但由于血脑屏障的存在，这些标志物在血液中浓度太低，病人和正常人区分不大，血液的干扰因素也太多，在过去被认为不可能以临床有价值的方式被定量精准检测。

最近几年，在 AD 治疗药物取得突破的同一时间节点，可对标 PET 影像和脑脊液诊断结果的血浆标志物检测手段也恰逢其时地出现了。不同于传统的影像技术和脑脊液检测，血浆标志物检测降低了诊断费用和对患者的创伤或伤害，使得 AD 早期筛查和诊断成为可能，也使得药物或其它干预手段的疗效评价或伴随诊断成为可能， 更使得未来药物开发过程中的临床试验成本有望大大降低。

推动 AD 血浆标志物检测形成爆炸态势的技术和仪器平台主要有三个：Quanterix 的单分子检测 (Simoa), MSD 的电化学发光 (ECL) 以及免疫沉淀质谱 (IP-MS)。然而这些在研究中发挥了巨大作用的平台技术的临床可及性仍然不如常规免疫分析平台技术，在常规 (电)化学发光已成为临床检验实验室主流的格局下，提升现有常规免疫分析仪器的检测性能，使得 AD 血浆标志物检测能够在现成的平台技术上开展，将使得 AD 血浆标志物早期检测更加便捷和可及，也将使得 AD 药物早期干预的疗效更容易得到评价。

随着 AD 核心标志物和其它相关标志物的确定以及若干高灵敏检测技术涉足临床应用，标志物在血浆样本中的低浓度、低的变化幅值、被测物（如 p-Tau 的多样性和异质性）以及抗体识别位点和标准品的差异等因数使得检测方法的标准化和临床决定值的建立成为 AD 血浆标志物临床应用所必须解决的问题。

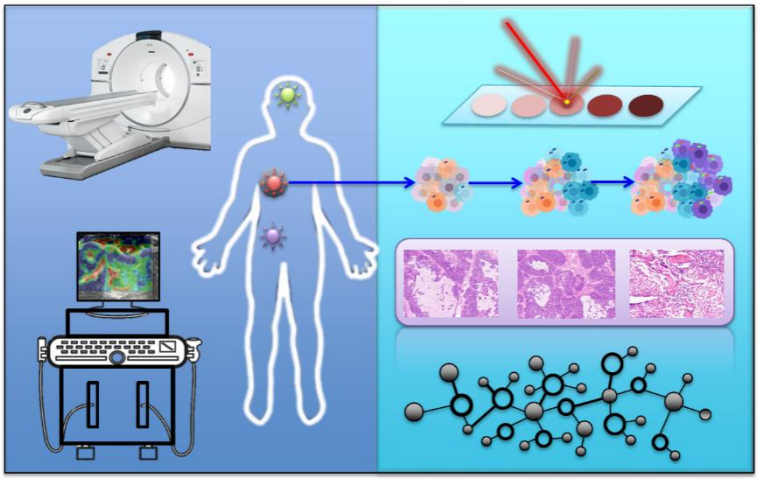
关键字 阿尔兹海默症，标志物， 单分子检测， 电化学发光，磷酸化 Tau

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

Spatial omics and clinical imaging technique for accurate diagnosis of tumor

赵超、罗茜*
中国科学院深圳先进技术研究院

As a global public health event, the emergence of malignant tumors seriously affects human health, longevity and quality of life. The occurrence and development of tumors undergoes the extremely complex processes, showing high spatial and temporal heterogeneity in multiple bio-information and disease progression. These features affect tumor metastasis and drug resistance. In order to explore the tumor heterogeneity, a variety of clinical imaging techniques and spatial omics techniques have been rapidly developed. Tumor characteristics are accurately evaluated by using the conventional clinical imaging technique with a non-invasive advantage. However, it is difficult to obtain accurate tumor staging and more molecular information using clinical imaging technique. Spatial omics technology can be used to determine a variety of cell types, spatial and temporal distribution, molecular typing and molecular interaction networks, thereby obtaining the accurate panoramic spectrum in tumor biology. Although spatial omics technique can detect a variety of molecules and their interactions, such as, genes, proteins, metabolites, as well as the interactions between gene-gene, protein-protein, metabolite-metabolite, gene-protein, gene-metabolite, and protein-metabolite, it can't provide in vivo information. The combination of clinical imaging and spatial omics technology can complement advantages, and has great application prospects in clinical and basic scientific research. The novel fusion technique plays an important role in promoting the accurate analysis of the spatio-temporal heterogeneity of tumors, the identification of molecular typing, and the accurate diagnosis and prediction of tumor progression.



关键字 spatial omics, tumor analysis

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：报告

改进型 NMS 算法在仪器研制中的应用

闫书雄*、罗茜
中国科学院深圳先进技术研究院

面对定制类小批量仪器的需求，仪器设计开发的复杂度抑制了质谱仪器在相关行业中的应用，在产业链中遗留下很多卡脖子的技术空白；同时仪器开发需要很强的专业性，人工智能技术在这一领域的应用还存在很多困难，而优化算法的直接应用，特别是在数值模拟过程中的应用能很好的解决这一问题。

针对质谱仪器中物理场的特点，在电磁场模拟软件 SIMION 的平台上，通过优化算法调整设计参数，通过数值模拟自动完成繁复的调优过程，极大降低开发难度，提高研发效率，促进科学仪器在不同行业中的应用发展。

关键字 寻优算法，单纯形算法，仿真，离子光学，仪器研制

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

人血浆中苯妥英抗癫痫药物的二维液相色谱检测方法学验证

易特、孙元社*、李彤
苏州依利特科技有限公司

癫痫是由多种病因引起的慢性脑部疾病，发病率较高，临床上一般用抗癫痫药物进行治疗。目前，国内外较常用的抗癫痫药物主要有传统药物丙戊酸钠、苯巴比妥、苯妥英钠及卡马西平，以及新型进口药物托比酯、拉莫三嗪及奥卡西平等。癫痫患者需长期用药，且对抗癫痫药的药物反应具有很大的个体差异。当苯妥英与其它药物联合用药时，存在明显相互作用。为提高疗效、减少毒副反应，需进行抗癫痫药的血药质量浓度监测，合理调整用药剂量[1]。血浆抗癫痫药物的监测方法很多，目前以免疫测定法、高效液相色谱法(HPLC)，以及高效液相色谱与质谱仪（LC-MS/MS）联用较为常用，上述方法在检验体系存在试剂成本高、前处理效率低以及仪器成本高等问题[2]。

本文采用二维液相色谱方法(2D-LC)，可以高效、快速测定人血浆中苯妥英浓度，提高临床检测效率。本实验采用依利特 Supersil C8 (5μm，ID4.6×50 mm)色谱柱为一维柱，一维流动相为乙腈:50mmol/L NaH2PO4 水溶液(氨水调节 pH 至 6.5):甲醇=25:50:25，流速为 0.6 mL/min；Supersil ODS-B (5μm,ID4.6×250 mm)色谱柱为二维柱，二维流动相为乙腈:50mmol/L NaH2PO4 水溶液(氨水调节 pH 至 6.5):50mM NaH2PO4 水溶液(氨水调节 pH 至 3.0):甲醇=10:5:44:41，流速为 1.0 mL/min；柱温为 45℃，进样量 20 μL，检测波长为 235nm[3]。结果表明：苯妥英的保留时间为 9.250 min，色谱峰拖尾因子为 1.2，分离能力强，特异性良好。连续进样 7 次，苯妥英保留时间 RSD 值为 0.14%，峰面积 RSD 值为 0.87%。在 2.51~50.2μg/ml 浓度范围内，苯妥英线性关系良好，相应的标准曲线回归方程为 Y = 4.14X+0.046(r=0.9995)，定量限浓度为 2.51μg/ml(信噪比大于 10)。苯妥英回收率为 95.1-98.8%，日内、日间精密度 RSD 小于 4%，样品前处理回收率为 96.9%，均符合生物样品分析的要求。本检测方法具有灵敏度高、准确性和重复性好，样品前处理方法简单，为临床制定合理化给药方案提供了实验依据。

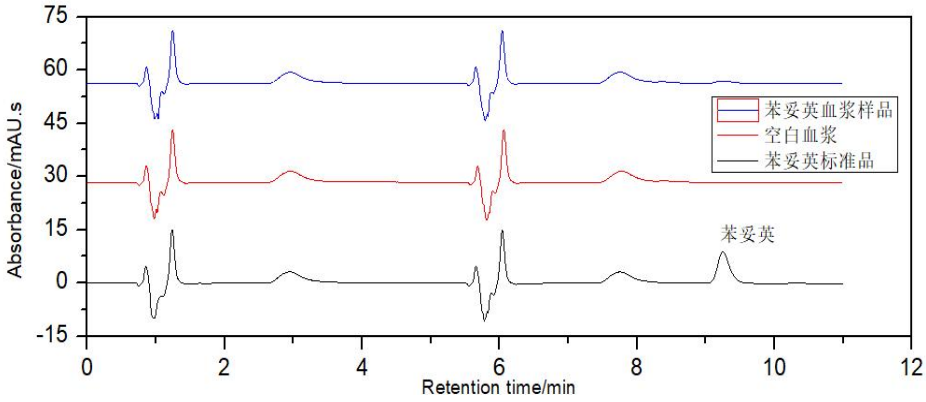


图 **1** 苯妥英标准品、空白血浆、人血浆样品分离色谱图

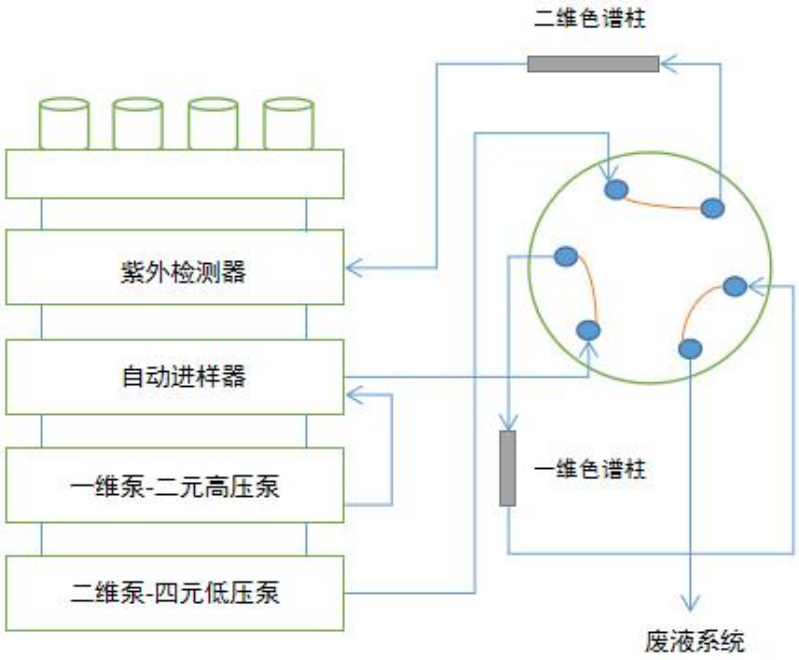


图 2 二维液相色谱系统液路流程图

关键字 二维液相色谱，血药浓度检测，方法学验证，抗癫痫药物

参考文献

1.朱亚丽，高效液相色谱法测定人血浆中苯妥英钠和苯巴比妥的浓度[J]．南通大学学报(医学版)，2011 :31(1):27-29,32.
2.曲素欣，陈湛芳，液质联用法监测癫痫患儿卡马西平血药浓度及结果分析[J].《中国医学创新》，2014: 26(11):101-103.
3.柳航，葛卫红，全自动前端二维液相色谱检测人血清中卡马西平的血药浓度.第四届全国治疗药物监测学术年会.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

基于滚环扩增信号放大和核酸自身丁达尔效应的免疫分析新方法

朱文丽、杜函聪、苏广华、蒋卫芳、韦琦、袁亚利、邹建梅、聂瑾芳、张云*
桂林理工大学

本工作协同利用滚环扩增（Rolling circle amplification, RCA）信号放大技术和所扩增核酸产物自身的丁达尔效应（Tyndall effect, TE），开发了一种免疫分析新方法用于人癌基因蛋白（Human oncogenic protein, HOP, p190-Bcr-Abl）模型分析物的高灵敏免仪器定量检测。当样品中存在 HOP 时，分析物介导一抗-抗原-二抗/DNA 引物“三明治”复合物形成，随后触发高效 RCA 反应，产生大量长单链 DNA 扩增产物。在此过程中，由于置换链反应作用，RCA 产物从微孔板表面脱离并分散到溶液中。使用激光笔作为手持光源照射该扩增核酸产物胶体溶液即可观察到肉眼可见的 TE 信号。采用智能手机用于 TE 信号读取则能进一步实现 HOP 的定量分析。TE 强度与样品中 HOP 浓度呈正比。研究结果显示，在优化的实验条件下，新方法检测 HOP 的线性浓度范围为 375 ~ 12000 ng/mL。根据 3σ原则估算检测下限约为 46 ng/mL。此外，将其用于人血清实际样品分析，所得回收率范围为 98.38~107.35%。

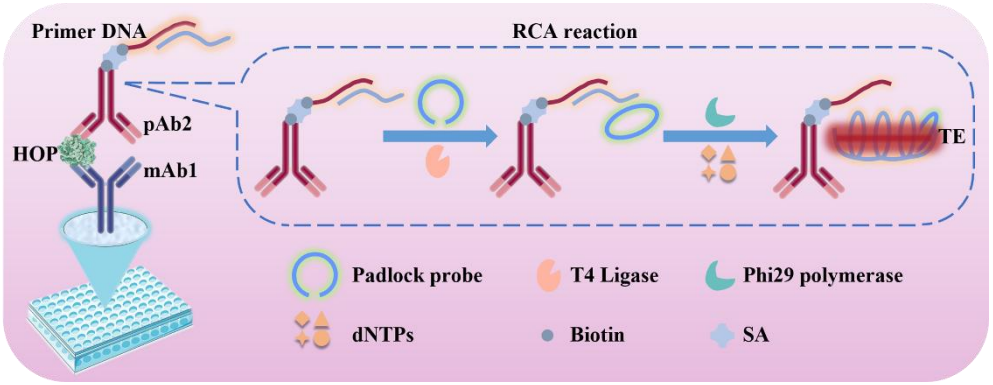


Fig. 1 Schematic representation of the new immunoassay based on rolling circle amplification (RCA) and Tyndall effect (TE).

关键字 免疫分析；滚环扩增；丁达尔效应；免仪器定量检测

参考文献

1. W. Xiao, Z. Deng, J. Huang, Anal. Chem., **2019**, 91, 15114-15122.
2. Z. Deng, W. Jin, Q. Yin, Chem. Commun., **2021**, 57, 2613-2616.
3. C. Liu, Z. Deng, Y. Deng, Sensor. Actuat. B-Chem., **2023**, 380: 133333-133338.
4. Y. Tang, X. Mo, L. Yuan, Sensor. Actuat. B-Chem., **2024**, 405: 135254-135260.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

高通量单细胞代谢物分析揭示肺癌顺铂耐药性传递机制

潘思远[1]、刘长宜[2]、杨金磊[1]、杜沐蓉[1]、刘鹏[2]、张四纯*[1]、张新荣[1]
1. 清华大学化学系，北京市，100084
2. 北京协和医院疑难重症及罕见病国家重点实验室，北京市，100730

细胞间的相互作用在肿瘤微环境中起着至关重要的作用，尤其是在细胞耐药性的形成和传播方面，这一现象对于癌症治疗具有深远的影响。研究表明，癌细胞能够通过直接接触转移耐药性，从而影响药物治疗的效果[1,2]。此外，通过分泌细胞因子的间接接触也是细胞间传递耐药信号的公认机制。例如，目前已观察到生物活性物质通过细胞外囊泡[3]、蛋白质[4]和小 RNA[5]在细胞间转移。除癌细胞外，肿瘤微环境中的其他细胞类型，如免疫细胞和基质细胞，也参与耐药性的传播[6]。

然而，目前对于细胞耐药性传递的研究，还局限在荧光流式细胞术（FCM）和单细胞 RNA 测序（scRNA-seq）等手段。FCM 存在荧光通道重叠的问题，无法同时研究大量细胞表面蛋白；而 scRNA-seq 局限于转录组的研究，缺乏细胞代谢物信息。在过去的二十年中，使用质谱技术的单细胞代谢物研究已经得到发展，基于探针提取、原位质谱成像的方法陆续被提出[7,8]。张新荣课题组提出了基于同轴流的免标记质谱流式细胞术（CyESI-MS），不仅大大提高了单细胞的检测通量，而且为揭示细胞代谢水平的异质性提供了新的机会[9,10]。

在这项工作中，我们开发了一套研究细胞间的耐药传递性的单细胞代谢物研究方法，证明了共培养会导致敏感型细胞中产生新的耐药型亚群。我们首先评估了敏感型 A549 细胞和耐药型 A549 细胞的代谢差异和耐药差异。我们采用转录了红色荧光蛋白的敏感型细胞和没有转录的耐药型细胞共培养，用于筛选出两个群体。通过单细胞代谢物数据分析，我们发现共培养后的敏感细胞发生了较大的改变，其中磷脂酰胆碱是代表性的差异性物质。最终，我们证明共培养诱导产生了一个新的代谢状态亚群。总之，单细胞代谢物分析为揭示顺铂耐药的复杂机制提供了一个强大的平台，并有望推进个性化的癌症治疗策略。

关键字 单细胞；质谱；代谢组学；肺癌耐药性；细胞相互作用

参考文献

1.K. Sugita, I. Onishi, R. Nakayama, S. Ishibashi, M. Ikeda, M. Inoue, R. Narita, S. Oshima, K. Shimizu, S. Saito, S. Sato, B. S. Moriarity, K. Yamamoto, D. A. Largaespada, M. Kitagawa and M. Kurata, *Communications Biology*, 2023, **6**, 582.
2.C. Ni, X. Lou, X. Yao, L. Wang, J. Wan, X. Duan, J. Liang, K. Zhang, Y. Yang, L. Zhang, C. Sun, Z. Li, M. Wang, L. Zhu, D. Lv and Z. Qin, *Nature Communications*, 2022, **13**, 5919.
3.P.-p. Hou and H.-z. Chen, *Cancer Letters*, 2021, **516**, 48-56.
4.A. Levchenko, B. M. Mehta, X. Niu, G. Kang, L. Villafania, D. Way, D. Polycarpe, M. Sadelain and S. M. Larson, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2005, **102**, 1933-1938.
5.A. Menachem, V. Makovski, O. Bodner, M. Pasmanik-Chor, R. Stein, N. Shomron and Y. Kloog, *Oncotarget*, 2016, **7**.
6.Q. Shi, Q. Shen, Y. Liu, Y. Shi, W. Huang, X. Wang, Z. Li, Y. Chai, H. Wang, X. Hu, N. Li, Q. Zhang and X. Cao, *Cancer Cell*, 2022, **40**, 1207-1222.e1210.
7.H. Mizuno, N. Tsuyama, T. Harada and T. Masujima, *J Mass Spectrom*, 2008, **43**, 1692-1700.

8.L. Rappez, M. Stadler, S. Triana, R. M. Gathungu, K. Ovchinnikova, P. Phapale, M. Heikenwalder and T. Alexandrov, *Nat Methods*, 2021, **18**, 799-805.
9.H. Yao, H. Zhao, X. Zhao, X. Pan, J. Feng, F. Xu, S. Zhang and X. Zhang, *Anal Chem*, 2019, **91**, 9777-9783.
10.S. Pan, C. Liu, H. Yao, X. Pan, J. Li, J. Yang, M. Du, P. Liu, S. Zhang and X. Zhang, *Chem Commun (Camb)*, 2024, **60**, 392-395.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

蛋白质聚集态物理微环境的可视化研究

沈宝星[1]、张鑫*[2]
1. 南京师范大学
2. 西湖大学

分子转子荧光团(RBFs)会随着微环境粘度的增加产生荧光激活效应，基于该现象 RBFs 在众多领域具有广泛的应用前景。然而如何控制 RBFs 的荧光信号对粘度变化的响应行为仍然是领域内的一大挑战。本研究中，我们证实了在 RBFs 分子激发态下构筑并调控分子内氢键可以有效调节 RBFs 的旋转势垒，从而实现在微环境粘度体系中对 RBFs 荧光激活行为的合理调控。基于该策略，本文以 4-羟基苄基-咪唑啉酮(HBI)为基础，开发了一系列具有广泛粘度敏感性的 RBFs。结合我们之前报道的 AggTag 方法，以及利用这些探针多样化的粘度敏感性和荧光发射光谱，实现了在活细胞内对蛋白质的多步聚集过程中形成的可溶性寡聚物和不溶性聚集体的双通道检测。总之，该研究表明，在 RBFs 上构筑激发态分子内氢键可以合理调控其旋转势垒，从而实现对粘度敏感性的精准调控。除了 RBFs，我们预期类似的策略可以广泛的应用于调控诸多依赖于激发态分子旋转运动产生荧光信号变化的荧光团，包括聚集诱导发射荧光团。

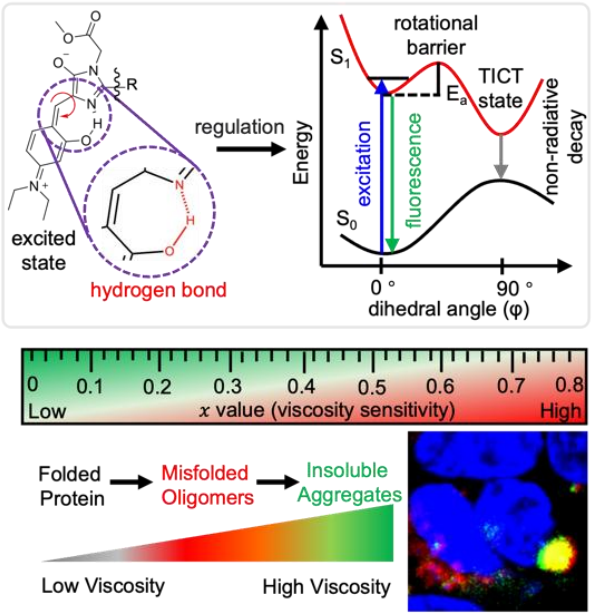


Fig. 1 The viscosity sensitivity of rotor-based fluorophores can be regulated by the installation of intramolecular hydrogen bonds at excited states.

关键字 蛋白质聚集体；荧光探针，生物成像

参考文献

1.Wolstenholme, C. H.; Hu, H.; Ye, S.; Funk, B. E.; Jain, D.; Hsiung, C.-H.; Ning, G.; Liu, Y.; Li, X.; Zhang, X. *Journal of the American Chemical Society*. **2020**, **142 (41)**, 17515-17523.

2.Shen, B.; Jung, K. H.; Ye, S.; Hoelzel, C. A.; Wolstenholme, C. H.; Huang, H.; Liu, Y.; Zhang, X. *Aggregate*. **2022, 4(3)**, e301.

3.Shen, B.; Liu, L.; Huang, Y.; Wu, J.; Feng, H.; Liu, Y.; Huang, H.; Zhang, X. *Aggregate*. **2023**, **5(1)**, e421.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

集成微通道技术的黑磷基质辅助激光解吸电离质谱检测血清中磷脂

杨致一、李文波、罗茜*
中国科学院深圳先进技术研究院

大气污染可影响儿童呼吸健康，使儿童哮喘、支气管肺炎等疾病的患病率增加。血液中的磷脂水平与多种疾病相关，监测磷脂代谢谱图对疾病诊断有重要意义。基质辅助激光解吸电离质谱（MALDI-MS）在生物样本中磷脂的分析有广泛应用，然而实际测量中在提高灵敏度和重复性、以及控制基质杂峰等问题上仍存在挑战。本文以黑磷作为 MALDI-MS 中的基质，集成微通道技术，开发新方法以检测少量血液样本中的一系列磷脂。该方法检测磷脂酰胆碱类（PC）和溶血磷脂酰胆碱类（LPC）脂质的灵敏度高，检测限低至 0.2 μg/mL；同时也具备重复性较强、可检测高盐样本等优点。利用该方法，检测了哮喘和支气管肺炎儿童患者血清中的磷脂代谢谱图和 PC/LPC 比值。该方法是黑磷材料和微通道技术在代谢组学领域中的一项新型应用，为体液中疾病标志物检测的方法开发提供了新的思路。

关键字 磷脂；MALDI；黑磷；微通道；血清

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

多位原发灶乳腺癌转基因模型中甘油磷脂代谢扰动及免疫微环境特征分析

曹天佑、赵超、罗茜*
中国科学院深圳先进技术研究院

由于乳腺肿瘤的多原发灶之间、及其肿瘤内部呈现出错综复杂的生物信息、肿瘤免疫微环境的异质性，严重影响了对其发生发展、转移的判断，从而干扰其诊疗[1-2]。研究发现，脂质代谢与免疫微环境之间在乳腺肿瘤发生发展过程中存在相互作用，改变了免疫细胞的表型和功能，协助肿瘤的免疫逃逸或远处转移[3-5]。然而，对于乳腺癌的多位原发灶肿瘤的代谢、免疫微环境的全面分析仍然有限。在本研究中，我们以 MMTV-PyMT 乳腺癌模型小鼠为研究对象，采用基于 LC-MS/MS 的多组学技术分析小鼠各原发灶肿瘤和相应癌旁组织的代谢和脂质组学谱，结果表明不同原发灶位置存在各自的代谢特征，即存在肿瘤间、癌旁间的代谢异质性，其中甘油磷脂类代谢扰动最为明显。同时，结合 CyTOF 技术表征不同原发灶肿瘤免疫微环境的组成，其中髓系细胞浸润程度具有显著差异，且与甘油磷脂类代谢物的水平变化表现出显著相关性。说明脂质水平的变化与肿瘤或癌旁组织中的免疫微环境组成关系密切，且与原发灶位置的不同表现出不同的变化规律。针对乳腺癌多原发灶之间，开展生物信息挖掘，尤其是肿瘤代谢特征、免疫微环境特征等，对于准确认识乳腺癌的发生发展过程、制定精准化诊疗和预后方案意义重大。

关键字 乳腺癌，多位原发灶，肿瘤异质性，甘油磷脂代谢，CyTOF，免疫微环境

参考文献

1.Panuta A, Radu I, Gafton B, et al. Multiple versus unifocal breast cancer: clinicopathological and immunohistochemical differences. *Rom J Morphol Embryol*. **2019,** 60(1):103-110.
2.Salgado R, Aftimos P, Sotiriou C, Desmedt C. Evolving paradigms in multifocal breast cancer. Semin *Cancer Biol*. **2015**, 31:111-8.
3. Butera A, Roy M, Zampieri C, Mammarella E, et al. p53-driven lipidome influences non-cell-autonomous lysophospholipids in pancreatic cancer. *Biol Direct*. **2022**, 8, 17(1):6.
4.Shu ting. Tan, Ramesh T, Xiu Ru. Toh, Nguyen LN. Emerging roles of lysophospholipids in health and disease. *Prog Lipid Res*. **2020**, 80:101068.
5.Matas-Rico E, Frijlink E, van der Haar Àvila I, Menegakis A, et al. Autotaxin impedes anti-tumor immunity by suppressing chemotaxis and tumor infiltration of CD8 T cells. *Cell Rep*. **2021**, 16;37(7):110013.

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

基于外泌体 microRNA 逻辑运算和信号放大对外泌体进行精准识别和鉴定

石铭清[1]、罗茜[1]、孟红敏*[2]
1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. 郑州大学

外泌体是由细胞多泡体与质膜融合后分泌到细胞外环境中的一种纳米级囊泡。外泌体的不同成分反映了它们不同的细胞起源，它可以作为一种非常有价值的生物标志物。外泌体 miRNA 作为外泌体重要的组成成分之一，它在磷脂膜的保护下在体液循环中稳定存在。现已证实，多种外泌体 miRNAs 在癌症患者和健康人的体液中表达有显著差异，为肿瘤早期诊断和预后监测提供了新的检测来源。

由于单一靶标很难实现对癌症的精准分型，因此，在临床诊断中常联合多种生物标志物来提高疾病诊断的准确度。例如，一种 miRNA 可能会在多种类型的外泌体中表达，miR-21 在 80%的肿瘤细胞中均过表达，因此实现多重 miRNAs 的逻辑分析对提高癌症诊断的准确率具有重要意义。分子逻辑系统是基于化学、物理、生物过程中分子模块间的相互作用，从而实现分子信息逻辑处理的器件。通过分子逻辑系统与多种检测技术的联用，可以构建出具有数字化和智能化的生化传感器。该系统可以同时输入不同的靶标分子，然后通过预先设计的逻辑回路分析，最终输出“0”或者“1”的结果，从而实现对多靶标的逻辑分析。核酸分子具有可编程性高、易修饰等优点，便于引入逻辑系统的设计和信号单元。

因此，基于熵驱动催化放大策略与 DNA 逻辑探针构建了一种新型的核酸逻辑器件，该器件包括 AND 和 OR 门，实现对外泌体多重 miRNAs 同时检测和信号放大输出。对于 AND 门，整个实验分为两步，第一步是多重 miRNAs 的逻辑运算，逻辑器件在两个靶标（miR-122，miR-21）同时存在时输入（1，1），输出信号为 1（释放触发链 N）。第二步是熵驱动信号放大策略，触发链 N 触发熵驱动催化反应产生大量信号，从而实现对外泌体 miR-21 和 miR-122 同时检测。由于 miR-21 在大多数肿瘤细胞中均高表达，而 miR-122 在肝癌细胞、正常肝细胞等肝细胞中都表达。因此，通过对这两种 miRNAs 的同时检测，从而实现对肝癌外泌体的精准识别。对 OR 门来说，逻辑器件在两个靶标（miR-122，miR-21）任一个存在时（0,0、1,0、0,1）均可以输出信号为（释放触发链 N），后续进行信号放大，与 AND 门类似。

关键字 外泌体 microRNA、信号放大、DNA 逻辑运算

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

胰腺癌异质性细胞微球的脂质分子可视化

王欣[1,3]、刘宣彤[4]、杨致一[1]、周鹏[2]、曹天佑[1]、罗茜[1]、赵超*[1]
1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. 深圳市第二人民医院（深圳大学第一附属医院）超声科
3. 山西医科大学
4. 帝国理工学院

腺癌是人类所有癌症中早期诊断最难、预后最差的癌症，肿瘤异质性为癌细胞及相关微环境提供了逃逸机制，阻碍了肿瘤进展的研究[1]。通过质谱(MS)技术获得的二维细胞样本的分子分析虽然包含丰富的生化信息，但缺乏分子的空间信息。该研究提出了一种三维异质型多细胞球体(3D-HMS)，并研究了胰腺癌时空进展过程中脂质的空间分布。研究发现，3D-HMS 中脂质的空间分布呈现出时空异质性，从 4 天到 14 天的培养中，3D-HMS 脂质组学受到显著干扰，以应对恶性程度的增加。例如，在 14 天的肿瘤进展过程中，磷脂酰乙醇胺和磷脂酰丝氨酸在 3D-HMS 中从外部增殖区到静止区和坏死区表现出显著的上调。数据显示，四种脂质在肿瘤进展 14 天期间从外部增殖区到内部静止区和坏死区表现出显著上调，即 XXX 磷脂酰乙醇胺[PE（18:0/18:1）、PE（16:0/18:1）]，磷脂酰丝氨酸[PS（36:0）、PS(42:1)]（图 1）。基于 MSI 的 3D-HMS 构建和脂质分析将为转移的发生、时空进展以及早期癌症的发现提供新的见解。

关键字 3D-异质性微球，胰腺癌，脂质代谢、质谱成像、潜在的时空标志物

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

聚苯乙烯微米和纳米塑料暴露诱发的小鼠肾脏损伤与代谢异常

何周琪、李芳、罗茜*
中国科学院深圳先进技术研究院

环境中无所不在的微塑料（Microplastics, MPs）和纳米塑料（Nanoplastics, NPs）威胁着人类健康。MPs 和 NPs 普遍存在于各种环境介质、海洋生态系统、食物及饮用水中，其污染已成为国际高度关注的新环境问题。小尺寸的微塑料生物膜渗透性强更易到达组织深处，肾脏组织是颗粒污染物重要毒性靶器官致之一，但 MPs 和 NPs 暴露引发的肾脏毒性效应尚不明确。本实验研究了使用环境相当剂量（2μg · mL^{-1} 和 40μg · mL^{-1}）聚苯乙烯微米塑料（Polystyrene MPs，2 μm）和纳米塑料（Polystyrene NPs，100 nm）饮水暴露对成年雄性 C57BL/6J 小鼠肾脏的毒性效应。研究发现，PS 暴露后小鼠体重和饮水量无显著变化，但肾脏系数下降，肾功能指标（肌酐、尿酸）发生显著变化。通过组织病理学发现，肾脏组织结构造成损伤，其中炎性细胞浸润尤为明显。之后使用超高效液相色谱-轨道离子阱 Exploris 240 质谱（Thermo Scientific）进行靶向代谢组学和脂质组学分析，靶向代谢组学分析结果表明 PS-MPs 和 PS-NPs 暴露导致小鼠肾脏代谢紊乱。其中。NP-low 组引起赖氨酸、谷氨酰胺及磷脂酰胆碱和乳糖神经酰胺等上调，而部分甘油磷脂下调。NP-high 组导致富马酸、苹果酸、精氨琥珀酸及多种甘油磷脂、鞘脂和固醇类下调，而甘油酯类显著上调。MP-low 组引起柠檬酸、丝氨酸及多种甘油酯类上调，部分甘油磷脂和鞘脂类下调。MP-high 组则上调了胆碱、谷氨酰胺、肌酸、牛磺酸、肾上腺素、赖氨酸等代谢物，并伴随部分甘油磷脂下调。极性代谢物变化影响了能量代谢、糖代谢及氨基酸代谢，而 MP-high 组显著影响了牛磺酸及亚牛磺酸代谢、丙氨酸、天冬氨酸、谷氨酸代谢等多条通路。脂质代谢主要影响了甘油磷脂、鞘磷脂和甘油酯代谢，NP-high 组和 MP-low 组受到的影响尤为显著。这些发现为进一步了解 MPs 和 NPs 对肾脏的潜在毒性提供了新的视角。

关键字 微塑料，聚苯乙烯，毒性，肾脏，损伤，代谢组学

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

质谱成像与光谱成像的多模态融合在肿瘤异质性中的研究

郑禹、罗茜*
中国科学院深圳先进技术研究院

同一肿瘤的不同区域在细胞组成和分子特征上存在显著差异。肿瘤边界的精准区分对肿瘤的诊断、治疗和预后均具有重要影响。质谱成像能够对肿瘤组织中分子的空间分布进行高分辨率、高灵敏度的多组分分析，进而帮助识别肿瘤的类型和级别。相比之下，红外光谱成像是一种无损、快速且具有更高空间分辨率的分析方法，能够提供肿瘤组织不同区域的分子结构和化学成分信息。质谱成像与红外光谱成像的多模态融合实现了肿瘤细胞成分信息的互补，能够全面分析肿瘤的生物学特征，更准确地区分肿瘤边界。因此，质谱成像与红外光谱成像的多模态融合在肿瘤异质性研究中展现出显著潜力，能够提供更为全面和准确的肿瘤特征分析，推动癌症的早期诊断和个性化治疗的发展。本文对多个患者的结肠癌及其癌旁组织进行了红外光谱成像、质谱成像及 HE 染色后的显微成像，并将各类成像数据进行融合，检验该融合模型能否实现癌症与癌旁组织的有效区分。

关键字 质谱成像 光谱成像 多模态融合 肿瘤异质性

分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

气锥收缩稳定性的数值模拟研究

杨帆*[1]、Ziqiang Yang[2]、Yuansi Tian[2]、Sigurdur T Thoroddsen[2]、罗茜 [1]
1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. King Abdullah University of Science and Technology

无论在自然以及生物界还是各种工业仪器中，气液的相互作用均广泛存在。由于流体的无定形性，气泡形态既包括通常的类球形，也存在特殊的锥形。与液锥不同的是，气锥的收缩过程主要由流体惯性力以及界面张力决定，粘性力的影响很小。我们通过流体直接数值计算的方式，对不同夹角、初始扰动以及尖端形态的气锥在纯水中的收缩进行了模拟。结果显示，相同夹角下气锥相比液锥不仅收缩更快还更早发生截断。通过参数空间分析，气锥收缩可分为无截断、不规则截断与规则截断。小夹角气锥均表现为规则截断，随着夹角和初始扰动的增大，气锥从无截断进入不规则截断，继续增大则出现规则截断。气锥在不规则截断时汇聚的表面波更易出现高速射流，对射流临界值的分析显示气锥收缩中的不稳定性与此有着密切关联。结论表明气锥夹角与扰动影响着收缩过程的稳定性，进而决定了截断的性质以及射流的强度。

关键字 气泡，射流，不稳定性，界面张力

参考文献

1. C. Frederik Brasz, Alexis Berny, James Bird, *Physical Review Fluids.*, **2018**, 3, 10.

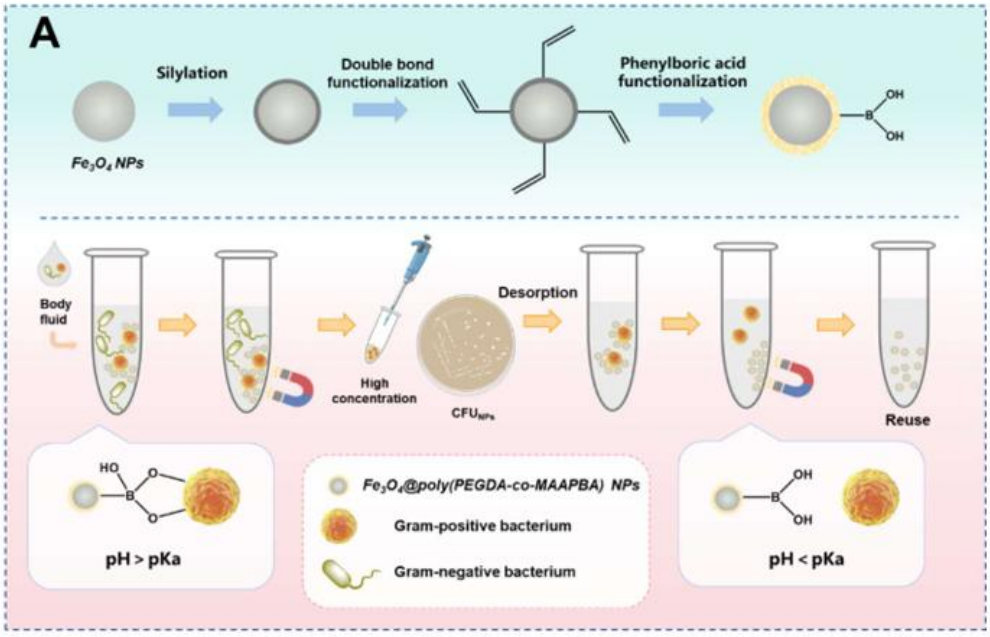
分会场：30.临床诊断与科学仪器
交流形式：墙报

硼酸功能化磁性纳米粒：低丰度细菌的选择性高效富集与活性守护

刘晶*[1]、陈静雯[1]、李澧[2]、李少波[1]
1. 中国药科大学
2. 江苏省农业科学院

病原菌感染一直严重威胁着公众健康。在疾病早期阶段，病原菌在复杂生物样品中的丰度较低。因此，开发一种灵敏、简便和准确的方法诊断病原菌至关重要。目前，病原菌感染的临床诊断方法主要包括微生物培养法，免疫法和 PCR 技术。其中，培养法是细菌诊断的“金标准”，但其检测限（LOD）较高，约为 30 CFU/mL。在病原菌感染的早期阶段，感染个体的体液（如血液、尿液等）中的细菌浓度可能低于培养法的 LOD。随着感染进展到更严重的阶段，体液中的细菌浓度才达到足以培养的水平，这意味着病原菌诊断的延迟。同时，鉴于微生物培养技术固有的复杂性和耗时性，医疗专业人员对病原菌的诊断通常需要 24-72 h。这两种不可避免的延迟因素，对病原菌感染的控制极为不利。

本文开发了一种苯硼酸功能化的磁性纳米粒（Fe_3O_4@poly(PEGDA-co-MAAPBA) NPs），利用苯硼酸与细菌表面顺式二羟基结构的亲和作用，选择性地高效捕获和富集复杂样品中低丰度革兰氏阳性菌（G+），并维持细菌处于可培养的活力状态，进而采用培养法直接培养 NPs@细菌，最终实现诊断，如图 1 所示。该方法将 LOD 降至 0.4 CFU/mL，解决了其灵敏度不足的问题。



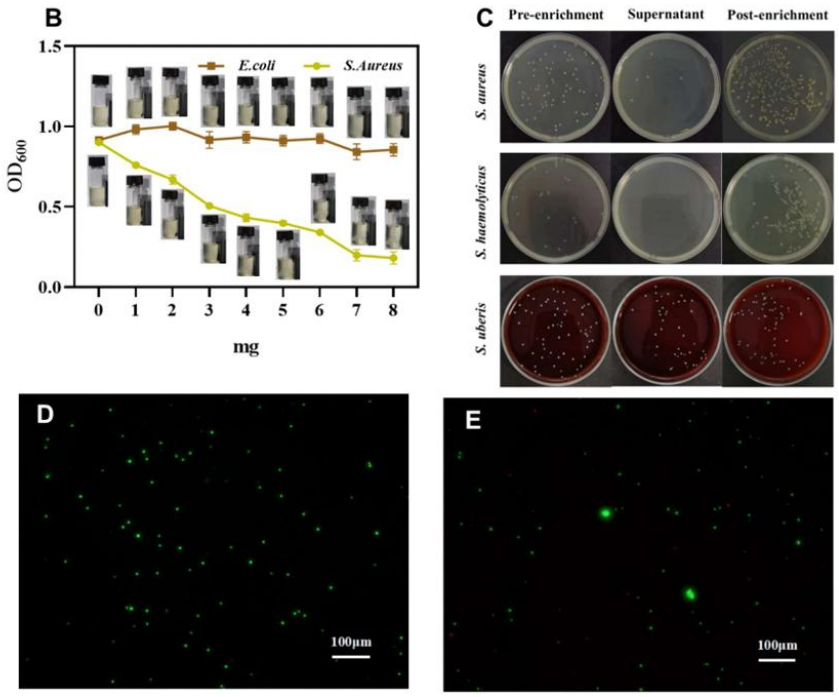


图 1 （A）设计思路；（B）E. coli 和 S. aureus 加入 NPs 的浊度变化曲线；（C）NPs 对三 种 G+的富集。S. aureus 在 NPs 加入前（D）和加入后（E）的荧光显微镜图。

为了考察 NPs 在复杂样品中的选择性富集能力，将 *S. aureus* （或 *S. haemolyticus*）与 *E. coli* 相混合，并用尿液稀释。这些尿样可视为常规尿检中健康样本。NPs 捕获和富集尿液中的细菌后培养，结果如图 2。直接培养尿液无法观察到菌落，即培养法对低丰度病原菌检测无效。相比之下，NPs 能明显提高细菌的数量，并能消除大量革兰氏阴性菌（100 倍）的干扰。这表明 Fe_3O_4@poly(PEGDA-co-MAAPBA) NPs 有可能成为病原菌临床早期诊断的有力工具。

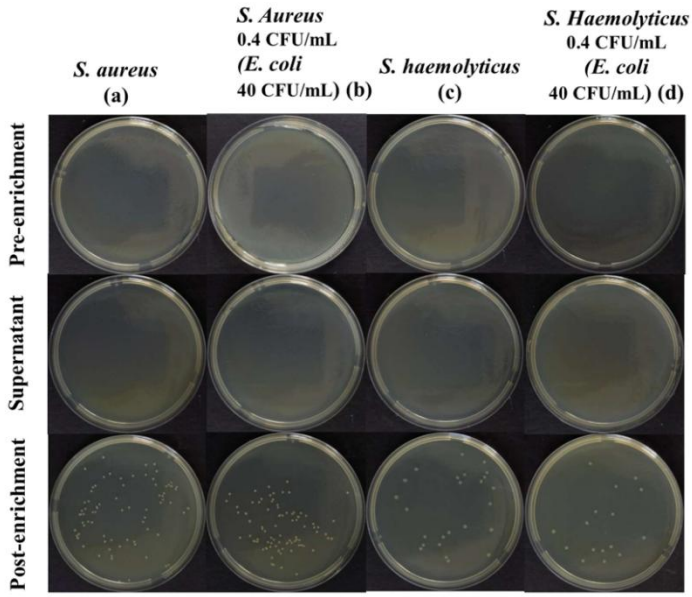


图 2 NPs 对尿液中 S. aureus 和 S. haemolyticus 的选择性富集。

关键字 磁性纳米粒；硼酸功能化；细菌检测；活菌富集

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

基于高分辨质谱的两类毒性化合物非靶向筛查研究

周燕*、陈晓奇、夏兵
中国科学院成都生物研究所

随着食药安全和环境污染问题的持续加剧，识别和监测有毒化合物变得愈发重要。本研究利用高分辨率质谱 (high-resolution mass spectrometry, HRMS) 对马兜铃酸类化合物 (aristolochic acid analogs, AAAs) 和芬太尼类化合物 (fentanyl and its analogues, FTNs) 等两类毒性化合物进行了非靶向筛查。AAAs 是天然存在的致癌和有毒化合物，对药品和环境构成安全威胁。特征质谱碎片的缺乏和结构的多样性给对 AAAs 的筛查造成了巨大挑战。我们提出了一种全面的非靶向筛查策略，同时开发了一个基于 Python3 的 AAAs_finder 的筛查工具。主要筛查流程包括虚拟结构及紫外可见 (ultraviolet and visible, UV) 光谱数据库的创建、基于精确质量和 UV 光谱的疑似数据提取、串联质谱 (tandem mass spectra, MS/MS) 的智能化解析，以及基于多条件保留时间 (retention time, RT) 预测的候选结构排序。经验证之后，该策略被成功应用于中药、土壤和水等样本中 AAAs 的筛查。FTNs 的滥用日益严重，给公共卫生带来了重大挑战，促使相关政府机构对这些物质实施整类列管。然而，现有的筛查策略大多为靶向或基于少量质谱碎裂特征的非靶向筛查，远远无法满足整类列管的需求。我们开发了一种综合性的 FTNs 非靶向筛查策略。首先，获取已知和潜在未知结构，并通过结合其结构取代规律和特征质谱碎裂路径 (characteristic fragmentation routes, CFRs）创建质谱数据库。接着，通过数据库数据与实测数据相匹配进行初步筛查，以识别 CFRs 并给出候选结构。可识别的 CFRs 越多，待分析物为 FTNs 的可能性越大。最后，根据候选结构的预测同位素分布与待分析物的实测同位素分布间的相似性，以及对实测色谱峰型的评估，做出最终判断。该策略的覆盖率可达 1.25×1015。为了便于该策略的建立和实施，开发了名为 FTNs_Finder 的计算机筛查程序。经过验证后，该策略被应用于环境水样中 FTNs 的存在筛查。针对 AAAs 和 FTNs 等毒性化合物分别开发了相应的非靶向筛查策略和计算机筛查工具。同时，这些策略和工具也可为其他类毒性化合物的筛查提供参考。

关键字 高分辨质谱、毒性化合物、非靶向筛查、计算机辅助筛查

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

化学毒剂毒物暴露植物标志物研究

刘石磊*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

植物广泛分布于各种生态环境和人类居住区，作为环境样品和生物医学样品之外的一种指示毒剂毒物暴露的新媒介，近年来引起了国际禁化武组织的高度关注（Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons, OPCW），并发布了相关挑战赛项目。相对于水、土壤等环境样品，植物样品来源丰富并且不涉及动物伦理问题，受环境因素影响较小。植物体内含有丰富的代谢物，可以与毒剂毒物反应产生特定的加合物，此类加合物相比毒剂毒物的水解产物具有特异性好、检测窗口期长等优点，可将此类加合物作为植物毒剂毒物暴露的标志物（植物标志物，plant biomarker），从而对化学品暴露进行种类、剂量及时间等信息的溯源。同时，植物对化合物具有一定的蓄积作用，可以作为有毒化学品暴露的“时间胶囊”（time capsule），为毒剂毒物的使用或泄露提供证据。荷兰的 TNO 实验室承担了 OPCW 植物标志物挑战赛项目，与赫尔辛基大学合作，发现了多种毒剂毒物与植物蛋白的加合物，加合物经过酶解产生具有高度特异性的氨基酸加合物，作为植物暴露标志物。本课题组（防化研究院分析化学实验室）已对神经性毒剂与糜烂性毒剂在植物体内产生的加合物进行了初步的研究，研究结果发现，神经性毒剂 RVX、GA 可与植物体内的黄酮类化合物发生反应，产生特异性的黄酮类加合物；糜烂性毒剂氮芥与硫芥可以与植物中的非蛋白氨基酸γ-氨基丁酸产生特定的加合物，此类加合物具有特异性强、灵敏度高、检测窗口期长等优点，在植物暴力后 120 天仍可检测到，且具有明显的蓄积现象。同时我们还研究了糜烂性毒剂与植物细胞壁结构的加合物，这种加合物适用于所有植物。此类方法有助于更好的完成日遗化武调查等化武履约任务，为潜在的化学威胁检测与调查提供有效技术手段。

关键字 毒物，植物标志物，暴露溯源分析

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

以电子电离源质谱数据裂解规律和特征碎片构建不依赖质谱数据库的新精神活性物质结构解析程序

罗轩*[1]、黄克建[2]、彭靖[1]、张珺[1]
1. 广西大学
2. 广西壮族自治区公安厅

新精神活性物质（New psychoactive substances，NPS）是继鸦片、海洛因等为代表的第一代传统毒品和以冰毒为代表的第二代合成毒品后，在全球范围快速被滥用的第三代毒品[1]。其不仅具有更强的成瘾性，还具备不同于前两代毒品的显著特征：种类繁多，合成材料来源广泛难以管控；衍生化速率快，法律难以及时监管。而其中的合成大麻素类和芬太尼类 NPS 则因结构中包含大量可发生衍生化的位点，所以是衍生化速率最快的。目前，法医实验室针对 NPS 的析检测技术主要是气相色谱-质谱（GC-MS）和液相色谱-质谱（LC-MS）联用技术。其中，GC-MS 被誉为毒品筛查确证的金标准，可在标准质谱数据库的辅助下，对未知化合物的进行快速准确的定性和定量分析。也正是对质谱数据库的依赖，在面对更新速率远滞后于 NPS 衍生化速率的现实情况时，法医实验室就很难对新出现的 NPS 结构进行准确鉴定。在电子电离（EI）源下，虽然难以获得 NPS 的分子量，但其产生的大量碎片则包含有丰富的结构信息[3–6]。考虑到同类 NPS 的结构上具备同样的核心骨架结构和衍生位点不同的官能团，在裂解途径、规律和特征碎片上，即有共同的特点，也有区别其它的个体的特征。因此，完全可以在对其进行归纳总结后，构建不依赖质谱数据库的结构解析程序，破解 NPS 结构鉴定的难题。研究中以 178 个芬太尼类 NPS（其中 129 个来源于 Cayman Chemical 数据库[2]）以及 166 个吲哚和吲唑型合成大麻素类 NPS（其中 45 个来源于 Cayman Chemical 数据库[2]）的 EI 源质谱数据库为基础，总结归纳其质谱特征碎片和裂解规律，构建两套结构解析程序，从而摆脱对质谱数据库的过度依赖，实现对未来新出现的两类 NPS 结构的快速准确鉴定。

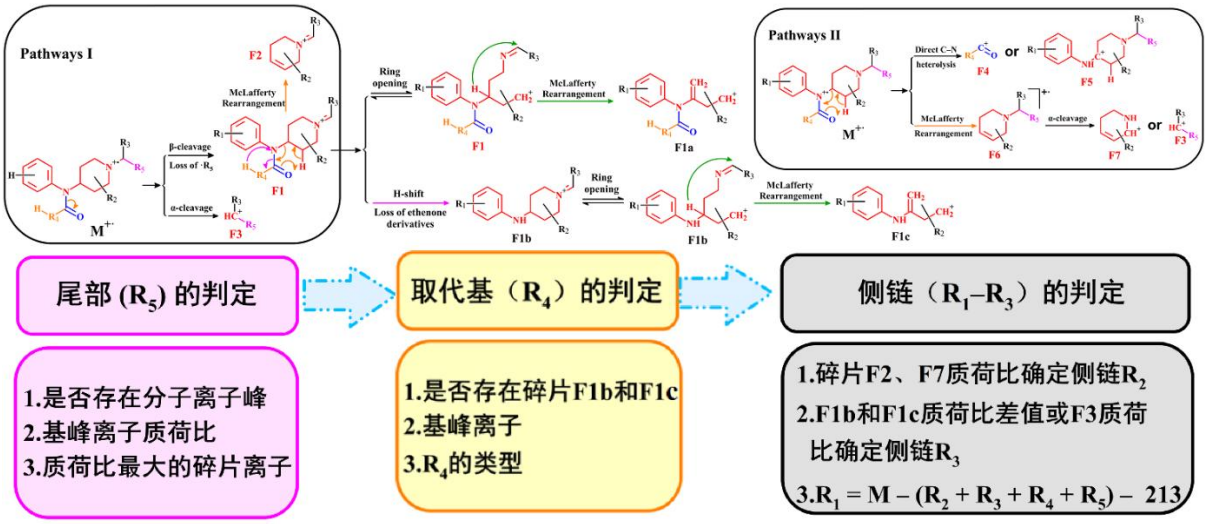


图 1 芬太尼类 NPS 的 EI 源质谱特征裂解和碎片及结构解析程序

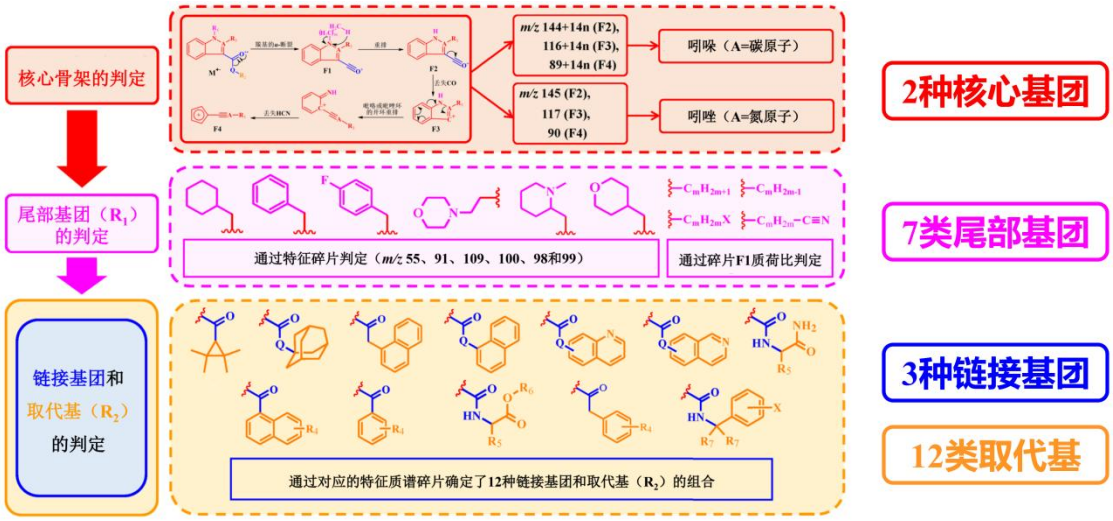


图 2 合成大麻素类 NPS 的结构解析程序

关键字 新精神活性物质，结构解析，电离源质谱，裂解规律，特征碎片

参考文献

1. United Nations Office on Drugs and Crime. The challenge of new psychoactive substances. (2013-03-12)[2024-09-21]. https://www.unodc.org/documents/scientific/NPS_2013_SMART.pdf
2. Cayman Chemical. Caymanchem. [2024-09-10]. https://www.caymanchem.com/.
3. Y. Fan, X. Zong, J. Liu, et al. J. Pharm. Biomed. Anal., 2021, 193, 113723.
4. A. S. Moorthy, W. E. Wallace, A. J. Kearsley, et al. Anal. Chem., **2017**, 89(24), 13261-13268.
5. N. Qin, H. Wu, P. Xiang, et al. J. Am. Soc. Mass Spectrom., **2020**, 31(2), 277-291.
6. J. Klingberg, A. Cawley, R. Shimmon, et al. Front. Chem. (Lausanne, Switz.), **2019**, 7, 331.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

基于免疫代谢机制的新污染物毒性高通量分析方法

李心砚、栾天罡*
广东工业大学

新污染物带来的健康风险和生态危害是我国目前亟需解决的环境问题之一。研究证实免疫系统是污染物攻击的敏感靶标，而免疫毒性也是污染物健康风险评估的重要依据。由于免疫系统的复杂性和功能多样性，与其他常用终点相比，免疫毒性更难甄别，损伤程度难以定量，毒性机制仍不明确，且目前尚无标准化检测流程，一直是分析毒理学的技术难点。开发免疫毒性高通量筛查与精准分析方法，对于新污染物的健康风险评价具有重要意义。2019 年，免疫学家 Medzhitov 提出“免疫反应的核心是对代谢资源（能量和中间产物）的灵活调配”，强调了利用代谢物精确变化解析免疫过程的可能性。据此，本研究以氯代多环芳烃为研究对象，整合高通量多靶点免疫毒性检测与非靶向代谢组学技术，联合评估了氯代多环芳烃的免疫毒性并探究了免疫代谢机制。研究首次证明了氯代多环芳烃在不激活 AhR 的较低浓度下（1 μM）能诱导免疫毒性，并讨论了巨噬细胞代谢过程在 Cl-PAHs/PPAHs 诱导免疫反应中的作用，为开发基于免疫代谢机制的环境化学品风险评估新方法提供了有力支持。进一步，本研究构建了多细胞混合的体外 3D 共培养球状体模型评估了单氯取代 Ant（2-ClAnt 和 9-ClAnt）和二氯取代 Ant（9,10-Cl2Ant）的肺部免疫毒性，揭示了不同氯取代结构的 Cl-Ants 对肺部免疫毒性的影响及相关机制。

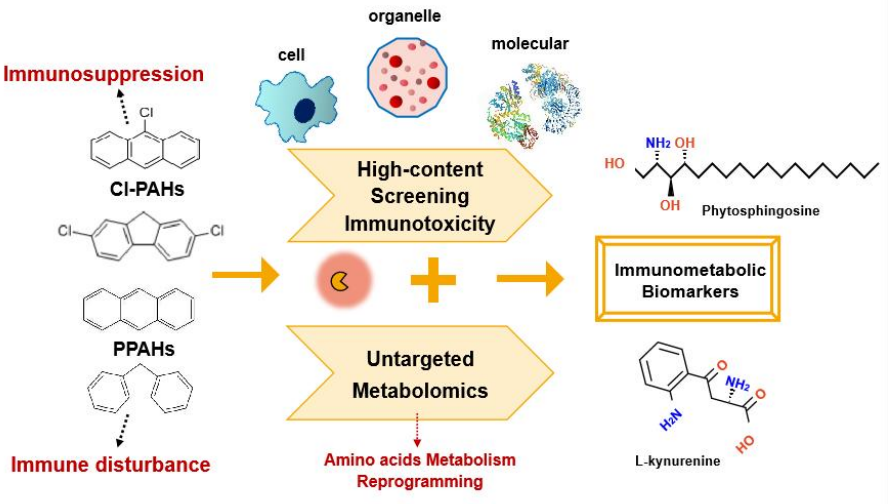


图 1. 氯代多环芳烃引起巨噬细胞氨基酸代谢异常

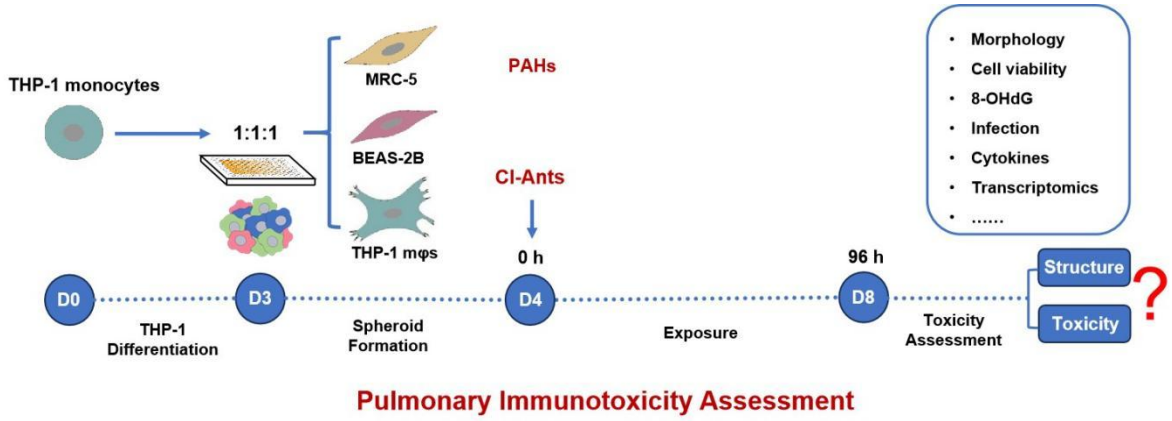


图 2. 氯代蒽的肺部免疫毒性与氯取代基个数紧密相关

关键字 免疫毒性，免疫代谢，高通量筛查，新污染物

参考文献

1. Wang, Y., Su, P., Ge, X., Ren, H., Ma, S., Shen, G., Chen, Q., Yu, Y., An, T., *Journal of Hazardous Materials.*, **2022**, 436.

2. Zhao, C., Li, A., Zhang, G., Pan, Y., Meng, L., Yang, R., Li, Y., Zhang, Q., Jiang, G., *Environ Sci Technol.*, **2022**, 56 (17), 12431-12439.

3. Zhao, C., Li, C., Wang, C., Li, Y., Yang, R., Zhang, Q., Jiang, G., *Anal Methods.*, **2022**, 14 (14), 1430-1438.

4. Liu, S., Yang, R., Chen, Y., Zhao, X., Chen, S., Yang, X., Cheng, Z., Hu, B., Liang, X., Yin, N., Liu, Q., Wang, H., Liu, S., Faiola, F., *Environ Sci Technol.*, **2021**, 55 (4), 2440-2451.

5. Chen, Y. Z., Li, F., Hua, M. Q., Liang, M., Song, C. W., *Frontiers in Immunology.*, **2023**, 14.

6. Pachathundikandi, S. K., Tegtmeyer, N., Arnold, I. C., Lind, J., Neddermann, M., Falkeis-Veits, C., Chattopadhyay, S., Bronstrup, M., Tegge, W., Hong, M., Sticht, H., Vieth, M., Muller, A., Backert, S., *Nat Commun.*, **2019**, 10 (1), 5717.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

小型化质谱仪在毒物分析领域的应用

甘剑勤[2]、赵丹[2]、葛苗秀[1]、孔周雁[2]、何婉琳[2]、熊伟[1,2]、闻路红*[1,2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

毒物中毒直接威胁人民群众生命安全、危害社会的安定，快速精准地检测中毒物对挽救生命具有重要的意义。急性中毒可引起多种威胁生命安全的症状，发展快速检测方法有助于早期识别毒物。然而，现阶段的检测方法需要复杂前处理和长时间的色谱分离，无法满足急性中毒物的快速确证。因此，如何快速、高效提取中毒物并精准确证中毒物是中毒诊断的难点。

面向现场实时精准定性定量检测需求，开发一种高效、快速提取技术和检测技术替代传统气相色谱和液相色谱，用于高灵敏提取和精准检测抗生素和有机磷农药具有重要的救治指导意义。基于直接电离技术的小型化质谱具有体积小、可便携以及无需工作载气等特点，能够在 1 分钟内分析超过 20 种目标物，满足现场快速定性定量分析生物样本中毒物的需求。

精神类药物和有机磷农药是两类常见的中毒物，开发便捷的前处理和检测方法有利于快速确证中毒物。基于常规的蛋白沉淀法，能够满足大部分场景下的快速筛查需求，可快速获取中毒物的信息。同时，为了进一步解决复杂基质环境下中毒物提取的难点，采用后修饰方法来制备具有高比表面积、稳定性和目标识别位点的功能化金属有机骨架（UIO-66-Py），并基于此构建含 UIO-66-Py 涂层的提取棒作为一种高效的固相萃取装置，用于提取血清中的中毒物质（精神类药物和有机磷）。通过优化旋转速度、提取时间、洗脱溶剂、解吸时间和质谱检测条件，实现农药（毒死蜱、氧乐果、三唑磷等）和精神类药物（地西泮、艾司唑仑、吡唑坦等）的检出限（Limit of Detections, LODs）分别为 1-5 和 0.5-2 ng/mL，相对标准偏差（Relative Standard Deviations, RSDs）小于 15%，线性相关系数（R2）为 0.99。该现场检测方法具有出色的灵敏度、抗干扰性和可重复性，为检测生物样本中毒物的高效检测提供了新的思路，同时也展现其在临床即时检测（Point-of-care Testing, POCT）方面具有巨大的潜力。

关键字 小型化，质谱仪，毒物分析，应用

参考文献

1. Singh, A.; Dhiman, N.; Kar, A. K.; Singh, D.; Purohit, M. P.; Ghosh, D.; Patnaik, S. Advances in controlled release pesticide formulations: Prospects to safer integrated pest management and sustainable agriculture. *J. Hazard. Mater.*, **2020**, 385, 121525.
2. Zhao, D.; Gan, J.; Xiong, W.; Ge, M.; Su, H.; Wang, X.; Kong, X.; Zeng, H.; Du, X.; Wen, L. Preparation and characterization of functional metal–organic frameworks-coated extraction bars and their application in the simultaneous determination of pesticides in fetal bovine serum[J]. *Microchem. J.*, **2024,** 206, 111595.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

“点亮”型分子印迹荧光传感器的制备及其应用

黄垂秀*、严一博、胡蓉、沈先涛
华中科技大学

荧光传感器因操作简单而备受青睐，特别是具备高特异性的分子印迹荧光传感器。目前，分子印迹荧光传感器的设计思路主要是通过荧光淬灭机制实现的，但一般“点亮”型荧光传感器具有更高的灵敏度[1]。此外，新精神活性物质（NPS）的快速检测也是毒物分析领域关注的热点。因此，本项目旨在设计“点亮”型分子印迹荧光传感器，并将其用于 NPS 的快速检测。

制备 AIE 功能单体，并且通过 LC-MS、核磁(NMR)、EDX 等对其进行表征；然后以 AIE 功能单体为 MIT 的单体合成了同时具有高灵敏荧光和超强特异性分子识别能力的 AIE-MIPs，并通过 LC-MS、SEM、FT-IR 对 AIE-MIPs 进行表征，且通过核磁共振硼谱和荧光寿命实验探索了 AIE-MIPs “点亮”效应的分子机制；最后将 AIE-MIPs 与液相微萃取技术联用测定尿液中 NPS 的含量。

分别针对碱性和酸性 NPS 合成 AIE 功能单体，并且确立了使 AIE 分子能够用作“点亮”型功能单体的设计思路；证明了 AIE-MIPs 的“点亮”性质是由于 AIE 单体在 MIPs 空穴中的活动受限所致（图 1）[2]；实验发现尿液基质对 AIE-MIPs 的荧光抑制作用是由于基质对 AIE-MIPs 的吸附性能和 AIE 单体的发光效果两方面的干扰引起的。液相微萃取技术和 AIE-MIPs 联用构建了 AIE-MIP 传感器，实现了尿液中卡西酮类 NPS 的总量测定[3]。

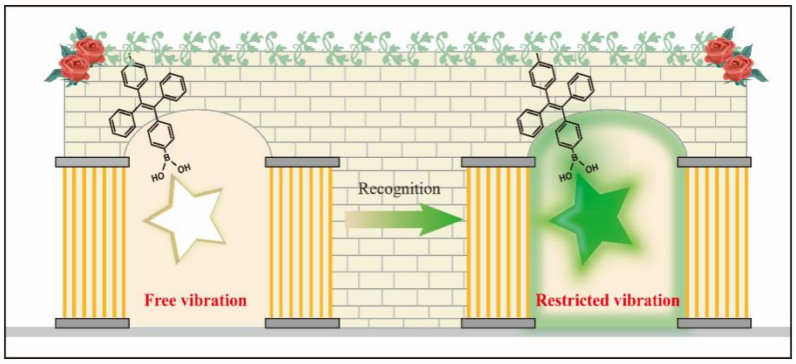


图 1：AIE-MIPs 的“点亮”效应机制。

本研究将 AIE 分子和 MIP 结合成功制备了“点亮”型 AIE-MIPs。探索了“点亮”型 AIE 单体的设计思路以及荧光“点亮”效应机制是因为 NPS 在 MIPs 孔穴中的空间占位限制了 AIE 单体的自由活动导致的，从原理上解决了淬灭机制导致的灵敏度和假阳性的问题。利用碱性和酸性 NPS 验证了该设计思路的普适性。最后在微萃取技术的辅助下，成功利用 AIE-MIPs 传感器检测了生物样品中的 NPS。这种广谱的“点亮”型 AIE-MIPs 的设计思路，将为 AIE 在法医毒品快速筛查中的应用提供新的发展方向。

关键字 分子印迹；聚集诱导发光；液相微萃取；法医毒物分析；新精神活性物质

参考文献

1. J. Mei, N. L. C. Leung, R. T. K. Kwok, et al. Aggregation-induced emission: together we shine, united we soar! Chemical Reviews, **2015**, 115(21): 11718-11940
2. Y. Yan, L. Jiang, S. Zhang, X. Shen*, C. Huang*, Specific “light-up” sensor made easy: An aggregation induced emission monomer for molecular imprinting, Biosens. Bioelectron., 205 (**2022**) 114113.
3. R. Hu, Y. Yan, L. Jiang, C. Huang*, X. Shen*, Determination of total cathinones with a single molecularly imprinted fluorescent sensor assisted by electromembrane extraction, Microchim. Acta,189 (**2022**) 324

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

SERS 技术在毒物分析与临床毒检的应用

曹玥*
南京医科大学

毒物的快速精准鉴定一直是毒物分析领域里至关重要的问题之一，但许多传统分析方法都具有繁琐耗时长、灵敏度低以及对操作人员技术要求高等局限性。在此，我们借助表面增强拉曼光谱 SERS 技术开发了一系列针对环境和生物体内多种物质的精准鉴定方法，为毒物的检验分析提供了新思路和新手段。在环境毒物检测中，我们开发了一种新型的双模分离 PA-6/AuNRs@ZIF-8 膜，用于对西维因的快速原位检测。PA-6 用于待测物质的初始分离，ZIF-8 通过化学增强机制放大拉曼信号的同时通过其多孔结构实现分析物的富集和二次分离。利用该薄膜对湖水中的西维因的检出限低至 1×10^{-9}M，显著低于现有标准。开发了高通量可抛式 AuBPs@MoS_2@tinfoil 试剂盒用于敌草快的快速定量检测，此方法对敌草快的检测限达到了 1×10^{-15}M，且在检测范围内具有良好的线性关系。在临床检验方面，我们利用 SERS 和静电纺丝技术设计了能够对唾液样本中 COVID-19 蛋白进行特异性识别的可穿戴性柔性纤维膜，该薄膜的检测限低至 10TU/mL。我们构建 Coral-SERS 传感器检测富血小板血浆(PRP)中特异生物标志物 MIF(巨噬细胞迁移抑制因子)浓度，提高 PRP 技术的有效性。对于细胞微环境中的小分子。基于拉曼光谱技术，我们实现了对 2 型晶体肾病石蜡包埋组织和活检标本中草酸钙晶体的原位鉴定，这为分析组织中的未知晶体提供了一种有效且有前途的方法。SERS 技术在毒物分析领域的应用不仅显著提高了检测的灵敏度和准确性，而且为环境监测、疾病诊断和生物医学研究提供了更为高效和精确的工具。

关键字 毒物分析，临床毒检，SERS

参考文献

1. Ding, Yan, et al. Dual-Mode Separation and SERS Detection of Carbaryl with PA-6/AuNRs@ ZIF-8 Films.*Analytical Chemistry* 96.5 (**2024**): 1941-1947.
2. Jiang, Qiao-Yan, et al. Recyclable and green AuBPs@ MoS2@ tinfoil box for high throughput SERS tracking of diquat in complex compounds. *Sensors and Actuators B: Chemical* 344 (**2021**): 130290.
3. Sun, Yang, et al. Fabrication of flexible electrospinning nano-fiber membrane for detection of respiratory tract transmission virus based on SERS. *Talanta* 266 (**2024**): 125127.
4. Zhu, Yiran, et al. Construction of “Coral” SERS sensor for ultrasensitive and rapid detection of harmful component macrophage migration inhibitory factor in Platelet-rich Plasma. *Biosensors and Bioelectronics* 242 (**2023**): 115718.
5. Yu, Youjia, et al. In Situ Identification of Unknown Crystals in Acute Kidney Injury Using Raman Spectroscopy. *Nanomaterials* 12.14 (**2022**): 2395.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

光电化学传感平台的构筑及其在农药残留检测中的应用研究

李海银*
河北大学

农药残留检测对推动化学与环境、食品交叉学科发展，推进健康中国建设具有重要研究意义。但传统方法存在操作繁琐、成本昂贵、灵敏度与准确性尚需提高等关键难题。发展农药残留传感新方法是解决以上问题的有效途径。光电传感技术具有简单、快速、背景信号低、灵敏度高等突出优点，成为分析化学领域的前沿研究方向。如何科学地从分子识别、信号转换及传导方面，设计构建灵敏、准确的光电传感新方法，是该领域的重大挑战。面向人民生命健康重大需求，以农药残留为检测对象，从化学信号传感和光电信号转换两方面入手，建立了纳米酶介导的比色、电化学传感新方法，发展了基于金属簇/量子点/配合物的光学传感新策略，提出了免固定电化学核酸适配体传感新思路，揭示了农药多残留同时检测机理，为农药残留的高灵敏度、高选择性分析提供了新思路、新方法和新途径。

关键字 农药残留，光电传感，新方法

参考文献

1. H. Li*, Y. Peng, X. Huang, R. Wan, L. Zhang, X. Wang, L. Han, L. Li, C. Wang*, J. Chen*, Coordin. Chem. Rev., **2024**, 510, 215797
2. H. Qi, Z. Wang, H. Li*, F. Li*, Anal. Chem., **2023**, 95, 12024-12031.
3. H. Li, S. Zhao, Z. Wang, F. Li*, Small, **2023**, 19, 2206465
4. J. Chen, C. Wang, X. Qin, X. Yang, C. Yang, H. Nie, H. Chen, H. Li*, Coordin. Chem. Rev., **2023**, 497, 215433
5. J. Wu, Q. Yang, Q. Li, H. Li*, F. Li, Anal. Chem., **2021**, 93, 4084-4091
6. H. Qi, H. Li*, F. Li*, Anal. Chem., **2021**, 93, 7739-7745
7. Q. Li, J. Wu, Q. Yang, H. Li*, F. Li*, Anal. Chem., **2021**, 93, 7362-7368
8. W. Lv, Q. Yang, Q. Li, H. Li*, F. Li*, Anal. Chem., **2020**, 92, 11747-11754
9. J. Chang, W. Lv, Q. Li, H. Li*, F. Li*, Anal. Chem., **2020**, 92, 8959-8964.
10. H. Li, Q. Yang, Z. Wang, F. Li*, ACS Sens., **2023**, 8, 1529-1535
11. H. Qi, H. Li*, F. Li*, Biosens. Bioelectron., **2023**, 220, 114839

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：报告

ID-LC-MS/MS 检测血浆中四种除草剂：从方法开发到临床应用

戴鑫华[1]、张静[2]、白杨娟[1]、李亚梅[1]、邹远高[1]、安云飞[1]、范飞*[3]
1. 四川大学华西医院
2. 四川大学华西第四医院
3. 四川大学华西基础医学与法医学院

敌草快（DQ）、百草枯（PQ）、草铵膦（GLU）和草甘膦（GLYP）是国内外最为常用的四种除草剂，对人体毒性高，中毒死亡率高。在临床实践中快速准确地对其进行检测，有利于除草剂中毒患者的早期诊断和及时治疗。本研究旨在建立一种高效、方便、可靠的方法，在不使用衍生化试剂和离子对试剂的情况下，使用液相色谱-串联质谱法（LC-MS/MS）联合 Thermo Acclaim Trinity Q1 混合色谱柱同时定量检测血浆中的 DQ、PQ、GLU 和 GLYP。DQ、PQ、GLU 和 GLYP 通过蛋白质沉淀和液-液萃取法提取，随后通过 LC-MS/MS 分离和检测。方法学验证评估了线性、检出限（LOD）、定量限（LOQ）、精密度、准确度、提取回收率、基质效应、稀释一致性和稳定性，并将验证的方法应用于华西医院和华西第四医院收集的 166 例除草剂中毒患者的血浆样品检测。结果显示，DQ 和 PQ 的 LOD 分别为 1ng/mL，GLU 的 LOD 为 5ng/mL，GLYP 的 LOD 为 10ng/mL；DQ 和 PQ 的 LOQ 分别为 5ng/mL，GLU 和 GLYP 的 LOQ 分别为 25ng/mL。此外，该方法的精密度、准确度、提取回收率、基质效应和稳定性均符合临床检测需求。该方法简便快捷、灵敏度高、结果准确可靠，并成功应用于双中心、大批量的临床样品检测，为该方法在临床中毒检测中的应用提供了可靠的依据。本研究解决了四种除草剂的同时检测需要使用离子对试剂作为流动相的困境，适用于临床中除草剂中毒患者的毒物筛查及定量检测，对于临床精准诊疗、疗效评估和预后判断具有重要意义。

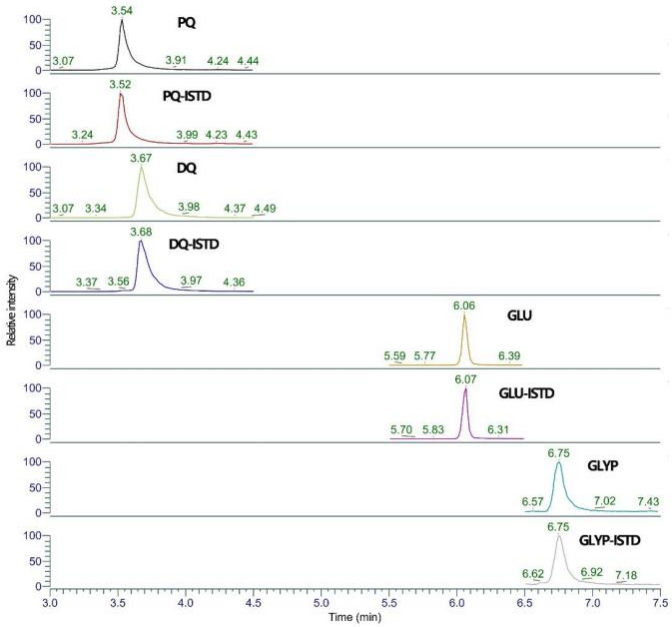


图 1 血浆中敌草快（DQ）、百草枯（PQ）、草膦（GLU）和草甘膦（GLYP）及其内标的典型色谱图

关键字 LC-MS/MS；敌草快；百草枯；草铵膦；草甘膦

参考文献

1. Wang, K., et al., Journal of chromatography. B, **2008**. 876(2): 211-218.
2. Tsao, Y., et al., Journal of analytical toxicology, **2016**. 40(6): 427-436.
3. Watanabe, D., S. Sonoda, and H. Ohta, Forensic toxicology, **2024**. 42(1): 1-6.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

脂溶性贝类毒素及其类似物的综合筛查鉴定策略及技术方法研究

梁龙辉*
军事科学院防化研究院

脂溶性贝类毒素是一类存在于海洋生物体内具有强烈毒性的活性物质。主要包括：腹泻性贝类毒素（DSP）、蛤毒素（PTX）、虾夷扇贝毒素（YTX）、原多甲藻酸毒素（AZA）、和环状亚胺类毒素（CIs）等[1]。近年来，时有发生的食物中毒事件和毒素引起的公共安全问题，对脂溶性贝类毒素及类似物的筛查鉴定提出了迫切技术需求。但目前的研究主要基于靶向筛查策略，存在覆盖度低、重复性差、未知物鉴别难等问题。本研究以 5 类典型脂溶性贝类毒素（DSP、PTX、YTX、AZA 和 CI 类）为研究对象，采用高效液相色谱-高分辨质谱（UHPLC-HRMS）技术，系统研究了不同类型脂溶性贝类毒素的质谱裂解规律，获得了特征碎片、中性丢失以及保守结构母核等特征质谱信息，建立脂溶性贝类毒素特征质谱信息数据库；基于特征质谱信息数据库，开发特征碎片（中性丢失）质谱过滤技术，实现脂溶性贝类毒素及类似物的快速锁定；开发贝肉样品前处理、UHPLC-HRMS 数据采集以及数据处理方法，最终建立贝肉中脂溶性贝类毒素及结构类似物的综合筛查鉴定策略（图 1），对建立的方法进行验证，并应用于贻贝组织标准物质的筛查鉴定中。解决了大量未知脂溶性贝类毒素难以实现高灵敏筛查的技术难题，为食品安全风险防控以及生物毒素检测鉴定等领域提供了有力技术支撑。

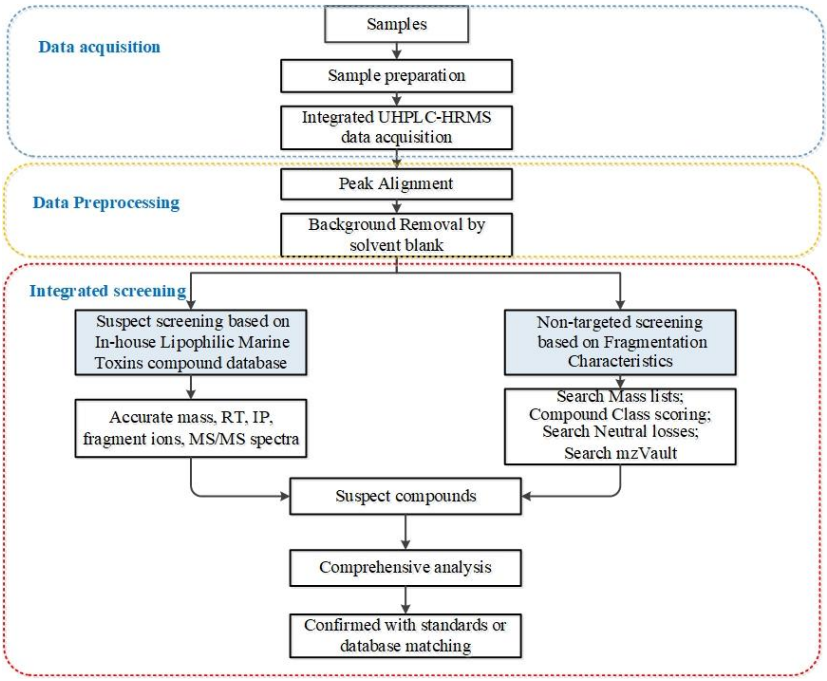


图 1 脂溶性贝类毒素及结构类似物综合筛查鉴定流程图

关键字 贝类毒素；质谱；数据库；特征质谱信息

参考文献

1. T. D'Amore, S. Lo Magro, V. Vita, Aurelia Di Taranto, *Mar Drugs*., **2022**, 20(173).
2. A. Gerssena, P. Muldera, J. Boer, *Anal Chim Acta*., **2011**, 685(2): 176-85.
3. P. Blay, J. P. M. Hui, J. Chang, J. E. Melanson, *Anal Bioanal Chem*, **2011**, 400: 577-85.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

玉米赤霉烯酮对黄粉虫生长发育的影响与降解菌株的筛选

郭宝元*[1]、赵孟如[1,2]、张春娥[3]、庞玥彤[1]、汪洋[1]、石鑫[1,2]、王哲[1]、张炜[1]

1. 国家粮食和物资储备局科学研究院
2. 上海理工大学健康科学与工程学院
3. 宁夏回族自治区粮油产品质量检测中心

玉米赤霉烯酮（Zearalenone，ZEN）是镰刀菌属产生的一种常见霉菌毒素，广泛存在于食品和饲料中，对食品安全和人类健康构成严重威胁[1]。前期研究发现，在饲养黄粉虫幼虫过程中添加呕吐毒素（Deoxynivalenol，DON）对其生长性能未造成显著影响。这表明黄粉虫可能通过肠道微生物或自身的代谢机制来降解或转化真菌毒素[2]。

本研究以黄粉虫（*Tenebrio molitor*）为试验对象，考察不同 ZEN 污染浓度（555.2μg/kg 的低浓度、828.2μg/kg 的中度污染浓度、3132.7μg/kg 的高度污染浓度）对其存活率和增重的影响。另外，采用超高效液相色谱-高分辨质谱联用技术考察了黄粉虫体内及其粪便中 ZEN 的残留情况。同时，从我国华东、华北等五个主要养殖区域收集黄粉虫粪便样本，通过富集培养的方法进行 ZEN 降解菌株的筛选。结果表明：（1）不同 ZEN 污染剂量（555.2μg/kg、828.2μg/kg 和 3132.7μg/kg）对黄粉虫幼虫的存活率和增重均无显著影响（$P>0.05$）；（2）在黄粉虫体内未检出 ZEN 及其衍生物残留，粪便中含有部分 ZEN 及其衍生物；（3）从收集的粪便样本中分离获得 6 株具有 ZEN 降解能力的菌株，其中短乳杆菌 PBJ10_5_5 在 42℃、pH 5.0 条件下培养 4 天的降解率最高，达 84.2%。本研究探讨了 ZEN 对黄粉虫生长发育的影响，并从其粪便中筛选出具有降解 ZEN 能力的菌株。这些发现不仅丰富了对黄粉虫代谢特性的认识，也为利用黄粉虫及其体内微生物降解饲料中 ZEN 污染提供了新的思路。

关键字 玉米赤霉烯酮；黄粉虫；微生物降解

参考文献

1. Kong, L.; Zhao, A.-H.; Wang, Q.-W.; Feng, Y.-Q.; Yan, Z.-H.; Li, M.-H.; Zhang, F.-L.; Wang, H.; Shen,
K.-Y.; Liu, Y.; Sun, Y.-J.; Shen, W.; Li, L., Maternal Zearalenone exposure impacted ovarian follicle
formation and development of suckled offspring. *Science of The Total Environment* **2021,** *788*, 147792.
2. 赵冬蕾；汪洋；张春娥；刘彤彤；李慧敏；黄凯；郭宝元，一株呕吐毒素高效降解菌的筛选鉴定
和降解特性表征. *环境化学* **2023,** (11)

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

电容法脱盐在质谱分析中的应用

李宏亮[1]、巩在君[1,2]、马冬雅[2]、郭磊*[1]、谢剑炜[1]
1. 军事医学研究院
2. 河北科技大学

目的：在蛋白质和多肽的生物医学样品测定中，多存在包括高盐环境在内的基质干扰。例如质谱分析时，需要克服蛋白和多肽样品中非挥发性盐信号抑制的问题。目前亟需便捷高效的盐分脱除前处理手段，其中电容技术具有工艺简便、能耗低、易再生的优点。本工作建立了一种新型的混合电容去离子（HCDI）技术方法，并应用于毒素蛋白和多肽样品。材料和方法：以石墨烯气凝胶（Graphene aerogel，GA）电极用作阳极，二硫化钼 MoS_2/GA 复合材料电极材料用作阴极，系统考察材料性能和电容法脱盐条件，并用于毒素蛋白和多肽样品的质谱分析。结果：MoS_2 薄片和 GA 的协同作用以及 3D 交叉网络结构使 MoS_2/GA 复合材料具有良好的亲水性、丰富的孔结构和高电化学性能，在 MS 分析之前，经过电容法脱盐，92%的 Na^+ 和 Cl^-被快速去除，除盐后质谱响应值存在 32%的提升，多肽样品的绝对回收率为 62%。结论：所建立 GA(+)‖GA/MoS2(-)的 HCDI 方法，具有良好的脱盐潜力，可望在复杂生物医学体系的质谱检测研究中得到进一步应用。

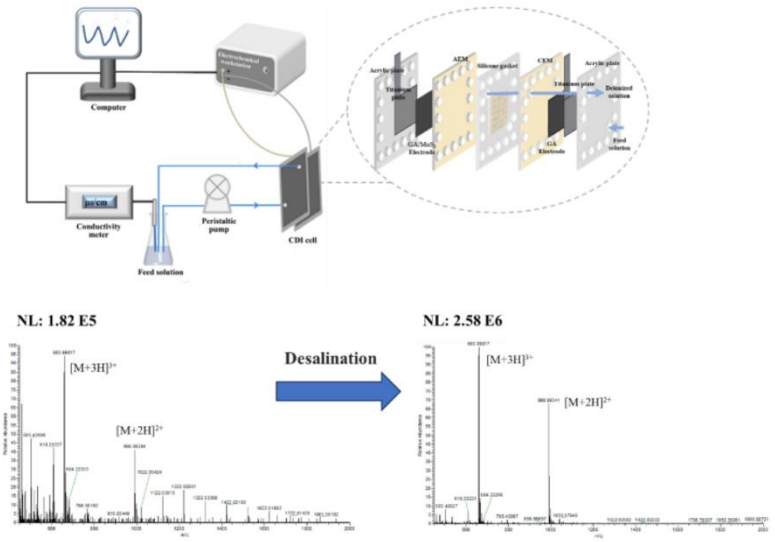


图 1 电容脱盐装置及脱盐前后质谱分析效果图

关键字 电容法脱盐，蛋白质和多肽，质谱分析

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

一种志贺氏菌与致泻大肠埃希氏菌的菌属及其种间区分鉴定新方法

刘璐瑶[1,2]、覃露媛[2]、曲梅[3]、郭磊*[2]、唐丽[1]、谢剑炜[2]
1. 中央民族大学药学院，北京，100081
2. 军事医学研究院国家安全特需药品全国重点实验室，北京，100850
3. 北京市疾病预防控制中心，北京，100013

目的：从 1898 年至今，世界各地均有因志贺氏菌（4 种）、致泻大肠埃希氏菌（DEC，主要有 5 种）引起的中毒感染和发病的报道，严重威胁公共健康。然而，志贺氏菌与 DEC 均为革兰氏阴性细菌并同属于肠杆菌科，其基因型高度相似、表型密切相关，进化角度上志贺氏菌属位于大肠埃希菌的系统发育树中。快速准确地区分鉴定志贺氏菌属和 DEC 属，对于临床诊断、预防控制非常重要。但目前常规形态、生化、基因水平等鉴定方法均难于实现这两类近缘菌属的快速区分鉴定，区分到种的水平更为困难。本研究则从提供丰富化学指纹的新角度，结合机器学习，建立了一种能够用于准确和快速区分鉴定两类菌属及其种之间的新方法。材料和方法：收集包含 4 种志贺氏菌与 5 种 DEC 在内共 72 株菌，菌株收集培养后采用甲酸提取法处理菌株样品。通过基质辅助激光解吸/飞行时间质谱（MALDI/TOF-MS）和纸喷雾质谱（PSI-MS）两种方法分别采集菌株的质谱数据。最后通过机器学习算法进行数据分析，生成有效的分类模型，并对模型进行超参数优化以及外部验证。结果：针对志贺氏菌和 DEC 这两类难以区分鉴定的菌株，3 个有效的机器学习分类模型，分别为模拟 Lasso 模型、模拟岭回归模型、以及 XGboost 模型，均可有效实现两类菌属之间的区分鉴定，也可实现其种间的精准区分鉴定。MALDI/TOF-MS 和 PSI-MS 两种方法分别提供的蛋白质和脂质的质谱数据起到较好的互补作用。结果优于商用微生物质谱鉴定系统的自建库模型比对，也优于经典的有监督偏最小二乘法的分类结果。结论：通过 MALDI/TOF-MS、PSI-MS 技术结合机器学习算法，建立了一种准确和快速区分鉴定志贺氏菌属和 DEC 属的菌属及其种的新方法。该方法可望用于临床诊断、预防控制、菌种优选、微生物发酵、工艺放大、以及中毒鉴定、食品安全等多方面实践。

关键字 志贺氏菌、致泻大肠埃希氏菌、MALDI/TOF-MS、PSI-MS、机器学习模型

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

几种芬太尼代谢产物轮廓研究

沈志颖、郭磊*、李泽华、李克新、谢剑炜
军事医学研究院

目的：芬太尼是一种μ-阿片受体激动剂，其镇痛镇静作用大约为吗啡的 100 倍，起效较快，被用作麻醉性镇痛药，用于全身和局部的麻醉以及持续性中重度慢性疼痛的治疗。芬太尼脂溶性高，极易通过血脑屏障和胎盘屏障；具有成瘾性，国际上滥用与致死案例逐年增多。芬太尼类衍生物是一类 4-苯胺哌啶衍生物，与芬太尼有共同的母核结构，但其效价更高，更具备成瘾性。代表性芬太尼类衍生物包括卡芬太尼、瑞芬太尼、呋喃芬太尼和奥芬太尼等。芬太尼及衍生物在体内代谢转化较快，亟需掌握芬太尼类衍生物的代谢轮廓，从而有助于芬太尼类衍生物的暴露溯源。本研究建立了生物医学样品—尿液中芬太尼类衍生物代谢产物的液相色谱-三重四极杆质谱（LC-QqQ MS/MS）定量方法，以明晰芬太尼类衍生物在体内的转化规律，完成代谢产物轮廓描绘。材料和方法：动物模型为雄性新西兰兔，经耳缘静脉注射枸橼酸芬太尼类衍生物，并在 2-72 h 收集尿液样本，采用β-葡糖醛酸化酶+芳基硫酸酯酶将 II 相代谢产物转化为 I 相代谢产物，最后通过 LC-QqQ MS/MS 实现定量测定。结果：在对芬太尼的代谢产物预测基础上，将该方法应用在卡芬太尼、瑞芬太尼、呋喃芬太尼和奥芬太尼。体内代谢尿液样品结果表明共测得 15 种卡芬太尼代谢产物，4 种瑞芬太尼代谢产物，7 种呋喃芬太尼代谢产物，6 种奥芬太尼代谢产物。N-脱烷基化代谢产物是卡芬太尼和瑞芬太尼的主要代谢产物，去酰胺化代谢产物是呋喃芬太尼的主要代谢产物，羟基化代谢产物是奥芬太尼的主要代谢产物。结论：获得了 4 种芬太尼类衍生物的代谢产物轮廓，其主要代谢产物可作为潜在的中毒诊断生物标志物。不同改构类型对芬太尼类衍生物的代谢产物产生直接影响，致使其主要代谢产物存在差异，未来通过扩大动物种类对体内潜在的中毒诊断生物标志物进行研究与验证。

关键字 芬太尼类衍生物，代谢产物轮廓，中毒诊断生物标志物

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

单色聚焦 x 射线荧光光谱法同时检测生物样本中四种有毒金属元素

张云峰*[1]、吴世豪[2]、赵鹏[1]、宋歌[1]、邹波[1]、王爱华[1]、常靖[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 中国人民公安大学

单色聚焦 x 射线荧光（ME-XRF） 光谱法是一种新型的微量元素分析技术，与电感耦合等离子体质谱法（ ICP-MS）相比，具有操作简单、 快速、 成本低等优势。本研究建立了 ME-XRF 快速检验血液、尿液、脏器组织等生物样本中砷、汞、铊、铅 4 种有毒金属元素的的方法。采用基本参数法对血液、尿液、脏器组织等生物基体效应进行校正，建立了对应的检测模式：血液和尿液振荡均匀后取 0.4 mL，脏器组织匀浆后取 0.3 g，装入样品杯并覆盖一层 12 μm 聚丙烯薄膜，使用各对应模式进行 100 s 测定。方法检出限为 0.03~0.05μg/mL（g），定量限为 0.10~0.15 μg/mL（g）。建立的方法应用于实际案件中 22 份生物检材的检验，得到了与 ICP-MS 法一致的结果。

本方法无需进行有机质破坏处理，操作简单、准确性好，能够用于实验室及案件现场的快速检验，为相关案件的快速侦办提供了技术支持。

关键字 生物样本；有毒金属；单色聚焦 x 射线荧光；快速检测

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

空间共轭微孔聚合物薄膜阵列传感器的设计

冯淼、张孔庆、李晓白、马洪伟*
东北林业大学

化学战剂（CWAs）由于其高毒性和致命性被用以打击恐怖主义和威胁国土安全，开发CWAs快速灵敏的检测技术，快速、准确识别环境中的CWAs具有极其重要的意义。荧光检测法能避免目前检测方法中存在的操作复杂、选择性差和响应时间慢等缺点，此外，荧光薄膜传感器因其在定性和定量分析方面的优势备受研究者青睐，对于复杂环境的多样本特异性检测，对单一薄膜性能开发尤为重要。因此，基于空间内电荷转移（TSCT）激发态性质的分子有利于CWAs在空间堆积成的孔洞中进行扩散等优点，本课题提出一种用于CWAs传感的超灵敏、光稳定性好的薄膜的新策略，设计并合成一种具有良好光学活性和不同π共轭的TSCT性质的D-π-A分子作为前体，通过电聚合（EP）方法制备出不同孔径的空间共轭微孔聚合物薄膜。以薄膜作为传感单元，构筑一种便携式荧光薄膜阵列传感器，实现对CWAs的超灵敏检测和复杂体系的特异性识别。

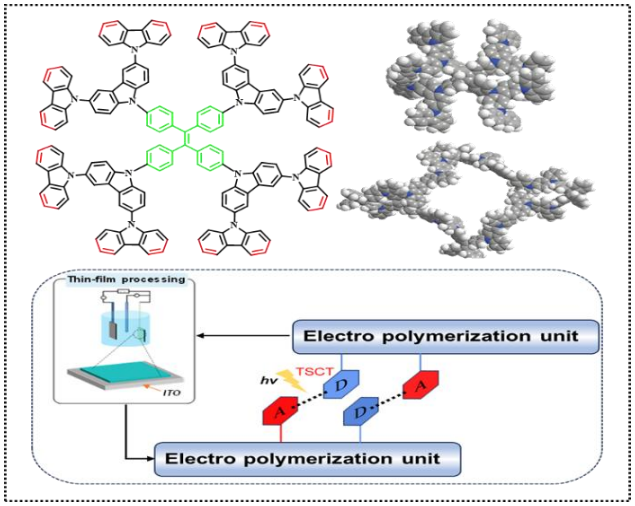


Fig.1 Design of fluorescent thin film sensing array

关键字 化学战剂；空间内电荷转移；D-π-A体系分子；共轭微孔聚合物；薄膜阵列

参考文献

1. Mo, W.; Zhu, Z.; Kong, F.; Li, X.; Chen, Y.; Liu, H.; Cheng, Z.; Ma, H.; Li, B. *Nat. Commun.* **2022**, 13: 5189.
2. Ma, H.; Chen, Y.; Li, X.; Li, B. *Adv. Funct. Mater.* 2021, 31: 2101861.
3. Liu, H.; Wang, Y.; Mo, W.; Tang, H.; Cheng, Z.; Chen, Y.; Zhang, S.; Ma, H.; Li, B.; Li, X. *Adv. Funct. Mater.* **2020**, 30: 1910275.
4. Li, X.; Lv, Y.; Chang, S.; Liu, H.; Mo, W.; Ma, H.; Zhou, C.; Zhang, S.; Yang, B. *Anal. Chem.* 2019, 91(17): 10927-31.
5. Wang, M.; Cheng, Z.; Meng, X.; Gao, Y.; Yang, X.; Liu, H.; Zhang, S.; Ma, H.; Yang, B. *Dyes Pigm.* **2020**, 177: 108317.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

基于 2-(2’-羟基苯基)苯并恶唑衍生物荧光分子构建及其对典型化学战剂识别研究

何元香、宋珂、高润利、王红梅*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

化学战剂的存在和使用对生命和环境安全构成了巨大威胁，因此迫切需要开发出快速有效、高灵敏度和选择性且适合实地使用的便携化检测方法，以应对未来潜在危机[1–5]。荧光检测法因其具有灵敏度高、选择性好、成本低及便捷可靠等优点，在化学战剂检测领域具有广泛的应用前景和重要的研究意义[6,7]。因此，本研究工作重点以 2-(2’-羟基苯基)苯并恶唑为骨架结构，结合荧光响应机理，设计合成了一系列具有不同官能团取代的苯并恶唑类分子，并将其用于氯磷酸二乙酯（DCP）、双光气（Diphosgene）以及芥子气（SM）的识别研究，通过荧光分光光度计检测，发现其中部分分子具有优异的识别能力（检测限低于μM）。

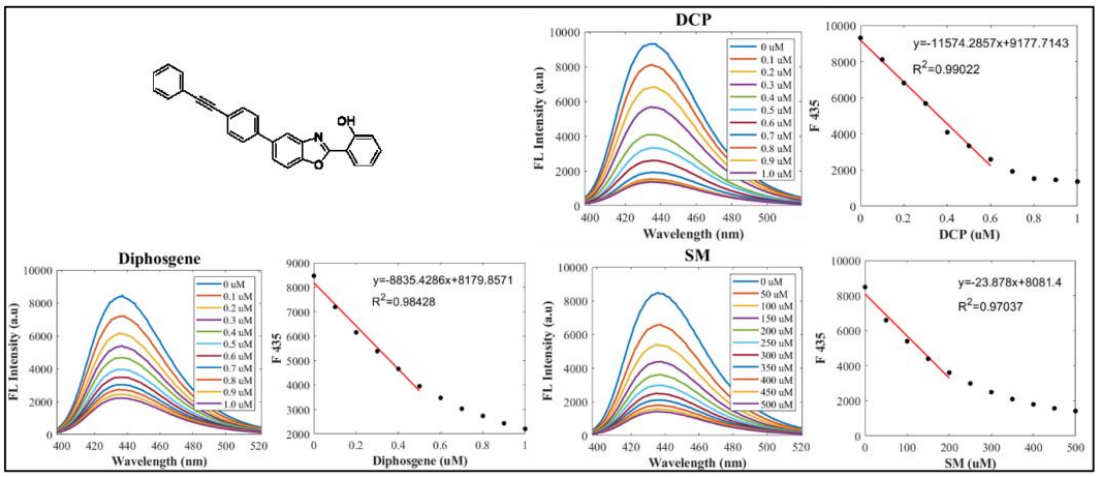


图 1 代表性的苯并恶唑类分子对化学战剂及类似物的荧光检测

关键字 苯并恶唑衍生物 化学战剂 识别研究

参考文献

1. O. Isono, A. Kituda, M. Fujii, T. Yoshinaka, G. Nakagawa and Y. Suzuki, *Toxicol. Lett.*, **2018**, 293, 9-15.
2. R. Stone, *Science*, **2018**, 359, 1314-1315.
3. Y. J. Jang, K. Kim, O. G. Tsay, D. A. Atwood and D. G. Churchill, *Chem. Rev.*, **2015**, 115, 1-76.
4. M. Lafuente, I. Pellejero, V. Sebastián, M. A. Urbiztondo, R. Mallada, M. P. Pina and J. Santamaría, *Sens. Actuators, B*, **2018**, 267, 457-466.
5. L. Chen, D. Wu and J. Yoon, *ACS Sens.*, **2018**, 3, 27-43.
6. W. Meng, A. Sedgwick, N. Kwon, M. Sun, K. Xiao, X. He, E. Anslyn, T. James and J. Yoon, *Chem. Soc. Rev.*, **2023**, 52, 601-662.
7. V. Kumar, H. Kim, B. Pandey, T. D. James, J. Yoon and E. Anslyn, *Chem. Soc. Rev.*, **2023**, 52, 663-704.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

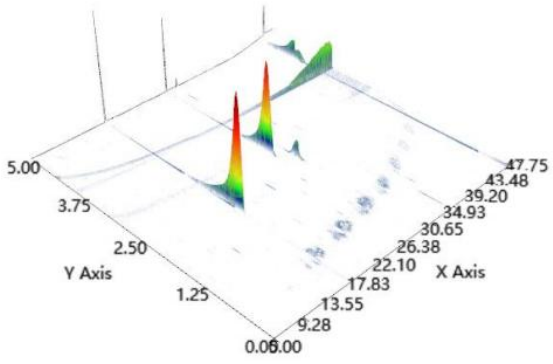
环境暴露下 RVX 的化学取证研究

张子璇、卢晓刚、金梦、高润利、王红梅*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

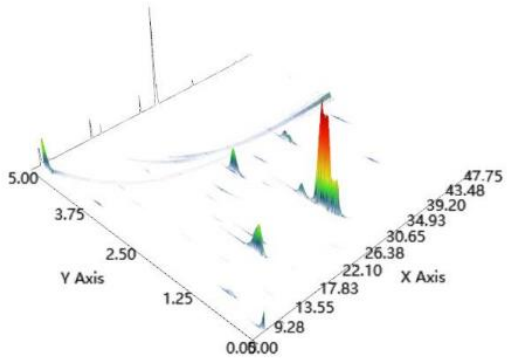
V 类神经性毒剂是一类高毒性有机磷神经毒剂，近年来，化学毒剂暴露释放的化学安全事件时有发生，因此，针对毒剂开展有效的化学取证归因工作对减少国际争端，维护国民安全有重要意义。近些年，有机磷神经性毒剂及其前体化合物环境暴露下的归因工作已逐步开展，为现实环境下毒物暴露后的取证归因提供了理论和技术支持。

本研究对 V 类神经性毒剂 RVX 环境下暴露后的化学取证进行了初步探索，对空白土壤和种有植物多肉的土壤分别进行了染毒实验。在 7 天和 14 天后对染毒的空白土壤进行了取样检测，所得 GC-TOFMS 如图（1）所示。结果显示，随着时间的延长，体系内 RVX 含量有所降低，并伴随着磷酸异丁酯类化合物和胺基二硫醚含量的增加。在种有植物的土壤染毒后的 40 天内发现了包括胺类化合物、有机磷化合物以及长链醚类、酯类化合物，质谱图如图（2）所示。与此同时，该部分检测到的有机磷化合物大多为膦酸乙酯，且含量较低，虽体系中可以检测到甲基膦酸二异丁酯，但膦酸乙酯类化合物的出现说明在现实环境中，化合物的代谢和转化是更为复杂的，该部分工作值得更深入的探索，以建立可用 V 类神经性毒剂的溯源追踪的化合物信息库。

基于本研究的思路和方法，期望获得更多的现实环境下毒物暴露后的取证信息，进一步实现化学毒剂的全方位分析及暴露后的溯源归因。



（1）



（2）

关键字 化学取证，RVX，有机磷神经毒剂，毒物暴露

参考文献

1. Zhang Z, Wang J, Lu X, et al. Recent progress in the application of chemical attribution in forensic
profiles. *Forensic Chemistry*, **2024**, 37: 100556.
2. Lu X, Zhang Z, Gao R, et al. Recent progress in the chemical attribution of chemical warfare agents and
highly toxic organophosphorus pesticides. *Forensic Toxicology*, **2021**, 39(2): 334–349.

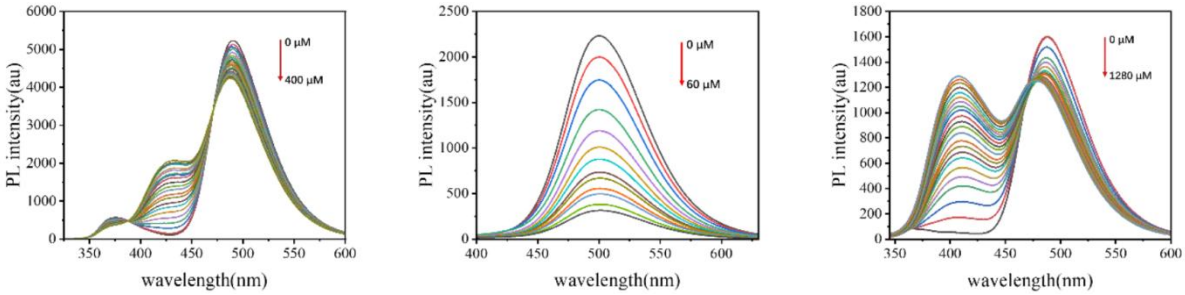
3. Hoggard J C, Wahl J H, Synovec R E, et al. Impurity profiling of a chemical weapon precursor for
possible forensic signatures by comprehensive two-dimensional gas chromatography/mass spectrometry
and chemometrics. *Analytical Chemistry*, **2010**, 82(2): 689–698.
4. Jansson D, Lindström S W, Norlin R, et al. Part 2: forensic attribution profiling of Russian VX in food
using liquid chromatography-mass spectrometry. *Talanta*, **2018**, 186: 597–606.
5. Williams A M, Vu A K, Mayer B P, et al. Part 3: solid phase extraction of Russian VX and its chemical
attribution signatures in food matrices and their detection by GC-MS and LC-MS. *Talanta*, **2018**, 186:
607–614.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

苯并咪唑及其衍生物对化学战剂的阵列区分与应用

宋珂、何元香、高润利、王红梅*
国民核生化灾害防护国家重点实验室

化学战剂（CWA）作为一类具有极高毒性的化学物质，在国际范畴内已被公认为大规模毁灭性武器。尽管目前国际上大多数国家都签署了《化学武器公约》，但 CWAs 在恐怖袭击或恐怖事件中仍被使用，对化学安全领域造成极大影响。因此，能够在第一时间准确确认毒剂的类型，对于人类生命健康以及国家安全而言，具有极为重要的意义。[1]近年来，荧光探针由于具备良好的灵敏度、选择性、便于携带和响应速度快等优点在检测 CWAs 方面受到了广泛的关注。因此，本文提出以苯并咪唑为母核，构建了一系列具有 ESIPT[2] 效应和不同激发态性质 [3] 的荧光分子，以达到同时进行不同毒剂区分和高灵敏性检测的效果，并将测试结果与高斯理论计算进行结合，从电子转移的角度，探究荧光分子在检测时由不同给受体基团所引起的检测现象及检测限的变化，并做出合理的机理解释与假设推断，为后续指导分子设计提出重要的意见和建议。将所合成的 17 个分子与模拟物进行反应，结果证明，相比之下给电子基团更有利于电子转移，更容易促使毒剂与检测位点的结合，这与高斯计算结果保持一致。最后，将所设计的分子与纸、纤维进行结合制作成可便携式的薄膜传感器，从而实现对液体和气体毒剂检测效果，为开发快速灵敏化学武器的现场检测工具具有重要的意义。



关键字 化学战剂；ESIPT；阵列；区分

参考文献

1. Meng, W.-Q.; Sedgwick, A. C.; Kwon, N.; Sun, M.; Xiao, K.; He, X.-P.; Anslyn, E. V.; James, T. D.; Yoon, J., Fluorescent probes for the detection of chemical warfare agents. *Chemical Society Reviews* **2023,** *52* (2), 601-662.
2. Cheng, H.-B.; Li, Y.; Tang, B. Z.; Yoon, J., Assembly strategies of organic-based imaging agents for fluorescence and photoacoustic bioimaging applications. *Chemical Society Reviews* **2020,** *49* (1), 21-31.
3. Liu, K.; Qin, M.; Shi, Q.; Wang, G.; Zhang, J.; Ding, N.; Xi, H.; Liu, T.; Kong, J.; Fang, Y., Fast and Selective Detection of Trace Chemical Warfare Agents Enabled by an ESIPT-Based Fluorescent Film Sensor. *Analytical Chemistry* **2022,** *94* (32), 11151-11158

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

光纤倏逝波生物传感器在石房蛤毒素检测中的应用

晏婷[1,2]、肖参[2]、刘雪梅[2]、马波[2]、李治[2]、徐华*[2]、邵宁生[2]、谢剑炜[2]
1. 青岛大学
2. 军事医学研究院

目的 石房蛤毒素（Saxitoxin，STX）是毒性最强的神经毒素之一，属于麻痹性贝类毒素（Paralytic shellfish toxins，PSTs）的一种。STX 广泛分布于海洋环境中，对人类及其他动物生命安全构成重大威胁，因此对其进行高灵敏及快速检测具有重要意义。适配体（Aptamer）是一类能够与目标分子高特异性结合的单链寡核苷酸序列，它们具有与抗原-抗体反应相匹敌的灵敏度，同时比抗体更易合成，稳定性好。本研究利用 STX 与其 Aptamer 高亲和力结合的特性，优化并建立了光纤倏逝波生物传感器检测 STX 的方法。材料与方法 亲和力评价实验中，对 M-30f、STX-41、STX-apt1、STX-apt2 四条 Aptamer 标记 Cy5.5 荧光探针，并将 STX 固定于光纤上，当 Aptamer 与 STX 结合，光纤中的倏逝波即可激发荧光产生信号，根据不同浓度的荧光标记 Aptamer 产生的荧光信号计算出其相应的 Kd 值，可鉴定获得亲和力最佳的 Aptamer。STX 的检测实验中，基于最佳 Aptamer 序列设计了系列 Cy5.5 荧光标记的互补短链，优化并获得最佳的互补短链序列和浓度，将最佳 Aptamer 固定于光纤上后，利用不同浓度 STX 与互补短链竞争结合而导致的荧光信号下降进行 STX 的检测。结果 亲和力评价实验结果显示，M-30f、STX-41、STX-apt1 和 STX-apt2 的 Kd 值分别为 47.31 nM、24.29 nM、314.5 nM 和 34.98 nM，亲和力大小为 STX-41＞STX-apt1＞M-30f＞STX-apt2。互补短链的最佳浓度确定为 50 nM。STX 的检测结果显示，其在浓度为 0.1 ng/mL 时即可引起荧光信号大幅度下降，表明方法检测限低于 0.1 ng/mL。结论 本研究基于互补链与目标物竞争结合 Aptamer 的原理，以及光纤中的倏逝波效应原理，设计并建立了便捷、特异、高灵敏的 STX 检测方法，有望发展成为一种现场快速检测 STX 的新方法。

关键字 石房蛤毒素、适配体、倏逝波

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

尖吻腹蛇毒毒素蛋白的精准鉴定

任春雨[1,2]、李泽华[2]、刘璐瑶[1,2]、郭磊*[2]、唐丽[1]、谢剑炜[2]
1. 中央民族大学药学院，北京市海淀区中关村南大街 27 号，100081；
2. 军事医学研究院毒物分析实验室，暨国家安全特需药品全国重点实验室，北京 100850

国内外蛇毒中毒事件屡有发生，对社会安定和民众健康造成了威胁。目前中毒事件中的蛇毒来源剖析方面，主要依据物证、症状、或基于毒液基因组的分析方法，多存在证据不充分或缺失、特异性不强等缺点。蛇毒是毒蛇毒腺分泌的含有丰富蛋白质和多肽的液态混合物，其中蛋白质和多肽占到干重的 90%至 95%。因此，考虑到蛇毒蛋白和多肽在细胞死亡、神经传导、血液凝固和信号传递等生物过程中是功能执行者，具有强大的生物活性和高度的专一性。直接对蛇毒蛋白进行精准鉴定，进而达到对种属的精准区分，是一种极具潜力的分析鉴定方法。但尚存在着基于蛋白质组学技术，在蛋白或酶解肽段层面鉴定规则不清等局限。我们在此进行了特征肽（签名肽，signatured peptides）的蛇毒鉴定实践，结合鉴定规则的建立，试图筛选出具有种属特异性的蛇毒肽段。

针对尖吻腹蛇蛇毒液冻干粉，我们引入尺寸排阻层析（SEC）作为前处理手段，将尖吻腹蛇蛇毒液有效分为 5 个主要组分，继而针对以上 5 个主要组分进行超高效液相色谱-四极杆经典轨道阱串联质谱（UPLC-Q Orbitrap MS/MS）分离及鉴定。有效提高了分离分析的鉴定效率。首先系统优化了 SEC 的层析柱柱长、流速、流动相的种类和浓度，可在 200 min 内获得的蛇毒液的 5 个分离峰。每个峰代表的组分经冻干复溶除盐处理后，进行溶液和 SDS-PAGE 胶内组分的胰蛋白酶酶解，最后经 UPLC-Q Orbitrap MS/MS 分离分析鉴定。通过 Proteome Discoverer 软件对质谱数据进行搜索，应用 FDR<0.01 规则,5 个组分分别可归属到 19、27、17、13、1 个主蛋白质，特征肽段>=2 的主蛋白质则分别有 14、21、13、12、0 种，继而应用 PRM 模式，可得到 7 个蛋白的 19 条肽段，用于构成尖吻腹蛇蛋白的特征肽段库。上述特征肽段可望用于蛇毒蛋白的种属来源的准确识别。未来还需将该策略用于更多种属的蛇毒蛋白的精确定性鉴别、准确定量以及中毒病例的鉴定实践。

关键字 尖吻腹蛇蛇毒；尺寸排阻层析；蛋白质组学；特征肽

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

基于细胞活性的相思子毒素及其解毒剂分析评价研究

陈雨婷[1,2]、李治[2]、马波[2]、徐华*[2]
1. 延边大学药学院
2. 军事医学研究院国家安全特需药品全国重点实验室

目的：相思子毒素（abrin）是一种从相思子种子中分离纯化的II型核糖体失活蛋白（ribosome inactivation protein type II，RIP II），由具 N-糖苷酶活性的 A 链和具凝集素活性的 B 链经二硫键连接构成。由于易获取和具高致死性，abrin 被认为是潜在的化生恐怖剂。在四种已知的 abrin 异构体即 a、b、c 和 d 中，abrin-a 毒性最强。目前，中和抗体仍然是治疗生物毒素中毒最有效的方法。本研究利用活性 abrin-a 分析技术评价毒素活性，并考察亲和抗体对于毒素暴露 HeLa 细胞的中和保护效果，探讨其与 abrin-a 相互作用的分子机制。**材料与方法：**在还原和非还原条件下，用 10%十二烷基硫酸钠聚丙烯酰胺凝胶电泳分离 abrin-a、abrin-b 和 AAG（各 4 μg），并用考马斯亮蓝溶液染色，分析蛋白纯度以评价蛋白纯化效果；用无血清 RPMI-1640 培养基稀释配制系列浓度的 abrin-a（0.01~100 ppb）并暴露 HeLa 细胞，采用 CCK-8 法测定 abrin-a 对细胞的半数抑制浓度（IC50）及检测限（LOD），考察 abrin-a 的细胞毒性。应用前期筛选获得的两株单抗 10D8 和 10C9（终浓度 10 μg/ mL），评价其对毒素作用细胞毒性的中和抑制效果；应用 Western Blot 技术，分别在还原和非还原条件下分析 abrin-a 的蛋白结构，以确定抗体 10D8 和 10C9 结合的表位，并评估这两株抗体是否通过抑制 abrin-a 的酶活而实现中和活性。**结果：**abrin-a、abrin-b 和 AAG 经还原和非还原 SDS-PAGE 分析，其完整蛋白或亚基的分子量均与理论值相符，且蛋白纯度大于 95%。CCK-8 法测得 abrin-a 在 HeLa 细胞中的 IC50 为 1.8 ng/mL，LOD 可达 0.03 ng/mL。抗体中和活性评价结果表明 10D8 和 10C9 对于 abrin-a 暴露 HeLa 细胞均有明显的毒性抑制作用。Western blot 分析结果表明，抗体 10D8 和 10C9 均能够识别并结合 abrin-a 的 A 链，提示其可通过影响 A 链的糖苷酶活性而呈现体外中和活性；此外 10C9 还显示出与 abrin-a 的 B 链的结合活性。**结论：**利用活性 abrin-a 分析技术可实现 abrin-a 的快速、灵敏、准确检测以及中和抗体的筛查，有助于进一步开发 abrin-a 的解毒剂，为未来的临床应用提供实验依据。

关键字 相思子毒素；中和抗体；细胞活性

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

基于噬菌体展示技术靶向蓖麻毒素的环肽亲和分子初筛

黄旋[1]、杨志芳[2]、刘佳[3]、郭磊*[1]、谢剑炜[1]
1. 军事医学研究院
2. 智能协同感知与分析认知实验室
3. 河北科技大学化学与制药工程学院

目的：国际范围内，蓖麻毒素（Ricin）及蓖麻子粗提物引起的恐怖或中毒事件时有发生。在突发事件应急处置、中毒救治中，迫切需要建立与发展针对 Ricin 的快速、灵敏、准确的生物传感检测方法，有效支撑国家、公共安全和保障民众生命健康。多肽作为生物传感的亲和元件，较之抗体，其结构简单、易于修饰和功能化，可长期稳定保存；较之核酸适配体，其作用位点丰富、筛选成功率高、识别可重复性强。相较于线性肽，环肽具有更强的特异性、更高的亲和力、更好的稳定性和膜通透性好等优势。目前尚无靶向 Ricin 的环肽亲和分子报道。因此，我们在此展示了使用噬菌体展示技术筛选靶向 Ricin 的环九肽亲和分子的初步结果。方法：使用库容量为 109 的噬菌体展示文库筛选靶向 Ricin 的亲和分子，一共进行了两次淘选，采用“固定-洗脱-扩增-富集”步骤、正反筛相结合、特异性多肽竞争洗脱、改变靶标投入量、改变洗脱液吐温 20 含量等策略，进行三至四轮淘选，筛选获得靶向 Ricin 的多条环九肽，并使用表面等离子共振技术（SPR）测定亲和环肽的亲和力和动力学特征。随后，使用分子对接技术揭示亲和多肽与靶蛋白潜在相互作用位点、作用力。构建环肽丙氨酸扫描突变库、组氨酸扫描突变库和饱和突变库以开展亲和力成熟，并进行 SPR 实验验证。结果：第一次四轮淘选得到 7 条靶向 Ricin 的环肽，经 SPR 验证，3 条环肽可与 Ricin 特异性结合，平衡解离常数（KD）介于 20～35 μM 之间。通过丙氨酸突变、组氨酸突变确定了宜保留的关键氨基酸（Trp4、Phe8）及可用于突变的氨基酸位点（Ser6、Gly7），分子对接揭示了环肽与 Ricin 的初级、次级口袋活性位点存在多重作用，实验评价发现亲和力成熟结果基本持平，提示可能非特异相互作用占优。饱和突变虚拟预测得到 62 条多肽序列均具有较大突变能（<-5 Kcal/mol）。加强进化压力后的第二次三轮淘选得到 3 条靶向 Ricin 的环肽。结论：通过噬菌体展示技术筛选得到多条与 Ricin 结合的亲和环肽，KD 集中于μM 水平，但仍需进行包括增大文库容量、合理设计体外筛选压力条件等探索，以及从头设计虚拟亲和环肽等，以获得具有更高亲和力的环九肽分子，以切实应用于生物传感和应急响应。

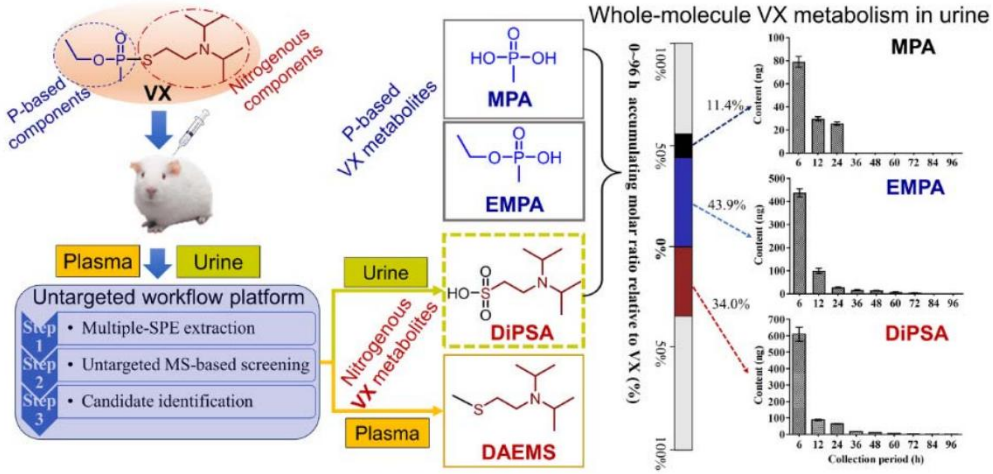
关键字 蓖麻毒素；噬菌体展示技术；环肽；虚拟-实验交替验证

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

VX 在豚鼠尿液中的含氮代谢物的发现与全分子代谢规律

刘昌财*
军事科学院防化研究院

近年来国际上 V 类有机磷神经性毒剂（V-OPNAs）被施用的事件多发，获得全部代谢物对于它们的唯一性指证使用/暴露尤为关键。然而，从尿液中排泄的源自 V-OPNAs 的含氮基团端的代谢物仍未知。以 VX 染毒豚鼠为模型，应用建立的非靶向工作流平台，首次揭示了 2-(N,N-二异丙基氨基)乙磺酸（DiPSA）为 VX 的含氮尿液代谢物，证实了 2-(二异丙基氨基乙基)甲基硫化物为 VX 的含氮血液代谢物，首次阐明了 VX 全分子代谢途径。DiPSA 被评估为性能优异的 VX 暴露生物标志物。建立了 VX 含氮、磷代谢物同时精准定量检测方法，首次阐明了完整的 VX 全分子代谢规律，暴露后 24 小时内 32.4%的 VX 以 DiPSA 的形式排出，52.1%以含磷代谢物的形式从尿液中排出。此研究发现了新 VX 代谢物/暴露标志物 DiPSA，揭示了 VX 全分子代谢规律，首次实现了 V-OPNAs 中毒/暴露在尿液中的精准溯源，对于 OPNAs 的化武精准核查、中毒新机理发现以及中毒诊断救治具重要价值。



关键字 有机磷神经性毒剂；尿液代谢物；暴露生物标志物；全分子代谢规律

参考文献

1. Wiener, S.W., Hoffman, R.S., *J. Intensive. Care. Med*. **2004**, 19(1), 22-37.
2. Long, Q., Zhang, Z., Li, Y., etal., *J. Hazard. Mater*. **2023**, 459, 132211.
3. Nakagawa, T., Tu, A.T etal., *Forensic Toxicol*., **2018**, 36(2), 542-544.
4. Vucinic, S., Antonijevic, B., Tsatsakis, etal, *Environ. Toxicol. Pharmacol*., **2017**, 56, 163-171.
5. Witkiewicz, Z., Neffe, S., TrAC, *Trends Anal. Chem*. **2020**, 130, 115960.
6. Liu, C.-C., Liang, L.-H. etal., *J. Chromatogr. A*. **2023**, 1697, 463990.
7. Kranawetvogl, T., Kranawetvogl, A., etal, *Arch. Toxicol*. **2023**, 97(7), 1873-1885.
8. Che Sulaiman, I.S., Chieng, B.W., etal., *Forensic Toxicol*. **2020**, 38(2), 297-313.
9. S., Avraham, M., Dekel Jaoui, H., Dagan, S., Weissberg, A., etal., *Arch. Toxicol*. **2020**, 94(9), 3033-3044.

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

克百威在生物体内的转化及暴露溯源分析研究进展

吕巧、张芮乾、张倩、刘昌财、刘石磊*
防化研究院

克百威（2,3-二氢-2,2-二甲基-7-苯并呋喃基甲氨基甲酸酯）是目前使用最广泛的氨基甲酸酯类杀虫剂之一。由于其对大鼠急性经口的半致死剂量（LD50）较低，约为 8 mg/kg，克百威已被世界卫生组织列为高度危害类农药。鉴于克百威的高毒性，它对环境和人类健康都存在潜在的威胁，因此有必要开发克百威在生物体内的暴露溯源检测方法。本文基于克百威在生物体内的代谢和转化，综述了克百威暴露后在生物体内的转化及其质谱分析方法，展望了其未来发展趋势。克百威在生物体内会经历氧化、水解和共轭等代谢反应，也会与蛋白质等大分子物质结合形成共价加合物。在昆虫和哺乳动物体内发现的氧化产物包括 3-羟基克百威、3-酮基克百威、N-羟甲基克百威等，水解产物包括 7-苯酚克百威、3-羟基-7-苯酚克百威、3-酮基-7-苯酚克百威等，所有这些苯酚产物和 3-羟基克百威都能与葡萄糖醛酸或磺酸共轭，生成葡萄糖醛酸和磺酸共轭物；已报道发现的加合物为克百威与暴露血浆中的丁酰胆碱酯酶的加合物。在植物体内的代谢过程与动物类似，可以产生相同的水解和氧化代谢产物，不同的是这些代谢物可能会与葡萄糖苷结合形成水溶性更强的葡萄糖共轭物。目前生物体内的克百威及其代谢物的定性和定量检测主要依赖于气相色谱-质谱和液相色谱-质谱联用等分析技术。对于克百威及其小分子游离代谢物，质谱检测技术可以实现复杂生物基质的灵敏检测；而对于共轭物，通用的方法是经酸水解或酶解后，间接检测其有机可溶性苷元，或者检测其乙酰化的衍生物。对于蛋白加合物，采用蛋白酶酶解转化为肽段或氨基酸后进行质谱检测。

关键字 克百威，生物标志物，质谱分析，溯源

参考文献

1.Ren Z, Chen B, Liang D, et al. *Journal of Chromatography B*, **2023**, 1225: 123775.
2. Siano G G, Pérez I S, García M D G, et al. *Talanta*, **2011**, 85(1): 264-275.
3. Abass K, Reponen P, Anyanwu B, et al. *Environ. Toxicol. Pharmacol.*, **2023**, 102: 104243.
4. Knaak J B, Munger D M, McCarthy J F, et al. *J. Agric. Food. Chem.*, **1970**, 18(5): 832-837.
5. WEN Yan, HAN Yu-zhe. *Chinese Journal of Forensic Medicine*, **2022**, 38(5): 601-605.
6. Tomašević A, Mijin D, Marinković A, et al. *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **2017**, 24(15): 13808-13822.
7. Yao B, Li Y, Zhang R, et al. *Journal of Future Foods*, **2024**, 4(1): 97-104.
8. Jinang C, Roney P R, Abat M. Malaysian Applied Biology, **2023**, 52(5): 137-145.
9. Ramasubramanian T, Paramasivam M. *Environ. Monit. Assess.*, **2018**, 190(9): 538.
10. Elsheikh M A A. *Eur. Chem. Bull.*, **2020**, 9(12), 355-359

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

基于蛋白组学的芥子气毒性机制研究进展

陈博、刘石磊*
军事科学院

芥子气是一种重要的糜烂性毒剂。人体暴露于芥子气后，会出现明显的皮肤症状、眼部症状以及呼吸系统症状，并且由于其可以直接损伤 DNA，还具有潜在的生殖系统毒性与致癌性。但目前对于这些症状的产生机制尚不明确。蛋白组学技术在疾病早期诊断、预后和监测疾病发展过程具有重要作用，研究人员针对芥子气暴露患者的受伤组织或血清样品进行蛋白组学分析，或通过构建染毒细胞模型模拟暴露生物体，以尝试阐明芥子气毒性作用机制。本论文综述了芥子气暴露的蛋白组学研究进展，总结得到芥子气可以通过多种作用机制造成组织损伤和异常，包括线粒体异常导致的过量活性氧生成与氧化应激、Ca2+结合蛋白异常导致的 Ca2+失衡、相关蛋白变化诱导细胞凋亡、损伤细胞骨架导致细胞破裂等。指出目前研究中尚缺乏芥子气暴露早期蛋白组学研究，提出以动物模型代替早期暴露患者的研究方法，为芥子气暴露后的早期干预和治疗提供参考。

关键字 芥子气，蛋白组学，毒性机制

分会场：31.毒物分析及临床毒检技术与设备
交流类型：墙报

FMO3 在砷毒性代谢中的作用机制研究

陈栩桐、高明*
中国科学院生态环境研究中心

砷是一种常见的环境毒素，长期暴露会导致皮肤病变、癌症、心血管疾病等多种健康问题。黄素单加氧酶 3（FMO3）是一种重要的代谢酶，主要在肝脏中表达，负责多种含硫和含氮化合物的氧化代谢，尤其在三甲胺代谢和药物解毒中发挥关键作用。在本研究中，我们利用 CRISPR 筛选发现 FMO3 基因可能与砷代谢相关。为进一步验证这一假设，我们对普通饲养小鼠和砷暴露小鼠的血清进行了靶向氨基酸差异代谢物分析。结果表明，砷影响 TMAO 代谢的变化。为进一步探讨 FMO3 在砷代谢中的具体功能，我们将 sh-FMO3 转染细胞后进行砷毒性暴露，通过 RT-qPCR 和 Western blot 检测 mRNA 和蛋白质表达水平，通过 CCK-8 测定和流式细胞仪分别检测细胞增殖和细胞凋亡情况。通过以上研究，我们进一步揭示了 FMO3 在砷毒性中的机制，为环境毒物代谢的研究提供了新思路。

关键字 FMO3,砷毒性,代谢调控

参考文献

1. Chen L, Li C, Zhong X, et al. The gut microbiome promotes arsenic metabolism and alleviates the metabolic disorder for their mammal host under arsenic exposure. Environ Int. **2023**;171:107660.
2. Gao C, Catucci G, Gilardi G, Sadeghi SJ. Binding of methimazole and NADP(H) to human FMO3: In vitro and in silico studies. Int J Biol Macromol. **2018**;118(Pt A):460-468

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

CRISPR 分子 POCT 技术开发的几个探索

周小明*
华南师范大学

CRISPR 技术的迅猛发展为开发新型分子 POCT 技术提供了机遇。我分享的内容包括：CRISPR 分子 POCT 技术到底具有哪些优势和潜力？其在 POCT 技术领域的发展现状如何？将来是否具有应用价值？以及我们课题组在 CRISPR 分子 POCT 诊断技术开发上所进行的实践探索。针对这一主题我们的研究内容包括：1、探索新的基于 CRISPR-Cas12as 顺式切割机制的检测原理，并开发完成具有多重检测能力、单碱基识别特异性的核酸试纸条，实现了呼吸道病原、高危 HPV 的多联检；2、发明了高效率、高特异性的一管式 CRISPR 核酸检测方法和便携化仪器，解决 CRISPR 切割和核酸扩增的不兼容性问题，实现了 15 分钟内的核酸快速检测。

关键字 CRISPR；核酸检测；POCT；病原检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

神经元外囊泡数字化芯片解码退行性疾病

蒋成*
香港中文大学（深圳）

神经退行性疾病的诊断难点在于对疾病（比如帕金森病，阿兹海默症）前驱阶段提供可靠的早期诊断。目前尚缺乏能提前预警、早期检测以及精确反映分子病理的血液生物标志物，且无有效手段对超低丰度血液生物标志物进行有效识别与量化。血清神经源性细胞外囊泡（Neuron EVs, NEV）作为生物标志物有巨大的潜在临床应用。我们探索了血清 NEV 作为生物标志物在预测病理和早期诊断疾病中的潜力。研究开发了新的检测工具，包括（1）新一代抗污染免疫珠，以提高特定 EV 的免疫捕获能力；（2）数字滴液微流控芯片，以评估单粒子水平上的 EV 膜抗原；（3）图象识别和解析算法来快速分析阳性信号；（4）构建诊断模型。

关键字 帕金森病，血液生物标志物，神经源性细胞外囊泡，数字滴液微流控芯片

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

使用 AIEgens 驱动的生物传感器智能检测疾病标志物

卢永凤[1]、刘彩虹[2]、许川[1]、蒋成*[2]
1. 电子科技大学医学院
2. 香港中文大学深圳

研究目的：围绕帕金森病（Parkinson's disease, PD）尚无有效血液标志物及诊断技术这一临床问题，我们基于聚集诱导发光材料（AIE）荧光颜色的统计，解析血液中脑细胞外囊泡膜上的及游离态的突触核蛋白聚集体，为 PD 液体活检提供技术方法学支撑。

方法：在本研究中，传统三明治结构的中心被外泌体膜和游离形式的α-突触核蛋白聚集体填充，黄色和橙色聚集诱导发射（AIE）分别作为外泌体膜和游离形式的信号输出介质。这种方法结合人工智能图像识别技术，实现了基于双荧光颜色的 PD 生物标志物的快速检测。外泌体膜上和游离态聚集体可以通过建立荧光颜色和生物标志物之间的一一对应关系来区分和监测。

结果：构建了基于双色 AIE 颗粒的双维度方式监测双形态突触核蛋白分布的技术平台并在临床血样测试中取得较好的诊断效果（AUC 0.85， Specifity 0.96, Sensitivity 0.96）。

结论：α-突触核蛋白的错误折叠导致聚集体的形成，并表现出神经毒性，被认为是帕金森病的致病因素。然而，尽管游离状态下的聚集体丰度很高，但它们在外泌体膜上并不普遍。同时检测两种形式的聚集体将增强帕金森病的诊断能力。开发的超亮 AIE 技术不仅可以特异性地检测游离蛋白质状态的聚集体，还可以检测外泌体膜上的聚集体，灵敏度达到 1fg/L。此外，聚集体的含量可以通过两个维度来量化：液体中的总荧光强度和显微镜下单个荧光颗粒的数量（通过机器学习计数）。该方法提供了一种从两个角度评估帕金森病患者聚集体水平的简单方法。因此，我们的技术结合了两种模态聚集形式（完全游离态聚集体和低丰度外泌体膜上聚集体）的超灵敏度和选择性分辨率，有可能显著提高帕金森病的诊断能力。

关键字 帕金森，聚集诱导发光，外泌体，机器学习，单颗粒检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

TRACER：低丰度膜蛋白表达下的恶性肿瘤精准原位成像策略

陈恒屹[1]、陈晓辉[2]、陈艺[1]、张宇芳[1]、吕建新[3]、李晨钟[2]、罗阳*[1]
1. 重庆大学医学院，重庆市人民医院，医学检验科，中国重庆，401147
2. 香港中文大学（深圳）医学院，生物医学科学与工程系，中国广东省，深圳市，518172
3. 杭州医学院，附属浙江省人民医院，医学检验科（检验医学中心），中国浙江省，杭州市，310014

在细胞膜蛋白表达丰度极低的情况下，针对单个恶性肿瘤细胞的精确成像仍面临重大挑战。为应对该固有难题，本研究研发了一种肿瘤响应自催化扩展反应器（TRACER，，Tumor-Responsive Auto-Catalytic Extension Reactor，寓意“肿瘤追踪者”），旨在实现高效、准确的肿瘤细胞原位成像。TRACER 采用了先进的纳米屏蔽机制，通过激活细胞内端粒酶活性和谷胱甘肽浓度，有效克服了传统方法对膜蛋白标记的依赖性。该系统具有灵敏度高的显著优势，在混合样本中能够以肿瘤细胞比例低至 1‰的极低丰度下实现恶性肿瘤细胞的可靠鉴定。临床样本验证结果表明，TRACER 还具备对显著缺乏膜表面蛋白标志物的三阴性乳腺癌（TNBC）细胞进行精准分型的独特潜在价值。此外，本研究结合理论计算模型，采用 10 种不同类型恶性肿瘤细胞和 4 种不同类型肿瘤微球对 TRACER 精准识别及时空可视化的可靠性进行了多维度验证，证明了其优异传感性能。综上所述，本研究构建的 TRACER 技术为恶性肿瘤早期诊断提供了全新思路，并有望显著提升肿瘤分期和预后评估准确性，具备广泛的临床应用前景。

关键字 恶性肿瘤；原位成像；液体活检；精准识别；端粒酶

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

基于负压辅助微针贴片的组织液快速提取及可穿戴多模式传感平台

谢媛婷、苏磊、张学记*
深圳大学

对体内生物标志物的即时检测有助于慢病患者进行及时掌握自身生理指标变化、健康监测、掌握疾病进程，对可能出现的突发疾病实现尽早发现与预警。血液仍然是当前的即时检测（POCT）的主流样本，但抽血检测存在诸多不便和感染风险，相对于血液而言，皮下组织液（细胞间隙液，由血液经毛细血管过滤形成）的成分与血液具有高度相关性，且采集过程无痛苦和感染风险，被视为一种理想的健康监测和疾病诊断样本。因此，开发基于组织液的多种生物标志物的即时检测方法，有效、准确地反映体内生理指标的动态变化，能够快速干预可能出现的突发疾病，实现即时的健康监测。微针阵列是由数十到数百微米级大小的针组成的阵列，能够穿透表皮层而不破坏深层皮肤组织，以微创、无出血及无感染风险的方式收集组织液，用于现场检测或后续离体分析[1]。然而，由于组织液类水凝胶的粘度特征，导致提取量低、耗时长、成分复杂，给组织液的即时检测带来了挑战。给基于微针的组织液生物检测带来了巨大挑战。

针对该问题，我们开发了一种利用负压驱动微针的组织液快速提取方法，实现了在新西兰兔皮肤组织上 5 分钟内 18.42 μL 的活体组织液提取，同时基于该微针组织液提取装置，开发了集成侧流层析、化学发光、比色分析等多种传感方法的可穿戴组织液多种生物标志物检测传感平台，实现了对糖皮质激素、乳酸、葡萄糖、pH 等组织液生物标志物的快速检测[2]。更进一步地，针对比色检测往往受到光源类型和强度的影响导致颜色读取差异、增加分析复杂程度的问题，我们构建出微量组织液钠离子、尿酸检测纸芯片、开发抗光干扰的深度学习识别模型并设计了组织液可穿戴智能比色传感器件，能够在快速提取组织液的基础上，实现快速、可视化智能读取比色检测结果[3]。本项工作提出的基于负压辅助的可穿戴微针传感器有望促进组织液微针快速提取及 POCT 技术的发展，拓宽多种分析方法在组织液生物标志物检测中的应用，为实现居家简易、微创无痛的检测提供创新技术支撑，提升慢病患者的生活质量。

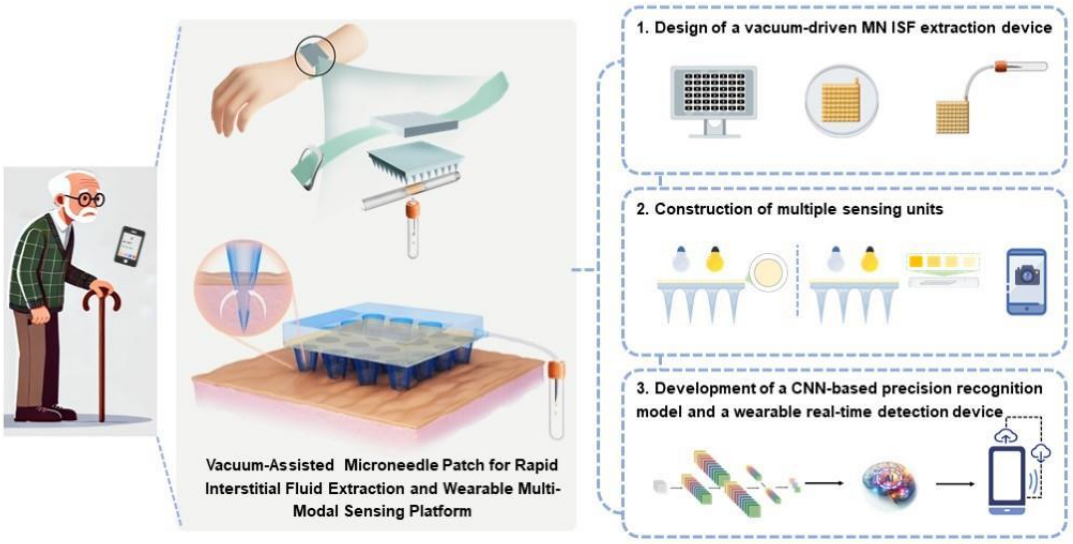


图 1. 基于负压辅助微针贴片的组织液快速提取及可穿戴多模式传感平台设计示意图

参考文献：

1. Y. Kim, M. R. Prausnitz, Nat Biomed Eng. 2021, 5, 3.

2. Y. Xie, J. He, W. He, T. Iftikhar, C. Zhang, L. Su, X. Zhang, Adv Sci. 2024, 11, 202308716.

3. Y. Xie, K. Li, J. Liu, Y. Zhou, C. Zhang, Y. Yu, J. Wang, L. Su, X. Zhang, Aggregate. 2024, e671.

关键字 微针，可穿戴传感器，即时检测，组织液

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

基于蓝光光盘技术的免疫检测便携式定量成像系统

李晓春*、张玲玲
太原理工大学

生物微芯片技术凭借其高效、高通量地同时检测多种疾病生物标志物的独特优势，为疾病的早期诊断开辟了新途径。然而，传统生物芯片/微阵列分析依赖于复杂昂贵的显微镜或扫描设备，这极大地限制了其普及与应用。为克服这一瓶颈，通过创造性地将标准光驱改造为高效经济的激光扫描成像系统，不仅可以拓宽光盘分析技术的应用范围，还为生物医学检测领域带来全新的解决方案，具有广阔的应用前景和重要的临床价值。

通过改造标准光驱构建了一种基于蓝光光盘技术的便携式激光扫描成像（BD-LSI）系统，以执行整个光盘或感兴趣区域的扫描及成像，用于高通量光盘基生物芯片分析。此外，特别设计了一套用户友好的自动化操作软件，该软件能够自动捕获分析图像和定量分析，极大地简化了操作流程，提高了检测效率。利用 BD-LSI 系统实现了复杂生物样本（如人血清）中抗缪勒管激素（AMH）的定量检测，检测限低至 18 pg/mL，动态范围为 0.05-25 ng/mL，对于优化个体化治疗方案以及降低卵巢过度刺激综合征风险具有重要意义，检测结果与临床实验室方法（CLIA）具有高度的一致性。基于光盘/光驱的即时检测技术（如家庭和医生办公室）在生命科学研究和临床诊断领域具有巨大的应用前景与市场规模，该技术会进一步推动医疗技术的快速发展。

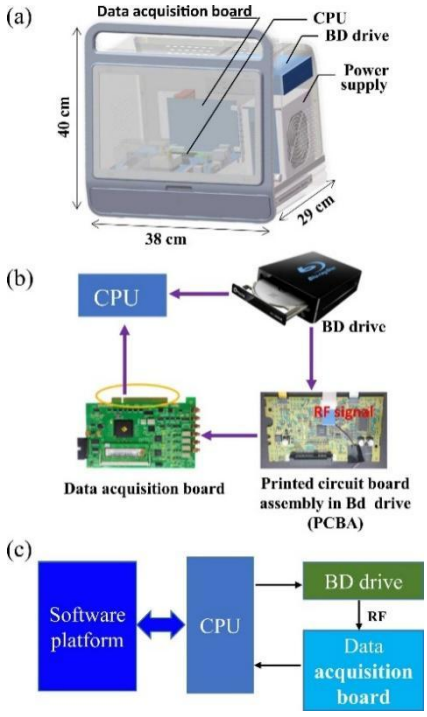


图 1. 基于标准蓝光光盘技术的便携式激光扫描成像系统示意图。（a）集成原型及其尺寸和构造。（b）BD-LSI 系统主要硬件组件的设计原理及构成。（c）关键硬件组件之间的运行原理。

关键字 蓝光光盘技术；生物医学成像；高通量分析；AMH 定量；微阵列扫描

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

基于金属有机框架功能化纸芯片的外泌体提取快检新方法

柳思扬*
中山大学

外泌体是一类新型疾病诊断标志物。外泌体富含有丰富的蛋白质、核酸、脂质等生物分子，它们的含量水平可以精确地反映疾病的发生发展。但是由于外泌体尺寸较小及基底复杂，常规超速离心、超滤、免疫捕获方法较难以高效高纯度的从体液样本中提取外泌体。更重要的是，目前针对外泌体及其所含生物分子的检测往往需要再提取之后再使用大型仪器进行下游检测，这导致基于外泌体的即时检测（POCT）面临极大地技术瓶颈。

针对以上问题，我们研发了多功能 MOF 原位修饰纸芯片，开发了基于 3D 纸芯片的外泌体自动分离和检测装置，结合了物理分离以及免疫捕获方法优势，实现对复杂血清样品中肝癌细胞和正常肝细胞来源外泌体的高效低成本分离检测。更重要的是，系列装置可以在捕获外泌体后，直接在纸芯片上进行原位的比色快速检测，再结合智能手机辅助定量可以快速的对外泌体所含生物分子进行多通道快检。同时，所研发系列外泌体提取检测装置将传统提取检测装置的价格由上百万元降低至 5000 元，甚至最新研发的针筒式提取检测装置的成本仅为 10 元以下。以上系列工作有望为基于外泌体的癌症早期诊断提供便携式平台。

关键字 外泌体，金属有机框架，纸芯片，即时检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

NIR-AIE 侧流层析技术增强关节假体 S.aureus 早期诊断

陈锐*
重庆医科大学

精确而灵敏的近红外（NIR）发光侧流免疫分析（LFIA）在即时检测（POCT）领域引起了相当大的关注。然而，由于 NIR 荧光探针的低荧光量子效率（<10％），检测的准确性和灵敏度通常受到影响。本文报道了由聚苯乙烯（PS）纳米粒子和近红外聚集诱导发光剂（AIEgen）组成的超亮 NIR AIEgen 纳米粒子（PS@AIE830NPs），其最大发射波长为 830 nm（AIE830），并描述了它在 LFIA 中促进复杂样品准确灵敏检测的潜力。PS@AIE830NPs 的相对量子产率（QY）为 14.76％，优于聚合物嵌入法和基于吲哚青绿（ICG）的 NIR 纳米粒子。与实验室构建的 NIR-LFIA 便携式定量仪器（检测光范围> 800 nm）结合使用的 PS@AIE830NPs 免疫标记-LFIA 完全消除了背景干扰，并且无需任何预处理步骤即可进行高度准确和灵敏的检测。在金黄色葡萄球菌生物标志物关节液中α溶血素（Hla）和人类溶血样品中 C-反应蛋白（CRP）的检测限分别为 0.02 μg mL−1 和 0.156 mg L−1，与相应的金标准检测方法相当，并覆盖了感兴趣的检测范围。预计超亮 NIR AIEgen 纳米粒子将作为 NIR-LFIA 诊断的普遍适用信号探针，有望扩大用于复杂样品定量检测的应用范围。

关键字 病原微生物，快速诊断，聚集诱导增强，侧流层析技术，近红外发光

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

膜分离技术耦合的纸基芯片

沈先涛*、马亚星、黄垂秀
华中科技大学

因为纸质材料的主要成分纤维素具有来源丰富、廉价、可再生、易处理等特点，纸芯片分析已被广泛应用于环境污染物分析领域。其中，纸芯片与比色法联用技术是该领域的研究热点之一。但是这种联用技术用于生物样本分析时遇到了新的难题：当样品中存在其他有颜色干扰物时，传统的比色法检测会受到严重的干扰，导致分析检测难以开展。

膜萃取技术作为一种样品前处理技术，具有萃取时间短、富集能力高、净化能力强等优势，已广泛应用于生物样本的前处理。该技术主要包括液相微萃取和加电辅助的液相微萃取。其中，液相微萃取是利用目标物组分在两相中的分配比不同进行分离，而加电辅助的液相微萃取则是以电场力为驱动力，使带电离子在电场力的作用下快速的定向移动，从而达到目标物的分离和富集。膜萃取技术可以选择性的分离和富集目标分析物，能很好的解决传统纸芯片比色检测时存在的样品基质干扰问题。因此，将纸芯片和膜萃取技术联用，开发基于纸芯片的快速手机比色检测具有重要的研究意义。基于智能手机比色检测，本论文开发了一系列应用于新冠肺炎标志物检测、尿铅中毒标志物检测以及高脂肪食品中亚硝酸盐检测的芯片平台。

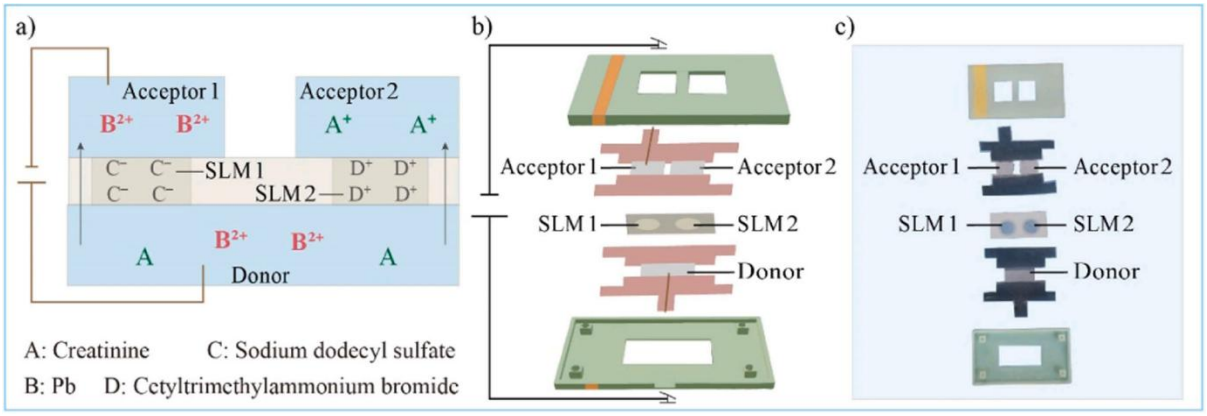


图 1 基于纸芯片的双通道电膜萃取技术模式图

关键字 纸芯片；膜分离；液相微萃取；电膜萃取

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

肿瘤标志物多重检测

杨春光*、张沥丹、叶文旗、徐章润
东北大学

癌症是人类健康的重大威胁，早发现早治疗，不但可以降低死亡率，也可以减轻患者的身体痛苦和家庭的经济压力。血浆肿瘤标志物的检测具有重要的意义，因为它可以为临床医生提供基于肿瘤标志物分析的信息。然而，在目前的临床应用中，只有少数肿瘤标志物被有效地用于癌症的早期诊断，主要是由于其特异性和敏感性的限制[1]。随着研究者们不停地寻找不同的生物标志物，以便无创地检测或监测疾病的同时，几种肿瘤标志物的联合检测也是一种解决办法，可以增加诊断特定肿瘤的特异性[2,3]。然而，随着目标数量的增加，样本消耗、检测时间和成本将呈指数增长。本文通过构建微流控芯片，进行微米尺度下的信号放大以及核酸等温扩增等操作，有效缩短检测时间，降低样品消耗，提高检测速度，实现多种标志物的同时检测。具体工作：首先构建了微流控液滴多色液滴同时检测系统，结合多色量子点良好的荧光性能，建立 FRET 传感体系，实现了四种肿瘤标志物 miRNAs 的同时检测；其次以离心微流控芯片为载体，结合催化发夹自组装扩增方法以及激光诱导荧光检测方式，实现血清中三种 miRNA 的直接同时检测，线性范围 200 fmol L^{-1} 至 2.00 nmol L^{-1}，检出限在 60-140 fmol L^{-1} 范围之内，且无需提取血清样品中总 RNA，直接进行血清中 miRNAs 的多重检测。通过三种 miRNA 含量数据，实现了正常人血清与非小细胞癌患者血清的区分，有望成为一种简单、可靠的血清 miRNAs 多重检测的方法。

关键字 肿瘤标志物， 微流控， 检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：报告

基于纸基微流控比色法的高尿酸血症尿液指标智能检测

李海琴、王翠翠、李晓春*
太原理工大学

高尿酸血症（Hyperuricemia, HUA）是嘌呤代谢紊乱引起的代谢异常综合征，其发生发展是一个慢性、连续的病理过程，与痛风、慢性肾脏疾病及心血管等疾病等密切相关，已逐渐成为一种全球公共卫生负担。因此，亟需开发一种 精准、快速、便携地检测与监测 HUA 尿液标志物的新技术，对提升 HUA 诊疗效率、精细化管理、延缓病程发展具有重要意义。

基于此，该研究提出了一种基于纸基微流控的 HUA 尿液多指标（尿酸（UA）、肌酐（CR）和 pH 值）智能监测系统。该系统从纸基微流控芯片制备、尿液分析仪装置研发、应用程序开发和临床验证四方面展开研究，为 HUA 的居家检测及长期监测提供了一种新的技术方案。为了实现三项指标同时联合定量检测，设计了便携式高尿酸血症尿液指标分析仪，为高灵敏、精准定量提供了稳定且均匀的光照环境，满足了现场快速便携检测的需求。开发了 HUA Detection App，结合制作的纸基微流控设备和分析装置实现了每个指标的精确量化。

通过对反应原理、反应条件、色度值选取等多方面优化，UA、CR 和 pH 的检测范围分别为 0-1.5 mM、0-50 mM 和 4.0-8.5；UA 和 CR 的检测限分别为 0.0178 mM 和 0.5983 mM，pH 的灵敏度为 0.1，满足临床检测的需求。为了验证该方法的临床可行性，进一步对加标样本进行检测并将检测结果与分光光度法所得结果对比，两种方法检测结果一致性均达到 99%以上。此外，该系统与医院的 HITACHI 7600 全自动分析仪、URIT-500B 尿液分析仪和 AU5800B 全自动生化分析仪对 100 例真实尿液样本的检测结果具有较高的一致性。

综上所述，该工作为 HUA 尿液标志物的日常检测与监测提供了一种准确、快速、低成本、可靠的技术方案，在慢病标志物监测领域有着良好的应用前景。

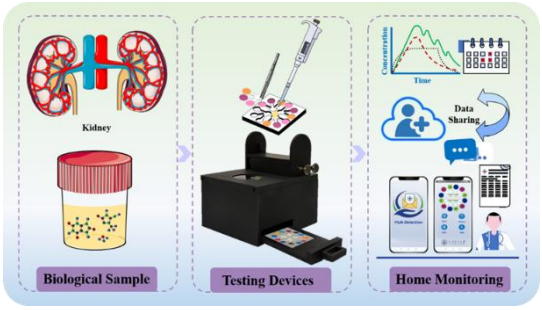


Fig. 1 Schematic diagram of urine biomarkers of hyperuricemia

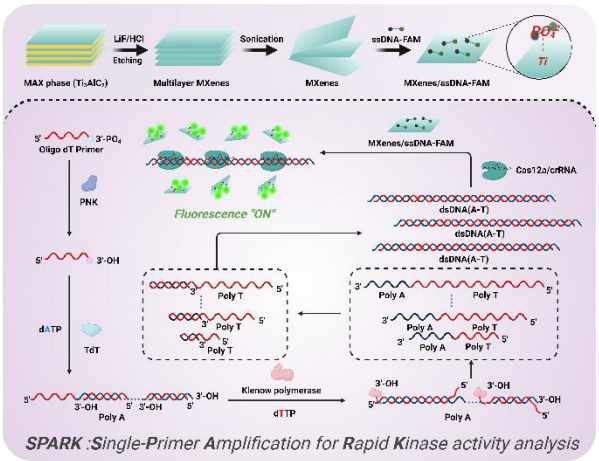
关键字 移动医疗；高尿酸血症；纸基微流控分析；比色分析；生物医学传感

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

SPARK：自折叠扩增 CRISPR/Cas12a 平台用于多核苷酸激酶活性快速精准鉴定

张宇芳[1]、陈恒屹[1]、莫家希[2]、陈艺[1]、罗阳*[1]、杨纪春[1]
1. 重庆大学医学院，重庆市人民医院，医学检验科，中国重庆，401147
2. 西南医科大学，临床医学院，中国四川省，泸州市，646000

多核苷酸激酶（PNK）在 DNA 损伤修复等过程中发挥关键作用，被认为是恶性肿瘤早期诊断的理想标志物。然而，目前临床上难以实现对 PNK 的快速、灵敏且可靠检测。为此，本研究开发了一种名为“SPARK”（Single-Primer Amplification for Rapid Kinase activity analysis，，寓意“靶标触发器”）的自折叠扩增 CRISPR/Cas12a 平台，实现了 PNK 活性快速准确分析。在 SPARK 中，靶标 PNK 可将 Oligo dT 的 3'-磷酸基团转化为 3'-羟基，激活末端脱氧核苷酸转移酶介导的末端延伸，延伸后的 Poly dA 长链与若干个体系中剩余的 Oligo dT 产生碱基互补配对，进而触发 Klenow 聚合酶介导的扩增反应，生成 A-T 长双链产物，最终激活 Cas12a 的反式切割活性，切割吸附于 MXenes 上预先被屏蔽荧光信号的短单链 DNA（Reporter），导致其荧光信号大量恢复，由此实现 PNK 活性快速精准鉴定。结果表明，SPARK 可在 30 分钟内实现 PNK 活性准确鉴定，动态范围为 0–1 U/mL，检测限低至 4×10^{-5} U/mL。此外，SPARK 还可用于 PNK 抑制剂筛选及单细胞水平的 PNK 活性分析。总之，本研究开发的 SPARK 凭借独特思路和优异检测性能，不仅拓展了 CRISPR/Cas 系统在酶活性鉴定中的应用途径，并展现其广阔的临床应用前景，有望推动现场即时检测的技术革新及恶性肿瘤早期精准诊断。



关键字 生物传感，CRISPR/Cas12a，肿瘤早期诊断，多核苷酸激酶，POCT

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

基于肠-脑轴的无创诊疗策略研究

缪养宝*
四川省医学科学院·四川省人民医院

随着 2011 年微生物-肠-脑轴概念的提出，肠-脑轴相关研究的展开为探究肠道与脑健康的病因以及肠-脑轴药物递送系统提供了新的方向。然而，如何克服胃肠道的生理屏障，并在肠道中检测中枢神经系统疾病或递送药物，成为了关键的科学问题。为了解决这一问题，本课题组采用了多种策略，包括仿生矿化、孔径装载和表面修饰等，以克服胃肠道的生理屏障，实现口服无创诊疗中枢神经系统疾病的目标。

关键字 肠-脑轴；口服药物递送；纳米载体；无创诊疗

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

基于微流控芯片与 CRISPR 技术的多重病原菌检测

李颖*
湖北中医药大学

基于 CRISPR-Cas 技术的新方法已被广泛应用于微生物感染的诊断[1]。本研究团队所开发的新型 CRISPR-Cas12a 与 Cas13a 报告分子（如 DNA G-四链体、G-三链体和 RNA G-四链体）展现出了比传统单链 DNA（ss-DNA）和单链 RNA（ss-RNA）报告分子更高的检测灵敏度[2]。基于这一新型 CRISPR 报告分子，我们结合微流控芯片的独特“空间编码”特性，开发了多种“空间编码”核酸检测平台[3-4]。这些平台利用 2、3、6、8 及 30 重微流控芯片，通过结合恒温扩增 RPA 技术，基于荧光信号或试纸条等方式，实现对 HPV、呼吸道病毒、性传播疾病相关病原体及基因兴奋剂的灵敏、快速、多重检测。这些方法在临床样本的检测中表现出良好的特异性和敏感性。本研究通过将微流控技术与 CRISPR 体系相结合，借助自主开发的高灵敏报告分子，实现了多重病原体的高效检测，在核酸快速检测领域展现了巨大的应用潜力。

参考文献：

1. J. Chen, E. Ma, J. A. Doudna, et al., Science, 2018, 360, 436.
2. T. Li, D. Chen, Y. Li, * et al., Chem. Commun., 2024, 60, 3166.
3. B. Zheng, T. Li, Y. Li,*, et al., Biosens. Bioelectron., 2024, 263,116631.
4. Z. Xu, D. Chen, Y. Li,* et al., Nat. Commun., 2022, 13, 6480.

关键字 微流控芯片，CRISPR 诊断，病原微生物，空间编码，多重检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

一种带有环装 DNA 保护的 DNAzyme Walker 用于细胞外小囊泡的定量分析

李益灿[2]、陈晓辉[1]、王志增[1]、王丽[2]、罗阳*[1]
1. 重庆大学
2. 河南大学第一附属医院

背景：外泌体携带了丰富的生物信息[1]，在液体活检中发挥着越来越重要的作用。但由于外泌体丰度低、分离过程复杂，外泌体的检测在临床诊断中的应用受到限制[2]。目的：本研究旨在引入一种带有环装 DNA 分子，使 DNAzyme Walker 能自我保护，用于外泌体的富集和定量。方法：利用 CD63 适配体与外泌体表面蛋白 CD63 的特异性结合，释放出阻断链，激活 DNAzyme 的催化活性，导致底物链的裂解和荧光信号的产生。结果：自我保护型 DNAzyme 保护了 DNAzyme 的催化核不受核酸酶的攻击，提高了反应体系的稳定性。同时，DNAzyme 的环状切割使外泌体的检测灵敏度高，检测限为 174 个/μL。结论：该策略利用外泌体的膜蛋白 CD63 对外泌体进行分离，避免了血清蛋白的干扰，提高外泌体定量的准确性，为外泌体的量化提供了新的思路，为外泌体的下游利用奠定了基础。

关键字 外泌体；DNAzyme；血清；生物传感器

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

催化发夹组装(TRACE)辅助的四面体 DNA 纳米结构-RNA 干扰用于肿瘤同步治疗

吴倩倩、陈晓辉、罗阳*
重庆大学

早期诊断和治疗干预在肿瘤的诊断、治疗和预后中发挥着至关重要的作用。然而，复杂的生物环境对于实现高效的同时诊断和治疗具有挑战性。这项研究提出了一种四面体 DNA 纳米结构-催化发夹组件辅助的 RNA 干扰（TRACE）纳米系统，用于特定的微 RNA 识别成像和 mRNA 的受控释放。这种方法在肿瘤细胞内显示出强烈的荧光信号，有效地区分肿瘤细胞与周围正常细胞。此外，TRACE 识别特定的生物标志物并控制 mRNA 的释放，有效抑制表皮生长因子受体（EGFR）的表达。因此，TRACE 纳米系统有效地实现了生物标志物识别成像和可控基因沉默。这种同步诊断和治疗可以智能地集成到 DNA 纳米系统中，展示了其在诊断、治疗和预后方面的巨大潜力。

关键字 DNA 四面体、恒温放大、分子成像、治疗

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

NiNPs 晶面位点控制的电位分辨 ECL 双标志物免疫传感器检测 CEA/CA125

邓紫欣[1]、向值质[1]、康子琪[1]、王孜旭[1]、佟学浩[1]、王贵学[2,3]、臧广超*[1,3]
1. 重庆医科大学缙云校区
2. 重庆大学
3. 金凤实验室

电化学发光(Electrochemluminescence, ECL)分析因其灵敏、低背景信号等优点，在临床检验中受到广泛应用。近年来，已有较多研究表明金属纳米颗粒催化剂可以精确调控 ORR 过程进而影响 ECL 发光促进电位。本项目采用氧化石墨烯为基底，合成了一系列具有不同主导晶面的镍纳米粒子催化剂（NiNPs@N-GO），并引入联吡啶钌 ECL 体系。这些共反应物通过不同晶面位点促进 Ru(bpy) $_3^{2+}$获得高选择性的阴极发光或阳极发光效果。基于 NiNPs@N-GO 良好的催化效果，我们成功构建了双标志物免疫传感器。最终实现了肿瘤标志物 CEA 和 CA125 的灵敏、准确检测，提高了早期肿瘤检验诊断的准确性，同时为电位分辨多信号 ECL 分析提供了新的方法。

Electrochemiluminescence (ECL) analysis has been widely applied in clinical testing due to its high sensitivity and low background signal.Recent studies have demonstrated that metal nanoparticle catalysts can precisely regulate the oxygen reduction reaction (ORR) process, thereby influencing the ECL emission potential.In this project, a series of nickel nanoparticle catalysts with different dominant crystal facets (NiNPs@N-GO) were synthesized using graphene oxide as a substrate, and the Ru(bpy)$_3^{2+}$ ECL system was introduced. These co-reactants facilitated highly selective cathodic or anodic ECL at different crystal facet sites of Ru(bpy)$_3^{2+}$. Based on the excellent catalytic performance of NiNPs@N-GO, we successfully developed a dual-marker immunosensor. This enabled the sensitive and accurate detection of tumor markers CEA and CA125, enhancing the accuracy of early tumor diagnosis, while providing a novel approach for potential-resolved multi-signal ECL analysis.

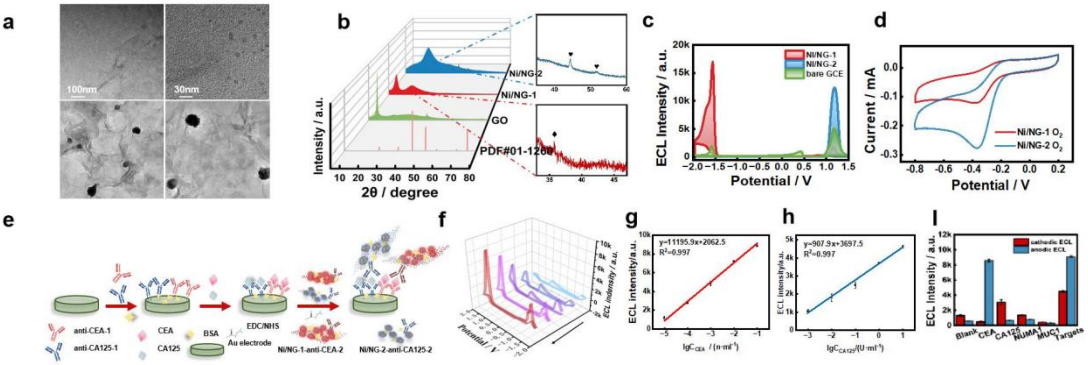


图 1. a. NiNPs@rGO 的 TEM 图像 b. 不同材料的 XRD 结果以及不同晶面与 XRD 峰的对应关系 c. 在 1 mM Ru(bpy)32+溶液（pH 6）中，Ni/NG-1 和 Ni/NG-2 的 ECL 测试 d. CV 测试结果 e.免疫传感器构建图 f-h.传感器线性测试 i.抗干扰性测试

关键字 电致化学发光，肿瘤标志物检测，活性氧自由基，晶面，多标志物检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

基于 Pt 单原子的用于过氧化氢即时检验的高灵敏和选择性传感平台

陈佳佳[1]、陈立杰[1]、戴鸿健[1]、鲜宇翔[1]、李晨钟[2]、臧广超*[1]
1. 重庆医科大学
2. 香港中文大学（深圳）

过氧化氢与癌症、神经退行性疾病等许多疾病的发生密切相关，将即时检验用于过氧化氢，有望实现对于多种疾病的早期诊断、监测和个性化治疗。但是，过氧化氢含量低、反应性高等问题对即时检验构成严峻挑战。单原子催化剂通过几乎 100%的原子利用率和独特的催化中心，实现了优异的催化性能和选择性。本文基于电化学技术和策略性设计的 Pt 单原子催化剂，构建了高灵敏度、高选择性和快速的过氧化氢传感平台。

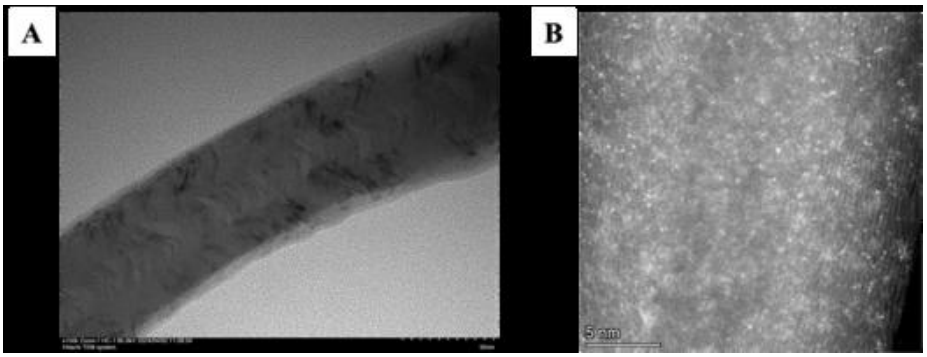


Figure 1. (A) TEM image of Pt-SACs. (B) AC HAADF STEM image of Pt-SACs.

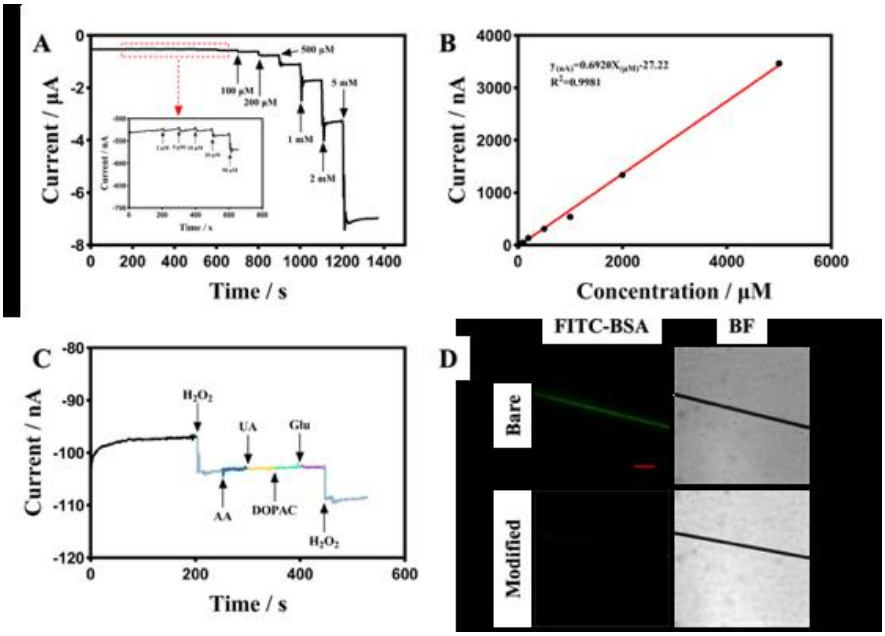


Figure 2. (A) Amperometric response of PEDOT/PtSACs/CFME in 0.1 M PBS (pH 7.40) at −0.3 V upon successive additions of H2O2 from 2 μM to 5 mM and (B) the corresponding calibration curves. (C)Amperometric responses of the PEDOT/PtSACs/CFME to 100 μM AA, 20 μM uric

acid (UA),20 μM 3,4-dihydroxyphenylacetic acid (DOPAC), 20μM glucose (Glu), and 100 μM H2O2 in 0.1 M PBS. (D) Fluorescence microscopic images of PEDOT/PtSACs/CFME and bare CFME treated with 5 mg·mL-1FITC-BSA. Scale bar, 50 μm.

关键字 过氧化氢、单原子催化剂、生物传感器、即时检验

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

基于脂质体膜融合和 DNA 探针的单个外泌体 miRNA 原位检测技术

马宁宇、陈晓辉、罗阳*
重庆大学医学院

摘要：外泌体及其内容物与多种疾病的发生发展密切相关，但其低丰度、小尺寸的特点使原位准确检测单个外泌体内物困难重重。多数现有的检测外泌体内容物技术依赖于破膜提取，导致在分析过程中会产生检测误差及标志物损失。基于此，本研究创建了一种脂质融合酶免系统（LIFE），用于在不损坏外泌体完整性的情况下快速、高保真地检测外泌体内容物。带有探针的阳离子脂质体可以捕获并融合单个外泌体，从而在原位实现探针递送和目标生物分子触发的双重级联信号放大，产生放大的荧光结果。本研究有望为开发一种通用的外泌体内容物检测平台奠定基础，以促进早期疾病诊断和个性化治疗。

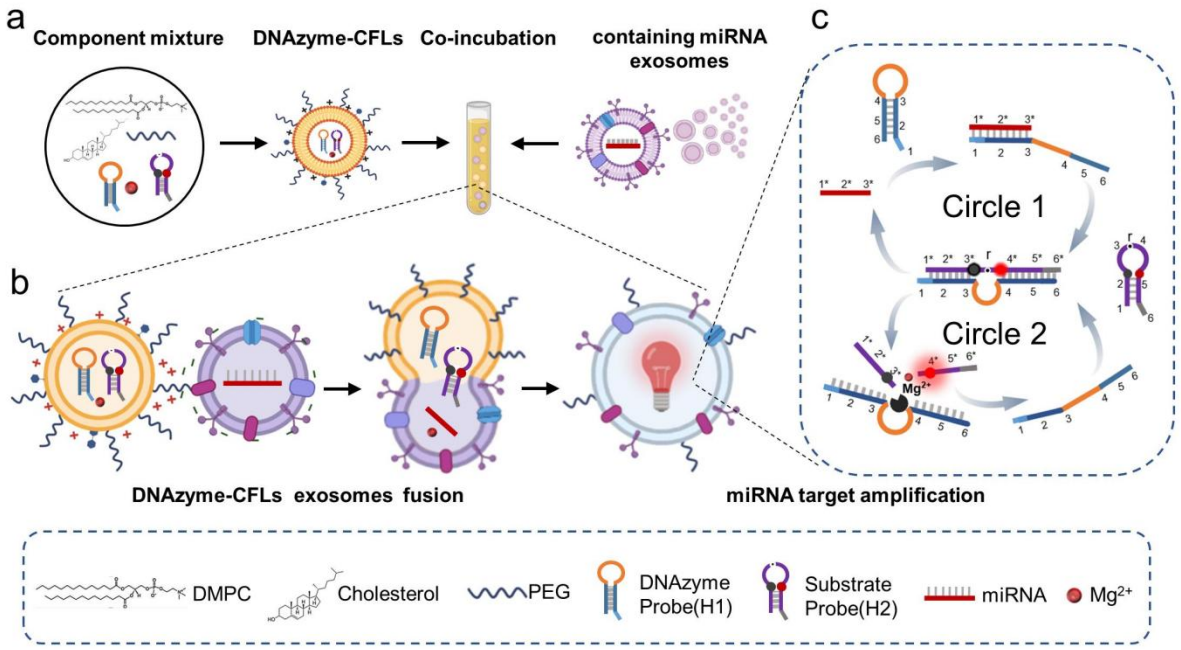


Fig.1 Schematic of the Liposome Fusogenic Empoweredcircuit (LIFE) platform for single-exosomal miRNA detection.(a) Preparation of the probe-loaded cationic fusogenic liposomes (DNAzyme-CFLs) and exosomes isolation. (b) The membrane fusion of exosomes and DNAzyme-CFLs triggered by PEG and charges attraction. (c) The signaling amplification with the hybridization of the probes with the target miRNA.

关键字 exosome, fusion, liposome, single-molecule detection

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

碳配位单原子催化剂调节 Ru(bpy)32+阴极/阳极电化学发光实现抗坏血酸比率分析

向值质[1]、邓紫欣[1]、朱姝[1]、张玉婵[1]、康子琪[1]、佟学浩[1]、王孜旭[1]、王贵学[2,3]、臧广超*[1,3]
1. 重庆医科大学
2. 重庆大学
3. 金凤实验室

电致化学发光（ECL）是一种基于电极反应诱导的活性中间体与发光体之间相互作用的现象。联吡啶钌（$Ru(bpy)_3^{2+}$）是 ECL 分析中最常用的体系。传统的 $Ru(bpy)_3^{2+}$ ECL 体系利用三丙胺（TPrA）作为共反应物，通过单信号进行定量分析。然而，它会显著受到各种干扰的影响。此外，由于 $Ru(bpy)_3^{2+}$较高的阳极激发电位，一些物质如抗坏血酸（AA）会发生直接电极氧化，使分析过程复杂。在本研究中，我们引入活性氧（ROS）作为 $Ru(bpy)_3^{2+}$的阴极 ECL 共反应物，氧气（O_2）作为阳极 ECL 的猝灭剂。我们合成了一系列单原子催化剂（SACs）作为共反应物促进剂（M@rGO，M = Fe, Co, Ni, Mn, Cu）。有趣的是，这些催化剂都是优良的阴极 ECL 促进剂。基于我们前期的研究，我们认为这些催化剂能够强有力催化氧还原反应（ORR），在阴极生成羟基自由基（·OH），增强阴极 ECL。在阳极，它们可以有效促进析氧反应（OER），生成 O_2，从而猝灭 ECL。最后我们设计了一种基于阳极/阴极 ECL 比率信号的抗坏血酸检测传感器。总的来说本研究提出了一系列高性能单原子阴极 ECL 促进剂，推动了内源性 $Ru(bpy)_3^{2+}$体系 ECL 发光促进机制研究，实现了抗坏血酸（AA）比率 ECL 检测，验证了所提出的阳极/阴极 ECL 调控机制的可靠性。

Electrochemiluminescence (ECL) is a phenomenon based the interaction between electrode reaction induced reactive intermediates and luminophores. Tris(2,2'-bipyridyl)ruthenium(II)($Ru(bpy)_3^{2+}$) is the most commonly used system in ECL analysis.Classical $Ru(bpy)_3^{2+}$ ECL system utilizes tripropylamine (TPrA) as co-reactant for quantitative analysis through single-signal method. Yet, it is significantly affected by various interference. Besides, due to the high anodic stimulation potential of $Ru(bpy)_3^{2+}$, Some substances like ascorbic acid (AA) can undergo direct electrode oxidation, complicating the analysis.In this work, reactive oxygen species (ROS) are introduced as cathodic ECL co-reactant for $Ru(bpy)_3^{2+}$, while oxygen (O_2) serves as anodic ECL quencher. We synthesized a series of single-atom catalysts(SACs) as co-reactant accelerators (M @rGO, M = Fe, Co, Ni, Mn, Cu).Interestingly, these catalysts serve as excellent cathodic ECL promoters. Based our previous research, we decided that these catalysts can strongly catalyze the oxygen reduction reaction (ORR) to generate hydroxyl radicals (·OH) at cathode, thereby enhancing cathodic ECL. At the anode, they can effectively promote the oxygen evolution reaction (OER) to produce O_2, which quenches ECL. We designed a sensor for AA analysis based on anodic/cathodic ECL ratiometric signal, achieving excellent detection performance.

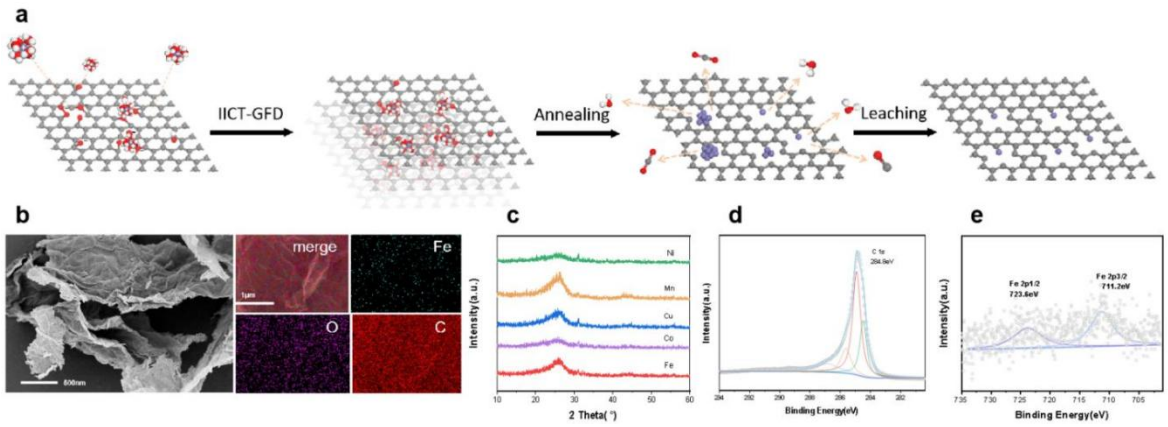


图 1. (a) 合成路线示意图 (b) Fe@rGO 的 SEM 和 EDS 图像 (c) 五种 SACs 的 XRD 表征 (d,e) Fe@rGO 的 XPS 结果

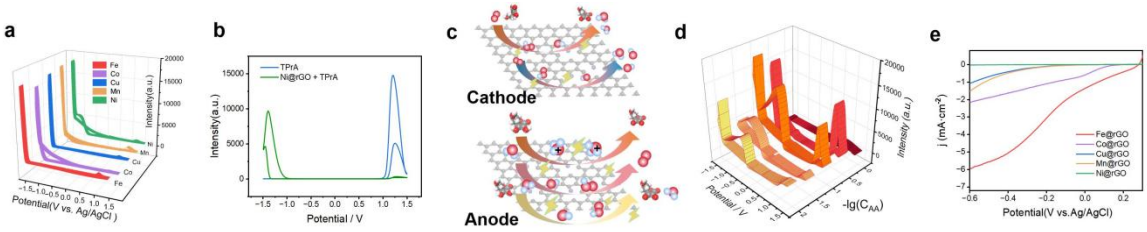


图 2. (a) 五种 SAC 的 ECL 曲线 (b) Ni 负载前后 Ru(bpy)32+-TPrA 体系的 ECL 强度 (c) AA 检测系统阴极和阳极反应的机制示意图 (d) AA 检测系统的 ECL 响应 (e) 五种 SAC 的 LSV 曲线

关键字 电致化学发光，抗坏血酸，联吡啶钌，单原子催化剂，活性氧自由基

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

用于定量测定活细胞中溶酶体碱化的“开-关”型 pH 探针的构建

柯何键、杨佳琪、张万萍、杨鹏丽、王以武、王宁荣、臧广超、刘倩、甘勇军*
重庆医科大学

溶酶体轻微 pH 升高可导致酶的非特异性作用和内容物的异常水解，从而增加神经退行性疾病和癌症等多种疾病的风险。因此，定量测定活细胞中溶酶体 pH 的变化对相关疾病的诊疗至关重要 1。本文开发了一种 pH 依赖性的开关型荧光探针 B26，该探针以 1,8-萘咯喹啉作为荧光基团，通过修饰 N-(2-羟乙基)哌嗪和羟乙基基团，分别实现溶酶体靶向功能和对溶解性、pKa 值的调节。B26 对 pH 变化表现出“开关”特性和可逆响应性。同时，它能够有效标记溶酶体，并对活细胞中溶酶体 pH 的变化展现出高敏感性和选择性。更重要的是，由于其 pKa 值与溶酶体碱化相匹配，B26 克服了现有溶酶体 pH 探针在弱酸性到中性范围内的 pH 检测局限性，使其非常适合监测溶酶体碱化过程。氯喹处理进一步证实了其定量测定溶酶体碱化过程的能力。凭借其卓越的性能，B26 在溶酶体相关疾病的研究与诊断中展现出较大的应用潜力。

关键字 荧光探针，pH 传感，溶酶体，定量测定

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

免洗缓冲脂滴荧光探针构建及其对脂滴代谢过程的实时监测

陈妍妍、柯何健、杨佳琪、王宁荣、臧广超、甘勇军、刘倩*
重庆医科大学实验教学管理中心

脂滴是细胞内的脂质储存库，在能量平衡、脂质代谢、细胞氧化应激、活化、迁移和凋亡等生理活动中发挥关键作用，其代谢异常与脂肪肝、糖尿病、心血管疾病和癌症等疾病密切相关。通过荧光成像技术对脂滴的形成、分解及其与其他细胞器的相互作用等过程进行实时动态监测，有利于揭示脂滴的生理功能及其疾病发生发展中的作用机制。然而，现有的大部分脂滴荧光探针存在亲脂性较强、稳定性不足以及易荧光漂白等缺点，导致脂滴的实时荧光成像面临困难 1,2。因此，本文设计并构建了一种基于氢键接受位点的可逆开关型极性荧光探针 Z32，利用脂滴内外的极性差异调控探针的发光行为。在脂滴内，其非极性环境抑制 Z32 形成氢键，使其荧光处于 ON 状态；而在脂滴外，胞质极性增大，Z32 与水等质子供体形成氢键，荧光转为 Off 状态，提供免洗成像条件。此外，Off 状态的探针可以避免激发光造成的氧化损伤，同时在胞质中形成缓冲体系，以瞬时补充脂滴内受损探针，抵抗光漂白，从而实现长时间的实时动态成像。Z32 具有优异的极性响应性和光稳定性，能精准靶向脂滴，进行长时间的可视化动态监测（Fig. 1）。同时，我们观察到其与高尔基体和线粒体之间存在密切的相互作用，苯扎贝特处理可加速脂滴的运动。本文设计的免洗缓冲脂滴荧光探针展现出卓越的光学性能和强大的实时监测脂滴能力，将为脂质代谢相关疾病机制的研究与诊疗提供全新的策略与方法。

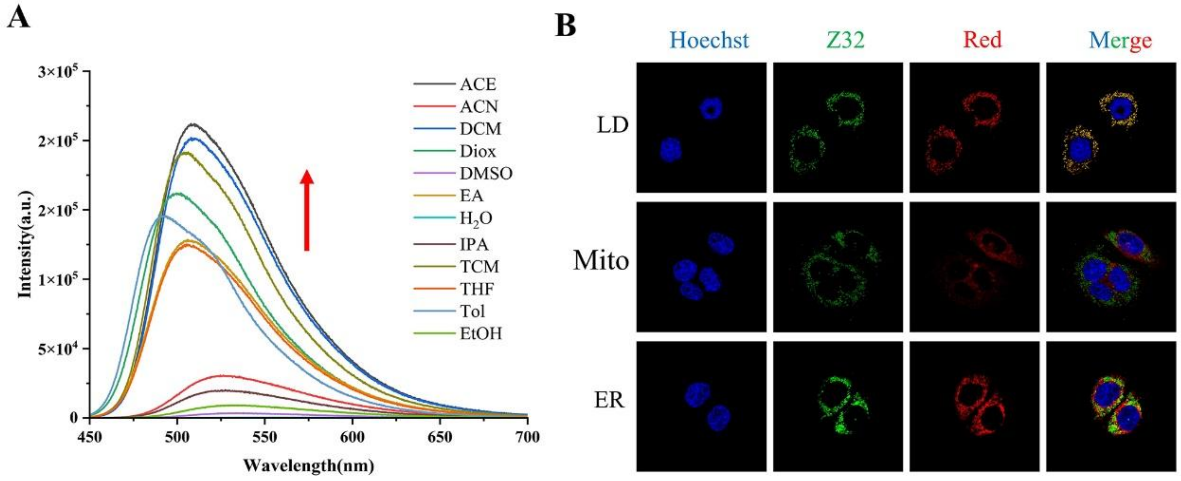


Fig. 1 Z32 的极性响应性和脂滴特异性标记性能。

关键字 极性响应荧光探针，免洗实时成像，脂滴代谢动态监测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

结合 CRISPR 策略的便携式设备用于多重呼吸道病原体检测

顾锡娟、潘安丽、吴玲玮、张晶、徐子荀、文涛、王淼淼、施秀英、吴丽*、秦玉岭
南通大学

快速、准确地检测呼吸道病原体对临床诊断和治疗呼吸道感染至关重要。在本研究中，通过专门设计的工程 CRISPR RNA (en-crRNA)激活 Cas12a 的反式切割活性，以及自制的便携式设备，促进了呼吸道病原体的多重和视觉检测。en-crRNA 由一个原始 crRNA 和一个 DNA 报告分子组成，该报告分子被荧光团和猝灭剂标记。此外，DNA 与原始 crRNA 的可变区域部分互补。同时鉴定出不同的呼吸道病原菌，检测限为 10^2 拷贝/μL。随后，通过专门设计的 en-crRNA 激活 Cas12a 的反式切割活性（图 1），以及自制的便携式设备（图 2），可以促进呼吸道病原体的多重和视觉检测。通过与临床样品检测的 qPCR 方法进行比较，验证了该策略的特异性，所有目标的 ROC 曲线下面积均为 0.98，显示出卓越的准确性。该研究为快速、特异、现场检测技术的发展提供了一条有希望的途径，旨在多重识别呼吸道病原体。

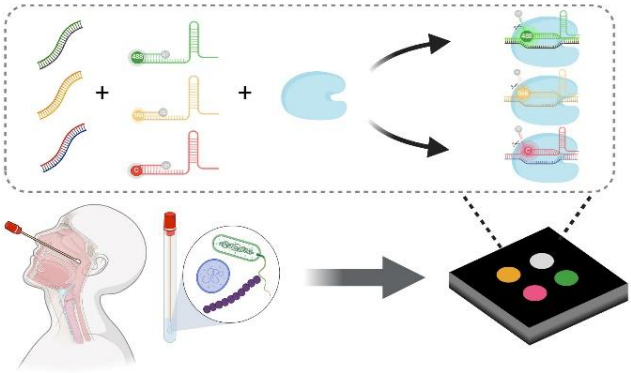


图 1. 通过设计特异性 en-crRNA 来激活 Cas12a 的跨剪切活性，结合 3D 打印便携式设备，实现多种呼吸道病原体的多重和视觉检测。

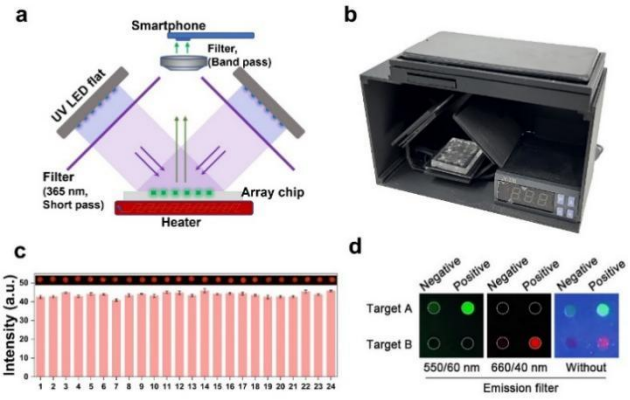


图 2. 便携式多通道检测装置的设计。(a) 光学系统的示意图。(b) 自制便携式装置和智能手机的照片。(c) 每个孔荧光强度的测量。(d) 使用图(b)中的 POCT 装置对成像信号进行评估。

关键字 POCT；呼吸道病原体检测；CRISPR/Cas12a

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

基于 HCR 辅助 RTF-EXPAR 的横向流动分析用于 H1N1 流感病毒的灵敏检测

朱亦丹、顾锡娟、唐曲、蒋汶君、夏锐、张晶、冀海伟、秦玉岭、吴丽*
南通大学

目的：研发一种集成无需逆转录-指数扩增反应（RTF-EXPAR）和杂交链式反应（HCR）的横向流动分析（LFA）技术，结合功能化量子点（QDs），实现荧光可视化及定量快速检测甲型 H1N1 流感病毒。并构建床旁检测（POCT）平台，在不依赖复杂仪器下，进行简便的操作即可完成对 H1N1 流感病毒的检测。

方法：选择 H1N1 流感病毒基因组序列的高度保守区域作为靶标，在切刻内切酶和 DNA 聚合酶的作用下，一部分产物可作为触发后续循环扩增反应的引物，另一部分产物启动杂交链式反应，随后发卡探针的茎环结构交替打开并相互结合，从而形成链式结构。进一步将上述反应产物引入 LFA 中。在靶标存在下，测试线将捕获 HCR 产物，同时，偶联链霉亲和素的量子点将与修饰生物素的发卡探针结合，从而产生级联荧光信号。最终，在便携式紫外手电筒的照射下，既可以直接采用肉眼观察条带的荧光强弱，进行定性诊断；也可利用 ImageJ 软件分析智能手机记录的荧光图像，实现定量检测（图 1）。

结果：成功开发了用于 H1N1 流感病毒 RNA 检测的高灵敏度和特异性 LFA 平台（称为 HRE-LFA）。试纸条 T 线荧光强度呈浓度依赖性增加，H1N1 RNA 的视觉检测限为 10 aM。此外，ImageJ 的灰度分析显示，T 线和质控线（C 线）的荧光强度（FI）比值（FI_T/FI_C）随着 H1N1 RNA 浓度的升高呈对数增加。同时，在 10^4 aM 至 10^9 aM 范围内表现出优异的线性相关（$R^2 = 0.9951$）。对于 H1N1 全基因组检测，本工作显示出与金标准方法高度一致的检测限和线性范围。双盲实验中，在定性解释中获得了较一致的判断，并与线性标准曲线计算结果具有较高的一致性（图 2）。对于三种不同的 H1N1 RNA 浓度，无论同一批次内还是不同批次间的试纸条的 FI_T/FI_C 比值均分别相近，变异系数（CV）小于 10%，显示出值得称赞的精密度。值得注意的是，制备的试纸条具有足够的稳定性，可以在室温下储存长达两个月而不影响其检测性能。此外，该方法的回收率在 92.00%至 109.35%之间，CV 值低于 2.37%，与定量逆转录聚合酶链式反应（qRT-PCR）结果显著一致，从而肯定了 HRE-LFA 平台满足 H1N1 流感感染临床诊断需求的潜力。

结论：综上所述，本文提出了一种无需逆转录直接检测 H1N1 RNA 的超灵敏横向流动分析策略。通过整合指数扩增反应和杂交链式反应，实现了高效的信号放大。而且其灵活通用的设计允许扩展到其他核酸靶标的检测。此外，温和的反应条件与便捷的横向流动分析展示出在现场检测方面的巨大潜力。

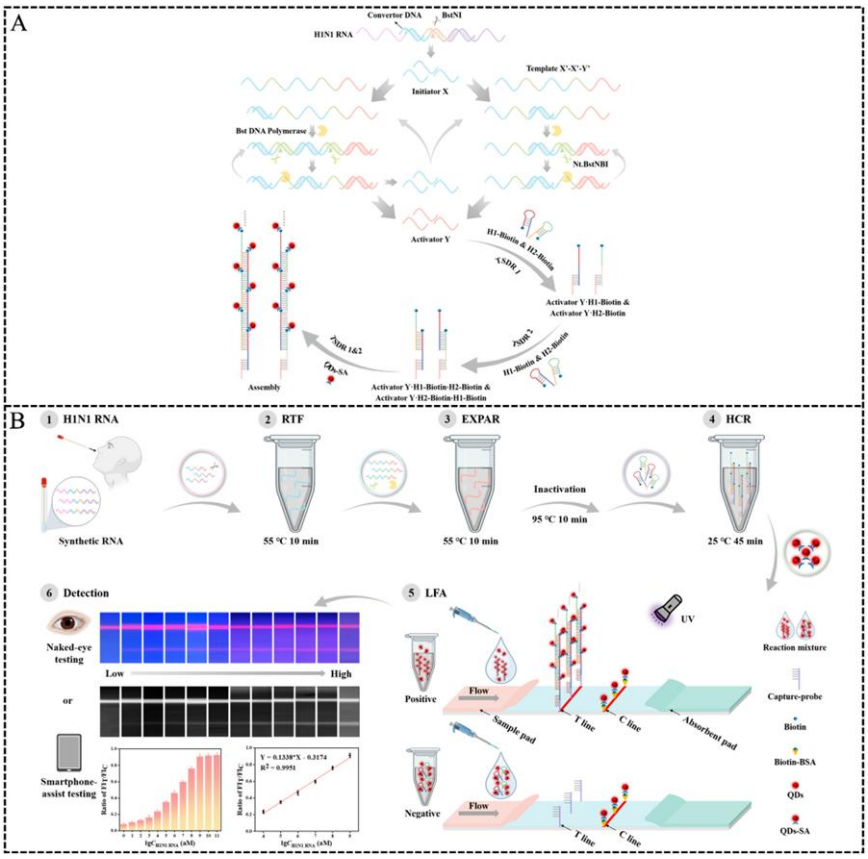


图 1. HCR 辅助 RTF-EXPAR 的 H1N1 流感病毒横向流动分析（HRE-LFA）的原理。（A）基于 HCR 辅助 RTF-EXPAR 检测 H1N1 流感病毒 RNA 的反应机制。（B）H1N1 流感病毒 RNA 检测平台整体检测流程，包括 LFA 的示意图。

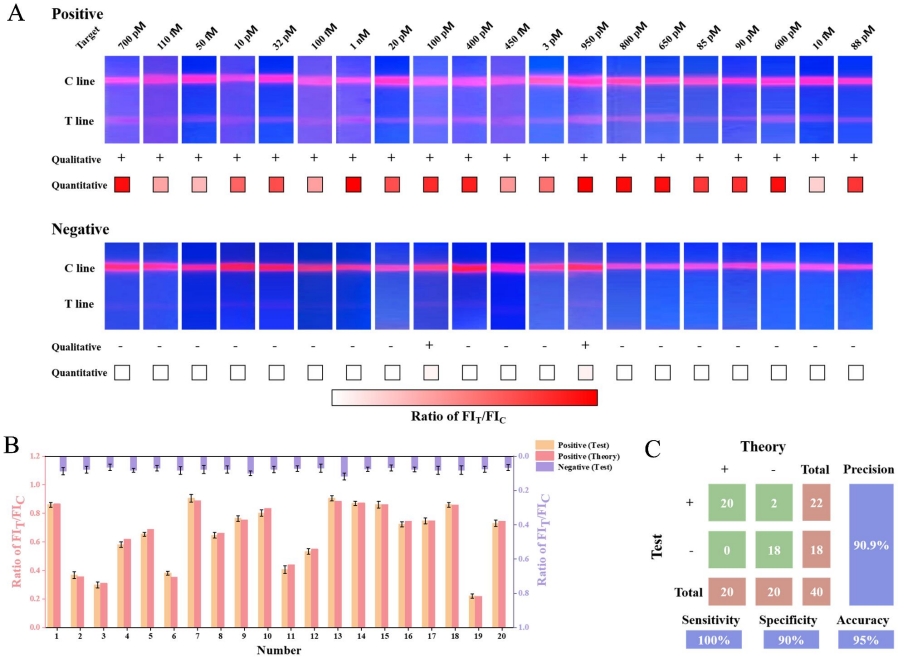


图 2. HRE-LFA 的双盲试验。（A）裸眼检测结果。（B）ImageJ 处理的 FI_T/FI_C 比值定量分析。数据以均值±标准差表示，其中 n = 3 个重复。（C）定量检测结果与理论计算值的统计图。

关键字 H1N1 流感病毒 RNA；杂交链式反应；无需逆转录-指数扩增反应；量子点；横向流动分析

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

数字化芯片解码帕金森病

蒋成*
香港中文大学（深圳）

神经退行性疾病的诊断难点在于对疾病（比如帕金森病，阿兹海默症）前驱阶段提供可靠的早期诊断。目前尚缺乏能提前预警、早期检测以及精确反映分子病理的血液生物标志物，且无有效手段对超低丰度血液生物标志物进行有效识别与量化。血清神经源性细胞外囊泡（Neuron EVs, NEV）作为生物标志物有巨大的潜在临床应用。我们探索了血清 NEV 作为生物标志物在预测病理和早期诊断疾病中的潜力。研究开发了新的检测工具，包括（1）新一代抗污染免疫珠，以提高特定 EV 的免疫捕获能力；（2）数字滴液微流控化验，以评估单粒子水平上的 EV 膜抗原；（3）图象识别和解析算法来快速分析阳性信号；（4）构建诊断模型。

关键字 帕金森病，血液诊断，数字化芯片，脑细胞外囊泡

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

POCT 质谱仪研制及临床检验应用

胡舜迪[1,2]、甘剑勤[2]、陈健力[1]、杨旭[1]、唐燕[1,2]、闻路红*[1,2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

药物治疗是实施精准疾病治疗的主要方式，药物浓度与治疗效果密切相关。POCT（Point-of-Care Testing）质谱是一种将质谱技术应用于临床现场，以快速、准确地检测和分析样品中化合物的过程。该技术具有高灵敏度、高选择性和广泛的应用范围，在临床诊断和治疗中具有重要意义。床旁药物浓度检测可以帮助医生实时获取患者体内药物的浓度信息，从而为个体化药物治疗提供有力支持。但目前常用的液相色谱质谱联用法存在设备体积重量大、结构复杂、需要专业人员操作、耗时长等缺点尚不能达到临床现场快速检测目的。

我们课题组针对目前临床治疗过程中急需的血液和体液中药物浓度和麻醉剂快速精准检测需求，研制了一款基于直接电离源和线性离子阱的临床 POCT 全自动质谱仪器系统。基于二维新型离子阱的多级串联质谱技术，通过优化双曲四极电场，开展离子输运仿真模拟研究，研究多重共振扫描技术，实现样品的多级串联质谱分析功能；设计新型液相色谱-离子源-质谱匹配接口，实现血液样本进样的快速高通量液相分离及敞开式大气压离子化，降低对真空装置要求的同时，实现样品便捷进样及离子高效传输；开展了血药浓度和麻醉剂浓度临床质谱诊断前处理技术研究，实现复杂生物基质样品的快速分离和富集，并形成稳定可靠的药物浓度、麻醉剂等相关临床质谱试剂盒；采用智能化质谱操作与质谱数据分析算法，建立药物的质谱特征数据库和多维数据谱图匹配与分析方法，实现多组分目标物快速精准分析。

本课题研制的 POCT 质谱仪系统具有分析速度快、操作简单等优势，并针对性开发了多种临床血药浓度监测方法，涵盖丙戊酸、卡马西平、喹硫平、奥氮平、舍曲林、利奈唑胺、伏立康唑等抗癫痫、抗精神、抗抑郁、抗菌药物及丙泊酚、舒芬太尼等麻醉剂，实现 20 多种药物的准确性、效率和便利性监测。已联合多家医院成功开展临床前研究，为个体化治疗提供了新的可能性，为“精准医疗”的全面落地实施提供了有效的技术方案支撑。

关键字 POCT，质谱仪，临床检验，应用

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

一种基于铁单原子的二维柔型传感器用于过氧化氢的实时检测

吴宇轩、李懿、王欣悦、何远轲、唐树婷、臧广超*
重庆医科大学

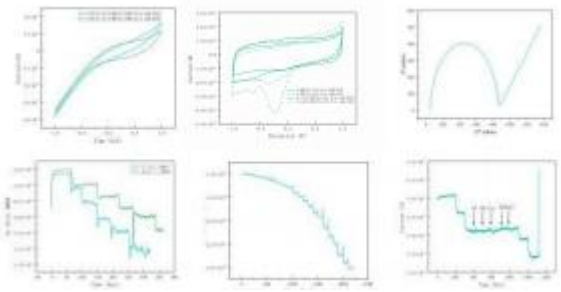
介绍:已有研究表明，血管承受过大的机械应力可导致血管平滑肌细胞氧化应激，从而激活下游通路，促进平滑肌细胞凋亡，最终导致动脉硬化[1]。然而，其发生的确切机制尚不清楚。因此，开发一种具有特殊性能的传感器来实时监测机械应力下细胞产生的过氧化氢是很重要的。基于上述要求，本研究报道了一种 PNE-FeN_4/N-MWCNTs/PDMS 传感器，并通过各种电化学手段对其性能进行了研究，以验证其作为细胞培养和传感集成平台的潜力。

材料与方法:将 30 mg FePc 与 300 mg N-MWCNTs 混合，在 800℃下热解 2 h，得到 Fe-N_4/N-MWCNTs。将 PDMS 预聚物进行自旋涂覆，并在 75℃下加热 3 h 固化。将 0.8 mg 催化剂粉末分散在去离子水(30 mL)中，泵送并过滤到混合纤维素膜上，随后将其转移到 PDMS 材料上。将得到的 Fe-N_4/N-MWCNTs/PDMS 复合膜在浓度为 1.2 mg/mL 的去甲肾上腺素溶液中浸泡 6 h，得到 PNE/Fe-N_4/N-MWCNTs/PDMS 膜[2]。

结果与讨论:该传感器制备成功，并用于过氧化氢分子的检测。电化学阻抗谱分析结果表明其具有良好的导电性。对比分析显示，与 NMWCNTs 相比，Fe-N_4/N-MWCNTs 表现出更明显的响应。I-t 结果表明，催化剂对过氧化氢的响应呈线性，最小可检测浓度为 10 μM。此外，在 DMEM 中浸泡 1 小时后，仅观察到其催化活性降低了约 26%，这证实了传感器卓越的防污性能。

结论:铁单原子基过氧化氢传感器具有显著的催化能力，显著优于 N-MWCNTs。此外，它具有优异的抗污垢性，并有效地防止蛋白质沉积在电极表面。该传感器灵敏度高，是细胞培养检测的理想平台。

致谢:本研究由重庆市自然科学基金(CSTB2024NSCQ-MSX0105),重庆医科大学未来医学青年创新计划(W00140)资助



关键字 H2O2, 单原子催化剂, 实时检测

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

基于适配体-滚环扩增和银纳米颗粒聚集检测外泌体浓度

李丹*、董青、孙旭、汪劲
中国科学院长春应用化学研究所

外泌体因携带多种生物学信息且在体液中含量丰富，有望成为非侵入性生物标志物，用于疾病诊断和预后监测。然而，目前的检测方法在灵敏度、特异性及成本效益方面存在局限性，阻碍了其在临床检测中的广泛应用。为了解决这些问题，我们开发了一种快速、精准且经济实惠的外泌体检测方法，具有高灵敏度和特异性，是理想的临床诊断工具。该方法利用 CD63 适配体及其与链霉亲和素包被的磁球（SA-MBs）相连的互补 DNA（CD63 适配体/cDNA）识别和捕获外泌体，再利用滚环扩增（RCA）放大外泌体从 SA-MBs 是否的 cDNA 拷贝数。带负电荷的 RCA 产物通过静电吸附诱导带正电荷的精胺修饰银纳米颗粒（AgNPs）聚集。AgNPs 的聚集状态可通过肉眼观察或紫外-可见光谱分析定量外泌体浓度。上述两种方式对外泌体浓度的检测限分别为 4.0×104 和 800 颗粒/毫升。此外，该方法也成功应用于血清样本中外泌体浓度的检测，展示了其在液体活检中的临床应用潜力。

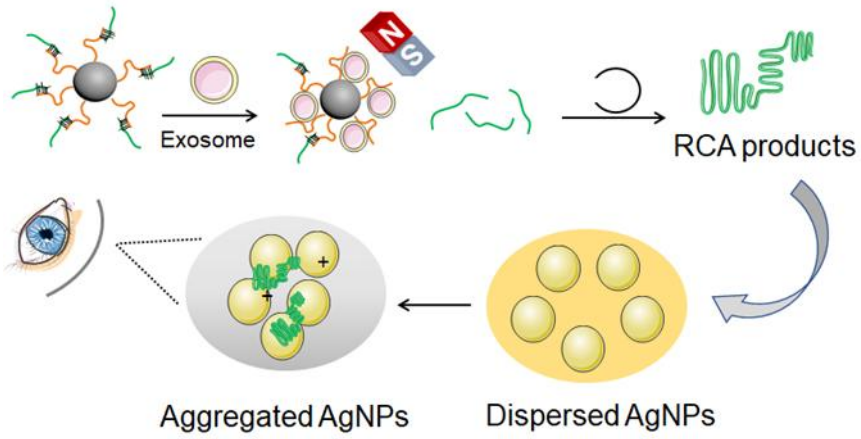


Figure 1. Schematic illustration of the process of exosomes detection.

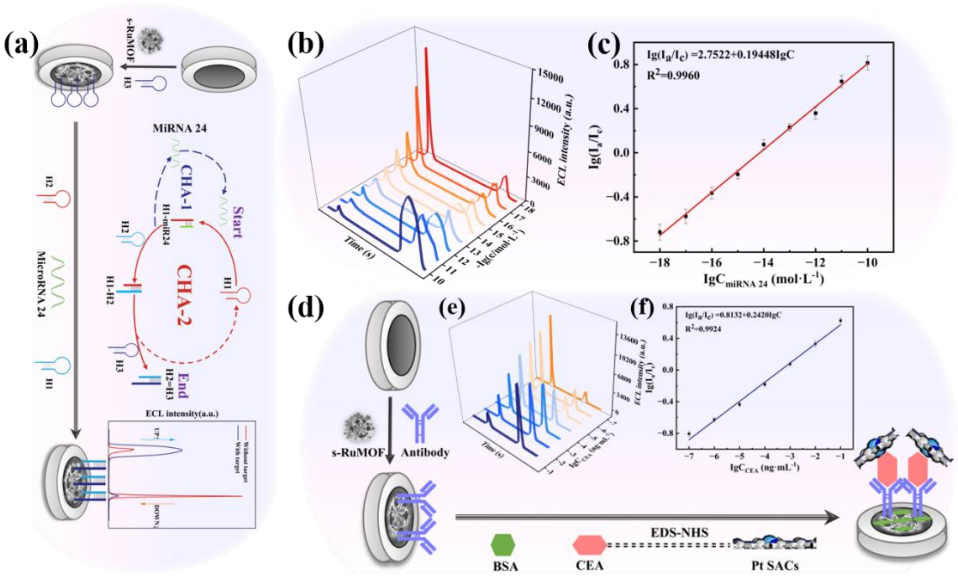
关键字 外泌体检测，DNA 滚环扩增，银纳米颗粒

分会场：32.检验医学 POCT
交流类型：墙报

单原子催化剂调控的单发光体高效灵敏 MicroRNA 24 及癌胚抗原 CEA 的比率型检测方法的开发研究

秦骏川、周锦域、应文凯、臧广超、朱姝*
重庆医科大学

本研究旨在开发一种高灵敏度、特异性的电化学发光（ECL）传感器，以实现对 MicroRNA 24（miRNA 24）和癌胚抗原（CEA）的即时检测，提供了一种创新的解决方案。miRNA 24 作为关键生物标志物，在心血管疾病等多种人类疾病的早期诊断、病理分级及预后评估中发挥重要作用，其检测能够及时识别病情并实施有效干预。癌胚抗原（CEA）广泛用于肿瘤的诊断与监测，尤其在结直肠癌、乳腺癌及肺癌的早期检测中，CEA 水平变化能够反映疾病的进展及治疗效果。因此，开发高效、快速的检测方法显得尤为重要。在本研究中，我们采用了具有优异催化性能的铂单原子催化剂（Pt-N SACs）作为信号调制标签，结合无酶双催化剂放大（DCHA）技术，实现了室温下的快速核酸扩增与 ECL 检测。该技术不仅简化了检测流程，还显著提高了检测的灵敏度与特异性。基于稳定的 ZnRuMOF 平台，我们成功构建了针对 miRNA 24 的 ECL 传感器，其灵敏度在现有检测方法中处于领先地位，检测限达到 0.24 aM，展现了在临床应用中的巨大潜力。通过 XRD、TEM 和 XPS 等多项表征，我们测定了 ZnRuMOF 的氧还原反应（ORR）性能，分析了其发光机制。ZnRuMOF 展示出电势分辨双信号，能够有效消除背景信号的干扰，从而提高检测精度。传感器表现出优异的选择性，能够有效区分 miRNA 24 与其他相似序列，显示出卓越的实际应用前景。此外，传感器在稀释血清中成功检测到已知浓度的 miRNA 24，进一步验证了其实用性。同时，我们开发的针对 CEA 的比值 ECL 传感器，其检测限为 0.0191 fg/mL，展现出超高的检测灵敏度和可靠性。此外，我们提出的检测方法具有广泛的普适性。通过对抗原-抗体结合反应及核酸链序列的修改，该方法能够检测更多种类的生物标志物，展现出巨大的应用潜力，为检验医学及其他相关领域的研究与实践提供了新思路。



关键字 MicroRNA 24，CEA，金属有机框架，单原子催化剂，电化学发光

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

肽基荧光分子信标

江云宝*
厦门大学

经典的核酸荧光分子信标系由单链核酸构成的发夹结构，因其两端的碱基配对而使茎部的两个端点靠近；待测核酸的序列因与信标柄环区序列配对而结合、转而采取伸展结构，导致茎部展开，两个端点因此远离。若于两个端点取代以与距离相关的光物理过程（如电子、能量转移等）的基团，则待测核酸的结合引起光物理和荧光发射特性的显著变化，得以实现灵敏的荧光检测。我们在研究新型酰胺基硫脲类阴离子结合受体时，发现酰基氨基酸酰基硫脲结构中含有 beta-转角单元，两个端点也因此靠近，与核酸分子信标结构上相似。晶体结构显示，转角内硫脲基团的两个-NH 呈反式构型，与阴离子结合要求的顺式构型不同，阴离子结合当引起转角结构的变化，达至伸展构型，原理上与核酸分子信标分子的相似。我们成功地实现了该设想，获得数例肽基荧光分子信标，展示出灵敏的阴离子荧光响应。

感谢国家基金重大研究计划集成项目和学部科学专项的资助，感谢实验室研究生同学的勤奋工作。

关键字 肽基分子信标，beta-转角，酰胺基硫脲，阴离子，荧光

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

DNA 超分子水凝胶

刘冬生*
清华大学

由于高分子链熵弹性的存在，高分子交联网络的有效孔径呈正态分布，使人工合成水凝胶体系的分子通透性不能与细胞外基质相比拟。利用核酸双链分子刚性大且水溶的特点，我们制备了纯核酸超分子水凝胶，在其分子网络中避免了高分子链熵卷曲的产生，具有类似细胞外基质的高通透性。在此基础上，我们发展了多种拓扑构型的核酸超分子组件，可以在生理条件下快速形成并具有较好的强度；利用其快速形成和良好的生物相容性，此系列水凝胶还在单细胞培养与操控、活细胞的三维打印等方面获得了良好的应用。

关键字 DNA，超分子，水凝胶

参考文献

1. Y. Shao, H. Jia, T. Cao and D. Liu* *Acc. Chem. Res.*, **2017**, *50*, 659–668.
2. C. Li, W. Shu and D. Liu et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015,** *54,*3957.
3. C. Li, Z. Li and D. Liu et al. *Small*, **2015**, *11*, 1138.
4. J. Jin, S. Wang and D. Liu et al. *Advanced Materials*, **2013**, *25(34)*, 4714.
5. D. Liu, E. Cheng and Z. Yang, *NPG Asia Mater.*, **2011**, *3(10)*, 109.
6. Y. Xing, D. Liu, *et al. Advanced Materials*, **2011**, *23*, 1117.
7. E. Cheng, D. Liu, *et al. Angew. Chem., Int. Ed.*, **2009**, *48*, 7660.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

细胞外囊泡单颗粒分析在液体活检标志物鉴定及癌症诊断与分型中的应用

胡芸芸，颜晓梅*
厦门大学

细胞外囊泡（extracellular vesicles, EVs）是由细胞分泌的，具有磷脂双分子层膜结构的纳米囊泡，富含源于母细胞的多种生物活性分子，包括蛋白质、核酸、脂质和糖类等。 作为细胞间通讯的重要媒介，EVs 广泛存在于各种体液中。由于其广泛的来源、丰富的含量、在循环中保持稳定以及动态反映生理病理状态的能力，EVs 已经成为液体活检中最热门的标志物之一，具有在癌症、神经退行性疾病、心脑血管疾病等诸多领域的临床应用潜力。目前，大量与 EVs 相关的蛋白质和 miRNA 已被应用于疾病治疗监控、早期癌症诊断和疾病预后评估中。然而，EVs 因其细胞来源、细胞状态和分泌途径的不同，而在粒径、表面蛋白和内容物方面表现出显著的个体差异性和多样性。单颗粒检测技术的应用，不仅能够从复杂的体液样本中甄别特定肿瘤来源的 EVs，还可以通过多参数同时表征，揭示肿瘤 EVs 异质性，确定特定 EVs 亚群的精确占比与蛋白分布，从而极大地提升液体活检的灵敏度、特异度与准确性。本报告将重点探讨课题组自主研发的纳米流式检测技术（nano-flow cytometry, nFCM）在结直肠癌、鼻咽癌和乳腺癌液体活检中的肿瘤标志物筛查及诊断应用，尤其是 EB 病毒编码蛋白 LMP1 和 LMP2 在早期鼻咽癌诊断及与鼻咽炎区分中的临床价值，以及通过检测乳腺癌患者 EVs 上的双蛋白标记物显著提升早期诊断准确性的实例。

关键字 细胞外囊泡，纳米流式检测技术，液体活检，癌症早期诊断

参考文献

1. Tian, Y; Su, GQ*; Yan, XM*, et al. ACS Nano, **2018**, 12, 671-680.
2. Hu, YY; Hu, B*; Lin, Q*; Yan, XM*, et al. Anal. Chem. **2022**, 94, 9740−9749.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

限域微环境生物分子高分辨测量

刘宝红*、柳懿芯、李彬、刘妍君
复旦大学

微环境是细胞赖以生存的基础，对细胞的增殖、迁移、分化等诸多行为和功能具有重要的调控作用，在生物体内，细胞生活在动态的复杂微环境中，细胞通过感知周围微环境的变化而调节自身行为和功能，从而影响细胞的形态、基因表达、蛋白质水平和定位，因此，需要发展微纳尺度的模拟调控和测量方法。在这些变化过程中，蛋白质及其微环境中分泌的特异性生物分子的差异表达起到了关键的作用。与传统的系综测量方法相比，单分子测量可以提供更丰富的信息，通过对单个分子行为进行统计分布，可以探索样本隐藏的异质性。我们发展了一系列基于核酸生物传感技术的单细胞单分子测量技术，并开发了相关软件，实现了对细胞内外分子的时空动态检测。

关键字 核酸生物传感，微流控芯片，单分子测量

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

Exploring site-specific N6-methyladenosine modifications as new cancer biomarkers

刘震*、孙思佳
南京大学

Aberrant N6-methyladenosine (m6A) modification of RNA plays an important role in the onset and progression of cancer. Total m6A has been extensively explored as a cancer biomarker. However, recent studies have revealed that m6A modifiers exhibit preferential binding sites and therefore site-specific m6A modifications can be more valuable cancer biomarkers. Although many methods have been developed for detecting site-specific m6A, site-specific m6A modifications have been rarely explored as cancer biomarkers. Herein, combining a m6A-specific DNAzyme with surface-enhanced Raman scattering (SERS), we developed a novel strategy for exploring site-specific m6A modifications as new cancer biomarkers through single-cell analysis and clinical tissues imaging. By leveraging the affinity recognition of base complementary pairing, we firstly used DNAzyme sequence-modified microextraction probes and complementary sequence-modified SERS labelling nanotags to probe RNA with candidate m6A sites in single cells and discovered new m6A sites that could serve as potential cancer biomarkers. Subsequently, we employed DNAzyme sequence-modified SERS nanotags to visualize these m6A sites on clinical pathological sections and further validated the clinical value of these potential cancer biomarkers in diagnosing pancreatic cancer and subtyping breast cancer. Our research not only demonstrates the potential of site-specific m6A modifications as cancer biomarkers but also provides a novel research paradigm for exploring clinical value of nucleic acid modifications.

关键字 mRNA, m6A modification, cancer biomarker, single cell analysis, tissue imaging

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

球形核酸先进合成技术

邓兆祥*
中国科学技术大学

球形核酸一般指表面接枝有高密度 DNA 分子的纳米粒子，其在可编程自组装、生物检测和纳米医学等领域具有重要应用。目前，使用加盐陈化、低 pH 和冻融等方法最快可在数分钟内获得较高 DNA 密度的球形核酸。如何在更短的时间内制备出更高 DNA 密度的球形核酸不但代表了基础化学认知的进步，亦能促进其功能与应用的进一步拓展。另一方面，纳米合成技术的进展大大丰富了球形核酸可用的功能内核，但是不同材料的表面性质和稳定性差异显著，往往需要针对性的核酸修饰方法，如何基于这些材料发展球形核酸的通用构建方法是一个需要解决的问题。本报告将介绍我们在球形核酸先进合成方法方面的一些最新进展，以及对相关物理化学过程的再认识。

关键字 DNA，纳米粒子，等离激元，球形核酸

参考文献

1. L. Song, X. Song, Y. Li, Y. Hao, S. Wang, Z. Deng, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202414752.
2. N. Chen, Y. Wang, X. Song, Y. Li, Z. Deng, *Nano Lett.*, **2022**, 22, 8550-8558.
3. Y. Ye, Y. Hao, M. Ye, Z. Deng, *Small*, **2022**, 18, 2202458.
4. Y. Li, L. Song, C. Wang, P. Lei, Z. Deng, *Nano Lett.*, **2022**, 22, 3385-3391.
5. Y. Hao, Y. Li, L. Song, Z. Deng, *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, 143, 3065-3069.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

级联信号放大技术在环状 RNA 定量检测中的研究

张春阳*
东南大学

作为一种新型超灵敏检测手段，单分子检测在生物分子的定量分析领域有广阔的应用前景，已被运用于疾病相关的生物标志物分子的超灵敏检测。环状 RNA（circRNA）是一类具有调控功能的非编码 RNA 分子，具有高丰度、高保守性及细胞/组织特异性等特点。失调的 circRNA 与各种人类恶性肿瘤的发生发展密切相关，可作为潜在的诊断标志物和治疗靶点。我们发展了基于级联信号放大和荧光纳米线的无标记方法，可以准确地监测乳腺癌细胞和组织中的 circRNA。该方法具有高灵敏度，可以准确测量单细胞内 circRNA 的表达，并能区分癌旁组织和乳腺癌组织中 circRNA 的表达，在研究 circRNA 的病理作用和临床诊断方面具有巨大潜力。

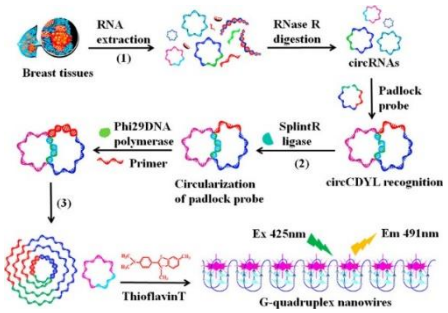


Figure 1. Workflow diagram of the construction of a fluorescent G-quadruplex nanowire for label-free and accurate monitoring of circRANs with low background.

关键字 单分子检测，信号放大，环状 RNA，乳腺癌

参考文献

1. W. J. Liu, R. Song, D. M. Yang, S. L. Zhao, C. Y. Zhang, *Chem. Eng. J.*, **2024**, 484, 149788.
2. S. H. Wei, J. P. Hu, Z. M. Sheng, Q. Zhang, J. Zhang, B. G. Zhang, M. Liu, C. Y. Zhang, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 599-605.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于功能核酸的分子识别体系设计与生物分析应用

袁荃*
湖南大学

疾病标志物的精准识别和高灵敏检测对健康管理和大流行筛查具有重要意义。准确、快速的疾病标志物检测不仅可以用于慢性疾病床旁护理，而且能够为重大疾病提供早期干预机会。核酸分子具有易于进行表面修饰和空间结构设计的特性，并具有电子传递等功能，因而在生物分析领域具有广阔的应用前景[1]。核酸适体（aptamer）具有分子识别特性，利用DNA 碱基互补配对可以形成精细的三维结构，使得核酸适体能够在分子水平上高特异性识别疾病标志物。使用该方法，我们获得了一系列具有功能性的核酸适配体，并成功将其应用于蛋白活性调控、疾病体外诊断等领域[2]。此外，DNA 的小尺寸有助于其在德拜长度内进行电信号转导，提高电化学生物传感器的检测灵敏度。这种核酸辅助的疾病标志物分析方法有望实现高灵敏疾病标志物传感、药物和病原体筛查、乃至即时检测（POCT）和数字医疗中的应用。

关键字 核酸适体，功能核酸

参考文献

1. Tan, J.; Li, H.; Ji, C.; Zhang, L.; Zhao, C.; Tang, L.; Zhang, C.; Sun, Z.*; Tan, W.*; and Yuan, Q.* *Nat. Commun.*, **2022**, 13: 594.
2. Wei, Y.; Long, S.; Zhao, M.; Zhao, J.; Zhang, Y.; He, W.; Xiang, L.; Tan, J.; Ye, M.; Tan, W.; Yang Y.*; Yuan, Q.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**,146: 319.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

DNA 纳米组装体用于生物分子的原位监测诊疗研究

朱俊杰*
南京大学

癌症是当代医学的难题，威胁着人类的健康和生命。研究表明，癌症的早期诊断和靶向协同治疗对癌症患者治愈率的提高至关重要。我们开发了系列用于癌症精确诊断与高效治疗的纳米平台。在癌症诊断方面，利用双链特异性核酸酶辅助靶标循环和催化发夹组装反应，构建了一种级联信号放大免标记电化学生物传感器用于 microRNA 的定量检测。基于 RNA 适配体的荧光增强特性和催化发夹组装反应介导的信号放大策略，设计了一种用于活细胞内 mRNA 低背景成像的近红外光控纳米器件。此外，还开发了一种端粒酶激活的可再生 DNA 纳米机器，实现了活细胞中人脱嘌呤脱嘧啶核酸内切酶（APE1）的高灵敏原位成像分析。在癌症治疗方面，基于 DNA 纳米自组装，利用功能化环状 DNA 构建了生物稳定性好、耐酶性强、协同给药的 DNA 纳米载体，可有效对抗耐多药人类白血病。同时，利用 DNA 折纸技术，构建了治疗基因的高效稳定递送平台，有效增强了乳腺癌的光热-化学联合治疗。此外，还提出了一种癌细胞内源性 mRNA 刺激响应的多功能 DNA-Au 纳米机器，不仅可以通过多药协同作用增强肿瘤治疗效果，还可以通过荧光成像实现肿瘤治疗过程的可视化监测。这些研究有助于癌症的准确诊断和成像引导的精准治疗，可为智能响应型诊疗一体化纳米平台的开发提供了新思路。

关键字 DNA 纳米组装体，原位成像，靶向递送，协同治疗

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

"小分子自增强"拉曼散射：发现，机理及活体诊疗分析

肖泽宇*
上海交通大学

精准医学的发展推动了分子影像诊疗分析技术的发展。拉曼影像因其高特异性的“指纹图谱”信号有望在生物医学展示前景。但是，由于拉曼散射信号弱，传统理论中必需依靠金、银、铜等金属基底材料来增强信号（SERS），而这些基底材料的生物安全性问题阻碍了拉曼影像技术的活体生物医学应用及转化。我们报道了一类特定结构的小分子，不依赖基底，仅通过自身堆叠来增强拉曼信号。所形成的小分子拉曼纳米探针在活体中展示优于 SERS 的成像灵敏度、分辨率和深度。晶体结构及机理研究揭示，这些小分子通过自我堆叠，形成有序的空间排列，使得相邻分子之间能够发生三维电荷转移，以此增强拉曼散射（SICTERS), 为活体拉曼成像提供了安全灵敏的技术。其次，我们发展了“DNA 碱基模块化”的策略实现了拉曼影像诊疗探针多功能整合时的精确构筑及性能调控。最后，拓展拉曼影像探针用于术中微小病灶的原位可视化分析、药物剂量分布的动态可视化分析、治疗分子靶标的人体可视化分析，显著提升了肿瘤手术及药物治疗的有效性，为个性化精准诊治提供有转化价值的分析技术。

关键字 活体拉曼影像分析，SICTERS，小分子自增强，DNA 模块化

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

功能性非天然核酸

于涵洋*
南京大学

核酸是化学和生命科学研究的重要分子工具，然而，核酸工具在生命体系中应用仍受限于化学多样性相对匮乏和生物稳定性相对不足等短板。针对核酸化学多样性匮乏和生物稳定性不足的核心问题，我们的研究策略是：通过创制非天然核酸，扩充核酸的化学多样性，增强核酸的生物稳定性。我们近几年围绕“非天然核酸化学生物学”科学主题，在开发新方法、发现新分子、实现新应用方面取得了一系列新成果。包括：（1）开发了在核酸中引入非天然化学修饰的新方法，提升了核酸的催化活性；（2）筛选获得了催化 RNA 发生化学反应的非天然核酶，调控了基因表达和 RNA 功能；（3）筛选获得了结合靶点蛋白的非天然核酸适配体，实现了靶向蛋白降解等新应用。

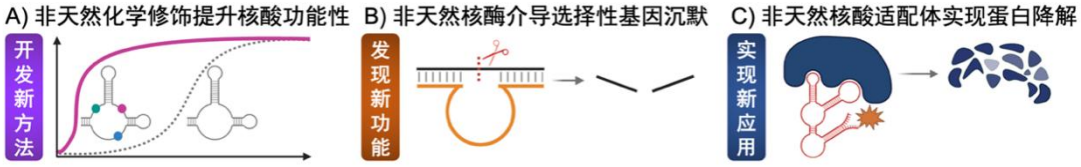


图 1. 功能性非天然核酸为生物医学研究提供化学生物学新工具

关键字 核酸化学生物学，化学修饰的核酸，非天然核酸，核酸适配体，核酶

参考文献

1. Zhang, Z.; Wei, W.; Chen, S.; Yang, J.; Song, D.; Chen, Y.; Zhao, Z.; Chen, J.; Wang, F.; Wang, J.; Li, Z.; Liang, Y.; Yu, H. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 7052.
2. Qin, B.; Wang, Q.; Wang, Y.; Han, F.; Wang, H.; Jiang, S.; Yu, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202317334.
3. Wang, Y.; Wang, Y.; Song, D.; Sun, X.; Li, Z.; Chen, J.-Y.; Yu, H. *Nat. Chem.*, 2022, 14, 350.
4. Wang, Y.; Wang, Y.; Song, D.; Sun, X.; Zhang, Z.; Li, X.; Li, Z.; Yu, H. *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 8154.
5. Li, X.; Zhang, Z.; Gao, F.; Ma, Y.; Wei, D.; Lu, Z.; Chen, S.; Wang, M.; Wang, Y.; Xu, K.; Wang, R.; Xu, F.; Chen, J.-Y.; Zhu, C.; Li, Z.; Yu, H.; Guan, X. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 9334.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于荧光 RNA 的基因编码生物传感器

李幸*
中国科学院动物研究所

基于荧光 RNA 的基因编码生物传感器包含荧光 RNA 适配体和结合靶标的 RNA 序列，可低背景、低干扰、高响应地检测细胞内关键靶标及其动力学。与传统基于荧光蛋白的生物传感器相比，其展现出更高的信噪比和灵活性，能够检测小分子代谢物、离子和蛋白质等多种细胞内信号分子。

我们发展了一系列基因编码的荧光 RNA 传感器，实现了对单个活细胞内小分子代谢物、蛋白和离子的实时追踪能力。我们首先通过人工智能筛选与构效关系设计，合成了高亮、光稳定、低背景的荧光 RNA 靶向小分子探针，随后通过荧光 RNA-小分子探针复合物，构筑出高性能的生物传感器。随后，检测单个哺乳动物活细胞内小分子代谢物、离子和蛋白质等多种细胞内信号分子。进一步，我们验证该类传感器可潜在应用于高通量药物筛选。

总之，基于荧光 RNA 的生物传感器为深入为相关疾病的诊断与治疗提供了新一代示踪和药物筛选工具。

关键字 荧光 RNA，生物传感器，核酸诊断，RNA 生物技术

参考文献

1. Chen, Z.#; Chen, W.#; Xu, C.#; … **Li, X.*** *Nature Communications*, 2024.
2. Zhang, Z.#; Rong, X.#; … **Li, X.*** *Nature Communications*, 2024, 15, 934.
3. Zhang, Y.#; Xu, Z.#; Xiao, Y.#; Jiang, H.#; Zuo, X.; **Li, X.*** and Fang, X.* *Nature Communications*, 2024, 15, 4026.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于功能核酸的肿瘤生物标志物检测新技术

王鹏飞*
上海交通大学

基于生物标志物（细胞、外泌体、核酸、蛋白、代谢小分子等）检测的肿瘤液体活检具有微创、快速、信息全面等优点，是影像学和组织病理检测的有效补充，在肿瘤的临床分子诊断方面具有显著的优势和应用前景。但由于生物标志物具有丰度低、类型广、干扰大、异质性高等特点，其检测面临测不出、测不准、测不全等系列挑战，亟须开发新型分子检测技术。以核酸适体、脱氧核酶、框架核酸为代表的功能核酸在分子结构、分子识别、分子信号传导等方面均具备精确可控的特性，是用于开发精确分子检测技术的优良工具。报告人将围绕生物标志物检测这一主题，介绍近年来我们开发的基于功能核酸的分子检测技术，包括针对血清 miRNA、细胞外囊泡等生物标志物的检测，以及在肿瘤分子诊断方面的临床应用探索。

关键字 生物标志物检测，肿瘤液体活检，功能核酸，生物传感

参考文献

1. Shi, C.; Yang, D.; Ma, X.; Pan, L.; Shao, Y.; Arya, G.; Ke, Y.; Zhang, C.; Wang, F.; Zuo, X.; Li, M.; Wang, P. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63 (12): e202320179.
2. Ma, X.; Zhou, F.; Yang, D.; Chen, Y.; Li, M.; Wang, P. *Anal. Chem.* 2023, 95 (35): 13220.
3. Zhou, F.; Pan, L.; Ma, X.; Ye, J.; Yu, Z.; Wang, F.; Yuan, C.; Yang, D.; Luo, Y.; Li, M.; Wang, P. *Anal. Chem.* 2024

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

仿生核酸分子网络设计及其系统功能研究

岳亮*
湖南大学

生物体内的生物分子网络通过复杂的调控机制，参与并控制着多种关键生命过程[1]。系统化学的研究旨在通过整合不同功能的分子模块，构建人工分子网络，实现天然生物分子网络的化学重构与功能模拟[2–6]。本研究运用系统化学的研究方法，针对多种天然生物分子网络进行结构解析与功能重现，重点研究了以下三个方面：（1）浓度信息解码网络：基于核酸链置换反应，构建了具浓度信息带通滤波功能的分子网络，系统调控了滤波行为的通带数量、位置、带宽及增幅。（2）时序编码网络：基于酶催化的核酸反应，设计了人工时序信号调控网络，精准控制了单一瞬态信号的多相行为、重复频率及多重信号的时间顺序。（3）网络的系统功能开发：在上述网络基础上，进一步实现了仿生核酸分子网络与下游生物功能系统的整合，成功进行了网络主导下的逻辑运算、RNA 转录以及生物催化功能的可编程调控。

关键字 功能核酸，时序调控，浓度信息解码，系统化学，生物功能调控

参考文献

1. Kholodenko, B. N. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **2006**, 7: 165–176.
2. Yue, L.; Wang, S.; Zhou, Z.; Willner, I. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142: 21577–21594.
3. Yue, L.; Wang, S.; Willner, I. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142: 14437−14442.
4. Yue, L.; Wang, S.; Wulf, V.; Willner, I. *Nat. Commun.* **2019**, 10: 4774.
5. Yue, L.; Wulf, V.; Wang, S.; Willner, I. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58: 12238–12245.
6. Yue, L.; Wang, S.; Willner, I. *Sci. Adv.* **2019**, 5: eaav5564. 18.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于功能核酸的靶向蛋白降解技术的开发及生物医学应用

张晶晶*[1]、展佳愔[1,2]
1. 南京大学
2. 长春理工大学

靶向蛋白降解技术，尤其是蛋白水解靶向嵌合体（PROTACs），已成为药物开发领域的热点之一，它们通过利用细胞内的蛋白降解机制，精准地清除疾病相关的蛋白质。然而，当前的 PROTAC 技术仍面临诸多挑战，如提高肿瘤选择性、实现按需蛋白降解、确保在复杂生物环境中的稳定性和活性，以及深入探索其降解机制等。在此背景下，我们课题组深入探索了功能核酸[1]，特别是核酸适体（Aptamer）在靶向蛋白降解技术中的应用。我们成功开发了两种创新技术：一种是新型 PROTAC（PS-ApTCs），通过引入硫代磷酸全修饰的适体分子，实现了对核质穿梭蛋白的肿瘤靶向和时空选择性降解，并与适体-药物偶联物协同作用，为肿瘤联合治疗提供了新的策略[2]；另一种是 miRNA 启动的预组装 PROTAC（miRiaTAC）平台（图 1）[3]，该平台能够基于细胞类型特异性，按需激活和终止目标蛋白的降解，展现出卓越的肿瘤选择性和极低的系统毒性。通过巧妙地引入光敏基团和不同配体分子，该平台还实现了 DNA 组装/解组装过程中预组装 PROTAC 的精确光学控制以及多靶点正交降解，并结合近红外光介导的光动力疗法，显著提升了抗癌效果。

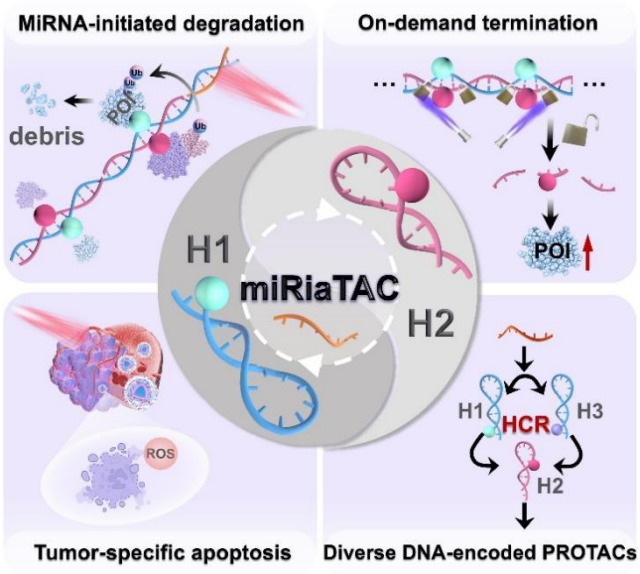


图1. miRiaTAC平台，实现细胞选择性的靶向蛋白质降解、按需激活和终止。

关键字 功能核酸，靶向蛋白降解，生物医学应用

参考文献

1. R. Liu, D. Jiang#, Y. Yun, Z. Feng, F. Zheng,* Y. Xiang,* H. Fan, **J. Zhang***, *Angew. Chem. Int. Ed*. **2024**, *63*, e202315536.
2. R. Liu, Z. Liu, M. Chen, H. Xing, P. Zhang*, **J. Zhang***, *Chem. Sci.*, **2024**, *15*, 134-145
3. J. Zhan, X. Li, Z. Feng, Z. Liu, Z. Feng, J. Zhu*, **J. Zhang***, *Angew. Chem. Int. Ed*. **2024**, Accepted.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

核酸适体生物传感器设计、组装及其在疾病检测和诊断中的应用

张立云*、韩聪、刘啓瑞、常新颖、贾超
南开大学

核酸适配体是一种能够高亲和力和特异性结合靶标分子的 DNA 或 RNA 单链短序列，被称为“化学抗体”。与抗体相比，核酸适配体具有诸多优势：可化学合成，成本低廉、批次间差异小、易于修饰、热稳定性高等优点。课题组近年来基于核酸适配体设计开发了多种电化学或荧光生物传感平台，用于检测病毒抗原和卵巢癌外泌体，为疾病的早期诊断提供了新的思路和方法。报告人将对核酸适配体生物传感器设计及应用中的关键科学问题，结合课题组最新进展进行深入讨论。

关键字 核酸适体，生物传感器，病毒检测，卵巢癌，早期诊断

参考文献

1. Han, C.; Liu, Q.; Luo, X.; Zhao, J.; Zhang, Z.; He, J.; Ge, F.; Ding, W.; Luo, Z.; Jia, C.et al. Development of a CRISPR/Cas12a-mediated Aptasensor for Mpox Virus Antigen Detection. *Biosensors and Bioelectronics* **2024**, 116313.
2. Ge, F.; Ding, W.; Han, C.; Zhang, L.; Liu, Q.; Zhao, J.; Luo, Z.; Jia, C.; Qu, P.; Zhang, L. Electrochemical Sensor for the Detection and Accurate Early Diagnosis of Ovarian Cancer. *ACS Sensors* **2024,** *9* (6), 2897.
3. Han, C.; Xing, W.; Li, W.; Fang, X.; Zhao, J.; Ge, F.; Ding, W.; Qu, P.; Luo, Z.; Zhang, L. Aptamers dimerization inspired biomimetic clamp assay towards impedimetric SARS-CoV-2 antigen detection. *Sensors and Actuators B: Chemical* **2023,** *380*, 133387.
4. Han, C.; Li, W.; Li, Q.; Xing, W.; Luo, H.; Ji, H.; Fang, X.; Luo, Z.; Zhang, L. Crispr/cas12a-derived electrochemical aptasensor for ultrasensitive detection of covid-19 nucleocapsid protein. *Biosensors and Bioelectronics* **2022,** *200*, 113922.
5.Wang, J.; Fang, X.; Zhang, C.; Ji, H.; Pang, Q.; Li, X.; Luo, Z.; Wu, Q.; Zhang, L. Development of Aptamer-Based Molecular Tools for Rapid Intraoperative Diagnosis and In Vivo Imaging of Serous Ovarian Cancer. *ACS Applied Materials & Interfaces* **2021,** *13* (14), 16118.
6.Zhang, L.; Fang, X.; Liu, X.; Ou, H.; Zhang, H.; Wang, J.; Li, Q.; Cheng, H.; Zhang, W.; Luo, Z. Discovery of sandwich type COVID-19 nucleocapsid protein DNA aptamers. *Chemical Communications* **2020,** *56* (70), 10235.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

功能核酸分子辅助构建 MRI 探针实现活体病原菌的精准原位成像

宋尔群*、李渝、李云鹤、李林瑶、张亚青
西南大学

细菌感染严重威胁着人类的健康和安全，因此准确快速诊断细菌感染迫在眉睫。病变部位的精确定位是临床及时诊断和治疗细菌感染的关键步骤。开发非侵入性成像技术以高特异性检测细菌感染至关重要，以便患者能够及时有效地接受治疗。由于其高空间分辨率、非放射性、高软组织对比度和不受限制的穿透深度，磁共振成像（MRI）是一种非侵入检测细菌感染的理想策略。然而常规 MRI 探针由于缺乏特异性或信号总是“开启”导致非特异性的信号增强，不利临床准确判断。核酸分子由于其可编辑、易获得、功能多样化等优异性能，在各个领域得到了广泛的研究和应用。在我们的研究中，以功能核酸为靶向单元、pH 响应单元、酶切单元等，辅助构建了系列智能 MRI 探针，用于体内细菌感染的精确成像。核酸分子的靶向性以及对病理微环境酸、酶的特异响应性，显著提高 MRI 信噪比，改善了细菌感染组织和无菌炎症组织之间的区别，为准确检测体内细菌感染提供了一种有前景的方法。

关键字 功能核酸，磁共振成像，探针，致病菌

参考文献

1. Y.Q. Zhang, M.Q. Hao, L.Y. Li, Q. Luo, S.Y. Deng, E.Q. Song. *Trac-Trends Anal. Chem.* **2023**, 159, 116916
2. Li, L.Y.; Liu, M.J.; Deng, S.Y.; Zhu, X.K.; Song, E.Q. *Acta Biomater.* **2023**, 164, 487-495
3. Li, L.Y.; Liu, M.J.; Deng, S.Y.; Zhu, X.K.; Song, E.Q. *Small* **2023**, 202208249
4. Gu, Y. Li, L. Li, S. Deng, X. Zhu, Y. Song, E. Song*, W. Tan. *ACS Nano* **2023**, 17, 24384-24394.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于 DNA 限域结构的生物传感新策略

柯国梁*
湖南大学

复杂生物体系具有分子状态变化快、靶标分子类似物多、不同体系丰度差异大等特征，因此亟需发展快速响应、高选择性、动态可调的高性能生物传感新方法，以满足复杂生物体系中的精准化学测量需求。近年来，我们以具有优异的可寻址性、纳米级空间分辨率和良好的动态可调性质等优点的 DNA 纳米结构为工具，结合分子工程技术和生物传感技术，构建了系列高效的 DNA 限域结构，并发展了基于 DNA 限域结构的高性能生物传感新策略，构建了系列快速响应、高选择性、动态可调的新型生物传感探针，为生物分析化学提供新工具。

关键字 DNA 纳米技术，CRISPR，生物传感，分子筛

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

精准识别与化学发光探针研究

王雪强*、张国荣、贺玉婷、张晓静
中国科学院杭州医学研究所

重大疾病的早期发现和精准治疗变革性技术的发展通常依赖于高特异性和高灵敏度分子诊疗工具的集成创新。核酸适体不仅具有特异性识别肿瘤细胞并能以高亲和力与之结合的特点，有效利用核酸适体的可设计性对其价态进行精准编程，有望为分子医学中的精准识别提供全新的分子探针。化学发光技术具有灵敏度高、特异性强、线性范围宽及无需外部光源等突出优势，被广泛应用于临床诊断中。精准识别与化学发光探针的集成创新有望为理解研究疾病发生发展过程中的分子事件提供重要的分子工具，推动恶性肿瘤等重大疾病临床诊疗技术的发展。课题组围绕双特异性核酸适体和新型化学发光探针开展了系统性研究，获得了一系列双特异性新型识别探针和生物影像探针。

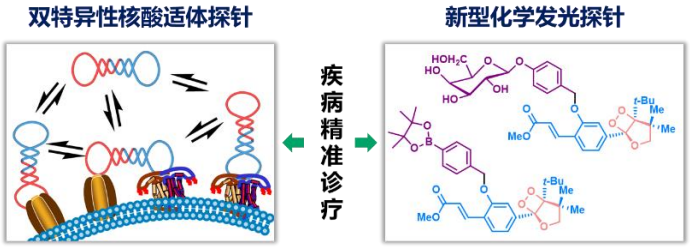


图1. 精准识别与化学发光探针

关键字 核酸适体，化学发光，精准诊疗

参考文献

1. Ai, L.; Peng, T.; Li, Y.; Kuai, H.; Sima, Y.; Su, M.; Wang, D.; Yang, Q.; Wang, X.-Q.*; Tan, W. * *Angew. Chem. Int. Ed*, **2022**, **61**, e202109500.
2. Zhang, X.; Zhao, Z.; Wang, X.; Su, M.; Li, Y.; Yuan, Q.; Wang, X.-Q.*; Tan, W. *Nat. Sci. Rev.* **2023**, **10**, nwac107.
3. Zhang, G.; Tan, W.; Wang, X.-Q.* *ACS Nano*, **2023**, **17**, 15146.
4. Zhang, G.; Zhang, C.; Fu, T.; Tan, W.; Wang, X.-Q.* *JACS Au,* **2024**, *accepted.*
5. Li, S. H.; Zhang, G. R.; He, Y. T.; Yang, L.; Li, H. L.; Long, C. Y.; Cui, Y.; Wang, X. Q. *Anal. Chem.* **2023**, 95, 13191.
6. Shang, Q.; Li, S. H.; He, Y. T.; Zhang, Y.; Fu, T.; Han, S. S.; Huang, W.; Wang, X. Q.; Xu, J. H. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 2286.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

金属核酸框架助力光电传感

欧阳湘元*
西北大学

框架核酸是核酸分子（DNA）通过自组装形成的一维到三维的框架结构，不仅能精准定位功能基元，还可在纳米甚至原子级尺度上进行光学和电学等物理性质的调控，以及单分子水平化学与生化反应的精准调控。利用框架核酸对物质进行原子级的人工自组装，可实现基本构筑单元的精准物理排布与功能化集成，进而实现器件制造，有望推动从原子到宏观的精确功能化材料的制备。

我们利用“框架核酸”----DNA 纳米片和 DNA 纳米带为模板实现了金属纳米簇的有序自组装。铜纳米簇(CuNCs)具有卓越的空间定位能力和可编程性，可精细调控金属纳米簇聚集体。研究发现，该组装体比离散铜纳米簇表现出更强的荧光量子产率（~62 倍）和更高的 ECL 效率（~68 倍），应用于荧光检测生物硫醇和 ECL 检测多巴胺，其检测限比之前报道的低 1-2 个数量级。这种自组装策略为开发高性能纳米材料奠定了重要基础，并且在检测分析中具有非常大的应用潜力。

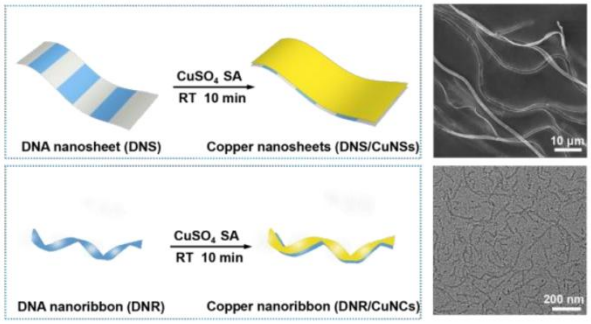


Fig. 1 Self-assembly diagram of copper nanosheets and copper nanoribbons

金纳米簇(AuNSs)是微尺度区域和超薄二维非晶结构，其金属化位点间距最大，金属层最薄，极大地丰富 DNA 基纳米材料。该组装体对葡萄糖的非酶氧化表现出比离散金纳米簇更高的电催化活性。所提出的合成策略为具有增强性能和多种功能的超薄二维非晶贵金属纳米结构开辟了新的途径，这可能会扩展我们对潜在基础科学的理解，并导致前所未有的现象和性质的揭示。

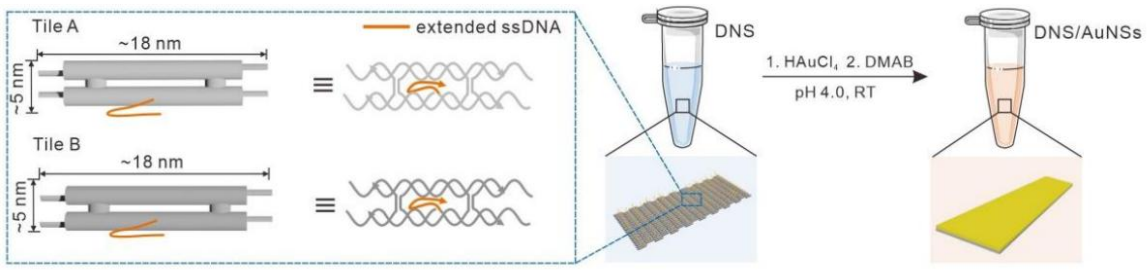


Fig. 2 Schematic illustration of the synthesis method of gold nanosheets

关键字 框架核酸，铜纳米簇，金纳米簇，自组装

参考文献

1. Ouyang, X. Y.; Wang, M. F.; Guo, L. J.; Cui, C. J.; Liu, T.; Ren, Y. A.; Zhao, Y.; Ge, Z. L.; Guo, X. N.; Xie, G.; Li, J.; Fan, C. H.; Wang, L. H. Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, 59(29): 11836.
2. Ouyang, X. Y.; Wu, Y. L.; Gao, Y. J.; Li, L. Y.; Li, L.; Liu, T.; Jing, X. X.; Fu, Y.; Luo, J.; Xie, G.; Jia, S. S.; Li, M. Q.; Li, Q.; Fan, C. H.; Liu, X. G. J. Am. Chem. Soc. **2023**, 145(8): 4553.
3. Ouyang, X. Y.; Wu, Y. L.; Guo, L. J.; Li, L.; Zhou, M.; Li, X. Y.; Liu, T.; Ding, Y. W.; Bu, H. Y.; Xie, G.; Shen, J. L.; Fan, C. H.; Wang, L. H. Angew. Chem. Int. Ed. **2023**, e202300893.
4. Li, L., Ding, Y., Xie, G., Luo, S. H., Liu, X. G., Wang, L. H., Shi, J. Y., Wan, Y., Fan, C. H., Ouyang, X. Y. Angew. Chem. Int. Ed. **2024,** 136(10): e202318646.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

核酸功能材料助力细胞和囊泡传感

姚池*
天津大学

恶性肿瘤等疾病的精准诊疗对生物体系中活细胞和胞外囊泡的分子识别与传感提出重大需求。从生物样本中特异性识别活细胞和胞外囊泡，进一步对其中重要生物组分的分布和活性进行精准测量，可以为重大疾病的早期诊断、机理阐释、疗效监测等提供重要依据。然而，生物体系成分复杂，靶标细胞/囊泡在其中的丰度低，且组分随时空动态变化，严重影响了分子识别的灵敏度和特异性，以及测量过程的可控性。因此，亟需发展高特异性、高灵敏度和时空可控的化学测量新工具、新方法和新技术，以满足复杂生物体系中细胞/囊泡精准分子识别与传感的需求。我们从创制多聚功能核酸分子工具入手，以复杂生物体系中的活细胞和胞外囊泡为研究对象，围绕“构建功能核酸元件，实现细胞/囊泡精准分子识别与传感”这一主题开展研究，主要研究进展包括：1）构建了多聚功能核酸元件作为分子识别新工具，提升了与细胞/囊泡内外分子结合的协同作用力，提高了对低丰度靶标的分子识别灵敏度；2）建立了核酸网络在细胞/囊泡界面分子识别和原位组装的新方法，提高了对复杂体系中靶标识别的特异性；3）发展了核酸探针在细胞/囊泡内分子识别和响应的新技术，提高了对活体中靶标动态分子信号识别与传感的稳定性，为重大疾病精准诊断等生物医学领域的应用奠定了基础。

关键字 细胞分析，细胞外囊泡，生物识别，生物传感，生物分离

参考文献

1. J. Tang[+], X. Jia[+], Q. Li[+], Z. Cui, A. Liang, B. Ke, D. Yang*, C. Yao*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **2023**, 120, e2303822120.
2. Y. Guo, S. Li, Z. Tong, J. Tang, R. Zhang, Z. Lv, N. Song, D. Yang*, C. Yao*, *J. Am. Chem. Soc.* **2023,** 145, 23859.
3. C. Yao[+], R. Zhang[+], J. Tang, D. Yang*, *Nat. Protoc.*, **2021**, 16, 5460.
4. C. Yao[+]*, Y. Xu[+]; J. Tang, P. Hu, H. Qi, D. Yang*, *Nat. Commun.*, **2022**, 13, 7739.
5. C. Yao[+], C. Zhu[+], J. Tang, J. Ou, R. Zhang, D. Yang*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, 143, 19330.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

纳米蛋白组学与癌症诊断

刘远*
中国科学院杭州医学研究所

深入的蛋白质组学对于疾病生物标志物发现和精准医学至关重要。质谱技术的进步显著扩大了蛋白质组学的覆盖范围。然而，蛋白质组学仍然落后于基因组学，特别是在基于血液的蛋白质组学方面，其全面性仍不及细胞和组织的蛋白质组学。最近，我们开发了一种基于纳米颗粒的血清蛋白捕获 ProteoFish 平台，用于非小细胞肺癌 (NSCLC) 诊断。该平台通过纳米颗粒蛋白冠的形成实现了更高的血清蛋白质组学覆盖率，促进了非小细胞肺癌生物标志物的发现和诊断。此外，我们还建立了基于 ProteoFish 的基于 CRISPR/Cas12a 的正交多重适体传感平台，证明临床血清样本形成的纳米颗粒蛋白冠具有癌症特异性。此外，我们开发了一种蛋白质变性策略，通过纳米蛋白冠增强血清蛋白质组深度，从而提升癌症诊断准确率，该策略将为癌症生物标志物发现和诊断提供更多临床转化应用机会。

关键字 纳米蛋白冠，蛋白标志物，癌症诊断

参考文献

1. Yueli Xie, Mengjie Wang, Haoxiang Guo, Baichuan Jin, Chenlu Xu, Xin Dai, Yiyang Fu, Ze Wang, Weizhao Yao, **Yuan Liu***, WeihongTan. Protein denaturation for in-depth serum proteome profiling and enhanced cancer diagnosis. ***Nano Today***, 2024, 59, 102488.

2. Lichao Wang, Xu Yang, Yueli Xie, Chenlu Xu, Xin Dai, Mengjie Wang, **Yuan Liu***. Nanoparticle protein Corona-Based Tissue Proteomics for the Aging Mouse Proteome Atlas. ***Anal. Chem.*** 2024, 96, 14363.

3. Shuangqin Li, Baichuan Jin, Yintao Ma, Xu Yang, Jinlong Fan, Yueli Xie, Chenlu Xu, Xin Dai, Mengjie Wang, Qiqi Liu, Ting Fu, **Yuan Liu***, Weihong Tan*. Proteome Fishing for CRISPR/Cas12a-Based Orthogonal Multiplex Aptamer Sensing. ***J. Am. Chem. Soc.*** 2024, 146, 19874.

4. Mengjie Wang, Xin Dai, Xu Yang, Baichuan Jin, Yueli Xie, Chenlu Xu, Qiqi liu, Lichao Wang, Lisha Ying, Weishan Lu, Qixun Chen, Ting Fu, Dan Su*, **Yuan Liu***, and Weihong Tan*. Serum Protein Fishing for Machine Learning Boosted Diagnostic Classification of Small Nodules of Lung. ***ACS Nano.*** 2024, 18, 4038.

5. Yuan Liu, Junqing Wang, Qingqing Xiong, Daniel Hornburg*, Wei Tao*, Omid C Farokhzad*. Nano-bio interactions in cancer: from therapeutics delivery to disease detection. ***Acc. Chem. Res.*** 2021, 54, 291.

6. Yuan Liu, Yu Yang, Yujia Sun, Jibin Song, Nicholas G Rudawski, Xiaoyuan Chen*, Weihong Tan*. Ostwald ripening-mediated grafting of metal-organic frameworks on a single colloidal nanocrystal to form uniform and controllable MXF. ***J. Am. Chem. Soc***. 2019, 141,7407.

7. Yuan Liu, Daniel L. Purich, Cuichen Wu, Yuan Wu, Tao Chen, Cheng Cui, Liqin Zhang, Sena Cansiz, Weijia Hou, Yanyue Wang, Shengyuan Yang, Weihong Tan*. Ionic functionalization of hydrophobic colloidal nanoparticles to form ionic nanoparticles with enzymelike properties. ***J. Am. Chem. Soc.*** 2015, 137, 14952.

8. Yuan Liu, Tao Chen, Cuichen Wu, Liping Qiu, Rong Hu, Juan Li, Liqin Zhang, Cheng Cui, Guizhi Zhu, Mingxu You, Tao Zhang, Weihong Tan*. Facile surface functionalization of hydrophobic magnetic nanoparticles. ***J. Am. Chem. Soc.*** 2014, 136, 12552.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

数字式单分子检测技术与应用

李朝辉*
郑州大学化学学院、郑州大学第一附属医院

生物标志物的探测和鉴定能够反映机体在生理或病理状态下的状况，是疾病诊断、预后评估和治疗效果监控的重要工具。然而，生物标志物在疾病诊疗中的应用也面临一系列挑战。首先，目前已知的生物标志物种类较少，且多数特异性较低，无法满足多样化的临床需求；其次，低丰度标志物的精确测量和发现面临技术瓶颈；再者，如何在珍贵样本体积极小的条件下进行精确测定，也是一个待解决的问题。目前广泛应用于生物标志物检测的方法主要有酶联免疫吸附试验（ELISA）和化学发光免疫测定，这些传统方法虽然已在临床实践中取得一定成效，但由于其灵敏度和精确度有限，无法满足对低丰度生物标志物的精确测定需求。近年来，数字式单分子免疫阵列技术的出现，为生物标志物检测开启了新的方向。单分子微阵列技具有灵敏度高、检测范围宽、低耗时等诸多优势，在疾病诊断和预后评估等领域展示出巨大的应用潜力。我们团队充分利用单分子微阵列技术的优势，针对神经退行性疾病、生殖健康、肿瘤等领域，发展了多种可应用于临床的生物标志物检测试剂盒，为生物标志物的新型应用、新型标志物的发现，乃至生物医学领域的新型理念和新型方法的探索，提供了新的视角和工具。

关键字 单分子检测；生物标志物；疾病诊断

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

多价核酸适体纳米载体的构建及其高稳定性体内靶向成像分析

张玉、丁中祥、刘洪林*
合肥工业大学

核酸适体在生物医学应用中引起了极大的兴趣，但也面临着重大挑战，尤其是在体内稳定性方面。我们小组开发了一种基于多价核酸适体和蛋白质的纳米载体，命名为 pAPNC，其由 BSA 核和多价 XQ-2d 适体壳制成。pAPNC 在血清和 DNase I 中可稳定存在 72h 和 96h；对 CD71 亲和力比 XQ-2d 高 30%；对 Dox 负载率比 XQ-2d 高 5 倍；比 XQ-2d 具有更长的体内成像能力。提高的 Dox 负载效率来自 DNA 链内蛋白质-DNA 的互作和协同电荷效应；空间位阻、静电排斥及适体聚集在蛋白表面的增强了 pAPNC 的核酸酶抗性。pAPNC@Dox 可损伤 52.5%癌细胞，比游离 Dox 提高 49%，比 XQ-2d@Dox 提高 23%，这一特性可归因于核酸酶抗性和受体可及性增强。最后，利用 XQ-2d 和 GNP 构建了超高密度球形核酸，实现了分子事件的原位靶向跟踪。该开创性平台为生物医学领域靶向治疗和成像方式的革新提供了新思路。

关键字 核酸适体，纳米载体，核酸酶抗体，受体可及性，载药效率，稳定性

参考文献

1. Zhang, Y.; Dong, Q.; Xiao, J,; Fang,X.; Huang, W; Li, Q.; Chen, Z.; Liu, H.; Tan, W., CCS Chem. **2024**, Just Published.
2. Ding Z.; Gao H.; Wang C.; Li Y.; Li N.; Chu L.; Chen H.; Xie H.; Su M.; Liu H., Angew. Chem. Int. Ed. **2024**, 63, e202317463.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

利用核酸适体扭转蛋白质相互作用不可成药性

魏永*
中国科学院杭州医学研究所

本研究以 MYC 蛋白的复杂相互作用网络为例，探讨靶向干预“不可成药”相互作用及其动态调控的挑战。我们首先解析了“不可成药”蛋白质相互作用的分子机制，阐明这些相互作用在生物学功能及其在肿瘤中的作用机制。研究揭示了“不可成药”蛋白质在调控蛋白质功能中的关键角色，为靶向这些相互作用提供了理论基础。

为解决“不可成药”蛋白质因缺乏经典药物结合位点而难以干预的问题，我们创新性地利用核酸适体识别靶标不需要经典药物口袋的特点，开发了功能驱动的 Blocker-SELEX 核酸适体筛选策略。该策略用于定向筛选能够特异性阻断“不可成药”蛋白质相互作用的功能性核酸适体。通过这一策略，我们成功筛选出多种竞争性核酸适体，这些适体在体外和体内实验中展现出有效的干预能力。其中部分核酸适体在小鼠模型中表现出显著的抗肿瘤效果，目前正处于临床前研究阶段。

此外，我们运用生物物理学和结构生物学技术，详细解析了核酸-蛋白质相互作用的分子机制，阐明了这些相互作用的构效关系。这些研究不仅深化了对“不可成药”蛋白质相互作用机制的理解，还为开发以核酸适体为基础的新型药物提供了重要的理论支持和技术路径，显著推动了针对“不可成药”蛋白质相互作用的化学工具开发。

关键字 竞争性核酸适体，蛋白质相互作用，不可成药性

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于理论指导的多模态核酸适体传感体系及其在毒物分析的应用

程欢、陈嫣月、刘明佳、李玉龙、胡蓉*
云南师范大学

毒素分子，如赭曲霉毒素 A （OTA）等具有潜在的肾毒性、致癌性、遗传毒性和免疫毒性，对人类健康构成重大风险。由于核酸适体具有高亲和力和特异性、良好的稳定性和成本效益，它们已被广泛应用于各种检测技术领域。为了实现有效的最终输出，设计合适的信号标签是至关重要的，它可以准确地将生物识别事件转换为电化学和视觉信号等多种信号，这对于开发用于毒素分子检测的多模态生物传感器至关重要，可以有效提高传感体系的准确性与可信度。利用密度泛函理论方法，本文在理论指导下设计并合成了一系列信号标签物质，并发现其具有优异的类氧化酶活性。基于此，我们构建了一系列多模态核酸适体传感体系用于毒素分子的检测。通过分子对接计算，核酸适体与毒素分子能够稳定的结合。所构建的传感体系分析性能好（灵敏度高、选择性好、可信度高），且实际样品的检测结果与商业试剂盒的结果一致。

关键字 核酸适体，毒素，多模态，理论指导

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

纳米孔晶体微流控平台在肿瘤外泌体正交分析中的应用

雷燕梅*
西南大学

肿瘤外泌体（tExo）的分子分型展现了其作为早期癌症诊断非侵入性方法的巨大潜力。然而，现有技术在分析 tExo 时仍然面临巨大的挑战，这主要由于细胞外囊泡的异质性、复杂的周围环境以及 tExos 的稀缺性。我们开发了一种纳米孔晶体微芯片上外泌体的表面双肿瘤蛋白正交分析（SIGNET）的多维微流控平台，该平台在胰腺癌（PC）患者少量血浆样本中能够灵敏且准确地检测 tExos。SIGNET 利用一对针对外泌体上 PC 相关蛋白标记物（核仁素和 EpCAM）的变构适配体，创建了一种正交身份编码，并通过微芯片的纳米孔晶体效应放大标记 tExos 上的荧光信号，从而显著提升了在复杂临床环境中的检测特异性和灵敏度。该平台能够以 100%的灵敏度和 96.0%的特异性区分非转移性 PC 患者与胰腺炎患者，准确率达到 97.8%。此技术为早期癌症检测、治疗和监测提供了强有力的液体活检工具。

关键字 肿瘤外泌体，微流控平台，纳米孔晶，变构适配体；液体活检

参考文献

1. R. Kalluri, V. S. LeBleu, *Science* **2020**, *367*, 640.
2. J. D. Spitzberg, S. Ferguson, K. S. Yang, H. M. Peterson, J. C. T. Carlson, R. Weissleder, *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 1239.
3. Y. Chen, Q. Zhu, L. Cheng, Y. Wang, M. Li, Q. Yang, L. Hu, D. Lou, J. Li, X. Dong, L. P. Lee, F. Liu, *Nat. Methods* **2021**, *18*, 212-218.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

可编程核酸探针用于肿瘤的精准诊断

宋萍*
上海交通大学

核酸作为一种生物信息材料，其结构、尺寸已知，随着研究的深入，热力学和动力学行为也得到越来越精准的计算和预测。因此利用核酸碱基互补配对的性能，可以实现核酸的可编程性，有望解决临床诊断中重要的科学问题。我们课题组基于可调控和精准计算的核酸杂交热力学能，采用点击化学将酶和 DNA 进行连接，构建了 DNA 和酶复合的超级大分子，使得酶在限域空间内可以高效的发生级联反应，用来检测低浓度的疾病代谢物[1]。同时引入茎环结构和 DNA 链取代反应，实现不同酶体系的可控组装，进而实现对不同代谢物的按需检测。除了代谢物的检测，我们更关注核酸分子点突变[2-4]、融合基因[5]和 RNA 剪接变异体的高灵敏检测。我们结合计算机的高通量计算和可编程设计，构建了抑制探针放大技术，可以实现针对放大区间内任何碱基突变的精准放大，在不使用分子标签基础上，实现对 0.019% 突变频率的检测，同时检测成本降低 50 倍，并应用于黑色素肿瘤 145 个突变位点，非小细胞肺癌 528 个突变位点，结直肠癌 286 个突变位点及肝癌 440 个突变位点等的临床精准诊断中[2-3]，该检测限也可满足微小细胞病灶（MRD）的精准检测。同时基于温度和盐浓度对核酸杂交热力学能的影响和调控，我们优化设计，构建了针对肿瘤组织检测中热点突变的高通量检测，实现一重设计就可以检测 81 个突变位点，较常规方法节约了 80 个探针，并且可以实现单管快速检测，有望应用在肿瘤的早期和术后精准诊断中。

关键字 核酸探针，热力学能，突变检测，融合基因，肿瘤诊断

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

核酸分子识别与精准化学调控

吴振坤*
湖南大学

实现时间和空间维度的生物分子可控分析，对于研究生物分子的结构、功能与相互作用，揭示相关疾病发生机制以及发展精准诊疗技术具有重要意义。本报告聚焦核酸分子精准化学修饰技术，通过在核酸不同结构区域特异性引入化学修饰基团，丰富核酸分子化学多样性并提高其结构稳定性，实现对核酸功能精准化学调控。首先，我们发展了特定核酸碱基表观遗传修饰策略，构建了细胞和活体环境中对功能核酸催化活性调控平台，实现了对修复酶介导的 DNA 损失修复过程监测以及细胞特异性基因表达调控。其次，我们发展了核酸生物正交化学修饰策略，通过在功能核酸特定骨架位点引入正交响应化学，建立了小分子诱导激活的核酸功能调控策略。最后，我们发展了核酸 2-羟基位点化学修饰策略，通过在 2-羟基位点引入特定内源分子响应的化学修饰基团，实现了 RNA 功能细胞特异性调控与成像研究。

关键字 核酸，化学修饰，可控激活，精准成像

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

病毒样颗粒介导的肿瘤免疫治疗

范换换*
南京大学

异常定位的核酸（如病毒的入侵）被视为先天免疫中的病原相关分子模式（PAMPs），可以触发核酸相关的模式识别受体（PRRs），激活相关信号通路，产生 I 型干扰素和促炎因子。因为先天免疫的激活能够进一步增强适应性免疫，所以利用核酸的固有免疫原性开发核酸药物能够为肿瘤免疫治疗开辟新途径。值得注意的是，核酸介导的先天免疫反应依赖于模式识别受体的构象变化，尤其是受体的寡聚或多聚，而具有高级结构的核酸（如病毒的遗传物质）显示了出更强的激活能力。因此，开发具有高级结构的核酸纳米材料能够增强先天免疫受体激活，进一步放大肿瘤免疫。我们首先合成了一种 DNA 病毒样颗粒，该颗粒由滚环扩增反应（RCA）产生的长链 DNA 自组装而成，并被阳离子脂质体覆盖。基于其长而密的 DNA 结构，该颗粒能够有效地诱导 cGAS 发生液相凝聚，进而激活下游 STING 信号，产生干扰素和促炎因子；此外，该颗粒还可以触发 AIM2 炎症小体的形成，诱导 GSDMD 介导的细胞焦亡，增强肿瘤免疫。随后，我们构建了另一种 RNA 病毒样颗粒，该颗粒由滚环转录反应（RCT）产生的长链 RNA 自组装而成，并被阳离子脂质体覆盖。它不但可以作为纳米佐剂高效激活 RIG-I/MDA5 信号通路，内部包含的 siRNA 还可以有效地抑制 CD47-SIRPα 免疫检查点，增强抗原呈递细胞对肿瘤细胞的吞噬，进而增强肿瘤免疫。两种病毒样颗粒都在小鼠活体实验中表现出了较好的抗肿瘤免疫治疗效果，为癌症免疫治疗的临床应用提供了简单且有效的策略。

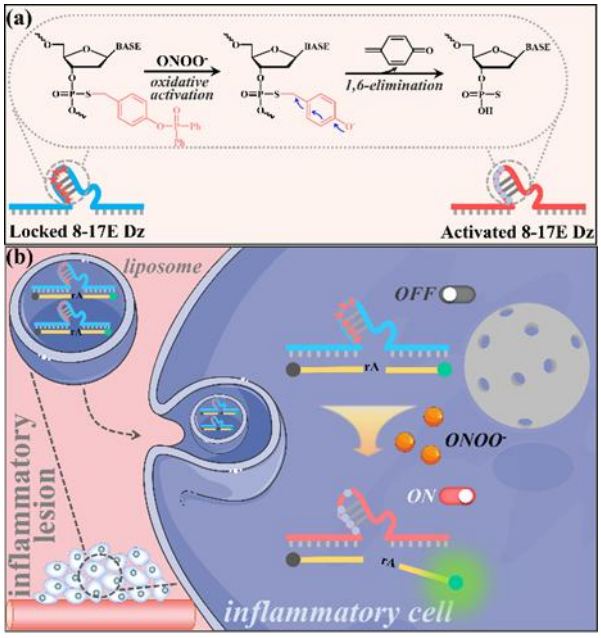
关键字 DNA，RNA，病毒样颗粒，先天免疫，肿瘤免疫治疗

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

过氧亚硝酸根激活型 DNAzyme 探针的制备及应用

孟红敏，王沛，袁昆，李朝辉*
郑州大学

DNAzyme 是通过体外筛选得到的具有催化特性的单链核酸分子，目前已被应用于体内外多种金属离子、生物分子的检测。而通过对其进行化学修饰有望进一步拓宽其靶标范围。活性氧（ROS）是许多细胞的关键代谢物，细胞内高浓度 ROS 是导致免疫反应、癌症和衰老的关键因素。其中一种特别严重的情况是氧化氮（NO）与超氧化物（O_2^-）的扩散导致自由基偶联形成过氧亚硝酸盐（$ONOO^-$）。ONOO-与多种疾病有关，包括糖尿病、阿尔茨海默病、癌症、关节炎等。本论文以 Zn^{2+}依赖型的 8-17E DNAzyme 为催化单元，通过使用具有 ONOO-特异性识别的 PO-Br 小分子进行位点修饰以封锁其酶活性，构建了一种 $ONOO^-$激活型 DNAzyme 探针。本论文构建了后修饰的 DNAzyme 探针对 ONOO-进行特异性检测,基于靶标物浓度与功能化探针的相关性，发展靶标响应型核酸探针策略，并结合 DNAzyme 切割 RNA 的循环放大能力，实现功能核酸探针在 ROS 传感领域的应用。



关键字 功能核酸，碱基修饰，DNAzyme，核酸探针，过氧亚硝酸根

参考文献

1. Xiao L, Gu C, Xiang Y. Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58,14167-14172.
2. Cai W, Liu J, Chen X, et al. J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 22272-22280.
3. Wang R, He W, Yi X, et al. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145,17926-17935.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

DNA 无膜细胞器用于活体水平下的细胞命运调控研究

张丽丽*[1]、毕赛[1]、张晓兵[2]、柯国梁[2]、刘艳岚[2]、谭蔚泓[2]
1. 青岛大学
2. 湖南大学

近年来，纳米药物在抗肿瘤药物递送和改善癌症治疗效果等方面显示出极大的应用价值和开发前景。其中，液-液相分离形成的凝聚体因其具有水溶性、高电荷密度、负载条件温和简单等优势，已成为调控肿瘤细胞命运的新兴分子工具。这一工具一经提出，便受到了科研工作者的不断关注。尽管不断取得进展，但基于凝聚体的细胞命运调控研究仍然有限，原因在于液液相分离是非共价相互作用介导的动态结构，其结构稳定性、多功能性和分子通讯之间的平衡关系趋向复杂，导致无膜凝聚体在复杂生理环境中的干预作用难以充分发挥。本研究针对凝聚体的复杂生物应用问题，围绕自稳定和功能增益策略，以多功能纳米材料作为稳定基团，通过触发式激活的方式对活体水平的肿瘤细胞进行分子调控。并在此基础上，创建一种具有高稳定性和生物活性可控的新型 DNA 凝聚体，期望它可以如同细胞内源性的无膜细胞器一样，协调细胞的程序性死亡信号，以实现活体内的癌症管理。同时，这项研究为合成无膜细胞器提供了新的见解，有助于理解和操纵重要的生命过程。

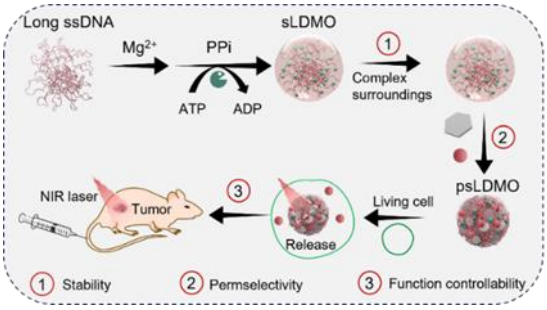


图 1.　DNA 无膜细胞器的细胞命运调控原理图。

关键字 液液相分离，DNA 纳米技术，滚环扩增，凝聚体，癌症治疗

参考文献

1. L. Zhang, R. Abdullah, X. Hu, H. Bai, H. Fan, L. He, H. Liang, J. Zou, Y. Liu, Y. Sun, X. Zhang*, W. Tan*, J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 4282-4290.
2. L. Zhang, L. Wang, X. Yuan, M. Zhong, H. Chen, D. Zhang, X. Han, S. Xie, L. He, Y. Li, F. Chen, Y. Liu*, W. Tan*, Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 10745-10755.
3. L. Zhang, M. Chen, Z. Wang, M. Zhong, H. Chen, T. Li, L. Wang, Z. Zhao, X. B. Zhang, G. Ke*, Y. Liu*, W. Tan*, ACS Cent. Sci. 2024, 10, 1201-1210.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于功能核酸嵌合受体的细胞调控分析研究

李浩*
中山大学

功能核酸主要包括 aptamer（核酸适配体）等。它们具备良好的生物相容性、序列设计性和结构稳定性，因此被广泛用作人工分子识别单元，应用于生物与药物分析等领域。 细胞受体作为天然分子识别单元，是细胞感知外界信号的重要传感器。天然受体配体对的数目有限，现代生物医学迫切需要对细胞膜表面受体赋予新的配体识别特异性，从而可以构建新型细胞受体激动剂。现有的方法主要基于遗传改造，操作难度大。利用核酸适配体与细胞膜表面受体相互作用构建嵌合受体，可以实现全新的基于核酸适配体分子器件的新型受体激动剂的构建，无需对目标细胞进行任何遗传改造，实现对细胞信号通路的激活以及调控细胞行为，在开发新型核酸药物方面具有潜在应用。本文以酪氨酸激酶受体 Met, EGFR 和 FGFR 等为例，研究功能核酸嵌合受体对于细胞行为的调控，并有望应用于溃疡性结肠炎等疾病的改善。

关键字 功能核酸，酪氨酸激酶受体，细胞调控，溃疡性结肠炎

参考文献

1. H. Li, M. Wang, T. Shi, S. Yang, J. Zhang, H. H. Wang*, Z. Nie*, Angew. Chem. Int. Ed., 2018, 57, 10226-10230.
2. H. Li, J. Gao, L. Cao, X. Xie, J. Fan, H. Wang, H. H. Wang*, Z. Nie*, Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 26087-26095.
3. Y. Cong§, K. Liu§, Z. Huang, J. Lu, H. H. Wang, Y. Hong*, Z. Xie*, H. Li*, ACS Chem. Biol. 2024, 19, 1280-1290.
4. K. Liu, Y. Cong, X. Luo, M. Yao*, Z. Xie*, H. Li*, Chin. Chem. Lett., 2024, 10.1016/j.cclet.2024.109839.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于分子逻辑门策略的双模成像探针用于溶酶体分析物的无损原位成像

李珂*
中南大学

原位追踪溶酶体生物标记物有助于揭示复杂的溶酶体相关生物过程和功能。然而，目前的溶酶体成像工具主要基于碱性功能基团，以方便在溶酶体中停留，这通常会导致不可避免的细胞损伤（碱化效应）和假阳性信号。为了解决这些问题，本研究报告了一种新策略，即在酸响应和非侵入性 HD-BTZ 荧光团支架中安装一个 AND 型逻辑门，从而构建精确的溶酶体跟踪探针。一方面，基于 ICT 机制的 HD-BTZ 支架可以对酸环境做出反应，而不会产生碱化效应；另一方面，AND 型逻辑门使得探针只有在输入两个触发信号后才能被激活。作为概念验证，我们在 HD-BTZ 荧光分子支架上集成了刺激响应单元（酶底物或光解保护基团），定制了两种具有 AND 型分子逻辑门的可激活分子探针（HD-BTZ-gal 和 HD-BTZ-photo），分别用于溶酶体中ß-半乳糖苷酶和溶酶体相关自噬的原位追踪。体外实验证明，HD-BTZ-gal 和 HD-BTZ-photo 是真正的 AND 型逻辑门探针，只有在两种因素（ß-半乳糖苷酶和酸，或光和酸）的先后触发下才能被激活，最终产生荧光信号。 正如预期的那样，我们已经验证了探针 HD-BTZ-gal 可成功用于活细胞溶酶体ß-半乳糖苷酶的原位成像，探针 HD-BTZ-photo 可通过监测溶酶体 pH 的动态变化用于自噬的原位追踪。此外，HD-BTZ-gal 还被应用于肿瘤异种移植模型中化疗诱导衰老的原位荧光/光声双模式成像，这表明该策略可为评估和监测老年相关疾病提供有效途径。

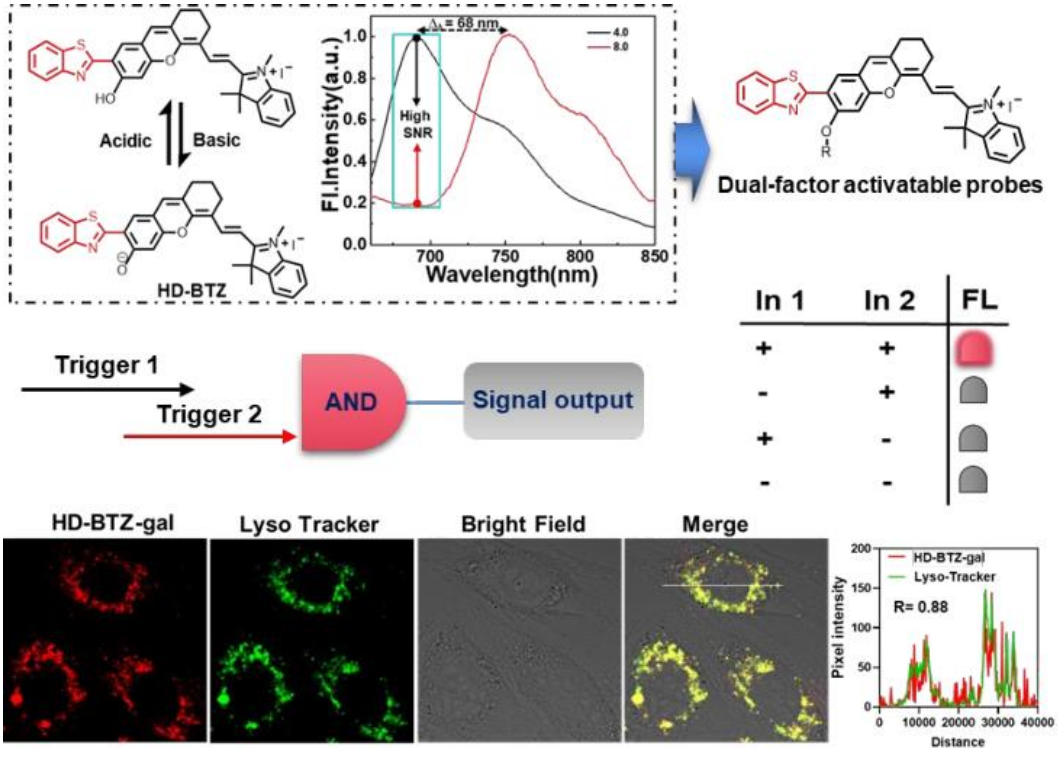


图 1. 激活型 AND 逻辑门探针用于溶酶体分析物以及生物过程的原位成像。

关键字 荧光探针，原位成像，溶酶体

参考文献

1. Li, K.; Xu, S.; Xiong, M.; Huan, S. Y.; Yuan, L.; Zhang, X. B. Chem. Soc. Rev. 2021, 50, 11766-11784.
2. Li, K.; Lyu, Y.; Huang, Y.; Xu, S.; Liu, H. W.; Chen, L.; Ren, T. B.; Xiong, M.; Huan, S.; Yuan, L.; Zhang, X. B.; Tan, W. Proc. Natl. Acad. Sci. 2021, 118, e2018033118.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

靶向核酸 G-四链体的荧光探针设计及临床应用

孙红霞*、姚立
中国科学院化学研究所

G-四链体（G-quadruplex）是由富含鸟嘌呤的 DNA 或 RNA 序列在 K^+或 Na^+等阳离子诱导下通过 Hoogsteen 氢键连接形成的一种非典型核酸二级结构。这种结构广泛分布在人体端粒、癌基因启动子区、mRNA 的内含子、编码区和非翻译区等，在调控基因复制、转录或翻译等生理过程中起着关键作用。G-四链体拥有十分独特的物理化学性质，相对于传统的核酸一级和二级结构更容易被探针/药物分子靶向结合。凭借这些功能和性质，G-四链体被公认为癌症的重要诊疗靶标。靶向识别 G-四链体的探针分子是研究 G-四链体功能机制、筛选靶向药物、发展疾病诊断新技术的必要工具。围绕 G-四链体结构，我们以菁染料或半菁染料为探针分子的母核结构，设计制备了一系列新型荧光分子探针。这些探针不仅能够在溶液体系高灵敏检测特定 G-四链体拓扑结构，而且还实现了在活细胞核染色质、细胞质、核仁、线粒体等不同区域 G-四链体的原位识别。近期，我们又构建了能够识别单个特定基因 G-四链体的高性能探针，为 G-四链体的精准识别开辟了新途径。更为重要的是，我们发展的一些探针在癌症临床诊断中表现出优异性能，在近百例临床样本检测中未出现假阳性和假阴性结果，十分有希望在癌症筛查诊断和预后监测中得到推广应用。

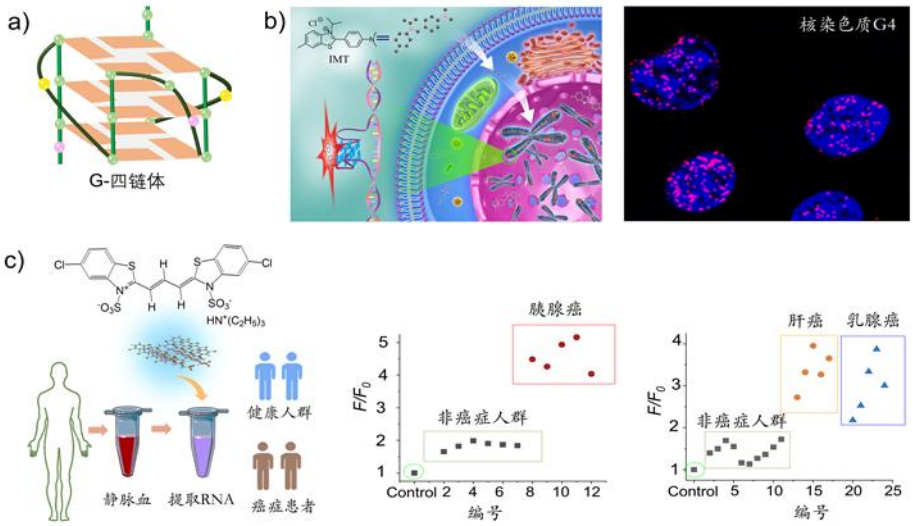


图 1. a）G-四链体结构示意图；b）活细胞核染色质 G4 探针及荧光成像；c）探针在临床诊断应用。

关键字 核酸 G-四链体，荧光探针，肿瘤诊断，临床应用

参考文献

1.H. Sun, R. Sun, D. Yang, et al. A cyanine dye for highly specific recognition of parallel G-quadruplex topology and its application in clinical RNA detection for cancer diagnosis. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 22736–22746.

2. R. Sun, H. Sun, X. Ye, et al. A benzothiazole derivative for differentiating mitochondrial G-quadruplex formation between normal and tumor cells. Sensor. Actuat. B-Chem. 2024, 408, 135524.
3. R. Sun, X. Guo, D. Yang, et al. RNA G-quadruplex in live cells lighted-up by a thiazole orange analogue for SCA36 identification. Int. J. Biol. Macromol. 2023, 229, 724-731.
4. H. Chen, H. Sun, S. Zhang, et al. Monitoring autophagy in live cells with a fluorescent light-up probe for G-quadruplex structures. Chem. Commun. 2019, 55, 5060-5063.
5. S. Zhang, H. Sun, L. Wang, et al. Real-time monitoring of DNA G-quadruplexes in living cells with a small-molecule fluorescent probe. Nucleic Acids Res. 2018, 46, 7522-7532.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

脱氧核酶在疾病诊疗方面的应用

王慧敏*、刘雅琪、翁本锐、杨慧然、孙玉东
三峡大学

脱氧核酶（DNAzyme）是利用体外分子进化技术合成的一类具有催化功能的单链 DNA，最常见的是具有 RNA 切割活性的 DNAzyme 和具有过氧化酶活性的 G-四链体/氯化血红素 DNAzyme，因其易合成、稳定性好、易编程等优点，被广泛应用于生物传感器。我们合成了基于脱氧核酶的级联、多级和自催化核酸信号扩增分子线路，实现了多重信号放大，产生无需外部激发光源的化学发光信号和基于化学发光共振能量转移的发光信号，减少背景信号和提高抗干扰能力，应用于肿瘤标志物的精准检测和细胞成像，为疾病诊断提供新方法。同时，由于脱氧核酶具有识别功能，因此也可以用于致病菌的检测。在疾病治疗方面，由于脱氧核酶具有切割核酸底物的功能，可以用于基因沉默，实现疾病的治疗。并且，通过设计基于化学发光共振能量转移的金属有机框架纳米材料，由肿瘤标志物引发自激活的光动力疗，实现无需外部光源的自发光光动力治疗。

关键字 脱氧核酶，化学发光，化学发光共振能量转移，肿瘤标志物，疾病治疗

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设，
交流形式：报告

基于光激活的数字 RPA/CRISPR-Cas12a 检测法用于快速灵敏地 BK 病毒 DNA 床旁检测

吴泽、付强强、钟文杰、朱文辉、亓涛、郑磊*
南方医科大学南方医院

目的：
BK 病毒（BKV）再激活导致的 BKV 相关性肾病（BKVN）是肾移植失败的主要原因之一，BKV DNA 载量监测具有重要意义。当前 BKV DNA 定量主要通过 qPCR 实现，但对于少量样本仍需要构建标准曲线，且操作复杂、耗时长。因此，开发一种易实现的，无需建立标准曲线就可实现 BKV DNA 的快速准确定量的即时检测（Point-of-care testing, POCT）技术对降低患者医疗负担，提高医疗效率具有重要的意义。
方法：
本研究提出了一种基于光激活的数字 DNA 内切酶靶向 Crispr 反式报告器（Photo-Activated Digital DNA Endonuclease-Targeted Crispr Trans Reporter，pdDETECTR），可用于现场进行的低成本和免构建标曲的病毒 DNA 精准定量。其中，设计合成的光敏 crRNA 使 RPA 与 CRRISPR-Cas12 时序可控，可实现高灵敏 RPA/CRRISPR-Cas12 免开盖一管法检测，开发的基于毛细管的离心式微液滴生成芯片可低成本快速将试剂分割成均一油包水微液滴。本文中使用 BK 病毒-肾移植术后常见的感染病毒-作为模式病毒进行检测验证。设计制作检测装置，优化检测性能，并对肾移植患者尿液样本进行检测。
结果：
本研究成功构建的 pdDETECTR 可在 45 min 内快速特异地对尿液中 BKV DNA 进行精准定量，最低检测限为 103 copies/mL。此外，分别对 68 份肾移植术后患者及 100 份健康人的尿液进行了检测，检测灵敏度为 97.83%，特异性为 100%。与实时定量 PCR（qPCR）方法相比，检测结果显示出良好的一致性。该方法无需核酸提取步骤，可直接对临床样本进行检测。检测其他 DNA 病毒临床样本时均未观察到非特异性交叉反应。
结论：
我们开发的 pdDETECTR 可以进行不依赖标曲的核酸快速精准 POCT 定量，可以实现低成本、便携、易操作的 BKV DNA 精准定量，为肾移植患者提供一种更加便捷和全面的健康管理服务。

关键字 光敏 crRNA，CRISPR-Cas12a，数字化检测，BKV DNA，肾移植术后监测

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

基于 LbuCas13a 靶向 DNA 的超高特异性基因分型平台

刘翼振*、庄松宽、骆思源
深圳大学

Cas13a 通常被认为是一种 RNA 特异性核酸酶，并广泛应用于 RNA 检测。然而，我们意外地发现 LbuCas13a 能够直接靶向 DNA，并且不会受到传统的 Protospacer Adjacent Motif (PAM)序列或 Protospacer Flanking Sequence (FPS)序列限制，如图 1a 所示。这一发现打破了 Cas13a 核酸酶仅特异性靶向 RNA 的传统认知，并为基于 CRISPR 的诊断学开辟了新的可能性[1,2]。特别的，LbuCas13a 在靶向 DNA 时展现出了超高的单核苷酸特异性。当不含人工突变 crRNA 的 LbuCas13a 靶向 dsDNA 或 ssDNA 时，其区分因子是分别检测 RNA 靶标时的 12 倍和 98 倍，如图 1d 所示。在电泳迁移率分析（EMSA）实验中，随着 LbuCas13a-crRNA 复合物浓度的增加，dsDNA 与复合物结合，直到完全消失，如图 1c 所示，这直接证明了 LbuCas13a 具备靶向 DNA 的能力[3]。

基于上述发现，我们构建了一种创新的分子诊断平台——Superior Universal Rapid Enhanced Specificity Test with LbuCas13a (SUREST)，通过将 LbuCas13a 与核酸扩增技术（如重组酶聚合酶扩增 RPA 或聚合酶链反应 PCR）相结合，SUREST 平台可以实现对 DNA 或 RNA 样品的精准检测，如图 1b 所示。该平台可检测低至 0.3 aM（0.18 cps/μL）的靶标并实现高分辨率基因分型。我们对 17 个 HBV、20 个 SARS-CoV-2 临床样本和 10 个人类全样本开展了基因分型检测，检测结果与 qPCR 和 Sanger 测序结果完全一致，验证了 SUREST 在广泛的突变和序列环境中的准确性和可靠性。

总之，本研究揭示了 LbuCas13a 在 DNA 靶向和分子诊断中的新功能，并开发了 SUREST 检测平台，该平台能够实现对 SARS-CoV-2 基因型和人类 SNP 基因型的高分辨率基因分型，为临床诊断提供了一个理想的工具。

关键字 LbuCas13a，核酸检测，超高特异性，单核苷酸特异性

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

柔性多价亲和界面捕获及分选稀有细胞

李慧达，王芮，杨婷*，王建华
东北大学

稀有细胞，如循环肿瘤细胞（CTCs）的高效分离迫切需要亲和界面兼具高选择性靶细胞结合能力及非靶细胞的低吸附能力。常规手段通过修饰抗污分子降低非特异性吸附，由于抗污分子和亲和配体都需要占用界面，因此高亲和力和强抗污力这两个需求常难两全。本研究利用 M13 噬菌体柔性纳米纤维的力学特性，通过将 CTC 特异性适配体修饰于 M13 噬菌体体侧，并将组氨酸标签展示于其尾部，通过 Ni-His 亲和作用将噬菌体纳米纤维锚定于磁珠表面，用于 CTC 亲和捕获。实验和模拟数据表明，噬菌体纳米纤维通过柔性扭曲以适配细胞表面受体分布，从而增强适配体与 CTC 表面受体的多价结合；与此同时，由于熵损失导致非靶细胞（白细胞）非特异性吸附降低。由此，该噬菌体磁珠可从全血中高效捕获 CTC。对使用 DNA 酶解释放后的 CTC 表型分析可实现乳腺癌亚型的精准诊断。进一步地，利用三适配体 DNA 纳米组装体代替单适配体，可实现 CTC 捕获-鉴定一体化及干细胞化 CTC 亚型的选择性释放。

关键字 噬菌体，循环肿瘤细胞，细胞分选

参考文献

1. Li HD, Chen YQ, Li Y, Wei X, Wang SY, Cao Y, Wang R, Wang C, Li JY, Ding HM, Yang T, Wang JH, Mao CB. Nat. Commun. 2024, 15, 5849-5865

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

可编程性 Argonaute 介导的核酸分析平台构建及在肿瘤相关 microRNA 检测中的应用

林秋媛*
福建医科大学

检测核酸生物标志物对于癌症的早期诊断和监测至关重要，现有方法利用 DNA 聚合酶和核酸内切酶等进行核酸扩增和分析，但受到特异性序列（如 Cas 酶的 PAM 序列）、多重操作和准确度不佳的限制。microRNA 是癌症液体活检中的新兴标志物。由于 microRNA 片段短、种类繁多且丰度低，使得简单且特异性地检测 microRNA 更具挑战性[1]。Argonaute（Ago）是一类能够结合并切割核酸的核酸内切酶，其通过 DNA 引导链（gDNA）识别并切割与之互补的目标核酸序列[2,3]。Ago 具有可任意靶向的灵活性、高效的剪切活性和单碱基区分能力，其介导的核酸分析平台展现出巨大潜力[4,5]。基于此，我们肿瘤 microRNA 为靶标，构建了：1）核酸亲和性 TtAgo 介导的高特异性 EXPAR 检测方法；2）TtAgo 耦联 EXPAR 双重信号放大平台（TEAM）；3）CpAgo 结合 EXPAR 一锅法（COP）检测平台；4）可编程 Ago-DNA 聚合酶介导的同步双循环扩增系统。我们探究了 TtAgo 调控模板进而抑制非特异性扩增和 Ago 可编程性剪切探针，发展了双重信号放大、多重检测、一锅法检测等研究策略，且评估了这些方法的临床应用潜力。这些方法突破了当前核酸检测技术的瓶颈，为肿瘤核酸检测困境提出了创新的解决方案，助力肿瘤精准分子诊断技术的升级，具有重要的科学意义和应用价值。

关键字 Argonaute 核酸内切酶，核酸扩增，肿瘤相关 microRNA 检测

参考文献

1. Kosaka N, Iguchi H, Ochiya T. *Cancer science*, **2010**, 101(10): 2087-2092.
2. Meister G. *Nature Reviews Genetics*, **2013**, 14(7): 447-459.
3. Swarts D C, Makarova K, Wang Y, et al. *Nature structural & molecular biology*, **2014**, 21(9): 743-753.
4. Koopal B, Mutte S K, Swarts D C. *Trends in cell biology,* **2023**, 33(7): 605-618.
5. Ye X, Wu H, Liu J, et al. One-pot diagnostic methods based on CRISPR/Cas and Argonaute nucleases: strategies and perspectives. *Trends in Biotechnology*, **2024**.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：报告

功能核酸适配体联合镧系发光检出策略在肿瘤来源细胞和细胞外囊泡检测中的应用

易强英*
四川大学

肿瘤细胞产生的循环肿瘤细胞（CTCs）和细胞外囊泡（例如外泌体），在细胞间及细胞与环境间的交流中扮演着至关重要的角色，它们有助于肿瘤逃避免疫系统的监视，推动肿瘤的发展，并最终导致转移。对具有特定时空特性的肿瘤来源细胞和细胞外囊泡进行精确识别和检测，对于临床癌症筛查、病程监测以及疗效评估具有重大意义。然而，这两类肿瘤相关标志物在外周血中的浓度极低，且极易受到其他血液成分的干扰，这给检测工作带来了极大的挑战。为解决这一难题，本研究通过联合功能核酸适配体与镧系发光检出策略，成功构建了多个高灵敏度的检测体系。这些检测体系利用功能核酸适配体序列的高精准靶向性，特异性地结合这两类标志物，并触发检测体系的信号输出。通过这种方式，有效地克服了生物学背景信号的干扰，实现了对肿瘤来源细胞和细胞外囊泡的精准检测。

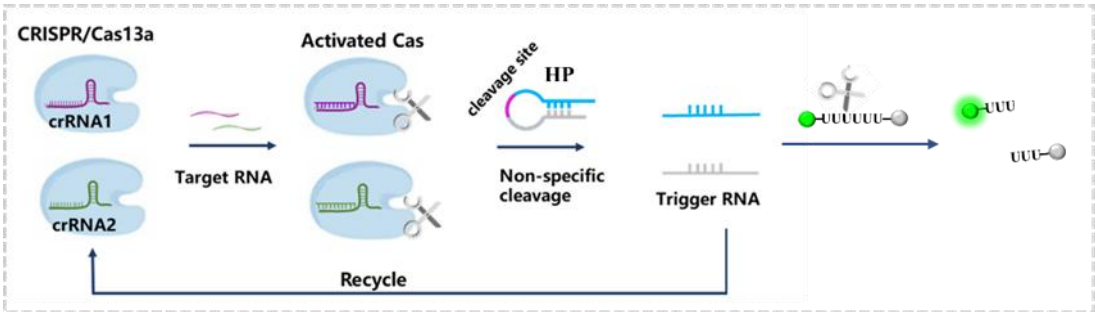
关键字 功能核酸适配体，镧系发光，循环肿瘤细胞，细胞外囊泡，体外检测

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

超快速 RNA 检测：无需预扩增的 Cas13a 自级联信号放大

王慧雯、易长青*
中山大学

随着人们对日常健康监测的需求日益增长，开发一种快速、高效、经济的居家病毒检测技术变得尤为关键。本工作建立了一种基于 LbuCas13a 的自级联循环放大系统，设计了富含“U”的发夹探针(HP)，实现一种无需预扩增的超快速（3 分钟）、超灵敏 (0.23 fM)的检测方法。工作原理如图 1 所示，当靶标 RNA 存在时，crRNA 特异性识别并结合靶标 RNA，激活 LbuCas13a 的剪切活性。LbuCas13a 随后切割 HP 和荧光报告分子中富含“U”的区域，导致 HP 发夹结构断裂，释放出单链 RNA，此单链 RNA 能够与 crRNA 杂交互补，进而触发 LbuCas13a 的连续切割，形成自级联循环放大，从而实现对 RNA 的快速、灵敏检测。此外，该工作后续将设计特定的 crRNA 和 HP 序列，实现对不同目标 RNA 的同时检测，并满足家庭自检中对多种疾病进行精确诊断的需求。该检测方法具有无需 RNA 预扩增的优势，突破了单一 CRISPR/Cas 系统灵敏度低的局限性，并降低了需要预扩增的传统分子诊断技术中气溶胶污染的风险。同时，简化了检测流程，降低了对实验环境和操作技能的要求，使该方法更适合广泛应用于现场快速检测。



关键字 无预扩增，循环放大，超快速核酸检测

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

单碱基分辨率NSET纳米尺映射活细胞膜上适体三维空间构象

张玉、刘洪林*
合肥工业大学

原位解密适体在活细胞体系中三维空间构象空间构象和结合位点具有重要意义和挑战性。我们小组开发了一种单碱基分辨新型 NSET 纳米尺，荧光标记的适体 (XQ-2d-FAM) 作为供体，纳米金颗粒-抗体偶联物 (G5@antiCD71) 作为受体。我们在 XQ-2d 适体 5′和 3′末端增加 nTA 间隔，通过 nTA 依赖的淬灭效率关系证明该纳米尺具有单碱基分辨率。 将荧光团标记在适体序列不同位置 T 碱基上，包括 5′、3′、6T、22T、38T 和 52T, 解析碱基序列依赖的距离投影构象。实验结果表明 XQ-2d 适体的 5′、3′、茎、环构象在三维空间上对称，5′、3′、茎朝向 antiCD71 抗体结合位点，而环则相反。分子对接模拟 (MDs) 列出了所有可能的构象，结合所有投射在纳米金表面的碱基距离参数，可以确定唯一的适体构象，并精确解析出适体特异性结合位点为 CD71 受体上 Lys477、Ser691 和 Arg698。该新型 NSET 光学测量工具可以高分辨率地原位解析核酸适体在活细胞膜上的三维空间构象和结合位点，有助于基于核酸适体的传感、成像和诊断，助力分子医学。

关键字 适体构象，结合位点，单碱基分辨率，NSET，纳米尺，分子对接

参考文献

1. Zhang,Y.; Fang, X.; Huang, W.; Hu, F.; Liu, H., Nano Lett. 2023, 23, 24, 11968–11974.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

基于核酸适配体标记策略的单细胞混样测序

马湘琦、武晓秋、吴芩、谭蔚泓*
中国科学院杭州医学研究所

近年来，条形码标记的单细胞混样测序技术逐渐兴起，极大地提升了样品处理效率。该技术不仅缩短了处理时间，降低了技术批次效应，还有效减少了文库制备成本，使得每个样品的处理费用显著降低。尽管已有多种新的标记策略在不同应用场景中支持单细胞混样测序，但这些策略也面临如标记步骤复杂、试剂耗材昂贵等问题，难以大规模推广。为解决这些挑战，我们提出了一种基于核酸适配体标记的单细胞混样测序策略。该方法在核心序列的基础上增加了可区分的标记序列，同时包含了适应测序平台的序列。此策略通过将不同样本的细胞与核酸适配体孵育，而后经单细胞测序流程，实现了多样本的同时合并测序，并能将数据精准匹配至各自的原始样本。这种策略不仅允许对单个细胞的转录组进行分析，还可对核酸适配体靶向的分子（如蛋白质或多糖）开展组学分析。与利用抗体进行细胞哈希（cell hashing）的方法相比，我们的方法简化了标记流程，并拓展了单细胞多组学技术的应用范围，超越了蛋白质层面的局限。初步实验结果显示，该策略在物种混合实验中展现了良好的可行性，并具备识别多细胞和阴性细胞的能力。下一步，我们计划将不同药物处理的细胞样本进行汇总，通过单次单细胞测序实验进行分析。预期结果将揭示每种药物引起的独特转录组反应，以及其在单细胞水平上的靶标特异性基因表达特征。综上，该策略具有高性价比，适用于多种实验条件下的单细胞分析，有望推动 scRNA-seq 在各类应用中的广泛普及。

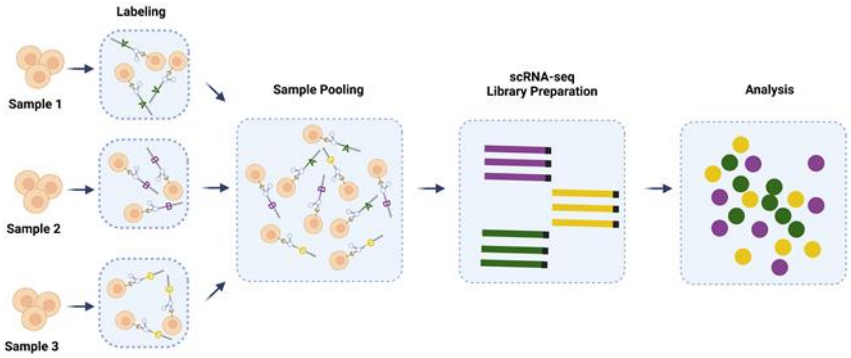


图 1. 核酸适体标记的单细胞测序示意图。

关键字 单细胞混样测序，核酸适配体，组学分析

参考文献

1. Cheng, Junyun et al. Adv Sci (Weinh). 2021 Sep;8(17):e2101229.
2. Stoeckius M, Zheng S, Houck-Loomis B, et al. Genome Biol. 2018;19(1):224.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

利用细胞间膜转移筛选肿瘤特异性 T 细胞

顾克丹，黄晓欣，连欣然，吴宏宇，谢斯滔，谭蔚泓*
中国科学院杭州医学研究所

肿瘤浸润淋巴细胞（TILs）疗法在黑色素瘤等多种实体瘤中显示一定的疗效 TILs 中含有针对肿瘤特异性抗原（TSAs）的 T 细胞，但更多的是识别与肿瘤无关表位的旁观者 T 细胞。本研究提出了一种基于抗原提呈细胞与 T 细胞间 pMHC-TCR 识别过程中膜转移标记技术的策略用于筛选肿瘤特异性 T 细胞。该方法具备高度的准确性，且对 T 细胞增殖无不良影响，显示出优异的临床转化潜力。

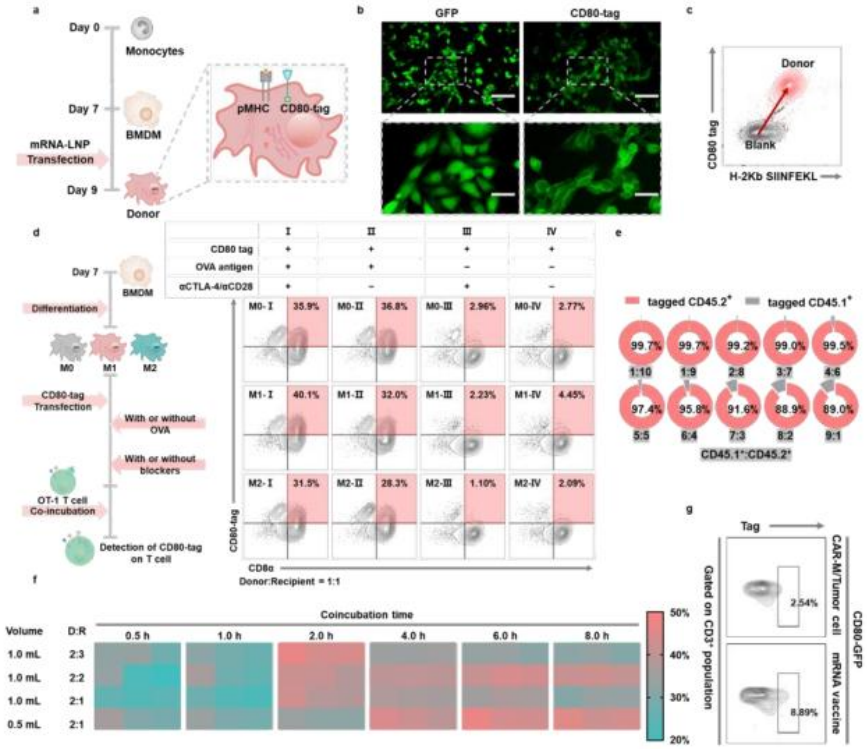


图 1. (a) Schematic donor cell. Fluorescence images (b) and flow cytometriccharacterization (c) of donor cells. (d) Antigen-dependent membrane transfer after co-culturing of donor cells and recipient cells. (e) The accuracy of membrane transfer labeling for antigen-specific T cells. (f)Optimization of the conditions for membrane transfer. (g) Membrane transfer mediated by antigens from phagocytosed tumor cells or multivalent mRNA vaccine.

关键字 TILs，T 细胞，肿瘤

参考文献

1．Chevrier, S. et al. Cell 169, 736-749 e718, (2017).
2．Simoni, Y. et al. Nature 557, 575-579, (2018).

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

Fluorescence monitoring of refluxed tyrosinase using endoplasmic reticulum-localized enzymatic activity-based sensing

舒敦基、杨盛*
湖南师范大学

A tyrosinase-activatable fluorescent probe with endoplasmic reticulum targetability was developed for the first time. It can ratiometrically fluoresce and hence be used to monitor refluxed tyrosinase into the endoplasmic reticulum.

关键字 tyrosinase，ratiometric fluorescent probe，endoplasmic reticulum

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

口服核酸适配体修饰的 SICTERS 用于拉曼内窥镜结肠癌诊疗

李鑫怡、肖泽宇*
上海交通大学医学院

结肠镜检查作为结直肠癌检查的“金标准”，对于结肠癌的确诊发挥着关键的作用。然而仅凭肉眼判断或染色剂辅助判断的方法对于微小肿瘤以及肿瘤边缘的区分仍旧存在局限性。因此，在结肠镜介导的肿瘤切除中往往存在切除边缘阳性以及复发率高的问题。在本项研究中，我们利用拉曼光谱具有的极窄拉曼峰和抗光漂白特性，和核酸适配体对于肿瘤特异性分子靶标的高度亲和性，构建了一个可口服的，用于结肠内窥镜检查的探针。该口服探针以无需金银等外部基底增强的小分子自堆叠的 SICTERS 为检测中心，具有良好的检测灵敏度和生物安全性。通过核酸适配体靶向结肠癌肿瘤高表达的核仁素，实现结肠癌检查的分子靶向。并且利用壳聚糖和海藻酸钠的上消化道稳定性和结肠缓慢降解特性，实现了核酸适配体修饰的 SICTERS 在结肠部位的成功检测。并且利用 SICTERS 优异的光热性质，实现了对残余肿瘤的治疗以及局部的光热免疫。这一口服检测系统有望为结肠镜检查提供更加准确的判断，并实现结肠镜检查时的诊疗一体化。

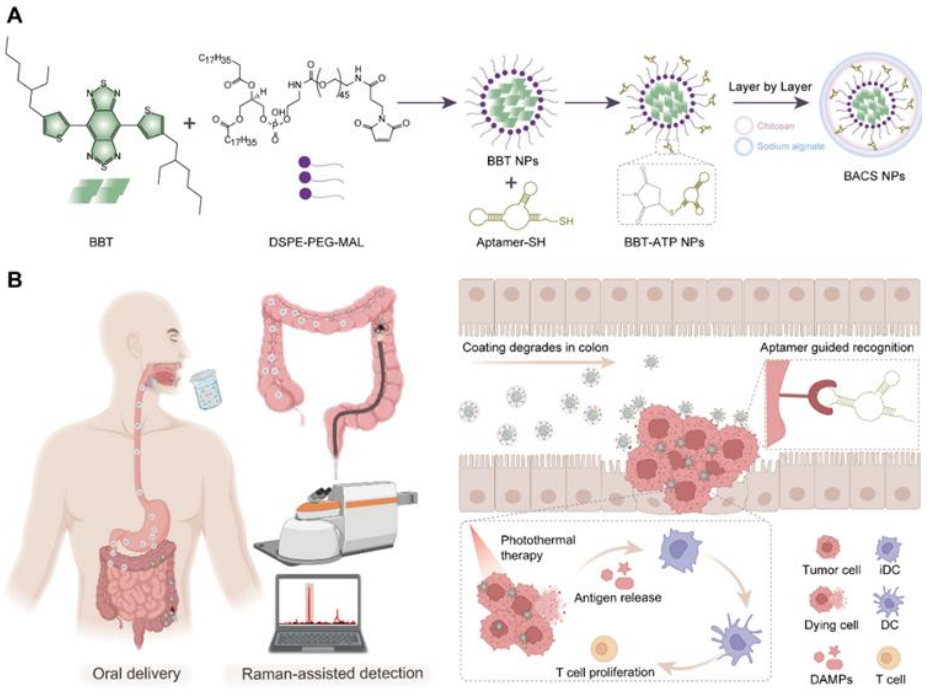


图 1. 口服核酸适配体修饰的 SICTERS 示意图。

A、口服纳米粒(BACS NPs)的制备。B、BACS NPs 的口服，检测及治疗过程。

关键字 口服，核酸适配体，SICTERS，诊疗一体化

参考文献

1. Gao, S. et al. Self-stacked small molecules for ultrasensitive, substrate-free Raman imaging in vivo. *Nature Biotechnology*, **2024**, 1-12.

2.Liping Huang et al. Rapid, label-free histopathological diagnosis of liver cancer based on Raman spectroscopy and deep learning. *Nature communications*, **2023**, 14:48.

3. Stefan Harmsen et al. Detection of premalignant gastrointestinal lesions using surface-enhanced resonance Raman scattering−nanoparticle endoscopy. *ACS Nano*, **2019**, 13, 1354-1364.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

DNA 纳米传感器用于 TRPML1 mRNA-Zn^{2+}-ATP 信号通路的成像研究

李祥丽，陈春燕，龚行，陈峰* 蔡昌群*
1. 中国科学院杭州医学研究所
2. 湘潭大学

细胞内信号通路的传导机制的研究已成为分析化学领域备受瞩目焦点。通过监测细胞内信号分子的异常，可以为疾病的发展提供重要的理论依据。锌作为生物体至关重要的必需元素，其在细胞内失衡可以引发不同程度的疾病。在癌症等疾病中，瞬时受体粘脂蛋白通道一（TRPML1）的含量会发生上调或下调，溶酶体内的锌离子通过 TRPML1 流入细胞质的过程可能受到影响，进而引发下游线粒体内 ATP 水平的变化。本工作利用 DNA 分子的高度可编程序性，构建了三个 DNA 纳米传感器，来实现细胞内多个生物分子的同时监测，以回答 TRPML1 调控下溶酶体内的锌离子与线粒体内 ATP 变化的信号通路的探究。本工作实现了细胞质内 mRNA、溶酶体内 Zn^{2+}、线粒体内 ATP 的三个传感器的同时成像。本工作从分析化学角度为细胞信号通路标志物的监测提供了新的方法。

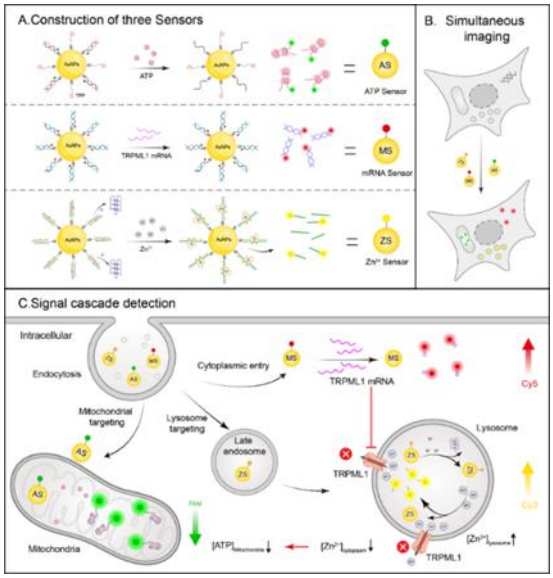


图 1. 三个 DNA 纳米传感器用于 TRPML1 mRNA-Zn^{2+}-ATP 信号通路成像研究的示意图。

关键字 DNA 纳米传感器，三传感同时成像，信号通路

参考文献

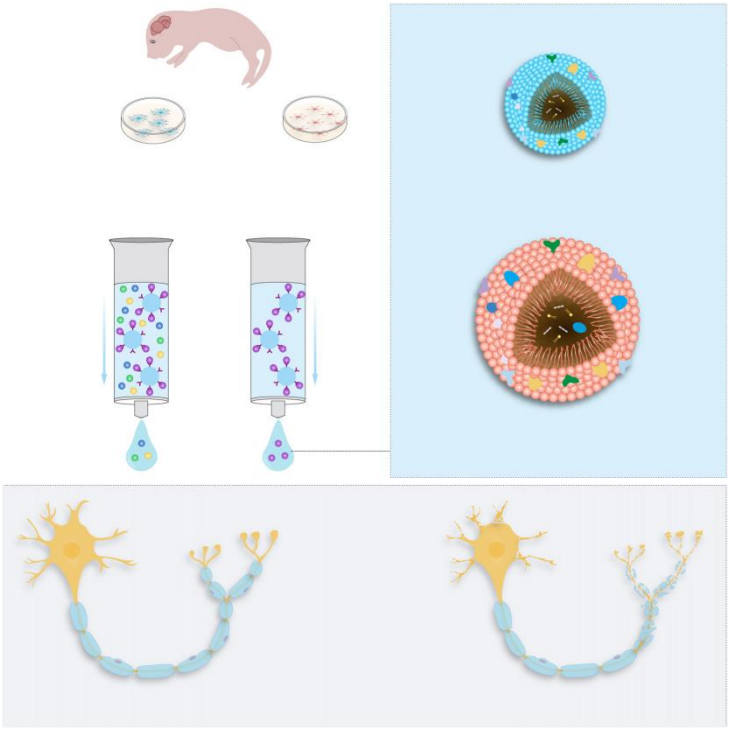
1. Y. J. Nishi. *J. Am. Coll. Nutr.*, 1996, 4, 340-344.
2. H. Waller-Evans. *Biochem. Soc. Trans.*, 2015, 3, 442-446.
3. S. E. Weinberg, N. S. J. Chandel. *Nat. Chem. Biol.*, 2015, 1, 9-15.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

小胶质细胞 apoE 颗粒具有突触毒性并促进神经元衰老

裴馨毓[3]、许华曦*[1]、赵颖俊[1]、蔡鲁建[1]、张鸿声[2]
1. 厦门大学
2. 重庆医科大学
3. 中科院杭州医学所研究所

载脂蛋白 E (apoE)在阿尔茨海默症(AD)的发病进程中起着关键作用。在大脑中，apoE 主要由星形胶质细胞表达并分泌，但在 AD 条件下，小胶质细胞 apoE 的表达量明显上升。尽管星形胶质细胞 apoE 的功能已有许多相关报道，但来自不同类型胶质细胞的 apoE 颗粒是否在生物学特征和功能上存在差异仍是一个谜题。本文中，我们发现来自星形胶质细胞和小胶质细胞的 apoE 颗粒呈现不同的大小。同时小胶质细胞 apoE 颗粒有神经毒性，能够损害突触，促进神经元衰老。而 GPNMB(非转移性糖蛋白黑色素瘤蛋白 B)敲除的小胶质细胞其分泌的 apoE 颗粒则并无有害影响。这些发现为支持小胶质细胞分泌的 apoE 颗粒促进神经元衰老和突触损伤提供了直接证据。



关键字 ApoE，阿尔兹海默症，小胶质细胞，衰老，GPNMB

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

DNA 模块化策略构筑双价配体实现对受体激活的精细调控

郝微[1]、赵娜[1]、吴文伟[1]、王颖[1]、宋坤[1]、陈高贤[1]、陈应之[1]、王若文[1]、徐见容[2]、崔凯[1]、陈红专[2]、张健[1]、肖泽宇*[1]

1. 上海交通大学医学院

2. 上海中医药大学

当前，药物设计的一个热门方向是构筑双价配体分子，即将两个药效明确的配体分子通过连接子偶联形成，其中每个配体分子分别识别两个不同蛋白受体的位点或者同一蛋白受体的不同位点（如正构位点、别构位点），并通过连接子协调配体——受体的相互作用，从而增强药物疗效、提高药物选择性、克服耐药等[1]。基于其在药物研发上的优势，双价配体赋予了许多传统上不可成药靶点和临床已淘汰药物以新的潜力，展示了广阔的开发前景[2]。构筑双价配体分子的关键是连接子的筛选及优化，因为它能够通过调节两个配体分子的空间距离及空间构象，从而影响双价配体的药理学活性[3]。本研究开发了 DNA 模块化可编程的策略来构筑双价配体分子，实现在单脱氧核苷酸水平对受体识别及激活构象的精细调控[4]。即将两个配体分子分别修饰成可用于 DNA 固相合成的“类核苷酸”药效团模块，将天然脱氧核苷酸作为连接子模块，并利用 DNA 固相合成仪，自动化高效构筑双价配体分子的筛选库。通过编程脱氧核苷酸的数目来精细调节连接子的长度，实现对两个药效团之间空间距离在 0.33 纳米尺度的调控；通过编程脱氧核苷酸的碱基排列来调节连接子的结构多样化，实现对药效团空间取向的精细调控，从而高效筛选获得对受体识别亲和力最高、激动效能最强的双价配体分子。该策略为双价配体分子的设计开发提供了全新的思路，在药物设计及生物医学研究领域具有广泛的应用前景。

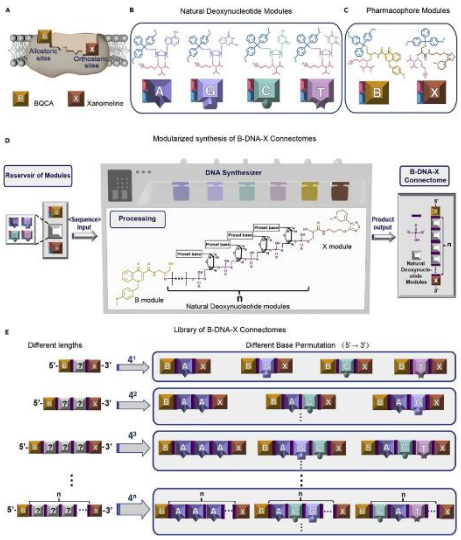


图 1. 基于模块化策略实现双价配体构筑和筛选示意图

（A）双价配体调控示意图 B,别构激动剂 BQCA, X，正构激动剂占诺美林

（B）天然核苷酸模块的结构

（C）药效团模块的结构

（D）DNA 模块化策略合成 B-DNA-X 连接体的示意图：输入序列指令之后，DNA 合成仪

可以通过磷酸二酯键自动化连接药效团 B 和药效团 X 及其之间的脱氧核苷酸序列，生成一系列 B-DNA-X 连接体

（E）具有不同长度和空间取向的 B-DNA-X 连接体候选化合物：通过改变脱氧核苷酸的数量来调节连接子的长度，通过改变脱氧核苷酸的种类来调节药效团的空间取向

关键字 DNA 模块化，双价配体

参考文献

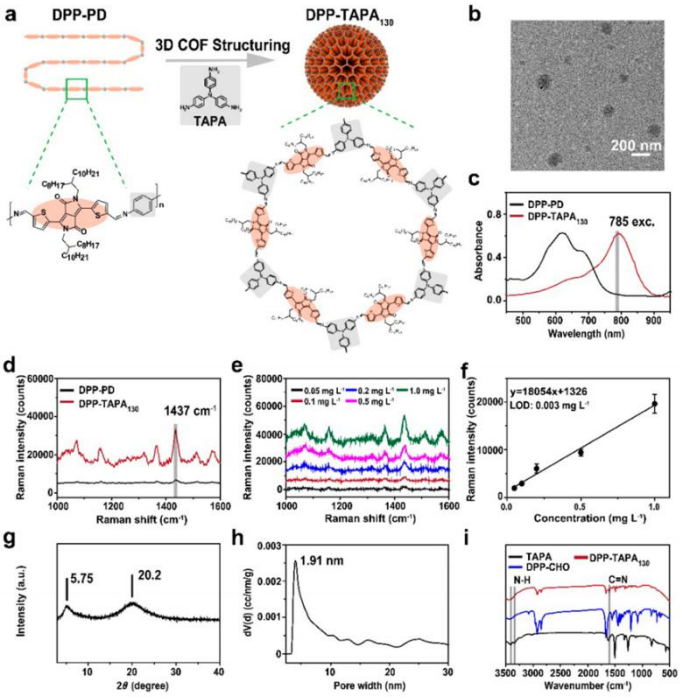
1. Faouzi A, et al. Structure-based design of bitopic ligands for the μ-opioid receptor[J]. ***Nature***, 2022, 613(7945): 1-3.
2. Békés M, et al. PROTAC targeted protein degraders: the past is prologue[J]. ***Nature Reviews Drug Discovery***, 2022, 21(3): 181-200.
3. Zha J, et al. Designing drugs and chemical probes with the dualsteric approach[J]. ***Chem Soc Rev.*** 2023, 52(24): 8651-8677.
4.Zhao N, et al. DNA-Modularized Construction of Bivalent Ligands Precisely Regulates Receptor Binding and Activation[J]. ***Chem*** 2023;9(6):901-923

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

共价有机框架结构拉曼探针用于超灵敏体内生物成像

崔凯[1]、李瑞珂[1]、李蒙[2]、仇媛媛[1]、王昊泽[2]、吴文伟[1]、刘涕泽[1]、张文贤[1]、肖泽宇*[1]
1. 上海交通大学医学院
2. 上海师范大学

拉曼成像基于光子的非弹性散射，是一种强大的光学生物成像技术，能够提供目标分子的高度特异性指纹，具有极窄的光谱宽度，使得拉曼探针能够从生物组织的荧光背景中被区分出来[1]。目前，为了实现高灵敏度的拉曼生物成像，一种有效的方法是基于共振拉曼原理的有机拉曼探针，共振拉曼通过对探针自身的吸收光谱进行精细调控，从而匹配激发光谱以获得优异的拉曼性能[2,3]。然而，常用的构建供体-受体（D-A）结构材料等有效调节有机材料吸收光谱的方法，会导致吸收谱产生超过约 100nm 的位移，难以实现吸收峰与固定 NIR 波长激发的精确重合[4-7]。本研究发展了共价有机框架（COFs）精细调控拉曼探针吸收光谱以达到共振拉曼效应的策略。通过使用三（4-氨基苯基）胺（TAPA）作为连接分子，将聚合物候选物（聚[双酮吡咯并吡咯-对苯二胺]（DPP-PD）转化为具有 COF 结构的拉曼探针 DPP-TAPA，并且通过进一步改善 COF 的晶体度和球形尺寸，最终实现了近 10 倍的拉曼信号增强。本研究为精细调控有机拉曼探针的吸收光谱提供了一种有效方法，使这些探针能够实现严格的共振激发，从而在体内成像中表现出高灵敏度。



关键字 拉曼，共价有机框架，生物成像

参考文献

1. Hang, Y. J., Boryczka, J., Wu, N. Q. Chem. Soc. Rev. **2022**, 51,329−375.
2. Kawata, S., Ichimura, T., Taguchi, A., Kumamoto, Y. Chem.Rev. **2017**, 117, 4983−5001.

3. Mu, X. J., Guo, Y. H., Li, Y. L., Wang, Z., Li, Y. E., Xu, S. H. J.Raman Spectrosc. **2017**, 48, 1196−1200.
4. Li, S. L., Deng, Q. Y., Zhang, Y. C., Li, X. Z., Wen, G. H., Cui,X., Wan, Y. P., Huang, Y. W., Chen, J. X., Liu, Z. H., Wang, L. D., Lee, C. S. Adv. Mater. **2020**, 32, 2001146.
5. Liu, Y., Liu, J. F., Chen, D. D., Wang, X. S., Liu, Z. B., Liu, H., Jiang, L. H., Wu, C. F., Zou, Y. P. Macromolecules **2019**, 52, 5735−5740.
6. Anderson, C. L., Zhang, T., Qi, M., Chen, Z. M., Yang, C. Q., Teat, S. J., Settineri, N. S., Dailing, E. A., Garzon-Ruiz, A., Navarro,A., Lv, Y. Q., Liu, Y. J. Am. Chem. Soc. **2023**, 145, 5474−5485.
7. Feng, Z., Li, Y., Chen, S., Li, J., Wu, T., Ying, Y., Zheng, J., Zhang, Y., Zhang, J., Fan, X., Yu, X., Zhang, D., Tang, B. Z., Qian, J. Nat. Commun. **2023**, 14, 5017

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

一种具有巨噬细胞选择性和可编程性的 DNA 模块化 STING 激动剂用于增强抗肿瘤免疫治疗

罗奥翔[1]、陈应之[1]、李瑞珂[1]、段巧[2]、吴龄龄[3]、李鑫怡[1]、张永明[1]、赵娜[1]、崔凯[1]、吴文伟[1]、刘涕泽[1]、万建波[4]、邓刘福[3]、李桂英[5]、侯立军[6]、谭蔚泓[2]、肖泽宇*[1]

1. 上海交通大学医学院 细胞分化与凋亡教育部重点实验室 药理学与化学生物学系
2. 上海交通大学医学院附属仁济医院 分子医学研究院 上海市核酸化学与纳米药物重点实验室
3. 上海交通大学医学院 免疫学与微生物学系 上海市免疫学研究所
4. 澳门大学 中华医药研究院 中药质量研究国家重点实验室
5. 河北工程大学附属医院 肾内科
6. 海军军医大学第二附属医院（上海长征医院） 神经外科

众所周知，环 GMP-AMP（cGAMP）合成酶（cGAS）及其适配体干扰素基因刺激器（STING）的激活可重新塑造免疫抑制性肿瘤微环境，从而促进抗肿瘤免疫。为了提高 cGAS-STING 通路激活的效率，巨噬细胞选择性吸收和可编程的细胞膜释放对于 STING 激动剂的递送至关重要。然而，现有的基于聚合物或脂质的递送系统难以在整合多种功能的同时保持精确的控制和简单的操作。本文受天然 DNA 传感器 cGAS 的启发，设计了一种模块化 DNA 纳米器件激动剂（DNDA），通过精确的自组装实现巨噬细胞选择性吸收和可编程激活 cGAS-STING 通路。由此产生的 DNA 纳米器件既是纳米载体，又是激动剂。在局部给药后，它能够被巨噬细胞选择性摄取、内体逸出，并在细胞膜上释放 cGAS 识别 DNA 片段，从而强力激活 cGAS-STING 通路，增强抗肿瘤疗效。此外，当 DNDA 与免疫检查点阻断结合使用时，还能产生协同治疗效果。这项研究拓宽了 DNA 纳米技术作为 cGAS-STING 激活免疫刺激剂的应用范围。

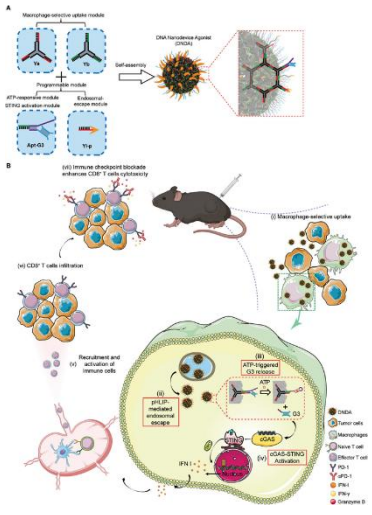


图 1. DNA 纳米器件激动剂(DNDA)示意图。A)基于 DNA 纳米技术的 DNA 构建。B) DNA 活化 cGAS-STING 及增强抗肿瘤免疫的机制。在巨噬细胞选择性摄取后，由于多足状纳米结构 DNA 和纳米颗粒大小，DNDA 通过 pHILIP 介导的内体逃逸到达细胞质。在胞质 ATP 存在的情况下，ATP 适配体调整其构象结合 ATP，导致 G3 的解离，从而识别 cGAS 进行信号激活。

关键字 DNA 纳米技术，药物递送系统，cGAS-STING 激动剂，肿瘤免疫治疗，肿瘤相关巨噬细胞

参考文献

1. A. Decout, J. D. Katz, S. Venkatraman, A. Ablasser, Nat. Rev. Immunol. 2021, 21, 548
2. K. W. Huang, F. F. Hsu, J. T. Qiu, G. J. Chern, Y. A. Lee, C. C. Chang, Y. T. Huang, Y. C. Sung, C. C. Chiang, R. L. Huang, C. C. Lin, T. K. Dinh, H. C. Huang, Y. C. Shih, D. Alson, C. Y. Lin, Y. C. Lin, P. C. Chang, S. Y. Lin, Y. Chen, Sci. Adv. 2020, 6, eaax5032
3. N. Zhao, W. W. Wu, Y. Wang, K. Song, G. X. Chen, Y. Z. Chen, R. W. Wang, J. R. Xu, K. Cui, H. Z. Chen, W. H. Tan, J. Zhang, Z. Y. Xiao, Chem 2023, 9, 901.
4. J. D. Watson, F. H. Crick, Nature 1953, 171, 737.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

自堆叠小分子用于体内无基底超灵敏拉曼成像

仇媛媛[1]、高帅[3]、张永明[1]、崔凯[1]、章思航[3]、廖云慧[3]、王昊泽[1]、余胜[3]、马丽阳[3]、陈红专[4]、季敏标[3]、方晓红[2]、陆伟[3]、肖泽宇*[1]

1. 上海交通大学医学院
2. 中科院杭州医学所
3. 复旦大学
4. 上海中医药大学

拉曼光谱是一种基于分子振动的分析技术，它通过检测分子对光的非弹性散射来揭示其化学结构[1]。在生物医学领域，拉曼光谱能够无创地分析细胞内分子的化学组成，为研究细胞的基因型、表型和生理状态提供了一种强大的工具。尽管拉曼光谱学具有高特异性，但其信号强度相对较弱，限制了其在生物成像中的应用[2]。为了提升信号强度，一种有效的方法是利用表面增强拉曼散射（SERS）技术。SERS 技术通过将小分子拉曼探针吸附在金属如金、银或铜，以及有机材料如半导体薄膜等基底上，能够显著增强拉曼信号，增强检测灵敏度[3]。但这些基底材料可能存在的生物安全性问题限制了 SERS 技术在活体中的广泛应用[4]。本研究揭示了一种新型的拉曼散射增强机制——堆叠诱导的电荷转移增强拉曼散射（SICTERS）[5]。SICTERS 技术通过小分子的自堆叠形成有序结构，实现了信号的显著增强，且无需依赖外部基底。SICTERS 技术的成功开发，为生物医学成像提供了一种新的超灵敏成像手段。它不仅提高了成像的灵敏度，还避免了基底材料可能带来的生物安全性问题。这一技术有望在术中微肿瘤检测、血液和淋巴血管的无创成像等领域发挥重要作用。

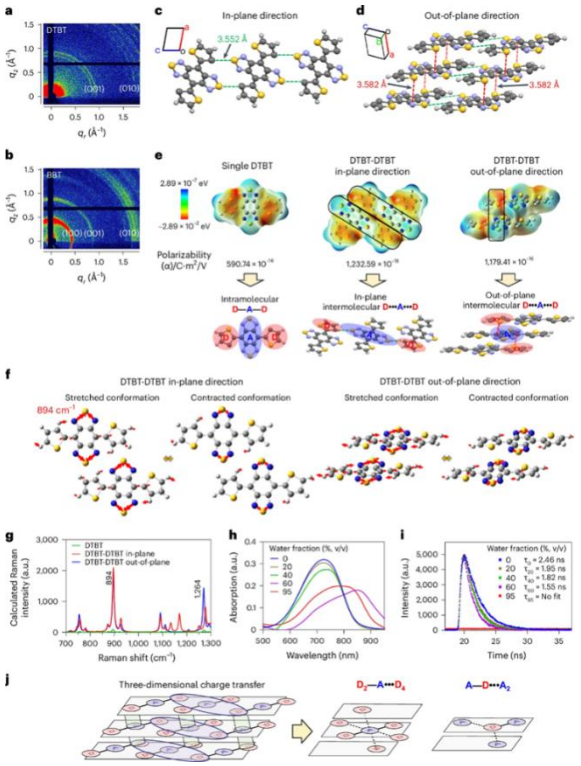


图 1. 堆叠诱导分子间电荷转移增强拉曼散射（SICTERS）的机理。揭示了基于 DTBT 的平面分子通过分子间堆叠实现拉曼散射增强的机制。DTBT 分子的平面内骨架到骨架堆叠和

π-π堆叠，以及 D-A-D 结构带来的分子内电荷转移特性，共同促进了分子的极化率和拉曼散射强度。密度泛函理论计算进一步证实了原子振动幅度和方向的同步性，导致拉曼强度显著放大。

关键字 小分子拉曼探针，自堆叠增强拉曼散射机制，生物医学成像

参考文献

1. Li, J. F. et al. Core-shell nanoparticle-enhanced Raman spectroscopy. *Chem. Rev.* 117, 5002–5069 (2017)..
2. Lane, L., Qian, X. & Nie, S. SERS nanoparticles in medicine: from label-free detection to spectroscopic tagging. *Chem. Rev*. 115, 10489–10529 (2015).
3. Gandra, N. & Singamaneni, S. Bilayered Raman-intense gold nanostructures with hidden tags (BRIGHTs) for high-resolution bioimaging. *Adv. Mater.* 25, 1022–1027 (2013).
4. Liu, Y. et al. Fundamental theory of biodegradable metals—definition, criteria, and design. *Adv. Funct. Mater.* 29, 1805402 (2019).
5. Gao, S. et al. Self-stacked small molecules for ultrasensitive, substrate-free Raman imaging in vivo. *Nature Biotechnology*, 1-12. (2024).

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

增效乳腺癌纳米药物治疗通过局部光热调控其表面蛋白冠

王昊泽[1,2]、崔彦娜[3]、肖泽宇*[3]
1. 天津大学材料科学与工程学院
2. 中国科学院杭州医学所
3. 上海交通大学医学院

乳腺癌是女性最常见的恶性肿瘤，也是导致女性死亡的主要原因之一。利用纳米技术可以解决药物溶解性低、生物利用度低、非特异性分布等问题，这使得纳米药物治疗成为一种有潜力的乳腺癌治疗方法。然而，由于纳米药物进入血液时，表面会吸附血液中的蛋白质形成“蛋白冠”，导致其理化性质改变，并影响药物在体内的命运，降低乳腺癌治疗效果。因此，调控纳米药物表面蛋白冠对乳腺癌治疗具有重要意义。

目前，调控纳米药物表面蛋白冠的思路主要包括两方面，（1）改变理化性质以减少蛋白质吸附；（2）体外预吸附特定功能蛋白质。然而，改变理化性质虽能在一定程度上减少蛋白吸附，但无法完全避免蛋白质在表面附着；而在体外预吸附蛋白质的纳米药物在体内可能会发生蛋白交换，导致表面形成更复杂的蛋白冠。因此，当前迫切需要一种能够在体内动态调控蛋白冠的方法。

本文研究了一种通过局部光热在体内动态调控纳米药物表面蛋白冠的策略。我们成功制备了一种核心成分为光热剂 BBT，载体为 DSPE-PEG 的光热纳米药物，并将其命名为 BBT NPs。BBT NPs 具备光热升温特性，因此可以通过激光照射改变温度来调节其表面的蛋白冠。我们在乳腺癌小鼠模型上研究了利用局部光热效应在体内动态调控 BBT NPs 表面蛋白冠的作用和机制，并探索了蛋白冠调控后纳米药物的光热治疗效果。结果显示，经过局部光热调控 25 min 后，BBT NPs 表面的白蛋白和载脂蛋白 A1 占比分别增长 195%、420%，且在体内循环 2 h 后，BBT NPs 表面蛋白冠中白蛋白依旧占比最高。同时，GO 功能分析证实，经局部光热调控后，BBT NPs 引起的免疫应答功能下调。我们进一步研究了 BBT NPs 在体内的生物学命运变化，结果显示通过局部光热调控 25 min 后，BBT NPs 的消除半衰期延长从 6.6 小时增长至 43.9 小时，进而肝脏富集减少，肿瘤富集增加。并且，经局部光热调控后，BBT NPs 光热治疗效果显著提高。本研究拓展了光热药物的应用范围，并为纳米药物表面蛋白冠调控提供了新的思路

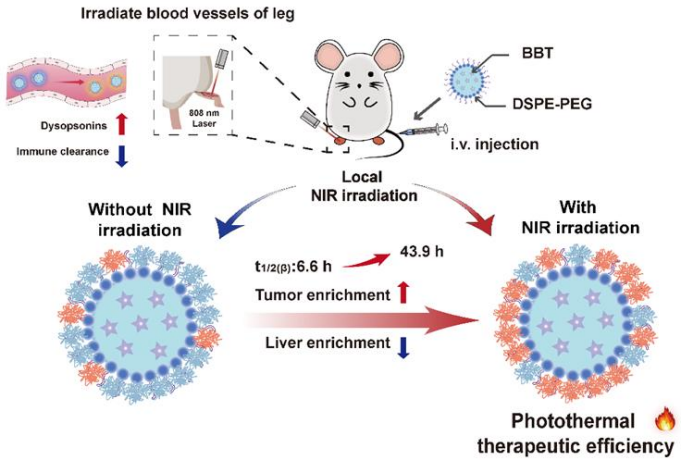


图 1. 光热调控蛋白冠示意图。本策略使用一种局部光热调控方法，可以体内动态调控纳米药物表面蛋白冠，增加其抗调理素，并减少引起的免疫清除相关功能。通过这种策略有效增效了纳米药物光热治疗效果。

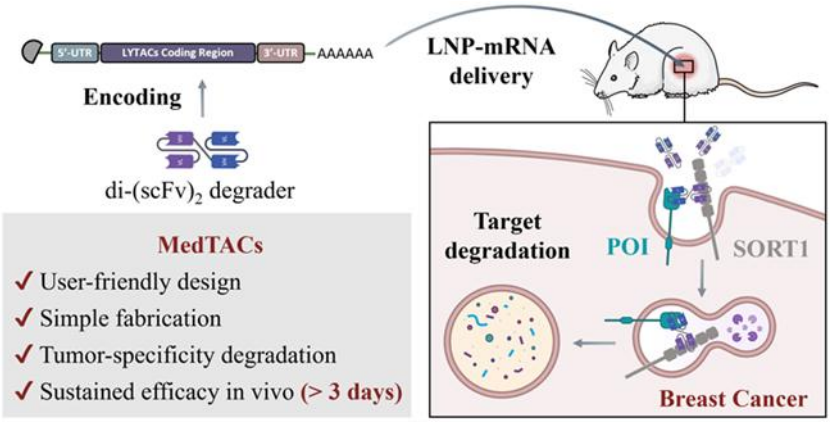
关键字 蛋白冠，局部光热调控，肿瘤富集，长循环，纳米药物

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

mRNA 编码的溶酶体靶向嵌合体用于 SORT1-介导的乳腺癌膜蛋白降解

常欣[1,2]、邱新宇[1,3]、童小宁[1]、左超[1]、谭蔚泓*[1,2]
1. 中国科学院杭州医学研究所
2. 湖南大学化学化工学院
3. 福建医科大学附属协和医院基本外科

乳腺癌(BC)是全球女性中最常见的癌症，也是女性癌症相关死亡的主要原因之一，因此，探索潜在的治疗靶点和新的靶向治疗方式以提高乳腺癌患者的生存率是一个具有挑战性且重要的临床问题。本研究报告了一种新型的 mRNA 编码的溶酶体靶向嵌合体(MedTACs)策略，该策略编码双特异性单链可变片段(bi-(scFv)$_2$)降解剂，可招募肿瘤特异性受体 SORT1，从而在 BC 细胞中诱导膜蛋白的降解。我们的研究结果表明，MedTACs 能够有效地促进持续的内吞和膜蛋白降解，包括 PTK7、HER2、EGFR 和 C-Met，并以 SORT1 和溶酶体依赖的方式发挥作用。MedTAC$_{PTK7}$ 通过降解 PTK7 显著抑制 BC 细胞的侵袭和迁移，在 BC 小鼠模型中展现出显著的治疗潜力，不仅能够明显抑制小鼠乳腺肿瘤生长，同时也不会引起系统性副作用。令人惊讶的是，一次低剂量(0.5 mg/kg)的 MedTAC$_{PTK7}$ 治疗能够在给药后三天内显著降低 PTK7 水平，极大地改善了靶向蛋白降解剂的药代动力学和药效动力学。总之，MedTACs 为 BC 治疗中特异性的溶酶体膜蛋白降解提供了灵活高效的模块化策略，也进一步为乳腺癌临床治疗的潜在靶点发掘和精准疗法开发提供了一种新的工具和方法。



关键字 Breast cancer，mRNA，MedTAC

参考文献

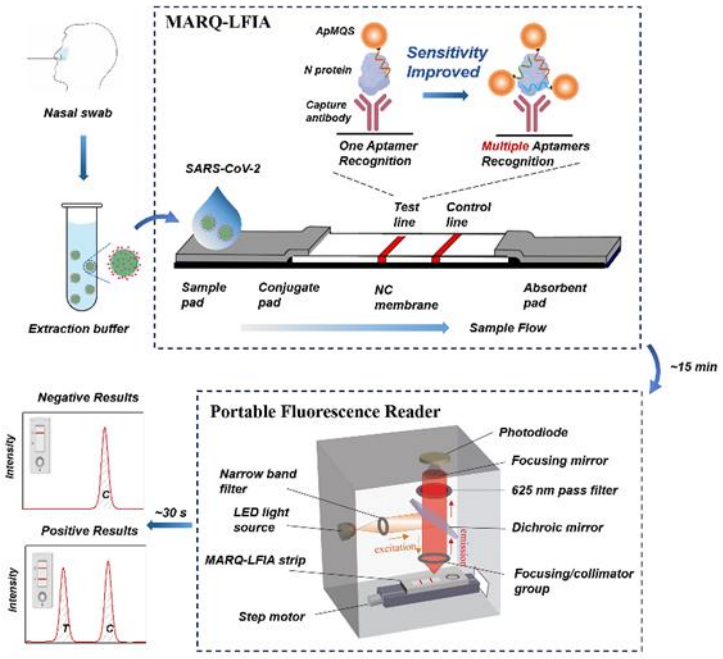
1. Bray. F, Ferlay. J, Soerjomataram. I, Siegel. R. L, Torre. L. A, Jemal. A, *CA Cancer J Clin*., **2018**, 68, 394-424.
2. Loibl. S, Poortmans. P, Morrow. M, Denkert. C, Curigliano. G, *Lancet*., **2021**, 397, 1750-1769.
3. Swain. S. M, Shastry. M, Hamilton. E, *Nat Rev Drug Discov*., **2023**, 22, 101-126.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

基于多重核酸适体识别的量子点侧向层析平台用于超灵敏的呼吸道传染病即时检测

李恒轩、付晓艺、王鹏、杨秋霞、彭瑞资、宋明慧、符婷、谭蔚泓*
中国科学院杭州医学研究所

呼吸道传染病传播迅速，影响范围广，对全球人类健康和国家公共卫生安全构成严重威胁。因此，灵敏、准确和快速的呼吸道病毒检测技术对于呼吸道传染病的预防和控制至关重要。然而，现有的检测方法难以同时满足呼吸道传染病准确、便捷的检测需求。因此，在这项研究中，我们开发了一种基于多重核酸适体识别策略结合量子点侧向层析免疫技术的平台MARQ-LFIA，用于超灵敏的呼吸道传染病即时诊断（POCT）。该平台的分子识别元件由多个高亲和力核酸适体组成，多个核酸适体可以结合呼吸道病毒蛋白上的不同位点，提高复杂环境中病毒鉴定的效率。通过将多重核酸适体识别策略与量子点（QD）荧光技术相结合构建侧向免疫层析试纸条，与高增益便携式荧光信号读取器配合使用，在 2019 年新型冠状病毒的检测中实现了出色的灵敏度和特异性。该平台对新冠病毒核衣壳蛋白和灭活病毒的检测限分别为 1.427 pg/mL 和 1643 U/mL，该结果表明 MARQ-LFIA 的检测灵敏度优于已报道的相关研究。更关键的是，通过检测 30 例新冠病毒阳性患者和 20 例个阴性健康人鼻咽拭子样本，MARQ-LFIA 的检测结果在与商业化的同类产品比较中，成功将阳性检出率从 55.2%提高到 86.7%。此外，我们还研究了 MARQ-LFIA 平台诊断乙型流感的出色表现，证明了其在呼吸道传染病检测领域的普遍适用性。因此，我们相信 MARQ-LFIA 可以成为一种前途光明的 POCT 工具，在公共卫生领域具有庞大的潜在应用价值，以满足目前社会对精确诊断和治疗日益增长的需求。



关键字 核酸适体，呼吸道传染病，及时诊断，量子点，侧向层析

参考文献

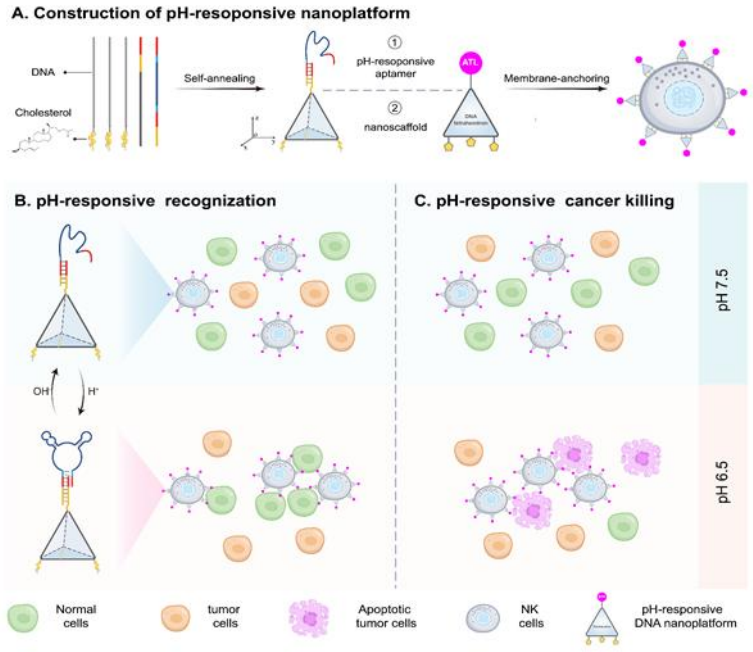
1. H. Y. Kim, J. H. Lee, M. J. Kim, S. C. Park, M. Choi, W. Lee, K. B. Ku, B. T. Kim, E. Changkyun Park, H. G. Kim and S. I. Kim, *Biosens. Bioelectron.*, **2021**, 175, 112868.
2. S. W. Wu, Y. J. Chen, Y. W. Chang, C. Y. Huang, B. H. Liu and F. Y. Yu, *J. Nanobiotechnology.*, **2024**, 22, 5.
3. J. Kim, S. Baek, J. Nam, J. Park, K. Kim, J. Kang and G. Yeom, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 1725-1732.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

pH-响应的 DNA 三螺旋纳米平台用于增强 NK 细胞识别

吴凡迪[1]、孙悦[1]、邱丽萍*[1,2]
1. 分子科学与生物医学实验室(MBL)，化学生物传感与计量学国家重点实验室，化学化工学院，湖南大学，长沙，410082
2. 浙江省适配体与诊疗技术重点实验室，浙江省肿瘤医院，中国科学院杭州医学所，浙江杭州 310022

自然杀伤细胞（NK cells）以不受 MHC 限制的方式识别和杀死肿瘤细胞，因此其特异性要低于 T 细胞。虽然基于适配体开发的策略可以增强 NK 细胞的靶向肿瘤的能力，但适配体的选择性识别可能会受到靶细胞和非靶细胞上共存靶受体的影响，从而在复杂的环境中限制 NK 细胞和靶细胞间的相互作用。在本工作中，我们以胆固醇修饰的四面体作为支架，构建了一个锚定在细胞膜表面的 pH-响应的 DNA 三螺旋纳米平台，增强 NK 细胞-靶细胞在肿瘤微环境下的相互作用。当受到外界酸性刺激时，三螺旋茎通过 Hoogsteen 碱基配对形成，其促进位于纳米平台顶部的适体形成特定的发夹构象，并特异性地与目标细胞结合。研究结果表明，工程化的 NK 细胞在酸性的条件下可以有效地与肿瘤细胞结合并发挥杀伤癌细胞的能力。该纳米平台为利用适体调节免疫细胞与癌细胞间的相互作用提供了一个新的范例，并为 NK 细胞的免疫治疗提出新概念。



Scheme1. A pH-responsive DNA nanoplatform for enhancing NK-tumor cell interaction at acidic pH.

关键字 DNA 四面体，NK 细胞，pH 响应，细胞间作用

参考文献

1. L. Li, Y. Jiang, C. Cui, *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, 140, 13335.
2. J. Li, K. Xun, K. Pei, *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, 141, 18013.
3. J. Li, K. Xun, L. Zheng, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 4585.

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

ABC 转运蛋白 AatA 或 MdlB 的介导的酪丁酸梭菌丁酸合成代谢调控机制研究

孙高雅[1]、黄金*[2]
1. 中国科学院杭州医学研究所
2. 浙江工业大学

ATP 结合盒（ABC）转运蛋白是广泛参与底物转运的微生物膜相关蛋白最大超家族之一，在细菌生理学中发挥着至关重要的作用。在本研究中，我们研究了巴氏醋化醋杆菌 AC2005 中 ABC 转运蛋白 AatA 的异源表达和 ABC 转运蛋白 MdlB 的同源过表达对改善酪丁酸梭菌中丁酸生产的效用。与起始野生型菌株酪丁酸梭菌 ATCC 25755 相比，在补料分批发酵过程中，其产量、产率和选择性都相应提高。qRT-PCR 结果显示 AatA 和 MdlB 上调 ack 的表达水平，ack 是乙酸盐合成代谢通路中关键酶基因。这结果与在重组菌株中观察到的乙酸盐产量的增加一致。此外，AatA 或 MdlB 的过表达促进了乙酸的合成和酸的分泌。细胞 ATP 酶活性测定证实了两种重组菌株与野生菌株相比表现出两倍高的 ATP 酶活性。ATP 酶活性的增加被认为是为了加速糖的利用，诱导细胞外乙酸盐分泌用于丁酸盐的生产，并缩短发酵期以提高丁酸盐的生产率。

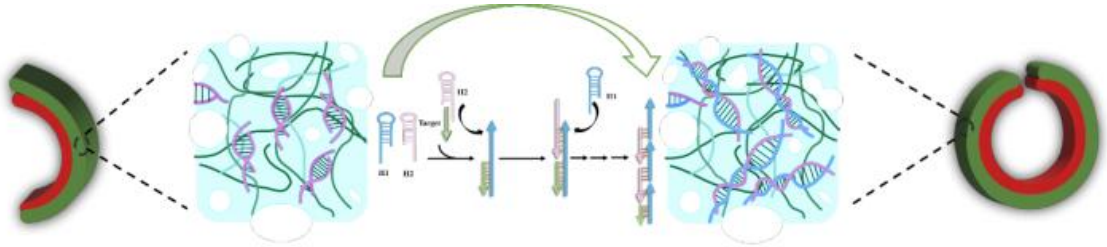
关键字 ABC 转运蛋白，丁酸，酪丁酸梭菌，乙酸

分会场：33.核酸分子医学·诊断与设备
交流形式：墙报

杂交链反应驱动的基于弯曲角度变化的 DNA 水凝胶薄膜传感器

陈宇、谷青雨、尹梦媛、郭玮炜*
南开大学

本研究探究了一种以弯曲角度为输出信号的基于 DNA 杂交链反应（HCR）驱动的 DNA 水凝胶薄膜致动传感器的开发及其在核酸检测中的应用。首先，我们构建了具有可序列编码响应特性的自支撑双层聚丙烯酰胺/DNA 杂化水凝胶膜，其中活性层引入了可对目标序列识别的 DNA 链，当特定的 DNA 目标存在时，可引发活性层的结构变化，从而触发双层水凝胶膜的大幅度宏观形状变化。在此基础上，通过引入 HCR，实现了该薄膜对核酸目标的灵敏响应。这种薄膜与传统体相形状记忆 DNA 水凝胶相比大大减少了 DNA 材料的消耗，而且通过形成多孔结构加强生物大分子物质在水凝胶网络内的传质，从而提升其传感性能，为实现即时检测核酸提供了新思路。



关键字 DNA 水凝胶，功能核酸，可视化检测，冷冻结构化

参考文献

1.Yin M, Zhang Y, Liang H, et al. Analytical Chemistry, 2024, 96(13): 5215-5222.
2. Bi Y, Du X, He P, et al. Small, 2020, 16(42): 190

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

二代测序技术的法庭科学应用与标准化

王乐*、康克莱、张驰、季安全
公安部鉴定中心

法医学 DNA 检验技术是个体识别和亲缘关系鉴定的金标准。传统方法利用毛细管电泳技术检测短串联重复序列（STR）遗传标记的长度多态性。二代测序技术具有高通量、高集成、精细化等显著优势，已经引起法医学核酸检验的深刻变革：由 STR 长度多态性检验深入到序列多态性检验；由少量遗传标记检验发展为大量标记甚至组学检验；由 DNA 检验拓展为 DNA、RNA 和 DNA 甲基化检验；由聚焦个体识别和近亲关系鉴定拓展为全面支撑混合 DNA 检验、微量/降解 DNA 检验、父系/母系祖源分析、生物组织属性推断、表型特征刻画、系谱分析、人体微生物检验、环境 DNA 分析等应用。全国已有 70 余家法庭科学 DNA 实验室配备了二代测序仪，在公安实战中已经解决了传统方法无法解决的技术难题，助力侦破了一批命案积案。2024 年，针对法医学二代测序检验分析、序列多态等位基因命名、试剂质量基本要求的国家标准已经发布。

关键字 法庭科学； 二代测序； 物证检验； 标准化

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

新精神活性物质发展趋势及分析技术

花镇东*、黄钰、刘翠梅、贾薇
公安部禁毒情报技术中心

联合国毒品与犯罪问题办公室（UNODC）将新精神活性物质定义为“未被联合国《1961年麻醉品单一公约》和《1971 年精神药物公约》所管制，但存在滥用、可能对公众健康产生危害的单一或混合物质”。根据联合国网站统计，截止目前世界范围内累计发现的新精神活性物质已达 15 大类 1258 种[1]，远超国际禁毒公约附表列入的物质数量，其滥用形势日趋严峻，给社会安全和公众健康带来巨大风险。我国禁毒部门高度重视新精神活性物质问题，不断采取多种措施遏制其非法制贩和滥用，为此国家毒品实验室全面开展了新精神活性物质检验鉴定、滥用监测、危害评估等方面的研究，为监测和管控工作提供全面技术支撑。

早期预警是防范新精神活性物质蔓延扩散的有效手段，其中最为关键的是及时发现新品种，以便将其作为目标物纳入滥用监测范围。国家毒品实验室对新精神活性物质的监测始于 2012 年，通过对娱乐场所、邮政寄递及地下实验室发现的可疑样品进行采样分析，了解掌握国内新精神活性物质发展趋势，截止 2023 年末，已筛查样品上万份，发现各类新精神活性物质 385 种。2015 年，我国为加快新精神活性物质列管速度，专门制定了《非药用类麻醉药品和精神药品列管办法》，并基于监测结果陆续将 220 种单一物质及芬太尼、合成大麻素两个大类的物质纳入附表管制目录。特别是今年 7 月 1 日起一次性列管 46 种物质，有效应对了近期尼秦类、苯环利定类及咪酯类物质的滥用风险。

由于种类繁多、更新换代迅速，同时标准品和标准谱库难以获得，新精神活性物质检测难度远超传统毒品。为此，国家毒品实验室开发了三类技术：一是针对多目标物的可回溯性 LC-MS 筛查方法，实现所有管制品种的高通量筛查，同时兼顾数据的回顾分析需求；二是针对特定类别物质的非靶向 LC-MS 筛查方法，适应整类列管措施的要求，发现潜在风险物质；三是针对异构体的分离与鉴别方法，解决新精神活性物质存在大量构造和对映异构体，检测时容易混淆的问题。未来，谱图的智能识别和解析技术有望进一步提升新精神活性物质检测工作的质量和效率。

关键字 毒品，新精神活性物质，筛查技术，液质联用

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

当前法医工作的重点关注和应对

杜宏*
四川省公安厅刑事侦查局

公安机关法医重要职责在于损伤分析，为涉及人身伤亡案事件的死亡原因和伤情程度进行鉴定，解决案件侦办和诉讼中的证据问题，也同样面对非刑事案件的事件处置任务。当前，法医工作面临的一项重要任务是非正常死亡案件的处置，这涉及案件的定性和事件的最终处置，是当前法医所面对的任务量和存在难点争议最多的事务。如何更加准确的开展非正常死亡案件的定性，需要专业的法医知识和更为广泛的调查访问、更加全面的刑事技术专业手段支持。如何参与非正常死亡案件的处置，需要此类案件的牵头部门做好各专业团队的协作，积极做好专业难点的解读，寻求更为广泛的专业支持。如何更好的面对社会的质询，法医工作还需要面对纷繁复杂的案件，开展个案的研讨，在整体定性和合理分析等方面支撑案件的全面处置。

关键字 法医　重点关注　事件处置

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

质谱分析在法庭科学文件材料和文件形成时间鉴定中的应用研究

孙其然、罗仪文、张清华、王雅晨、杨旭*
司法鉴定科学研究院

在法庭科学领域，墨水成分分析及书写时间鉴定是文件检验专业的重要研究内容。尤其是书写时间鉴定，由于墨迹成分复杂、目标物含量低、易受环境影响等原因，至今仍是国际法庭科学界的难点问题，在实践中尚处于探索阶段。

文件材料鉴别是文件形成时间鉴定的基础。过往文件检验多采用形态检验、光谱检验等无损方法，虽然能保全书证，但方法的特异性不强，对墨迹的区分率有限。本课题组以司法实践中常见的圆珠笔和黑色中性笔墨迹为研究对象，应用液相色谱-高分辨质谱（LC-HRMS）、解吸电喷雾电离-高分辨质谱成像（DESI-MSI）等分析技术，建立了墨迹中芳基甲烷类染料、聚乙二醇低聚物等特征组分的质谱分析方法，有效提高了对相关文件材料的定性鉴别能力。通过老化实验，课题组还系统研究了这些特征成分的历时性变化规律。

课题组建立的墨迹中 9 种染料的 LC-HRMS 分析方法，取样量少、灵敏度高，仅提取 1-2 个直径 0.5mm 圆片大小的墨迹样品，就可对圆珠笔墨迹中的 4 常见碱性染料（结晶紫、甲基紫、维多利亚蓝 B、碱性蓝 7）以及它们的降解产物进行定性和半定量分析。借助高分辨质谱提供的精确质量数和在线数据库，能对墨迹中的未知染料进行解析。

针对碳素类黑色中性笔鉴别方法有限的问题，课题组应用 LC-HRMS，创建了黑色中性笔墨迹中聚乙二醇低聚物（PEG）的检测方法，根据样品中 PEG 的分布对碳素类黑色中性笔墨迹进行鉴别，有效提高了对此类文件材料的区分率。进一步研究表明：PEG 的降解主要表现为低分子量 PEG 相对含量增加、高分子量 PEG 相对含量减少；用不同分子量的 PEG 低聚物的相对含量作为参数，可对黑色中性笔墨迹的相对形成时间进行鉴定。

在掌握特征组分及其历时性变化规律的基础上，课题组进一步应用 DESI-MSI 技术分析不同老化程度的墨迹样品。原位分析技术降低了前处理等步骤带来的分析误差，可视化的结果可直观显示样品中特征成分的相对含量差异，从而揭示不同样品的老化程度。该方法有望应用于文件相对形成时间的鉴定实践。

关键字 文件检验；墨水分析；书写时间鉴定；高分辨质谱；质谱成像

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

法庭科学中毒物的精准鉴定

曹玥*
南京医科大学

法庭科学中的快速精准鉴定一直是公共安全领域至关重要的问题之一，但许多传统分析方法都具有耗时长、对操作人员技术要求高等局限性。在此，我们联合光谱和质谱技术开发了一系列对法医学中各个物质进行快速、精准鉴定的方法，为法医学毒物的精准鉴定提供了新思路和新手段。基于光学方法，如利用表面增强拉曼散射(SERS)光学方法开发高通量可抛式 AuBPs@MoS_2@tinfoil 试剂盒用于敌草快的快速定量检测，此方法对敌草快的检测限达到了 1×10^{-15}M，且在检测范围内具有良好的线性关系。开发新型双分离富集 PA-6/AuNRs@ZIF-8 膜对法医环境样本中的氨基甲酸酯类农药西维因的检出限低至 1×10^{-9}M，显著低于现有标准。针对分离出来的体外组织样本中物质的定量及分布，拉曼技术也能实现其原位成像，我们基于该方法实现了对 2 型晶体肾病石蜡包埋组织和活检标本中草酸钙晶体的原位鉴定，这为临床和法医学的精准病理诊断提供了一种有效且有前途的方法来分析组织中的未知晶体。另一方面基于质谱方法我们也构建了一系列可应用于法医学的新的检测手段，如通过 HPLC-MS/MS 成功构建了同时测定血浆中敌草快及其两种代谢物的快速定量检测手段，并将其应用于毒物代谢动力学研究。我们通过 TOF-SIMS 进行β-AR 激活引起的心源性猝死的代谢研究，并对小鼠心肌中的脂质成分分布进行了可视化研究，最终将研究成果应用于真实的人心肌样本的检测中。以上光谱和质谱的新方法均能解决一定的法医及公共安全领域的实际问题，突破了传统分析方法的局限性，拓展了法庭科学毒物鉴定的新思路。

关键字 法庭科学，毒物分析，表面增强拉曼散射光谱

参考文献：

1. Jiang, Qiao-Yan, et al. Recyclable and green AuBPs@ MoS2@ tinfoil box for high throughput SERS tracking of diquat in complex compounds. *Sensors and Actuators B: Chemical* 344 (**2021**): 130290.

2. Ding, Yan, et al. Dual-Mode Separation and SERS Detection of Carbaryl with PA-6/AuNRs@ ZIF-8 Films.*Analytical Chemistry* 96.5 (**2024**): 1941-1947.

3. Yu, Youjia, et al. In Situ Identification of Unknown Crystals in Acute Kidney Injury Using Raman Spectroscopy. *Nanomaterials* 12.14 (**2022**): 2395.

4. Mao, Zhengsheng, et al. Simultaneous determination of diquat and its two primary metabolites in rat plasma by ultraperformance liquid chromatography–tandem mass spectrometry and its application to the toxicokinetic study. Forensic Toxicology 40.2 (**202**2): 332-339.

5. Lou, Jia-Qian, et al. Investigation of heart lipid changes in acute β-AR activation-induced sudden cardiac death by time-of-flight secondary ion mass spectrometry. *Analyst* 145.17 (**2020**): 5889-5896.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

法庭科学 DNA 检验新技术助力生物物证证据价值深度挖掘

张瑾*、刘开会、张颖、郝金萍、杨雪莹
公安部鉴定中心

随着犯罪的“多元化”发展和以审判为中心的刑事诉讼制度改革不断深入推进，公安技术工作对生物物证的证据能力和证明力的审查评断提出了更高要求，需要从何人、何地、何物、何时、何为、何事、何故等不同物证鉴定层级[1,2]，通过核酸序列高效富集、遗传信息深度解析、统计学计算、深度学习模型分类等，为案件侦破和法庭审判提供更加科学可靠、丰富全面的证据支撑。（1）大体系 DNA 提取策略有效提高渗透性检材附着 DNA 富集效率。大体系 DNA 提取策略，可以在一次操作中有效富集 DNA 模板，为 STR 检验提供必要基础。与常规核酸提取纯化系统相比，大体系 DNA 提取系统，可以将织物、纸张等渗透性载体检材样本单次提取量由≤6 cm^2 增大至 10~12 cm^2、消化裂解体系由 250 μL 增大至 5 mL，有助于在 DNA 附着分散或发生渗透迁移的生物检材中成功富集染色体片段，并检出有效 STR 分型。（2）基于新一代测序的 STR（short tandem repeats）分型技术助力流产组织混合样本胎儿 STR 分型及嫌疑人认定。流产组织胎儿 STR 分型检测长久以来始终是法医 DNA 检验面临的一大难题，对于孕早期、组织结构不完整、腐败降解的流产组织，难以通过组织形态学分离绒毛组织，母体与胎儿混合 STR 分型结果可以为强奸致孕案件嫌疑人认定提供关键依据。基于新一代测序的 STR 分型技术，摆脱了 PCR-CE 法荧光强度和种类的限制，一次测序可获得更多数量和种类遗传标记信息，在法医学领域，特别是复杂亲缘关系鉴定中有广泛的应用前景，联合应用 STRSTR 长度多态性、序列多态性和侧翼序列信息，可以为嫌疑人认定提供更加全面可靠的遗传学和统计学依据。[3]（3）生物斑迹多组学分析为遗留时间推断提供可靠依据。生物斑迹遗留时间（time since deposition，TSD），在案发时间推断、涉案人员甄别、案发过程重建中有重要作用。从生物斑迹蕴含的 RNA 和微生物变化规律分析入手，探明血液样本 RNA 完整性和转录本变化规律以及唾液斑微生物多样性改变特征，获得潜在时间标志转录本和微生物，应用深度学习模型，可以为血液样本和唾液斑遗留时间提供切实可行的分析方法。[4,5]

关键字 法庭科学；生物物证；生物斑迹遗留时间；混合流产组织；大体系 DNA 提取

参考文献：

1.物证鉴定证据应用层级论. 王桂强，刑事技术，**2011**，6：3-9.
2. A hierarchy of propositions: deciding which level to address in casework. R. Cook, I.W. Evett, G. Jackson, et al, *Science & Justice*. **1998**, 38: 231–239.
3.基于新一代测序技术进行孕早期流产组织胎儿 STR 分型及亲子鉴定. 张瑾，刘开会，郝金萍，等，中国法医学杂志，**2024**，39(5)：546-552.
4.Transcriptomic changes and prediction of time since deposition of blood stains. Zhang J, Liu K, Wang R, et al, *Forensic Sci Int*, **2024**, 355:111930.
5. 转录组分析在血液样本时间和供体特征刻画中的应用研究. 张瑾，刘开会，张颖，等，遗传，**2023**，45(01)：52-66.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

公安机关虚拟解剖装备及实验室建设概况

何光龙*
公安部鉴定中心

虚拟解剖技术是利用放射影像技术获取尸体的影像学数据，以推断死亡原因、死亡时间、成伤机制等，具有非破坏性、高效率、可重复性强等优势，是传统尸检的有效补充。随着科技的进步和法医学的发展，虚拟解剖技术在我国公安机关逐渐得到重视和推广。目前，公安机关有多个省份建立了虚拟解剖实验室，但也面临设备适配性不佳、尸体影像技术基础研究不足，专业人才培训和相关标准规范缺乏等挑战。本文通过文献分析、学术交流、问卷调查和实地考察等方法，调研了公安机关虚拟解剖实验室的建设现状、存在的问题及发展前景，提出了改进建议，针对目前医用 CT 在尸体扫描中适配性、图像后处理工作站及数据库建设等，进行探索，希望能为今后虚拟解剖实验室更好的建设发展提供一些启发。

关键字 法医学；虚拟解剖；实验室建设；技术装备

参考文献：

1.Shruthi M, Gupta N, Jana M, et al. Conventional vs virtual autopsy with postmortem MRI in phenotypic characterization of stillbirths and fetal malformations[J]. Ultrasound Obstet Gynecol,2018,51(2):236-245.
2.Badam R K, Sownetha T, Babu D, et al. Virtopsy: Touch-free autopsy[J]. J Forensic Dent Sci,2017,9(1):42.
3. Filograna L, Pugliese L, Muto M, et al. A Practical Guide to Virtual Autopsy: Why, When and How[J]. Seminars in ultrasound, CT, and MRI,2019,40(1):56-66.
4.Pomara C, Fineschi V, Scalzo G, et al. Virtopsy versus digital autopsy: virtual autopsy[J]. Radiol Med,2009,114(8):1367-1382.
5.Wullenweber R, Schneider V, Grumme T. [A computer-tomographical examination of cranial bullet wounds (author's transl)][J]. Z Rechtsmed,1977,80(3):227-246.

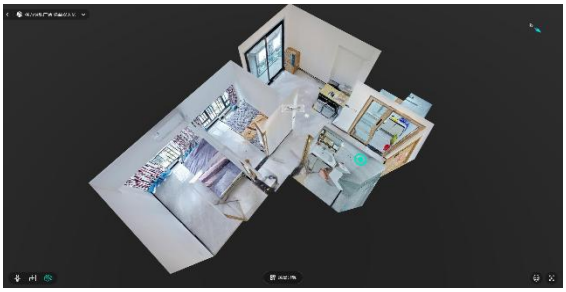
分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

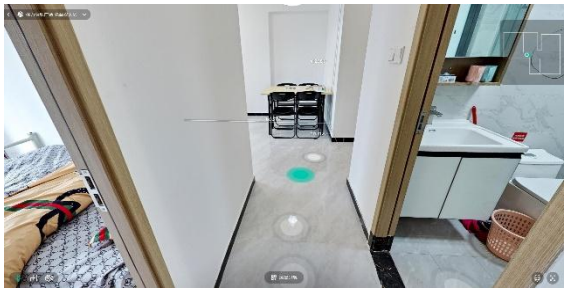
三维数字化建档技术在案事件现场勘查中的应用

蒋雪梅、窦修超*
公安部鉴定中心

针对犯罪现场采集的二维图像与案件现场重建、案件分析存在衔接障碍等难题，我们研究形成了一套犯罪现场勘验专用空间建模系统。该系统通过无人机、激光扫描设备等设备获取犯罪现场的多尺度三维空间数据。基于这些数据，空间建模软件自动完成犯罪现场数字化三维重建，这形成新的犯罪现场记录模式，清晰、真实地记录案事件现场。这种可测量、可回溯的记录方式能结合与犯罪相关的视频、照片、专家分析意见等材料。这可以代替传统的笔录、绘图、照片等方式去记录犯罪现场情况的方式，全方位、系统化建立犯罪现场 3D 数字化档案。

该方法在犯罪调查中能够发挥重要作用。专家可基于犯罪现场的 3D 数字化档案，开展远程勘验和分析工作。专家还可以基于犯罪现场的三维模型和分析情况，去使用软件制作三维动画模拟犯罪发生的过程。此外，该方法结合虚拟现实技术，还能用于犯罪现场调查领域的技术培训。









关键词：多尺度建模技术；记录方式；数字化建档

参考文献：
1.刘志海,代振锐,田绍鲁,等.非接触式三维重建技术综述[J].科学技术与工程, 2022, 22 (23)：9897-9908.
2.卜令彬.基于结构光的案件现场三维重建方法[D].北京：中国人民公安大学,2021.
3. Zulkifli H M ,Tahar N K . The Influence of UAV Altitudes and Flight Techniques in 3D Reconstruction Mapping[J]. Drones,2023,7(4).
4.姜子鹏.基于点云数据的案件现场三维重建方法研究[D].北京:中国人民公安大学,2019.

关键字 多尺度建模技术；记录方式；数字化建档

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

视频资料证据在案件调查中的应用

李春宇*
中国人民公安大学

随着数字技术的快速发展，视频监控系统已成为案件调查中不可或缺的工具。本文旨在探讨视频资料证据在案件调查中的应用及其面临的挑战。视频资料作为一种动态、直观的证据形式，能够提供案件现场的连续视觉记录，对于案件的侦破和证据的固定具有显著优势。本文首先分析了视频资料证据的特点，包括其直观性、动态性和客观性。随后，本文探讨了视频资料在案件调查中的具体应用，如现场还原、嫌疑人识别、证据固定和行为分析。然而，视频资料的应用也面临着隐私保护、技术限制和法律认可等挑战。文章最后展望了人工智能技术在视频资料分析中的应用前景，并讨论了法律体系完善对视频资料证据地位的加强。本文认为，合理利用视频资料证据，可以在保障公民隐私权的同时，提高案件调查的效率和准确性。

关键字 视频资料证据；案件调查；隐私保护；人工智能；法律认可

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

人工智能在电子数据取证中的应用

李果*、柳秋霜
重庆市合川区公安局

随着信息技术的飞速发展，电子数据在司法活动中的重要性日益凸显。人工智能技术的不断进步为电子数据取证带来了新的机遇和挑战。本文详细探讨了人工智能在电子数据取证中的多个应用领域，包括数据处理、图像识别、语音识别、自然语言理解、代码分析、智能化操作、单案深度研判、类案串并分析、实战模型构建、情报线索推送以及业务流程管理等方面。通过对这些应用的深入分析，展示了人工智能在提高电子数据取证效率、准确性和智能化水平方面的巨大潜力。

关键字 人工智能、电子数据、取证

参考文献：

1.张辉极,人工智能在电子数据取证中的应用研究,中国安防, 2021, 7, 85-89.
2.李娜,电子数据证据应用在人工智能背景下的发展与挑战,河北公安警察职业学院学报,2020 年 03 期 3.效率源科技,当侦查取证遇上 AI,知乎
4.江汉祥,张辉极,电子取证 3.0 时代的实验室建设思路,网络空间安全,2019 年 05 期
5.皮浩,AI 时代的情报数据分析,第七届法庭科学发展国际研讨会,2024

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

凝胶色谱结合统计学方法用于高分子材料物证的进一步检验

郭洪玲*、朱军、胡灿、王萍、梅宏成、李亚军、周正、邓显贺
公安部鉴定中心

随着高分子材料在人们日常生活中广泛应用，在各类案件中也经常出现，如凶杀案件中，犯罪分子用高分子材料包装袋来包裹尸体、用保鲜膜或胶带来封住口鼻，使人窒息；交通事故中经常涉及如汽车灯罩、保险杠残片等高分子材料物证，成为法庭科学微量物证专业常见的微量物证之一。通过高分子材料物证间的比对检验可以为建立嫌疑人与现场，嫌疑人、使用工具与受害人之间关联关系提供重要证据。目前，法庭科学领域检验方法比较成熟，主要是通过红外光谱确定高分子材料的种类[1]，元素分析法[2]检验高分子材料中添加剂元素。但由于高分子材料种类并不多，有些材料也不添加任何添加剂，给高分子材料物证比对检验带来很大困难。利用同种类高分子材料分子量及其分布不同的固有性质，采用凝胶渗透色谱法（GPC）是检验高聚物平均分子量和分子量分布的方法[3]，可对同种类高分子材料物证做进一步比对检验。作者优化了 GPC 检验汽车大灯聚碳酸酯塑料的分析条件，对 50 个不同厂家样品进行检验，对获得的重均分子量数据（Mw）和多分散指数（PDI），采用 Hotelling T2 和方差分析法进行数据分析，将对采用常规方法无法区分的样品的区分率提升至 94.64%；作者还将 GPC 方法用于 79 个不同厂家及批次的子弹发射药样品（其主要成分为硝化纤维素）的分析，采用高斯核密度估计的似然比计算方法[4]对检验数据进行评估，一类错误和二类错误率均为 0。凝胶渗透色谱法检测高分子材料的分子量和分子量分布是从高分子材料合成工艺中寻找差异，反映高分子材料自身物理参数的异同，弥补了红外光谱法和扫描电镜/能谱法进行此类物证检验区分率不高的不足，结合不同的统计学方法对检验结果进行准确分析和评估，为高分子材料的进一步比对检验提供了新的思路和方法。

关键字 凝胶色谱，分子量及其分布，高分子材料

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

基于表面增强拉曼光谱法的保健食品中 PDE5is 快速检测方法的研究

栾玉静*、王芳琳、孙晓宇、接强
公安部鉴定中心

背景：近年来，我国在打击食药环犯罪的专项行动中查处多起保健食品中非法添加磷酸二酯酶 5 型抑制剂（PDE5is）的案件。PDE5is 多添加于抗疲劳类、补肾壮阳类和调节免疫类保健食品中，严重威胁了消费者健康。 目的：为提高保健食品市场监管和筛查效率，打击 PDE5is 非法添加行为，基于表面增强拉曼光谱技术（SERS）和自制金溶胶增强试剂，建立了针对液体保健食品中 90 种非法添加 PDE5is 的快速筛查方法。 方法：采用柠檬酸三钠还原法制备金溶胶，使用乙腈和硫酸溶液对保健酒、口服液等液体保健食品进行样品前处理，将样品与乙腈按 1：2 体积比混合，涡旋后加入少量 NaCl 固体，以 3000 rpm 离心 5 min，取上清液与 0.3 mol/L 硫酸溶液按 1：4 体积比混合，涡旋后作为待测溶液备用。依次取 500 μL 金溶胶，20 μL 待测溶液，20 μL 匹配剂（1 mol/L，盐酸:氯化钠=1:9，v/v）置于拉曼检测瓶中混匀，瓶内液体变色后采集拉曼光谱。 结果：自制金溶胶的紫外可见光谱最大吸收峰位于 532.5 nm，对应吸光度值为 0.884，采用动态光散射法（DLS）测定 Z-平均粒径为 38.05 nm，其粒径分布直方图呈现正态分布，表明金溶胶粒径均匀。该方法的最低检出质量浓度为 1~10 μg/mL，以硫代西地那非保健酒加标样品为例，经 10 次 SERS 检测后，在 1258 cm-1 处计算出相对标准偏差（RSD）为 5.06 %，重复性良好。采用该方法对 7 种保健酒和 11 种口服液进行筛查，检出某品牌保健酒为硫代艾地那非阳性，与液相色谱质谱联用法检测结果一致。 结论：该方法具有操作简单、灵敏度高、重现性好等优点，可准确定性 PDE5is 类别，提供疑似药物的名称，为食药环部门对液体保健食品的日常抽检和现场快速检测提供了可行的技术支持。

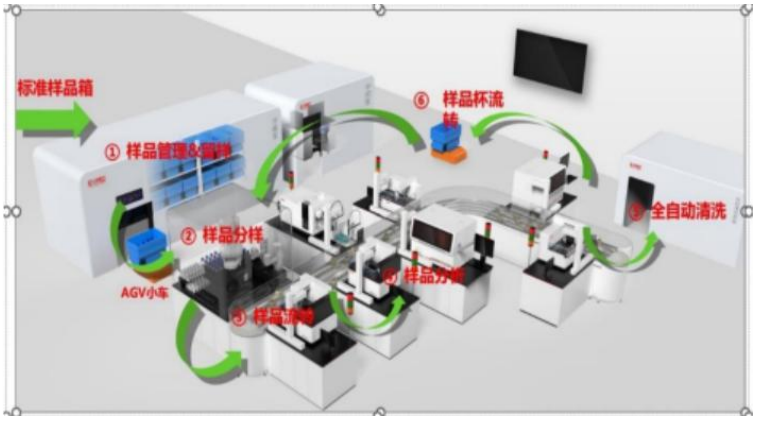
关键字 表面增强拉曼，保健食品，PDE5is 抑制剂

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

法庭科学全自动智能化毒物筛查“熄灯实验室”建设及应用

谢伟宏[1]、应剑波[1]、程建波*[1]、傅得锋[2]、卓成飞[3]、石银涛[4]、宫臣[5]
1. 杭州市公安局刑事侦查支队（杭州市公安局刑事科学技术研究所）
2. 浙江省公安物证鉴定中心
3. 杭州谱育科技发展有限公司
4. 重庆市公安局物证鉴定中心
5. 杭州创恒电子技术开发有限公司

杭州刑科所的熄灯实验室，就是以“信息化、智能化、自动化、国产化、安全化、个性化”为主题，将环境、安全、数字、节能融入到实验室建设过程中，以实验室检测项目为中心，以满足实战需求为导向，按照“科技强警，科技兴警”的要求，着眼于解决法庭科学智慧化鉴定的“卡脖子”问题，推动新质生产力同新质战斗力高效融合，实现数字化智能化手段与刑事侦查业务深度融合，打造高科技、高效能、高质量的智慧型刑事技术实验室。依托国产自动化提取仪及检测设备、智能冰箱及物证柜、自动机器人、定制化 lims 智鉴系统融合大数据、RFID 技术及人工智能等前沿技术建设的智能化、自动化熄灯实验室，不受时间限制、无需人员值守，全自动完成对非正常死亡案（事）件中死者的生物体液进行多领域、全项目的检验鉴定，实现了法庭科学刑事技术的管理高效化、资源集约化、鉴定过程自动化，并通过检测数据的 AI 自动处理研判、自动预警，为刻画死者特征及研判死亡原因做好预警防治



支撑，解决了当下公安检验鉴定的痛点、难点问题，构建了智慧警务在刑事技术领域的新模式。

关键字 智慧警务；法庭科学；熄灯实验室；自动化；智能化；检验鉴定；非正常死亡

参考文献：

1. Wu Qinglin, Wang Yan. Exploration and practice of efficient intelligent laboratory based on "Cloud computing + Internet of Things" [J]. Laboratory Research and Exploration, 2024,Vol.43No. 2:2266-230.
2. Zhu Junjie, Li Yong, Zheng Zhian, et al. Intelligent laboratory management system based on deep information fusion [J]. Laboratory Research and Exploration, 2021,40 (11) : 228-232. (in Chinese)
3. Du Jin, Xu Jin, Wanwang Jun, et al. Construction of Customs Intelligent Laboratory and

Exploration of key technologies [J]. Laboratory Research and Exploration, 2022,41 (10) : 260-264. (in Chinese)
4. Zhao Wenjing, Liu Kui. Construction of intelligent laboratory in universities based on AI/iot [J]. Laboratory Research and Exploration, 2022,41 (12) : 163-167. (in Chinese)
5. Yan Wanru, DU Qinglin, WEI Jinzhi, et al. Research and establishment of intelligent Laboratory based on Internet + Technology [J]. Laboratory Science, 2019, 23 (6) : 170-173. (in Chinese)
6. Sheng Xiaojun, ZHANG Hangbin, Lin Wanglin. Thinking exploration and practice of building intelligent Laboratory of quality Inspection to realize machine replacement [J]. Value Engineering, 2018,23 (6) : 12-14.
7. Teng Junhua, Fan Tiecheng. Open intelligent laboratory management system based on RFID [J]. Journal of Sichuan University (Natural Science Edition), 2018,55 (1) : 253-255. (in Chinese)

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

基于 HS-SPME-GC/MS 和电子鼻的性别推断研究

任昕昕*、董林沛、宋歌、常靖、张云峰
公安部鉴定中心

人体气味是一种重要的生物物证，在犯罪现场侦查中具有很大的潜力，但现有的应用主要依赖于警犬。基于仪器分析尤其是基于现场快速检测仪器的研究相对较少。本研究使用两种不同的仪器分析方法分析了人体挥发性有机化合物（VOCs），可用于性别判断。一种是利用脱脂棉提取腋窝气味后进行固相微萃取气相色谱-质谱（SPME-GC/MS）检验的间接方法，该方法具有吸附容量大、灵敏度高的优势。将所建方法应用于实际样品中不同性别样品的区分，准确率为 93.3%。另一种是直接法，利用自主研发的电子鼻（e-nose）现场快速分析手部气味，并研究了正交偏最小二乘判别分析（OPLS-DA）和卷积神经网络（CNN）等不同算法对不同特征的分类精度。使用 CNN 算法进行性别预测的准确率高于 90%，具有良好的分类效果。

关键字 人体气味　气相色谱-质谱 电子鼻　性别推断

参考文献：

1. Peters R, Veenstra R, Heutinck K, et al. *Forensic Sci Int.*, **2023**, 78, 349-356.
2. Drabinska N, Flynn C, Ratcliffe N, et al. *J Breath Res.*, **2021**, 15, 034001.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

稳定同位素质谱仪在炸药分析中的应用

胡灿*、朱军、梅宏成、郭洪玲、王萍、李亚军、邓显贺
公安部鉴定中心

炸药的深度比对与溯源对于揭露爆炸案事件的真相至关重要，采用不同来源的原料或不同生产工艺生产的炸药，其组成元素的稳定同位素比值存在差异，这些差异使得稳定同位素比值成为炸药深度比对和溯源的关键指标。稳定同位素质谱仪（IRMS）作为一种精确测量稳定同位素比值的高精尖技术，已经日趋成熟，与元素分析仪（EA）、气相色谱仪（GC）、液相色谱仪等仪器联用，在食品安全、环境保护、法庭科学等领域展现出卓越的应用潜力[1]。在炸药的比对与溯源方面，IRMS 同样展现出了非凡的实力，自 1975 年 IRMS 首次被用于区分不同国家生产的三硝基甲苯以来[2]，IRMS 已成功用于多种炸药的分析。但目前的研究主要聚焦在爆炸前炸药原药的分析，爆炸后复杂基质中微量爆炸残留物的稳定同位素检测仍然是个挑战。研究组以三过氧化三丙酮（TATP）等常见有机炸药为对象，建立了基于金属有机骨架材料（MOFs）的固相微萃取方法，联用 GC 与 IRMS，构建了复杂基质中微量有机炸药的稳定同位素检测方法[3]。考察了合成原料、合成条件对 TATP 的碳、氢稳定同位素比值特征的影响，并研究了不同基质对 TATP 稳定同位素比值测定的影响，在自来水和土壤基质中的 TATP 加标回收率分别为 87.32%~90.57%和 88.76%~100.93%。研究结果对爆炸现场复杂基质中微量 TATP 的溯源分析有重要意义，亦为其他复杂基质中微量有机化合物的溯源提供了参考。

关键字 炸药，稳定同位素，样品制备，MOFs

参考文献：

1. Benson S, Lennard C, Maynard P, et al, *Forensic Sci. Int.*, **2006**, 157, 1-22.
2. Nissenbaum A. *J Forensic Sci*, **1975**, 20, 455-459.
3. WY Xie, XH Zhu, HC Mei, et al, *Forensic Sci. int.*, **2023**, 352, 111852.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

生物快速分析及应用

张祯*
江苏大学

色谱质谱联用技术是目前研究毒物的主要手段，这类方法具有准确性好、灵敏度高的优势。然而，SPE 等样品前处理方法存在劳动强度大，过程繁琐费时，需要使用大量对环境不友好的有毒有机溶剂，难以实现自动化等缺点。仪器分析也有测试成本高、检测所需样品量大、需要专门技术人员操作等不足[1]。所以传统仪器分析方法无法实现对大量样品在较短时间内进行简单快速的分析，从大量数据中反映出其真实的污染状况[2]。导致了此类研究的滞后。

与此相对，生物分析（基于抗体或其他具有识别功能的生物分子）方法具有前处理简单、分析过程快捷的优势，可以弥补仪器方法的不足。事实上，这类分析方法因其可靠、高效、快速、低成本，已被大量应用于各种毒物的分析检测，受到了包括美国 EPA 等研究者在内的广泛肯定。我们也认为：一些毒物的污染水平与特征、环境行为及分布，需要长期、高频次、多样品分析，从大量分析结果中得出规律性的结论[3]。而生物分析方法完全满足此类研究的要求。

关键字 生物分析方法，快速分析，信号放大

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

基于常压电离质谱的毒品快检关键技术研究

李冬梅*[1,2]、单雅冰[1,2]、吴一荻[1,2]、李佳益[1,2]、贾睿[1,2]、陈莹[1,2]、曾宪彬[1,2]
1. 北京市禁毒科技中心
2. 国家毒品实验室北京分中心

针对新型毒品种类繁多且具备可扩充性，急需发展和建立结构确证性强的快检技术方法。常压电离质谱技术是近十几年来质谱研究领域的新兴热点研究方向之一，其重大突破和进展促使质谱分析迈向了原位实时、快速高效的新时代。常压电离质谱可在大气压条件下实现分析物的直接进样和离子化，无需或仅需简单样品前处理，可极大简化质谱分析的操作流程，缩短分析时间，在毒品的现场原位、实时、快速高通量分析检测中具有突出优势[1,2]。

本研究以常见传统毒品、新型毒品和新精神活性物质为研究对象，开展五方面研究工作：1. 构建介质阻挡放电电离-热解吸-质谱分析实验装置，实现了芬太尼溶液样品分析，探讨芬太尼类质谱碎裂规律，构建芬太尼类高分辨质谱数据库；2. 基于有限元仿真模拟和 3D 打印技术，构建一种新型介质阻挡放电电离-热解吸-质谱分析实验装置，实现干血（浆）斑样品中芬太尼的直接定量分析测定和筛查分析；3. 开展基于基质辅助入口电离的常压电离源研制，考察基质辅助入口电离的样品引入材料，并设计 4 代接口，实现 5 种芬太尼类化合物的良好电离；4. 建立基于小型化质谱仪的毒品可疑物快检分析方法，优化质谱参数，构建质谱分析实体数据库，实现毒品可疑物快速筛查鉴定；5. 开展毛发样本中毒品快速筛查新方法建立与质量控制研究，设计毛发样本一体化前处理装置，建立基于小型化质谱仪的毛发样本中常见毒品和新精神活性物质的快速筛查分析新方法。

关键字 毒品；常压电离质谱；介质阻挡放电电离；小型化质谱

参考文献：

1. T. H. Kuo, E. P. Dutkiewicz, J. Pei, C. C. Hsu, *Anal. Chem.*, **2020**, 92 (3), 2353-2363.
2. C. L. Feider, A. Krieger, R. J. DeHoog, L. S. Eberlin, *Anal. Chem.*, **2019**, 91 (7), 4266-4290.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

痕量甲基苯丙胺场放大 CE–MS/MS 新方法研究

张钰洁、魏艳萍、曾静*
西南医科大学

随着污水流行病学的发展和推广应用，通过对城市污水中的毒品及其代谢物进行定性定量分析，并结合污水流量和覆盖人口数量监测区域毒品消费量，为公安禁毒缉毒部门提供科学数据具有重要意义。污水中毒物含量极低，对于分析检测方法提出了很高的要求。目前大多采用离线或在线固相萃取法富集，再采用液质联用平台进行分析检测，但这种方法操作相对繁琐、分析时间较长。课题组利用毛细管电泳在线富集、分离的优势，在同一根毛细管内同时实现富集和分离，并结合高灵敏的质谱检测器，建立了一种痕量污水甲基苯丙胺在线富集、分离和检测的毛细管电泳质谱分析新方法。该方法灵敏度可达 0.1 ng/mL，稳定性、重复性均满足相关要求，检测结果与 LC-MS/MS 结果一致，为日益增长的污水毒物检测需求提供了一种新的选择。

关键字 毛细管电泳；质谱；甲基苯丙胺；在线富集

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

基于拉曼-光度计-胶体金集成技术的快检设备研发

周楠*[1]、唐寅[1]、陶秋辰[1]、常化仿[2]
1. 南京警察学院
2. 普拉瑞思科学仪器（苏州）有限公司

针对公安环食药侦、理化刑侦的现场勘验以及食品安保的工作需求，综合采用拉曼光谱技术、光电比色技术、胶体金免疫层析技术，研发集成三种技术的多功能快检设备。基于普通拉曼技术，可对常量食品添加剂、药品、原辅料、危化品等进行快速无损检测；基于表面增强拉曼光谱技术，可对假药劣药、食品非法添加、保健品非法添加西药、炸后/烧后残留物、毒品、毒物、环境污染物等进行现场快速检测；基于光度计技术，可对滥用食品添加剂、非食用化学物质、理化指标等进行快速检测；基于胶体金免疫层析技术，可对瘦肉精、兽药残留、农药残留、真菌毒素等进行快速检测。通过集成拉曼光谱模块、12 通道光度计模块、胶体金检测模块，开展多模块集成研发，依托于内置数据终端，实现对设备的控制；通过配备本地和云端 2 版数据库，实现检测数据云端共享，可根据需求对检测结果计算，提高设备准确度，实现对不同目标物的快筛快检；通过将算法、数据库、终端软件、硬件性能、试剂性能有机整合，实现云端检测架构需要云、网、端三位一体的解决方案，满足更迅速、更准确的现场检测需求。本研究能够解决公安环食药侦部门的环境保护（水体及土壤中多环芳烃、环境激素等）、食品安全（非食用化学物质、滥用食品添加剂、农药残留/假农资、兽药残留、保健品中非法添加等）、药品安全（假药、劣药、中成药非法添加西药等），以及刑侦理化部门毒物（除草剂、鼠药、剧毒农药等）、炸后残留物等快速检测的问题，有助于公安相关警种队伍现场快速检验能力的提升。

关键字 快检设备；拉曼光谱技术；光电比色技术；胶体金免疫层析技术

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

基于高光谱技术的物证鉴定现场智能快检

余自如[1]、韩星周[2]、秦达[2]、杨求凤[2]、高章明[3]、刘勇孜[4]、余向阳*[5]
1. 华南理工大学
2. 公安部鉴定中心
3. 江西省上饶市公安局刑事科学技术研究所
4. 江西省公安厅刑事科学技术研究所
5. 中山大学

近年来，由于微光电技术和人工智能的强大背景支撑，微型高光谱相机得到了迅速的发展，使我们可以近距离的测量光谱及光谱成像数据，结合先进的人工智能算法，使其在现场快检领域的应用得以可行。本论文展示了我们在微型高光谱的设备研发、智能化方案及物证鉴定中的应用所做的工作,报告了我们在印油分类和不同布料中血迹的研究结果。

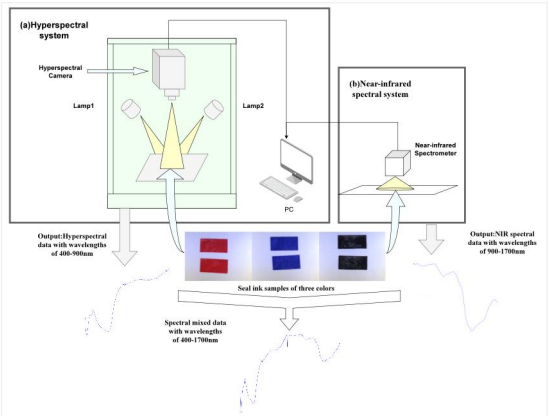


图 1 印油高光谱成像探测系统

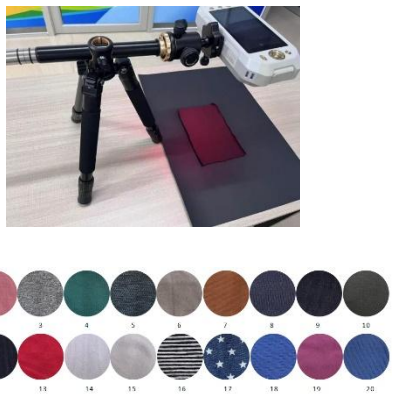


图 2 实验装置及布料种类

关键字 高光谱技术，人工智能，现场快检，物证鉴定

参考文献：

1. Yu, Z., & Cui, W., *Computers and Electronics in Agriculture*, **2023**, 215, 108382.
2. Xie, Z., Yu, Z., Duan, X., Han, X., Qin, D., Cui, W., Yu, X., *Microchemical Journal*, 2024, (in print)

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

尸体磁共振成像在法医虚拟检验中的应用

母航[1,2]、陈志明*[1,2]、周哲[3]、陈为龙[4]、杨超朋[5]
1. 吉林大学基础医学院
2. 吉林大学司法鉴定中心
3. 沈阳市人民检察院
4. 吉林省公安厅物证鉴定中心
5. 公安部鉴定中心

尸体磁共振成像（post-mortem magnetic resonance imaging, PMMR）是利用磁共振成像原理对尸体进行死后成像，从而对尸体进行死因分析。随着尸检率的下降，基于 PMCT 结合 PMMR 进行虚拟解剖已逐渐成为传统尸检的替代方案[1]。现有研究证实，PMCT 结合 PMMR 及临床病史对于法医学死亡原因判定具有重要意义[2]。尽管在磁共振成像技术临床医学已得到广泛应用，但在法医学领域的研究和应用仍处于探索阶段。

但 PMMR 在虚拟解剖方面相较于尸体计算机断层扫描（post-mortem computed tomography, PMCT）具有不可忽视的优势。PMMR 具有多参数、多序列成像特点，PMMR 不存在运动伪影因此可以获得最佳分辨率[3]。基于重 T2WI 序列，磁共振水成像无需对比剂即可显示人体内含有液体的管道系统[3]。尽管进行 PMMR 检查要花费比 PMCT 检查更多的时间，但 PMMR 相对于 PMCT 具有更高的软组织分辨力，PMMR 可以分析死后心肌梗死和非心肌梗死区域的形态学和组织学差异，死后对心脏进行 PMMR 定量分析可以对不同阶段的心肌梗死区分和表征[6]。研究表明，在年轻死者因心源性猝死（Sudden cardiac death, SCD）而死亡的案例中，PMMR 的检出准确率明显高于 PMCT[4]。

PMMR 显微镜检查甚至可以检测到大脑蓝斑的异常改变，这意味着 PMMR 可以检测到死者脑部是否发生了退行性改变，能够检测到 PMCT 无法发现的微小病变灶，甚至与组织病理学检验相媲美[5]。将磁共振波谱成像（magnetic resonance spectroscopy, MRS）应用于虚拟解剖，可以实现无创检测尸体组织化学成分变化，进行定性定量分析，未来可能利用死后 MRS 检测组织化学成分变化趋势进行死亡时间推断[3]。

磁共振成像的参数和序列研究仍在不断增加。而在法医学领域，对于 PMMR 应用的探索仍处于起步阶段，未来 PMMR 在虚拟解剖方向的应用与发展还有很长的一段路要走。而随着人工智能时代的飞速发展，临床研究与人工智能快速融合应用，预示着 PMCSI 与人工智能、影像组学技术的联合应用也必将成为未来发展新趋势。

关键字 尸体磁共振成像，虚拟解剖，死亡原因，死亡时间

参考文献：

[1] Bisset R. Magnetic resonance imaging may be alternative to necropsy. BMJ. 1998 Nov 21;317(7170):1450. doi: 10.1136/bmj.317.7170.1450. PMID: 9822409; PMCID: PMC1114303.
[2] Bisset RA, Thomas NB, Turnbull IW, Lee S. Postmortem examinations using magnetic resonance imaging: four year review of a working service. BMJ. 2002 Jun 15;324(7351):1423-4. doi:10.1136/bmj.324.7351.1423. PMID: 12065265; PMCID: PMC115853.
[3] 于春水，郑传胜，王振常主编；余永强，高剑波，邱士军，居胜红副主编. 医学影像诊

断学 第 5 版[M]. 北京：人民卫生出版社, 2022.07.

[4] Puranik R, Gray B, Lackey H, Yeates L, Parker G, Duflou J, Semsarian C. Comparison of conventional autopsy and magnetic resonance imaging in determining the cause of sudden death in the young. J Cardiovasc Magn Reson. 2014 Jun 19;16(1):44. doi: 10.1186/1532-429X-16-44.PMID: 24947895; PMCID: PMC4067524.

[5] Keren NI, Taheri S, Vazey EM, Morgan PS, Granholm AC, Aston-Jones GS, Eckert MA. Histologic validation of locus coeruleus MRI contrast in post-mortem tissue. Neuroimage. 2015 Jun;113:235-45. doi: 10.1016/j.neuroimage.2015.03.020. Epub 2015 Mar 17. PMID: 25791783; PMCID: PMC4649944.

[6] Zech WD, Schwendener N, Persson A, Warntjes MJ, Jackowski C. Postmortem MR quantification of the heart for characterization and differentiation of ischaemic myocardial lesions. Eur Radiol. 2015 Jul;25(7):2067-73. doi: 10.1007/s00330-014-3582-2. Epub 2015 Jan 16. PMID: 25591749.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

基于国产 GA118-24B 遗传分析仪进行 9 色荧光常+Y STR 复合扩增体系的构建及验证

白雪*[1]、于浩[2]、张哲[1]、李英[3]、贾丽娜[1]、宋文[1]、崔玉玲[2]、王晶[1]、李泽伦[3]、李万水[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 河北医科大学
3. 公安部第一研究所

摘要 目的 构建一套 9 色荧光常+Y STR 复合扩增体系，并对其性能进行验证。方法 采用 9 色荧光标记技术，以 GB/T41009-2021 国家标准中推荐的常染色体和 Y 染色体核心、优选基因座作为候选基因座，构建一套包含 29 个常染色体、40 个 Y-STR 基因座以及 1 个性别基因座 Amel 的复合扩增体系；对国产 GA118-24B 遗传分析仪进行光学系统和光谱校正算法的优化改进以满足 9 色荧光检测需求，在此仪器上按 GB/T 37226-2018 国家标准要求对 9 色扩增体系的准确性、灵敏度、种属特异性等系统性能指标进行验证。结果 成功构建了包含 Amel、D5S818、D21S11、D7S820、CS1FPO、D2S1338、D19S433、D8S1132、D2S441、VWA、D8S1179、D16S539、D10S1435、PentaD、D3S3045、TPOX、TH01、D22S1045、D18S51、FGA、D19S253、D10S1248、D6S477、D6S1043、D13S317、D12S391、D15S659、PentaE、D1S1656、D3S1358、DYS460、DYS389I、DYS390、DYS533、DYS392、DYS518、DYS557、DYS570、DYS458、DYS437、DYS385、GATA-H4、DYS576、DYS643、DYS508、DYS627、DYS456、DYS391、DYF404S1、DYS438、DYS448、DYF387S1、DYS596、DYS549、DYS399S1、DYS393、DYS635、DYS439、DYS19、DYS444、DYS449、DYS481、DYS527a/b 及 DYS447 等 70 个基因座的 9 色荧光 STR 复合扩增体系。本体系分型准确、各基因座均衡性良好，灵敏度可达 0.0625ng，具有一定的混合样本检测能力。结论 本体系可通过单次检测获得丰富的基因座信息，可满足日常检案、建库和打拐案件的需求，具有良好的法医学实践意义。

关键字 法医遗传学；常+Y 染色体；9 色荧光；STR 试剂盒；复合扩增；遗传分析仪；

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

毛干蛋白质组中单氨基酸多态性的质谱检测分析

丰蕾*[1]、吴佳蕾[2]、杨志远[1]、丁冬升[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 江阴市公安局

目的：毛干是法医常见的生物物证，DNA 含量低且高度降解，却富含蛋白质。蛋白质中蕴含着丰富的遗传信息，表现为单氨基酸多态性（SAP），因缺少有效的检测技术，毛干的证据价值尚未得到充分利用。发展基于高分辨质谱仪的 SAP 检测方法，是毛干进行个体识别应用的关键环节。

方法：收集 20 名志愿者头发。取 2 厘米长单根头发，去除毛囊，剪碎至约 1 毫米，比较尿素结合压力循环技术（PCT）、离子液体结合接触式超声两种前处理方法的毛干蛋白提取能力。取同一根头发不同部位与不同长度进行质谱检测，采用 EASY-nLC 1200 超高压系统（Thermo Fisher Scientific）与 Orbitrap Fusion Lumos Tribrid 质谱仪联用，DDA 数据采集方式，分析部位与长度对检测结果的影响。最后探讨了质谱仪性能提升对检测 SAP 的影响。蛋白质组数据分析使用 pFind v3.2.1 软件，UniProt 下载 proteome_UP000005640 数据库搜库；使用 SAPTyper 软件进行 SAP 分析，自建的蛋白序列数据库搜库。

结果：

1. 离子液体结合接触式超声方法更有利于毛干蛋白提取在 9 个样本中，尿素结合 PCT 方法不能充分裂解头发，获得肽段质量为 3.14 μg±1.22 μg）；而在 12 个样本中，离子液体结合接触式超声方法可有效裂解头发，肽段为 48.19 μg±10.12 μg。

2. 毛干蛋白数量从发根到发梢递减取个体毛发一根，长约 29cm，去除毛根，因此从毛根至发梢共取 4 段发干，每段 2cm，每段间隔 7cm。质谱检测后经 UniProt 数据库搜库，检出的肽段数量由 P1 至 P4 分别为 1528、1282、1131、774，蛋白数量为 325、268、207、156。

3. SAP 检测毛干长度 2 厘米为宜对来源于同一个体的 4 个不同长度（4cm、2cm、1cm、0.5cm）的样本进行了检测，样本均为近毛根端且去除了毛根部分。4 个样品分别编号 L4、L2、L1、L05，检出肽段数量为 1407、1417、1310、1223，检出蛋白数量为 306、195、222、226，检出 SAP 数量为 79、90、83、76。

4. 高性能质谱仪提升 SAP 检测数量来源于 2 个人的 2 根头发（A 和 B），提取肽段。将同一份肽段样本，等分为 3 份，分别在了 timsTOF HT，ZenoTOF7600 与 Orbitrap Exploris 480 三款高分辨率质谱仪进行 1 个小时梯度的 DDA 采集方式质谱检测。结果显示，在蛋白、肽段、以及 SAP 检出数量方面，timsTOF HT > Orbitrap Exploris 480 > ZenoTOF 7600（表 1）。在 DDA 采集方式下，timsTOF HT 质谱仪由于扫描速度最快，检测肽段数量增多，相应的 SAP 检出数量也增加。

结论：建立了一个基于高分辨质谱仪的毛干单氨基酸多态性（SAP）的法医检测与分析方法，用于 SAP 发现与筛选，为毛干个体识别应用提供了技术基础。

关键字 毛干；单氨基酸多态性；质谱检测

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

第三代测序技术及法医学应用

莫晓婷、刘寰、姚伊人*
公安部鉴定中心

当前，二代基因测序技术(NGS)已成为一种普遍适用的基因组分析方法，但也存在读取序列短和需要 PCR 扩增等局限性。为克服上述问题，被称为“第三代测序(TGS)”的单分子测序技术应运而生。TGS 能实现实时测序，产生平均长度超过 10 kb 的长读数。它对常规 NGS 难以检测的超长重复序列、高 GC 含量的基因组区域分析具有独特的优势，可直接用于检测结构变异、RNA 表达、DNA 甲基化和宏基因组分析等许多领域。在过去的 10 年里，该技术不断发展，结果准确性、测序通量和测序长度逐渐提升。目前 TGS 技术在遗传疾病的诊断领域已取得重大进展，但在法医领域的应用尚处于起步和探索阶段。本文介绍了 TGS 的主流技术平台（美国的单分子实时测序和英国牛津纳米孔测序平台），分析了该技术在法医领域潜在的技术优势，并展望其在长 STR 信息分析、RNA 检测、表观遗传学研究以及线粒体检测等法庭科学领域的应用前景，为进一步推进 TGS 技术在法庭科学领域的应用研究奠定基础。

关键字 高通量测序；TGS；单分子实时测序；纳米孔测序；法庭科学

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

涂料墙面上汗潜手印热致荧光成像技术

李孝君*、宋瑞蓉、薛静、吴浩、秦旗
公安部鉴定中心

在现场勘查中，刑事技术人员往往会遇到大量攀爬入室的案件，嫌疑人通过攀爬进入居民楼或办公室，在攀爬过程中接触的墙面或者进入室内后由于不熟悉环境、光线较暗会无意识的扶靠墙面，往往能在墙面上留下犯罪嫌疑人的手印痕迹，而这些手印多数是汗潜手印，手印遗留的承痕体大多是涂料墙面，那么如何显现这些涂料墙面上的汗潜手印就是刑事技术人员面临的一个非常大的难题。

热致荧光技术就是一种显现汗潜手印的快速简便、无需化学试剂、且还可以与多种显现效果相互补充的检验方法，在物证检验领域具有重要的应用价值。通过一定时间的加热之后，在蓝绿光（波长为 450-530nm）的激发环境下，通过橙色护目镜观察，即可观察出强烈的黄色荧光手印。更重要的是，该方法不污染损坏涂料墙面，整个显现过程对刑事技术人员无毒无害。研究发现，热致荧光技术可以有效地显现出涂料墙面上汗潜手印，而且具有较高的灵敏度；显现过程不需要化学试剂的参与，可大大简化检测过程和节约检验成本；作为一种快速的汗潜手印检验方法，可以很方便地运用于实际案例中。

以涂料墙面上汗潜手印为研究对象，通过运用红外光谱、GC-MS 等手段从承痕客体、氨基酸、氯化钠以及其它成分等多角度分析热致荧光成像原理，确定了热致荧光现象是由汗液中的多种氨基酸参与反应生成的。生成的荧光物质是一类具有刚性结构和 p-π共轭体系的环状化合物，分子的闭环有利于荧光的产生，增加分子的共平面性和刚性可以使荧光增强。这种反应既发生于同种氨基酸之间，同时也发生于异种氨基酸之间。研究建立了相应的检验方法并研制了涂料墙面上汗潜手印热致荧光成像仪，该技术方法能够快速、有效地显现出涂料墙面上汗潜手印，为基层处理此类检材上汗潜手印提供了技术方法。该方法技术及设备在国内外未有相关报道，研究成果达到了国际先进水平，处于成熟应用阶段。目前，已在公安系统中三家单位进行了应用和推广，应用于数十起案件的侦破，在实际案件检验应用中取得了满意的效果，得到应用单位的好评。

关键字 热致荧光，汗潜手印，显现技术，原理分析

参考文献：

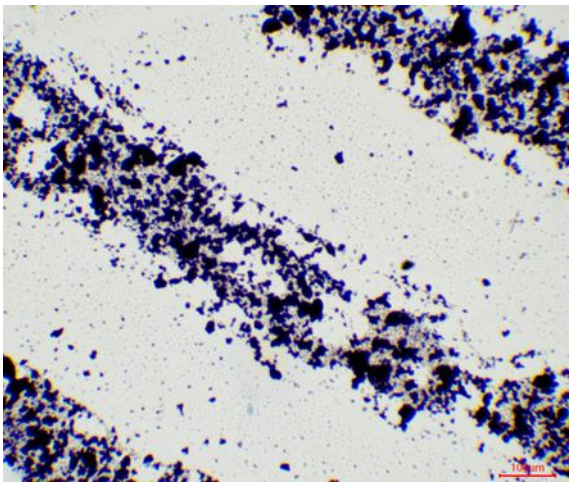
1. OLSEN R D. Scott’s fingerprint mechanics[M]. Springfield: Charles C Thomas Pub Ltd, 1978.
2. BROWN A G, SOMMERVILLE D, REEDY B J, et al. Revisiting the thermal development of latent fingerprints on porous surfaces: new aspects and refinements［J］. Journal of Forensic Science, 2009, 54(1): 114-121.
3.李孝君，黄涪江，周飞，等. 纸张上汗潜手印荧光热成像检验技术研究进展[J]. 警察技术，2015(2): 31-33.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流方式：报告

普鲁士蓝显现手印的研究

黄巾梁[1]、刘茜茜[1]、宋瑞蓉[2]、王子政[2]、曲会英[2]、马荣梁*[2]
1. 中国人民公安大学
2. 公安部鉴定中心

普鲁士蓝系三维多孔晶体材料，作为一种被人工合成的框架化合物，已有 300 多年的历史，该材料配置简单，安全无毒，因其深邃的蓝色和高吸附性能被广泛应用于颜料、医药等行业。本文选用普鲁士蓝，首次将其作为显现手印的材料。一方面以粉末刷显考察显影效果；一方面以水为溶剂，通过加入不同分散剂考察对潜指纹的显影效果。通过对不同客体不同类型潜指纹的适用性考察，总结出：1）其粉末能较好的适用于非渗透客体和部分半渗透客体汗潜、油潜和血指纹的显现；2）优化后普鲁士蓝水剂不仅能较好的显现出多种非渗透客体汗潜、油潜和血指纹，还可显现硅片上 180 天的陈旧性指纹，这种普适性的廉价材料对警务实战应用有着巨大的发展潜力和开发价值，以扩展小颗粒悬浮液及粉末显现指纹的方式方法，为刑事技术中指纹显现提供新的方法。



图为生物显微镜（×40）下普鲁士蓝溶液显现硅片上指纹

关键字 指纹显现；普鲁士蓝；小颗粒悬浮液；粉末显现

参考文献：

1. Jin X, Bi T, Xin R, et al. Advances in the application of organic materials for the development of latent fingerprints[J]. Chinese Journal of Organic Chemistry, 2020, 40(12): 4184.
2. Chen H, Chang K, Men X, et al. Covalent patterning and rapid visualization of latent fingerprints with photo-cross-linkable semiconductor polymer dots[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2015, 7(26): 14477-14484.
3. Ma K, Li J, Ma H, et al. 2D Cd-MOF and its mixed-matrix membranes for luminescence sensing antibiotics in various aqueous systems and visible fingerprint identifying[J]. Chinese Chemical Letters, 2023, 34(11): 108227.
4. 蔡晓军,马明,陈航榕等.普鲁士蓝在肿瘤诊断和治疗中的研究进展[J].科技导

报,2016,34(02):18-26.

5. LI J P, YUAN Y H. Synthesis of magnetic Prussian blue nanoparticles and the fabrication of chemically modified electrode[J]. Acta Chimica Sinica, 2006, 64(3): 261.
6. Liang K, Ricco R, Doherty C M, et al. Biomimetic mineralization of metal-organic frameworks as protective coatings for biomacromolecules[J]. Nature communications, 2015, 6(1): 7240.
7. Buser H J, Schwarzenbach D, Petter W, et al. The crystal structure of Prussian blue: Fe_4 [Fe (CN) $_6$]$_3$. xH_2O[J]. Inorganic chemistry, 1977, 16(11): 2704-2710.
8. Guanglei Fu, Wei Liu, Shanshan Feng, Xiuli Yue. Prussian blue nanoparticles operate as a new generation of photothermal ablation agent for cancer therapy[J]. Chemical Communications, 2012, 48 (94): 11567-11569.
9. Zhang W, Sun M, Liu Y, et al. Platelet membrane-functionalized hollow mesoporous Prussian blue nanomedicine for comprehensive thrombolytic management by targeted enhanced fibrinolysis and ROS scavenging[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 474: 145515.
10. Pan Y, Shi Z, Li J, et al. Graphene oxide laminates intercalated with Prussian blue nanocube as a photo-Fenton self-cleaning membrane for enhanced water purification[J]. Journal of Membrane Science, 2023, 672: 121465.
11. Liu C, Ma J. Designing Prussian blue coated iron electrode with exceptional cyclic and rate performance on potassium-ion storage[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 942: 169127
12. Qin G, Zhang M Q, Zhang Y, et al. Visualization of latent fingerprints using Prussian blue thin films[J]. Chinese Chemical Letters, 2013, 24(2): 173-176.
13. Najdoski M, Oklevski S, Stojković G. A simple chemical method for visualization of sebaceous fingerprints on unfired cartridge cases by Prussian blue deposition[J]. Russian Journal of Applied Chemistry, 2015, 88: 1896-1901.
14. Moret S, Scott E, Barone A, et al. Metal-organic frameworks for fingermark detection—A feasibility study[J]. Forensic science international, 2018, 291: 83-93.
15. Liang K, Carbonell C, Styles M J, et al. Biomimetic replication of microscopic metal-organic framework patterns using printed protein patterns[J]. Advanced Materials (Deerfield Beach, Fla.), 2015, 27(45): 7293-7298.
16. Wiwasuku T, Chuaephon A, Puangmali T, et al. Multifunctional fluorescent Eu-MOF probe for tetracycline antibiotics and dihydrogen phosphate sensing and visualizing latent fingerprints[J]. RSC advances, 2023, 13(15): 10384-10396.
17. Buser H J, Schwarzenbach D, Petter W, et al. THE CRYSTAL STRUCTURE OF PRUSSIAN BLUE-FE4 (FE (CN) 6) 3. XH2O[J]. Chemischer Informationsdienst, 1978, 9(5): no-no.
18. Innocenzi P, Malfatti L, Falcaro P. Water droplets to nanotechnology: a journey through self-assembly[M]. Royal Society of Chemistry, 2013.
19. Jiang Y, Huang Y, Shi X, et al. Eu-MOF and its mixed-matrix membranes as a fluorescent sensor for quantitative ratiometric pH and folic acid detection, and visible fingerprint identifying[J]. Inorganic Chemistry Frontiers, 2021, 8(22): 4924-4932.
20. Zhang Y, Zhang L. Designed multifunctional ratiometric fluorescent probe for directly detecting fluoride ion/ dichromate and indirectly monitoring urea[J]. Journal of Hazardous

Materials, 2021, 418: 126271.

21. Liu J, Li X, Han Y, et al. Synergetic Effect of Tetraethylammonium Bromide Addition on the Morphology Evolution and Enhanced Photoluminescence of Rare-Earth Metal–Organic Frameworks[J]. Inorganic Chemistry, 2020, 59(19): 14318-14325.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

图像拍摄设备溯源技术浅析

侯欣雨*、李志刚、谢兰迟、李伟、宋华青、许磊、郭晶晶、黎智辉
公安部鉴定中心

目的：不法分子利用电子设备拍摄不良、虚假的图像和视频并进行传播，严重危害社会公共安全秩序，侵犯公民的个人隐私，造成一系列社会不良效应。因此图像拍摄设备拍摄的视频图像溯源取证成为法庭科学领域新的研究方向，具有很强的科学研究意义和打击违法犯罪活动的现实意义。本文以实战应用为导向，结合近些年法庭科学领域凸显的图像溯源问题进行探讨。

方法：本文旨在通过图像拍摄设备溯源研究技术将拍摄设备和视频图像进行关联，主要原理是通过拍摄设备提取的噪声模板作为设备的指纹，与待检验的目标图像的噪声残差进行比对，用 NCC、PCE 和 SiameseModel 三种方法计算得出置信度，从而判断拍摄设备与图像之间的相关性。

结果：作者团队将上述研究方法转化为应用平台，一是同源检测功能，利用单张图像的噪声残差判断关联性；二是设备溯源核验功能，通过计算图像拍摄设备的噪声指纹与图像的置信度判断关联性；三是设备溯源检验功能，通过图像噪声残差在设备指纹库中进行检索获取排序进行研判分析，实现了 NCC、PCE 和 SiameseModel 三种方法的置信度计算，支持不同的使用场景，应用效果显著。比如在陈某某被害案中，公安机关提取到数字图像，同时从嫌疑人家中搜查到某型号相机，但嫌疑人拒不供认。作者采集该相机的平滑图像和自然图像，与提取到的图像进行比对检验。NCC、PCE 和 SiameseModel 置信度结果都支持提取到的数字图像来源于嫌疑人家中搜查到的相机，为案件侦破提供重要技术支持。

结论：图像拍摄设备溯源技术在诸多案件中为公安机关打击违法犯罪提供技术支撑，尤其是涉网涉诈类案件。以期本文的内容为相关理论研究和实战应用提供参考与借鉴，提升数字图像在法庭科学领域的应用价值，具有非常重要的实战意义。

关键字 溯源；拍摄设备；置信度；噪声指纹

参考文献：

1. HOU Xinyu, XIE Lanchi , LI zhihui, et al. *A Review of Traceability and Forensics Research Based on Digital Images of Smartphone*[J]. Forensic Science and Technology, **2023**,48(03): 306-312.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

基于刑事案件侦办的智能汽车取证研究

王璐、杨孝桐、宋润*
北京市公安局刑侦总队

近年来，涉及车辆的刑事案件日益增多，特别是汽车冲撞类案件，其定性难度大、伤亡人数多且容易引发社会舆情。智能汽车取证技术作为此类案件侦办的关键环节，其重要性日益凸显。本文探讨了智能汽车取证的研究现状与挑战，特别是车载电控模块（ECU）、汽车事件数据记录系统（EDR）、行驶记录仪（VDR）、车载 T-BOX、信息娱乐导航系统（IVI）等车载设备的数据提取与分析方法。这些设备存储了大量的行车数据，如轨迹位置、蓝牙设备连接记录、紧急加速、紧急刹车、车门开关记录、导航记录、速度记录等，为案件的快速固证、准确定性提供了重要依据。文章还指出了当前智能汽车取证中存在的问题，如取证对象的复杂性、企业对数据加密保护、缺乏可操作性强的取证标准等，并提出了相应的对策建议，以期为提高智能汽车取证的技术水平和法律效力提供参考。

关键字 电子取证，汽车取证

参考文献：

1. GB 39732-2020《汽车事件记录系统》
2. GB/T 19056-2021《汽车行驶记录仪》
3. GB/T 32960.3-2016《电动汽车远程服务与管理系统技术规范第 3 部分：通信协议及数据格式》
4. SF/T 0077-2020《汽车电子数据检验技术规范》

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

通用人脸识别模型的跨界应用：实现高准确度亲缘人像比对

宋华青*、李伟、侯欣雨、王臣日、汪磊、李志刚
公安部鉴定中心

随着深度学习技术的发展，通用人脸识别模型已经达到了很高的准确度并在各个领域得到广泛应用[1,2]。然而，在亲缘关系识别这一特殊领域，目前尚未出现实用的专门模型。考虑到通用人脸识别模型强大的泛化能力[3]，本研究探讨了将其应用于亲缘人像比对的可能性。

我们使用了包含 2 万个亲缘关系正样本和 100 万个负样本的真实人像数据集，在通用人脸识别模型 SeetaFace6 上进行了测试。通过对模型输出评分的统计分析，绘制了详细的分布图。结果表明，即使未经过专门亲缘关系训练的通用人脸识别模型，也具备一定的亲缘识别能力。在 1:1（N=1）的亲缘关系判定实验中，模型的准确率达到 79.26%，重叠系数为 0.4681，Hellinger 距离为 0.4738。值得注意的是，随着参与比对的亲属人像数量（N）的增加，识别性能显著提升。当 N 从 1 增加到 4 时（即每组亲缘关系的判定从单人比对升级为多人比对与某一人像的亲缘关系判定，N:1），准确率从 79.26%上升至 92.54%，重叠系数从 0.4681 降低至 0.1467，Hellinger 距离从 0.4738 增加到 0.8035。该结果表明，通过增加亲属人像数量，可以显著增强亲缘关系识别的准确性，为提升亲缘识别系统的性能提供了一种简单且有效的途径[4]。

本研究不仅证实了通用人脸识别模型在亲缘关系识别中的潜力，也为解决实际应用中样本不足的问题提供了新的思路[5]。这一发现为基于人像的亲缘关系鉴定辟了新的技术路径，同时也拓展了通用人脸识别模型的应用范围。

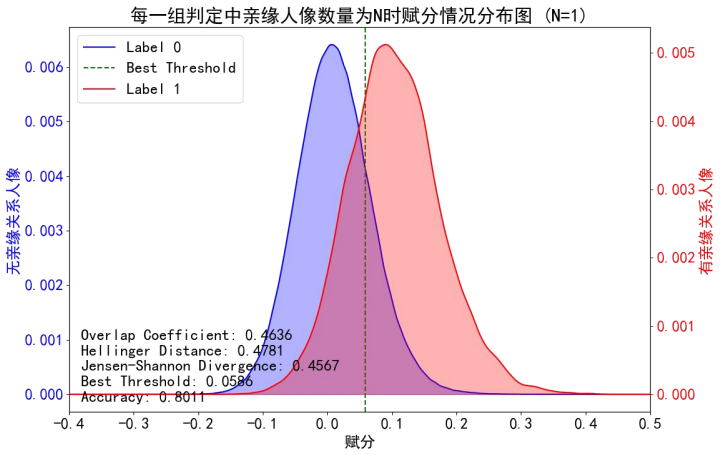


图1 通用人脸识别模型SeetaFace6在1:1亲缘人像判定中的赋分分布图

关键字 深度学习；通用人脸识别模型；亲缘关系识别

参考文献：

1. Deng, Jiankang, et al. "Arcface: Additive angular margin loss for deep face recognition." Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. 2019.
2. Wang, Mei, and Weihong Deng. "Deep face recognition: A survey." Neurocomputing 429

(2021): 215-244.
3. Taigman, Yaniv, et al. "Deepface: Closing the gap to human-level performance in face verification." Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2014.
4. Qin, Yunxiao, et al. "Learning meta model for zero-and few-shot face anti-spoofing." Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vol. 34. No. 07. 2020.
5. Guo, Yandong, et al. "Ms-celeb-1m: A dataset and benchmark for large-scale face recognition." Computer Vision–ECCV 2016: 14th European Conference, Amsterdam, The Netherlands, October 11-14, 2016, Proceedings, Part III 14. Springer International Publishing, 2016.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

塑料物证的全链溯源：法庭科学视角下 ATR-FTIR 分析塑料自封袋

徐学谦[1]、陈壮[1,2]、柴田若梅[1]、王元凤*[1]
1. 中国政法大学
2. 甘肃政法大学

附着在塑料表面上的化学物质能够反映生产加工流程，揭示物证来源信息[1][2]。以往对塑料物证的检测集中在聚合物材料本身[3]，而忽视了材料表面化学物质痕迹的分析。研究表明，这些化学痕迹具有很高的潜在溯源价值[4]。

本研究从来自 6 家潜在制造商的 15 家零售商分两个批次收集了 3000 个塑料自封袋进行抽样调查。使用乙醇清洁其表面的化学痕迹，并使用衰减全反射傅里叶变换红外光谱（ATR-FTIR）对清洁前后的塑料袋进行检测[5]。面对高维光谱数据，全面解析其吸收谱带，并结合化学计量学的多变量方法进行证据解释，包括主成分分析（PCA）和层次聚类分析（HCA）。从原料到产品全链评估化学痕迹的示踪潜力。

本研究的主要发现有：（1）证实了化学痕迹的存在，并确定其成分为以油酸酰胺为代表的几种脂肪酸酰胺或其混合物。它们通常作为抗粘剂、润滑剂和抗静电剂添加在塑料制品中。（2）在 6 个制造商的塑料袋中，考虑化学痕迹的累计方差贡献率相比于清洁后从 85% 提升至 90%，足以在不同制造商之间进行区分。（3）对于来自同一个制造商的塑料袋，该分析方法也可在不同时间的生产批次上实现区分。

这些发现对于实际案件例如使用塑料自封袋包装毒品的案例具有重要意义，为增加证据价值、客观决策和提高效率提供了有力的推理工具[6]。

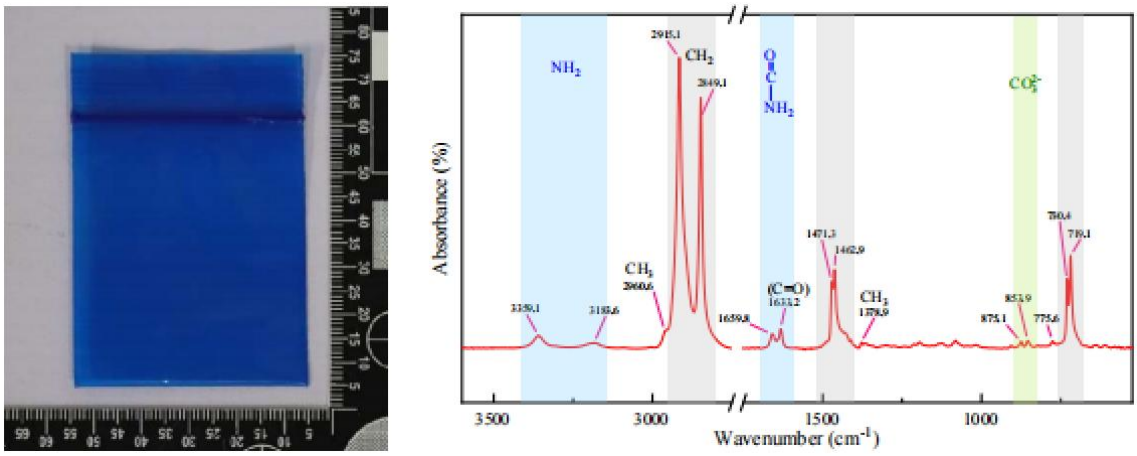


图 1：塑料自封袋样品及其典型红外光谱图解析

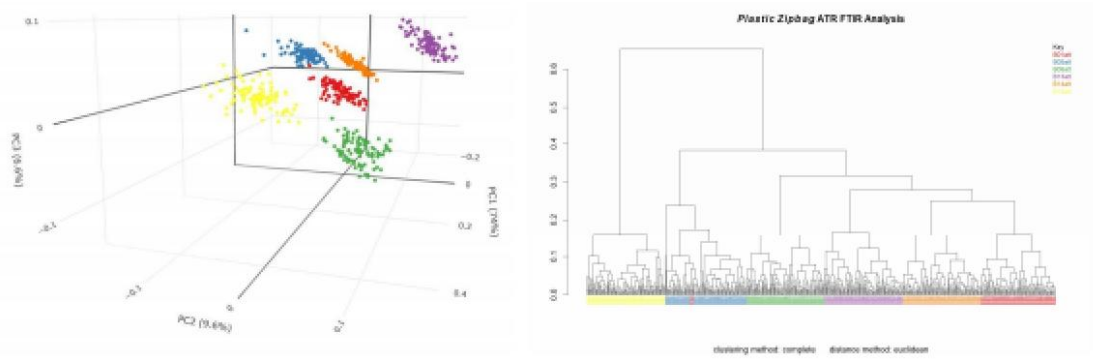


图 2：化学计量学分析之三维 PCA 得分图及 HCA 分类图

关键字 塑料物证，ATR-FTIR，化学痕迹，PCA，证据价值

参考文献

[1] 翁诗甫, 徐怡庄. 傅里叶变换红外光谱分析（第三版）[M]. 化学工业出版社, 2016.

[2] Causin V. Polymers on the crime scene: How can analytical chemistry help to exploit the information
from these mute witnesses?[J]. Analytical Methods, 2010, 2(7): 792.

[3] Sim Y H Y, Koh A C W, Lim S M, et al. Snap-lock bags with red band: A study of manufacturing
characteristics, thermal and chemical properties[J]. Forensic Science International, 2015, 255: 50-55.

[4] Hashimoto T, Mizuhata M. Discrimination of Transparent Polyethylene Films Based on Identification of
Inorganic Anti-blocking Agents: Anti-blocking Agents Identify Plastic Bags[J]. Journal of Forensic
Sciences, 2012, 57(3): 744-749.

[5] Chophi R, Sharma S, Jossan J K, et al. Rapid and non-destructive analysis of eye-cosmetics using ATRFTIR spectroscopy and chemometrics[J]. Forensic Science International, 2021, 329: 111062.

[6] Causin V, Marega C, Carresi P, et al. A quantitative differentiation method for plastic bags by infrared
spectroscopy, thickness measurement and differential scanning calorimetry for tracing the source of
illegal drugs[J]. Forensic Science International, 2006, 164(2-3): 148-154.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

协方差矩阵的半正交参数池化方法在说话人自动识别中的应用

康锦涛*、李敬阳
公安部鉴定中心

传统的深度说话人嵌入框架中，池化层将所有帧级别特征沿着时间轴拼接，并计算它们的均值和标准差，作为网络中后续段级别层的输入。这种统计策略能从长度可变的语音片段中产生固定长度的表征。然而，这种方法对不同的帧级别特征不作区别，忽略了协方差信息。在本研究中，我们提出了协方差矩阵的半正交参数池化（SoCov）方法。SoCov 池化会计算帧级别特征的协方差矩阵，并使用半正交参数矢量化将之压缩为一个矢量，然后与加权的标准差向量拼接，形成段级别层的输入。基于 SoCov 的深度嵌入特征被称为 "sc-vector"。在 SRE21 开发集和评估集上，我们将 sc-vector 与几种不同的基线进行了比较。sc-vector 系统明显优于 x-vector 系统，在 SRE21Eval 上的 EER 相对降低了 15.5%。当两者都使用自注意深度特征时，与传统的 "平均值+标准差 "统计量相比，SoCov 可以将 SRE21Eval 上的 EER 降低约 30.9%。

关键字 说话人自动识别，注意力池化层，协方差矩阵，sc-vector

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

自主研制 LDI-TOF-MS 质谱仪在文件检验应用初探

喻彦林*[1]、颜磊[1]、曾志胤[2]、袁德娟[1]、朱孔涛[2]、杨溢[1]、汪旭[1]、郑建晟[2]
1. 西南政法大学刑事侦查学院/司法鉴定中心
2. 厦门历思科技有限公司

原位电离质谱在墨迹分析中具有独特潜力，是最具前景的文件检验方法之一。研究组基于自主研制的 LDI-TOF-MS 质谱仪，实现了在文件检验领域的多个应用：1）应用于碳基墨水墨迹分析，对多元醇类、低聚物具有特殊敏感性，实现了溶解实验、多光谱检验、拉曼光谱分析等流行墨迹分析方法不能解决的碳基墨迹的分类，33 种碳基墨迹样本的区分率达到了 79%；2）应用于常见印油的分析，对其溶剂、染料敏感，5 类 20 种商品印油均实现了快速区分；3）应用于彩色激光打印墨迹分析，11 个彩色墨迹样本的区分率达到了 98%；4）在墨迹形成时间研究中，展现了特有优势。基于该设备在墨迹分析、篡改/污损文件检验、文件制作时间等多个文件检验应用中的优势，在文件检验领域优于拉曼光谱仪，成为具有商用价值的“文检质谱仪”。

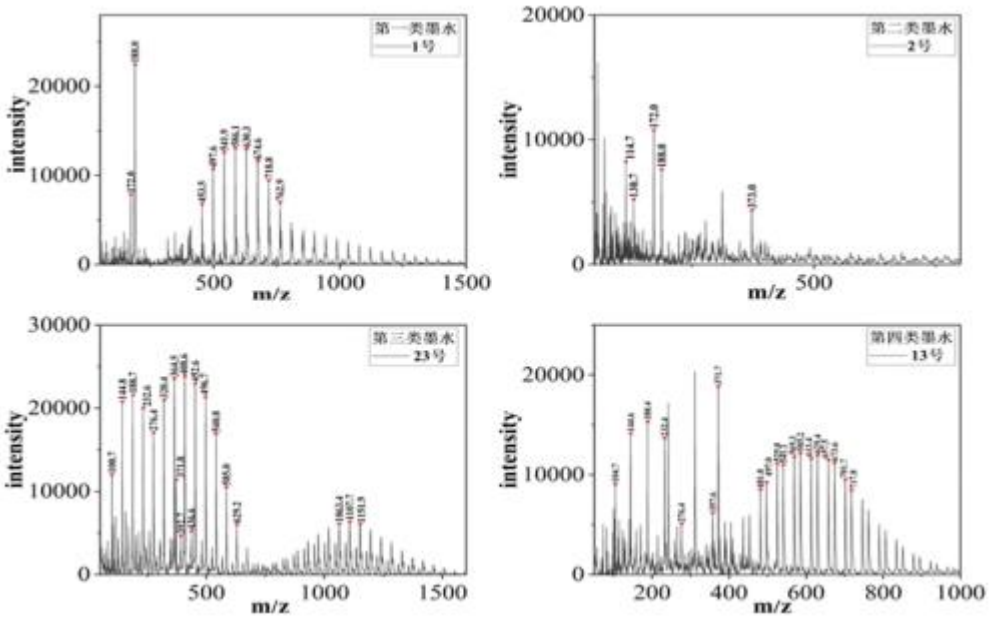


图 1：典型碳基墨迹的 LDI-TOF-MS 质谱图（拉曼光谱不能区分）

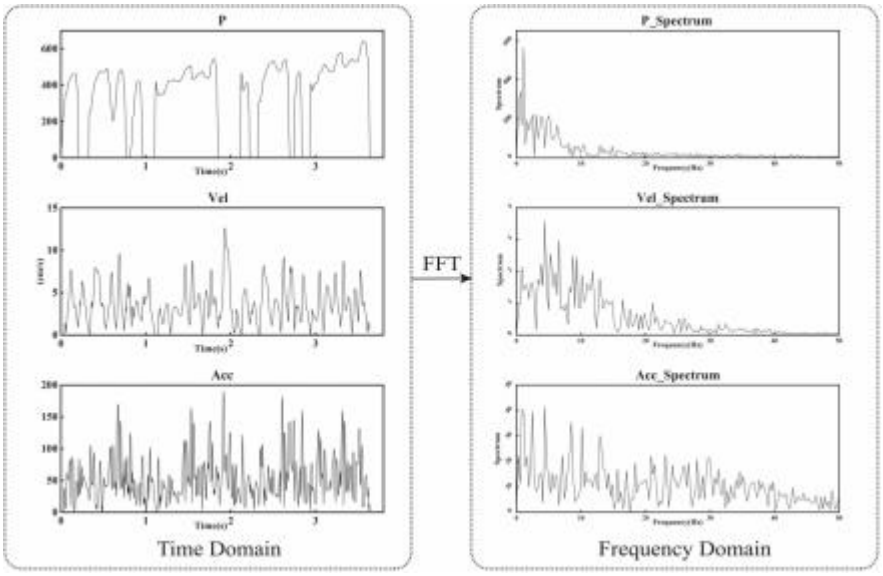
关键字 文件检验，墨迹分析，LDI-TOF-MS，质谱仪

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

电子签名笔迹时域频域特征研究

秦达*[1]、杨杨[2]、韩星周[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 北京市通州区人民检察院

手写电子签名在各种应用场景中的使用日益广泛，因此对鉴定的需求也随之增加。不同于传统手写签名，手写电子签名的优势在于可以提取动态特征数据，包括书写压力、速度和加速度等。在本研究中，我们采用了傅里叶变换来提取书写压力、速度和加速度在时域和频域的 18 个特征。实验结果显示，真实签名与随机伪造签名在书写压力上存在可区分的差异。然而，在书写速度和书写加速度方面并未观察到统计学上的显著差异。此外，当比较真实签名与自由书写签名以及套摹签名时，大部分特征都显示出了显著的差异。通过典型判别分析对真实和非真实签名进行了比较；交叉验证估计了这些特征的鉴别能力，并得到了令人满意的结果。本研究提出了一种利用时域和频域特征分析手写电子签名的新方法，并证明了其在检验中的有效性。



关键字 电子签名，动态特征，时域频域

参考文献

1. Y. Yang, X. Han, D Qin, Biomed. Chromatogr., J Forensic Sci. 2024, 69, 264-272.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

区块链存证技术在刑事案件中的应用及法律规制研究

郑莹*[1]、郭丽莉[2]
1. 汕头市公安局
2. 公安部物证鉴定中心

在刑事案件中，电子数据的真实性、完整性和可靠性是司法审判的关键。传统的电子数据存储方式存在易被篡改、损坏和丢失的风险，但区块链技术以其独特的防篡改和可溯源特性，为电子数据存证提供了新的解决方案。区块链存证技术通过分布式账本记录、加密算法和共识机制，确保了数据的安全性和不可篡改性，这对于刑事案件中的电子证据存证尤为重要。绍兴市上虞区人民法院在处理一起刑事案件时，采用了区块链存证技术，这是全国首例区块链存证刑事案件。被告人通过虚构理由骗取他人财物，案件涉及大量分散的被害人和多起小额诈骗行为。传统的电子数据存储方式可能无法确保证据的完整性和安全性，但通过区块链技术，上虞区司法机关能够对数据进行加密，并在后期通过哈希值比对来验证证据的真实性。这一做法得到了公安机关和检察机关的认可，并为今后利用区块链技术进行电子数据存证和审查提供了重要的参考 。

关键字 区块链存证技术　　刑事案件

参考文献

[1]王素、王永全、于彤、王海峰.基于区块链技术的电子证据“存证----鉴真”模型[J].江西警察学院学报，2024（3）：57-66.
[2]刘品新.论区块链证据[J].法学研究，2021（6）：130-148.
[3]马明亮.区块链司法的生发逻辑与中国前景[J].比较法 研究，2022（2）：15-28.
[4]]王士博.数字时代下功能性失灵的对质权与因应之策 [J].上海法学研究集刊，2022（11）：116-128.
[5]刘品新.论区块链存证的制度价值[J].档案学通讯，2020 （1）：241-30.
[6]杜洋.区块链为法院工作插上科技翅膀[N].法治日报， 2021-5-6.
[7]段莉琼、吴博雅.区块链证据的真实性认定困境与规则 重构[J].法律适用，2020（19）：149-160.
[8]陈瑞华.刑事证据法（第三版）[M].北京：北京大学出 版社，2018：120.
[9]伊然.区块链存证电子证据鉴真现状与规则完善[J].法 律适用，2022（2）：106-121.
[10]聂勇浩，张忻. 基于区块链的电子证据保全模式研究以广州互联网法院为例[J]. 档案学 研究，2021（5）：2836.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

基于DESI-MSI技术与K-means聚类算法的中性笔墨迹分析方法研究

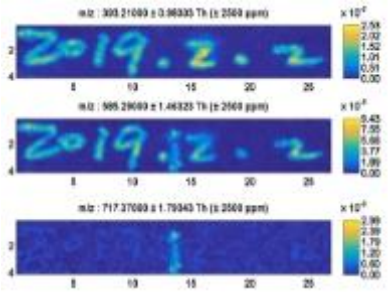
袁逸婷*[1]、秦达[2]、吴勇[1]、张建东[1]、吴刚[1]、祁秋景[1]、胡长安[1]、李康[1]
1. 安徽省公安厅物证鉴定中心
2. 公安部鉴定中心

墨迹成分分析在法庭科学领域中扮演着关键角色，特别是在文件检验中，判断可疑字迹是否存在添改对于案件定性具有重要意义。目前，我国广泛使用含碳颜料墨水书写笔，传统的光学检验法难以满足检验需求；拉曼光谱法等光谱方法易受到物理性质等因素的影响，难以区分成分相近的墨迹；色谱法可以定性定量分析墨迹成分，但操作复杂且需要对检材进行前处理。

相较于上述方法，质谱法能检测到墨迹更多的物质信息，且是唯一可以确定分子量的方法。我们利用一种原位敞开式质谱——解吸电喷雾电离质谱（DESI-MS）技术与 K-means 聚类算法，提出了一种肉眼无损的中性笔墨迹成分分析方法。研究选取了 23 个品牌共 227 种型号的中性笔，通过 DESI-MS 技术采集墨迹样本的成分数据，在不进行样品前处理的情况下，对墨迹的质谱数据进行了归一化处理，并通过主成分分析（PCA）降低数据维度；随后，采用 K-means 聚类算法对处理后的数据进行分类，分析其不同品牌型号中性笔墨迹成分的差异。研究结果表明，DESI-MS 技术能够快速、有效地区分不同中性笔的墨迹成分，其中同一品牌不同型号中性笔的成分存在一定差异，且不同品牌中也存在成分相似的情况。同时，我们将研究成果结合成像（DESI-MSI）应用于一例笔迹添改文件的检验中，利用化学计量学对字迹成分进行区分，最终的成像图片能够直观地区别显现添改字迹。

相比于已有的墨迹成分检验方法，DESI-MSI 无需样品前处理，具备无损、快捷的优势。实验结果表明，该方法在墨迹成分检验特别是可疑字迹添改检测中具有广泛应用前景。





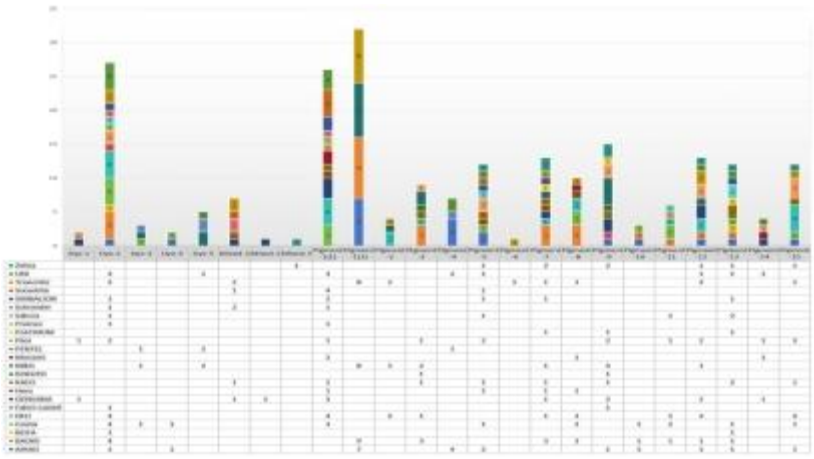


Figure 1. (a) Comparative Analysis of Ink Composition Among Various Brands. (b) Correspondence between the questioned document and the total ion chromatogram for the 12th scan and DESI-MSI images of the suspicious handwriting.

关键字 DESI-MSI，中性笔墨迹，K-means 聚类，文书鉴定，添改字迹

参考文献

1. Ifa DR， Gumaelius LM， Eberlin LS， et al. Forensic Analysis of Inks by Imaging Desorption Electrospray Ionization （DESI）Mass Spectrometry. Analyst， 2007， 132（5）:461-467.

2. Takats Z, Wiseman JM, Gologan B, Cooks RG. Mass spectrometry sampling under ambient conditions with desorption electrospray ionization. Science. 2004;306:471

3. YUAN Yiting, CHEN Ying, HUANG Guangming, QIN Da. A Case of Alteration Documents Examination Using Desorption Electrospray Ionization-Mass Spectrometry Imaging (DESI-MSI) Technology. Forensic Science and Technology. 2024, 49(5): 531-536

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

枪弹弹体分离检验检测仪

曹润铎*
江苏警官学院

目前在枪弹性能检验鉴定方面，对于枪弹性能分离检验方面，尚没有设备可以提供科学、准确、完善的检测，从而无法对枪弹性能分解式检验法的建立、运行提供准确、客观、可分析研究判断的数据。利用枪弹弹体惯性分离检验检测仪，采用枪弹弹体分离检验法，测算国内外制式枪弹的火药威力相关数据，明确枪弹的详细威力范围。在日常枪弹检验鉴定工作中，使用枪弹弹体惯性分离检验检测仪，开展超期（失效）枪弹性能检验、自制枪弹性能检验、改制枪弹性能检验等情况枪弹的性能检验。

关键字 枪弹检验；分离检验法

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

SERS 技术快速检测水中微量芬太尼类物质

许瑞翔[1]、郭勇[1]、侯夏阳[1]、杨丽[2]、徐布一[2]、高天珍[1]、汤媛茜[1]、晏宗文[1]、莫燕*[1]
1. 四川警察学院
2. 国家毒品实验室四川分中心

通过一锅法合成了具有表面增强拉曼散射(SERS)活性的凹面体高指数纳米金多面体胶体，利用透射电子显微镜、扫描显微镜及能谱仪分别对胶体的结构、形貌和化学成分进行了表征；将该胶体滴加在洁净硅片上，制成 SERS 增强衬底，对水相中微量芬太尼类物质进行了 SERS 检测。实验结果表明，因其独特的光学性质和高表面活性，凹面体高指数纳米金多面体对芬太尼类物质表现出良好响应，从而实现对微量芬太尼的检测。进一步，通过对比结构相似的丁酰芬太尼和异丁酰芬太尼 SERS 光谱特征，结合化学计量学分析，建立了一种有效的芬太尼物质区分方法。在优化的实验条件下，水相中芬太尼类物质的检测限可以达到 0.1 ppm 量级。该方法灵敏度高、选择性强，为芬太尼类物质的监管及快速检测区分提供了技术支持。

关键字 表面增强拉曼光谱；胶体金；芬太尼；快速检测

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

血液中甘精胰岛素的液相色谱质谱分析检验方法

宋祥瑞、吴小军、赵鹏、张云峰*
公安部鉴定中心

胰岛素类药物作为一类能够有效降低血糖浓度的蛋白质物质，过量注射会产生昏迷、惊厥甚至死亡等毒副作用且获取较为便捷，导致胰岛素类药物中毒案件时有发生。科学有效检测生物检材中是否存在外源性胰岛素，对于判定中毒原因具有重要意义。本文利用液相色谱质谱联用技术(LC-MS/MS)灵敏度高、特异性好的特点，以常见生物检材血液和常用胰岛素类药物甘精胰岛素为研究对象，开发了一种检测血液中甘精胰岛素的有效方法。血液样品经三氯乙酸-甲醇-水混合溶液处理，流动相为乙腈-水（均含 0.1%甲酸），液相分离采用 Cortecs UPLC C18+色谱柱进行梯度洗脱，通过配备电喷雾源的串联质谱，以多反应监测模式进行正离子检测。通过比较甘精胰岛素保留时间和特征离子对，甘精胰岛素在 20~1000ng·mL-1 与峰面积关系良好(r2＞0.990)，方法精密度、准确度与提取回收率良好。本方法简便快速，可准确有效地对血液中甘精胰岛素进行定量检测和鉴别分析，对于分析处置距离死亡时间较短的涉甘精胰岛素中毒案件具有一定实践意义。

关键字 甘精胰岛素，液质联用，生物样品分析

参考文献

1. Sunderland N, Wong S, Lee C K. Fatal Insulin Overdoses: Case Report and Update on Testing Methodology[J]. Journal of Forensic Sciences, 2016, 61(S1):S281-S284.
2. Bottinelli C, Nicoli R, F.Bévalot, et al. Development and validation of a method for quantification of human insulin and its synthetic analogues in plasma and post-mortem sera by LC-MS/HRMS[J].Talanta, 2021, 225:122047.DOI:10.1016/j.talanta.2020.122047.
3. 张家莹, 郭银汉, 李黎,等. 比格犬血浆中德谷胰岛素浓度检测方法的建立及应用[J]. 中南药学, 2020(006):018

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

稳定同位素技术在物证溯源和地域推断中的应用和展望

梅宏成、胡灿、郭洪玲、王萍、邓显贺、李亚军、朱军*
公安部鉴定中心

在法庭科学领域，稳定同位素技术在物证溯源和地域推断方面展现出了惊人的应用潜力[1]。传统的理化检验技术主要是从物质的分子/元素组成层面对物证进行定性定量分析，而稳定同位素技术则将对物证的分析提升到分子的元素同位素鉴别层面，能够实现对不同来源的同一种分子进行区分，为解决法庭科学领域物证来源和地域推断提供了新的技术手段。基于元素稳定同位素比值分布的地域差异性，不同来源/不同批次的同种炸药（如 TNT、硝酸铵等）、助燃剂（如汽油、柴油等）、毒品、塑料、纤维、火柴、丙酮、有毒物质等常见的物证由于生产原料来源的不同、生产工艺/合成路线的差异，其组成元素 C、N、H、O 的稳定同位素比值存在差异，通过对不同来源同种样本的 13C/12C、15N/14N、2H/1H、18O/16O 比值进行分析，可以确定案件现场物证的来源，为案件侦查提供线索和证据，相关研究成果已在实际案件中得到了应用和验证[2~4]。结合人体组织中的头发、指甲等的生长规律和不同地域生活的居民饮食的差异性，利用稳定同位素技术对涉案人员的头发/指甲分段进行检验分析，通过与不同地域居民头发/指甲稳定同位素比值的比较，可以推断出涉案人员在某段时间内的生活地域及其变化，这些信息在重大案事件人员身份确认、未知名尸体尸源认定等方面具有重要的应用价值[5,6]。目前，我们已经开展了全国不同地区多个城市常住居民的头发 C、N、H、O 稳定同位素比值检验研究，初步绘制了全国头发稳定同位素比值分布的概图，并将该数据集用于多起实际案件分析，在案件侦查发挥了线索作用。随着研究的不断深入，稳定同位素技术在法庭科学领域的应用将越来越广泛。大量不同来源样本数据的积累是保证稳定同位素技术在物证溯源和地域推断方面更加精准和可靠的基础，因此，构建不同物证的稳定同位素数据库是法庭科学领域未来的重要发展方向之一。

关键字 稳定同位素；物证溯源；地域推断

参考文献

1. Meier-Augenstein,Wolfram, Stable Isotope Forensics (Methods and Forensic Applications of Stable Isotope Analysis, Wiley, 2017.
2. 胡灿, 解伟亚, 黄阳, 梅宏成, 郭洪玲, 李亚军, 郑继利, 邓显贺, 朱军*, 质谱学报, 2023, 5, 706-713.
3. 朱晓晗, 秦皓, 解伟亚, 胡灿, 李亚军, 王萍, 刘占芳, 郭洪玲, 张冠男, 朱军*, 梅宏成*, 化学研究与应用, 2023, 35(10), 2273-2282.
4. Huang Yang, Zhu Jun, Hu Can, Mei Hongcheng, Yu Ziyang, Qin Hao, Forensic science international, 2022, 337, 111379.
5. 梅宏成, 朱军, 权养科, 王桂强, 刑事技术, 2016, 41(2), 87-92.
6. 秦皓, 于子洋, 黄阳, 胡灿, 朱晓晗, 解伟亚, 郭洪玲, 王萍, 李亚军, 郑继利, 朱军*, 梅宏成*, 生物化学与生物物理进展, 2023, 50(08), 1904-1914.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

核分析技术（NATs）应用于法庭科学证据分析的回顾与展望

马成栋、张亮、廖信彪*
广东省公安厅刑事技术中心

本文初步概述了核分析技术（Nuclear Analytical Techniques，NATs）在法庭科学中的潜在效能和应用前景。NATs 主要指通过离子或中子束与被测样品的原子或原子核发生相互作用，从而识别及量化样品中特定元素和同位素的一类方法，目前已在材料科学、环境科学、文化自然遗产研究等领域广泛应用，然而在法庭科学证据分析领域目前仍处于初步发展阶段。

全文回顾了具有法庭科学应该用潜力的常见 NATs 分析方法，包括离子束分析（Ion Beam Analysis，IBA）、中子活化分析（Neutron Activation Analysis，NAA）、和加速器质谱法（Accelerator Mass Spectrometry，AMS）等，讨论了每种方法的基本原理、主要机制及其可以分析的样本类型，每种方法以其灵敏度、精确度和微量元素分析能力等独特优势在应对包括枪弹残留物、毒品检测分析、涉食药环检验鉴定、野生动植物鉴定以及艺术品和历史文物年代认定等各种法庭科学证据分析难题中发挥着独特作用。NAA 是在法庭科学中应用较早也较为成熟的 NATs 方法，在不同的历史时期曾用于枪弹残留物、玻璃、毒品药物等分析中发挥了重要作用；离子束分析（IBA）技术通常需要兆伏特离子束加速器，擅长进行近表面元素深度剖析；而加速器质谱法（AMS）则擅长检测不同浓度的同位素（如 14C），使其非常适合法庭科学的领域较为久远的年代测定和时间顺序研究，在法医人类学和历史文物的鉴定中发挥着重要作用。NATs 方法在打击当前刑事犯罪、成瘾物质滥用、食药环违法犯罪、涉文物犯罪等维护公共安全实践和法庭科学证据分析中具有良好的应用前景。

在进一步展现 NATs 在法庭科学分析的准确性和可靠性优势的同时，文章还讨论了 NATs 在法医学实验室中开展所面临的环境方法、仪器设备等客观挑战，客观分析了当前可能的研究难点和应用方向，以期为 NATs 逐步在在国内法庭科学证据分析中发挥重要作用而提供信息和线索。

关键字 核分析技术（NATs） 法庭科学 证据分析 物证溯源 现场重建

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

温度可调解吸原位电离质谱在毒物和爆炸物快速检测中的应用

张云峰*[1]、董林沛[1]、赵鹏[1]、邹波[1]、刘新玮[2]
1. 公安部鉴定中心
2. 清华大学精密仪器系

公共安全对国家安全和人民生活健康至关重要。毒物和爆炸物是公共安全领域的重点检查物质，其非法使用、运输和交易也是国家严格打击的犯罪行为。因毒物和爆炸物非法携带和使用的移动性和隐蔽性及相关案件的严重性和广泛性，毒物和爆炸物的检测需要准确度高、灵敏度高、检测速度快、操作简单、便携性强。质谱作为实验室准确度和灵敏度俱佳的通用型仪器检测方法，现已应用于各大检测领域。便携质谱的出现和兴起，加上无需复杂前处理的原位电离离子源，更是将准确、灵敏、快速的质谱方法与简单、便携的操作体验相结合，给出了现场快速检测的解决方案。

目前原位电离方法种类众多，各有利弊。基于电喷雾电离原理的原位电离离子源，必须使用溶剂形成喷雾。基于激光解吸原理的原位电离离子源，受限于装置体积和光学要求，难以形成极为便携简易的离子源设计。基于等离子体原理的原位电离离子源，无需溶剂，装置简单，很适合小型化用于现场质谱检测。本文中，介绍了一种基于等离子体原理的温度可调解吸原位电离源在毒物和爆炸物的快速检测应用。该离子源可集成于便携质谱上，实现现场简易操作和快速检测。离子源支持纸片擦拭上样和载玻片上样两种模式，可应对现场不同取样场景，从采样到出结果的整个检测过程不超过 3 分钟，操作快速便捷。经过测试，该温度可调解吸原位电离源可针对不同物质，得到不同的最优解吸温度，从而从温度维度实现多种物质的分离。从实际样品检测角度，该电离源可实现皮克级检测灵敏度，氯胺酮、可卡因等管制药品的检出限低于 1ng/mL， 黑索金（RDX）、太安（PETN）、硝化甘油（NG）等多种爆炸物检出限低于 1ng，甲氰菊酯等毒物检出限低于 1ng，可实现现场精准灵敏检测。

关键字 温度可调节；原位电离；便携质谱；毒物爆炸物；快速检测

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于 UWB 定位技术在毒品实验室中的应用

闫晓鹏*、陆亚娟、焦英、肖雷、廖琦
国家毒品实验室陕西分中心（陕西省公安厅毒品技术中心）

近年来，随着物联网技术在实验室信息化建设中逐步成熟，各大实验室都致力于打造智慧实验室模式。实验室是一个具有人员集中、设备房间多的环境，对于人员、设备的位置信息需求是实验室管理的一个重要内容。毒品实验室与其他化学实验室最大的区别在于毒品实验室最常使用检测样品以毒品、管制的新精神活性物质等缴获物及毒品标准品为主，所以毒品实验室有严格的质量管理体系，从样品登记到报告整个结果过程中，记录和观察鉴定过程中的人员位置和设备使用等情况成为实验室质量监控的一项重要环节。因此，为了快速、便捷地获取人员、设备的位置，科学规范地管理人员、设备使用情况，实时掌握记录人员和设备位置信息显得尤为重要。

超宽带（Ultra-Wide-Band, UWB）室内定位技术具有频谱功率密度小、定位精度高、实时性强的优点，其系统定位时延小于 Wi-Fi、蓝牙等定位技术。同时，UWB 硬件结构简单，成本低，更适合在煤矿、厂房、仓库等中大规模规模空间环境部署。此外，UWB 定位技术系统还具有可扩展强、功耗低、覆盖范围广、穿透力强等优点，是一种有效的室内人员定位选择方案。

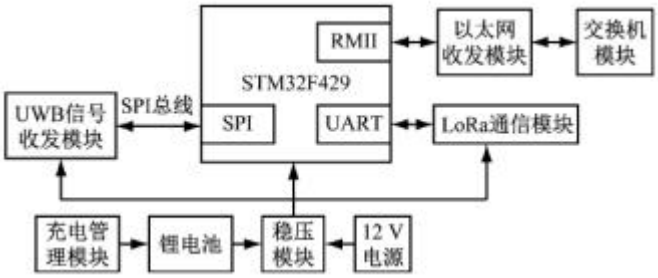


图1 基站硬件组成

Fig1. Hardware composition of base station

关键字 UWB，人员定位，毒品实验室

参考文献

1. 孙玉晗.实验室信息管理系统在毒品检测实验室的应用[J].中国司法鉴定,2014(05):43-46
2.王洋洋.UWB 技术在煤矿精确定位中的应用［J］.煤炭技术，2020，39(5)：186-188..
3. 方贤宝等，基于 TOF 和自适应抗差卡尔曼滤波的 UWB 室内定位算法［J］,传感器与微系统，2024(03):03-0134-05

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

五氟苯基柱在毒物检验技术中的应用研究

吴小军*
公安部鉴定中心

本研究探讨了五氟苯基柱（PFP）在毒物检验技术中的应用，特别是针对具有显著极性差异的鼠药。抗凝血鼠药，具有强脂溶性，通常采用反向色谱体系进行分析；而剧毒鼠药氟乙酸，作为极性药物，在反向色谱体系中的灵敏度不足，且缺乏有效的色谱保留，难以满足定性分析需求。PFP 色谱柱因其独特的分离特性，在毒物检验中展现出显著的优势。

研究中发现，PFP 色谱柱不仅具备反向分离特性，还具有亲水作用特性。通过精心设计的实验，我们首先使用 PFP 色谱柱的反相色谱条件，在 3 分钟内通过 10%乙腈梯度洗脱模式逐步提高乙腈比例至 90%，并保持 2 分钟，再回到初始流动相的条件下，成功实现了对抗凝血鼠药（例如大隆、溴敌隆、华法林等）的有效分离与定量分析。这一过程中，苯环四周的氟原子增强了与分析物之间的π-π相互作用，使得 14 种抗凝血鼠药均得到良好的分离，检测限达到 1ng/mL，浓度范围在 10-500ng/mL 内保持良好的线性。

进一步地，在不更换色谱柱的情况下，仅通过调整流动相为亲水流动相，实现了从 90%乙腈梯度洗脱模式在 3 分钟内逐步提高乙腈比例至 10%，并保持 2 分钟，再回到初始流动相，使系统切换至亲水作用模式。在亲水作用模式下，PFP 色谱柱表现出对卤代物的强相互作用，有效保留了强极性药物氟乙酸，检测限达到 10ng/mL，浓度范围在 30-1000ng/mL 内保持良好的线性。

整个研究过程中，PFP 色谱柱不仅展现了其独特的分离性能，还证明了在同一根柱上无需更换流动相即可实现不同类型化合物间快速转换的可能性。这种特性极大地提高了鼠药检测的分析效率，扩大了鼠药检测的范围。实验结果表明，PFP 色谱柱在应对不同极性的鼠药检测时具有显著的优势和良好的适应性，为毒物检验技术提供了一种高效、便捷的分析工具，对于保障公共安全和生命健康具有重要意义。

关键字 五氟苯基柱；毒物检验；抗凝血鼠药；氟乙酸；液质联用技术

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

液体中γ-羟基丁酸、γ-丁内酯和 1,4-丁二醇的高效液质分析

邵云龙、宋春辉、蒋力维、吴成豪、马俊、王培霞、李冬梅、吕建霞*
北京市禁毒科技中心

γ-羟基丁酸（GHB）)是一种 GABAB/GHB 受体激动剂，其无色无味且具有强烈镇静和健忘效果，因而常被不法分子混入酒水饮料中滥用实施犯罪，给社会带来严重问题，2007 年我国将其列入一类精神药物进行管制。GHB 的前体物质γ-丁内酯（γ-butyrolactone，GBL）和 1,4-丁二醇（1,4-BD）在人体内代谢后也可快速转化为 GHB[1]。目前已有工作报道了血液中 GHB、GBL 和 1,4-BD 的检测方法[2]。本工作建立了超高效液相色谱-串联质谱（UPLC-MS/MS）方法定性定量测定缴获物中的 GHB、GBL 和 1,4-BD，准确高效服务执法办案。为克服基质效应和溶剂效应问题，样品用初始流动相稀释并过滤，选用 SHIMADZU C18-AQ 色谱柱（100×2.1 mm，1.9 μm）以提升方法的高比例水相耐受性，以甲醇—0.1%甲酸水溶液为流动相，梯度洗脱，流速为 0.25 mL/min。采用 SHIMADZU LCMS-8060NX 液质联用仪的多反应监测(multiple reaction monitoring, MRM) 扫描方式进行检测，GHB（正负离子模式）、GBL（正离子模式）和 1,4-BD（正离子模式），考虑到三种物质的结构相似性，在正离子模式下三者产生的碎片离子存在部分重叠，采用正负离子同时监测的方式可避免 GHB 检测的假阳性几率。该方法可将 3 种化合物在 5 min 内完成基线分离，峰型良好。采用外标法定量，GHB、GBL 和 1,4-BD 在 0. 1~ 10.0 μg /mL 范围内线性良好（R2＞0.998），检出限为 0.05μg /mL。所建立的方法灵敏度高、简便快速，能应用于不同液体中目标物质的检测。

关键字 γ-羟基丁酸，γ-丁内酯，1,4-丁二醇，液相色谱-质谱联用

参考文献

1. OG Bosch, E Seifritz. The behavioural profile of gamma-hydroxybutyrate, gamma-butyrolactone and 1,4-
butanediol in humans. Brain Res Bull. 2016, 126, 47-60.
2. 罗芳, 赵瑞斌, 李国军, 付旭宪, 范贤谋, 苏少明, 文云波, 黄齐林, 李斌. LC-MS/MS 法研究酒精
对人体血液中内源性 GHB 的影响. 昆明医科大学学报, 2024, 45 (05): 170-177.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

射击弹头痕迹图像自动比对算法在非同源数据泛化能力的研究

周志飞*[1]、郭百恩[2]、张刚[1]、李轶昳[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 中国人民公安大学

本文设计并实现了一种基于深度学习的射击弹头痕迹图像自动比对算法。该算法以BalScan 系统为基础，通过图像采集、图像预处理等，构建了 17870 张射击弹头痕迹图像的数据集，类别涵盖国内常见的 7 种枪支。基于该数据集，我们搭建了一个孪生网络模型，数据集划分为训练集和测试集。在训练集中，我们建设了正样本对和负样本对。其中，正样本对由同一枪支发射的弹头痕迹图像组成，负样本对来源于不同枪支的弹头痕迹图像。本模型采用三元组损失函数进行训练。通过使用 500 张独立的弹头痕迹图像进行测试，本算法在排名前 10 的正确率为 95.0%。为了进一步探讨本研究模型在其他来源的射击弹头痕迹图像比对中的泛化能力，我们选取了来自 Evofinder®系统的 19 对射击弹头痕迹图像进行测试。Evofinder® 为德国 ScannBI Technology 公司研发生产的枪弹自动识别系统，由数据采集平台、数据分析平台、专家工作平台三部分构成。研究采集的 19 对图像样本来自 19 支不同的 64 式 7.62mm 手枪，每支枪对应 2 张图像，共 38 张图像。在测试的过程中，我们从每对图像中挑选出一张图像，作为待查询图片，共 19 张。测试中，我们选出每对图像中的另一张图片，再加上由 BalScan 系统扫描获取的 1015 张射击弹头痕迹图像，共 1034 张图像作为测试的数据集。经测试和统计，算法自动识别的前 10 名的正确率达到了 94.7%，该结果表明本研究所提出的算法模型在非同源数据上具有一定的泛化能力。

关键字 弹头痕迹 自动比对算法

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

电子锁中的电子数据勘验技术解析

王勇*[1]、郭文举[2]、余蒋[1]、宋小波[1]
1. 重庆市永川区公安局
2. 重庆市公安局刑侦总队

随着智能电子锁的广泛应用，它们不仅提高了安全性，还在司法取证和案件侦破中扮演着越来越重要的角色。本文将探讨电子锁在侦破案件中的应用，包括其工作原理、数据收集与分析、实证案例以及未来发展趋势。

关键字 电子锁；电子数据勘验；司法取证；案件侦破；数据提取。

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

基于稳定同位素分析的秋水仙碱溯源研究

郑翰阳[1,2]、张涵宇[1,2]、接昭玮[1,2]、王伟[1,2]、胡灿[2]、王萍[2]、郭洪玲[2]、朱军*[1,2]、梅宏成[2]
1. 中国人民公安大学侦查学院
2. 公安部鉴定中心

秋水仙碱是存在于鲜黄花菜等植物中的一种生物碱，具有较强的毒性，在一些案件中会被犯罪分子用于投毒，因此开展秋水仙碱溯源研究在法庭科学具有重要的意义。本文利用气相色谱同位素比质谱仪（GC-IRMS）对秋水仙碱的碳稳定同位素比值进行分析，通过优化溶剂类型、进样量、色谱柱和升温程序、注氧时间等参数，克服了秋水仙碱相对分子量大、难于反应管中完全氧化为二氧化碳而导致检验结果不稳定的问题，建立了基于 GC-IRMS 的秋水仙碱碳稳定同位素比值检验方法（SD<0.3‰）。对三份不同来源的秋水仙碱样品碳同位素比值进行检验，$\delta^{13}C$ 值分别为-33.20±0.16‰、-34.18±0.11‰和-33.54±0.11‰，三者的$\delta^{13}C$值存在显著差异，表明通过碳稳定同位素检验可以实现不同来源秋水仙碱的区分。将上述三份秋水仙碱分别加入麦片中，采用丙酮溶解提取并浓缩至适当的浓度后进行检验，三者的$\delta^{13}C$ 值分别为-33.28±0.16‰、-34.23±0.04‰和-33.42±0.08‰，与纯样品检验结果具有良好的一致性，表明麦片基质不会干扰秋水仙碱碳稳定同位素比值检验。在一起投毒案件中，嫌疑人将秋水仙碱混入受害人食用的麦片中，采用本文建立的方法对案件检材（麦片）中的秋水仙碱进行提取和检验，通过与不同来源的秋水仙碱进行比较，最终确定了嫌疑人使用的秋水仙碱的来源，为案件侦破提供了有力的技术支撑。本文的研究结果表明，基于 GC-IRMS 的秋水仙碱碳稳定同位素比值检验方法能够区分复杂体系中秋水仙碱的来源，结果准确可靠，在法庭科学领域具有广泛的应用价值。

关键字 气相色谱同位素比质谱法（GC-IRMS）；秋水仙碱；碳同位素；溯源

参考文献

1.丁敬敏. 百合中化学成分的提取和分析[D]. 江苏:南京工业大学,2007.
2.Kurashima N ,Makino Y ,Urano Y , et al.Use of stable isotope ratios for profiling of industrial ephedrine
samples: Application of hydrogen isotope ratios in combination with carbon and nitrogen[J]. Forensic
Science International,2009,189(1):14-18.
3.Booth L A ,Wooller J M ,Howe T , et al.Tracing geographic and temporal trafficking patterns for
marijuana in Alaska using stable isotopes (C, N, O and H)[J]. Forensic Science International,2010,202(1):45-53

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

基于大规模平行测序技术的高度自动化的便携式法庭科学 DNA 鉴识系统

程莹莹[1,2]、哈力木热提·司马义江[1,2]、郭小森*[1,2]
1. 深圳华大法医科技有限公司
2. 深圳市法医学重点实验室

几十年来，荧光标记毛细管电泳（CE）一直是法医 DNA 鉴定中短串联重复序列（STR）基因分型的黄金标准。然而，尽管技术不断进步，多重 PCR 反应中可分析的 STR 位点数量仍受限于荧光标记的数量及片段大小的重叠，难以区分多个等位基因。

大规模平行测序（MPS）技术突破了这一限制，显著增加了单次反应中可检测的 STR 等位基因数量。与仅识别 DNA 长度多态性的 CE 不同，MPS 可以测序 STR 等位基因及其侧翼序列，提供更为丰富的遗传信息。此外，MPS 还支持检测单核苷酸多态性（SNPs）和线粒体 DNA（mtDNA），推动了更多类型的遗传标记在法庭科学 DNA 鉴识中的应用。然而，当前的 MPS 法庭科学 DNA 检测体系普遍存在自动化程度不高而操作复杂以及体积庞大而便携性差等问题。

在这里，我们开发了一套高度自动化的便携式的法庭科学 DNA 鉴识系统。该系统集成了高通量测序仪、自动化 DNA 文库制备仪器、自动化数据分析软件以及适配的多款法庭科学 DNA 检测试剂盒。测序仪采用的是基于国产的 DNBSEQ™技术的“桌面打印机”大小的 DNBSEQ-E25，以 400bp 读长的测序能力实现了 STR 等位基因的检测。为降低 MPS 文库构建的复杂度，该系统还配备了同样大小的全自动化 DNA 文库构建设备 DNBelab-D4，真正实现文库构建的全自动化。在该系统中，我们还将数据分析软件（FGID 法医 DNA 分析鉴定系统）集成到了测序平台上，实现了测序分析一体化。该系统配备了专为法庭科学 DNA 检测设计的试剂盒，可独立或联合检测 STRs、SNPs 和 mtDNA 等遗传标记，适用于个体识别、亲子鉴定、家谱分析、谱系追溯、祖源推断及野生动物种属鉴定等多种法庭科学应用。

该系统流程更加简便、信息更为全面且易于使用，真正实现了法庭科学从 DNA 到检测报告的全自动化流程操作，标志着法庭科学 DNA 鉴定技术的一次重大进步。

关键字 法庭科学 DNA 鉴识；大规模平行测序；自动化检测；便携式

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

气相色谱-串联质谱法(GC-MS/MS)检测复杂基质中过氧化物炸药六亚甲基三过氧化二胺

周华*
惠州市公安司法鉴定中心

全球恐怖主义的威胁正日益加剧，爆炸仍然是恐怖袭击最常见的形式。过氧化物炸药六亚甲基三过氧化二胺（HMTD）具有合成简单、隐蔽性高、高度敏感等特点，因此，HMTD的快速检测对于爆炸物快速识别及爆炸案件侦破都具有重要意义。本研究建立了气相色谱-串联质谱（GC-MS/MS）对复杂基质（面粉、泥土、塑料）中 HMTD 的定性定量方法。样品经丙酮提取，离心取上清液后，浓缩定容，用 HP - 5MS 色谱柱（30 m×0.25 mm×0.25 μm）分离，流速 4.0 mL/min，采用电子轰击电离（EI）、多反应监测（MRM）模式检测，外标法定量。HMTD 标准溶液在 0.2~50 μg/mL 范围内，线性良好，相关系数 R2≥0.995，以空白尘土为基体，方法检出限为 0.01 μg/g。该方法简便、可靠、灵敏度高，在复杂基质中展现出高灵敏度和良好的选择性，并成功应用于实际案例中的 HMTD 检测，为现场快速筛查和实验室精确分析提供了有效的技术支持。

关键字 过氧化物炸药；六亚甲基三过氧化二胺；气相色谱-串联质谱；爆炸物检测

参考文献：

1. Li Y., Sun Z., Liu Y., Chem. Res. Appl., 2021, 33(6), 985-995.
2. Marshall M., Aspects of Explosives Detection, Elsevier, Oxford, UK, 2009, p. 21.
3. Li X., Liu J., Sun Z., et al., Chem. (Huaxue Tongbao), 2021, 84(5), 411-418, 410.
4. Keinan E.I.H., USPat Appl., 2009, 914, 268.
5. Zhao H., Wang X., Forensic Sci. Technol., 2014, (5), 45-48.
6. Jiang D., Peng L., Zhou Q., et al., Chin. J. Anal. Chem., 2016, 44(11), 1671-1678.
7. Crowson A., Beardah M.S., Analyst, 2001, 126(10), 1689-1693.
8. Sisco E., Dake J., Bridge C., Forensic Sci. Int., 2013, 232(1-3), 160-168.
9. Stambouli H., Bouri A.E., Dahrouch A., et al., J. Forensic Res., 2019, 10, 1-4.
10. Li X., Xie W., Xu J., Forensic Sci. Technol., 2023, 48(3), 300-305.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

使用 GC-MS 对电缆隧道火灾中聚乙烯电缆燃烧烟尘与痕迹的研究

李恩浩*
中国人民警察大学

随着我国社会、经济的快速发展，电缆隧道大量发展伴随而来的火灾事故层出不穷，同时在电缆通道中，输电电缆线径较粗，绝缘护套由多种聚合物包裹而成，其在发生热解时多种聚合物之间可能伴随共热解行为，导致热解产物与之前的研究产生较大的区别。为帮助调查人员正确识别该现场中烟熏成分与准确分析起火部位起火点，有效完善事故调查证据链，同时为探明隧道火灾蔓延规律提供依据。本文首先采用实体燃烧实验平台，对不同工况下 PVC 电缆在火灾中产生的烟熏痕迹与烟尘进行收集；然后采用气相色谱质谱仪对其成分进行分析，详细阐述电缆燃烧烟尘具体产物、产生过程、特殊物质；最后结合现场调查针对多种成分比对分析发现多组电缆烟尘分析中均出现特征峰，该特征峰组分为 1,3-苯二甲酸二(2-乙基己基)酯，进一步为事故调查、涉火案件鉴定分析提供理论依据。

关键字 GC-MS；涉火案件；电气火灾；电缆隧道

参考文献：

1.Z. Chen, Q. Zhu, X. Wang, B. Xiao, S. Liu, Pyrolysis behaviors and kinetic studies on Eucalyptus residues using thermogravimetric analysis, *Energy Convers. Manage.* 105 (2015) 251–259.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于高分辨质谱的依托咪酯及其类似物质谱裂解规律研究

范一雷[1]、赵森[1]、杨奕轩[1]、柯星[1]、徐雨[2]、陈显鑫*[2]
1. 浙江警察学院
2. 国家毒品实验室浙江分中心(浙江省毒品技术中心)

目的：探究依托咪酯及其类似物在质谱下的裂解规律，为该类物质的鉴定及结构分析提供参考。方法：基于气相色谱-四级杆飞行时间质谱联用技术（GC-QTOF/MS）和液相色谱-静电场轨道阱质谱技术（LC-Q-Orbitrap/MS）在 EI 和 ESI 正电离模式下对依托咪酯、美托咪酯、丙帕酯和异丙帕酯进行质谱分析，推测该类物质的 EI-MS 以及 ESI-MS/MS 裂解规律。结论：依托咪酯及其类似物具有相似的裂解途径，在 EI-MS 模式下断裂过程主要集中在碳氮键的断裂，形成特定的离子碎片（m/z 105 和 m/z 77）。在 ESI-MS/MS 正离子模式下断裂过程主要集中在碳氮键的断裂，形成以 104 Da 为中性丢失的特征碎片离子 m/z [M+H-104 Da]，接着依次丢失中性碎片 R1 及 H_2O，形成特定的离子碎片（m/z 113 和 m/z 95）。此外，在 ESI-MS/MS 正离子模式中丢失的中性碎片 R1 可以较直观地反映母核上的取代基，从而进一步确定依托咪酯及其类似物结构。依托咪酯及其类似物质谱裂解规律有助于对该类物质的结构进行解析与推断，为法庭科学实验室该类物质的鉴定及结构分析提供参考。

关键字 依托咪酯及其类似物; 质谱裂解规律; 快速筛查; 电子轰击质谱；电喷雾质谱

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于 ATR-FTIR 技术和机器学习算法的奢侈品包鉴别探究

张健*、李志豪、邹积鑫
公安部鉴定中心

奢侈品包因其独特的设计、精湛的工艺及高昂的经济价值拥有广泛的受众群体，然而市场上假冒伪劣产品的泛滥已成为亟待解决的问题。本文提出了一种基于 ATR-FTIR 技术和机器学习算法的奢侈品包的快速鉴别技术。通过便携式红外光谱仪对假冒的 LV、古驰、香奈儿三类奢侈品包进行光谱数据采集，采用了一阶导数、平滑滤波和标准正态变换的预处理手段，经归一化后使用随机森林、支持向量机（SVM）和 1D CNN 建立模型分析比对。结果表明，SVM 模型的预测准确率达到了 95.8%，高于随机森林算法的预测准确率（86.0%）和 1D CNN 算法的预测准确率（92.6%）。该技术的优势在于其高效、准确且非破坏性的鉴别过程，可以为市场监管部门、消费者及品牌方提供强有力的技术支持。

关键字 奢侈品包；便携式红外光谱仪；机器学习；支持向量机

参考文献：

1. 应楚楚，林华，高璨，*西部皮革*, **2014**, 36, 31-38.
2. 孙琳琳，张 磊，孙辛未，*合成材料老化与应用*, **2023**, 52, 34-35.
3. Narayanan. P, Janardhanan. S,K, *Collagen & Leather*, **2024**, 6, 1.
4. Mas Ira Syafila Mohd Hilmi Tan, Mohd Faizal Jamlos, Ahmad Fairuz Omar, Kamarulzaman Kamarudin, Mohd Aminudin Jamlos, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **2023**, 232, 104718.
5. Megha. Mehta, Rafea. Naffa, Catherine. Maidment, Geoff Holmes & Mark Waterland, *Journal of Leather Science and Engineering*, **2020**, 2,3.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：报告

电气火灾熔痕检验新进展

周正*、李光耀、李亚军、邓显贺
公安部鉴定中心

随着经济的快速发展，目前火灾已经成为我国发生频率最高、破坏性最强、影响最大的灾种之一，严重危害人民生命财产安全。据国家消防救援局数据统计，2010 年至 2020 年，全国共发生 265.1 万起火灾，其中电气火灾有 86.6 万起。我国每年的火灾发生超过 30 万起/年，直接经济损失超过 37 亿元/年，电气火灾超过 10 万起/年，约占火灾总数的 1/3，与 2012 年之前相比有大幅度增加。2021 年，电气故障仍是造成火灾事故的主要原因，较大以上火灾则有 1/3 是由电气故障所致，占电气火灾总数的近 80%，电气火灾事故调查是火灾调查工作的重点，也是国内外火灾调查技术研究的重点和前沿。

就电气火灾调查技术而言，在起火部位处找到故障熔痕，并对其产生原因做出准确判断，是认定电气故障引发火灾的关键。熔珠熔痕形成与火灾发生前后的关系，是此类火灾调查原因认定的关键。目前而言，公安刑事技术部门对电气火灾现场中熔痕物证最直接也是最有效的检验方法为金相法。金相组织是金属特有的组织结构，主要包括晶粒结构、物理性能、晶粒密度等。金相组织作为电气火灾痕迹物证鉴定的重要依据，对判断导线过电流、短路、火烧提供必要的数据支撑。由于火场中火灾前导线发生短路和火灾后导线发生短路金属导线所经历的热过程不同，其金相显微组织也会存在差异，因此通过金相法来判断熔痕究竟为一次短路（也叫火灾前短路）产生或二次短路（也叫火灾后短路）产生对侦查部门对火灾原因的认定以及下一步侦查方向起着很重要的作用。

关键字 法庭科学，电气火灾，金相法

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

挥发和燃烧对汽油组分的影响

张冠男*、刘占芳、郭洪玲、周正、李光耀、李亚军、邓显贺
公安部鉴定中心

汽油是在原油基础上经过分馏、催化裂化、催化重整等过程生产的烃类混合物。由于其极易燃烧，获取方便，是放火犯最常使用的助燃剂，因此，汽油及其残留物的检验一直是法庭科学的重要工作。多数案件中，勘验人员提取的检材是经历了燃烧或挥发过程的汽油残留物，由于其各个组分在热过程和挥发过程中可能发生变化，残留物与纯品汽油峰型差异很大[1]。因此，研究汽油燃烧和挥发残留物与纯品汽油的差异和特征规律，对于案件中助燃剂的定性和溯源具有支撑意义。为此，我们对汽油挥发和燃烧产生的残留物进行了谱图特征研究。

挥发实验取多组新鲜汽油各 200 μL 分别置于 2 mL 色谱进样瓶中，敞口放置在通风橱内。由于不同汽油挥发速率差别很大，通过放置时间不能准确区分挥发程度，因此通过观察残留液体体积，取残余量约 50 微升（记为挥发 75%）、约 20 微升（记为挥发 90%）和无明显液滴残留（记为挥发 99%）共三个节点进行考察。燃烧实验同样取多组新鲜汽油各 200 μL 分别置于 10 mL 玻璃坩埚内，用丁烷喷枪反复点燃汽油，至剩余汽油无法再点燃为止。挥发和燃烧操作完成后，分别加入甲醇定容至 1 mL，封口后参照 GA/T 2075.1-2023 标准中仪器参数用气相色谱-质谱仪进行检验。谱图如图 1 所示。

可以看到，随着汽油挥发程度的加重，汽油中的甲苯、C2 苯逐步消失，C3 和 C4 苯的相对比例逐渐增大，整体 TIC 峰型向着轻组分减少重组分增加变化。而汽油燃烧残留物的峰型介于 90%挥发和 99%挥发残留物之间，相对于挥发程度 99%的样品，燃烧残留物样品的轻组分保留更多，换言之，挥发效应对汽油峰型的破坏可能更为严重。在火场的实际样品中，由于检材的提取有滞后性，汽油残留物往往受到着燃烧和挥发两个过程的共同影响，谱图的研判分析更加困难。而通过助燃剂谱图溯源的工作需要综合考虑两个效应对各个组分的影响，通常需要引入统计学方法进行分类[2]。

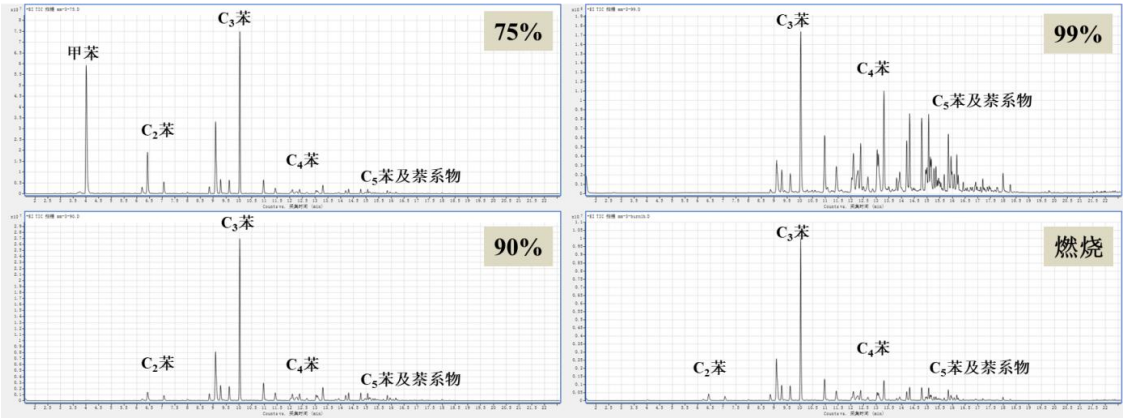


图 1 挥发程度为 75%，90%，99%的汽油和燃烧残留物总离子流色谱图

关键字 助燃剂，汽油，残留物，气相色谱-质谱

参考文献：

1. 杨勇仪, 刘玲.理化检验（化学分册）, 2024, 60.2, 242-248.
2. Vergeer P , Bolck A , Peschier L J C ,et al., Science & Justice, 2014, 54(6),401-411.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

光敏印油的光学和光谱特征分析研究

杨求凤*
公安部鉴定中心

随着制章技术的发展和材料的革新，光敏印章凭借其优越的盖印效果和便捷的使用方式，成为许多公司、企业公章及业务用章的首选，与此同时，伪造光敏印文的案件出现频率也急剧上升。在传统的印文检验中，文检人员一般仅从形态学角度，通过规格性特征和细节性特征鉴定不同印文来源是否同一，但是光敏印文由于其盖印效果的特殊性，在检验中可供利用的印文形态特征较少，检验难度较大。我们注意到，光敏印章使用专用的光敏印油，注油一次可盖印上万次，在一段时期内印章所含的印油是固定的。因此，我们尝试利用印油的理化特性来为印油分类，以辅助印文同一性鉴定。

课题组从市场上搜集了 50 种不同品牌、型号的红色印油，制作 50 枚光敏印章并灌注印油，每隔一周在 A4 纸上盖印浓、中、淡三种类型的样本，对提取的样本分别进行荧光检验、显微分光检验、拉曼光谱检验。依据荧光强弱、有无和分布，可以将 50 类样品分为五类；依据显微分光光谱的差异，可以将样品分为 5 类；依据拉曼光谱特征峰的差异，可以将样品分为 3 类。交叉三种检验结果的分类，我们将所有样品分成了 21 类，其中 9 种可以直接区分。课题组还尝试运用主成分分析法对获得的 50 组拉曼光谱数据进行分类，结果达到了 99.67%的成对区分效果。

这一结果表明利用光敏印油的理化特性可以对光敏印油进行区分，理化特性可以为印文同一性鉴定提供新的依据，从而辅助印文鉴定，提高法庭科学印文检验的正确率。

关键字 法庭科学文件检验；光敏印油分类；荧光检验；显微分光检验；拉曼光谱检验

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

AFAI-MSI 技术在文书鉴定领域应用的探索性研究

王蔚昕*、李志豪、廉哲、石高军
公安部鉴定中心

与光学检验、光谱分析相比，质谱成像检验技术可以深入到分子层面，实现不同分子的高灵敏度检测，并能够直接提供目标化合物空间分布信息[1]。研究发现，应用敞开式空气动力辅助解吸电喷雾离子化质谱成像技术（AFAI-MSI）可以在保持纸质文件原貌的情况下获得其上字迹墨迹或印文印迹的化学物质成分分布特征。研究使用 AFAI-Orbitrap 联用系统对质谱成像技术在法庭科学文书鉴定领域中的应用进行了初步探索性研究。研究根据检验对象及目的的不同，优化并设置了相适应的成像离子源采集条件及质谱采集条件。研究使用的质谱成像系统空间分辨率纵向为 100μm，横向可达 45μm 左右。研究结果表明，通过分析提取纸基上色料痕迹强度适当、有特异性的特征离子或离子组进行单独成像，并结合基于全扫描质谱数据的化学计量学分析，AFAI-MSI 技术可对物质组成仅有细微差别、光学特性相似或相同的墨迹实现有效区分，并能在一定程度上将油墨相互覆盖关系的判定依据向数据化转变[2]，在“被掩盖字迹显现”、“变造文件检验”、“朱墨时序鉴别”等文书鉴定项目中均有良好应用效果。

关键字 文书鉴定 原位检验 敞开式空气辅助电离 质谱成像 化学计量学方法

参考文献：

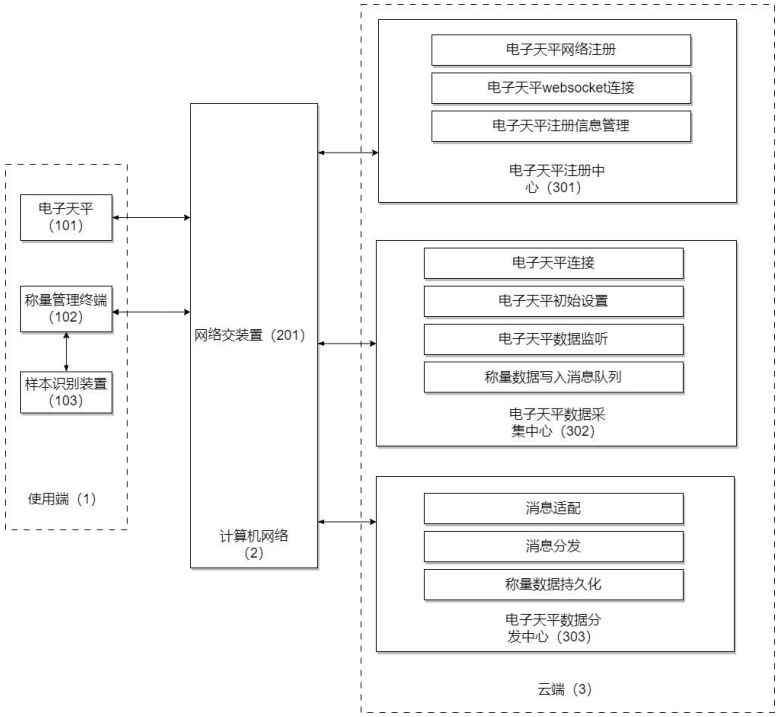
1. 贺玖明，李铁钢，何菁菁，罗志刚，再帕尔·阿不力孜*.常压敞开式离子化质谱技术研究进展［J］分析测试学报，2012，31(9):1151－1160.
2. Zhigang L ,Weixin W ,Xuechao P , et al.Writing sequence identification of seals and signatures in documents using ambient mass spectrometry imaging with chemometric methods[J].Talanta., 2021, 235, 122804-122804.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

智能电子天平管理系统在毒品检验鉴定中的研发及应用

陆亚娟、闫晓鹏、姚震、廖琦、刘茜、肖雷*
国家毒品实验室陕西分中心（陕西省公安厅毒品技术中心）

随着我国经济与社会的发展，电子天平已在检验鉴定、教学、科研及医药等行业中实现广泛的应用，其准确的称量结果发挥着不可忽视的作用。但是，传统的天平使用完还需要手工记录原始称量数据，再录入到信息管理系统中，最后由信息管理系统对录入的数据进行处理，这大大增加了检验人员的工作量，同时不能避免手工抄录造成的错抄漏抄情况，在毒品检验鉴定过程中，快速提供检验结果与低效率前处理称量过程矛盾愈发明显。在这种情况下，研发出智能电子天平管理系统具有极其重要的意义。智能电子天平管理系统采用物联网技术将天平连接到云端，实现远程控制和数据访问；使用计算机视觉技术实现与受理窗口和检材管理窗口对接，让天平能认识目前称量的检材、样品或标准品；同时，使用自动化技术实现对天平的自动控制和数据读取，该系统实现了称量人员在称量样品时的无接触智能管理，提高了数据处理的效率，提升数据的准确性，减少人为错误，实现称量数据的智能化管理。



关键字 电子天平，检验鉴定，智能管理，数据读取

参考文献：

1. 安民军．电子天平检定管理系统的研发及应用[J]. 科技风，2022,(17):1-3.DOI:10.19392/j.cnki.1671-7341.202217001.
2. 甄达贵.影响电子天平计量检定的因素及优化措施[J].仪器仪表标准化与计量,2022(05):41-43.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

铜导线熔痕的电子背散射衍射分析研究

韩军凯*[1]、叶永发[1]、赖仕均[1]、胡孙林[2]
1. 深圳市公安司法鉴定中心
2. 深圳美恩美科技有限公司

电气火灾突发性强，难控难防，严重危害国家财产和人民生命安全。当前电气火灾物证鉴定以铜导线熔痕鉴定为主，通过对铜导线熔痕研究可以追溯火灾起因，避免火灾再次发生。本文在实验室中模拟制备了铜导线的火烧熔痕和一次短路熔痕，利用氩离子抛光技术来对熔痕的截面进行刻蚀处理，再采用背散射电子衍射技术分别对火烧熔痕和一次短路熔痕进行表征，分析研究了两种熔痕的形貌和晶体学特征。研究表明：在高温火焰灼烧的条件下，得到的火烧熔痕内部存在较多气孔，也有比较明显的缩孔，晶体存在形式以等轴晶为主，存在个别粗大的枝状晶；晶粒分布呈现无序状态。在瞬间短路大电流的作用下，得到的一次熔痕内部气孔数量少、体积小且分布均匀，由于受到电流方向的影响，熔痕内部存在比较明显的呈现拉长状的柱状晶，而在熔痕的边缘存在部分胞状晶；晶粒分布呈现比较明显的取向性。

Electrical fires had strong suddenness and were difficult to control and prevent, seriously endangering national property and people's safety. The current physical evidence identification of electrical fires mainly focused on the identification of copper wire molten marks. By studying the molten marks of copper wires, it was possible to trace the cause of fires and prevent their recurrence. In this article, fire melted marks (FMs) and primary short-circuit molten marks (PSMs) of copper wires were prepared in the laboratory in order to simulate the real fire scene. After etching the cross-section of the melt using argon ion polishing technology, backscattered electron diffraction (EBSD) technology was used to characterize FMs and PSMs separately. Then the morphology and crystallographic characteristics of the two types of molten marks were analyzed and studied. Results indicated that there were many pores and obvious shrinkage pores inside the FMs under the condition of high-temperature flame burning. The main form of crystal existence is equiaxed crystals, with a few coarse dendritic crystals present. The grain orientation distribution presented a disordered state. Under the condition of instantaneous short circuit and high current, the number and volume of internal pores in a single weld trace were small and evenly distributed. Due to the influence of current direction, there were obvious elongated columnar crystals inside the molten marks, while there were some cellular crystals at the edge of the molten marks. The grain orientation distribution showed a relatively obvious orientation.

关键字 电气火灾，铜导线熔痕，氩离子抛光，背散射电子衍射

参考文献：

1. T.Baudin, A.L.Etter, R.Penelle. Materials Characterization., 2007, 58(10), 947-952.
2. 韩俊青，武玉英，刘树帅，等. 电解铜箔截面微观组织的 EBSD 分析[J]. 精密成形工程，2024，16(7)，233-238.
3. 陈克，张斌，邓松华，等. 铜导线一次短路熔痕显微组织再结晶过程 [J]。理化检验-物理分册，2024，60(01)，6-11.

4. J.Park, J.H.Kang, E.P. Lee. Fire Technology., 2021,57,1667-1682.
5. 刘强. 短路及火烧条件下铜导线痕迹特征研究[D]. 西安：西安科技大学，2022.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

生物样本中 42 种挥发性有机毒物的 HS/GC-MS 检验

邹波*[1]、朱小涵[2]、魏春明[1]、张云峰[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 长春市公安局

目的：本研究建立生物样本中常见有机溶剂、卤代烃、芳香化合物及吸入麻醉剂等 42 种挥发性有机毒物的顶空气相色谱-质谱检验（HS/GC-MS）方法，为相关中毒死伤案件检验提供技术方法。

方法：移取血液、尿液或匀浆化的脏器组织等生物样品 0.5 mL（g）置于玻璃顶空进样瓶中，加入 0.5 mL 去离子水，封盖后采用配备自动顶空进样器的气相色谱-质谱联用仪分析。自动顶空进样器条件：进样瓶加热温度 60 ℃；加热时间 10 min；定量环压力 25kPa；定量环温度 100 ℃；进样时间 0.5 min。GC-MS 条件：Gaspro（30m×0.32mm×20μm）色谱柱，50℃保持 3 min，以 10 ℃/min 速率升温至 250 ℃，保持 5 min；柱流量 2 mL/min；离子源温度 200 ℃；质谱扫描方式：全扫描（SCAN）；扫描范围：14 amu～250 amu；采集时间：3~25 min。

结果：配制目标物标准物质工作溶液使用的溶剂为水-乙二醇 1:1（v:v），原因是大部分目标物水溶性差，而常用的低沸点溶剂如甲醇、乙腈会在保留时间 8~10 min 区间出峰，导致质控样品中部分目标物被覆盖，影响检验准确性。采用水-乙二醇体系有利于降低溶剂干扰。采用本方法检测生物样本中丙酮、乙酸乙酯等 6 种烃类含氧衍生物，甲硫醚、二硫化碳等 4 种烃类含硫衍生物，三氯甲烷、1,2-二氯乙烷等 14 种卤代烃，苯、对二甲苯等 13 种芳香化合物，以及七氟烷、地氟烷等 5 种吸入麻醉剂，均达到良好色谱分离效果。血液样本中 42 种目标物检出限(LOD)为 0.02~0.5 μg/mL，定量限(LOQ)为 0.05~1.0 μg/mL，血添加样品工作曲线相关系数(R2)为 0.992~0.999。方法日内精密度 RSD＜8%，日间精密度 RSD＜12%。

结论：各类挥发性有机物的吸入中毒死伤案件多发，例如工厂中有机溶剂或含氟制冷剂泄漏事故，清洗油罐车的操作人员中毒伤亡，临床麻醉事故以及利用七氟烷等吸入麻醉剂实施的迷奸犯罪等。由于其挥发性强、蒸汽易扩散，现场物证提取难度较大。生物样本的检验结果对判定死伤原因、明确案件性质有关键作用。本研究开发了常见有机溶剂、卤代烃、吸入麻醉剂等 42 种挥发性有机毒物的 HS/GC-MS 检验方法，操作简便，灵敏度高，能够满足实际案件检验鉴定需求。

关键字 生物样本，挥发性毒物，顶空气相色谱-质谱法（HS/GC-MS）

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

信号分析和波谱检测技术在声纹鉴定中的应用

王欣*
南京锐寰科技有限公司

随着音像资料分析和检验鉴定技术的日益成熟，公安司法机关对音视频资料分析、检验的需求日益增长，相应的设备检验检测的需求也越来越多。音视频设备检验检测涉及无线通信、信号处理等多种技术，要求鉴定人员具备较强的数据分析和处理能力；加之各种品牌和型号的设备差异较大，实际的检验鉴定难度越来高。本研究针对声纹鉴定工作中存在的实际难题，研究建立了融合信号分析技术、电磁波检测技术、波谱检测技术等多种技术手段于一体的综合检测系统。信号分析技术通过频谱仪分析设备识别并检测异常信号源，分析信号源的特征特点；对信号的时域波形和频域特征进行分析，判断信号的来源和特性；通过傅里叶变换将时域信号转换为频域信号，分析信号的频率成分；通过短时傅里叶变换、小波变换分析时间和频率信息，分析非平稳信号。电磁波检测技术重点检测电信号的波形，分析信号变化，识别和定位特定的信号源，监测环境中的电磁波信号，识别目标设备。波谱检测技术则通过语音降噪技术、波谱鉴真技术，去除杂音并且识别发射与接收端检测分析设备。该综合系统形成了一个全面的鉴定平台，检测的准确性和可靠性得到了显著提升。该系统已在实际司法实践中发挥重要技术支撑作用，有力促进了声纹鉴定手段的不断发展与完善。

关键字 信号分析技术，电磁波检测，波谱检测

参考文献：

1. ICS 13.310CCS A 92 中华人民共和国公共安全行业标准 GA/T 2013-2023 窃听/窃照专用器材鉴定技术规范（Technical specifications for eavesdropping device identification）.
2. 周俊 "窃听窃照器材的检测与防范对策." 信息安全研究, 8(3), 22-27
3. 张华，李刚"窃听窃照器材的技术鉴定与法律问题探讨." 法学研究, 35(4), 112-118
4. Baker, J "Detection and Prevention of Eavesdropping Devices." Journal of Forensic Sciences, 63(2), 456-460.
5. Ferguson, R., & Smith, T "Counter-Surveillance Techniques: Identifying and Neutralizing Listening Devices." International Journal of Security and Privacy, 7(3), 145-158.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

SPME-Arrow 结合 GC-MS/MS 同时检测人体体表中 38 种挥发性有机化合物

董林沛*、任昕昕、宋歌、张云峰
公安部鉴定中心

目的 建立一种同时检测人体体表中 38 种挥发性有机化合物（Volatile Organic Compounds, VOCs）的箭型固相微萃取（SPME-Arrow）结合气相色谱-串联质谱（GC-MS/MS）的方法，并对基质条件、萃取纤维、萃取温度以及萃取时间进行优化。方法 采用经乙醇超声清洗后的纱布采集人体体表 VOCs，经 SPME-Arrow 提取后上样。选用 DB-WAX 毛细管柱（30 m×0.25 mm, 0.25μm）分离，采用多反应监测模式（MRM）测定。结果 所有 VOCs 在线性范围内线性关系良好（r2 >0. 99），检出限在 0. 07～5.24 ng 之间。采用空白纱布进行加标回收实验，38 种 VOCs 在 50、100、200 ng 加标水平下回收率在 70%～120%范围内。在 100 ng 加标水平下，重复测定 6 次，连续测定 5 天，日内精密度在 1.27%～11.79%之间，日间精密度在 2.88%～12.95%之间。结论 本方法操作简单、快速高效，可用于人体体表中多种 VOCs 的同时检测。将该方法用于实际样品中 VOCs 的筛查与定性定量检验工作，能够满足分析要求。

关键字 人体体表；箭型固相微萃取；气相色谱三重四极杆串联质谱；挥发性有机化合物

参考文献：

1. Peters R, Veenstra R, Heutinck K, et al. Human scent characterization: A review[J]. Forensic Science International, **2023**, 78(3): 349-356
2. Grabowska-Polanowska B, Miarka P, Skowron M, et al. Development of sampling method and chromatographic analysis of volatile organic compounds emitted from human skin[J]. Bioanalysis, **2017**, 9(19): 1465-1475.
3. de Lacy Costello B, Amann A, Al-Kateb H, et al. A review of the volatiles from the healthy human body[J]. Journal of breath research, **2014**, 8(1): 10-14.
4. Broza Y Y, Mochalski P, Ruzsanyi V, et al. Hybrid volatolomics and disease detection[J]. Angewandte Chemie International Edition, **2015**, 54(38): 11036-11048.
5. Prada P A, Furton K G. Human scent detection: a review of its developments and forensic applications[J]. Revista de Ciencias Forenses, **2008**, 1(2): 81-87.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

紫外拉曼-荧光联用技术在毒品分析中的应用

焦英、廖琦*、陆亚娟、闫晓鹏、肖雷、刘永红、姚震
国家毒品实验室陕西分中心（陕西省公安厅毒品技术中心）

拉曼光谱是对与入射光频率不同的散射光谱进行分析得到分子振动、转动信息，以提供样品化学组分、结构的光谱技术。由于可以直接穿过透明或半透明包装进行快速、无损检测，是毒品现场快筛的有效方式。随着新型毒品层出不穷，拉曼光谱在实际应用中常存在信号弱、背景荧光强、环境光干扰等问题。主要是因为目前的便携式拉曼光谱仪出于平衡成本的考虑主要使用 532nm，785nm 等可见光或近红外光激发样品，极易受到样品荧光和环境杂散光的影响。

采用深紫外激光激发亦可以激发样品，深紫外激光产生拉曼信号位于深紫外区附近，而荧光通常在近紫外和可见区，因而能够同步实现拉曼和荧光信号的分离和测定。同时，拉曼信号强度与波长的四次方成反比，将激发波长缩短向紫外区偏移可显著提高灵敏度。人眼受激光辐射损伤阈值与波长相关，紫外波段比可见光及近红外波段高 2-3 个数量级，所以紫外激发也有助于实现人眼的安全测试。此外，深紫外激光对拉曼检测的影响很小，从图 1 可以看出，266nm 比 785nm 激发的拉曼光谱受环境光的影响更小，更有利于现场检测。对于大多数毒品，由于芳香共轭体系的存在，许多样品有可能通过共振拉曼将光谱信号强度增加 3-4 个数量级。值得注意的是不同毒品的荧光光谱也有所区别，将拉曼光谱和荧光光谱相结合，有助于提高毒品样品的识别准确率。因此，紫外拉曼-荧光光谱联用技术可有效结合荧光光谱高灵敏度和拉曼光谱“分子指纹”特性的优点，进而实现缴获复杂毒品样品的现场快速检测。

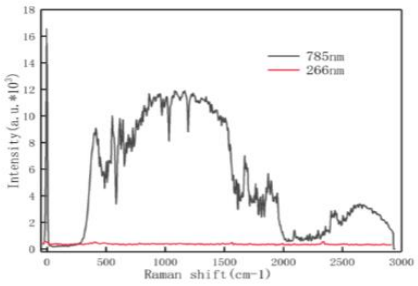


图1 采用266nm激光及785nm激光激发拉曼光谱的背景光谱

关键字 紫外拉曼，荧光，毒品分析

参考文献

1. Jones, R.R., Hooper, D.C., Zhang, L. et al. Raman Techniques: Fundamentals and Frontiers. Nanoscale Res Lett .14, 231 (2019). https://doi.org/10.1186/s11671-019-3039-2
2. Zhang, S.; Li, S.; Zhou, W.; Zheng, L. Chem. Phys. **2011**, 135: 14304.
3. Jones, L. E.; Stewart, A.; Peters, K. L.; McNaul, M.; Speers, S. J.; Fletcher, N. C.; Bell, S. E. J. Infrared and Raman Screening of Seized Novel Psychoactive Substances: A Large Scale Study of >200 Samples. Analyst 2016, 141, 902–909. doi:10.1039/c5an02326b

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

电子背散射衍射分析技术在法庭科学中的应用

门腾腾*[1]、刘树帅[2]、刘海旭[1]、王永明[1]
1. 山东省公安厅物证鉴定研究中心
2. 山东大学材料科学与工程学院

电气火灾是当下带来经济损失与威胁人类安全的主要火灾诱因之一。对引发电气火灾诱因的可靠鉴定技术是法庭科学中事故方判定，乃至预防电气火灾发生的关键一环。因此，本文讲从背散射电子衍射技术特点以及背散射电子衍射技术在电气火灾事故中的应用场景。深入探讨当下技术发展较快的，可靠性较强的背散射电子衍射分析技术在电气火灾中潜在应用价值，并探讨其取代金相检测技术优势因素，为背散射电子衍射分析技在电气火灾中的推广使用提供思路。

关键字 背散射电子衍射分析，法庭科学，电气火灾，熔痕

参考文献：

1. 刘飞,马晓桐,刘战伟,等.电子背散射衍射技术及其在微观力学行为研究中的应用[J].力学与实践,**2023**,45(06):1321-1330.
2. 徐娜, 时军波, 李永德, 等. 金相分析技术在电气火灾原因鉴定中的应用[J]. 理化检验-物理分册, **2013**.49(9):593-596.
3. 徐海军,金淑燕,郑伯让.岩石组构学研究的最新技术——电子背散射衍射(EBSD)[J].现代地质,**2007**,(02):213-225.
4. 刘庆.电子背散射衍射技术及其在材料科学中的应用[J].中国体视学与图像分析,2005,(04):205-210.
5. 詹美燕,李春明.电子背散射衍射的制样方法和影响花样质量的因素[J].物理测试,**2021**,39(01):31-36.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

核磁共振法测定“Rush”中的亚硝酸烷基酯类新精神活性物质

廖琦、刘永红、孙卫、叱干家助、杨怡华、肖雷、姚震、焦英*
国家毒品实验室陕西分中心（陕西省公安厅毒品技术中心）

当前全球毒潮持续泛滥，以新精神活性物质（New psychoactive substances, NPS)为代表的成瘾性物质替代品的流行，对法庭科学检验鉴定提出更高要求。司法实践中常常需要在没有标准方法和缺乏标准物质的情况下解析新型毒品结构，甚至定量分析，在这种现实需求下，核磁共振波谱在新型毒品研究中具有独一无二的优势。

亚硝酸烷基酯类新精神物质是以亚硝酸异丁酯，亚硝酸异戊酯等为代表的一类新型毒品，常以“Rush”为名进行批量贩卖，是近年来我国男同群体中滥用最严重的新型毒品。挥发性极强，具有浓烈的类似汽油味道，一般直接鼻吸，常用玻璃瓶装液体；内部常有小珠，摇晃时能听到响声，发出砰砰声，也被称为“Propper”，目前暂无检测的标准方法。

该类物质虽未被列入管制目录，但在全国已具有一定滥用倾向和相当的危害性。目前属于危险化学品，有关案件的办理常参考笑气应用非法经营进行兜底。我们在实际工作中发现目前该物质主要使用 GC 或 GCMS 检测，但 GC 进样口气化加热常导致部分样品分解，使得目标峰过小，无法准确判断。尽管使用顶空进样可以有效改善以上现象，但仍无法满足准确定量需求。因此我们开发了基于核磁共振的 Rush 定性定量方法，希望能够对从事分析化学和毒品研究的有关工作提供一定的参考。

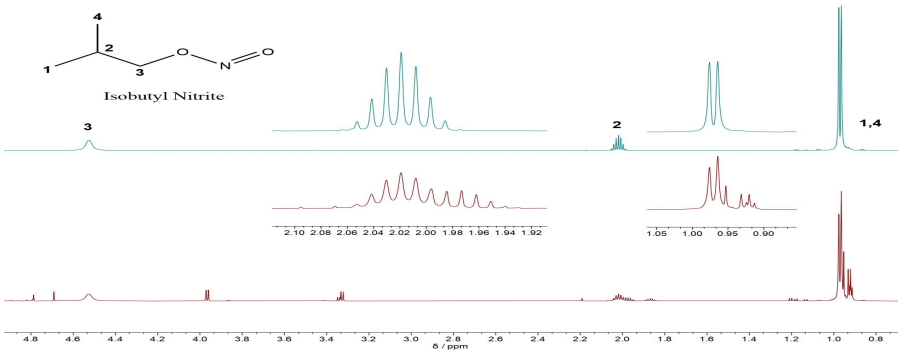


图 1 亚硝酸异丁酯（top）和缴获可疑 Rush 样品（bottom）的 1H-NMR 对比图

关键字 核磁共振波谱、新精神活性物质、Rush、亚硝酸异丁酯

参考文献：

1. Barrangou-Poueys-Darlas M, Gerardin M, Deheul S, et al. Poppers Use and High Methaemoglobinaemia: ‘Dangerous Liaisons’ [J]. Pharmaceuticals, **2021**, 14(10): 1061.
2. ZHANG Xing-can, ZHAO Wan, ZHENG Huang, et al. Analysis on use of rush popper and related factors among men who have sex with men in Shanghai，China. Fudan Univ J Med Sci. **2021**, 48(05): 611–617.
3. Vogt S, Angerer V, Freiburg U. Analysis of “poppers” products and analytical detectability of a single use of “poppers” [J]., 2015.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于深度学习的人脸特征可解释性数据集的构建

李伟*
公安部鉴定中心

基于深度学习的人脸识别、目标检测等计算机视觉技术发展迅猛，但由于深度学习网络模型犹如“黑盒”般难以解释，限制了计算机视觉技术在严谨的法庭科学影像证据领域的广泛应用。近年来，虽然对基于深度学习的人脸特征可解释性的研究开始引起相关领域研究人员的关注，但是尚未形成统一的解释范式，尤其是人脸特征可解释性数据集基本上是一对一的用于基于深度学习的人脸特征可解释性的研究，其效果和适用范围均有待继续研究。对此，本文围绕法庭科学领域内基于深度学习的人脸特征可解释性任务，提出灰度密度图+无缝融合图的“两步走”数据集构造原理。简言之，首先以被广泛应用于评价人脸识别算法性能的 LFW 数据集为基础进行筛选，筛选的原则是每个人物至少有两张人像照片，以便构成三元组数据集[1]（待检人像、配对人像、非配对人像）。其中，非配对人像的重绘是基于 BisNet 模型进行精准语义分割，得到人脸图片特征，如眼睛等；结合 Stable Diffusion 进行多倍次融合得到较为友好的非配对人像的过程。如图 1 所示。最后可形成 3X 数量级数据集，以供人脸特征可解释性算法研究和测试。

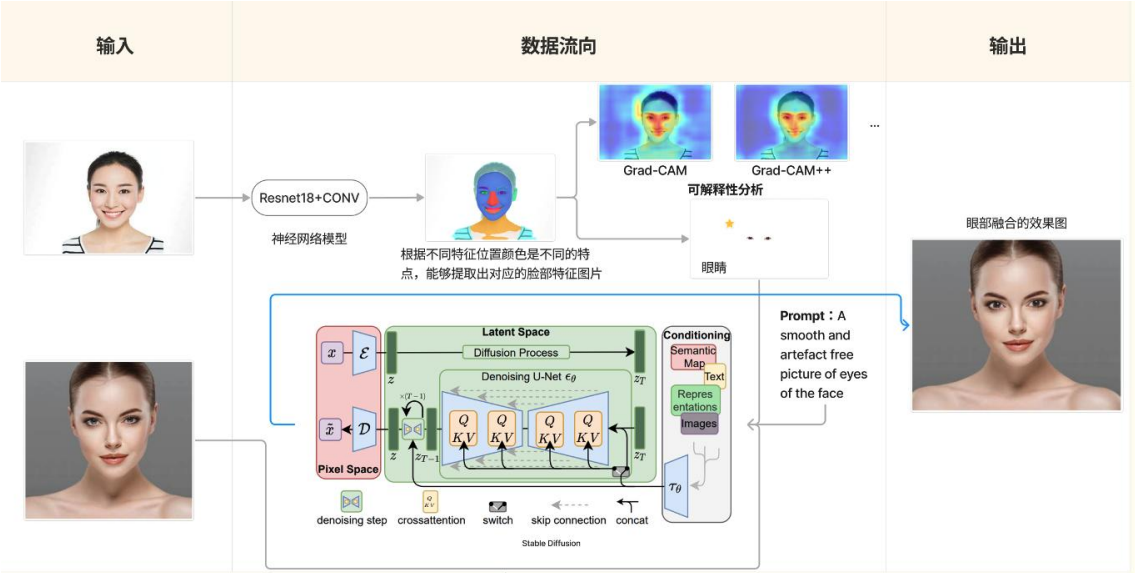


图 1 非配对人像的重绘过程

关键字 深度学习，可解释性，三元组数据集，非配对人像，融合

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

铁路护网上脱落细胞的提取纯化效果初探

张智杰*[1]、雷一鸣[1]、郭平[1]、孙文婷[1]、古育明[1]、罗深恒[2]
1. 广州铁路公安局广州公安处
2. 广州高盛智造科技有限公司

【目的】：本研究旨在探索一种高效提取和纯化铁路护网上脱落细胞的方法，以便为大规模、快速的提取和纯化提供参考。【方法】：选取当前铁路线路上常见的喷漆金属护网，通过模拟攀爬行为在护网上留存脱落细胞。分别使用植绒拭子和脱落细胞粘取器提取护网上的脱落细胞，并采用 S-Pure 96 Plus 型硅磁一体核酸提取工作站中的硅珠法和磁珠法分别提取和纯化脱落细胞中的 DNA。提取的 DNA 经 Verifiler™ Plus 试剂盒进行 PCR 扩增，扩增产物通过 ABI-3500XL 型遗传分析仪检测，以获取常染色体 STR 多态性检验结果。【结果】：实验结果显示，使用植绒拭子提取的检出率（54.89%）高于脱落细胞粘取器（48.44%）；采用硅珠法提取纯化的检出率（71.56%）显著高于磁珠法（31.78%）。其中，植绒拭子结合硅珠法提取纯化的检出率最高，达到 80%。【结论】：植绒拭子在提取铁路护网上脱落细胞方面具有更高的检出率。S-Pure 96 Plus 型硅磁一体核酸提取工作站能够高效、快速地提取和纯化大批量物证，尤其是硅珠法在自动化提取和纯化中的效率较高，DNA 分型效果更好。

关键字 法医物证；铁路护网；脱落细胞；自动化提取工作站

参考文献：

1.江煜灵,汤志成,袁红等.X-Pure 96 Plus 微量 DNA 自动提取工作站应用测试[J].刑事技术,**2022**,47(4):405-410.
2.张振清,李晟婷,范光耀.铁路栅栏上接触性 DNA 检验方法的比较[J].中国人民公安大学学报(自然科学版),**2022**,28(02):9-14.
3.范光耀,陈昶旭.铁路线路犯罪案件常见接触性 DNA 检验效果研究[J].铁道警察学院学报,**2017**,27(03):37-40.
4.杨电,刘宏,刘超等.国产磁珠结合自动化工作站批量提取生物检材 DNA 的应用[J].中国法医学杂志,**2009**,24(6):404-406.
5.王颖希,张庆霞,薛卢艳等.接触性检材的 DNA 自动化提取[J].刑事技术,**2018**,43(2):156-158.
6.韩海军,伊海,杨敏等.磁珠法自动化纯化现场检材 DNA 方法研究[J].中国法医学杂志,**2017**,32(1):9-12.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于并行分块模型处理的实时智能语音降噪技术

丁俊豪、黄润乾、黎荣晋、谭林伟、陈东鹏*
深圳市声扬科技有限公司

随着人工智能（AI）技术的快速发展，语音作为人机交互的重要接口在智能化产品领域得到广泛应用。智能语音交互包含前端语音信号采集与处理、语音降噪及增强、语音识别、声纹识别、自然语言处理、语音合成等一系列关键技术。整个语音交互链路的最终目的是让机器听得懂，而首先得让机器听得清。目前，受限于设备与技术，在噪声环境下，机器对麦克风拾取语音的解析能力还无法与人类的耳朵相媲美。因此，语音降噪一直是智能语音研究的重要方向。语音降噪方法主要分为两类，一类是基于信号处理的传统降噪方法，如谱减降噪、自适应降噪等，另一类则是基于深度学习的 AI 降噪方法，如 DNN、CNN、LSTM 等经典网络模型。传统降噪方法应对稳态噪声效果尚可，但对于非稳态噪声的处理却相对有限，AI 降噪不仅能够很好地处理稳态噪声，对于非稳态噪声的处理相较于传统方法也有明显优势，这得益于训练模型时用到了大量数据。然而 AI 降噪仍有不足之处，如模型复杂度与实时性的矛盾、环境泛化能力差等问题。如何在低计算资源开销的条件下使得降噪模型既有良好的降噪性能，又有较强的泛化能力，仍然是一个具有挑战性的问题。在低资源开销的实时降噪场景，对现有的较大模型进行裁剪和优化，使得模型的整体参数量控制在硬件资源可以承受的范围以内，且在特定的场景可以获取与较大模型相当甚至更优的降噪效果。采用基于自适应权重分配的复频谱分段重构的方法搭建一个并行分块网络模型，并基于分块复频谱的残差对并行网络的前置权重进行实时调整。通过频域分块使得各并行分块网络可以专注于处理特定频带的噪声数据，以降低模型的复杂度。通过并行网络的权重调整，实时追踪噪声频率特征的变化。在训练过程中，引入信噪比影响因子，通过实时监测输入数据的信噪比与噪声频率分布的相关性，进一步对并行网络的前置权重进行优化，使得在低信噪比的局部频带上，在对噪声进行抑制的同时，最大限度的保留语音成分，从而提升模型整体的降噪性能。实验结果表明，经过分块并行网络模型的处理，在同等参数量的情况下，其计算效率与单一全频带处理模型相当，但降噪效果要优于单一全频带模型，并行分块网络对低信噪比频段的语音成分起到明显的保护和增强作用。

关键字 人工智能，深度学习，语音降噪，分块网络

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于碳稳定同位素与 Relief-Voting 融合模型的中国汽油样品溯源研究

接昭玮[1]、朱晓晗[1]、张涵宇[1]、郑涵阳[1]、胡灿[2]、刘占芳[2]、郭洪玲[2]、朱军[1,2]、梅宏成*[2]
1. 中国人民公安大学
2. 公安部物证鉴定中心

鉴于中国复杂多变的地理环境，传统溯源方法在识别中国不同地区汽油样品来源时面临重大挑战[1-3]。本研究聚焦于开发一种新型的溯源技术，通过深入分析来自中国四大主要区域的 60 个汽油样品的碳稳定同位素特征，以精准确定其地理来源。将气相色谱同位素比值质谱（GC-IRMS）技术与 Relief-Stacking 融合模型相结合，相较于传统手段，可以显著提升溯源准确率。本研究采用 Relief 特征选择模型从汽油的 40 种组分中筛选出 4 种关键特征组分，不仅有效减少了数据冗余，还显著提高了溯源分析的精确性与效率。基于交叉验证一致性指数（CEI）评估，采用 XGBoost、随机森林、CatBoost、LightGBM 和 KNN 等五种算法构建用于汽油地区溯源分析的高性能溯源模型。为进一步优化模型性能，采用 Voting 式融合策略，最终验证 Voting 融合模型为最优选择，其 CEI 值高达 0.895。本研究不仅成功克服了传统溯源技术的局限，还为构建高效稳定的同位素溯源平台提供了参考。展望未来，随着参数优化与特征适应性的持续改进，Relief-Voting 融合模型有望广泛应用于来自更广泛地域/更复杂环境条件下的汽油溯源分析，从而为全球能源安全与环境监测贡献力量。

关键字 碳稳定同位素；汽油；溯源研究；Relief-Voting 融合模型

参考文献：

1. Abdellatief T M M, Ershov M A, Makhmudova A E, et al. Novel variants conceptional technology to produce eco-friendly sustainable high octane-gasoline biofuel based on renewable gasoline component[J]. Fuel, 2024, 366: 131400.
2. Misolas A A, Ferreiro-González M, Palma M. Optimization of a carbon adsorption/HS-GC–MS method for ignitable liquids classification from fire debris[J]. Microchemical Journal, 2024, 200: 110302.
3. Bubalo P, Nestic M, Martinovic S, et al. Death by accidental intravenous administration of gasoline[J]. International Journal of Legal Medicine, 2024: 1-7.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

文书上伪造红印油指印的鉴别方法研究

秦旗*、王子政、宋瑞蓉、吴浩、马荣梁、曲会英
公安部鉴定中心

为深度探究文书上伪造红印油指印的鉴别方法，本研究成功验证了真伪红印油指印的物质成分存在差异，提出了基于物质转移原理鉴别文书上伪造红印油指印的方法，并通过实验得到有效验证。首先，利用光敏指纹印章制作伪造红印油指印，手指直接捺印真实红印油指印。其次，利用转移介质完成真伪红印油指印的印迹物质转移，并对介质进行手印显现（茚三酮显现方法）处理，具体是先将红印油指印中的印迹物质通过转移工作液转移至介质上，再对介质上的印迹物质进行显现处理，即先进行物质转移，后完成显现反应。最后，观察显现处理前后的转移介质上指印变化情况（有无鲁赫曼紫物质生成）。结果表明，该方法成功实现不同遗留时间的红印油指印物质转移，且转移介质经茚三酮显现处理，介质上真实红印油指印位置处均有鲁赫曼紫物质生成，伪造指印均无鲁赫曼紫物质生成，从而实现真伪红印油指印的有效鉴别。

关键字 红印油，伪造指印，物质转移，手印显现

参考文献：

1. AZMAN A R, MAHAT N A, WAHAB R A, et al. Relevant visualization technologies for latent fingerprints on wet objects and its challenges: a review [J]. Egyptian Journal of Forensic Sciences, **2019**(9): 23.
2. RITIKA D, MANDEEP K, MANVJEET K. An investigation of latent fingerprinting techniques [J]. Egyptian Journal of Forensic Sciences, **2021**(11): 33.
3. FEI J, XIA Z, YU P, et al. Adversarial attacks on fingerprint liveness detection [J]. EURASIP Journal on Image and Video Processing, **2020**(1): 1-11.
4. SOUSEDIK C, BUSCH C. Presentation attack detection methods for fingerprint recognition systems: a survey [J]. IET Biometrics, **2014**, 3(4): 219-233.
5. SAHARAN S, YADAV A K, YADAV B. Novel C stain-based chemical method for differentiating real and forged fingerprints [J]. Egyptian Journal of Forensic Sciences, **2020**(10): 16..
6. CHAMPOD C, ESPINOZA M. Forgeries of fingerprints in forensic science [M]// Handbook of Biometric Anti-Spoofing. Springer London, 2014.
7. 王勇，张宇宽. 光敏指模指印鉴别方法研究[J]. 刑事技术，**2020**, 45(3): 242-245.
8. 李珍珍. 硅胶高仿指模的检验[J]. 刑事技术，**2021**, 46(1):91-95.
9. 吕昱帆，张永良，吴浩，等. 伪造指印识别方法研究进展[J]. 刑事技术，**2022**,47(3):221-226.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于复杂语音转换场景的说话人验证在源说话人追踪的应用

郑榕*、杜雨轩、张德俊、邓菁
北京远鉴信息技术有限公司

近年来，语音转换（Voice Conversion, VC）技术的发展对自动说话人验证（Automatic Speaker Verification, ASV）系统的安全性和可靠性构成了重大挑战。以往基于 VC 的说话人验证任务研究主要集中在比较基于语音转换的发音之间的相似性，却忽略了源说话人与目标说话人之间的关系，以及正常语音与转换后语音之间的比较。IEEE SLT(Spoken Language Technology)2024 国际会议主办了源说话人追踪挑战赛（Source Speaker Tracing Challenge，SSTC），任务背景是基于语音转换操纵源说话人的语音信号，使其听起来像目标说话人，同时保留语言内容。基于涵盖 16 种语音转换类型的大规模转换语音数据库，检验说话人验证系统对语音转换攻击的鲁棒性和有效性。要求从转换后的语音中提取关于源说话人的信息，并判定两个转换后的语音是否来自同一源说话人。远鉴团队研发了一种鲁棒性自动说话人验证系统，通过使用微调后的 ResNet101 模型和 AS-Norm 策略，来帮助识别不同语音转换算法下的源说话人。针对多种已知和未知的 VC 方法，在 SSTC2024 的开发集上，我们提出的系统实现了 5.21%的相对等错误率（Equal Error Rate, EER）降低，在 SSTC2024 包含 16 种 VC 算法构造的最终评测集上，提出的系统最终实现了 18.65%的等错误率，与基线系统相比，EER 相对降低了 9.51%，在 SSTC2024 中排名第 2，这证明了我们的方法在抵御不同 VC 攻击的 ASV 系统中的有效性。此外，当前基于 VC 的 ASV 系统主要关注不同模型下的测试性能，却常常忽略了不同试验组合对系统性能的影响。我们采用了预训练和微调后的模型，全面分析系统在不同试验组合下的可靠性，包括正常语音之间的试验、正常语音与转换语音之间的试验，以及不同源说话人与目标说话人之间转换语音的实验。然而，从 SSTC2024 的最终结果来看，现有的 ASV 系统在处理高质量或未知的 VC 算法时仍面临重大挑战。我们未来的研究将集中于不同 VC 和 ASV 算法之间的关系，以进一步推动更安全 ASV 系统的发展。

关键字 说话人确认，语音转换，微调策略

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

X 射线衍射法检验常见易制爆化学品成分

刘晓锋*[1]、杨兰[1]、杨宁[1]、乔文涛[1]、刘迪[2]
1. 广西壮族自治区公安厅物证鉴定中心
2. 广西钦州市公安局刑侦支队

X 射线衍射法(XRD)是利用晶体对 X 射线的衍射效应进行物相分析的方法。XRD 具有分析快速、灵敏度高、选择性好及样品前处理简单等优势，可用于检验炸药、土壤、涂料、油漆、药品等，为侦查破案、服务诉讼提供科学证据。本文应用 XRD 检验常见易制爆化学品硼氢化钠(NaBH4)、高锰酸钾(KMnO4)、硫磺(S)等，得到准确的检验结果及对应图谱，为相关检验提供参考。

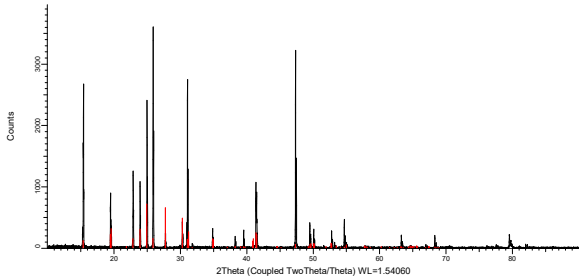


图 1：高锰酸钾（KMnO4）XRD 图谱

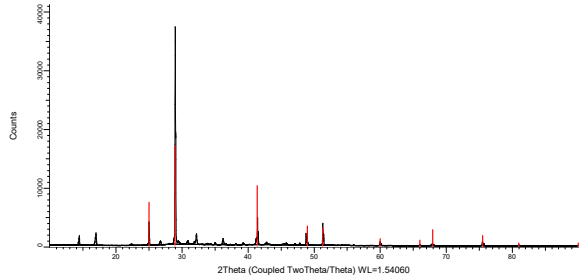


图 2：硼氢化钠（NaBH4）XRD 图谱

关键字 X 射线衍射，易制爆化学品

参考文献：

1.王力春，马健，罗敬锋.X 射线衍射法检验有机炸药初探[J].刑事技术，**2014**, (3):6-8.
2.樊晨.X-射线衍射光谱法在法庭科学中的应用[J].微量元素与健康研究，**2014**, 31(6):56-57.
3.余静，庞松颖，刘猛，等.X 射线衍射法对常见涂料的检验研究[J].第五届全国“公共安全领域中的化学问题”暨第三届危险物质与安全应急技术研讨会，**2015**:468-473.
4.金建中.常见毒物的 X 射线衍射法检验运用[J].科学技术应用，**2016**(12):77-79.
5.石文华，张振锋.微量物证鉴定中 X 射线衍射法的运用分析[J].化工管理，**2016**(11):332.
6.郭洪玲，权养科，陶克明.法庭科学常见火炸药组分检验 X 射线衍射法[S].GA/T 1422-2017.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

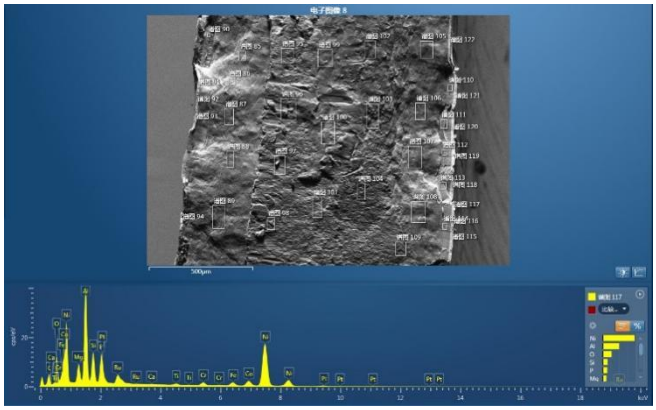
精密仪器在电子物证的应用

郭丽莉*、姜贤波、赵露、康艳荣、王博、张倩、鲍梦湖
公安部鉴定中心

机械硬盘（Hard Disk Drive, HDD），作为数据存储的元老级产品，从个人计算机到大型数据中心，从消费电子产品到工业控制系统，其应用范围之广，几乎无处不在。一旦机械硬盘出现故障，发生数据丢失，将会对正常工作生产造成极大的影响和损失。为了提高数据存储的安全性，研究人员探索研究采样技术和机器学习算法来监控预测硬盘故障发生的可能性，从而避免大规模数据丢失的发生。但是，在公安行业侦办案件的场景中，机械硬盘数据的丢失原因更多是犯罪嫌疑人为了掩盖事实、逃避侦查而人为因素导致的暴力性损坏或突发火灾、灾难性事件中不可预期的严重性损坏。因此，电子物证专业的技术人员一直在关注探索机械硬盘故障修复技术方法，从而最大程度实现数据重现、过程还原，为案件侦办和诉讼提供重要线索和关键证据。

机械硬盘的制造设计是精密工程的典范，它涉及精密的物理机械结构、精细的电子控制和复杂的制造工艺。因此对于机械硬盘的硬件故障修复，不仅需要专业的设备和工具，还需要对硬盘的制造工艺、工作原理、功能组件具有专业深入的了解。近年来，作者课题组在机械硬盘硬件故障修复方面，如电路板损坏、磁头损坏、固件损坏等故障修复方面取得了显著的研究成果，并在实际案例中发挥了重大作用。然而，对于盘片损坏的数据恢复仍是业内难以解决的技术难题。作者探索机械硬盘盘片损坏情形下的数据恢复技术方法，通过查阅机械硬盘生产行业的文献，借助高精度光学仪器、高精度测量分析仪器对盘片进行表征和测量，积累了大量的盘片基础特征和成分分析数据，为后期的修复方法研究奠定了数据基础，并通过大量的测试实验取得了一些振奋人心的进展。

通常，电子物证专业的研究对象是各种电子设备产品及其对应的存储介质和数据，操作研究使用的工具也主要集中在数据处理的各种工具软件方面。由于机械硬盘的特殊构造和工艺，是该研究内容是本人从事电子物证专业以来首次采用各种大型精密仪器开展数据恢复的研究，在行业内也属于电子物证与精密仪器结合的先河。未来希望借助各种精密仪器的加持，实现有损机械硬盘数据恢复方法的突破，进一步扩大有损机械硬盘数据恢复的对象范围，推动国内电子物证专业技术的进一步发展，在该领域取得国际领先的技术水平。



关键字 机械硬盘，故障修复，电子物证，数据恢复

参考文献：

1. 薛涛.视频监控技术在火灾调查中的应用研究.今日消防,**2024**,9,112-115.
2. 黄步根,刘建军,张晓南.NTFS 文件系统中的视频数据恢复方法[J].计算机工程,**2010**,36,275-276.
3. 赵露,康艳荣,刘思棋,等.一种通过硬盘串口获取固件工厂指令的方法[J].西安邮电大学学报,**2018**,23,105-110.
4. 石鹏.机械硬盘硬件故障电子数据取证实践探讨[J].保密科学技术,**2023**,29-36.
5. 覃卫,奚永忠.渗水硬盘的数据恢复一例[J].电子世界,**2017**,2,137-139.
6. 康艳荣,赵露,郭丽莉,等.一种清洁严重污染盘片的方法[J].刑事技术,**2021**,3,293-298.
7. 王立发，刘玉岭，等.硬盘盘片结构特点及 NiP 基板 CMP 研究.微纳电子技术[J].**2007**,10,964-968.
8. 雷红.计算机硬盘基片 CMP 中表面膜特性的分析研究.无机化学学报,**2009**,2,206-212.
9. 雷红,雒建斌,等.计算机 2005.3 硬盘基片的亚纳米级抛光技术研究.机械工程学报,**2005**,3,117-122.
10. 雷红,司马能,等.计算机硬盘基片的化学机械清洗技术研究.半导体技术,**2010**,8,757-760.
11. Denis Solodova, Ilia Solodovb. Data recovery in a case of fire-damaged Hard Disk Drives and Solid-State Drives. Digital Forensics, **2021**,3,1-4.
12. Kaizhong Gao. Architecture for Hard Disk Drives. IEEE MAGNETICS LETTERS, **2018**,9,1-5.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

一起涉非甾体抗炎药物非法添加的案件检验

蔺大伟*[1]、接强[2]、夏庆兵[1]、张演庆[1]
1. 泰安市公安局刑事科学技术研究所
2. 公安部鉴定中心

一些不法分子利用人民追求不断提高的生活质量的愿望，在网上、网下售卖含有非法添加的保健食品，谋取利益。近期，我市某分局根据线索，查获虎骨酒中添加非甾体抗炎药物一宗。

本文以非法添加的非甾体抗炎药物对乙酰氨基酚为研究对象，建立了保健酒中对乙酰氨基酚的高效液相色谱法-质谱检验方法。用含 0.02%甲酸的乙腈水（v/v:1/1）提取保健酒中的对乙酰氨基酚成分，上清液过有机滤膜后，用 Kinetex 2.6 μm Biphenyl 100 A,100×3.0 mm 色谱柱，正离子模式采集。结果表明对乙酰氨基酚在 1~ 50 ng/mL 范围内线性良好，相关系数（r）> 0.996，检出限为 0.1 ng/mL，定量限为 1 ng/mL，回收率为 62.46 %。

本文建立了保健酒中对乙酰氨基酚的高效液相色谱法-质谱检验方法，该方法灵敏高效、简便快速，为酒类保健食品中非法添加非甾体抗炎药物的案件检测提供了强有力的技术支撑，具有较强的实践意义。

关键字 非甾体抗炎药，保健品，HPLC-MS/MS

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

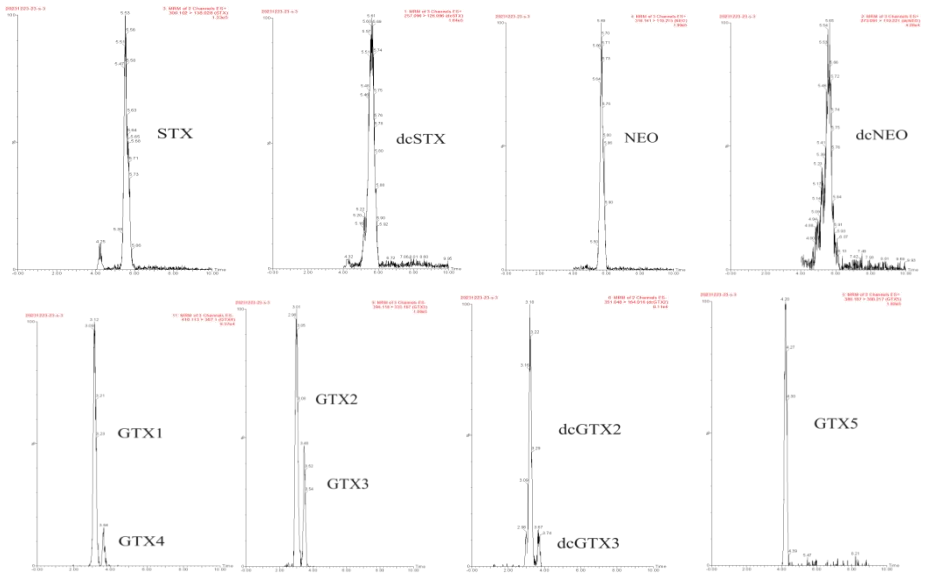
尿液中 13 种麻痹性贝类毒素检测

接强*[1]、栾玉静[1]、王芳琳[1]、孙晓宇[1]、蔺大伟[2]、夏庆兵[2]、张演庆[2]
1. 公安部鉴定中心
2. 泰安市公安局刑事科学技术研究所

贝类毒素是一类因贝类摄取被污染的环境水中的有毒海藻（如膝沟藻属、原甲藻属等）而使生物毒素在体内积累，产生的具有毒性的生物活性物质，贝类自身并不会产生贝类毒素。按中毒症状可分为四类：麻痹性贝类毒素(PSTs)、腹泻性贝类毒素、神经性贝类毒素和记忆缺损性贝类毒素，其中 PSTs 是分布最广、危害最严重的，毒性强于其他三类，尚无特效的解毒方法。由于 PSTs 毒性强且解毒难，禁止化学武器组织将 PSTs 中的石房蛤毒素列入禁止化学品的第一类清单中。目前，对 PSTs 的检验研究多集中在贝类产品本身，缺乏中毒生物体内（人）检验研究。

本文选取 13 种 PSTs（石房蛤毒素、新石房蛤毒素、脱氨甲酰基石房蛤毒素、脱氨甲酰基新石房蛤毒素、N-磺酰氨甲酰膝沟藻毒素 2&3、膝沟藻毒素 1&4、膝沟藻毒素 2&3、脱氨甲酰膝沟藻毒素 2&3、膝沟藻毒素 5）为研究对象，建立尿液中 13 种 PSTs 的超高效液相色谱-质谱检测方法。用 1%乙酸：乙腈（1 : 4，v : v）溶剂提取尿液中的 13 种 PSTs，上清液过固相萃取柱后洗脱进样，使用 BEH Amide 色谱柱（100 mm×2.1mm，1.7μm）分离，正、负离子同时采集。结果表明，13 种 PSTs 在 10 ~ 100 ng/mL 范围内线性良好，相关系数（r）> 0.995，检出限为 0.5 ~ 5 ng/mL，定量限为 1 ~ 10 ng/mL，回收率为 65.11 % ~ 118.79 %。

本文建立了尿液中 13 种 PSTs 的检测方法，建立的方法灵敏高效、稳定可靠，为生物检材中毒素的定量分析给予支撑，为法庭科学领域 PSTs 中毒案（事）件快速侦查定性提供依据，具有较强的实践意义。



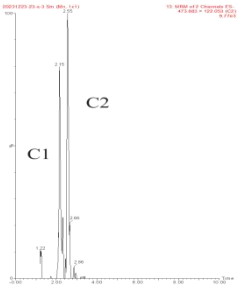


图 1 空白尿液中 13 种 PSTs 添加色谱图（50ppb）

关键字 麻痹性贝类毒素，尿液，UPLC-MS/MS

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

应用改良造影鞘管进行基于尸体计算机断层扫描的心脑血管靶向联合造影新方法

王博[1]、王利君[2]、杨超朋[3]、高艳斌[2]、陈志明*[1]
1. 吉林大学
2. 长春市公安司法鉴定中心
3. 公安部鉴定中心

【目的】心、脑血管疾病是世界范围内常见的死亡原因之一。由于 CT 的软组织分辨率较差，非增强 CT 无法对上述疾病进行明确诊断。尽管尸体心脏冠状动脉靶向造影技术日臻成熟，但目前仍缺乏有效的原位脑血管靶向造影技术。因此，本研究的目的是探索并建立一种利于推广并能同时可视化尸体冠状动脉和脑血管的新方法。

【方法】本研究于 2021 年 10 月至 2022 年 6 月期间进行了一项前瞻性研究，介绍了一种同时进行脑和冠状动脉死后 CT 血管造影的新方法。我们对造影鞘管进行了一些修改，包括增加导管长度、增加球囊充气后的球径、头部改为斜开口并且尾端能连接注射器。我们选择腹股沟区域的股动脉作为改良造影鞘管的穿刺位置，以尽量减少对尸体外观的破坏。将导管推进至主动脉弓与降主动脉交点处，连接高压注射器注入造影剂。充气后的球囊可以使造影剂向上沿主动脉、双侧颈动脉及双侧椎动脉灌注，以达到冠状动脉及脑血管同时显影的目的。

【结果】本研究共完成了 27 具成人尸体的检验，除因颅内压过高（案例 23）及动脉破裂（案例 11）未能正常显影外，其余 25 例造影后均能显示 Willis 环、主要大脑动脉和冠状动脉结构图像。完成尸检的案例与心脑血管联合造影结果一致。病例 1、3、7、18、26 均未见明显脑冠状动脉异常，且经尸检证实。心脑血管联合造影发现冠状动脉狭窄 6 例（案例 4、6、16、17、19、20），其中 3 例和组织学检验结果相符（案例 4、17、19）；颅脑损伤或病变 15 例（案例 2、5、8-10、12-15、21-25、27）；动脉破裂 1 例（案例 11）。此外，心脑血管联合造影还可以用于死亡时间较长的尸体或单独的靶向冠状动脉造影。

【结论】本研究建立了一种心脑血管靶向联合造影技术，该技术具有操作简便、成本低、耗时短的特点，同时对尸体容貌损伤小，有利于推广并常规应用于法医病理学死亡原因鉴定实践之中。

关键字 法医病理学，死后计算机断层扫描，死后计算机断层扫描血管造影，死亡原因

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

肌肉组织碎块对硝铵炸药爆炸残留物检验的干扰问题探析

李光耀*、邓显贺、周正、李亚军
公安部鉴定中心

爆炸案事件发生后，爆炸物的确定至关重要。爆炸物的确定主要途径之一就是通过对现场提取的残留物进行检验排查，有机炸药和无机炸药均属于我们要排查的范围。距离爆炸中心点越近，破坏越严重，肌肉组织碎块（往往涉及到嫌疑人与被害人）是爆炸现场提取的重要残留物检材。硝铵类炸药主要通过离子色谱仪对现场残留物的检验去确定，我们发现以肌肉组织碎块为承载客体的检材易检出铵根离子，从而存在假阳性风险。为此，以猪肉为样本进行了验证试验，在室温下分别对自然存放 24h、48h、64h 的猪肉组织淋洗液进行了离子色谱检验，发现铵根离子浓度逐步升高。这很有可能是由于肌肉组织的腐败产生了铵根离子。在爆炸现场勘验中进行硝铵类炸药排查时需小心肌肉组织的干扰问题：首先，需要关注非生物检材残留物的离子色谱检验情况,若只有肌肉组织碎块为承载客体的检材呈阳性则需警惕；其次，如果肌肉组织检材还存有皮肤，尽可能在皮肤表面进行擦拭提取，避免直接淋洗和浸泡检材。

关键字 肌肉组织，硝铵炸药，干扰，离子色谱

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于荧光淬灭技术的便捷式爆炸物及毒品检测设备研制应用

傅得锋*[1]、孙剑聪[1]、宣宇[1]、孙景志[2]、高原[3]
1. 浙江省公安司法鉴定中心
2. 浙江大学绍兴学院
3. 杭州芬得检测有限公司

本文利用新设计合成的哌嗪修饰的四苯基乙烯衍生物，一种新概念发光材料聚集诱导发光（AIE）材料，开展了爆炸物 TNT、TATP 等的荧光检测、冰毒系毒品荧光检测、双通道光学系统设计和优化等方面研发和应用工作，通过大量实验和测试应用，研发出基于荧光淬灭技术的双通道便携式爆炸物/毒品检测仪，实现了同时对 PETN、RDX、硝酸铵等多硝基芳烃类爆炸物、TATP 炸药的检测和常见微量毒品的快速检测，具有高灵敏度、检测速度快、方便携带适用于现场勘验等优点，在国内外同类爆炸物检测器件中处于先进水平。荧光材料由浙江大学绍兴研究院研发团队设计研制，数据采集系统和算法由杭州芬得检测技术有限公司研发和创制。该产品可应用于机场海关、公安刑侦、禁毒等现场爆炸物、毒品的快速检测，目前已在全国多家单位进行了实际应用，经测试达到以下指标，检测限约：TNT100 pg；PETN、RDX、黑火药、硝酸铵、烟火剂 10 ng，TATP 20 ng，冰毒（甲基苯丙胺）20 ng，整机重量 0.7 kg，单个样品检测时间小于 20s。

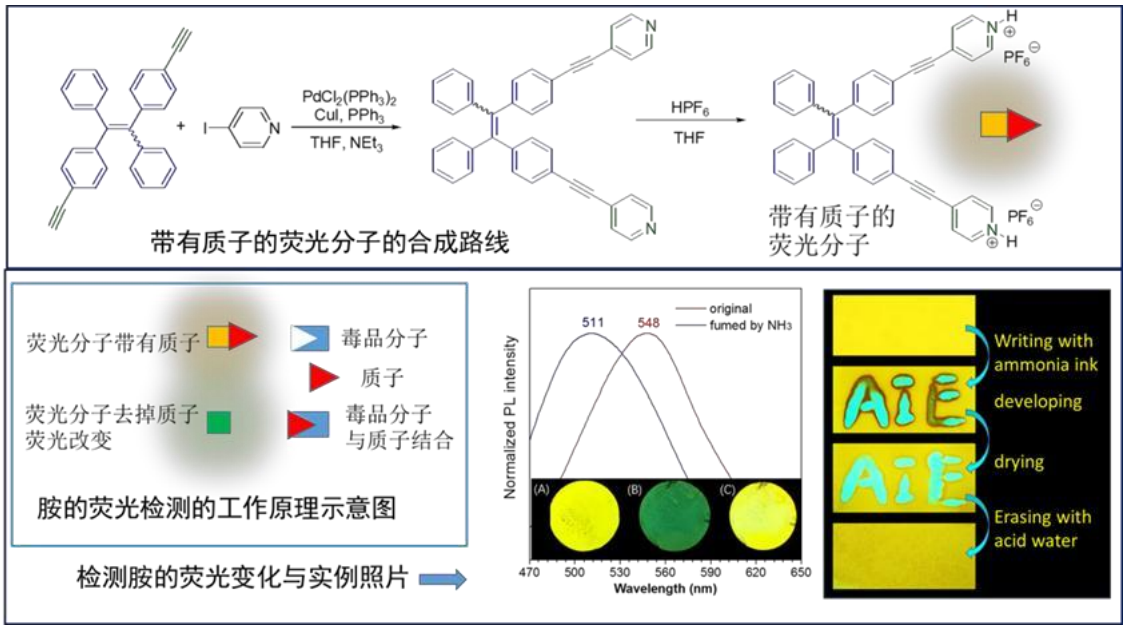


图 1：荧光检测的化学原理示意图



图 2：便携式爆炸物/毒品检测仪实物图

关键字 荧光淬灭技术，爆炸物，毒品，便携式检测设备

参考文献：

1.AlanZhang,DeFengFu,JianCongSun,XuanYu,HuiMaTang.AMulti-channelsystemforqualitative ExplosiveandDrugDetection,J.Sensingandimaging.**2018**:19[1−16].

2.白玮,史杨,宋忱,贺杰,秦安军,孙景志,唐本忠.荧蒽修饰的四苯基乙烯衍生物:分子合成、聚集增强荧光特性及其对苦味酸的高灵敏度检测.化学学报,**2016**,74,893-901.

3.傅得锋,宣宇,孙剑聪,马辉.基于荧光淬灭技术的双通道便捷式爆炸物/毒品检测设备研发 九届全国痕迹检验技术交流会论文集 2023.9

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

芬氟拉明分子的光谱计算与分析

关力畅[1,2]、蒋雪梅*[1]
1. 公安部鉴定中心
2. 湖南警察学院

当下，芬氟拉明因其具有抑制食欲的作用，被不良商家非法添加在食物中进行售卖。然而，食用芬氟拉明后，极有可能引发诸如肝脏功能异常、瓣膜性心脏病、原发性肺动脉高压等一系列严重影响身体健康的疾病 1，给人民的生命健康带来巨大威胁。鉴于此，对芬氟拉明分子的结构、光谱及分子激发等方面进行深入研究便具有了极为重要的意义。基于密度泛函理论（DFT），使用 B3LYP 泛函 6-311++G(2d,2p)基组，对芬氟拉明分子进行结构优化。在此基础上，对该分子的拉曼光谱和紫外光谱开展了深入研究。该分子的 HOMO 和 LUMO 均为 alpha + beta 型轨道，能量分别为-6.25 eV、-1.22 eV，能级差为 5.03 eV。在实验拉曼光谱中，756.5 cm-1 和 1003.5 cm-1 位置有两个强峰。通过计算得知，756.5 cm-1 位置的强峰由 CF3 的对称变形振动和苯环上 C=C 的不对称变形振动共同构成；1003.5 cm-1 位置的强峰为苯环上 C=C 的对称变形振动，这是间位双取代苯的特征谱带。实验拉曼光谱和计算拉曼光谱之间的线性拟合方程为 y = 0.988x + 10.328，R2 = 0.999，呈现出较好的一致性。此外，芬氟拉明分子的紫外光谱主要由第 1、2、3 激发态决定，其中第 2 激发态的贡献率高达 82.516%。使用空穴-电子分析法 2 进行分析，S0→S1 和 S0→S2 的激发类型均为胺基到苯环方向上的 n-pi*电荷转移激发；S0→S3 的激发类型是胺基到苯环方向的 n-pi*电荷转移激发，同时伴随胺基到附近碳链的 n-σ*局域激发。以上这些扎实的基础理论计算工作，不仅为食品中非法添加芬氟拉明的检测提供了理论依据，更为研究其衍生物奠定了丰厚的理论基础。

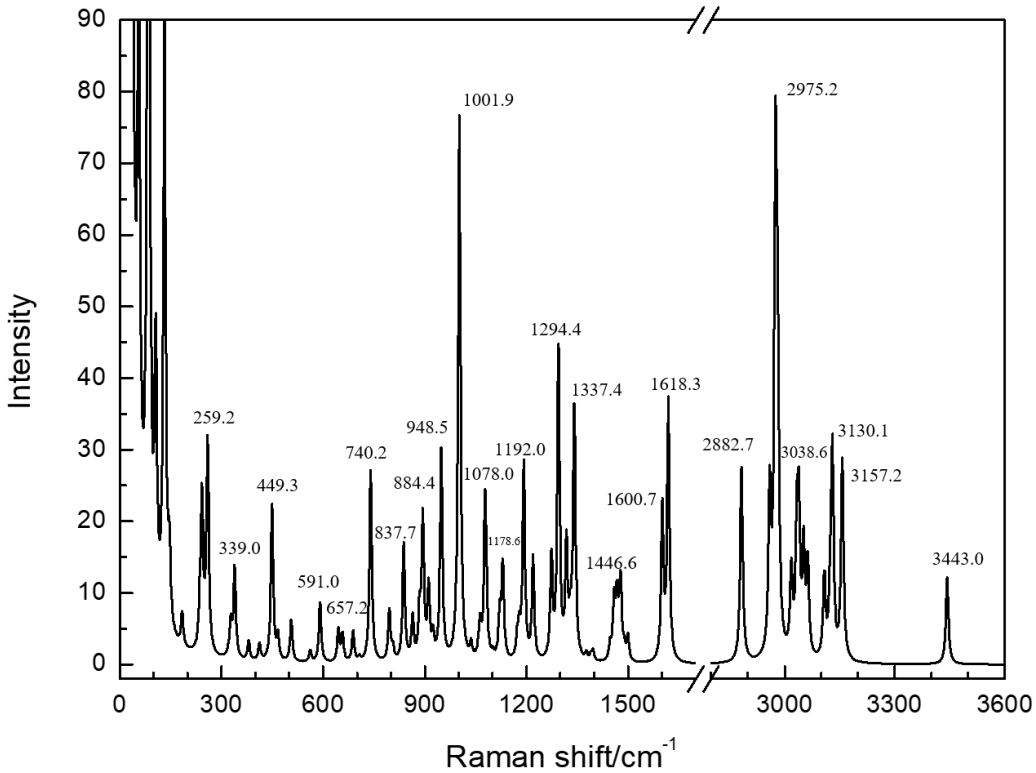


图 1 芬氟拉明分子的理论计算拉曼光谱图

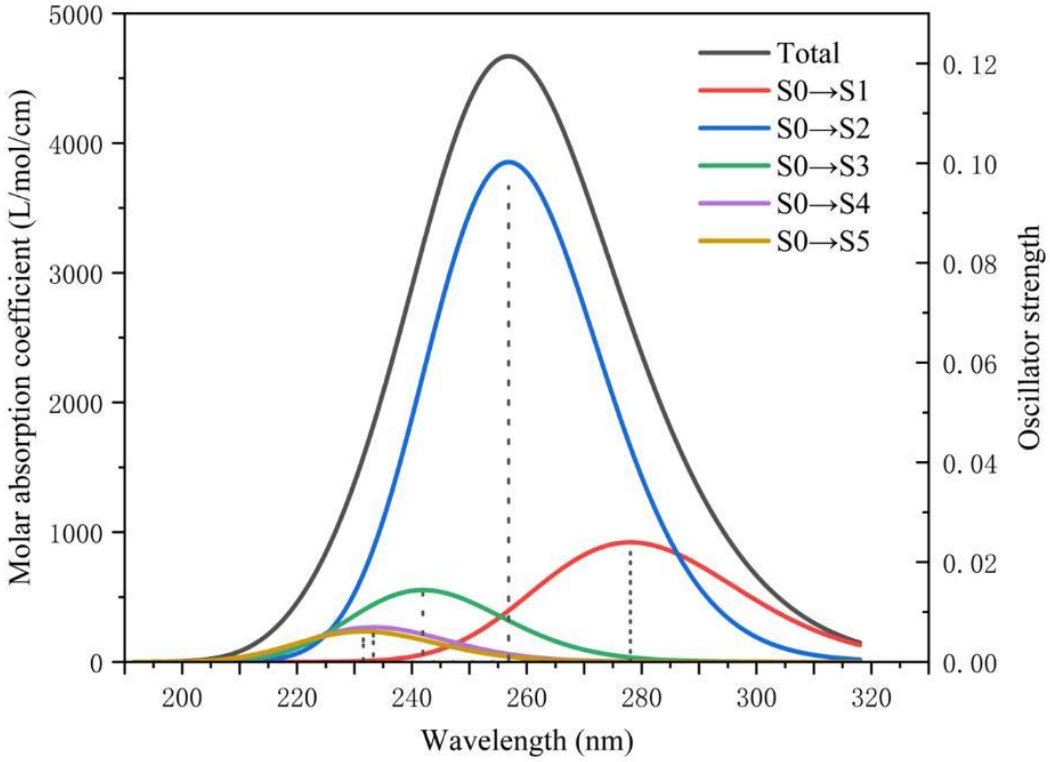


图 2 芬氟拉明分子的紫外光谱及各激发态的贡献

关键字 芬氟拉明，拉曼光谱，紫外光谱

参考文献：

1. Martin Parthena, Czerwiński Maciej, Limaye Pallavi B., et al. Pharmacology Research & Perspectives
2022, 10: e00958
2. Zhang Jun, Lu Tian. Phys Chem Chem Phys, **2021**, (36): 20323

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

可疑毒品中新型麻醉活性物质脱氧甲氧西敏的 GC/MS 检验

庄顺*
福建省公安厅

建立疑似毒品中新型苯环己哌啶类麻醉活性物质脱氧甲氧西敏（简称 DMXE）的 GC/MS 检验分析方法。通过气相色谱质谱联用仪(GC/MS)对疑似毒品中 DMXE 进行检验研究，并对所获得的质谱图进行解析。测得未知组分的(tR=7.87min)质谱特征碎片峰信息为 m/z 174（基峰）、203、160 和 118 等。经与 DMXE 标准物质的保留时间和质谱图比对，确定为 DMXE 成分。该方法简易可靠，适用于疑似毒品中 DMXE 成分的检验鉴定。

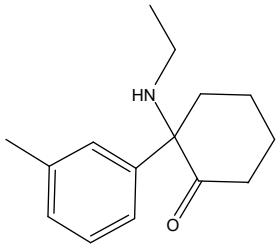


Fig.1 A Structural formula of DMXE

关键字 法庭毒物分析，DMXE，GC/MS，电子轰击电离

参考文献：

1. 庄顺,叶树海,林葭,等.疑似毒品中新型麻醉活性物质氟胺酮的 GC/MS 检验[J].中国法医学杂志, **2020**, 35(5):508-513.
2. 庄顺, 林葭, 叶树海, 等. 新型毒品“火狐狸”针剂的 GC-MS 及 GC/FID 检验研究 [J]. 刑事技术, **2020**, 45(3): 263-265.
3. R. Tanaka, M. Kawamura, S. Mizutani, T. Hakamatsuka, R. Kikura-Hanajiri, Identification of three Arylcyclohexylamines (MXPr, MXiPr, and DMXE) in illegal products, Yakugaku zasshi: J. Pharm. Soc. Jpn. **2022**,142 (6),675–681.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

硝酸肼镍检验方法研究

杨兰*[1]、莫旖[2]、刘晓锋[1]、杨宁[1]、刘迪[3]、乔文涛[1]
1. 广西壮族自治区公安厅
2. 广西警察学院
3. 钦州市公安局

摘要：硝酸肼镍[Ni(N2H4)3](NO3)2 是一种配位化合物起爆药，主要应用于工业雷管的生产中。经查阅国内外文献，未见有关硝酸肼镍检验方法报道。本文通过应用立体显微镜结合 X 射线衍射仪、扫描电镜/能谱仪、红外光谱仪等法庭科学中常用表征技术手段，对硝酸肼镍样品的外观形貌和特征结构进行检测分析，建立简便、快捷、准确度高的分析方法，为公安机关日常案件检验分析提供参考。

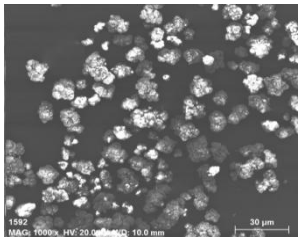


图 1：硝酸肼镍 SEM 图

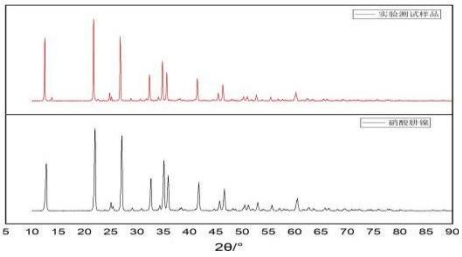


图 2：硝酸肼镍 XRD 图

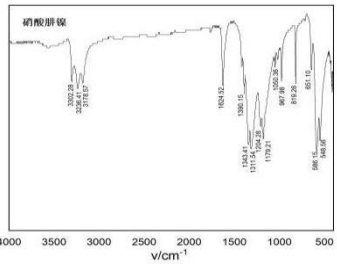


图 3：硝酸肼镍红外光谱图

关键字 硝酸肼镍，X 射线衍射，扫描电镜，红外

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

法医病理学检材自动固定装置摘要

武斌*
石家庄市公安局物证鉴定所

目的：研发自动控制法医病理学检材固定装置，通过其高频振动、自动化控制程序增强脏器固定效果、避免切片人工假象、伪像的产生，提高工作效率，减少从业人员职业暴露，实现病理固定流程的标准化和自动化，内置二维码标识，可实现从固定、取材、包埋、染色、切片的全流程溯源及追踪。

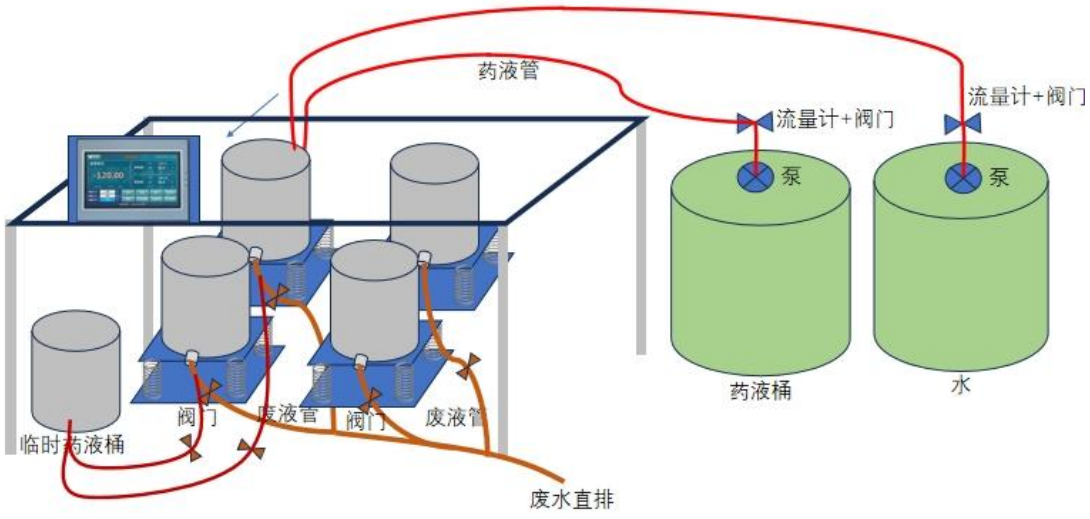
材料和方法：

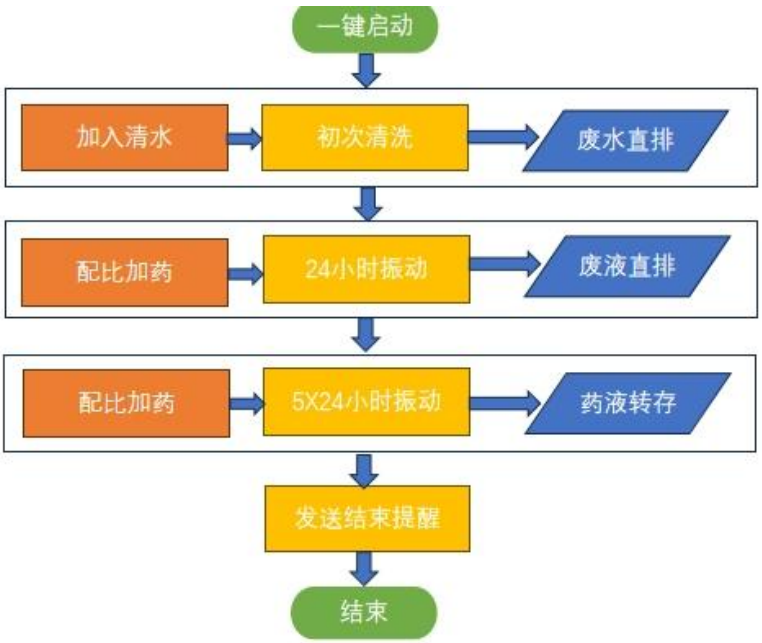
采用专业的塑料材质作为固定容器，部分区域进行有效分隔，确保心、脑等重要脏器及小组织检材进行单独固定，避免挤压。自动化病理固定装置具有清洗、24 小时自动换药功能，装置内嵌高频振动、自动化抽吸药装置加快固定速度，采用中性甲醛液加强固定效果，减少甲醛颗粒，避免后期切片中的人工伪像。采用可编程逻辑控制器实现药液按比例调配，以及控制固定流程和固定时间。每个桶上有唯一的二维码，实现每个案件证据可溯源。通过“一键操作”，实现对脏器清洗、药液固定、24 小时后自动换药、5 日后实现脏器完全固定。

15 例通过固定装置自动化的脏器与 15 例常规固定的脏器进行比较，对固定时间、脏器的固定效果、切片上制片结构的完整性、HE 染色满意度、切片的优良率等指标进行对比。

结果：通过对比。15 例常规固定的脏器一般需要 7 天的时间可以进行取材，通过固定装置自动化的脏器一般 5 天即可以进行取材，工作时间提高 28.6%；与常规固定的脏器相比，固定后的脏器颜色无血污附着，质地适中，在切片上制片结构的完整性、HE 染色满意度、各组织器官的清晰程度、切片的优良率均高于常规固定组。

结论：法医病理学检材固定装置可以显著提高工作效率，提高法医病理学诊断质量，保护法医从业人员健康具有重要的应用价





关键字 法医病理学，固定，染色

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

经鼻内窥镜检验在法医死因诊断中的应用探讨

武斌*
石家庄市公安局物证鉴定所

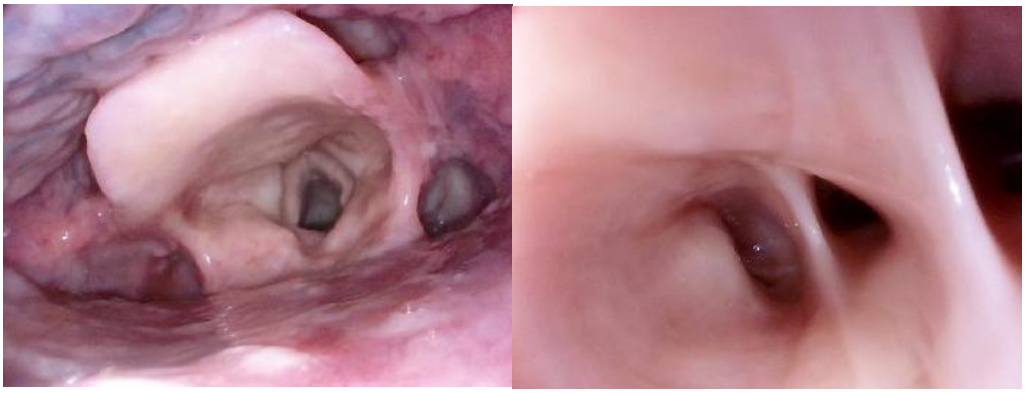
目的：本研究的目的是探索经鼻内窥镜技术在法医尸体检验中的应用场景和价值。

材料和方法：

本研究使用珠海泰科内窥镜 EU1315（管路直径 5.8mm）经鼻腔入路，能够实时传输呼吸道和消化道的清晰图像并通过液晶显示屏显示。检验时，尸体保持仰卧位，将头枕垫至胸背部，使尸体头部后仰，左手持操作手柄，右手持插入管，选择一通畅的鼻孔，缓慢由鼻道进入，将气管镜头向前弯曲经鼻腔、鼻咽、口咽、会厌软骨（声门裂），观察各部位有无水肿、黏膜出血、泡沫及异物。之后，探查进入气管后，至左、右支气管分叉处（气管杈），进行拍照固定。然后，将支气管镜的操作部向实验对象右侧转约 100°，并将腔镜头部往上方仰起约 90°，即可看见右上叶支气管开口概况，必要时可进一步深入观察段支气管内壁情况。其余各肺叶支气管可参照上述操作步骤进行。撤掉头枕，使尸体头部恢复至正常仰卧位，将支气管镜插入食管、胃壁，观察上消化道黏膜及胃内容情况。

结果：通过对 30 例不同死因的尸体进行经鼻内窥镜检查，发现在 7 例溺水死亡的尸体中，除一具高度腐败的尸体外，均可观察到气道黏膜水肿、气管壁出血及喉头部位的蕈样泡沫（死后 48h 左右亦能发现），为溺水案件的检验提供了新的手段与思路；在 6 例火场中的尸体中，发现通过对气管和支气管内烟灰炭沫的沉积部位及密集程度，可评估死者在火场的生存时间，同时也有助于鉴别生前烧死与死后焚尸；在 6 例心源性猝死和 1 例机械性窒息死亡的尸体中，发现死者气管壁显著淤血，部分死者可见肺泡水肿液；在 10 例机械性损伤致死的尸体中，除观察到气管内有血性液体外，未找到其他有指向性的征象与变化。对其中 5 例尸体进行食道和胃壁的检验，可清晰观察胃黏膜及胃内容情况。

结论：本研究表明，经鼻内窥镜检查作为一种重要的无创检查技术，能够对尸体的呼吸道和上消化道进行观察，成像效果较为清晰，能够观察到异常的管壁及管腔变化，在溺水、烧死等相关死因的诊断中具有重要的应用价值。同时，该技术也可作为法医虚拟解剖的重要补充，有助于提高尸体检验质量，从而为非正常死亡案（事）件的有效处置提供重要的技术支撑。









关键字 内窥镜，死因分析

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

迷奸案检材中检出东莨菪碱一例

黄琦彬*、韦善、马艳梅、闭伟玲
贵港市公安局刑侦支队

在一起使用二代香港捡尸水（成分不明）迷奸受害人的案件中，对检材进行碱提后，使用 GC-MS 检验，检出东莨菪碱及其代谢物。

关键字 捡尸水，GC-MS，东莨菪碱，代谢物

参考文献：

1.4.闫明，东莨菪碱在大鼠体内的毒代动力学研究,硕士学位论文，昆明医科大学，**2021**；
2.何易雯，付传香，惠爱玲等，东莨菪碱旋光稳定性的研究[J],安徽化工，**2018**，44（5）:19-21；
3.方朝晖，杨响亮，从江湖“蒙汗药”说莨菪，家庭医生[G]。

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

XRD 量化表征在微量物证中应用

邓显贺、李亚军*
公安部鉴定中心

火炸药（黑火药、烟火药、硝铵炸药、有机炸药等）、易制毒原料、矿物、金属及其他未知固体物质等是案、事件现场常见的微量物证，其共同特点是主要成分均以晶态存在。X 射线衍射法（XRD）因检验对象范围广、无需复杂前处理、分析便捷等优势，成为目前确定微量物证成分的主要手段。但是，由于物证形态多样、成分和含量复杂多变、前处理和制样方法不统一、缺乏定量方法等原因，XRD 对微量物证的表征目前仍停留在物相匹配，即物质定性阶段，缺少量化表征方法。对微量物证进行组成分析（即量化表征），是刑事技术领域微量物证精细分析和综合检验中亟待解决的问题之一，可为此类物证的比对和溯源提供重要依据，从而进一步关联刻画案情。本文阐述了一种含晶态微量物证通用量化表征方法，包括样品前处理、衍射片子制备、仪器参数设置、全谱拟合方法，即按照优化的 X 射线衍射仪分析条件采集衍射图谱；采用多种分析测量手段，准确判断样品中所含晶相和非晶相成分；采用 Rietveld 精修全谱拟合方法，结合结构参数、峰形参数、仪器参数等多维因子，计算粉末衍射图谱，以实验图谱与计算图谱差别为目标函数，利用优化算法，获得针对该物相组成样品的模型参数，从而获取包含样品各组分含量、结构信息的实际参数。

关键字 火炸药，X 射线衍射法，Rietveld 精修

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

自制硝铵炸药自燃自爆现象机理研究

李亚军*
公安部鉴定中心

由于工业炸药管控严格、原料容易获取、工艺简单等原因，自制硝铵炸药被广泛制造、销售和使用。不法分子以化肥为原料经过简单炒制即可制备。但是硝酸铵钝感稳定，尤其是化肥中的改性硝酸铵。为弥补起爆性能不佳的缺点，增加爆炸威力和感度，不法分子会添加高感爆炸物，如氯酸钾，其极易导致在存储、运输和使用过程中引发爆炸事故，甚至自燃自爆。自制炸药自燃自爆原因调查存在诸多困难，比如：同火灾或者易燃物引发的爆炸不同，自燃自爆是在自然状态、无外界诱发的情况下自发发生，诱因不明确，只能从炸药本身性质入手。爆炸残留物检验是传统理化检验手段，用于倒推炸药组成，对爆炸原因分析至关重要。但是自制硝铵炸药原料来源广泛，随处可见，组成非常复杂，给倒推带来了很大困难；硝铵炸药特征离子 NH4+、NO3-等在自然界中广泛存在，尤其泥土和灰尘中，基质干扰对爆炸残留物分析带来难度；对于非法添加的自制炸药，高感炸药往往含量很低，当含量足够低或者爆炸完全时，残留物中是否还可以检出原药成分同样有待考量。更重要的是，传统理化检验往往仅关注残留物成分，忽略物质晶相、热稳定性、炸药相容性等方面，这些是诱发自燃自爆的关键。

本文以一起实际发生非法添加氯酸钾的自制硝铵炸药自燃自爆事故为例，通过爆炸残留物分析、模拟贮存实验、中间体合成和纯化、晶体结构精修等，对爆炸残留物成分、晶相组成、热稳定性和相容性进行研究，探究自燃自爆机理并试图解释爆炸残留物中未检出原药特征成分的原因。研究表明，在一定温度湿度和密闭贮存条件下，AN 与氯酸钾生成完全固溶体，氯酸铵。氯酸铵非常不稳定，室温下即可发生分解，产物均为气体，放出热，在内部积累，形成热点发生爆炸，这也是为什么没有检出 CLO3-的原因。同时就混合炸药本身而言，氯酸钾的加入会降低 AN 的热稳定性，混合体系不相容。

关键字 自制硝铵炸药，自燃自爆，热稳定性，晶体合成与表征

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

HPLC-QTOF 检测苯环己哌啶类新精神活性物质 甲基胺酮和 2-oxo-PCE 在大鼠体内的代谢方式研究

蔡玉刚[1]、王燕军[3]、吴永富[1]、冯佳怡[4]、代勇*[2]

1. 泸州市公安局
2. 四川警察学院
3. 四川省公安厅刑侦局
4. 西南医科大学

摘　要：本文对同为同分异构体的苯环己哌啶类新精神类活性物质甲基胺酮[2-(邻甲苯基)-2-(甲胺基)环己酮]和 2-oxo-PCE[2-（苯基）-2-（乙胺基）环己酮]在大鼠体内的代谢规律进行探索，比较不同结构位阻对代谢过程的影响，确定主要代谢物和代谢标记物。18 只 SD 大鼠随机分为 2 组，第一组为甲基胺酮实验组，第二组为 2-oxo-PCE 实验组，禁食 12h，按 1.0mg/kg 灌胃给药，在分别给药后 0.5h、1h、2h 分别处死取血液、肝组织和尿液，经处理后利用高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱（HPLC-QTOF）对给药后大鼠血液、肝组织和尿液中可能存在的代谢物进行分析。根据大鼠血液、肝组织和尿液中各组分的响应强度和谱图解析可知，甲基胺酮代谢物主要是己环羟基化代谢物（编号 M1），M1 己环脱水形成脱水化代谢物（编号 M2），N-去甲基化代谢物（编号 M3），M3 己环羟基化代谢物（编号 M4），M4 脱水化代谢物（编号 M5），M4 己环羰基氢化代谢物(编号 M6)及 M3 己环羰基氢化后葡萄糖醛酸化代谢物（编号 M7）；2-oxo-PCE 代谢物主要是己环羧基氢化代谢物（编号 A1），N-去乙基化代谢物（编号 A2），A2 去氨基化代谢物（编号 A3），A2 己环羧基氢化代谢物(编号 A4)，A2 己环羟基化代谢物（编号 A5），A5 己环脱水化代谢物（编号 A6），A2 葡萄糖醛酸化代谢物（编号 A7）。根据实验数据可知，甲基胺酮和 2-oxo-PCE 在大鼠体内代谢均发生在己环和氨基两个位置，并形成相应的代谢产物，根据各组分的响应强度判断，主要代谢以 N-去烷基化为主，由于结构存在差异，两种物质代谢过程存在较大区别，甲基胺酮在己环为羟基化反应和后脱水化反应，而 2-oxo-PCE 在己环上为氢化反应；N-去烷基化后，甲基胺酮在己环上仍然以羟基化和脱水化为主，而 2-oxo-PCE 则以去氨基化、己环氢化、己环羟基化后脱水及葡萄糖醛酸化等方式进行代谢。根据实验数据，邻甲苯基上的甲基形成的位阻可能是甲基胺酮和 2-oxo-PCE 代谢存在差异的主要原因，但两种物质的主要代谢方式一致，代谢标记物均为 N-去烷基化代谢物。

关键字　甲基胺酮，2-oxo-PCE，体内代谢，高效液相色谱-四极杆串联飞行时间质谱，代谢标记物

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

锂电池爆炸残留物检验技术研究

张金鹏*、潘炎辉、樊武龙、申振宇、李啸
公安部鉴定中心

对于不能充电的一次性锂原电池，如果故意或者误操作对其充电，可能会造成爆炸。某实际案例表明，锂-亚硫酰氯电池爆炸的痕迹特征和残留物成分与烟火药爆炸非常相似，公安机关在判别此类爆炸案事件性质时存在一定困难。为进一步开展对锂电池爆炸残留物的检验，本研究收集 88 种不同品牌、型号的锂原电池和 54 种锂离子电池，选取部分样品开展锂电池充电起爆实验、锂电池短路起爆实验、烟火药引爆锂电池爆炸实验、黑火药引爆锂电池爆炸实验、乳化炸药引爆锂电池爆炸实验，通过红外和拉曼光谱法、X 射线荧光光谱法、扫描电镜能谱法、化学显色分析法、离子色谱法等方法检验锂电池爆炸残留物，从特征残留物的角度建立区分锂电池爆炸和火炸药爆炸装置爆炸的指标体系。

本研究设计了锂电池爆炸残留物现场快速检验操作规程，确定了不同检验方法的先后顺序。因红外光谱法和拉曼光谱法操作简单且物质成分检验结果较为直观，在检材条件符合情况下，应当首先采用红外光谱法和拉曼光谱法。X 射线荧光光谱法对样品表面影响较小，对后续技术方法影响较小，该手段应适当前置。扫描电镜能谱法对样品量要求较少，且通过采样台轻轻粘取，对爆炸残片表面改变不大，不影响后续检验，可置于 X 射线荧光光谱法之后。化学显色分析法和离子色谱法需要采用棉棒擦拭可疑介质表面，该两种方法应当最后采样。通过分析检验结果，发现锂电池爆炸和火炸药爆炸确实存在很多相似的元素，S、Si、Fe、Al、Mg 等元素在锂电池和火炸药爆炸残留物中频繁出现，特异性较弱。对于不同种类的锂原电池，如锂-亚硫酰氯电池、锂-硫酰氯电池中的 Cl、O、S 等，锂-二氧化锰电池中的 Mn、O，锂二氧化硫电池中的 S 等，可以稳定高含量地检出，有助于对这些电池进行准确判定。部分电池残留物中检出含 C 颗粒、含 S 颗粒或者含高氧颗粒等，这与火炸药爆炸残留物元素分析结果存在显著差异。通过残留物检验分析得出的意见可为侦查方向提供技术支撑与参考。

关键字 锂电池，爆炸，残留物

参考文献：

1. 石治国,郭勋,王九洲,等.固体正极锂原电池研究综述[J].电源技术,**2021**,45(06):823-827.
2. 袁中直,刘金成,吕正中,等.金属锂原电池技术进展与未来[J].电源技术,**2019**,43(05):735-738.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

关于两种一次性手套印痕的探讨

黄巾梁[1]、柴新乐[2]、秦旗[2]、薛静[2]、马荣梁*[2]
1. 中国人民公安大学
2. 公安部鉴定中心

本研究主要针对两种一次性常见手套：PVC 手套和医用检查手套。通过对不同承痕客体上形成的印痕，探究最佳的显现方法。证明了穿戴两种手套后接触的非渗透性客体能用磁粉刷显出具有鉴定价值的指纹，手套的穿戴对指纹并非完全隔离，实验中，具体探讨了不同穿戴时长下遗留的印痕刷显后的比对分析，以及在不同客体上的刷显效果和显影方式比对，总结出两种手套在玻璃客体上遗留 6 天的印痕依然具备较高的鉴定条件。一方面两种手套对手部的包裹性和贴合度较强，为能留下高质量指印提供前提条件；另一方面含聚氯乙烯材质的手套在客体表面本身具有一定的静电吸附能力，磁粉接触后更容易吸附。本实验结果为戴手套作案现场的痕迹勘验和现场勘验人员的手套选择提供建议，有助于对相关案件现场进行更有针对性的勘查。同时，不推荐现勘人员在现场勘验过程中穿戴光面的一次性 PVC 手套和医用检查手套。

关键字 指纹显现，粉末刷显，手套印痕，塑料手套，聚氯乙烯

参考文献：

1. 中国化工学会 1988 年度优秀论文介绍[J]. 化工进展，1989(6): 51-59.
2. 徐孝健，吴星星，王红松. 实验室化学品防护手套的选择与使用[J]. 劳动保护，2020(8): 84-85.
3. 冯晓荫. 耐高温丁腈橡胶性能的研究[D].青岛：青岛科技大学，2017.
4. 戚久强，刘杏杰. 现场勘查所戴手套防护效果的比较[J]. 刑事技术，2011(2): 52-53.
5. 钱海艳. 硅橡胶/热塑性聚氨酯 TPV 微相结构形成机理及性能调控[D]. 北京：北京化工大学，2022.
6. 刘学全. PVC 手套生产工艺的节能研究[D]. 青岛：青岛科技大学，2012.
7. 韩忠良，汪海位. PVC 一次性手套出现针孔的原因[J].聚氯乙烯，2021, 49(7): 14-19, 33.
8. 林志鹏，陈贤卫. 在戴手套侵财案件的现场中提取到手印或生物检材的方法[J].广东公安科技，2020, 28(3): 70-71.
9. 蔡伟荣，闵晓明. 手套印痕的分析利用和手印的寻找发现[J].刑事技术，2009(5): 64-65.
10. 徐海军，叶志鹏，钱利峰，等. 手套印痕迹物证的发现与提取[J].中国法医学杂志，2017, 32(S1): 23-24.
11. 程福强，王怀印. 戴手套入室盗窃案现场遗留指纹的分析提取[J].法制博览，2016(35):165.
12. 李玉芬，王操，彭非，等. 手套印痕的现场勘查方法[J].刑事技术，2008(5): 47.、
13. 吴世超，李刚. 遗留手套印痕现场易忽视物证的分析[J].广州市公安管理干部学院学报，2017, 27(2): 62-64.
14. 尹雪兵，戴强，孙春峰. 戴手套作案现场的勘查[J].刑事技术，2007(1): 50.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

法医损伤自动测量技术与装备研发

康晓东[1]、杨强[2]、郑冬云[1]、石河[1]、李志刚[1]、吕国丽[1]、蔡鸣[3]、韩亮[3]、赵建*[1]
1. 广州市刑事科学技术研究所
2. 衡阳市人民检察院
3. 珠海祥臻生物科技有限公司

法医损伤鉴定是法庭科学的重要工作内容之一。损伤程度是处置刑事案件、处理民事纠纷的客观证据。但是人体损伤的形态通常是不规则的形状，常规的直尺、卷尺等测量工具对损伤的长度、面积进行测量时，受到的人为因素干扰较多、主观性强，难以实现标准化，是法庭科学领域的难点[1]。研发法医损伤自动测量技术与装备十分迫切。

近年来，随着数字技术的发展，数字成像方法同样准确可靠，并且是非接触式测量方法，可以避免测量工具与损伤接触导致的感染风险。应用数字成像技术、三维测量技术预期可以实现体表损伤长度、面积等数据的标准化测量[2,3]。本研究旨在研发携带便携、测量准确的法医损伤自动测量技术与装备。软件部分基于 Linux 操作系统，对系统进行了定制化调节，以高效调动 CPU 的性能，实现屏幕、传感器、LED 灯、按钮、时钟芯片等硬件的稳定连接；采用了中央模块加周边功能模块的框架进行开发，可以快速地调动硬件和处理软件之间的衔接配合；研发了基于损伤图像特征的损伤区域自动绘制功能，同时可以实现将人体三维曲面损伤投射到平面上进行绘制。硬件部分采用了 1200 万像素的高质量传感器和 8 mm 的低畸变、大口径的高分辨率定焦工业镜头，拍摄的照片具有色彩真实、畸变率低、分辨率高、锐利度高的优点；采用了 OLED 电容触摸屏、基于 ARM Cortex A72 的运算主板、专用转接板、5000 mAh 的大容量锂电池等，解决了硬件软件匹配、电磁干扰等问题，实现了损伤长度、面积的自动测量，在不同形状损伤的长度、面积数据测量中显示出较高的准确度。

该装备解决了法庭科学领域不规则形状损伤的数据测量的问题，为损伤程度鉴定提供了一个方便、智能、标准化的测量设备，而且产品体积小、可靠性高，便于产业化。

关键字 法庭科学，法医病理学，损伤程度，自动测量

参考文献：

1. 祁琳，李鹏，靳步，等. 三维测量技术在人体损伤程度鉴定的应用探讨. 中国法医学杂志，**2019**，34（2）：165-167，164.
2. 付佳旗，阳紫倩，刘子龙，等. 结构光三维扫描技术测量损伤瘢痕的法医学应用. 法医学杂志，**2020**，36（3）：311-315.
3. Peake M, Pan K, Rotatori RM, et al. Incorporation of 3D stereophotogrammetry as a reliable method for assessing scar volume in standard clinical practice. Burns, **2019**, 45(7)：1614-1620.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

超景深光学显微系统在涉爆、涉火物证及痕迹检验领域的应用

李红宇、孙玉友、程桂敏、谢永迅、张冀峰*
公安部鉴定中心

涉爆、涉火现场经历高温、高压、打击、燃烧、烟熏等后会在现场形成大量变形、损毁、灼烧、烟熏的痕迹及物证，这是案件侦破的基础与关键。传统相机及显微镜等观测设备因拍摄景深小、观察视野小、需移动物证、难以定位与对比分析等原因，无法满足涉爆、涉火物证弯曲变形、痕迹复杂、体积不定、景深较大等特征的观测需求。超景深光学显微系统将光学显微镜技术、光电转化技术、数字转化技术、图像显示与处理技术等结合在一起，基于聚焦形貌恢复[1]、三维点云数据纵向拼接[2]、宏地图导航横向拼接等方法实现观测物证的高倍数、大景深、大面积的三维重建，经研究发现可利用其在涉爆、涉火物证及痕迹检验方面实现物证表面痕迹显微形貌观察[3]，对物证表面各类打击、高温、高压、烟熏、电熔等各类作用痕迹进行不同倍数的细微观察，并实现分屏比对分析；实现超景深合成拍摄及深度分析，利用超景深光学显微系统轴向步进式移动，实现同一视野下不同景深照片的合成，完成大景深（约 3cm）的清晰图像显示，并可保存观察条件信息，实现二维及三维尺寸测量等，解决涉爆、涉火痕迹景深差异大的问题，提高观测重现性与准确性；实现大面积合成拼接及深度分析，利用超景深光学显微系统宏地图导航，完成载物台步进式水平移动及图像拼接，弥补传统显微设备高倍数下观测爆炸破片、电路板等面积较大物证视野小、需移动物证等缺点，实现高倍数、大面积的物证三维重建；实现多角度全方位观测，通过调节物镜角度、光源位置及亮度等，实现超 90°的多角度观测，并实现三维表面、剖面的观察与测量[4]，使物证信息体现更快速、全面。利用超景深光学显微系统开展涉爆、涉火物证及痕迹检验，可大大提升检验分析的速度、精度、清晰度、完整性，为提高公安机关侦办爆炸、放火案事件效率、能力与水平提供关键支撑。

关键字 涉爆、涉火物证，超景深，拼接，测量

参考文献：

1.林平,李琦,申作春.连续场景太赫兹数字全息三维重建图像的参数影响[J].激光与光电子学进展,**2020**,57(22),49-57.
2. 张瑞轩.数字全息显微超景深三维形貌测试技术研究[D].西安工业大学,2024.
3.腾昭玉.超景深光学显微系统在文博领域的应用现状和展望[J].科技创新与生产力,**2022**,(02),125-127.
4.何智华,周静波,吴章勤,等.基于超景深三维可视化方案的材料表面显微形貌分析与表征[J].理化检验(物理分册),**2018**,54(12),878-881.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

一种基于蛋白质组学的法医体液来源鉴定方法的有效性验证

杨志远*[1]、王芷婷[2]、丰蕾[1]、刘健慧[2]、石慧霞[1]、季安全[1]、张丽华[2]
1. 公安部鉴定中心
2. 中国科学院大连化学物理研究所

本文对一种基于蛋白质组学的可实现五种体液鉴定的联合检测流程进行有效性验证。首先，建立了一套完整的基于质谱的鉴定方法（专利号：CN 202011375357）。利用固相烷基化材料和肽段半胱氨酸的共价结合的特点，对体液样品进行蛋白质提取、变性、还原、烷基化、酶解的预处理过程后，直接进行基于 MRM-HR 的标志物的靶向蛋白质组分析。根据筛选经验，从保留时间、离子相关性和信号强度三个方面，建立了从谱图峰确定肽段有无被检出的阈值联动评价标准，然后依据这套标准实现准确的蛋白鉴定。

然后，根据前期筛选获得特异性标志物集，建立了五种体液联合鉴定的靶向蛋白质组检测方法，并给出不同体液鉴定的判定条件：若人碳酸酐酶、腮腺分泌蛋白、乳过氧化物酶等蛋白之一被检出，则为唾液样品；若酸性附睾糖蛋白、A 激酶锚定蛋白等蛋白之一被检出，则为精液样品；若半胱氨酸天冬氨酸蛋白酶、LIM 结构域纯蛋白等蛋白被检出，则为阴道液样品；若免疫抑制性糖蛋白、角蛋白、食管素等蛋白之一被检出，且无唾液、精液、阴道分泌物检出，则为月经血样品；若血红蛋白β亚基被检出且月经血标志物未检出，则为外周血样品。

最后，使用 15 份精液、18 份唾液、18 份口腔拭子、15 份外周血、14 份阴道分泌物、12 份月经血样品对上述体液鉴定方法进行有效性验证。具体结果为：15 份精液样本均检出至少一种精液标志物，有 13 份检出所有精液标志物；18 份唾液样本均检出所有唾液标志物；15 份外周血均检出所有外周血标志物，且未检出月经血标志物；14 份阴道分泌物样本中均检出至少一种阴分标志物且检出所有月经血标志物，有 12 份检出所有阴分标志物；12 份月经血样品均检出至少一种月经血标志物且检出所有外周血标志物，有 9 份检出所有月经血标志物。综上，结果显示可以实现五种体液 100%的准确鉴定。

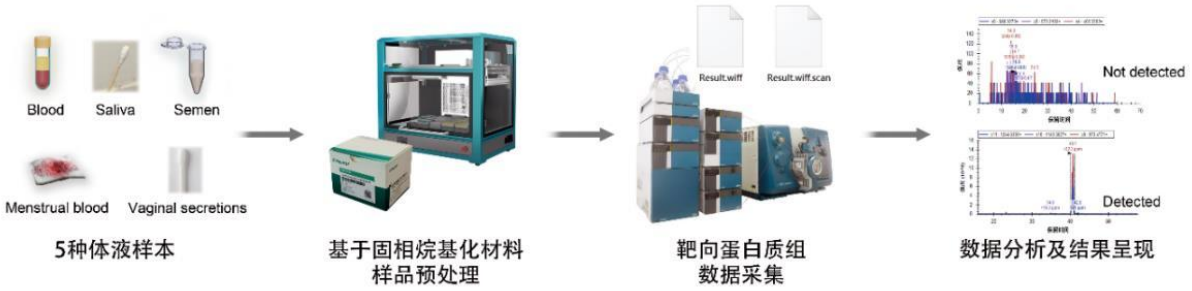


图 1 唾液、精液、阴分、外周血和经血的质谱鉴定流程示意图

关键字 蛋白质组学，体液来源鉴定，固相烷基化，MRM-HR

参考文献：

1. Merkley, E.D., Wunschel, D.S., Wahl, K.L. and Jarman, K.H., **2019**. Applications and challenges of forensic proteomics. Forensic science international, 297, pp.350-363.
2. Li, Yilan, et al. "Solid-phase alkylation: a low-loss and anti-interference sample preparation strategy for low-input proteome profiling." Science bulletin 67.16 (2022): 1628-1631.
3. 丰蕾,吴佳蕾,季安全等.法医蛋白质组学研究进展与展望[J].中国法医学杂志,**2021**,36(03):298-30
4. 丰蕾,江丽,李姗飞等.基于毛干蛋白质组的族群推断技术的建立与验证[J].生物化学与生物物理进展,**2019**,46(01):81-88.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

应用死后肺部计算机断层扫描技术推断死亡时间

李昊、魏智彬、孟运乐、杨超朋*
公安部鉴定中心

死亡时间也称死后间隔时间(postmortem interval，PMI)，是指发现、检查尸体时距死亡发生时的时间间隔。传统方法是根据尸温、尸僵、尸斑、胃内容物等死后尸体现象进行推断，这些指标推断的 PMI 是一个较为宽泛的区间，且受主观因素的影响，在实际案件的处置中发挥作用有限。随着视频、电子物证等新兴技术的发展，为 PMI 推断提供了强力的支持，但在室内、野外现场等缺乏电子数据支持的案件中，关于 PMI 的推断仍需回归尸体本身。

基于计算机断层扫描（Comuted Tomography，CT）的虚拟解剖技术因其检查无创或微创、数据长期保存和重复使用等特点，广泛运用于法医学科研和实践中。近年来，PMCT 已成为尸体检验中一种无创、快速、客观的尸检辅助手段，能显著提高尸检的质量和效率，发现传统尸检术式难以或忽视检查的损伤、特征等。

PMCT 本质上是以 CT 值（单位：HU）的形式反映一定厚度层面被检物质的密度差异，而随着时间推移，尸体组织器官的物质结构发生改变，这种改变也会在物质密度上得到体现，通过 PMCT 可以观察到尸体各器官组织随时间推移的影像学特征改变，并可以对这些特征进行定量、客观的描述。

肺是胸腔内最大的空腔器官，通过气管与喉、鼻相连，与外界相通，人体通过呼吸实现机体与外界环境之间的气体交换，维持机体的正常生命活动。人死后，肺组织毛细血管内的红细胞在自溶作用下发生溶血，富含血红蛋白的液体逐渐渗入浸染肺泡腔，随着时间的延长，肺内液体转移到胸膜腔内，形成胸膜腔积液，胸膜腔积液量与 PMI 存在相关性。胸膜腔积液在死后约 30h 开始急剧增加，之后 12h 内增长速度逐渐下降，在死后 42h 时，其增长率几乎为零。人死后，自主呼吸功能停止，肺通气、肺换气消失，死后肺内气体含量随 PMI 会发生变化，动物实验发现肺内气体含量在死后立即明显下降，之后随着时间的推移逐渐下降；气管、支气管腔内气体含量在死后 0h～12h 暂时升高，12h 之后逐渐下降。肺组织死后随着自溶、腐败等影响，其 CT 值、体积等也会发生改变，肺平均 CT 值均随 PMI 的延长呈先升高后降低趋势；肺面积/胸椎面积比总体呈下降趋势。

胸膜腔积液量、呼吸道及肺内气体量与 PMI 具有相关性，但是，死亡原因会对上述指标的发生发展造成影响，接下来的研究在进一步验证上述指标时间相关性的同时，可探索这些因素对相关性的影响。另外，对于 PMI 较长的研究，可尝试利用肺组织平均 CT 值或肺体积进行推断。

关键字 虚拟解剖，死亡时间，肺，CT，死后变化

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于隔膜泵与超声装置开发虚拟解剖专用注射泵的方案研究

臧玉峰[1]、王文元[2]、鲁宁[3]、包达尔罕[4]、杨超朋*[5]
1. 重庆大学
2. 济宁市公安局
3. 山东大学
4. 云燕科技（山东）股份有限公司
5. 公安部鉴定中心

虚拟解剖是法医鉴定领域的热门新兴技术，它主要是通过 CT 影像等手段深入分析尸体组织和器官的形态结构，并据此完成无损条件下的死因判断[1]。在虚拟解剖中，一般造影剂用量大且注射速度高，然而传统的医用微量泵无法满足这些要求。因此，开发大容量、高压力的专用注射泵成为必然。

临床医学中，通常选择微量泵用于造影剂注射，其容量较小（最大注射量<100 ml），注射速度较慢（注射速度<150 ml/min）[2]。然而，虚拟解剖所需的造影剂容量大（注射量>1500 ml），注射速度快（注射速度>300 ml/min），这已经远超微量泵的能力范围[3]。因此，需要开发能够承受高流速、高压力的新型注射泵。医学和化学实验室中常用的泵型包括蠕动泵、柱塞泵和隔膜泵等[4]。蠕动泵和柱塞泵流速较小，不适合虚拟解剖这种要求高流速的场景。相比之下，隔膜泵具有较高的流速上限和宽范围的压力调节能力，能够满足虚拟解剖的技术指标，因此适合作为专用注射泵的硬件基础。此外，虚拟解剖用造影剂还存在水剂与油脂混合的问题，为此在隔膜泵的泵前端还应集成超声装置，以确保油脂被“打碎”，从而均匀分布在造影剂中。

其中的关键技术难点是隔膜泵的稳压问题。隔膜泵通过泵腔中隔膜的往复运动来推动流体，由于隔膜运动速度非恒定，泵输出端的压力呈现峰谷式的脉冲分布。这种脉冲压力在高流速、高压力条件下可能导致血管破裂，引发造影剂渗漏，严重影响虚拟解剖的安全性和效果。为了解决这一问题，我们提出在隔膜泵输出端增加特斯拉阀的设计。特斯拉阀是一种无活动部件的流体控制装置，能够削减流体中的脉冲压力。通过在泵后端增加特斯拉阀，可以削峰填谷，平滑输出压力[5]。初步试验结果显示，单个特斯拉阀能够将脉冲压力削减 50%。随着特斯拉阀数量的增加，流体输出的压力波动将进一步平缓，最终实现稳定的流体输出，确保造影剂注射过程中的安全性。

综上所述，本研究提出了一种基于隔膜泵和超声装置的虚拟解剖专用高压注射泵设计方案。这种新型注射泵不仅能满足虚拟解剖对高流速、高压力的要求，还通过集成特斯拉阀解决了隔膜泵固有的脉冲压力问题。未来，我们将继续优化设计，进一步提高注射泵的性能，以满足虚拟解剖对高精度、高可靠性设备的需求。这一专用注射泵的开发将为虚拟解剖的广泛应用提供重要技术支持。

关键字 隔膜泵，超声装置，虚拟解剖，注射泵

参考文献：

1. 万雷，邹冬华，汪茂文.尸体 MSCT 血管造影技术的法医学研究现状[J].法医学杂志,**2020**, 36(6):820.
2. Fleischmann D, Hallett R L. Contrast Medium Injection Technique[J]. Multidetector-Row CT of the Thorax, **2016**: 37-57.
3. Grabherr S, Doenz F, Steger B, et al. Multi-phase post-mortem CT angiography: development of a standardized protocol[J]. International journal of legal medicine, **2011**, 125: 791-802.
4. Mohith S, Karanth P N, Kulkarni S M. Recent trends in mechanical micropumps and their applications: A review[J]. Mechatronics, **2019**, 60: 34-55.
5. Stith D. The Tesla valve–A fluidic diode[J]. The Physics Teacher, **2019**, 57(3): 201-201.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

MSCT 技术在无名尸尸体检验中的应用

谢杨[1]、杨超朋*[2]、李朋瑞[1]、靳雅翠[1]
1. 北京铁路公安局石家庄公安处
2. 公安部鉴定中心

摘要：目的：无名尸案件的处理涉及法律、人文等方面，难以周全，一直都是公安机关比较棘手的问题。方法： 虚拟解剖技术自本世纪初期引入国内至今已取得了长足的发展。目前该技术在交通事故、枪弹伤、高坠伤、颅脑损伤、猝死等方面均取得一定的研究成果。而 MSCT 技术则是虚拟解剖中最常用的影像学检查手段。MSCT 技术应用于无名尸尸体检验有独特的自身优势，可在尽量保持尸体完整的情况下，一次性获取全部尸体信息（包括损伤信息和个体信息）；既为判明死因提供数据、为查询尸源提供线索，又对死者家属给予最大程度的人文主义关怀。结果：该技术可获取法医病理学相关信息，探明出血血肿、脏器损伤及骨折情况，进而明确死亡原因。MSCT 技术附带有强大的图像后处理功能，最常用的容积重建技术以三维图像形式显示目标部位，可多角度旋转观察，呈现连续、完整的损伤情况，对分析力的作用方向及作用顺序、致伤过程和现场重建提供帮助；另外三维图像更加清晰直观，方便后期对死者家属的解释工作。还可发现常规解剖检验不易发现的损伤，例如颈髓等常规解剖不易涉及的部位，一定程度上避免漏诊。其次可获取法医人类学相关信息，提取到骨骼的形态学特征。国内外已有不少学者开展了虚拟人类学的研究，通过对颅骨、锁骨、骨盆、髌骨等容积重建，推断性别和年龄；另外亦可提取到体内的医源性异物信息，如骨折内固定物和种植牙等，均可为查找尸源提供线索。MSCT 技术还可以客观的、长期的保存尸体数据。该数据完全避免了法医的主观因素影响，更具有公信力；数据储存介质为电子存储设备，体积小、可备份且不易损坏，便于长期保存。结论：MSCT 技术多维度的尸体信息的获取及客观稳定的储存手段，对无名尸案件前期的尸源寻找及后期的家属解释和安抚工作提供详实且有力的数据支撑，为公安机关处理无名尸案件提供强大的技术保障。随着虚拟解剖技术研究的逐步深入，扫描、重建及后处理等各个环节的操作也日益规范，这将提高 MSCT 数据在法庭中的证据效力，也将为该技术在公安工作实践中的带来更广阔的发展空间。

关键字 MSCT，无名尸

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

全自动多重滤膜法检验陈旧精斑认定嫌疑人 1 例

张智杰*[1]、雷一鸣[1]、郭平[1]、孙文婷[1]、罗深恒[2]
1. 广州铁路公安局广州公安处
2. 广州高盛智造科技有限公司

随着自动化技术的发展，自动化 DNA 提取工作站在刑侦领域的应用越来越广泛。虽然精斑混合斑检验是法医物证检验的一项常规检验，但陈旧混合斑的分离提纯依旧是法医物证领域的一个难题。本文在一起 20 年前的命案积案中，由于案发时间久远、案情特殊、物证保存条件一般等不利情况，因此尝试利用全自动多重裂解滤膜法，使用 S-Pure 96 Plus 型硅磁一体核酸提取工作站对一处陈旧精斑进行自动化分离提纯，最终成功获得嫌疑人常染色体 STR 分型，为案件侦破提供关键线索。通过总结相关工作经验，可为类似案件的侦破提供检验思路。在本案中，实验人员充分发挥了 S-Pure 96 Plus 型硅磁一体核酸提取工作站的 5 个优势：（1）操作简便。工作站为全自动工作站，无需人工干预，操作更加简便。(2)耗时短。工作站 180min 内即可完成 24 个混合斑样本的分离提纯。（3）分离效果好。工作站所使用的全自动多重裂解滤膜法，结合差异裂解法及滤膜法，分离效果好。（4）检出率高。工作站分离死者和嫌疑人的 DNA 后，通过高灵敏度的磁珠法进行提取纯化,对混合斑单一男性的检出率达到 84.7%。

关键字 法医物证；混合斑检验；自动化分离提纯

参考文献：

1.柳超,龚桂雄.犯罪现场四种常见人体体液固有荧光光谱响应[J].贵州警官职业学院学报,**2016**,28(6):84-87.
2.全国刑事技术标准化技术委员会法医检验分技术委员会. 人精液 PSA 检测金标试剂条法: GA/T 766-2020[S].北京：中国标准出版社，2020:1-2.
3.全国刑事技术标准化技术委员会. 人类 DNA 荧光标记 STR 分型结果的分析及应用: GA/T 1163-2014[S].北京：中国标准出版社，**2014**:1-4.
4.吕德坚,陆惠玲,陈玉川.混合斑的 DNA 分型解析[J].法医学杂志,**2002**,(3):185-188.
5.秦海燕,张浩.检验陈旧精斑认定嫌疑人 1 例[J].中国法医学杂志,**2020**,35(6):672-673.
6.郭晓涛,郭建伟,杜勇等.Maxwell 16 裂解纯化法提取陈旧精子 DNA 的应用[J].刑事技术,**2014**,(5):12-13.
7.徐韩飞,范京来,富渭鑫等.QIAcube 小型工作站在生物接触类检材提取中的应用研究[J].刑事技术,**2015**,40(2):118-121.
8.全国刑事技术标准化技术委员会. 法庭科学 DNA 实验室检验规范: GA/T 383-2014[S].北京：中国标准出版社，2014:7-13.
9.韩海军,张玉红,杨敏等.改良差异裂解法结合硅珠法提取混合斑精子 DNA[J].法医学杂志,**2014**,30(1):50-51+54.
10.张子阳,聂世昌,马奇兴.DNA 检案中混合拭子提取方法的优化[J].法医学杂志,**2017**,33(5):540-542.
11.王传海,李湘秦,王伟妮等.一种基于全自动多重裂解滤膜法的研究应用[J].警察技术,**2022**,(2):50-52.

12.杨电,刘宏,刘超等.国产磁珠结合自动化工作站批量提取生物检材 DNA 的应用[J].中国法医学杂志,**2009**,24(6):404-406.
13.江煜灵,汤志成,袁红等.X-Pure 96 Plus 微量 DNA 自动提取工作站应用测试[J].刑事技术,**2022**,47(4):405-410.
14.王颖希,张庆霞,薛卢艳等.接触性检材的 DNA 自动化提取[J].刑事技术,**2018**,43(2):156-158.
15.韩海军,伊海,杨敏等.磁珠法自动化纯化现场检材 DNA 方法研究[J].中国法医学杂志,**2017**,32(1):9-12.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

纸币磁性印刷检验初步研究

廉哲*
公安部鉴定中心

本文建立了一种基于磁性的货币磁性印刷检验方法，通过对国内外主要货币及部分相应伪钞进行了检验，发现约绝大多数货币均采用了磁性油墨进行印刷，部分假币也在油墨中加入了磁性物质以提升仿造效果。经磁性扫描，发现这些磁性物质均匀分布于墨迹中，其磁性和分布较稳定，随时间变化不显著。对不同版型和不同部位的纸币，其墨迹磁性强度存在差异。这种方法快捷无损，是一种较好的假币鉴定和比对溯源的预检验方法，具有一定的推广价值。

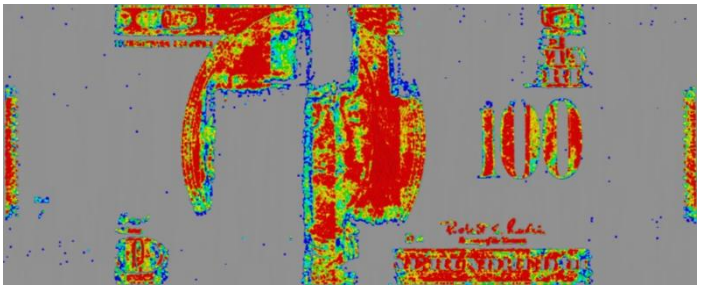


图 1 一种货币的磁性扫描图

关键字 法庭科学；纸币；鉴定

参考文献：

1. Mieremet M. The use of magnetism to discriminate between different laser printers[J]. Electrical Engineering Mathematics & Computer Science, **2013**.
2. Biedermann A, Bozza S, Taroni F, et al. Analysis and evaluation of magnetism of black toners on documents printed by electrophotographic systems[J]. Forensic Science International, **2016**:157-165.
3. Williams Mazzella, Bing Li. Is magnetic flux a valuable tool for the analysis of electrophotographic-printed documents?[J]. Journal of Forensic Science and Medicine, **2018**, 4(4).
4. Polston C, Thompson D, Buzzini P. The assessment of the impact of induction spatial effects on magnetic flux measurements of toner-printed documents to the detection of forged or altered documents[J]. Journal of Forensic Sciences, **2021**, 66(5).
5. 廉哲,梁鲁宁,林雷祥,等.黑色激光打印墨迹磁性检验初步研究[J].刑事技术, **2022**, 47(4):6.DOI:10.16467/j.1008-3650.2022.0022.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

基于 MOFs 的固相微萃取技术在法庭科学领域的应用

冯琳*
中国人民公安大学

在法庭科学领域，提取复杂基质中痕量和超痕量的目标分析物是检验的首要步骤。传统的样品前处理技术，如索氏提取和液液萃取，步骤繁琐，耗时耗力，过程中易造成样品的损失和二次污染，并可能对环境和健康造成威胁。相比之下，固相微萃取（SPME）技术以其无需溶剂、便携、操作简便和快速等优势，成为法庭科学领域的重要样品前处理方法[1-2]。早期研究多依赖于商业化的 SPME 装置，但这些装置存在价格昂贵，纤维易断，选择性差等问题。近年来，利用金属有机骨架化合物（MOFs）制备 SPME 涂层的技术受到了广泛关注。MOFs 是由无机金属离子（或金属簇）和有机配体通过配位键自组装形成的多孔杂化材料[3]，作为涂层材料具有选择性高、稳定性好、吸附能力强、结构可控、容易调节等优点。已在环境监测、食品分析和药物检测等领域得到广泛应用，但在法庭科学领域的应用还相对较少。本文对 MOFs 进行了简要介绍，并系统总结了 MOFs 材料的合成方法、MOFs 基 SPME 涂层的制备技术，以及该技术在法庭科学领域的应用情况。同时，文章还指出了基于 MOFs 的 SPME 技术在法庭科学分析中的不足，并对其未来发展方向提出了建议，旨在为相关研究者提供参考。

关键字 MOFs，固相微萃取，法庭科学

参考文献：

1.Mattarozzi M, Bianchi F, Bisceglie F, et al. Anal Bioanal Chem, **2011**, 399(8), 2741.
2.Costa Dos Reis L, Vidal L, Canals A. Anal Bioanal Chem, **2017**, 409(10), 2665.
3. Weiya Xie, Xiahan Zhu, Hongcheng Mei, et al. Forensic Sci Int, **2023**, 352, 111852.

分会场：34.法庭科学与仪器
交流形式：墙报

创新性低渗透性水溶性造影剂的研发及在法医虚拟解剖血管造影中的应用探讨

臧玉峰[1]、孙科[2]、鲁宁[3]、包达尔罕[4]、杨超朋*[5]
1. 重庆大学
2. 青岛市公安局
3. 山东大学
4. 云燕科技（山东）股份有限公司
5. 公安部鉴定中心

目前，虚拟解剖已成为法医专业的研究热点之一，很多省市已经开展此类研究。其中，血管造影是研究的重点之一，该技术能够对心脑血管疾病、机体创伤、出血等进行定位诊断及三维重建，可辅助法医进行死因诊断，在命案及非正常死亡案事件中具有良好的应用前景。现阶段，血管造影使用的造影剂主要有脂溶性造影剂和水溶性造影剂两种。脂溶性造影剂不易向周围组织渗漏，易于引发毛细血管栓塞从而阻碍动静脉血液的相互流动，有利于尸体血管整体造影和动静脉单独造影。但是，脂溶性造影剂的应用成本较高，单次注射有时需要耗资数万元，不太适合大范围推广使用。相比较而言，水溶性造影剂在临床领域已广泛使用，使用成本较低，单次注射成本仅为数千元，且试剂易于获取，具有较好的推广前景。

受自溶、腐败等因素影响，人体死后血管壁通透性将会大幅增加，水溶性造影剂则易于向血管外渗透，在一定程度上会影响血管造影效果。另外，水溶性造影剂不易引起毛细血管栓塞，不利于动静脉单独造影。因此，有必要研发一种低渗透性、但易引发栓塞的水溶性造影剂。传统水溶性造影剂一般由两部分构成：碘化物和纯净水。其中碘化物主要用于吸收X射线，实现增强造影；纯净水用于稀释碘化物，增加造影剂的流动性。本研究拟在两者的基础上增加醇醚类试剂和油脂类试剂等两种溶剂。其中，醇醚类试剂的渗透压较高，注入到血管中会引发血管壁细胞的收缩，有助于减少造影剂的渗漏，利于增强造影，而油脂类试剂如石蜡油等能够加快纤维蛋白的形成速度，促进毛细血管中血栓的形成，有利于动静脉单独造影。

与醇醚类分子拥有水溶性醇羟基不同，脂类分子缺乏水溶性基团，其在水中的溶解度较低。本研究在注射造影剂前采用高频超声技术，将油脂类试剂粉碎成微米级的液滴，形成均匀分布的悬浊液，解决了造影剂中油脂类溶剂的分布问题。基于此，构建了由碘化物、纯净水、醇醚类和油脂类溶剂混合而成的水溶性造影剂，兼备了流动性好、渗漏性低、易引发毛细血管栓塞等功能。根据目前的初步实验结果，造影剂的悬浊液状态能够维持数十分钟之久，已达或超过了注射与造影所需的总时间。该造影剂在法医虚拟解剖血管造影方面具有较好的应用前景。

关键字 造影剂，虚拟解剖，血管造影

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

食品加工中产生的荧光碳点形成机制与性质分析

谭明乾*
大连工业大学

食品热加工过程中产生的潜在危害物对人体健康具有重要影响，因此，建立荧光碳点分析技术在食品加工中的应用对研究其生物效应具有重要价值。荧光碳点是一种由食品中的营养成分（如蛋白质、多糖、脂质等）在加工过程中形成的内源性纳米粒子。本研究对不同食品体系中的荧光碳点特性进行了深入分析，并首次提出了“食品热加工荧光碳点”的概念。通过代谢组学技术结合生理生化表征，阐明了食品热加工荧光碳点诱导氧化应激反应的机制。这些碳基荧光碳点具有复杂的 sp^2和 sp^3杂化结构，并展示出小尺寸效应、表面效应和量子尺寸效应，使其具备较高的吸附能力、化学反应活性以及分散和团聚能力。这些特性与传统的大块材料明显不同，荧光碳点表现出强烈的光诱导电子转移和光催化特性。虽然这些特性可能在某些情况下具有潜在的应用价值，但它们对人体的影响尚不完全明确。研究表明，荧光碳点可能干扰细胞的正常生物过程，诱发细胞内氧化应激反应。这种氧化还原过程的失衡可能引发炎症反应，并对细胞产生损伤，进而对生命健康构成潜在威胁。

关键字 食品加工 荧光碳点 形成 性质解析

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

基于食品组学的空气炸薯片化学轮廓解析与标志性化合物表征

章宇*、黄颖玉、张帆
浙江大学

薯片因其独特的风味和酥脆的质感在全球范围内备受欢迎。然而，关于热加工条件及鱼油处理对薯片安全性、营养和风味质量影响的化学成分分析研究却较为稀缺。在本研究中，我们利用高分辨质谱技术和 ChemRICH 富集分析，揭示了不同加热时间和鱼油处理对空气炸薯片全面化学组成的影响，并鉴定了其标志性化合物。结果表明，热加工显著改变了薯片的组学化学谱，尤其是吲哚类、吡啶类和吡嗪类化合物含量显著增加，而环状氨基酸和丁酸盐类化合物显著减少。此外，热加工还导致了典型有害美拉德反应产物（hMRPs）如丙烯酰胺的形成，以及氧化产物如邻醌和氢醌的生成，同时减少了如 4-氨基丁酸（GABA）等重要的生物活性化合物。值得注意的是，薯片在油炸前经过鱼油处理，能够减少 hMRPs 的生成，保留有益的营养成分如 GABA，并在最终的炸制产品中富集 n-3 多不饱和脂肪酸（PUFAs）及酚类、香豆素等抗氧化物质。此外，鱼油处理还减少了吲哚及吲哚乙酸的含量，降低了薯片的苦味，产生了更加温和的风味特征，并突出了鱼油的特有香气。通过食品组学方法，本研究开创性地揭示了热加工对食品安全性、营养质量和风味属性的三重影响，进而表征了薯片的化学成分及标志性化合物。鱼油在油炸前的创新应用不仅减少了有害美拉德反应产物的形成，还改善了空气炸薯片的营养和风味特性。研究结果表明，鱼油具有作为保护剂的潜力，并提供了一种兼顾安全、营养和风味的策略，以应对现代热加工技术带来的挑战。

关键字 空气炸薯片；化学轮廓解析；标志性化合物；食品组学；食品安全；食品营养；食品风味

参考文献

1.A. Koszucka, A. Nowak, I. Nowak, I. Motyl, Crit. Rev. Food Sci. Nutr., **2020**, 60, 10, 1677-1692.
2.J. Dehghannya, M. Ngadi, Trends Food Sci. Technol., **2021**, 116, 786-801.
3.A. Hamzalıoğlu, V. Gökmen, Trends Food Sci. Technol., **2020**, 106, 198-208.
4.Z. Liu, X. Dai, H. Zhang, R. Shi, Y. Hui, X. Jin, et al., Nat. Commun., **2020**, 11, 1, 855.
Z. Han, M. Zhu, X. Wan, X. Zhai, C.-T. Ho, L. Zhang, Crit. Rev. Food Sci. Nutr., **2024**, 64, 15, 4904-4920.
5.T.-T. Zhang, J. Xu, Y.-M. Wang, C.-H. Xue, Prog. Lipid Res., **2019**, 75, 100997.
6.H. Yu, R. Zhang, F. Yang, Y. Xie, Y. Guo, W. Yao, et al., Trends Food Sci. Technol., **2021**, 112, 795-807.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

人工智能辅助的微球编码显微成像传感技术用于食源性致病菌的多重检测

陈翊平*、董永贞
大连工业大学

食源性致病菌污染严重危害全球食品安全和公共健康。由于食品基质营养丰富，适宜多种食源性致病菌生长，导致单一食品基质中常存在多种致病菌，进一步增加了食源性致病菌的危害性。传统致病菌检测技术及现有快速检测技术存在多信号同步传感复杂、检测信号易受食品基质干扰等问题，难以满足食源性致病菌多重检测的需求。针对上述问题，开发粒径可控、抗基质干扰性强、成本低廉的聚苯乙烯微球信号探针，基于其粒径可控性，构建“致病菌-微球”编码体系；基于噬菌体/抗体识别及磁分离技术，实现致病菌的有效分离，进而基于 DNA 杂交、免疫反应等技术，建立致病菌浓度与微球数量的相关性；基于人工智能技术，构建机器视觉解码体系，开发微球显微成像技术，用于编码微球的快速计数，实现从微球粒径/数量到多种致病菌种类/浓度的智能解码。基于上述研究，构建人工智能辅助的微球编码显微成像传感技术，用于食源性致病菌的多重、灵敏、准确检测，为食品安全多危害因子的同时检测提供了高效的分析工具。

关键字 食源性致病菌；多重检测；微球编码；人工智能；机器视觉

参考文献：

1. N. Feng, S. Wang, L. Wei, Q. Wang, X. Cheng, P. Lu, Y. P. Chen, Artificial intelligence-based imaging transcoding system for multiplex screening of viable foodborne pathogens. Analytical Chemistry., **2023**, 95(22), 8649-8659.
2. X. Lin, X. Huang, Y. Zhu, K. Urmann, X. Xie, M. R. Hoffmann, Asymmetric membrane for digital detection of single bacteria in milliliters of complex water samples. ACS Nano., **2018**, 12 (10), 10281-10290.
3. Z. Wang, J. Liu, Y. Yang, P. Li, K. Li, Y. Xianyu, Y. Chen, B Li, Versatile biosensing toolkit using an electronic particle counter. Anal. Chem.,**2021**, 93 (15), 6178-6187.
4. Y. Xianyu, Y. Dong, Z. Wang, Z. Xu, R. Huang, Y. Chen, Broad-range magnetic relaxation switching bioassays using click chemistry-mediated assembly of polystyrene beads and magnetic nanoparticles. ACS Sens.,**2019**, 4 (7), 1942-1949.
5. C. Zhou, C. Huang, H. Zhang, W. Yang, F. Jiang, G. Chen, Y. P. Chen, (2024). Machine-learning-driven optical immunosensor based on microspheres-encoded signal transduction for the rapid and multiplexed detection of antibiotics in milk. Food Chemistry., **2024**, 437, 137740.
6. H. Y. He, R. B. Nie, P. Lu, X. W. Peng, X. H. Li, Y. P. Chen, Low-cost and convenient microchannel resistance biosensing platform by directly translating biorecognition into a current signal. Analytical Chemistry., **2021**, 93(45), 15049-15057.

7. Y. Lin, J. Ma, Q. Wang, D. W Sun, Applications of machine learning techniques for enhancing nondestructive food quality and safety detection. Critical Reviews in Food Science and Nutrition., **2023**， 63(12), 1649-1669.
8. J. P. Zhao, C. X. Huang, X. F. Wang, X. H. Wang, J. Wang, A. M. Ma, Y. P. Chen, Novel bioorthogonal reaction-mediated particle counting sensing platform using phage for rapid detection of Salmonella. Analytica Chimica Acta., **2022**, 1236, 340564.
9. W. Q. Zhao, Y. Zhou, Y. Z. Feng, X. H. Niu, Y. K. Zhao, J. P. Zhao, Y. P. Chen, Computer vision-based artificial intelligence-mediated encoding-decoding for multiplexed microfluidic digital immunoassay. ACS Nano., **2023**,17(14), 13700-13714.
10. C. Zhou, S. Pan, P. Liu, N. Feng, P. Lu, Z. Wang, Y. P. Chen, Polystyrene microsphere-mediated optical sensing strategy for ultrasensitive determination of aflatoxin M1 in milk. Talanta., **2023**, 258, 124357.
11. J. Zhao, M. Han, A. Ma, F. Jiang, R. Chen, Y. Dong, Y. P. Chen, A machine vision-assisted Argonaute-mediated fluorescence biosensor for the detection of viable Salmonella in food without convoluted DNA extraction and amplification procedures. Journal of Hazardous Materials., **2024**, 466, 133648.
12. L. Wei, M. Han, Z. Wang, Z. Wang, S. Ruan, Y. P. Chen, Detection of foodborne methicillin-resistant Staphylococcus aureus via fluorescence-encoded microsphere and Argonaute-mediated decoding. Food Chemistry., 2024, 460, 140615.X. Xan, ,,,,,, X. Wang, Biomed. Chromatogr., **2018**, 1, 1-10.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

小型化直接电离质谱仪研制及在食品安全快检领域的应用

唐燕[1,2]、章文天[2]、刘耀楠[1]、赵丹[2]、何婉琳[2]、闻路红*[1,2]
1. 宁波大学
2. 宁波华仪宁创智能科技有限公司

食品安全直接影响着人们的身体健康和生命安全，也会直接或间接影响国家经济发展与社会稳定。食品中化学危害物的科学、准确、实时检测是保障食品安全的首要关键。目前，食品中化学危害物种类及数量繁多，难以支撑全检，现行抽检方式存在科目不多、成本高、时效性差等问题，食品抽检并不能真正反映出食品实际的安全隐患和问题。而现有的快检方法存在测不准、测的少、定量差，以及实验室质谱技术存在前处理复杂、检测成本高、现场应用缺失等突出问题。

针对这些问题，我们课题组系统研制了基于敞开式直接离子化和高容量线性离子阱技术的小型化直接电离质谱仪。针对不同食品样品形态，研发了适用于食品化学性危害因子检测的高通量样品前处理技术；针对食用农产品的理化特性，突破单一或集成离子化技术，开发新型质谱大气压与真空转换接口，引导中性粒子定向迁移，完成目标物质的分离与离子化精准控制；形成了质谱接口传输创新结构，实现低真空度要求下的离子高效传输；研究设计了低功耗、高稳定性、扫描范围宽的射频电压电路控制系统，满足便携式设备低功耗、小体积要求。

面对食品安全检测需求，开发了不同基质现场快检应用方法，包括三颗菜（豇豆、韭菜、芹菜）中氨基甲酸酯、苯基咪唑类和烟碱类等五种农残的快速检测方法，检出限在 0.5-1 μg/kg；水产品中孔雀石绿、结晶紫等四种药物的快检方法，检出限在 0.21-0.59 μg/kg；乳制品中氯酸盐、高氯酸盐、三聚氰胺等快速检测方法，灵敏度均满足检测要求；建立了包含农兽药、生物毒素、环境激素、持久性有机污染物、非法添加物等 400 种以上危害物的筛查数据库，实现食品科学防控技术的升级和产业格局的突破，显著增强我国食品安全快速检测产业的核心竞争力。

关键字 小型化，直接电离，质谱仪，食品安全，快检

参考文献：

1. Y. Lv, J. Zhao, H. Xue, Q. Ma, TrAC Trends Anal Chem., **2024**, 178, 117814.
2. B. Mou, C. Zuo, L. Chen, H. Xie, W. Zhang, Q. Wang, L. Wen, N. Gan, J Chromatogr A., **2023**, 1689, 463744.
3. Y. Shen, W. Xiong, Q. Wang, W. Zhang, H. Xie, Y. Cao, Q. Xu, L. Wen, N. Gan, J Chromatogr A., **2022**, 1681,463456.
4. W. Wang, T. Liu, Y. Wang, G. Mu, F. Zhang, Q. Yang, X. Hou, J Agric Food Chem., **2022**, 70(38), 12211-12219.
5. Y. Hao, M. Yang, X. Chen, F. Zhang, N. Li, M. He, M. Xu, J Agric Food Chem., **2023**, 71(22), 8656-8664.
6. D. Usmanov, M. Mandal, K. Hiraoka, S. Ninomiya, H. Wada, M. Matsumura, S. Sanada-Morimura, H. Nonami, S. Yamabe, Food Chem., **2018**, 260, 53-60.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

以聚合物功能化三聚氰胺海绵作为新型 QuEChERS 净化材料联合 HPLC-DAD 分析牛奶中抗精神病药物

亓亮*、王哲、陈剑
陕西科技大学

禁止在动物食品中使用抗精神病药物引起了人们极大的关注。本研究采用聚苯胺（Polyaniline，PANi）和聚吡咯（Polypyrrole，PPy）功能化密胺海绵（Ms）作为新型基质净化材料，联合高效液相色谱-二极管阵列（HPLC-DAD）检测牛奶中的抗精神病药物，包括三种吩噻嗪类药物（氯丙嗪、噻嗪和异丙嗪）和一种三环类药物丙咪嗪。利用扫描电镜、傅里叶变换红外光谱仪和水接触角测量仪对聚合物功能化 Ms 进行了表征。在 0.01-47.00 μg mL-1 的浓度范围内，所有药物均具备良好的线性关系，R2 大于 0.999。在三种加标水平下，四种分析物的回收率在 92.1%-106.9%之间。结果表明，所建立的方法可成功地用于这四种药物的测定。聚合物功能化 Ms 是一种很有前景的基质净化替代材料，可用于快速测定各种食品样品中的药物残留。

关键字 抗精神病药物，QuEChERS，聚苯胺，密胺海绵，HPLC-UV

参考文献：

1. L. Qi & J. Gong, Journal of Chromatography A, **2020**, 1616, 460777.
2. X. Xu, W. H. Zhao, B. C. Ji, et al. Food Chemistry, **2022**, 369, 130894.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

酶反应器-微流控纸芯片体系对食品中有机磷农残的快速检测

张剑、张博、李一冰、张婷、刘春叶*
西安医学院

食品中农药残留存在会对人类健康造成持续危害[1]，即使每天摄入少量杀虫剂也会对人体健康产生影响，引起如头痛、淋巴细胞癌、造血性肝癌、乳腺癌和卵巢癌等[2]。因此，快速准确地检测农残对于食品质量和安全控制至关重要。然而现有农残检测方法存在耗时久、操作繁琐、依赖大型仪器等问题[3,4]。因此，迫切需要建立一种农残检测新方法。本研究将乙酰胆碱酯酶（AChE）定向固定在微流控纸芯片表面，制得纸芯片微酶反应器，以提高 AChE 的稳定性和生物活性，并用于蔬菜中有机磷农药残的检测。首先，采用壳聚糖对纸芯片反应区 I（纸芯片I）进行活化，用戊二醛（GA）为间隔臂键合上凝集素 Con A，借助 ConA 与糖蛋白的特异性结合完成 AChE 在纸芯片表面的定向键合。通过纸芯片I与检测区 II（纸芯片II）的相接与分离，可实现酶解液与酶的快速分离，无需加入终止剂即可对农残进行测定（图 1）。使用手机拍照记录结果，Photoshop 软件对色度值进行分析。实验结果显示，定向键合 AChE 连续使用 40 次后酶活性依然高于 91%，7 天后活力仍高于 83%。测定结果的日内和日间相对标准偏差（RSD）分别为 2.0%（n = 5）和 1.6%（n = 5），重复性良好。建立了乐果、马拉硫磷、倍硫磷、甲基对硫磷、草铵膦和谷硫磷等 6 种有机磷类农药的拟合曲线，其检测限分别为 0.073±0.003、1.642±0.001、9.311±0.025、0.087±0.122、0.882±0.063、0.575±0.020 μg/mL。对油菜、西蓝花、生菜等三种蔬菜的农残进行测定，加样回收率为 88.6% ~ 102.7%，RSD 小于 3.0%（n = 3）。本研究制备了可重复使用的定向纸芯片微酶反应器，基于此平台建立农残检测新方法，具有操作简便、样品用量少、检测快速等特点，可用于食品中有机磷农药残留检测。

关键字 微酶反应器；纸芯片；有机磷；农残

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

基于 2D 卟啉 MOF 的食品快检电化学生物传感研究

白武双*、张靖瑜、郑建斌、曹炜
西北大学

电化学生物传感技术检测速度快、灵敏度高，且往往不需要复杂的样品前处理，尤其是小型/微型电化学传感设备，可实现食品复杂体系中目标物的便捷、快速测定。基于此，本课题组结合 2D 卟啉 MOF 良好的催化活性和生物亲和性等特点[1-3]，开展了如下研究工作：1、在密度泛函理论指导下，以 2D 卟啉 MOF 为前驱体，分别通过自还原和电沉积的方式，在其表面原位可控生长双/三合金纳米颗粒，提升其表面吸附能和电子转移性能，增加其有效表面面积，并基于此构建 2D 卟啉 MOF 修饰的丝网印刷芯片电极 (图 1)，结合微型电化学工作站，搭建便携式抗生素快检电化学传感平台(图 2)，实现蜂蜜、牛奶等样品中多种抗生素的高灵敏快速测定；2、基于 2D 卟啉 MOF 良好的生物亲和性和较大的比表面积[4]，在其表面构建 DNA 适配体纳米结构，并作为待测物识别平台，通过待测物诱导核酸外切酶循环扩增和磁力驱动 DNA 链式杂交反应，建立磁控均相电化学生物传感新方法，实现坚果样品中黄曲霉素的超高灵敏快速测定。



图 1 2D 卟啉 MOF 修饰的丝网印刷电极



图 2 便携式抗生素传感平台

关键字 食品分析；2D 卟啉 MOF；电化学生物传感

参考文献：

1. Bai, W.; Li, Y.; Zheng, J. J. Food Compos. Anal. **2023**, 121: 105385.
2. Ma, J.; Bai, W.; Zheng, J. Biosens. Bioelectron. **2022**, 197: 113801.
3. Ma, J.; Yuan, J.; Xu, Y.; Jiang, Y.; Bai, W.; Zheng, J. Chem. Eng. J. **2022**, 446: 137001.
4. Qiao, Z.; Zhang, H.; Zhou, Y.; Zheng, J. Anal. Chem. **2019**, 91: 5125.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

人工食品染料去仪器化快检平台的构建与应用

王双寿*、李海洋
安徽工业大学

人工染料（FDs）相关的食品安全与环境污染已成为全世界关注的重要问题，开展 FDs 分析检测研究意义重大。然而，现有 FDs 分析技术高度依赖于仪器方法[1]，可视化快检技术鲜有报道。强的着色性和荷电行为的多样性使得基于静电相互作用而开发用于 FDs 比色分析的试纸成为可能；此外，富含不饱和结构赋予了 FDs 强的光吸收能力，而大多数 FDs 无荧光发射性质，易引起基于内滤效应的荧光猝灭[2]。因此，我们结合量子点优异的荧光性能设计开发了集表观颜色和荧光的多模式、多维度比色试纸，并融合基于智能手机的数字化图像分析技术，实现了基于颜色的数字化比色分析[3]。最终，通过纸分析技术完成了软/硬饮料、糖果、蛋糕、果蔬汁、辣椒制品和染料污水等真实食品和环境样品中染料的多模/多维可视化快检与掺假鉴定[4-8]，整个检测过程 1 min 内即可结束，且不同模式分析结果的交互验证显著提高了可视化检测的可靠性。实验结果表明：基于试纸的可视化分析结果与传统仪器技术（如紫外-可见/荧光光谱法、HPLC 和 MS 等）的测定结果高度吻合，在食品安全与环境分析等领域展示了良好的应用前景。

关键字 染料；食品安全；可视化快检；纸分析技术

参考文献

1. K. Yamjala, M. S. Nainar, N. R. Ramisetti, Food Chem., **2016**, 192, 813-824.
2. S. Wang, L. Zhang, H. Wang, et al., Sensor. Actuat. B: Chem., **2024**, 409, 135631.
3. S. Wang, H. Wang, Y. Ding, et al., Microchem. J. **2022**, 183, 108088.
4. S. Wang, H. Wang, Z. Yuan, et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, **2022**, 14, 57251-57264.
5. S. Wang, L. Zhang, Q. Jin, et al. Food Chem., **2022**, 390, 133087.
6. S0. Wang, Y. Ding, L. Zhang, et al. J. Hazard. Mater., **2023**, 445, 130563.
7. S. Wang, Y. Ding, L. Zhang, et al. J. Hazard. Mater., **2024**, 470, 134154.
8. S. Wang, H. Li, T. Li, et al., Food Control, **2025**, 168, 110885.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

化学蒸气发生-比色法在食品现场分析中的应用

邹志荣*、叶霜、蒋晨希
四川师范大学

砷污染是一个比较严峻的环境和食品安全问题，直接威胁着数百万人的生命健康。世界卫生组织（WHO）规定饮用水中砷的含量不得高于 10 μg/L，因此，实时快速分析监测食品样品中的砷含量具有重要的意义。化学蒸气发生（CVG）是一种理想且成熟的气态样品引入方式。通过化学蒸气发生过程可以将目标分析物转变为其气态氢化物，在实现高效进样的同时，减少了来自复杂基体的干扰，具有较为优异的选择性。

本实验通过化学蒸气发生过程将溶液中的无机砷（As(III)）和 S2-转化为 AsH3 或 H2S，同时实现高效进样和有效的基质分离效果，从而提高分析方法的灵敏度和选择性。生成的 AsH3 具有一定的还原性，可以与无机盐（如 AgNO3 等）或金属有机骨架材料（如 Ag-BTC 等）等不同的显色基底发生氧化还原反应，从而使显色基底的颜色发生变化，通过肉眼或者智能手机 RGB 对反应前后的颜色变化进行数据读取，从而实现对待测样品中的无机砷含量进行快速分析检测。同时，生成的 H2S 气体可以与 Ag-BTC 材料中的 Ag+发生化合反应，生成 Ag2S，从而使 Ag-BTC 的颜色由白色变为黑色，通过目视比色和智能手机 RGB 读数即可实现对水样品和食品添加剂中 S2-含量的快速检测。

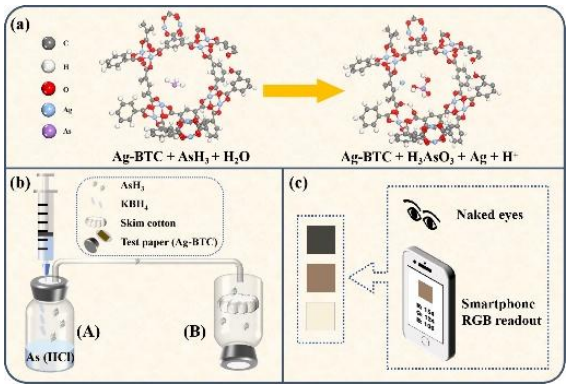


图 1 氢化物发生-比色法测定无机砷示意图

关键字 化学蒸气发生；比色分析；无机砷；硫离子

参考文献：

1. Ye, S.; Li, L.; Ou, Y.; Li, W.; Zhang, S.; Huang, K.; Luo, H.; Zou, Z.; Xiong, X. Anal. Chim. Acta. **2022**, 1192, 339366.
2. Zou, Z.; Ye, S.; Xiao, J.; Jiang, C.; Zhang, S.; Tan, C.; Xiong, X.; Huang, K. Food. Chem. **2023**, 428, 136806.
3. Jiang, C.; Chen, J.; Tang, J.; Xiao, J.; Xu, F.; Luo, H.; Huang, K.; Zou, Z. Food. Chem. **2024**, 444, 138532.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

基于磁性生物炭改进 QuEChERS 在残留分析中的应用

陈蕊[1]、刘丰茂[2]、薛晓锋*[1]
1. 中国农业科学院蜜蜂研究所
2. 中国农业大学

随着人们对食品安全的高度关切，农兽药残留检测在保障食品安全、降低膳食风险方面的重要性愈发彰显。然而，当下残留检测的前处理方法存在操作繁复、耗时久长、成本高昂等问题。QuEChERS 方法作为一种常用的农药残留检测前处理技术，虽具快速、简易、廉价、有效、可靠及安全等优点，但其在净化效果方面仍有提升空间。对于不同类型基质中的农兽药残留，该方法可能无法将干扰物质完全去除，从而影响检测结果的准确性。此外，传统的 QuEChERS 方法步骤较为繁杂，尤其是净化过程中的离心步骤，不但耗时较长，还对设备有一定要求。

因此，本研究着力于开发新型的样品前处理材料与技术。本研究制备的新型磁性生物炭材料，具备比表面积大、表面官能团丰富等特性，能够实现多种目标物的分离与纯化，降低基质干扰。同时，由于引入了磁性，借助磁铁即可实现快速分离，极大地简化了净化步骤，取代了传统 QuEChERS 方法中繁琐的离心步骤，节省了时间与设备成本。并结合高效液相色谱-串联质谱（HPLC-MS/MS），成功构建了一种高效的农兽药残留检测方法。该方法具有检出限低、定量限合理、线性范围广、回收率高且稳定、相对标准偏差小等优势。与传统商品净化材料相比，磁性生物炭的基质效应基本可忽略，净化效果显著提升。

本研究为农兽药残留检测开辟了全新的技术路径。新型磁性生物炭材料的制备利用了农业废弃物，实现了资源的高效再利用。该方法在实际应用中展现出良好的准确性与可靠性，为保障食品安全提供了强有力的技术支撑，具有重大的理论意义与实际应用价值。

关键字 样品前处理，磁性生物炭，农兽药残留，QuEChERS

参考文献：

1. R. Chen, X. Qiao, F. Liu, X. Chen, Food Chem., **2022**, 404(B), 134695.
2. R. Chen, X. Qiao, F. Liu, Anal. Chim. Acta., **2022**, 1201, 339623.
3. R. Chen, X. Xue, F. Liu, D. Zhen, X. Chen, Chem. Eng. J., **2024**, 495, 153534.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

集成式金属有机框架膜阵列芯片及装置用于多种抗生素的快速同时定量检测

马彤彤、应义斌、傅迎春*
浙江大学

抗生素的滥用及残留严重威胁食品安全及人类健康。因此，开发针对抗生素的快速灵敏检测方法与仪器对于保障食品安全具有重要意义。然而，现有快速检测技术虽相对简便，但仍存在前处理操作繁琐、生物识别元件稳定性低且缺少配套便携式分析仪器等不足。膜传感器因其集成化、高通量、低成本等优势在抗生素等化学危害物的快速检测方面引起了广泛关注。基于化学识别元件的高稳定与膜基底的多孔性，我们开发了基于新型荧光金属有机框架（MOFs）膜阵列芯片的多种抗生素快速同时定量检测技术，并研制了小型化荧光信号分析仪器与图像识别软件，以满足实际场景中多对象现场化同时检测需求（Fig. 1）。引入比表面积高、化学结构稳定及荧光响应型的 MOFs 作为化学识别元件材料，借助真空过滤、微波-仿生矿化等策略，制备了聚合物膜负载多种 MOFs 的复合膜阵列芯片。同时，为了提高操作便携性及检测性能，进一步开发过滤检测模式，通过提升 MOFs 识别区域与目标抗生素的接触概率，将混合溶液中土霉素（OTC）、甲氧苄啶（TMP）及环丙沙星（CIP）的检测限（LOD）分别降低至 1 ng mL^{-1}、2 ng mL^{-1}、19 ng mL^{-1}。此外，为了满足现场小型化检测需求，制备了与膜阵列芯片配套的便携式荧光检测设备，并搭配智能手机及自制的图像分析软件实现多种抗生素的定量检测，为抗生素等危害因子的快速高通量现场化分析检测贡献新模式。

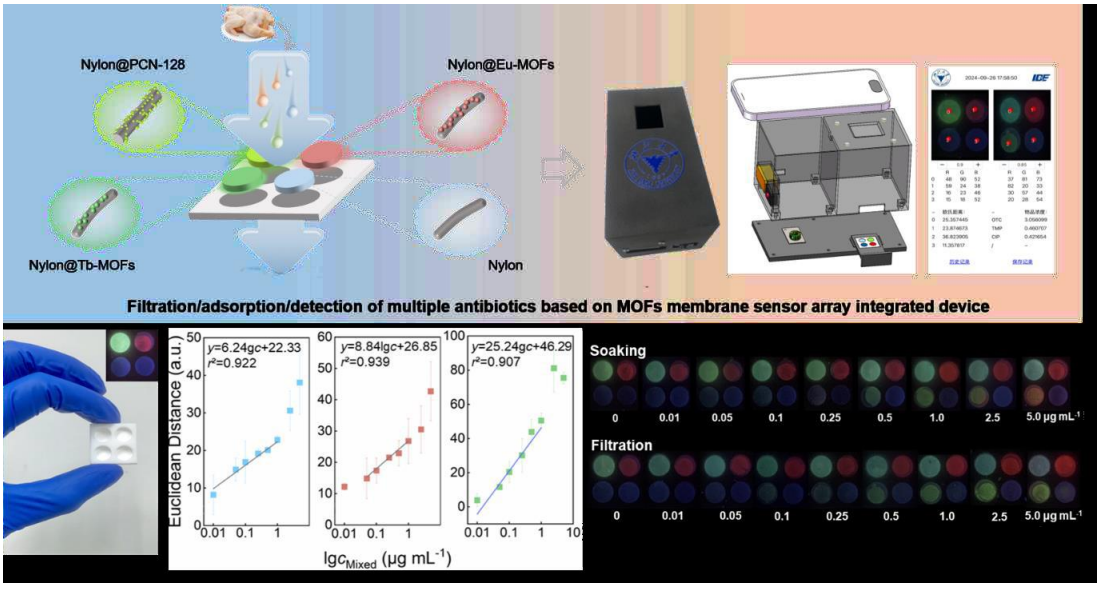


Fig. 1 Integrated metal-organic framework membrane array chip and device for rapid and simultaneous quantitative detection of multiple antibiotics

关键字 金属有机框架；膜阵列芯片；抗生素；仪器；检测

参考文献：

1. T. Ma, J. Zhang, L. Zhang, Q. Zhang, X. Xu, Y. Xiong, Y. Ying, Y. Fu*, Adv. Colloid Interface Sci., **2023**, 311, 102828.
2. T. Ma, Q. Zhang, Y. Lei, Z. Li, L. Zhang, J. Zhang, S. Yan, X. Xu*, Y. Ying, Y. Fu*, ACS Appl. Mater. Interfaces, **2024**, 16(19), 25333-25342.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

食品安全风险物质快速富集 SERS 检测

赖华圣*、祁梦涵、王心兰
赣南医科大学

SERS 技术具有灵敏度高、操作简单、快速、无损分析等特点，适于构建食品安全快速检测方法。在食品分析过程中，复杂基体通常会产生干扰效应。构建选择性好、灵敏度高、稳定性强的 SERS 基底对于食品安全分析至关重要。我们制备了一种苦瓜状的 ZnO/AuNPs SERS 基底用于快速检测水产品中抗生素含量。通过改变制备条件能够实现 AgNPs 尺寸与电磁场的调控。ZnO/AuNPs 基底灵敏度高（EF＞107）、均匀性好（RSD＜8.0%）、选择性好以及抗干扰能力强，能够在 5 min 内实现呋喃妥因的富集检测。建立了测定水产品中呋喃妥因的富集 SERS 检测方法。方法精密度高、准确性好，能够在 10 min 内完成水产品的快速分析，无需任何预处理。该工作在食品安全现场快速检测中具有应用前景。

关键字 抗生素；食品安全；表面增强拉曼光谱；水产品

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

高亲和功能化石墨烯吸附剂制备及其在食品分析中的应用研究

苑亚楠[1]、白立改[1]、乔凤霞[2]、闫宏远*[1]
1. 河北大学
2. 保定学院

食品中目标组分的高效分离和分析一直是分析科学领域的研究热点和难点之一。样品前处理通常是食品分析过程中最关键且最耗时的一步，开发新型样品前处理吸附剂、提高萃取分离效率、缩短样品前处理时间，一直是亟需解决的关键科学问题。石墨烯是一种二维碳纳米材料，具有大的π-π共轭体系，适用于吸附和萃取大多数带有苯环结构的化合物，可作为吸附剂应用于样品前处理领域[1]。但是单纯的石墨烯吸附作用单一，主要为疏水作用和π-π堆积作用，缺少对目标物的亲和性和选择性，易受到样品基质干扰，并且石墨烯片层容易聚集结块造成吸附性能下降。因此，本工作采用表面修饰技术、分子印迹技术等制备了一系列高亲和功能化石墨烯吸附剂，如离子液体功能化石墨烯、低共熔溶剂功能化石墨烯、聚离子液体分子印迹石墨烯、聚低共熔溶剂分子印迹石墨烯及亲水树脂/石墨烯[2,3]。通过石墨烯与离子液体、低共熔溶剂、分子印迹聚合物及树脂等材料的复合，一方面有效避免了石墨烯片层的聚集结块，另一方面引入了丰富的吸附作用力（如静电吸附、离子交换、氢键作用等）。吸附性能评价实验结果表明开发的系列高亲和功能化石墨烯材料具有多重吸附作用力、快传质速率和高吸附容量，其吸附性能显著优于 C18、Silica、石墨烯等商业化吸附剂。本工作将开发的系列高亲和功能化石墨烯吸附剂进一步结合小型化固相萃取技术和色谱检测手段，实现了果蔬中多农药残留的高效分析、尿液中β-激动剂的选择性分析及西蓝花中吲哚-3-甲醇的快速分析。

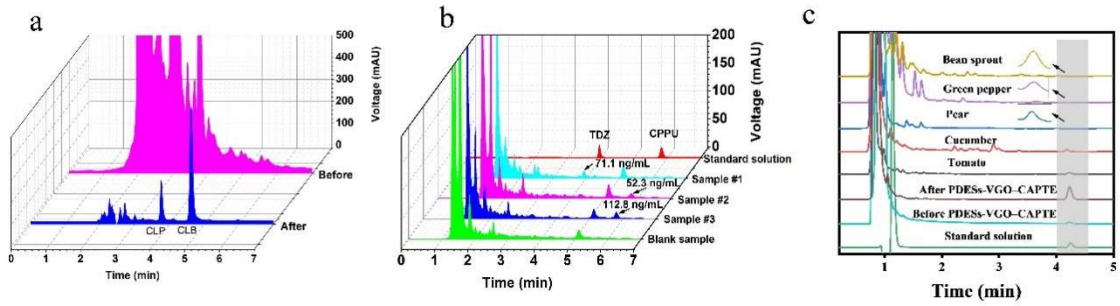


图 1. a: 尿液中β-激动剂的选择性分析; b: 果蔬中苯脲类农药的快速分析; c: 果蔬中氯氟醚菌唑的高效分析

关键字 功能化石墨烯，分子印迹，样品前处理，食品分析

参考文献：

1. Y. Gu, Z. Yang, J. Zhou, Q. Fang, X. Tan, Q. Long, Sep. Purif. Technol. **2024**, 328, 125042.
2. Y. Yuan, Y. Wang, Y. Zhang, H.Yan. J. Agri. Food Chem. **2024**, 72(22), 12822–12831.
3. Y. Yuan, Y. Zhang, M. Wang, J. Cao, H. Yan. Food Chem. **2024**, 450, 139341.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

原位制备和调控新型 NiO/Cu/Cu₂O/异质结电极用于鱼类中组胺的高灵敏电化学检测

杨捷、胡婵、许林贤*
广东医科大学

组胺（HA）是一种典型的生物胺化合物，常见于鱼类、烟熏腊肉和乳制品等高蛋白和发酵食品中。组胺是组氨酸通过蛋白质分解和微生物介导的热发酵脱羧作用产生的。[1] 长期储存、储存温度升高或储存不当都会使食物中组胺含量升高。HA 含有咪唑环和乙胺基团，因此具有很强的生物活性。摄入过量的 HA 或对 HA 不耐受会引发一系列生理疾病，包括哮喘、肠胃炎、过敏和低血压，对公众健康造成巨大威胁。美国食品和药物管理局（FDA）规定食品中 HA 的阈值为每公斤 50 毫克。[2,3] 因此，考虑到 HA 是食品质量的重要指标，为保障公众健康，开发方便、快速、高灵敏度的 HA 监测方法十分必要。本研究利用电化学沉积技术在电极表面原位形成异质结构并调控 NiO 和 Cu_2O 的氧空位密度，以构建灵敏高效快速的电化学 HA 检测平台，如图 1 所示。通过优化 Cu（CH_3COO）$_2$ 的浓度、NiO/Cu/Cu_2O 的沉积比例和电极活化次数，可以得到 Ov 浓度最高、活性位点最丰富、催化活性最好的异质结 NiO/Cu/Cu_2O。在最佳优化条件下，NiO/Cu/Cu_2O 可将 HA 氧化电位降至 0.58 V Vs Ag/AgCl，并在 HA 电化学检测中具有极高的灵敏度（3.51 mA mM^{-1} cm^{-2}）。此外，该平台还具有检测限低（0.04 nM）、线性范围宽（1 - 5×10^6 nM）、选择性高、稳定性好、重现性强等特点，可用于实际鱼类样品中 HA 的检测。该方法在实际鱼类样品中的表现与高效液相色谱（HPLC）分析结果一致，表明其在方便、快速、高灵敏度地监测实际鱼类储存过程中的 HA 含量方面具有巨大潜力。

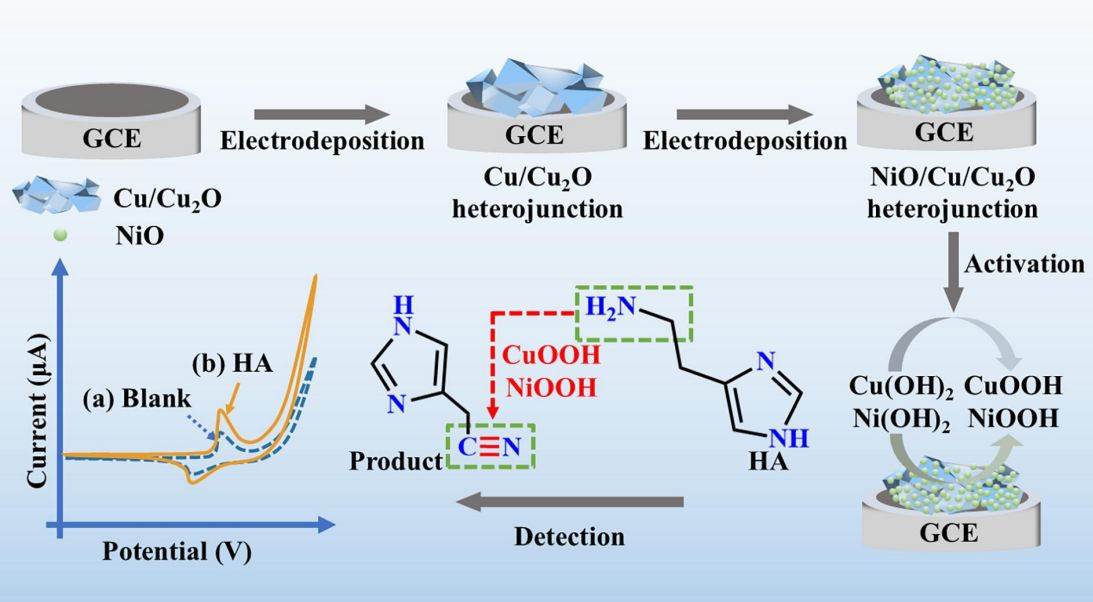


图 1. 在 NiO/Cu/Cu2O 上构建高效 HA 电化学检测平台的示意图。

关键字 电化学传感，快速检测技术，组胺

参考文献：

1. In-situ production of Histamine-imprinted polymeric materials for electrochemical monitoring of fish[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, **2020**, 311, 127902.
2. Commission Regulation (EU) No 1019/2013 of 23 October 2013 Amending Annex I to Regulation (EC) No 2073/2005 as Regards Histamine in Fishery products Text with EEA Relevance.
3. Grant, F. S. Fish And Fishery Products Hazards And Controls Guidance (Fourth Edition).

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

食源性致病菌分子检测及风险分析

夏许寒、邓锐杰*
四川大学

抗生素的滥用和环境变化会诱导食源性病原菌产生单碱基突变，从而导致耐药菌的产生和富集，对农业和食品安全构成持续威胁。目前常规方法包括基因测序和扩增阻滞突变系统-荧光定量聚合酶链式反应方法（ARMS-qPCR），基因测序需要较长的检测时间，而ARMS-qPCR 依赖专业实验室分析。在此，我们提出了一种基于扩增阻滞突变系统和重组聚合酶扩增（RPA）的可视化检测方法，即 ARMS-RPA，可解析与喹诺酮耐药性相关的 gyrA 基因中单碱基突变情况。通过在 RPA 引物中设计一个人工错配碱基，作为等位基因特异性探针，用于特异性扩增带有单碱基突变的基因。并且，利用 SYBR Green I（SG）染料在与双链 DNA 扩增子结合时的光敏活性设计信号转换策略，通过光催化以实现喹诺酮耐药沙门氏菌的可视化检测。所开发的 ARMS-RPA 方法能够在 35 分钟内检测到浓度低至 10 CFU/mL 的喹诺酮耐药沙门氏菌，无需细菌的预富集。该检测方法已应用于检测鸡蛋中单碱基突变介导的喹诺酮耐药性沙门氏菌，显示出其在食源性病原微生物污染监测中的应用潜力。

关键字 食源性病原菌；单碱基突变；恒温扩增；核酸检测；可视化分析

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

CRISPR 系统介导的食源性致病菌及铅污染分析方法研究

杨溟*
四川大学

食品质量与安全的保障是食品工业领域的核心内容。食源性致病菌及重金属等危害因子严重威胁食品安全。因此，食品危害因子和关键组分的快速准确检测，对食品质量与安全控制具有重要意义。然而，食品危害因子分析涉及的靶标分子种类多，且危害因子含量低，因此需要发展新型分子识别与传感放大技术，用于复杂食品体系中多靶标的高灵敏检测。CRISPR（规律间隔成簇短回文重复序列）系统作为可以实现靶标的识别和信号的扩增。报告人主要采用 CRISPR 系统构建传感分析方法，并结合功能核酸拓展了 CRISPR 的分子靶标范围，从而发展了一系列食源性致病菌及重金属铅等食品危害因子的快速检测方法。报告人积极探索了两类 CRISPR 系统中蛋白工具（如 Cas12a、Cas12f 和 Csm6）的基本原理。并且，有机结合等温核酸扩增策略与 Cas12 发展了一类具有单核苷酸多态性（SNP）分辨能力的核酸检测技术，应用于致病微生物耐药性的筛查；尤其基于 CRISPR/Cas III-A Csm6 的特殊原理，巧妙级联 DNAzyme 开发了一种皮摩尔水平的高灵敏食品中铅污染评估方法。

关键字 食源性致病菌；重金属铅；细菌耐药性；CRISPR；DNAzyme

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

基于旋转荧光阵列芯片和循环信号放大策的多种食源性致病菌同时快速检测方法

干宁*[1]、高柔怡[1]、刘白露[2]
1. 广东药科大学
2. 宁波大学

食品中致病菌的快速现场检测对食品安全至关重要。传统的微流控芯片虽有优势，但受限于流体控制装置和光学检测设备。我们研发的旋转荧光阵列微流控芯片，克服了这些局限。本课题研究了一种旋转芯片，可以现场、可视化并同时快速检测食品中的金黄色葡萄球菌、鼠伤寒沙门氏菌和副溶血性弧菌的含量，并可监测其增殖状况。

它利用适配体探针识别病原体，通过双盘的比例荧光信号实现检测。其具有三层结构，中间的 PDMS 层设有三个检测区域，上下两层为玻璃，这种结构使得芯片在 500r/min 的转速下运行 20min（整个检测时间不到 30min）就能发出放大的荧光信号，便于在线开展致病菌现场分析。

该芯片采用双盘循环辅助信号放大策略，将适配体及其互补 DNA 链分别固定在两个金盘电极上。当芯片旋转时，不同区域的适配体捕获目标细菌，目标菌在两个电极间游走，导致某一电极上双链 DNA 的累积。随后，通过插入 SYBR green 染料，产生放大的荧光信号，从而实现对目标细菌的检测。这种设计不仅减少了非特异性扩增，而且提高了检测的准确性和精度，假阳性率降低了 50%。

我们对该芯片进行了全面的性能评估。实验结果表明，该芯片能在 30min 内检测出食品样本中浓度为 7 - 39CFU/mL 的目标病原体。通过对实际样品（自来水、鱼和牛奶）的检测，验证了该方法的适用性，回收率在 90.2% - 103% 之间，相对标准偏差在 3.1% - 8.3% 之间。与传统的平板计数方法和基于基因检测（如 PCR，LAMP）芯片相比，我们的芯片具有显著优势。它实现了快速、现场、同时检测多种病原体，且整个过程可在便携式检测箱内进行，只需一部手机作为检测设备。

综上所述，旋转荧光阵列微流控芯片为食品中病原体的在线、同时、快速检测提供了一种高效、准确、便捷的方法，具有广阔的应用前景。

关键字 旋转荧光芯片，双盘循环放大，多元分析，食源性致病菌，同时在线分析

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

基于熵分析（EA）和因子聚类分析（FCA）对中国贵州五种茶的 20 种氨基酸、微量元素、热重参数等进行多指标分析

周利兵*、黄春丽
广西科技师范学院

本研究的目的是为五种茶叶构建全面评价体系，包括多个指标：燃烧热、燃烧性（茶叶燃烧稳定性）、脂肪含量、氨基酸含量、灰分含量、粗纤维含量和微量元素含量，使用灰色模式识别（GPR）、灰色主成分分析（GPCA）、灰色因子分析（GFA）、熵分析（EA）和因子聚类分析（FCA）。研究对象为五种茶叶，分别是都匀毛尖茶、黎平香茶、水城春茶、花溪茉莉花茶和遵义红茶。测定了五种茶叶的燃烧热、燃烧稳定性、脂肪、灰分、粗纤维、氨基酸和微量元素含量。五种茶样的燃烧热从 2610.18 到 5849.31 J/g 之间，燃烧热的顺序依次是：黎平香茶 > 水城春茶 > 都匀毛尖茶 > 遵义红茶 > 花溪茉莉花茶。五种茶的燃烧稳定性顺序依次是：花溪茉莉花茶、黎平香茶、水城春茶、都匀毛尖茶和遵义红茶。脂肪含量从 0.20%到 0.65%，平均值为 0.37%，其顺序是：黎平香茶 > 都匀毛尖茶 > 遵义红茶 > 花溪茉莉花茶 > 水城春茶。灰分含量从 4.75%到 5.58%，平均值为 5.21%，其顺序是：都匀毛尖茶 > 花溪茉莉花茶 > 水城春茶 > 黎平香茶 > 遵义红茶。粗纤维含量从 11.07%到 13.37%，其顺序是：黎平香茶 > 遵义红茶 > 都匀毛尖茶 > 花溪茉莉花茶 > 水城春茶。使用灰色主成分分析（GPCA）选取前三个灰色主成分共同代表五种茶中微量元素变异的 94.170%，就微量元素而言，五种茶的微量元素浓度顺序是：水城春茶 > 花溪茉莉花茶 > 都匀毛尖茶 > 黎平香茶 > 遵义红茶，水城春茶的质量最高，其次是花溪茉莉花茶。使用灰色因子分析（GFA），五种茶的氨基酸含量顺序是：水城春茶 > 花溪茉莉花茶 > 都匀毛尖茶 > 黎平香茶 > 遵义红茶。熵方法用于对茶样的营养价值进行排名，结果顺序是：水城春茶 > 花溪茉莉花茶 > 都匀毛尖茶 > 黎平香茶 > 遵义红茶。因子聚类分析（FCA）的应用表明，五种茶样可以分为三类，39 个变量可以分为三组。本研究的发现对于确定和全面评价多个茶叶质量指标具有重要的理论和实际意义。此外，该研究为中国贵州茶叶的营养、健康和分类研究提供了科学依据和研究意义。

关键字 茶；热重分析；ICP-OES；氨基酸；微量元素

参考文献：

1.Zhou L, Jiang C, Zhang Y. COMBUSTION STABILITY AND METROLOGICAL ANALYSIS OF MULTIPLE INDEXES OF 5 KINDS OF RICE[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(6):5499-5514.
2.Zhou L, Jiang C, Lin Q. ENTROPY ANALYSIS AND GREY CLUSTER ANALYSIS OF 8 CHINESE MEDICINAL HERBS[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(8B):9045-9062.
3.Zhou L, Jiang C, Lin Q. Entropy analysis and grey cluster analysis of multiple indexes of 5 kinds of genuine medicinal materials[J]. SCIENTIFIC REPORTS, **2022**,12(1):6618.

4.Zhou L, Jiang C, Zhong T, et al. Entropy analysis and grey correlation coefficient cluster analysis of multiple indexes of 5 kinds of condiments[J]. FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY, 2022,42:e81122.
5.Zhou L, Jiang C, Shi J, et al. GRAY PATTERN RECOGNITION AND GREY SYSTEM CLUSTER ANALYSIS OF MULTI-INDEXES OF FIVE KINDS OF TEA[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(3):2510-2521.
6.Zhou L, Zhang Q. MULTI-INDEX CHEMOMETRICS ANALYSIS OF FIVE KINDS OF TEA PRODUCED IN YUNNAN, CHINA[J]. FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN, **2022**,31(10):10342-10354.
7.Zhou L, Hou S. Multi-indicator analytical study of 18 trace elements and fat in 5 beans based on entropy analysis (EA) and gray pattern recognition (GPR)[J]. INTERNATIONAL JOURNAL OF FOOD PROPERTIES, **2024**,27(1):616-631.
8.Zhou L, Zhang Q. Multiple indicators metrological analysis for 5 kinds of tea produced in Yunnan, China[J]. FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY, **2022**,42:e70922.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

大蒜的时空品质评价

翁瑞*
中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所

大蒜是重要的药食同源植物，营养成分丰富，对人体具有重要的生理意义。但目前我国不同品种及产地大蒜中品质成分的含量水平和差异尚不清晰，大蒜生长储藏过程中的物质变化规律也缺乏系统研究。因此，本文分别基于液相色谱-高分辨质谱和液相色谱-串联质谱建立了大蒜中品质成分的非靶向和靶向代谢组学分析方法，并对我国 6 个省份 242 份大蒜样品的品质差异进行了研究，为大蒜的品种选育和深加工产品原料的选择提供了数据基础。随后，对山东（金蒜 3 号、金蒜 4 号、金乡白皮）和黑龙江（阿城紫皮）大蒜生长过程中的物质累积模式和代谢通路进行了研究，明确了品质成分在大蒜不同组织间的分配和转运规律，为大蒜品质的形成机理提供了数据依据，并针对加工消费需求提出了合理的采收建议。在此基础上，对常温和低温储藏条件下大蒜中品质成分的动态变化进行了分析，并可通过回归模型对大蒜在冷库中的储藏时间进行预测，为大蒜的科学合理储藏提供了参考依据，并为不同储藏阶段大蒜的充分利用提供了科学信息。由此，本文基于代谢组学技术，对不同品种、产地、生长期和储藏起大蒜开展了时空品质评价，为大蒜的品种培育和品质提升提供了有力的数据和理论支撑。

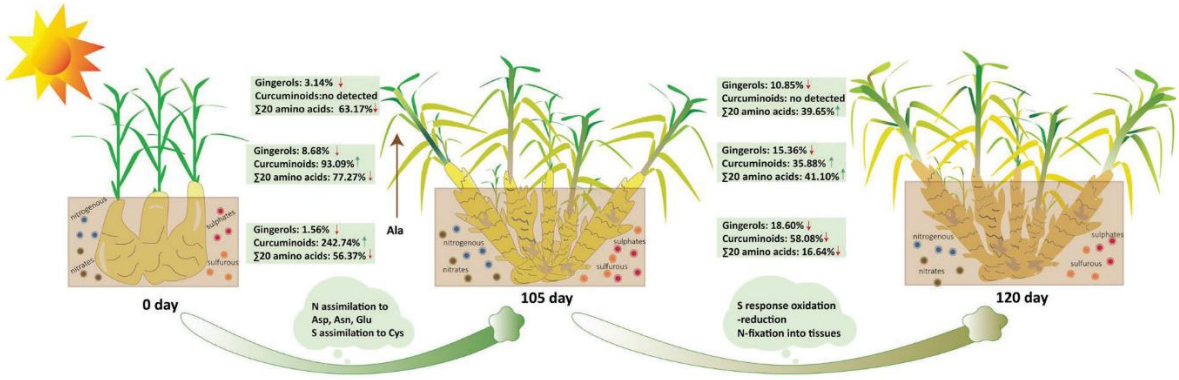
关键字 大蒜；时空品质；代谢组学；质谱；有机硫化合物

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

莱芜大姜不同组织在生长过程中生物活性成分的积累和转运

赵银峰、刘秀华、蒋宜轩、王天润、张朝阳、翁瑞*、邱静、钱永忠
中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所

生姜具有广泛的生物活性，被用作新鲜蔬菜、调味品和中药的历史悠久。生姜不同组织在生长过程中生物活性成分的组成、积累和转运模式仍不明确。应用靶向代谢组学研究了生长过程中叶、茎和根茎中姜黄素、姜辣素和氨基酸的变化规律。此外，姜辣素和姜黄素在叶片、茎和根茎中的浓度差异较大，几乎积累于根茎。而姜酮和 1-脱氢 -6 - 姜酮在生长过程中始终在叶片和茎中保持中等含量。根茎中的赖氨酸、天冬酷胺和甲硫氨酸主要来源于氮和硫酸盐代谢，在旺盛生长期积累，并在 90 天时被大量消耗用于生姜快速生长。化学计量分析表明，茎在 60 天时逐渐过渡到内始式，丙氨酸和天冬氨酸在 0 - 75 天从根茎向叶片的迁移导致活性成分相反的分布模式。氨基酸通过氨酰 tRNA 合成途径固定到组织中，是成熟过程中的主要途径。此外，延迟收获策略诱导姜黄素和氨基酸逆向茎叶运输以及姜酚降解，生姜营养价值降低。对生姜中关键成分的分布和运输的新见解，可有效指导高价值收获和促进产品开发。



关键字 生姜；组织；生长过程；靶向代谢组学；生物活性成分

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

基于水凝胶中多孔材料诱导生成纳米金的比色贴片 用于硫化氢抗湿高敏检测

孙裕鑫、傅迎春*、袁磊、马彤彤、荣艳娜、应义斌
浙江大学

硫化氢（H_2S）作为腐败的评价指标，能够精确地反映食品新鲜程度。比色传感器因其低成本、结果可视化等优势在 H_2S 快速检测领域受到广泛关注。然而，实验室中常用的定量方式依赖于复杂、昂贵的设备，限制了比色传感器的广泛应用。市售的 H_2S 检测试纸灵敏度有限，受环境中湿度的干扰显著，不适合应用于包装内食品新鲜度监测。因此，提升比色传感器的灵敏度和稳定性，开发与之配套的便捷式检测装置成为增强比色传感器在新鲜度监测上应用的关键。在此，我们提出一种基于水凝胶环境下多孔材料诱导生成纳米金颗粒并结合智能手机图像分析的比色水凝胶贴片用于食品包装内 H_2S 气体监测。利用金属有机框架（MOFs）预还原的机制，实现弱还原剂在常温/低温下生成金纳米粒子（AuNPs）并引起颜色改变，显著提高了检测的灵敏度。借助水凝胶作为载体，进一步构建了气-液-固三相传感器用以检测 H_2S 气体。水凝胶三维网络结构为 MOFs 提供了丰富的负载位点，丰富的含水量提供微观水环境，赋予传感器优越的抗湿度、抗气流速度干扰能力，使其在多变化环境下能够保持对 H_2S 的长时间监测。该传感器对 H_2S 的检测表现出令人满意的性能。在 0.05-12 ppm 浓度范围内具有良好线性关系，检出限低至 14 ppb，相比于市售试纸降低两个数量级。藉此，结合智能手机构建了便携式智能监测系统，借助手机自带图像分析处理技术，获取检测信号并实时分析。该技术可望成为一类抗湿度干扰和高灵敏比色分析新策略，并为食品新鲜度监测提供新手段。

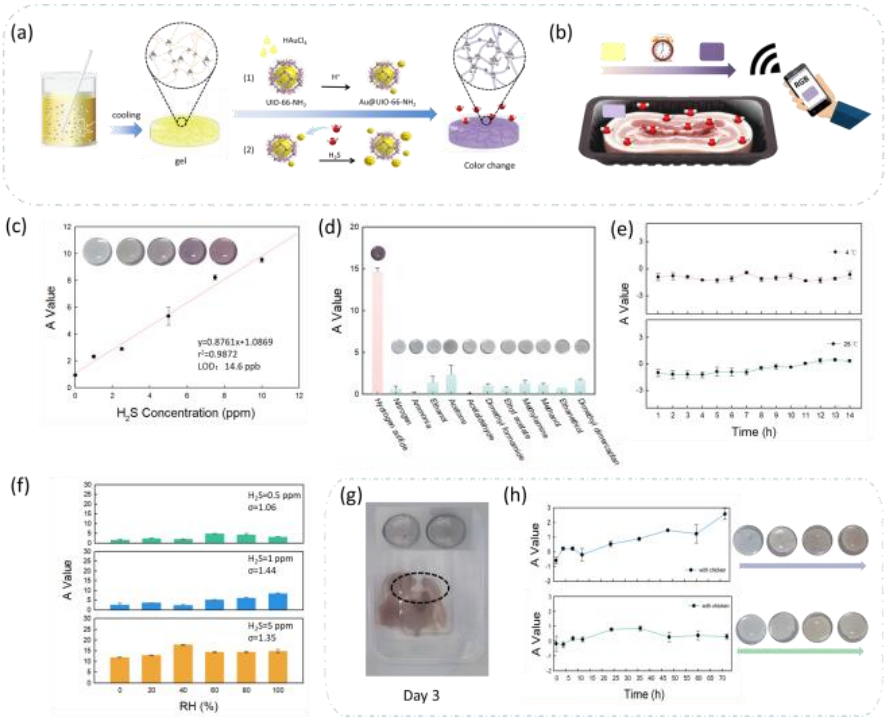


图1 (a)水凝胶贴片的制备和对H2S响应；(b)包装内肉制品新鲜度监测；(c)水凝胶贴片的A值

随H2S浓度变化的线性关系；(d)谁凝胶贴片对11气体的抗干扰能力；(e)水凝胶贴片在4℃和室温下的稳定性；(f)水凝胶贴片在不同湿度下对0.5、1、5 ppmH2S气体的响应；实际应用：(g)实际监测装置；(h)4°C和室温下水凝胶贴片A值随时间变化。

关键字 水凝胶；MOF；比色；硫化氢；无损监测；新鲜度

参考文献

1. Lin Zhang, Yuxin Sun, Li Peng, Wenzhang Fang, Qiao Huang, Jie Zhang, Ziyan Zhang, Hang Li, Yingjun Liu, Yibin Ying, Yingchun Fu*. Adv. Sci. 2022, 10, 2204702.

分会场：35.食品分析
交流类型：报告

乳铁蛋白热稳定性和铁饱和度的差示扫描荧光法检测

孙娜娜、赵婉怡、杨孟迪、黄珍、徐秦峰*
陕西科技大学

乳铁蛋白(LF)的热稳定性和铁饱和度被认为是评估其生物活性变化和设计提取、干燥工艺的关键技术参数。差示扫描量热法(DSC)是一种成熟而有效的 LF 热稳定性和铁饱和度检测方法。然而，多个 DSC 测量通常顺序执行，因此耗时和低通量。本研究引入纳米差示扫描荧光法(nanoDSF)来克服这些局限性。NanoDSF 主要用于监测蛋白质展开过程中色氨酸(Trp)残基和酪氨酸(Try)在温度梯度上的固有荧光变化，测量的 LF 熔解温度与 DSC 测定的温度一致。在此基础上，建立了一种利用 LF 铁饱和度与 DSF 测量值的线性相关来测定铁饱和度的定量方法。NanoDSF 方法具有简单、廉价、快速(<3 min)、高通量(>48 个样品/实验)等优点。

关键字 热稳定性；乳铁蛋白铁饱和度；差示扫描荧光法

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

中空纤维萃取结合液质联用检测火锅底料中罂粟壳成分

倪永付*[1]、王志宏[2]、魏俊英[1]
1. 济宁海关综合技术服务中心
2. 龙口海关综合技术服务中心

建立了火锅底料中罂粟碱、那可汀、蒂巴因、吗啡、可待因成分的检测方法。设计制作了一种中空纤维萃取装置（图 1），引入了流动注射模块、搅拌加热模块、氮吹干燥模块，能够实现对中空纤维萃取过程溶剂流速、溶剂温度、搅拌速度、萃取时间的模块化控制，减少人为因素的影响，提高分析检测效率。样品使用甲醇：乙腈=1：9 混合溶剂提取，经中空纤维萃取后，采用 Agilent Poroshell 120 EC-C18 色谱柱，以甲醇-0.1%甲酸水为流动相进行梯度洗脱，在电喷雾离子源、多反应监测模式下进行测试。结果表明，罂粟碱、那可汀、蒂巴因在 5~100μg/L，吗啡、可待因在 25~500μg/L 范围内线性关系良好，5 种化合物的平均回收率为 64.9%-85.8%，精密度为 1.6%-12.4%。该方法适用于火锅底料中罂粟壳成分的检测。

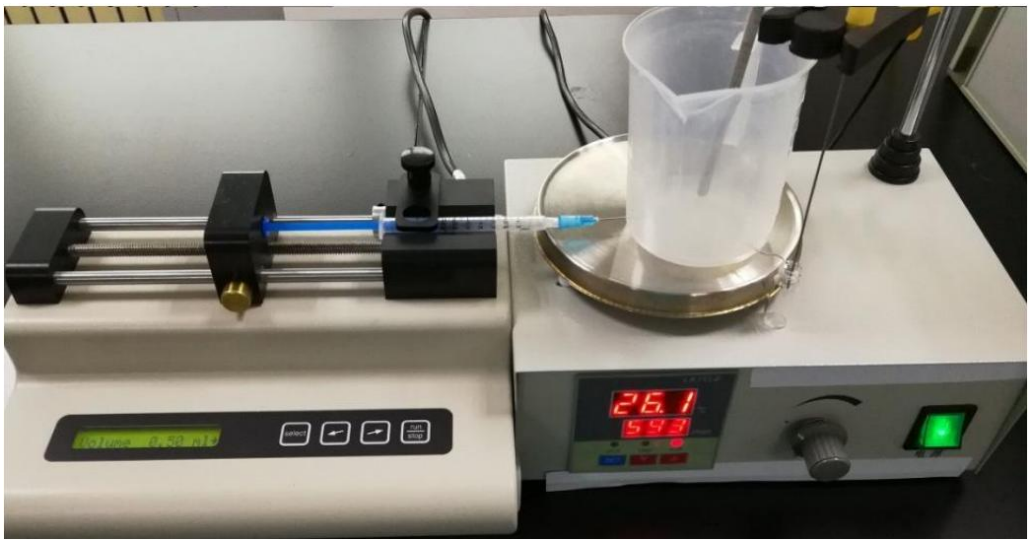


图 1 中空纤维萃取装置实物模型图

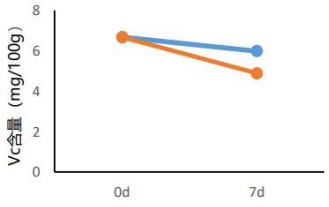
关键字 中空纤维萃取；液质联用；火锅底料；罂粟壳成分

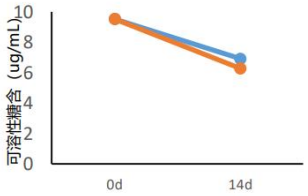
分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

水果营养及风味分析在冰箱气调保鲜技术效果的应用

孙秀娇 SUN Xiujiao*、朱燕、孙永才
青岛海尔电冰箱有限公司

民以食为天，食以安为先。近年来冰箱关注由食材的“存储”向“保鲜”转变，有研究表明，气调冰箱在水果感官、失重率、结露量等传统指标[1]上有明显保鲜优势，但是对于以水果营养风味分析为手段，应用于冰箱保鲜的鲜有报道。本文以具有气调保鲜功能冰箱提供气调环境，对气调抽屉与普通冷藏果蔬抽屉存储水果营养指标[2][3] [4]及风味[5]的影响进行研究。结果表明，营养方面，水蜜桃存储 7d 后，气调组 Vc 损失率为 10.48%，对组为 26.80%；猕猴桃存储 14d 后,气调组可溶性糖损失率 27.27%，对照组 34.02% ；存储 21 天后，气调组花青素降解率为 9.18 %，对照高达 19.11 %。说明气调组的低氧环境，具有降低水果呼吸速率、延缓食材营养流失的显著保鲜优势[6]。 风味方面，香蕉存储 7d 后，主要风味成分为酯类、醇类和醛类，50 余种， 气调组正己醛、乙酸异丁酯、反式-2-己烯醛等关键贡献风味 10 种含量均高于对照组，气调组总含量为 83.30ug/g，而对照组为 60.08 ug/g。气调环境能提水果风味水平，与研究一致[7]。本研究为食品测试在冰箱气调技术保鲜验证方面的应用及气调对果蔬保鲜效果研究和进一步发展提供了一定的实验数据和技术依据。





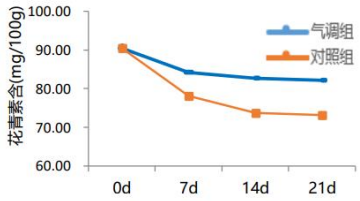


图 1 有无气调冰箱 7d 水蜜桃 Vc 变化　图 2 有无气调 14d 猕猴桃可溶性糖变化　图 3 有无气调 21d 蓝莓花青素变化

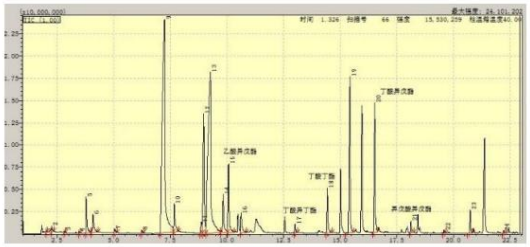


图 4 气调组 7d 香蕉香气成分峰图

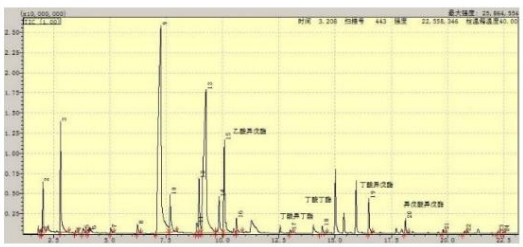


图 5 对照组 7d 香蕉香气成分峰图



图 6 有无气调组冰箱存储 7d 香蕉主要风味成分分布图

关键字 气调保鲜 食品保鲜 营养 挥发性香气成分

参考文献

1. 张宇佳，蔡宁. 电冰箱保鲜的行业现状分析[C].第十四届全国电冰箱（柜）、空调机压缩机学术年 会论文集，103-109.
2. "食品安全国家标准 食品中抗坏血酸的测定".GB 5009.86-2016.2016.
3. 赵轶鹏, 赵新勇. 植物体可溶性糖测定方法的优化 [J]. 安徽农业科学, 046(4):184-185.
4. 李建伟. "pH 示差法测定山楂中花青素的含量." 长治医学院学报 29.3(2015):3.
5. 陈存坤,王文生,冯炯琦,等.用 SPME 方法分析不同贮藏方式厚皮甜瓜香气成分的研究[J]. 食品工业科 技, 2008(12):4.DOI:CNKI:SUN:SPKJ.0.2008-12-069.
6. 吴齐. 气调保鲜技术在我国的应用及前景展望[J]. 农业展望, 2009(04):42-45.
7. 罗峻渲. 气调贮藏对和田红杏贮藏品质及挥发性成分的影响. Diss. 新疆农业大学, 2023.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

借助 APGC-QTOF 技术鉴定芦荟果肉中异味物质

池可心、李慧、冯昕韡*、胥颖
可口可乐饮料（上海）有限公司

库拉索芦荟（Aloe barbadensis）富含多糖、蛋白质、膳食纤维等营养成分，广泛应用于果味饮料、酸奶、果冻、罐头等食品中。在食品生产中，芦荟果肉的加工工艺如果选择不当，容易呈现出令人不适的气味，大大影响消费者的感官体验，降低其经济价值，因此对芦荟加工过程中的工艺处理和气味控制显得尤为重要。

本文利用气相色谱嗅闻质谱联用仪（GC-O-MS），采用固相微萃取（SPME），结合 NIST2020 数据库，在经过加工后的芦荟果肉中检测嗅闻到多种挥发性成分，嗅闻分析确定了若干具有类氯异味的化合物，但在数据库中未匹配到结果。在气质联用中电子轰击（EI）的高能量（70eV）会导致分子大量碎裂，难以推断判别分子离子，对于未知化合物鉴定带来一定难度。

大气压气相色谱电离源（APGC）是在大气压中进行化学电离，用电晕针产生的等离子体提供反应离子以电离目标分子的离子源，在气质联用中作为电子轰击（EI）技术的替代，完成“更软”的电离，APGC 与高分辨飞行时间质谱（TOF）联用可以更容易得到分子离子，同时获取目标化合物的精确质量数信息，辅助未知化合物鉴定。本文采用 APGC-QTOF 的软电离技术来鉴定异味未知化合物，分离条件与 GC-O-MS 保持一致，利用保留时间对未知化合物进行定性，得到其分子离子信息，进而得到元素组成后用于鉴定其化合物结构信息。鉴定结果最终为芦荟果肉加工工艺改进提供指导，对芦荟果肉气味品质改良提供了重要的理论依据。

关键字 芦荟异味，GC-Olfactometry，APGC-QTOF，未知物鉴定

参考文献

1. E. Canellas, P. Vera, C. Domeño, P. Alfaro and C. Nerín, Journal of Chromatography A, **2012**, 1235, 141-148.
2. K. Shen, Q. Wan, Y. Tang, Y. Xiong, F. Hu, L. Wen, Guangdong Chemical Industry, **2022**, 49(02), 41-43.
3. Q. Su, P. Vera, C. Van de Wiele, C. Nerín, Q. Lin and H. Zhong, Talanta, **2019**, 202, 285-296.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

基于挥发性成分检测和机器学习建模的玉米新陈度分析

李盼盼[1,2]、郭瑞*[1]、张晓莉[3]、杨永坛[1,2]
1. 国家粮食和物资储备局科学研究院
2. 河南工业大学粮油食品学院
3. 岛津企业管理（中国）有限公司创新中心

采用固相微萃取-气相色谱-三重四极杆质谱联用（SPME-GC-MS/MS）技术建立了玉米挥发性成分无损靶向检测方法。在中国北方七个玉米主产省于 2019-2023 年份收获的 285 个玉米样品中，共鉴定出 99 种挥发性成分。结合挥发性风味组学和多元统计分析，根据主成分分析[1]（PCA）和偏最小二乘判别分析[2]（PLS-DA）中变量投影重要性（VIP）值大于 1.5 的原则，筛选出不同收获年份玉米中含量有显著变化规律的 8 种挥发性成分，分别是 2-乙酰基呋喃、苯并噻唑、糠醛、5-甲基呋喃醛、乙酸、异戊酸、苯甲酸丁酯和反-2-壬醛，可作为玉米新陈度分析的潜在特征差异化合物。采用支持向量机（SVM）、梯度提升（GBC）和多层感知（MLP）等机器学习算法构建玉米新陈度分析模型，对未知样品的新陈预测准确度可达到 96.5%以上，表明分析模型可靠性良好。该研究为基于挥发性成分检测的玉米新陈度分析提供了参考思路，将为储藏玉米的适时更新轮换提供指导，对保障国家粮食安全和节粮减损具有重要意义。

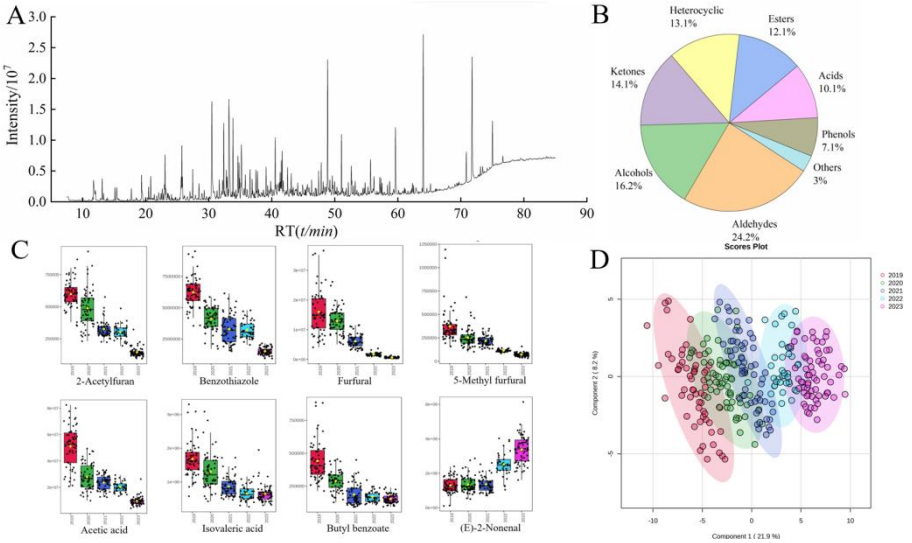


图 1 玉米挥发性成分分析结果：A 总离子流图; B 挥发性成分分类; C 特征差异化合物箱线图; D PLS-DA 得分图

关键字 SPME-GC-MS/MS；玉米；新陈度；机器学习

参考文献

1. Guo W, Cheng M, Dong X, Liu C, Miao Y, Du P, Chu H, Li C, Liu L. Food Res Int. **2024**, 192:114751.
2. Sirilertpanich P, Ekkaphan P, Andriyas T, Leksungnoen N, Ruengphayak S, Vanavichit A, De-Eknamkul W, Tansawat R. Food Chem. **2024**, 434:137424.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

啤酒与黄酒中有机酸含量的对比分析

孙元社*、曹佳佳、白纪翠、李彤
依利特(苏州)分析仪器有限公司

有机酸是构成啤酒酸味的主要成分，其种类及含量对啤酒风味、缓冲容量及 pH 值都有重要影响。同时，酿造过程中有机酸的变化是评价发酵工艺的重要指标。而对于黄酒，有机酸是黄酒产香的前体物质，也能有效增强黄酒的浓厚感，降低甜度，并且具有缓冲、协助其他香味成分的作用。本文首先建立了一种反相高效液相色谱法分析 10 种常见有机酸，并进行了方法学验证。在依利特 EClassical 3200L 高效液相色谱系统上，采用 SinoPakAQ-C18 5μm, ID4.6mm×250mm 色谱柱，以 0.1%磷酸二氢钾水溶液(磷酸调至 pH=3)为流动相，流量为 1.0 mL/min，检测波长为 UV215nm；10 种有机酸得到了基线分离(图 1)，保留时间 RSD 均小于 1%，峰面积 RSD 均小于 2%，重复性良好；在 0.1-200 mg/L 浓度范围内线性关系良好，相关系数 r 均大于 0.999，加标回收率在 81-108%之间。然后，对市售 6 种品牌的啤酒和 3 种品牌的黄酒进行含量测试。结果显示，市售的 6 种品牌啤酒，除啤酒 1 和 2 未检测到酒石酸和 a -酮戊二酸，其他 4 种啤酒均检测到 10 种有机酸，各款啤酒样品的有机酸总含量在 1000-2000 mg/L 左右，而啤酒 6(精酿)最高为 7608.26 mg/L。啤酒中有机酸以柠檬酸、琥珀酸、乳酸、乙酸为主，含量较低的是草酸、丙酮酸、苹果酸、富马酸、酒石酸、a -酮戊二酸。常见市售的 3 种品牌黄酒样品均检测到 10 种有机酸，有机酸总含量在 6000-8000mg/L 左右，其中乳酸含量最高(4000-5000mg/L)，其次为草酸、酒石酸、乳酸、乙酸、柠檬酸、琥珀酸，含量较低的是苹果酸、丙酮酸、a -酮戊二酸、富马酸。另外，黄酒的总有机酸含量是啤酒的 2-3 倍(图 3)。

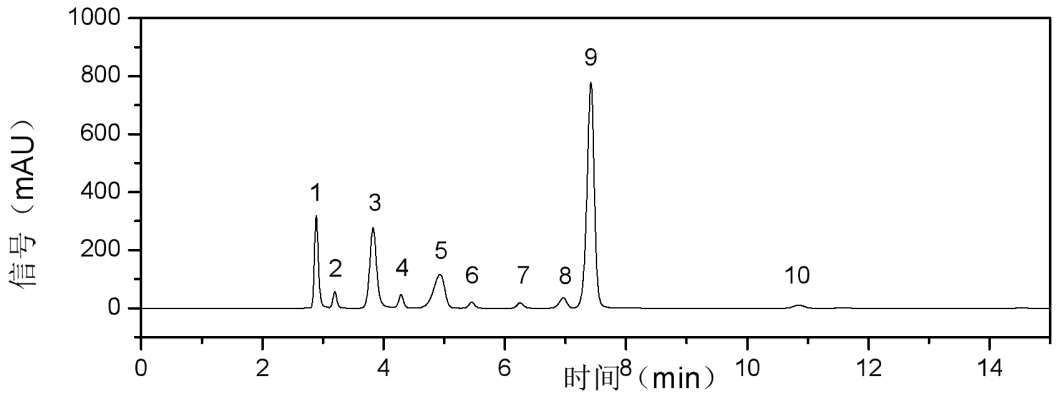


图 1　10 种有机酸典型分离色谱图

1 草酸、2 酒石酸、3 丙酮酸、4 苹果酸、5　-酮戊二酸、6 乳酸、7 乙酸、8 柠檬酸、9 富马酸和 10 琥珀酸

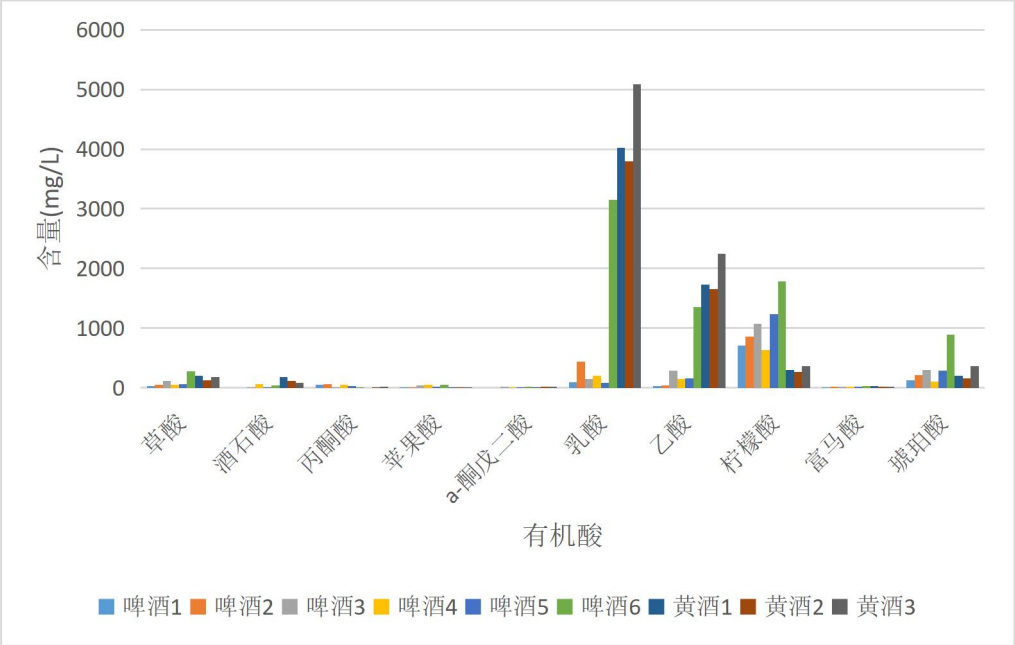


图 2　啤酒与黄酒中各种有机酸含量分布图

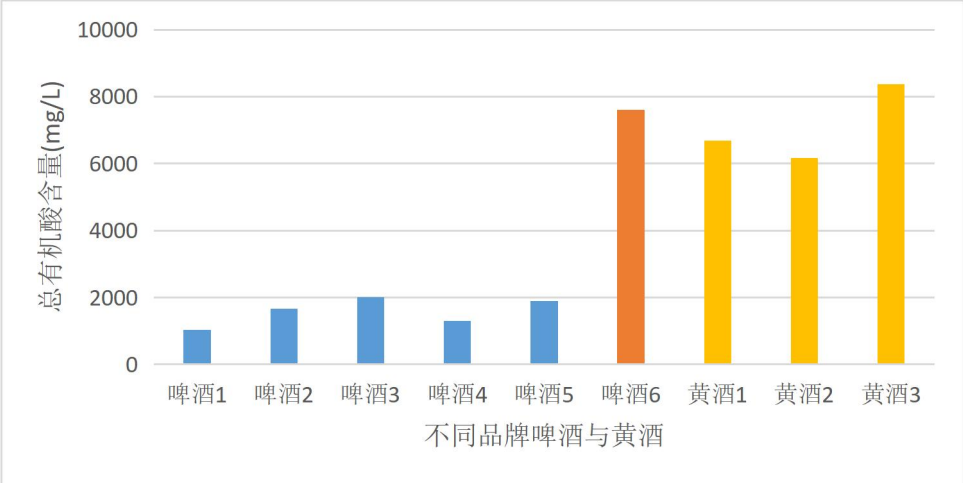


图 2　啤酒与黄酒中总有机酸含量对比图

关键字 酒，有机酸，液相色谱

参考文献

1. 杨毅，李崎，陈蕴，顾国贤.反相高效液相色谱法(RP-HPLC)测定啤酒中有机酸[J]食品与发酵工业,2003,29(8):6-12.
2. 冯德明,张洋,赵惠明,等.反相高效液相色谱法测定黄酒中的有机酸[J].中国酿造,2009.03:157.
3. 高云超,宫晓波,杨春英,等.广东客家黄酒 10 种有机酸的 HPLC 分析[J].酿酒科技, 2021.04：106.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

双增强型酶级联杂交水凝胶用于尿素灵敏检测

邹睿琦、李红霞*
吉林大学

本文设计了一种高效的双增强型酶级联杂交水凝胶，用于灵敏准确地检测尿素。基于静电接触效应和水凝胶定向限制效应得以实现铁基纳米酶（Fe-DNA）和天然酶（脲酶）的高效酶级联组装。与游离酶系统相比，酶级联杂交水凝胶具有优异的稳定性，并提升了整体的反应速率，适合实际应用与制造生物传感器。借助水凝胶的可塑性，构建了以酶级联杂交水凝胶为目标识别和信号放大单元的便携式比色平台，该平台对尿素的线性检测范围为0.06-6.25 mmol L^{-1}。通过图像处理算法，水凝胶管的颜色信息被转换为 RGB 色彩空间，无需精密仪器即可直接获取尿素残留信息。

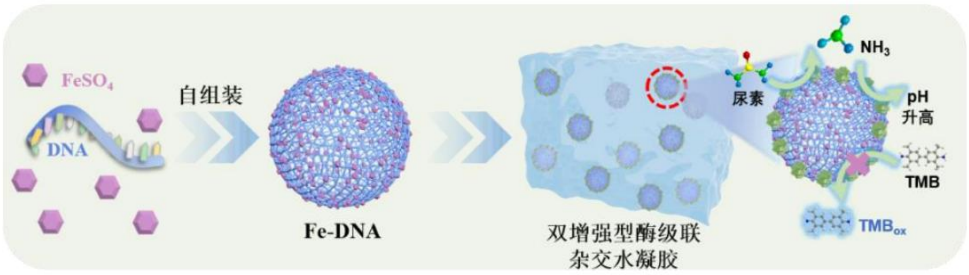


图 1. 双增强酶级联系统检测尿素示意图

关键字 酶级联，水凝胶，尿素检测

参考文献

1. Y. Xiong, S. Tsitkov, H. Hess, O. Gang, Y. Zhang, ACS Nano, 2022, 16, 10383-10391.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

一种啤酒中嘌呤含量的 HPLC 分析方法开发与验证

曹佳佳、孙元社*、李彤
依利特(苏州)分析仪器有限公司

痛风是由于嘌呤代谢紊乱引起血中尿酸浓度过高，尿酸盐结晶沉积于关节、软骨和肾脏等处而引起的代谢性疾病。研究发现，大量摄入红肉或海鲜可以增加痛风患病的风险。酒精也会增加痛风患病风险，啤酒的作用大于白酒，可能是因为啤酒里嘌呤含量高。痛风患者除采用药物治疗外，必须控制饮食，避免摄入过多嘌呤类物质，因此检测和控制啤酒中嘌呤类物质的含量十分有必要。

本文建立了同时测定啤酒中 4 种嘌呤(腺嘌呤、鸟嘌呤、黄嘌呤、次黄嘌呤)含量的高效液相色谱法。采用 Supersil HILIC-ARG (5um, ID 4.6×250mm)色谱柱，以乙腈/0.1%甲酸水溶液(pH=5)=75/25 为流动相，流速为 1.0 mL/min，检测波长为 UV254nm 的色谱条件进行分析，系统性考察了重复性、线性、检出限、定量限和加标回收率等指标。结果表明：4 种嘌呤分离效果良好，且峰形对称；保留时间和峰面重复性良好；在 0.25~500 mg/L 浓度范围内线性相关系数 r 均大于 0.999；检出限为 0.053~0.163 mg/L；加标回收率为 81~102%。6 种市售啤酒样品均可测出腺嘌呤、次黄嘌呤、黄嘌呤和鸟嘌呤，其总嘌呤含量分别为：37.09 mg/L，61.49 mg/L，77.35 mg/L，44.50 mg/L，75.12 mg/L 和 119.24 mg/L。该方法快速、方便、精确，适用于啤酒中 4 种嘌呤类物质的定量检测。

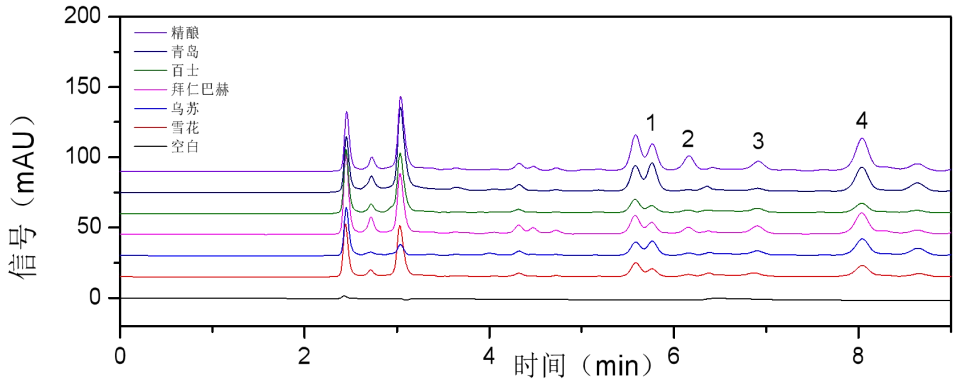


图 1 不同啤酒样品中嘌呤检测的色谱图
1. 腺嘌呤，2. 次黄嘌呤，3. 黄嘌呤，4. 鸟嘌呤

关键字 啤酒，嘌呤，高效液相色谱，方法学验证

参考文献

1. C. Lu, W. Yu, H. Yu, *Chinese Journal of Health Laboratory Technology*, **2012**, 22, 2335-2337.
2. L. Zheng, R. Wang, H. Le, X. Chen, *Modern Food*, **2021**, 15, 205-209.
3. H. Wang, R. Wang, D. Fu, Z. He, Y. Li, *Liquor-Making Science & Technology*. **2008**,10,107-110.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

气相色谱质谱联用法测定茶叶中有机氯类农药

冯秀琳、任旭、段江粉、杨金辉*
新疆大学

茶叶中有机氯类农药（OCPs）的残留超标问题备受关注，虽然世界各国及有关部门均加大了对其监测力度，但因茶叶中色素含量高、基质干扰大和农残种类多等原因，给其检测带来了较大难度。因此，开发一种快速、简单、环境友好的茶叶预处理技术，提高茶叶中OCPs 的分析效率和准确性，是保障茶叶安全的有效手段。

本研究拟以有机氯类农药六六六（BHC）为研究对象，采用气相色谱-质谱联用技术（GC/MS），实现对 BHC 的快速测定。茶叶经乙腈提取、固相萃取净化和丙酮洗脱浓缩，经 DB-5MS 色谱柱程序升温分离，选择离子模式测试。方法在 0 μg·mL^{-1}～1.0 μg·mL^{-1} 范围内线性良好，相关系数 r^2 为 0.9916～0.9998，方法检出限为 0.0100 μg·mL^{-1}～0.0223 μg·mL^{-1}。加标浓度分别为 0.1 μg·mL^{-1} 和 1.0 μg·mL^{-1} 时，该法的平均加标回收率为 91.00 %～112.20 %。结果表明，该法操作简单，灵敏度高，回收率好，适用于茶叶中 BHC 的快速检测。

关键字 茶叶；六六六；样品前处理；气相色谱-质谱联用

参考文献

1. X. Xu, S. Wang, S. Hou, Z. Li, Z. Lu, S. Liang, *Agronomy*., **2022**, 12, 2479.
2. P. Borah, R. Biswas, *Measurement*., **2023**, 221.
3. F. Huo, H. Tang, X. Wu, D. Chen, T. Zhao, P. Liu, L. Li, *J Chromatogr B Analyt Technol Biomed Life Sci*., **2016**, 1023-1024, 44-54.
4. S. Miao, Y. Wei, Y. Pan, Y. Wang, X. Wei, *Compr Rev Food Sci Food Saf*., **2023**, 22, 2945-2976.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

基于钙钛矿纳米晶体构建提升传感性能的水凝胶生物传感器

胡亚楠、李红霞*
吉林大学

本文提出了三位一体的合成策略，通过将 Mn(II)取代，$CsPb_2Cl_5$ 惰性壳和 NH_2-PEG-COOH 涂层相结合来设计 Mn^{2+}掺杂的 $CsPbCl_3/CsPb_2Cl_5$ 核/壳异质钙钛矿纳米晶体（PMCP PNCs）。这种核壳异质构型赋予了 PMCP PNCs 优异的水稳定性和氧敏感性。鉴于其纳米结构和特性，将 PMCP PNCs 作为光致发光指示剂来构建用于超灵敏农药检测的水凝胶生物传感器。得益于 PMCP PNCs 的双酶触发响应特性，水凝胶生物传感器对毒死蜱具有 ng/mL 水平的超高灵敏度。这种基于 PMCP PNCs 的强大水凝胶传感器可以提供准确的农药信息，对食品安全、环境保护和精密农业具有益处。

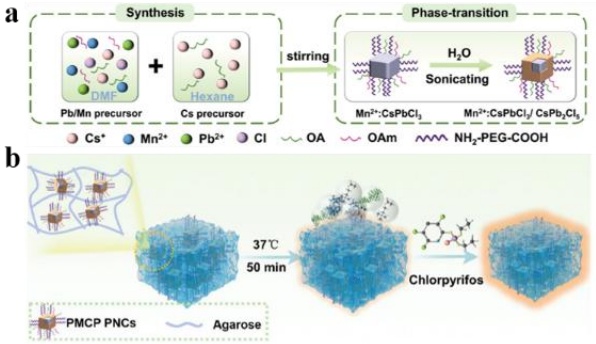


图 1.（a）PMCP PNCs 合成流程图；（b）水凝胶生物传感器合成检测流程图。

关键字 水凝胶，钙钛矿，生物传感

参考文献

1.B. Das, P. Gupta, *Coord. Chem. Rev*, **2024,** 504, 215656.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

多谱联用技术在新食品风险筛查中的应用

夏金涛*、朱松松、吴婉琴、江丰、张莉
湖北省食品质量安全监督检验研究院

目的：对暗示具有减肥功效的果蔬梅进行专项筛查，对其中可疑的新型非法添加物进行分离、鉴定和定量研究。方法：在自建质谱数据库的基础上，采用超高效液相色谱-四极杆飞行时间串联质谱仪对十余批次果蔬梅进行非靶向筛查，在一批次果蔬梅中发现一种新型双酯化酚汀的类似物。类似物经柱层析色谱分离纯化后，利用一维和二维核磁共振波谱对其结构进行了解析，确证了其分子结构。在获得高纯参照品后，通过超高效液相色谱建立了定量分析的检测方法。结果：在 MS2 谱图中出现质荷比为 224 和 196 的特征碎片离子，表明类似物具有酚汀的母核骨架。结合质谱质荷比为 428，334，83 的特征碎片离子、拟合的化合物分子式及计算得到的不饱和度，推测酯化酚汀的酸酐可能为环己基甲酸酐；核磁共振波谱分析验证了我们的猜想，最终将类似物命名为双环己基甲酰酚汀。进一步通过从头合成策略制备了双环己基甲酰酚汀，通过比对精准确证了化合物的分子结构。高效液相色谱检测方法开发结果表明该方法灵敏度高，准确性好。结论：据我们所知，双环己基甲酰酚汀不属于食品添加剂，在结构上它是酚汀经双环己基甲酰化后得到的产物。该物质在食品中的违法添加行为将对不知情的消费者造成未知的伤害，需要引起相关部门的重视。

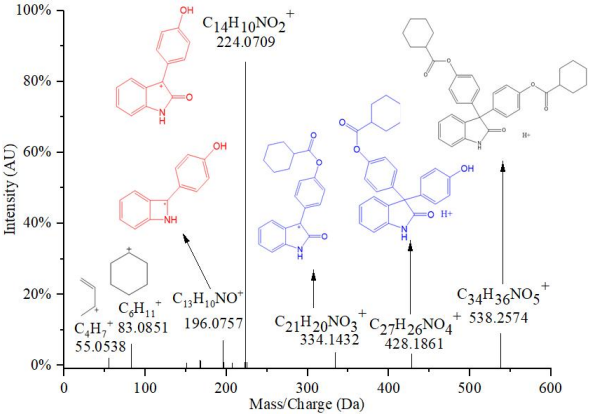


图 1. 双环己基甲酰酚汀的碎片离子图

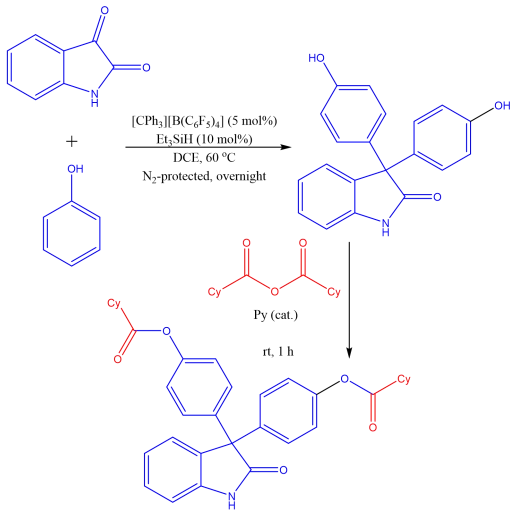


图 2. 双环己基甲酰酚汀的制备流程

图 3. 双环己基甲酰酚汀的 ^{1}H NMR 谱图

图 4. 双环己基甲酰酚汀**的 ^{13}C NMR 谱图**

关键字 保健食品，非法添加，酚汀类似物，结构确证，定量分析

参考文献

1. J. Yun, K.J. Shin, J. Choi, *et.al*, *Forensic Sci. Int.*, **2018**, 286, 199-207.
2. J.X. Zhang, S. Zhang, H. Yu, *et.al*, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2023**, 230, 115391.
3. J.T. Xia, W.Q. Wu, S.S. Zhu, *et.al*, Food Mach. **2023**, 40, 21-27.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

乳及乳制品中高氯酸盐的快速荧光检测方法

李艳妮[1]、闵婉妮[1]、安瑜[2]、康婕[2]、邓帆[1]、朱懿杰[1]、徐秦峰*[1]
1. 陕西科技大学
2. 陕西省产品质量监督检验研究院

高氯酸盐是一种新型持久性、可迁移的环境污染物，经由食物链逐级富集累积后会对农产品和食品安全构成威胁。本研究建立了一种乳品中高氯酸盐的快速荧光检测方法，该方法基于金属多吡啶钌配合物的聚集诱导发光效应，可通过荧光信号增强或荧光颜色的变化来检测溶液中的高氯酸盐，结合样品前处理方法，实现了对乳及乳制品中高氯酸盐的高灵敏定量检测,检出限低至 3 ppb，该方法检测速度快、灵敏度高、选择性强、成本低，对操作人员要求较低，可应用于不同场景的高氯酸盐快速检测，在食品安全、环境保护和公共卫生等领域具有重要意义。

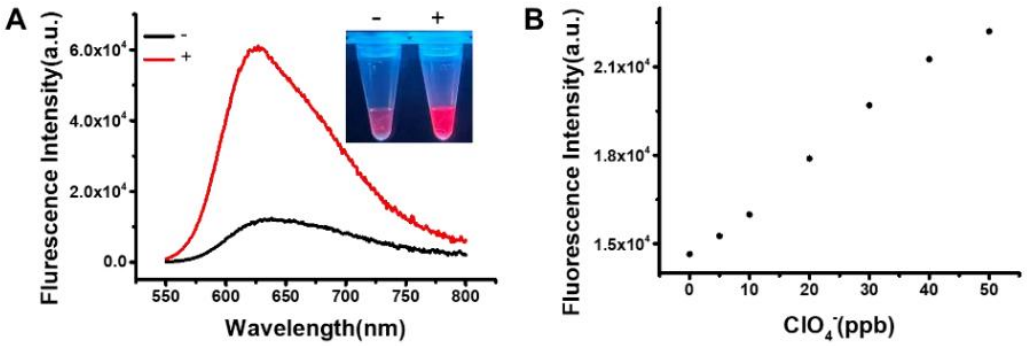


图 1 高氯酸盐荧光检测性能。（A）荧光光谱图（插图：颜色对比图；-：不加高氯酸盐；+：加高
氯酸盐），（B）荧光强度与不同浓度高氯酸盐响应关系图

关键字 高氯酸盐；金属多吡啶钌配合物；聚集诱导发光效应；乳及乳制品；食品安全

参考文献

1. S. Kim, J. Kim, D. Lee, Angew. Chem. Int. Ed., **2021**, 60, 10858-10864.
2. Z. Su, Y. Li, J. Li, X. Dou, Sensor. Actuat. B-Chem., **2021**, 336: 129728.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

饮用水和牛奶中全氟辛酸的快速可视化荧光检测

刘昊*
陕西科技大学

全氟和多氟烷基物质（PFAS）是在环境中广泛存在的有毒物质，因此迫切需要发展传感器以实现对 PFAS 的快速监测。在此，我们发展了一种比例荧光探针，用于可视化、高灵敏和特异性监测全氟辛酸（PFOA）。具有富 G 序列的适配体单链 DNA 在 PFOA 存在下折叠成 G-四链体。这种构象变化可以通过基于荧光共振能量转移（FRET）的分析方法来检测。在紫外光照射下，用裸眼就可以观察到由蓝色到绿色的明显颜色变化。随后，我们开发了一种集成智能手机的便携式快速实时检测 PFOA 的设备，并且该设备可进一步应用于饮用水和牛奶中 PFOA 的快速检测。

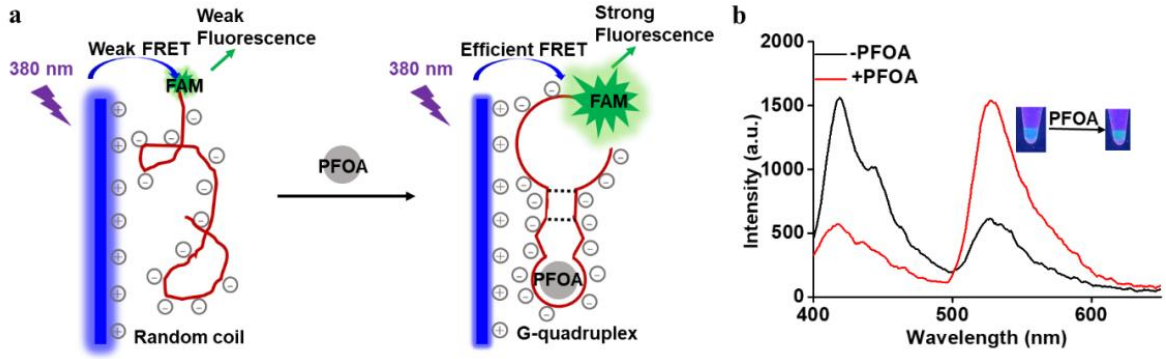


图 1 （a）基于 CCP 的 PFOA 检测平台示意图。（b）在 PFOA 存在和不存在时的荧光光谱（插图为在 385nm 紫外灯下，溶液的荧光图像）。

关键字 全氟辛酸、适配体、荧光共振能量转移、快速检测

参考文献

1. C. Nie, J. Shui, L. Huang, J. Wang, Y. Shen, Y. Wu, Anal. Chem., **2024**, 96, 13512-13521.
2. J. Park, K.-A. Yang, Y. Choi, J.K. Choe, Environ. Int., **2022**, 158, 107000-107009.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

HPLC 法同时测定汉麻酒制品中 3 种成分含量

时志春*[1,2]、王丹[1,2]、孙立秋[1,2]、李军[1,2]、赵明[1,2]
1. 齐齐哈尔大学 化学与化学工程学院
2. 国家市场监督管理总局技术创新中心（工业大麻）

汉麻（*Cannabis sativa* L.）为桑科大麻属一年生草本植物，其植株中富含一类具有 C21 骨架的含氧芳香次生代谢产物，统称大麻素。现代药理学研究表明大麻提取物具有抗炎、镇痛、抗氧化、抑菌等药理作用，被广泛应用于食品保健、化工材料、医药等领域。目前，文献报道的大麻素检测主要集中在汉麻植株、汉麻提取物、汉麻功能产品和大麻籽油[1-2]，尚无针对汉麻酒制品中大麻素成分检测的研究。为了全面监测汉麻酒制品中所含的大麻素成分及含量，本研究建立了一种同时测定汉麻酒制品中大麻二酚酸（CBDA）、大麻二酚（CBD）和四氢大麻酚（THC）含量的高效液相色谱法（HPLC），以期为进一步监测和评估汉麻酒制品质量控制提供科学依据和技术支持。

摘要：目的 建立了一种同时测定汉麻酒制品中 3 种大麻素类成分含量的高效液相色谱（HPLC）分析方法。**方法** 采用 Agilent ZORBAX SB-C_{18} 色谱柱（4.6 × 150 mm，5 μm）；流动相为甲醇-0.3%磷酸水溶液，梯度洗脱，体积流量 1.0 mL/min，检测波长 220 nm，柱温 35 ℃，进样体积 10 μL。**结果** 大麻二酚酸、大麻二酚、四氢大麻酚分别在 4~200、4~200 和 4~40 μg/mL 范围内呈良好线性关系，有良好的精密度、稳定性和重复性，平均加样回收率分别为 99.5%、99.2%、101.0%，RSD 均＜2.0%；6 批样品中大麻二酚酸、大麻二酚和四氢大麻酚的质量分数分别为 0.040~0.180、0.020~0.680、0.001~0.017 mg/g。结论 实验建立的方法高效、准确、重复性好，可用于汉麻酒制品的质量控制。

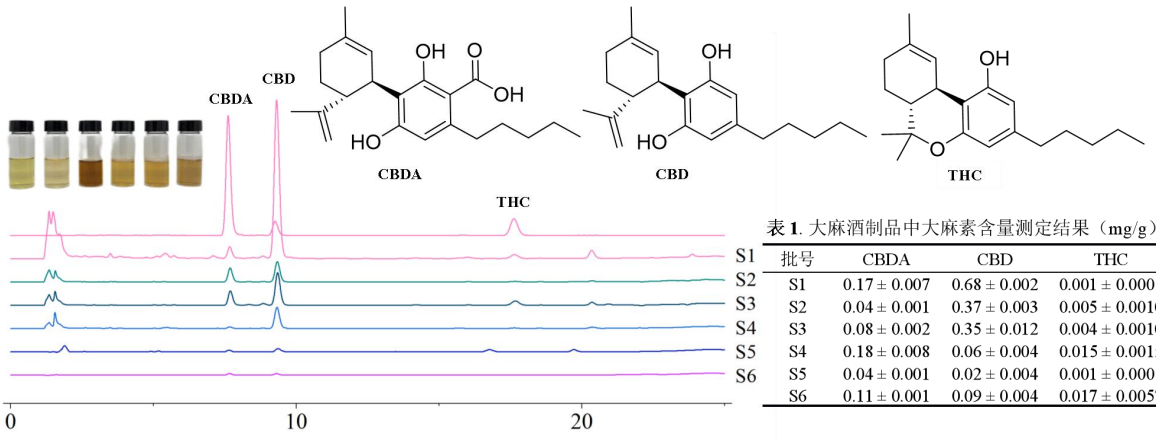


表 1. 大麻酒制品中大麻素含量测定结果（mg/g）

批号	CBDA	CBD	THC
S1	0.17 ± 0.007	0.68 ± 0.002	0.001 ± 0.0001
S2	0.04 ± 0.001	0.37 ± 0.003	0.005 ± 0.0010
S3	0.08 ± 0.002	0.35 ± 0.012	0.004 ± 0.0010
S4	0.18 ± 0.008	0.06 ± 0.004	0.015 ± 0.0015
S5	0.04 ± 0.001	0.02 ± 0.004	0.001 ± 0.0001
S6	0.11 ± 0.001	0.09 ± 0.004	0.017 ± 0.0057

关键字 汉麻酒制品；高效液相色谱法；大麻二酚酸；大麻二酚；四氢大麻酚

参考文献

1. 王丹, 秦世丽, 赵英楠, 孙立秋, 杜宛潼, 赵明, 张树军, 分析试验室, **2023**, 42, 217-221.
王丹, 赵明, 时志春, 李军, 刘祥忠, 张树军, 齐齐哈尔大学学报（自然科学版), **2019**, 35, 49-51+54.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

调味料荜茇中抗阿尔茨海默症活性成分的系统评价和制备

张雨桐、张语迟*、梁佳祺
长春师范大学

目的 荜茇作为传统药食两用植物，具有抗胃溃疡、免疫调节、抗肿瘤、降血脂、防治胆结石、神经保护等作用 1-3。本研究主要对荜茇中乙酰胆碱酯酶(AChE)抑制剂的筛选、生物活性评价及活性物质的提取制备进行了研究。**方法** 采用受体配体亲和快速筛选活性成分，分子对接和分子动力学验证活性成分，网络药理学预测作用靶点和通路四位一体深度探究天然产物对疾病的作用机制。设置多组别超滤实验筛选活性成分，对每个活性成分的靶蛋白亲和抑制能力进行综合评价。通过根据响应面结果对相似成分分组，将响应面与 NSGA-III 多目标遗传算法结合，探究了三个目标之间提取效率的关系。完成活性成分快速筛选、作用机制探究、提取和制备的一体化。**结果** 六个活性小分子被筛选验证对 AChE 有一定的抑制作用，荜茇治疗阿尔兹海默症具有多成分、多靶点、多途径的特点。利用三个代表性成分优化了所有六个成分，克服了以往多成分综合优化能力的不足，实现了多成分综合的优化。六个活性小分子经高速逆流色谱全部分离出，纯度分别为 90.51%、98.72%、96.68%、97.94%、82.96%、97.67%。**结论** 本研究使用生物活性筛选结合先进的提取技术为荜茇活性成分及其潜在抗阿尔茨海默病的特性提供了一些的见解。为从各种药食两用植物中发掘和开发功能性食品提供了有效参考。

关键字 荜茇；阿尔茨海默症；四元活性评价；多目标提取优化

参考文献

1. P. Biswas, M. Ghorai, T. Mishra, A V. Gopalakrishnan, D. Roy, A B. Mane, A. Mundhra, N. Das, V M. Mohture, M T. Patil, M H. Rahman, N K. Jha, G E S. Batiha, S C. Saha, M S. Shekhawat, Radha, M. Kumar, D K. Pandey, A. Dey. *Piper longum* L.: A comprehensive review on traditional uses, phytochemistry, pharmacology, and health-promoting activities. *Phytotherapy Research*. **2022**, 36, 4425-4476.
2. Q. Wan, J. Xu, C. Zhu, X. Liu, Y. Tu, J. Lei, J. Yu. *Alkaloids from Piper longum* Exhibit Anti-inflammatory Activity and Synergistic Effects with Chemotherapeutic Agents against Cervical Cancer Cells. *Journal of Agricultural and Food Chemistry.* **2023**, 71, 10349-10360.
3.S. Hua, J. Liu, Y. Zhang, J. Li, X. Zhang, L. Dong, Y. Zhao, X. Fu. Piperine as a neuroprotective functional component in rats with cerebral ischemic injury. *Food Science & Nutrition*. **2019**, 7, 3443-3451.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

乳制品中 PAH4 的快速绿色荧光检测方法

郭怡涵[1]、魏嘉雯[1]、何家荣[1]、刘宏俊[1]、郑高峰[2]、李耀群*[1]
1. 厦门大学化学化工学院
2. 厦门大学萨本栋微米纳米科学技术研究院

多环芳烃（Polycyclic aromatic hydrocarbons, PAHs）分布广泛，是一类重要的食品污染物。欧洲食品安全局提出以四种代表性 PAHs（包括苯并(a)芘、苯并(b)荧蒽、苯并(a)蒽和䓛，简称 PAH4）作为评估食品中 PAHs 污染的合适指标。由于 PAH4 都具有不同程度的致癌性，对于从事致癌 PAHs 分析研究的相关人员的健康存在着潜在威胁。因此，本研究基于二阶导数-非线性同步荧光技术，通过建立非致癌标准物与目标分析物之间的定量校正关系，提出了一种无需使用致癌性 PAHs 的定量校正方法用于乳制品中 PAH4 的同时定量检测。利用乙腈溶剂超声辅助萃取乳制品中的PAH4，萃取液浓缩至干后重新溶解在二甲亚砜中进行分析，无需复杂繁琐的样品净化过程。该方法以非致癌物芘为标准物，只需一次光谱扫描即可实现对乳制品中 PAH4 的准确定量分析，对 PAH4 的检测限在 0.11 μg/kg~0.46 μg/kg 之间，回收率在 85.1%~114.5%之间。结果表明，该方法简便快速，有望用作同时定量分析乳制品中 PAH4 的一种有效检测手段。

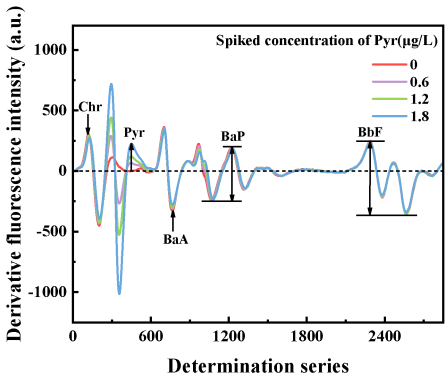


Fig.1 The second-order derivative-nonlinear synchronous fluorescence spectra of cream samples spiked with chrysene, benzo(a)anthracene, benzo(a)pyrene, benzo(b)fluoranthene, and pyrene.

关键字 多环芳烃；非致癌标准物；同步荧光；乳制品

参考文献

1. J.W. Wei, J.R. He, S.Y. Chen, Y.H. Guo, X.Z. Huo, N. Zheng, S.H. Cao, Y.Q. Li, *Food Control*, **2024**, 158, 110205.
2. B.H. Chen, B.S. Inbaraj, K.C. Hsu, *Journal of Food and Drug Analysis*, **2022**, 30(4), 494-522.
3. Y.H. Liu, P.P. Wu, Q. Liu, H.D. Luo, S.H. Cao, G.C. Lin, D.S. Fu, X.D. Zhong, Y.Q. Li, *Food Analytical Methods*, **2016**, 9(11), 3209-3217.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

液相色谱-三重四级杆质谱分析稻谷中 7 种有机磷酸酯类阻燃剂

姚香澳、周若芸、官智勇*
武汉轻工大学

有机磷酸酯类阻燃剂（OPFRs，Organophosphorus Ester Flame Retardants）作为一种新兴的持久性有机污染物，广泛存在于环境中，这类化合物有较强的迁移性，可以通过多种途径进入食物链和食物网，从而在生物体内蓄积，带来一定的安全风险。有研究表明，谷物中普遍存在 OPFRs 的污染情况，因此亟需建立谷物中 OPFRs 的高效、准确分析技术。实验采用酸消解法提取稻谷中的 OPFRs，结合 dSPE 分散固相萃取净化建立了稻谷中 7 种 OPFRs 的液相色谱-三重四级杆质谱（LC-MS/MS）分析方法，并对采集的 30 份稻谷样品中 7 种 OPFRs 的含量进行检测。实验分别考察了不同提取溶剂、固相萃取柱及洗脱溶剂对 OPFRs 回收率的影响，确定了样品的最佳前处理条件，采用 BEH C18 色谱柱进行分离，并优化了流动相条件，使用内标法定量。结果表明，采集的 30 份稻谷样品中均有不同程度的 OPFRs 检出，在 7 种 OPFRs 中，检出率及含量最高的是 TPHP，约为 1.381-13.748μg/kg，平均含量为 4.380μg/kg。次之则为 TCEP 和 TCIPP，平均含量分别为 0.341μg/kg 和 0.328μg/kg。通过计算 OPFRs 的膳食暴露量和危害商 HQ，结果表明由大米及其制品摄入 OPFRs 的风险处于安全可控水平。

关键字 液相色谱-三重四级杆质谱；有机磷酸酯类阻燃剂；稻谷

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

食品接触材料迁移物 PLA 颗粒对小鼠肠道的损害作用研究

维丽斯、刘涵、王裕田、李玉苗、许静、周子怡、戚瑞麟、唐志*
广东医科大学

背景：聚乳酸（Polylactic acid, PLA）作为一种新型的可生物降解材料，被广泛应用于生活用品、医疗器械和农业生产等各个领域。随着聚乳酸塑料制成外卖包装盒、一次茶包等大批量应用，食品接触用 PLA 迁移物——PLA 塑料颗粒的安全性备受关注，亟待深入研究。材料和方法：为探明经口暴露的 PLA 颗粒在体内分布情况，本研究使用带有 FITC 标记的 PLA 给小鼠连续灌胃 4 天，追踪了其在小鼠体内的组织分布。另以 C57BL/6 小鼠为整体动物模型，随机分为染毒组和对照组。染毒组采用 PLA 颗粒对小鼠连续灌胃 28 天（剂量为 50 mg/kg/d），对照组小鼠则给予等剂量溶媒。实验结束后，通过病理组织学、qRT-PCR 等多种实验方法，检测各组小鼠结肠组织病理特征、炎症浸润以及屏障功能；并进一步对小鼠粪便样本进行 16S rRNA 测序分析其肠道菌群构成情况。结果：FITC 标记的 PLA 经灌胃后，追踪了其在小鼠活体的组织分布。结果显示 PLA 主要分布在小鼠腹部。特别地，PLA 颗粒物的荧光信号主要集中在肠道、结肠和胆囊。通过对区域定量计算平均荧光强度，发现 PLA 染毒后在腹部区域的荧光强度显著高于对照组，同时在全肠道荧光显著也显著高于对照组。另发现，聚乳酸连续暴露 28 天后，染毒组小鼠在暴露过程中表现为更大程度的体重增长。与对照组小鼠相比，染毒组小鼠结肠呈异常增长变化。H&E 染色分析小鼠结肠组织的病理损伤程度发现，PLA 染毒引起肠上皮细胞的大量变性、坏死和脱落，隐窝结构消失以及黏膜和固有层的严重炎症细胞浸润，不同程度的黏液下水肿，整体上升高了肠道组织病理学评分。对小鼠的粪便进行 16s rRNA 高通量测序，发现 PLA 染毒 10 天后引起肠道 OTU 物种群落总数增多、多样性降低，28 天后引起肠道 OTU 物种群落总数减少、群落多样性显著增高。与对照组相比，PLA 染毒 28 天后 Ileibacterium（回肠杆菌）、Allobaculum（另枝菌属）相对丰度表达显著升高，是 PLA 染毒诱导的标志菌。对肠道屏障相关因子表达情况检测发现 PLA 染毒引起小鼠 ZO-1 的表达降低。结论：PLA 颗粒会在小鼠肠道内积累，并引起结直肠肠道病理组织损伤，减少肠道屏障因子 ZO-1 的表达。

关键字 聚乳酸、食品接触材料、肠道毒性

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

稻米在不同加工条件下重金属变化规律

齐文静、姚香澳、熊睿、朱燕、官智勇*
武汉轻工大学

本文目的是探究在不同加工条件下稻米中重金属的变化规律。经过碾磨工艺将稻谷加工成不同留皮度样品（糙米、等外、适碾、精碾），实验通过 ICP-MS（电感耦合等离子体质谱）检测不同加工精度稻米中常见的铅、镉、砷三种重金属含量，评估稻米中重金属污染水平，以及探究不同加工程度的稻米中重金属含量的变化规律。结果表明，60 份稻谷样品中重金属污染的严重程度依次为镉>砷>铅。结果还表明，随着稻米加工精度的增加留皮度的降低，样品中铅、镉、砷含量都有所下降，但三种重金属含量的下降趋势存在显著差异。其中铅的下降趋势最为显著，砷次之，镉紧随其后。

关键字 稻米 加工条件 重金属

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

PY-GC/MS 联用技术用于食用油中矿物油的快速高效筛查

刘石磊*
北京莱伯泰科仪器股份有限公司

近期，食用油中矿物油的高效快速检测成了人们关注的一个焦点。矿物油（MOH）源自石油与合成油，主要包含饱和烃（MOSH）及芳香烃（MOAH）两部分，它们或容易蓄积在人体，或有致癌和致畸毒性。矿物油会通过环境污染、种（养）殖采收、生产加工、包装储存等多种途径迁移进入食物，给人类健康带来风险。

矿物油的检测方法较多，有皂化法、气相色谱法、高效液相色谱法、液相色谱-气相色谱-氢火焰离子化检测器联用法（LC-GC）、红外光谱法、核磁共振法、二维气相色谱法等，但这些方法普遍存在灵敏度较低、操作复杂、基质干扰大、重复性不好、定量分析困难等问题。被行业广泛认可的 LC-GC 法，其高昂的技术要求和复杂的定量分析流程，限制了其在企业及基层实验室的广泛应用。

基于此，本研究创新性地开发了一种基于食用油与矿物油沸点差异的热裂解-气相色谱/质谱联用检测方法（PY-GC/MS）。该方法具有操作简单、灵敏度高、重复性好等优点，无需繁琐的前处理步骤，样品可直接进样到 PY-GC/MS 中，十几分钟即可完成定性、定量分析。方法检出限可以达到 0.1mg/kg，低于标准要求的 2mg/kg，可为实验室提供了高效、便捷且精准的快速筛查方案，有望成为企业和基层实验室快速筛查食用油中矿物油的理想方法。

关键字 食用油 矿物油 热裂解

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

一种四臂 PEG 作为接枝剂用于制备高选择性的质谱电离基底检测玉米赤霉烯酮及其代谢物

刘嘉威、杨敏莉、陈凤明、张峰*
中国检验检疫科学研究院

食品中的玉米赤霉烯酮残留会对消费者的健康产生不利影响，因此有必要开发快速灵敏准确的检测技术。敞开式电离质谱由于简便快速，准确，灵敏度高等优势具备较好的应用潜力。研制功能性导电基底可提高敞开式电离的灵敏度和检测的效率。然而现有的导电基底难以直接在复杂基质中富集目标物，检测的灵敏度较低。本研究设计并合成了一种氨基和四嗪基团功能化的四臂 PEG 分子（NH2HCl-4armPEG10K-(MTz)3）作为接枝剂用于制备质谱电离基底（图 1a）。NH2HCl-4armPEG10K-(MTz)3 可以通过氨基和聚多巴胺的加成反应连接到基底表面。四嗪（Tz）允许链霉亲和素-反式环辛烯（SA-TCO）通过点击反应从而将 SA 固定在基底表面。进一步生物素化的广谱性玉米赤霉烯酮抗体（3D4-biotin）可以通过 SA-biotin 反应固定在基底表面（图 1b）。研究证实，使用 NH2HCl-4armPEG10K-(MTz)3 作为接枝剂能够显著的提升表面的SA（1.23 μg→8.67 μg）和抗体的偶联量（5.30 μg→12.34 μg）。本研究制备的 SSS-Au-PDA-4armPEG10K-SA-3D4 不仅能够高选择性的富集和检测玉米赤霉烯酮及其代谢物（选择性可提升 8-16 倍），并且在含有蛋白质的基质中表现出了良好的抗污性能。利用 SSS-Au-PDA-4armPEG10K-SA-3D4 建立了牛奶中玉米赤霉烯酮及其代谢物的检测方法。对牛奶样品稀释 5 倍后，所制备的质谱电离基底对待测物检测的检出限 LOD 为 0.23-0.60 μg/kg，定量限 LOQ 为 0.5-1.0 μg/kg。样品的加标回收率为 83.60%-97.80%，RSD 为 2.80%-9.10%。所制备的质谱电离基底有望为突破质谱检测瓶颈，解决食品中霉菌毒素的检测难题提供良好的思路。

关键字 玉米赤霉烯酮 聚多巴胺 PEG 广谱性抗体 敞开式电离质谱

参考文献

1. J.W. Liu, M. L. Yang, F. M. Chen, X. L. Xu, Y. P. Chen, F. Zhang. *Analytical Chemistry*, **2024**, 96(21): 8484-8491.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

一种共价有机框架-分子印迹复合材料的研制及其在食品安全检测中的应用研究

王秀娟、赵东岳、谢昀、许秀丽*
中国检科院

黄曲霉毒素（AFs）是黄曲霉和寄生曲霉等产生的双呋喃环类毒素。AFs 易污染谷物，且毒性极强，痕量黄曲霉毒素即可引发严重的食品安全问题和人类健康问题，所以建立一种快速、灵敏、高效的 AFs 检测技术十分重要。本论文结合共价有机框架材料吸附容量大和分子印迹聚合物选择性高的特点，使用对苯二甲醛（TPA）和 N,N,N',N'-四(对氨基苯基)对苯二胺（TPBD）单体合成具有较大比表面积的共价有机框架材料，并在其表面改性黄曲霉毒素分子印迹聚合物，研发出一种重复使用次数高、吸附性能好的复合材料（TPBD-TPA@MIPs），与敞开式质谱技术集成，建立了一种实时、原位、高富集效率和高选择性的 AFs 检测方法。研究结果表明，AFs 在 0.01-10.0 μg/L 范围内线性关系良好，检出限（LODs）为 0.035-0.30 μg/kg，定量限（LOQs）为 0.12-0.99 μg/kg，样品加标回收率为 82.1-115.7%，相对标准偏差（RSD）小于 17.4%。本研究建立的方法灵敏度高、准确度高，可用于复杂食品基质中的 4 种 AFs 的同时检测。

关键字 共价有机框架，分子印迹，黄曲霉毒素

参考文献

1.J Li, XL Xu, F Zhang,et al.,**2023**. *Food chem,* 387(2022), 132821

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

测定加热卷烟 13 种羰基化合物释放量的方法研究

邱建华、韩路*
河南中烟工业有限责任公司

为研究加热卷烟烟气释放物中 13 种羰基化合物释放量的测定方法，比较了滤片捕集法，溶液吸收法和吸附管吸附法三种方法对测定结果的影响。结果表明：1）准确性评价方面，滤片捕集法对于 13 种羰基化合物稳定性最好，溶液吸收法对低分子量羰基化合物准确性高，而吸附管吸附法对于 13 种羰基化合物整体准确度最高； 2）精密度评价方面，三种方法基本一致，即低分子量羰基化合物偏差略低于高分子量羰基物，不饱和羰基化合物的偏差明显高于饱和羰基物。3）从测定结果方面，三种方法测试结果基本保持一致。

关键字 加热卷烟； 羰基化合物；释放量；捕集方法

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

食品中胆固醇含量的纸基可视化检测

张剑、张博、沈丹彤、苗延青、刘春叶*
西安医学院

人体内胆固醇含量过多会导致动脉粥样硬化，引起冠心病、高血压病等[1-2]。及时有效地对食品中的胆固醇进行检测，可以帮助人们更加合理地安排饮食。然而，现有胆固醇检测方法普遍存在分析成本较高、分析时间长、样品处理繁琐等问题[3-4]，建立一种经济、快速、简单的胆固醇检测方法非常必要。本研究以圆形 Whatman No.1 色谱纸（直径 0.6 cm，厚度 0.34 mm）为分析平台，滴加 4.5 μL 邻苯二甲醛溶液，干燥后加入 4.5 μL 胆固醇样品溶液，在强酸（冰醋酸与浓硫酸按体积比 1:1 混合，16 μL）环境下发生显色反应，体系由无色变为红色，通过裸眼观测即可实现样品中胆固醇定性检测（图 1a）。1.5 min 时采用智能手机对结果进行拍照，用 Photoshop 软件分析 RGB 值，制作胆固醇浓度与色度值的标准工作曲线，可实现胆固醇定量分析。结果显示，在 0.25-1.25 mg/mL 范围内，RGB 值与胆固醇浓度呈现良好的线性关系（R2=0.9954）（图 1b），该方法最低检测限为 0.08 mg/mL，加样回收率为 101.4%，日内日间重复性均小于 1.0%。在较优检测条件下，分别对生蛋黄、熟蛋黄、生瘦肉、熟肉等样品中胆固醇含量进行检测，表 1 数据显示，食物制熟过程可降低胆固醇含量。纸基法检测结果与紫外分光光度法相比较，误差别为 1.5%、2.6%、3.5%、2.5%。该方法不依赖大型分析仪器，操作简单，分析成本低，分析效率高，准确性良好，可对实际样品中胆固醇进行定性及定量检测。

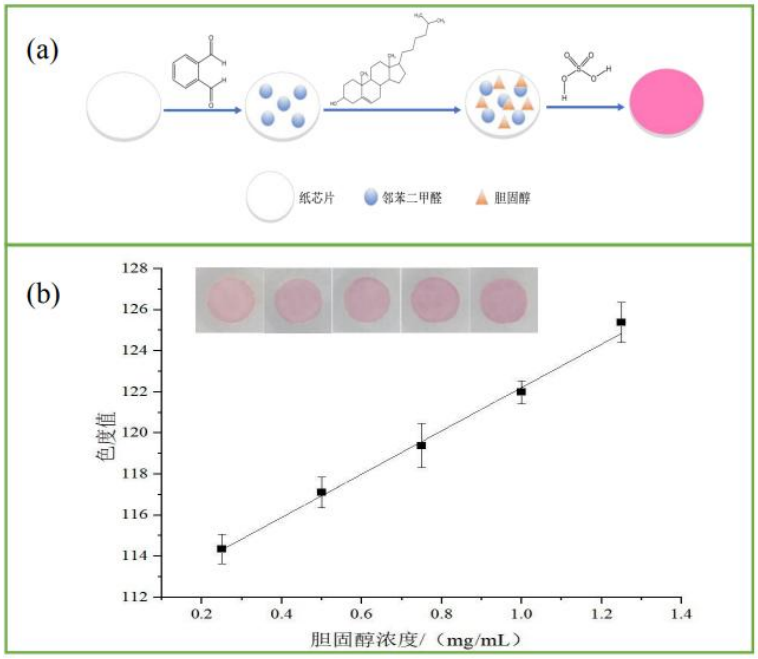


图 1 （a）纸基法检测胆固醇原理及（b）标准曲线

关键字 胆固醇；食品；纸芯片；可视化

参考文献

1. 孙娜娜，李爽爽，张俊，罗嫚，聂嫄媛，王磊，中国卫生工程学, **2020**, 19: 282-284.

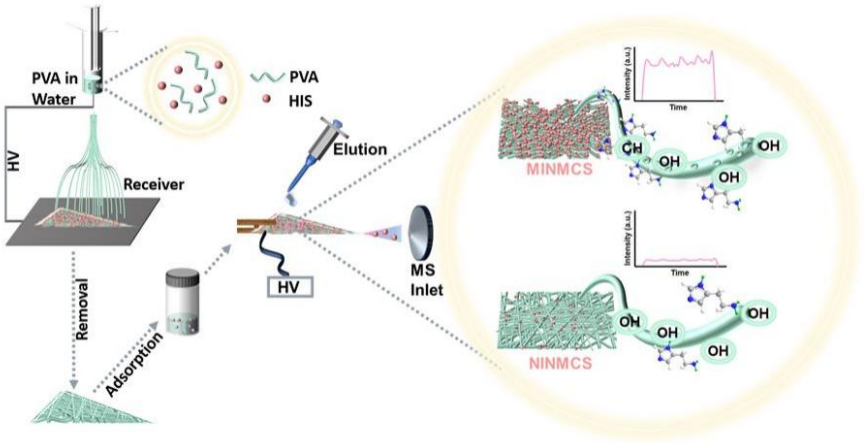
2. C. Liu, Y. Zhang, D. Ding, X. Li, Y. Yang, Q. Li, Y. Zheng, D. Wang, W. Ling, Atherosclerosis, **2016**, 249:116-124.
3. 张璟，张文强，秦慧民，毛淑红，薛家禄，路福平，中国生物工程杂志, **2017**, 37: 21-26.
4. 范佳琳，王新宇，陈雪，任志宇，潘凯，张谦，张玲，分析试验室，**2021**, 40: 736-744.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

新型高选择性质谱离子源用于生物胺快速高灵敏检测

刘通、沈正超、张峰*
中国检验检疫科学研究院

开发具有高选择性富集能力的电喷雾电离源以实现复杂样品中痕量有害物质的敞开式质谱（AMS）快速检测，仍然是一项重大挑战。本研究基于静电纺丝技术，构建了一种分子印迹纳米纤维静电纺丝膜涂层导电基底（MINMCS），并将其用作高特异性富集和分离的电离源元件。该元件能够在复杂基质中实现对生物胺的高特异性提取，富集及离子化质谱检测。实验结果表明，所制备的新型离子源对组胺、酪胺、色胺三种生物胺具有优异的富集能力。经过简单的样品前处理后直接进质谱分析，该方法的灵敏度可与传统的高效液相色谱-质谱（HPLC-MS/MS）相媲美。此外，整个分析过程可在一分钟内完成，且回收率优良（83.21-101.80%）。综上所述，本研究研制了一种新型质谱离子源用于痕量生物胺的检测，展现了其在食品安全快速精准检测方面的巨大潜力。



关键字 敞开式质谱；高选择性离子源；分子印迹；静电纺丝；生物胺

参考文献

1. Z. Takats, J. M. Wiseman, B. Gologan, R. G. Cooks, Science, **2004**, 306 (5695), 471−473.
2. M. Moniente, L. Botello-Morte, D. García-Gonzalo, R. Pagán, I. Ontañón, Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, **2022**, 21 (4), 3612−3646.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

伴侣动物猫和犬中革兰阴性菌耐药性研究及 blaCTX-M 基因传递机制初探

张保超、罗姝菡、徐义航、安龙懿、邹粤、裴晓方*
四川大学华西公共卫生学院/华西第四医院

目的 为探究伴侣动物猫和犬中主要革兰阴性菌的耐药性及其产超广谱β-内酰胺酶的情况，探讨伴侣动物携带的 blaCTX-M 基因的传递风险。方法 本研究 2022 年 9 月~2023 年 9 月期间采集成都市某宠物医院伴侣动物猫和犬的肛拭子及眼鼻口拭子样本，采用 MAC 和 SS 平板进行分离培养，MALDI-TOF MS 对分离株进行鉴定；纸片扩散法测定主要分离菌对 16 种抗生素的耐药性，双纸片协同扩散法检测产 ESBL 情况，PCR 检测 blaCTX-M 基因的流行情况，采用 blaCTX-M-1 群、blaCTX-M-2 群和 blaCTX-M-9 群引物进行亚型测定。采用接合试验探讨主要 blaCTX-M 亚型基因的传递风险，采用纸片扩散法对接合子的耐药表型进行测定。 结果 本研究共采集伴侣动物猫和犬样本 304 份，样本中革兰阴性菌的总检出率为 60.53%，共分离获得革兰阴性菌 305 株，其中排前四位的是大肠杆菌、奇异变形杆菌、肺炎克雷伯菌和阴沟肠杆菌复合体，分别检出 164 株、40 株、32 株和 22 株，这 4 种菌对氨苄西林的耐药率最高，均超过 60%，对甲氧苄啶-磺胺甲恶唑、头孢氨苄、四环素的耐药率较高，均超过 40%，对美罗培南的敏感性较好，耐药率均低于 5%，多重耐药菌检出率高达 48.8%，其中肺炎克雷伯菌和奇异变形杆菌整体的耐药性更高，而犬源细菌的整体耐药情况更为严重，犬源革兰阴性菌的。共检出产 ESBL 菌株 100 株，检出率为 38.8%。在 4 种菌中 blaCTX-M 基因的检出率为 34.5%，产 ESBL 菌中 blaCTX-M 基因的检出率高达 85%，blaCTX-M 基因阳性菌株对多种抗生素的耐药性较高。共检出 12 种 blaCTX-M 亚型基因，其中检出率排前三的亚型分别是 blaCTX-M-55（21.3%）、blaCTX-M-14（19.1%）和 blaCTX-M-65（18.0%）。对这些菌株进行接合试验，结果显示共有 16 株菌发生 blaCTX-M 的接合，均为大肠杆菌，接合率为 42.1%，其中 blaCTX-M-55、blaCTX-M-14 和 blaCTX-M-65 的接合率分别为 61.1%、17.6%和 66.7%，在奇异变形杆菌和肺炎克雷伯菌中未观察到 blaCTX-M 的接合现象。结论 本研究中伴侣动物猫和犬携带的 4 种主要革兰阴性菌大肠杆菌、奇异变形杆菌、肺炎克雷伯菌和阴沟肠杆菌复合体的耐药情况尤为严峻；此外本研究发现大肠杆菌中携带的 blaCTX-M-55、blaCTX-M-14 和 blaCTX-M-65 基因具有较强的接合转移的能力，可导致受体菌对多种抗生素产生耐药，具有潜在的传递风险。

关键字 抗生素耐药性（AMR）、伴侣动物、革兰阴性菌、超广谱β-内酰胺酶（ESBLs）、blaCTX-M 基因、耐药性传递

参考文献

1 WRIGHT G D. Antibiotic resistance in the environment: a link to the clinic? J. Current opinion in microbiology, 2010, 13(5): 589-594.

2 DIALLO O O, BARON S A, ABAT C, et al. Antibiotic resistance surveillance systems: A review J. Journal of global antimicrobial resistance, 2020, 23: 430-438.

3 MURRAY C J L, IKUTA K S, SHARARA F, et al. Global burden of bacterial antimicrobial resistance in 2019: a systematic analysis J. The Lancet, 2022, 399(10325): 629-655.

4 DE OLIVEIRA D M P, FORDE B M, KIDD T J, et al. Antimicrobial Resistance in ESKAPE Pathogens J. Clinical microbiology reviews, 2020, 33(3).
5 World Health Organization. Antimicrobial resistanceEB/OL. 2023-11-21. https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/antimicrobial-resistance
6 BREIJYEH Z, JUBEH B, KARAMAN R. Resistance of Gram-Negative Bacteria to Current Antibacterial Agents and Approaches to Resolve It J. Molecules (Basel, Switzerland), 2020, 25(6): 1340.
7 ARZANLOU M, CHAI W C, VENTER H. Intrinsic, adaptive and acquired antimicrobial resistance in Gram-negative bacteria J. Essays in Biochemistry, 2017, 61(1): 49-59.
8 LANG M, CARVALHO A, BAHAROGLU Z, et al. Aminoglycoside uptake, stress, and potentiation in Gram-negative bacteria: new therapies with old molecules J. Microbiology and molecular biology reviews: MMBR, 2023, 87(4): e0003622.
9 BHATT S, CHATTERJEE S. Fluoroquinolone antibiotics: Occurrence, mode of action, resistance, environmental detection, and remediation-A comprehensive review J. Environmental pollution (Barking, Essex: 1987), 2022, 315: 120440.
10 HUSSAIN H I, AQIB A I, SELEEM M N, et al. Genetic basis of molecular mechanisms in β-lactam resistant gram-negative bacteria J. Microbial pathogenesis, 2021, 158: 105040.
11 EL-SAYED AHMED M A E, ZHONG L L, SHEN C, et al. Colistin and its role in the Era of antibiotic resistance: an extended review (2000-2019) J. Emerging microbes & infections, 2020, 9(1): 868-885.
12 胡付品, 郭燕, 朱德妹等. 2021 年 CHINET 中国细菌耐药监测 J. 中国感染与化疗杂志, 2022, 22(05): 521-530.
13 李耘, 郑波, 薛峰等. 中国细菌耐药监测研究(CARST)2021—2022 年革兰氏阳性菌监测报告 J. 中国临床药理学杂志, 2023, 39(23): 3509-3524.
14 ZHANG X F, DOI Y, HUANG X, et al. Possible Transmission of mcr-1-Harboring Escherichia coli between Companion Animals and Human J. Emerging infectious diseases, 2016, 22(9): 1679-1681.
15 MARIN C, LORENZO-REBENAQUE L, LASO O, et al. Pet Reptiles: A Potential Source of Transmission of Multidrug-Resistant Salmonella J. Frontiers in veterinary science, 2020, 7: 613718.
16 HACKMANN C, GASTMEIER P, SCHWARZ S, et al. Pet husbandry as a risk factor for colonization or infection with MDR organisms: a systematic meta-analysis-authors' response J. The Journal of antimicrobial chemotherapy, 2022, 77(7): 2043.
17 MA S, CHEN S, LYU Y, et al. China antimicrobial resistance surveillance network for pets (CARPet), 2018 to 2021 J. One Health Advances, 2023, 1(1): 7.
18 TENG L, FENG M, LIAO S, et al. A Cross-Sectional Study of Companion Animal-Derived Multidrug-Resistant Escherichia coli in Hangzhou, China J. Microbiology spectrum, 2023, 11(2): e0211322.
19 邓翔文, 郑婷婷, 陈璐等. 福州地区宠物犬源大肠杆菌耐药性及耐药基因调查 J. 福建农林大学学报(自然科学版), 2022, 51(06): 815-821.
20 佟盼盼, 杨银萍, 谢金鑫等. 乌鲁木齐市宠物犬、猫粪源大肠杆菌耐药性分析与 ESBLs 基因型检测 J. 中国农业大学学报, 2020, 25(11): 90-98.
21 易梦颖, 王晶, 卢沛兰等. 宠物源大肠埃希菌耐药性及耐药基因调查 J. 华南农业大学学报, 2019, 40(06): 15-21.

22 LIU G, THOMSEN L E, OLSEN J E. Antimicrobial-induced horizontal transfer of antimicrobial resistance genes in bacteria: a mini-review J. The Journal of antimicrobial chemotherapy, 2022, 77(3): 556-567.
23 SHEN Z, TANG C M, LIU G Y. Towards a better understanding of antimicrobial resistance dissemination: what can be learnt from studying model conjugative plasmids? J. Military Medical Research, 2022, 9(1): 3.
24 HUDDLESTON J R. Horizontal gene transfer in the human gastrointestinal tract: potential spread of antibiotic resistance genes J. Infection and drug resistance, 2014, 7: 167-176.
25 TUFA T B, FUCHS A, TUFA T B, et al. High rate of extended-spectrum beta-lactamase-producing gram-negative infections and associated mortality in Ethiopia: a systematic review and meta-analysis J. Antimicrobial resistance and infection control, 2020, 9(1): 128.
26 BUSH K, JACOBY G A. Updated functional classification of beta-lactamases J. Antimicrobial agents and chemotherapy, 2010, 54(3): 969-976.
27 MAMMERI H, VAN DE LOO M, POIREL L, et al. Emergence of plasmid-mediated quinolone resistance in Escherichia coli in Europe J. Antimicrobial agents and chemotherapy, 2005, 49(1): 71-76.
28 PATERSON D L, BONOMO R A. Extended-spectrum beta-lactamases: a clinical update J. Clinical microbiology reviews, 2005, 18(4): 657-686.
29 PEIRANO G, PITOUT J D D. Extended-Spectrum β-Lactamase-Producing Enterobacteriaceae: Update on Molecular Epidemiology and Treatment Options J. Drugs, 2019, 79(14): 1529-1541.
30 BAUERNFEIND A, GRIMM H, SCHWEIGHART S. A new plasmidic cefotaximase in a clinical isolate of Escherichia coli J. Infection, 1990, 18(5): 294-298.
31 ELLABAAN M M H, MUNCK C, PORSE A, et al. Forecasting the dissemination of antibiotic resistance genes across bacterial genomes J. Nature communications, 2021, 12(1): 2435.
32 MINJA C A, SHIRIMA G, MSHANA S E. Conjugative Plasmids Disseminating CTX-M-15 among Human, Animals and the Environment in Mwanza Tanzania: A Need to Intensify One Health Approach J. Antibiotics (Basel, Switzerland), 2021, 10(7).
33 NEGERI A A, MAMO H, GAHLOT D K, et al. Characterization of plasmids carrying blaCTX-M genes among extra-intestinal Escherichia coli clinical isolates in Ethiopia J. Scientific reports, 2023, 13(1): 8595.
34 TAMANG M D, GURUNG M, KANG M S, et al. Characterization of plasmids encoding CTX-M β-lactamase and their addiction systems in Escherichia coli isolates from animals J. Veterinary microbiology, 2014, 174(3-4): 456-462.
35 ASLAM B, KHURSHID M, ARSHAD M I, et al. Antibiotic Resistance: One Health One World Outlook J. Frontiers in cellular and infection microbiology, 2021, 11: 771510.
36 FERRI M, RANUCCI E, ROMAGNOLI P, et al. Antimicrobial resistance: A global emerging threat to public health systems J. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2017, 57(13): 2857-2876.
37 PIRES D, DE KRAKER M E A, TARTARI E, et al. 'Fight Antibiotic Resistance—It's in Your Hands': Call From the World Health Organization for 5th May 2017 J. Clinical Infectious Diseases, 2017, 64(12): 1780-1783.
38 CHRISTAKI E, MARCOU M, TOFARIDES A. Antimicrobial Resistance in Bacteria:

Mechanisms, Evolution, and Persistence J. Journal of Molecular Evolution, 2020, 88(1): 26-40.
39 CASSINI A, HöGBERG L D, PLACHOURAS D, et al. Attributable deaths and disability-adjusted life-years caused by infections with antibiotic-resistant bacteria in the EU and the European Economic Area in 2015: a population-level modelling analysis J. The Lancet Infectious diseases, 2019, 19(1): 56-66.
40 BOUCHER H W, TALBOT G H, BRADLEY J S, et al. Bad bugs, no drugs: no ESKAPE! An update from the Infectious Diseases Society of America J. Clinical infectious diseases: an official publication of the Infectious Diseases Society of America, 2009, 48(1): 1-12.
41 CORNAGLIA G, ROSSOLINI G M. Forthcoming therapeutic perspectives for infections due to multidrug-resistant Gram-positive pathogens J. Clinical microbiology and infection: the official publication of the European Society of Clinical Microbiology and Infectious Diseases, 2009, 15(3): 218-223.
42 BREIJYEH Z, JUBEH B, KARAMAN R. Resistance of Gram-Negative Bacteria to Current Antibacterial Agents and Approaches to Resolve It J. Molecules (Basel, Switzerland), 2020, 25(6).
43 FERRI M, RANUCCI E, ROMAGNOLI P, et al. Antimicrobial resistance: A global emerging threat to public health systems J. Critical reviews in food science and nutrition, 2017, 57(13): 2857-2876.
44 MARCO-FUERTES A, MARIN C, LORENZO-REBENAQUE L, et al. Antimicrobial Resistance in Companion Animals: A New Challenge for the One Health Approach in the European Union J. Veterinary sciences, 2022, 9(5).
45 POMBA C, RANTALA M, GREKO C, et al. Public health risk of antimicrobial resistance transfer from companion animals J. The Journal of antimicrobial chemotherapy, 2017, 72(4): 957-968.
46 WEESE J S, VAN DUIJKEREN E. Methicillin-resistant Staphylococcus aureus and Staphylococcus pseudintermedius in veterinary medicine J. Veterinary microbiology, 2010, 140(3-4): 418-429.
47 WIELER L H, EWERS C, GUENTHER S, et al. Methicillin-resistant staphylococci (MRS) and extended-spectrum beta-lactamases (ESBL)-producing Enterobacteriaceae in companion animals: nosocomial infections as one reason for the rising prevalence of these potential zoonotic pathogens in clinical samples J. International journal of medical microbiology: IJMM, 2011, 301(8): 635-641.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

基于超亲水 PVDF 改性膜材料的乳化破乳策略用于牛奶中多目标污染物残留分析

王筱卓[1,2]、阚莹[1]、陈智[2]、李红梅[1]、王晟*[1]
1. 中国计量科学研究院
2. 中国计量大学

高脂肪基体中多目标痕量污染物的通量与准确分析面临着巨大挑战，共性问题包括复杂的前处理步骤、净化效率低和选择性不足等。本研究利用季戊四醇四基（3-巯基丙酸）与二甘醇二缩水甘油醚的巯基-环氧反应构建包被水凝胶，并通过巯基-烯反应将其共价键合到碱处理过的商用 PVDF 膜表面，成功制备了超亲水、水下超疏油的聚偏氟乙烯膜。采用乙腈作为萃取溶剂，通过构建乙腈、水和脂的三相体系实现牛奶萃取物中脂类共提取物的自发高效乳化，乳化液通过亲水亚微米级 PVDF 改性膜破乳，此过程中含有大量脂类的乳化液滴被截留在膜表面，而携带污染物的乙腈水溶液顺利通过，从而实现目标物和干扰物的选择性分离。该材料在样品前处理中表现出优异的油/水乳液分离性能，在重力作用下即可实现乳化液的快速破乳过程。本研究将本方法与传统的净化策略和材料进行了深入比较，显示出优异的净化效率和分析通量。通过该功能化膜材料的乳化-破乳净化方法与超高效液相色谱串联质谱联用法的构建,实现了牛奶中 90 种农药、兽药和真菌毒素残留的快速与准确测定。目标物在 5-250 μg/kg 范围内线性良好（R2>0.99），所有目标物的定量限均低于国标规定的最大残留限量值要求，回收率为 70-120%，相对标准偏差低于 20%。该方法具有净化效率高、回收率好和简便快速等优点，在高脂样品中多目标残留的检测中展现出良好的应用前景。

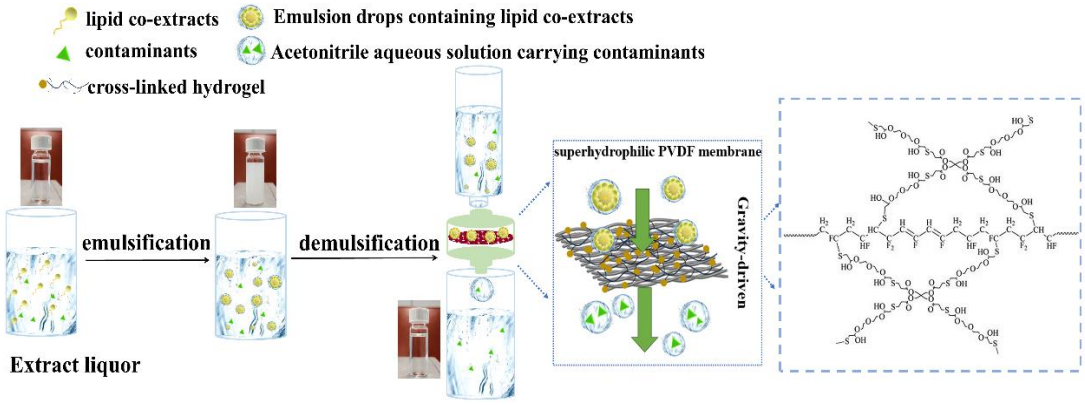


Fig.1 Schematic diagram of emulsification-demulsification clean-up procedure based on super-hydrophilic modified PVDF membrane

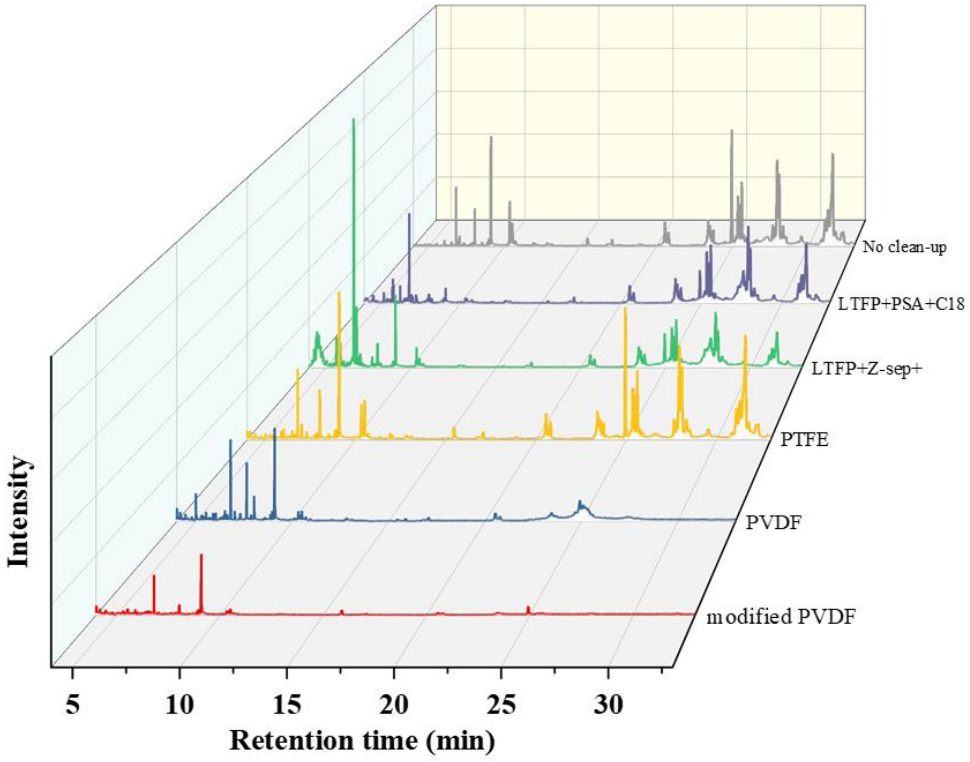


Fig. 2 Full-scan GC-MS/MS ion chromatograms of blank milk extract employing different clean-up procedures

关键字 高脂肪基体 乳化破乳 PVDF 改性膜材料 多目标污染物 UPLC-MS/MS

参考文献

1. Y. Tao, J. Meng, T. Hao, Z. Wang, Y. Zhang, *ACS Appl. Mater. Interfaces.*, **2015**, 7, 14896-14904.
2. S. Wang, X. Li, M. Li, X. Li, Q. Zhang, H. Li, *Food. Chem.*, **2022**, 379, 132098.
3. H. Peng, H. Li, X. Li, B. Wei, Z. Du, G. Wei, S. Wang, *Food. Chem.*, **2024**, 458, 140246.

分会场：35.食品分析
交流类型：墙报

基于液相色谱串联质谱技术的过敏蛋白定量研究

申成英男、周美珍、赵雨萌、李思怡、陈蕊婕、李熠、杨术鹏*
中国农业科学院农产品加工研究所

近年来，液相色谱串联质谱（HPLC-MS/MS）技术取得了显著进展，广泛应用于小分子药物检测领域等，同时质谱技术的持续升级也推动了蛋白质组学分析的新模式。凭借其高灵敏度、高特异性及高通量等显著优势，质谱技术在食品过敏原的检测与鉴定中占据了核心地位，已成为食物过敏原检测的主要技术手段。然而，随着食品加工与制造行业的迅速扩张，食品加工基质的复杂性日益增加，食物过敏原在存储、运输及加工过程中的交叉污染问题愈发严重，这极大地提升了食物过敏原精准检测的难度，成为了全球范围内亟待攻克的一项重大难题。因此，开发一种能够同时识别并量化多种食物过敏原，且具备高灵敏度、高精度、高通量及成本效益显著的分析方法，对于评估食品中潜在的食物过敏原污染、确保食品安全以及保护过敏潜在人群的健康具有极其重要的意义。

基于此，本实验选择牛奶、鸡蛋、花生、大豆、芝麻、小麦、核桃、榛子、开心果、腰果、碧根果和杏仁这十二类在食品加工过程中常见的过敏原作为研究对象，通过 Q Exactive 对过敏原特征肽段进行系统性筛选，并结合 LC-MS/MS 对所筛选特征肽段进行验证，最终针对每种食物过敏原筛选出两种致敏蛋白，每种致敏蛋白筛选两条特征肽段，并确定最优的特征肽段作为定量肽段，建立了十二类食物过敏原的 MRM 定性定量方法。并且，使用稳定同位素标记的 QconCAT 结合 LC-MS/MS 技术，利用“自下而上”的蛋白质组学方法，通过比较标记肽段与天然肽段的信号峰强度进行定量，成功应用于食品中鸡蛋、牛奶、花生、大豆、芝麻等食物过敏原的定量分析。此方法不仅有效消除了仪器波动、电离效率差异等实验过程中的潜在误差，还显著降低了基质效应的影响，从而确保了定量结果的准确，实现致敏蛋白的绝对定量。此技术将为食品监管部门提供强有力的技术支撑，进一步强化食品安全监控能力，同时也为食品企业开辟了全新的分析途径，有力保障消费者的安全。随着技术的不断成熟与广泛应用，该方法有望在未来成为食物过敏原检测领域的主流方法。

关键字 食物过敏原；液相色谱-质谱联用；定量分析

参考文献

1. Seung-Man Suh, Kyungdo Kim, Seung-Min Yang, et al., Comparative analysis of LC-MS/MS and real-time PCR assays for efficient detection of potential allergenic silkworm, Food Chemistry, **2024**.
2. Wong GW-K, Food allergies around the world. Front. Nutr., **2024**.
3. Irene Bartha, Noorah Almulhem, Alexandra F. Santos, Feast for thought: A comprehensive review of food allergy 2021-2023, Journal of Allergy and Clinical Immunology, **2024**.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

过渡金属辅助元素光化学蒸气发生/纳米粒子形成及其分析应用

高英*
成都理工大学

原子光谱（包括 ICP MS）是微量和痕量元素分析最常用的方法。然而，原子光谱传统的气动雾化进样装置进样效率低（≤5%），样品基体影响大。这直接影响原子光谱的分析性能，降低了分析的灵敏度和准确性，限制了其在复杂基体样品中痕量/超痕量元素/形态分析方面的应用研究。在低分子量有机酸存在下，元素经光化学作用可转化成为具有挥发性的烷基化合物、氢化物或单质。这一过程中，金属离子首先与光生自由基或者光生电子 反应生成中间态物质，中间态物质再与产生的 H·或 CH3·反应生成对应的氢化物 或者甲基化合物。利用 PVG 代替传统的气动雾化进样可提高仪器的分析性能。若体系中存在过渡金属（例如：Fe、Co、Ni 和 V 等元素）可有效促进原本转化效率极低的 Pb、Sb、 Te 和 Bi 等元素生成其挥发性形态，增敏可达 200 倍和 4300 倍。此外，光化学还原后在 Zn、Ga、Nb 和 Ta 等体系中还发现纳米粒子形成。相关的研究为了解元素在环境中的迁移、转化提供了积极帮助。

关键字 元素挥发性形态，纳米粒子，光化学反应，过渡金属

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

卤素高温水解设备研制及分析方法开发

薛丁帅*
中国科学院地质与地球物理研究所

卤素族元素（F、Cl、Br 和 I）是存在于许多地球和行星物质中的挥发性元素。然而，准确测定地质样品中卤素（F、Cl、Br 和 I）的质量分数，特别是超痕量的 I，仍然是一项具有挑战性的任务。在这项研究中，构建了一个自动热解系统来分解地质样品，以便随后同时测定 F、Cl、Br 和 I 元素。采取了一系列创新措施来获得卤素的高质量数据。自动热解系统有助于标准化操作条件以获得高精度数据。在优化温度、加速器剂量、供水率和 O2 流量后，精确测量了一系列地质参考物质，产生的结果与通过惰性气体或放射化学中子活化分析方法获得的结果相当。此外，使用加标样品验证了液氮冷阱的有效性。最后，利用 X 射线衍射、X 射线光电子能谱和拉曼光谱技术详细研究了 BHVO-2 与 V2O5 的反应机理，证实 BHVO-2 分解为方石英、莫来石和赤铁矿物种。

关键字 卤素

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

全新世石笋的高灵敏度原位微区 U-Th 测年方法

吴忠哲*[1,2]、沈川洲[3]、Detlef Günther[2]、Bodo Hattendorf[2]
1. 南京师范大学
2. 瑞士苏黎世联邦理工学院(ETH)
3. 台湾大学

在本研究中，我们建立了一种使用激光剥蚀电感耦合等离子体质谱(LA-ICPMS)对碳酸盐进行高灵敏度、原位 U-Th 测年的方法，检测效率(detection efficiency)为 1-2%。在激光产生的气溶胶中在线添加已知浓度的人工核素 ^{229}Th-^{233}U-^{236}U 稀释剂，能够监测和校正仪器质量偏差(mass discrimination)和 U/Th 元素分馏效应(U/Th elemental fractionation)。通过这种方法，达永世平衡的流石样品，其 ^{234}U/^{238}U 和 ^{230}Th/^{238}U 活度比可以准确且再现为 1。该方法适用于测定 2 万 1 千年至 1000 年前天然石笋的形成年龄。特别是年仅 1000 年的全新世石笋可以准确地测年，其 2 个标准误差为±76 年。这种高灵敏度的原位微区 U-Th 测年方法将可以应用于不同的研究领域，如古气候学、海洋学、地磁学和考古学等。

关键字 LA-ICPMS，原位微区 U-Th 测年，人工核素 229Th-233U-236U 稀释剂，全新世石笋

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

LA-ICP-MS 褐帘石 U-Th-Pb 定年分析

罗涛*、胡兆初
中国地质大学（武汉）

褐帘石作为一种绿帘石族矿物，广泛分布于各种岩石类型中。褐帘石的 U-Th-Pb 年代学信息为研究火成岩形成、变质事件和热液矿化过程提供了关键的时间约束。激光剥蚀电感耦合等离子体质谱（LA-ICP-MS）技术为褐帘石 U-Th-Pb 定年分析提供了高空间分辨率的微区原位手段，具有避开成分环带和包裹体的优势。然而，目前用于 LA-ICP-MS 褐帘石 U-Th-Pb 定年分析的标准样品通常含有非常高且变化的普通铅含量，限制了其作为外标校正的可行性。本研究介绍了两种新的低普通铅含量的褐帘石标准样品（AMK 和 ASP）。褐帘石 AMK 和 ASP 的 f206 值分别低于 0.8%和 5.5%。AMK 含有 140 ± 41.9 μg g^{-1}（1σ）的 U 和 306 ± 145 μg g^{-1}（1σ）的 Th，而 ASP 含有 261 ± 143 μg g^{-1}（1σ）的 U 和 130 ± 102 μg g^{-1}（1σ）的 Th。ID-TIMS 分析得出 AMK 的加权平均$^{207}Pb/^{206}Pb$ 年龄为 1533.6 ± 1.9 Ma（2σ，MSWD = 5.1，n = 6），ASP 的加权平均$^{206}Pb/^{238}U$ 年龄为 335.86 ± 0.52 Ma（2σ，MSWD = 5.9，n = 8）。为评估外标中普通铅的影响，本文对常用的 Tara 褐帘石标样进行了两种基于 207Pb 方法的校正研究（VizualAge_UcomPbine 软件校正和"两步法"校正策略）。虽然两种校正策略都能获得准确的褐帘石 U-Pb 年龄，但普通铅校正会引入不确定度，降低分析精度。此外，本文通过采用褐帘石 AMK 无需预先普通铅校正，直接进行 Pb/U 分馏校正，建立了一种简单可靠的褐帘石 LA-ICP-MS U-Th-Pb 定年方法。本文提出褐帘石 AMK 可作为一种新的 LA-ICP-MS U-Th-Pb 定年分析标准样品，ASP 由于其极低的普通铅含量，可作为合适的监控标样。本研究结果还表明，在 LA-ICP-MS 分析过程中，褐帘石的 Th 含量（从 0.03 到 21900 μg g^{-1}）和 FeO 含量（从 12.8 到 14.6 wt.%）的改变不造成显著的基体效应。本研究有助于提高 LA-ICP-MS 褐帘石 U-Th-Pb 定年方法的准确性和精密度。

关键字 LA-ICP-MS，褐帘石，U-Th-Pb，基体效应

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

Neoma MS/MS：机遇与挑战

黄超*
中国科学院地质与地球物理研究所

赛默飞世尔科技公司推出的新一代多接收-电感耦合等离子体质谱仪(MC-ICP-MS), Neoma, 为同位素分析领域带来了革命性的突破。它融合了全新电子系统、离子光学变焦和信号检测单元等先进技术，并首次在 MC-ICP-MS 中引入了串联质谱功能 (Neoma MS/MS)，为同位素比值精确测量提供了新的解决方案。

本报告将探讨 Neoma MS/MS 带来的机遇与挑战。MS/MS 技术的应用，可有效消除 ICP 离子源带来的多种谱峰干扰，提高测量的准确度和精度，为地球化学、环境科学、材料科学、核工业等领域的研究带来全新的、更加先进的技术手段。

然而，新技术的应用也面临着挑战。例如，如何抑制 Neoma MS/MS 预质量过滤器的 Mass Bias，如何优化预质量过滤器条件以获得准确的同位素数据，以及 Neoma MS/MS 的技术瓶颈等。本报告将对这些挑战进行探讨，并展望 Neoma MS/MS 在未来的发展趋势、应用前景和改进空间。

关键字 无机质谱仪，多接收-电感耦合等离子体串级质谱仪，同位素分析

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

Chelex-100 螯合树脂在地质样品高精度 Ni 同位素分析中的应用

杨涛*、于汇洋、秦欢、汪瑾
南京大学

镍同位素已被广泛应用于追踪基性岩和超基性岩的风化、矿物吸附共沉淀过程以及产甲烷菌新陈代谢等领域，在高温和低温过程中均展现出极大的应用潜力。然而，现有的镍纯化方法通常需要引入镍螯合剂（DMG）以及丙酮或柠檬酸铵等复杂有机物，这在时间效率和空白控制方面存在一定困难，使得镍同位素的纯化面临挑战。

本研究研发了一种基于 Chelex-100 螯合树脂的灵活且易于操作的三步柱分离流程，以实现从地质样品中广泛分离纯化镍。该流程涉及三种树脂，分别为 Chelex-100、AGMP-1 和 AGMP-50。其中，Chelex-100 在镍的纯化过程中发挥着重要作用，对去除严重干扰镍分析的碱金属、碱土金属以及铁元素效果显著。经纯化分离后，镍的回收率大于 96%，全流程空白低于 1.2 ng。采用双稀释剂法进行镍同位素测定，长期外部精度为 0.05（2SD）。选取 9 种地质参考物质（BCR-2、GSR-3、GSP-2、NOD-A-1、GSMC-1、SGR-1、SDO-1、GSD-5、GSD-23），在 MC-ICP-MS 上进行镍同位素测量，所得测量值与前人发表数据一致。测试结果表明，本研究开发的纯化流程适用于各种地质样品的镍同位素分析。

关键字 Chelex-100，Ni 同位素，地质样品，MC-ICPMS

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

基于 MC-ICP-MS 两柱化学分离纯化 Ni 同位素分析方法

李玲珂[1]、吴非*[1]、刘勇胜[1]、何焘[1]、蔺洁[1]、张文[1]、李睿[1]、陈海红[1]、宗克清[1]、曾振[1,2]、胡兆初[1]
1. 中国地质大学（武汉）
2. 中国科学院南京土壤研究所

镍（Ni）同位素对示踪早期增生过程、壳幔岩浆演化和古海洋等研究有着巨大潜力。然而，现有的 Ni 同位素分离纯化方法具有流程复杂、有机试剂使用量大等特征[1-4]。因此，本工作建立了一种两柱化学分离纯化流程，同时降低了有机试剂和 Ni 特效树脂的使用量。第一柱采用盐酸（HCl）和氢氟酸（HF）淋洗阳离子树脂（AG50W-X8），移除了 Al、Fe、Cr、Na、K、Ti 和 Ca 等绝大部分基质元素，第二柱使用微量（< 200 μL）Ni 特效树脂进一步分离残余基质，全流程回收率不低于 85%。样品标样间插法和双稀释剂法结合用于校正不同类型的岩石学地质标样和实验室内部标准溶液（SCP-Ni 和 CUG-Ni）的 Ni 同位素组成（δ^{60}Ni），测试的长期精度优于 0.06‰（2 SD)。实验室内部标准溶液 SCP-Ni 和 CUG-Ni 的 Ni 同位素组成分别为−0.06 ± 0.05‰（2 SD, n = 104）和 0.36 ± 0.06‰（2 SD, n = 97）。此外，不同类型地质标样（BCR-2、BHVO-2、BIR-1、DTS-1、DTS-2b、SDO-1、GSP-2、W-2a、JB-1b、GSR-2、GSR-3、GSR-4、GSR-5 和 GSR-10）的 Ni 同位素组成与前人文献报道数据在误差范围内基本一致。而且，本工作首次报道了 AGV-1、GSR-10、GSR-12、GSR-15、GSR-17、GSR-18 和 GSR-19 的 Ni 同位素组成。

关键字 Ni 同位素，Ni 特效树脂，MC-ICP-MS

参考文献

1. Beunon, H., Chernonozhkin, S.M., Mattielli, N., Goderis, S., Doucet, L.-S., Debaille, V., Vanhaecke, F., 2020. Innovative two-step isolation of Ni prior to stable isotope ratio measurements by MC-ICP-MS: application to igneous geological reference materials. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 35(10): 2213-2223.
2. Chernonozhkin, S.M., Goderis, S., Lobo, L., Claeys, P., Vanhaecke, F., 2015. Development of an isolation procedure and MC-ICP-MS measurement protocol for the study of stable isotope ratio variations of nickel. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 30(7): 1518-1530.
3. Gueguen, B., Rouxel, O., Ponzevera, E., Bekker, A., Fouquet, Y., 2013. Nickel Isotope Variations in Terrestrial Silicate Rocks and Geological Reference Materials Measured by MC-ICP-MS. Geostandards and Geoanalytical Research, 37(3): 297-317.
4. Wu, G., Zhu, J.-M., Wang, X., Han, G., Tan, D., Wang, S.-J., 2019. A novel purification method for high precision measurement of Ni isotopes by double spike MC-ICP-MS. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 34(8): 1639-1651.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

使用临界混合双稀释剂法测量地质标样的 Mg 同位素

张寅楚、杨维娟、汪洋*、何永胜、柯珊、曲柯臻、张诗滢
中国地质大学（北京）

镁（Mg）同位素被广泛应用于追踪各种地质、生物和环境过程中。Mg 同位素数据的精确测定通常是在 MC-ICP-MS 上进行，并且使用标样-样品间插法 (SSB) 进行校正。然而，当使用 SSB 法纠正相同样品的质量偏差时，可以观察到相当大的实验室间误差。因此，提高镁同位素测量精度的需求变得显而易见。最近，一种新的临界混合物双稀释剂法 (CMDS) 被用于 Mg 同位素分析中质量偏差的校正。为了提高对自然界中常见地质端元的 Mg 同位素组成的认识以及减少实验室之间的报道误差，本研究使用 CMDS 方法测定了 31 个地质和环境标准样品的 Mg 同位素组成。这些样品包括火成岩、变质岩、沉积岩、河流沉积物以及土壤，涵盖了广泛的成分范围。本研究还设计了不同的实验验证了整个实验流程的可靠性和数据的准确性。本研究将稀释剂添加到样品中再进行 Mg 的分离提纯工作，分离后的纯 Mg 溶液直接上机测试，与先提纯 Mg 再加入稀释剂的测试结果在误差范围内一致，有力的证明了实验流程的可靠性。还通过使用地质标准基质掺杂 GSB Mg 的接近零的 $\delta^{26}Mg_{GSB}$（0.006±0.021‰，2SD，N=15） 确保了实验精度。通过两年时间里对溶液标样和地质标样的长期监测可以看出，本实验室的δ^{26}Mg 的长期精度优于 0.03‰。总体而言，这些新数据为火成岩、沉积岩，河流，土壤等方面的 Mg 同位素研究提供数据支持，希望对地学研究领域的实验室间数据校准和数据质量控制提供帮助。

关键字 Mg 同位素，MC-ICP-MS，CMDS，地质标样

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

碳酸盐岩中稀土元素的分离与分析方法

冯雨晨、黄荣富、武晓郑、李娜*
成都理工大学

四川地区有丰富碳酸盐岩储层资源，对其稀土元素的研究利于深入了解碳酸盐岩形成环境、成岩过程及储层特征，对油气勘探开发有重要理论和实际意义。研究者分析碳酸盐岩稀土元素组成时，关键是提取碳酸盐矿物部分而避免样品中非碳酸盐相如黏土矿物释放的稀土元素。本文以纯黏土矿物和天然碳酸盐岩为对象，用阳离子表面活性剂作抑制剂进行化学浸出实验，从动力学角度探究其对碳酸盐岩中粘土矿物溶解的影响。结果表明：阳离子表面活性剂能够抑制粘土矿物溶解，且抑制能力与碳原子数有关；25g/L CTAB 对粘土矿物中 Al^{3+} 抑制率最高达 85%、对 La^{3+}达 60%，30g/L 的 STAB 对 Al^{3+}最高达 90%、对 La^{3+}达 70%；对天然碳酸盐岩的酸溶-稀土元素分析，STAB 处理后 Al 离子含量显著下降，稀土元素酸溶结果也均下降，说明黏土矿物溶解被有效抑制，且 STAB 处理能有效排除黏土矿物对碳酸盐矿物稀土元素特征异常值指数的干扰，有效消除其对自生碳酸盐矿物稀土元素反演古环境的干扰。

关键字 碳酸盐岩，稀土元素，阳离子表面活性剂，古环境反演

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

《地矿分析新视角：微焦点工业 CT 的应用潜力》

邹志红*
奥影检测科技（上海）有限公司

本次演讲将结合案例，探讨 微焦点工业 CT 在地质和矿产分析领域的重要应用。介绍其工作原理及独特优势，展示如何通过非破坏性检测为地矿分析提供精准的数据和见解，助力地矿行业在资源勘探、质量评估等方面实现技术升级和创新发展。

关键字 微焦点工业 CT、无损 CT 检测、工业 CT 检测、卧式 CT、X 射线工业 CT 系统

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

一种降低电感耦合等离子体质谱大气相关干扰的装置

姜昕[1]、刘勇胜*[1,2]、刘文贵[1]、蔺洁[1]、刘箴一[1]、陈力飞[1]、朱希[1]、张文[1]、胡兆初[1]
1. 中国地质大学（武汉）
2. 长江大学

本研究研制了一种降低大气相关干扰的装置（AIRD）用于降低 ICPMS 分析中的大气相关干扰。由于氩气 （Ar） 和氦气 （He） 的惰性特性，使用氩气 （Ar） 和氦气 （He） 作为保护气体，评估了 AIRD 在减少 H、C、N 和 O 等大气气体引起的干扰方面的有效性。氪气 （^{82}Kr） 用作监测和校正仪器灵敏度漂移的内标。使用气体动力学模拟优化了隔离气的流速，揭示了 10 L min^{-1} 的阈值，以实现最佳降低干扰效果。结果表明，He 在降低干扰方面具有优势，与 Ar 相比，$^{12}C^+$ 减少了 32%，$^{15}N^+$ 减少了 51%，$^{16}O^+$ 减少了 56%，$^{16}O^1H^1H^+$ 减少了 54%，$^{40}Ar^{14}N^+$ 减少了 51%，$^{40}Ar^{16}O^+$ 减少了 42%。此外，即使在停止通入隔离气后，AIRD 仍保持较低的氧化物产率，氧化物产率保持在约 0.03%持续 24 小时以上。LA-ICP-MS 与 AIRD 联用的分析表明，与不使用 AIRD 的正常分析相比，ThO/Th 可以从 0.92% 降低到 0.15%。实验调查进一步表明，AIRD 会影响元素灵敏度，尤其是以 He 作为保护气体时，在 ^{82}Kr 的信号强度中观察到 ~25.7% 的增强。

关键字 ICP-MS，AIRD，Oxide interferences，Shielding gas

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

面向微/纳塑料分析的冷辅助固相微萃取装置设计及应用

纪彩霞、杨凯丽、肖丽、徐生瑞*
河南师范大学

作为一种新兴污染物，微/纳塑料（MNPs）的污染逐渐成为环境、地质和生态科学研究的热点，为了评估其归趋、生态毒理效应，建立一种简单、灵敏、绿色的 MNPs 分析方法至关重要。本研究针对目前热解析-气相色谱质谱法中存在的灵敏度低、前处理步骤繁冗、操作条件要求高等问题，引入冷辅助固相微萃取技术（CA-SPME），设计研制出一套基于热电制冷的 CA-SPME 装置（图 1），借助其集样品加热、冷萃取富集于一体的独特优势，实现了 MNPs 的一步“热解-标志物萃取富集”，结合 GC-MS，成功应用于土壤、水体样品中聚甲基丙烯酸甲酯（PMMA）MNPs 的高灵敏分析（图 2）。结果发现本方法成功鉴定出 PMMA 中 8 种热解产物，以 MMA 为标志化合物，分别评价了萃取时间、滤膜、样品基质、粒径、盐度、溶解性有机质对热解-萃取分析的影响。在最佳条件下，该方法具有较宽的线性范围（水样：0.5–2000 μg，土壤：5–1000 μg）和较高灵敏度，水样和土壤样品的检出限分别为 0.014 μg 和 0.28 μg，相对标准偏差分别为 9.2%和 13.7%。最终成功应用于实际水、土壤、沉积物样品中 PMMA MNPs 的测定。本研究为 MNPs 的绿色简便分离分析开辟了新途径，也为其污染监测、调查和环境毒理学研究提供重要的技术支撑。

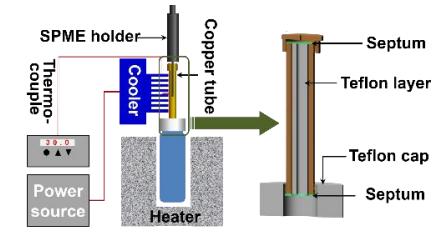


图 1 CA-SPME 装置示意图

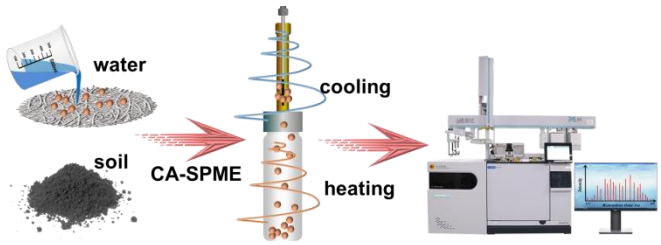


图 2 基于 CA-SPME 技术分析 MNPs 示意图

参考文献

1. Xu, S.; Li, H.; Xiao, L.; Feng, S.; Fan, J.; Pawliszyn, J. Anal. Chem. 2024, 96, 10772-10779.
2. Xu, S. R.; Li, H. M.; Xiao, L.; Wang, M. M.; Feng, S. L.; Fan, J.; Pawliszyn, J. Anal. Chem. 2024, 96, 2227-2235.
3. Xu, S.; Li, H.; Dong, P.; Wang, M.; Chen, C.-P.; Feng, S.; Fan, J. Anal. Chim. Acta 2022, 1221, 340159.
4. Xu, S.; Shuai, Q.; Pawliszyn, J. Anal. Chem. 2016, 88, 8936-8941.
5. Xu, S.; Li, H.; Wu, H.; Xiao, L.; Dong, P.; Feng, S.; Fan, J. Anal. Chim. Acta 2020, 1115, 7-15.

关键字 冷辅助固相微萃取，微/纳塑料，分析，装置设计

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

深海孔中收发一体 X 射线成分探测技术

蒋镖*、葛良全、张庆贤、肖鸿飞
成都理工大学

X 射线荧光测井技术是重要的测井手段，可以快速、便捷地测定井壁中元素含量。本研究针对深海高压、高腐蚀等极端环境，研制了一种深海 X 射线荧光成分原位探测装置，重点解决了高抗压探测窗材料选型、自主测量孔壁贴靠机构设计、同位素激发源设计和海水影响校正等技术难题。采用 GEANT4 模拟软件分析水层对测量结果的影响，并优化了 Be 材料作为耐腐蚀和高透射率 X 射线荧光探测窗材料，开展材料抗压性能模拟分析，设计厚度为 2mm 的窗口。其次，通过有限元网格划分和压力分析，对 X 射线发射及接收系统的机械结构进行了详细设计，并对不同厚度的 Be 窗及海水层对测量结果的影响进行了模拟分析，通过设计主动贴壁装置和优化探管结构，实现小口径测量段在海水压力下有效贴壁，以减少海水对 X 射线的吸收。最后，设计了包括 X 光管驱动模块、探测器制冷模块、模拟信号处理模块、数字信号处理模块以及电源模块等多道测量硬件系统，并开发了 X 射线荧光多道能谱采集和分析软件。最后通过对南印度洋多金属硫化物矿区开展海底 X 射线荧光原位分析实验，实验结果表明，系统能在最大 4000m 水深下有效测量 Cu、Fe、Zn、Pb、Au、Ag、Co 等元素。

关键字 X 射线荧光分析，深海原位测量，多道能谱测量

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

X 射线技术助力地址化探分析

汤家伟*
赛默飞世尔科技（中国）有限公司

波长色散 X 射线荧光(WDXRF)是用于元素分析应用的两种通用型 X 射线荧光仪器之一。在 WDXRF 光谱仪中，样品所产生的荧光信号被分光晶体衍射到不同角度，通过测角仪将晶体与探测器转置于不同角度可以收集测试不同波长段的能量信号从而实现对样品中元素组成的定性定量分析。

从上世纪 80 年代开始，随着 1:200000 区域地球化学扫面国家计划（RGNR）的开展实施，众多地质实验室开始采用以 WDXRF 为主要设备的第三代多元素分析系统，20 世纪末，在 76 种全国地球化学图集编制工作中，WDXRF 已成为地质实验室必不可少的分析仪器之一。经过 70 多年的技术发展，WDXRF 凭借其测试的高效率、高灵敏度、高精度等特性，在地质分析领域仍扮演重要的角色。

关键字 X 射线荧光

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

初探真空深紫外（157nm）激光剥蚀系统在地矿分析中的潜力

彭德义、陈开运、包志安、聂晓娟、袁洪林*
西北大学

近年来，激光剥蚀结合电感耦合等离子体质谱技术（LA-(MC-) ICP-MS）广泛应用于地球科学、环境科学和考古学等领域；其具有良好的空间分率、较高的分析精度和简便的制样流程等优点。LA-ICP-MS 技术中，激光剥蚀系统是重要的研究部分，其直接决定了分析结果的可靠性和精度。在最近约 30 年的发展中，激光剥蚀系统的波长逐步从 1064 nm (Nd:YAG) 缩短至 193 nm (ArF) 的准分子激光，激光脉宽也从常规的纳秒缩短为皮秒和飞秒。一般的，在 LA-(MC-) ICP-MS 分析中，更短的波长和更窄的脉宽具有更小的元素（同位素）分馏，因而具有更好的分析精度和准确度。在 LA-(MC-) ICP-MS 分析中广泛被使用的最短波长仍然是 193 nm (ArF) 的准分子激光；比 193 nm 更短波长的激光剥蚀分析技术鲜有报道。截至目前，有望用于固体样品激光剥蚀分析的更短波长是真空深紫外（VUV）157 nm (F_2)。与 193 nm (6.4 eV)相比，157 nm 的激光器具有更高的光子能量（7.9 eV, 约提高 20%），更高的光子能量有利于提高激光剥蚀材料的能力。此外，对于常规准分子激光难以剥蚀的材料（萤石、高纯石英等），157nm 激光或许具有更好的剥蚀能力。然而，157nm 的激光穿透力不足、无法在大气中传输，目前暂无成熟的可用于实际样品分析的商业激光剥蚀系统。

基于上述问题，本文研制了一套真空深紫外的 157nm 激光剥蚀系统。光路采用高纯氮气保护，并配有同轴观察系统；此外，为了提高气溶胶传输效率，减小位置效应，本文研制了低本底、高提取率的激光剥蚀池。首先我们对该激光剥蚀系统进行了基本性能考察，包括激光能量、频率、不同的束斑大小等对剥蚀效果的影响。其次对剥蚀坑的形貌、不同基体材料的剥蚀速率等进行了探究。为了评估该 VUV 157 nm 激光用于微区原位分析的潜力，本文用 NIST 610, USGS 系列玻璃（BHVO-2G, BIR-1G）, MPI-DING 系列玻璃（GOR128-G, GOR132-G），以及萤石、石英等样品对微量元素的分馏因子进行了评估。不同矿物中微量元素的分馏因子都接近 1.0，证明了在剥蚀过程中具有较小的分馏和基体效应，可以忽略不计。最后，该系统用于微量元素定量分析和锆石（TANZ, Temora-1, GJ-1, Mudtank, SK10-2 和 Plešovice）U-Pb 定年的潜力被考察。六种矿物的微量元素分析结果都与推荐值吻合，锆石的 U-Pb 年龄也与文献报道的 ID-TIMS 值在误差范围内一致。综上所述，157nm 准分子激光具有更高的剥蚀能力，更小的热效应和分馏效应，在地矿分析中展现了较好的潜力；但本文不足的是，暂未进行 157nm 准分子激光用于非传统稳定同位素的原位分析，其相关数据仍处于空白。

关键字 激光剥蚀系统，157 nm，LA-ICP-MS，微区分析

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

富铬铁氧化物原位铁同位素组成精确测定

吕心婷[1]、何德涛*[1]、刘勇胜[2]、李明[1]、蔺洁[1]、陈唯[1]、胡兆初[1]
1. 中国地质大学（武汉）地质过程与矿产资源国家重点实验室
2. 长江大学

赤铁矿和磁铁矿等铁氧化物矿物常见于各种地质环境中。它们的铁同位素组成是一种有效的地球化学示踪剂，应用于地球科学的各个领域。然而，采用 LA-MC-ICP-MS 进行原位 Fe 同位素分析时缺少化学消解与分离提纯过程，样品中的基体元素会随 Fe 一同进入质谱中对 Fe 同位素的测定产生干扰。其中，$^{54}Cr^{+}$对 $^{54}Fe^{+}$的同质异位素干扰严重降低了 Fe 同位素分析的准确度和精度。天然铁氧化物矿物中的铬含量变化范围非常大，部分样品铬含量甚至高达百分水平。有关这些富铬铁氧化物的研究目前仅限于全岩分析。高铬铁氧化物原位 Fe 同位素分析过程中铬干扰校正方法的缺乏，严重阻碍了铁氧化物矿物原位铁同位素示踪技术的发展。

本研究开发了一种精确测定富铬铁氧化物原位 Fe 同位素组成的分析方法。采用铬同位素组成均一的铬金属作为干扰校正标样，通过在样品分析过程中监测铬金属的铬同位素，获得铬的分馏因子，将其应用于富铬样品进行铬干扰校正。研究中为了降低原位测定过程中的基体效应，采用飞秒激光和湿等离子体技术相结合的方式实现 Fe 同位素组成的非基体匹配测定。为了对该干扰校正方法的可行性进行评估，我们通过粉末压片烧结技术合成了一系列不同铬浓度的赤铁矿、磁铁矿样品。测定结果表明，采用我们所建立的干扰校正方法后，由 ^{54}Cr 同质异位素干扰引起的偏差可以被有效消除。对于 $^{54}Cr/^{54}Fe$ 高达 0.51（Cr/Fe 高达 1.27）的样品，校正后的$\delta^{56}Fe$ 可在 0.10‰的外精度下与推荐值一致。这进一步证明了我们的方法在精确测定高铬铁氧化物 Fe 同位素组成方面的可靠性。

关键字 Fe 同位素，干扰校正，富铬铁氧化物，LA-MC-ICP-MS

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

离子探针分析中电气石硼同位素的基体效应及其在线校正策略

陈佑纬*、董少花、高剑峰
中国科学院地球化学研究所

硼元素具有质量轻、化学性质活泼以及亲流体相中等地球化学特征，使得其同位素在地质体的各种地质活动中的分馏较大，因而硼同位素常作为重要的地球化学示踪剂被广泛应用于在地球科学研究中。电气石是地壳中最重要的富硼矿物，其具有分布广泛，晶内元素扩散速率低以及极好的稳定性等特征而备受关注，因此电气石中的硼同位素组成特征是利用硼同位素解译示踪地质过程的重要研究工具。

离子探针分析是原位获得电气石中硼同位素特征重要的分析方法之一。尽管以往的许多工作显示，离子探针分析中不同成分的电气石标样的测试值与推荐值存在不同程度的偏差，但由于分析精度较差等原因，有关离子探针分析电气石的硼同位素中可能存在基体效应的还未得到证实。Marger et al(2020)利用 CAMECA IMS 1280HR 获得了高精度的电气石的硼同位素，同时也证实了基体效应的存在，并提出利用电子探针分析获得的 FeO, MnO,SiO2 和 F 等含量，建立了多元线性回归方程以校正基体效应。但该方法比较费时且校正复杂，同时电子探针和离子探针的采样量不一样也可能造成数据的不匹配。本次研究首先利用纳米离子探针获得了 8 个电气石标样品的硼同位素，结合电子探针的主量元素特征，讨论了电气石的主量元素对离子探针分析中硼同位素的基体效应，提出利用电气石的 FeO 和 MnO 的成分可有效校正基体效应，获得精确的硼同位素组成。在这些研究的基础之上，本次研究还通过设定合理的检测器组合，优化仪器参数和测试条件等，建立了利用纳米离子探针分析电气石硼同位素的在线校正的分析方法。该方法可在准确获得高精度硼同位素的同时，利用同时获得 Fe 和 Mn 等主量元素信息建立线性回归方程校正进行基体效应的在线校正。该方法不仅具有空间分辨率和分析精度较高的优点，同时也使得硼同位素基体效应的校正变得更加可靠，因此可广泛应用于地球科学的相关领域研究之中。

关键字 离子探针 硼同位素 电气石 基体效应

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

LA-ICP-MS 全岩整体分析标准物质研制和基体效应研究

张文*
中国地质大学（武汉）

矿石矿物中的金属元素的测定对于了解矿床的潜在经济意义和成因具有重要意义。LA-ICP-MS 被认为是分析天然样品中微量元素的绿色高效方法。然而，缺乏与矿石矿物相匹配的参考材料是一个主要问题。本研究开发了一种先进的湿磨法方法，制备出具有适当浓度的超细粉末压片样品。优化的方案实现了典型的粒径分布 D_{90}=1.74μm，形成具有良好粘结性和均匀性的粉末压片，适用于 LA-ICP-MS 剥蚀。对于超过 50 种元素的重复测量所得的相对标准偏差（RSD）值均小于 10%，与硅酸盐玻璃标样相当。对硅酸盐玻璃标样、商业的铁矿石压片和我们合成的超细粉末压片的系统性研究表明，使用纳秒激光剥蚀时，各种材料中均存在显著的基体效应。虽然使用飞秒激光剥蚀系统可以在一定程度上抑制激光剥蚀过程中的基体效应，但由化学组成差异引起的 ICP 中的基体效应仍然是一个难以解决的问题。“湿”等离子体模式会增强基体效应。我们的研究强调了在铌钽矿和其他矿石样品的定量分析中使用基体匹配参考材料的重要性。通过使用基体匹配的校准方法，我们成功地测定了铁矿石（MAKR-NP）和铌钽矿（LSC）中的微量元素，大多数元素的误差小于 10%。

关键字 全岩分析，LA-ICP-MS，超细粉末，微量元素，基体效应

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

国产新型飞秒激光剥蚀系统最新进展及其在地矿领域的应用

王忠强*
上海凯来仪器有限公司

激光剥蚀系统目前已成为元素及同位素分析的重要原位微区采样工具。近年来，激光剥蚀技术逐步由纳秒向飞秒发展。飞秒激光由于其脉宽极短，显著降低了热效应及元素和同位素分馏，因而在精确微区分析中表现出优越性。上海凯来仪器有限公司自研的国产新型飞秒激光剥蚀系统 GenesisGEO，是中国首台全自研国产飞秒激光剥蚀系统。本报告将概述激光剥蚀的基本原理与发展历程，介绍国产飞秒激光剥蚀系统 GenesisGEO 的优势，及其在地矿领域的新应用。

关键字 国产 飞秒 激光剥蚀

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

ICPMSDataCal-Py：一个新的 LA-ICP-MS 数据快速处理模板

毛吉、刘勇胜*
中国地质大学（武汉）

软件的优势在于其便捷性、可视化以及出色的数据处理方案所带来的数据质量的提高。尽管目前已经有许多用于 LA-ICP-MS 数据处理的专业软件，但仍然缺乏一个全面的综合解决方案。在此，我们提出一个免费、功能齐全且灵活的工具—ICPMSDataCal-Py，它是在 ICPMSDataCal 的基础上重新开发的独立软件包。在软件中使用矩阵计算进行加速以支持对来自数百个样本点的数据进行实时处理。该软件建立了标准而灵活的数据处理流程，考虑到了不同激光剥蚀方法工作流程的差异。引入了剥蚀起点进行校准，以尽量减少深度分馏对数据处理的影响。采用可选择的数据滤峰策略，有效提高数据质量。加入校正公式编辑器功能，可便捷性的自定义校准方法。支持图表样式修改，可输出高质量图表，如 U-Pb 谐和年龄、等时线、加权平均年龄等。

关键字 数据处理，软件，综合方案

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

高性能阴极荧光谱仪在矿物研究中的应用

陈莉*[1]、李洋[2]、张红雨[3]、陈昱璋[1]、徐军[1]、苏犁[3]
1. 北京大学物理学院
2. 北京金竟科技有限责任公司
3. 中国地质大学（北京）科学研究院

阴极荧光可有效揭示矿物等固体物质的内部结构特征，提供了矿物精细研究的重要途径。伴随着计算机技术、扫描电镜和仪器加工技术的长足进步，阴极荧光（CL）谱仪性能得到了很大的提高，由北京金竟科技公司（简称‘金竟’）生产的 Rainbow 和 sunny 系列阴极荧光系统，其探测器采用高性能椭球反射镜对阴极荧光信号进行收集，配合场发射环境扫描电子显微镜，可以实现大视野和高分辨率的阴极荧光成像；采用半导体光电芯片和滤波技术，能够得到强磷光样品（如磷灰石、方解石）去除磷光效应的高清晰阴极荧光图像；高能量分辨阴极荧光系统和高空间分辨扫描电镜结合，可对矿物的微区进行 CL 光谱分析，为矿物内部结构和微量元素含量变化研究提供了新的途径。

岩、矿石是地质学基础研究的主要对象，是化学成分不同的矿物集合体。石英、方解石、白云石等造岩矿物，以及锆石、磷灰石、独居石、磷钇矿、榍石等副矿物普遍具有多期特性，在岩石成因、成岩年龄、成岩物理化学条件研究中具有重要价值[1]。利用金竟的高性能 CL 对多种矿物进行了高清晰 CL 图像和 CL 光谱分析，精细揭示了矿物内部结构、微量元素的变化规律、成因类型。例如：1、锆石的 CL 图像和谱峰分析为确定原岩成因、成岩作用过程、U-Pb 年龄测定点位的选择和年龄结果的地质意义讨论等提供了必要保证。2、高空间分辨 CL 图像特征清晰揭示了石英的多期生长、显微构造变形特征，以及成岩机理；石英的 CL 谱峰特征也有助于成岩温压条件和微量元素含量变化规律的认识。3、新型阴极荧光谱仪（金竟 Sunny 型 CL）可有效扣除磷灰石等具有强磷光效应矿物的“尾影”现象，从而获得高清晰的磷灰石 CL 图像，有效保证磷灰石微区 U-Pb 年龄测定和微量元素含量测定的准确性；CL 谱图研究也为磷灰石的化学成分特征、成因，以及相关的成岩、成矿机理研究提供了新的研究手段。

利用金竟 Rainbow 型 CL 系统进行了不同类型金刚石的 CL 图像和光谱特征分析，揭示天然金刚石和实验室培育金刚石存在明显差异，即天然金刚石、高温高压培育金刚石、化学堆侵培育金刚石各自具有特定的 CL 图像和 CL 光谱，因此，CL 光谱仪可作为金刚石类型鉴定的重要分析仪器之一。

关键字 阴极荧光谱仪，阴极荧光图像，磷光效应，阴极荧光光谱，金刚石类型鉴定

参考文献

1. J. Götze, Microsc. Microanal. 2012, 18, 1270–1284.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

同位素稀释—电感耦合等离子体串联质谱法（ID-ICP-MS/MS）准确测定地质样品中的 S-Se-Te

李嘉威、宗克清*、汪在聪、何焘
中国地质大学（武汉）地球科学学院 地质过程与矿产资源国家重点实验室

硫（S）、硒（Se）和碲（Te）是同属于第六主族的亲铁和强亲铜挥发性元素，是研究核幔分异、挥发性物质运移以及壳幔岩浆演化等关键地质和宇宙化学过程的重要示踪剂[1]。然而，由于元素的挥发性以及测试中受到严重质谱干扰的影响，地质样品中 S-Se-Te 的准确测定非常困难。现今可以通过在样品消解时加入同位素稀释剂，结合化学分离富集以及氢化物发生装置在高分辨率电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）上进行分析[2]。这类方法具备同位素稀释法的优势，即可以确保当样品达到同位素平衡后能够无视元素的挥发损失，但流程中需要额外装置以及经历复杂繁琐的化学分离步骤。电感耦合等离子体串联质谱（ICP-MS/MS）是在传统单四级杆 ICP-MS 的碰撞反应池前增加一个可以进行质量筛选的四级杆质量分析器，仪器的双重质量选择能力结合不同的反应气体可以精准控制反应池中发生的分子离子反应，实现分析物与干扰的在线分离，成为解决 ICP-MS 测试中质谱干扰问题最有效的手段之一[3]。

本研究将同位素稀释法的溶样优势与 ICP-MS/MS 在线消除质谱干扰的分析优势有效结合，建立了准确高效测定地质样品中 S-Se-Te 的分析方法。我们优化了仪器硬件配置、碰撞反应池参数和反应气种类及流量，确定了 S、Se、Te 在不同反应气体（O_2 及 N_2O）下的最佳分析策略。对九种不同岩性（从超基性岩到酸性岩）的国际地质标样进行了 HNO_3-HF 与逆王水两步消解，并以硝酸介质稀释到 1000 倍，随后直接引入 ICP-MS/MS 进行测试。最终计算结果与进行了化学分离富集的常规 ID-ICP-MS 结果高度一致。该方法大大缩短了常规同位素稀释法测试的样品前处理时间，减少了试剂消耗量，提高了样品测试效率。同时也为地质样品中低含量高干扰元素的准确测定提供了新思路。

关键字 S-Se-Te，同位素稀释法，ICP-MS/MS，质谱干扰

参考文献

1. Wang, Z., Becker, H., 2013. Ratios of S, Se and Te in the silicate Earth require a volatile-rich late veneer. Nature, 499(7458): 328-31.
2. Zou, Z., Wang, Z., Cheng, H., et al., 2020. Comparative Determination of Mass Fractions of Elements with Variable Chalcophile Affinities in Geological Reference Materials with and without HF-desilicification. Geostandards and Geoanalytical Research, 44: 501-521
3. Bolea-Fernandez, E., Balcaen, L., Resano, M., et al., 2017. Overcoming spectral overlap via inductively coupled plasma-tandem mass spectrometry (ICP-MS/MS). A tutorial review. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 32(9): 1660-1679.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

固体进样光电直读光谱技术在战略找矿中的应用

董学林*、马景治、贾正勋、李光一
湖北省地质实验测试中心

为更好服务新一轮找矿突破战略行动，解决野外现场锂、铍等元素测试难题。本文基于研制的车载型光电直读光谱仪，建立了固体进样测定矿石样品中锂、铍、铌及稀土等元素的分析方法。研究表明：根据元素的不同蒸发行为，以三氧化二铝、二氧化硅、碳粉等配制不同配比的缓冲剂，选择 Ge、Pd 等作为相应的内标元素，可实现矿石样品中锂、铍、铌等 22 种元素的准确测定；采用国家一级标准物质对方法的准确度和精密度进行了验证，分析结果相对误差均小于 17.08%，相关偏差均小于 9.11%；20 件实际样品测定结果与 ICP-OES、ICP-MS 分析结果相吻合，相关系数大于 0.98。本文采用固体进样技术操作简单，相比酸溶、碱熔法处理更加环保，根据战略性矿产元素特性，研发不同配比的缓冲剂、优化仪器工作参数等分析条件，建立了野外现场锂、铍等多元素分析方法，可大大提高矿产勘察效率。

关键字 固体进样，光电直读光谱技术，战略矿产

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

离子吸附型稀土野外快速分析方法研究

张磊[1]、杨斌[2]、王晶晶[3]、王祎亚[1]、樊兴涛*[1]
1. 国家地质实验测试中心
2. 江西省地质局第七地质大队
3. 苏州佳谱科技有限公司

离子吸附型稀土野外勘查中目前主要采用的现场快速测试方法为“现场滴定法”，因其仅靠目视判断浑浊度，所以受风化壳中 Al、Ca、Si、Na 等杂质影响较大，不能完全指示离子相稀土元素且对离子相稀土单元素缺乏指示意义[1-2]。因此，建立一种快速、精确的离子吸附型稀土离子相单元素野外现场分析方法十分必要。

本文用硫酸铵溶液淋滤浸取离子相稀土元素，以采用高灵敏度双曲面弯晶全聚焦技术的便携式 XRF 测试[3-4]，建立了离子相稀土单元素野外现场分析新方法。实验室配制 9 种不同浓度梯度的稀土混标溶液，在弯晶 XRF 上建立溶液中 Y、La、Ce、Pr、Nd、Sm、Eu、Gd、Tb、Dy、Ho、Er、Tm、Yb、Lu 等 15 种稀土元素分析曲线，决定系数为 0.9997~0.9919。通过构建光谱解析模型、全谱拟合以及在模型中加入质量吸收系数，三个步骤来校正实际测量过程中稀土元素间以及与其他元素的重叠干扰（混标溶液和实际样品的实际谱图见图 1）。

将 6 件南岭地区实际样品的分析结果与室内 ICP-MS 的测定结果进行线性分析，含量高于检出限的 10 个元素的决定系数 R^2 介于 0.9966~0.8386，说明两者测定数据吻合度较高，证明了本方法的可靠性。

选取一件低含量的离子吸附型稀土实际样品，以本方法连续制备 11 个样品并进行测定，以测定结果的 3 倍标准偏差计算检出限，以 3 倍检出限为方法测定下限，确定方法检出限为 0.41~5.41μg/g。通过对 6 件实际样品的独立处理并测定 10 次，计算 RSD 均<10%，表明方法的精密度满足实验要求。

以本研究所建立离子吸附型稀土野外现场分析方法在南岭靶区开展野外勘查应用示范，发现离子相稀土总量 634.91μg/g、离子相轻稀土含量 524.4μg/g、离子相重稀土含量 202.07μg/g 的多个异常点位，部分点位已达到成矿品位，说明本方法可在野外现场提供较准确的离子相稀土分析结果，较“现场滴定法”的目测估算有了巨大进步，检测效率和野外工作效率显著提升，有较强的指导意义。

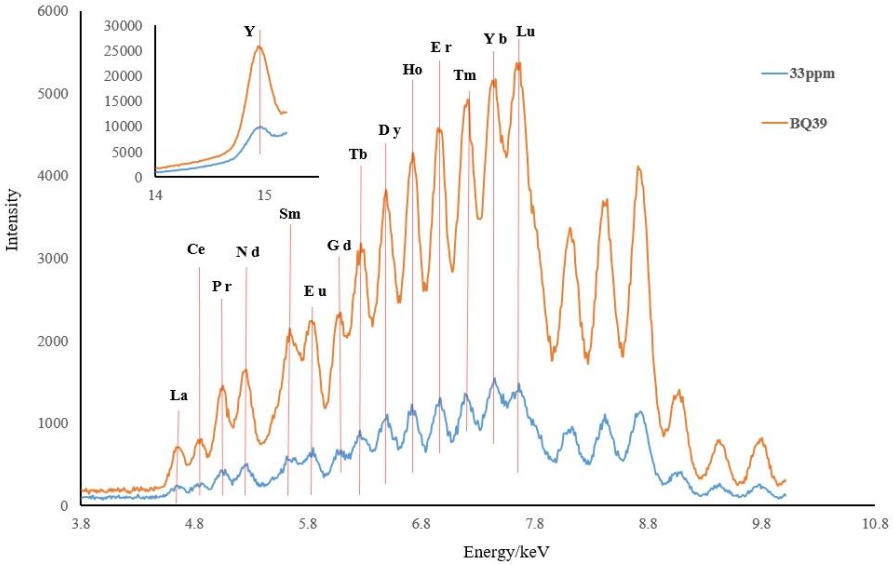


图 1　15 个稀土元素混标溶液（33ppm）和实际样品 BQ39 的实际谱图

关键字 离子吸附型稀土，离子相稀土，野外现场分析，弯晶 X 射线荧光光谱仪，双曲面弯晶全聚焦技术

参考文献

1. 严志安, 燕利军, 陈曹军, 等.地质与勘探, 2021, 57(4):796-807.
2. 潘泽伟, 罗建宏, 唐忠, 等.中国稀土学报, 2022, 40(2):313-320.
3. 韩伟丹, 杜祯宇, 任立军, 等.冶金分析, 2021, 41(8):22-33.
4. 程大伟, 刘明博, 沈学静, 等.冶金分析, 2022, 42(1):10-17.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：报告

便携式锂钾分析仪的研发及其在战略性找矿中的应用

袁继海*
国家地质实验测试中心

一直以来，小型台式能量色散-X 射线荧光光谱仪是多金属矿产野外现场分析的主力，但受仪器原理限制，无法分析轻元素 Li。国家地质实验测试中心野外现场分析技术团队在国家、部、局项目的支持下，自主研发了一款基于大气压液体阴极辉光放电原理和微型 CCD 光纤光谱仪相结合的小型发射光谱仪，简称便携式 Li-K 分析仪，该仪器不仅体积小、重量轻、功耗低、成本低、操作简单、分析速度快，也无需任何载气或辅助气体，野外可采用 24V 直流电或太阳能板充电的方式供电，携带方便，可以分析盐湖卤水、深部富钾卤水、可溶性钾盐中的 Li、K 等元素，通过现场微波消解溶样，也可以分析固体锂辉石矿中的 Li、Rb、Cs 等战略性金属元素，可以为我国“十四五”战略性矿产找矿行动提供现场技术支撑。

关键字 战略性矿产；锂矿；钾盐；现场分析；液体阴极辉光放电发射光谱仪；光纤光谱仪

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：墙报

基于液压驱动的自动柱色谱系统的开发

张文开[1]、朱振利*[1]、Nick Belshaw[1,2]
1. 中国地质大学（武汉）
2. 牛津大学

金属稳定同位素在地质、环境以及生命科学等领域得到了越来越广泛的关注。这些领域的研究通常都需要分析大批量的样品，尤其对于同位素医学应用十分重要。高精度的同位素分析的前提是样品中目标元素的有效分离纯化，但常规手动样品纯化方法繁琐耗时，劳动强度大，难以满足同位素研究的发展需求。近年来，相继报道了一些自动分离富集的方法和装置：比如 ESI 公司开发的 pre-Fast 系统，传统蠕动泵/柱塞泵驱动系统，机械臂辅助式系统，阵列式的多通道系统，红外液滴计数的柱色谱系统[1]。但这些装置仍存在使用金属器件、成本高等问题。因此，新型有效的自动分离纯化装置仍具有重要研发价值。

本研究开发了一种基于液压驱动的简单、经济、可靠的新型自动柱色谱系统。该系统由注射器系统和阵列式的多通道开柱系统组成，避免了其他自动过柱系统中蠕动泵或注射泵、以及多通道阀等包含大量金属的器件的使用，实现了控制单元、驱动单元中电子元件与分离纯化部分的隔离。这既有助于降低成本，大大提高了实验效率，又实现了分离富集单元完全无金属部件，显著降低了金属的潜在污染。我们首先验证了液压驱动淋洗液的可行性，证实了采用液压驱动可以精确的控制淋洗液，淋洗液的加入体积误差很容易控制在低于 1%的精度水平（流速控制范围为 0.1～0.017 g/s，注射器间的相对标准偏差为 0.44～0.90%）。此外，为验证所开发的基于液压驱动的自动柱色谱系统的实际分离效果，我们以血清样本和地质样本中铜（Cu）的分离纯化程序为例，探究了该系统的 Cu 元素纯化的回收率并评估了全流程空白情况。结果表明，该系统对模拟混标溶液和血清样本的 Cu 纯化回收率可达 97.5 ± 2%，对 BCR-2 和 GSD-12 等地质样品的 Cu 纯化回收率可达 94 ± 1%，基体元素回收率几乎为零并且全流程的本底低于 0.7 ng，充分证明了该自动柱色谱系统的实际性能。这些结果充分证明了这种利用液压间接驱动的自动柱色谱系统是一种可以有效用于元素分离纯化的全新手段。

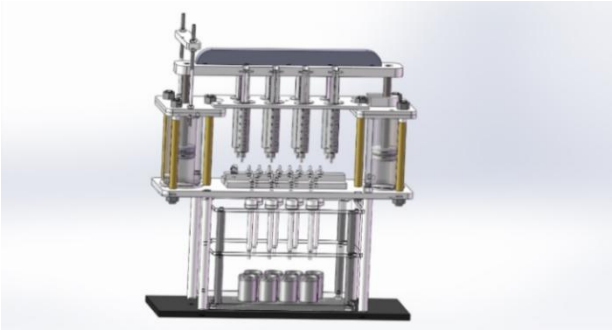


图 1 基于液压驱动的自动柱色谱系统

关键字 金属稳定同位素，自动柱色谱分离，铜同位素

参考文献

1.Zhou, F.Y., et al., Development of an Automatic Column Chromatography Separation Device for Metal Isotope Analysis Based on Droplet Counting. Anal Chem, 2021. 93(19): p. 7196-7203.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：墙报

一石三鸟:基于 ZIF-67 萃取、氧化和基体辅助光化学蒸气发生电感耦合等离子体质谱法测定超痕量碲

余莹、黄渭文、陈星、宋泽霖、高英*
成都理工大学

碲（Te）是一种具有生物毒性的类金属元素，在天然水体中丰度极低。研究利用 ZIF-67 金属有机骨架材料集萃取、氧化和基体辅助于一体，开发了一种新型光化学蒸气发生电感耦合等离子体质谱法测定环境水样中痕量 Te 的新方法。ZIF-67 材料首先作为吸附剂预浓缩样品溶液中的 Te(IV)和 Te(VI)；随后作为钴离子的前驱体，加速了富集相中 Te(IV)和有机化合物的氧化，并促进了 PVG 反应过程中 Te 的高效还原。结果表明，在较宽 pH 范围内，该材料在 5 分钟内可以实现环境水样中 Te(IV)和 Te(VI)共同定量吸附。将富集相从样品溶液中分离后，用含有 2% (v/v) H2SO4 和 10% (v/v) H2O2 的溶液将其溶解，并在 200 ℃条件下加热 5 分钟，实现富集相中有机质的完全解离以及将 Te 全部氧化为 Te(VI)。在溶解过程中，ZIF-67 释放的 Co(II)离子作为催化剂参与了基于芬顿反应的氧化过程，从而增加了氧化自由基的生成。与传统的氢化物生成（HG）方法中的还原过程相比，该方法的样品预处理时间缩短了约 6 倍，且极大地避免了样品损失和污染的可能性。此外，Co(II)离子的存在，明显提高了 Te 的 PVG 效率，显著促进了挥发性物质（$Te(CH_3)_2$）的生成，提高方法的分析灵敏度。在选定条件下，经过 50 倍预浓缩后，检测限（LOD, 3σ）为 0.6 ng L-1。所提出的方法已成功应用于湖水和河水样品的分析。该方法为解决传统固相萃取和 ICP-MS 之间的兼容性问题提供了一种新的解决方案，实现了环境样品中痕量元素的直接、快速和高灵敏度分析。

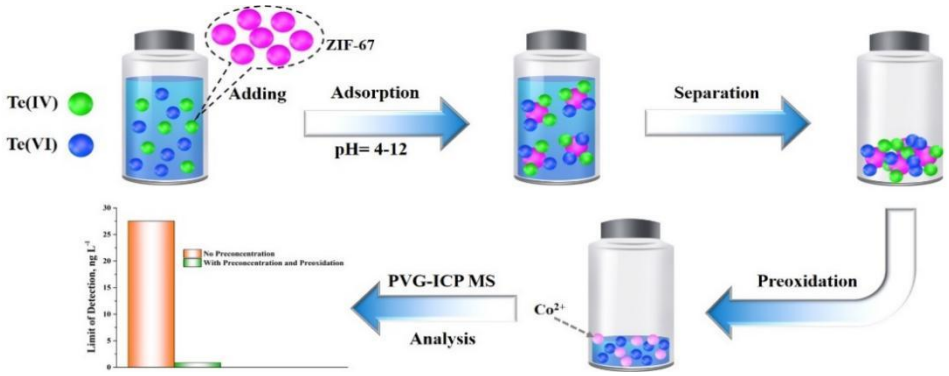


图1. 实验原理图

关键字 碲，ZIF-67，光化学蒸气发生，电感耦合等离子体质谱

参考文献

1. N. Belzile, Y.W. Chen, *Appl. Geochem.*, **2015**, 63, 83-92.
2. Q. Mou, L. Dong, L. Xu, Z. Song, Y. Yu, E. Wang, Y. Zhao, Y. Gao, *J. Anal. Atom. Spectrom.*, **2021**, 36, 7. 1422-1430.
3. A.D. Bokare, W. Choi, *J. Hazard. Mater.*, **2014**, 275, 121-135.
4. W. Zeng, J. Hu, H. Chen, Z. Zou, X. D. Hou, X. M. Jiang, *J. Anal. Atom. Spectrom.*, **2020**, 35, 7, 1405-1411.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：墙报

过渡金属离子辅助铌和钽的光化学蒸气发生：挥发性物质生成及纳米粒子形成

董亮、高英*
成都理工大学

光化学蒸气发生（PVG）是利用低分子质量有机酸（LMWOAs）在紫外线照射下产生的还原性自由基和水合电子等活性物质与分析物相互作用转化成对应的挥发性物质，主要包括自由原子、氢化物、羰基化合物、烷基化合物和氧化物。自 2003 年以来，它已被用作原子光谱法中的进样方法，取代传统的气动雾化进样进行元素分析。铌（Nb）和钽（Ta）在地球化学领域被视为高场强元素。在这项工作中，首次报道了 Nb 和 Ta 的 PVG。在甲酸溶液中，Nb 和 Ta 可通过光化学还原转化为挥发性物种。Cu^{2+}、Co^{2+}、Cd^{2+}等过渡金属离子的加入可以提高 Nb 和 Ta 的 PVG 产率。其中，Cu^{2+}是最好的敏化剂，与不含过渡离子的体系相比，Nb 和 Ta 的分析灵敏度分别提高了 76 倍和 91 倍。采用电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）研究了 LMWOAs 浓度、过渡金属离子浓度、紫外辐射波长和光照时间以及共存离子对 Nb 和 Ta 的光化学还原的影响。利用透射电镜和 X 射线光电子能谱表征了 Cu^{2+}辅助下 Nb 和 Ta 的 PVG 的机理。在还原后收集的气相和液相中发现了零价 Nb 和 Ta 的纳米颗粒。据推测，Nb 和 Ta 产生的挥发性物质是羰基化合物。本研究的新发现将有助于进一步了解 Nb 和 Ta 的光化学性质以及紫外光照射下纳米颗粒的形成。此外，为进一步提高 Nb 和 Ta 的 PVG 效率和开发这两种元素的灵敏分析方法提供了可能。

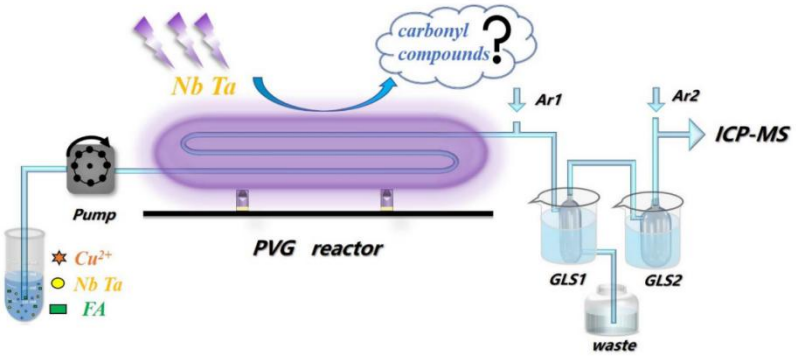


图 1. Nb 和 Ta 的 PVG 装置示意图

关键字 光化学蒸气发生，铌，钽

参考文献

1. Y. Gao, M. Xu, R. E. Sturgeon, et al., *Anal. Chem.*, **2015**, 87(8), 4495–4502.
2. J. Hu, H. J. Chen, X. D. Hou and X. M. Jiang, *Anal. Chem.*, **2019**, 91(9), 5938–5944.
3. R. E. Sturgeon, *J. Anal. At. Spectrom.*, **2017**, 32(12), 2319–2340.

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：墙报

三星堆遗址 K7 出土玉石器风化机理研究

王凤娇*[1]、丁力[2]、刘建成[1]
1. 四川省文物考古研究院
2. 南漳县自然资源和规划局

三星堆遗址 7 号“祭祀坑”出土部分玉石器出现了严重的表面粉化剥落、溶蚀和孔洞等多种风化病害，严重影响了玉石器文物的提取与保存。然而，当前对三星堆出土玉石器的研究多集中于器型、材质和玉料溯源等方面，玉石器的风化机理在很大程度上被忽视。本研究利用光学显微镜（OM）、激光共聚焦拉曼光谱仪（LRS）和能量色散型 X 射线荧光光谱仪（EDXRF）表征三星堆出土玉石器的微观形貌、矿物类型及组合和元素组成及含量等；同时测定埋藏环境土壤的酸碱性、含水率和密度等。结果表明，各玉石器主要由透闪石和碳酸盐矿物组成，其中碳酸盐矿物易溶蚀，导致玉石器孔隙发育、结构疏松。研究还还发现，部分玉石器中存在透闪石向透辉石的矿物热相变过程，表明玉石器经历过高温。以上结果为三星堆玉石器的长期保存、修复与管理提供了科学依据。

关键字 三星堆，玉石器，风化

参考文献

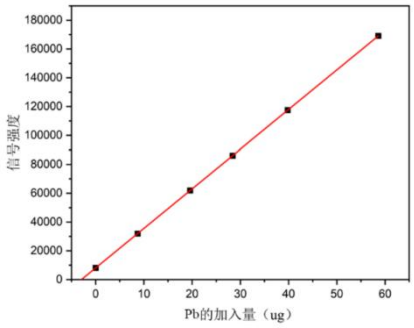
1. H. Lu, W. L. Fu, S. Y. Xu, J. Chai, H. L. Ran, Y. Lei and H. Zhao. Characterizing ancient jade by on-site analysis in Sanxingdui, China. Herit. Sci., 2023, 11, 121.
2. Y. Bao, X. M. Yun, C. H. Zhao, F. Wang and Y. S. Li. Nondestructive analysis of alterations of Chinese jade artifacts from Jinsha, Sichuan Province, China. Sci. Rep., 2020, 10, 18476

分会场：36.地矿分析与仪器
交流形式：墙报

固相溶剂标准加入—LA-ICP-MS 法测定土壤中的铅元素

于海东*
中国地质调查局廊坊自然资源综合调查中心

土壤中铅含量较低，且基体成分复杂，不同地点、用途的基体差异较大，使用 LA-ICP-MS 直接测定难以找到合适的标准样品进行基体匹配，基体效应对测定有较大影响。现在常用的土壤中铅元素分析测试多为湿法分析，前处理步骤相对复杂，元素易挥发损失，酸碱试剂消耗量大，样品制备过程易受到污染且对操作人员要求较高等问题。使用固相溶剂标准加入-LA-ICP-MS 法不仅能简化样品的前处理步骤[1]，提高检测效率，还能消除基体效应对元素分析测试的影响[2]。我们制备合成了氨基功能化硅胶（SiO_2-2N）作为固体吸附剂载体[3]，并制备一系列的铅含量呈梯度变化的标准加入法分析样品，测定了土壤中铅元素的含量。固相溶剂标准加入法测定国家标 GBW07985 中铅元素含量的结果与标准值一致，重复三次测定结果的 RSD%为 3.2%。



元素	Pb
工作曲线	y=2747.6x+8078.1
R^2	0.9997
x|(y=0)/ μg	2.79
ω（g/t）	19.6
ω标准值（g/t）	19.5
相对误差RE/%	0.5
RSD%（n=3）	3.2

图 1 铅元素工作曲线，测定结果及重复性

关键字 LA-ICP-MS，固相溶剂，铅元素，标准加入法

参考文献

1. M. Tanner, D. Günther, Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2008, 391: 1211-1220.
2. 刘郑，王萌，汪冰，分析科学学报, 2020, 36: 443-448.
3. L. Li, Y. Li, H. Wang, S. Liu, Physicochemical and Engineering Aspects, 2019, 570: 322-330.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

用于单细胞蛋白质组分析的微流控单细胞分选、捕获与预处理仪器

方群*
浙江大学

本报告将介绍作者研究组在应用于单细胞蛋白质组分析的微流控单细胞分选、捕获与预处理仪器研制方面取得的进展。

最近，我们利用前期发展的序控液滴阵列（SODA）技术，研制成功自动化单细胞分选、捕获与预处理仪器，集成了单细胞分选与捕获、预处理、荧光检测、机器视觉、液体量取、仪器控制和显示等模块，能自动完成目标细胞的检测、识别、捕获与液滴生成，以及多步纳升级样品预处理操作。结合自动化机器人和机器视觉技术，将上述仪器与液相色谱仪和高分辨质谱仪联用，构建了全流程操作自动化的单细胞蛋白质组分析平台，实现细胞样品成像检测，目标细胞智能识别、挑取、转移，纳升级多步反应，微反应器封闭、孵育、移取及装载，液相色谱进样和分离，高灵敏质谱检测等操作的自动化。

基于上述系统，我们发展了“点取式”单细胞蛋白质组分析（Pick-up single-cell proteomic analysis, PiSPA）流程，在纳升级水平完成单细胞挑取、裂解、蛋白质还原、烷基化、酶解、反应终止、色谱进样和质谱分析等多个步骤。基于该流程，分别从单个 A549 和 HeLa 肿瘤细胞中定量鉴定最高超过 3000 种蛋白质组，成功实现了深度覆盖的单细胞蛋白质组学分析[1]。

关键字 单细胞蛋白质组分析

参考文献

1. Y. Wang, Z-Y. Guan, S-W. Shi, Y-R. Jiang, J. Zhang, Y. Yang, Q. Wu, J. Wu, J-B. Chen, W-X. Ying, Q-Q. Xu, Q-X. Fan, H-F. Wang, L. Zhou, J. Fang J-Z. Pan, Q. Fang, Pick-up single-cell proteomic analysis for quantifying up to 3000 proteins in a Mammalian cell. Nat. Commun., **2024**, *15*, 1279.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

高通量痕量及单细胞蛋白质组学方法开发与应用

叶子璐*
中国医学科学院苏州系统医学研究所

单细胞蛋白质组学 (SCP) 被认为能够彻底改变生物医学领域，因为它为研究单个细胞中的蛋白质组提供了前所未有的视角。在此，我们介绍了一种名为 Chip-Tip 的高灵敏度 SCP 工作流程，成功在单个 HeLa 细胞中鉴定出超过 5000 种蛋白质。此外，该方法能够直接检测单细胞中的翻译后修饰 而无需进行特定的富集。我们还证明了此流程每天可处理多达 120 个无标记 SCP 样本。

在对未定向分化的人诱导多能干细胞 (hiPSC) 进行分析时，我们始终能够量化干细胞标志物 OCT4 和 SOX2 以及内胚层标志物 GATA4、中胚层标志物 HAND1 和外胚层标志物 MAP2 在不同胚体细胞中的表达。通过开发一套高通量、高灵敏度的质谱分析方法，我们大大增强了对微量和单细胞蛋白质组及其翻译后修饰的检测能力，并加深了对多能干细胞分化等关键生物学过程的理解。该工作流程为基础生物学和生物医学领域的研究提供了新的标杆，尤其在特定细胞类型标志物和治疗靶点的识别方面具有广泛的应用前景。

关键字 质谱，单细胞，蛋白质组学

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

尿液是下一代生物标志物的来源

高友鹤*
北京师范大学

疾病的早期诊断是医学最重要的问题。早期诊断可以给医生有效治疗的机会。尿液不像血液那样受身体稳态效应的控制，能够汇集大量的疾病相关变化，因此尿液能够更好地反映早期微小的变化，是生物标志物的更好体液来源。以往很多研究集中在动物模型上证明疾病的早期，在尿液中有相应的反映。这些动物模型研究证明了尿液作为早期标志物来源的潜力。也有一些研究利用临床样本的研究，但是很多研究没有认真考虑可以影响尿液的大量各种混杂因素。我们提出如果疾病引起的变化足够大足够独特的时候，才能利用疾病对健康人群分组的方式发现疾病尿液标志物。我们还提出，如果能利用同一个人的前后对照，可以解决大量混杂影响因素的对照问题，让尿液标志物更早地用于临床。这个报告还将讨论如何从临床的角度分析当今诊断困难的病例，为医生提供线索。这个应用模式，符合个体化精准医学的未来前景。

关键字 尿液，生物标志物，早期诊断，个体化医疗，精准医疗

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

精准医学蛋白质组分析技术的标准化研究进展

应万涛*
医学蛋白质组全国重点实验室，国家蛋白质科学中心-北京，北京蛋白质组研究中心

蛋白质组学技术包括色谱分离、质谱分析和生物信息学近年发展迅猛，在疾病标志物发现、疾病分子机制探索及药物开发等方面展现巨大的潜力。但是在基础研究或临床应用中，也存在蛋白质组报告结果一致性低的挑战，究其根源，是当前在蛋白质组学领域，研究技术的标准化共识体系亟待完善。本报告将首先展示蛋白质组学技术的前沿进展、国际国内蛋白质组学标准化研究尝试，随后就发展并行化、通量化临床蛋白质组分析框架（REAL）以及在千例规模肝细胞癌组织蛋白质组学中的应用展开阐述，我们的研究显示，基于规范化的生物质谱技术和大规模蛋白质组学数据分析体系，可以实现重大疾病的分子分型、发现生物标志物和干预靶点，为疾病精准干预提供可能。

关键字 蛋白质组学，生物质谱，标准化，精准医学

参考文献

1. Y. Jiang, A. Sun, Y. Zhao, W. Ying, et al, J. Fan, X. Qian, F. He, Nature, **2019**, *567 (7747)*, 257.
2. C. Ding, J. Jiang, J. Wei, W. Liu, et al, F. He, X. Qian, J. Qin, Mol. Cell. Proteomics, **2013**, *12 (8)*, 2370.
3. S. Weng, M. Wang, Y. Zhao, W. Ying, X. Qian, J. Proteomics, **2021**, *238*, 104152.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

蛋白质聚集的组学分析技术

刘宇*、张丽华、赵群
中国科学院大连化学物理研究所

蛋白质的错误折叠与聚集会导致多种蛋白质构象疾病，如阿尔兹海默症病、帕金森综合征和系统性淀粉样变等。与具备完整三维结构的正确折叠态蛋白质不同，聚集态蛋白质大多呈现无序结构。因此，传统靶向标记蛋白质分子的化学方法不适用于聚集态蛋白质，导致相关分析方法和研究手段相对匮乏。

课题组聚焦致病聚集态蛋白质的分析化学，通过靶向聚集态蛋白质的特征理化微环境和结构域，发展了新型荧光成像探针和组分捕获探针，建立了聚集态蛋白质组的分析新方法。这些探针帮助我们实现了聚集态蛋白质的（1）示踪：调控探针荧光信号的环境敏感度，动态追踪聚集态蛋白质的聚集过程；（2）测量：调控探针荧光信号的灵敏度和线性区间，测量了聚集态蛋白质的多种理化性质，并与美国辉瑞公司合作开发了可临床应用的分析方法；（3）组分分析：调控探针的单重态荧光到三重态的能量分布重排，实现聚集态蛋白的邻近标记，并通过蛋白质组学解析其标记位点、反应机理以及互作网络。上述工具的开发，有助于更好的理解人类退行性疾病中聚集态蛋白质的致病机制。

关键字 化学蛋白质组学，蛋白质聚集，淀粉样变，阿尔兹海默症，神经退行

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

活细胞表面蛋白质功能位点挖掘和动态变化解析

张莹*、王婷、梁宇颖、马诗韵、陆豪杰、张莹，王婷，梁宇颖，马诗韵，陆豪杰
复旦大学

细胞通过暴露在细胞表面的蛋白质与周围环境进行广泛的交流，这些蛋白质被称为细胞表面蛋白质组[1]。细胞表面的蛋白质直接参与许多重要的生物学过程，包括细胞与细胞的相互作用、信号转导、细胞粘附和蛋白质运输等。尽管细胞表面蛋白具有十分重要的功能，但由于表面蛋白高疏水性、低丰度等特性，对其进行组学规模的分析仍有很大的技术挑战。为解决上述问题，我们开发了一种新型 OPA-S-S-alkyne 探针对细胞表面蛋白高选择性快速标记的方法。该方法不仅能够在 1 分钟内高效标记活细胞表面蛋白，而且能选择性靶向标记细胞表面的赖氨酸，利用其靶向标记赖氨酸的特点我们研究了细胞表面蛋白的氨基酸反应性，我们报道了第一个细胞表面赖氨酸残基反应性数据集，包括 2639 个细胞表面赖氨酸残基，并发现了数百个高反应性的功能赖氨酸残基，从而实现赖氨酸功能位点的鉴定[2]。随后，进步一部对方法进行优化，将该方法用于细胞表面蛋白质组的富集鉴定和定量研究中，在 100 μM OPA-S-S-alkyne 探针标记细胞 1 分钟的条件下，实现了 1787 个细胞表面相关蛋白的鉴定规模。利用其快速标记的优势，我们研究了 EGF 刺激下细胞表面蛋白质的实时动态变化过程，区分了“早期”瞬时变化和“晚期”变化的表面蛋白质组[3]。

关键字 蛋白质组，细胞表面蛋白，功能位点，动态变化

参考文献

1. Li, H. Qin, M. Ye*, An overview on enrichment methods for cell surface proteome profiling. J. Sep. Sci., **2020**, *43*, 292.
2. T. Wang, S. Ma, G. Ji, G. Wang, Y. Liu, L. Zhang, Y. Zhang*, H. Lu*, Nat. Commun., **2024**, *15*, 2997.
3. T. Wang, Y. Liang, G. Wang, S. Ma, L. Zhang, H. Lu, Y. Zhang*, Anal. Chem., **2024**, *96*, 14448.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

使用交联非天然氨基酸在活细胞中鉴定蛋白质之间的直接相互作用

杨兵*
浙江大学

我们基于氟磺酸基团合成了化学交联非天然氨基酸 eFSY，利用遗传密码扩展技术在蛋白质的特定位点插入非天然氨基酸 eFSY，eFSY 中的氟磺酸通过硫-氟交换 (SuFEx)反应与相互作用蛋白中的酪氨酸、组氨酸或赖氨酸形成共价交联。eFSY 携带的炔基基团可以通过点击化学反应连接生物素，随后可以实现交联肽段的富集，从而提升交联肽段的鉴定效率。我们发现了氟磺酸基团介导的交联产物在质谱中的混合性碎裂规律，其与组氨酸及赖氨酸交联产生的磺酰胺键会在质谱中发生断裂，与酪氨酸交联后形成的磺酰胺键不会断裂。为更好地应用该规律，我们进一步开发了非天然氨基酸交联鉴定软件 AixUaa。AixUaa 可同时分析交联键断裂的质谱数据和交联键未断裂的质谱数据，实现了交联肽段及位点的准确匹配，提升了交联肽段的鉴定数量。我们使用 eFSY 分别在大肠杆菌及哺乳动物活细胞中系统性地鉴定了硫氧还蛋白（Trx1）和硒蛋白 M（SELM）的直接相互作用蛋白组，验证了该方法的有效性。在这项研究工作中，我们综合使用可富集的交联非天然氨基酸以及新开发的鉴定软件，极大的提升了非天然氨基酸交联多肽的鉴定数目，和之前已经发表的工作相比，我们在 Trx1 样品上将分子间交联肽段的鉴定数目提高了 30 倍以上。通过 SELM 我们鉴定到了哺乳动物细胞中目前最大的非天然氨基酸交联肽段数据集。

关键字 遗传密码扩展技术，生物质谱，硒蛋白，数据搜索引擎

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

活细胞内蛋白质原位构象和相互作用规模化解析新技术

赵群、张丽华*、张玉奎
中国科学院大连化学物理研究所

作为生命活动的执行者，蛋白质通过相互作用形成复合体等形式行使其特定的生物学功能。不同于细胞外的离体环境，细胞内的限域效应、拥挤效应和细胞器微环境等对于维持蛋白质复合体的结构和功能起着至关重要的作用。因此，实现细胞内蛋白质相互作用的精准解析对于深入研究其生物学功能，进而理解生命现象本质具有重要意义。近年来，化学交联质谱技术已逐渐成为蛋白质复合物解析的重要手段。它是利用化学交联剂将空间距离足够接近的蛋白质内/间的氨基酸以共价键连接起来，再利用质谱对交联肽段进行鉴定，进而实现蛋白质相互作用的组成、界面和位点的解析。现有化学交联技术主要用于解析体外表达纯化的或细胞裂解液中的蛋白质复合物，而在细胞内蛋白质复合物的原位构像解析方面仍处于起步阶段。

针对上述问题，我们团队发展了一系列新型高生物兼容性的可透膜多功能化学交联剂，实现了活细胞内蛋白质复合物构像的原位交联捕获；建立了多种高选择性的低丰度交联肽段的富集方法和高可信度的交联肽段鉴定方法，显著提高了原位交联信息的鉴定灵敏度、覆盖度和准确度；进而，通过靶向富集特定亚细胞器内的交联蛋白质复合物，实现了亚细胞器空间分辨的蛋白质相互作用精准解析；在上述基础上，利用基于化学交联距离约束的分子动力学技术获得了蛋白质复合物的动态系综构像，实现了活细胞微环境下蛋白质复合物组成、相互作用界面及作用位点的规模化精准解析，为规模化地揭示蛋白质复合物功能状态下的结构调控机制提供了重要的技术支撑。

关键字 液质联用，化学交联，蛋白质复合物，原位构象，相互作用组

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于磷酸可富集交联剂的开发及其在 XL-MS 中的应用

陈红莉*、程琪、孙紫煜、朱微
上海科技大学

化学交联质谱（Chemical cross-linking mass spectrometry, XL-MS）是一种重要的技术，用于研究蛋白质结构和蛋白质-蛋白质相互作用。目前，XL-MS 最重要的挑战是简化质谱数据的解析工作流程，并且高准确性的识别交联肽段。含有亲和标签的交联剂，可以富集纯化低丰度的交联肽段，从而提高鉴定交联肽段的效率。最近，我们报道了以磷酸基团作为亲和标签引入到交联剂中，并成功的应用在 XL-MS 中。此外，我们还基于磷酸可富集的交联剂提出了一种基于决策树的搜索策略（DTSS）和一种基于保留时间的预测方法（RTBP）。这些方法可以显著降低数据处理的复杂性，并且大大提高分子间交联肽段的鉴定效率。另外，一方面，我们还设计合成了含有炔基或者叠氮基团的磷酸试剂，它们可通过 click 反应捕获交联肽段。相较广为应用的 biotin 亲和试剂，这一磷酸试剂可极大的提高交联肽段的鉴定效率。总的来说，我们是针对 XL-MS 技术中的关键问题，从交联剂的设计和合成出发，探讨它们在 XL-MS 中的应用。

关键字 化学交联质谱，可富集交联剂，蛋白-蛋白相互作用，click 反应

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

DIA 宏蛋白质组技术及其在菌群研究中的应用

乔亮*、吴恩慧
复旦大学

人体内存在大量微生物，微生物与人体共同组成的微环境对于维持人体健康和促使疾病发展起着至关重要的作用。基于质谱的宏蛋白质组学通过分析复杂微生物群落的蛋白质表达，可以揭示微生物群落在特定环境下的实际功能和相互作用，为深入理解微生物群落的功能提供了重要的视角。相较于普通的蛋白质组分析，宏蛋白质组分析时面对的样本往往复杂度更高，以肠道菌群为例，宏蛋白质组数据可能来源于数百个物种表达的蛋白，且不同的物种间丰度差异极大。因此宏蛋白质组分析一方面需要能够提供更高数据容量的数据采集模式，另一方面需要能够对数据实现精准解析。数据非依赖采集技术（DIA）能够系统采集样本中全部肽段离子的碎片信息，从而最大限度的保存微生物群落宏蛋白质组信息。然而，由于数据的高度复杂性，DIA 宏蛋白质组数据解析也更加困难。微生物群落宏蛋白质组数据解析的关键之一在于高度匹配的数据库构建。

针对基因组测序翻译得到的蛋白条目的物种注释问题，我们提出了一种重叠群指导的基因注释策略。在该策略中，宏基因组测序的短读序列首先被组装为重叠群，然后对重叠群进行注释，选取注释结果中丰度排名靠前的物种，利用这些物种的参考基因组来构建一个基因序列数据库，最后基于这个基因序列数据库，对预测的基因进行物种水平的注释。我们将该策略与当前常用的策略进行了对比。在 12 种细菌组成的合成微生物群落数据集上的测试结果表明，该方法能够实现 100%的注释准确度。此外，在合成微生物群落数据集上对比了宏基因组测序数据经基因预测构建的数据库、宏基因组测序数据经六框翻译构建的数据库以及种、属和科不同层级构建的公共数据库，结果表明基于宏基因组预测的基因构建的数据库实现了最高的蛋白鉴定量。在人粪便样本数据集的测试结果表明，利用该策略鉴定到的蛋白注释率可达 90%以上。为了进一步验证在复杂体系中该注释策略的准确性，我们将合成微生物群落和粪便样本的宏基因组和宏蛋白质组数据集分别在原始数据层面进行混合得到混合样本数据集。在混合数据集中的测试结果表明，该策略能够从复杂的数据集中准确地注释到合成微生物群落的全部 12 种微生物，并且从混合数据集中鉴定到的来自粪便样本的物种与单一粪便样本中鉴定到的物种一致率在 80%以上，同时总体注释率远超其他注释策略。总之，该方法在注释覆盖度、注释准确性、低丰度物种注释等多方面上都超过了其他现有注释策略，有效解决了当前基于宏基因组测序构建的宏蛋白质组数据库物种注释的可靠性问题。

在实现数据库优化的基础上，针对宏蛋白质组 DIA 数据解析依赖实验谱图库的问题，提出了基于深度学习预测谱图库用于宏蛋白质组 DIA 数据解析的策略。近年来，随着人工智能技术与组学研究的深度融合，深度学习预测谱图库已经在蛋白质组学中取得了长足的发展。基于一个已发表的深度学习谱图库预测工具 DeepDIA，采用数据库缩减策略，实现了在合成微生物群落、粪便样品和肺灌洗液样品中微生物宏蛋白质组的高效分析，并与基于 DDA 的实验建库和 directDIA 鉴定结果进行了比较。在合成微生物群落样本上，基于深度学习预测谱图库的方法获得了比基于 DDA 实验谱图库的方法及无需谱图库的 directDIA 搜库方法更高的蛋白质和肽段鉴定量。在粪便样本上，采用预测谱图库与实验谱图库合并的方法，实现了对粪便样本的深度蛋白和肽段覆盖。在加入 6 种已知细菌的粪便加标样本数据集上，基于深度学习预测谱图库的方法准确检出 6 种细菌并且获得较高的蛋白质鉴定数量，从而进一步证明了深度学习预测谱图库在宏蛋白质组 DIA 数据解析中的准确性及其实用价值。本

研究还将深度学习预测谱图库应用于肺灌洗液样本上，共鉴定到超过 2000 种来自于微生物的蛋白质，为肺部微生物组的存在与组成提供了蛋白质层面的可靠证据，为肺部微生物组的研究提供了一种新的技术手段。

关键字 宏蛋白质组，数据非依赖采集，深度学习，谱图库构建，肠道菌群

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

小鼠脑肠通讯的肽组学研究

贾辰熙*
国家蛋白质科学中心

宿主体内信号分子与肠道微生物的相互作用调节着诸多重要生理过程。其中，哺乳类动物应对环境温度变化而维持的能量稳态涉及复杂的神经调节，并受到肠道微生物与宿主相互作用的影响。然而，由于缺乏对相关信号分子的全面了解，其调控机制仍不清楚。本研究对冷暴露小鼠模型进行神经肽组分析，绘制了脑部区域可分辨的神经肽草图，并研究了肠道微生物和脑部神经肽在冷应激中的相互作用。在慢性冷暴露期间观察到神经肽组的区域特异性变化，并且与肠道微生物组的组成相关。几种 proSAAS 衍生多肽与乳杆菌(Lactobacillus)呈正相关，下丘脑-垂体轴对冷暴露表现出敏感反应。本研究建立了参与调节冷诱导能量稳态的生物活性肽候选库。对小鼠进行冷适应微生物亚群的干预可诱导下丘脑神经激肽 B 下调，并导致能量消耗从脂代谢转移到糖代谢。综上所述，本研究发现肠道微生物与宿主的神经肽的相互作用可调节并维持能量稳态，为了解冷暴露介导能量稳态的调节机制提供了数据资源。

关键字 蛋白质组学，神经肽，能量代谢

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于 Top-Down 和 Middle-down 质谱技术的蛋白 proteoforms 分析

李惠琳*、陈昌明、刘蕊洁、张颖、李孟效
中山大学

Proteoforms 是蛋白质组的基本单元，涵盖了受基因突变、RNA 剪切和翻译后修饰的共同影响、由单一基因产生的不同蛋白质存在形式。由于蛋白质是生物系统中功能的最终执行者，因此对 proteoforms 的精准分析对于理解生命过程、疾病机制、发展新的治疗方法以及推动生物医学研究的进展都具有不可替代的重要性。与以短肽为分析目标的常规自下而上组学技术相比，自上而下（top-down）和自中而下（middle-down）组学技术可以更有效地区分 proteoforms。但随着蛋白分子量和样本异质性的增加，proteoforms 的色谱分离、质谱分析等层面都面临着众多挑战。

本研究以临床检验和生物医药中涉及的关键蛋白质（如白介素、抗体等）为研究对象，将 RPLC、CE、cIEF 分离手段与 top-down 或 middle-down 质谱技术相结合，实现 proteoforms 的精细分析和鉴定，并从结构层面阐释造成 proteoform 差异的修饰位点或序列截断对蛋白功能的影响，为实现 proteoform 的深度解析奠定方法学基础。

关键字 蛋白异质体（proteoforms），自上而下蛋白组学（top-down proteomics)，自中而下蛋白组学(middle-down proteomics）

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

生物样本完整天然蛋白复合物的超分辨质谱解析

王冠博*
北京大学

质谱因其独到原理可突破经典蛋白结构表征手段的局限，其中非变性质谱可直接分析完整复合物的拓扑结构及其动态学。生物样本成分及基质复杂，在有限样本体量下目标复合物通常含量极低，难以直接适配质谱。我们对此开发了系列策略，解决纯化效率、鉴定深度、异质性等问题，实现对生物样本内天然复合物的结构及功能分析。这些复合物常包含高度糖基化修饰，呈现高异质性，导致其完整蛋白质谱信号高度卷积而难以解析。这不仅影响完整糖蛋白价态及分子量测定的可靠性甚至可行性，也使具有蛋白型分辨能力的结合关系分析难以实现。这一问题严重制约完整蛋白质谱的应用范围，以及对天然蛋白多层级结构和相互作用的分析能力。尽管以往基于有限价态还原（limited charge reduction）及电荷检测质谱（CDMS）开发的方法可在一定范围内解决价态和分子量测定问题，但均难以提供充分的信号分辨用以区分共存的蛋白型。理论上如能实现完整糖蛋白的同位素分辨，则可同时测定价态和糖基分子量；但现有方法均难以提供大型高异质性完整糖蛋白的同位素分辨信号。我们开发了一种超分辨质谱方法，可通过特殊的进样形式和信号采集模式，针对检测范围全域的离子信号实现超过仪器分辨能力一个数量级以上的分辨率，从而实现大型高异质性完整糖蛋白的同位素级别信号分辨。利用团队自研的信号处理算法，这些超分辨信号可转化为蛋白型分布图，进而解决高异质性糖蛋白的相互作用分析问题。我们已针对糖基化位点多达数十个的复杂糖蛋白体系实现了蛋白型分辨测定，并将该技术应用于蛋白相互作用研究中。

关键字 非变性质谱，糖蛋白，超分辨，蛋白质复合物，蛋白相互作用

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于液相共分级-质谱法技术的蛋白质复合物分离分析方法研究

高明霞*、刘威、于海龙、晏国全、张祥民
复旦大学

蛋白质通过相互作用形成蛋白质复合物，在特定的时间和空间内完成特定的功能[1]。实现规模化蛋白质复合物精准解析将为理解疾病的发生发展机制提供途径。我们课题组先后发展多维液相色谱技术，实现了从肽段、完整蛋白质到超大分子量的蛋白质复合物的分离分析[2,3]。最近，我们针对磷酪氨酸（pTyr）依赖的信号复合物发展了基于共分级偶联质谱法（co-fractionation mass Spectrometry，CoFrac-MS）和复合物为中心的算法的大规模 pTyr 信号复合物定量分析平台[4]。首先设计制备了一种三功能探针，以实现对酪氨酸磷酸化（phosphotyrosine, pTyr）蛋白质复合物的特异富集和分离，然后，采用 CF/MS 策略，结合离子交换色谱（IEC）和数据非依赖性质谱采集方式（DIA-MS）工作流程，鉴定到 647 个潜在的 HeLa 细胞 pTyr 蛋白质复合物。同时，我们发展了以复合物为中心的新型算法，对这 647 个蛋白质复合物中的 216 个进行了定量分析，首次描述了 EGF 信号通路在 pTyr 蛋白质复合物水平上的扰动情况。

接着，我们将上述发展的共分级偶联质谱法进一步应用于探究 T 细胞耗竭过程中蛋白质复合物的动态变化。我们构建了 T 细胞耗竭模型，并利用基于 SH2 结构域的三功能探针高效富集 pTy 的蛋白质复合物。通过 CoFrac-MS 技术对 pTyr 蛋白质复合物进行分离和鉴定，采用串联质谱标签（TMT）对馏分混合后进行蛋白质组学分析。开发了以复合物为中心的蛋白质复合物定量分析算法，鉴定并定量了 268 个蛋白质复合物。差异分析发现，T 细胞耗竭过程中，12 个蛋白质复合物的丰度发生了显著变化。本研究为理解 T 细胞耗竭的分子机制提供了新的视角。同时，也表明本研究所建立的基于液相共分馏-质谱法技术可以为研究生物过程中蛋白质复合物的动态变化提供了强大的技术支撑。

关键字 蛋白质复合物，共分级偶联质谱法

参考文献

1. Bruce Alberts, The cell as a collection of protein machine. Cell, **1998**, *92*, 291.
2. Wang, X.T., et al. Strategy for High-Throughput Identification of Protein Complexes by Array-Based Multi-Dimensional Liquid Chromatography-Mass Spectrometry. Journal of Chromatography A，**2021**, *1652*, 462351.
3. Wang, X.T., et al. Microliter-level Multi-Channel Fraction Collector for High-Throughput Separation System. Journal of Chromatography A，2021,10.1016/j.chroma.**2021**.462535.
4. Liu, W., et al. Integrated Platform for Large-Scale Quantitative Profiling of Phosphotyrosine Signaling Complexes Based on Cofractionation/Mass Spectrometry and Complex-Centric Algorithm. Anal Chem **2024**, *96 (24)*, 9849.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

蛋白质 L/D-型乳酸化修饰的组学分析和调控机制研究

张锴*
天津医科大学

蛋白质翻译后修饰在各种生理病理过程中发挥重要的调控功能[1-3]。L-乳酸驱动的蛋白质赖氨酸乳酸化（Lysine lactylation，L 型）是近年来发现的一种新型翻译后修饰形式，与肿瘤代谢和免疫密切联系，因此受到密切关注。我们将基于分子亲和探针的富集技术与 HPLC-MS/MS 分析相结合，发展乳酸化修饰调节因子（修饰酶和去修饰酶）分离分析方法，鉴定酶调控的乳酸化分子网络，解析乳酸化的功能和肿瘤生物学意义。首先，通过筛选和分析，我们发现了 HBO1 是赖氨酸乳酸化的一种新型修饰酶，并通过体外和细胞内实验，表征了其催化乳酸化的酶学特征，发现 E508 是 HBO1 发挥乳酸化修饰酶活性的关键位点。通过蛋白质组学分析，鉴定了 HBO1 调控的乳酸化位点和网络，揭示了 HBO1 优先催化组蛋白 H3K9la，促进转录调控的分子机制，并发现 HBO1 介导 H3K9la 影响宫颈癌等 7 种肿瘤进展。

此外，我们发现了肠道细菌分泌的 D-乳酸在肝脏中积累，诱导宿主细胞发生蛋白质赖氨酸 D-乳酸化修饰，并调控转录。我们通过质谱鉴定，发现了肝癌细胞在细菌分泌物 D-乳酸刺激下发生了 D-乳酸化修饰。通过四种正交方法验证了 D-乳酸驱动的这一新修饰的发生，并在小鼠肝脏和人类肠道组织进一步确认了该修饰。此外，我们发现了 D-乳酸转化为 D-乳酰辅酶 A 的生物合成途径，解析了该修饰发生的分子机制。接下来，我们通过基于质谱的蛋白质组学技术鉴定了 2800 多个蛋白质 D-乳酸化位点，表征了其分布的独特性。通过生化实验，揭示了组蛋白 D-乳酸化修饰在转录中的调控功能，以及抑制肝癌细胞增殖的潜在作用。

关键字 蛋白质组学，HPLC-MS/MS，翻译后修饰，乳酸化修饰，D-乳酸化修饰

参考文献

1. Hanyang Dong; Yujie Zhao; Changfen Bi; Yue Han; Jianji Zhang; Xue Bai; Guijin Zhai; Hui Zhang; Shanshan Tian; Deqing Hu; Liyan Xu; Kai Zhang. Nature Chemical Biology, **2022**, *18(2)*: 142.
2. Hanyang Dong; Jianji Zhang; Hui Zhang; Yue Han; Congcong Lu; Chen Chen; Xiaoxia Tan; Guijin Zhai; Zhongyi Cheng; Enmin Li; Liyan Xu; Kai Zhang. Nature Communications, **2022**, *13*: 6628.
3. Ziping Niu, Chen Chen, Siyu Wang, Congcong Lu, Zhiyue Wu, Aiyuan Wang, Jianji Zhang, Yanpu Han, Yingao Zhang, Guijin Zhai, Xudong Wu, and Kai Zhang. Nature Communications, **2024**, *15*, 3561.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

空间可视化蛋白质组学

田瑞军*
南方科技大学

以肿瘤微环境等为代表的多细胞系统存在着显著的空间异质性和错综复杂的细胞间信号转导。时空动态蛋白质复合物是构建这些信号转导网络的重要分子机器，一般都经历一个由细胞间、细胞膜、细胞质到细胞核的“链条式”激活、组装和信号传递过程。因此，空间蛋白质组学分析技术是多维度全面表征多细胞系统的蛋白质组的重要需求，将有力推动药物靶点和生物标记物蛋白的原位系统解析。本报告将汇报团队在胰腺癌肿瘤微环境细胞间信号转导应用研究方向的最近进展。

关键字 空间蛋白质组学

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

利用分子库对分子库筛选策略发现蛋白酶抑制剂和蛋白质共价配体

李刚*
深圳湾实验室

利用化学蛋白质组学质谱筛选蛋白酶抑制剂以及蛋白共价配体可以在蛋白质组水平上全面评估抑制剂的活性和选择性，这一方法在学术界和工业界得到了广泛应用。然而，目前通过质谱在蛋白质组中逐一测试每种化合物的筛选方法面临挑战，包括测试低通量、生物样本需求量大以及长时间的样本制备等。因此，如何高效应用化学蛋白质组学质谱技术来筛选蛋白酶抑制剂和共价配体，已成为该领域亟需解决的重要问题。

近年来，在利用动态组合化学策略构建动态分子库筛选单一纯化蛋白抑制剂方面取得了显著进展。该技术在蛋白溶液中采用有机可逆反应，使蛋白活性位点能够模板引导弹头基团和配体的原位自组装，形成热力学稳定的产物，从而优化配体筛选。同时，非理想配体会解离并重新组合成更合适的形式，展现出动态组合化学的“进化”特性，提高了优选配体的识别效率。该方法绕过了传统“先合成后筛选”模式中低效分子合成的过程，从而提升了筛选效率。然而，目前的动态库筛选方法通常仅针对单一蛋白质，不支持多种蛋白的同时筛选。

为了解决化学蛋白质组学在抑制剂发现中的低通量问题以及动态组合化学仅限于单一蛋白筛选的局限性，本项目将动态组合化学与化学蛋白质组学相结合，实现真正的库对库（化合物库对蛋白质组）筛选。我们已成功应用该策略快速筛选出新型丝氨酸水解酶 PPME1、ABHD11 和 PNPLA6 的抑制剂，其 IC50 值分别为 6.9 μM、1.9 μM 和 770 nM。特别值得注意的是，我们发现了一种在活细胞条件下靶向 PNPLA6 的特异性抑制剂，IC50 为 1.0 μM，突显了我们设计的筛选平台的有效性。此外，我们还利用这一方法实现了半胱氨氨酸配体的发现，在 8 次质谱实验中发现了约 2600 个半胱氨酸的共价配体，并同时测定每个配体的 EC50 值。综上，我们的分子库-对-分子库筛选方法，可以大大加速蛋白酶抑制剂以及蛋白质共价配体的发现。

关键字 化学蛋白质组学，动态组合分子库，库对库筛选

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

增龄相关的代谢失衡和肠道氧化应激关系研究

肖茜娜、胡梦、高丽、袁欢、戴伦治*
四川大学

氧化应激在器官老化及相关疾病中起着关键作用，但其内源性调节因子仍然大多未知。本研究阐明了代谢稳态在保护大肠免受氧化应激中的重要作用。我们开发了一种微量、高效的流程，能够同时分析五种不同的 Cys 状态，包括游离巯基（SH）、总 Cys 氧化（Sto）、亚砜酸（SOH）、S-亚硝基化（SNO）和 S-谷胱甘肽化（SSG），揭示了结肠衰老过程中 Cys 氧化还原修饰的化学计量特征以及其区域分布。研究发现，被 SOH 和 SSG 修饰的蛋白质主要与细胞黏附相关，表明其在维持肠道屏障完整性中的关键作用。相比之下，SNO 修饰的蛋白质更多参与免疫调节。值得注意的是，Sto 水平在 0.97%到 99.88%之间，呈现出两个明显的峰值，且随年龄增加而升高。Crosstalk 分析揭示了多种与年龄相关的代谢物，它们在调节氧化应激和 Cys 氧化修饰中发挥作用。此外，研究还阐明了富马酸在缓解硫酸葡聚糖钠（DSS）诱导的结肠炎小鼠模型中的肠道氧化应激中的作用。富马酸处理促进了多种细胞类型、信号通路及与氧化应激调节相关蛋白质的恢复。热量限制（CR）作为一种已知的氧化应激缓解策略，在老年小鼠肠道中对 Cys 氧化还原组的影响表现出区域特异性。为期两个月的 CR 干预恢复了多种抗氧化代谢物，并重新塑造了 Cys 氧化还原组。本研究揭示了非人灵长类动物肠道衰老过程中氧化还原组的复杂性，并确定了关键代谢调节因子在氧化应激和氧化还原信号中的作用。

关键字 氧化还原蛋白质组，氧化应激，衰老，结肠，代谢失衡

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

快速 MICROFASP 方法在高通量高灵敏度蛋白质组学研究中的应用

应国津、何宇、杨梦青、李洋、张振宾*
宁波大学

滤膜辅助样品处理（FASP）方法与各类表面活性剂兼容性好，被广泛应用于蛋白质组学样品预处理。然而，由于样品与容器接触面积大、样品转移步骤多、需要冻干和复溶等，常规的 FASP 方法存在着严重的样品损失，限制了其在微量生物样品蛋白质组学分析中的广泛应用。为了解决这一问题，我们发展了一种基于微型滤膜反应器的样品处理 (MICROFASP) 方法，能够高通量、快速处理亚微克的样品。非洲爪蟾是研究脊椎动物胚胎发育的经典模型，我们将发展的高通量、快速 MICROFASP 方法用于分析 50-细胞阶段的非洲爪蟾胚胎单细胞，采用基于 96-孔板的 MICROFASP 方法同时处理了 146 个单细胞，从每个单细胞中平均鉴定到 3400 多个蛋白。采用无标记定量方法对单细胞内蛋白表达变化进行分析，发现它们的蛋白质组学特征清楚的区分了胚胎左半球和右半球，为胚胎早期建立不对称的模型提供了证据。此外，我们还将 MICROFASP 方法用于微量样品交联质谱研究，为研究微量细胞亚型中蛋白-蛋白相互作用提供了有力工具。

关键字 蛋白质组学，样品预处理，单细胞，脊椎动物，胚胎发育，蛋白-蛋白相互作用

参考文献

1. Z. Zhang, K. M. Dubiak, P. W. Huber, N. J. Dovichi, Anal. Chem. **2020**, *92 (7)*, 5554.
2. Z. Zhang, K. M.Dubiak, E. Shishkova, P. W. Huber, J. J. Coon, N. J. Dovichi, Anal. Chem. **2022**, *94 (7)*, 3254.
3. Y. He, Y. Li, L. Zhao, G. Ying, G. Lu, L. Zhang, Z. Zhang, Anal. Chem. **2024**, *96 (30)*, 12341.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于血液多肽的抑郁症诊断研究

张晓哲*、王佳琦、王翼、张丽华、张玉奎
中国科学院大学大连化学物理研究所

重度抑郁症（MDD）是一种常见的精神健康疾病，目前尚无确切的生物标志物，导致临床误诊率较高。液相色谱-质谱联用（LC-MS）因其高通量和高灵敏度检测能力而被广泛用于寻找潜在生物标志物。然而，由于体内稳态补偿机制和高丰度蛋白的掩盖效应，血液中特定蛋白标志物的鉴定仍然具有挑战性。为了提高 MDD 的检测能力，我们开发了一种名为 CMS-Net 的深度神经网络来处理血浆肽段数据，并与传统机器学习（ML）模型和其他深度学习（DL）架构进行性能比较。CMS-Net 采用局部连接层和多头注意力机制构建，以从有限的数据集中提取关键特征。对 LC-MS 肽段数据进行了预处理，包括批次校正，并训练了该网络进行分类。将 CMS-Net 的性能与传统 ML 模型（KNN、RF、SVM、LDA、XGBoost）和其他 DL 模型（LSTM、ResNet、Transformer）进行了比较。此外，还使用不同类型的 LC-MS 数据验证了网络的可行性。CMS-Net 在 MDD 数据集上表现出色，并且适用于其他类型的 LC-MS 数据，表明该网络模型具有较高的可靠性和稳定性。基于 CMS-Net 的特征分析识别出一些潜在的差异肽段序列，这些序列可能为抑郁症的诊断提供重要支持。本研究提供了一种未来有临床应用价值的快速 MDD 诊断方法，并在多肽类型质谱数据的深度分析引入了新的探索途径。

关键字 多肽，血液，抑郁症，诊断，组学

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

大规模蛋白质组数据精准解析与标志物筛选

常乘*
国家蛋白质科学中心（北京）

得益于质谱技术的迅猛发展，蛋白质组学已迈入大数据时代，当前公开的蛋白质组数据集已超过 35,000 个，每年生成的数据量超过 1 PB。然而，蛋白质组数据的解析能力亟待提升。近年来，人工智能（AI）技术的迅速进步为蛋白质组数据解析带来了革命性的变化。

首先，我们开发了基于深度学习的大规模样本间质谱数据对齐算法 DeepRTAlign（Nat. Commun., 2023），无需依赖传统的鉴定结果，显著降低了样本间的缺失值比例。利用 DeepRTAlign 对齐后的质谱特征，我们筛选出 15 个可用于预测肝细胞癌早期复发的肽段母离子，并在独立的队列中验证了其有效性。该方法有助于发现传统鉴定方法难以识别的潜在生物标志物。其次，鉴于不同队列间存在数据异质性，传统 AI 模型所依赖的独立同分布假设并不总是成立。为此，我们开发了基于稳定学习的预后标志物筛选方法 Stable Cox（Nat. Mach. Intell., 2024），能够有效克服队列间的异质性，识别出稳定的预后标志物组合。

综上所述，AI 技术在大规模蛋白质组数据解析和生物标志物筛选中具有广阔的应用前景。

关键字 蛋白质组数据解析，标志物筛选，人工智能

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

外泌体分离制备新方法及其在临床诊疗研究中的应用

袁辉明*、候国姗、张玉奎、张丽华
中国科学院大连化学物理研究所

细胞外囊泡（EV）是一种由细胞释放到细胞外基质的膜性小囊泡，携带包括核酸、蛋白和小分子代谢物在内的多种生物活性成分。通常疾病来源的 EV 包含特定的疾病标志物，也可以作为递送治疗分子的生物载体。然而，传统的 EV 分离方法如超速离心（UC）、聚合物共沉淀等存在纯度低、回收率低、通量低和产量低等问题，制约了其在临床研究中的应用。

针对传统 EV 富集方法的纯度和回收率低等问题，我们通过相反转技术制备了聚醚砜-氧化石墨烯复合材料（GO-PES）复合材料，该材料外层为生物兼容性好的聚醚砜，而内层为吸附能力强的氧化石墨烯，，外表面含有 30-40nm 的圆形均孔道，内部孔道结构为微米级别的蜂窝状。将该材料与体液或细胞培养液共同孵育，由于体液或培养液中共存的干扰蛋白由于尺寸较小（< 10nm），通过渗透作用可以进入颗粒内部被 GO 不可逆地吸附，而大尺寸的 EV (>30nm)则被拦截在材料的表面，从而实现了外泌体的反向富集，将该材料应用于 2 mL 尿液中外泌体的富集，与传统超速离心和聚合物沉降方法相比，EV 富集纯度提高了 5.6-1000 倍，回收率提高了 1.5-18 倍。将该方法应用于 IgA 肾病患者和健康人尿液 EV 的分离，通过定量蛋白质组分析，发现上调蛋白如 AFM, ORM1, CP, SERPINA1 等可实现 IgA 肾病和健康人的有效区分，有望为 IgA 肾病的无创筛选提供重要技术支撑。

此外，针对现有方法难以实现活性 EV 的高通量和高产量制备的问题，我们还搭建垂直电场辅助切向流膜分离装置。与传统超速离心方法（金标准）相比，尽管 EV 富集的纯度相当，但产量提高了 15 倍，且分离时间缩短 6 倍，将制备的人脐带间充质干细胞来源的细胞外囊泡（hUCMSC-sEVs）与 Aβ诱导的神经细胞共孵育，发现 hUCMSC-sEVs 具有良好的神经细胞保护作用，显示出良好的生物活性和应用潜力。

关键字 外泌体分离制备，蛋白质组分析，临床诊疗研究

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

皮肤基质微环境蛋白质组研究及应用

马洁[1]、李晓[1]、冷泠[2]、朱云平*[1]
1. 北京蛋白质组研究中心
2. 中国医学科学院北京协和医学院

皮肤是人体最大的器官，具有典型的复层结构，皮肤的基质微环境在皮肤发育和维持皮肤功能中起着至关重要的作用。本研究中，我们结合组织工程方法、蛋白质组学技术以及生物信息学方法对皮肤基质微环境开展系统研究，构建了不同物种和不同年龄皮肤基质蛋白质图谱，探讨了皮肤基质蛋白物种及发育阶段构成和功能的差异。进一步将临床病理和微量组织样本分析结合，将蛋白质定量表达、功能与组织空间定位结合建立皮肤基质空间蛋白质组分析流程，构建了正常和疾病皮肤空间蛋白质组图谱，揭示基底膜胞外基质蛋白作为表皮干细胞生态位的重要性。本研究建立的皮肤基质微环境方法体系，为系统研究皮肤发育、衰老和损伤修复等相关疾病提供了方法学支持。

关键字 皮肤，细胞外基质，蛋白质组

参考文献

1. Leng L, Ma J, Sun X, Guo B, Li F, Zhang W, Chang M, Diao J, Wang Y, Wang W, Wang S, Zhu Y, He F, Reid LM, Wang Y. Comprehensive proteomic atlas of skin biomatrix scaffolds reveals a supportive microenvironment for epidermal development. J Tissue Eng. **2020**, *11*, 2041731420972310.
2. Zhang S, Liu B, Wang W, Lv L, Gao D, Chai M, Li M, Wu Z, Zhu Y, Ma J, Leng L. The "Matrisome" reveals the characterization of skin keloid microenvironment. FASEB J. **2021**, *35*, e21237.
3. Li J, Ma J, Zhang Q, Gong H, Gao D, Wang Y, Li B, Li X, Zheng H, Wu Z, Zhu Y, Leng L. Spatially resolved proteomic map shows that extracellular matrix regulates epidermal growth. Nat Commun. **2022**, *13*, 4012.
4. Li J, Ma J, Liu M, Li M, Zhang M, Yin W, Wu M, Li X, Zhang Q, Zhang H, Zheng H, Mao C, Sun J, Wang W, Lyu W, Yue X, Weng W, Li J, Chen F, Zhu Y, Leng L. Large-Scale Proteome Profiling Identifies Biomarkers Associated with Suspected Neurosyphilis Diagnosis. Adv Sci. **2024**, *11*, e2307744.
5. Wang W, Liu P, Zhu W, Li T, Wang Y, Wang Y, Li J, Ma J, Leng L. Skin organoid transplantation promotes tissue repair with scarless in frostbite. Protein Cell. **2024**, pwae055.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于 2.1 mm ID 色谱柱的高通量蛋白质组学平台

边阳阳*[1]、王月[1]、左海玥[1]、邓楠[2]
1. 西北大学
2. 西安交通大学

长久以来，由于其极高的分析灵敏度，纳流液相色谱（nano flow-LC）一直是蛋白质组学研究领域的主流分离技术。但是，纳流液相色谱在分析通量和稳定性方面存在着较大的不足，无法满足大队列样本的蛋白质组学分析要求[1]。在前期的研究中，我们搭建了基于微流液相色谱（micro-flow LC）的高通量蛋白质组学分析平台，该平台使用 1.0 mm ID 色谱柱进行肽段分离，色谱流速为 50 μl/min。与 nano-LC 相比，分析灵敏度有所降低，但是稳定性和分析通量显著提高，单根色谱柱完成了近 15000 个样品的分析[2-3]。在本研究中，我们搭建了一个基于 Vanquish Neo 液相色谱和 Orbitrap Exploris 480 MS 的高通量蛋白质组学分析平台，系统对比了 1.0 mm 和 2.1 mm ID 色谱柱的性能。由于 Vanquish Neo 色谱系统的硬件限制，2.1 mm ID 色谱柱的分离流速设置为 100 μl/min。结果发现，在 DDA 模式下，2.1 mm ID 色谱柱表现出相同的鉴定效果。进一步以 Hela 细胞肽段为样品，在 DIA 数据采集模式下进行方法优化。在 15、30 和 60 min 的梯度下，单针进样分析分别可以定量到 5000、6500 和 7500 种蛋白质。相比于 1.0 mm ID 色谱柱，2.1 mm ID 的商品化色谱柱种类更多，许多常规分析实验室也都有丰富的使用经验。因此，基于 2.1 mm ID 色谱柱的高通量蛋白质组学平台具有较高的应用前景。

关键字 微升液相色谱，高通量蛋白质组学，数据非依赖采集，单针进样分析

参考文献

1. Shishkova, E., et al. Now, More Than Ever, Proteomics Needs Better Chromatography. *Cell Syst*, **2016**, *3(4)*: 321.
2. Bian, Y., et al. Robust, reproducible and quantitative analysis of thousands of proteomes by micro-flow LC-MS/MS. Nat Commun, **2020**, 11 (1), 157.
3. Bian, Y., et al. Robust Microflow LC-MS/MS for Proteome Analysis: 38000 Runs and Counting. *Anal Chem*, **2021**, *93 (8)*, 3686.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

解密蛋白质组学样本质控走向自动化高通量的黑科技

张佳*
安捷伦科技

蛋白质组学样本来源丰富，实验流程复杂，对样本和流程做好质控是非常必要的，以往对蛋白样品的质控主要是从定性和定量两个维度来进行分析，蛋白定量一般使用 BCA 方法，蛋白定性一般是看蛋白质的分布情况，使用 SDS Page 的方法，但因其操作的繁琐性，导致在该步骤停留的时间较长，无法在拿到样本的短期之内快速给出质量报告。该演讲将会基于这一背景，介绍一种新型的自动化高通量解决方案，助力蛋白质组学突破流程束缚。

关键字 蛋白质样本质控，毛细管电泳，CE-SDS

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于质谱的空间多组学技术

刘丹*、孙悦、梁玉、刘欣欣、李汝婧、张丽华、张玉奎
中国科学院大连化学物理研究所

蛋白质作为生命活动的主要执行者，其功能的执行与组织空间定位密切相关。因此，发展基于质谱的组织成像技术对于解析蛋白质的表达和空间定位，进而揭示其功能至关重要。近年来，基质辅助激光解析电离—质谱成像技术（MALDI-MSI）与基于完整蛋白质分离鉴定的组学技术相匹配，可实现空间分辨的蛋白质变体精准解析，利用系列切片重构 Z 轴，可构建完整组织的蛋白质变体 3D 图谱。但受限于现有完整蛋白质分离鉴定技术对较高样品量的需求，使得空间蛋白质变体组检测的覆盖度较低。脑组织神经递质，如儿茶酚胺、血清素、氨基酸和核苷酸等小分子的强烈失衡和空间分布变化与极端环境暴露和神经退行性疾病密切相关。近年来，MALDI-MSI 等技术的快速发展将功能脂类的时空变化与组织结构和生物功能联系起来。然而现有技术对低含量神经递质的组织原位成像的灵敏度不足。此外，由于实验条件的苛刻限制不同空间成像技术难以在同一切片上实现多组学数据的采集和整合分析。针对上述问题，我们发展了空间多组学技术，在同一组织切片上实现神经递质、蛋白质变体、多参数免疫表型质谱成像和组织染色成像的空间多模态成像整合分析，通过特异性衍生化和组织切片兼容处理提高鉴定覆盖度和灵敏度，保留各模态成像的特异性和敏感度，为深入理解低压缺氧和阿尔兹海默症相关的关键生物分子提供了技术支撑。

关键字 质谱成像，空间多组学，组织原位衍生化，神经递质，蛋白质变体

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于交联剂转运载体的活细胞蛋白质复合物原位分析技术

杨开广[1]、陈玉宛[1,2]、周雯[1,2]、李欣蔚[1,3]、付文欣[1,4]、张玉奎[1]、梁振[1]、张丽华*[1]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 中国科学院大学
3. 大连理工大学
4. 东北大学

蛋白质复合物是蛋白质执行生物学功能的主要形式。其动态组装介导的高维度信号传导贯穿于不同细胞器，并调控诸多生命过程。对细胞器中蛋白质原位构象和相互作用的时空动态变化精准解析对于理解生命过程、揭示疾病机制、筛选生物标志物以及寻找药物靶标具有重大意义。

为了实现细胞正常生理培养下，细胞内蛋白质复合物原位分析，我们以 HepG2 为模式细胞，以双十八烷基二甲基溴化铵（DDAB）为靶向基团、以聚乳酸-乙醇酸（PLGA）为载体基质、以聚甲醛 35 氢化蓖麻油（KEL）为保护剂，通过乳化溶剂蒸发法，制备了高包埋交联剂双琥珀酰亚胺辛二酸酯（DSS）的纳米颗粒。在 DDAB 的靶向识别和 PLGA/KEL 的保护作用下，纳米颗粒将 DSS 靶向递送至 HepG 2 细胞线粒体中；DSS 被释放后对线粒体中的蛋白质复合物进行原位交联；最后利用液质联用鉴定交联肽段，进而实现对线粒体中蛋白质复合物相互作用位点的精准解析（技术简称：CD-MS，图 1）。CD-MS 不仅实现了活细胞内空间分辨的蛋白质复合物的低扰动原位交联，而且与已发表的先分离细胞器再交联以及全细胞原位交联方法相比，可以鉴定到更多的细胞器靶向的蛋白质复合物。并进一步结合质谱技术，对原位交联的线粒体蛋白质复合物进行分析，鉴定到 1203 对蛋白间交联位点信息，覆盖到了 Mitocarta 3.0 中 501 个线粒体蛋白，不仅不仅与蛋白质晶体学结构或 AlphaFold 预测的结构高度匹配（94%），而且还提供了 74 对未报道的蛋白质-蛋白质相互作用信息，这些未报道的相互作用主要与氧化磷酸化的主要场所——线粒体嵴形成有关，此外，还为具有原位依赖性的、超复合物 SCI-CII2-CIV，ATP 合酶及其组装辅助蛋白等蛋白质复合物提供了原位结构信息。这为深入研究线粒体的能量转换提供了技术支撑。

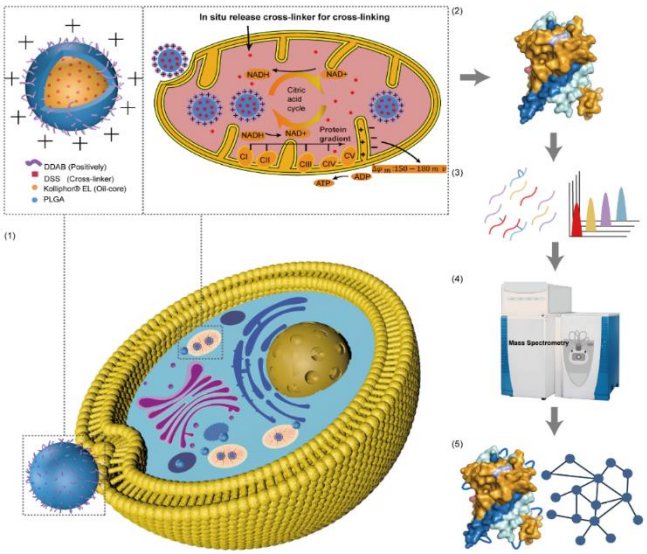


图 1. 基于交联剂载体靶向递送的活细胞内线粒体蛋白质原位构象和相互作用解析技术（CD-MS）示意图

CD-MS 进一步与自溶酶辅助入胞技术相结合，实现了有壁藻类细胞（莱茵衣藻，Chlamydomonas reinhardtii，为模式细胞）中叶绿体中光合作用蛋白质复合物原位分析，不仅实现了 334 个蛋白质的 600 对交联信息，通过 Predalgo 预测，覆盖叶绿体内 46.5 %蛋白质，瞬时和弱相互作用也被捕获，叶绿体管腔侧的外源蛋白（PsbL 和 PsbH）与光合蛋白复合物中的核心亚基（CP47 和 CP43）之间的弱相互作用直接在活细胞中被捕获，并且还发现了未注释蛋白质（Cre07.g335700）与捕光蛋白 CP26、LhcbM3、LhcbM5 之间较强的结合，为深入解析光系统上光能捕获机理、提高光能向化学能转化奠定了基础。

总之，CD-MS 为在天然微环境下原位确定细胞器中的蛋白质构象和相互作用提供了技术平台。

关键字 蛋白质复合物，交联剂跨膜转运载体，蛋白质相互作用，蛋白质结构，原位分析

参考文献

1. Chen YW, Zhou W, Li XW, Yang KG, Liang Z, Zhang LH, et. al., *Nat. Commun.*, **2023**, *14*, 3882
2. Li XW, Chen YW, Zhou W, Yang KG, Liang Z, Zhang LH, et. al., *Anal. Chem.*, **2023**, *95*, 9555
3. Chen YW, Zhou W, Li XW, Yang KG, Zhang LH, et. al. *ACTA Chimica Sinica*, **2022**, *80*, 817
4. Chen YW, Zhou W, Li XW, Yang KG, Zhang LH, et. al. *J. Mat. Chem. B*, **2024**, *12*, 4262

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

新型氮氧高亲水性纳米材料的制备及其在蛋白质组相互作用分析中的应用

吴慈[1]、张蓓蓉[2]、赵群[2]、张丽华*[2]
1. 辽宁师范大学
2. 中国科学院大连化学物理研究所

蛋白质作为生命活动的执行者，通过相互作用形成复合物等结构，以发挥其特定的生物学功能。在细胞内，限域效应、拥挤效应以及细胞器微环境等因素对于维持蛋白质复合物的结构和功能至关重要。化学交联技术（Chemical cross-linking mass spectrometry, CXMS），尤其是原位化学交联质谱技术（in vivo CXMS），具有对蛋白质复合物原位构象和相互作用界面进行大规模分析的优势，已成为解析活细胞内蛋白质复合物的重要技术。在低扰动状态下，快速交联是精准解析蛋白质原位构象和相互作用的先决条件。然而，目前活细胞的原位交联面临反应效率低和细胞扰动大的问题，同时交联肽段的碎裂谱图复杂多样，导致交联覆盖度和准确性降低。为此，我们基于糖分子的生物兼容性及糖苷键的质谱碎裂特征，将糖苷键引入功能交联剂的骨架设计中，筛选并获得了生物兼容性良好的海藻糖作为骨架分子，开发出了一种质谱可裂解的交联剂——海藻糖二琥珀酰亚酯（TDS）。该交联剂展示了优良的两亲性和生物兼容性，能够在保证高细胞活性的同时，实现细胞内蛋白质复合物的高效交联分析。此外，糖苷键-肽键的质谱选择性碎裂模式显著降低了交联谱图的复杂性，有效避免了假阳性结果，从而提高了交联肽段的鉴定效率与准确度。针对当前二糖交联策略缺乏有效富集方法的问题，本研究发展了一种基于 N→O 高亲水材料的富集方法，成功实现了复杂样品中交联深度的覆盖与鉴定。

关键字 蛋白质组，HILIC，化学交联质谱分析

参考文献

1. C. Wu, S. Shi, C. Hou, J. Ma* , *ACS Appl. Mater. Inter.* **2022**, *14*,4748.
2. J. Chen, Q. Zhao*, H. Gao, L. Zhao, H. Chu, Y. Shan, Z. Liang, Y. Zhang, L. Zhang*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 62, **2023**,e202212860.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

宏蛋白质组学在微生物系统生态学研究中的应用路径

李乐园*
国家蛋白质科学中心（北京）

人体微生物组作为一个复杂的生态系统，在宿主的健康与疾病过程中扮演了至关重要的角色。深入理解微生物群落的结构、功能及其与宿主的相互作用，对于解析疾病机制和开发新型疗法至关重要。宏蛋白质组学作为人体微生物组研究的重要工具，能够直接捕捉微生物群落中实际表达的蛋白质，进而揭示其功能动态及其与宿主健康的关联，为深入探讨微生物群落如何影响健康与疾病状态提供了关键信息。在系统生态学中，微生物物种的功能和生物量是生态网络中最核心的基本单元。通过宏蛋白质组学，不仅可以观察到在特定环境条件下不同物种生物量的变化趋势，还能够揭示这些变化如何伴随功能表达的调整。

为了充分发挥宏蛋白质组学在微生物生态学研究中的潜力，报告人和合作者开发了一系列基于宏蛋白质组学的微生物生态学研究方法，包括：（1）蛋白质组水平功能冗余度分析方法[1]，结合深度宏蛋白质组学构建的分类-功能二分网络，预测微生物群落在面对环境干扰时的功能抗干扰能力；（2）配对宏基因组-宏蛋白质组的生态位功能分析[2]，通过对比特定蛋白质在其基因水平的功能冗余度和蛋白质水平的功能冗余度，预测其是否在生态系统中发挥生态位功能；（3）PhyloFunc 功能距离计算[3]，基于宏蛋白质组学与系统发生树，揭示微生物组数据集中的β多样性。

报告将结合多项基于 RapidAIM 体外实验[4]的研究，展示上述分析方法的应用和微生物生态学发现。RapidAIM 是一种用于研究药物与人体肠道微生物组相互作用的高通量平台。它通过在实验室条件下模拟人体肠道环境，培养多样的微生物群落，以评估不同药物对微生物群落结构和功能的影响。该系统可以快速检测药物在不同剂量和时间下对微生物群落生物量、代谢活性及功能表达的干扰，从而揭示微生物组对药物的响应模式。上述方法为研究微生物生态系统提供了多维度的功能视角，有助于深入探索微生物群落的功能结构与生态网络，为未来基于微生物组的健康调控策略奠定了理论基础和实践路径。

关键字 人体微生物组，微生物生态系统，宏蛋白质组学

参考文献

1. L. Li, D. Figeys, *Nat Commun*, **2023**, *14*, 3428.
2. T. Wang, Y. Liu, *ISME Commun*, **2024**, *4*, ycae063.
3. L. Wang, L. Li, *bioRxiv*, **2024**.*05*.28.596184v2.
4. L. Li, D. Figeys, *Microbiome*, **2020**, *33*, 8.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

多维宏蛋白质组分析新技术

刘健慧、王松朵、王芷婷、杨开广、梁振、张丽华*、张玉奎
中国科学院大连化学物理研究所

微生物群落与宿主和环境因素共同进化，对人类健康和生态系统稳定具有深远的影响，也是重要的蛋白酶和生物反应资源库[1]。宏蛋白质组通过分析特定样品中菌群全部蛋白质的动态变化进而理解其功能，对于连接上游宏基因组和下游代谢组具有重要意义，是发现关键调控蛋白酶及微生物的重要手段[2]。然而，由于微生物组的高复杂性和多样性，目前仍亟需提高宏蛋白质组分析技术的检测灵敏度、鉴定深度及翻译后修饰分析等方面，以实现多维度的宏蛋白质组深度解析。

基于此，我们发展了低细胞量宏蛋白质组和多位点宏磷酸化蛋白质组分析新方法。首先，针对现有宏蛋白质组分析技术所需微生物样品量大的问题，我们通过构建微量微生物富集和蛋白提取、基于固相烷基化策略的样品制备及低流速色谱分离系统[3]，将深海海水样品需求量从>100 L 降低到 1 L，并将蛋白质定量数目提高了 3 倍（>6000 v.s. <2000）。将该技术应用于分析南海 A5 站位水柱（50 m - 4000 m）微生物群落系统发育组成及代谢活动变化，发现奇古菌表达的氨转运蛋白，氨单加氧酶以及 3-羟基丙酸/4-羟基丁酸途径关键酶 abfD 随水柱变化的相关性高，证实奇古菌在基于碳氮耦合过程的初级生产力中起着关键作用，有助于深海碳和氮的储存，在海洋的物质循环与能量流动过程中发挥重要作用。其次，针对微生物中磷酸化丰度低、修饰位点多、且组氨酸磷酸化等稳定性较低的 N-磷酸化修饰较为丰富的问题，利用课题组前期开发的双二甲基吡啶胺双锌分子功能化硅球材料在中性条件下进行快速富集，并建立了宏磷酸化肽段的迭代搜索方法，获得了包含大于 5000 个磷酸化位点的首个宏磷酸化蛋白质组数据集，发现 N-磷酸化修饰调控的微生物蛋白质功能与 O-磷酸化存在明显差异。

关键字 宏蛋白质组，微生物，深海，肠道菌群

参考文献

1. Aggarwal, N.; Kitano, S.; Puah, G. R. Y.; Kittelmann, S.; Hwang, I. Y.; Chang, M. W. *Chemical Reviews* **2022**, *123 (1)*, 31-72.
2. Kleiner, M. *mSystems* **2019**, *4 (3)*, e00115-00119.
3. Wang, S.; Zhang, Z.; Yang, K.; Zhao, J.; Zhang, W.; Wang, Z.; Liang, Z.; Zhang, Y.; Zhang, Y.; Liu, J.; et al. *Analytical Chemistry* **2024**. *96 (29)*, 12030-12039.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

非变性自上而下质谱中完整蛋白质复合体气相解离机理的研究

周默为*、周世文、潘远江
浙江大学

非变性自上而下质谱直接检测完整的蛋白复合体，可以对蛋白-蛋白，蛋白-小分子等相互作用体系进行快速的表征。当前的方法主要限于对完整复合体的质量分析，可以获得相互作用的化学计量比信息，为高通量药物筛选提供分子互作机制的数据。使用气相解离方法采集二级质谱信息，可以获得结合位点和分子组装等更为精细的结构信息。非变性自上而下质谱的仪器对高质量范围的大分子传输和检测都有特殊要求。即使在高端进口仪器型号中，适用于大分子的气相解离方法也极其有限，机理研究不够深入，对仪器方法的涉及带来了困难。

本研究聚焦新冠病毒中的非结构蛋白(Nonstructural protein, NSP) NSP10/NSP16 的二聚体结构。NSP10/NSP16 在新冠病毒的生命循环中负责修饰病毒的 RNA，逃避宿主的免疫系统识别，是潜在的药物靶点，但由于其动态结构，尚无特效的小分子抑制剂。结构生物学数据表明，底物结合在 NSP16 中，NSP10 起到变构调节的作用，只有二聚体才具有生物活性。初步的质谱研究发现，在通过气体碰撞（collision induced dissociation, CID）缓慢提高内能诱导二聚体解离的过程中，底物能保留在 NSP16 中，与晶体结构数据相吻合。但 NSP10 中结合的两个锌离子会向 NSP16 发生一定程度的转移。相反，表面碰撞（surface induced dissociation，SID）诱导解离时能快速提高内能，可以在较大程度上抑制锌离子转移。这些数据表明蛋白复合体在二级质谱的过程中可能发生气相结构重排，且与蛋白结构和解离方法密切相关。为了更精确的定义气相结构与溶液相结构的关系，本研究将进一步考察解离的机理，为分析未知体系和仪器方法设计提供理论指导。

关键字 非变性质谱，蛋白质复合物分析，二级质谱，生物大分子

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

蛋白质变体分离鉴定新技术及其应用研究

梁玉、孙悦、杨雪、梁振、张丽华*、张玉奎
中国科学院大连化学物理研究所

一个蛋白质编码基因经过基因突变、RNA 可变剪切、蛋白质翻译后修饰等会产生多个蛋白质变体，行使不同的生物学功能。蛋白质变体分析被认为是下一代蛋白质组学研究的重要方向。与基于酶解肽段分离鉴定的 bottom-up 策略相比，基于完整蛋白质分离鉴定的 top-down 策略可以直接获得更完整、更精准的蛋白质变体信息[1-2]。然而由于蛋白质分子尺寸大、表面性质复杂，现有色谱分离材料对完整蛋白质的分离能力差，导致蛋白质变体鉴定覆盖度极低。针对此问题，研制了新型有机桥联杂化整体柱，通过调控孔结构解决蛋白质由于尺寸大在传统色谱固定相中传质慢导致分离分辨率低的问题；通过设计骨架中的有机桥联基团解决蛋白质由于表面性质复杂在传统色谱固定相中分离选择性差导致分离分辨率低的问题。研制的整体柱显著提高了蛋白质分离分辨率，将色谱峰容量提高到已报道填充柱的 3-4 倍；单次分析从大肠杆菌中分离鉴定的蛋白质变体数目从文献报道的~500 增加到 959；实现了氨基酸序列仅有一个氨基酸差异的 EF-Tu 1 和 EF-Tu 2 变体的精准鉴定。此外，显著提高了对极具挑战的疏水性膜蛋白质的分离能力，从小鼠海马组织中分离鉴定到 261 个基因编码膜蛋白的 3100 个变体，绘制了包含变体信息的氧化呼吸链膜蛋白互作网络图。蛋白质变体的空间分布可视化能够将更精准地理解疾病过程。基于发展的低吸附细内径桥联杂化整体柱与高分辨质谱联用，实现了空间限域的蛋白质变体高灵敏度鉴定，与高通量原位质谱成像技术结合，获得了 100 微米分辨率下 366 种蛋白质变体在小鼠全脑区空间分布图，并揭示了 AD 模型小鼠全脑区和海马区蛋白质变体空间分布变化，为脑科学精细分子图谱的绘制及 AD 疾病研究提供了技术支撑。此外，基于原位化学交联-可控断裂技术和 top-down 技术，实现了复合物在蛋白质变体层面上的精准解析。

关键字 蛋白质变体，top-down 策略，分离鉴定，空间分布表征，原位相互作用

参考文献

1. Smith et al., *Sci. Adv.*, **2021**, *7*, eabk0734.
2. Melani et al., *Science*, **2022**, *375*, 411.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

蛋白质结构的紫外光解离-非变性质谱分析

刘哲益*、赵恒、罗盼、王方军
中国科学院大连化学物理研究所

非变性质谱技术通过电喷雾离子化方法，能够直接从非变性溶液中离子化蛋白质及其复合物，并在气相中维持其天然结构。这一技术显著拓宽了质谱在蛋白质高阶结构分析中的应用范围，可以获取蛋白质复合物的翻译后修饰、亚基组成以及小分子配体的信息。借助二级质谱解离技术，该方法可进一步解析蛋白质的精细结构，包括复合物亚基的拓扑结构、结合界面及配体结合位点。然而，传统的基于气体碰撞的二级质谱解离技术往往优先破坏非变性蛋白质离子内部的非共价相互作用，导致蛋白质结构的解聚，而难以实现非变性蛋白质离子的骨架断裂。基于高能光子的紫外激光解离质谱技术能够选择性地激发蛋白质骨架酰胺键，从而在结构破坏前实现非变性蛋白质离子的骨架解离，产生的碎片离子种类和信号强度显著依赖于蛋白质的结构特性，并且可以达到单氨基酸位点的分辨率，实现蛋白质结构的高精度质谱表征。

通过跨学科协作，我们成功改造了 Thermo Fusion Lumos 质谱仪，搭建了 193 nm 紫外激光解离-高分辨率质谱平台，并优化了静态电喷雾离子源的设计，实现了微量（<10 微升）样品的高效稳定离子化以及含盐样品的直接分析。在软件方面，我们开发了一个紫外激光解离图自动化解析软件，并集成了一个用于内部碎片离子高可信度鉴定的模块，实现碎片离子的精确匹配，完整蛋白质序列覆盖率超过 90%。基于该平台，我们系统地研究了电喷雾离子化过程中蛋白质离子的电荷溶剂化效应，确定了电荷溶剂化位点及其结构影响范围；结合分子动力学模拟，阐明了 CD28 和 PKCθ之间的分子识别机制，并明确了蛋白质-蛋白质识别区域及关键氨基酸位点。此外，我们还发展了一种整合紫外激光解离的时间分辨质谱方法，实现了对氨基酸位点突变引起的靶蛋白稳定性和动态精细结构的表征，为研究治病靶蛋白质氨基酸突变的病理机制提供了一种新的技术手段。

关键字 非变性质谱，紫外激光解离，蛋白质结构，相互作用

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于纳米孔道单分子技术的时间蛋白质组学

蒋杰、龙亿涛*
南京大学

蛋白质是生命活动的执行者，在分子构象、翻译后修饰、周转等方面具有高度异质性和动态性，要求我们对其进行时间依赖的组学分析。目前蛋白质中低丰度、短半衰期的组分往往丢失在断点采样以及系综测量的平均信息中，因此，亟需一种单分子的时间动态组学研究方法。

这里，我们基于纳米孔道单分子技术，利用其能够对复杂体系中单个分子在无标记状态下进行逐个、高通量读取，提出纳米孔道单分子时间组学。通过定点修饰精准调控纳米孔道传感界面的空间分辨能力，引入不对称理化势场提升蛋白质的无偏捕获效率，从而获取蛋白质序列相关的离子流特征指纹信号，解析了蛋白硫酸化、羟基化动态修饰分子图谱。结合微升级纳米孔道阵列和秒级快速定量算法，建立了从单分子层面研究复杂体系多种靶标时序动态演化的新方法，实时监测了血管紧张素 Ang 蛋白网络的动态变化过程，率先揭示了肾素-血管紧张素系统中的串扰效应，使得单分子水平的时间蛋白质组学研究成为可能。

关键字 纳米孔道，单分子分析，蛋白质组学，时间组学，动态修饰，串扰

参考文献

1. J. Jiang, M.-Y. Li, X.-Y. Wu, Y.-L. Ying, H.-X. Han, Y.-T Long, *Nat. Chem.* **2023**, 15, 578.
2. M.-Y. Li, J. Jiang, J.-G. Li, H.Y. Niu, Y.-L. Ying, R.J. Tian, Y.-T Long, *Nat. Methods.* **2024**.
3. H.Y. Niu, M.-Y Li, Y. Gao, J.-G. Li, J. Jiang, Y.-L. Ying, Y.-T. Long, *Nat. Chem. Biol.* **2024**.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

非变性质谱直接检测等位基因特异性蛋白修饰与相互作用

吴迪*
武汉大学

等位基因特异性失衡（Allele-specific imbalance）受到复杂的顺反式作用调控，并影响着复杂的个体性状和人类疾病。等位基因特异性失衡导致的等位基因蛋白质表达差异可导致一系列复杂的表型和人类疾病。肿瘤相关等位基因的特异性表达与癌症的易感性和病理生理过程密切相关。目前基因组和转录组测序是研究癌症相关等位基因特异性失衡的主要分析手段。然而，仅使用转录组测序并不能直接检测等位基因特异性失衡的生物学功能，如调控蛋白质的修饰、构象及相互作用。基于质谱的蛋白质组学技术可以高通量的分析氨基酸突变位点、翻译后修饰及其相对丰度。而自下而上的方法难以将单核苷酸多态性（SNP）和翻译后修饰分相（phasing）到特定等位基因。作为一种新兴的蛋白质分析技术，非变性质谱（native MS）能够直接测量完整蛋白质复合物的精细组成和相互作用。通过高分辨非变性质谱，我们分析了人骨髓间质液高丰度蛋白的单核苷酸多态性、翻译后修饰和内源性配体，并进一步探索了等位基因对蛋白表达、翻译后修饰修饰和相互作用的调控。

关键字 非变性质谱，翻译后修饰，相互作用

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于人工智能的谱图库预测和糖基化蛋白质组分析

杨奕*、方群
浙江大学

液相色谱–串联质谱（LC–MS/MS）是蛋白质糖基化修饰分析广泛使用的方法，特别是近年来出现的数据非依赖性采集（DIA）技术，显示出糖蛋白质组深度覆盖和准确定量的能力。然而，现有 DIA 分析方法依赖于实验构建的谱图库，其并不能完全覆盖待分析的肽段或糖肽，使 DIA 的鉴定能力受限。利用人工智能技术，已有诸多方法可以实现常规肽段色谱保留时间和质谱图的预测，但这些方法难以处理复杂的糖基化修饰。

为此，报告人开发了糖肽谱图库预测方法 DeepGlyco，利用树形的长短期记忆网络和图神经网络处理糖链的非线性结构，实现了糖肽色谱保留时间的预测，并同时解决了糖肽二级质谱图中肽段 b/y 离子和糖链 B/Y 离子峰强度的预测问题。预测谱图库有助于糖链结构的鉴定，通过将实验谱图与预测谱图进行比较，对相同单糖组成的不同糖链结构进行打分和排序，其准确率在核心岩藻糖基转移酶基因敲除小鼠数据集上得到验证。预测谱图库还可用于 DIA 分析，通过扩大谱图库搜索的范围，提高了血清糖蛋白质组分析的覆盖深度。在预测谱图库中添加样品中不存在的“陷阱”糖链，可以对鉴定结果的错误率进行评估，有助于糖肽鉴定的质控。

关键字 糖基化，蛋白质组学，谱图库，人工智能

参考文献

1. Y. Yang, G. Yan, S., Kong, M. Wu, P. Yang, W. Cao, L. Qiao. *Nat. Commun.* **2021,** *12*: 6073.
2. Y. Yang, X. Liu, C. Shen, Y. Lin, P. Yang, L. Qiao. *Nat. Commun.* **2020,** *11*: 146.
3. Y. Yang, Q. Fang. *Nat. Commun.* **2024,** *15*: 2448.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于变性-复性的样本处理策略提升泛素化修饰蛋白质组富集效率与定量准确性

李衍常*[1,2]、成欣宇[2]、王永红[1]、徐平[1]、张令强[1,2]
1. 国家蛋白质科学中心（北京）
2. 安徽医科大学基础医学院

泛素化是一种重要的翻译后修饰，维持蛋白质稳态并参与多种生物过程。研究泛素组具有重要的科学意义。由于泛素化蛋白的丰度较低，第一步也是至关重要的一步是有效地富集泛素化蛋白。目前，常用抗体或人工泛素结合域(UBDs)来富集泛素化蛋白。在天然条件下，富集取决于泛素和泛素链的自然空间结构。然而，去泛素化酶和蛋白酶体的高活性使得泛素化信号很容易被去除，并且存在大量的污染蛋白。在本研究中，我们提出了一种通过变性-复性的样本处理（DRUSP）与 ThUBD 偶联来富集泛素化蛋白的新方法。在变性条件下充分提取蛋白质，快速准确地恢复了泛素和链的空间结构。ThUBD 能有效富集修饰后的底物。泛素信号的整体富集效果提高了约 2.4 倍，8 条泛素链的平均富集效果提高了约 10 倍；新方法定量鉴定的稳定性和重现性明显提高。该方法预计在泛素化修饰组学中产生广泛的应用。

关键字 泛素化修饰，泛素化组学，DRUSP，质谱，样本处理

参考文献

1. Swatek KN, Komander D. Ubiquitin modifications. *Cell Res.* **2016** Apr;*26(4)*:399.
2. Yau R, Rape M. The increasing complexity of the ubiquitin code. *Nat Cell Biol.* **2016** May *27;18(6)*:579.
3. Xu G, Paige JS, et al. Global analysis of lysine ubiquitination by ubiquitin remnant immunoaffinity profiling. *Nat Biotechnol.* **2010** Aug;*28(8)*:868.
4. Gao Y, Li Y, et al. Enhanced Purification of Ubiquitinated Proteins by Engineered Tandem Hybrid Ubiquitin-binding Domains (ThUBDs). *Mol Cell Proteomics.* **2016** Apr;*15(4)*:1381.
5. Xiao W, Huang S, et al. Chemically labeled ThUBD permits rapid and super-sensitive imaging of polyubiquitination signals. *Analyst.* **2022** Jul *22;147(15)*:3434.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

蛋白质异常巯基亚硝基化与神经退行性疾病的关系

杨洪梅*
长春中医药大学

NO 共价结合到蛋白质半胱氨酸残基上就形成了蛋白质巯基亚硝基化(SNO)，这是一种典型的氧化还原依赖的蛋白质翻译后修饰，这种修饰是一个非酶的可逆的过程。也是 NO 发挥其广泛信号转导作用的新的重要途径。近年来研究证实了 SNO 蛋白质参与神经系统疾病的病理过程。细胞环境下是高度还原性的，含有大量的包括 GSH 和其他巯基在内的还原性物质，认为大部分 SNO 是转瞬即逝的，比较难检测。我们改进了一种基于 SNOTRAP 化学探针的高度重现、高度特异性的巯基亚硝基化蛋白质组学方法。发现蛋白质 SNO 的发生可能是酸碱催化，疏水作用增强的机制，当然与二级结构也相关，易于暴漏 SH 的位置比较容易被亚硝基化。补体蛋白 C3 的亚硝基化可能增强了突触体的吞噬作用，触发了突触的修剪。另外，年龄大的女性易患 AD，可能与雌激素减少，C3 异常硫亚硝基化有关。对于 PD 和 LBD，发现某些 TCA 酶异常 S-亚硝基化抑制了 TCA 循环功能，可能导致线粒体生物能量损害，最终神经元细胞死亡。

关键字 蛋白质 巯基亚硝基化 神经退行性疾病

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

共价修饰蛋白质组：作用机制研究与前沿共价抑制剂开发的新策略

胡晓兰[1,2]、伍建林[2]、李娜*[2]
1. 暨南大学
2. 澳门科技大学

药物-蛋白加合物是一种蛋白复合物，是蛋白的氨基酸残基与具有化学反应性的药物及其活性代谢产物（RMs）共价结合产生的。共价修饰改变蛋白的生物化学性质，影响蛋白的功能，甚至产生特异的毒性和/或活性。因此，在药物研究和发现中，药物及其 RMs 共价修饰蛋白鉴定，及其修饰蛋白功能的研究是很重要。药物-蛋白质加合物的定量分析对于评价和了解药物的潜在毒性或活性机制的关键。

在本研究中，我们提出了一种基于 LC-MS 结合结构警报（SA）的策略来快速评估化合物共价结合蛋白的潜力及其可能的机制。一方面，我们开发了一种有价值的、快速的体外分析方法，在体外添加或不添加人肝微粒体（HLM）的孵育体系中评估含 SA 化合物及其 RMs 是否具有共价结合氨基酸的潜力。另一方面，建立了一种多反应监测（MRM）模式的定量方法，来揭示化合物的毒性或活性与蛋白加合物之间的关系。该策略已成功应用于体内、外化合物毒性或活性的可能机制研究。

首先选择了包含两个酚环的双酚 A（BPA）进行进一步研究。发现 BPA RMs 可以通过 7 种修饰模式与蛋白质的半胱氨酸残基共价结合。定量结果表明，肝组织中蛋白加合物的含量随时间的变化与血清 AST 和 ALT 水平的变化一致，说明蛋白加合物可能是用于快速评估肝损伤一个很好的指示剂。最后，在大鼠肝脏鉴定到 BPA RMs 修饰蛋白与氧化应激有关，首次从 BPA 共价修饰蛋白的角度阐明其产生不良反应的机制。

此外，开发了一种数据库辅助的液相色谱-串联质谱（LC-MS/MS）策略，以快速发现潜在的靶向半胱氨酸的化合物。该策略显示出广泛的适用性，筛选出了结构多样的共价化合物，为共价抑制剂的开发提供了结构资源。此外，所筛选的化合物去甲氯胺酮和羟基去甲氯胺酮可以在体内修饰突触传递相关蛋白，表明它们具有作为共价抑制剂的潜力。这种基于实验的筛选策略为共价抑制剂的设计和发现提供了快速可靠的指导。

关键字 结构警报，活性代谢物，蛋白质共价键修饰,共价修饰蛋白, LC-MS，毒性

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

蛋白质甲基化分析新技术

王科云*、毛家维、刘震、叶明亮
中国科学院大连化学物理研究所

蛋白质甲基化是一种常见的翻译后修饰，在很多关键生理过程中都发挥着重要的调控作用。在已知的甲基化修饰类型中，精氨酸甲基化和赖氨酸甲基化已经得到了广泛研究。甲基化修饰除了可以发生在精氨酸和赖氨酸上，还可以发生在其他氨基酸的侧链上。但由于分析方法上的欠缺，到目前为止，对这些甲基化修饰进行鉴定分析仍然十分困难。我们利用不同同位素组成的甲硫氨酸来标记蛋白上的甲基化位点，在经过酶解处理之后，同一甲基化肽段的轻标形式与重标形式在母离子层次上会存在特定的分子量差异，而这个分子量差异的大小是由肽段上甲基化修饰基团的数目决定的，因而可以通过这个分子量差异准确判断出肽段上带有的甲基化修饰的数目。合作团队基于甲基化修饰引入的这一分子量特征，发展了一种基于代谢标记的甲基化鉴定分析新技术，实现了 8 种氨基酸甲基化的同时鉴定分析，并鉴定到了 C3H1 锌指蛋白上的组氨酸甲基化。随后，团队确定了 C3H1 锌指蛋白上组氨酸甲基化的结构为 Nπ类型，并确定 CARNMT1 为对应的甲基转移酶；进一步的研究发现 U2AF1 上的组氨酸甲基化修饰会显著影响 pre-mRNA 的可变剪接，并在 in-vitro 和 in-vivo 层次上证实，该修饰是通过改变 U2AF1 与 RNA 的结合能力来影响 U2AF1 的剪接功能；此外，利用分子模拟对该甲基化修饰进行分析，发现组氨酸甲基化修饰是调控锌指蛋白活性的一个通用机制。

此外，我们发展了基于光交联的甲基转移酶底物筛选新技术，克服了酶-底物相互作用力弱而导致的鉴定灵敏度低的问题，实现了 PRMT1 底物蛋白的广谱鉴定；发展了一种基于化学-酶法富集的精氨酸甲基化分离分析新策略，提升了精氨酸单甲基化的分析能力，并且提高了精氨酸甲基化的鉴定覆盖度。

关键字 蛋白质翻译后修饰，组氨酸甲基化，蛋白质组学

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

原代单细胞蛋白组学新方法

樊智雅、柳迪、钱小红、秦伟捷*
国家蛋白质科学中心

Mass spectrometry (MS)-based single cell proteomics (SCP) has made significant advances in sensitivity and throughput in recent years. However, current studies typically focus on immortalized cell lines, which failed to represent the true cellular heterogeneity and authentic biological responses within tissues. Additionally, primary cells isolation from tissues requires prolonged enzyme digestion, chemical stress from frequent buffer exchanges, and mechanical stress from the high-pressure fluid environment of flow sorting. These factors may contribute to striking protein degradation or loss, posing greater challenges for SCP identification. Here we introduce SPOT, a novel SCP workflow that integrated optimized immune cell sorting from mouse lymph nodes, cellenONE-based automatic single-cell acquisition, one-pot sample preparation and Astral-based lossless high-throughput MS analysis. In this work, we provided the first in-depth characterization of the interactions of primary immune cells and tumor cells at the single-cell level. Initially, sensitivity of SPOT was validated using HeLa cells, identifying more than 3,500 protein groups/cell in single-search strategy (one MS raw data searched alone) and more than 5,000 protein groups/cell in carrier-search approach (searched in combination with 20 cell data). Furthermore, SPOT was applied to tumor-associated macrophages (TAMs) with a throughput of 400 cells/week. We identified around 2000 protein groups/cell using single-search strategy for TAMs with a volume of only one-third that of HeLa cells, representing a significant advancement in SCP by pushing the field towards actual functional biological research.

关键字 single cell proteomics, primary cell, mass spectrometry

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于 NanoLC-MS/MS 的单细胞多维度多组学分析新方法

贺映云[1,2]、刘欣欣[1]、袁辉明[1]、梁玉[1]、张晓哲[1]、赵宝锋[1]、张玉奎[1]、张丽华*[1]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 中国科学院大学

为深入系统研究细胞异质性，实现对细胞功能的精确认知，亟需开展“内外结合”的单细胞多维度多组学分析。然而，单个细胞中的生物分子如蛋白质和代谢物的含量极低，而且缺乏有效的扩增方法。对于不同种类的生物分子，往往需要独特的样品制备方法，而这些方法通常不兼容，因此单细胞多组学分析仍然具有挑战性。近年来发展了各种以蛋白质组为核心的单细胞多组学分析技术，然而，现有样品制备技术难以确保不同组分的完全分离和提取回收率。此外，目前单细胞分泌蛋白组分析方法严重依赖于抗体，在高丰度血清蛋白的干扰下全面研究单细胞分泌组具有挑战性。

为了实现对同一细胞的蛋白质组-代谢组分析，我们研制毛细管烷基化微反应器（OCAM），首先蛋白质通过巯基的烷基化反应共价结合到碘乙酸功能化的 OCAM 上，然后用高浓度有机溶剂快速洗脱代谢物，随后对捕获的蛋白质进行柱上酶解，将多肽和代谢物分别进行 nanoLC-MS/MS 分析。OCAM 可以在单个 HeLa 细胞中平均鉴定 1509 种蛋白质，并且在单个卵母细胞中鉴定 3457 种蛋白质和 171 种代谢物，实现了目前单个小鼠卵母细胞最深的蛋白质组和代谢组覆盖度，多组学分析进一步揭示了卵母细胞成熟过程中的代谢调控模式。此外，为了实现单细胞分泌组的规模化分析，我们发展了基于选择性富集和 nanoLC-MS/MS 的单细胞分泌组分析（SCSP）方法，首先在活细胞水平对新合成蛋白质进行 L-叠氮高丙氨酸（AHA）代谢标记，然后采用微流控芯片实现单细胞的分离和原位培养，随后在炔烃功能化毛细管微反应器中对标记的分泌组进行基于点击化学的富集，并在蛋白质原位酶解后进行 nanoLC-MS/MS 分析。该方法可以在单个 HeLa 细胞的分泌组中平均定量 295 种蛋白质，与之前报道的基于抗体的靶向分析方法相比提高约一个数量级，为深入了解单细胞分泌异质性和细胞间通讯提供有力工具。

关键字 单细胞，多组学，蛋白质组，，分泌组，，NanoLC-MS/MS

参考文献

1. Y. Li, H. Li, Y. Xie, S. Chen, R. Qin, H. Dong, Y. Yu, J. Wang, X. Qian, W. Qin, *Anal. Chem.*, **2021**, *93*, 14059.
2. P. Zhao, Y. X. Feng, J. H. Wu, J. W. Zhu, J. L. Yang, X. X. Ma, Z. Ouyang, X. R. Zhang, W. P. Zhang, W. H. Wang, *Anal. Chem.*, **2023**, *95*, 7212.
3. Y. Lu, Q. Xue, M. R. Eisele, E. S. Sulistijo, K. Brower, L. Han, E. D. Amir, D. Pe'er, K. Miller-Jensen, R. Fan, *PNAS*, **2015**, *112*, E607.
4. Y. Y. He, H. M. Yuan, Y. Liang, X. X. Liu, X. Z. Zhang, Y. H. Ji, B. F. Zhao, K. G. Yang, J. Zhang, S. Zhang, Y. K. Zhang, L. H. Zhang, *Chem. Sci.*, **2023**, *14*, 13495.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

小细胞肺癌蛋白基因组学研究

刘倩*[1]、章靖[2]、郭晨晨[3]、王梦成[3]、王晨飞[4]、高大明[3]、季红斌[3]、周虎[1]、张鹏[2]

1. 中国科学院上海药物研究所
2. 同济大学附属上海市肺科医院
3. 中国科学院分子细胞科学卓越创新中心
4. 同济大学生命科学与技术学院

肺癌是全球癌症致死的首位原因，其中小细胞肺癌约占 15%，是恶性程度最高、预后最差的亚型，5 年生存率仅为 5%。分子表征与组学研究的不足极大地限制了小细胞肺癌的基础与临床进展，由于缺乏驱动突变，使得难以通过基因组研究识别有效靶点和分子分型，导致小细胞肺癌面临分子分型不明和治疗手段单一的挑战。蛋白质作为生命功能的执行者，是 95%以上药物的作用靶点，但目前尚缺乏对小细胞肺癌的系统性蛋白质组学研究。

本文对上百例小细胞肺癌患者的肿瘤和配对癌旁组织进行了蛋白基因组学分析，整合基因组、转录组、蛋白质组、磷酸化蛋白质组等多维组学数据，揭示了小细胞肺癌的分子特征，提出新的分子分型及其针对性治疗策略。首先，通过对蛋白质组学数据监督分析，我们筛选出预后生物标志物，发现并验证了 HMGB3 的高表达与不良预后密切相关。生物实验表明，HMGB3 通过转录调控细胞连接相关基因的表达，促进小细胞肺癌细胞迁移。其次，通过分析小细胞肺癌的免疫微环境特征，发现 ZFHX3 突变与免疫细胞浸润水平升高密切相关。更重要的是，在接受 PD-1 或 PD-L1 抑制剂联合化疗的小细胞肺癌临床试验患者肿瘤样本中，ZFHX3 突变患者展现出更好的治疗响应，提示其可能作为免疫治疗的生物标志物。最后，基于非负矩阵分解算法，我们将小细胞肺癌分为四个亚型（nmf1-4），并系统表征其独特的分子特征与潜在治疗策略。其中，nmf1 为经典亚型，增殖快、E2F 活性高，可能受益于一线化疗；nmf2 表现出 DLL3 显著升高，适合靶向 DLL3 治疗；nmf3 在磷酸化蛋白质组层面表现出显著激活的 RTK 通路，适合靶向 RTK 治疗；nmf4 表现出特异性升高的 MYC 表达及通路激活，可能受益于 AURK 抑制剂。我们进一步建立了小细胞肺癌的 PDX 和 CDX 模型，并进行基因组学和蛋白质组学整合分析，验证了基于临床样本的分子分型及针对性治疗策略。

这些研究成果为小细胞肺癌的病理机制解析、预后检测、分子分型及个性化治疗提供了理论依据，同时产生的高质量大数据将将支持广大小细胞肺癌的基础与临床研究，推动该领域的发展。

关键字 小细胞肺癌，蛋白质组学，多组学，分子分型

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

基于功能二维材料的细胞表面工程策略在膜蛋白质组原位分析中的应用

蒋倩倩、江波*、张丽华
中国科学院大连化学物理研究所

细胞膜蛋白在信号传导、分子运输、细胞识别等方面起着至关重要的作用。对膜蛋白组的原位解析有助于阐明真实状态下动态但高度有序的细胞事件，发掘潜在的生物标志物和药物靶标。细胞表面工程化策略将生物活性分子或功能材料涂覆在细胞表面以调节细胞活性和功能，为生物膜富集提供了的新见解。功能二维纳米片材料具有柔性片层结构，且比表面积大，生物兼容性强、可及活性位点丰富，是细胞表面工程化策略的理想选择。

基于此，我们开发了功能二维材料导向的细胞表面工程偶联膜融合方法，利用二维材料和生物膜上磷脂双层之间的相互作用以及生物膜间的膜融合过程，绘制从质膜到各种细胞器膜的整个膜蛋白质组。利用方法在 HeLa 细胞中鉴定到 1526 膜蛋白质，特异性高达 77%。该方法具有稳定性高和普适性强的优点，在不同类型细胞及外泌体中得到验证。此外，结合 N-磷酸化富集技术，提供了具有膜特异性的 N-磷酸化修饰位点信息。结合定量蛋白质组学，发现了凋亡过程中与线粒体动力学和 ER 稳态相关的膜蛋白质变化，为探索依托泊苷诱导人神经母细胞瘤细胞凋亡的机制提供新方向。

在上述工作基础上，通过在膜靶向二维材料上负载光敏剂合成了二维纳米光敏材料，利用细胞表面工程化策略将光敏剂限域在细胞表面，实现了对细胞表面蛋白的光催化邻近标记。二维纳米光敏材料制备简单，分散性好，结构稳定，避免了复杂的化学合成分离步骤，对细胞表面组氨酸标记特异性达 85%。利用该方法发现并初步验证了癌转移过程中的潜在细胞表面参与者，为癌转移的分子机制提供了重要的见解。总之，基于功能二维材料的细胞表面工程策略实现了活细胞膜蛋白质组原位分析。

关键字 功能二维材料，膜蛋白质组，原位分析

参考文献

1. Q. Q. Jiang, B. Jiang, L. H. Zhang, et al. *Chem. Sci.*, **2023**, 14, 11727.
2. Q. Q. Jiang, B. Jiang, L. H. Zhang, et al. *Small, In revision*.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

微生物宏蛋白质组数据库构建与数据解析新方法

吴恩慧、乔亮*
复旦大学

宏蛋白质组能够获得微生物群落结构和功能的全面信息，已经成为研究微生物群落功能的一种强大的技术手段。相较于普通的蛋白质组分析，宏蛋白质组分析时面对的样本往往复杂度更高，且不同的物种间丰度差异极大，因此其数据分析面临许多挑战。宏蛋白质组数据解析的关键之一在于高度匹配的数据库构建。尽管现在已经开发了一系列微生物宏蛋白质组数据库构建策略，其中却存在各种不同的问题，包括基因组测序翻译得到的蛋白条目的物种注释问题和庞大的公共数据库带来的数据解析时间等问题。在本工作中，我们开发了重叠群指导的基因注释策略。在该策略中，宏基因组测序的短读序列首先被组装为重叠群，然后对重叠群进行注释，选取注释结果中丰度排名靠前的物种，利用这些物种的参考基因组构建一个基因序列数据库，最后基于这个基因序列数据库，对预测的基因进行物种水平的注释。在12 种细菌组成的合成微生物群落数据集上实现了 100%的注释准确度，在肠道菌群分析时蛋白注释率达 90%以上，比当前主流方提升 100%以上。在实际研究中，有时无法得到同一样本的基因测序结果，此时往往采用公共数据库。然而，直接使用大型公共数据库搜库分析会导致搜索空间膨胀，搜库时间增加，鉴定灵敏度降低。因此，我们提出了基于高丰度蛋白过滤公共数据库的宏蛋白质组数据库构建策略。在该策略中，首先从公共数据集中收集肠道微生物物种信息，构建了一个包含 647 种微生物 4541304 个蛋白条目的人类肠道菌群宏蛋白质组数据库，进一步从中提取高丰度蛋白，构建了一个高丰度蛋白数据库；然后通过该高丰度蛋白数据库对质谱数据进行初步搜库分析，构建样本特异性的数据库；最后基于该数据库采用混合谱图库搜库策略对宏蛋白质组数据进行搜库分析。我们分别在合成微生物群落数据集、粪便样本数据集、结直肠癌肠道菌群宏蛋白质组数据集上证明了该方法的灵敏度和准确性，实现了单纯从蛋白质组数据出发的物种筛选和蛋白注释达到了基因组测序建库相当的蛋白和多肽鉴定数。

关键字 宏蛋白质组；蛋白质序列数据库；物种注释；数据解析

参考文献

1. 吴恩慧、乔亮，微生物宏蛋白质组–从样品处理、数据采集到数据分析. *色谱*，2024, *42(7)*: 658.
2. Wu E, Xu G, Xie D, Qiao L. Data-independent acquisition in metaproteomics. *Expert Rev Proteomics*, **2024**, *21(7-8)*: 271.
3. Wu E, Mallawaarachchi V, Zhao J, et al. Contigs directed gene annotation (ConDiGA) for accurate protein sequence database construction in metaproteomics. *Microbiome*, **2024**, *12(1)*: 58.
4. Wu E, Yang Y, Zhao J, et al. High-Abundance Protein-Guided Hybrid Spectral Library for Data-Independent Acquisition Metaproteomics. *Anal Chem*, 2024, *96(3)*: 1029.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

亲和肽配体用于全局 N 磷酸化蛋白质组解析

王鹤、张小雨、江波、张丽华*、卿光焱
大连化学物理研究所

可逆性蛋白磷酸化是普遍存在的研究最广泛的翻译后修饰(post-translational modification, PTMs)之一，影响着许多疾病 1。目前关于 N-磷酸化的研究较少，N-磷酸化是发生在组氨酸(pHis)、赖氨酸(pLys)和精氨酸(pArg)侧链氨基上的磷酸化，由于高能磷酰胺键 P-N 的存在导致其热力学稳定性较差，在强酸性或者高温条件下极易发生解离，其重要性被忽视。近年来，N-磷酸化的研究已逐渐提上日程。迄今为止，两种哺乳动物的 pHis 激酶(NME1 和 NME2)和三种 pHis 磷酸酶(PHPT1, LHPP 和 PGAM5)已被成功验证 2-5。基于抗体的亲和富集法是最广泛采用的 N-磷酸化肽富集策略，而针对 pHis 的特异性抗体具有较高的交叉反应性 6，关于更不稳定的 pLys、pArg 抗体的研究则很少。尽管取得了一部分的进展，但缺乏有效的富集方法严重阻碍了 N-磷酸化的鉴定和功能研究。本项目以 pHis 作为靶标，pHFF 作为基底，利用噬菌体随机展示技术基于十二肽库对其进行亲和迭代筛选，通过多轮“结合—洗涤—洗脱”的筛选流程，获得了在中性条件下对 pHis 具有高特异性结合能力的亲和肽。将肽固载在琼脂糖磁珠上，在生理条件下通过对磷酸化标准肽段的高效富集验证了其可靠性，并成功用于大肠杆菌、HeLa 细胞、及组织裂解液中 N-磷酸化位点的富集。该固载亲和肽的磁性材料简化了富集的实验流程，可在中性生理缓冲溶液中进行富集，避免了高有机相对蛋白构象的干扰，不仅可用于 pHis 位点的富集，对 pLys、pArg 位点也有一定的富集效果，实现了 N-磷酸化蛋白质组学的全面富集分析。亲和肽磁性材料在 HeLa 细胞裂解液中富集到 2307 个高可信 N-P 化位点，其中 pHis 位点 829 个，相比于 SiO2@DpaZn 材料鉴定结果（1048 个 N-P 化位点，278 个 pHis 位点）显著提高。结合质谱定量方法，将该材料用于 PS19 小鼠与 WT 小鼠大脑皮层中 N-P 位点的定量分析，定量到 PS19 小鼠中微管相关蛋白、突触支架蛋白、激酶等磷酸化水平发生变化，与微管组装、磷酸化、信号传导等 AD 发病相关过程密切相关。该方法可以广泛地用于各种样品中 N-P 化蛋白的富集，极大地扩充了 N-P 位点数据库，为 N-P 化发挥重要作用的疾病相关机制研究提供了有力的工具。

关键字 亲和肽配体，N-磷酸化，富集

参考文献

1. Liu, Q., Zhang, J., Guo, C. et al., Proteogenomic characterization of small cell lung cancer identifies biological insights and subtype-specific therapeutic strategies. *Cell,* **2024,** *187*, 184.
2. Kalagiri, R., Hunter, T., The many ways that nature has exploited the unusual structural and chemical properties of phosphohistidine for use in proteins. *Biochemical Journal*, **2021**, *478*, 3575.
3. Cai, X., Srivastava, S., Surindran, S. et al., Regulation of the epithelial Ca^{2+} channel TRPV5 by reversible histidine phosphorylation mediated by NDPK-B and PHPT1. *Mol. Biol. Cell,* **2014**, *25*, 1244.
4. Hindupur, S. K., Colombi, M., Fuhs, S. R. et al., The protein histidine phosphatase LHPP is a tumour suppressor. *Nature,* **2018**, *555*, 678.
5. Attwood, P. V., Wieland, T., Nucleoside diphosphate kinase as protein histidine kinase. *Naunyn*

Schmiedebergs Arch Pharmacol, **2015**, *388*, 153.

6. Oslund, R. C., Kee, J. M., Couvillon, A. D. et al. A phosphohistidine proteomics strategy based on elucidation of a unique gas-phase phosphopeptide fragmentation mechanism. *J. Am. Chem. Soc.,* **2014**, *136*, 12899.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

利用空间特异性的 N 糖基化蛋白质组学技术揭示聚糖加工的位点异质性

周欣悦、唐麒、邹鹏、陈兴*
北京大学

N 糖基化是一种高度保守的翻译后修饰，通常发生在 N-X-S/T 基序中的天冬酰胺的侧链上。在真核细胞中，N 糖基化广泛分布于各类分泌蛋白和细胞膜蛋白上，对它们的结构和功能有着重要影响。在过去的几十年中，大量研究者通过对参与 N 糖基化过程的糖基转移酶，糖苷酶，转运蛋白以及分子伴侣进行纯化，体外表征和亚细胞定位分析，逐渐拼凑起了完整的 N 糖基化生物合成模型。尽管已有的 N 糖基化加工模型涵盖了大多数 N 糖基化事件，但仍有许多问题等待解答。例如 N 聚糖的微观异质性为何展现出了明显的位点特异性——即不同糖基化位点上的 N 聚糖的结构多样性和特征存在差异。根据现有模型，不同糖基化位点上的 N 聚糖应该经历类似水平的成熟过程，因为它们都沿分泌途径接触了同样的聚糖加工流水线。然而，大量研究表明同一蛋白质上的不同糖基化位点的 N 聚糖成熟状态可以高度多样化，这在某些情况下对蛋白质功能有很大贡献。这些观察结果暗示了在现有模型之外，存在其他机制能够位点特异性地调控 N 聚糖的加工和成熟。在蛋白质组水平上追踪每个 N 糖基化位点载带的 N 聚糖结构在分泌途径中的变化有助于阐明这一潜在机制。为此，我们基于酶促的邻近标记技术发展了一种具有亚细胞分辨率的 N 糖基化蛋白质组学鉴定流程，并将其命名为 N-GlycoMap。利用 N-GlycoMap 技术，我们报道了来自内质网，高尔基体，细胞膜以及溶酶体的万余种完整糖肽，提供了亚细胞精度的 N 糖基化蛋白质图谱，描绘了分泌途径中的 N 糖基化景观。通过在组学规模上追踪 N 聚糖在分泌途径中的加工过程，我们捕捉到了位点特异性的微观异质性的改变，并使用 GM score，GMSD 和香农指数等参数重现定义了微观异质性的描述方式。此外，我们还基于 AlphaFold2 提供的蛋白质预测结构建立了用于评价聚糖可及性的模型，发现了聚糖可及性与微观异质性的关系，揭示了聚糖可及性是影响 N 聚糖成熟命运决定的关键因素。

关键字 空间特异性，N 糖基化，完整糖肽鉴定，微观异质性

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：报告

时空分辨的 TRAP 技术描绘药物体内外信号网络

张汉卿、皖宁、李义、李春雨、江齐和、叶慧*
中国药科大学 多靶标天然药物全国重点实验室

生物活性小分子的靶标识别对于理解其作用机制和发现治疗靶标至关重要。尽管现有方法主要关注直接结合靶标（directTs），但对下游效应蛋白（间接靶标，indirectTs）的解析能力有限。之前的研究中我们开发了一种靶标响应可及性剖析（DIA-TRAP）方法，该方法通过还原性二甲基化标记反应性蛋白赖氨酸，测量配体结合引起的可及性变化，以识别结合靶标[1]。本研究中我们假设活性分子与直接靶标的结合会影响其下游效应蛋白，它们的化学可及性会发生变化，这一变化可以通过 TRAP 检测。我们将数据独立采集（DIA）技术整合到 TRAP 工作流程中以实现高通量的时间分辨 TRAP 分析。以 TEPP-46 为模型化合物，将其与细胞共孵育，并在给药后的 6 个不同时间点进行 TRAP 标记。DIA-TRAP 分析揭示了 TEPP-46 的真正靶标 PKM2，该靶标在 30min 显示出最显著的可及性降低。此外，我们观察到与糖酵解相关的蛋白（如 ALDOA 和 GAPDH）在给药后 30min 发生了可及性变化，这些蛋白被注释为 PKM2 的相互作用蛋白。进一步我们探讨了 DIA-TRAP 在体内环境中评估配体诱导的可及性变化的能力，并以空间分辨的方式识别靶标。通过向接种移植肿瘤的小鼠尾静脉注射 TEPP-46，并在肿瘤组织的不同区域（核心、中点和边缘）进行 TRAP 分析，我们发现 PKM2 在所有区域均表现出显著的反应，尤其是在肿瘤边缘区域，这与 TEPP-46 的体内分布相一致。总之，DIA-TRAP 技术实现了时间和空间分辨的 TRAP 分析，使我们能够识别生物活性配体的直接和间接靶标，并分析其下游效应。该方法适用于原位环境，为生物活性小分子的靶标识别提供了一种新的策略。

关键字 时空分辨，药物靶标，TRAP，TEPP-46，PKM2

参考文献

1. Tian, Y. et al. Chemoproteomic mapping of the glycolytic targetome in cancer cells. *Nat Chem Biol* . **2023**,*19*, 1480.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

基于固相烷基化磁性纳米微球的蛋白质组样品预处理方法开发及应用

程孟春[1]、吴玉洁[1,2]、刘欣欣[1]、杨开广[1]、袁辉明[1]、张丽华*[1]、张玉奎[1]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 大连理工大学

临床样品蛋白质组研究对于潜在生物标志物发现、药物靶点筛选、疾病早期诊疗及预后判断等具有十分重要的意义。血浆、尿液、循环肿瘤细胞等样品已被广泛用于临床检测。大多临床样品具有样品量少、基体复杂、干扰物多的特点，因此发展高效样品制备方法是实现高通量、高精准、深度覆盖的临床蛋白质组分析的重要前提。针对传统方法对临床蛋白质组样品制备回收率低、抗基质干扰能力差和通量低的问题，我们制备固相烷基化（SPA）磁性纳米微球，利用材料表面的碘与蛋白质变性还原后暴露的半胱氨酸上巯基之间的共价反应实现蛋白质在材料表面的捕获，显著提高蛋白质组样品的制备抗干扰能力；我们将 SPA 磁性纳米微球用于处理 1000 个 293T 细胞，通过 nano-LC/MS/MS（QE 质谱）分析可以鉴定到 2034 个蛋白，显示出对微量样品高效的处理能力。此外，将开发的 SPA 磁性纳米微球与自动化液体工作站相结合，构建高通量蛋白质组样品预处理系统，可在 4 小时内完成 96 个 293T 蛋白样品从蛋白到肽段的样品制备全流程，平均可以鉴定到 3074 个蛋白，不同批次样品间定量蛋白的 Pearson 系数可达 0.955-0.989，显示出良好的样品处理重现性。上述结果表明，我们开发的基于固相烷基化磁性纳米微球的蛋白质组样品制备方法有望为临床样品蛋白质组高通量分析提供重要技术支撑。

关键字 固相烷基化磁性纳米微球，蛋白质，预处理方法

参考文献

1. Y. Li, H. Yuan, M. Cheng, X. Zhu, K. Yang, W. Zhang, Z. Sui, C. Zhang, L. Zhang, Y. Zhang, *Science Bulletin*, **2022**, *67(16)*, 1628.
2. H. Yuan, Z. Dai, X. Zhang, B. Zhao, H. Chu, L. Zhang, Y. Zhang, *Science China-Chemistry,* **2022**, *65(9)*, 1838.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

M1 极化巨噬细胞外泌体通过 STAT3 通路调节肝脏铁调素

刘伟、郭晓雨、刘思金*
生态环境研究中心

铁是人体必需的微量元素，铁调素-铁转运蛋白轴在系统铁代谢调节中起重要作用。细颗粒物（FPM）等环境污染物已被证明可导致巨噬细胞 M1 极化。然而，极化巨噬细胞外泌体在肝脏铁调素调节中的作用尚不明确。本研究通过 LPS 和 IL-4 分别诱导 M1、M2 极化巨噬细胞，分离外泌体刺激肝细胞。结果表明，M1 极化巨噬细胞的外泌体可增加肝细胞铁调素 mRNA 的表达。进一步对信号通路的研究显示，肝细胞 STAT3 磷酸化水平增加，STAT3 信号通路被激活，且与 IL-6 无关。蛋白质测序分析发现潜在差异蛋白包括 PTN1、HMOX2、TGFI1、UBE20、VPP2。这些结果表明，M1 极化巨噬细胞外泌体可通过激活 STAT3 通路上调肝脏铁调素的表达。

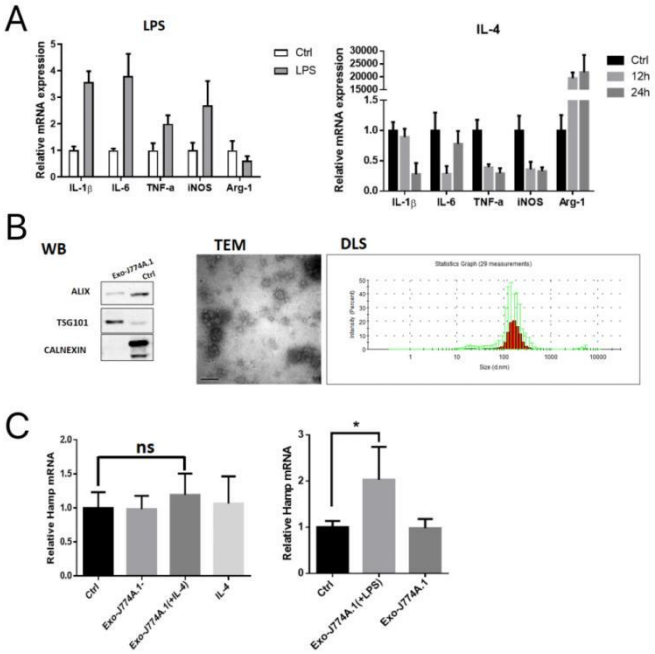


图 1. 巨噬细胞外泌体对肝细胞铁调素表达的影响。
A.LPS 和 IL-4 分别诱导 M1、M2 极化巨噬细胞 B.分离巨噬细胞外泌体并鉴定 C.巨噬细胞外泌体刺激肝细胞检测铁调素 mRNA 的表达。

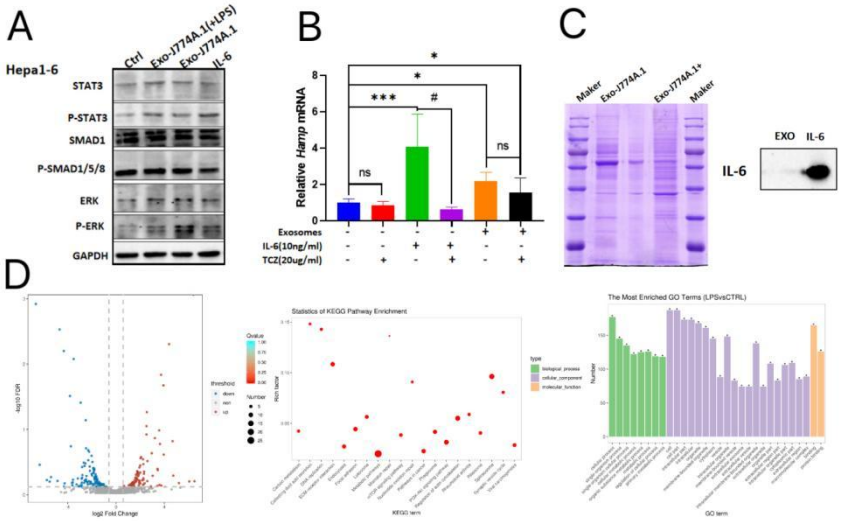


图 2. 巨噬细胞外泌体调节铁调素表达的分子机制。

A. Western Blot 检测巨噬细胞外泌体调节铁调素表达的信号通路 B.TCZ（IL-6 受体阻断剂）处理后检测外泌体效应 C.Western Blot 检测外泌体中 IL6 D.外泌体蛋白质测序。

关键字 巨噬细胞，外泌体，肝脏铁调素

参考文献

1. Billesbølle CB, Azumaya CM, Kretsch RC, et al. Structure of hepcidin-bound ferroportin reveals iron homeostatic mechanisms. *Nature.* **2020**;*586(7831)*:807.

2. Li X, Cai H, Wu W, Si S, Zhu M. Exposure duration of ambient fine particulate matter determines the polarization of macrophages. *Cent Eur J Immunol.* **2023**;*48(3)*:219.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

细胞表面蛋白质复合物分析新技术研究

刘祎、吴慈、赵群、梁振、张玉奎、张丽华*
大连化物所

Cell surface proteins play a crucial role in mediating various cellular processes through interactions with other proteins. A comprehensive analysis of the cell surface interactome is essential for identifying potential biomarkers and drug targets. However, achieving highly selective crosslinking remains a significant challenge due to the low abundance and dynamic nature of these proteins. In this study, we introduce a novel crosslinker, 2,6-dimethylpiperidine disulfosuccinimidyl tridecanoate (DPSST), specifically designed to target lysine residues. This crosslinker features reactive N-hydroxysulfosuccinimide esters and a membrane-impermeable group, along with an enrichable trimethylpiperidyl moiety. This design of DPSST facilitates in vivo crosslinking of cell surface protein interactions. Notably, the trimethylpiperidyl group enhances the mass spectrometry signal of crosslinked peptides, improving detection sensitivity. By combining this highly lysine-reactive crosslinker with a one-step enrichment strategy in physiological environments, we achieved an in-depth analysis of the cell surface interaction network, yielding a high selectivity of 78.5%. From live HeLa cells, we identified 3,194 crosslinked peptide pairs, corresponding to 398 high-confidence protein-protein interactions (PPIs) on the cell surface. Gene ontology analysis revealed that these PPIs are significantly enriched in processes related to cell adhesion, membrane structure, and enzyme binding activities. Therefore, this novel method offers a powerful toolkit for detailed profiling of surfaceome interactions and facilitates comprehensive functional analyses.

关键字 细胞表面蛋白质，交联，蛋白质复合物，相互作用

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

双响应脂质体用于蛋白质复合物原位分析

付文欣[1,2]、周雯[1,3]、李欣蔚[1,4]、徐章润[2]、梁振[1]、杨开广[1]、张丽华*[1]、张玉奎[1]

1. 中国科学院大连化学物理研究所，中科院分离分析化学重点实验室，辽宁省大连市中山路 457 号，邮编：116023

2. 东北大学，理学院，辽宁省沈阳市和平区文化路三巷 11 号，邮编：110819

3. 中国科学院大学，北京市玉泉路 5 号，邮编：100049

4. 大连理工大学，张大煜学院，辽宁省大连市凌工路 2 号，邮编：116024

蛋白质以复合物的形式参与多项重要的生命活动。其结构和与其他蛋白质间相互作用与所处细胞微环境息息相关。对细胞器中蛋白质复合物的原位分析对于理解蛋白质动态变化，疾病机理等具有重要意义。目前已有 PLGA 型载体，成功将交联剂递送到活细胞线粒体，并且首次实现在细胞培养状态下，细胞内细胞器的可控交联和原位分析。但这类高分子载体当前还存在着装载率低，入胞时间长、可控释放慢等问题。

为了实现活体蛋白质复合物的深度覆盖原位分析，我们选择具有膜结构，生物相容性高的脂质体为载体基质，加入马来酸酐(DMMA)pH 响应电荷反转基团，通过薄膜分散法，制备了高包埋交联剂双琥珀酰亚胺辛二酸酯(DSS)的脂质体纳米颗粒(LNPs)。DMMA 电荷反转层使 LNPs 在正常生理环境下具有较长的血液循环，并在弱酸性肿瘤微环境下成功实现电荷反转，提高细胞吸收。以 HepG2 细胞为模式细胞，细胞附近 pH 下降脂质体发生负电向正电荷的转变，LNPs 进入到 HepG2 细胞中并在高于脂质体相转变温度时原位释放 DSS，实现对肝癌细胞中蛋白质复合物的原位交联。在细胞内原位交联后，结合离子液体过滤辅助样品制备(i-FASP)技术，提取蛋白质复合物。进一步通过化学交联质谱，实现肝癌细胞中蛋白质构象和相互作用位点的精准解析。

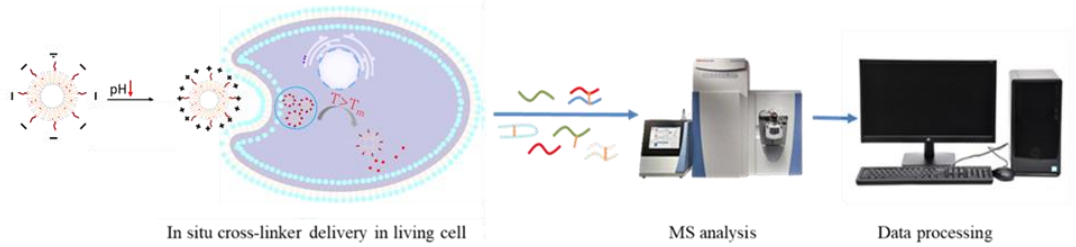


图 1 示意图。

关键字 脂质体，原位交联分析，蛋白质相互作用，蛋白质结构解析

参考文献

1. Chen YW, Zhou W, Li XW, Yang KG, Zhang LH, et. al. ACTA *Chimica Sinica*, **2022**, *80*, 817
2. Chen YW, Zhou W, Li XW, Yang KG, Liang Z, Zhang LH, et. al., *Nat. Commun.*, **2023**,*14*, 3882
3. Li XW, Chen YW, Zhou W, Yang KG, Liang Z, Zhang LH, et. al., *Anal. Chem.*, **2023**, *95*, 9555

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

遗传密码子扩展技术揭示活细胞中特异位点乳酰化重塑蛋白质功能

邵畅[1]、唐槊[2]、余思琴[1]、刘宸光[1]、张越阳[1]、何梓萌[1]、袁琪[1]、王南溪[2]、叶慧*[1]
1. 中国药科大学
2. 南京中医药大学

乳酰化是一种源自乳酸的全新翻译后修饰，于 2019 年在组蛋白赖氨酸残基上被发现。尽管组蛋白上的乳酰化翻译后修饰在不同的生物学背景中已被证明具有生理学意义，但对于乳酰化在非组蛋白上的功能亟待揭示。如何发现非组蛋白乳酰化修饰位点并解析其生物学意义至关重要。为了推动对非组蛋白乳酰化修饰功能的探索，我们开发了一套全面的乳酰化工作流程，该流程整合了用于发现乳酰化位点的蛋白质组学、用于在活细胞中表达特异性乳酰化位点蛋白质的遗传密码子扩展技术（GCE）以及用于评估由此产生的生物效应的综合功能分析（IFA）平台。利用干湿实验蛋白质组学策略，我们在 ALDOA-K147 处发现了一种保守的乳酰化作用，我们推测这种作用具有重要的生物学意义。在哺乳动物细胞中表达该位点特异性乳酰化的 ALDOA 发现，它不仅能抑制酶活性，还能诱导功能增益效应。这些效应通过增强蛋白稳定性、促进核转位、调节粘附相关基因的表达、改变细胞形态和调节与 ALDOA 互作的蛋白，重塑了 ALDOA 的功能。我们的研究结果证明了基于 GCE 的工作流程在建立特定乳酰化事件与以靶点为中心或全细胞变化之间的因果关系方面的强大功能。

关键字 乳酰化翻译后修饰，蛋白质组学，ALDOA，转录调控，蛋白互作

参考文献

1. Zhang, D. *et al.* Metabolic regulation of gene expression by histone lactylation. *Nature*, **2019**, *574*, 575.
2. Chen, Y. *et al.* Metabolic regulation of homologous recombination repair by MRE11 lactylation. *Cell,* **2023**, *187*, 294.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

基于区域和性别分辨率的多组学技术系统解析金属元素失衡介导的大肠衰老和肠癌发生的分子机制

张柔、胡梦、卢莹、何思雨、崇宝晨、戴伦治*
四川大学华西医院

大肠是人体消化系统的重要组成部分，其主要功能包括吸收水分和电解质、形成和储存粪便以及维护电解质和酸碱平衡等。随着年龄的增加，大肠逐渐衰老，主要表现为形态学改变、吸收能力下降、抵抗力下降、肠屏障功能下降和肠道菌群失衡等 1-3，肠道衰老相关疾病，如炎症性肠病、结直肠癌等的患病风险也逐渐升高 4-6。深入研究肠道衰老背后的生物学机制有助于防治肠道衰老相关疾病。

金属元素是组成有机体的必需成分。金属元素的含量，会随着生命周期和机体状态发生动态变化，与衰老进程密切相关。然而，金属元素稳态失衡如何影响大肠衰老，以及金属元素失衡介导的大肠衰老如何影响肠癌的发生等仍缺乏系统研究。

本研究基于转录组、蛋白质组、磷酸化组、N-糖蛋白组、代谢组和金属组系统地绘制了高等动物大肠衰老过程中金属元素介导的分子网络图谱，发现了多个金属元素相关的调控大肠衰老的重要分子。金属组学结果显示，大多数金属元素的含量在肠道衰老过程中显著降低，且具有部位和性别特异性，提示这些金属元素可能在肠道衰老过程中发挥了重要作用。蛋白组和转录组联合分析显示，肠道衰老过程中随年龄变化且与金属元素相关的基因主要与细胞粘附和免疫通路相关，提示金属元素在肠道衰老过程中可能是通过影响细胞粘附相关蛋白的表达以及免疫细胞的功能，从而导致肠道屏障失衡。肠道衰老过程中翻译后修饰水平的变化则可能响应于金属元素调控的特定蛋白、过程以及途径的改变，反应了金属元素与翻译后修饰之间可能存在高度复杂的关系。代谢组学分析提示，金属元素在肠道衰老过程中与胆汁酸和精氨酸合成途径有关，可能与肠道炎症的发生有关。此外，结直肠癌多组学分析显示，结直肠癌诱导的金属再分布与肠道衰老和肿瘤进展紧密相关，提示关键金属元素在肠道衰老和结直肠癌进展中的重要作用。

总的来说，本研究建立了高等动物中金属元素失衡与大肠衰老以及肠癌发生的联系，提示了补充金属元素在预防肠道衰老和肠癌中的潜在应用价值。

关键字 多组学，金属元素，大肠，衰老，肠癌

参考文献

1. Tauc, H. M. et al. Age-related changes in polycomb gene regulation disrupt lineage fidelity in intestinal stem cells. **2021**, *Elife 10*.
2. Salazar, N., Valdés-Varela, L., González, S., Gueimonde, M. & de Los Reyes-Gavilán, C. G. Nutrition and the gut microbiome in the elderly. *Gut microbes*, **2017**, *8*, 82.
3. He, D. et al. Gut stem cell aging is driven by mTORC1 via a p38 MAPK-p53 pathway. *Nat Commun*, **2020**, 11, 37.
4. Nimmons, D. & Limdi, J. K. Elderly patients and inflammatory bowel disease. *World journal of gastrointestinal pharmacology and therapeutics*, **2016**, 7, 51.
5. Duricova, D., Burisch, J., Jess, T., Gower-Rousseau, C. & Lakatos, P. L. Age-related differences

in presentation and course of inflammatory bowel disease: an update on the population-based literature. *Journal of Crohn's & colitis*, **2014**, *8*, 1351.
6. Nagpal, R. et al. Gut microbiome and aging: Physiological and mechanistic insights. *Nutrition and healthy aging,* **2018**, *4*, 267.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

长肽段宏蛋白质组学分析增加微生物群落物种分辨率

孙伯焱[1]、袁金晖[1]、张新[1]、常蕾[1]、迟浩[2]、徐平[1]、李乐园*[1]
1. 国家蛋白质科学中心（北京）
2. 中国科学院计算技术研究所

肠道微生物组在人体健康与疾病中的重要性已得到广泛认可，但目前关于肠道微生物组和宿主的互作机制仍有很多黑箱难题尚未解决。宏蛋白质组学作为蛋白质组和微生物组领域交叉领域，紧随宏基因组之后兴起。它采用高精度、高分辨率的质谱技术[1]，从整体水平上研究特定环境和时期复杂微生物群落的蛋白质组成，提供了蛋白质分类单元与功能注释的二维信息[2, 3]，从而帮助揭示特定微生物的特定蛋白质如何在不同环境下执行特定功能，深入探索微生物队环境压力的适应机制[4]，以及环境与微生物之间的互作关系。

然而，微生物群落的高度物种多样性为宏蛋白质组学研究带来了显著挑战，当前技术难点主要集中在如何增加测序深度和蛋白质鉴定数量，以及怎样提高蛋白质定性和定量的准确性。现有研究多聚焦在从样品制备[5]、提高分析深度[6]、质谱新技术[7]等方面增加蛋白质鉴定数量，并且取得丰富的进展。但在蛋白质推断和分类学维度的注释能力仍然是限制该领域发展的关键瓶颈。尽管胰蛋白酶是蛋白质组学中最常用的蛋白酶，但由于不同微生物物种之间存在高度相似同源蛋白，这些蛋白被胰酶水解产生同源肽段，导致其真正来源难以区分。此时，基于极简蛋白质推断原则的蛋白质小组可能中包含了多个同源蛋白，具有较强的模糊性，不利于蛋白质溯源。相反，如果鉴定得到的肽段属于某个蛋白特有，并且当一个蛋白包含多个独特肽段时，蛋白质推断模糊性将显著降低，从而提高分类学分辨率。

为了减少宏蛋白质组学中蛋白质推断模糊性，提高分类学分辨率和物种-功能匹配的精确性，本研究开发了一种结合长肽段宏蛋白质组学分析方法和生信分析管线。通过该管线，我们发现最优方法相较胰酶结果的序列覆盖率指数提高了 30.5%，物种水平分辨率相较胰酶结果提高了 28.0%，证明本研究所用管线可以有效增加蛋白质序列覆盖度，并且将更多蛋白定位到物种水平。

关键字 微生物蛋白质组，宏蛋白质组，质谱鉴定技术与策略，分类学注释

参考文献

1. Zhang, X., Figeys, D, J. Proteome Res., **2019**, *18 (6)*, 2370.
2. P. Wilmes, P. L. Bond, Environ Microbiol., **2004**, *6 (9)*, 911.
3. B. Mesuere, P. Dawyndt, PROTEOMICS, **2015**, *15 (8)*, 1437.
4. Li L, Figeys, D, Nat Commun., **2023**, *14(1)*:3428.
5. Wang, J, Figeys, D, Anal. Chem., **2020**, *92*, 5379.
6. Zhang, X., Figeys, D, Anal. Chem., **2017**, *89*, 9407.
7. Zhao, J., Qiao, L, npj Biofilms Microbiomes, **2023**, *9*, 1.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

基于化学蛋白质组学技术鉴定组蛋白β-羟基丁酰化的识别蛋白及其功能研究

黄旖旎、陈晨、王爱源、蒋梓昕、翟贵金、张锴*
天津医科大学

组蛋白翻译后修饰是表观遗传学的重要内容，在 DNA 复制、转录调控等生物过程发挥了重要作用。其中，组蛋白修饰招募特异性识别蛋白（Reader）是发挥其功能的重要形式，识别蛋白可以决定转录的走向，其失调往往与肿瘤等疾病密切联系。因此，组蛋白修饰识别蛋白的鉴定具有重要的意义。组蛋白赖氨酸β-羟基丁酰化（Kbhb）是近年来鉴定的一种新型修饰形式，在糖尿病、肿瘤代谢中预示了重要功能。由于其丰度低，动态变化等特点，其识别蛋白的鉴定具有挑战性，目前尚不清楚。这里，我们采用化学蛋白质组学策略，发展了多价态亲和光交联探针，研究了组蛋白 H3K9bhb 的识别蛋白的鉴定。通过 LC-MS/MS 分析，我们发现 ENL 对组蛋白 Kbhb 具有特异性亲和作用，通过结构分析和生化实验，证明了 ENL 是组蛋白 H3K9bhb 的识别蛋白。CUT&Tag 分析提示，ENL 与 H3K9bhb 在基因上大量富集，并共定位在转录起始位点。进而，我们揭示了 ENL 识别组蛋白 H3K9bhb 调控 MYC 等基因转录，影响肿瘤进程的分子机制。我们的工作建立了一种基于化学蛋白质组学鉴定修饰识别蛋白的方法，发现了组蛋白 H3K9bhb 的识别蛋白及功能，为β-羟基丁酰化功能的理解提供了新视角。

关键字 蛋白质组学，HPLC-MS/MS，组蛋白，β-羟基丁酰化，Reader

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

基于邻近标记串联亲和富集策略鉴定 HDAC8 调控的蛋白质赖氨酸乙酰化分子网络

李明哲、黄烨佩、翟贵金、张锴*
天津医科大学

酶调控的翻译后修饰分子网络的鉴定，对于揭示蛋白质修饰功能和分子机制具有重要意义。当前，在细胞内捕获“调控酶-翻译后修饰”的瞬时作用仍然十分困难，这限制了相关领域的发展。本研究提出了一种基于 ProLORT（proximity labeling-based orthogonal trap approach）的分析新策略，利用生物正交化学邻近标记结合亲和富集技术，实现了在活细胞中鉴定“调控酶-蛋白质修饰底物”相互作用的组学鉴定。我们以目前底物尚不十分清楚的 HDAC8 作为模型，运用上述策略，结合基于色谱-质谱的蛋白质组学技术，发现了大量尚未见报道的 HDAC8 调控的赖氨酸乙酰化底物和位点，显著拓展了 HDAC8 调控乙酰化的数目，并以此构建了 HDAC8 调控的乙酰化图谱。其中，发现 CTTN 的 K144 乙酰化受到 HDAC8 显著调控。进一步的实验表明，HDAC8 通过去除 CTTN 的 K144 乙酰化，增强了 CTTN 与 F-actin 的结合，从而促进肿瘤细胞迁移。这一发现不仅为理解 HDAC8 在细胞调控中的功能提供了新的视角，而且为开发针对 HDAC8 的新型治疗策略提供了潜在的靶点。ProLORT 的分析策略为研究“修饰介导的蛋白质-蛋白质相互作用”及其在生物学功能提供了一种有效的分析工具。

关键字 蛋白质组学，LC-MS/MS，乙酰化，HDAC8，蛋白质-蛋白质相互作用

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

聚集态蛋白质组原位成像和多维度分析新技术

赵楠[1]、陈宇文[1,2]、梁振[1]、刘宇[1]、赵群[1]、张丽华*[1]、张玉奎[1]

1. 医学蛋白质组全国重点实验室，国家色谱研究中心，中国科学院分离分析化学重点实验室，中国科学院大连化学物理研究所

2. 中国科学院大学

保持蛋白质的正确折叠对细胞功能至关重要。蛋白质的错误折叠、变性和聚集会导致多种蛋白质构象疾病，例如阿尔茨海默病、帕金森病等。在活细胞中，蛋白质聚集体不仅包含致病性错误折叠蛋白质，还包含影响聚集体形成和清除的各种调节因子。了解这些相互作用对于理解这些蛋白质在疾病进展过程中的协调组织和募集至关重要。

然而，由于聚集体（聚集态蛋白质组）的结构无序性和高动态性，且缺乏特征性标志物，在其天然细胞环境中对聚集体中的组成和相互作用进行全蛋白质组表征仍具挑战性。尽管传统的离心分离技术在聚集态蛋白质组研究中得到广泛应用，但该方法存在技术限制，难以获得高纯度的聚集体，并且体外环境的变化极易影响蛋白质的原位结构和功能。近年来，邻近标记技术的发展突破了传统分离方法的局限，使得原位捕获聚集态蛋白质组成为可能。然而，现有的基于生物催化的邻近标记技术（如 APEX，BioID 等）通常需要对细胞进行基因改造，这在难以进行基因改造的样品（如原代细胞、组织和临床样品）中应用受限。因此仍然要迫切开发一种原位化学蛋白质组学策略实现聚集态蛋白质组的时空动态的空间定位、组成分析、互作分析和调控位点分析。

为了解决这一问题，我们开发了一种聚集态蛋白质组原位成像和多维度分析新技术。首先，利用我们之前发展的对聚集态蛋白具有高亲和力的化学靶向探针及其光敏特性，通过筛选邻近标记底物探针，引入富集集团，实现聚集体的原位成像、标记和靶向富集。结合化学交联质谱技术，实现了活细胞内聚集态蛋白质组的原位光敏邻近标记和交联，并解析了其组成成份和相互作用信息。该策略成功将邻近标记和化学交联技术拓展到聚集态蛋白质的组成和相互作用组的鉴定，能够为我们揭示神经退行性疾病的发生、发展及其调控机制提供重要的技术支撑。

关键字 聚集态蛋白质组，邻近标记，化学交联质谱，原位成像

参考文献

1. J.Tyedmers, A.Mogk, B.Bukau, Nature reviews Molecular cell biology, **2010**, *11*, 777.
2. F.U.Hartl, Annual review ofbiochemistry, **2017**, *86*, 21.
3. S.Markmiller, et al, Cell, **2018**, *172*, 590.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

基于原位化学交联-可控断裂技术和自上而下组学策略的 α-synuclein 蛋白质变体复合物解析

杨雪[1,2]、钟博文[1]、赵宝锋[1]、赵群[1]、梁振[1]、梁玉[1]、张丽华*[1]、张玉奎[1]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 中国科学院大学

帕金森病（Parkinson's disease，简称 PD）是一种影响中枢神经系统的慢性神经退化疾病，其主要特征为病理性α-synuclein （α-syn）在细胞内积聚形成路易小体 1。目前，已有研究证实不同的α-syn 蛋白形式，如 N/C 端序列截断、不同的翻译后修饰（PTMs）在帕金森病的发病机制中发挥重要作用 2；同时，α-syn 蛋白质变体的相互作用对其细胞功能及发病机制研究具有重要的意义。然而，目前已有的基于自下而上（Bottom-Up）的蛋白质组学的相关研究缺失了其蛋白质变体的基本信息 3。

为了更准确地分析α-syn 复合物的蛋白变体组成及相互作用，发展了一种基于原位化学交联-可控断裂技术和自上而下组学策略的方法，实现了α-syn 蛋白质复合物的蛋白质变体-蛋白质变体相互作用网络分析。首先利用化学可断裂交联剂实现α-syn 蛋白质复合物的原位捕获，后通过生物素亲和标签富集交联剂绑定的蛋白质复合物。一方面，通过化学触发试剂断裂交联剂以实现复合物中蛋白质变体组成的释放，继而采用 Top-Down 质谱技术，精确鉴定该复合物中 32 个α-syn 蛋白质变体和 155 个相互作用蛋白质变体。另一方面，对交联剂绑定的蛋白质复合物进行酶解并鉴定交联肽，进而解析复合物中蛋白质变体之间的相互作用网络。最终基于 464 个交联肽信息，实现了 54 个蛋白质变体之间的相互作用网络绘制。首次实现了α-syn 复合物的蛋白质变体-蛋白质变体相互作用网络的分析。

关键字 α-synuclein 蛋白质复合物，自上而下质谱技术，原位交联质谱技术，蛋白质变体相互作用

参考文献

1. S. Zhang, R. Zhu, B. Pan, et al, Nat Neurosci., **2023**, *26*, 213.
2. R.P. McGlinchey, et al, Proc Natl Acad Sci U S A., **2021**, *118*, e2023487118.
3. J.C. Tran, et al, Nature., **2011**, *480*, 254.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

电场辅助切向流过滤装置用于活性外泌体批量制备

侯国姗、李一岚、袁辉明、张丽华*、张玉奎
大连化学物理研究所

外泌体是由细胞分泌的脂质双分子层包裹的纳米级囊泡颗粒，携带多种蛋白质、脂质、核酸、代谢物等成分，广泛存在于血液、尿液、唾液、母乳、脑脊液和泪液等体液中，是细胞间通讯的重要介质。外泌体因其易于跨越生物屏障、高生理稳定性、低免疫原性和良好的生物相容性而被越来越多地用作疾病治疗剂或药物载体。外泌体的分离富集是其下游分析和应用的前提，高纯度、高收率、高通量的分离方法将有助于发挥外泌体在临床诊疗中的应用潜力。因此从生物样品中连续制备具有高纯度和生物活性的外泌体至关重要，目前在技术上仍然具有挑战性。

在本研究中，我们开发了一种电场辅助切向流过滤装置(E-TFF），利用基于滤膜的孔径筛分和基于电泳迁移的分离相结合，协同实现了高纯度和高生物活性外泌体的连续制备[1]。相比于金标准超速离心法，E-TFF 制备外泌体的纯度提高了 1.4 倍，产量提高了 15.8 倍，富集时间缩短至 1/4。利用 E-TFF 制备人脐带间充质干细胞 (hUCMSC) 来源的 sEV，与暴露于 Aβ的 HT22 小鼠海马神经元细胞共培养，验证了 E-TFF 分离的 sEV 的高生物活性和显著的神经保护作用。总体而言，E-TFF 平台为批量制备高质量 sEV 提供了一种有前途且强大的策略，有望为外泌体的临床应用转化提供重要技术支撑。

关键字 外泌体，分离纯化，切向流过滤

参考文献

1. Guoshan Hou, Yilan Li, Xulian Cui, Baofeng Zhao, Lukuan Liu, Yukui Zhang, Huiming Yuan, and Lihua Zhang. Analytical Chemistry. **2024**, *96 (33)*, 13345.

分会场：37.蛋白质组分析
交流形式：墙报

T 细胞耗竭过程中酪氨酸磷酸化蛋白质复合物的动态变化研究

刘威*
复旦大学

T 细胞耗竭（T cell exhaustion）是一种以抑制性受体上调（如 PD-1、TIM-3、TOX 和 CTLA-4）和效应功能丧失（无法产生 IL-2、TNF-α和 IFN-γ等细胞因子）为特征的免疫抑制状态，导致 T 细胞无法有效清除感染和肿瘤细胞。磷酸化蛋白质组学已成为研究 T 细胞信号转导的重要工具，但目前对 T 细胞耗竭下游信号通路的研究，尤其是蛋白质复合物水平的研究仍较为有限。为了深入探究 T 细胞耗竭过程中蛋白质复合物的动态变化，我们首先构建了 T 细胞耗竭模型，并利用基于 SH2 结构域的三功能探针高效富集酪氨酸磷酸化（phosphotyrosine, pTyr）的蛋白质复合物。我们通过共分馏-质谱法（co-fractionation mass spectrometry, CoFrac-MS）对 pTyr 蛋白质复合物进行分离和鉴定，即利用离子交换色谱(IEC)对 pTyr 蛋白质复合物进行分离，然后采用串联质谱标签（TMT）对馏分混合后进行蛋白质组学分析。通过 IEC-TMT，我们可以在两天内完成 312 个色谱馏分的蛋白质组学分析，显著缩短了 CoFrac-MS 分析时间。为了准确地鉴定和定量蛋白质复合物，我们开发了以复合物为中心的蛋白质复合物定量分析算法，鉴定并定量了 268 个蛋白质复合物。差异分析发现，T 细胞耗竭过程中，12 个蛋白质复合物的丰度发生了显著变化。通路富集分析揭示，溶酶体相关的通路在 T 细胞耗竭过程中显著富集。进一步研究发现，一个从未被报道的蛋白质复合物 PPI204 在 T 细胞耗竭过程中显著上调，其亚基 RTN4 参与调控溶酶体定位。敲低 RTN4 能够有效逆转 T 细胞耗竭，增强其抗肿瘤细胞毒性，提示 RTN4 可作为 T 细胞耗竭的潜在治疗靶点。本研究揭示了 T 细胞耗竭过程中复杂的蛋白质复合物调控网络，为理解 T 细胞耗竭的分子机制提供了新的视角。同时，本研究所建立的 IEC-TMT 蛋白质组学方法为研究生物过程中蛋白质复合物的动态变化提供了强大的工具，具有广泛的应用前景。

关键字 T 细胞耗竭，蛋白质复合物，酪氨酸磷酸化，共分馏-质谱

参考文献

1. Wang, J., et al. T cell exhaustion in cancer: Mechanisms and clinical implications. J Cell Biochem **2018**, *119 (6)*, 4279.
2. Bludau, I., et al. Complex-centric proteome profiling by SEC-SWATH-MS for the parallel detection of hundreds of protein complexes. Nat Protoc **2020**, *15 (8)*, 2341.
3. Liu, W., et al. Integrated Platform for Large-Scale Quantitative Profiling of Phosphotyrosine Signaling Complexes Based on Cofractionation/Mass Spectrometry and Complex-Centric Algorithm. Anal Chem **2024**, *96 (24)*, 9849.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

新体系动力电池关键材料测评技术进展

沈雪玲，李晓兵，袁敏娟，方彦彦*
国联汽车动力电池研究院有限责任公司

主要从产业化的动力电池关键材料测评技术现状、新体系动力电池关键材料测评技术进展和未来测评技术展望三方面阐述了测评技术的进展。首先，系统性总结了动力电池四大关键材料的标准化情况，深入分析了测试标准化原因和重要性；其次，介绍了新体系电池用固体电解质性能测评技术框架，重点分为常规测评技术和先进测评技术，并详细的介绍了两种技术目前的发展情况。最后，基于现有标准化工作进展对未来的测评技术的标准化、先进的表征技术及测评数据库的建立进行了展望。

参考文献

1. Pushun Lu, Dengxu Wu1, Fan W, Electrochemical Energy Reviews , **2022**, *5*: 3.
2. Hyeon-Ji Shin, Jun Tae Kim, A-Yeon Kim, Adv. Energy Mater., **2023**, *13*, 1-15.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

新国标助力氢能产业高质量发展

王亚敏*，徐广通，张祎玮，万伟，杨孟智，刘雅琼
中石化石油化工科学研究院有限公司

近年来，我国的氢能产业在国家政策和市场需求的双重推动下，正在驶入发展快车道。标准化建设是我国成为氢能产业强国的重要基础性工作，2023 年 8 月，国家标准委与国家发展改革委、工业和信息化部、生态环境部等部门联合印发《氢能产业标准体系建设指南（2023 版）》，指南中将氢品质检测方法研制任务被列为核心标准研制行动。全国氢能标准化技术委员会（TC309）为此项任务的领导者，中石化石油化工科学研究院有限公司氢品质分析团队凭借自主研究开发的成套氢气杂质的检测方法及加氢机高压采样技术及在北京冬奥会的成功的示范应用经验，成为系列标准研制任务的承担者。历经 18 个月，2024 年 7 月 24 日，4 项氢品质检测方法标准及氢气采样技术要求由国标委正式发布。

发布的 5 项国家标准涉及燃料电池用氢气的采样及氢气中 10 种（类）杂质的检测。其中 GB/T 44238-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气 氦、氩、氮和烃类的测定 气相色谱法》，描述了采用气相色谱-热导检测器/火焰离子化检测器法测定质子交换膜燃料电池汽车用氢气中氦气、氩气、氮气和烃类组分含量的试验方法的相关要求。各类组分的测定范围：氦气，10.0 μmol/mol～600.0 μmol/mol；氩气、氮气，5.0 μmol/mol～300.0 μmol/mol；烃类中甲烷(C1)，0.10 μmol/mol～200.0 μmol/mol； C2-C6 组分和甲苯，0.10 μmol/mol～2.0 μmol/mol。GB/T 44243-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气 含硫化合物、甲醛和有机卤化物的测定 气相色谱法》，描述了测定目标化合物含量的原理、试剂与材料、仪器与设备、系统性能验证、试验步骤、试验数据处理、精密度和正确度、质量保证和控制、试验报告的相关要求。含硫化合物测定范围：0.10 nmol/mol～10.0 nmol/mol，硫化氢检出限为 0.01 nmol/mol。甲醛测定范围：1.0 nmol/mol～400.0 nmol/mol，检出限为 0.1 nmol/mol。有机卤化物测定范围：1.0 nmol/mol～100.0 nmol/mol，一氯甲烷检出限为 0.5 nmol/mol。GB/T 44244-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气 一氧化碳和二氧化碳的测定 气相色谱法》，描述了采用气相色谱-氦离子化检测器测定质子交换膜燃料电池汽车用氢气中一氧化碳和二氧化碳含量的试验方法的相关要求。一氧化碳、二氧化碳测定范围均为 0.05 μmol/mol～10.0 μmol/mol。GB/T 44242-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气无机卤化物、甲酸的测定离子色谱法》，描述了采用离子色谱法测定质子交换膜燃料电池汽车用氢气中无机卤化物、甲酸含量的原理、试剂和材料、仪器和设备、试验步骤、试验数据处理、精密度、质量保证和控制、试验报告。氢气中无机卤化物、甲酸含量的测定范围为 0.025 μmol/mol~0.5 μmol/mol。氢气中氯化氢、氯气、溴化氢、甲酸组分的检出限分别为 0.014 μmol/mol、0.007 μmol/mol、0.002 μmol/mol、0.001 μmol/mol。GB/T 44262-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气采样技术要求》，规定了氢气样品采样的设备、准备、采样以及采样报告的要求。适用于压力不大于 70 MPa 的氢气生产、储运、加注等场所中氢气的采样。

该系列国家标准从检测方法层面保障了燃料电池汽车用氢气的品质，解决了目前我国氢能领域氢气质量关键杂质检测方法的缺失或不适应问题，具有极高的创新性、科学性和可操作性，是以国家标准助力我国氢能产业高质量发展的典型示范。

关键字 新国标，氢能

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

中国可持续航空油料生产技术及标准制定的建议

陶志平*
中石化石油化工科学研究院有限公司

国际民航组织（ICAO）先后提出 2020 年碳中性增长和 2035 年燃效年均提升 2%的中期减排目标及 2050 年减排 50%的长期减排目标。国际航空运输协会（IATA）推荐的减排措施有提高运营和基础设施效率、电动飞机、氢能飞机的使用、碳抵消以及使用可持续航空燃料（SAF）等。而 SAF 具有与传统航空煤基本完全一致，不需要对飞机现有系统和基础设施进行大的更改并可以减少 50%-90%的二氧化碳和甲烷的排放。从中期来看，SAF 是民航业唯一的能源解决方案。我国目前在大力研发与世界同步的 SAF 技术，同时，也在快速进行 SAF 标准体系的建设。分析国内外各种 SAF 技术的优缺点和发展趋势，考虑到技术经济性和成熟度，提出我国近中期 SAF 应采取的工艺路线和标准制定的思考。

关键字 可持续航空燃料，生产技术，标准

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

氢气中痕量含硫杂质对 PEMFCs 耐久性影响的研究

邱丽美*，董文妍，赵文慧，徐广通
中石化石油化工科学研究院有限公司

氢气品质对质子交换膜燃料电池（PEMFCs）的性能和寿命有直接影响。为保证电池的长周期、高效运行，ISO 14687 对氢气中杂质含量进行了严格限定，其中以 H_2S 计的硫含量限值低至 4 ppb。本工作研究了目前所用燃料氢中很可能存在但文献鲜见报道的含硫杂质（二硫化碳（CS_2）、羰基硫（COS）、甲硫醇（MeSH）、乙硫醇（EtSH）、甲硫醚（DMS）和乙硫醚（EMS））等对燃料电池耐久性的影响程度、毒化机制及其解毒方法[1-2]，以期为这些含硫化合物容限值研究和 PEMFCs 用氢品质标准的细化奠定基础。

全电池实验表明 CS_2、COS、MeSH 和 EtSH 对 Pt/C 催化剂氢氧化反应（HOR）活性的不利影响比 H_2S 更加严重，而 DMS 和 EMS 的毒化作用则较小（见图 1）。上述杂质对 PEMFCs 的耐久性影响程度为：CS_2>EtSH>MeSH>COS>H_2S>DMS>EMS。

化学阻抗谱（EIS）结果表明，上述含硫杂质气主要通过与 H_2 竞争吸附占据活性位来降低电池使用寿命。通过半电池实验结合结构表征和 DFT 计算研究了杂质气与催化剂表面 Pt 原子的键合信息（图 2 为部分结果），阐述了不同杂质气的解离和非解离吸附毒化机制。

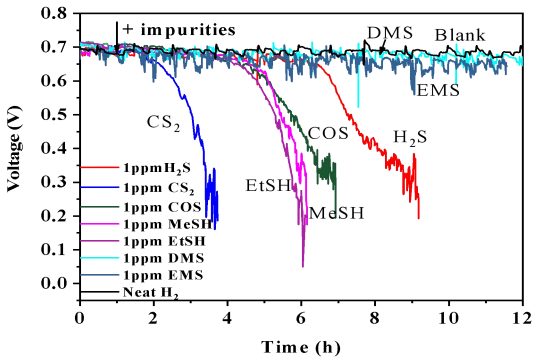


图 1. 暴露于不同杂质气 H_2 中 PEMFCs 的恒电流极化曲线。电密：500 mA·cm^{-2}，电池温度：75 ℃。

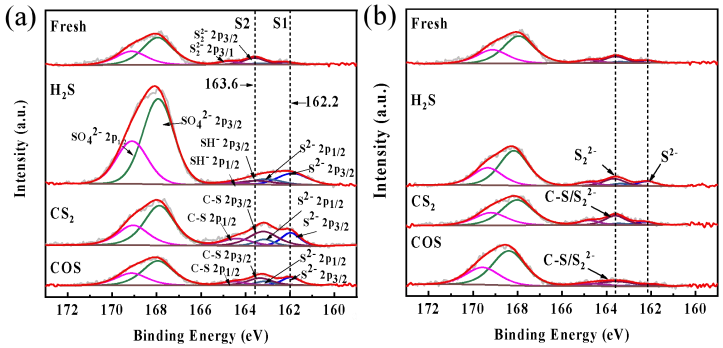


图 2. （a）新鲜和毒化后的 Pt/C 催化剂，（b）新鲜和 CV 扫描后的 Pt/C 的 S2p XPS 拟合谱

关键字 PEMFCs，氢气，含硫杂质，毒化

参考文献

1. W. Dong, C. Xu, W. Zhao, et al., ACS Appl. Energy Mater., **2022**, *5(10)*, 12640-12650.
2. W. Dong, C. Xu, W. Zhao, et al., Int. J. Hydrogen energy, **2023**, *48(81)*, 31745-31757.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

“双碳”目标下生物质检测平台的建设

杨静，王威，刘颖荣，王乃鑫*
中石化石油化工科学研究院有限公司

在“双碳”目标下，准确识别并检测生物航煤、生物柴油、乙醇汽油等生物质燃料、确定各类型燃料中生物质的含量，对于生物能源的推广至关重要[1]。生物基能源与化石基能源的一个关键区别是碳原子放射性同位素 ^{14}C 的丰度不同。基于这一特点，国际上采用加速器质谱仪通过 ^{14}C 分析法测定样品中来自于生物基的有机碳含量，该方法已被国际认证机构应用于测试石油产品中的生物质含量。我国的加速器质谱仪应用起步较晚，在燃料领域中的应用近乎空白。随着生物质燃料占比的持续增大，我国急需建设生物质检测平台，完善低碳产品的检测和认证体系。

本研究提出建立以加速器质谱法为主、快速检测方法为辅的生物质检测平台。一方面，基于加速器质谱为生物航煤、生物柴油、乙醇汽油等提供标准检测方法，判别生物基与化石基，并确定燃料中生物质的含量。团队考察了加速器质谱法检测乙醇汽油中生物质含量的准确性和再现性，是国内利用加速器质谱测定乙醇来源的首次尝试[2]。目前本方法已成功应用于生物航煤与生物乙醇汽油的甄别，具有高灵敏度、高准确性和高重复性。针对生物航煤和化石航煤混配样品，以及添加生物乙醇和化石乙醇的乙醇汽油混合物，生物质含量测量结果如表 1 所示。另一方面，基于常规实验室分析方法建立生物质燃料谱图数据库，开发快速甄别生物质燃料的方法，具有快速检测、成本低、普及化高等优势。本研究对生物质属性的鉴定可为燃料产品提供生物质属性的“身份证”，有助于石化行业“双碳”平台的建设，为低碳产品检验检测以及国家能源战略与各种补贴政策的顺利实施提供技术支撑。

表 1. 加速器质谱测定各种乙醇汽油和航空煤油的生物基含量及其理论生物基含量

样品	理论生物基含量/%	测定生物基含量/%	样品	理论生物基含量/%	测定生物基含量/%
乙醇汽油 1	100	100	航空煤油 1	5	5
乙醇汽油 2	0	0	航空煤油 2	19	20
乙醇汽油 3	1	1	航空煤油 3	49	51
乙醇汽油 4	14	14	航空煤油 4	100	100

关键字 生物质，^{14}C，加速器质谱，生物航煤，生物乙醇，生物柴油

参考文献

1. 杨静，郭莘，韩江华，王威，刘泽龙，刘颖荣，王乃鑫. 石油学报(石油加工), **2023**, *39(3)*, 713-726.
2. 王乃鑫，李娜，韩璐，郭莘，刘泽龙. 石油学报(石油加工), **2021**, *37(2)*, 339-344.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

固态锂电池材料表界面分析技术

王其钰*
中国科学院物理研究所

固态锂电池在能量密度和安全性方面有望实现较好的结合和提升。在固态锂电池研发过程中，仍存在很多科学问题和工艺难点亟待解决，如表界面性能表征与优化。表界面性能往往与其组分、结构、形貌等物理化学特性直接相关。选择适当的表征分析技术测定表界面的物理特性是研究表界面性能的必要手段。表面谱学表征技术在元素分析、价态解析以及定量分析等方面应用较为广泛。在本次报告中，将介绍几种常用的表面谱学表征技术，及其在锂电池研发中的应用案例。

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

动力电池排气安全测试

马天翼*，韩策，孙智鹏，戴晓谦，郝维健
1.中汽研新能源汽车检验中心（天津）有限公司
2.中国汽车技术研究中心有限公司

随着动力电池在电动汽车领域的广泛应用，电池的安全性能尤为关键，而排气行为直接关系到电池系统在极端情况下的安全性。电池在失效失控时，会产生大量气体，这些气体的成分、释放速率和压力等因素将直接影响电池系统的安全性以及防护设计。系统化的排气测试不仅能帮助评估电池在极端条件下的安全表现，还能为改进电池系统的设计提供可靠依据。另一方面，电池排气与电池整体安全性密切相关。通过排气测试可以揭示热失控时的危险气体积累以及其对电池系统的热管理和结构安全的影响。了解这些影响可以帮助设计更加有效的热管理系统和排气防护措施，确保在电池发生故障时，尽可能减少对车辆和人员的安全威胁。

本报告介绍了从电芯到整车多层级的排气测试方法，通过对不同层级的排气行为进行监测，结合气体成分分析、压力和温度监测等手段，全面评估电池在不同环境和工况下的排气表现。这些测试数据对于优化电池安全设计具有重要参考价值。

关键字 动力电池，排气安全，测试

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

岛津丰富产品线助力新能源发展

李言*
岛津企业管理（中国）有限公司

介绍岛津丰富产品线在新能源分析领域的应用，氢能及氢燃料电池关键材料的研发和品控， 绿氢、绿氨、绿色甲醇、SAF 产业链分析技术，主要包括：

1 上游：可再生能源风能：风机叶片用碳纤的力学性能评价
2 上游：光伏电池片质量检测
3 上游：电解水制氢装置，电解槽相关分析
4 上游：电解水产氢，氢纯度分析
5 中游：储氢材料分析
6 下游：“质子交换膜”氢燃料电池产业链
7 下游：生物质燃中氧含量色特分析技术

关键字 燃料电池用氢气杂质检测，储氢材料，燃料电池，生物质，可持续航煤 SAF

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

加快氢燃料质量检测基础设施建设，促进氢能产业高质量发展

潘义*，邓凡锋，张婷，邓文清
中国测试技术研究院

气候变化导致全球变暖，在全球碳中和的战略背景下，氢能已成为各国能源战略的重要组成部分，也是实现双碳目标的重要途径。氢气作为质子交换膜燃料电池（PEMFC）汽车的能量载体，其质量的优劣将直接影响 PEMFC 的运行和寿命正常与否。我国现行 PEMFC 用氢燃料产品国家标准 GB/T 37244-2018 中提出了氢燃料中系列杂质组分限量值要求。氢燃料作为氢能产业“前端生产的产品”和“后端应用的原料”，建立准确可靠、具有溯源性的质量检测分析方法标准体系至关重要。取样技术、标准物质、测量技术、标准化等方面是构成氢燃料质量检测基础设施的重要组成部分。依托中国测试技术研究院作为秘书处的国际标准化组织 ISO/TC 158 Analysis of gases 和全国气体标准化技术委员会气体分析分技术委员会氢能与燃料电池分析方法标准制定工作组（SAC/TC206/SC1/WG1），开展了氢燃料质量检测相关的基础设施建设工作。在成都世界大学生夏季运动会期间，将前期的研究成果在成都汉尊能源有限公司制氢现场进行了为期 21 天的在线连续检测示范应用，采用基于电容法、电化学、气相色谱、非色散红外光谱、傅里叶变换红外光谱、光腔衰荡光谱等不同原理的分析仪器对 12 项关键参数进行了在线监控，取得了满意的结果。同时，针对氢气在线检测的特点，开发了“基于 ODM-FTIR 技术的氢燃料质量在线监控平台”软件，在运行期间对氢气中痕量 CO、CO_2、CH_4、NH_3、HCHO、HCOOH、HCl 等组分的测量数据进行在线可视化监控，该平台可实时显示测量数据及其时间趋势图，可对超出限量值的测量数据进行实时报警。

关键字 氢燃料，质量检测，基础设施，电容法，电化学，气相色谱，非色散红外光谱，傅里叶变换红外光谱，光腔衰荡光谱，在线检测

参考文献

1. 邓凡锋，邓文清，张婷，王维康，刘洪刚，陈林，李浩，潘义，方正. 分析试验室，**2023**, *42*, 3, 312-328.
2. 邓凡锋，张婷，邓文清，王维康，杨嘉伟，姚伟民，卢波，潘义，方正. 基于气相色谱的质子交换膜燃料电池用氢气中无机组分和总烃的快速分析方法. 天然气工业, **2022,** *42(S1),* 186-192.
3. 潘义，邓凡锋，王维康，杨嘉伟，张婷，林俊杰，龙舟，姚伟民，方正. 车用燃料氢气中杂质组分的分析方法现状与探讨-以质子交换膜燃料电池汽车为例. 天然气工业, **2021**, *41*, 115-123.
4. 林俊杰，邓凡锋，周理，许向东，李志昂，张婷，肖炼，魏东，潘义. 计量科学与技术，待出版. doi: 10.12338/j.issn.2096-9015.2024.0078.
5. Yi Pan, Fan-Feng Deng，Zheng Fang，Zhou Long，Xian-Deng Hou. Chinese Chemical Letters, **2021**, *32*, 3440-3445.
6. Wenqing Deng，Fanfeng Deng，Ting Zhang，Junjie Lin，Liang Zhao，Gang Li，Yi Pan，Jiebin Yang. Chinese Chemical Letters, DOI：10.1016/j.cclet.2024.110085.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

燃料氢中总卤化物的测试——燃烧炉离子色谱法

魏王慧*，陈朝阳，任逸尘，刘安东，高艳秋，刘旺旺，朱玮郁，薛民杰*
上海市计量测试技术研究院

本研究利用燃烧炉，配合内嵌气体吸收装置的离子色谱仪，实现了燃料氢中无机、有机卤化物的同步一次性采集及测试。燃烧炉与气体吸收装置均为针对燃料氢分析的自研装置。使用氢中一氯甲烷、二氟一氯甲烷、一溴甲烷、氟化氢、氯化氢等气体标准物质，配合气体稀释装置，通过燃烧炉离子色谱法测试，能够做到氟、氯、溴离子经燃烧、吸收、分析全过程后线性良好，相关系数＞0.99，曲线斜率即为吸收效率，效率均＞80%，检测限均＜10 ppb，包含样品采集过程、分析过程的重复性均＜20%。

关键字 燃料氢，总卤化物，燃烧炉离子色谱，吸收效率

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

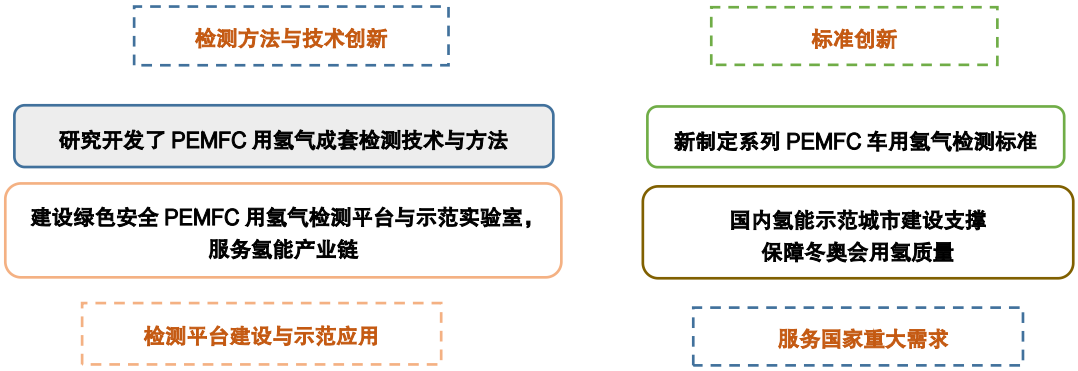
质子交换膜燃料电池车用氢气检测技术与标准研究进展及应用实践

徐广通*，王亚敏，万伟，杨孟智，袁蕙，张祎玮，刘雅琼
中石化石油化工科学研究院有限公司

氢能作为洁净可持续发展能源已成为世界各国未来能源体系的重要组成部分，也是全球实现碳减排的重要技术途径。质子交换膜燃料电池（PEMFC）是氢能利用最重要的技术方式之一，在未来氢能交通和长时储能体系建设中将发挥重要作用。PEMFC 以氢气和空气作为原料实现氢电转换，保障 PEMFC 长周期安全运行对作为反应原料的氢气有特定的质量要求。本文概述了 PEMFC 对氢气质量品质的要求，介绍了国内外 PEMFC 用氢气检测技术及标准概况以及中石化石科院（RIPP）在 PEMFC 氢气杂质检测技术及标准中的研究进展。RIPP 首次提出预浓缩耦合 GC/SCD/MS 方案，实现了一次进样可同时测定氢气中限值最严格的含硫化合物、甲醛和有机氯化物，针对硫化氢、甲醛和 CH_3Cl 的检测限分别为 0.01 nmol/mol, 0.1 nmol/mol 和 1 nmol/mol；提出了 GC/TCD/FID 可以快速测定氢气中的永久性气体以及烃类化合物的解决方案；针对氢气中的 CO_2 和 CO 的检测，研究提出了 GC-PDHID 快速测定方法，采用多阀柱系统较好解决背景干扰问题，检测限达 50 nmol/mol；针对无机卤化物和甲酸等污染物则建立了采用高吸收率的吸收组件，同时检测无机卤化物（HCl，Cl_2，HBr）和甲酸的离子色谱法，无机卤化物和甲酸的检测限可达 0.01 μmol/mol 和 0.001 μmol/mol；为解决加氢站、氢气运输管束车和高压储氢罐等场景的氢气采样，设计了专用氢气采样装置，在加氢站的安全采样频次 100 站次以上，以此为基础起草制定了 PEMFC 氢气采样规范。以上述检测方法和采样规范为基础制定的系列国家标准已正式发布实施，解决了我们国家氢能检测标准缺失和不适用的问题。研究团队针对氢气中痕量 NH_3 的检测，提出采用光腔衰荡光谱（CRDS）测定方法，检测限达 1.8 nmol/mol；针对氢气纯化生产中涉及的多组分杂质检测，研究了 FT-IR 的适用性，并建立了分析模型，这些方法已在全国节能协会制定团体标准并发布实施。

针对氢能检测平台缺失等问题，石科院于 2019 年初开始建设氢能检测实验室，2020 年 6 月，石科院的“质子交换膜燃料电池汽车用燃料氢气质量检测项目”通过中国国家认证认可监督管理委员会(CMA)资质认定和中国合格评定国家认可委员会(CNAS)认可，成为国内首家获得氢源国家级 CMA 资质认定和 CNAS 认可单位。2022 年 5 月，再次通过 CMA 和 CNAS 复评审及扩项评审，完成了国际标准 ISO 14687-2019 和国家标准 GB/T 37244-2018 氢气杂质、纯度检测及相关方法标准的扩项。在建立高水平氢能检测平台的基础上，研究团队又开展了基于国产仪器氢气中杂质检测的技术方案研究，并取得良好结果。

基于建立的检测平台、检测方法和制定的系列标准，研究团队协助北京市市场管理局制定了燃料电池用氢气质量检测规范，支持北京市氢能示范城市的建设并承担了 2022 年北京冬奥会氢气质量的检测任务；制定了中国石化燃料电池用氢气质量管理规范，指导 PEMFC 用氢气在生产、储运、加注等环节的质量管理；系统开展不同生产工艺生产的氢气中杂质的检测，为氢气生产企业杂质的有效管控和工艺优化提供支撑；采用石科院的成套氢气检测技术，目前已完成 4 个氢能检测实验室的建设。



关键字 氢气，检测技术，质子交换膜燃料电池车

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

氢气中痕量杂质分析红外光谱法的标准化研究

袁蕙*，刘丹，王亚敏，徐广通
中石化石油化工科学研究院有限公司

氢能是能源转型的战略方向，因此氢燃料电池汽车（FCV）得到大力发展同时加氢站也在加快建设。FCV 所用氢气与炼厂用氢不同，除对纯度有要求外，更要求控制氢气中影响电池性能痕量杂质含量。GB/T 37244 对 FCV 用氢气中杂质种类及限值参照 ISO14687 提出了明确技术指标要求，甲酸、一氧化碳、二氧化碳、甲烷等烃类、甲醛、氨、水和氯化氢是控制限值项目。但由于国内 FCV 产业起步较晚，对于氢气质量和检测的研究都严重不足，标准所列检测方法来自工业高纯气及环境监测领域等，操作繁琐、引入误差较多。因此本项目组从红外光谱仪选型、稀释仪等外围关键设备的搭建、尾气处理等配套环保设施的设计、以及各杂质的定性定量分析等进行了全面的攻关，建立了一套无需处理同时检测多种痕量杂质的 FTIR 检测系统和方法，具备先进性、准确性[1]。更进一步对吹扫气纯度、背景气纯度、各杂质的特征谱峰的选取、定量模型优化和干扰因素的影响等进行了深入系统的标准化研究，改进的系统和方法适用于国情并更具实用推广价值。和其他检测方法进行了对比，准确度可靠，获批团标，已成功应用于各种工业场景以及市场质量监督检测中。

关键字 氢气 痕量杂质 红外光谱

参考文献

1. H. Yuan, D.Liu, G. Xu, Spectroscopy and Spectral Analysis, **2024**, *3*, 853-858.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

基于增强型等离子体放电气相色谱在线测定氢气中多项杂质的系统设计和方法开发

张祎玮*，王亚敏
中石化石油化工科学研究院有限公司

氢能是国家新型能源体系的重要组成部分，氢燃料电池车是目前氢能的重要应用载体，燃料电池用氢气除对纯度有要求外，更要求控制氢气中影响电池性能和寿命的痕量杂质含量，而化石燃料制氢工艺得到的燃料氢气产品，含硫化合物和含碳化合物是高风险杂质。燃料氢的在线检测分析在生产过程的风险监控、产品质量控制上具有重要作用，因此针对燃料电池氢气中痕量含硫化合物及其他关键杂质进行在线连续测定的系统设计和检测方法研究，对于填补适用于不同应用场景的燃料氢品质分析方法空白以及支撑燃料电池车用氢气产品标准的可靠执行具有重要意义。

研究设计了基于增强型等离子体放电气相色谱（GC-EPD）技术的同时在线测定氢气中痕量含硫化合物和含碳永久性气体含量的分析系统及方法。分析系统包括样品的采集单元、气源单元、校准单元、分析单元和数据实时采集管理单元。其中分析单元包括可同时分析氢气中痕量含硫化合物和含碳化合物杂质的两个部分，待测试样以恒定流速进入采样系统后分为两路，含硫化合物经配吸附填料捕集阱的电子制冷浓缩组件对氢气中含硫化合物进行富集，通过热解析方式经气相色谱分离，并由 EPD 检测；含碳化合物（包括一氧化碳、二氧化碳和甲烷等烃类化合物）依次通过样品定量环进样和色谱柱进行分离，再进入配特征波长滤光片的 EPD 进行检测。通过外标法得到各组分信息和含量。进一步对建立的分析系统进行方法研究和验证，包括定性分析、定量分析、线性范围考察、检测下限及重复性验证等。系统线性及重复性良好，检测能力满足产品指标要求。

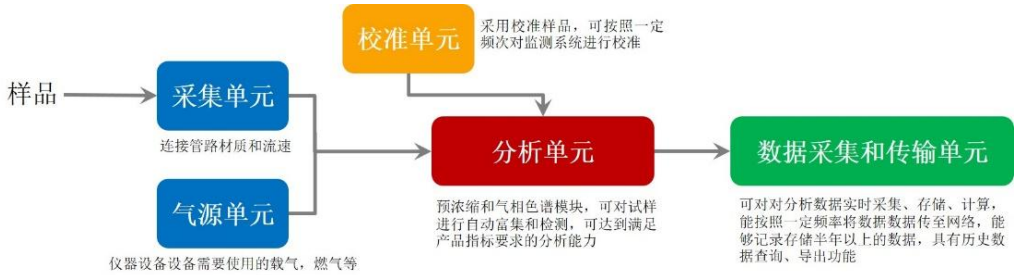


图 1. 分析系统流程图

本研究实现了常见制氢工艺生产的燃料电池用氢气中痕量含硫化合物和含碳化合物杂质组分的同时在线分析，以满足对燃料电池用氢气质量检测和管控的需求。同时对分析系统设计提出技术要求，对自动连续监测系统工作条件、放置场所的电器、仪器设备等提出相关安全要求，为方法在工业生产的在线分析小屋、加氢站现场检测等场景中的应用奠定基础。

关键字 燃料氢，在线分析，含硫化合物

参考文献

1. Kova A, Paranos M, Marciu D. Hydrogen in energy transition: A review. International Journal of Hydrogen Energy, **2021**, *46(16)*: 10016-10035.

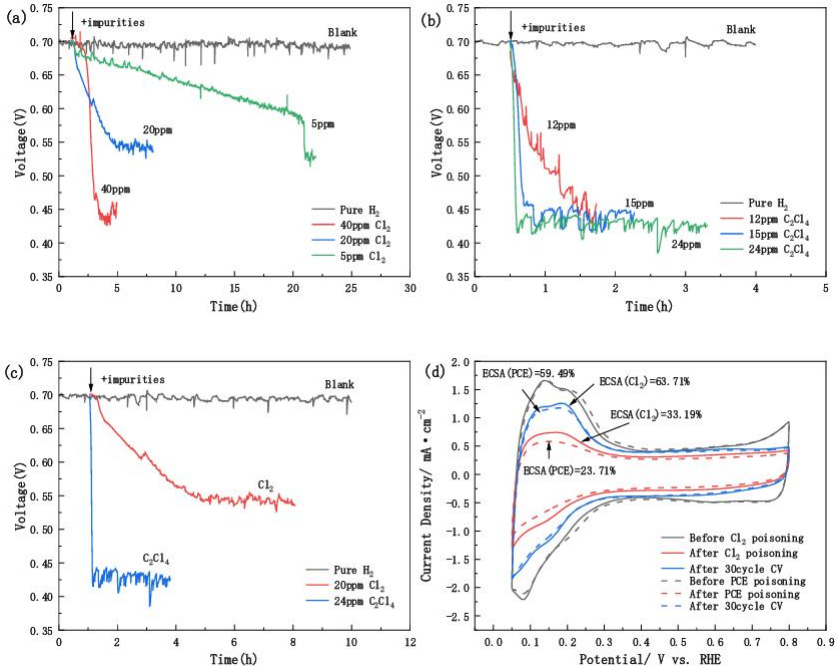
2. Arrhenius K, Bacquart T. Review of the state of the art of online gas sensors/analysers. 2021-10-02. https://www.sintef.no/projectwev/metrohyve-2.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

氢气中四氯乙烯和氯气对质子交换膜燃料电池耐久性的影响

彭雪*，赵文慧，邱丽美，徐广通
中国石化石油化工科学研究院有限公司

氢气作为质子交换膜燃料电池（PEMFC）的燃料，其纯度对电池耐久性起着决定性作用。然而，在工业氢气生产过程中，尤其是氯碱工艺和使用四氯乙烯（PCE）作为设备清洁剂的过程中，可能会引入 Cl_2 和 PCE 等杂质，这些杂质可能对 PEMFC 的性能产生不利影响。为了深入探究这些杂质对 PEMFC 耐久性的具体影响，采用单电池评价装置和旋转圆盘电极（RDE）系统地评估并对比了 Cl_2 和 PCE 对燃料电池及催化剂的毒化效果。实验结果表明，Cl_2 和 PCE 均导致电池性能显著衰退，且衰退程度随杂质浓度的增加而加剧，且在 20ppm 浓度杂质的毒化作用下，电池性能无法通过纯 H_2 吹扫恢复，表明 Cl_2 和 PCE 对 PEMFC 的毒化是不可逆的。此外，相较于 Cl_2，PCE 对电池的毒化速率更快，这可能是由于 PCE 作为一种稳定的有机化合物，其 C-Cl 键难以解离成 Cl^-，而以分子形式与 Pt 催化剂相互作用，其较大的空间位阻有效阻碍了 H_2 在 Pt 上的吸附，从而更快地降低了催化剂的活性。本研究揭示了无机氯（Cl_2）和有机氯（PCE）杂质对 PEMFC 不同的毒化机制，也为氢气纯化过程中杂质含量的控制提供了重要的实验依据。本研究的结果对于确保氢气作为能源载体的可靠性和经济性至关重要，同时对推动 PEMFC 技术的商业化应用具有重要意义。



图（a）、（b）不同浓度 Cl_2 与 PCE 毒化下的电池电压随时间变化曲线；图（c）20 ppmCl_2 与 24 ppmPCE 毒化下的电池电压随时间变化曲线；图（d）暴露于 Cl_2 与 PCE 毒化前后以及 CV 扫描恢复后的 CV 曲线

关键字 质子交换膜燃料电池，氯气，四氯乙烯，耐久性

参考文献

1. Y. Zhao, Y. Zhang, W. Zhang, Y. Tang, P. Wang, Reviews on the effects of contaminations and research methodologies for PEMFC. International Journal of Hydrogen Energy, **2020**, *45(43)*, 23174-23200.

2. Arul Murugan, Andrew S. Brown, Review of purity analysis methods for performing quality assurance of fuel cell hydrogen. International Journal of Hydrogen Energy, **2015**, *40(11)*, 4219-4233.

3. Anusree Unnikrishnan, Vinod M. Janardhanan, N. Rajalakshmi, K. S. Dhathathreyan, Chlorine contaminated anode and cathode PEMFC-recovery perspective. Journal of Solid State Electrochemistry, **2018**, *22(7)*, 2107-2113.

4. Michael J. Martínez-Rodríguez, Elise B. Fox, William D. Rhodes, Christopher S. McWhorter, Scott Greenway, Héctor R. Colón-Mercado, The Effect of Low Concentrations of Tetrachloroethylene on the Performance of PEM Fuel Cells. Journal of The Electrochemical Society, **2011**, *158(6)*, B698.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

氢气中卤化物和甲酸的分析标准要求及离子色谱的应用

万伟*，刘雅琼，王亚敏，杨孟智，徐广通
中石化石油化工科学研究院有限公司

当前，石化能源储量日益减少，能源的消耗引起的环境污染却每况愈下，人类年均能源消费总量超过 127 亿吨石油当量，以传统的石化能源石油、煤炭和天然气为主，占据了总能源消费量的 80%以上。人类急需寻找新的可替代能源。氢能储量大、污染小、比能量高，成为市场最受关注的新能源之一。氢燃料电池用氢除在纯度上提出更高的要求外更重要的是氢气中痕量杂质的控制，否则将严重影响电池的运行效率和寿命。氢气中的卤化物对氢燃料电池的性能有不可逆的影响，卤化物吸附在催化剂层上，减少了催化表面积，降低了电池性能。氯化物通过形成可溶性氯化物络合物并随后沉积在燃料电池膜中来促进铂的溶解。潜在的来源包括氯碱生产过程中使用的制冷剂和加工清洗剂。甲酸吸附过程中可能会产生一氧化碳中间体，一氧化碳的吸附会影响催化剂的活性，造成可逆影响。GB/T 37244－2018《质子交换膜燃料电池汽车用燃料氢气》产品标准规定燃料氢气中总卤化物含量<0.05 μmol/mol，甲酸<0.2 μmol/mol。因此对于 FCV 用氢中卤化物和甲酸，建立一套既有先进性，适用性强且兼具经济性的测定标准是十分必要的。

新国家标准 GB/T 44242《质子交换膜燃料电池汽车用氢气 无机卤化物、甲酸的测定 离子色谱法》实现了一次吸收可以同时检测无机卤化物和甲酸，方法简便，应用范围广。氢气中无机卤化物、甲酸体积分数的测定范围为 0.025 μmol/mol~0.5 μmol/mol。当采样体积为 100 L、吸收液体积为 10 mL、室温 25 ℃时，氯化氢、氯气、溴化氢、甲酸的检出限分别为 0.014 μmol/mol、0.007 μmol/mol、0.002 μmol/mol、0.001 μmol/mol。本标准可为国内氢源质量检测标准体系的进一步完善提供支撑和服务，为氢燃料电池汽车的正常运行提供保障，本标准的建立对氢燃料纯化技术及燃料电池催化剂新材料开发具有重要意义。

关键字 卤化物，甲酸，离子色谱

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

光腔衰荡光谱法测定燃料电池汽车用氢气中痕量氯化氢

杨孟智*，王亚敏，万伟，刘雅琼，张祎玮
中石化石油化工科学研究院有限公司

为改善燃料电池汽车用氢气中氯化氢测定方法操作复杂或灵敏度低等问题，应用光腔衰荡光谱技术对燃料电池汽车用氢气中痕量氯化氢进行测定。结果表明，在优化的条件下20 min 内即可完成单次测定，测定结果受死体积及进样流量影响较小，平衡时间受死体积、进样流量影响较大，在 0.01~10.1 μmol/mol 浓度范围内具有良好的准确性，不受水、硫化氢等常规杂质的干扰，并可用于在线检测，有助于完善燃料电池车用氢气质量管理。

关键字 光腔衰荡光谱法，氯化氢，燃料电池，氢气

参考文献

1. 徐聪,王亚敏,张祎玮,等. 预浓缩与 GC-SCD/MS 联用测定燃料电池车用氢气中超痕量多形态硫化物和甲醛[J]. 石油学报(石油加工), **2021** ,*37(6)*: 1440-1451..
2. 张祎玮,王亚敏,万伟等.质子交换膜燃料电池车用氢气品质分析整体解决方案开发及应用[J]. 分析试验室, **2022** ,*41(07)*: 776-782.
3. 邓凡锋,邓文清,张婷等.在线稀释-傅里叶变换红外光谱法用于质子交换膜燃料电池汽车用氢燃料中微痕量杂质组分的快速分析[J]. 分析试验室, **2023**, *42(03)*: 312-318.
4. ISO 19880-8: 2020 Gaseous hydrogen-fuelling stations--Part 8: Fuel quality control[S].
5. ISO 14687:2019 Hydrogen fuel quality-Product specification [S].
6. GB/T 37244-2018 质子交换膜燃料电池汽车用燃料氢气[S].
7. ASTM D7653-18 Standard test method for determination of trace gaseous contaminants in hydrogen fuel by Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy [S].
8. 刘雅琼,万伟,王亚敏等.离子色谱法测定氢燃料电池汽车用氢气中卤化物[J]. 石油与天然气化工, **2023**, 52(04):100-104.
9. ASTM D7892-22 Standard Test Method for Determination of Total Organic Halides, Total Non-Methane Hydrocarbons, and Formaldehyde in Hydrogen Fuel by Gas Chromatography /Mass Spectrometry [S].
10. O Keefe A,Scherer J J,Cooksy A L,et al. Cavity ring down dye laser spectroscopy of jet-cooled metal clusters: Cu2and Cu3. Chem Phy Lett. **1990**, *172(3-4)*: 214.
11. 宋巍巍,盖文,顾正华.气体中痕量水蒸气测量技术进展[J]. 计测技术, **2022**, *42(03)*: 10-15.
12. 马路遥,林俊,张亮等.温室气体浓度监测的光腔衰荡光谱研究进展[J]. 计量学报, **2022**, *43(02)*: 274-280.
13. 阎文斌. 微量气体定量分析的新方法:光腔衰荡光谱[J]. 低温与特气, **2007**, *25(01)*:35.

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：报告

新标准、新仪器—福立仪器助力氢能产业高质量发展

冯帅*
浙江福立分析仪器有限公司

随着氢能产业崛起，确保燃料电池用氢高质量检测标准愈发关键。近期，全国氢能标准化技术委员会发布 5 项氢能国家标准。新标准将于今年 11 月 1 日实施，主要针对质子交换膜燃料电池汽车用氢气，其中有 3 项为采用气相色谱法检测标准。

福立公司做为国产气相色谱领军企业，一直注重分离分析整体解决方案，积极参与氢能领域应用方法开发，其中全程参与起草其中 2 项氢气检测标准，分别为 GB/T 44238-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气 氦、氩、氮和烃类的测定 气相色谱法》和 GB/T 44244-2024《质子交换膜燃料电池汽车用氢气、一氧化碳、二氧化碳的测定 气相色谱法》，主要承担了对两项标准的方法验证及数据精密度验证工作，此外，在国标发布前，福立公司也参与了 2022 年 8 月份发布 3 项氢气检测团体标准的起草。

今年福立公司也全新推出了福立未来系列气相色谱仪，入门级的 F60 气相色谱仪，高性价比的 F70 气相色谱仪，高性能的 F80 气相色谱仪。针对燃料电池汽车用氢气中杂质分析新国标，推出 F80 气相色谱仪器氢气中杂质分析应用解决方案，氢气中氦、氩、氮和烃类分析，采用具备 FID、TCD 检测器气相色谱仪，两阀三柱方案，满足 GB/T 44238-2024 标准要求；氢气中 CO、CO_2 分析，采用具备 PDHID 检测器气相色谱仪，三阀三柱方案，满足 GB/T 44244-2024 标准要求；氢气中痕量硫化物分析，采用具备 FPD 检测器气相色谱仪，结合电子制冷硫浓缩仪，低成本的硫化物检测解决方案。在氢能产业中，产氢、储氢、运氢、用氢每个环节气相色谱仪都发挥着作用，福立公司也将会不断创新与发展在氢能领域开发更多应用解决方案，为氢能领域高质量发展添砖加瓦。

分会场：38.新能源(含氢能)分析技术、标准与仪器
交流形式：墙报

基于电子制冷预浓缩与GC-SCD/MS联用测定氢气中硫化物、有机卤化物、甲醛的技术研究

薛杨*，邓凡锋，韩博，王少军
1. 中石化（大连）石油化工研究院有限公司
2. 中国测试技术研究院

随着质子交换膜燃料电池（PEMFC）汽车领域的快速发展，人们越来越关注燃料电池用氢质量对燃料电池性能的影响。为了高效、准确、同步检测燃料电池用氢气中的硫化物、有机卤化物及甲醛杂质，实现对燃料电池用氢的生产、纯化工艺的精确指导及燃料电池氢气产品品质的快速分析，本工作利用质谱及硫化学发光检测器，搭载电子制冷-吸附填料的预浓缩模块，实现了氢气中含硫化合物、卤化物以及甲醛的同步检测。通过六通阀隔离常量及痕量组分的分析通道，进而实现工业原料气及产品气的无干扰检测。经试验得到甲醛、有机卤化物的定量下限为 1 nmol/mol，硫化物的定量下限为 0.05 nmol/mol。各化合物的标准曲线线性关系良好，相关系数 R^2 均达 0.995 以上。分析系统设计精巧、集成度高，适用性广，适用于燃料电池用氢全周期的硫化物、有机卤化物、甲醛含量检测。

关键字 氢气杂质分析，硫化物，有机卤化物，甲醛，GC-SCD/MS

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

单颗粒生物传感新方法与仪器

范文娇，雷超，董园园，石静静，刘成辉*
陕西师范大学化学化工学院，应用表面与胶体化学教育部重点实验室
通讯联系人: E-mail：liuch@snnu.edu.cn

以微纳米颗粒为复杂生物样本基质分离、信号富集及输出的基本单元，基于创新构建的单颗粒分析新策略，发展了系列高灵敏度、高特异性生物标志物传感新方法：（1）创新发展了微球表界面荧光放大及信号传感新原理，构建了简便、高效的流式微球检测技术平台，有效克服了生物样本基质干扰的同时，摆脱了国际上现有数字式生物检测平台对封闭式微反应室的技术依赖，提出了基于单粒子限域反应及计数机制的完全开放式的数字式流式微球传感新思路。（2）开创性提出并发展了一种以单个微球为信号放大及富集载体的生物传感新体系，即便极低丰度靶标分子引起的微弱信号也能够高度集中于单一微球表面得以检出，显著提高了检测灵敏度。实现了单微球操控的自动化和集成化，以简便的操作实现了核酸、蛋白、酶类等生物标志物的单细胞及单分子水平检测，初步搭建起了基于单微球信号富集机制的荧光、化学发光免疫/核酸分析体系及自动化检测设备，形成了单微球相关完整检测体系和集成化检测仪器。

参考文献

1. Y. Qi*, J. Sun, S. Wang, W. Ren, C. Liu*, Anal. Chem., **2024**, *96*, 13734-13741.
2. Y. Dong, W. Ren*, Y. Sun, X. Duan, C. Liu*, Adv. Mater., **2024**, *36*, 2407013.
3. W. Fan, Y. Dong, W. Ren*, C. Liu*, Trend Anal. Chem., **2023**, *162*, 117035.
4. D. Chen, X. Zhang, L. Zhu, C. Liu*, Z. Li*. Chem. Sci., **2022**, *13*, 3501-3506.
5. X. Lu, C. Hu, D. Jia, W. Fan, W. Ren*, C. Liu*. Nano Lett., **2021**, *21*, 6718-6724.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

金属单细胞 ICP-MS 测定技术与应用研究

刘念 [1] 王雪彦 [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
通讯联系人: : E-mail：lghu@rcees.ac.cn

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 1×105 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。

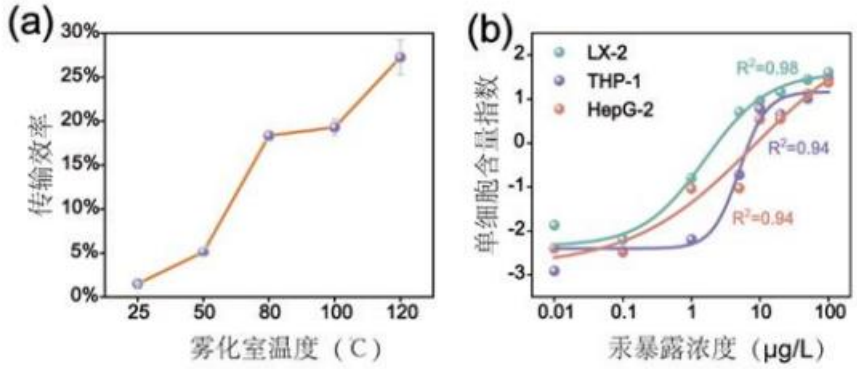


图 1a 传输效率随温度的变化规律；图 1b 不同暴露浓度下三种细胞中汞的单细胞含量指数

关键字 电感耦合等离子体质谱；单细胞；金属；技术与应用

参考文献

1. Yu X, He M, Chen B, Hu B. Recent Advances in Single-Cell Analysis by Inductively Coupled PlasmaMass Spectrometry: A review [J], Anal. Chim. Acta. **2020**,*1137*:191-207.
2. Resano M, Aramendía M, García-Ruiz E, Bazo A, Bolea-Fernandez E, Vanhaecke F. Living in A Transient World: ICP-MS Reinvented Via Time-Resolved Analysis for Monitoring Single Events [J], Chem. Sci. **2022**,*13*(16):4436-4473.

3. Corte-Rodríguez M, Álvarez-Fernández R, García-Cancela P, Montes-Bayón M, Bettmer J. Single cell ICP-MS using online Sample Introduction Systems: Current Developments And Remaining Challenges [J], TrAC-Trend. Anal. Chem. **2020**,*132*:116042.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于多孔导电薄膜的可延展多传感复合器件

曾绪，邓海涛，张晓升*
电子科技大学
通讯联系人: E-mail：zhangxs@uestc.edu.cn

作为一种新兴的电子设备，可穿戴传感器在现代社会的各个领域都显示出极具吸引力的应用潜力，例如在电子皮肤、机器人、生物医学、医疗保健等领域的应用。在此，我们开发了一种基于多孔银纳米线/硅橡胶导电膜的可拉伸多功能传感器。其独特的结构为实现器件的被动传感（即压力传感和温度传感）和主动传感（即摩擦电传感）提供了机会。通过循环真空渗透和高温干燥工艺实现了导电性和响应可恢复性的优化。作为可拉伸传感器的重要组成部分，它不仅用作被动传感的传感材料层，还用作主动传感的导电电极。当外力导致多孔银纳米线/硅橡胶导电层上的微孔逐渐闭合时，产生了额外的电路径，导致导电层的电阻降低，具有良好的压阻特性。硅橡胶的膨胀或收缩改变了嵌入微孔硅橡胶表面的网络的排列，因此具有检测人体和环境温度变化的潜力。此外，由于导电多孔银纳米线/硅橡胶电极和硅橡胶摩擦层的独特组装，开发的传感器被证明是一种用于主动传感的单电极摩擦电传感器。基于接触起电和静电感应的耦合效应，并根据运动与产生信号的幅度和波形特征之间的定量相关性，该传感器可用于人体运动监测。因此，基于多孔导电薄膜的可拉伸传感器成功地实现了压力、温度和动作监测传感的高度集成，在可穿戴领域展现出巨大的潜力。

关键字 可穿戴电子设备；多孔微结；多传感器

参考文献

1. J. Heikenfeld, A. Jajack, J. Rogers, P. Gutruf, L. Tian, T. Pan, R. Li, M. Khine, J. Kim, J. Wang, and J. Kim, Lab on a Chip, **2018**, *18*, 217-248.
2. Q. Shi, B. Dong, T. He, Z. Sun, J. Zhu, Z. Zhang, and C. Lee, InfoMat., **2020**, *2*, 1131-1162.
X. Wang, Z. Liu, T. Zhang, Small, **2017**, *13*, 1602790.
3. Y. Su, G. Chen, C. Chen, Q. Gong, G. Xie, M. Yao, H. Tai, Y. Jiang, and J. Chen, Adv. Mater., **2021**, *33*, 2101262.
4. Y. Liu, R. Bao, J. Tao, J. Li, M. Dong, and C. Pan, Science Bulletin, **2020**, *65*, 70-88.
5. H. Teymourian, M. Parrilla, J. R. Sempionatto, N. F. Montiel, A. Barfidokht, R. Van Echelpoel, K. De Wael, J. Wang, ACS Sens., **2020**, *5*, 2679-2700.

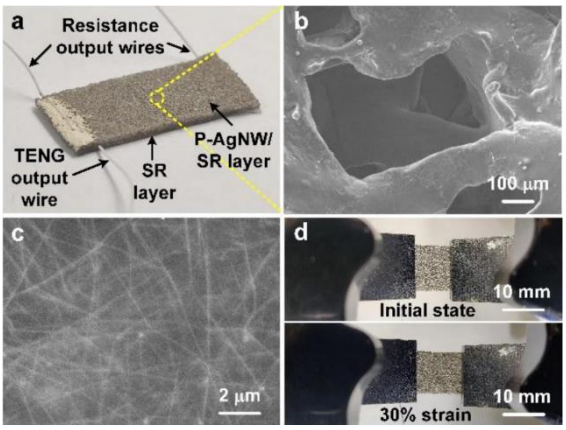


Fig. 1 Morphology of the stretchable sensor. (a) Configuration of stretchable sensor. (b,c) Surface morphology of porous AgNW/silicone rubber (P-AgNW/SR) conductive film realized by 8 cycles of vacuum infiltrating and annealing. (d) Stretchable sensor at initial state and 30% strain.

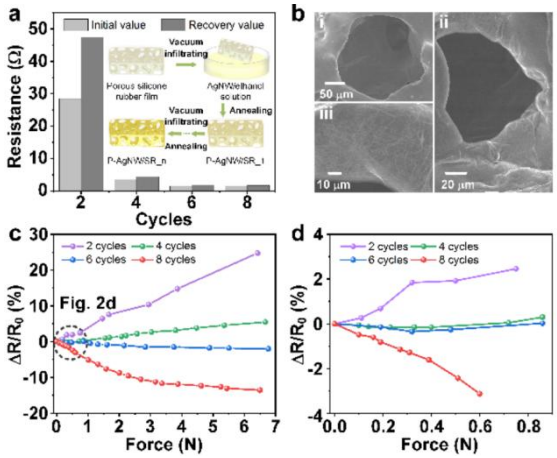


Fig. 2 Characterization of P-AgNW/SR film. (a) Initial and recovery resistances of P-AgNW/SR realized by cyclic vacuum infiltrating and annealing. (b) Surface morphology of the porous SR film (i) and the P-AgNW/SR_8 (ii-iii). (c,d) Resistive response of P-AgNW/SR_2/4/6/8.

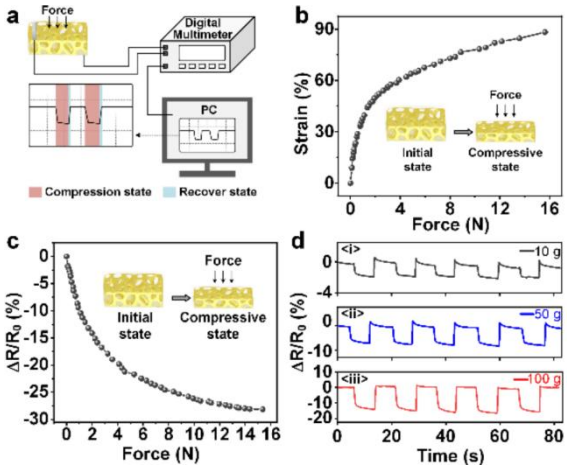


Fig .3 Pressure sensing of stretchable sensor. (a) Schematic illustration of the measurement of pressure-responsive behavior. (b) Compressive strain-stress behavior. (c) Dynamic pressure

responsive behavior, with a maximum sensitivity of 9.062%/N. (d) Static pressure-responsive behavior, the pressure sensor was used to sense the weights of different orders of magnitude.

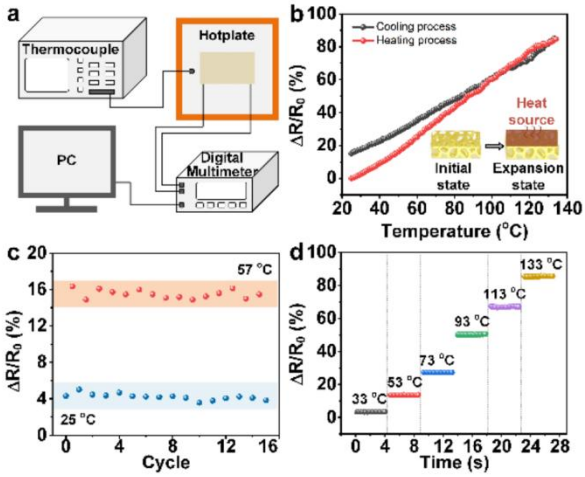


Fig. 4 Temperature sensing of stretchable sensor. (a) Illustration of the measurement platform of temperature-responsive behavior. (b) Dynamic temperature-responsive behavior in a continuous heating-cooling process. (c) Repetitive cycle test between the temperatures of 25 ℃ and 57 ℃. (d) Temperature response of the sensor at 33 ℃, 53 ℃, 73 ℃, 93 ℃, 113 ℃, and 133 ℃.

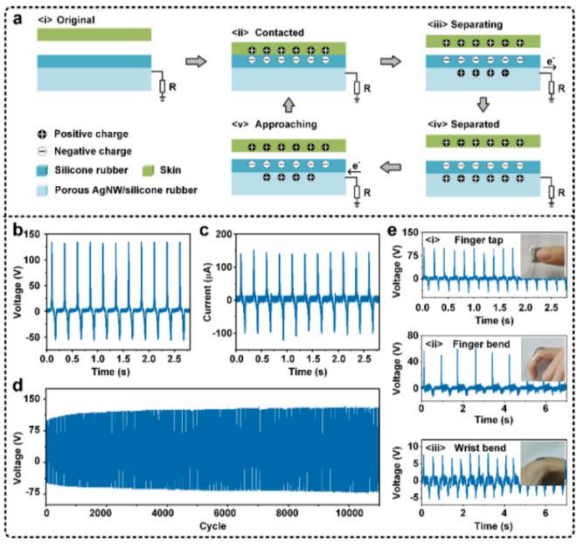


Fig. 5 Triboelectric sensing of stretchable sensor. (a) Sensing mechanism of triboelectric sensor, i.e., the coupling effect of electrification and electrostatic induction. (b) Voltage and (c) current output of the device. (d) Fatigue test of the device under 10800 working cycles, indicating that the durability of the sensor is remarkable. (e) The triboelectric sensor was used to detect human motions.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于金纳米团簇探针的荧光可视化传感研究

尚利*
西北工业大学

金纳米团簇因具有明确的组成、可调的荧光性质、优异的稳定性以及独特的催化特性等优点，被认为是极具潜力的新型荧光探针，因而在荧光可视化传感领域极具应用前景。课题组近些年在基于金纳米团簇探针的荧光可视化传感策略及其应用方面开展了相关工作，发展了系列荧光金纳米团簇探针的可控制备策略，提出了基于金团簇类酶特性的荧光传感新方法，并探索了其在 ATP、含能分子等分析物的便携式可视化传感应用的潜能。

关键字 金纳米团簇；荧光探针；可视化传感

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

高灵敏硅基异质结光电传感器及其性能调控

李静*
厦门大学

With the development of semiconductor optoelectronic technologies, Si-based photoelectric sensors present more and more applications to smart grid, optical communication, medical instrumentation, military monitoring, national defense and so on. [1-3] However, effective light absorption, suitable band-structures, and efficient carrier management are still issues to ensure high sensitivity, fast response, and controllable spectral sensing in conventional Si-based opto-electrical sensors.

In this work, three-dimensional optical cavity array structures were proposed and fabricated with the integration to silicon-based photosensors by employing the ion implantation, plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD) growth, metal/semiconductor thin film deposition and nanosphere self-assembled technologies. By optimizing the size and dielectric material of the cavities, multiple whispering gallery mode (WGM) resonances with the leaky mode radiation were successfully generated in ZnO microcavity arrays (MCAs) on Si substrates, which was verified both theoretically and experimentally. As a result, an enhancement of broadband spectral response covering the UV-VIS-NIR region was realized in the Si-based PIN photosensors. Further, a heterostructure tunneling layer was introduced to the graphene interfaced Si-based photosensors through the deposition by atomic layer deposition (ALD) technology. With the systematic investigations on the nanoscale insulating layers and corresponding layer thicknesses, an engineered tunneling layer of AlN film with the thickness up to 15.3 nm was optimized to effectively fulfill the enhanced impact ionization in the heterostructured Si-based photosensors, resulting in the photogain both from the regular minority carriers in silicon and the hot carries from graphene. Eventually, the enhanced photocurrent both in UV and NIR regions as well as suppressed dark current were accomplished in the Si-based heterojunction devices.

关键字 硅基异质结构；光电传感

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于软材料的即时检测平台及应用

李菲*，牛纪成，周玉琳
西安交通大学
通讯联系人: E-mail：feili@mail.xjtu.edu.cn

应用软材料（如纸、水凝胶）代替传统硬材料（如玻璃、硅）作基底成为近年来即时检测（POCT）领域发展趋势之一。通过将软材料与电化学集成可进一步拓展 POCT 的应用领域。我们使用四种软材料（纸、PDMS、水凝胶、液体橡皮泥）作为 POCT 新型软质基底平台，实现了对蛋白、食品添加剂、人体健康指标等检测应用。包括将电极和疏水通道通过自制笔简易书写方法整合在纸上，将纸基电化学装置应用于人工尿液中葡萄糖和样品溶液中三聚氰胺的检测；利用纸基和液体橡皮泥为小型等电聚焦分离装置，实现了疾病标志蛋白的分离和分析；将 MWNTs/PDMS 纤维作为多功能传感器制作并集成于手套上，实现了手势识别和温度监测；制备了新型水凝胶微针贴片，实现了温度、pH、尿酸、血糖等人体健康指标监测应用。

参考文献

1. J. Niu, W. Liu, X. Li, X. Pang, Y. Liu, C. Zhang, K. Yue, Y. Zhou, F. Xu; X. Li, F. Li, Nat. Communs., **2023**, *14*, 3853.
2. R. He, H. Liu, T. Fang, Y. Niu, H. Zhang, F. Han, B. Gao, F. Li, F. Xu, Adv. Sci., **2021**, *8*, 2103030.
3. J. Niu, Z. Bao, Z. Wei, J. Li, B. Gao, X. Jiang, F. Li, Anal. Chem., **2021**, *93*, 3959.
4. J. Niu, C. Shi, G. Wei, B. Gao, J. Li, F. Xu, X. Li, F. Li, Anal. Chem., **2020**, *92*, 9048.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

智慧骨科传感器与手术机器人接口

臧浠凝*
清华大学

本研究将针对骨植入传感器件与植入体刚度失配、有源传感器有效工作体积过小、传感器实时监测困难等问题，利用先进制造方法如多自由度激光加工在骨植入物的应力集中部分原位加工多工作模式（电阻、电感）传感单元及阵列。以碳纤维增强聚醚醚酮（ CFR-PEEK）这种新型骨科植入物材料为例，采用激光加工的方法，通过研究激光与 CFR-PEEK 的相互作用，在 CFR-PEEK 上原位制备出了具有应变传感和无线信号传输一体化功能的智能传感植入体。在不同骨植入物的关键位置加工传感单元，结合力学模型及大量实验数据，建立映射解析阵列数据反应的不同拓扑结构的受力情况。 原位制造被动传感器件可以作为植入物表面改性避免对植入物的力学及成分改变，进而降低医疗准入门槛。另一方面现有骨科植入物均与手术机器人无法进行通讯及，具有导航、感知功能的植入耗材将解决手术机器人及康复机器人导航无法提供准确力反馈，无法形成真正意义上的闭环控制问题。本项目旨在变革骨折患者手术范式及术后随访方式，利用先进制造技术实现智能医疗领域弯道超车。

关键字 智慧骨科；无线无源传感器件；骨植入物

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

MEMS 微振镜研究及生物检测应用

夏长锋*[1,2]、乔大勇[3]、宋秀敏[4]、熊鹏文[1,2]、张宇[1,2]
1. 南昌大学先进制造学院
2. 南昌大学智能机器人江西省重点实验室
3. 西北工业大学空天微纳系统教育部重点实验室
4. 西安知微传感技术有限公司

本研究探讨了 MEMS 微振镜的研发关键问题及其在生物检测设备中的应用前景。MEMS 微振镜是一种重要的光束偏转器件，广泛应用于固态激光雷达、VR/AR 显示、三维扫描以及医疗检测等多个领域。然而，在实际应用中，MEMS 微振镜常面临非线性响应的问题，导致其结构模型仿真和动力学响应仿真过程复杂，从而影响了开发效率。

为了解决这些问题，本文建立了 MEMS 微振镜圆形平板结构的空气模型，通过解析求解的方法推导出其空气阻尼的表达式。该表达式给出了空气阻尼的模型。随后，结合微振镜驱动力的表达式，本文建立了其非线性动力学方程，并通过采用平均法对非线性动力学方程进行求解，获得了非线性响应的表达式。本文还原理性地解释了 MEMS 微振镜出现迟滞响应的原因，并推导出其最大幅值的表达式，为 MEMS 微振镜的设计与优化提供了理论依据。

针对 MEMS 微振镜在实际应用场景中对实时角度位置的需求，本文提出了时分复用的电容检测方案。解决了以往静电 MEMS 扫描镜电容检测只能用独立检测电极或非独立电极载波方式进行馈通消除的难题，时分复用非独立电极的检测方法，从时间上彻底隔离了驱动干扰，避免了采用复杂的版图设计和沟道隔离工艺来制备独立检测电极，也避免了采用复杂且昂贵的调制、解调电路来实现非独立电极电容检测信号的分离与提取。

在应用层面，高速光偏转技术能够与其他测量系统相结合，实现多种空间扫描功能。例如，将 MEMS 微振镜集成到扫描式共聚焦显微镜的光路中，可以实现对二维平面的共聚焦信息的高效收集，进而用于人体组织的精细测量，尤其在癌变区域的预测中显示出重要应用价值。此外，在三维成像系统中，MEMS 微振镜则能够实现结构光的投影，支持三维系统的扫描，对人脸进行小于 0.3mm 的高精度三维建模，这在医美和人脸识别等领域具有广泛的应用前景。

关键字 MEMS；非线性振动；空气阻尼；电容检测；三维成像

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

生物细胞机器人多维信息传感与自动化操控技术

高文迪*、杨宇杰、白云飞、崔文骥、刘德华、张芷岚、吴涛、李伯阳、赵立波
西安交通大学

在微纳米尺度对细胞及细胞器等细胞内部单元进行精密操作，由此对细胞机能进行精准调控，是当前智慧医疗与精准医学领域的研究热点和前沿技术。细胞操作环境复杂、目标对象尺寸微小，且结构脆弱，当前研究较难实现高精度、高效率的细胞微操作控制。本团队提出一种基于智能视觉和触觉感知反馈的先进微操作方法，大大提高了微创细胞手术的操作精度、成功率，并极大地降低了细胞损伤。本文首先从传感原理、设计方法和系统集成三个角度介绍了本团队在 MEMS 微纳牛顿力学传感器的研究进展。此外，本文还将从成像系统及算法方面介绍了团队在生物细胞三维图像重建的最新进展。本文还介绍了团队融合视觉-触觉感知反馈的生物细胞手术微操作应用实例，并将重点讨论在临床试验中细胞微纳操作存在的挑战及未来的方向。

关键字 生物细胞，MEMS 微纳力学传感，显微视觉传感，细胞微纳操控

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

纳米等离子体技术驱动的广谱病毒快速检测及多重生物传感平台

赵志俊*，徐先武，墨天洋，方铁军
西南交通大学 智慧城市与交通学院单位
通讯联系人: E-mail：zhaozhijun@swjtu.edu.cn

我们成功研发了一种基于纳米等离子传感器（NPS）的快速病毒检测技术。该技术通过测量病毒的尺寸特性，实现了直接检测，无需复杂的样本预处理或化学标记，大幅简化了传统的即时检测（POCT）流程。这种传感器特别适合疫情期间的快速响应，能够在早期阶段实现高效、精准的检测。实验结果表明，NPS 在检测人工脂质包膜病毒（ALEV）时，表现出显著的光谱峰值偏移（11.6 ± 1.3 nm）和肉眼可见的红色变化（32.8 ± 14.2），验证了其灵敏度和可靠性远超传统检测方法。这种纳米传感技术不仅反应迅速，操作简单，且成本低廉，具备广泛的应用前景。特别是在未来的疫情防控中，NPS 有望为公共卫生应急系统提供更加便捷、高效的检测工具，大幅提升检测速度并降低成本。除了病毒检测外，我们还拓展了纳米等离子体技术在生物和化学物质检测中的应用。实验表明，基于纳米等离子体的表面增强拉曼散射（SERS）基底能够显著增强拉曼信号，检测核苷酸等生物分子的灵敏度可达 1 nM。此外，在电化学检测模式下，我们成功检测到复杂环境中低至 30 nM 浓度的 Pb2+金属离子。这些研究表明，纳米等离子体技术不仅在病毒检测方面具有广阔前景，在环境监测和智能诊断等领域同样展现了巨大的潜力，为未来低成本、高性能传感器的设计提供了新的思路。

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

集成微裂纹力学传感器的心脏器官芯片

杨清振*，贾鑫淼，李学标，程绪坤，徐峰
西安交通大学
通讯联系人: E-mail： qzyang@xjtu.edu.cn

心脏疾病是人类健康的重要杀手，为研究其发病机理、探寻治疗方案，需构建相应的疾病（正常）模型。心脏器官芯片是近几年出现的一种新技术，具有高通量、便携性、可模拟在体微环境等优势，引起了科研工作者和医务人员的广泛关注[1]。目前心脏芯片面临的挑战是如何实时监测心肌细胞的跳动状态，而跳动的频率和幅值是心肌细胞的关键生理指标[2]。为此，本团队设计并制备了一种集成压阻式微纤维力学传感器的心脏器官芯片。该心脏芯片由一系列重复单元组成，每个结构单元由一个培养腔室和一对微纤维力学传感器组成，其中培养腔室用于三维心肌微组织的培养。纤维力学传感器为三层芯包结构，其中功能涂层为压阻材料碳纳米管，为提高其检测灵敏度，在涂层上采用预拉伸的方式制备了微裂纹阵列[3]。心肌微组织的跳动引起传感器的电阻变化，通过测量电阻变化即可计算心肌微组织的跳动频率及幅值。三维心肌微组织采用小鼠原代心肌细胞和胶原水凝胶材料混合制备而成，接种至心脏器官芯片可实现长时间培养。针对该心脏器官芯片，开展了形貌、力学、电学、生物相容性等测试。制备的心脏器官芯片能够在原位实时连续监测三维心肌微组织的跳动，在心脏疾病模型构建（如心衰、心律失常等）和药物筛选中具有重要的应用前景。

参考文献

1. J. U. Lind, T. A. Busbee, A. D.Valentine et al., Nat. Mater., **2017**, *16*(3), 303-308.
2. D. Huh, B. D. Matthews, A Mammoto, et al., Science, **2010**, *328*(5986): 1662-1668.
3. D. Kang, P. V. Pikhitsa, Y. W. Choi et al., Nature, **2014**, *516*(7530): 222-226.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于腔室型微流控芯片器官/类器官芯片体外模型研究

曾湖烈*
复旦大学药学院
通讯联系人: E-mail： zenghulie@fudan.edu.cn

本研究采用界面屏障理念设计了适用于精细化药物筛选和评价的腔室型微流控系统。以该腔室型微流控系统为构架，发展了呼吸系统芯片体外模型，肝脏芯片体外模型，具有免疫功能的呼吸系统芯片等。研究发现，在动态腔室型微流控芯片基础上构建的肺泡芯片对不同尺寸和浓度的吸入性颗粒污染物的毒性具有精细的辨别和评价能力，而利用动态腔室型微流控系统构建的肝脏芯片体外模型具有便利构建不同胞内脂质（脂肪肝炎症阶段）的非酒精性脂肪肝的特点，并在降脂药对不同阶段的酒精性脂肪肝模型的减脂作用实现了精细化评价。另外，联动了淋巴滤泡单元的的呼吸系统芯片展现出了较为完善的呼吸系统生理及免疫功能。表面采用界面屏障理念设计的动态类器官芯片具有便捷、易标准化、精准复刻疾病模型和进行药物精准评价的潜力，以及作为病原体感染模型的潜能。

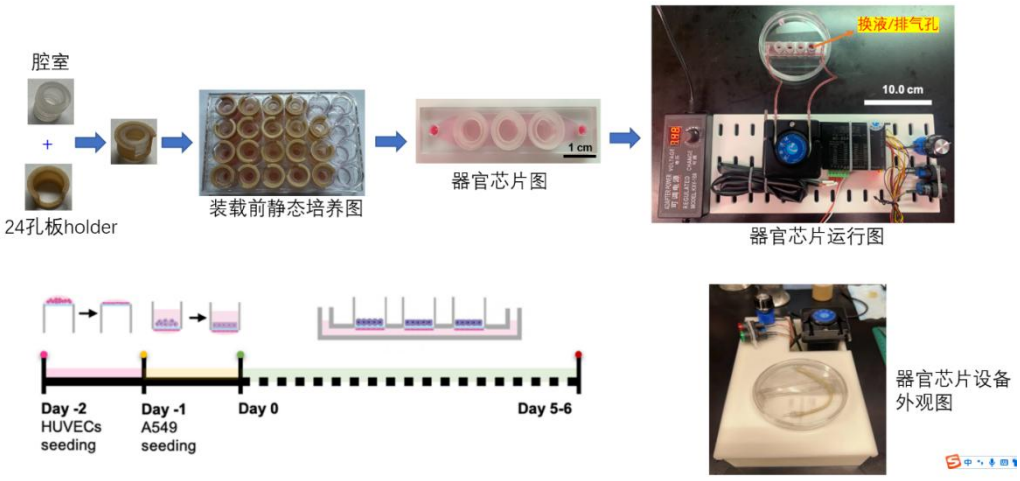


图 1. 腔室型微流控芯片为基础的器官/类器官芯片组装图

参考文献

1. M. Chang, A. Fu, B. Liu, Y. Wang, H. Zeng, Dynamic liver chip based on well-coupled microfluidics: an accurate NASH model for drug evaluation, Anal. Chem., **2024,** accepted.
2. A. Fu, S. Mao, N. Kasai, H. Zhu, H. Zeng., Dynamic tissue model in vitro and its application for assessment of microplastics-induced toxicity to air-blood barrier (ABB), Biosens. Bioelectron. **2024**, *246*,115858 (8p).

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于微流控技术快速检测食品药品中致病菌

李楠[1,2]，林金明[2*]
1 北京中医药大学中药学院
2 清华大学化学系，100084
*Email: jmlin@mail.tsinghua.edu.cn

近年来由致病菌引起的安全事件屡见不鲜，针对致病菌的早期快速筛查是保证食药安全的有效手段之一,然而挑战在于样本中致病菌浓度低且种类多样，这对检测方法的灵敏度和多样性提出了较高要求；此外食品药品基质复杂，易干扰目标致病菌的检测。针对这些挑战我们提出需要开发快速、灵敏、无干扰的食品药品致病菌检测新方法。因此，本研究旨在基于微流控技术、信号扩增技术、免疫磁分离技术、纳米材料的光热效应，运用质谱、光谱检测方法，构建新型的致病菌检测平台，取得的主要创新性成果包括：

(1)开发了一种利用 MALDI-TOF 质谱并基于双滚环扩增和特定 DNA 质量标签来同时对多种细菌进行高灵敏度检测的方法。对用来捕获靶标细菌的适配体进行了扩增，极大地增加了捕获适配体的浓度，提高了目标细菌的捕获率。进一步对检测信号进行扩增可产生具有重复序列的 DNA 长链，其中的重复序列可与相应的 DNA 质量标签互补配对。施加基质后进入 MALDI-TOF，在激光的照射下氢键断裂，DNA 质量标签脱离细菌表面，把对细菌的检测转化成对 DNA 质量标签的检测。利用质谱多组分分析的优势，可通过分析不同的 DNA 序列实现对多种细菌的同时检测。

(2)开发基于微流控的免疫磁分离方法用于目标致病菌的富集，并利用抗体修饰的金纳米棒的光热裂解效应来选择性释放活的目标菌的 ATP。将抗体修饰的免疫磁珠注入芯片通道中，由于芯片底部免疫磁栅的存在，磁珠将在磁栅尖端部分形成免疫磁珠链；然后将大体积样本连续注入芯片通道中，目标菌被特异性捕获在免疫磁珠链上，非目标物未被捕获随流体离开芯片通道；进而向芯片通道中通入抗体修饰的金纳米棒，形成磁珠-目标菌-金纳米棒的复合体；然后利用近红外激光照射金纳米棒产生光热效应，引发目标菌的裂解并释放 ATP；最后利用荧光素酶/荧光素与 ATP 反应产生生物发光信号的强度来反映目标细菌的浓度。该体系结合了微流控免疫磁分离以及抗体靶向的金纳米棒光热裂解效应的优点于一体，可高灵敏度、高选择性地对活的目标致病菌进行检测。

关键字 致病菌检测；质量标签；信号放大；微流控生物传感器；光热裂解

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

第三代半导体异质结传感器

孟建平*
北京纳米能源与系统研究所

开发具有高灵敏度、快速响应回复和低功耗（自驱动）传感器以满足物联网的需求推动着传感器发展。传感器的性能依赖于传感材料，其中，具有半导体、压电和热释电多种特性的第三代半导体是理想材料之一。本报告围绕第三代半导体异质结，通过耦合势垒调节、局域表面等离子体激元共振（LSPR）、热释光电子效应、压电光电子效应、能带工程和铁电极化，开发高灵敏光传感器、气体传感器和生物传感器。

关键字 第三代半导体，异质结，光传感器，气体传感器，生物传感器

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于 MEMS 技术的量子磁强计技术及生物测量应用

陈瑶*，马银涛，于明智，赵立波，蒋庄德
西安交通大学仪器科学与技术学院
通讯联系人: E-mail：yaochen@xjtu.edu.cn

原子自旋是物质的内秉属性，利用原子自旋在外界磁场的进动可以对1fT（1fT=10-15T）的磁场进行敏感测量，使得人们可以对诸如大脑产生的磁场进行测量以进行大脑功能和大脑相关疾病研究，也可以和传统的NMR技术结合进行超低场NMR测量，对手性分子、生物代谢物进行低成本和片上检测。除了进行超高灵敏磁场测量外，利用原子自旋超精细能级分裂的跃迁也可以进行时间测量，研制高精度原子钟。在原理上由于量子传感技术可以在较小的敏感体积内（1mm^3）可以实现超高灵敏的测量，有望和MEMS技术结合实现微小型、高精度、低成本的磁强计芯片。报告将聚焦于芯片化传感器中的MEMS碱金属气室、无磁加热芯片、双平面调制线圈等芯片的核心技术突破以及传感器集成研究。将展示一种基于模压工艺的六面透光MEMS碱金属气室；为了配合MEMS平面化加工工艺，将展示一种芯片化双平面线圈技术；为了实现干扰磁场的抵消，研制一种对绕结构的无磁加热线圈芯片。

关键字 原子磁强计；光抽运磁强计；脑磁测量；超低场核磁共振

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

大尺寸碳化硅单晶生长调控与人工智能辅助的无损检测

尹君*，叶晓芳，檀鹏，康闻宇，康俊勇
厦门大学萨本栋微米纳米科学技术研究院
通讯联系人: E-mail：jyin@xmu.edu.cn

碳化硅作为一种宽禁带半导体材料，具有一系列独特的物理和化学性质，包括宽带隙、高击穿电场强度、高热导率、高电子饱和漂移速度以及优异的化学稳定性和抗辐射能力。这些特性使其在高温、高频、高功率，以及极端环境应用中表现出明显的优势。除了在高性能功率器件和光电器件获得广泛应用外，碳化硅材料的高温稳定性、化学惰性和宽禁带特性使其也成为高温传感器、辐射探测器、压力传感器、化学传感器和MEMS传感器的理想材料选择，适用于航空航天、工业过程控制、环境监测等苛刻环境。然而，当前高质量碳化硅晶体材料的成本仍然较高，限制了其广泛应用，这主要是由于碳化硅单晶在高温生长条件下工艺的特殊性和长晶过程实时调控的困难性导致。因而，发展大尺寸碳化硅单晶制备工艺并通过多种手段追溯其长晶过程具有重要的研究意义。

在该工作中，我们首先通过多物理场仿真构筑了适用于尺寸单晶生长的热场环境，并引入气相传输干扰机构优化了传质过程，为高质量、大尺寸碳化硅单晶的 PVT 制备提供了有效途径[1]。在此基础上，发展了一种基于 Micro-CT 扫描结合机器学习的碳化硅晶体块状材料无损的增强表征方法，能够快速有效地识别和定位材料中的微观和有害缺陷（多型体、微管和碳夹杂）[2]。在获得典型缺陷的三维重构基础上，我们进一步结合多物理场仿真探究了上述关键缺陷的产生机理和随生长过程的演化过程。相关研究对于追溯碳化硅晶体的生长过程，可视化缺陷的演化过程具有重要的意义，在指导单晶 PVT 生长工艺优化方面呈现出重要的的应用前景。

参考文献

1. P. Tan, W. Y. Kang, J. Yin, J. Y. Kang, Phys. Scr., **2022**, *97*, 105708.
2. X. F. Ye, A. Z. Zhang, J. X. Huang, W. Y Kang, W. Jiang, X. Li, J. Yin, J. Y. Kang, Aggregate, **2024**, *5*, e524.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于微流控芯片的航天微流式细胞仪研究

苑曦宸*
西北工业大学

太空中的辐射、微重力、长期封闭等因素会引起航天员免疫功能障碍等诸多健康问题，易导致潜伏病毒活化和细菌感染等多种疾病[1]，从而严重威胁到航天员的身体健康和航天任务的顺利执行。流式细胞术是一种对高速流动的细胞作单细胞多参数分析的技术，是淋巴细胞亚群等多种血细胞计数的标准手段[2]。为实现流式细胞仪在轨免疫监测应用，研制了基于微流控芯片的航天微流式细胞仪，开发了全自动样本预处理技术实现微重力环境下试剂快速混合，单次混合时间≤1 min，混合效率＞95%。细胞聚焦采用无鞘流聚焦中的惯性聚焦方式，利用颗粒的惯性迁移和微流道内部产生的二次流引导粒子往同一位置运动，聚焦效果如图 2（a）所示，最大聚焦效率高于 99%[3]。克服了传统水力聚焦方式因液路系统复杂、鞘液消耗量大而难以满足航天应用的局限性。通常以荧光变异系数（coefficient of variation，CV）作为评价流式细胞仪性能的指标，本研究所开发的航天微流式细胞仪各通道 CV 值在 50 kPa 驱动压力下分别为 FITC_2.67%、PE_2.81%、ECD_2.75%、PC5_3.19%，与商用仪器处于同一水平。仪器整体尺寸约 260×300×300 mm3、重约 10 kg，体积重量均为商用流式（BriCyte E6，迈瑞）的 1/6 左右，满足空间站应用的小型化、轻量化需求。在实际应用时，仅需采集 30 μL 指尖血样注入微流控芯片中，即可在 30 min 内完成“样本进，结果出”的全自动快速检测，配套的微流控芯片即插即用、单次可抛，具备操作简便、低消耗、无污染等优点。通过检测细胞在激光诱导下产生的侧向散射光（SSC）和四种颜色的荧光信号来实现 TBNK 淋巴细胞亚群的计数，结果如图 3 所示，T4、T8、B、NK 淋巴细胞亚群分群百分比分别为 44.50%、21.50%、10.60%、4.43%，同商用仪器检测对比其百分比偏差＜2.0%。验证了航天微流式细胞仪的实际可用性，有望填补我国在该领域的空白，为航天医学工作提供设备保障。

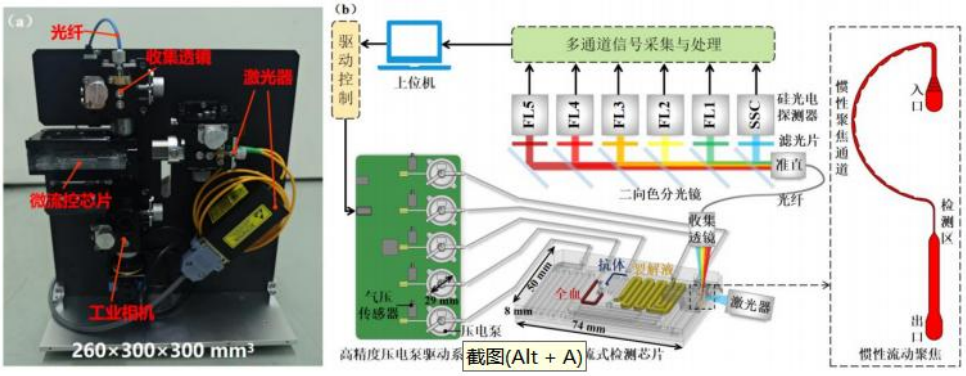


图 1 （a）航天微流式细胞仪实物；（b）航天微流式细胞仪原理示意图

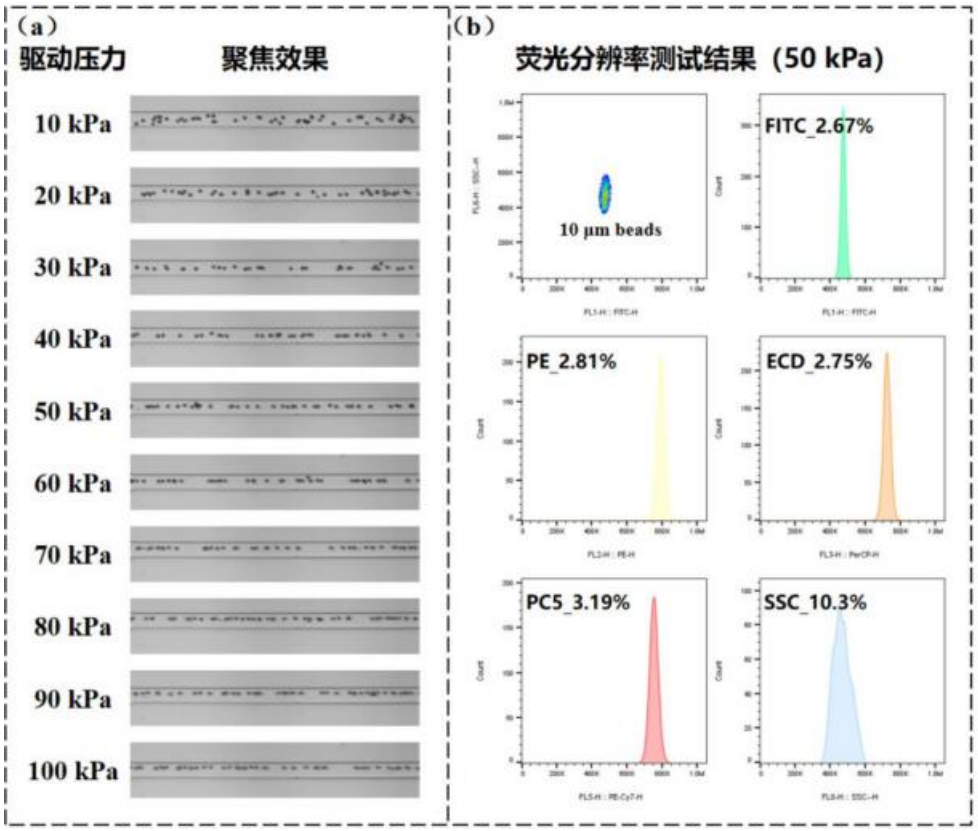


图 2 （a）惯性聚焦中不同驱动压力对聚焦效果的影响；
（b）航天微流式细胞仪荧光分辨率测试结果（50 kPa 驱动压力下）

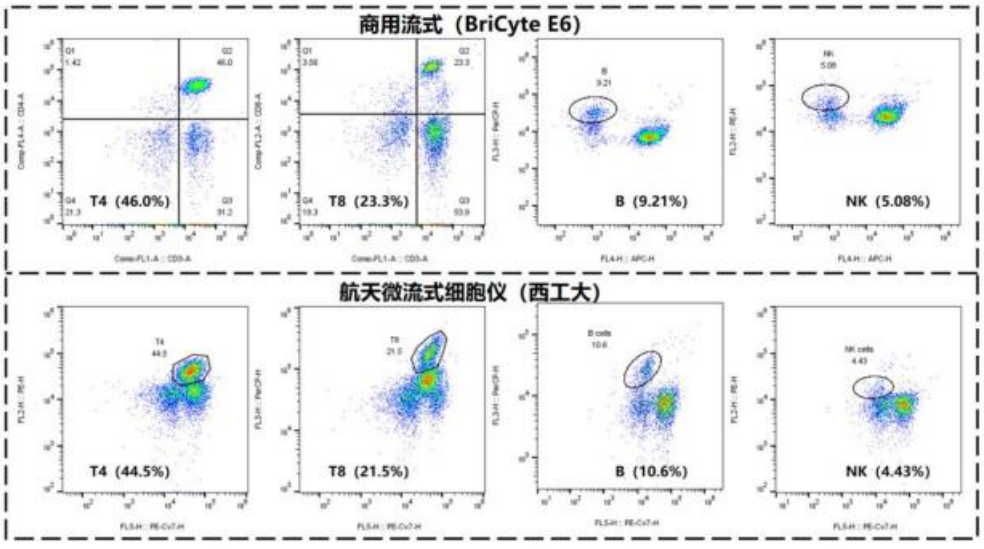


图 3 T4、T8、B、NK 淋巴细胞分群检测结果对比

关键字 微流控芯片；航天微流式细胞仪

参考文献

1. Crucian B E, Stowe R P, Pierson D L,et al. Immune system dysregulation following short- vs long-duration spaceflight.[J]. Aviation Space & Environmental Medicine, **2008**, *79*(9).
2. Orfao A. Phenotypic Analysis[M]. Current Protocols in Cytometry. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., **2009**.
3. Zhao T, Zeng P, Li J, et al. Inertial co-focusing of heterogeneous particles in hybrid microfluidic channels with constantly variable cross-sections[J]. Lab on a Chip, **2024**.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

基于机器学习辅助的柔性压力传感器在人体健康监测中的应用研究

苏越*
国科大杭州高等研究院

随着人工智能和物联网技术的发展，柔性电子器件逐渐走入我们的生活。柔性电子以其独特的柔性、延展性以及高效、低成本制造工艺，在信息、能源、医疗、国防等领域具有广泛的应用前景。其中，柔性压力传感器作为柔性电子器件中的核心器件之一，可实现对人体的心率和呼吸速率等生命体征信号的精准有效测量和监控，在医疗健康检测、健康监护以及人机交互界面等应用中发挥着重要作用。近年来，基于不同传感机制、新材料和新型器件结构的柔性压力传感器被成功研制，并展示出了柔性、可拉伸性、高灵敏度、快速响应、良好的稳定性等独特优势。然而，目前柔性压力传感器相关研究还处于初级阶段，从实验室的性能测试到作为消费电子的实际应用还要经历漫长的研发和产业化进程。现存的一些亟待解决的难题可以概括为如下几个方面：（1）柔性材料方面，兼顾器件成本、使用寿命以及皮肤佩戴舒适性等实际问题，制备出可用于柔性压力传感器的廉价、环保、柔韧性好的新型柔性材料是传感器发展的首要任务。（2）器件结构方面，多级微纳米结构的引入会对压力传感器的性能提升有一定的借鉴意义，但传统微纳米结构制造过于复杂，制造周期长、成本高，制造过程中会产生大量的材料浪费。（3）器件性能方面，大部分研究工作均集中于器件单一信号的探测，无法获得全面的信息，实际应用受限。柔性传感器的多重信号响应是其走向应用的必经之路。基于上述柔性压力传感器发展过程中面临的一些实际问题，从新颖材料制备、多级微纳米结构制备以及多重信号响应等诸多方面开展全方位创新，实现一系列高性能可穿戴柔性压力传感器的制备。通过将机器学习算法与制备的传感器相结合，成功验证传感器在大数据下的人体信号识别能力。

关键字 柔性压力传感器 人体健康监测 多级微纳米结构

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

高灵敏小型化太赫兹探测器及薄膜厚度无损检测技术

孟庆之*
西安交通大学

太赫兹技术近年来在材料无损成像、无损检测、生物学检测及无线通讯等领域有着广泛的应用前景。本报告介绍了课题组在 GaN 高电子迁移率晶体管太赫兹探测器的设计、制备表征及测试技术方面的研究成果，以及太赫兹时域、频域光谱技术在有机物薄膜材料厚度检测方面的应用情况。

关键字 小型化太赫兹探测器；薄膜厚度；无损检测

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

碲基纳米材料及其二氧化氮敏感特性

郭昱、梁峻阁、袁震、太惠玲*
电子科技大学

二氧化氮（NO_2）是世界公认的六大污染物之一，其监测和预警对人类健康至关重要。同时，湿度干扰作为气体传感器面临的顽固问题之一，几十年来一直是研究人员的挑战。因此，开发具有快速响应、高灵敏度、低检测限和良好抗湿性的传感器，对于实际环境中有效监测 NO_2 分布具有重要意义。

针对 NO_2 传感器检测下限不足问题，基于水热法合成 Au@Te 纳米带，制备了电阻型 NO_2 传感器。传感器展示了优异的 NO_2 传感性能，包括在 0~50 ppb 范围内灵敏度达 0.028 ppb^{-1}、检测下限约 83 ppt、5 ppm 快速响应时间为 11.3 s 、良好的重复性和选择性。此外，本研究还考察了传感器在连续工作状态下的长期稳定性，观察到连续 28 天内稳定的响应。这项工作为 NO_2 传感器的制造提供了一种有效的策略，并提供了针对特定应用场景的气体传感器评估案例。针对 NO_2 传感器的湿度干扰问题，通过水热法合成了 Ag_2Te 纳米线，并制备电阻型传感器。该传感器在室温~25°C 和 50%相对湿度条件下进行了性能测试，展现了 5 ppm 快速响应 10.2 s 、ppb 级的低检测限和良好的重复性。值得一提的是，Ag_2Te 传感器显示出卓越的耐湿性能，在 10%至 90%的相对湿度范围内，其在空气和 1 ppm NO_2 中的电阻变化分别为 1.84%和 0.95%，证实了其在室温下的稳定性和可靠性。这项工作为室温下耐湿气体传感器的开发提供了新的研究方向。

关键字 碲基纳米材料，二氧化氮传感器，低检测限、抗湿性、室温

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：报告

全向风能采集器的设计方法与应用研究

李深*
重庆大学

基于风致振动机理的风能采集器以其结构简单、易于小型化、成本低廉等优点为无线传感节点的能量供应提供了新的解决方案，但是当前大多数对基于风致振动机理的风能采集器的研究仅着眼于对单一风向下采集器的输出响应的研究，仅对单一风向敏感的风能采集器难以适应风向、风速多变的环境。并且暴露于空气中的机电转换单元易受到恶劣环境条件的影响，所以研制出具有多风向兼容性和高环境兼容性的风能采集器具有重要意义。

本研究以提高风能采集器风向兼容性为目标，提出了一种设计方法，并分别设计出基于涡激振动，驰振以及颤振的多向/全向压电风能采集器。提出了基于涡激振动的全向风能采集器的理论模型。通过理论计算以及有限元仿真证明采集器在不同风向下电学响应相同。实验结果证明，设计的采集具有良好的风向兼容性，可以在不同风向下产生稳定的电学输出。设计出无线传感节点，实现了全风向下的无线温湿度检测。

关键字 风致振动；全向风能采集；自供电无线传感

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：墙报

单颗粒生物传感新原理新方法研究

范文娇、雷超、董园园、石静静、刘成辉*
陕西师范大学

液体活检为重大疾病的无创早期筛查带来了新的契机，但体液中关键标志物含量极低、复杂基质中海量物质存在严重干扰仍是制约液体活检技术应用的关键挑战。提出以微纳米尺度颗粒为基质分离、信号富集及输出的基本单元，基于创新构建的单颗粒分析与数字式传感新原理，发展了系列高灵敏度、高特异性生物标志物检测新方法。在疾病相关核酸及蛋白标志物的单分子、单细胞水平准确检测方面取得了多项成果，为重大疾病早期诊断提供了可靠的分析技术平台。

关键字 单颗粒，生物传感，新方法

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：墙报

用于高鲁棒肌电手势识别的模量匹配纤维基表皮电极

谭嘉宝[1]、罗国希*[1,2]、罗伟[3]、谢嘉琦[1]、刘桀仑[1]、赵立波[1,2]、蒋庄德[1]
1. 西安交通大学机械工程学院
2. 西安交通大学仪器科学与技术学院
3. 墨尔本大学化学学院
通讯联系人: E-mail： luoguoxi@mail.xjtu.edu.cn

基于表面肌电信号的手势识别技术提供了一种直观的、灵活的、高效的手势识别方法。然而，现有肌电传感电极具有较高的杨氏模量，无法与皮肤模量相互匹配，导致电极与皮肤之间的接触界面在动态环境中难以保持稳定，显著增加了信号采集过程中的噪声，并严重降低了采集信号的质量。这一问题极大地限制了肌电手势识别技术的进一步发展和广泛应用。为此，我们提出了一种与皮肤共形的纤维基表皮肌电传感电极，其具有与人体皮肤高度匹配的杨氏模量(121 kPa)。该电极展现出优异的皮肤共形特性，它能够在皮肤拉伸状态下与皮肤保持紧密贴合并表现出稳定的接触阻抗。因此，即使在振动干扰条件下，该电极仍能够采集到高质量的肌电信号。相比于传统的 Ag/AgCl 凝胶电极，该电极采集到的信号具有更低的运动伪迹噪声(28.9 μV)，以及更高的信噪比(18.4 dB)。此外，我们还提出了一种创新的自适应深度学习算法，通过引入反卷积特征重构器，减少特征空间中肌电信号数据的分布差异，使模型能够快速适应非理想因素，实现精准的手势识别。最后，我们将该电极和算法集成至一个手势识别系统当中，该系统具有出色的鲁棒性。在受到外部干扰的情况下，该系统的手势识别准确率仅下降了 1.6%，而基于 Ag/AgCl 凝胶电极的手势识别系统的识别准确率则下降了 22.1%。我们的研究为肌电信号采集质量的影响因素提供了更全面的分析，还为提高生物电信号检测、手势识别和各种人机交互应用的准确性开辟了一条全新的途径。

关键字 模量匹配，肌电传感电极，肌电信号采集，手势识别，静电纺丝

参考文献

1. L. Zhang et al., "Fully organic compliant dry electrodes self-adhesive to skin for long-term motion-robust epidermal biopotential monitoring," Nature Communications, **2020**, *11*, 1, 4683.
2. W. Zhou et al., "Gas-permeable, ultrathin, stretchable epidermal electronics with porous electrodes," ACS Nano, **2020**, *14* , 5 , 5798-5805.
3. A. Moin et al., "A wearable biosensing system with in-sensor adaptive machine learning for hand gesture recognition," Nature Electronics, **2021**, *4*, 1, 54-63.
4. H.G. Li et al., "Breathable and skin-conformal electronics with hybrid integration of microfabricated multifunctional sensors and kirigami-structured nanofibrous substrates," Advanced Functional Materials, **2022**, *32*, 2202792.
5. H. Kim et al., "Skin preparation-free, stretchable microneedle adhesive patches for reliable electrophysiological sensing and exoskeleton robot control," Science Advances, **2024**, *10*, 3, 5260.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：墙报

弹性可拉伸多传感复合器件

曾绪，邓海涛，张晓升*
电子科技大学
通讯联系人: E-mail：zhangxs@uestc.edu.cn

作为一种新兴的电子设备，可穿戴传感器在现代社会的各个领域都显示出极具吸引力的应用潜力，例如在电子皮肤、机器人、生物医学、医疗保健等领域的应用。在此，我们开发了一种基于多孔银纳米线/硅橡胶导电膜的可拉伸多功能传感器。其独特的结构为实现器件的被动传感（即压力传感和温度传感）和主动传感（即摩擦电传感）提供了机会。通过循环真空渗透和高温干燥工艺实现了导电性和响应可恢复性的优化。作为可拉伸传感器的重要组成部分，它不仅用作被动传感的传感材料层，还用作主动传感的导电电极。当外力导致多孔银纳米线/硅橡胶导电层上的微孔逐渐闭合时，产生了额外的电路径，导致导电层的电阻降低，具有良好的压阻特性。硅橡胶的膨胀或收缩改变了嵌入微孔硅橡胶表面的网络的排列，因此具有检测人体和环境温度变化的潜力。此外，由于导电多孔银纳米线/硅橡胶电极和硅橡胶摩擦层的独特组装，开发的传感器被证明是一种用于主动传感的单电极摩擦电传感器。基于接触起电和静电感应的耦合效应，并根据运动与产生信号的幅度和波形特征之间的定量相关性，该传感器可用于人体运动监测。因此，基于多孔导电薄膜的可拉伸传感器成功地实现了压力、温度和动作监测传感的高度集成，在可穿戴领域展现出巨大的潜力。

关键词 可穿戴电子设备；多孔微结；多传感器

参考文献

2. J. Heikenfeld, A. Jajack, J. Rogers, P. Gutruf, L. Tian, T. Pan, R. Li, M. Khine, J. Kim, J. Wang, and J. Kim, Lab on a Chip, **2018**, *18*, 217-248.
2. Q. Shi, B. Dong, T. He, Z. Sun, J. Zhu, Z. Zhang, and C. Lee, InfoMat., **2020**, *2*, 1131-1162.
X. Wang, Z. Liu, T. Zhang, Small, **2017**, *13*, 1602790.
3. Y. Su, G. Chen, C. Chen, Q. Gong, G. Xie, M. Yao, H. Tai, Y. Jiang, and J. Chen, Adv. Mater., **2021**, *33*, 2101262.
4. Y. Liu, R. Bao, J. Tao, J. Li, M. Dong, and C. Pan, Science Bulletin, **2020**, *65*, 70-88.
5. H. Teymourian, M. Parrilla, J. R. Sempionatto, N. F. Montiel, A. Barfidokht, R. Van Echelpoel, K. De Wael, J. Wang, ACS Sens., **2020**, *5*, 2679-2700.

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：墙报

基于超快激光焊接的 MEMS 碱金属气室关键制备技术

王延斌*
西安交通大学

原子气室是原子磁强计等原子器件的核心。传统的 MEMS 原子气室一般通过阳极键合工艺实现密封，但高温、高压的环境以及产生的水氧等污染物会对气室产生不利影响。鉴于此，本团队基于超快激光焊接技术，利用其高分辨率、小热影响区的特点实现了 MEMS 气室的制备。基于 ICP 干法刻蚀工艺以及湿法化学抛光工艺实现了硅腔室的制备，随后，对硅-玻超快激光焊接参数进行了优化并基于搭建的超快激光焊接系统实现了 MEMS 气室的密封。最后，对制备的气室进行了长期高温漏率测试，并对制备的单光束原子磁强计的灵敏度进行了测试。结果表明，该方法制备的 MEMS 气室与阳极键合方法相当，这为 MEMS 气室的高效制备提供了新的途径。

关键字 超快激光焊接；MEMS 碱金属气室；制备

分会场：39.MEMS 传感器和生物检测仪器
交流形式：墙报

基于自旋交换光泵浦 3He 磁强计的强磁场测量

郭举，王延斌，马银涛，于明智，陈瑶，赵立波**
西安交通大学仪器科学与技术学院
通讯联系人: E-mail：libozhao@xjtu.edu.cn

本研究旨在利用光泵浦^{3}He磁强计在强磁环境下进行磁场测量。光泵浦^{3}He磁力计长期以来被广泛应用于军事、太空勘探和地球物理实验室。然而，它们在基础研究中的应用最近也受到了越来越多的关注。这些磁强计具有高灵敏度、高精度、高温度独立性、磁场与共振频率之间的线性关系等特点，是强磁场测量的理想选择。本研究通过充分利用^{3}He核的长期自旋进动特性，在高磁场条件（大于0.5 T）下进行超高精密磁场测量。该研究利用自旋交换光泵浦方法使^{3}He原子核自旋极化，随后通过脉冲双平面线圈施加横向脉冲磁场，并利用线圈拾取核自旋感应衰减振荡信号来读取磁场信息。这一技术突破为基础科学研究提供了新的途径，为量子信息、生物检测和核磁共振等领域的研究提供了新的可能性，并有可能推动这些领域的进一步发展。

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流类型：报告

等离子体质谱在半导体用高纯材料的分析研究

汪正*
中国科学院上海硅酸盐研究所

汇报内容涉及 ICP-MS 在集成电路的广泛应用，随后介绍 ICP-MS 结构原理及干扰去除，接着介绍 ICP-MS 在高纯材料分析的应用研究，最后介绍 LA-ICP-MS 在高纯材料分析的应用探索。

关键字 集成电路， ICP-MS，高纯材料

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流形式：报告

疏水碳纳米管-硫纳米片复合气敏材料用于人体呼出氨气的检测

申丽华*、崔晓妮、唐宇琛、张耀州
西安科技大学

人体呼出气中 NH_3 的测定在生物医学领域具有重要意义，可为慢性肾病、肺癌等疾病的诊断和治疗提供重要依据。然而，湿度干扰是影响呼出气分析的主要因素，另外，由于人体呼出气中 NH_3 含量较低，因此，开发具有良好抗湿度和高灵敏度的新型气敏材料具有重要意义。利用碳纳米管的毛细管冷凝作用和十六烷基三甲氧基硅烷的疏水作用，结合硫纳米片（S-NSs）对 NH_3 检测的高灵敏度响应特性，本文合成了疏水性碳纳米管 H-CNT- S-NSs 新型复合材料（Fig.1），构建了基于该复合材料的电阻式气体传感器，用于人体呼出气中 NH_3 的分析检测。构建的传感器能够在高湿度下（RH:80%）可以检测低至 ppb 级别的 NH_3，表现出快速的响应/恢复（18 s/26 s）和良好的稳定性。构建的传感器用于人体呼出气在线监测，表现出良好的基线稳定性（Fig. 2）。本研究为商用低成本呼吸分析传感器的开发提供了新的参考，具有潜在的应用价值。

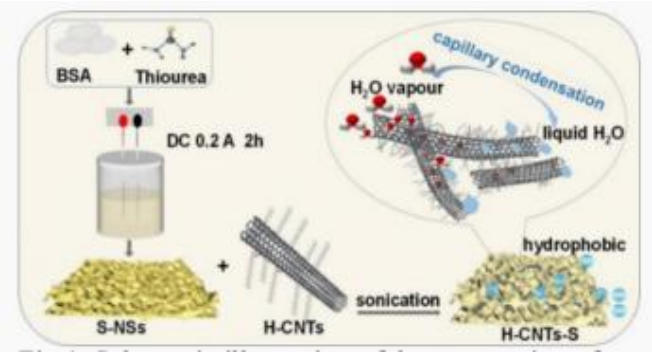


Fig.1. Schematic illustration of the preparation of sensing material and its humidity resistance principle.

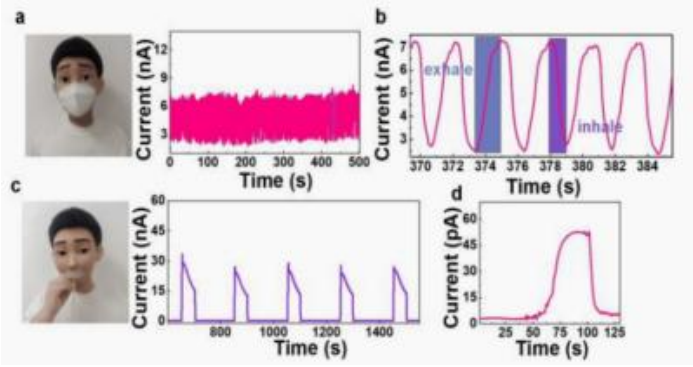


Fig. 2. (a-b) On-line nose exhaled breath analysis via a mask equipped with the H-CNTs-S sensor. (c) On line mouth exhaled breath analysis. (d) The sensing response of the H-CNTs-S sensor to the exhaled breath gas.

关键字 硫纳米片，呼出气分析

参考文献

1. J. Tang, L. Shen, K. Zhao, J. Peng, Q. Chen, C. Yu, Y. Li, A. Abbas, S. Wang, Z. Liu, Appl. Surf. Sci. **2024**, *643*, 158574.
2. Q. Chen, S. Wang, S. Bai, L Shen, J. Peng, Y. Zhang, X. Cui, C. Yu, R. Zhang, Y. Li, Z. Liu, J. Alloys Compd. **2024**, *985*, 174070.

分会场：40. 半导体材料分析技术与仪器
交流类型：报告

半导体材料杂质分析前沿进展

余晶晶*
安捷伦科技（中国）有限公司成都分公司

随着制程发展，半导体材料种类和要求不断提升。ICP-MS 作为半导体行业金杂分析的主要手段，也遇到 越来越多的挑战。伴随制程发展的需求，ICP-MS 仪器，也在一步步的提升自己的性能，拓展应用领域，以满足日益严苛的检测需求。

With the development of the semiconductor processes, the types and requirements of materials continue to improve. ICP-MS, as the main means of metal impurity analysis in semiconductor industry, also meets more and more challenges. With the needs of semiconductor processes development, ICP-MS instruments are also improving their performance step by step and expanding their application fields to meet the increasingly demanding testing needs.

关键字 ICP-MS，金属杂质，材料

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流形式：报告

半导体材料中硼掺杂的高精度中子深度剖面分析

肖才锦*
中国原子能科学研究院

中子深度剖面分析技术（neutron depth profiling, NDP）是一种高精度、高分辨率的无损分析技术，且分析不受基体影响，在半导体、高温合金、固态电池等领域有重要应用 1,2。依托中国先进研究堆建立了一套中子深度剖面分析系统（图 1），样品测量位置中子注量率达到 10^9 $cm^{-2}·s^{-1}$。依托于 NDP 系统，测试了硼磷玻璃（BPSG）样品、离子注入半导体硅样品，获得了 SiO_2 和 Si 基体材料中硼的浓度和深度分布。测试结果表明，硼浓度的标准不确定度小于 2%，深度分布的分辨率小于 10nm。

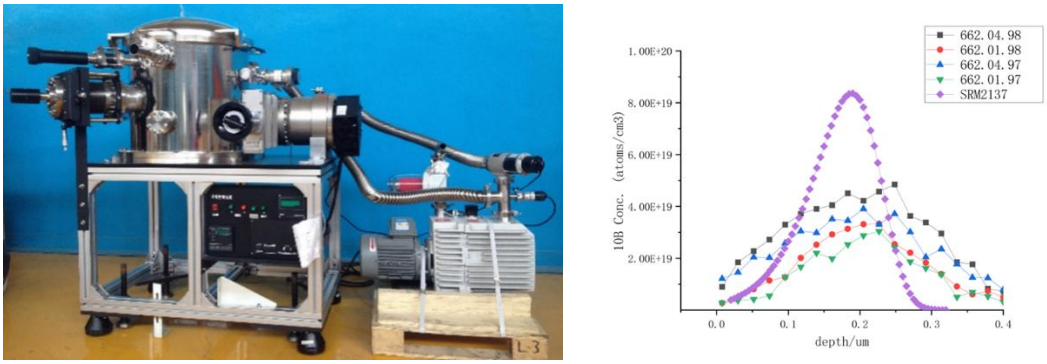


图 1 CARR NDP 装置图及部分样品测试结果

关键字 半导体，硼掺杂，中子深度剖面分析

参考文献

1. Chanjuan, Tang, Caijin Xiao*， et al. ， Neutron depth profiling system at CARR，Applied Radiation and Isotopes *148* **(2019)**: 102-107.
2. Zhao, Liang, Xiao Caijin*， et al. ， Measurement of nanoscale film thickness using neutron depth profiling technique.，ACS Applied Materials & Interfaces 15.29 (**2023**): 35639-35647.

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流形式：报告

半导体级氢氧化钾中痕量杂质元素的 ICPMS 测定方法

弓振斌[1]、江保龙[1]、陈明辉[2]、苟安明[3]、弓振斌*[1]
1. 厦门大学
2. 厦门芯传微电子技术有限公司
3. 华融化学股份有限公司

高纯化学试剂中痕量杂质的测定是半导体行业经常面对的挑战。低含量杂质元素的准确测定不仅涉及洁净实验室环境、检测仪器的灵敏、稳定，还要针对不同的样品类型选择合适的分析方法。

半导体级氢氧化钾中杂质元素含量一般要低于 10^{-9} 量级。不同工艺过程对杂质元素含量的限值差异较大，如最常用的 G2～G3 级氢氧化钾中杂质元素含量分别低于 1、0.1 ng/L。氢氧化钾中杂质元素测定方法主要有基体稀释法、富集分离法：基体稀释法是通过对样品的大倍数如 10 倍、50 倍，以至 100 倍的稀释，降低基体中高含量钾对 ICPMS 测定结果的影响；富集分离法则是通过使用在线小柱体系实现对高含量钾的去除、同时对待测痕量元素进行洗脱、富集，改变样品进入 ICPMS 测定时的样品基体，这一过程不仅消除了高含量钾对 ICP 中待测元素的电离干扰、提高 ICP 稳定性，还大大改善了测定结果的准确度。

课题组通过对含亚氨基、羧基的高分子配体的选择，实现对半导体级氢氧化钾中痕量待测元素的络合、螯合或键合，将其存在样品溶液中的化学形态进行转换，通过超滤技术，或在线富集技术实现与样品中高含量钾的分离、去除：1）方法一使用超滤技术，截留待测元素形成的高分子配合物，在通过酸解离的方式将待测元素从超滤膜上洗脱，实现高钾盐基体的去除，建立手动模式的脱盐、ICPMS 测定，可满足 G2~G3 级氢氧化钾中杂质的测定。2）方法二则是在方法一的基础上，使用课题组研制的低本底高纯化学试剂传输装置，结合色谱分离技术，将形成的络合物的待测分子进行在线分离，去除样品溶液钾离子的干扰，实现在线分离、富集、脱盐以及 ICPMS 测定等过程。该方法的优点是在线分离、测定，提高测定效率的同时极大避免了实验室环境、操作过程可能带来的污染，可实现 G4 级氢氧化钾中痕量杂质的准确测定。

关键字 半导体级，氢氧化钾，痕量杂质，ICPMS

参考文献

1. H.L. Duan, J.J. Lin, Z.B. Gong, Talanta, **2015**, *143*, 287-293.
2. 段华玲，博士学位论文，厦门大学，**2015**.
3. 林继军，博士学位论文，厦门大学，**2013**.

分会场：40. 半导体材料分析技术与仪器
交流类型：报告

离子色谱技术在电子化学品行业的应用

李青、汪正*
中国科学院上海硅酸盐研究所

离子色谱技术可分析无机阴离子、无机阳离子、有机阴离子、有机阳离子、天然有机物和生物物质等，因具备分析速度快、灵敏度高等优势已被广泛应用于食品医药、环境、生物制药、化工等，可以说离子色谱几乎可以用于所有学科领域。

在半导体制造行业中，需要用到大量各类湿电子化学品，包括酸性、碱性及溶剂类试剂。由于半导体制造对于杂质控制的极高要求，样品纯度通常要求 99.999%以上甚至更高，意味着各种杂质含量，如金属离子/无机盐/有机物等，都要控制在极低的含量范围内，通常为 ppb 或更低含量级别，这给分析带来很大的挑战。

针对电子化学品的分析需求和难点，开展了多种离子色谱分析方法。针对超纯水杂质含量低，通过预浓缩将大量超纯水杂质进行富集，实现 ppt 级别的定量分析。针对二氧化碳气体的杂质分析容易受到碳酸的干扰而波动的难题，通过样品先经过前处理装置（去除二氧化碳）后再预浓缩，实现 ppb 级阴离子杂质的测定。针对有机溶剂的分析受基体干扰且损害色谱柱，通过基体去除把阴离子和阳离子预浓缩，同时去除掉含有非解离的物质，反离子或有机物，从而实现痕量杂质阴离子的测定。

除常规离子色谱，通过燃烧炉离子色谱新技术，还可实现有机固体样品中 ppb 级阴离子的测定。

关键字 离子色谱，电子化学品，燃烧炉离子色谱

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流类型：报告

半导体材料中超痕量杂质检测技术研究与进展

李春华*
上海市计量测试技术研究院

本文介绍了半导体材料的 8 种分会场：衬底材料、光刻材料、电子气体、光掩材料、湿电子化学品、溅射靶材、抛光材料、专用辅料。针对不同材料阐述了基于电感耦合等离子体质谱技术的痕量阳离子分析方法和基于离子色谱技术的痕量阴离子分析方法，以及配套的前处理技术装置，重点介绍了检测过程中的技术要点和实践经验。此外，介绍了半导体产业的检测技术发展方向和未来趋势。

关键字 半导体材料，痕量杂质，检测，ICPMS，IC

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流类型：报告

应用 GEDICPMS 技术直接进样测试电子特气金属污染

陈登云*
北京清合智测科技有限公司

半导体器件极易受到多种污染物的损害，污染是可能将芯片生产扼杀在摇篮里的首要原因之一。这些污染物可以归纳为四类：颗粒物（金属氧化物为主）,金属（在电子特气中即纳米颗粒物）,有机化学物质与原生氧化物及化学氧化物；其中纳米颗粒物和金属杂质等污染沾污是最重要的污染因素，是造成 IC 生产良率下降的最主要因素。随着 IC 制程发展到单个纳米尺度，对于电子特气中金属污染水平控制也相应的达到亚 ppbw 甚至亚 pptw 级别，采用传统的金属污染检测方法，包含国标方法，即使是使用最灵敏的 ICPMSMS 技术也无法达到相关要求的检测极限。

本研究采用了最新的 GEDICPMS 进样技术 1，直接进样分析了 PN_2， PO_2， 压缩空气，氨气等不同的半导体行业常用电子特气，获得不同类型电子特气里金属颗粒物污染特征。同时，方法探索了直接进样方法的检测限，达到 fg/L（或 ppqw）量级，满足当前电子特气检测的需求。

关键字 GED，ICPMS，电子特气，金属，颗粒物污染，半导体

参考文献

1. K. Suzuki, K. Nishiguchi, K. Kawabata, etc. IAS Inc & Agilent, Agilent Application note Direct Injection Analysis of Metallic Paticles in Semiconductor Gases Using GEDICPMS Chen Dengyun* , Ye Long hui ETI Instrument Co., Ltd.

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流类型：墙报

使用 ICP-MS/MS 测定半导体光刻胶中的超痕量杂质元素

应钰*[1]、曾祥程[1]、宋娟娥[1]、Ed McCurdy[2]
1. 安捷伦科技（中国）有限公司
2. 安捷伦科技公司 英国

光刻胶 (PR) 是集成电路制造光刻步骤中使用的关键材料之一，在光刻步骤中，复杂的图案被蚀刻到晶圆表面以构建 IC 电路。光刻使用投射到晶圆表面上的紫外图像来再现电路的每一层所需的特定图案，而 PR 是光刻工艺的关键材料。根据不同的应用领域，印刷电路板 (PCB)、液晶 (LC) 和液晶显示器 (LCD) 以及集成电路 (IC) 会使用不同类型的 PR。本研究分析了主要用于 IC 制造过程纯度要求非常高的 IC PR。

在光刻步骤中，PR 被直接涂覆到晶圆表面上，而构建完整电路中交替的导电层和绝缘层的完整制程可能需要重复数十个光刻步骤。因此，必须严格控制 PR 的纯度，以避免污染晶圆表面。其中，PR 中的金属杂质尤为棘手，它们会影响最终半导体器件的电学性能和可靠性，因此对 PR 中金属杂质的要求也越来越严格。目前，针对 IC PR 中的金属杂质，每种元素的最大可接受含量在 1–10 ppb 范围内，未来将降至 1 ppb 以下。因此，监测 PR 中超痕量的金属元素非常重要，这项工作通常由 PR 供应商和 IC 制造商共同完成。

在本研究中，我们从半导体行业供应商处获得了几种不同的 IC 级光刻胶样品，并使用 Agilent 8900 ICP-MS/MS 分析了其中的 20 种关键痕量元素。将 PR 样品用丙二醇甲醚乙酸酯 (PGMEA) 溶剂简单稀释，使用 PGMEA 制备标准曲线，采用外标法进行定量分析。在 1 小时的样品运行期间重复测量加标浓度为 0.1 ppb 的光刻胶样品，获得了出色的稳定性和回收率。结果表明，Agilent 8900 ICP-MS/MS 量测方法具有优异的稳定性、可靠性和灵敏度。

关键字 光刻胶， ICP-MS/MS，元素分析

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流类型：墙报

阴极荧光成像及光谱采集系统及其在半导体领域的应用

李洋*
北京金竟科技有限责任公司

阴极荧光（CL）是真空中携带一定能量的电子束同物质相互作用而产生的发光现象，它分为相干辐射和非相干辐射。相干辐射分为契伦科夫辐射、衍射辐射、跃迁辐射、等离子体激元（SPP）等；非相干辐射分为半导体带边复合、激子复合、缺陷态复合、4f 电子激发等。阴极荧光成像及光谱采集系统，可以对第三代半导体材料进行 CL 表征及缺陷分析。

CL 成像可以清晰表征第三代半导体如 GaN 材料中的位错缺陷，通过计算位错密度，进而可以评价晶圆生长质量。CL 成像具有高分辨本领，能够分辨硅片上转移的纳米柱；除此之外，在保证高分辨成像的同时，CL 还能够进行大面积成像，可以表征正装 Mini LED 样品中位错缺陷的分布与电极的位置。同时，配合单色仪进行单色 CL 成像还可以观察特定波段的 CL 图像。

除了 CL 成像，光谱采集系统还能够在 200-1100 nm 范围内表征半导体材料的 CL 光谱峰位，从而显示出例如 GaN 材料的带边峰、黄光带缺陷峰或者 InGaN 材料的量子阱峰等信息。

光谱采集系统中还搭载了数据采集控制板卡，通过控制电子束逐像素点的光栅式扫描，从而实现 CL 成像和光谱数据的同时采集，即高光谱成像。高光谱成像线扫可以清晰的分辨 DUV LED 材料中量子阱层位置；利用高光谱面扫可以得到 Micro LED 器件的真彩色 CL 图像，这可以显示出蓝光 LED 器件发出的蓝光和黄光带区域发出的黄光，可视化了半导体器件的真实发光情况。

同时，阴极荧光成像及光谱采集系统搭配低温液氦（或液氮）冷台，还可以得到不同温度下的半导体材料光谱峰位的偏移情况。尤其对 AlN、Ga_2O^3、BN 等宽禁带半导体材料适用，利用该系统可以采集到这些间接带隙半导体的深紫外 CL 信号。

综上所述，阴极荧光成像及光谱采集系统在半导体材料生长与表征、光电子器件、功率电子器件、超宽禁带半导体中有重要应用。

关键字 阴极荧光，第三代半导体，光谱，冷台

参考文献

1. Xu W, Li W, Wang Y, et al. Polarized vortex Smith–Purcell radiation with cascaded metasurfaces[J]. Optics Letters, **2024**, *49(7)*: 1840-1843.
2. Brenny B J M. Probing light emission at the nanoscale with cathodoluminescence[M]. Universiteit van Amsterdam [Host], **2016**.

分会场：40.半导体材料分析技术与仪器
交流类型：墙报

基于光电材料转移介导阳极异质结破坏和阴极异质结重组的光燃料电池自供能传感器高灵敏检测 miR-155

雷杨、宋荣斌、李朝辉*
郑州大学

Self-powered photoelectrochemical biosensors (SPECs) have been gaining significant research interest for various substances of bioanalysis. Construction of heterojunction structures is an efficient approach to improve the performance of SPECs for highly detection sensitivity. Herein, we developed different heterojunctions via a photoactive material as transfer medium between photoanode and photocathode respectively to achieve cascade signal amplification in this SPECs. In detail, the photoactive material of TiO_2 was initially introduced to Sb_2S_3/Au photoanode via DNA hybridization to form Z-scheme heterojunction, which enhanced the oxidation performance of the photoanode. In the present of miR-155, the TiO_2 was separated and then connected to the CuO/Cu_2O photocathode to form type-II heterojunction, leading a reduced reduction capacity in the photocathode. Consequently, a cascade signal amplification SPECs could be achieved with a low detection limit of 0.29 fM and range from 1 fM to 10 nM. Besides, the developed SPECs demonstrated favorable selectivity, reproducibility, and stability. Moreover, the lysates of cells and human serums have been applied in the analysis of miR-155, which provided a promising avenue for the determination of bioanalysis in biochemical research.

关键字 光电半导体材料，异质结，级联转移，自供能传感器

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

脑神经分子的活体追踪与空间成像

田阳*
华东师范大学

在活体层面实时准确分析各种化学分子的空间定量分布和结构功能关系对于深入解析大脑的运行原理具有重要意义。作为活体分析的经典方法，电化学技术时空分辨率方面有着显著的优势。然而，复杂的生物环境对传感器的选择性和稳定性提出了挑战，测量过程中施加额外的电压可能会影响脑中神经元放电和电生理信号的采集。另一方面，常见的线缆连接式传感器容易干扰动物的行为而导致信号失真。

针对上述挑战，我们首先提出了双重识别策略，通过合理设计识别分子结合电化学反应电位，实现了活体脑中高选择性生物传感。其次，高稳定性 Au-C≡C 修饰键以及亲水性抗生物污染材料被发展以提高长期稳定性。最后，我们开发了无外加电压的微电极阵列和 SERS 微探针阵列用于实时监测多种离子并记录电生理 LFP（Local field potential）信号。最近，我们也发展了无线电化学微针阵列，实现了对自由移动鼠多脑区化学信号的实时量化追踪。依托于所发展的活体分析新方法，我们系统性研究了可能诱导相干共振的低频电刺激对癫痫的治疗，发现了 2 Hz 刺激频率对癫痫的独特治疗效果，这可能与 Ca2+导致的氧化应激有关。由于该过程涉及离子在多区域的实时变化，我们进一步结合导电光纤及太赫兹光谱技术等，构建针对活体中细胞内外及跨膜过程离子实时动态量化监测平台，实现全脑多分子的空间分布及功能探索。

关键字 脑科学，微电极阵列，电化学分析，表面增强拉曼光谱，活体脑成像

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

含氟纳米探针构筑及活体成像分析

汪乐余*
北京化工大学

^{19}F 磁共振成像(19F-MRI)背景低、穿透深、安全、无毒副作用，适合大型动物尤其是人体的深层组织影像分析，19F-MRI 信号强度随 19F 原子数的增加而增加，因此，增加单个探针中 ^{19}F 数量，是提高 ^{19}F-MRI 信号强度的前提。但增加 ^{19}F 数量时，含 ^{19}F 分子运动性受限，进而降低 ^{19}F-MRI 信号强度。因此，如何在提高 19F 原子数的同时，仍保持含 ^{19}F 分子的运动性，是发展高灵敏 ^{19}F-MRI 的关键。课题组成功构建了系列多功能含氟纳米探针，既可以对肿瘤进行 ^{19}F MRI、CT、荧光、光声成像示踪，同时又可以实现光热治疗（PTT）、化疗及化学动力学治疗。

关键字 含氟纳米探针，活体成像分析

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

基于 CBT-Cys 点击反应的成像分析

梁高林*
东南大学

分子影像是利用化学手段在分子与细胞层面对生物过程的一个成像分析。在一次成功的分子影像所包含的 6 个步骤中，信号放大策略是分子影像的关键科学问题之一，也是我们课题组的研究方向。本研究把 CBT-Cys 点击反应和分子影像结合起来，利用该点击反应能够放大成像信号的特点，实现了对几种生物标志物高表达的重要疾病（肿瘤、凋亡等）的高灵敏生物成像分析。本报告将介绍几例基于 CBT-Cys 点击反应设计小分子（或纳米）探针，实现肿瘤部位信号增强的光声、磁共振、CT 和荧光等成像分析。

关键字 点击反应，成像分析

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

PM2.5 中的关键毒性组分的精准识别与溯源

刘倩*
中国科学院生态环境研究中心

PM2.5 对人体健康危害极大，其中超细颗粒物（UFPs）的健康危害尤为重要。评价 UFPs 的毒理效应的关键在于正确认识 UFPs 在环境条件下的赋存和物化形态转化及其生物效应。质谱技术为复杂介质中 UFPs 的定量与表征提供了一个强大的平台。基于无标记质谱技术，可以获取复杂环境及生物介质中的 UFPs 的多维化学信息，包括化学组成、晶体结构、微观形态、尺寸分布、稳定同位素组成等，这些信息可以视作 UFPs 的多维化学指纹，可以指征环境和人体中 UFPs 的来源和成因。目前，多维化学指纹分析技术已被用于定量、表征和溯源环境中多种 UFPs 组分（黑碳、磁性颗粒等），并已被应用于多种复杂环境介质分析中（水、大气、动物、植物、人体等）。

关键字 PM2.5，毒性组分，指纹，溯源，识别

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

空间转录组测序仪器及应用

杨朝勇*
厦门大学

生命体是由细胞构成的复杂三维结构，细胞的三维排布决定了生物组织的功能和命运。解析组织中细胞的三维分布信息对于深入理解生命的发展、器官的运行机制以及疾病的发展至关重要。空间组学技术利用成像、质谱或测序等手段，在空间维度揭示组织样本中细胞、核酸、蛋白质、多糖以及代谢物等分子的位置和丰度信息，从而回答了“是什么、有多少、在哪里以及何时发生”等关键问题，从而大大促进了我们对复杂多细胞系统的理解、病理学的检测、药理学的研究和精准医疗的实践。本报告将着重介绍本课题组围绕空间组学测序高灵敏度、高分辨率、多组织类型兼容的需求，近年来所发展的空间组学测序仪器、芯片、方法以及在胚胎发育、疾病机制研究及病理诊断应用进展。

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

细胞器形态超分辨图像与药物筛选

徐兆超*
中国科学院大连化学物理研究所

面对突发传染病和重大疾病等全球健康挑战，快速、高效、精准的药物筛选日益迫切。药物与靶点作用引起的纳米尺度上的细胞器形态特征性变化可作为药物筛选的依据，但此形态变化是动态和千变万化，如何在纳米尺度以指纹图谱的方式识别出细胞器形态特征是关键挑战。超分辨荧光成像突破衍射极限，能够精准、原位可视化细胞器纳米尺度下的形态变化以及细胞分子网络。通过细胞器超分辨成像与图像智能识别上的结合，发展细胞器超分辨图像组学技术，开发匀质闪烁荧光探针实现多种细胞器的超分辨成像，建立细胞器形态超分辨成像图像库，基于图像识别和人工智能识别药物作用下不同细胞器的特征形态，可望用于药物筛选。

关键字 超分辨成像，图像组学，荧光探针，药物筛选

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

光谱分析专用仪器设备的研制和开发

宋大千*
吉林大学

光谱分析技术目前在材料科学、环境监测、食品安全、医药分析等多个领域得到了广泛应用，是现代科学研究和工业检测中不可或缺的重要手段。然而，现有的商品化光谱分析仪器往往存在集成度高、封闭性强、定制化程度低等问题，难以满足不断变化的研究需求和教学需求。因此，光谱分析专用仪器的研制与开发具有重要意义，这不仅有助于提升分析检测的灵敏度和准确度，还能够促进教育实践，推动分析化学领域的技术创新与人才培养。

针对现有的油品分析光谱仪采用低压交流电弧激发源，激发温度较低，难以实现痕量分析等问题。我们开发了采用微波耦合等离子体（MCP）激发源的油品分析光谱仪，显著提高了分析灵敏度和元素覆盖范围，能够实现对油品中微量和痕量元素的检测。MCP 激发源具有更高的电子温度和更宽的线性范围，能够满足油品品质监测的高精度需求。采用旋转圆盘送样方式结合罗兰圆色散光学系统，使样品无需预处理即可实现多种元素的直接分析，具备高稳定性和精确性。通过改进 MCP 光源的气流路数和谐振腔特性，进一步提升了炬焰温度和系统稳定性，以满足快速测量的需求。通过新开发的仪器控制软件，优化了进样方式和检测条件，建立了油品中多元素同时检测的方法。

为了提高学生在实验教学中的参与度和动手能力，开发了具有高灵活性和模块化特征的光谱分析仪器，以解决传统商品化仪器设备集成度过高、封闭性强的问题。自组装紫外可见吸收光谱仪使学生能够动手搭建和调试仪器，深入了解仪器内部结构和工作原理，从而体验仪器的功能与应用，培养其分析和解决问题的能力。此外，便携式激光拉曼光谱仪的研制，引入了表面增强拉曼散射（SERS）技术，可用于检测食品中的违法添加物，进一步丰富了基础实验教学内容。为了使学生深入理解光谱分析仪器的组成和测试原理，还开展了对废弃的大型 ICP-AES 光谱仪的拆解实验课程，激发了学生的学习兴趣。

上述光谱分析专用仪器的研究在油品检测的灵敏度和效率上取得了重要进展，不仅提升了油品分析的精确性和可靠性，还显著缩短了检测时间，提高了检测的自动化水平和稳定性。同时，自组装光谱仪器的应用显著提高了学生的动手能力和实验参与度，使得学生在实验教学过程中不再是被动的观察者，而是通过实践成为知识的创造者和应用者。这种以研究促教学的方式，不仅增强了学生对分析化学的理解和兴趣，还培养了他们的科研能力和创新意识。

关键字 光谱分析，仪器开发，油品分析光谱仪，自组装仪器

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

纳米限域策略结合表面增强红外光谱研究界面水的结构与解离

姜秀娥*
中科院长春应化所

水为绝大多数生物、物理和化学过程提供溶剂化环境，并在某些情况下作为催化剂或反应物间接/直接参与反应。然而，界面水的氢键网络如何受偏置电位和电解质阳离子的双重调节，以及对电催化反应的影响仍不清晰。氢析出反应(HER)是一种典型的以水为反应物或介质的模型反应，由于水在各种结构之间的耦合作用以及其作为反应物和溶剂分子的双重作用，使得长期以来一致无法准确探测界面水的结构和功能，这极大地限制了对氢析出反应的全面认识。我们将纳米限域策略和表面增强红外光谱结合，揭示了离子-水局部相互作用和氢键网络连通性之间的协同作用主导最佳的水解离和电荷传输，从而实现最高的氢析出反应活性。

关键字 表面增强红外光谱，界面水，氢析出反应，限域策略

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

摩擦起电:新化学反应驱动力

张新星*
南开大学

“丝绸摩擦过的玻璃棒带正电,毛皮摩擦过的橡胶棒带负电。”中学课本总是在物理的层面介绍摩擦起电这一无处不在的自然现象。然而，由于化学反应本质是电子的流动，摩擦既然起了电，那么摩擦起电必然伴随着化学反应的发生。因此我们提出两个关键科学问题：摩擦起电时有什么化学反应发生？摩擦起电可以促进什么新化学反应，其驱动力是什么？

在本报告中，我们利用质谱技术研究了撕透明胶带过程中伴随的摩擦起电现象，以及其中涉及到的自由基过程，并且研究了撕开胶带两侧产生的 10E9 V/m 极高电场可以促进的化学反应类型，并利用该电场作为驱动力，促成了几种在常规条件下难以发生的化学反应。由此我们得到了如下结论：摩擦起电时水和一些物种可能因为电子的轰击被电离成自由基，而摩擦起电可以促进有电子转移和偶极变化的反应其驱动力是自发产生的 10 的 9 次方伏每米数量级的极高电场。

关键字 摩擦起电，电场，质谱分析

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：报告

可穿戴体液电子器件

周明*
东北师范大学

可穿戴体液电子器件作为一项前沿技术在医疗保健和个性化监测领域展现出巨大潜力。这些设备能够实时分析汗液、泪液、唾液等液体，提供了无创和持续的健康监测解决方案。将可穿戴与体液相结合，我们构建了全集成可穿戴体液电子器件，用于可穿戴体液分子监测和可穿戴体液发电。

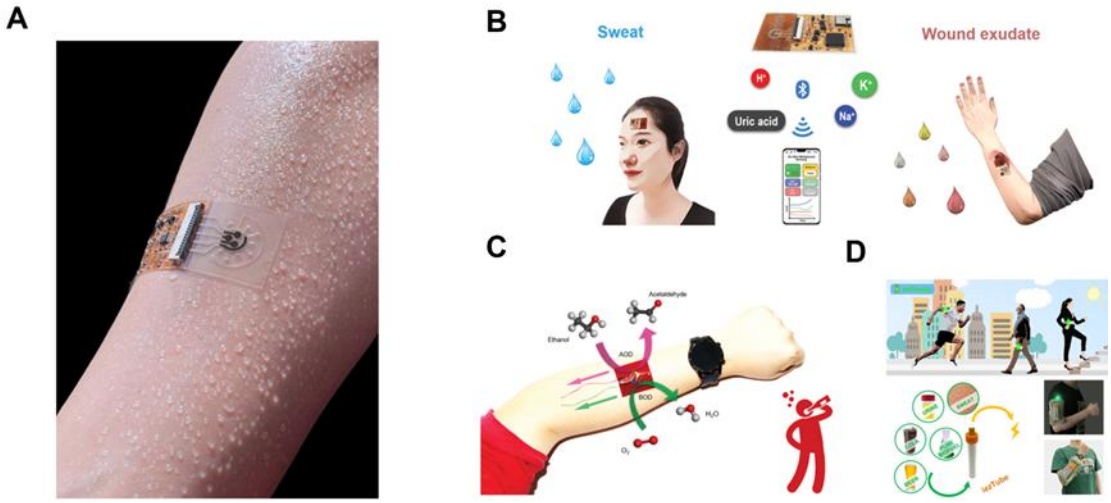


表 1 课题组近期在全集成可穿戴汗液传感器领域发表的部分工作示意图。[1-4]

关键字 可穿戴，体液，电子器件

参考文献

1. Y. Bi, M. Sun, J. Wang, Z. Zhu, J. Bai, M. Y. Emran, A. Kotb, X. Bo and M. Zhou, Anal. Chem., 2023, 95, 6690-6699.
2. X. Pei, M. Sun, J. Wang, J. Bai, X. Bo and M. Zhou, Small, 2022, 18, 2205061.
3. M. Sun, Y. Gu, X. Pei, J. Wang, J. Liu, C. Ma, J. Bai, and M. Zhou, Nano Energy, 2021, 86, 106061.
4. J. Wang, M. Sun, X. Pei, L. Zheng, C. Ma, J. Liu, M. Cao, J. Bai, and M. Zhou, Adv. Funct. Mater., 2022, 32, 2209697.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

3D 打印技术在分析仪器及其核心零部件研制中的应用

王丁一*、胡立刚、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

3D 打印技术具有设计制造自由度高、能够实现复杂结构一体成型以及迭代周期短等特点，非常适合用于个性化分析仪器及其核心零部件的研制。为此，本研究利用 3D 打印技术围绕质谱分析器件的研制开展了系列创新性研究工作，并建立了基于计算机模拟辅助设计、3D 打印精确制造以及快速实验测试的分析器件研制新工艺。

研究首先研制了一套用于非均一样品高效分析的电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）进样系统。进样系统是决定 ICP-MS 分析性能的关键，然而，现有 ICP-MS 进样系统的传输效率较低，不适合用于离散、非均一样品的高效分析。本研究设计了一种全耗型单通道进样雾化室，并基于单个颗粒在雾化室内的传输轨迹对雾化室的结构进行了理论模拟和优化。随后，利用多种 3D 打印技术在实验室内实现了该雾化室的精确加工制造。之后，以纳米金颗粒为代表，通过实际实验对整个进样系统的工作参数进行了优化和测试，与传统进样系统相比，本研究研制的进样系统能够在低样品进样速率的条件下，将样品传输效率提高到 60%，并实现不同粒径单颗粒样品的高灵敏分析。

此外，研究还研制了基于凝胶电泳与 ICP-MS 联用的金属蛋白分析系统及相关组件[1]。结合 3D 打印技术设计并实现了柱状凝胶电泳装置及其电泳槽、洗脱接口和凝胶管等核心模块的精确加工制造。该装置既可离线对蛋白进行快速高效分离，也可以通过设计的洗脱接口与 ICP-MS 联用，对细菌以及细胞等生物样品中的金属蛋白进行高效分离和实时在线分析，整个系统的死体积只有 2.49 μL，研究使用该联用系统分别对蛋白标准品和大鼠血浆样品中汞结合蛋白进行了检测，成功从血浆样品中检测出 7 种汞结合蛋白，表明该装置具有良好的分析性能，能够为金属组学、金属蛋白质组学等研究提供强有力的技术支撑。

关键字 3D 打印，ICP 质谱，进样系统，单颗粒分析，金属蛋白

参考文献

1. D. Wang, B. He, X. Yan, Q. Nong, C. Wang, J. Jiang, L. Hu*, G. Jiang, Talanta, 2019, 197, 145-150.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

新型纳米酶递送系统的构建及其生物活性评价研究

艾永建、梁琼麟*
清华大学

纳米酶作为一个前沿研究方向正处于快速发展阶段。尽管纳米酶具有很好的发展前景，但关于纳米酶还有大量的研究工作亟待探索[1-2]。例如：纳米酶的催化效率偏低，纳米酶的类酶活性种类有限，纳米酶的制备方法有限，纳米酶催化机理、生物与药物效应评估，以上问题都严重限制了纳米酶的发展和应用。设计在复杂生理条件下具有高效、靶向及稳定等特性的纳米酶并分析评价其对肿瘤、炎症和缺血再灌注损伤等疾病的治疗效果与内在机制具有重要的研究价值。基于以上问题，我们设计了一系列的新型纳米酶，开发了纳米酶制备新方法，构筑了高活性、多酶活性和具有良好生物相容性的纳米酶；深入探索了纳米酶药物对肿瘤、炎症和缺血再灌注损伤等疾病的治疗效果，分析评价了纳米酶药物的药理学和毒理学性质；探究了纳米酶药物在肿瘤、炎症和缺血再灌注损伤等不同疾病的治疗效果与作用机制[3-5]。相关研究工作有望为纳米酶的可控构筑提供新方法，为纳米酶治疗疾病提供新方案，为纳米酶药物分析评价提供新模式。

关键字 纳米酶，药物分析，递送系统，生物医药，疾病治疗

参考文献

[1] Ai, YJ.; He, MQ.; Liang, QL. et al. Adv. Mater. 2023, 35, 2302335.
[2] He, MQ.; Ai, YJ.; Liang, QL. et al. Adv. Mater. 2023, 35, 2211915.
[3] Ai, YJ.; Hu, ZN.; Liang, QL. et al. Adv. Funct. Mater. 2022, 32, 2110432.
[4] Ai, YJ.; Sun, H.; Liang, QL. et al. Adv. Funct. Mater. 2021, 31, 2103581.
[5] Ai, YJ.; Hu, ZN.; Liang, QL. et al. Adv. Sci. 2019, 6, 1802132.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

蒙烯玻璃纤维织物的电学表征方法

谢关才*
北京石墨烯研究院

蒙烯玻璃纤维织物作为一种导电织物，在电加热、电磁屏蔽、抗静电和传感器 等领域表现出较强的应用潜力和市场前景。蒙烯玻璃纤维织物的电学性能对其应用场景起着决定性的作用，其中表面电阻率(也被称为薄层电阻或面电阻)是最直接、最重要的电学性能参数，被普遍用于评估导电织物的电学性能。对于常用的四探针测试方法，由于织物具有一定的孔隙和柔性，探针的测试位置或微小压力变化即可能导致其电阻测量结果的显著差异，不能保证测试数据具有一定的准确度和重复性。本研究通过优化传统四探针测试探头的探头形状、探头尺寸和探针形状等参数，解决了探针压力变化对测试结果影响的关键问题，保证了测试数据较好的准确性和重复性。而且该测试探头与当前的四探针测试设备兼容性好，具有很好的可操作性和经济合理性，对于导电织物电学性质的测量和标准化具有重要意义。

关键字 石墨烯，导电织物，面电阻，表征

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

基于核酸电路的生物传感与信息编码策略

高中锋*
济南大学

传统信息加密与传输主要依赖于数学算法和电子设备。然而，这些传统方法也存在一些缺点。首先，随着计算能力的提高，尤其是量子计算机的发展，传统加密算法的安全性受到挑战。其次，传统加密方法依赖于电子设备和网络，这使得它们容易受到硬件故障、网络攻击和物理破坏的影响。此外，随着数据量的爆炸性增长，传统存储介质的容量和寿命可能不足以满足长期存储的需求。在这样的背景下，利用生物分子，尤其是核酸，作为信息加密与传输载体的重要性日益凸显 [1,2]。基于核酸电路的生物传感与信息编码策略因其具有编程性强、操控性好、并行性高等优点而备受关注。开发能够在复杂生物环境中执行特定任务的功能核酸电路仍面临复杂体系痕量响应、背景信号噪声干扰、生物信息数字转换等三类重要挑战。针对以上挑战，本研究致力于设计和构建功能核酸电路精准分析方法，构筑了核酸传感电路及布尔逻辑树，发展了核酸非对称编码策略和迪菲-赫尔曼秘钥交换策略用于信息高安全性传输。通过解析所内涵的关键科学问题，提出了一系列解决方案，发展了一套功能核酸电路精准分析方法，实现了复杂体系传感检测。该方法体现了核酸分子具有的独特物理和化学特性，使其成为信息存储和传输的有力候选者。核酸分子的多样性和复杂性为设计难以破解的加密系统提供了可能。与传统的数学算法相比，基于核酸响应性电路的加密方法更难被破解，因为它们不依赖于容易受到量子计算攻击的数学问题。此外，核酸分子的合成和测序技术的进步，使得我们可以精确地设计和读取核酸序列，从而实现高效的信息加密和解密。

关键字 核酸，逻辑电路，传感分析，信息加密

参考文献

1. Lai, X., Lu, M., Qin, L., Han, J., Fang, X. Asymmetric encryption and signature method with DNA technology. Science China Information Sciences, 2010, 53, 506-514.
2. Zheng, L. L., Li, J. Z., Wen, M., Xi, D., Zhu, Y., Wei, Q., Zhang, X-.B. Ke, G. Xia, F., Gao, Z. F. Enthalpy and entropy synergistic regulation–based programmable DNA motifs for biosensing and information encryption. Science Advances, 2023, 9, eadf5868.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

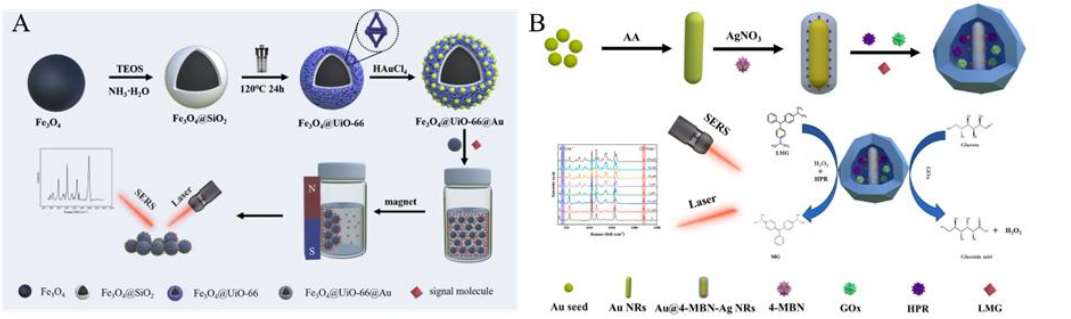
基于 MOFs 材料 SERS 传感器的构建及分析检测

孙岩*
德州学院

表面增强拉曼散射（SERS）因其无创检测能力和独特的指纹效应、无需样品预处理、优异的灵敏度、实时检测等优点，已被广泛地应用于各类分析检测中。但是以贵金属（如金和银）纳米材料为增强基底的表面增强拉曼光谱分析技术，存在吸附分子的性能不佳、易于聚集等缺点，这就导致其用于分析检测的特异性和稳定性较差。鉴于此，我们将具有大的空隙率和比表面积、特殊的拓扑结构、丰富活性位点、易于调节孔径的金属-有机框架（Metal-Organic Frameworks）与贵金属纳米材料相结合设计、合成相应的 SERS 基底材料用于分析物的检测。

我们将 Ag NPs 装饰在磁性金属有机框架（Fe3O4@UiO-66-NH2）表面，制备了一种新型 SERS 基底材料（Fe3O4@UiO-66-NH2@Au）。制备的 SERS 衬底结合了 Ag NPs 之间丰富的热点和 UiO-66-NH2 优异的吸附性能。同时，在外部磁场的作用下 Fe3O4 有助于快速分离，并减弱咖啡环效应，实现了果汁中噻苯达唑（TBZ）的快速，准确，稳定的检测 [1]。

为了获得更稳定、可重现的 SERS 信号，我们基于 MOFs 材料设计了比率 SERS 传感器。在这项工作中，我们将 4-巯基丁腈(4-MBN)封装在 Au@Ag NRs 中作为内标(IS)，并将其与隐色孔雀石绿 (LMG)、葡萄糖氧化酶(GOx)、辣根将过氧化物酶(HPR)包裹在 ZIF-8 中，制备串联酶催化比率 SERS 传感器 Au@4-MBN@Ag@LMG@ ZIF-8(GOx, HPR)，用于唾液中葡萄糖的检测。实验结果表明，我们所构建的检测方法具有线性范围宽（0.1 ~ 100 μM）、检测限低（0.03 μM）及特异性高等优点。这项工作提供了一种新的酶催化 SERS 传感器的设计策略 [2]。同时，我们利用磷酸盐对 ZIF-8 的分解与具有稳定内标信号的 Au@PATP@Ag NRs，设计了一种具有灵敏度高、选择性好和稳定性好的磷酸盐 SERS 传感器(Au@PATP@Ag@ZIF-8)3。



关键字 表面增强拉曼光谱，金属有机框架，拉曼光谱，SERS 传感器

参考文献

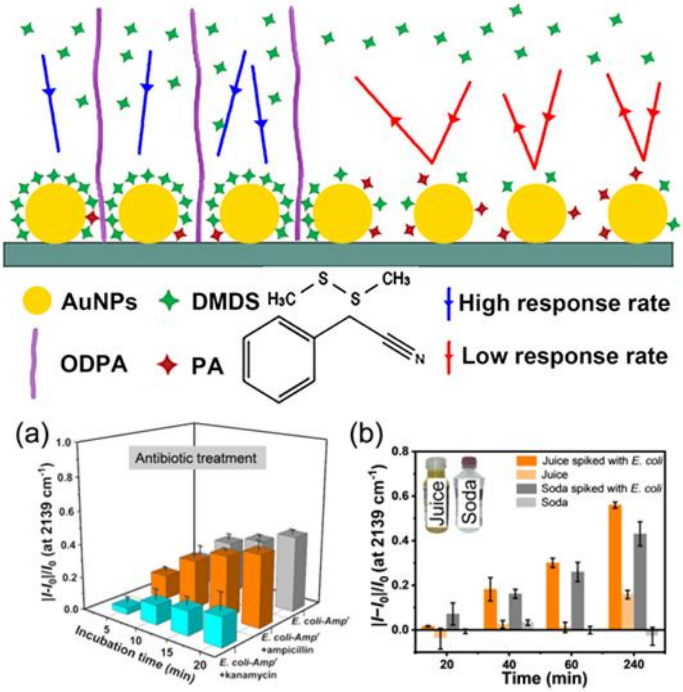
1. Y. Sun, X. X. Yu, J. Y. Hu, X. M. Zhuang, J.J Wang, H. X. Qiu, H. T. Ren, S.H. Zhang, Y. S. Zhang, Y. J. Hu, ACS Sustainable Chem. Eng. 2022, 10, 8400-8410.
2. Y. Sun, Y. S. Zhang, H. T. Ren, H. X. Qiu, S.H. Zhang, L. Qiao, Y. J. Hu, Talanta, 2024, 271, No. 125647.
3. Y. S. Zhang, L. C. Yan, Y. L. Xu, H. T. Re S. Yin, Y. Sun, Y. J. Hu, Food Chemistry (Submit)

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

反应型拉曼纳米探针用于挥发性气体检测

许婧文、李俊翰、宋焱焱*
东北大学

表面增强拉曼散射（SERS）作为一种高灵敏光谱技术，可利用分子的振动指纹识别和量化分析物，已成为一种强有力的分析方法。然而，基体环境中存在的蛋白质、脂类等内源性物质在指纹区（<1800 cm^{-1}）存在大量拉曼峰，这些峰通常存在信号重叠，产生背景干扰。我选择能够在静默区（1800−2800 cm^{-1}）产生信号的探针分子，并设计反应型拉曼探针提高基底对目标物的选择性，能够实现对低浓度目标物的高灵敏、快速识别。



关键字 拉曼，挥发性有机物，反应型探针

参考文献

1. J. Kelly, R. Patrick, S. Patrick, S. E. J. Bell, Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 15686 –15690.
2. J. Xu, J. Li, X. Liu, X. Hu, H. Zhou, Z. Gao, J. Xu, Y.-Y. Song, Chem. Sci., 2024, 15, 7308-7315.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

基于等温核酸信号放大的活细胞内 miRNA 高对比成像分析

周倩漾[1]、孙蒙旭[1]、黄婷[1]、彭晶[1]、刘思敏[1]、陈俊*[1]、戴宗[2]
1. 南方医科大学
2. 中山大学

基于活细胞内 miRNA 成像的肿瘤细胞特异识别对肿瘤的早期诊疗具有重要意义。等温核酸信号放大由于操作简单且灵敏度高被广泛用于 miRNA 分析。活细胞内 miRNA 具有丰度低、序列短及同源性高的特点。同时，正常细胞与肿瘤细胞内 miRNA 的差异低。因此，基于基于活细胞内 miRNA 成像的肿瘤细胞特异识别仍然存在挑战。通过改善等温核酸信号放大技术的扩增模式、提升扩增技术的反应效率和运用内源酶作为驱动力，我们发展了系列新型等温扩增技术，实现了活细胞内 miRNA 高灵敏高对比成像分析，成功实现了肿瘤细胞的特异识别。我们相信发展的基于等温信号放大技术有望在肿瘤的早期诊断和新药开发中发挥重要作用。

关键字 等温核酸信号放大，miRNA，细胞成像

参考文献

1. Q. Zhou, T. Li, X. Li, L. Wei, J. Luo, L. Bai, W. Duan, B. Xie, B. Sun, J. Chen, Z. Dai, J. Chen,* Anal. Chem., 2024, 96, 6774-6783.
2. T. Li, M. Sun, Q. Zhou, P. Liang, T. Huang, M. Guo, B. Xie, C. Li, M. Li, W. Duan, J. Chen, Z. Dai, J. Chen,* Anal. Chem., 2023, 95, 15025-15032.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

微纳结构设计与曾敏机制研究

徐英明*
黑龙江大学

进入 21 世纪以来，人工智能和物联网技术迅猛发展，深刻影响着人类社会的各个方面。传感器作为感知手段，是人工智能和物联网中不可替代的重要组成部分。气体传感器是传感器家族中重要组成部分，被广泛应用于航空、医疗、矿产、食品、汽车、环境、消防、室内空气预警、大气污染控制等领域，监测挥发性有机物、易燃易爆气体、有毒有害气体、湿度、生物体代谢气体等等。针对当前国际上氧化物基敏感材料的组装及其气体传感的研究领域中存在的科学问题，开展了新型氧化物基多级结构纳米材料的组装与气湿敏器件的制备技术方面的研究。敏感材料的结构设计及其敏感机制探究是决定材料敏感性能的关键。因此，从材料结构设计入手，通过形貌调控、晶面调控、缺陷设计及异质结构筑等系统研究材料结构与性能间的关系及影响因素。进而揭示微纳结构设计与敏感机制间的协同关系。

关键字 微纳结构，气体传感，湿度传感，敏感机制

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

基于激光解吸质谱技术的生物小分子分析及疾病诊断新方法研究

马雯*[1]、李先江[2]、刘芬[1]、刘明霞[3]
1. 北京大学
2. 中国计量科学研究院
3. 北京安定医院

内源性生物小分子包括氨基酸、脂质、有机酸、寡糖、小分子肽等参与了生物体内一系列重要的生命活动，并在炎症、退行性疾病、肿瘤等疾病的发生发展中扮演重要的角色。开发针对这些生物小分子的质谱原位分析及成像方法对于医学诊断，临床治疗和预后具有重要意义。基质辅助激光解吸质谱广泛应用于生物大分子的检测，然而传统的有机基质在小于700Da 的低质量范围产生严重的背景干扰，极大限制了其对于小分子，特别是疾病相关生物小分子的检测。为了解决上述问题，我们设计开发了多种纳米或二维层状材料作为激光解吸质谱的基质，如后修饰金属有机骨架材料，功能化金纳米粒及多层 MXene 材料，开发的材料在质谱低质量端背景干扰小，普适性好，实现了脂质、氨基酸、神经递质、药物、寡糖、小分子肽等的高灵敏度检测。其中，麦芽糖后修饰金属有机骨架材料可用于血糖的快速定量，成功区分糖尿病患者和健康人；功能化金纳米粒可直接用于癌和癌旁组织、同一组织不同病理区域以及组织不同微观结构中糖苷的质谱成像研究，有助于揭示各类肿瘤发生发展中糖苷含量的变化，多层 MXene 材料可用于血中天然氨基酸的测定，并发现 3 种氨基酸在重度抑郁症患者中显著下调。该研究为临床快速诊断和标志物筛选提供了新的思路和技术手段。

关键字 激光解吸质谱，纳米材料，MXene 材料，生物分析，疾病诊断

参考文献

1. W. Ma, S. T. Xu, H. W. Liu, Y. Bai, Small Methods, 2019, 1900407.
2. M. A. Hollingsworth, B. J. Swanson, Nat. Rev. Cancer, 2004, 4, 45-60.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

基于 GPC-UV 分析的土壤中聚苯乙烯微塑料简便定量研究

蒋可志*、李慧茹、姜多好、汪嫣、黄国梁
杭州师范大学

微塑料(MPs)已成为一种新型污染物，环境介质中 MPs 的监测已引起了极大关注。聚苯乙烯微塑料(PS-MPs)来源广泛，且结构中带有苯基基团，毒性较大，常作为 MPs 模型化合物来研究其对动物和人类的影响和危害。由于高度复杂的基质，土壤中 PS-MPs 的分析仍然是一项富有挑战性的工作。凝胶渗透色谱是聚合物分析的一项极为重要技术，我们曾采用凝胶渗透色谱-紫外检测(GPC-UV)技术实现聚合物官能团的准确定量[1]。本文采用稀盐酸辅助提取结合 GPC-UV 分析开发出了一种土壤中 PS-MPs 的实用定量方法。通过扫描电子显微镜结合能谱分析，证实了土壤中 MPs 的存在。采用 HCl 稀溶液搅拌，PS-MPs 从土壤中分离出来，通过过滤上清液将 PS-MPs 富集在滤膜上。使用 THF 将其溶解，并对溶液进行 GPC-UV 分析。在提取体系中加入少量 HCl，可加快土壤在水中的沉降，提高 PS-MPs 的提取效率。该提取方法的 AFGEEprer 得分为 0.59，符合绿色分析化学的概念。PS-MPs 的线性范围为 1.0 ~ 100 μg/mL, R2> 0.999；分析重现性好，日内相对标准偏差(RSD, n=3)为 1.36%，日内 RSD (n=3)为 4.78%。土壤样品中 PS-MPs 的浓度为 nd ~ 2.33 μg/g，回收率为 76.7 ~ 100.3%[2]。结果表明，该方法具有准确、快速测定土壤中 PS-MPs 的潜力。

关键字 土壤，微塑料，GPC-UV，定量

参考文献

1. J. Li, H. Li, X. Shao, L. Wu, K. Jiang. Int. J. Adhes. Adhes., 2024,132,103716.
2. H. Li, D. Jiang, Y. Wang, J. Liu, K. Jiang. J. Hazard. Mater.2024,476,135127.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

单细胞代谢物质谱分析

刘沁蕾*
四川大学

在单细胞水平上对细胞代谢物进行精准分析，对解析生命活动的本质具有重要的科学价值。然而，由于细胞内生化反应速度快、代谢物成分复杂、数量少、结构多样且无法标记或扩增，在单细胞水平对代谢物进行检测极其困难。质谱技术以其高灵敏度、无标签和良好的选择性等优点，逐渐发展成为单细胞代谢组学研究的有力工具。我们针对单细胞代谢异质性精准测量这一重要科学问题，开发了适应单细胞分析需求的一系列新型离子化方法与技术，利用高分辨质谱实现了对单细胞中小分子代谢物的高灵敏、高覆盖度和高通量的精准测量，为单细胞质谱分析新方法和新装置的研究提供了技术支持和新的思路。

关键字 质谱，离子源，单细胞分析

参考文献

1. Liu, Q.; Lan, J; Martínez-Jarquín, S; Ge, W; Zenobi, R. Anal. Chem. 2024, 96: 4918.
2. Liu, Q.; Ge, W; Martínez-Jarquín, S; He, Y; Wu,R; Stoffel, M; Zenobi, R. Angew. Chem., Int. Ed. 2023, 135: e202213703.
3. Liu, Q.; Martínez-Jarquín, S; Ge, W; Zenobi, R. Anal. Chem. 2023, 95: 1823.
4. Liu, Q.; Lan, J; Wu, R; Begley, A; Ge, W; Zenobi, R. Anal. Chem. 2022, 94:2873.
5. Liu, Q.; Ge, W; Wang, T; Lan, J; Martínez-Jarquín, S; Wolfrum, C; Stoffel, M; Zenobi, R. Angew. Chem., Int. Ed., 2021, 60: 24534.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

纳流控离子整流器件用于渗透能收集

王琛*
南京师范大学

面对日益增长的能源需求，开发高效、可再生且环境友好的能源解决方案变得尤为关键。渗透能，作为一种利用海水与淡水之间的盐度梯度转换能量的绿色能源，因其环境友好和易于获取的特性而备受关注。在众多渗透能转换技术中，反电渗析（Reverse Electrodialysis，RED）因其高效性而被视为最具潜力的方法，该过程高度依赖于渗透选择性膜。然而，如何在分子水平上精确设计离子通道，提高器件中的离子传输效率，实现更有序、高效的离子传输，仍然存在很大挑战。我们通过在氧化铝膜表面原位生长多孔框架材料，制得纳流控复合膜用于渗透能收集。具有不对称表面电荷或结构的纳流控器件使其具有显著的离子电流整流（Ion Current Rectification，ICR）性质，可有效抑制离子浓差极化（Ion Concentration Polarization，ICP），从而增强离子的渗透性和选择性，显著提高 RED 的能量转换效率。我们的研究明确了 HOF 在促进离子的选择性和快速离子传输中的核心作用，为开发用于渗透能收集的高性能纳流控离子整流膜提供了一种新策略。

关键字 能源转换；渗透能收集；纳流控；离子电流整流

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

生物燃料电池自供能传感

盖盼盼*
青岛农业大学

生物燃料电池自供能传感（BFC-SPB）是电化学分析的重要前沿领域之一，对推动生命科学、环境科学和能源催化等领域的发展具有重要研究意义。BFC-SPB 通过目标物调控电极界面结构和电子传输，改变电池输出信号，实现传感过程。因此，精准调控和设计电极界面结构，研究电化学界面电子转移行为，揭示电子传输机制，是构筑高灵敏、高选择性 BFC-SPB 平台的关键。发展了有机共轭分子介导电子跨膜传递自供能新策略[1]。阳离子型有机共轭分子可直接嵌插细胞膜，电子沿共轭分子链直达膜蛋白，能有效降低电子跨膜能量损耗，提高电子传输效率。异质结光敏层界面结构高效分离电子，增强了电子跨膜转移自供能驱动力。提出的分子嵌膜增强微生物胞外电子传递新机制，为 BFC-SPB 界面电子调控奠定了基础。创建了生物共轭体信号传导自供能传感新方法[2]。利用高特异性 DNA 生物共轭体调控界面结构和电子传输速率，阐明了 DNA 生物共轭体与靶标的竞争识别机制。基于单/双链功能核酸对生物共轭体电子传输和信号传导的差异性，构筑了刺激响应型 BFC-SPB 平台，建立了抗生素残留的简单快速、高灵敏、高选择性传感新方法。

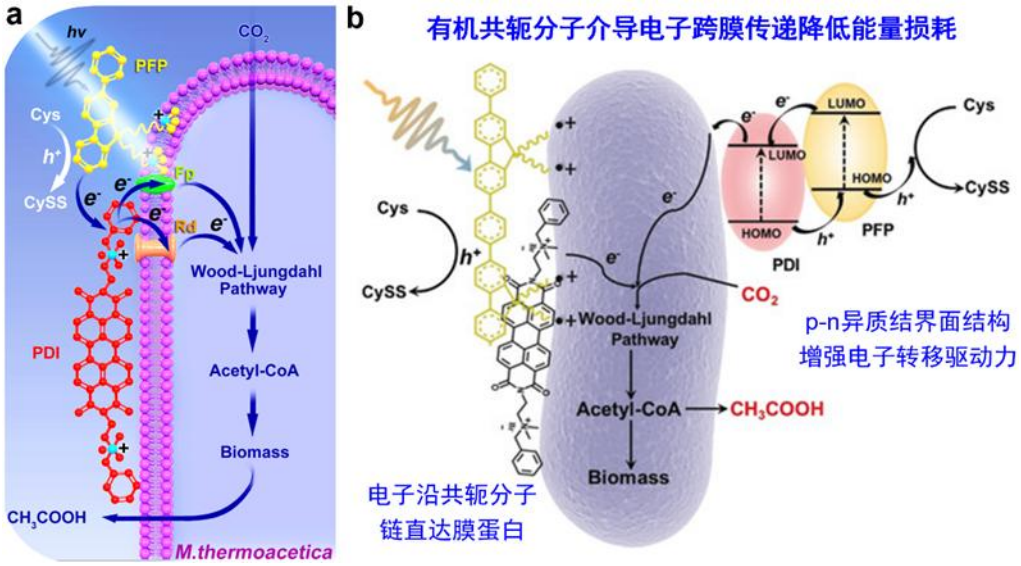


图 1. 有机共轭分子介导微生物电子跨膜传递示意图

关键字 生物燃料电池，自供能传感，界面电子调控

参考文献

1. Gai P, et al. Solar−Powered Organic Semiconductor−Bacteria Biohybrids for CO2 Reduction into Acetic Acid, Angewandte Chemie International Edition, 2020, 59: 7224-7229.
2. Gai P, et al. Ultrasensitive Self-Powered Aptasensor Based on Enzyme Biofuel Cell and DNA Bioconjugate: A Facile and Powerful Tool for Antibiotic Residue Detection, Anal. Chem., 2017, 89:2163-2169

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

灵芝黄嘌呤氧化酶抑制剂（Fr.）的综合分析喀斯特病及其对痛风病的治疗

周阳、李赛男*
长春师范大学

To improve the preparation efficiency of medicinal fungi, new techniques for extraction, biological activity screening, and preparation of xanthine oxidase(XOD) inhibitors from *Ganoderma lucidum*·(Leyss. ex Fr.) Karst (*G. lucidum*) have been established. Based on this, the BP neural network modeling with the response surface method was used to optimize the extraction process of triterpenoid active ingredients in *G. lucidum*. Firstly, XOD inhibitors were rapidly screened using affinity ultrafiltration mass spectrometry. The anti-gout activity of chemical components in *G. lucidum* was verified by network pharmacology and its mechanism of action was discussed. As a result, five potential XOD inhibitors (Ganoderic acid I, Lucidone A, Ganoderic acid A, Ganoderic acid C_2, Lucidenic acid A) the purity is above 90%, it has significant binding affinity to XOD active sites. Secondly, molecular docking and molecular dynamics simulation were used to verify the anti-gout activity of active compounds. At the same time, the mechanism of interaction between XOD and pine *G. lucidum* was analyzed by enzyme kinetic method. The results showed that the IC_{50} values of Ganoderic acid I, Lucidone A, Ganoderic acid A, Ganoderic acid C_2, and Lucidenic acid A on XOD were 16.48 mg/mL, 19.48 mg/mL, 18.36 mg/mL, 24.14 mg/mL, 19.78 mg/mL, respectively. Finally, with activity screening as the guide, high-speed countercurrent chromatography(HSCCC), high performance liquid chromatography(HPLC) were used to separate the active ingredients, and chromatography and mass spectrometry were used to analyze and identify the active ingredients. This study provided valuable insights into the active compounds of *G. lucidum* and their potential gout disease properties. This will provide more opportunities to discover and develop new potential therapeutics from health food resources.

关键字 Ganoderma lucidum·(Leyss. Ex Fr.) Karst; xanthine oxidase; xanthine oxidase inhibitors; BP neural network modeling; chromatography; molecular docking; network pharmacology

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

基于超滤和网络药理学的栀子花乙酰胆碱酯酶抑制剂快速筛选分离方法

刘轩林、李赛男*
长春师范大学

Gardenia jasminoides Ellis is not merely a type of traditional Chinese medicinal herb; it is also among the first batch of medicinal and edible materials issued by China's National Health Commission (formerly known as the Ministry of Health). The aim of this study is to establish a new technology for extraction, biological activity screening and preparation of acetylcholinesterase inhibitors (AChEIs) from Gardenia jasminoides. Firstly, the extraction of G. jasminoides Ellis was investigated using the NSGA-II algorithm, and the extraction variables were optimized to maximize the G. jasminoides Ellis yield. Secondly, AChEIs were rapidly screened using ultrafiltration. Meanwhile, the potential inhibitory effects of the obtained active substances on AChE were verified by network pharmacological analysis. Finally, nine active ingredients were identified by mass spectrometry.

关 键 字 Gardenia jasminoides Ellis; acetylcholinesterase; NSGA-II algorithm; network pharmacology

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

激活型蒽醌光敏染料用于光动力治疗

韩娇娜*、仉华
河南师范大学

光动力疗法(PDT)因其独特的高时空选择性、非侵入性和显著的肿瘤消融特性，有望治疗广泛的癌症。激活型光敏剂可在特定肿瘤标志物或肿瘤微环境下被激活，从而有效规避对正常组织的光损伤，进而提升光动力治疗的精准性。本工作以天然蒽醌单体为母体，通过引入 L-亮氨酸作为亮氨酸氨基肽酶（LAP）识别基团，通过对氨基苯甲醇将两者连接，构建了一例能与 LAP 响应并具有 PDT 治疗效果的光敏染料 HA-Leu。光敏染料 HA-Leu 能特异性识别不同浓度的 LAP 并恢复荧光，检测限为 0.12 U/L，且光照下可以通过I型机制产生超氧阴离子。细胞毒性实验表明光敏染料 HA-Leu 具有可忽略的暗毒性和较好的光毒性，能够有效诱导癌细胞凋亡。综上所述，本工作开发了一例激活型光敏染料 HA-Leu，可通过 PDT 抑制肿瘤生长，且通过探针的荧光变化实现治疗过程的监测。

关键字 激活型光敏染料，亮氨酸氨基肽酶，光动力治疗

参考文献

1. Rongbin Zhong, Renfeng Jiang, Jiayu Zeng, Xiangyang Gong, Xuefeng Yang, Longwei He*, Lin Yuan, and Dan Cheng*. Anal Chem, 2023, 95, 2428-2435.
2. Feiyi Wang*, Sisi Hu, Qi Sun, Qiang Fei, Chao Ma, Cuifen Lu, Junqi Nie, Zuxing Chen, Jun Ren, Guo-Rong Chen, Guichun Yang*, Xiao-Peng He*, Tony D James*. ACS Appl Bio Mater, 2019, 2, 4904-4910.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

天然水体中铵/氨的荧光测定方法的发展

郭晓宸、朱勇*
自然资源部第二海洋研究所

为了进一步了解水生生态系统中氮循环过程的潜在调控机制，了解铵（NH4+）和氨（NH3）的作用至关重要。铵和氨是水生环境中的重要污染物，可引起生态应激，是重要的水质指标之一。铵/氨的精确测定是一个重大挑战，特别是在海水基质中。目前已有多种分析方法，包括离子选择电极、分光光度法、荧光法和基质分离技术，已被用于铵/氨的测定。其中荧光法具有灵敏度高，无需富集处理等优点，已广泛应用于各种水体基质。本文全面概述了使用荧光法测定水体样品中铵/氨的最相关文献，包括用于铵/氨荧光测定方法的发展，荧光分析与分离技术的集成以及在环境水域的现场应用。此外，本文还指出了影响铵/氨荧光测定方法分析性能的关键问题，并就未来的研究方向提出了建议，以提高水生环境中铵/氨测定的准确性。

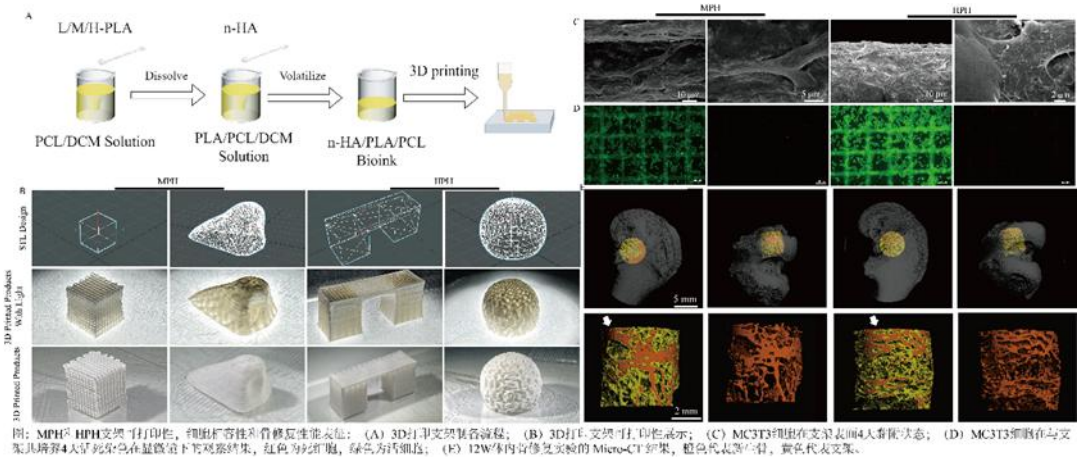
关键字 铵/氨，荧光测定方法，基质分离，流动分析，现场测定

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

PLA/PCL/n-HA 3D 打印浆料及其支架的性能表征

张桓硕、王晨鑫、林明玥、张瑞、邹琴*
四川大学

高能量创伤、骨髓炎和骨肿瘤切除等将会引起无法自行愈合的临界尺寸骨缺损。由于自体骨供骨存在限制，且骨块塑形困难，导致患者预后未达到最佳状态。3D 打印技术是一种先进的数字化快速成型技术。该技术基于预先设计好的模型，采用金属粉末、无机陶瓷或高分子天然化合物等材料，通过逐层叠加的方法，高效地构建出所需的目标结构，进而解决自体骨塑形困难的问题[1]。聚乳酸（Polylactide，PLA）降解产物为乳酸，可被人体自然代谢。但 PLA 作为 3D 打印生物材料的代表，其研究主要集中于熔融沉积成型（Fused Deposition Modeling，FDM）技术[2]。FDM 过程中的高温打印条件会引起 PLA 热降解，导致材料性能下降并导致载入的生物活性因子失活，因而限制其在生物医用领域的应用潜力。本研究围绕上述挑战，依据 3D 打印浆料的打印性能需求，选用低、中、高三种分子量的 PLA，将 PLA/聚己内酯(Polycaprolactone，PCL)/羟基磷灰石(Hydroxylapatite，n-HA) 共混并构建了新型 3D 打印墨水，实现常温 3D 打印。这种墨水具备高结构保真度，可以依据模型的不同，制备复杂结构的支架。同时，支架表现出优异的生物相容性以及体内成骨性能。本研究构建的新型 3D 打印浆料具有制备复杂形状骨修复支架的能力，凸显了 3D 打印定制化形状的优势，为个性化骨修复提供了有潜力的新方案和创新 3D 打印策略。



图：MPH和 HPH支架 3D打印性，细胞相容性和骨修复生能表征：（A）3D打印支架制备流程；（B）3D打印支架 3D打印性能表示；（C）MC3T3细胞在支架表面4天黏附状态；（D）MC3T3细胞在支架上培养4天后死/活在显微镜下荧观察结果，红色为死细胞，绿色为活细胞；（E）12W体内骨修复实验的 Micro-CT 结果，橙色代表新生骨，黄色代表支架。

关键字 PLA 分子量，挤出式 3D 打印，高结构保真度，个性化骨修复

参考文献

1. C. Wang, W. Huang, Y. Zhou, L. He, Z. He, Z. Chen, X. He, S. Tian, J. Liao, B. Lu, Y. Wei, M. Wang, Bioact., 2020, 5, 1, 82-91.
2. S. Bhagia, K. Bornani, R. Agrawal, A. Satlewal, J. Durkovi, R. na , M. Bhagia, C. Geunyoo, X. Zhao, V. Kunc, Y. Pu , S. Ozcan, A. J. Ragauskas, Appl. Mater. Today., 2021, 24, 101078.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型；墙报

微环境激活型磁共振成像探针的构建与应用

李云鹤、李歆玥、郝梦琪、宋尔群*
西南大学

磁共振成像（MRI）是临床上广泛应用于疾病诊断的影像技术，具有组织穿透深、无电离辐射等优点，但存在成像分辨率较低等不足[1-3]。因此，临床上常使用造影剂提高病灶部位与正常组织间的对比度以提高检测灵敏度[4,5]。临床采用 MRI 造影剂的方式可以在一定程度上提高成像对比度，但这种基于“常亮模式”MRI 成像探针的检测灵敏度仍较低，且现有造影剂常缺乏特异性，仍然无法实现疾病精准诊断[6,7]。根据纳米尺度距离依赖的磁共振调谐（MRET）现象和病灶部位特殊微环境如特异性酶等[8]，构建酶激活响应 MRET 成像探针。在正常组织，由于磁共振增强子与猝灭子距离较近，增强子电子自旋波动变慢，导致较低的 T_1 核磁信号，MRET 为“Turn OFF”状态，呈现低背景的暗图像。而在病灶部位，由于酶等微环境特异分子的激活，使得磁共振增强子与猝灭子间距离增大，增强子电子自旋波动加快，产生较高的 T_1 核磁信号，此时 MRET 为“Turn ON”状态，呈现亮图像。这种微环境激活 MRI 探针，通过高信噪比 MRI 成像策略可以实现靶标特异、灵敏分析，在实现活体小尺寸肿瘤成像、致病菌精准检测等方面极具潜力。

关键字 微环境激活，磁共振调谐，探针，原位成像，精准检测

参考文献：

1. R. Geraldes, G. Arrambide, B. Banwell, A. Rovira, R. Cortese, H. Lassmann, et al., Nat. Rev. Neurol., 2024, 20, 620-635.
2. X. Jiang, H. Zhao, O. Saldanha, S. Nebelung, C. Kuhl, I. Amygdalos, et al. Radiology, 2023, 307, e222223.
3. G. Li, L. Li, Y. Li, Z. Qian, F. Wu, Y. He, et al. Brain, 2022, 145, 1151-1161.
4. Y. Ding, X. Ruan, K. Shu, W. Xu, Y. Liu, G. Mo,et al. J. Med. Chem., 2024, 67, 15476-15493.
5. X. Chen, S. Teng, J. Li, X. Qiao, W. Zhao, Z. Xue, et al. Adv. Mater., 2023, 35.
6. H. Zhang, X. Liu, H. Fan, Nano Res., 2023, 16, 12531–12542.
7. C. Yang, K. Chuang, RSC Med. Chem., 2012, 3, 552-565.
8. J. Li, S. Wang, C. Wu, Y. Dai, P. Hou, C. Han, K. Xu, Biosens. Bioelectron., 2016, 86, 1047-1053.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

棉花检验实验室智能化转型的思考与探究

王蕾*
中国纤维质量监测中心

我国是世界上最大的棉花生产和消费国，也是重要的棉花贸易国，棉花在我国国民经济中占有重要地位，是关系国计民生的重要战略物资。据统计，我国棉花年产量约为600万吨，参与棉花种植、生产、加工、流通的人数多达2亿人，在全国范围内形成了大范围的产棉区以及棉花生产加工链，以棉花为原料加工而制成的棉纱、棉布、棉质服装等产品在工业、纺织业、军事国防、医疗卫生以及个人生活等领域都有着广泛应用。

随着棉花质量检验体制改革的不断深入，在“专业仓储 + 在库公检”管理模式下，棉花实现了全面公证检验，为棉花生产加工企业更好地满足市场需求提供可靠的棉花质量数据支撑，为纺织企业更好地配棉、提升经济效益提供有力保障[1]。现阶段随着我国棉花公检实验室的高速发展，面临的主要风险为：一是临聘人员多，检验水平不稳定；二是棉花检验过程中会出现大量粉尘及絮状纤维，影响人员健康；三是检验人工化程度较高，影响检验效率[2]。棉花实验室向自动化、智慧化、数字化领域拓展是一个必然趋势。

棉花检验样品量大，重复性操作高，检验过程单一，是实现自动化良好的先决条件。本研究拟对现有无线射频识别技术（RFID）技术、电阻法回潮率测试技术、微波回潮率测试技术以及机械手技术发展现状、使用场景及模式进行深入探究，以多种技术融合为切入点，为实现棉花样品自动化流转、在线回潮率监测、自动化检验，达成无人化、自动化、智能化棉花检验实验室的终极目标奠定理论基础。

关键字 棉花，棉花实验室，自动化，智能化

参考文献

1. 刘昆东, 陈洁.浅谈棉花检验指标和提升棉花质量的改进措施. 中国棉花加工, 2022(2): 25-27.
2. 甘莉莉, 王娟, 李国峰. 棉花公证检验工作的优化措施探头. 化纤与纺织技术, 2023(52): 69-71.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

检测抗体药物糖基化修饰的新方法

周文*
北京大学分析测试中心

近年来抗体药物蓬勃发展，在癌症、心血管疾病、自身免疫性疾病的治疗中均有优异表现，是生物医药领域中增长最快的一类药物。抗体天然带有蛋白糖基化修饰，其糖基化的种类和修饰水平对抗体的结构、功能、活性、药代动力学等方面均有重要影响。因此，不论是对于原研药还是仿制药，抗体药物的糖基化修饰都是抗体药物的关键质量属性之一。

目前主流的分析方法主要针对抗体的 N-糖基化。O-糖基化的分析由于缺乏特异性酶和高效的质谱表征方法，一直是研究的难点。作者发展了基于质谱组合碎裂方式的分析新方法，可以同时实现对抗体药物的 N-糖基化和 O-糖基化的位点及糖型分析。本文从不同的酶切条件、色谱梯度、质谱碎裂方法（HCD, EThcD, HCD-pd-EThcD 等）和数据处理软件等方面进行了方法优化，并在抗体药物曲妥珠单抗中检测到了 14 种 N-连接糖和 2 种 O-连接糖。预计本方法在抗体药物糖基化修饰的表征中有广泛的应用前景。

关键字 抗体药物，糖基化修饰，质谱，HCD-pd-EThcD

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

便捷式纳米酶光度测量平台的设计及其在磷酸盐快速检测中的应用研究

李欣[1]、邱洪灯[1]、牛湘衡[2]、陈佳*[1]
1. 中国科学院兰州化学物理研究所
2. 华南大学

磷酸盐（Pi）是一种重要的无机盐，广泛应用于食品、农业和化工等领域。然而，磷酸盐过量排放会导致水体富营养化，对生态环境造成严重破坏。因此，磷酸盐浓度是评价水质安全的重要指标之一[1]。当前国内外的磷酸盐检测方法包括比色法、荧光法、离子色谱法和电化学法，尽管这些技术适用于实验室测量，但它们普遍存在成本高、耗时长和需要样品预处理的问题，难以满足现场快速、低成本的检测需求。为此，本研究创新性地提出了一种基于纳米酶催化的磷酸盐光学分析新方法，用于实现水体中磷酸盐的快速、灵敏检测。纳米酶是一类具有类酶活性的纳米材料，因其高稳定性和低成本等优势，在解决天然酶失活和成本高的问题方面具有潜在应用价值[2-4]。本研究设计了一种具备类过氧化物酶活性及磷酸盐识别能力的 $Ce_xZr_{1-x}O_2$ 纳米复合材料。该材料中的 Ce^{4+}/Ce^{3+} 氧化还原对能够在 H_2O_2 的存在下催化 TMB（3,3',5,5'-四甲基联苯胺）的显色反应，同时 Zr^{4+} 能够与磷酸盐形成 Zr—O—P 键，为磷酸盐提供额外的识别位点。研究发现，磷酸盐的吸附显著增强了 $Ce_xZr_{1-x}O_2$ 纳米材料类过氧化物酶催化活性，导致更显著的颜色变化，从而实现高灵敏度和高特异性的磷酸盐检测。此外，本文还开发了一种基于智能手机的便捷光度测量平台，结合 3D 打印技术，用户可以通过智能手机拍照读取信号，实现现场无仪器检测。这一创新设计大大降低了检测成本，提升了检测的灵活性与便捷性，为水质的现场快速检测提供了全新的解决方案。

关键字 磷酸盐，纳米酶类，过氧化物酶活性，比色检测，智能手机

参考文献:

1. Withers, P.; Jarvie, H., Sci., Total Environ., 2008, 400, 379-395.
2. Wu, J.; Wang, X.; Wang, Q.; Lou, Z.; Li, S.; Zhu, Y.; Li Q.; Wei H., Chem. Soc. Rev., 2019. 48(4), 1004-1076.
3. Li, X.; Zhu, H.; Liu, P.; Wang, M.; Pan, J.; Qiu, F.; Ni, L.; Niu, X., TrAC, Trends Anal. Chem., 2021, 143, 116379.
4. Li, X.; Wang, Z.; He, J.; Mashriqi, H.; Chen, J.; Qiu, H., Chem. Sci., 2024, Accepted Manuscript, DIO: 10.1039/D4SC05709K.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

基于小型化二氧化碳传感器校准装置的高效控制条件研究

沈小涵、郑旻辉*
自然资源部第二海洋研究所

针对当前海水二氧化碳传感器的校准方法存在装置体积庞大、校准效率低下等不足，基于水气交换思路自主设计了小型化校准控制装置，对比分析了校准介质、水气交换方式、水气体积比例等因素对校准调节效率和校准环境维持的影响，并探讨了使用氮气进行可预测调节的可行性。结果表明，天然海水因无法达到平衡状态而不适合作为校准介质，自来水、超纯水和人工海水在数据波动情况、达到稳定耗时和最终平衡浓度方面无明显区别，皆可作为校准介质；喷淋和复水方式均可大幅提高水气混合效率，鼓气+喷淋+复水三者共用时的水气混合效率最高；通过减小校准器内水体体积或气体体积，以及在总体积一定时降低水体占比，均可提升水气混合效率；使用氮气基于时长及流速调控进行可预测的水体混合调节具备可行性。论文明确了各参数设置差异对于校准效率和校准环境维持的影响，验证了氮气调控的可预测性，为后续建立完整、高效、自动化的海水二氧化碳传感器校准方案提供了数据支持。

关键字 二氧化碳传感器，水气交换，校准控制条件，校准效率

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

质谱成像用于生物体内氧化还原及代谢异质性的研究

韩静*、聂宗秀
中国科学院化学研究所

生物体内的氧化应激与细胞凋亡，疾病衰老等息息相关[1]。在这些情况下，谷胱甘肽(GSH)和还原性辅酶 NADPH 通过调节氧化还原稳态以抵御氧化应激的伤害 2。与 GSH 和 NADPH 相关的氧化还原系统的调控是疾病治疗的一个重要研究领域[3]。然而，代谢异质环境和复杂的组织结构往往导致治疗效果差和机制不明确，这严重限制了基于氧化应激的治疗的发展[4]。因此，基于成像的空间代谢组学研究显得尤为重要。

质谱成像可以同时给出数百种代谢物的空间分布信息，分辨率可以达到单细胞水平（~10-50 μm）。近些年，基于质谱成像的空间代谢组学方法用于研究多种疾病癌症的关键代谢物组织分布情况，对于探究复杂的生物系统和病理过程具有重要意义[5]。

本项目，建立体内合成金纳米颗粒方法，通过金纳米颗粒的质谱指纹峰信号，指示发生氧化应激的区域，同时结合空间代谢组学方法，对该区域的关键代谢物及相关通路异质性进行研究。实验发现不同细胞，不同细胞亚型的还原能力存在差异性。将离子形态的金递送到小鼠体内，发现在肾组织区域，被还原的金纳米颗粒具有区域异质性，主要分布在肾皮质区域。在注射离子金之后，产生大量差异性代谢物，主要集中在氨基酸代谢和谷胱甘肽代谢通路中。通过质谱成像对谷胱甘肽代谢通路上的分子进行研究，发现谷胱甘肽含量明显上升，主要发生在皮质区域。结合免疫组学和免疫荧光成像，发现谷胱甘肽合成相关酶的表达主要集中在肾皮质区域，说明代谢物的异质性往往与相关酶的表达异质性相关。NADPH 是合成谷胱甘肽中重要的辅酶，通过质谱成像、酶活性研究、相关 mRNA 的表达量综合研究发现，G6PD 和 IDH1 是主要合成 NADPH 的通路。在实体瘤内，同样发现了氧化还原和相关代谢物的分布及含量异质性，并发现氧化应激可以促进肿瘤相关巨噬细胞对实体瘤的浸润，为肿瘤治疗提供新的研究思路。

关键字 质谱成像，氧化应激，空间代谢组学

参考文献

1. M. T. Lin, M. F. Beal, *Nature*, **2006**, 443, 787-795.
2. R. Kandar, *Biomed Chromatogr*, **2016**, 30, 13-28.
3. C. Ji, H. Li, L. Zhang, P. Wang, Y. Lv, Z. Sun, J. Tan, Q. Yuan, W. Tan, *Angew Chem Int Ed Engl*, **2022**, 61, e202200237
4. J. D. Hayes, A. T. Dinkova-Kostova, K. D. Tew, *Cancer Cell*, **2020**, 38, 167-197 (2020).
5. V. Ruiz-Rodado, A. Lita, M. Larion, *Nat Methods*, **2022**, 19, 1048-1063.

分会场：41.分析测试青年论坛
报告类型：墙报

新型多孔碳材料的可控合成及其在环境污染物中的检测

陈晖*
江西农业大学

近年来，MOFs 衍生碳材料引起了研究者的广泛关注。由 MOFs 衍生的功能化多孔碳材料可以有效保留 MOFs 前驱体的多孔结构和超高比表面积的特性，还具有碳材料优异的理化性质如高稳定性、强导电性等，实现“1+1>2”的优势互补；其次，通过 MOFs 前驱体中的异质原子掺杂（如 N、P、S、O 等），可以为多孔碳材料提供更多的吸附位点，使得它们在样品捕获和分离中表现出优异的性能；同时，由于 MOFs 前驱体结构和形貌的多样化，可以有效调控多孔碳材料的孔结构、形貌特征、传质速率等特性[1,2]。因此，通过对 MOFs 前体及煅烧过程的精细化调控，由此衍生放热碳材料在环境污染物检测中表现出巨大的潜力和应用前景。研究主要内容有：

1、以 ZIF-67 为自模板，一步碳化制备了新型磁性氮掺杂碳纳米管笼材料（N-CNTCs）。在碳化过程中，MOFs 中的钴离子被还原为磁性纳米颗粒并封装于碳纳米管内部；含氮有机配体作为碳源及氮源经煅烧后形成了功能化修饰的氮掺杂碳纳米管。同时，通过对煅烧温度的调控设计出独特的碳纳米管缠绕的“笼状”结构。这些特性使得 N-CNTCs 材料具有优异的化学稳定性和磁稳定性、良好的水分散性以及丰富的作用位点。将其作为 MSPE 吸附剂，结合高效液相色谱-串联质谱（HPLC-MS/MS）技术，建立了一个高效的冈田海绵酸（OA）检测方法。研究结果表明，磁性 N-CNTCs 具有优异的理化稳定性和良好的抗干扰能力，可应用于复杂基质生物样本中 OA 的高效富集。

2、通过一步热解策略法，整合了集 CoS 纳米颗粒和金属(Co，Fe)、N 物种于一体的开壁分层多孔碳笼(CoS-CoFe-HSNC)材料。具体而言，在 ZnCo-MOF 上掺杂 CdS 作为热牺牲模板，为 CoS 的形成提供硫源，同时生成了特定的中空介孔结构；再通过双溶剂法引入的 Fe^{3+}，其在热解过程中会触发 Kirkendall 效应，导致封闭壁由封闭转变成开放大孔，同时形成 Fe-N 活性位点。所制备的 CoS-CoFe-HSNC 材料不仅能将多种活性成分牢固地整合在一个单元中，而且提供了多维电子传递途径，促进了活性位点的局部可达性。将其作为电化学传感器件，实现了对多菌灵的高灵敏电化学检测。实验结果表明，开放壁的 CoS-FeCo-HSNC 对 CBZ 具有较低的电化学阻抗和较高的吸附能力，这两方面都赋予了它对 CBZ 优异的传感性能。

关键字 MOFs 衍生，多孔碳材料，环境污染物，分析检测

参考文献

1. Hwang J, Ejsmont A, Freund R, et al. Chemical Society Reviews, 2020, 49(11): 3348-3422.
2. Zheng Y, Wang J, Huang H, et al. Trends in Food Science & Technology, 2024, 147: 104449.

分会场：41.分析测试青年论坛
交流类型：墙报

酶-多孔有机框架材料生物催化剂在环境催化的应用

高瑞*、陈国胜、欧阳钢锋
中山大学

酶催化具有催化能力强，特异性高、反应条件温和等优点，是一种高效、绿色的污染物分析和治理技术。然而，酶的易失活、变性，且重复利用率差等缺陷严重限制了酶在实际环境中的大规模应用。酶固定化是提高酶稳定性最有效的一种方法。由于其物理化学特性可调，比表面积大、孔隙率高，稳定性强等特性，框架材料被认为是固定化酶的理想平台。本文开发了一种微量离子液体介导的水相动态聚合策略，实现一步水相合成高结晶度酶-共价有机框架（COF）生物催化剂。同时，这种绿色的新策略适用于合成多种酶@COF 生物催化剂，COFs 骨架的结晶度媲美溶剂热方法合成的产品。COFs 明确的孔道具有底物筛分功能，赋予封装在内的脂肪酶非天然的酯类水解选择性，拓宽了框架材料在分析领域的应用；同时，高结晶性的 COFs 骨架具有增强的光催化 H_2O_2 原位合成能力，结合光催化和生物催化成功开发了一种自级联的光-酶反应器，其污染物降解效率是低结晶性光-酶反应器的 2.63 倍。这种 COFs 和酶协同理念有望展拓展 COFs 在环境分析和污染治理领域的应用，并为其他酶-共价有机框架的设计提供新思路和方向。

关键字 酶固定化，多孔材料，离子液体，环境分析，污染治理

分会场：42.科技期刊发展论坛
交流形式：报告

打造精品分析化学中文期刊　助力学科发展

杨帆*
中国科学院长春应用化学研究所

《分析化学》杂志于 1972 年创刊，是由中国科学院长春应用化学研究所和中国化学会共同主办、国内外公开发行的专业性学术期刊，主要报道我国分析化学创新性研究成果，反映国内外分析化学学科的前沿和进展。《分析化学》为月刊，设有特约来稿、研究快报、研究报告、评述与进展、仪器装置与实验技术等栏目。为广大读者提供最新的分析化学的理论、方法和研究进展，为分析化学工作者提供国内外最新分析仪器信息，促进学术交流和科技进步，为国家的经济建设服务。《分析化学》为 SCI 收录期刊、中文核心期刊、中国科学引文数据库（CSCD）收录期刊、北大核心期刊、Scopus 收录期刊。

《分析化学》一直坚持以建设高端精品中文学术期刊为目标，始终瞄准学科前沿，在选题和组稿上力求发挥导向作用，以引导分析化学以及相关学科发展，服务我国科学技术领域的发展和国民经济建设，以及培养和扶植专业人才。《分析化学》积极参与策划学科热点和前沿专题的出版，，近五年组织出版的专辑包括脑神经化学分析与成像、核酸适配体筛选与分析应用、青年分析测试、电分析化学与交叉学科新方法、纳米与生物成像分析、便携式生物传感器、分析化学与交叉学科新方法新技术、近/中红外光谱和色谱及联用技术专刊等科技前沿攻关领域。《分析化学》在提高期刊在国内的影响力的同时，也致力于扩大中文科技期刊在国际上的地位。2006 年我刊与 Elsevier 合作出版英文稿，提高了期刊的国际影响力。

《分析化学》近年来获得很多资助和奖项。2016-2018 获“中国最具国际影响力学术期刊”；2019-2023 获“中国国际影响力优秀学术期刊”；2021 件获得“百种中国杰出学术期刊”；2015-2017 年获得中国科协精品科技期刊资助工程-TOP50 项目资助，2018 年获得中国科协中文科技期刊精品建设计划学术引领项目资助。2020-2023 年获得中国科学院科学出版基金中文科技期刊择优支持项目。2021 年 7 月，《分析化学》荣获第五届中国出版政府奖期刊奖提名奖。

关键字 分析化学 精品期刊 中文期刊

分会场：42.科技期刊发展论坛
交流形式：墙报

地质学期刊《岩矿测试》学术影响力提升策略

徐书荣、储彬彬、佟玲、罗立强*
国家地质实验测试中心

近年来我国科技期刊的学术影响力持续提升，在国际学术交流中的地位和作用日益显现，科技期刊已逐步从服务于学者个体学术研究的成果发布和信息获取工具，向支撑国家科技创新的基础性平台转变。着力聚焦国家关键领域和战略方向，吸引一流科技创新成果，加快拓展国际前沿学术阵地，从而有效引导学科建设，促进科技创新，是科技期刊学术影响力的重要发展方向。《岩矿测试》是中国地质学会和国家地质实验测试中心共同主办的自然资源实验测试领域专业学术期刊和科技创新交流平台，在编委会建设、办刊人才发展、组稿、国际传播力等方面多措并举，努力提升学术影响力。

关键字 科技期刊；学术影响力；岩矿测试；人才发展；国际传播力

参考文献

1. N. Li, L Y. Liu, L F. Zhu, et al. Chinese Journal of Scientific and Technical Periodicals, 2023, 34(11): 1435-1442.
2. S. Xu, M. An, X. An. Do scientific publications by editorial board members have shorter publication delays and then higher influence?[J]. Scientometrics, 2021, 126: 6697–6713.
3. M Q. Yang, B L. Xu. Chinese Journal of Scientific and Technical Periodicals, 2020, 31(1): 83-87.
4. Y H. Li, C Q. Peng, L X. Deng, et al. Science-Technology & Publication, 2024(5): 98-104.

分会场：42.科技期刊发展论坛
交流形式：墙报

树脂产业链碳足迹核算

王一飞、师人博、冯仕杰、韩晔华*
中国石油大学（北京）化学工程与环境学院，重质油全国重点实验室，北京，102249

化工行业是碳减排的重点对象之一，采用碳足迹核算能够有效开展各项碳减排工作、促进经济绿色转型。树脂作为化工行业排放 CO_2 的重点产业，对其进行全生命周期的碳足迹核算刻不容缓。树脂产业链上游原料复杂，中游产业分散、产品繁多且下游应用广泛，对其进行全生命周期的碳足迹核算不仅面临着数据收集困难的挑战，还需要解决原料表征因子缺失的难题。本研究根据中国化工情报信息协会于 2023 年公布的《产品碳足迹 产品种类规则》中明确的化工行业十大重点产品类别以及活动水平数据的可得性，选择特种纤维类别中的中复神鹰碳纤维产品进行核算。定义功能单位为 1 kg 的碳纤维，根据生命周期评价方法的四个步骤，按照 ISO 14067：2018 的要求，核算中复神鹰 2018-2020 年间碳纤维产品从“摇篮”到“大门”的碳足迹。从企业公布的《清洁生产环境信息公示》、《公开发行股票招股说明书》和《企业年报》中收集原料和生产阶段的基础数据，依照《中国化工生产企业温室气体排放核算方法与报告指南（试行）》对其进行分类和计算，并通过物料衡算法计算原料在工艺中的排放量，最终得到这三年的碳足迹结果分别为：41.59 $kgCO_2eq$，42.43 $kgCO_2eq$ 和 42.84 $kgCO_2eq$。通过对比不同阶段的碳排放，提出了使用清洁能源、定期维护生产设备的减排策略。

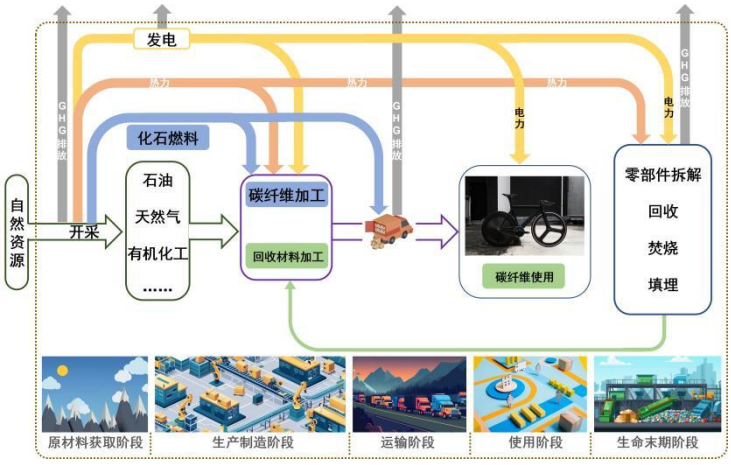


图 1 树脂产品碳纤维全生命周期系统边界

关键字 碳足迹，生命周期评价，碳达峰碳中和

参考文献

1. Yang Y, Meng G. The evolution and research framework of carbon footprint: based on the perspective of knowledge mapping. *Ecological Indicator.* 2020, 112: 106125.
2. García R, Freire F. Carbon footprint of particleboard: A comparison between ISO/TS 14067, GHG Protocol, PAS 2050 and Climate Declaration. *Journal of cleaner production.* 2014, 66: 199-209.

分会场：42.科技期刊发展论坛
交流类型：墙报

聚焦行业热点前沿，打造精品科技期刊

龙秀芬*、吴惠勤、盛文彦、丁岩、胡雪玉、崔文轩
广东省科学院测试分析研究所（中国广州分析测试中心），《分析测试学报》编辑部

《分析测试学报》(Journal of Instrumental Analysis)于 1982 年创刊，月刊。主编江桂斌院士，主办单位为中国广州分析测试中心、 中国分析测试协会，主管单位为广东省科学院。创刊以来，本刊不断调整和优化内容，从国家需求和人民健康出发，及时报道分析测试学科的最新科研成果和前沿研究进展，内容涉及生命分析、环境健康、食品安全、中药质量与控制、新能源分析、仪器研制等众多国家优势和重点领域；关注民生和行业热点，快速刊发与国计民生大事（如食品安全、环境污染）以及重大突发事件相关（如新冠疫情、毒面膜、塑化剂、地沟油、三聚氰胺等事件）的检测报道；有效促进了分析测试新技术、新方法的传播、推广及应用，最新仪器的研发和制造，在传播科研成果，加强学术交流，促进科技创新和人才培养，推动产学研用结合以及技术合作，助力健康中国、质量强国建设等国家战略布局中发挥积极作用，为推进学科发展和中国式现代化建设贡献了期刊力量。

经过 42 年的努力，本刊已发展为分析测试领域的重要学术传播和交流平台，在我国化学界具有广泛的学术影响力。《学报》目前被 Scopus、美国化学文摘(CA)、日本科技文献速报、俄罗斯 文摘、中国学术期刊综合 评价数据库、中国科技论文统计源期刊、中国科学引文数据库（CSCD）、中国科技期刊精品数据库等国内外二十几种数据库收录。入选《中文核心期刊要目总览》)、“中国科技期刊精品数据库”、中国学术期刊影 响力指数 Q1 区。连续三届（2017、2020、2023 年）获评中国精品科技期刊，为中国国际影响力优秀学术期刊、广东省精品科技期刊、广东省品牌期刊。2021 年首批入选广东省高水平科技期刊建设项目。

关键字 精品科技期刊，行业热点前沿，分析测试学报

分会场：43.四川分析检测论坛
交流形式：报告

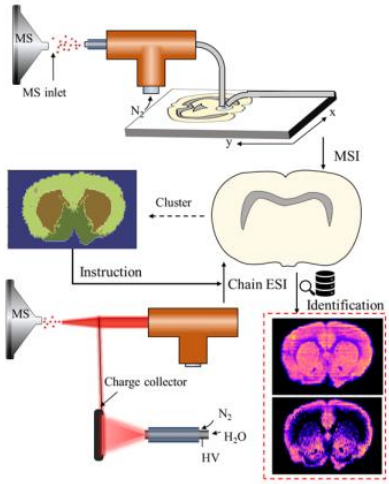
超微量质谱离子化及 AI 辅助代谢物注释研究

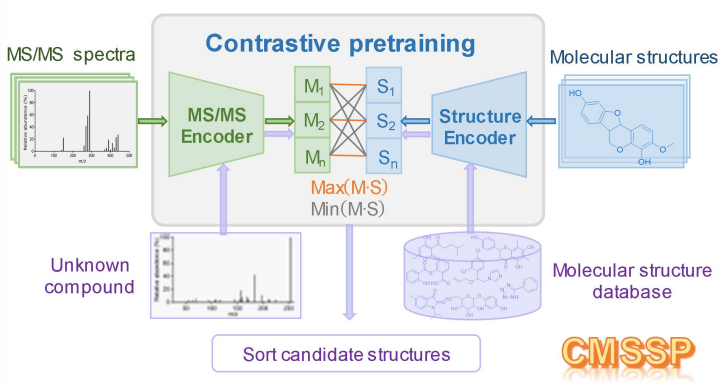
夏兵、王宇、陈璐、周燕*
中国科学院成都生物研究所

细胞是生物体的基本组成单元和功能单位。单细胞分析有助于深入了胞内生化信息变化，揭示在群体水平上被掩盖的异质性信息。然而，单细胞等超微量样品的检测，对样品消耗和灵敏度提出了极高要求。我们开发了链式电喷雾离子化技术（Chain electrospray ionization, Chain-ESI），可获得皮升级每分钟的极低样品消耗和高灵敏质谱检测，使质谱仪有充足的时间采集到足够的串联质谱数据，是超微量分析的理想工具[1]。基于 Chain-ESI 开发了聚类重采样质谱成像技术(Cluster resampling mass spectrometry imaging, CRMSI)，利用一级质谱成像构建化学成分聚类，然后使用 Chain-ESI 对多个化学成分聚类中的代表点位重采样并采集二级质谱，从而在一张切片上同时获得代谢物的一级和二级质谱数据，提升代谢物鉴定的覆盖度。该技术不仅克服了传统质谱成像的限制，而且为深入分析药物分布、机制探索和发现新的生物活性分子开辟了新途径。

此外，为解决代谢物快速注释的难题，开发了一种新颖的 MS/MS 谱图-分子结构对比学习预训练模型（Contrastive Mass Spectra-Structure Pretraining Model，CMSSP），该模型构建了一个共同表示空间，实现了 MS/MS 谱图与分子结构的直接比较，从而超越不同模态的限制[2]。在两个基准测试集上的评估结果证明了该方法的有效性。CMSSP 在注释准确性方面取得了显著提升，远超当前先进的方法。在 CASMI 2017 数据集上的 top-1 命中率提高 30%。此外，该模型在七个化学类别的化合物鉴定中都表现出良好的准确性，证明了其稳健性和通用性。最后，对 Glycyrrhiza glabra 中的代谢产物进行分析，top-1 和 top-3 的鉴定准确率分别达到 86.7%和 100%。深入研究表明，CMSSP 是解析复杂 MS/MS 数据的强大工具，推动了代谢物注释领域朝着更准确、更高效的方向发展。

结合 Chain-ESI 与 CMSSP 技术，可实现单细胞或生物组织等样品质谱数据的高效、快速的采集及分析，提升微量生物样本中化合物鉴定的准确度和覆盖率，以高效、深入地获取相关生化信息，为生命科学、医学等领域的相关研究，如癌症等疾病的发生、发展、转移和治疗提供新研究手段和可靠的科学依据。





关键字 超微量质谱离子化，质谱成像，代谢物注释，AI 辅助

参考文献

1. Y. Wang, L. Chen, X. Huang, B. Xia*, Y. Zhou*, *Talanta,* **2024**, 277 (June), 126410
2. L. Chen, B. Xia*, Y. Wang, X. Huang, Y.C. Gu, W.L. Wu, Y. Zhou*, *Anal. Chem.*, **2024**

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

Hemin/多肽共组装纳米管负载金簇用于尿酸的比色/荧光检测

康雨洁、王亚*、杨秀培
西华师范大学

人体内过度的尿酸（UA）积累不仅会导致炎症及内皮功能障碍还会增加原发性高血压、痛风等疾病的风险。因此，快速、灵敏地检测体液样本中的 UA 对人体健康至关重要。Hemin 是具有过氧化物酶活性的血红蛋白的催化中心，但其在水溶液中容易聚集而导致催化活性降低甚至钝化。常将 Hemin 与其他材料结合制备复合纳米材料，以提高 Hemin 的催化性能。自组装肽材料具有特殊的三维结构、序列可调、易于合成及功能化，可被用来作为稳定的纳米材料，以提高杂化纳米材料的生物相容性和生物活性。

本研究将短肽 RH 与 Hemin 共组装形成纳米管，模拟天然酶催化中心的疏水微环境。在此基础上，结合金纳米簇（Au NCs）制得了具有良好类过氧化物酶活性和荧光特性的 RH-Hemin@Au NCs 复合材料。结合尿酸酶（Uox）催化 UA 产生 H2O2 及材料类酶催化显色反应体系，根据体系颜色及荧光信号的变化，建立了比色/荧光双模传感平台，用于尿液样品中 UA 的测定。荧光和比色法检测 UA 的线性范围分别为 0.2-180 μM、0.5-120 μM，检测限分别为 0.06 μM、0.26 μM。该方法不仅具有较高的灵敏度、选择性，而且由于双响应信号的存在，可以进行自校正，提高分析结果的准确性和可靠性。

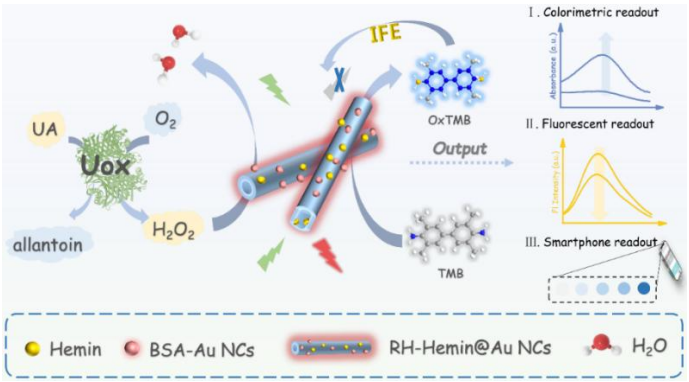


图 1. RH-Hemin@AuNCs 检测尿酸示意图

关键字 Hemin，多肽组装，尿酸，比色/荧光检测

参考文献

1. I.B. Ansah, W.-C. Lee, C. Mun, et al., Sensor Actuat B-Chem., 2022, 353, 131196-131204.
2. C. Zhou, C. Hu , D. Ouyang, et al., Chem. Eng. J., 2023, 477, 146979.
3. T. Jian, Y. Zhou, P. Wang, et al., Nat. Commun., 2022, 13, 3025-3037.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

连接多壁碳纳米管的钴单原子用于电化学检测膳食中的咖啡酸

杨恺婧、杨涵雨、郑燚、陈慧、刘伟、杨秀培*
西华师范大学

咖啡酸（CA）又称 3，4-二羟基肉桂酸，是一种代表性的酚类化合物，广泛存在于水果、咖啡、红酒和茶叶中。由于其潜在的有益特性，包括抗菌、抗氧化和抗炎作用，咖啡酸在人体中发挥着至关重要的作用[1]。近年来，CA 已在临床治疗和保健方面显示出良好的药理作用。一般来说，CA 还常被用于治疗肥胖症、疱疹、心脏病、糖尿病以及止血[2]。但是，过量摄入 CA 可能会对人体产生不良副作用，如癌症。因此，构建一种准确、灵敏的方法来检测我们日常饮食中的 CA 至关重要。电化学传感器具有操作步骤简单、响应速度快、成本低等优点，是一种功能强大且具有成本效益的替代方法[3]。尽管目前已开发出多种用于 CA 的电化学传感器，但选择性仍有待提高。

本研究开发了一种简便的策略来制备附着在多壁碳纳米管（Co-NC/MWCNT）上的钴单原子，用于 CA 的电化学检测。制备过程包括超分子自组装和高温煅烧，制备的复合材料具有优异的电化学性能。利用这些特性设计了一种用于检测 CA 的电化学传感器。通过优化实验参数，利用差分脉冲伏安法（DPV）测定了其线性范围和检出限，并将其用于咖啡和蓝莓中 CA 的灵敏度和选择性测定，具有良好的抗干扰性和重现性。

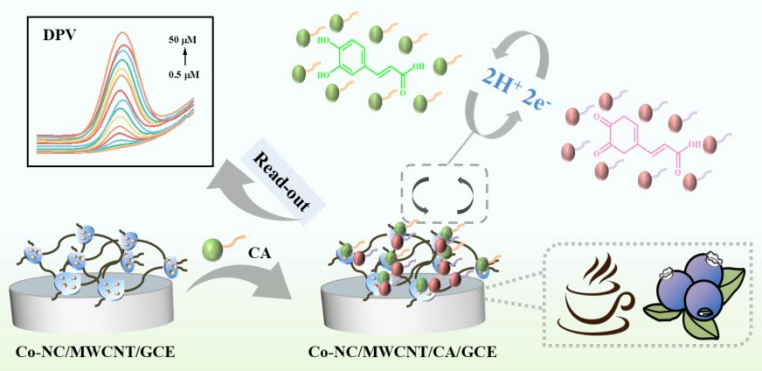


图 1. 基于 Co-NC/MWCNT 电化学传感咖啡酸的检测示意图

关键字 多壁碳纳米管，钴单原子，电化学检测，咖啡酸

参考文献

1. H. Imanzadeh, A. Khataee, M. Amiri, Food Chem., 2024, 461, 140762-140770.
2. M. Feng, X. Zhang, Y. Huang, Talanta., 2024, 271, 125714-125721.
3. P. Gao, M.Z. Hussain, Z. Zhou, J. Warnan, M. Elsner, R.A. Fischer, Biosens. Bioelectron., 2024, 261, 116515-116525.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

三元过渡金属硫族化合物 CdSSe 用于双放大电致化学发光检测 CA19-9

官正兴[1]、张信凤[1]、范大伟*[2]、魏琴[2]
1. 成都理工大学
2. 济南大学

糖类抗原 19-9（CA19-9）是胰腺癌以及其他消化道癌症的糖基化标志物，因此 CA19-9 在临床诊断中备受关注[1]。目前常用的检测方法，如酶联免疫吸附法和放射免疫法，由于酶标记效率低和同位素的半衰期和辐射类型的影响，无法实现灵敏检测 CA19-9，因此需要开发一种新型的检测方法用于 CA19-9 的灵敏检测。电化学发光（ECL）结合了电化学与化学发光的优点，具有极高的灵敏度，在环境分析、食品安全和临床诊断领域有着广泛应用[2]。

在本研究中，开发了一种三元过渡金属硫族化合物 CdSSe 作为 ECL 发光体，制备 Au-In_2O_3 和 Cu_2S 作为共反应促进剂，实现 CdSSe ECL 信号的双放大用于检测 CA19-9[3]。具有 ECL 活性的三元过渡金属硫族化合物 CdSSe 首次作为发光体应用于 ECL 领域。将 CdSSe 原位生长于 Cu_2S 表面，由于 Cu_2S 的大比表面积和 Cu^{2+}/Cu^{+}氧化还原对的催化作用，实现了 ECL 信号的放大。此外，Au-In_2O_3 纳米立方体作为捕捉抗体标记物，再次实现了 ECL 信号的的二次放大。该免疫传感器在宽检测范围内（100 μU/mL – 100 U/mL）ECL 信号与 CA19-9 浓度的呈现高度相关性，检测限低至 80 μU/mL，展现了其在临床 CA19-9 检测中的应用价值。

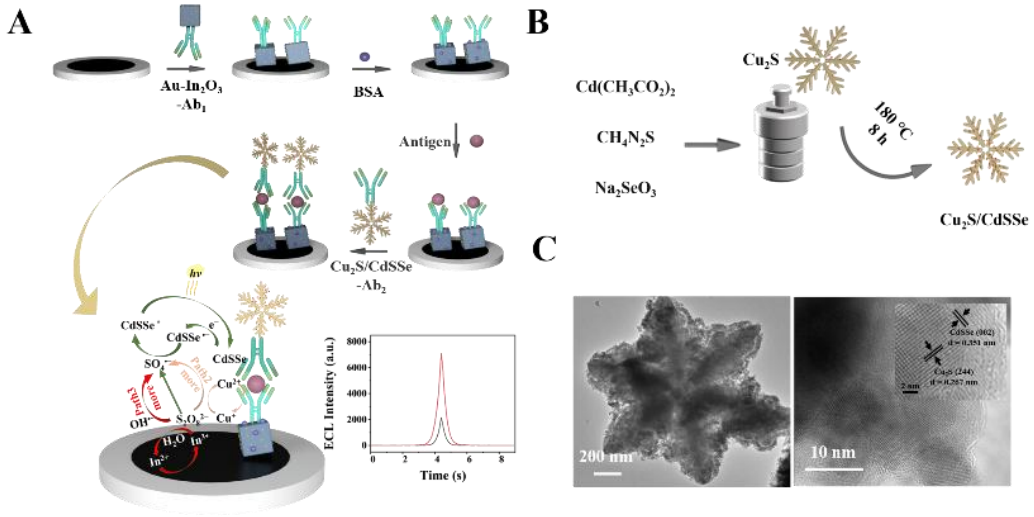


图 1.（A）传感器的构建流程图和检测机理图，（B）CdSSe 原位生长制备示意图，（C）Cu_2S/CdSSe 透射电镜图像和高倍透射电镜图像

关键字 电致化学发光，CA19-9，生物传感器

参考文献

1. Luo, G.; Jin, K.; Deng, S.; Cheng, H.; Fan, Z.; Gong, Y.; Qian, Y.; Huang, Q.; Ni, Q.; Liu, C.; Yu, X. *Biochim Biophys Acta Rev Cancer* **2021**, *1875*, 188409.

2. Hu, L.; Xu, G. *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 3275-3304.

3. Gong, Z.; Lu, B.; Wang, H.; Ren, X.; Liu, X.; Ma, H.; Wu, D.; Fan, D.; Wei, Q. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 1678-1685.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于铜离子和组氨酸顺序检测的具有大斯托克斯位移的多肽荧光探针：智能手机设备、真实的样品、测试条和生物成像

王鹏*、曹心林
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验室

铜（Cu^{2+}）是人体必需的微量元素，在人体内的各种生理功能中起着至关重要的作用；组氨酸（L-His）是一种必需的神经递质，在调节中枢神经系统，组织生长和修复中发挥着重要作用。鉴于 Cu^{2+}和 L-His 在人体中的重要性，在这项工作中我们以丹磺酰荧光团标记的二肽（Asn-His-NH_2）为骨架，设计了一种新型的、简便的荧光探针 DNH。基于 Cu^{2+}的荧光猝灭机制，探针 DNH 在 100%水溶液中实现了对铜离子的特异性荧光猝灭识别，并形成了 1:1 型非荧光复合物，计算得检测限为 19.6 nM。DNH-Cu^{2+}复合物在识别 L-His 时显示出强的荧光增强，具有突出的选择性，并且 DNH-Cu 2+复合物相对于 L-His 的检测限计算为 22.8nM。值得注意的是，当交替加入 Cu^{2+}和 L-His 时，DNH 在至少 7 个循环中表现出良好的可逆性，并且荧光强度变化较小。DNH 还具有良好的生物相容性和低细胞毒性，可用于活体细胞和斑马鱼中 Cu 2+和 L-His 的连续检测。另外，DNH 用于实际水样中 Cu^{2+}和 L-His 的测定，具有良好的回收率和准确度。将 DNH 应用于滤纸上，开发了快速、高效分析 Cu^{2+}和 L-His 的可视化试纸条。此外，将智能手机颜色识别器开发成便携式分析设备，实现了对 Cu^{2+}和 L-His 的半定量目视监测，检测限分别为 0.49 μM 和 0.63 μM。鉴于这些属性，DNH 本身作为一个有前途的基于肽的荧光探针，在各种环境和生物环境中的 Cu 2+和 L-His 的实时可视化监测展示了相当大的潜力。

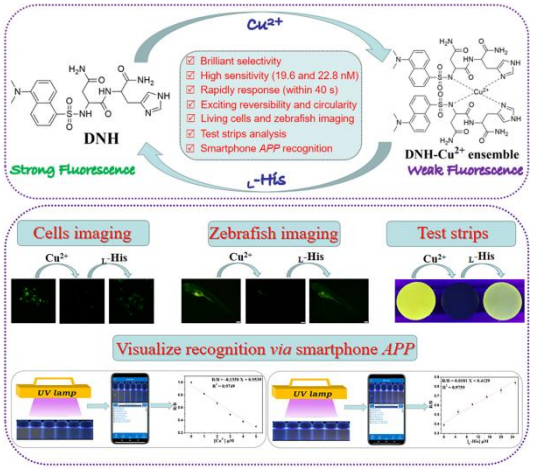


图 1. 多肽探针 DNH 作用机理图

关键字 多肽荧光探针，铜离子，组氨酸，生物成像，手机辅助

参考文献

1.A. Kumar, P.S. Chae, Novel dual-responsive phenothiazine-based probes formoisture detection and Cu^{2+} sensing, Microchem. J. 198 (2024) 110171.

2.Y. An, L.Y. Li, L.P. Li, Y.Q. Sun, B. Li, P. Wang, Peptide-based probe for colorimetric and fluorescent detection of Cu^{2+} and S^{2-} in environmental and biological systems, J. Hazard. Mater. 465 (2024) 133192.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

多肽荧光探针的构建及对汞离子和硫离子的连续检测和生物应用

王鹏*
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验室

汞离子(Hg2+)和硫离子(S2−)作为广泛使用的两种剧毒污染物，对生态环境和人类健康造成了严重危害。因此，Hg2+和 S2−的定量检测在环境监测和药物治疗领域具有重要意义。本研究以二肽(Asn-Cys-NH2)为原料，采用多肽固相合成技术(SPPS)，结合 Fmoc 化学，设计并合成了一种新型荧光“开-关-开”肽基探针 DNC。DNC 在识别 Hg2+方面表现出高选择性，并以 2：1 结合模式形成非荧光复合物(DNC-Hg2+)。值得注意的是，原位产生的 DNC-Hg2+复合物被用作中继响应探针，通过可逆的生成-分离对 S2−进行选择性顺序检测。DNC 实现了对 Hg2+和 S2−的高灵敏度检测，检测限(LOD)分别为 8.4 nM 和 5.5 nM。同时，DNC 证明了在水样中检测 Hg2+和 S2−的可行性，并获得了可观的回收率。更重要的是，DNC 表现出优异的水溶性和低毒性，已成功用于连续识别试纸、活细胞和斑马鱼幼虫中的 Hg2+和 S2−。作为现场有效的视觉分析方法，智能手机 RGB Color Picker APP 无需复杂的设备即可实现 Hg2+和 S2−的半定量检测。该研究成果为接力响应型探针的构建及现场环境中重要污染物的快速检测提供了新思路。

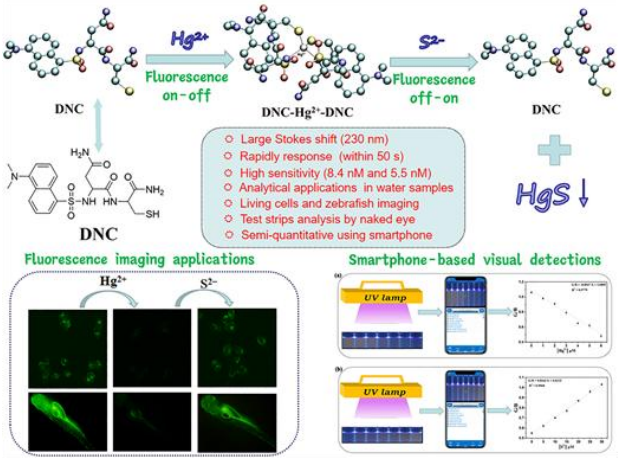


图 1. 多肽探针 **DNC** 作用机理图

关键字 多肽荧光探针，汞离子，硫离子，生物成像，手机颜色识别

参考文献

1. X.L. Zhou, et al. Novel thermo and ion-responsive copolymers based on metallo-base pair directed host-guest complexation for highly selective recognition of Hg^{2+} in aqueous solution, J. Hazard. Mater. 445 (2023) 130610.
2. Q.P. Li, et al. Recent advances in fluorescent materials for mercury(II) ion detection, RSC Adv. 13 (2023) 19429–19446.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于 ZIF-8 和氮掺杂石墨烯量子点的分子印迹荧光传感器对双酚 A 的特异性识别和检测

仝安袁、许楠、颜婷、陈复彬、杨春艳*
西华师范大学

本研究构建了一种对双酚 A（BPA）具有高选择性和高灵敏度检测能力的分子印迹荧光传感器。基于氮掺杂石墨烯量子点（N-GQDs）的强荧光和稳定性的光学特性以及具有高比表面积的金属有机框架材料 ZIF-8 制备的分子印迹聚合物（MIP）实现了对 BPA 的高亲和力识别，在与 BPA 结合时，该传感器的荧光会发生显著淬灭。通过 TEM、XPS、FT-IR 等方法研究了传感器的形貌、化学组成及结构。通过荧光检测实验研究了该分子印迹荧光传感器的光学性能。结果表明该分子印迹荧光传感器对双酚 A 表现出良好的选择性，能够有效区分其他结构类似物，并具有较低的检测限，为双酚 A 在水中的快速、灵敏、选择性检测提供了一个有前景的途径，有助于环境监测与保护。

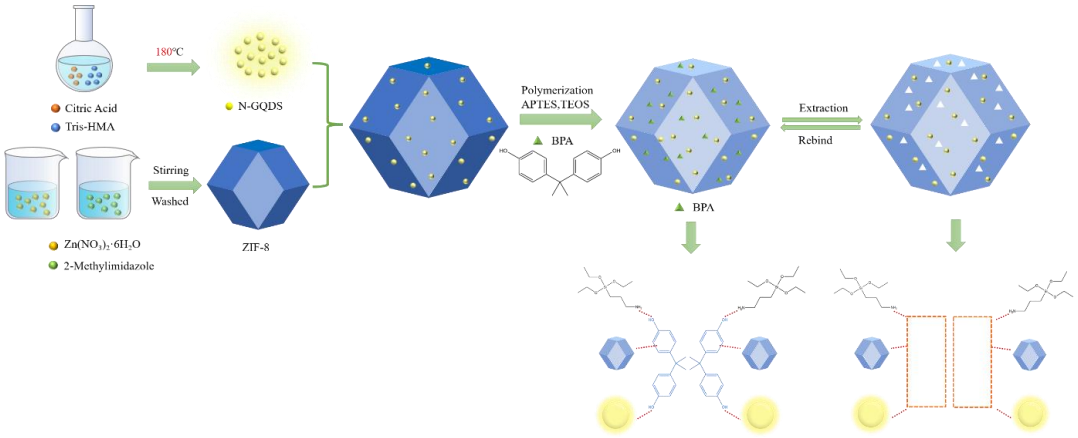


图 1. N-GQDS/ZIF-8@MIP 识别 BPA 作用机理图

关键字 氮掺杂石墨烯量子点，分子印迹聚合物，MOF，荧光传感器，双酚 A

参考文献

1. Liu X, Tian L, Ren R, et al. Constructing hollow ZIF-8/CDs@ MIPs fluorescent sensor from Osmanthus leaves to specifically recognize bovine hemoglobin[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2023, 287: 122121.
2. Pongprom A, Chansud N, Bunkoed O. A fluorescence sensor probe based on porous carbon, molecularly imprinted polymer and graphene quantum dots for the detection of trace sulfadimethoxine[J]. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 2022, 427: 113812.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

利用橙红色荧光铜纳米团簇灵敏测定香叶木素

杨欣、况建华、袁静雪、冯遥、程正军*
西华师范大学

香叶木素（Dio）因其良好的药理活性而受到广泛的关注，因此，有必要测定其在科学研究以及产品中的含量。在本文工作中，利用 4-羟基-2-巯基-6-丙基嘧啶作为模板及剂和还原剂，采用一锅湿化学法合成橙红色纳米铜簇 PTU-CuNCs，量子产率可达 18.03%。具有红色荧光的 PTU-CuNCs 可以提高检测的抗干扰能力。同时，对 PTU-CuNCs 的合成条件进行了优化和详细分析。通过一系列实验发现，内滤光片效应 （IFE） 和动态猝灭可能成为 DiO 对 PTU-CuNCs 进行荧光猝灭的主要原因。基于该机制，建立了用于测定 Dio 的荧光探针。在 0.33—31.67 μmol·L-1 中，PTU-CuNCs 的荧光猝灭效率与 Dio 含量呈线性关系，对应的检出限（LOD）估计为 101.3 nmol·L-1 的定量限 （LOQ） 计算为 337.4 nmol·L-1. 此外，该方法可有效用于实际样品中 Dio 的测定

关键字 纳米铜簇，香叶木素，4-羟基-2-巯基-6-丙基嘧啶，机制

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

应用高分辨质谱的新型合成大麻素 5F-EDMB-PICA 体外代谢研究

石恺婷[1]、高煜婕[1]、白登文[2]、蒋林芝[1]、孙一铭[1]、姜子涵[1]、徐布一[2]、廖林川*[1]
1. 四川大学
2. 四川省毒品监测技术中心 （国家毒品实验室四川分中心）

目的：本文通过建立人肝微粒体体外代谢模型，研究新型合成大麻素 5F-EDMB-PICA 的I、II相代谢产物及代谢途径。

方法：利用人混合肝微粒体与 NADPH 再生系统、UGT 孵育系统构建体外代谢模型，加入 2 μL 1 mg/ml 5F-EDMB-PICA 标准溶液，37℃恒温孵育 60min 后加入等体积乙腈停止反应，冷冻离心后取上清液进样。使用超高效液相色谱串联 Q Exactive 质谱，色谱条件为：色谱柱：Thermo Scientific™ Hypersil GOLD™ C18 UHPLC 色谱柱（100 mm×2.1 mm，1.9 μm）；流动相：流动相 A 为 0.1%甲酸水溶液，流动相 B 为 1%甲酸/乙腈；采用梯度洗脱（A∶B）：0 min（95∶5）→2 min（40∶60）→5 min（10∶90）→6.5 min（0∶100）→7.5 min（0∶100）→8 min（95∶5）；流速：0.4000 ml/min；柱温：35℃；进样量：5 μL。质谱条件为：离子源：正离子采集模式；检测方式：Full MS-ddMS2 扫描模式；电源电压：+3.0 kV；毛细管温度：350℃；碰撞气、雾化气和辅助气均为高纯氮气。全扫描数据采集参数：分辨率 70000，自动增益控制（ACG）3e6，最大注射时间 100 ms，扫描范围 200-2000 m/z；二级质谱数据采集参数：分辨率：17500，目标物（ACG）：1e5，最大 IT 50 ms，隔离宽度 3.0 m/z，碰撞能量为 30，45 和 70 eV。

结果：运用 Compound Discovery 软件，分析推断出 17 种 5F-EDMB-PICA I相代谢产物与 4 种II相代谢产物，包括酯水解、脱氢、脱氟（羟基化）、羟基化、二羟基化、葡萄糖醛酸化及前几者途径的合并代谢产物。 5F-EDMB-PICA 体外代谢产物具体信息见表 1，推断代谢途径见图 1。

结论：本研究通过体外代谢模型，利用高效液相色谱-高分辨质谱对 5F-EDMB-PICA 进行代谢物研究，并对检测出的 21 种代谢物的峰面积进行排名，其中 M15 酯水解产物含量最高，由于 M14 和 M15 需要同时存在才能验证完整的母体结构，故建议将 M14 和 M15 作为 5F-EDMB-PICA 检测的潜在生物标志物。本实验对该合成大麻素的及时检出提供了代谢物参考，也为进一步研究类似结构的合成大麻素代谢研究提供实验依据。

ID	Metabolic method	Hold time /min	Fomula	Theoretical quality [M+H]+ m/z	Accurate quality [M+H]+ m/z	Error/‰	Characteristic fragments
M18	酯水解+脱氢	5.67	$C_{20}H_{23}O_3FN_2$	361.1922	361.1909	-0.36	144,232
M2	酯水解+脱氟	4.74	$C_{20}H_{25}O_4N_2$	361.2122	361.2118	-0.11	144,230
M15	酯水解	5.51	$C_{20}H_{27}O_3FN_2$	363.2078	363.2067	-0.30	144,232
M9	酯水解+羟基化（氟戊基）	4.88	$C_{20}H_{27}O_4FN_2$	379.2028	379.2024	-0.11	144,248
M7	酯水解+羟基化（吲哚环）	4.91	$C_{20}H_{27}O_4FN_2$	379.2028	379.2022	-0.16	160,248
M14	脱氟	5.49	$C_{22}H_{25}O_4N_2$	389.2435	389.2424	-0.28	144,230
M20	脱氢+羟基化（N1 链）	5.98	$C_{22}H_{29}O_4FN_2$	405.2184	405.2175	-0.22	144,232
M6	脱氟+羟基化（N1 链）	4.81	$C_{22}H_{25}O_5N_2$	405.2384	405.2377	-0.17	144,230
M8	脱氟+羟基化（氟戊基）	4.94	$C_{22}H_{25}O_5N_2$	405.2384	405.2382	-0.05	144,230,246
M10	脱氟+羟基化（吲哚环）	4.90	$C_{22}H_{25}O_5N_2$	405.2384	405.2378	-0.15	160,246
M19	羟基化（N1 链）	5.74	$C_{22}H_{31}O_4FN_2$	407.2341	407.2324	-0.42	144,232
M16	羟基化（氟戊基）	5.54	$C_{22}H_{31}O_4FN_2$	407.2341	407.2328	-0.32	144,248
M21	羟基化（吲哚环）	6.41	$C_{22}H_{31}O_4FN_2$	407.2341	407.2335	-0.15	160,248
M17	二羟基化+脱氢	5.55	$C_{22}H_{29}O_5FN_2$	421.2133	421.2120	-0.31	144,232
M12	二羟基化（氟戊基*2）	5.00	$C_{22}H_{33}O_5FN_2$	423.2290	423.2283	-0.17	248,264
M13	二羟基化（氟戊基+N1 链）	5.06	$C_{22}H_{33}O_5FN_2$	423.2290	423.2280	-0.24	144,248
M11	二羟基化（吲哚环+N1 链）	5.23	$C_{22}H_{33}O_5FN_2$	423.2290	423.2282	-0.19	144,160
M5	葡萄糖醛酸化+脱氟	4.80	$C_{28}H_{40}O_{10}N_2$	565.2756	565.2761	0.09	144,230
M4	葡萄糖醛酸化	4.79	$C_{28}H_{39}O_{10}FN_2$	583.2662	583.2666	0.07	160,248,424
M3	葡萄糖醛酸化+羟基化	4.27	$C_{28}H_{39}O_{11}FN_2$	599.2611	599.2622	0.19	160,248,264
M1	葡萄糖醛酸化+羟基化	4.77	$C_{28}H_{39}O_{11}FN_2$	599.2611	599.2615	0.07	176,264

表 1. 合成大麻素 5F-EDMB-PICA 体外代谢

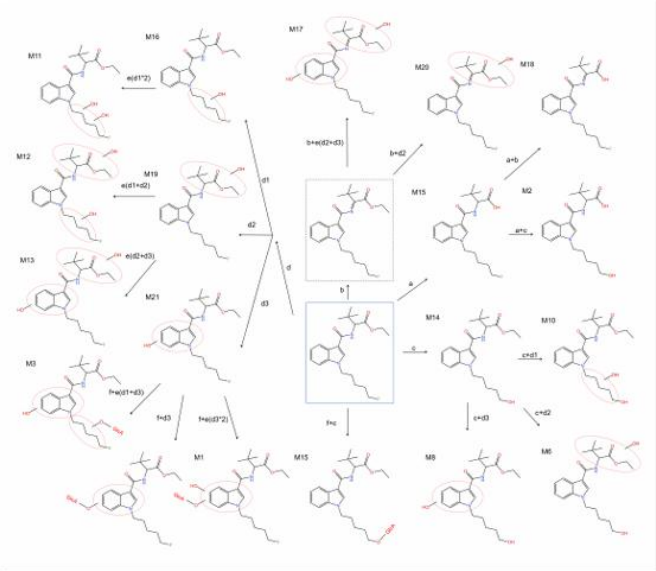


图 2. 合成大麻素 5F-EDMB-PICA 体外代谢途径

关键字 新型合成大麻素，高分辨质谱，5F-EDMB-PICA，代谢

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

可视化检测室内电子屏幕蓝光凝胶传感器

江玉姣、张信凤*
成都理工大学

蓝光(380-500 nm)广泛存在于我们日常使用的个人电子设备（手机、平板电脑和电脑等）以及 LED 照明灯中[1]。长时间暴露于蓝光会引发视网膜损伤等严重健康问题。因此，检测蓝光的重要性日益凸显。目前，具有代表性的蓝光传感器依赖于半导体材料的光电转换特性[2]。虽然对蓝光敏感，但这些传感器大多用于检测蓝光辐射强度而不是剂量。一些光致变色材料也用于蓝光的可视化检测，然而，这种颜色变化的对比度低，且这种材料的合成过程复杂。因此，需要开发一种制作简单、操作方便的蓝光可视化传感器。光敏催化具有高灵敏度和可视化检测优点，广泛用于可视化检测的应用中[3]。

在本研究使用光敏剂（荧光素）在蓝光光照下产生活性氧(ROS)物质，氧化显色底物 3, 3', 5, 5'-四甲基联苯胺(TMB)，从而将无色 TMB 转化为蓝色 oxTMB，并结合无毒害的天然琼脂糖水凝胶作为负载基质，开发了一种可视化蓝光剂量分析的传感器。该传感器可以直接连接到屏幕上，使用户能够实时监测蓝光剂量暴露。此外，该可视化传感器在检测范围(0.15 J/cm^2–1.2 J/cm^2)内观察到蓝光剂量与颜色强度变化之间存在明显的线性关系。检测限确定为 0.080 J/cm^2。通过对电子屏幕和照明灯的蓝光剂量分析，分析结果与辐照计检测结果一致，证明该水凝胶具有可视化分析蓝光暴露累积剂量的能力。

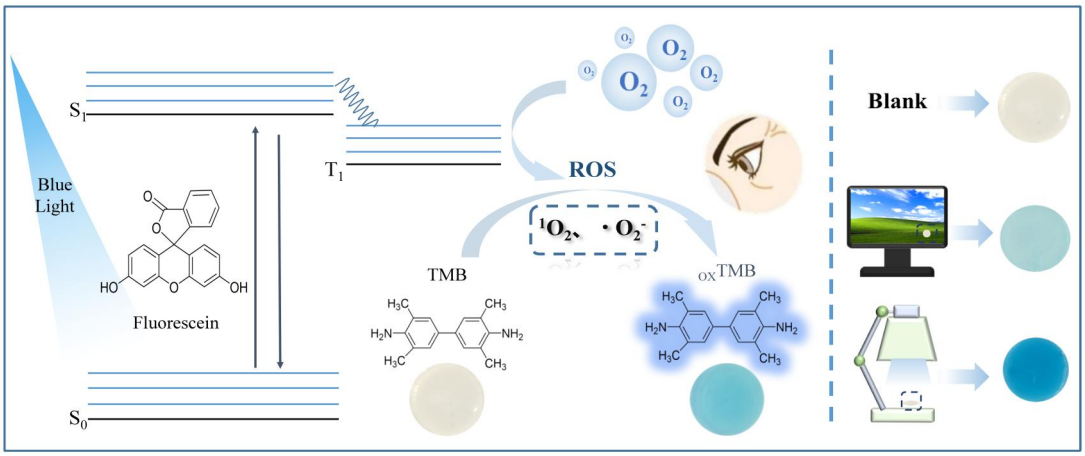


图 1. 可视化检测蓝光方案设计图。

关键字 水凝胶，可视化比色分析，光敏染料，蓝光

参考文献

1. Cougnard-Gregoire, A.; Merle, B. M. J.; Aslam, T.; Seddon, J. M.; Aknin, I.; Klaver, C. C. W.; Garhofer, G.; Layana, A. G.; Minnella, A. M.; Silva, R.; et al. *Ophthalmol Ther* **2023**, *12* (2), 755-788.

2. Lu, J.-H.; Jiang, B.-H.; Hsiao, F.-C.; Peng, Y.-C.; Su, Y.-W.; Lin, Y.-R.; Tsai, T.-H.; Shiu, M.-N.; Lin, C.-Y.; Fang, Y.-T.; et al. *Chem. Eng. J*, **2022**, 437.

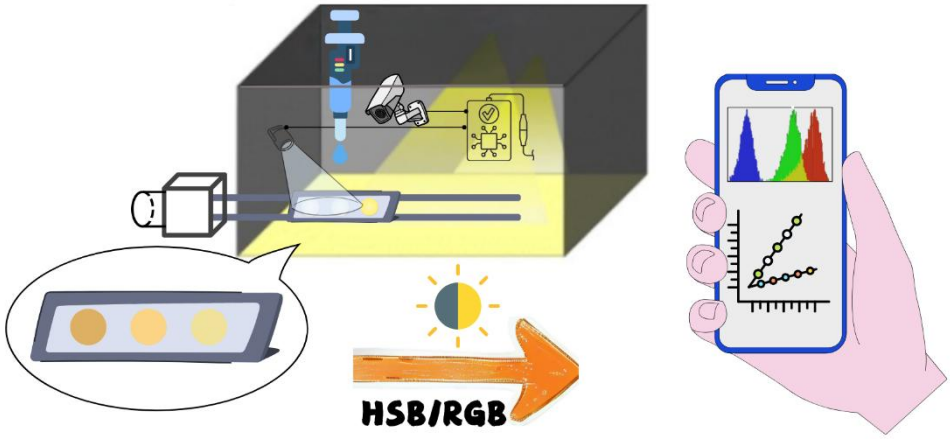
3. Wang, Y.; Dong, Z.; Hu, H.; Yang, Q.; Hou, X.; Wu, P. DNA-modulated photosensitization: current status and future aspects in biosensing and environmental monitoring. *Anal Bioanal Chem* **2019**, 411 (19), 4415-4423.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

便携式装置用于漂发、染发剂中氧化性物质的快速检测

何金书、刘心怡、邓宇佳*
西华师范大学

过硫酸盐与双氧水作为漂发及染发制剂中常见的氧化剂成分，其在安全限值内的短期暴露通常被视为安全无害。然而，部分不良厂商可能会为追求更显著的漂白效果而违规超量添加此类氧化剂，这将增加用户罹患接触过敏性皮炎及诱发哮喘等健康风险。因此，对氧化剂含量进行准确、简便的检测方法及设备显得尤为重要。氧化剂含量的测定主要采用碘量法，该方法不仅耗时较长，且对操作人员的专业技能有较高要求。鉴于此，本研究提出了一种新策略：利用强氧化剂在碱性环境下能将 Bi(III)化合物氧化为有色产物铋酸钠的化学特性，结合色彩识别技术或机器学习，开发了一种便携式检测设备，旨在实现对漂发剂与染发剂中氧化性物质的准确且快速定量分析。实验结果显示，该方法对过硫酸钾、双氧水、次氯酸钠等多种氧化性物质均展现出良好的检测性能，预示着其在未来有望拓展应用于更广泛环境样本



中的氧化物含量测定，为提升环境安全及产品质控提供有力工具。

关键字 便携式装置，染发剂，快速检测，色彩模式，氧化剂

参考文献

1. Macan, J.; Babić, Ž.; Hallmann, S. *et al. Int Arch Occup Environ Health*, **2022**, 95, 1679–1702.
2. Huang, J.; Cao, J.; Ding, Y. B. *et al. Chemosphere*, **2018**, 205, 531-539.
3. Wu, Q.; Tao, T.; Zhao, Y.; Huang, W., *Sensors*, **2021**, 21, 8082.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于金属有机框架载体的 SERS 基底的制备及应用研究

龙倩、陈杨洁、郑丽、廖文龙、刘坤平*
成都大学

表面增强拉曼光谱（SERS）因其简单、快速、高灵敏度的优异检测能力获得了极大关注，现已被应用于检测药物、食品和环境中的痕量分析物。金属有机框架（MOFs）是一种高比表面积且化学稳定性良好的多孔材料，其优异的吸附性能和与目标分子的相互作用能大大提高 SERS 性能。本课题组采用微波辅助法、种子介导生长法等方法制备了基于金属有机框架载体的 SERS 基底，Au-MBA@Ag NRs/PSS/MIL-88B-NH_2（AMAPM）（如图 1A）和 Fe_3O_4@UiO-66-NH_2/Au NPs（如图 1B），分别用于辣椒粉中罗丹明 6G（R6G）和牛奶中恩诺沙星（ENR）的检测[1,2]。由于 MIL-88B-NH_2、Fe_3O_4@UiO-66-NH_2 的多孔结构和优异的吸附能力，所制备的 SERS 基底各自表现出优异的 R6G 和 ENR 检测性能，高灵敏度以及选择性，在复杂基质中痕量成分分析中显示出巨大的应用潜力。

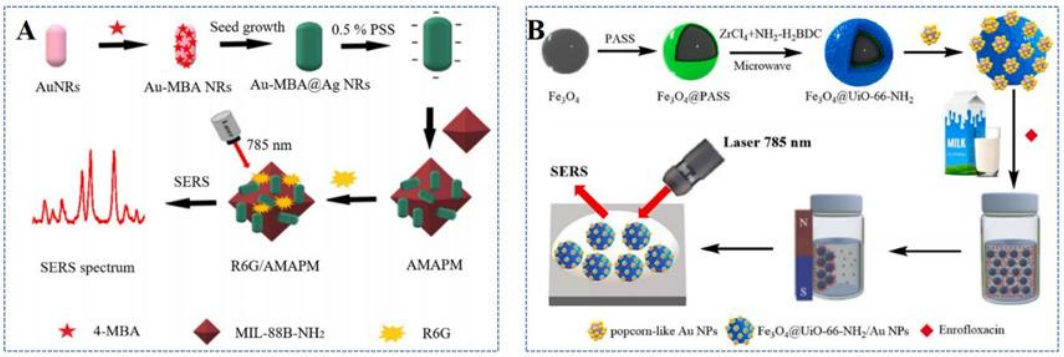


图 1. AMAPM（A）、Fe3O4@UiO-66-NH2/Au NPs（B）基底的制备及具体检测过程

关键字 表面增强拉曼光谱（SERS），金属有机框架（MOFs），罗丹明 6G，恩诺沙星

参考文献

1. Y. Chen, J. Hao, Z. Yin, Q. Wang, Y. Zhou, L. Jia, H. Li, W. Liao, K. Liu, RSC. Advances., 2023, 13, 10135 10143. 2. Y. Chen, L. Zheng, J. Hao, L. Huang, Q. Wang, Y. Zhou, Z. Yin, L. Jia, H. Li, W. Liao, K. Liu, Food. Control., 2024, 159, 110270.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

小鼠组织中的 4-10 硼酸-L-苯丙氨酸的 UPLC-MS/MS 检测方法的建立

胡杨[1]、蒋鑫[1]、秦永平*[2]、钱广生[1]
1. 四川大学
2. 成都海枫生物科技有限公司

4-10 硼酸-L-苯丙氨酸（BPA）是一种常见的硼中子俘获疗法 10B 载体药物，可应用于多种难治性肿瘤疾病。检测小鼠体内各个组织中 BPA 的含量，有利于保障用药的合理性和安全性。本研究建立了灵敏准确的 UPLC-MS/MS 法测定小鼠组织中的 BPA 含量。分析方法如下：采用 ACQUITY UPLC HSS T3 C18 (100 mm × 2. 1 mm，1.8 μm)色谱柱，流动相为 0.5%（v/v）甲酸-水溶液和乙腈，柱温 40 ℃，流速 0.4 mL/min。采用 AB 6500+质谱检测器，电喷雾离子源(ESI 源)为正离子模式，毛细管电压 5500V，脱溶剂温度 600℃，采用多重反应离子监测(MRM)，BPA 定量离子对为 209.1→120.1。组织样本匀浆后，采用蛋白沉淀法进行前处理。

方法学验证显示该方法专属性较好，空白组织样品中无内源性物质干扰 BPA 的测定，BPA 在小鼠组织中的回收率均在 70 % ~ 115 %范围内，且 BPA 在各组织中均无明显基质效应，有较好的精密度和准确度。小鼠静脉注射 BPA 后，于给药后 1.0 h、8.0 h、24.0 h 和 168.0 h 处死小鼠，收集组织。实验结果表明 BPA 静脉注射后快速分布到组织中，并在胰腺、肾脏中蓄积浓度最高。

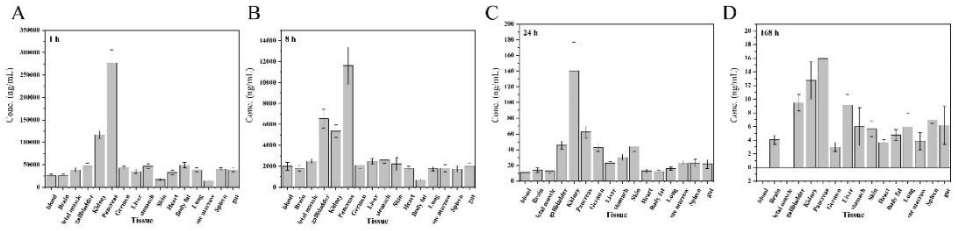


图 1. BPA 在小鼠体内组织分布的结果

关键字 超高效液相色谱-串联质谱，组织分布，BPA，生物分析

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

多维糖蛋白组学分析揭示全氟辛烷磺酸暴露肝毒性机制

李大鹏*
四川大学

全氟辛烷磺酸（PFOS）是使用最广泛、分布最广的全氟化合物之一，已被证明会导致不良健康后果。虽然生态毒性基因组学和蛋白质组学数据集为全氟辛烷磺酸毒理学效应提供了更深入的见解，但全氟辛烷磺酸肝毒性对翻译后修饰（PTMs）调节的分子机制尚未得到很好的阐明，而 PTMs 与调节蛋白质活性最为相关。蛋白质糖基化是与多种细胞功能相关的最普遍的 PTM 之一，这对于理解暴露于全氟辛烷磺酸的多种生物过程和毒性机制至关重要。本研究利用多维糖蛋白组学，定量了全氟辛烷磺酸暴露和野生型小鼠肝脏中的全球蛋白质表达水平、糖基化位点和糖蛋白。在暴露全氟辛烷磺酸的小鼠肝脏中，鉴定出的 2439 种蛋白质、1292 种糖苷和 799 种糖蛋白显示出复杂的异质性。定量结果显示，全氟辛烷磺酸暴露小鼠肝脏中的 241 种失调蛋白（倍数变化 2，$p<0.05$）参与了脂质和异生物质代谢。而 16 种过表达的糖蛋白仅与中性粒细胞脱颗粒、细胞对应激的反应、内质网（ER）中的蛋白质加工有关。此外，相互作用组和功能网络分析确定 HP 和 HSP90AA1 是潜在的糖蛋白生物标志物。这些结果为深入了解全氟辛烷磺酸诱导的肝毒性和肝病的机制提供了独特的见解。多维糖蛋白组学平台可以适应不同的生态毒理学研究。

关键字 糖蛋白组学、肝毒性、PFOS

参考文献

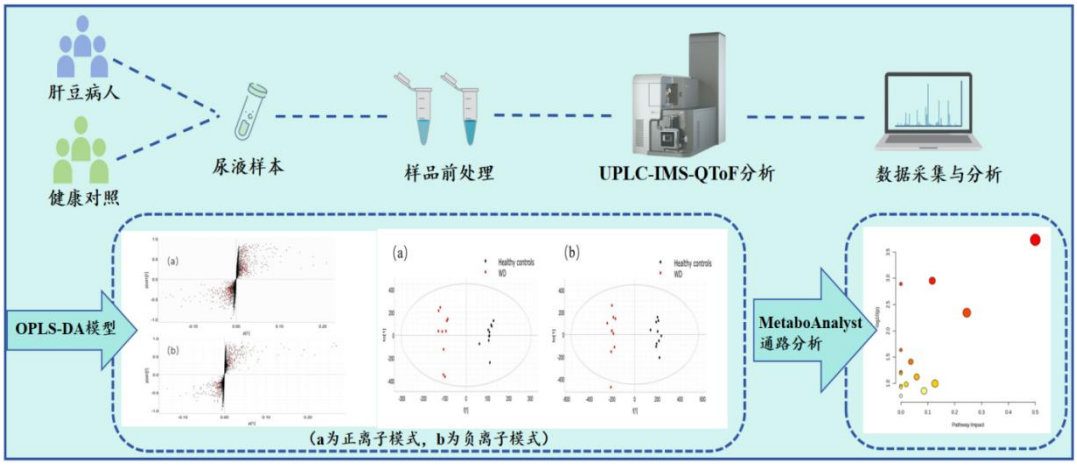
1. Li, D.; Jiang, L.; Hong, Y.; Cai, Z.* *Environ. Pollut.* **2021**, *268*, 115774.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于超高效液相色谱-离子淌度质谱法的肝豆状核变性的尿液无创生物标志物研究

李永新*、周慧灵、徐欢、潘翱、董思敏
四川大学华西公共卫生学院(华西第四医院）

目的 基于代谢组学技术筛选肝豆状核变性疾病的尿液无创生物标志物，探讨相关生物通路，为疾病的早期诊断和治疗提供参考。方法 研究对象为四川某医院确诊的肝豆状核变性患者及健康体检人群。收集两组受试者的晨尿中段尿液样本，经离心去除沉淀，取上清液至 Turbo 4 超滤浓缩管中去除高丰度蛋白，并加入甲醇进行低温沉淀。使用超高效液相色谱-离子淌度质谱联用技术（UPLC-IMS-QToF）进行代谢物分离和数据采集，色谱柱为 ACQUITY UPLC BEH C18（150 mm×2.1 mm，3 μm），流动相 A 为超纯水（含 0.1%甲酸）、流动相 B 为乙腈（含 0.1%甲酸），柱温 40 ℃，ESI-模式进样量为 8 μL，ESI+模式进样量为 5 μL。数据经 Progenesis QI 软件进行预处理，以人类代谢组数据库中的 Metabolite Structures（v5.0）为参考数据库，通过 Progenesis MetaScope 鉴定代谢物。使用 SIMCA-P 软件建立 OPLS-DA 模型筛选潜在生物标志物，并通过 IMPaLA 平台和 MetaboAnalyst 4.0 软件进行代谢通路富集分析。结果 研究共筛选并鉴定出 234 个潜在生物标志物，其中 44 种差异代谢物水平上调，190 种差异代谢物水平下调。IMPaLA 分析显示，前 5 个富集通路分别为天冬氨酸合成、丙氨酸代谢、丙氨酸合成/降解、D-谷氨酰胺和 D-谷氨酸代谢、L-半胱氨酸降解，MetaboAnalyst 分析结果同样显示 D-谷氨酰胺和 D-谷氨酸代谢通路与差异代谢物最为相关，其 Impact 值达到 0.5，此外，精氨酸生物合成通路和丁酸代谢通路在富集分析中同样有较高的权重。 结论 肝豆状核变性患者与健康人群的尿液代谢物存在差异，且差异代谢物所在通路主要与氨基酸类的合成代谢相关。



关键字 肝豆状核变性，代谢组学，尿液生物标志物，离子淌度质谱

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

核级硼酸中痕量杂质元素分析技术研究

罗凤焱*、凡敏、李文强、李洁、宁伟
中国核动力研究设计院

核级硼酸是制备中子计数管、核反应堆防护屏和控制棒的重要原料之一。核级硼酸对其杂质的要求十分严苛，钙、镁、钠等杂质元素的含量要求为痕量级水平。针对硼酸的记忆效应和基体效应，采用甲醇蒸馏法，称量 2.5 g 样品，加入 40 mL 甲醇，设计专用水浴蒸发装置避免蒸发过程中钙、镁、钠等元素的沾污，经蒸馏去除硼酸后，定容至 50 mL，采用 ICP-AES 和 ICP-MS 测定钙、镁、钠、铅、砷、铝等元素，各元素的检测范围低至 0.0001%，加标回收率在 80%~120%之间，精密度（n=6）优于 10%，满足核级硼酸中杂质元素的检测要求。

关键字 核级硼酸，甲醇蒸馏，ICP-AES，ICP-MS

参考文献

1. 冉启培，姚越，郑学家，杨子怀. 硼化物的制造和应用[M]. 辽宁科学技术出版社，2002,56-58.
2. Nakazato H, Morita H, etc. Oxidation behavior of silicon and carbon in molten iron-carbon-silicon alloys with carbon dioxide [J]. ISIJ Int. 2001, 41:61-65.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于谷胱甘肽修饰碳点荧光法检测水样中的次氯酸根

马雪、胡清清、袁静雪、冯遥、程正军*
西华师范大学

使用谷胱甘肽修饰的硅掺杂碳量子点设计了一种高选择性和灵敏度的次氯酸盐荧光方法。然后，基于谷胱甘肽和硅掺杂碳量子点之间的碳二亚胺活化偶联反应获得了双发射比绿荧光探针。即当激发波长保持在 360 nm 时，该碳点在 430 和 580 nm 处表现出强蓝色和弱黄色荧光。同时，在次氯酸根存在下，该碳点的荧光可在 430 nm 处选择性淬灭并在 580 nm 处增强，测量相应的检测限和线性范围分别为 0.35 μM 和 1.0-33.3 μM。在这项工作中，氧化猝灭是系统的传感机制。此外，该荧光探针成功地应用于实际样品中次氯酸根的测定，具有良好的准确性。

关键字 谷胱甘肽基碳点，次氯酸根，谷胱甘肽，传感机制

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

$MnSe_2$ 与吡啶取代的吡咯并吡咯氧化石墨烯协同促进电化学检测 4-硝基氯苯

罗源、黄丽娟、郝娟、贾玲普*、刘坤平
成都大学

4-硝基氯苯（4-NCB）是一种应用广泛的的化工原料，对人类和动物危害大且难以被好氧微生物降解，因此检测低浓度的 4-NCB 非常重要。我们通过两步水热法构建了 $MnSe_2$/吡啶取代的吡咯并吡咯氧化石墨烯（$MnSe_2$/PDPP-rGO），用于 4-NCB 的直接电化学检测。电化学表征技术 CV 和 EIS 说明了 PDPP-rGO 构建的 GCE 传感器具备优异的导电性和电化学活性面积，也揭示了 $MnSe_2$ 即使具有最大电阻也不会降低对 4-NCB 的敏感电化学活性。$MnSe_2$ 和 PDPP-rGO 的协同作用对 4-NCB 表现出优异的电化学传感综合性能，线性范围为 0.05-280 μM，检测限低至 4.8 nM，长期稳定性可达 20 天。这些结果充分说明 $MnSe_2$/PDPP-rGO/GCE 为 4-NCB 的检测提供了一个准确并实用的平台。

关键字 MnSe2，4-硝基氯苯，电化学传感器， 协同效应

参考文献

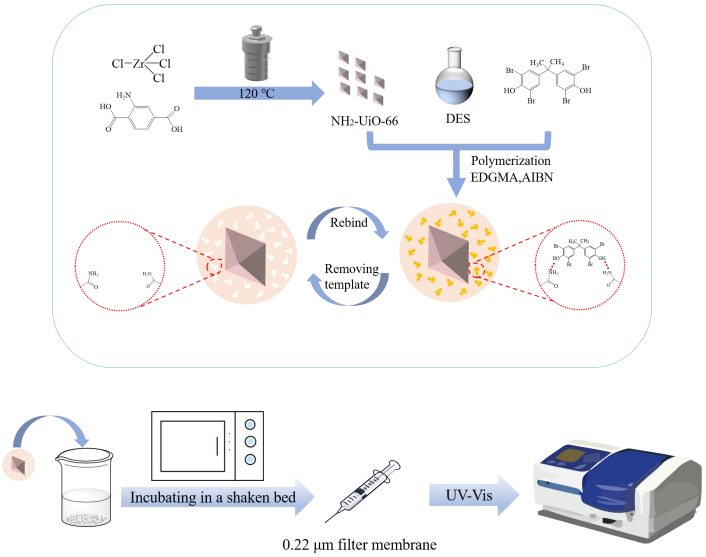
1. Jia L, Huang L, Hao J, et al. *Microchemical Journal*, 2024, 205: 111229.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于低共熔溶剂的表面分子印迹聚合物对四溴双酚 A 的特异性识别和富集

许楠、仝安袁、赵芳、陈复彬、杨春艳*
西华师范大学

本研究中，利用符合绿色化学的亲水性低共熔溶剂(DES)作为功能单体，并以金属有机框架 NH_2-UiO-66 作为载体，成功合成了对四溴双酚 A(TBBPA)具有高度选择性的表面分子印迹聚合物 (NH_2-UiO-66@MIP)。通过扫描电子显微镜(SEM)、透射电子显微镜(TEM)、X 射线衍射(XRD)和傅里叶变换红外光谱(FT-IR)对 NH_2-UiO-66@MIP 进行了全面表征。在优化条件下（25℃、50%甲醇-水溶液），NH_2-UiO-66@MIP 对 TBBPA 的最大吸附容量达到了 96.21 mg/g。吸附过程符合准二级动力学模型，表明该过程由化学吸附控制，而 Langmuir 等温模型证实了单分子层吸附的特性。NH_2-UiO-66@MIP 对 TBBPA 的选择性明显优于结构类似的化合物，具有 1.68 的相对选择性系数(RSF)。此外，材料在经过六次吸附/解吸循环后，仍然保持高于 98.36%的吸附效率，显示出良好的可重复使用性。结果表明，基于 DES 的 NH_2-UiO-66@MIP 作为水溶液中 TBBPA 去除的选择性吸附剂，具有显著的应用潜力，助力环境可持续的水净化。



关键字 低共熔溶剂，MOF，表面分子印迹聚合物，吸附，四溴双酚 A

参考文献

1. A. Baranska et al., Determination of Apoptotic Mechanism of Action of Tetrabromobisphenol A and Tetrabromobisphenol S in Human Peripheral Blood Mononuclear Cells: A Comparative Study. Molecules. **27**(18), 6052 (2022).

2. Y. Yang et al., MOF/COF heterostructure hybrid composite-based molecularly imprinted photoelectrochemical sensing platform for determination of dibutyl phthalate: A further expansion for MOF/COF application. Biosens Bioelectron. **223**, 115017 (2023).

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

具有类过氧化物酶活性的花状 Fe/NC-F 单原子纳米酶用于咖啡酸的比色传感

蒋玲、杨秀培*
西华师范大学

咖啡酸(CA)广泛存在于蔬菜、红酒、咖啡等食物中，过量摄入会对人类健康造成重大危害[1]。2017 年，CA 已被世界卫生组织列为 2B 类致癌物。比色法具有操作简单、耗时短和能实现现场检测等优点，是快速检测 CA 的较优选择。单原子纳米酶具有与天然酶相似的催化活性中心，在比色传感领域受到了许多研究者的青睐。典型沸石咪唑骨架(ZIF-8)被广泛应用于制备单原子纳米酶，但其致密骨架会阻塞金属活性位点。因此，合理设计高活性单原子纳米酶在比色传感领域具有重要意义[2]。本工作，在制备 ZIF-8 的过程中引入第二配体(5-氨基四氮唑)，合成了由二维纳米片组装成的三维碳花(ZTF),再利用模板法和高温热解制备了花状铁单原子纳米酶(Fe/NC-F)。合成的 Fe/NC-F 具有优异的类过氧化物酶活性，能催化 H2O2 产生.O2-，使 3,3',5,5'-四甲基联苯胺(TMB)氧化成蓝色的 OXTMB。引入 CA 后，由于与 TMB 竞争.O2-和自身还原性的共同作用，OXTMB 在 652 nm 处的特征吸收峰降低，构建了灵敏检测 CA 的比色传感平台。该传感器对 CA 的响应范围为 0.04-20 μM，检出限为 12 nM。同时，借助智能手机 APP 提出了 CA 的可视化传感策略，线性范围为 0.5-20 μM，检出限为 143 nM，该方法被成功应用于咖啡和蓝莓样品中 CA 的检测。

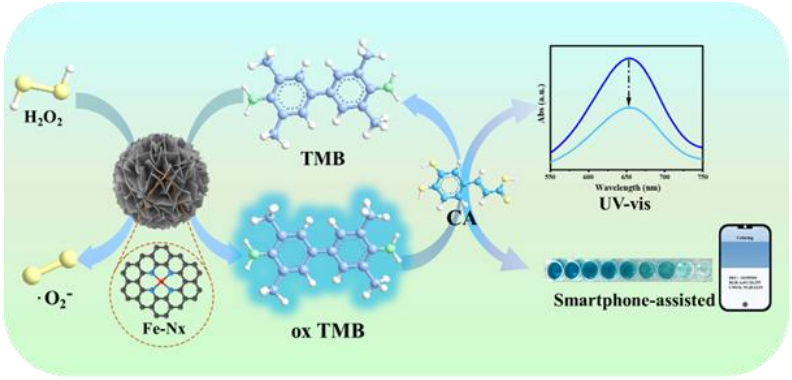


图 1. 基于 Fe/NC-F 传感平台检测 CA 示意图

关键字 类过氧化物酶，Fe/NC-F，单原子纳米酶，咖啡酸，比色传感

参考文献

1. M. Feng, X. Zhang, Y. Huang, Talanta., 2024, 271,125714-125720.
2. H. Zhang, H. Chen, X. Zhang, X. Xu, C. Wang, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 36, 2400523-2400533.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于肽纳米管激活 hemin 和 PPIX 的比色/荧光双信号传感体系灵敏检测单宁酸

唐蓉、王亚*、杨秀培
西华师范大学

单宁酸（TA）在自然界中广泛存在，常被用作食品工业中的添加剂。然而摄入过量 TA 会导致恶心、腹痛、虚弱甚至死亡，因此开发简单、准确、灵敏的测定 TA 的传感策略至关重要。而与容易受外界因素影响而产生假阳性信号的单信号传感方法相比，基于双模式信号的传感方法由于两种信号可以相互印证，其结果更可靠，更适合于复杂系统的分析。因此，本研究利用自组装肽纳米管（KL）非共价结合原卟啉 IX（PPIX）和氯化血红素（hemin），制备了 KL@PPIX-hemin 复合材料，用于单宁酸的比色/荧光双模式检测。KL 肽纳米管作为超分子载体可以为 PPIX 和 hemin 提供疏水微环境，有效抑制它们在水溶液中的聚集，从而激活 PPIX 的荧光，同时增强 hemin 的类过氧化物酶活性。结果表明，该复合材料不仅表现出强烈的红色荧光，而且能催化 H2O2 氧化 3,3',5,5'-四甲基联苯胺（TMB）生成蓝色的 ox-TMB，而生成的 ox-TMB 反过来又猝灭了材料的荧光。当体系中引入 TA 后，蓝色的 ox-TMB 被还原为无色的 TMB，材料的荧光也随之开启，以此构建了针对 TA 的比色/荧光双信号传感平台。该方法具有较高选择性及灵敏度，对 TA 的检出限低至 13.2 nM，已被用于实际茶叶样品中 TA 的检测分析。此外，该策略还能与智能手机相结合构建 TA 的可视化检测平台，为 TA 分析提供更简单、便捷的方法。

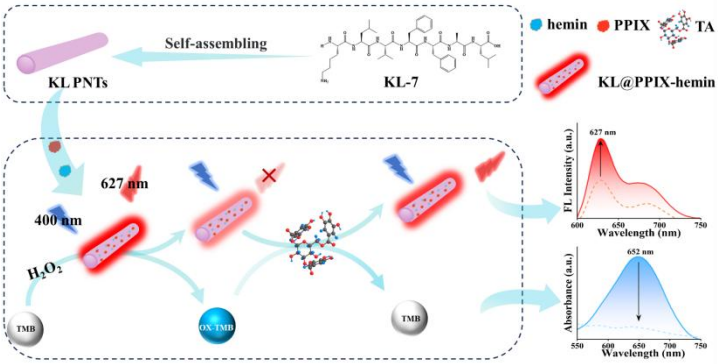


图 1. KL@PPIX-hemin 检测单宁酸示意图

关键字 肽纳米管，hemin，PPIX，比色/荧光传感，单宁酸

参考文献

1. X. Xie, X. Chen, Y. Wang, M. Zhang, Y. Fan, X. Yang, Talanta., 2023, 257, 124387-124395.

2. Y. Shen, Y. Wei, C. Nie, Y. Wu, Environ. Sci. Technol., 2023, 57, 1680-1691.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

金纳米粒子与氯化血红素共负载肽纳米管检测水样中儿茶酚

章成林、梅晓林、王亚*、杨秀培
西华师范大学

儿茶酚（CC）作为一种化学中间体和抗氧化剂广泛应用于各个领域，但其在环境中的残留会污染环境并且对人体健康构成威胁。建立快速、高效、灵敏的方法检测 CC 对于环境治理和疾病预防具有重要意义。利用酶催化体系构建的比色法具有成本低、现场使用方便等优点而被广泛应用；肽与天然酶具有相同的基本单元和相似的空间构型，可以作为肽基酶材料的构件。此外，贵金属纳米材料例如金纳米粒子（AuNPs）常被用作催化剂或增强复合材料的催化活性，进一步为构建高效肽基模拟酶提供有效的策略。

本文以两条短肽（KH 与 KL）共组装为肽纳米管，并进一步通过非共价作用同时负载氯化血红素（Hemin）和 AuNPs，制备得到了复合材料。结果表明，该复合材料与单独 Hemin 负载的肽纳米管材料相比具有更强的类过氧化物酶活性。对催化机理的探索表明，AuNPs 与 Hemin 的共同负载不仅增加了材料对底物的亲和力，还促进了催化过程的电子传输和转移，产生更多的 O2•−，加速了催化循环过程，进而增强了催化活性。还原性 CC 的加入会使复合材料催化的显色体系褪色，基于此构建了 CC 的比色传感平台，实现了对 CC 的比色检测。该方法检测 CC 在 0.03-0.8 μM、0.8-15 μM 范围内线性关系良好（检出限 15 nM），已被应用于自来水和湖水中 CC 的检测。

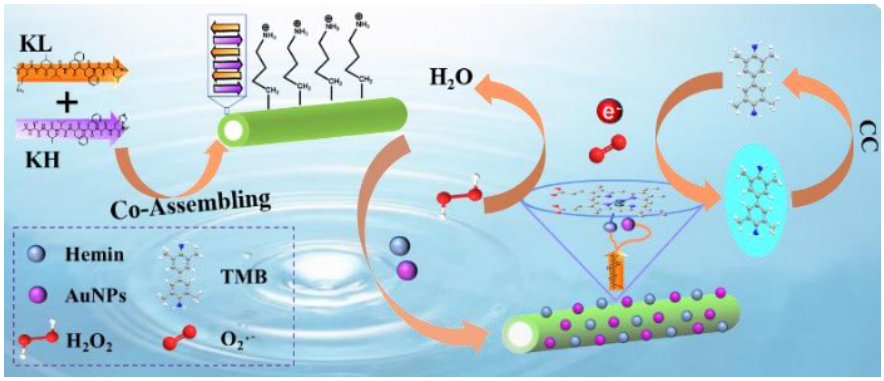


图 1. KH-3/hemin/AuNPs 制备及邻苯二酚检测示意图

关键字 金纳米粒子，氯化血红素，肽纳米管，儿茶酚

参考文献

1. L. Hou, Y. Qin, T. Lin, Y. Sun, F. Ye, S. Zhao, Sens. Actuators B Chem., 2020, 321, 128547-128554.
2. J. Han, H. Gong, X. Ren, X. Yan, Nano Today., 2021, 41, 101295-101314.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

一种连续识别 Cu^{2+}和草甘膦的荧光/比色双模式多肽探针的合成及应用研究

王鹏*、郑茂月
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验室

铜离子(Cu^{2+})的过度排放和草甘膦(Glyp)的滥用对生态环境和人类健康造成了严重的危害。在这项工作中，我们利用 5-羧基荧光素(5-FAM)作为荧光基团修饰四肽(Ala-Ser-Arg-His-NH2)，构建了一种具有荧光和比色双模式的多肽探针(FASRH)。根据设计，FASRH 在对 Cu2+呈特异性荧光猝灭响应，形成了 1：1 非荧光复合物 FASRH-Cu2+，检测限为 80.7 nM。FASRH-Cu2+复合物作为一种新型的有前景的级联探针，通过配体置换作用实现了在宽 pH 范围(7.0-11.0)对草甘膦的特异性检测，对草甘膦的特异性识别表现出高选择性和良好的抗干扰能力，具有较高的灵敏度，检测限低至 50.2 nM，并且在 365 纳米紫外灯和自然光照下都可以肉眼观察到明显的颜色变化。FASRH 不仅实现了在两个真实水样中对Cu^{2+}和草甘膦的准确检测，而且基于 FASRH 低毒性，成功应用于检测 Hacat 活细胞中的 Cu^{2+}和草甘膦。此外，将 FASRH 侵泡后的试纸制成简易测试条，成功应用于两种不同光源下的Cu^{2+}和草甘膦的视觉检测。最后，采用智能手机颜色识别软件辅助 FASRH，用于便携式检测 Cu^{2+}和草甘膦，该方法操作简单、成本低、反应快。该研究成果表明，基于 FASRH 的分析方法满足了半定量检测和视觉分析的要求，为真实样品和生物系统中的 Cu^{2+}和草甘膦的快速、灵敏、现场、实时检测提供了一种新的选择。

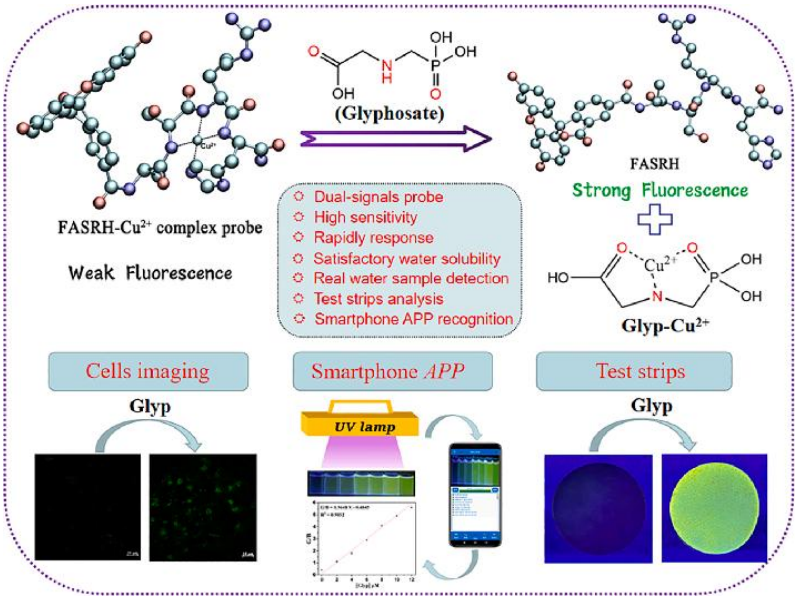


图1. 多肽探针FASRH作用机理图

关键字 多肽荧光探针，铜离子，草甘膦，生物成像，手机 App

参考文献

1. Zhou M, et al. A novel ratiometric peptide-based fluorescent probe for sequential detection of Hg^{2+} and S^{2-} ions and its application in living cells and zebrafish imaging. Spectrochim. Acta, Part A 2024, 309:123829.

2. An Y, et al. A rapid and specific fluorescent probe based on aggregation-induced emission enhancement for mercury ion detection in living systems. Journal of Hazardous Materials 2024, 465:133331.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：报告

比色/荧光双模式多肽探针的构建及对铜离子和草甘膦可视化检测研究

王鹏*、李世洋
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验室

铜离子（Cu2+）和草甘膦（Glyp）作为典型污染物被过度排放，流入河流或渗入土壤带来环境质量下降、生态平衡破坏以及公众健康危害等日益突出的环境污染问题。在这项工作中，我们以三肽分子(Met-Asp-His-NH2)为接受体，并将其与 5-羧基荧光素(5-FAM)巧妙结合设计并合成了一种新型的比色/荧光双信号探针(FMDH)。基于 Cu2+的荧光猝灭机制，探针 FMDH 在 100%水溶液中实现了对铜离子的特异性荧光猝灭识别，并形成了 1:1 型非荧光复合物，计算得检测限为 47.4 nM。由于草甘膦分子中含有能与 Cu2+强烈配位的氨基、磷酸、羧基等官能团，将草甘膦加入 FMDH-Cu2+复合物，FMDH-Cu2+复合物中的 Cu2+被草甘膦取代引起 FMDH 的荧光恢复，从而实现了草甘膦的特异性接力检测，检测限低至 29.9 nM。细胞毒性实验证实 FMDH 具有良好的渗透性和低毒性，并成功应用于活细胞和斑马鱼活体中，实现了 Cu2+和草甘膦的接力荧光成像分析。另外，基于较高的准确性和实用性，FMDH 被成功用于三种实际水样中 Cu2+和草甘膦的高灵敏检测，通过滤纸浸泡将 FMDH 制备成了简便的测试条，在便携式紫外灯下实现 Cu2+和草甘膦的可视化快速分析。最后，将 FMDH 与智能手机颜色识别软件巧妙结合，建立了一种快速、灵敏、高效的传感系统，在无需其他复杂昂贵设备的条件下实现了 Cu2+和草甘膦的半定量检测。该研究成果为双信号探针的构建及现场环境中重要污染物的可视化快速便携检测提供了新思路。

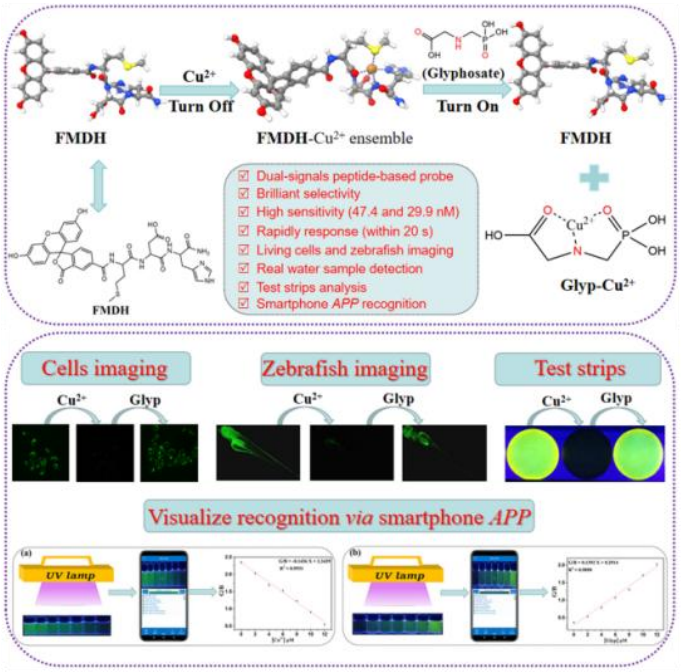


图 1. 多肽探针 FMDH 作用机理图

关键字 双模式探针，铜离子，草甘膦，生物成像，手机 App

参考文献

1. Li S, et al. A dual-signals fluorometric and colorimetric peptide-based probe for Cu(II) and glyphosate detection and its application for bioimaging and water testing. Science of the Total Environment 2024, 945: 174163.

2. An Y, et al. Peptide-based probe for colorimetric and fluorescent detection of Cu^{2+} and S^{2-} in environmental and biological systems, Journal of Hazardous Materials 2024, 465: 133192.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

具有大斯托克斯位移的多肽荧光探针的构建及对镉离子检测的研究

王鹏*、邓伟良
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验室

镉是一种毒性很强的重金属，广泛应用于冶炼、磷肥、镍镉电池等领域，这些镉经工业废水、化肥灌溉、金属废弃物等途径流入到生活环境后会严重威胁人类身体健康，诱发肺癌、前列腺癌等重大疾病。鉴于镉离子的危害本项工作设计了以（Pro-Gly-Cys）三肽为识别基团，以丹磺酰氯为荧光团的具有大斯托克斯位移（330 nm）的多肽荧光探针（DPGC）用于在 100%水溶液中准确、快速的识别镉离子。基于螯合荧光增强原理，DPGC 可以在 17 种金属离子中及时地特异性识别 Cd2+并形成 2:1 的配合物导致荧光发生 22 倍增强，最大发射波长从 560 nm 蓝移至 525 nm，且不受其他金属离子、阴离子和氨基酸的影响。DPGC 具有高选择性的同时其对 Cd2+检测限低至 12.4 nM 远低于 WHO 饮用水中 Cd2+的标准(26.7 μM)。DPGC 还具有快速响应能力和良好的光稳定性，可以在 30 s 内快速识别 Cd2+，且在 3 h 内荧光强度保持不变。除此之外，可逆性也是优良探针的特征之一，DPGC 结合 Cd2+形成 2DPGC-Cd2+配合物实现荧光增强，在 EDTA 存在下 2DPGC-Cd2+体系中的 Cd2+被置换出来，荧光发生恢复，且这种可逆循环过程可达 8 次。鉴于 DPGC 优异的性能，将 DPGC 应用于实际水样中检测 Cd2+，结果显示不同水样中 Cd2+的回收率为 95.3%～108.0%，RSD (n = 3)为 0.26%～2.74%，较高的准确度表明 DPGC 具有在现实环境中检测 Cd2+的潜力。DPGC 还被成功应用于活细胞和斑马鱼活体中 Cd2+的荧光成像， 这说明 DPGC 具有良好的生物相容性和低毒性。在 365 nm 紫外灯下，向 DPGC 溶液中加入 Cd2+，溶液由深蓝色变为海绿色实现了 Cd2+的可视化检测，并且利用智能手机上的颜色识别软件对溶液颜色的 RGB 值进行分析从而实现了 Cd2+的半定量检测。总之，该项工作对 Cd2+的分析与检测具有一定的实际意义。

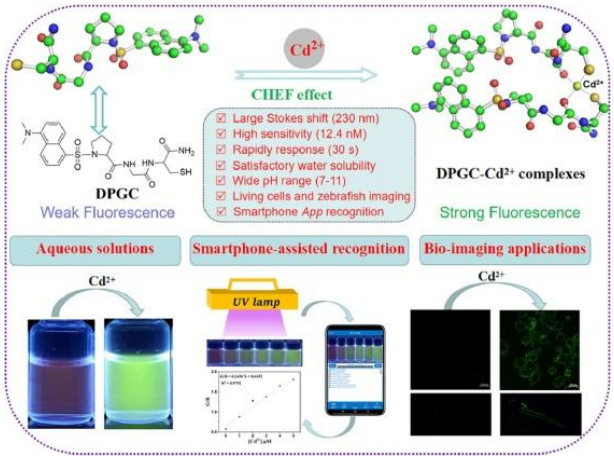


图 1. 多肽荧光探针 DPGC 的作用机理

关键字 多肽荧光探针，大斯托克斯位移，镉离子，生物成像，手机颜色识别

参考文献

1. H. Yu, Q. Zhao, Sensitive electrochemical sensor for Cd^{2+} with engineered short high-affinity aptamer undergoing large conformation change, Talanta 271 (2024) 125642.

2. S. Francis, L. Rajith, Water soluble porphyrin for the determination of Cd^{2+} metal ion and glucose, J. Photoch. Photobio. A (2024) 115352.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

基于多肽荧光探针序列识别铜离子和草甘膦的合理设计:智能手机、试纸、实际样品和活细胞应用

王鹏*、蒲春梅
西华师范大学化学化工学院，化学合成与污染控制四川省重点实验室

铜离子（Cu2+）和草甘膦（Glyp）作为典型污染物,自然环境中 Cu2+的高浓度会损害海洋和河流的自净能力。而草甘膦的过度使用不仅会破坏生态系统，环境中残留的草甘膦还会通过生物富集在动物体内积累，并沿食物链扩散，对非靶生物产生毒性作用。我们以丹酰荧光团为荧光团，通过连接三肽骨架(Met-Asp-His-NH2)，设计合成了具有大 Stokes 位移(225 nm)的新型肽基荧光探针 DMDH。基于 DMDH 与顺磁性 Cu2+以 2:1 的化学计量比稳定结合，DMDH 在 Cu2+检测中优先显示荧光“关闭”模式。当进一步将草甘膦引入 DMDH-Cu2+复合物中时，通过 Cu2+与草甘膦的配位结合，DMDH-Cu2+复合物恢复荧光。同时，DMDH 对 Cu2+和草甘膦的检测线分别为 40.6 nM 和 10.6 nM。另外，三种不同水样中 Cu2+和草甘膦的回收率分别为 99.2~107.3%和 96.0~111.0%。此外，由于 DMDH 具有良好的渗透性和低毒性，因此成功地应用于活细胞中 Cu2+和草甘膦的监测。最重要的是，通过智能手机辅助试纸传感系统捕捉到系统明显的颜色变化，实现了 Cu2+和草甘膦的可视化现场分析。总之，DMDH 的发展将为真实环境样品和活细胞系统中 Cu2+和草甘膦的快速、视觉和高效检测提供一种有前景的方法。

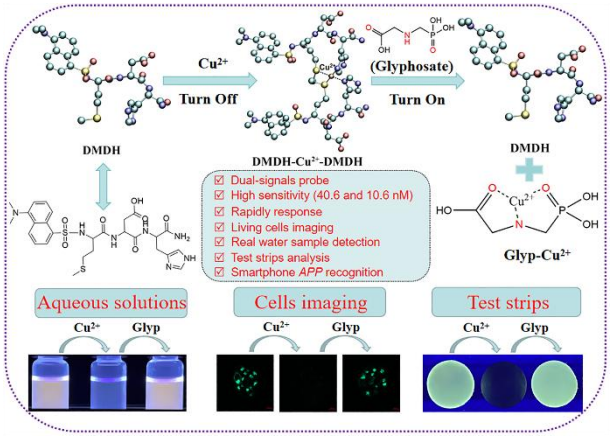


图 1. 多肽探针 **DMDH** 作用机理图

关键字 多肽荧光探针，铜离子，草甘膦，智能手机，生物成像

参考文献

1. R.A. Festa, D.J. Thiele, Copper an essential metal in biology, Curr. Biol. 21 (2011) 877–883.
2. D.J. Waggoner, T.B. Bartnikas, J.D. Gitlin, The role of copper in neurodegenerative disease, Neurobiol. Dis. 6 (1999) 221–230.
3. C. Andreini, L. Banci, I. Bertini, A. Rosato, Occurrence of copper proteins through the three domains of life: a bioinformatic approach, J. Proteome Res. 7 (2008) 209–216.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：墙报

往复筒法测定血塞通软胶囊有效成分的体外溶出度

沈祥、朱小迪*
路易企业有限公司

目的 采用《中国药典》2020 版溶出度第七法往复筒法建立血塞通软胶囊的体外溶出方法。

方法 采用往复筒法，考察血塞通软胶囊在不同溶出介质（纯水和 0.5%吐温 80）、往复频率、筛网规格、溶出时间下的溶出行为。

结果 采用水为溶出介质，往复频率 40dpm，无上筛网、下筛网 40 目，45min 内可实现血塞通软胶囊目标组分溶出度>80%。其中三七总皂苷和五种人参皂苷（三七皂苷 R1，人参皂苷 Rg1，人参皂苷 Re，人参皂苷 Rb1，人参皂苷 Rd）的精密度在 0.04%~3.81%，均小于 5%。

结论 本论文建立的往复筒测定血塞通软胶囊溶出度方法，较常规桨法有利于改善血塞通软胶囊的溶出，且避免常规桨法软胶囊内油性基质漂浮影响取样，导致结果平行性不好的弊端，可以作为血塞通软胶囊的质控方法。该方法对传统中成药中复杂成分的溶出度质量控制，提供了新的可行性思路。

关键字 溶出度，往复筒法，中成药，血塞通软胶囊

分会场：43.四川分析检测论坛
交流形式：报告

多量表联合常规检验数据的敌草快中毒患者预后评估研究

戴鑫华[1]、赵韩[1]、张静[2]、范飞[3]、李亚梅[1]、安云飞[1]、邹远高[1]、张蕾[1]、白杨娟*[1]
1. 四川大学华西医院
2. 四川大学华西第四医院
3. 四川大学华西基础医学与法医学院

背景：敌草快中毒是农药中毒最常见的类型之一，尚无有效解毒剂，易引起多器官 衰竭，死亡率较高。敌草快中毒患者的早期预后评估对辅助临床开展精准化治疗、减少非必要的过度治疗、提高患者的生存率与生活质量等方面具有重要意义。目的：筛选与敌草快中毒预后相关的临床检验指标与临床量表，基于机器学习算法建立早期预后评估模型，并与临床现用方法比较，为敌草快中毒患者的早期预后评估提供简便、快捷、准确的决策方法。方法：回顾性收集 2021 年 1 月-2023 年 12 月华西医院及华西第四医院收治的 98 例资料完整的急性敌草快中毒患者的病历资料，内容包括血常规指标、凝血常规指标和生化指标，并记录患者入院后的 APACHE II 评分、SOFA 评分、GCS 评分。根据预 后不同将百草枯中毒患者分为存活组（n=56）和死亡组（n=42）。通过独立样本 t 检验与 LASSO 回归分析对检验指标降维筛选，建立单指标预后评估模型、常规检验指标综合模型、量表评分综合模型和常规检验指标联合量表评分综合模型，模型性能通过 ROC 曲线、校准曲线和决策曲线评估。结果：独立样本 t 检验和特征降维筛选得到 CO2、eGFR、 RBC、年龄和 APTT5 个常规检验指标以及 APACHE II评分和 SOFA 评分 2 个临床量表评分，其中 CO2、eGFR 在存活组中显著升高，RBC、年龄、APTT、APACHE II 评分和 SOFA 评分在死亡组中显著升高。常规检验指标联合量表评分模型的预测性能高于常规检验指标综合模型，其中 Logistic 模型的综合性能最佳，AUC 为 0.930（95%CI, 0.825-1.000），准确度为 0.835（95%CI, 0.789-0.881）。结论：本研究构建了基于常规检验指标联合量表评分的敌草快中毒早期预后评估机器学习模型，该模型效能最佳，且优于临床现用方法，有望应用于临床实践。

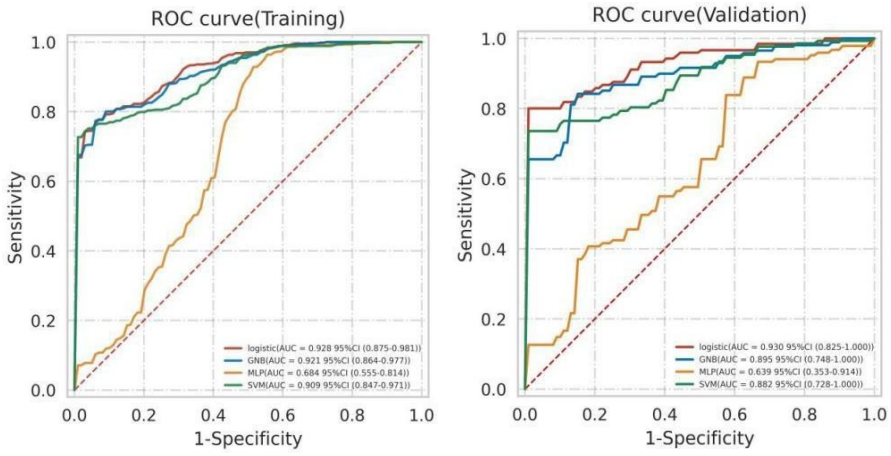


图1. 检验指标联合量表评分综合模型测试集 ROC 曲线（左）与训练集 ROC 曲线（右）

关键字 敌草快中毒，预后评估，量表，机器学习

参考文献

1.He C, Liang L, Zhang Y, et al. BMC emergency medicine, 2024, 24(1): 61.
2. Yan M, Liu H, Yang Y, et al. Internal and emergency medicine, 2024, 19(2): 307-312.
3. Godinjak A, Iglica A, Rama A, et al. Acta medica academica, 2016, 45(2): 97-103.

分会场：43.四川分析检测论坛
交流类型：报告

液相高分辨质谱表征抗体偶联药物 RC48 的临床前研究

许韬韬*、刘玉淑、罗世英、秦永平
成都海枫生物科技有限公司

抗体偶联药物（ADC）是靶向特异性抗原的抗体通过可切割的或不可切割的连接子链接具有强大杀伤力的细胞毒素的药物。这种“导弹攻击式”的结构能够将药物直接输送到特定的癌细胞或组织中，具有优良的靶向性和选择性，同时减少对健康组织的损伤，降低药物的毒副作用。因此，ADC 药物在癌症治疗中显示出了巨大的潜力，被广泛研究且已有数十款药物应用于临床治疗中。

目前 ADC 药物研究也面临许多挑战，包括特异性、耐药性、药物毒副作用及合适的表征技术。2023 年 NMPA 发布的《抗体偶联药物非临床研究技术指导原则》要求 ADC 药物在进行药代样品生物分析前，需要根据 ADC 的组成、理化特性、体内代谢情况以及对检测灵敏度和线性范围的要求等因素，选择和建立合适的检测方法，并完成相应的分析方法学验证。因此，临床前对 ADC 药物进行相关表征是必不可少的，为后续的药物代谢动力学研究、药物有效性评价及药物安全性评价提供依据。

作者通过 UP-HRMS（Orbitrap Exploris 240）对已上市的国产 RC48 药物进行了结构表征，对 RC48 药物的前处理及液相质谱条件进行了方法开发与优化，完成了 RC48 完整分子量、轻重链分子量、DAR 值、氨基酸序列、翻译后修饰、糖基化位点及药物偶联位点分析，满足临床申报要求。

结果显示：

1）RC48 的完整分子量、轻重链分子量与对应的理论分子量误差≤40 ppm；

2）轻链 DAR 值为 0.52，重链 DAR 值为 1.62，ADC 的 DAR 值为 4.26；

3）氨基酸序列：通过 Trypsin 酶进行 K，R 的 C 端酶切后分析，ADC 单抗重链的蛋白序列覆盖度为 96.0 %，轻链的蛋白序列覆盖度为 100.0 %；

4）翻译后修饰结果： 1 个 C 端赖氨酸 （128 Da）丢失、7 种天冬酰胺脱酰胺修饰、4 种甲硫氨酸氧化修饰和 3 种色氨酸氧化修饰；

5）糖基化位点确认及糖型分析：共鉴定到 7 种糖基化修饰的肽段，其中含量较高的是 A2G0F、A2G1F 和 A2G2F；

6）ADC 药物偶联位点：在半胱氨酸结合药物分子的肽段的串级质谱图中存在特征碎片离子 152.10、321.20 、718.50 和 1366.22，确认轻链中 1 半胱氨酸位点和重链中 3 个赖氨酸位点。

关键字 高分辨，ADC，分子量，DAR 值，氨基酸序列，偶联位

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流形式：报告

科技创新高质量发展与试验技术能力评价体系

王海舟*
中国钢研科技集团有限公司/中国工程院

科技创新实验技术人才队伍是支撑科学研究、加快新质生产力建设的重要力量，CSTM/NTC 委员会为适应加快发展新质生产力的需求，深化改革，扎实推进高质量发展，建立了试验人员通用试验技术与专业试验技术相结合的（CSTM/NTC）试验人员技术能力评价体系。该体系根据多样化需求按《标准试验操作能力》、《通用试验技术能力》、《专业试验技术能力》和《标准化高级试验技术能力》四种分类开展培训和考核。（CSTM/NTC）试验人员技术能力评价将为实现新质生产力、全产业链创新高质量发展提供有力的保障。

本报告为特邀报告。

关键字 科技创新，实验技术人才，科学研究，新质生产力

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流类型：报告

标准化人才助推科技创新

申孟芝*
中国科学院国家空间科学中心

通过科学试验标准化概述、标准化高级人才队伍建设、如何成为标准化高级人才对标准化人才助推科技创新进行阐述，并通过实际案例讲解。

关键字 标准化高级人才，科学试验

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流类型：报告

科技创新实验技术专业人才培养与能力认定

张莉*、负琳
北京大学

高校实验技术队伍是支撑科学研究和人才培养的重要力量。在双一流建设背景下，高校实验技术队伍建设面临新的挑战。本文以高校分析测试平台为例，阐述了平台通过顶层设计、科学设置岗位、统筹队伍布局，招聘并培养高素质人才，分层次建立专业素质过硬的实验技术队伍。通过定期业务交流、试讲展示和团队建设活动，提升人员素质，完善激励机制，拓宽职业发展渠道，为打造高水平高素质的实验技术队伍提供了新思路。平台的实践表明，高校实验技术专业人才的培养应围绕高校实验技术平台的核心使命，强化技术支撑与创新能力，通过绩效考评、团队建设等机制，实现人才成长与平台能力提升的双赢。

关键字 科技创新，实验技术专业人才，高校分析测试平台

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流类型：报告

办好电镜教育 传承电镜文化

郭新勇*
河南微束科技集团有限公司

理念是行动的先导，一切发展实践都是由一定的发展理念来引领的，发展理念是否对头，从根本上决定了企业发展的成效乃至成败。随着我国科教事业的蓬勃发展，微束科技集团以实验室经济为引擎，紧紧围绕高校产业，秉承“从商育人”的理念，经过近 20 年的发展，已拥有省市级新型研发机构、工程技术研究中心、示范转移机构、重点实验室等科研平台，先后获批国家级高新技术企业、河南省专精特新企业，承担市省级科研项目 5 项，专利 20 项、软件著作权 8 项。

集团从市场销售、技术服务、科技研发、生产制造、技术培训、文化教育等六个方面，系统性地建立了企业生态，并构建了“中镜科仪”“中科百测”“河大科技”“菲泰姆”“中镜教育”五大战略品牌，在国内十多个城市建立了分支机构，产品远销海外，实现了全球化的市场布局。

集团通过校企合作，创办了国内首个电子显微镜技术专业，建立了中国材料与试验标准平台及全国分析检测人员能力培训委员会（CSTM/NTC）联合认证的培训机构和考评基地，为国家培养和输送了一批电镜专业高技能人才，就业单位分布在北大、清华等高等院校、科研院所和仪器设备厂家，促进了产学研紧密结合，为职业教育开辟了新的领域，开创了电镜专业学制教育的历史先河。

在传承电镜文化方面，集团先后举办了五届“全国电镜维护管理与教学论坛”，两届“中镜科仪杯超薄切片”大赛，两届“电镜整机维护与管理培训班”，为传播电镜知识，弘扬电镜文化，发挥了重要作用。同时，通过收集社会闲置报废的老旧电镜，整理相关故事，创办了中国首个电子显微镜博物馆，并以 VR 形式进行展示，引起了社会各界的广泛关注，为学生增加了科学教育史的场所，更为社会敞开了一扇电镜科普教育之门。

集团在“从商育人”理念的引领下，不断探索创新，已逐步成长为电子显微镜领域的领军企业。未来，集团将继续发挥自身优势，为传承和弘扬电镜文化，推动我国科教事业的发展作出更大的贡献。

关键字 从商育人，电镜实验技术，实验技术人才，电子显微镜专业

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流形式：报告

精准赋能：构建科学仪器行业人才数字化培养体系

张小师*
北京信立方科技发展股份有限公司

报告概述了科学仪器行业在人才培养方面的现状、挑战以及数字化转型的必要性。通过介绍数字化培训平台的优势和在线教育资源的创新应用，旨在为行业提供构建人才数字化培养体系的参考和指导，以实现精准赋能，推动行业的持续发展和创新。

关键字 科学仪器行业，人才培养，数字化培训，培养体系

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流形式：报告

产教同行，助推新质生产力发展 —— 国家级生物医药市域产教联合体探索与实践

马菲菲*
天津医学高等专科学校

目的:学校作为唯一卫生健康类国家级“双高计划”建设院校，坚持“四个面向”，服务新质生产力发展。研究方法:加强体制、机制创新，在市委市政府的大力支持下，依托天津经济技术开发区，与天津科技大学、天津国际生物医药联合研究院有限公司共同牵头，组建国家级生物医药产教联合体，推进职普融通、产教融合、科教融汇，优化职业教育类型定位。结果：人才培养质量和社会、产业服务能力显著增强。结论：聚焦难点共性问题，以国家级生物医药市域产教联合体为平台，“产学研创合作项目”为载体，有利于推进教育、科技、人才“三位一体”协同融合发展。

关键字 产教融合，科教融汇，职普融通

分会场：44.科技创新实验技术人才队伍建设论坛
交流形式：报告

CSTM/NTC 试验人员技术能力培训机构与考核基地管理要求

佟艳春*
中关村材料试验技术联盟

CSTM/NTC 委员会为适应加快发展新质生产力的需求，深化改革，扎实推进高质量发展，建立了试验人员通用试验技术与专业试验技术相结合的（CSTM/NTC）试验人员技术能力评价体系，为实现新质生产力、全产业链创新高质量发展提供有力的保障。

本报告为特邀报告，详细介绍了（CSTM/NTC）试验人员技术能力评价管理办法、能力证书管理办法、培训机构与考核基地管理办法以及教师资质认定管理办法，报告还将对培训机构评审准则进行详细讲解。

关键字 试验人员，试验技术，能力评价

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流形式：报告

氢能催化材料创制与应用

郭少军*
北京大学

世界能源结构未来势必向绿色化、低碳化、高效化、可持续化和智能化的方向发展。面向我国氢能可持续发展和双碳战略重大战略需求，针对氢电能源化学（材料）领域面临的能源转换效率低的难题，提出了材料应变调控催化理念，揭示了材料应变、电荷与催化的构效关联，创制了高效氢能催化剂新体系，开发出自主产权国际领先水平的氢电能源转换器件，显著提升了氢电能源转换效率，推动了材料应变催化理念在燃料电池、氢能、二次电池和电化学传感等领域的应用，有力促进了化学、材料和能源学科的交叉与融合。

关键字 催化材料；氢能；燃料电池；原位电镜表征

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流形式：报告

原位电镜表征在工业催化剂上的应用

蒋复国*、王鹏、韩志华、尉琳琳
北京低碳清洁能源研究院

催化剂在反应时的晶粒尺寸、晶体结构、及元素分布，会随着不同的反应条件产生变化，而这些空间上的变化情形，一般可以利用原位电镜在反应条件下（气氛、加热）进行实时观察与记录其晶体结构与物相变化，用以解释催化剂反应的机理。

报告内容主要为利用原位透射电镜在气氛及加热条件下对费托催化剂进行表征。（1）在费托铁基催化剂中，一般认为，经过还原的氧化铁，经过氢气还原后，通入 H_2：CO=2：1 的合成气及 350℃下，能生成χ-Fe_5C_2；然而，ε-Fe_2C 能在较低温度下（280℃），直接生成在还原后的 Raney-Fe 颗粒表面 1，与核心的 Fe 形成共格生长。ε-Fe_2C 的外延生长与χ-Fe_5C_2 的核心向外生长机制不同；另外，ε-Fe_2C 本身具有极低二氧化碳选择率，外延生长的特性能使得 ε-Fe_2C 在铁表面获得极高的比表面积，因而提高催化剂的反应效率。（2）利用电镜观察费托一步法制烯烃催化剂中纯相 χ-Fe_5C_2 的形成过程 [2]；一步法制烯烃是利用在特定的温度和压力下，通入合适比例的 CO/H_2 合成气，能略过还原过程，直接获得高产率的烯烃。原位电镜结果发现，前驱体 Raney-Fe 颗粒会随着温度的升高逐渐聚集成为较大的颗粒，此时形成的颗粒为非晶形态，当温度到达 350℃时，从高分辨图像得到的反傅里叶变换图像可知，χ-Fe_5C_2 会逐渐从颗粒核心部位长大，直到整个颗粒完全长成 χ-Fe_5C_2。持续一段时间之后，显示 χ-Fe_5C_2 在反应气氛中稳定存在，代表χ-Fe_5C_2 已经稳定运行费托反应。

关键字 in-situ TEM, Fischer-Tropsch, catalyst, syngas

参考文献

1. Peng Wang, Wei Chen, Fu-Kuo Chiang, et al.. Synthesis of stable and low-CO_2 selective -iron carbide Fischer-Tropsch catalysts. Science Advance, 2018, 4: P1
2. Peng Wang, Fu-Kuo Chiang, et al., Efficient conversion of syngas to linear a-olefins by phase-pureχ-Fe_5C_2, Nature, accepted

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流形式：报告

二维碳材料的电子显微学和光谱学分析

刁玉霞*，向彦娟，忻睦迪，何文会，徐广通,邱丽美
中石化石油化工科学研究院有限公司

本文对一系列二维碳材料（石墨烯、掺杂型石墨烯、含官能团石墨烯）进行了图谱和图像分析。结果表明，相比较高纯的石墨烯，官能团的引入导致石墨烯的二维结构出现较多的缺陷，Raman 光谱的 ID/IG 反映出的石墨烯质量与电镜图像观察的一致。FTIR 结果表明，石墨烯基二维碳材料区别于高纯石墨烯的红外吸收谱，具有官能团的吸收谱峰。从 XPS 的结果来看，表面碳的化学态呈现多样性，n(C) / n(O)物质的量之比直观反映了石墨烯基材料的质量。针对几个商品化的石墨烯样品的综合分析，最后得出，电镜表征和谱学表征可以联合使用作为石墨烯品质鉴定的主要物化表征方法。

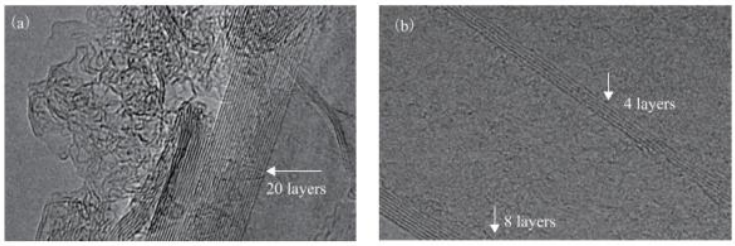


图 1 HRTEM 图像(a)纳米石墨烯 (b)高纯石墨烯。

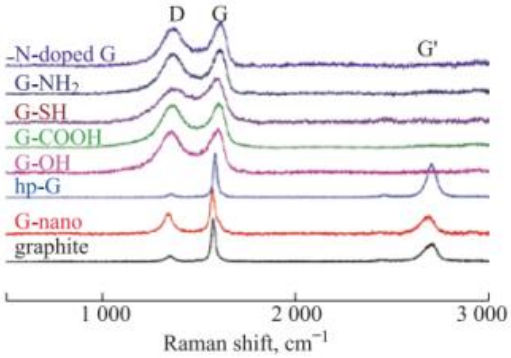


图 2 石墨烯基 2D 碳材料的 Raman 谱图。

关键字 二维碳材料，电子显微学，Raman，XPS

参考文献

1. Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Science, 2004, 306(5696):666-669.
2. Zhong Y, Zhen Z, Zhu H. FlatChem, 2017, 4:20-32.
3. Meyer J C, Geim A K, Katsnelson M I, et al. Solid State Communications, 2007, 143: 101-109.

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流形式：报告

原位 TEM 表征在电极材料中的应用

崔洁*[1]、杨贤锋[1]、张磊[2]、胡仁宗[3]
1. 华南理工大学分析测试中心
2. 华南理工大学化学与化工学院
3. 华南理工大学材料科学与工程学院

纳米结构工程以及界面工程被广泛认为是提高材料电化学性能的有效途径，在原位表征技术的助力下，可以确定更合理的纳米结构材料设计。

针对锂离子电池负极材料（SnO_2）转化和合金化反应转换反应的可逆性较差、低可逆容量和较差的循环稳定性等问题，本文通过精心设计 SnO_2-Mo 的界面结构，制备了多层 Mo/SnO_2/Mo 薄膜电极材料，实现了突破性的综合性能，为确定界面结构与性能关系，结合原位 TEM 等表征技术及理论计算证实 SnO_2 和 Mo 之间的氧原子再分配导致的非晶态 SnO_2/Mo 界面能够精确地调节多层膜的可逆容量和循环稳定性，而电极的稳定容量随界面密度呈抛物线分布，氧在 SnO_2/Mo 异质界面中的重分布通过诱导内建电场促进了 Li 离子输运动力学及 SnO_2 反应的可逆性。

针对钾离子 Sb 基负极材料，本文设计了具有核壳结构 Sb@C 纳米盒嵌入的碳纳米纤维（Sb@CNFs），通过原位 TEM 观察到核壳结构能够有效缓解合金化过程中的体积膨胀，证实由层状核壳结构单元组成的 Sb 基纳米纤维能够大改进钾离子电池负极性能。针对钾离子 Bi 基负极材料，本文设计了具有 Bi-O-C 键耦合和内部空隙空间的二维铋@氮掺杂碳片材料，结合原位 TEM 观察可视化了实时钾化/去钾化过程，证明空隙空间和塑性碳壳可以有效缓解剧烈的体积变化并有力地保持结构完整性。针对 SbxBi1-x@NC 复合电极材料，本文通过原位 XRD 和原位 TEM 观察确认了该复合体系的合金的钾化以及去钾化结构演变过程，确认合金纳米棒在循环过程中的膨胀和碳层的约束和缓冲过程。

本文将结构设计和原位分析技术结合，充分揭示界面工程及纳米结构的结构优势，并为应用先进的表征技术指导电极材料设计优化提供重要参考。

关键字 原位 TEM、电极材料、界面工程、纳米结构设计

参考文献

1. X. Lan, J.Cui, R.Z. Hu, X.F. Yang, S.Q. Wu, M.Zhu. Advanced Materials. 2022, 21063663.
2. H. Huang, R. Bi, J. Cui, L. Zhang, X.F. Yang, Journal of Energy Chemistry, 2021, 59, 405-418.
3. H.W. Huang, J.W. Wang, X.F. Yang, R.Z. Hu, L. Zhang, M. Zhu, Angew. Chem. 2020, 132, 14612 – 14618. 4. A.D. Xu, Q. Zhu, G. Li, J. Cui, SP. Wu, Z.G Xu, Y.R. Yan, Small, 2022, 18, 2203976.
5. J.H. Liu, J.Cui, X.J. Xu, M. Zhu, J.Liu, Small, 2023, 19, 2301444.

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流类型：报告

“进”无止境——赛默飞世尔电镜的进化与进取之路

张桢*
赛默飞世尔科技（中国）有限公司

电子显微镜是人类认识物质世界的重要工具，同时也被誉为分析仪器皇冠上的明珠。赛默飞作为从电子显微镜商业化以来就深耕在这一领域的品牌，在 80 多年的时间里不断突破自我，创造纪录，引领技术，服务用户。本报告将利用一些案例，介绍赛默飞电镜以进取的心态在电镜产品迭代、AI 融合、应用拓展方面的新进展。

关键字 电子显微镜

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流类型：报告

原位进样技术研发进展

郭云昌*
仪凰（无锡）光谱测控有限公司

近年来清洁、高效的新型可再生能源迎来了飞速发展，而各种储存新型能源的技术一直是许多国家研究攻关的课题。

储能技术种类繁多，目前氢储能、锂电池储能具有定代表性，相关研究与应用已受到国家的高度重视。敏感样品的转移和原位实验研究已然成为上述两种储能技术的科研发展的重点与难点。

关键字 原位进样、敏感样品

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流形式：墙报

中空可变纳米颗粒及其复合纳米材料的形貌与组成表征

林华*
大连理工大学

中空多孔纳米材料可控合成监测及其负载功能颗粒的表征依然存在挑战，采用透射电镜记录纳米颗粒的形成过程，形貌变化和成分组成是中空纳米材料可控合成的关键。本课题采用透射电镜技术实现帽状和多腔室中空纳米颗粒尺寸、形貌以及内部空腔结构的调控，并将 AuPd 纳米颗粒负载于碳化后的多腔室碳纳米球上并对其组成进行分析，实现透射电镜与纳米颗粒可控合成的有效结合。

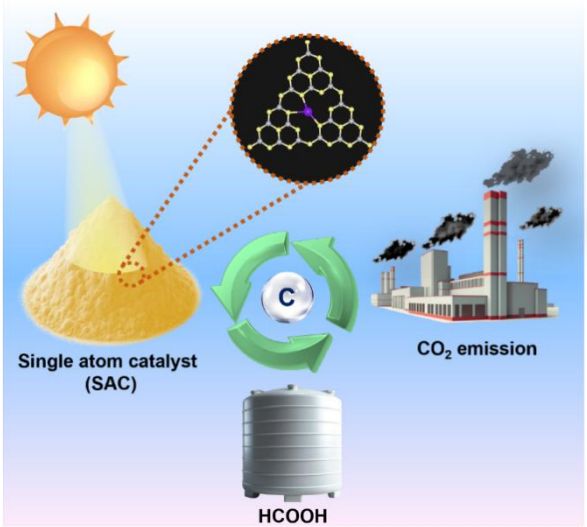
关键字 中空纳米材料；可控合成；透射电镜形貌表征；纳米材料组成分析

分会场：45.电子显微分析仪器、应用与先进材料论坛
交流形式：墙报

位点调控对氮化碳光催化 CO_2 还原的影响

段有雨，甘立勇*，周小元*
重庆交通大学

“2030 年前实现碳达峰、2060 年前实现碳中和”是党中央经过深思熟虑做出的重大战略部署，也是我国应对气候变化对世界做出的庄严承诺。通过模拟自然光合作用，利用太阳光驱动水和 CO2 光催化转化为高附加值的燃料或化学品被认为是实现“碳达峰、碳中和”的最有前景的技术之一。光催化剂是该技术的核心，因此，发展高效光催化剂，具有重要的科学意义和广阔的应用前景。光催化 CO2 还原反应涉及 CO2 还原和 H2O 解离，然而单位点单原子催化剂通常只能实现单分子活化，无法同时实现多分子活化和解离过程。因此，报告人聚焦于 CN 材料表面反应活性位点匮乏、反应物吸附困难以及光生载流子分离效率低等关键科学问题，采用缺陷工程和单原子修饰等方法来调控该体系的表面反应物分子吸脱附动力学、光吸收能力和光生载流子动力学等，并初步探索了一种 SACs 的工业化制备方法。



关键字 单原子催化，大剂量，高负载，CO_2 还原

参考文献

1. Y. Y. Duan, L. Y. Gan, X.Y. Zhou et al., Adv. Energy Mater., 2021, 11: 2004001.
2. Y. Y. Duan, L. Y. Gan, X.Y. Zhou et al., Adv. Funct. Mater., 2023, 2301729.
3. Y. Y. Duan, L. Y. Gan, X.Y. Zhou et al., Adv. Mater., 2024, 2404900.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

本草物质科学研究方法与技术毒性与毒性评价仪器

江桂斌*、曲广波、王丁一
中国科学院生态环境研究中心

当前我国环境与食品安全形势十分严峻，现有的污染物风险评估方法及国际上已有的毒性评价体系仅限于单一物质或纯化学品毒性筛查，并未涉及复杂基质及未知物的识别与毒性评价，难以用于实际环境和食品等体系。本研究聚焦污染物低剂量复合暴露下未知污染物快速分离、定性定量及高通量毒性筛选等关键科学问题，提出将微量复合污染物识别与毒性评价结合一体的全新思路，并结合化学分析、生物传感以及效应导向毒物筛查等技术，研制了国际上首台高通量多功能成组毒理学分析系统。主要研究内容包括：（1）发展了高通量自动化样品分离和制备技术，构建了复杂介质样品分离与制备子系统，实现了复杂介质样品中微量组分的自动提取、富集、纯化、收集及规模化制备；（2）发展了无机物、有机物及细颗粒物等有毒物质的分析与鉴定技术，构建了有毒物质的仪器分析与结构-性质关系综合鉴定子系统，实现了复杂样品中未知污染物自动多维分离、定量及定性分析；（3）从生物有效性、细胞/分子生物学效应、生物靶分子结合三个层次，构建了多靶点高通量生物评价子系统，实现了复杂样品的高通量多靶点自动化毒性评价；（4）建立了基于计算模拟的污染物体内潜在靶点筛查方法和计算模块的数据一体化分析平台，实现污染物和生物大分子相互作用模式计算和成组毒理学数据解析。本研究建成的高通量、在线仪器系统为复杂体系中污染物快速筛查、鉴定及复合毒性效应评价的同步实现等研究提供了全新的技术手段和通用平台，将大大推动我国环境科学与毒理健康基础研究水平，在环境保护、食品安全、军事毒物分析、中药成分解析、国家安全等领域得到广泛应用。

关键字 成组毒理学，效应导向分析，复杂样品，高通量，自动化

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

基于多维高效制备技术的本草物质科学研究

梁鑫淼*、刘艳芳、王纪霞
中国科学院大连化学物理研究所

本草物质科学是指使用现代科学理论和技术手段系统研究中药的化学物质组成、结构和生物学效应的科学，旨在阐明中药的药效物质基础和多成分多靶点的分子作用机理，为解析中药有效性和安全性、促进中药新药研发、提升中药质量等提供科学依据和核心技术支撑。系统全面的制备中药化合物、解析中药物质组成结构是本草物质科学研究的基础。

中药为天然来源的复杂物质体系，化合物数量繁多、结构多样、极性范围宽，同时存在大量异构体。目前常用的分离手段只能解决部分常量化合物的分离纯化问题，仍存在大量低丰度、难分离的化合物，难以满足中药复杂物质体系全面、深入解析的需求。针对上述难题本团队设计并合成了硅胶、琼脂糖等基质的系列新型色谱固定相，涵盖反相色谱、亲水作用色谱、离子交换色谱以及混合模式色谱等多种色谱模式，构建了多维多通道分离纯化预研装置，发展了多维正交高效制备方法体系，可实现中药复杂体系的规模化、高通量、系统化制备，从苦地丁、北豆根、补骨脂等多个中药中发现了大量新化合物，为本草物质组成和结构解析奠定了关键基础。结合先进的整合药理学筛选技术，围绕炎症免疫、代谢及神经系统疾病相关的靶点模型，开展了高通量活性筛选，发现了大量活性化合物，上述研究形成的技术体系将为本草物质科学研究奠定关键技术基础。

关键字 中药、多维制备、靶点活性

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

中药复杂体系的表征分析与分离鉴定

马百平*
军事医学研究院

中药是中医防病治病的主要手段，是中医药理论与实践的重要组成部分。中药成分复杂，其所含化学成分的种类和含量决定了中药的质量，也与其有效性、安全性密切相关。表征中药中的化学成分，必要时对其进行分离纯化，对于研究确定中药药效物质基础、实现中药的有效质量控制均具有重要意义。

本课题组综合利用液相色谱-质谱联用技术（LC-MS）、液相色谱-电雾式检测器（HPLC-CAD）及液相色谱-紫外检测器（HPLC-UV）等技术，建立一套具有一定普适性的中药质量研究方法体系[1]，包括定性、半定量和定量方法，从而全面阐明中药中的化学成分组成及其含量；同时，针对中药中含有的大量同分异构体，本课题组引入离子淌度质谱碰撞横截面积（CCS），提高成分鉴定的准确性[2]。此外，对于目前研究较少却是中药中的常量成分—寡糖，本课题组通过结合多种不同性质的色谱柱（Amide、HILIC、GCC 等）及多种检测器，形成一套中药寡糖表征鉴定的通用方法[3]，可阐明寡糖聚合度及糖基类型等。在对中药成分表征分析的基础，本课题组采用不同性质填料的柱层析（硅胶、ODS、凝胶柱色谱等）以及多种类型色谱柱（C18 柱、苯基柱和手性柱等）的制备液相色谱，对中药中的小分子和寡糖成分进行了分离纯化和结构鉴定，并形成基于 LC-MS 特征分子网络指导复杂体系中未知化合物分离的流程和策略，如本课题组近年共从中药绞股蓝中分离鉴定 185 个三萜皂苷成分，包括 92 个新化合物[4-6]。

关键字 中药；液相色谱-质谱联用；电雾式检测器；寡糖；特征分子网络

参考文献：

1. W. Zheng,, B. P. Ma, *Phytochem. Anal.,* 2022, 1–9.
2. W. Zheng, B. P. Ma, *Front. Chem.*, 2023, 11, 1203418.
3. Y. Liu, B. P. Ma, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 2024, 244, 116129.
4. H. Z. Liang, B. P. Ma, *Chin. J. Nat. Med.*, 2023, 21, 1–16.
5. H. Z. Liang, B. P. Ma, *Phytochemistry*, 2023, 213, 113744.
6. G. Li, B. P. Ma, *Nat. Prod. Res.*, 2024, 31, 1–9.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

高分子多孔微球在天然产物分离中的应用研究

刘宝乾、邸多隆*
中国科学院兰州化学物理研究所

由于天然产物的成分复杂，目标化合物的快速富集分离是实现其进准富集分离分析的关键。高分子多孔微球是一类不含交换基团且有大孔结构的高分子吸附材料，其具有良好的网络结构和较大的比表面积，同时其具有孔径和比表面积可调、耐酸碱等优点，被广泛应用于天然产物的富集分离。但是其吸附作用力主要以弱相互作用为主，导致其对目标化合物的吸附选择性较低。

基于此，研究团队根据黄酮类化合物的显酸性的特性，定向设计合成了系列聚苯乙烯-二乙烯苯(Polystyrene-divinylbenzene，PSDVB)新材料 PSDVB、PSDVB-VP、PSDVB-AM，并利用曼尼希反应改性合成了胺基化 PSDVB-M、PSDVB-VP-M、PSDVB-AM-M，利用静电相互作用实现了枸杞叶中总黄酮的高效富集分离，总黄酮含量达到 40%以上。同时根据橄榄苦苷分子结构中大量的羟基，定向设计合成了富氮高分子多孔微球，利用材料与橄榄苦苷的氢键相互作用，实现了橄榄苦苷的高效富集，其含量可达 62%以上，得率 80%以上。

关键字 天然产物；高分子多孔微球；吸附

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

化学分析与生物测试驱动的活性物质识别

曲广波*、江桂斌
中国科学院生态环境研究中心

活性物质在药物开发、环境保护以及食品安全等多个领域中具有重要作用，其识别和表征不仅是推动新型药物开发的关键环节，也是在环境治理中发现和评估新污染物的重要工具。本研究以活性物质作为研究对象，旨在通过化学分析与生物测试的结合，建立有效的识别方法体系，为不同领域的应用提供科学依据和技术支持。

本研究采用化学分析与生物效应测试相结合的策略，以样品制备为基础，以生物效应测试为核心，结合色谱分离技术，利用质谱分析手段识别关键活性物质。具体而言，研究通过高通量体外生物效应测试筛选活性样品，并使用液相色谱对具有生物活性的样品进行组分分馏，同时继续对分馏产生的组分进行生物效应测试，从而锁定活性组分。随后，利用高效液相色谱和气相色谱联用的高分辨质谱技术对活性组分中物质的成分与结构进行全面解析并获得疑似活性物质清单。最后，通过使用商业或合成标准品，成功确认所识别的关键活性物质及其与生物效应之间的因果关系。化学分析为活性物质提供了详细的分子特征信息。生物测试为活性物质的应用奠定了基础，为其后续的安全性评估提供了依据。

总体而言，本研究通过化学分析与生物测试的有效结合，开发了活性物质的系统识别方法，并成功应用于多个领域。未来，我们将进一步优化测试流程和分析方法，提升对活性物质结构与功能关系的理解，为活性物质的开发与应用提供更加精准的技术支持。



关键字 活性物质；化学分析；生物效应测试

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

本草物质多维高效制备方法研究

刘艳芳*[1,2]、刘典[1,2]、黄飞飞[2]
[1] 大连化学物理研究所
[2] 赣江中药创新中心

中药是十分复杂的物质体系，但受限于当前分离技术的分离能力和制备效率，其物质组成仍有大量未知化合物未被发现，严重阻碍了中药科学原理的阐释。本课题组前期基于自主研发的正交高效分离材料，针对生物碱、黄酮、萜类等不同化合物类型的多个中药对象，发展了个性化的多维高效制备方法，形成了多维高效制备方法学体系，并应用于苦地丁等多个中药的化合物系统制备中，发现了大量新骨架和新化合物，为本草物质科学研究提供了化合物基础。然而多维高效制备过程仍然存在大量的重复性工作，亟需借助计算机技术加速研究过程。因此，针对上述问题提出了 AI 驱动的多维高效制备系统研究思路，结合化合物分子描述符，构建基于化合物结构类型的多维制备方法知识库；发展质谱目标导向的化合物制备策略及算法，实现目标化合物/新化合物的靶向制备以及快速去重，加速了多维制备方法开发，提高了中药多维高效制备的效率和成效性。

关键字 多维高效制备 中药 新化合物

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

高速逆流色谱分离新模式及新方法在天然产物活性物质分离制备中的应用

胡锦霞、邸多隆、裴栋*
中国科学院兰州化学物理研究所

高速逆流色谱（HSCCC）是一种基于液-液分配原理的分离技术，利用高速行星式运转过程中产生的离心力保留液体固定相，通过目标分子在互不相溶的两相溶剂中分配系数的差异实现高效分离。为提升其在西北特色植物资源活性成分分离中的应用，开展了系列 HSCCC 分离新模式和新方法的研究。

1）建立基于四元三相溶剂系统（正己烷/甲基叔丁基醚/乙腈/水）分段洗脱宽极性化合物的方法，并应用于橄榄叶中 8 种极性差异化合物的同步分离。结果显示出基于 HSCCC 的三相溶剂系统在宽极性化合物分离中的独特优势，为极性差异较大的天然产物的同步分离纯化提供了新方法。2）建立基于高速剪切技术与 HSCCC 在线联用同步提取和分离天然活性化合物的方法，并应用于枸杞中的玉米黄质、玉米黄质单棕榈酸酯和玉米黄质双棕榈酸酯提取和分离。结果表明该方法耗时仅为 120 分钟、效率高、易于规模制备，为分离化学性质不稳定化合物提供新思路。3）建立基于二阶重叠重复进样的 HSCCC 洗脱-挤出分离模式，并应用于枸杞中类胡萝卜素的分离制备。结果表明该方法进样量大、溶剂消耗少，为大规模分离复杂样品中分配系数相差较大化合物提供新视角。4）建立基于洗脱-挤出模式的 HSCCC 连续进样理论模型，并应用于橄榄叶中橄榄苦苷的分离。该理论模型为 HSCCC 连续分离过程中色谱行为和操作参数的确定提供了理论依据，推动了 HSCCC 分离机理的研究。5）建立基于修正多重双向洗脱（Modified MDM）和循环洗脱的分离模式，并应用于酮康唑对映体的分离（纯度＞99%）。建立的分离新模式能够物理性地增加 HSCCC 分离柱长，有效提高 HSCCC 的分离能力，为难分离对映体的大量制备提供了新策略。

上述研究构建了系列 HSCCC 分离新模式和新方法，揭示和明确了不同分离模式分离目标活性成分的运行规则和适用条件，提高了 HSCCC 分离效率，拓展了 HSCCC 技术在西北特色植物资源活性成分的筛选分离中的应用，为高效分离复杂植物体系中活性成分提供了技术支撑。

关键字 高速逆流色谱;新模式;新方法;分离制备

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

基于蛋白组学的药物作用机制研究

李秀玲*、董雪芳、崔韵
中国科学院大连化学物理研究所

中药临床疗效确切，但是仅有不到2%的已知中药成分作用机制明确，严重制约了中药新药的发现和中药的国际认可。药物一般通过改变蛋白质的丰度或者蛋白质翻译后修饰调控的信号通路达到治疗作用。 药物作用的生物体系非常复杂，如何从复杂的生物样品中揭示药物的作用机制具有挑战性。针对这一问题，报告人发展了30余种基于新材料的翻译后修饰蛋白组学富集新方法，在此基础搭建了高通量、翻译后修饰蛋白组学富集新方法，并将其用于不同药物的作用机制研究中；此外，建立了基于蛋白瞬时酶解技术的药物靶点发现新方法，为中药的靶点发现提供了新方法。基于蛋白组学和翻译后修饰蛋白组学的新技术和新方法为揭示药物的靶点发现和通路网络解析提供了强有力的工具。

关键字 蛋白组学，中药，作用机制

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

中药活性物质的多靶酶亲和超滤质谱筛选研究

郭明全*
中国科学院宁波材料技术与工程研究所
宁波慈溪生物医学工程研究所

人体内的酶在人类健康和疾病中起着至关重要的作用，其中许多酶已被用作药物靶标。更引人注目的是，市场上近一半的小分子药物是酶抑制剂，其中很大一部分来自天然产物比如中草药，这激励了越来越多的药物研发致力于寻求天然药物靶酶抑制剂[1]。与目前使用的化学合成药物相比，天然酶抑制剂具有更好的特异性、更低的毒性和更少的副作用。然而，从中草药中筛选和识别潜在的抑制剂一直是一个非常棘手的挑战，因为中草药复杂的粗提取物中含有复杂多样、含量各异的化学成分。为了应对这些挑战，多种基于靶酶亲和色谱方法不断发展，其中基于靶酶亲和超滤质谱(MS)策略因其高灵敏度、高分辨率和对中草药复杂提取物分析的广泛适用性而具有独特优势[2,3]。本团队基于上述策略使用不同的靶酶 (如拓扑异构酶(Topo) I, II; COX-1，蛋白激酶，葡萄糖苷酶等)，从多种中草药中成功筛选出具有多种化学结构的天然抑制剂(如生物碱，类黄酮等)。这些研究不仅有助于揭示部分中草药的药效物质，而且通过其多种活性天然化合物与多种药物靶点之间复杂而微妙的相互作用网络有助于揭示其作用机制[4]。比如拓扑异构酶 I (Topo I)是肝癌、结直肠癌等多种癌症公认的治疗靶点，由于其抑制剂显示出良好的抗癌活性，一些抑制剂已经获得 FDA 批准，如喜树碱(CPT)型抑制剂，包括拓扑替康和伊立替康。然而，这些抑制剂因受内酯不稳定性影响其作用是高度可逆的。为此，研究者一直在积极寻找新型的 Topo I 抑制剂，尤其是副作用较小的新型天然抑制剂。在此背景下，我们尝试将亲和超滤与 LC/MS (UF-LC/MS)相结合，旨在从一些选定的中草药中筛选出针对 Top I 的特异性抑制剂，并应用 UF-LC/MS 策略得到了一些新的发现，从不同药用植物中成功筛选出了几种新型天然化合物，并经过测试，与 CPT 相比，它们对 Topo I 具有与 CPT 相媲美的抑制作用。比如从石蒜中筛选出多种生物碱具有良好抑制作用和剂量依赖性，IC50 为 7.25±0.20 μg/mL, CPT 为 6.72±0.23 μg/mL;对 HT-29 和 Hep G2 细胞的增殖也有较强的抑制作用，其 IC50 值分别为 3.98±0.29 μg/mL 和 11.85±0.20 μg/mL。我们还从鼠李中筛选到的抗 Top 1 的化合物 3、4 等类黄酮对 Hep G2 细胞的增殖有明显抑制作用，IC50 值分别为 10.20±0.24μg/mL 和 4.78±0.28μg/mL；而且这些化合物还对其他药物靶标（如 COX-1）具有显著的抑制作用。 综上所述，以多靶酶为靶标的 UF-LC/MS 是一种快速筛选和鉴定中药中多靶酶抑制剂的有效方法，可以从复杂的中药提取物中提取和鉴定出针对多个药物靶标的生物活性化合物，为高通量发现新的天然多靶酶抑制剂提供了强有力的工具，同时也为中药本草物质科学研究提供新的技术和方法。

关键字 中药药效物质 多靶酶抑制剂 亲和色谱质谱 拓扑异构酶 蛋白激酶

参考文献：

1. MX. Fan, GL. Chen, B Sun, J Wu, N. Li, SD. Sarker, L. Nahar, MQ. Guo., Phytochemistry Reviews, 2020, 19(5), 1231-1261……
2. HX. Feng, GL. Chen, MQ. Guo, Food Chemistry, 2023，404, 134515
3. H. Zhang, GL. Chen, Y. Zhang, M. Yang, JM. Chen, MQ. Guo., Food Chemistry，2022，375，131856…….
4. HX. Feng, GL. Chen, YL. Zhang, MQ. Guo*., Phytomedicine Plus, 2022, 2, 100219

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

细胞外囊泡和亚细胞蛋白质组研究新技术

肖华*
上海交通大学

细胞外囊泡（EVs）是由细胞分泌并广泛分布在体液和细胞微环境中的具膜囊泡，包裹着蛋白质、核酸、脂质等生物分子，是细胞间通讯的重要桥梁[1]。前期研究发现，细胞外囊泡可以通过运输特定糖蛋白促进肺癌转移[2]，因此有必要对 EVs 糖蛋白质组开展深入研究，揭示其在肺癌转移中的功能。通过亲和色谱技术，建立了 EVs 糖蛋白质组的高效分离策略；采用高分辨液质技术实现了肺癌 EVs 糖蛋白质组的全面鉴定和功能解析。通过定量蛋白质组学分析，分别从低转移肺癌细胞外囊泡（95C EVs）中鉴定到 1345 个糖蛋白，从高转移肺癌细胞外囊泡（95D EVs）中鉴定到 1316 个糖蛋白。在鉴定到的 1562 个 EVs 糖蛋白中，268 个在 95D EVs 中发生显著变化，变化倍数 20 倍以上的 23 个。通过 TCGA 数据分析，发现 CDCP1 在肺腺癌和肺鳞癌中的表达均明显升高，并与患者生存率显著负相关，证明 CDCP1 有望作为肺癌转移评价的新标志物。经 EVs 共培养和目标基因敲除，通过 TRANSWELL 验证了其对肺癌转移的促进作用。磷酸化蛋白质组学研究发现，CDCP1 可能通过 ErbB 通路影响下游信号并进而影响细胞迁移，从而揭示了基于 EVs 糖蛋白质的肺癌转移新机制。此外，针对核酸结合蛋白[3]和细胞膜蛋白等发展了分离分析新技术，并应用于癌症、炎症和衰老等研究，提高了亚细胞蛋白质组的分离鉴定和功能解析能力。

关键字 细胞外囊泡，亚细胞，蛋白质组学，分离分析

参考文献：

1. Wang, Z.Y., Wu, L.H., Wang, H.Y., Zhang, Y., Xiao, H., *Cell. Mol. Life Sci.,* **2022**, 79:72.
2. Qiao, Z., Zhang, Y., Ge, M.L., Liu, S., Jiang, X.T., Shang, Z., Liu, H., Cao, C.X., Xiao, H., *Mol. Cell. Proteomics,* **2019**, 18 (8):1619-1629.
3. Wang, H.Y., Zhang, Y., Wang, Z.Y., Zhang, L., Guo, M., Cao, C.X., Xiao, H., *Mol. Cell. Proteomics,* **2023**, 22(8):100611.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

无衍生化的化学蛋白质组学揭示生物活性天然化合物的机制

陈顺兴*
南方科技大学

疾病模型、自动化、成像和数据分析等方面的最新技术进步推进了表型药物发现的复兴。天然产物是药物结构多样化合物的丰富来源，许多临床用药都是天然产物及其衍生物。剖析从表型筛选或临床验证药物中得到的生物活性天然化合物的机制，可以进一步挖掘新的药物靶点，促进药物研发，创新治疗途径。大多数具有生物活性的天然产物通过与蛋白质的直接物理相互作用，扰乱各种细胞过程的蛋白质机制和分子途径。然而，目前缺乏时间和成本效益高的技术去大规模原位分析细胞内蛋白质-蛋白质及蛋白质-化学物质相互作用，以用于生物活性天然产物的机制研究。本实验室整合了计算科学、分析化学和分子生物学的方法，结合新的蛋白质细胞生物物理学技术，进行大规模的蛋白质-蛋白质和蛋白质-化学物质相互作用分析。我们的方法避免了化学衍生化和基因工程等方法的繁琐，从而加速了生物活性天然化合物作用机制研究的系统性部署。我将介绍在我实验室中开发的这些方法，以及我们最近利用这些方法进行的全蛋白质组筛选，旨在发现天然生物活性化合物和 FDA 批准药物所扰动的脱靶效应和蛋白质复合物。

关键字 无衍生化；热蛋白组学；活性天然化合物；药物靶点；作用机制

参考文献:

1. C. Tan, K. Go, X. Bisteau, L. Dai, C. Yong, N. Prabhu, M. Ozturk, Y. Lim, L. Sreekumar, J. Lengqvist, V. Tergaonkar, P. Kaldis, R. Sobota, P. Nordlund, *Science,* 2018, 359 (6380): 1170-1177.
2. Z. Zheng, Y. Zeng, K. Lai, B. Liao, P. Li, C. Tan, *Chem. Sci.*, 2024 15(8): 6064-6075.
3. S. Sun, Z. Zheng, J. Wang, F. Li, A. He, K. Lai, S. Zhang, J. Lu, R. Tian, C. Tan, *Nat. Commun.,* 2023, 14, 7697.
4. H. Ji, X. Lu, S. Zhao, Q. Wang, B. Liao, L. Bauer, K. Huber, R. Luo, R. Tian and C. Tan, *Cell Chem. Biol.* 2023, 30 (11): 1478-1487.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

药食同源复杂体系全成分解析关键技术及产品开发

伍建林*
澳门科技大学

课题组建立了包括代谢流、羧酸组学、微生物组学、多肽组学和蛋白组学的基于问题导向的质谱多组学整合分析技术 (POMIMS)，解决了复杂体系全成分多维度分析、微量和痕量成分定性定量及效应物质精准动态定位的难题。利用 POMIMS 技术，可以检测到 7,000 多种蛋白质，肽类、氨基酸及其代谢物超过 110,000 余种以及多糖、寡糖、单糖及其代谢物 100 多种、黄酮类、酚酸类、含羧基化合物、脂肪酸羟基脂肪酸类、生物碱和挥发性成分等中药小分子化合物超过 3,000 种。该团队还提出了中药和食品活性成分少即是多的概念，聚焦含量低但活性高的成分，突破了只关注高含量、易分析的中药活性成分的局限，并提出了原创性的分析策略。

关键字 药食同源，复杂体系，全成分解析

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

安捷伦液相质谱技术在中药物质基础研究中的创新与应用

黄任永*
安捷伦科技有限公司

报告主题是关于安捷伦在中药物质基础研究方面的液相质谱技术更新。中药物质基础研究是中医药现代化的重要组成部分，而质谱技术在这一领域中发挥着至关重要的作用。质谱技术通过精确的质量测量和结构解析，能够快速、准确地识别和定量中药中的多种化学成分。液相色谱-高分辨质谱联用（LC-MS）技术可以高效分离和鉴定复杂中药提取物中的化合物，能够提供更高的分辨率和准确性，有助于确定化合物的分子结构。在结构鉴定方面，安捷伦提供了多种研究思路，跨越多个层次的解决方案，包括 PCDL 数据库匹配，AI 助力未知物解析，以及分子网络分析挖掘化合物成分组等等。这些方案能够有效提高中药物质基础研究的效率。

关键字 中药物质基础；液相质谱

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

绿原酸：双光子荧光成像与作用机制研究

胡海宇*、王庆华、杜婷婷、陈晓光、蒋建东
中国医学科学院药物研究所

天然产物绿原酸因具备显著的生物活性和多样的药理作用，已成为科学研究的热点。目前，绿原酸注射液已完成了针对晚期恶性脑胶质瘤的 I 期临床研究，结果显示其具有良好的抗肿瘤疗效和安全性，并已进入 II/III 期多中心临床研究阶段。尽管绿原酸在癌症治疗领域展现出巨大潜力，但其直接作用靶点及抗癌机制尚未完全明确。

在前期研究中，我们发现绿原酸（CGA）具有作为双光子荧光探针的独特功能，能够特异性地检测并活体成像线粒体中的超氧阴离子（$O_2^{\bullet-}$）。CGA 与线粒体 $O_2^{\bullet-}$特异性反应，生成 CGA-SQ$^{\bullet}$，并伴随强烈的双光子荧光信号，使其成为实时、无创监测肿瘤细胞和组织中线粒体 $O_2^{\bullet-}$活性水平的高效工具。进一步的研究揭示了 CGA 的抗肿瘤机制：它不仅能有效降低线粒体中的 $O_2^{\bullet-}$水平，还通过调控 AMPK 活性（降低其磷酸化水平）和促进肿瘤代谢重编程（即由糖酵解向氧化磷酸化的能量代谢方式转变），实现其抗肿瘤作用。这些前期研究成果为我们后续聚焦于线粒体与肿瘤代谢领域，深入探索 CGA 的直接作用靶点提供了宝贵的线索和研究方向。

为探究 CGA 的直接作用靶标，我们创新性地开发了双功能光亲和探针 PAL-CGA，并运用化学生物学技术成功揭示了线粒体中的 ACAT1 是 CGA 的关键靶蛋白之一。研究团队采用表面等离子共振、等温滴定量热法及冷冻电镜等多种技术手段，对 CGA 与 ACAT1 之间的直接相互作用进行了深入分析。值得注意的是，CGA 以一种非共价变构抑制剂的形式，特异性地结合在 ACAT1 的 A401 区域，有效抑制了 ACAT1 的 407 位酪氨酸磷酸化激活作用，同时保持了其四聚体结构的完整性，这与现有的 ACAT1 共价抑制剂的作用机制存在显著差异。进一步研究表明，ACAT1 在 CGA 抑制肿瘤生长的过程中起着至关重要的作用。当肿瘤细胞中的 ACAT1 表达被抑制时，CGA 几乎丧失了其体内外的抗肿瘤活性，这充分证明了 ACAT1 是 CGA 作用机制中的核心靶点之一。在作用机制上，CGA 通过靶向 ACAT1，进一步影响其下游丙酮酸脱氢酶的活性，从而触发肿瘤细胞代谢方式的重编程。

关键字 肿瘤代谢重编程、线粒体、绿原酸、ROS、双光子

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

本草科学中安全性控制新技术探索及应用

魏金超*、李鹏
澳门大学

中医药是我国医药体系和产业的重要组成，其具有原创思维和独特理论体系。中医药行业的蓬勃发展有赖于中药物质基础的深度解析以及中药安全性的有效保障。2020 版中国药典，酶联免疫技术纳入中药中真菌毒素残留的快速筛查推荐方法，彰显国家和行业对于新兴快检技术的认可和需求。伴随科学技术的不断进步，快速筛查技术日新月异。聚焦中药材常见、痕量外源性有害残留物的发现难、测不准的问题，报告人开发了分子模拟辅助识别、仿生传感、智能设备分析、多模态监测等技术和体系，为多品种中药材的安全评估提供了技术保障。本报告由目标物发现、分子结构解析、探针科学设计和分析体系构建为思路，将探讨本草科学范畴安全性控制新技术的研发和应用。

关键字 中药安全性；快速分析；外源污染物；荧光识别；拉曼传感；

参考文献：

1. Cheng, Z.; Wang, T.; Luo, M.; Wu, S.; Wei, J.*; et al. Biosens Bioelectron 2024, 264, 116660.
2. Chen, W; Luo, H.; Zhong, Z.; Wei, J.*; Wang, Y.; et al. Phytomedicine 2023, 108, 154534.
3. Wang, T.; Ji, B.; Cheng, Z.; Chen, L.; Luo, M.; Wei, J.*; et al. Biosens Bioelectron 2023, 228, 115191.
4. Cheng, Z.; Gu, L.; Zhao, Y.; Yang, L.; Wei, J.*; et al. J Hazard Mater 2022, 424, 127555.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

多级三维质谱实现三七中人参皂苷靶向亚代谢组定量表征

张珂、宋月林*
北京中医药大学

串联多级质谱（MS/MS）是中药化学成分结构鉴定和定量分析最主要的分析平台，但现存的分析策略仍旧无法完全满足定量亚代谢组表征的分析需求。本质上，更丰富的质谱信息代表着更多的结构和浓度线索，因此，本研究构建多级三维质谱策略以全面采集和解析化合物 MS/MS 行为，进而实现化合物的准确鉴定和全面定量分析。选择可食用药用植物三七中的人参皂苷类成分作为概念验证。使用 LC−Qtof-MS 采集梯度浓度下皂苷标准品的 MS1 图谱，构建全浓度一级质谱（第一个三维质谱），发现多电荷多聚体前体离子，如[2M–2H]2–和[2M+2HCOO]2–离子的形成依赖于化合物浓度和糖链数目；使用 LC−Qtrap-MS 采集前体离子在系列碰撞能量下裂解产生全部一级碎片离子的轨迹，建立全碰撞能二级质谱（第二个三维质谱），发现最佳碰撞能（OCE）和最佳相对响应强度（RIImax）等参数能够提供取代基位点信息，实现碎片离子的准确连接，并且糖苷键断裂的 OCE 值与前体离子和碎片离子的质量呈线性相关，其可用于人参皂苷多反应监测（MRM）定量方法的构建；采集糖苷键裂解得到的一级碎片离子在系列激发能量下进一步发生碎裂产生二级碎片离子的裂解轨迹，形成全激发能三级质谱（第三个三维质谱），发现碎片离子与具有相同结构的水解产物阴离子能够产生完全一致的全激发能图谱，而与具有不同结构的阴离子的裂解轨迹有所区别，以此实现碎片离子结构准确鉴定。随后将该分析策略应用于三七不同部位皂苷类化学成分的深入比较中，准确鉴定了差异皂苷成分。总的来说，多级三维质谱涵盖了化合物所有的 MS/MS 行为，并从定量方法开发和结构准确鉴定两个方面促进了亚代谢组的表征。

关键字 定量亚代谢组表征，人参皂苷，结构鉴定，三七，全激发能三级质谱

参考文献：

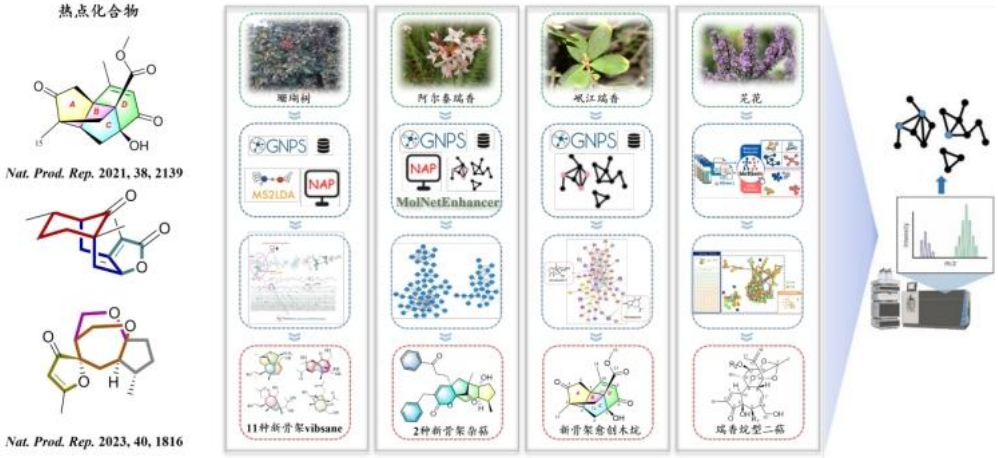
1. P. Guan, W. Liu, Y. Cao, H. Tang, H. Huo, J.B. Wan, X. Qiao, P. Tu, J. Li, Y. Song, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 15381-15389.
2. Y. Cao, W. Li, W. Chen, X. Niu, N. Wu, Y. Wang, J. Li, P. Tu, J. Zheng, Y. Song, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 15395-15404.
3. K. Zhang, H. Li, J. Shi, W. Liu, Y. Wang, P. Tu, J. Li, Y. Song, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 1296, 342346.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

药用植物中萜类化合物的精准导向分离及其抗肿瘤作用

黄肖霄、宋少江*
沈阳药科大学

随着现代天然药物化学领域研究的发展，研究范畴已经不仅仅包括传统的提取分离和结构鉴定。结构修饰及全和成、靶点筛选及机制研究，乃至生物合成机制，都属于现代天然药物化学研究的内容。但是提取分离仍然是天然产物研究最基础的工作，而分离实现由“数量”到“质量”的转变是我们需要面临的一个重要关键技术问题。本报告基于“网格化”分离的思路，重点介绍采用基于结构的多种导向分离技术实现对萜类化合物精准分离的案例，同时也介绍我们对分离到的部分萜类化合物的抗肿瘤活性研究工作。



图一

关键字 萜类、导向分离、抗肿瘤

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

直接电晕充电：提升电雾式检测器的灵敏度与稳定性的新策略

陈应庄*
湖南师范大学

带电气溶胶检测器（CAD）因其卓越的灵敏度、稳定性和高响应一致性，被广泛认可为检测无紫外线吸收的非挥发性化合物的理想选择 1。气溶胶的充电是 CAD 实现检测的关键步骤，但传统的等离子体碰撞充电模式（PCCM）存在缺陷，如样品气溶胶稀释、气流返混和扰动，这些因素降低了检测灵敏度和分析重复性 1,2。为了克服这些限制，本研究借鉴大气压化学电离技术原理，发展了一种新的充电模式-直接电晕充电模式（DCCM）。DCCM 取消了充电气路，采用高压电晕针直接对干燥气溶胶气流进行充电，从而有效避免混合碰撞带来的问题。此外，DCCM 还可以简化仪器结构，降低了氮气消耗。为了验证 DCCM 模式的潜在优势，本研究选择了咖啡因等样品，对两种充电模式下的 CAD 分析性能进行了详细比较分析。结果表明，相比 PCCM，DCCM 在检测灵敏度和稳定性上均获得了显著提升。DCCM 下的测试物响应与浓度关系符合典型的二次曲线，相关系数在三个数量级浓度范围中超过 0.99。对 22 种分析物的直接进样分析显示，等质量分析物在 DCCM 下峰面积 RSD 小于 10%，响应一致性显著优于 PCCM。在复杂样品的梯度分析中，DCCM 提供了更好的重复性和更高的灵敏度。进一步的实际样品分析测试结果也证实了 DCCM-CAD 在实际应用中的巨大潜力。综上，通过引入 DCCM 这一新的充电模式，不仅显著提升了 CAD 的性能，降低了使用成本，还有利于简化了仪器结构，为进一步研制高效、可靠的新型商业化通用型电雾式检测器奠定了基础。

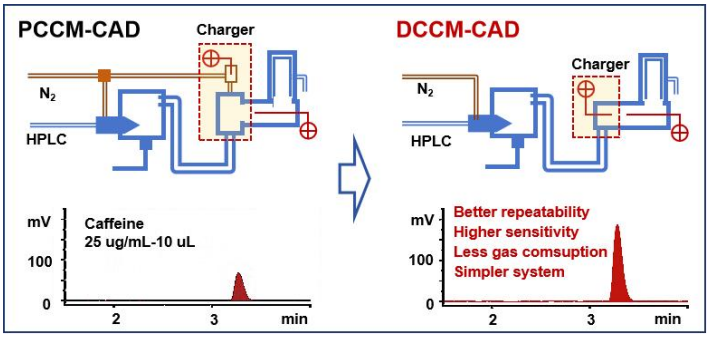


图 1.PCCM 和 DCCM 模式 CAD 原理与检测性能对比

关键字 带电气溶胶检测器、电晕充电、等离子碰撞充电、无紫外吸收化合物、通用型检测器

参考文献：

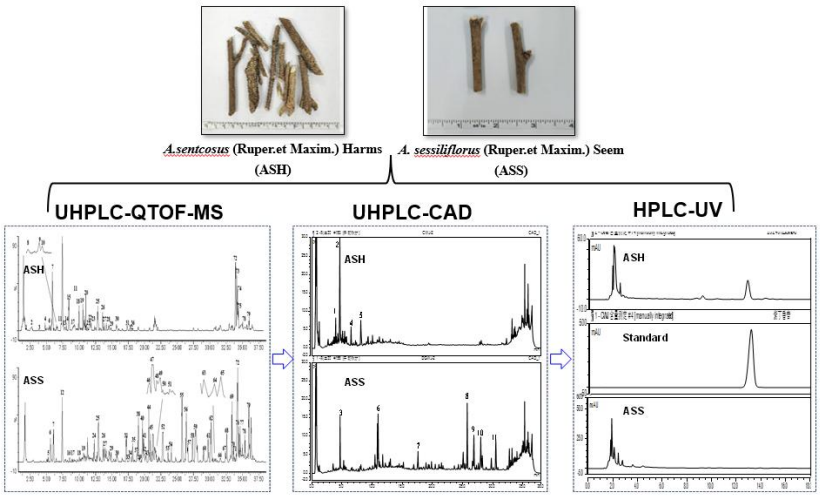
1. R.W. Dixon, D.S. Peterson, Anal. Chem. 2002, 74, 2930-2937.
2. L.E.Magnusson, D.S. Risley, J.A. Koropchak, J. Chromatogr. A 2015, 1421, 68-81.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

刺五加与短梗五加茎中化学成分的定性和定量研究

梁海珍、黄长亮、赖成材、马百平*
军事科学院军事医学研究院

刺五加 Acanthopanax sentcosus (Ruper.et Maxim.) Harms（ASH）为五加科植物，其干燥根和茎均可做为中药刺五加使用[1]，因其疗效显著得到广泛应用。短梗五加 A. sessiliflorus (Ruper.et Maxim.) Seem（ASS）为同科同属植物，多做食品使用[2]。目前，由于刺五加资源的日益减少和两种植物在形态学上的相似，市场上经常将短梗五加当作刺五加药材混用[3]。为了临床使用的安全性和有效性，有必要对刺五加和短梗五加进行全面的化学成分比较。本研究以刺五加和短梗五加的茎为研究对象，首先采用液相色谱-高分辨质谱（UHPLC-QTOF-MS）对两种植物中的化学成分进行了表征，结合对照品、质谱裂解规律和自建数据库等方法，共鉴定出 79 种化合物，结构类型包括苯丙素类、酚酸类及三萜类等。多元统计分析结果表明，刺五加和短梗五加在化学成分上存在明显差异，并筛选出 15 种差异标志物。由于质谱响应与化合物性质密切相关，而非仅含量，且多成分绝对定量过程复杂，本研究进一步采用质量型通用检测器—电雾式检测器（UHPLC-CAD）对两种植物中 12 种主要成分进行了半定量分析，发现在刺五加中苯丙素类和酚酸类成分含量较高，在短梗五加中三萜类成分含量较高。其中，紫丁香苷为刺五加的主要成分，也是药典规定的药材质控成分及重要药效成分，定量研究（HPLC-UV）发现刺五加中该成分含量为 0.06%-0.13%，而在短梗五加中并未发现紫丁香苷。以上结果表明，刺五加和短梗五加在化学成分上存在较大差异，在实际应用中要严格防止短梗五加的混用。



关键字 刺五加；短梗五加；液相色谱-质谱联用；电雾式检测器

参考文献：

1.中华人民共和国药典，北京:中国医药科技出版社, **2020**.
2. H. Sun, J. Feng, Y. Sun, … H. Zang, *Molecules*, **2023**, 28, 6564.
3. Y. Liu, Z. Wang, C.Wang, … Y. Zhao, *Food Funct.*, **2021**, 12, 2292.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

天然产物“自下而上”结构分析策略 —基于气相碰撞诱导 C–C 键裂解的碎片离子结构鉴定与拼接

王倩、屠鹏飞、宋月林*
北京中医药大学 中医药研究院 中药现代化研究中心 北京 10029

研究目的：亚结构间通过 C-C 键连接而成的天然产物寡聚体广泛存在于自然界，但由于其结构复杂，含量较低，导致化学结构难以鉴定。通过结构降级确定复杂聚体结构是一种行之有效的分析策略。但化学水解中，C–C 键断裂较难发生。因此采用碰撞诱导解离（collision-induced dissociation，CID）使得聚体气相离子的 C–C 键裂解，优先鉴定亚结构信息，继而拼接亚结构，实现自下而上的结构鉴定。

方法：通过在线能量分辨质谱，绘制了第二次 CID 时所有碎片离子的丰度随能量变化的裂解曲线，即全激发能三级质谱图（Full exciting energy ramp-MS3 spectrum，FEER-MS3），其包含了二级碎片离子（亚结构离子）半数响应激发能量（EE50）以及三级碎片离子的最佳激发能（OEE）和最佳相对响应强度（RIIOEE）等信息。利用 FEER-MS3 采取三种方式鉴定亚结构：1）与寡聚体对照品碎片离子的 FEER-MS3 图谱匹配；2）与已知亚结构对照品准分子离子的 FEER-MS2 图谱匹配；3）基于已知信息 m/z、OEE、EE50 和 RIIOEE 结合量子化学计算解析亚结构。在实现亚结构鉴定的基础上通过全碰撞能二级质谱（Full collision energy ramp MS2，FCER-MS2）结合裂解途径推断亚结构拼接方式。

结果：本研究基于 77 个不同类型由 C–C 键连接的天然产物寡聚体及其亚结构对照品构建了天然产物“自下而上”的质谱分析策略，并将该策略应用于桑白皮的化学成分分析，实现了 63 个 Diels-Alder 加合物的结构鉴定。

结论：FEER-MS3 策略有助于识别由 C–C 键裂解产生的碎片离子结构，为基于 MS/MS 的结构注释提供了一种前景广阔的“自下而上”方法。

关键字 全激发能三级质谱，C-C 键裂解，亚结构鉴定，Diels-Alder 加合物，桑白皮

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

食源性病原体的快速免疫分析方法

胥欣欣、刘丽强、徐丽广、宋珊珊、匡华、胥传来*
江南大学

食源性病原体通常指存在于食物中的细菌、病毒和寄生虫等，会造成食物中毒等人类疾病。所以，对环境或食品中食源性病原体的有效、快速检测，是保证人类的生命健康安全的重要环节。传统食源性病原体检测是基于培养扩增的方法，需要样品准备、富集、培养和鉴定等过程；另外，基因核酸鉴定的 PCR 方法的步骤也较为繁琐。这些方法都非常耗时，因而亟需开发一种更快速的分析方法。侧流免疫分析（LFIA）因其效率高、成本低、便携性和简易性，已成为一种广泛使用的食源性病原体现场检测方法。在本研究中，通过小鼠免疫、杂交瘤细胞分离的方式，制备针对不同食源性病原体的单克隆抗体（mAbs）；利用双抗体夹心法，筛选高特异性、高灵敏度的配对抗体；基于配对的 mAbs，即分别以胶体金标记的 mAb 和固定在测试线上的 mAb 作为捕获抗体和检测抗体，开发 LFIA 方法，可以实现对食品中不同食源性病原体的快速、灵敏检测。以铜绿假单胞菌（CICC 10419）的检测为例，建立的 LFIA 对其他常见的革兰氏阴性和革兰氏阳性细菌无交叉反应，其检测限为 2.41×10^4 CFU/mL，线性检测范围为 3.13×10^4-1.0×10^6 CFU/mL，且无需精密仪器，10 分钟内即可获得结果。

关键字 食源性病原体；单克隆抗体；免疫分析；快速检测

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

基于天然纤维的绿色样品前处理方法及其中药有毒有害物质分析应用

陈迪*[1]、刘玉微[1]、罗彦波[2]、庞永强[2]
1. 郑州大学
2. 国家烟草质量监督检验中心

中药不仅富含天然生物活性成分，还可能受到外源性有毒有害物质的污染，如农药残留、真菌毒素和塑化剂等。此外，炮制加工过程中可能生成亚硝胺、丙烯酰胺和美拉德反应产物等有害物质，甚至存在非法添加违禁成分的风险。由于中药基质复杂，且有毒物质的含量通常极低，样品处理和检测面临诸多挑战。本研究开发了一系列基于天然纤维材料（如棉纤维、木棉纤维等）的绿色样品前处理方法，旨在高效富集并检测中药中的有毒有害物质。这些方法结合了固相萃取和液相微萃取技术，充分利用天然纤维材料的优异特性，实现了痕量有毒物质的快速富集与精准检测。应用包括外源性有毒物质（如玉米赤霉酮、有机氯农药、三唑类杀菌剂）的检测，炮制过程中生成的美拉德反应产物、α-二羰基化合物和糠醛类物质的分析，以及非法添加物的高通量筛查。该研究为中药的安全性评估和质量控制提供了重要技术支持。相关成果已发表在《Talanta》、《Food Chemistry》、《Journal of Chromatography A》等期刊上（发表论文：https://www.x-mol.com/groups/dichen/publications）。

关键字 中药、有毒有害物质、天然纤维、样品前处理、绿色、快速

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

微针贴片用于有效装载和持续递送各种治疗药物

寿旗扬，凌志新，孙蒋，Omar Mohamed Khattab,常皓*
1. 浙江中医药大学金华研究院
2. 中科院杭州医学所

缓释给药制剂可增强和延长疗效，减少不良反应，避免频繁给药，是治疗各种疾病的优选剂型。然而，这些配方与患者依从性差有关，需要训练有素的医护人员，并且涉及损害药物稳定性的恶劣生产条件。本文报道了一种可自我修复的可生物降解的多孔微针（PMN）贴片，用于持续给药。PMN 贴片是通过低温微成型和相分离制备的，从而在表面和内部形成相互连接的孔。具有自愈特性的孔隙使 PMN 能够以温和有效的方式负载不同分子量的亲水性药物。愈合后的 PMN 在压力作用下可以很容易地穿刺到皮肤中，并在剪切作用下与支撑基质分离，从而作为植入式药物储存库，实现药物的持续释放至少 40 天。与多次给药的常规方法相比，使用缓释愈合的 PMNs 一次性给药可在缓解银屑病和激发免疫方面产生更强、更持久的疗效。自我修复的 PMN 贴片用于自我给药和长效给药，最终可以改善通常需要频繁给药的预防和治疗方案的药物依从性。

关键字 微针，经皮递送，缓释，免疫，银屑病

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

内部萃取电喷雾电离质谱快速测定中草药中脂肪酸含量

秦嫚嫚、廖亮亮、王慧婷、陈焕文*
江西中医药大学

脂肪酸作为多数中草药的生物活性成分，具有增强心脏活性、降低胆固醇水平、维持皮肤健康、缓解焦虑、调节食欲、抗高血压等药理作用。由于脂肪酸对于人体的保护作用，其含量高低是中草药品质鉴定的主要指标之一。本研究以酸枣仁和柏子仁为例，建立了内部萃取电喷雾电离质谱（iEESI-MS）同时测定不同产地中草药中脂肪酸（亚油酸、油酸、亚麻酸、硬脂酸、软脂酸）含量的分析方法。研究表明，5 种脂肪酸在 0.001-100μg/mg 范围内线性关系良好，相关系数（R2）大于 0.992，方法的检出限（LOD）为 0.01~0.09 μg/mg，定量限（LOQ）为 0.02~0.30μg/mg，平均回收率均在 89.50%-102.25%之间。并通过主成分分析（PCA）和热图分析不同产地酸枣仁及柏子仁中 5 种脂肪酸的含量差异。实验结果表明，建立的 iEESI-MS 分析方法具有无需样品预处理、高灵敏度、高通量等特点，可用于不同产地中草药脂肪酸的直接、快速、定量分析。

关键字 中草药，脂肪酸，iEESI-MS

参考文献

1. XIE J, ZHANG Y, WANG L, et al. *Natural Product Research*, **2012**, 26(5): 479-83.
2. ABDO A, ZHANG C, AL-DALALI S, et al. *Nutrients*, **2023**, 15(13).
3. SIMARD M, TREMBLAY A, MORIN S, et al. *Acta Biomaterialia*, **2022**, 140: 261-74.
4. ZHAO X, YU D, ZHOU W, et al. *Journal of Separation Science*, **2023**, 46(10): e2200704.
5. MORADI S, ALIVAND M, KHAJEBISHAK Y, et al. *BMC Sports Science, Medicine & Rehabilitation*, **2021**, 13(1): 48.
6. IMIG J D. *Advances in pharmacology (San Diego, Calif)*, **2023**, 97: 1-35
7.QIN M, QIAN Y, HUANG L,et al. *Front Pharmacol*, **2023**, 14: 1110900.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

低共熔溶剂改善酸性化合物制备容量及其机理研究

何群、秦天雪、殷盛飞、郭素英、章慧、何好杰、杨李影、孙光映*
黄山学院

通过研究不同色谱条件下低共熔溶剂对酸性化合物的过载分离行为，探讨其作为流动相添加剂在改善该类化合物制备分离过程中的潜力。本研究通过过载色谱法研究化合物的过载分离行为，经前沿色谱法测定化合物的吸附等温线后采用离子-分子混合型吸附模型对数据进行模拟表征。实验结果表明，在一定色谱条件下，在流动相中添加低共熔溶剂可以显著改善酸性化合物的制备容量，减缓因化合物自身浓度导致的流动相 pH 变化，以及相应的反-Langmuir 型吸附趋势。低共熔溶剂中的氢键受体类型在分离过程中又决定了该类性质变化。吸附等温线模拟结果表明，低共熔溶剂对该类化合物离子对形成及溶质-溶质相互作用均有明显影响，这合理解释了其对酸性化合物制备容量改善的相关机制。本研究对酸性化合物的制备色谱方法开发具有一定的参考意义。

关键字 低共熔溶剂；酸性化合物；制备分离

参考文献

1. Tan T, Zhang M, Wan Y, Qiu H. Utilization of deep eutectic solvents as novel mobile phase additives for improving the separation of bioactive quaternary alkaloids. Talanta. 2016;149:85-90. doi: 10.1016/j.talanta.2015.11.041.

2. Gritti F, Guiochon G. Overloaded elution band profiles of ionizable compounds in reversed-phase liquid chromatography: influence of the competition between the neutral and the ionic species. J Sep Sci. 2008 Dec;31(21):3657-82. doi: 10.1002/jssc.200800472.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

通过“四合一”测定实现中药中的细胞色素 C 配体在线筛选

李婷#，张珂#，龚兴成，王倩，何航昀，李军，屠鹏飞*，宋月林*
北京中医药大学 中医药研究院 中药现代化研究中心 北京 102488

中药活性成分是其发挥临床疗效的物质基础。近年来，国内外研究人员以亲和色谱或亲和质谱为核心 1,2，构建了系列在线活性筛选平台，从中药中获取了大量的活性成分。然而，这些筛选体系通常以化学成分响应值的降低或者探针底物响应值的升高为标准判定活性配体 3,4。由于未能实现配体-蛋白质复合物的直接检测，并且难以评估配体与蛋白质的结合强度，筛选出来的化合物往往是活性较低的常量成分。此外，各类非特异性结合还导致了大量假阳性结果的发生。为了克服传统方法的缺点，我们在前期创建在线能量分辨质谱 5,6、肽图分析 7 以及“代谢组-蛋白组”双组学同步分析方法 8 的基础上，建立了柱后注射-液相色谱–能量分辨亲和质谱系统（PCI-LC–ER-AMS），同步检测（1）潜在配体响应值是否降低；（2）蛋白质响应值是否降低；（3）配体-蛋白质复合物相关离子是否出现；（4）配体-蛋白质结合能力强弱。通过“四合一”测定，实现中药中活性成分的高效、准确筛选。该工作以细胞色素 C（Cyt C）为示范，采用 PCI-LC–ER-AMS 从中药中“钩钓”活性配体，并成功应用于常用中药黄芩中 Cyt C 配体的在线筛选，从黄芩中捕获 24 个潜在活性成分。进一步利用分子对接、表面等离子共振（SPR）、紫外-可见光谱（UV-Vis）以及细胞活性验证等手段对潜在活性进行验证，结果表明筛选捕获的化合物均能与 Cyt C 结合，并且结合能力与相应的 OCE 值呈现正相关关系。

关键字 能量分辨亲和质谱；细胞色素 C；黄芩苷；柱后注射；配体-蛋白质复合物

参考文献

1. X.F. Hou, M. Sun, T. Bao, X.Y. Xie, F. Wei, S.C. Wang, *Acta Pharm. Sin. B*, **2020**, 10, 1800–1813.
2. R. Rogawski, A. Rogel, I. Bloch, M. Gal, A. Horovitz, N. London, M. Sharon, *Angew Chem. Int. Edit.*, **2021**, 60, 19637–19642.
3. C.F. de Jong, R.J.E. Derks, B. Bruyneel, W. Niessen, H. Irth, *J. Chromatogr. A*, **2006**, 1112, 303–310.
4. J.L. Tan, Y.L. Xu, Y.Q. Fei, G.H. Zheng, X.P. Ding, *J. Pharmaceut. Biomed. Anal.*, **2022**, 219, 114897.
5. Q. Song, J. Li, H. Huo, Y. Cao, Y. Wang, Y. Song, P. Tu, *Anal. Chem.*, **2019**, 91, 15040–15048.
6. Y. Song, Q. Song, Y. Liu, J. Li, J.B. Wan, Y. Wang, Y. Jiang, P. Tu, *Anal. Chim. Acta*, **2017**, 953, 40–47.
7. K. Zhang, X. Gong, Q. Wang, P. Tu, J. Li, Y. Song, *RSC Adv.*, **2022**, 12, 9868–9882.
8. W. Liu, Q. Song, Y. Cao, Y. Zhao, H. Huo, Y. Wang, Y. Song, J. Li, P. Tu, *Anal. Chim. Acta*, **2019**, 1069:89–97.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

糖类物质分离分析与功能研究

闫竞宇*[1,2]、郑义[1,2]、曹翠岩[1,2]、程一名[2]、黄贝贝[2]、柴文刚[3]、梁鑫淼[1,2]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 赣江中药创新中心
3. 帝国理工学院

糖类物质是自然界中广泛分布的一类重要的有机化合物，其不仅是维持生命活动所需能量的主要来源，聚糖也常作为生物信息分子在细胞生长、分化、通讯等重要的生命活动中发挥着不可替代的作用。不同于核酸和蛋白质的线性排列的结构，聚糖结构要复杂的多，主要原因在以下几个方面：（1）单糖种类多，不同单糖组成、数目和序列的变化都会产生不同的聚糖结构；（2）糖苷键连接位置多变，单糖是多羟基醛（酮）的结构，尽管在生物体中并非每种单糖的所有羟基都可作为糖苷键的位点，多个羟基连接位点急剧增加了聚糖结构的可能性；（3）糖苷键连接方式改变，聚糖结构中每个糖苷键都可能存在 a 和 b 两种连接方式；（4）可形成分支结构，分支结构的发生位点、数目、序列组成和长短又会增加寡糖的复杂性；（5）同分异构体多，聚糖结构在上述几个特点的组合下形成了大量丰富的同分异构体，也成为聚糖复杂性的最重要的特征。

由于聚糖的高度复杂性，加之其极性强，紫外吸收弱，传统的反相色谱方法很难保留和检测，聚糖的分离、结构分析以及功能研究均较为欠缺。本团队以母乳低聚糖为代表性研究对象，针对不同分析目标，构建了系列母乳低聚糖的分析方法，并开展了该类样品系统化规模化制备，在此基础上，建立和发展微阵列糖芯片技术体系开展了部分聚糖功能研究。

关键字 聚糖；色谱分离；结构分析；糖芯片

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：报告

北豆根镇痛的多成分多靶点作用机理研究

王纪霞[1,2]、侯滔[1,2]、周晗[1,2]、刘艳芳[1,2]、梁鑫森*[1,2]
1. 中国科学院大连化学物理研究所
2. 赣江中药创新中心

疼痛成为继心脑血管疾病、肿瘤之后的第三大健康问题，临床应用最广的阿片镇痛药物引起成瘾及致死性呼吸抑制等严重副作用。传统中药北豆根具有治疗咽喉肿痛、风湿痹痛的临床功效，副作用小，以总生物碱为主要成分的北豆根片、北豆根胶囊等中成药在临床上得到广泛应用，然而其镇痛药效成分及作用靶点并不清楚。针对该问题，我们利用多维色谱分离纯化技术和无标记细胞整合药理学技术开展了北豆根镇痛的多成分多靶点作用机理研究。针对化合物系统制备，发展了五维色谱分离纯化方法，利用质谱、核磁等技术进行结构鉴定，共获得 138 个化合物，其中 92 个新化合物；在阿片受体（μ/δ）、多巴胺受体（D1/D2）、毒蕈碱受体（M3）的 5 种靶点模型上进行了高通量活性筛选，发现了 20 个靶效化合物，包括 1 个μ受体激动剂、2 个δ受体激动剂、4 个 D2 受体拮抗剂、11 个 D1 受体拮抗剂和 2 个 M3 受体拮抗剂，最高活性分别为 2.89 ± 0.23 μM、49.78 ± 14.88 nM、1.37 ± 0.35 μM、0.25 ± 0.08 μM 和 0.62 ± 0.35 μM。生物学研究表明μ/δ受体激活或 D2 受体拮抗产生镇痛作用，D1 受体上调导致成瘾及拮抗 M3 受体降低阿片戒断反应。因此，北豆根的靶效化合物通过激动μ/δ受体与拮抗 D2 受体治疗急性疼痛与慢性疼痛。尽管μ受体激活可能会产生成瘾及戒断反应等副作用，拮抗 D1 和 M3 受体的靶效化合物可以协同减缓这些副作用。该工作从分子水平揭示了中药北豆根镇痛的多成分多靶点作用机理，为其临床应用提供了科学依据。

关键字 北豆根；镇痛；多成分多靶点

参考文献

1. The Lancet Public, H., Lancet Public Health, **2022**, 7, e195.
2. Paice, J. A., Bohlke, K., Barton, D., Craig, D. S., El-Jawahri, A., Hershman, D. L., Kong, L. R., Kurita, G. P., LeBlanc, T. W., Mercadante, S., Novick, K. L. M., Sedhom, R., Seigel, C., Stimmel, J., Bruera, E., J Clin Oncol, **2023**, 41, 914.
3. Faouzi, A., Wang, H., Zaidi, S. A., DiBerto, J. F., Che, T., Qu, Q., Robertson, M. J., Madasu, M. K., El Daibani, A., Varga, B. R., Zhang, T., Ruiz, C., Liu, S., Xu, J., Appourchaux, K., Slocum, S. T., Eans, S. O., Cameron, M. D., Al-Hasani, R., Pan, Y. X., Roth, B. L., McLaughlin, J. P., Skiniotis, G., Katritch, V., Kobilka, B. K., Majumdar, S., Nature, **2023**, 613, 767.
4. Gendron, L., Cahill, C. M., von Zastrow, M., Schiller, P. W., Pineyro, G., Pharmacol Rev, **2016**, 68, 631.
5. Zhang, Y., Wang, C., Wang, L., Parks, G. S., Zhang, X., Guo, Z., Ke, Y., Li, K.-W., Kim, M. K., Vo, B., Borrelli, E., Ge, G., Yang, L., Wang, Z., Garcia-Fuster, M. J., Luo, Z. D., Liang, X., Civelli, O., Curr Biol, **2014**, 24, 117.
6. Garmabi, B., Vousooghi, N., Vosough, M., Yoonessi, A., Bakhtazad, A., Zarrindast, M. R., Neuroscience, **2016**, 322, 104.
7. Capasso, A., Lett Drug Des Discov, **2007**, 4, 207.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

基于 iEESI-MS 不同产地柏子仁质量评价研究

王宁、廖亮亮、刘泽锋、秦嫚嫚、陈焕文*
江西中医药大学

柏子仁是一种广泛应用于中药中的天然产物，具有抗动脉硬化、改善睡眠、抗氧化和抗炎等药理作用，但现有测试方法需要对样品进行复杂的预处理，因此对其质量的高通量分析和评估面临挑战。因此，我们利用内部萃取电喷雾电离质谱法（iEESI-MS）建立了一个高通量分析平台，用于评估不同产地柏子仁样品的质量。并对亚油酸、亚麻酸、花生四烯酸、硬脂酸和棕榈酸进行了定量分析。结果显示在 0.001-100.00 μg/mg 具有良好的线性关系（R^2 > 0.995），检出限为 0.02-0.04 μg/mg，定量限为 0.07-0.14 μg/mg，回收率为 89.5-102.0 %，精密度为（n=9）为 0.51-3.88 %。实验结果表明，建立的 iEESI-MS 分析方法具有无需样品预处理、高灵敏度、高通量等特点，可用于不同产地柏子仁中脂肪酸的直接、快速、定量分析，在天然产物分析、药物研发及相关领域具有广阔的应用前景。

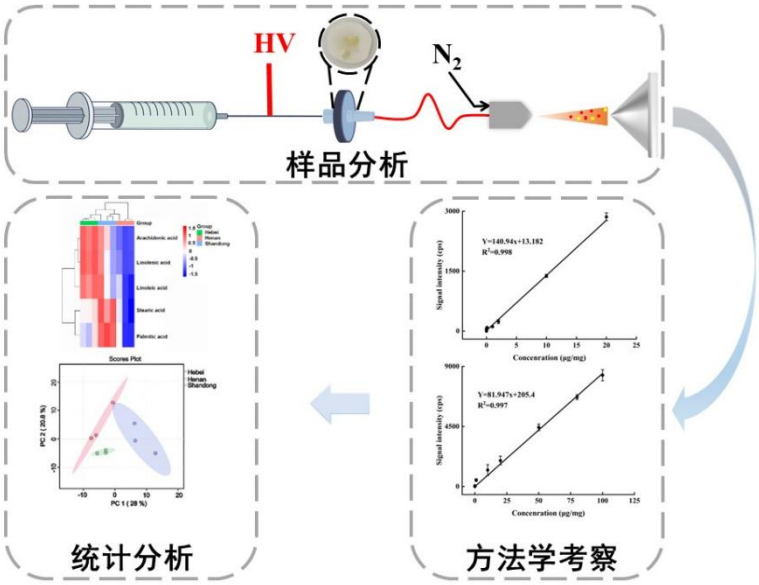


图 1 柏子仁 iEESI-MS 检测流程图

关键字 柏子仁；MS；脂肪酸；质量评价；iEESI-MS

参考文献

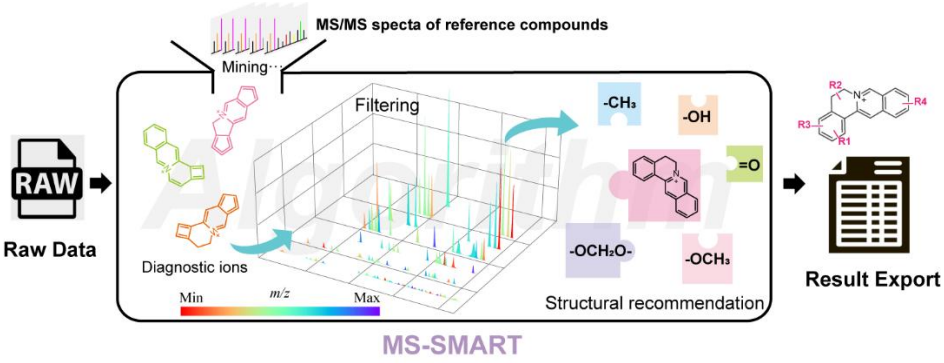
1. Yu JS, Guo MY, Jiang WJ, Yang MH, Pang XH, *Frontiers in Microbiology* , 2020 ,11.
2. Lu HY, Zhang H, Xiao YP, Chingin K, Dai C, Wei F, Wang NY, Frankevich V, Chagovets V, Zhou F, Chen HW, 2020 , *Analyst.*,145 (20):6470-6477.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

算法驱动天然产物质谱数据智能挖掘与鉴定

余文怡[1,2]、郑训皓[1]、彭莉[2]、沈爱金*[1,2]
1. 中国科学院大连化学物理研究所　植物化学与天然药物重点实验室
2. 赣江中药创新中心　江西省中药药效物质基础重点实验室

由于天然产物结构多样、成分复杂，从巨大的植物提取物质谱数据集中有效地挖掘和鉴定新化合物是一个重大挑战。各种各样的数据后处理技术被开发出来以简化质谱数据的解析，如数据库匹配（Database matching，DM）、质量亏损过滤（Mass defect filtering，MDF）、中性丢失过滤（Neutral loss filtering，NLF）、诊断离子过滤（Diagnostic ion filtering，DIF）和分子网络/特征分子网络（Molecular networking/feature-based molecular networking，MN/FBMN）等。这些方法可以在一定程度上加速质谱数据挖掘和解析，但往往也缺乏特异性和准确性。此外目标成分过滤后的结构鉴定也非常耗时。在本工作中，我们开发了一种名为 MS-SMART 的研究策略，该策略集成了三种智能算法：诊断离子自动挖掘算法，复杂样品快速过滤算法和目标成分结构自动推荐算法。以小檗碱类生物碱为例，证明了该方法快速发现新化合物的可行性。首先从标准品二级质谱数据中自动提取诊断离子并进行验证，然后从原始质谱数据中过滤小檗碱类化合物，最后利用小檗碱类成分结构母核和生物合成途径中的“building blocks”，自动组装拼接推荐目标成分结构式，降低了专家手动解析和确认的难度。将 MS-SMART 应用于中药复杂样品的解析中，分别从地不容、黄连、黄柏、关黄柏和夏天无五个不同植物科属的中药中发现了 103、198、60、80 和 51 个小檗碱类生物碱，其中包括 99、169、50、64 和 40 个新化合物。这一发现证明了 MS-SMART 进行复杂样品解析和快速发现新化合物的可靠性。MS-SMART 的开发为中药物质基础和药效机理的研究奠定了基础，也为快速发现和鉴定复杂样品中不同类型的新化合物提供了一种新的研究范式。



关键字 智能算法，数据挖掘，成分鉴定，天然产物，液相色谱-质谱联用

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

岩藻糖修饰的高聚合度人乳寡糖异构体的超高温纯化制备与负离子串联质谱分析

曹翠岩 1，郑义 1，程一名 2，黄贝贝 2，闫竞宇 1,*，柴文刚 3，梁鑫淼 1,*
1 中国科学院大连化学物理研究所，分离分析化学重点实验室，辽宁省大连市，116023
3 赣江中药创新中心，江西省南昌市，330100
2 帝国理工学院，英国伦敦，W12 0NN

人乳寡糖（HMOs）是母乳中仅次于乳糖和脂肪的第三大固体组分，在婴儿肠道菌群调节、免疫系统完善和抵抗病原体入侵等方面发挥重要作用。在 HMOs 中，岩藻糖修饰寡糖含量最丰富，这些被不同连接方式岩藻糖修饰的 HMOs 往往具有多种抗原决定簇，是生物学功能发挥的重要结构单元。含量较高的低聚合度 HMOs 研究较多，多岩藻糖修饰的高聚合度 HMOs 异构体结构与功能关系研究尚未报道，这些高聚寡糖往往具有多种识别单元，对寡糖的构效研究具有重要意义。与低聚合度 HMOs 相比，高聚合度 HMOs 丰度低，分支复杂，结构多样，异构体众多。由于每个异构体存在α和β两种形式，这些差向异构体在传统石墨化碳（PGC）色谱分离过程中往往形成 2 个色谱峰，大大增加了传统 PGC 色谱分离分析与质谱表征的难度。

针对传统高效液相色谱方法在高聚合度寡糖异构体分离选择性不足和传统负离子串联质谱表征困难等问题，本研究以双岩藻糖修饰的七、八糖骨架寡糖为模式对象，发展高聚合度寡糖异构体的超高温 PGC 色谱分离纯化方法，解决了α和β两种差向异构体在 PGC 分离过程中的裂分问题，实现 17 种双岩藻糖修饰的十聚合度母乳寡糖异构体的高效纯化制备。在获取的寡糖单体基础上，发展基于负离子串联多级质谱的原位表征方法，通过碎片离子一价和二价态多级质谱分析，实现了 6 种全新双岩藻糖修饰的七糖骨架和八糖骨架结构的表征，且这些新结构均进行核磁验证。此外，本研究还采用糖芯片技术对这些多种岩藻糖抗原表位进行了结合分析，并对 P[28]亚型轮状病毒 VP8*蛋白进行了结合筛选，发现 VP8*特异性识别 type 1 型组织血型抗原结构寡糖。随后，通过生物膜干涉实验及共结晶实验的共同验证了该特异性识别作用的准确性。

本研究一方面为新型高聚合度寡糖异构体的获取提供新途径，另一方面为高聚合度寡糖与靶蛋白识别的构效关系研究奠定物质基础。

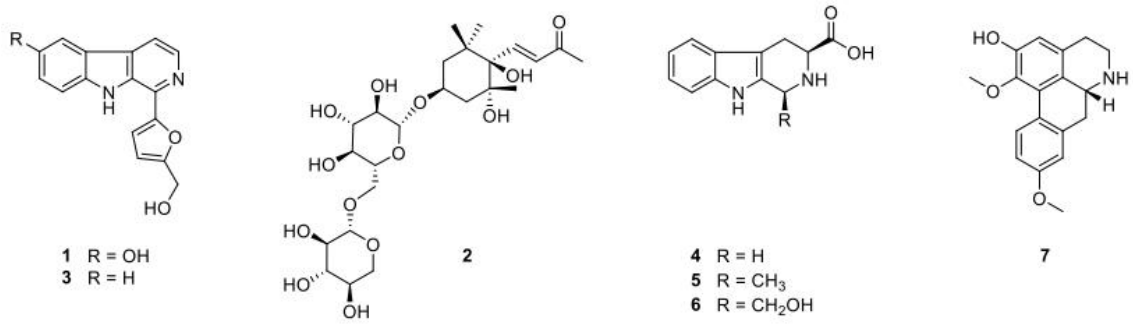
关键字 高聚合度人乳寡糖；异构体；高温色谱；串联多级质谱；多维色谱

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

中药苦地丁生物碱成分及其活性研究

韩阳[1,2]、刘典[1,2]、刘艳芳*[1,2]、梁鑫淼[1,2]
1. 中国科学院大连化学物理研究所，植物化学与天然药物重点实验室，大连，116023
2. 赣江中药创新中心，江西省中药药效物质基础重点实验室，南昌，330000

苦地丁是《中国药典》收录的一味中药材，系紫堇属植物地丁草（*Corydalis bungeana Turcz.*）的干燥带根全草[1]。中医将其用于清热解毒，散结消肿，治疗感冒和咳嗽等多种病症，尤其对风湿病、心肌炎有较好疗效[1,2]。生物碱是苦地丁中种类和含量最多的化学成分，现代药理研究表明苦地丁生物碱具有镇痛抗炎、镇静催眠、抗病毒、抑菌、抑制机体免疫、细胞毒性等多种药理作用[2,3]。课题组对苦地丁的前期研究工作中发现了一系列结构新颖并且具有多巴胺 D2 受体活性的化合物[4,5]。为了进一步挖掘苦地丁中具有新颖结构及生物活性的化学成分，本文采用五维高效分离体系（4D HPLC+SFC）对苦地丁生物碱进行了再分离，并采用 NMR、MS、ECD 及 ECD 计算等多种波谱解析技术进行了结构鉴定，共获得了 7 个化合物：1 个新的*β*-咔啉类生物碱（**1**），1 个新的 megastigmane 型糖苷化合物（**2**），perlolyrine (**3**)，1,2,3,4-tetrahydro-*β*-carboline-3-carboxylic acid (**4**)，1-methyl-1,2,3,4-tetrahydro-*β*-carboline-1-carboxylic acid (**5**)，1-(hydroxymethyl)-2,3,4,9-tetrahydro-*β*-carboline-3-carboxylic acid (**6**)，9-methoxyasmilobine (**7**)。其中化合物 **7** 为首次从天然产物中发现。对化合物 **1**、**2**、**5-7** 进行了多巴胺 D2 受体活性测试，结果表明化合物 **7** 具有 D2 受体拮抗活性，IC_{50} 为 28.56 ± 2.97 μM。该研究为阐明苦地丁药效物质基础及进一步开发多巴胺 D2 受体药物提供了科学依据。



关键字 生物碱，苦地丁，多维色谱，生物活性，多巴胺 D2 受体

参考文献

1. 国家药典委员会. 中华人民共和国药典 [M]. 北京: 中国医药科技出版社, **2020**.
2. 宋修云，俞腾飞，亚文志，*内蒙古医学院学报*, **2008**, 30 (6), 449-451.
3. 郑建芳，秦民坚，郑昱，陈从亮，*中国药科大学学报*, **2007**, 38 (2), 112-114.
4. Y. Han, T. Hou, Z.-H. Zhang, Y.-D. Wang, J.-X. Cheng, H. Zhou, J.-X. Wang, J.-T. Feng, Y.-F. Liu, Z.-M. Guo, X.-M Liang, *Fitoterapia*, **2022**, 159, 105175.
5. Y. Han, T. Hou, Z.-H. Zhang, Y.-H. Zhu, J.-X. Cheng, H. Zhou, J.-X. Wang, J.-T. Feng, Y.-F. Liu, Z.-M. Guo, X.-M Liang, *Phytochemistry*, **2022**, 199, 113209.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

四神丸治疗炎症性肠病的多成分多靶点机理研究

徐芳芳[1]、王纪霞[1,2]、侯滔[2]、罗凤彬[1]、王俊[1]、方晔[2]、刘艳芳[1,2]、梁鑫淼*[1,2]
1. 赣江中药创新中心
2. 中国科学院大连化学物理研究所

目的：四神丸是我国常用的治疗炎症性肠病（IBD）的中药方剂，由补骨脂、吴茱萸、肉豆蔻和五味子组成。四神丸治疗 IBD 具有确切的临床疗效，其加减方在 52 例慢性结肠炎治疗上，痊愈 33 例，有效 19 例，总有效率达 100% [1]。现代药理学表明四神丸能改善三硝基苯磺酸或葡聚糖硫酸钠（DSS）诱导的结肠炎[2-3]，但主要以总提物入药，缺乏分子机制研究。随着对 IBD 发病机制研究的深入，发现一系列 G 蛋白偶联受体是调节 IBD 的重要靶点[4]。这些靶点主要在三个环节上调控 IBD：调节粘膜屏障功能（如 PAR2、GPR35 和 FFAR2），调节炎症因子分泌（如 GPR84 和 GPR120）和调节免疫细胞迁移（如 GPR183 和 S1PR1）。本研究将以 IBD 最相关的靶点为模型体系，利用多维色谱纯化和无标记细胞整合药理学（CLIP）等技术揭示四神丸治疗 IBD 的多成分多靶点作用机制。

方法：采用 DSS 诱导小鼠结肠炎，评价四神丸水提物和醇提物对小鼠结肠炎的治疗作用。利用多维色谱技术进行补骨脂、吴茱萸、肉豆蔻和五味子醇提物成分的系统制备，并通过核磁技术进行结构鉴定。采用 CLIP 技术筛选制备化合物在 7 个 IBD 相关靶点（GPR84、GPR120、PAR2、GPR35、GPR183、S1PR1 和 FFAR2）上的活性。随后，进一步评价了 2 个 GPR120 激动剂对 DSS 诱导的小鼠结肠炎的治疗效果。

结果：我们发现与四神丸水提物相比，四神丸醇提物在减轻体重、DAI 评分和结肠缩短方面表现出更好的治疗效果。我们制备得到 222 个化合物，筛选得到 21 个靶点活性分子，其中 3 个 GPR84 拮抗剂、4 个 GPR120 激动剂，4 个 GPR120 拮抗剂、3 个 PAR2 拮抗剂、2 个 GPR35 激动剂、1 个 GPR35 拮抗剂、2 个 S1PR1 激动剂、1 个 S1PR1 拮抗剂和 1 个 FFAR2 拮抗剂，EC50/IC50 小于 10 μM 的活性化合物有 7 个。2 个 GPR120 激动剂在 DSS 诱导的小鼠结肠炎模型上表现出显著的改善体重减轻、DAI 评分和结肠缩短效果。

结论：本研究发现了具有调节粘膜屏障功能的 PAR2 拮抗剂、GPR35 激动剂和 FFAR2 拮抗剂，具有调节炎症因子分泌功能的 GPR84 拮抗剂和 GPR120 激动剂，及具有调节免疫细胞迁移功能的 S1PR1 激动剂，揭示了四神丸抗 IBD 的多成分多靶点机制，为四神丸临床有效性提供依据，也为多靶点的 IBD 中药新药奠定基础。

关键字 四神丸；炎症性肠病；多成分多靶点；多维色谱纯化技术；无标记细胞整合药理学技术

参考文献

1. 蒋月娟，实用中医药杂志，2015, 31(07), 632.
2. K., Li, J., Dong, D., Ge, M., Li, H., Ye, X., Wang, Y., Wu, Evid Based Complement Alternat Med, 2021, 2021, 9957709.
3. H. Y., Wang, H. M., Zhao, Y., Wang, Y., Liu, X. Y., Lu, X. K.,Liu, F., Chen, W., Ge, Z. Y., Zuo, D. Y., Liu, Front Pharmacol, 2019, 10, 170.
4. Z., Feng, R., Sun, Y., Cong, Z., Liu, Mucosal Immunol, 2022, 15(5), 819-828.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

翻译后修饰蛋白多组学样品前处理平台及在中药作用机制中的应用

董雪芳[1]、崔韵[2]、李秀玲[1]、梁鑫淼*[1]
1. 大连化学物理研究所
2. 赣江中药创新中心

蛋白翻译后修饰（PTMs）在各种生物过程中普遍存在并且调控重要的蛋白质功能。然而，开发能够在小样本体积或低蛋白浓度下实现全面且同步地解析蛋白组及其多层次 PTMs 的通用样本制备工作流程仍然具有挑战性。在此，我们引入了一种新型的蛋白组学样本制备平台，该平台集成了蛋白聚集捕获、在线酶解和串联富集技术，能够实现来自同一样本的蛋白组、糖蛋白组和磷蛋白组“一锅法”分析。与传统的蛋白组学平台相比，它提供了更佳的效率和稳健性，并能够根据不同类型生物样本的需求进行可定制的多层次 PTMs 分析。通过对不同样本的系统评估，验证了该平台稳健、高效的样本制备能力。在不同细胞系中对不同中药活性分子进行了蛋白组学的多层次 PTMs 分析，展示了该方法的广泛适用性。该平台为多层次 PTMs 的解析与挖掘提供了成熟的技术路线并能够提高多层次蛋白组学分析效率，产生更深入的生物学见解。

关键字 翻译后修饰、蛋白组学、中药作用机制

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

人工智能在天然产物复杂样品的分析应用

郑训皓[1,2]、张晨[1]、周晗*[1,2]、李效农[1]
1. 赣江中药创新中心
2. 中国科学院大连化学物理研究所

天然产物具有骨架丰富、结构多样的典型特征和优势，是新药及药物先导化合物的重要来源。但由于样品组成复杂性和化学成分多样性，传统分析方法的分析效率不足以应对。近年来，人工智能（AI）技术在数据处理、模式识别及优化决策中的强大能力为复杂样品的分析提供了新的机遇。本研究报告了 AI 在色谱分析、核磁共振技术和纳米孔技术中的最新应用，展示其在天然产物分析中的潜力与突破。

1. 色谱。针对复杂中药样品分离难的问题，本研究借助数学模型，在三个简单的线性梯度初始实验的基础上，建立了保留时间和峰宽的预测模型。结合遗传算法，以基线分离、洗脱时间短为目标对梯度条件进行迭代，实现了色谱方法的智能优化[1]，缩短了分离方法的开发周期，并提升了分离效率。

2. 核磁共振。中药分子结构的精准鉴定是推动其药理学与临床应用发展的关键步骤。本研究提出了一个创新的通用架构，旨在通过多模态对比学习来优化中药分子结构的鉴定流程[2]。该架构巧妙地设计了谱图编码器与结构编码器两大核心组件，将中药分子的不同表征形式转换至统一的潜在空间内，实现了高效且精确的结构解析。

3. 纳米孔技术。为应对中药中复杂分子结构解析的挑战，探索了深度学习在辅助纳米孔技术鉴定糖链分子。本研究开发了一种综合性工具，它集成了自适应阈值检测、等效电路法预处理[3]及深度学习实时分类功能。该工具能够精确捕捉纳米孔测序过程中产生的阻塞事件信号，并通过深度学习算法实现信号的端到端识别[4]，有效完成了对中药里糖链分子的定性与定量检测。

AI 技术的应用极大地提高了复杂样品的目标分离、结构解析和单分子检测的准确性、通量和效率。随着 AI 技术的进一步发展，其在中药及其他复杂天然产物分析中的应用前景将更加广阔，为中医药的现代化研究和临床应用提供强有力的技术支持。

关键字 人工智能；天然产物；分析方法

参考文献

1. 梁鑫淼，刘喆等，一种液相色谱梯度分离条件优化的方法，CN116953139A
2. Yuan B, Zhang C, Ji C, Liu G, Li X, Gong S, et al. ChemRxiv. 2024;
3. LI M, XIONG Y, CAO Y, et al. Nature communications, 2023, 14(1): 1737
4. LI M, WANG J, ZHANG C, et al. ACS Nano, 2024, 18(36): 25155-69.

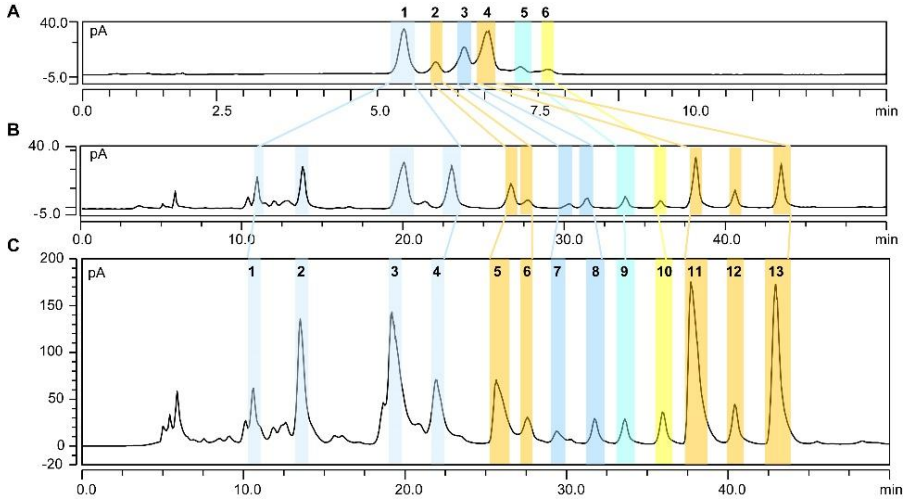
分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

多孔石墨化碳色谱在中药寡糖同分异构体分离中的应用

宋娟[1]、刘思[1,2]、洋雯茜[1]、陈晓娟[1]、马百平*[1]
[1] 军事科学院军事医学研究院
[2] 山东中医药大学

寡糖作为中药中的重要活性成分，具有增强免疫、调节肠道菌群、抗抑郁、降血糖、抗肿瘤、抗菌等多种生物活性。寡糖结构复杂多样，且普遍存在同分异构体，为寡糖的分离分析带来了巨大挑战。随着新型色谱固定相材料的出现，液相色谱分离技术为中药寡糖的分析表征和分离纯化提供了良好的解决方案。其中，多孔石墨化碳（porous graphitic carbon, PGC）色谱分离模式，由于其特殊的保留机制（疏水相互作用和极性保留效应），对于极性分子，尤其是寡糖成分具有良好的选择性和分离效果[1]。

我们研究发现延龄草中含有系列三聚寡糖成分，当使用亲水相互作用色谱（hydrophilic interaction chromatography, HILIC）分离时只能看到 6 个色谱峰（图 A，HILIC Amide column, 1.7 μm, 2.1 × 100 mm）。当使用 PGC 色谱进行分离时，各个成分得到了很好的分离，能看到明显的 13 个色谱峰（图 B，PGC Hypercarb column, 3 μm, 2.1 × 100 mm）。当使用半制备石墨化碳色谱（图 C，PGC semi-preparative Hypercarb column, 5 μm, 10 × 150 mm）分离时，13 个色谱峰仍然呈现良好的分离效果。基于此，我们开展了这 13 个色谱峰的分离纯化，并借助 UHPLC-Q-TOF/MS 以及核磁共振一维和二维对 13 个三聚寡糖进行了确切结构的解析。13 个三聚糖为首次从延龄草中分离得到，其中，有 2 个由甘露糖、葡萄糖、果糖组成的不同连接顺序的三聚糖为新结构。PGC 优越的同分异构体分离能力，为中药中寡糖成分的表征分析和精细分离提供了有效手段。



不同色谱模式下延龄草中三聚糖的电雾式检测器分析色谱图（A）UHPLC-(HILIC)-CAD 色谱图（B）UHPLC-(PGC)-CAD 色谱图（C）pHPLC-(PGC)-CAD 色谱图

关键字 寡糖，分离，多孔石墨化碳色谱，三聚糖，延龄草

参考文献

1. L. Pereira, *J. Liq. Chromatogr. R T.*, **2008**, 31, 1687-1731.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

基于硼亲和树枝状介孔硅的选择性富集用于人参皂苷的高效分析

赵伟曼、刘龙婵、范文翔、李林楠、王峥涛*
上海中医药大学

人参属五加科植物人参作为东亚和北美最著名的传统草药之一，用药历史悠久。人参皂苷作为人参的主要有效成分具有多种药理活性[1-2]，人参皂苷的分析对于人参的质量控制具有十分重要的意义。然而，中药组分复杂，有效成分含量较低，往往需要采用复杂而繁琐的前处理方法。皂苷糖基链极性较大，传统的 RPLC 不适合分析人参皂苷。因此有必要开发一种简便有效的人参皂苷分析策略。皂苷中的糖基侧链具有丰富的顺式二羟基，可以与硼酸发生特异性可逆反应。在这项研究中，我们利用硼酸官能化的树枝状介孔二氧化硅纳米粒子作为选择性吸附剂，开发了一种基于硼酸酯亲和色谱的策略来分析人参皂苷。与标准分析方法（2020 版中国药典）相比，所建立的方法简化样品前处理，具有优异的选择性、高结合能力，定量分析结果表明所提出的策略具有可靠的精度、准确度和重复性。以 5 种人参皂苷 Re、Rb1、Rb2、Rc 和 Rd 为代表靶点，对人参药材、饮片和含人参的中成药进行了有效的定性和定量分析，表明所建立的方法具有广阔的应用前景。



图 1. A) BA-DMSN 的制备，B）BA-DMSN 用于人参皂苷的富集分析操作流程

关键字 硼亲和，树枝状介孔二氧化硅纳米材料，人参皂苷分析

参考文献

1. Y. Y. Wu, Y. N. Cui, T. Y. Zhang, W. Li, M. Y. Zhang, J. Cheng, Y. Wang, J. Wang, Y. Q. Zhao and Y. X. Zhang, *Phytochem. Lett.*, **2018**, 27, 123.
2. J. R. B. de Souza, F. F. Dias, J. D. Caliman and L. W. Hantao, *Anal. Chim. Acta*, **2018**, 1040, 1.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

基于异构化性质的“自切换”低温液相色谱纯化方法研究

章慧、吴慧敏、秦天雪、郭素英、殷盛飞、孙光映、杨李影、李长江*
黄山学院

自然界中有多种多样的具备异构化性质的化合物。本研究以莫诺苷为例，基于这类化合物的异构化性质，设计了“自切换”低温液相色谱纯化方法。该方法分为“收集-异构化-切换收集”三步完成：a.通过降低柱温至-5oC，有效降低莫诺苷在反相 C18 色谱柱上的异构化速率，从而在色谱柱上呈现分辨率较高的两个异构体峰，分别收集 A 和 B 两个莫诺苷异构体；b.将收集所得莫诺苷 A 经常温异构化重新转换成 A 和 B 两个异构体混合物；c.将该混合物并重新进样至同一反相 C18 色谱柱进行分离，收集 B 异构体处的莫诺苷，即得到纯度高于98%的莫诺苷，而杂质将保留在 A 异构体处。另一个莫诺苷异构体也经类似机理处理。该方法的二步分离均在相同的色谱条件下实现，流动相完全兼容，具备构建在线同柱二维液相色谱的应用潜力。

关键字 低温液相色谱；异构体；二维色谱

参考文献

1. Sun G, Abuduaini M, Adili G, Zhao Y, Aisa HA. Dual-tautomerism separation method based on asymmetric transformation: Gram-scale preparation of high-purity punicalagin from pomegranate peel wastes. J Chromatogr A. 2021 Aug 16;1651:462281. doi: 10.1016/j.chroma.2021.462281.

2. Zheng D, Zhang L, Zhang QF. Isomerization of astilbin and its application for preparation of the four stereoisomers from Rhizoma Smilacis Glabrae. J Pharm Biomed Anal. 2018 Jun 5;155:202-209. doi: 10.1016/j.jpba.2018.04.005.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

姜黄中姜黄素组合物与 FGF21 功能蛋白双载微纳米复合物制备研究

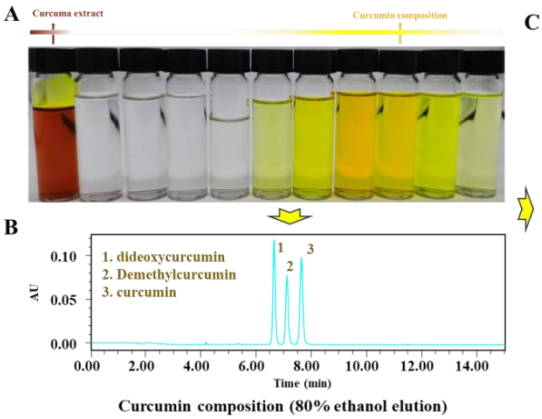
胡小艳[1]、茅羽桥[1,3]、胡秀[1]、吕福胜[1]、于伟*[1,3]、梁鑫淼[1,2]

[1] 赣江中药创新中心

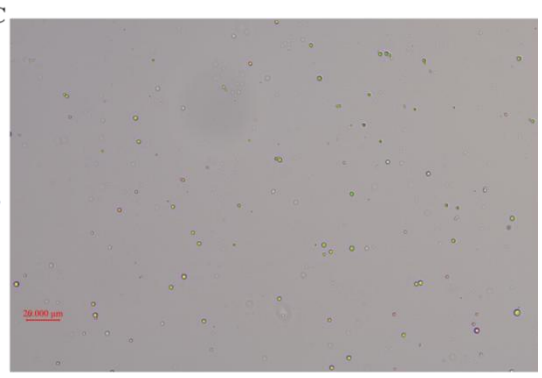
[2] 中国科学院大连化学物理研究所

[3] 江西师范大学

姜黄素组合物（Curcumin composition, CC）是药食同源姜科植物姜黄（Curcuma Longa L.）的主要活性成分，其临床研究覆盖抗肿瘤研究、心血管健康研究、代谢性疾病、神经性系统疾病等多个领域。目前市场上姜黄素组合物因纯度低、水中分散性差、吸收率低、代谢快、稳定性差等因素，限制了其作为临床治疗药物的应用。本研究以姜黄药材作为研究对象，将提取方式优化为动态温浸法，温浸温度为 50℃，提取率为 5.92%；其次，以自主研发的 PS-NVP 聚合材料装载的低压柱层析技术纯化分离姜黄素组合物，采用分级醇进行梯度洗脱，发现 80%乙醇洗脱部位的姜黄素组合物纯度高达 72.53%，相较于提取物纯度提升了 42.89%，该组合物主要包括双脱氧姜黄素、去甲基姜黄素和姜黄素三种成分，含量占比为 35.6% : 26.6% : 37.8%。最后，以生物相容性和降解性好的壳聚糖季铵盐、明胶作为基质材料，采用乳化技术对姜黄素组合物与 FGF21 重组功能蛋白混合成 W/O/W 型多重乳液，最终构建了粒径均一（0~3μm）、亲水性和稳定性好、高载量且生物活性高的 CC-FGF21 双载微纳米复合物，精确计量复合物的双脱氧姜黄素、去甲基姜黄素、姜黄素和 FGF21 蛋白浓度分别为 0.05mg/mL、0.04mg/mL、0.05 mg/mL 和 0.11mg/mL。综上所述，本研究优化了姜黄素组合物提取纯化方法，开发了具有优异性能和应用前景的 CC-FGF21 双载微纳米复合物，解决了姜黄素纯度低、生物利用度差、药物稳定性差等问题，为姜黄素组合物在临床和实际中应用提供了新思路和新方法，并为药物递送、功能食品、化妆品等领域提供了新原料产品。



Curcumin composition (80% ethanol elution)



CC-FGF21 double-loaded micro and nano composites

关键字 姜黄；姜黄素；姜黄素组合物；FGF21 重组功能蛋白；微纳米复合物

参考文献

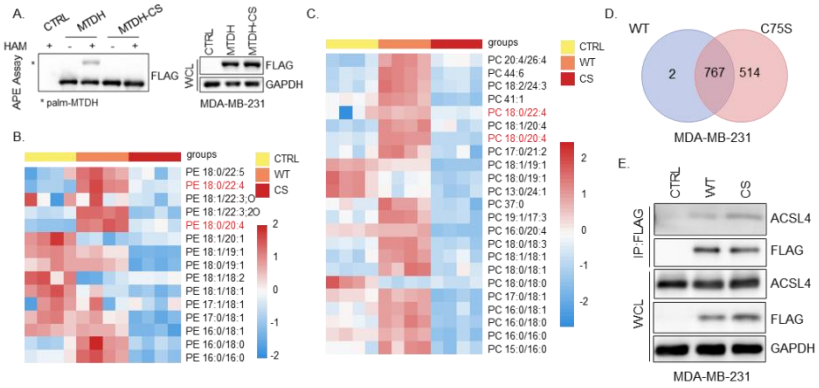
1. Patel, S. S., Acharya, A., Ray, R. S., et al. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, **2019**,60(6), 887–939.
2. Maryam R.K., Mehrab P., Fatemeh Y., et al. Journal of Drug Delivery Science and Technology, **2022**, 74, 103443.
3. F.Y. Tian, T.X. Chen, W.D. Xu, et al. Mol. Nutr. Food Res. **2023**, 67, 2300195.
4. Bertoncini-Silva, C.; Vlad, A.; Ricciarelli, R, et al. Antioxidants, **2024**, 13, 331.
5. 徐佳琳，浙江工业大学博士论文，**2019**.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

整合脂质组学与蛋白质组学揭示 MTDH 棕榈酰化修饰调控 ACSL4 活性

裴劭君、朴海龙*
中国科学院大连化学物理研究所

棕榈酰化修饰是一种酶催化的可逆的脂质修饰，在蛋白质的半胱氨酸残基引入脂肪链，会改变蛋白质的局部疏水性来调节蛋白质的亚细胞定位及与其他生物分子的相互作用。Metadherin（MTDH）在癌症中普遍高表达，促进肿瘤细胞的转移。MTDH 敲除小鼠高脂喂食下体重无明显增加，暗示 MTDH 参与了脂质的代谢调控。Long chain fatty acid CoA ligase 4（ACSL4）催化游离的长链脂肪酸转化为酰基辅酶 A，在脂质代谢中发挥关键作用，ACSL4 的底物偏好以花生四烯酸（FFA 20:4）和二十碳五烯酸（FFA 20:5）为代表的多不饱和脂肪酸,是细胞铁死亡的关键调控因子。通过点击化学技术与酰基—聚乙二醇交换技术验证了 MTDH 会发生棕榈酰化修饰。结合分子生物学与共聚焦成像技术发现 MTDH 棕榈酰化修饰不会改变 MTDH 的内质网定位。在 MDA-MB-231 等乳腺癌细胞系中构建了稳定 MTDH 与 MTDH 棕榈酰化缺失（MTDH-CS）过表达细胞系，分别通过非靶向脂质组学技术绘制了 MTDH 棕榈酰化修饰调控的脂质谱，通过 DIA 蛋白质组学技术绘制了棕榈酰化修饰影响的 MTDH 相互作用蛋白质谱。通过整合脂质组学与蛋白质组学结果，发现 MTDH 与 ACSL4 存在相互作用，且 MTDH 棕榈酰化缺失后含有不饱和脂肪链的磷脂酰胆碱与磷脂酰乙醇胺等含量下调，推测 MTDH 棕榈酰化缺失后与 ACSL4 的相互作用增强并抑制 ACSL4 的酶活性。这一发现揭示 MTDH 棕榈酰化水平参与调控了细胞的铁死亡，是铁死亡相关疾病治疗的潜在新靶点。



关键字 棕榈酰化修饰 脂质组学 蛋白质组学 多组学整合

参考文献

1. Pei, S.J. and H.L. Piao, *ACS Chemical Biology*, **2024**, 19, 9, 1868-1882.
2. Hu, G., et al. *Cancer Cell*, **2009**, 15, 1, 9-20.
3. Robertson, C.L., et al. *J Biol Chem*, **2015**, 290, 29, 18227-18236.
4. Doll, S., et al. *Nature Chemical Biology*, **2017**, 13, 1, 91-98.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

基于微量升华法的沉香之“香”的药效物质基础研究

童若楠、谢燕巧、李林楠*、杨莉、王峥涛
上海中医药大学

芳香化合物的香气成分是其特征成分，早在中国古代就有通过芳香（熏香）舒缓身心、预防疾病的做法。因此，芳香疗法常被用作治疗慢性疼痛、抑郁、焦虑、失眠等神经系统疾病的辅助治疗。沉香为四大名香“沉檀龙麝”之首，是瑞香科沉香属含树脂的木材，其结香过程特殊，来源于沉香木受外界刺激后分泌的油脂与其木质部分共同组成的混合物。沉香作为名贵中药材及芳香疗法的重要原料，应用范围广泛。近年来对沉香香气成分的提取方法主要包括水蒸气蒸馏法、溶剂萃取法、同时蒸馏萃取、超临界二氧化碳流体萃取和固相微萃取等，其中水蒸气蒸馏法、超临界二氧化碳流体萃取和溶剂萃取法在沉香挥发油的提取中应用比较广。但是传统熏香疗法多基于沉香阴燃时所产生的香气进行治疗，而现有常用沉香香气提取方法温度均不能达到沉香阴燃时的温度。基于现状，本研究参考《中国药典》中理化鉴别项中的微量升华法，对沉香高温烘烤后产生的香气成分进行分析，结合并分析其与不同提取方法所得香气成分的差异。同时进行沉香香气成分的药效研究，分析加热前后的药效差异。通过非靶向（SCAN）与靶向（MRM）相结合策略对沉香之“香”的药效物质基础进行分析。首先采用微量升华法及其他香气成分提取方法富集沉香的香气成分，基于气质联用（GC-MS）、薄层-Thermo Scientific™ LTQ XL™ 线性离子阱质谱仪(TLC-MS)联用、NMR 等方法联合分析加热前后沉香成分差异。然后利用薄层-生物自显影技术、磁珠垂钓筛选技术、细胞实验对微量升华法及其他不同富集方法所得样品进行药效差异比较，并利用液质联用（HPLC-MS）、TLC-MS 揭示有效成分。并针对有效成分分析不同结香方式的沉香进行品质分析。上述研究将沉香之“香”与挥发油不同富集方式进行联系，为沉香香气成分及其他芳香天然药物的研究提供一个参考。

关键字 微量升华，香气成分，活性筛选

参考文献

1.国家药典委员会编. 中华人民共和国药典 2020 年版 二部 [M]. 北京：中国医药科技出版社, 2020.
2.Xie, Yanqiao, et al. *Journal of Analysis and Testing*, 2024.
3. Xie, Yanqiao, et al. *Chemical communications*, 2024, 60(27), 3709-3712.
4. Xie, Yanqiao, et al. *Mass spectrometry reviews*, 2022, 42(5), 2207-2233.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

凉山州特色农业废弃物荞麦秸秆的热解特性及动力学研究

严云*
西昌学院

以凉山州特色农业废弃物荞麦秸秆为研究对象，在静态空气气氛条件下，用差热—热重分析仪器（SHIMADZU DTG-60）对其热解特性进行了研究，利用 Coats-Redfern 积分法计算其动力学参数。结果表明，四个升温速率下荞麦秸秆的热解过程均呈现失水、挥发分热解、固定碳热解和末尾燃尽，通过 Coats-Redfern 动力学方法所得到的数据拟合的线性方程符合一级动力学方程。

关键字 荞麦秸秆；热解特性；动力学

参考文献

1.董雪妮,唐宇,丁梦琦,等. 中国荞麦种质资源及其饲用价值[J].草业科学,2017,34(2):378-388.
2.Chen Wei-Hsin, Po-Chih Kuo. Isothermal torrefaction kinetics of hemicellulose, ce -llulose, lignin and xylan using thermogravimetric analysis[J]. Energy, 2011,36(11): 6451-6460.
3.Ceylan, Selim, Topçu, Yıldıray, et al. Pyrolysis kinetics of hazelnut husk using th -ermogravimetric analysis[J]. Bioresource Technology, 2014,156:182-188.
4.范方宇,黄元波,杨晓琴,等.果壳生物质热解特性与动力学[J].生物质化学工程,2018,52(6):8-14.
5.姚锡文,许开立, 闫放等.不同农业生物质废弃物的热解特性及动力学对比[J].东北大学学报(自然科学版),2016,37(11):1593-1597.
6.李智文,刘若琛,杨伏生,等.基于微分积分法和 Friedman 等转化率法的生物质热解动力学研究[J].现代农业科技,2022,(19):152-157.
7.杨冬,陈清文.北方地区典型生物质的热重分析及动力学研究[J].燃烧科学与技术,2014,20(4):319-322.
8.王明峰,蒋恩臣,周岭.玉米秸秆热解动力学分析[J].农业工程学报,2009,25(2):204-207.
9.张立利.冶金铜渣热分析动力学研究[D].昆明:昆明理工大学,2022.
10.严云.玉米的热分析研究[J].粮食与油脂,2015,28(12):53-55.
11.宗永兰,吴泳霖,龚建涛,等.碱渣的热分解特性及动力学分析[J].化学工程师,2023,37(10):21-24.
12.胡海清,高健,胡同欣.基于热重分析的延边州地区 7 种常见乔木树种的燃烧性排序[J]. 中南林业科技大学学报,2020,40(11):1-10.
13.罗红英,顾岩城,赖佳斯,等.西藏三种木材生物质的燃烧特性及动力学分析[J].高原农业,2024,8(1):1-10.
14.杨帆, 叶子玮, 陈楠纬,等.A 型分子筛对 WPCBs 燃烧特性的影响[J].环境工程,2021,39(8):156-164.
15.张今奇,周梅,赵鹏武,等. 内蒙古毕拉河林区地表死可燃物热解特性[J].消防科学与技术,2021,40(10):1521-1524.

16.严云.荞麦的热分析动力学[J].湖北农业科学,2015,54(17):4291-4293
17.李德波,王明传,杨新生,等.Coats-Redfern 模型和 DAEM 在污泥与煤掺烧过程中的动力 学适应性分析[J].广东电力,2019,32(11):70-77.

分会场：46.本草物质科学研究方法与技术
交流形式：墙报

本草科学中应对有机磷农药残留的荧光检测方法开发

罗迈*
澳门大学

过量使用有机磷农药会导致中草药和环境中有害残留物的积累。为了解决这个问题，已经开发出高灵敏度的荧光探针来检测农药残留。在这项研究中，我们设计并合成了具有聚集诱导发射增强特性的氮和硫共掺杂碳点 (N，S-CDs)。N，S-CDs 在乙醇和乙酸中显示绿色荧光，但在水溶液中, N，S-CDs 探针转移至蓝色荧光且强度增加了近四倍。这种增强的荧光是由于聚集状态下非辐射途径的限制。这些 N，S-CDs 已成功应用于有机磷农药在中药材和环境样本的回收率验证。此外，我们还开发了一个荧光和比色联合的双模平台。在智能手机的辅助下，成功地开发了视觉比色通路并提高了检测的效率和简化了结果显示。这项工作为碳点中的聚集诱导荧光增强提供了新的见解，并针对中药材中的农药残留提供了新的方法参考。

关键字

参考文献

1. **Luo, M.**, Chen, L., Wei, J., Cui, X., Cheng, Z., Wang, T., ... & Li, P. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2022, 239: 113668.
2. Liu, S.#, **Luo, M.#**, Liang, H., Zou, L., Cao, J., Wei, J., & Li, P. Microchemical Journal, 2024: 111781.
3. **Luo, M.**, Wei, J., Zhao, Y., Sun, Y., Liang, H., Wang, S., & Li, P. Microchemical journal, 2020, 154: 104547.

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：报告

呼出气体质谱分析研究进展

陈焕文*
江西中医药大学

以人体或其他哺乳动物的呼出气体作为生物体样本，是一种新型的非侵入性诊断技术。通过对所呼出气溶胶样本中包含的代谢物进行分析，可实现生物体代谢情况的动态监测，为健康状况和治疗效果评估提供丰富的信息[1]。质谱法是一个强大的呼气分析工具，随着质谱技术的发展，越来越多地被应用于呼气分析[2]，特别是随着直接质谱分析技术的发展，克服了传统联用质谱技术需要复杂样品预处理的不足，可在无需或仅需简单的样品预处理条件下进行呼气分析[3]，极大限度地提高了分析通量，已广泛应用于呼出气体分析（图 1）。本报告将主要介绍基于质谱的呼气分析技术原理、仪器装置、分析流程、技术特点、典型应用，以及该技术未来的发展前景，希望能促进呼气分析的进一步发展和应用[4]。

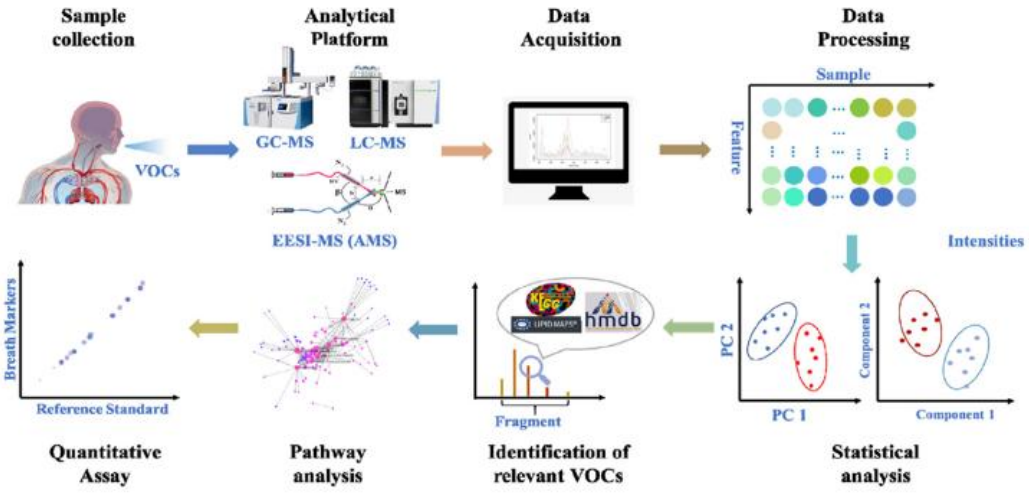


Fig. 1 Workflow of studying metabolic markers by breath analysis

关键字 呼出气体；直接质谱分析；电喷雾萃取电离质谱

参考文献

1. Wallace M A G*, Pleil J D*. *Anal. Chim. Acta* **2018,** *1024*, 18-38.
2. Hubbard J A*, Smith B E, Sobolesky P M. *Clin. Chem. Lab. Med.* **2020,** *58(5)*, 673-681.
3. Chen H W, Wortmann A, Zhang W H, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2007**, *46(4)*, 580-583.
4. Su R, Yang T T, Zhang X R, Li N, Zhai X Y, Chen H W*. *Trac-Trend Anal. Chem.* **2023**, *158*, 116823.

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：报告

MALDI-TOF 质谱技术在临床科研中的应用探索

李鹏飞*
布鲁克公司

质谱技术具有高灵敏度、高特异性、高准确度和高通量的特点，正逐渐成为临床科研、脑神经科学、新药开发等领域的热点分析技术。其中，MALDI-TOF MS（基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱）以其快速、准确、高通量和低成本的特点，正在成为临床科研中不可或缺的分析工具，并展现出极为广阔的应用前景。本讲座将从 MALDI-TOF 质谱技术原理的讲解出发，围绕下面两项内容展开：

（1）MALDI-TOF 与微型 SPE 色谱柱或磁珠前处理方法相结合，通过对低丰度的生物分子的预先富集，并利用 MALDI-TOF 快速及高通量等优点，以期建立一种低样品处理量、可重现的、可靠的临床分析方案。

（2）MALDI 成像技术通过对组织切片进行原位质谱数据采集、来实现生物分子的空间可视化分析，它进一步拓展形成的新型空间组学分析策略可以用于疾病标志物的发现、肿瘤诊断等疾病病理的科学研究。

MALDI-TOF 是一种强大的分析工具，可用于对包含临床领域所涉及的多种生物分子快速检测及多维度空间分析。科学家逐步将 MALDI-TOF 技术引入到疾病诊断等临床科研的最前沿，它将为生物标记物的发现和疾病病理研究提供更加有效的、更加可靠分析方法。

关键字 MALDI-TOF；质谱成像；临床科研

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：报告

食管癌中组蛋白乳酸化修饰的质谱鉴定和应用研究

张锴*
天津医科大学

目前的研究表明，蛋白质翻译后修饰在各种生理病理过程中发挥了重要的调控功能[1]。肿瘤细胞的异常代谢，导致乳酸的大量堆积，成为肿瘤的重要特征之一。最近发现，乳酸可以驱动发生蛋白质赖氨酸乳酸化（Lysine lactylation，Kla），并与肿瘤代谢和免疫密切联系，因此受到广泛关注，已成为当前生物医学的研究热点之一[2-4]。食管癌是我国高发的恶性肿瘤之一，其生物标志物尚不十分清楚。我们将基于分子亲和探针的富集技术与质谱鉴定相结合，发展了蛋白质乳酸化修饰及调节因子（修饰酶和去修饰酶）的分析新方法，鉴定了食管癌的乳酸化修饰组学特征，解析乳酸化在食管癌中功能和肿瘤生物学意义。

首先，通过质谱鉴定，我们分析了食管癌细胞缺氧环境下的乳酸化修饰组学特征，并发现了组蛋白 H3K9la 的显著性上调。结合生化实验，揭示了其促进转录和肿瘤侵袭能力。接下来，我们通过质谱分析和生物学实验，发现了 HBO1 是赖氨酸乳酸化的一种新型修饰酶，鉴定了 HBO1 调控的乳酸化修饰位点，揭示了 HBO1 优先催化组蛋白 H3K9la，促进转录调控的分子机制，并发现 HBO1 介导组蛋白 H3K9la 影响食管癌等 7 种肿瘤的进展。在此基础上，通过发展基于抗体-邻近标记的识别蛋白富集技术，结合基于质谱的化学蛋白质组学分析，发现了组蛋白 H3K9la 的去修饰酶，探索了通过干预组蛋白乳酸化抑制食管癌进展的新策略。

关键字 质谱；肿瘤；组蛋白；蛋白质乳酸化修饰；肿瘤标志物

参考文献

1. Hanyang Dong, Yujie Zhao, Changfen Bi, Yue Han, Jianji Zhang, Xue Bai, Guijin Zhai, Hui Zhang, Shanshan Tian, Deqing Hu, Liyan Xu, Kai Zhang*. Nature Chemical Biology, **2022**, *18(2)*, 142-151.
2. Di Zhang, Zhanyun Tang, He Huang, Guolin Zhou, Chang Cui, Yejing Weng, Wenchao Liu, Sunjoo Kim, Sangkyu Lee, Mathew Perez-Neut, Jun Ding, Daniel Czyz, Rong Hu, Zhen Ye, Maomao He, Y. George Zheng, Howard A. Shuman, Lunzhi Dai, Bing Ren, Robert G. Roeder, Lev Becker*, Yingming Zhao*. Nature, **2019,** *574*, 575-580.
3. Hanyang Dong, Jianji Zhang, Hui Zhang, Yue Han, Congcong Lu, Chen Chen, Xiaoxia Tan, Siyu Wang, Xue Bai, Guijin Zhai, Zhongyi Cheng, Enmin Li, Liyan Xu*, Kai Zhang*. Nature Communications, **2022**, *13*, 6628.
4. Ziping Niu, Chen Chen*, Siyu Wang, Congcong Lu, Zhiyue Wu, Aiyuan Wang, Jing Mo, Jianji Zhang, Yanpu Han, Ye Yuan, Yingao Zhang, Guijin Zhai, Xudong Wu, Kai Zhang*. Nature Communications, **2024**, *15*, 3561.

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

全自动样品前处理结合 LC-MS/MS：尿液中儿茶酚胺类物质的精准测定

谢鑫宝[1]、刘治芳[1]、李松屹[2]、刘冀阳[3]、陈思嘉[3]、陈一帆[3]、徐亮*[1,3]
1. 天津市临床药物关键技术重点实验室，天津医科大学药学院
2. 天津医科大学医学技术学院
3. 质谱应用技术实验室，天津医学高等专科学校

目的：本研究旨在开发一种自动化、高通量分析方法，用于一次性测定尿液中的 8 种儿茶酚胺类物质。该方法整合了全自动样品前处理系统与液相色谱串联质谱（LC-MS/MS）技术，显著提升了分析的灵敏度与准确性。**方法：**我们合成了两种固相萃取吸附剂，即弱阳离子交换（WCX）和强阴离子交换（SAX），并构建了 96 孔微孔固相萃取板，用于高效提取尿液中的儿茶酚胺类物质。结合全自动样品前处理系统，实现了从样本前处理到上样的全流程自动化，能够快速和高通量处理尿液样本。色谱分离采用 ACQUITY UPLC HSS PFP 色谱柱（2.1×100mm, 1.8μm），以 0.1%甲酸水溶液和甲醇作为流动相进行梯度洗脱。质谱检测采用电喷雾离子化（ESI）正离子模式，通过多反应监测（MRM）模式进行目标化合物的定量分析，利用同位素内标法进行定量，并在临床尿液样本上进行了方法验证。**结果：**自制的 96 孔微孔固相萃取板能够有效提取尿液中的 8 种儿茶酚胺类物质，通过使用全自动样品前处理系统，极大提升了样品处理的效率和通量。所建立的方法在宽线性范围内，8 种儿茶酚胺及其代谢物显示出良好的线性关系，相关系数 r^2>0.995。加标回收率介于 93.8%至 108.0%之间，日内精密度低于 10.10%，日间精密度低于 10.12%，证明了该方法的优异重复性和可靠性。样本在-80℃下可稳定保存 30 天，未见明显降解。与现有方法相比，本方法在自动化和高通量方面展现出显著优势，大幅缩短了样品前处理时间，提高了整体检测效率。通过对 40 名健康人的尿液样本进行参考区间评估，进一步证实了该方法的适用性和可靠性。**结论：**本研究成功开发了一种高通量、自动化的尿液中儿茶酚胺类物质测定方法。该方法具备高灵敏度、高选择性、操作简便、分析效率高、时间短、结果准确可靠等优点，展现出良好的临床应用潜力，并有望为临床大规模质谱检测提供高效、精确的解决方案。

关键字 儿茶酚胺；固相萃取；全自动样品前处理；液相色谱-串联质谱法；尿液

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

液相色谱与液质联用技术在抗精神疾病药物 TDM 中的应用探索与分析

刘治芳[1]、谢鑫宝[1]、魏泽[2]、李业海[1]、吕昊翰[3]、岳照宇[3]、张继华[4]、徐亮*[1,3]
1. 天津市临床药物关键技术重点实验室，天津医科大学药学院
2. 天津市益中学校
3. 质谱应用技术实验室，天津医学高等专科学校
4. 天津市安定医院（天津市精神卫生中心）

背景 抗精神病药物治疗药物监测（TDM）旨在通过精确测定患者体内药物浓度，融合药物特性与患者个体差异，优化用药方案，以实现疗效最大化与不良反应最小化。采用液相色谱（HPLC）、液相串联单杆质谱（LC-MS）及三重四级杆质谱（LC-MS/MS）技术，进行精神类药物 TDM 的研究，为不同规模医院实施 TDM 提供多方面支持与选择。**方法** 本研究针对天津安定医院常用抗精神疾病药物，利用三种不同检测仪器进行 TDM 研究，兼顾检测能力与预算成本。**结果** 利用 HPLC 成功同时测定 6 种抗精神分裂药物（奥氮平、利培酮、氯氮平、喹硫平、阿立哌唑、氯丙嗪）血药浓度，样本经固相萃取前处理（SPE）技术富集后，通过 HPLC 系统的紫外检测技术进行分析，结果显示方法在治疗参考范围内线性良好（r^2＞0.99），精密度与准确度均佳。液质联用技术显著提升了分析的选择性与灵敏度，确保结果准确可靠。进口单杆质谱仪技术成熟，但成本较高；国产单杆质谱仪虽成本较低，但设备稳定性有待提升，为 TDM 研究带来一定挑战。此外，我们成功使用 LC-MS/MS 同时定量包括帕利哌酮在内的 7 种抗精神病药物浓度，药物浓度与峰面积间呈现出优异的线性关系（R^2＞0.99），绝对回收率在 85%-115%之间，日间、日内精密度 RSD＜15%。**结论与展望** 结合 SPE 与 HPLC 技术，为 6 种精神类药物 TDM 提供了适用方案，尤其适合预算有限、样本量少的基层医疗机构。尽管单杆仪器在 TDM 研究中应用尚不广泛，但加速国产单杆仪器研发步伐，有望推动 TDM 实现更快、更灵敏且成本更低的应用。相比之下，LC-MS/MS 技术快速准确，虽成本偏高，却成为大型医院 TDM 的首选。接下来，我们将依托天津安定医院临床数据与用药经验，深入拓展 TDM 研究范围，旨在通过精准医疗手段，进一步提升患者治疗效果。

关键字 血药浓度监测；固相萃取；液相色谱；液相串联质谱

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

结合机器学习与时序代谢组学揭示胃癌化疗敏感性的代谢分层亚型及异质性

刘畅[1]、丁贤[4]、周军[3]、王朝英[1]、薄云海[3]、胡颖[3]、臧清策[2]、张瑞萍[2]、贺玖明[2]、杨芬[3]、陈艳华*[1]、再帕尔·阿不力孜[1,2]

1. 中央民族大学
2. 北京协和医院
3. 北京大学肿瘤医院
4. 首都医科大学北京朝阳医院

胃癌是一种常见于全球范围内的具有高死亡率和高度异质性的恶性肿瘤，其多药耐药性（MDR）是影响化疗效果的主要因素。因此，识别癌症患者异质性及代谢分型是理解胃癌化疗敏感性，指导胃癌患者精准治疗的关键。我们提出机器学习、时序性分析和代谢分层相结合的多层次、多维度数据挖掘的代谢组学分析方法，对 124 例进行 FP 化疗的进展期胃癌患者不同治疗周期的血浆进行了非靶向代谢组学与脂质组学研究。基于机器学习的横断面研究，发现了多条与化疗耐药相关的代谢通路，建立了基于第二治疗周期（2C）的化疗敏感性预测模型；基于个体时序性分析的纵向研究揭示了鞘脂水平在耐药患者中的持续累积现象，表明其可作为胃癌 FP 化疗敏感性的预测因子。同时，发现基于治疗前胃癌患者血浆代谢水平的三个代谢亚型与化疗敏感性和预后密切相关，且血浆中的 SM（尤其是 SM42:2 和 SM44:2）对代谢分层有着重大贡献，可作为胃癌化疗敏感和预后分层的生物标志物。本研究为研究疾病异质性和疗效预测提供了新的代谢组学分析方法，并为胃癌的个体化治疗提供了重要的分子依据。

关键字 胃癌；化疗耐药；化疗敏感性；代谢组学；脂质组学；代谢分层

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

泰利霉素潜在肝毒性的空间代谢组学研究

薛迎凤、李金翼、李佳恒、罗志刚、厉欣、张瑞萍、孙华、再帕尔·阿不力孜*
中国医学科学院北京协和医学院药物研究所，天然药物活性物质与功能国家重点实验室

泰利霉素（Telithromycin）是具有广谱抗菌活性和较低选择性耐药性的酮内酯类抗生素[1]，对于常见和非典型呼吸道病原体具有良好的活性[2, 3]。泰利霉素在体内主要经肝细胞色素 P450 酶系代谢，因出现了严重的肝毒性而被撤市，但毒性机制尚不明确；从报道的三例临床严重肝毒性病例报告中可知，患者皆有饮酒史[4]，分析推测在酒精的作用下，泰利霉素的体内代谢过程可能受到影响，进而产生肝毒性甚至致人死亡。因此，本研究通过构建酒精小鼠模型，对其给予正常剂量的泰利霉素，通过将 LC-MS 技术与 AFADESI-MSI 的分析方法相结合，开展了泰利霉素潜在肝毒性的空间代谢组学研究，探究可表征药物肝毒性与酒精相关性的差异代谢通路，并寻找潜在的毒性标志物。目前的研究发现，在仅给予酒精的动物模型中，与肾脏、肺脏等器官相比，酒精对肝脏代谢影响更显著；而对酒精动物模型给予泰利霉素后，相比于肝脏和肺脏，肾脏中发生显著变化的代谢通路明显增多，其中包括嘧啶代谢、牛磺酸和次牛磺酸代谢、氨基酸类代谢等 11 条代谢通路。本研究结果表明，泰利霉素在酒精的代谢影响下，使肝脏和肾脏的代谢出现了异常，并且主要由肝脏代谢的泰利霉素可能通过向肾组织产生转移代谢和蓄积，从而产生潜在肝毒性及肾毒性。该项研究结果还在进一步分析中，其结果还有待验证。

关键字 泰利霉素；肝毒性；质谱成像；空间代谢组学

参考文献

1. Shain C S, Amsden G W, *Ann. Pharmacother.* **2002,** *36* (3), 452-464.
2. Namour F, Wessels D H, Pascual M H, Reynolds D, Sultan E, Lenfant B. *Antimicrob. Agents Chemother.* **2001,** *45* (1), 170-175.
3. Onur O*, Guneysel O, Denizbasi A, Celikel C, *Clin. Ther.* **2007,** *29* (8), 1725-1729.
4. Clay K D, Hanson J S, Pope S D, Rissmiller R W, Purdum III P P, Banks P M. *Ann. Intern. Med.* **2006,** *144* (6), 415-20.

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

空间分辨功能代谢组表征用于胶质母细胞瘤的溶瘤腺病毒治疗评价及作用机制研究

王子璇[1]、高雅慧[1]、张俊文[2]、刘福生[2]、厉欣*[1]、再帕尔·阿不力孜[1]
1. 中国医学科学院北京协和医学院药物研究所
2. 北京市神经外科研究所

胶质母细胞瘤（GBM）是最常见的原发性恶性脑肿瘤，患者预后较差，中位生存期<2年。替莫唑胺（TMZ）化疗是目前 GBM 患者首选化疗药物，但其治疗有效度仍不足 50%，且使用存在高耐药性[1]。目前仍缺乏有效的治疗措施改善患者生存期。溶瘤病毒能够选择性地感染和杀死肿瘤细胞，同时间接诱导全身免疫反应对抗肿瘤，是一种有前景的治疗方法，为传统化疗耐药的 GBM 患者提供了新的治疗选择。

新型溶瘤腺病毒 TS-2021（Ad5 KT-E1A-IL-15）[2]是北京市神经外科研究所刘福生老师团队研发设计的一种三重基因修饰病毒，药理学实验初步证明了 TS-2021 对 GBM 治疗的有效性。溶瘤病毒用于肿瘤治疗的疗效和机制仍缺乏有效评价方法。

根据肿瘤细胞微环境内细胞组成和状态的不同，将 GBM 微环境定义为至少三种不同生态位[3]：缺氧坏死核心生态位（HYN）、血管周围生态位（PVN）和浸润边缘生态位（INN）。不同的生态位中，肿瘤细胞的活力状态、营养梯度及与周围细胞的相互作用关系不同，这些状态共同决定了 GBM 的表型、进展和转归。本研究建立了功能分子质谱成像可视化分析方法，实现了 GBM 微环境生态位的识别，如图 1 所示，结合空间分辨代谢组学分析，在组织生态位的代谢层面研究新型溶瘤病毒 TS-2021 用于胶质瘤治疗的有效性，并根据治疗引起的代谢轮廓变化探讨 TS-2021 的可能作用机制。

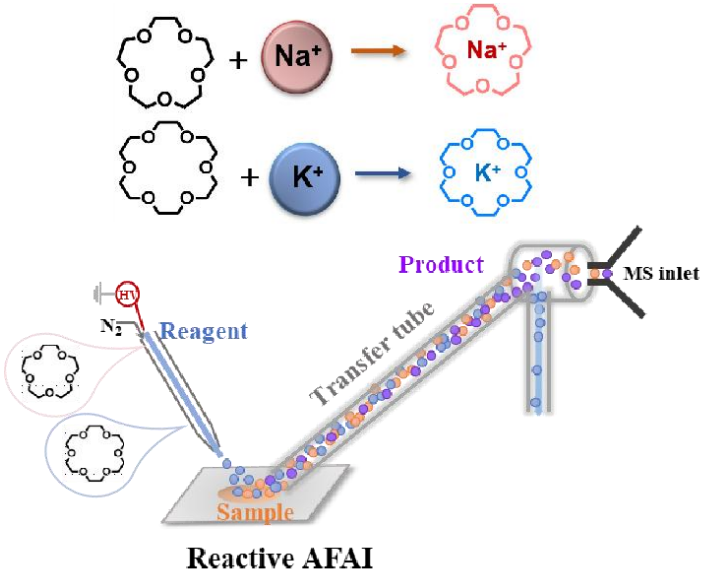


图 1 功能分子的质谱成像可视化分析方法

关键字 质谱成像；胶质母细胞瘤；溶瘤腺病毒；生态位

参考文献

1. S Y Lee *. Genes & diseases, **2016**, *3(3)*, 198-210.
2. Jialin Wang, Junwen Zhang, Qing Zhang, Wenxin Zhang, Qi Zhang, Guishan Jin*, Fusheng Liu*. Journal of medical virology, **2024**, *96(1)*, e29335.
3. Hambardzumyan D*, Bergers G*. Trends in cancer, **2015**, *1(4)*, 252-265.

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

一种新型同位素编码的光化学组织衍生化质谱成像技术对生物组织中胺类代谢物的定量可视化研究

吴娅玲、汪满江措、陆慧敏、胡成功、杜丹*
四川大学华西医院

含氨基代谢物在调节细胞代谢、保护细胞的氧化还原状态及参与细胞信号转导方面发挥着不可或缺的作用。氨基代谢物的代谢异常与胰腺导管腺癌（PDAC）的发生和进展密切相关。在异质性胰腺组织中成像氨基代谢物的空间分布，对于揭示其生物功能至关重要。然而，基于质谱的氨基代谢物的检测和可视化面临诸多挑战，包括低电离效率和背景干扰。在此，我们开发了一种新型的同位素编码光化学衍生化技术，并结合敞开式空气动力辅助离子化质谱成像技术（AFADESI-MSI），以绘制胰腺组织中氨基代谢物的空间表达图谱，实现检测灵敏度的提升和代谢物覆盖度的扩展。我们合成了一对同位素编码的衍生化试剂 4-(4-(羟基甲基)-3-硝基苯酰氨基)-1-甲基吡啶-1-离子（d-NPU）和 4-(4-(羟基甲基)-3-硝基苯酰氨基)-1-(甲基-d_3)吡啶-1-离子（d_3-NPU），用于氨基代谢物的组织衍生化。通过引入 4-氨基-1-甲基吡啶基团，组织衍生化效率获得显著提高。同时，衍生化反应在光照下激活，无需加热，从而减少了分析物位移或降解的情况。此外，引入 d_3-NPU 标记的氨基代谢物作为内标，能够显著降低基质效应导致的定量偏差，提高胺类代谢物定量的准确性。通过这一方法，我们实现了对包括极性氨基酸和非极性脂肪胺类在内的含氨基代谢物的高覆盖可视化。值得注意的是，诸如乙胺、乙醇胺、亚牛磺酸和磷酸乙醇胺等小分子得以可视化，而在没有化学衍生化的情况下这些分子很难被检测到。此外，我们进一步利用该方法表征了胰腺组织中含氨基代谢物的空间变化，使得能够区分其在正常组织、正常间质、肿瘤及肿瘤间质区域的分布，为癌症研究和其他生物医学研究提供了宝贵的机制见解。

关键字 光化学；同位素标记；质谱成像；胺类代谢物

参考文献

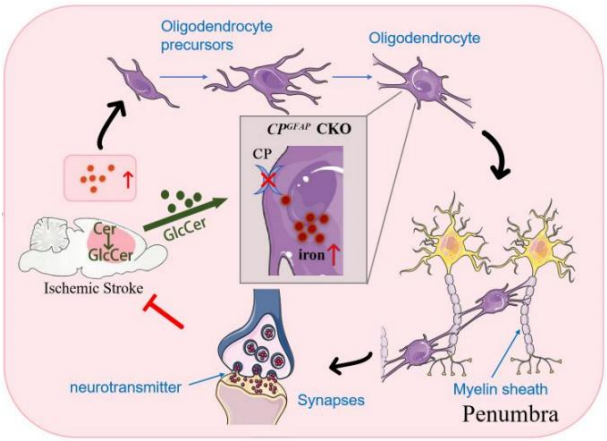
1. Shenao Fu, Shaokang Xu, Shubing Zhang*. *Biochim Biophys Acta Rev Cancer* **2023**, *1878* (3), 188893.
2. Divya Murthy, Kuldeep S. Attri, Voddu Suresh, Girish H. Rajacharya, Carlos A. Valenzuela, Ravi Thakur, Junzhang Zhao, Surendra K. Shukla, Nina V. Chaika, Drew LaBreck, Chinthalapally V. Rao, Michael A. Hollingsworth, Kamiya Mehla, Pankaj K. Singh*. *Proc Natl Acad Sci U S A* **2024**, *121* (14), e2315509121.

分会场：47.中国分析测试协会医学质谱分会成立暨论坛
交流形式：墙报

髓鞘对缺血性脑卒中小鼠神经损伤恢复过程中保护机制的研究

韩康、石欣彤、赵悄雅、靳晓芳、张桐、李星瑶、常彦忠*
河北师范大学

脑卒中是世界范围内的第二大死亡原因[1]。大量的证据表明，在脑卒中后几周可观察到自发恢复，如胶质增生、突触可塑性、髓鞘形成和神经再生等内源性修复机制在神经功能恢复中发挥着重要作用[2-5]。前期研究结果发现脑卒中恢复过程中铁降低显著抑制了神经功能恢复。铁代谢与髓鞘形成有密切关系，铁代谢是如何影响髓鞘形成，并进一步促进神经元恢复是我们主要的研究目的。研究方法：首先利用脂质组学和质谱成像技术，我们发现 dMCAO 中风小鼠损伤侧的核心区和半影区白质区髓鞘相关脂质以及髓磷脂蛋白(MBP)显著升高。然后通过喂食 CPZ 和腹腔注射芬戈莫得药物分别得到了脱髓鞘小鼠模型和促进髓鞘再生的小鼠模型，质谱成像结果显示脱髓鞘后不利于小鼠神经元功能恢复，而经过芬戈莫得药物治疗后显著增加了少突胶质前体细胞以及成熟细胞数量，抑制了神经元的损伤。接着我们利用蛋白组学探究了 dMCAO 损伤侧和对照测的分子通路差异性表达。结果显示损伤侧少突胶质细胞相关蛋白显著升高，同时发现与能量代谢相关的金属代谢发生了显著变化。金属代谢与神经递质表达密切相关，我们利用质谱成像和神经递质代谢组学检测了神经递质的变化，发现损伤侧谷氨酸水平在损伤第一天明显升高，而 GABA 氨基酸则显著降低。最后我们通过蛋白组学结果发现铜蓝蛋白(CP)发生显著变化，铜蓝蛋白是调控铁代谢和关联铜死亡的关键蛋白，我们利用星形胶质细胞特异性敲除 CP 研究金属代谢和髓鞘再生的关系。研究结果：通过质谱成像技术实现了金属、脂质、神经递质的空间分布特征同时原位成像，通过这项技术可以实现脑卒中小鼠损伤侧和非损伤侧对比，为了解在脑卒中恢复过程中不同生物分子的调控路径，从而为寻找新的治疗手段提供见解。结合蛋白组学，脂质组学，和代谢组学进一步探究相关分子通路，寻找相关的靶向治疗药物。研究结论：本研究揭示了髓鞘在缺血性脑卒中小鼠神经损伤恢复过程中的保护作用。并进一步探究金属代谢和髓鞘再生的调控机制。确定 CP 在该机制中的关键作用。



关键字 Stroke; myelin sheath; MSI; metal metabolism

参考文献

1. Nina A Hilkens MD, Barbara Casolla MD, Prof Thomas W Leung MD, Prof Frank-Erik de Leeuw MD*. Lancet. **2024**, *403*, 2820-2836.
2. Lagos-Cabre R, Burgos-Bravo F, Avalos AM, Leyton L*. Front Pharmacol. **2019**, *10*, 1546.
3. Choudhury GR, Ding S*. Neurobiology of disease. **2016**, *85*, 234-244.
4. Dimovasili C*, Fair AE, Garza IR, Batterman KV, Mortazavi F, Moore TL, Rosene DL. Geroscience. **2023**, *45*, 249-264.
5. Yunna Li, Yun Xia, Sijia Yin, Fang Wan, Junjie Hu, Liang Kou, Yadi Sun, Jiawei Wu, Qiulu Zhou, Jinsha Huang, Nian Xiong, Tao Wang*. Front Immunol. **2021**, *12*, 71980

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

Performance Evaluation of thickness-tapered channel in flow field-flow fractionation

文明熙*
Yonsei University

The thickness-tapered channel structure in flow field-flow fractionation (FlFFF) was recently introduced by constructing a channel with a linear decrease in thickness along its length without using a typical channel spacer.[1] Decrease in channel thickness was implemented by carving the depletion wall inside so that the depth decreases along the channel axis. This study initially evaluated the thickness-tapered channel in steric/hyperlayer separation of supramicron particles with improvements in separation speed, elution recovery, and expanded dynamic size range of separation. Since the migration flow rate increases along the channel axis, the channel exhibits a field-programming effect without extra equipment. Further studies compared the performance between the impact of field programming or outflow rate programming for the separation of polystyrene latex standards (50 – 800 nm) with a conventional uniform-thickness channel and a thickness-tapered channel without programming. Experiments varied outlet flow rate and crossflow rate conditions and revealed that the separation resolution of the tapered channel did not surpass that of field-programming uniform-thickness channel, however, it achieved higher-speed separation without a significant loss of resolution and the need for a complex flow controller system even at a low outflow rate condition. Furthermore, it improved the resolution for particles close to the steric transition regime (400 ~ 600 nm) in the normal mode of separation. Due to the continuous increase in mean flow velocity down the channel, the tapered channel exhibits flexibility in separating submicron-sized particles at high crossflow rate or low outflow rate conditions, of which the latter can be advantageous when coupled with mass spectrometry in a miniaturized setup. Finally, an effort to miniaturize thickness-tapered channel for flow FFF will be introduced too.

关键字 Thickness-tapered channel; Supramicron particles; Miniaturized setup

参考文献

1. Seung Yeon Shin, Jae Won Seo, Jin Yong Kim, Philip Stephen Williams, Myeong Hee Moon*, Anal Chem, **2022**, *94*, 14460.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

复杂样品场辅助分离富集方法与微型化装置研究

李攻科*、夏凌
中山大学

随着生命、食品、环境、医药等领域的科学研究和实际应用的不断深入，分析化学面临着如何有效分析这些复杂样品的挑战。它们不仅基质复杂、待测目标组分种类多含量低、理化性质差异微小。将待测物从复杂基质中预先分离富集出来，可以提高检测方法的灵敏度、选择性和准确性。但是分离富集是系统从无序到有序的熵减过程，非自发进行，需要输入能量。向该系统施加力、电、热、磁、声、微波等外场可以有效加速分离富集过程。基于团队在复杂样品场辅助分离分析多年研究基础，本研究针对微量复杂样品快速分离分析的需求，结合微芯片快速高效易集成和场辅助灵敏可控的优势，设计研制了多种分离富集微芯片装置，发展了电场辅助的微自由流电泳和磁场辅助微流控磁载分离富集检测方法，可用于食品、药品、体液样品中小分子、微粒物、蛋白、细胞等的快速分离分析，为微量复杂样品的快速分离分析提供方法和技术支持。

关键字 场辅助；分离富集；微型化装置；复杂样品。

参考文献

1. J. Yang, L. Xia, G. Li, Sensor. Actuat. B-Chem., **2024**, *398*, 134747
2. J. Dong, G. Li, L. Xia, Anal. Chem., **2022**, *94*, 16901-16909
3. J. Yang, X. Xiao, L. Xia, G. Li, L. Shui, Anal. Chem., **2021**, *93*, 8273-8280.
4. L. Xia, J. Yang, R. Su, W. Zhou, Y. Zhang, Y. Zhong, S. Huang, Y. Chen, G. Li, Anal. Chem., **2020**, *92*, 34-48.
5. L. Xia, W. Zhou, J. Huang, J. Dong, X. Xiao, G. Li, Electrophor., **2023**, *44*, 82-88.
6. W. Zhou, L. Xia, X. Xiao, G. Li, Q. Pu, Electrophor., **2019**, *40*, 2165-2171.
7. 刘玉兰，陈雅莉，肖小华，夏凌，李攻科，色谱, **2020**, *38*, 1197-1205.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

非对称场流、切向流过滤和超速离心在细胞外囊泡分离纯化和蛋白质组学研究中应用与比较

王凡，Alexandre Felipe Santa Ana de Lima，吴博雯，李娜，王继峰，杨福全*
中国科学院生物物理研究所

细胞外囊泡（Extracellular Vesicles, EVs）是细胞主动分泌的具有膜结构的微小囊泡的统称，几乎所有的细胞都会分泌 EVs。根据大小、起源和形成过程的不同，EVs 大致可分为外泌体（exosomes）、微囊泡（microvesicles, MVs）和凋亡小体（apoptotic bodies）。EVs 富含蛋白质、核酸、脂质与多肽等分子，具有重要的生物学功能，如参与细胞间通讯、信号传导、抗原递呈、细胞微环境的构建等。EVs 广泛参与细胞生理和病理过程，与肿瘤转移和多药耐药性密切相关等。干细胞衍生的 EVs 具有多种疾病的治疗潜能。生物体内的多种体液富含多种细胞分泌的 EVs，是疾病相关生物标志物的重要来源。因此开展疾病相关的 EV 蛋白质组学等研究意义重大。开展 EV 蛋白质组学研究的第一步是 EVs 的分离纯化，而血浆、血清和尿液等体液的组成复杂，EVs 分离纯化极具挑战性。

本报告系统介绍了基于非对称场流（Asymmetric flow field-flow fractionation, AF4）、切向流过滤（tangential flow Filtration, TFF）和超速离心（UC）等技术分离纯化血浆和尿液中 EVs 的方法的建立和优化，不同分离纯化方法的比较研究和适应性分析。利用所建立的 EV 分离纯化方法分别开展了地中海贫血患者血浆中 EV、糖尿病肾病和肾癌等患者尿液中 EV 的定量蛋白质组学研究，发现和鉴定了疾病相关的差异表达蛋白质，以及 lncRNAs 编码的小蛋白和多肽。经过初步验证筛选出有可能用于疾病诊断或亚型区分的潜在生物标志物。

关键字 细胞外囊泡、非对称场流、切向流过滤、蛋白质组学

参考文献

1. Taylor J, Bebawy M, Proteomics, **2019**, *19*, 1-2.
2. KRISHNAN S R, BEBAWY M, Mol Cancer, **2023**, *22(1)*: 79.
3. Li N, Wu B, Wang J, Yan Y, An P, Li Y, Liu Y, Hou Y, Qing X, Niu L, Ding X, Xie Z, Zhang M, Guo X, Chen X, Cai T, Luo J, Wang F, Yang F.Q.*, iScience. **2023**, *26*, 2, 106048.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

流体场场流分离在生物分析中的应用

钟文婉*
中国科学技术大学

流体场场流分离是一项温和的、根据分子的尺寸大小进行分离的技术。它所用的带状分离通道没有填充固定相，且系统压力相对较低，相比于传统的排阻色谱能够更好地避免由于剪切力及与固定相碰撞所造成的对生物结构的破坏，适用于生物大分子和生物颗粒的分析。本课题组在过去的研究工作中，发展了多种基于流体场场流分离的方法，用于提高对核酸和蛋白的复合体以及如外泌体类的生物颗粒的分析。首先我们发现流体场场流分离不会破坏适配体和蛋白形成的复合体，可用于测试结合常数及筛选适配体；流体场场流分离技术还允许使用高盐的生物缓冲液作为分离介质，有利于蛋白酶结构和活性的保持。最终，流体场场流分离帮助成功筛选出针对于 DNA 甲基转移酶 I 的适配体。该适配体不但和蛋白酶有强的、选择性的结合，而且可以抑制酶的活性并在细胞中使用。另外，流体场场流分离可通过改变分离通道方向和垂直方向的流速比控制不同大小的颗粒的流出时间；一个分离通道可以分离尺寸在几个纳米到几个微米的大范围内变动的样品。因此，我们利用流体场场流分离分析了循环系统中的微小 RNA 在不同的传输和保护介质中的分布，发现大部分的微小 RNA 可在外泌体中稳定存在，从而开始了对外泌体的分子组成的研究，意图发现更多的、可用于液体活检的疾病诊疗靶标。流体场场流分离的高样品通量和根据尺寸大小分离的特性可快速地将大量存在的蛋白和外泌体分开，所得到的初步纯化的外泌体样品可进入毛细管电泳分离系统，将外泌体和与其尺寸相当的污染物更好地分离，使得微量的、特异性好的外泌体蛋白可以在后续的质谱实验中被很好地分辨出来，大大增加了外泌体分析的可行度。我们的工作很好地证明了流体场场流分离在生物分析中的重要性和关键功能。

关键字 流体场场流分离 (flow field-flow fractionation)，适配体筛选 (SELEX)，循环微小 RNA (circulating microRNAs)，外泌体 (extracellular vesicles)

参考文献

1. Ju Yong Lee, W. Zhong*, New York, USA. **2025**.
2. G.B. Adkins, E. Sun, R. Coreas, W. Zhong*, Analytical Chemistry, **2020**, *92*, 7071-7078.
3. L. Wang, J. Lee, L. Gao, J. Yin, Y. Duan, L. A. Jimenez, G. B. Adkins, W. Ren, L. Li, J. Fang, Y. Wang, J. Song*, W. Zhong*, Nucleic Acids Research, **2019**, *47*, 11527-11537.
4. J. Ashby, K. Flack, L. Jimenez, Y. Duan, A.-K. Khatib, G. Somlo, S. E. Wang, X. Cui, W. Zhong*, Analytical Chemistry, **2014**, *86*, 9343-9349.
5. Z. Gao, Z. Hutchins, Z. Li, W. Zhong*, Analytical Chemistry, **2022**, *94*, 14083–14091.
6. Z. Gao, Z. Li, Z. Hutchins, Q. Zhang, and W. Zhong*, Analytical Chemistry, **2023**, *95*, 15778–15785.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

高梯度可调磁场作用下磁性粒子的运动特性和分离效果

邵力耕*、杜千帅、邹广政
大连交通大学

磁泳分离能够分选磁性粒子和磁性标记粒子，应用于临床医学、生物工程、分析化学和环境检测等领域。在磁泳分离装置中，设计科学合理的外加磁场是取得良好分离效果的关键因素。采用直线型带下线槽铁心，在铁心中嵌入三相绕组，如图 1 所示。设计的三相绕组，从左到右下线槽中绕组匝数依次递减。接入三相正弦交流电后产生高梯度循环移动磁场，磁场移动的频率和大小可以调节。分离通道水平平行放置于直线型铁心绕组上方，研究在高梯度可调磁场作用下磁性粒子的运动特性。分离通道载液中不同特性的磁性粒子在循环移动磁场的作用下，受到沿通道中载液流动方向的周期性磁场力牵引，不同特性的磁性粒子会在此方向上产生速度差，以不同的时间、先后流出分离通道，实现分离。利用这种高梯度循环磁场的磁泳分离装置，磁场力周期性地作用于磁性粒子，增加了粒子受磁场力作用时间，可以减少粒子的磁化团聚，能够改善粒子的分离效果。

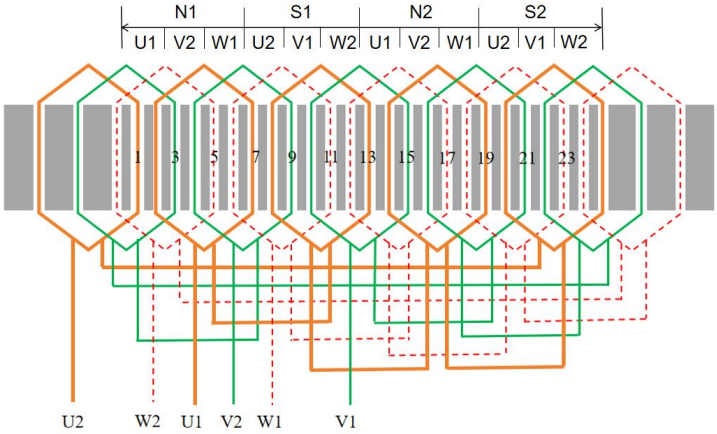


图1 高梯度磁场产生结构

关键字 磁泳分离

参考文献

1. Z. Sun, S. Liu, D. Zhao, L. Dong, J. Qi, C. Guo, Smart Mater. Struct. **2023**, *32*, 115027.
2. Y. Zhu, B. Zhang, J. Gu, S. Li, J. Magn. Magn. Mater. **2020**, *501*, 166485.
3. Y. Ding, J. Yuan, L. Wang, N. Jin, S. Wang, Y. Li, J. Lin, Biosens. Bioelectron. **2023**, *229*, 115230.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

A Porous Membrane-Medicated Preparative Electrophoresis for the Extraction of Nucleic Acids

魏伟*[1]、吴冠岑[1,2]、王胤佳[2]、梁宏彬[2]、王莉[2]
1. 天津理工大学
2. 昆明医科大学附属甘美医院,中国云南省昆明市盘龙区北京路 1228 号,邮编 650032

Preparative electrophoresis of biomacromolecules is a technique used to separate and purify large quantities of biomolecules, such as proteins or nucleic acids, based on their size and charge. Here, we report a three-dimensional separation approach to electrokinetically isolate DNA fragments from milliliter-scale plasma samples. The separation device consists of a two-tier cylindrical electrophoresis system. A high-density polyethylene (HDPE) porous tube, located at the center of the top cylindrical chamber, serves as the sample chamber, connecting the top and bottom chambers via a removable sample collection vial. The electrokinetic separation was carried out using three electrodes: a cathode (top chamber), an anode (bottom chamber), and an intermediate electrode (+/-) (sample chamber), operated with two DC power supplies in series. The proteins in the plasma migrated from the central sample chamber to the outer cathode due to electroosmotic flow (EOF) and electrophoretic mobility, while DNA moved beneath the anode chamber under the influence of the electric field. By adjusting the EOF and the pH of the running buffer, proteins and neutral compounds in the plasma were removed, allowing the collection of purified DNA using an integrated dialysis membrane vial. The separation mechanism involves electrophoretic separation based on the charge-to-mass ratio of molecules, size selection via a molecular cutoff membrane, and fractionation of charged and neutral molecules by an electrokinetic pump. Since the separation occurs from 360 degrees, 5 ml of plasma sample can be processed in under 30 minutes. This approach demonstrated efficient electrokinetic desalting and deproteinization in a single step for large-scale sample volumes, paving the way for new advancements in electrokinetic separation technology.

关键字 Porous Membrane, preparative Electrophoresis, DNA Isolation, Electrokinetic separation

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

应对富有机质水体中微量元素分析的不确定性：AF4-UV-ICPMS 技术的应用与挑战

王瑜*
中国地质大学（武汉）

人类活动释放的潜在有毒微量元素，如砷、镉、铅等，对水生生态系统的健康构成了严峻威胁。这些元素在水体环境中以复杂多样的形态存在，包括但不限于水解离子、无机分子、有机络合物，吸附在无机或有机胶体颗粒物表面，以及被悬浮颗粒包裹的形态。胶体颗粒物，作为国际纯物质与应用化学联合会（IUPAC）定义的粒径在 1 至 1000 纳米之间的悬浮颗粒，因其巨大的比表面积，在控制微量元素迁移、归宿及毒性方面发挥着关键作用。非对称流场流分离技术（AF4）结合紫外/可见光二极管阵列探测器（UV）和电感耦合等离子体质谱仪（ICPMS），凭借其基于流体动力学粒径的分离分析能力，成为研究水体中胶体颗粒物结合态微量元素的重要工具。然而，在富含有机质的天然水体的应用实践中，AF4-UV-ICPMS 测试技术面临显著挑战。研究表明，系统表面易吸附胶体颗粒物及其相关的微量元素，导致分析过程中的样品损失。在随后的分析测试中，这些弱吸附在系统表面的微量元素会与样品中的胶体相互作用，引发交叉污染。这一现象不仅降低了分析的准确性，还可能造成对水体中微量元素含量及其潜在毒性的误判。为减轻系统表面对样品中微量元素吸附和随后引发的交叉污染的影响，建议使用原样品或苏万尼河天然有机质（天然有机质标准样品，源自国际腐殖质协会）对 AF4 系统进行预清洗。尽管如此，AF4-UV-ICPMS 技术在天然水体中痕量元素的分析依然面临巨大挑战。开发用于测量胶态微量元素的标准参考材料至关重要，这将有助于建立可靠的分析方法，显著提升微量元素检测的准确性和一致性，为环境监测和水质管理提供更可靠的数据支持。

关键字 场流分离，微量元素，天然有机质，天然水体，误差分析

参考文献

1. Beckett, R., At. Spectrosc. **1991**, *12*, 228-232.
2. Xue, J.-P.; Cuss, C. W.; Noernberg, T.; Javed, M. B.; Chen, N.; Pelletier, R.; Wang, Y.; Shotyk, W., J. Hydrol. Reg. Stud. **2022**, *40*, 101033.
3. Wang, Y.; Cuss, C.; Shotyk, W., J. Chromatogr. A, **2020**, *1632*, 461600.
4. Cuss, C. W.; Grant-Weaver, I.; Shotyk, W., Anal. Chem, **2017**, *89 (15)*, 8027-8035.
5. Cuss, C. W.; Donner, M. W.; Grant-Weaver, I.; Noernberg, T.; Pelletier, R.; Sinnatamby, R. N.; Shotyk, W., Sci. Total Environ, **2018**, *642*, 1242-1251.
6. Du, L.; Cuss, C. W.; Dyck, M. F.; Noernberg, T.; Shotyk, W.; Naeth, M. A., Can. J. Soil Sci, **2020**, *100 (4)*, 381-392.
7. Ghotbizadeh, M.; Cuss, C.; Grant-Weaver, I.; Markov, A.; Noernberg, T.; Ulrich, A.; Shotyk, W., J. Hydrol. Reg. Stud, **2022**, *40*, 101029.
8. Javed, M. B.; Cuss, C. W.; Zheng, J.; Grant-Weaver, I.; Noernberg, T.; Shotyk, W., Environ. Sci. Atmos, **2022**, *2(3)*, 428-440.
9. Wang, Y.; Butt, S. A.; Cuss, C. W.; Pei, L.; Xue, J.-P.; Luu, A.; Barraza, F.; Shotyk, W., Anal. Chem, **2024**.
10. Wang, Y.; Cuss, C. W.; Pei, L.; Shotyk, W., Anal. Chem, **2024**, *96 (18)*, 6889-6897.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

基于中空纤维流场流分离技术的风化壳载 REE 纳米微粒表征

傅旋霓、岑浩宇、王萌、易泽邦、付伟*
桂林理工大学

中国南方离子吸附型稀土(REE)矿床是全球稀土资源的主要来源。近年来发现风化壳内 REE 具有小尺寸富集效应，即富集在纳米微粒中，这启示我们对离子吸附型 REE 矿床的成因理解还需要深入到纳米尺度。本文提出了一种中空纤维流场流分离(HF5)技术与电感耦合等离子质谱仪(ICP-MS)技术结合，实时表征风化壳载 REE 纳米微粒尺寸的方法。利用该方法分别对华南地区南安重稀土矿床全风化层与半风化层样品所提取的载 REE 纳米微粒进行了分离，并对其尺寸大小进行了表征。结果表明，风化壳载 REE 纳米微粒主要集中分布于 0~20 nm 和 20~80 nm 区间，半风化层载 REE 纳米微粒浓度高于全风化层载 REE 纳米微粒浓度。此外，REE 峰位与 Al、Fe、Mn 元素峰位有良好的对应关系，指示 REE 被纳米级黏土矿物以及铁锰氧化物吸附或离子交换，且粒径越小的纳米微粒与 REE 的富集关系更加密切。最后，本研究发现 Ce 在 120~140 nm 与 180~200 nm 尺寸范围内独立分布，表明部分载 Ce 纳米微粒可能以独立矿物微粒的形式存在。

关键字 离子吸附型稀土矿床;稀土元素;纳米微粒;中空纤维流场流分离与电感耦合等离子质谱仪联用技术

参考文献

1. M. Li., M. Zhou, A. Williams-Jones. Economic Geology. **2019**, *114(3)*: 541-568.
2. 易泽邦, 付伟, 赵芹, 等. 地学前缘, **2022**, *29(01)*: 42-53.
3. Z. Yi, W. Fu, Q. Zhao, et al. American Mineralogist, **2023**, *108(8)*: 1461-1475.
4. B. Stolpe, L. Guo, A. Shiller. Geochimica et Cosmochimica Acta, **2013**, *106*: 446-462.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

基于声流效应下的沙门氏菌高灵敏可视化快速检测研究

李王璐、李可欣、徐霞红*
中国科学院大学杭州高等研究院

食源性致病菌危害着人类健康，开发即时检测方法具有重要意义，但灵敏和准确的视觉判别仍具有挑战性。因此，本研究开发了一种基于声波微流控技术的荧光比色传感平台，用于鼠伤寒沙门氏菌的高灵敏可视化快速检测。我们利用驻波（BAW）驱动产生的声流效应诱导多条探针偶联聚苯乙烯（PS）微球向玻璃毛细管中心运动，并基于 Lab 颜色模式来评价色差变化，达到有效区分不同浓度沙门氏菌的目的。利用等温扩增、CRISPR/Cas12a 系统及声流控技术实现多重信号放大，在便携式信号源驱动下，目标基因的检测限可低至 1 copy/reaction，也缩短检测时间至 1 小时。由于微通道内的荧光颜色易于区分识别，该方法可作为（1~10^5 copies/reaction）沙门氏菌半定量分析的依据，有望为食品/药品监管和食源性疾病早期诊断提供解决方案。

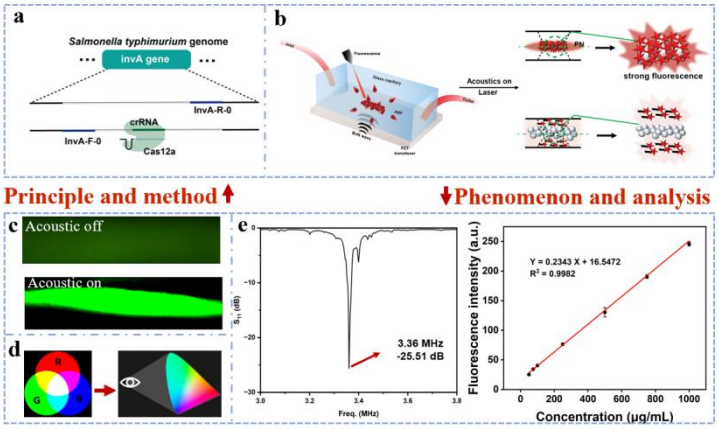


Fig. 1 Schematic diagram of (a)CRISPR/Cas12a system and (b)acoustofluidic enriching chip. (c)Resonance frequency scanning of acoustic transducer. (d) Excellent quantitative skills by acoustofluidic enriching platform. (e) Phenomena and analytical methods

关键字 声流控芯片；CRISPR/Cas12a；富集；鼠伤寒沙门氏菌；快速检测

参考文献

1. Wanglu Li, Zhihao Yao, Tongtong Ma, Zihong Ye, Kaiyu He, Liu Wang, Hongmei Wang, Yingchun Fu*, Xiahong Xu*, Advances in Colloid and Interface Science, **2024**, *332*, 103276.
2. Zhihao Yao, Wanglu Li, Kaiyu He, Hongmei Wang, Yan Xu, Xiahong Xu, Qun Wu, Liu Wang., Critical Reviews in Microbiology, **2024**, *50*, 4.
3. Zhihao Yao, Kaiyu He, Hongmei Wang, Suyin Feng, Xiaoqing Ding, Yan Xu, Qiang Wang, Xiahong Xu, Qun Wu*, Liu Wang*, ACS Sensors, *9(7)*, 3511–3519.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

非对称场流分离技术在血小板来源细胞外囊泡异质亚群分离与研究中的应用

毛震、张晓丹、蔡瑾、耿翱博、黄沛力*
首都医科大学

细胞外囊泡（EVs）作为重要的细胞间通讯介质，其异质性亚群在生理病理过程中发挥不同作用。明确界定 EVs 异质性亚群的生物物理特性、功能、成因和调控机制，对于了解其在生理病理过程中的确切作用及识别病理状态下的潜在诊断/预后生物标志物具有重要意义。然而，现有的 EVs 的异质性亚群的分离方法如差速超速离心法，存在容易导致样品聚集、生物活性降低、分离时间较长等缺点，并且难以去除蛋白质杂质。本研究旨在建立一种基于非对称场流分离（AF4）技术的血小板来源细胞外囊泡（PEVs）异质亚群分离、纯化和富集方法，以解决上述问题。研究采用 AF4-UV/MALS 系统对 PEVs 进行分离和表征，通过优化分离条件实现蛋白质杂质与 PEVs 的有效分离。为解决 AF4 分离后样品被稀释的问题，创新性地改造了 AF4 管路系统，在进样器和 AF4 系统之间连接大体积进样管路，并重新设定进样程序，实现 PEVs 亚群的高效富集。研究成功建立了基于 AF4 技术的 PEVs 异质亚群分离、纯化和富集方法，将 PEVs 分为小尺寸（PEVs-S，<100 nm）、中尺寸（PEVs-M，100-200 nm）和大尺寸（PEVs-L，>200 nm）三个亚群。该方法可同时提供各亚群的粒径分布、平均半径和颗粒浓度信息，具有良好的重现性。通过改造 AF4 管路与重新设定进样程序，实现了 PEVs 异质亚群样品的高效富集，富集效果优于常用的超滤法。透射电镜观察显示，富集后 EVs 样品形态良好，膜结构完整，保留样品的生物特性，利于后续对 EVs 异质性亚群进行深入研究。本研究建立的 AF4 分离表征方法为深入研究 EVs 异质性及其生物学功能提供了新的技术平台。

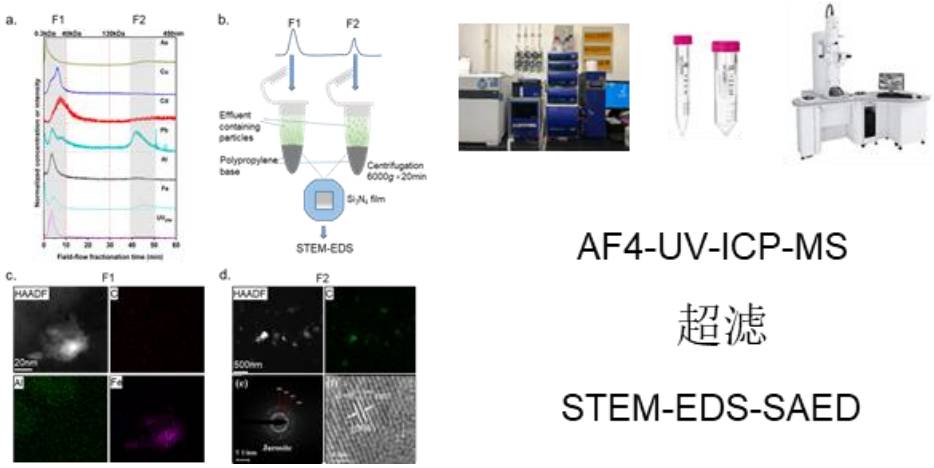
关键字 细胞外囊泡；异质性亚群；非对称场流分离技术；分离；富集

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

场流分离技术在土壤胶体颗粒重金属赋存与迁移研究中的应用

胡鹏杰*、杜彦锴、吴龙华
中国科学院南京土壤研究所

场流分馏技术是近年来迅速发展的适用于大分子、胶体和微粒的一种分离技术，普遍应用于生物和纳米材料等领域。其中应用范围最广的是非对称流场流分馏技术（Asymmetric flow field flow fractionation，AF4），具有可分离尺寸范围宽、分离条件温和，对样品的吸附、剪切作用小，并且可以程序化调节分离强度，与多种检测器在线联用等优点。土壤胶体尤其是水分散性胶体和纳米颗粒，在土壤重金属元素赋存、迁移和转化等方面起着重要作用，而准确、高效地分离和表征这些水分散性胶体和纳米颗粒，获得其粒径、结构、物质组成、目标污染元素分布等信息，则是技术关键。通过不同分子量的系列聚苯乙烯磺酸钠（PSS）标准品，建立了 AF4 特定洗脱条件下样品分子量（粒径）与洗脱时间之间的线性关系，进一步采用了非对称流场流分馏-紫外可见-等离子体质谱（AF4-UV-ICP-MS）以及扫描透射电子显微镜-能量色散谱-选区电子衍射（STEM-EDS-SAED）、超滤等相结合的技术手段，探讨了不同土壤性质、氧化还原、秸秆还田、酸雨等因素，对土壤孔隙水胶体颗粒粒径与成分，尤其是胶体态重金属赋存与迁移特征的影响。



关键字 场流分离，土壤，胶体，重金属

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

场流分离技术国内研究进展：机遇与挑战

窦海洋*
河北大学

1966 年，Giddings 首次提出场流分离（Field-flow fractionation, FFF）概念。FFF 是一种基于样品与外力场相互作用的分离技术。根据外力场的不同发展了热力场场流分离（Thermal field-flow fractionation, ThFFF），离心力场场流分离（Sedimentation field-flow fractionation, SdFFF），流场场流分离（Flow field-flow fractionation, FlFFF），电力场场流分离（Electrical field-flow fractionation, ElFFF）等技术。FFF 分离流道没有固定相和填充材料，检测范围广（1 nm-100 μm），分离条件温和，可以与紫外可见检测器（Ultraviolet-visible, UV）、示差折光检测器（Differential refractive index, dRI）、多角度激光光散射检测器（Multiangle light scattering, MALS）、动态激光光散射检测器（Dynamic light scattering, DLS）、荧光检测器（Fluorescence detector, FD）等在线联用，获得样品的粒径分布、绝对分子量分布、分子构象、聚集状态等信息。本文介绍了近十年来，FFF 在我国的研究进展，面临的机遇与挑战，重点介绍了非对称场流分离（Asymmetrical flow field-flow fractionation, AF4）。AF4 是集超滤与分离于一体的温和的分离技术，其分离流道没有固定相和填充材料，具有广阔的检测范围（103-1018 Da），适合剪切力敏感的生物大分子分离（例如：多糖）。本文基于 AF4-MALS-dRI 建立了“一步法”分离纯化了两个灵芝多糖组分，研究了其结构和抗肿瘤活性之间关系。在此基础上，研究了天麻、山药、大枣等药食同源中药材多糖的构效关系。此外，本文采用 AF4-MALS-dRI 结合傅里叶变换红外光谱、差示扫描量热法等技术，研究了从植物中提取的淀粉和非淀粉多糖的结构与其功能性质之间的关系。研究结果证明 AF4-MALS-dRI 是一种强有力的分离纯化及表征多糖的手段，为食源性多糖的开发提供技术支持。

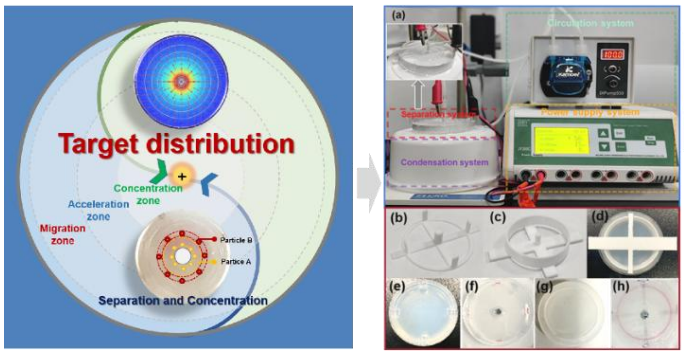
关键字 场流分离，多糖，纯化

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：报告

“靶型”电泳技术研发及其应用

刘璐、李东浩*
延边大学

外泌体、蛋白质、核酸及纳米颗粒等的微纳尺度物质分离分析是生命科学研究中的关键。而如何精准分离、浓缩及制备微纳尺度物质是保证其相关后续生物学研究的首要且必要条件。然而，目前传统的分离技术尚缺乏统一技术标准，在产量、纯度、时间效率等方面均存在不足。因此，迫切需要新型有效的微纳尺度物质精准分离和制备技术。针对微纳尺度物质的质荷比与电泳行为特征，结合圆环形非均匀电场的梯度电场线靶型分布特征，本论文独辟蹊径提出系列“靶型”电泳技术，成功实现了微纳尺度物质的分离、浓缩、制备一体化。1）根据微纳尺度物质的电荷及尺寸效应，结合环形非均匀电场及凝胶色谱，创建“靶型”凝胶电泳技术。首先针对“靶型”凝胶电泳中的环形非均匀电场进行了理论研究。环形电场根据电场特征可以区分为迁移区、加速区、浓缩区，目标物在迁移区内可以实现初步分离，在加速区得到精准分离，在浓缩区实现高度浓缩和制备。2）本方法成功在纳米颗粒的精准分离、全尺寸外泌体的高通量制备、骨髓间充质干细胞外泌体亚群的分离制备、盐酸多柔比星脂质体亚群的分离制备、DNA 及蛋白质的可控分离等方面得到了成功应用。3）首次提出在毛细管柱内实现电泳、色谱和场流动分离技术“三位一体”化的靶型毛细管电场流微分离技术。相较于传统电场流分离技术存在电极极化问题，通过离子液体及介孔硅材料界面修饰可以显著提高了工作电压范围及电极的稳定性。4）以不同尺寸及电荷的聚苯乙烯颗粒物为模型，在靶型毛细管电场流分离技术的电场驱动下颗粒物形成靶型分布，在流动场层流的作用下形成锥形排列，在交流电场和流动场的共同作用下，颗粒物在分离通道内实现反复吸附-脱附并最终实现色谱化分离。本论文提出的“靶型”电泳分离策略以成功在小分子-蛋白质-外泌体-单细胞层面提供了全新的分离技术平台，并且有望继续在生命科学领域中探索其更多的可能性。



关键字 电泳，靶型分布，锥形排列，色谱分离，制备

参考文献

1. L. Liu, D.H Li, et al. Analytica Chimica Acta, **2024**, *1287*: 342110.
2. L. Liu , R. Yang, J. Cui, et al. Analytical Chemistry, **2022**, *94(23)*: 8474-8482.
3. L. Liu, C. Yang, C. Liu, et al. Lab on a Chip, **2020**, *20(19)*: 3535-3543.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

基于中空纤维流场流分离系统的天然有机质与薄层黑磷相互作用研究

吴章国[1,2]、赵伟辰[1,2]、阴永光[1,2,3]、谭志强*[1,2,3]、张庆华[1,2,3]、江桂斌[1,2,3]

1. 中国科学院生态环境研究中心
2. 中国科学院大学
3. 国科大杭州高等研究院

薄层黑磷（FLBP）是一种新型二维材料，在光电子器件、光催化等领域有广泛的应用前景，这导致其不可避免地被释放到环境中，带来一系列环境风险。然而，FLBP 在环境条件下相当不稳定，如氧气和水分子可吸附在 FLBP 表面导致其快速降解为多种离子态磷，导致准确预测 FLBP 环境风险非常困难。天然有机质（NOM）在天然水体、土壤、大气等环境介质中广泛存在。研究表明，环境中的 NOM 可以显著提高 FLBP 在水环境中分散性和迁移能力[1]，而 NOM 中的重要成分黄腐酸可以促进 FLBP 在水环境中的氧化降解[2]。因此，NOM 组分与 FLBP 的相互作用可能存在显著差异，其对 FLBP 环境行为和效应的影响存在认知空白。为了深入研究 NOM 组分与 FLBP 的相互作用，我们建立了基于中空纤维流场流分离系统（HF5）的 FLBP 分离纯化新方法，然后将 HF5 与电感耦合等离子体质谱仪联用实现了实现 FLBP 和离子态磷的识别和定量。结果表明，FLBP-黄腐酸和 FLBP-腐植酸在 HF5 中的信号存在显著差异；黄腐酸和腐植酸均显著促进了 FLBP 的降解，且腐植酸的促进作用更强；NOM 的降解促进作用主要依赖于其含有的较大分子量成分（>10 kDa），这些成分与 FLBP 存在强烈的相互作用。以上结论为科学评估 FLBP 在实际环境中的环境归趋和风险提供了重要依据。

关键字 流场流分离，薄层黑磷，天然有机质

参考文献：

1. Tan Z, Yin Y, Guo X, et al, Environ. Sci.: Nano, **2019**, *6(2)*: 599-609.
2. Chen X, He W, Liang Y, et al, Water Res., **2023**, *238*: 120014.

分会场：48.场流分离与仪器
交流类型：墙报

声波微流控技术在微塑料尺寸分离中的应用研究

李可欣、李王璐、徐霞红*
中国科学院大学杭州高等研究院环境学院

微塑料因其优良的物理和化学特性被广泛应用于多个领域。然而，由于其微小的尺寸和难以降解的特性，微塑料在环境中广泛存在，对生态系统构成了重大威胁。本文深入研究了声波微流控技术在微塑料分离领域的应用。通过构建先进的声波微流控系统，实现了对不同尺寸微塑料颗粒的高效分离。实验过程中详细探讨了声波参数对分离效果的影响，通过优化液滴体积（15 uL）及分离芯片的参数（共振频率及驱动电压，20.78 KHz 和 20 Vpp），达到最优的分离效果。结果表明，声波微流控技术具有较高的分离效率和纯度，同时保持了良好的操作稳定性。该技术为微塑料的分离和回收提供了一种新的、高效的方法，有望在环境保护、水处理等领域发挥重要作用。

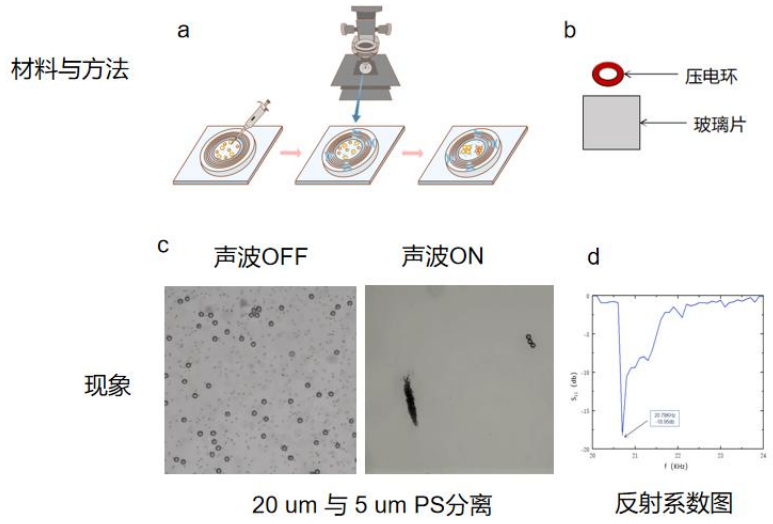


Fig. 1 (a) Schematic diagram of the device, (b) Annular piezoelectric transducer material, (c) Separation of 20+5 um PS before and after the acoustic wave, (d) Frequency response diagram of S11.

关键字 声波微流控；微塑料；分离技术

参考文献

1. Wanglu Li, Zhihao Yao, Tongtong Ma, Zihong Ye, Kaiyu He, Liu Wang, Hongmei Wang, Yingchun Fu*, Xiahong Xu*, Advances in Colloid and Interface Science, **2024**, *332*, 103276.
2. Mesquita P, Lin Y, Gong L, Schwartz D, Microplastics. **2024**; *3(3)*:449-462.

分会场：48.场流分离与仪器
交流类型：墙报

靶型旋转凝胶电泳用于蛋白质的分离

贾泽阳、刘璐、李东浩*
延边大学

凝胶电泳技术已被广泛地认为是一种分离生物大分子的有效方法，蛋白质等生物大分子在电场的驱动力下经过凝胶的色谱作用实现分离。在传统平板凝胶电泳中，目标物在两个电极间直线移动，此时分子所受凝胶的色谱作用固定且有限，而利用微流控技术可以通过制作螺旋轨道在有限空间下大幅提高色谱作用能力。对此，本文将圆形凝胶基质和可移动的环形电场装置相结合，希望在电极环形移动时，蛋白质处于变化的电场驱动力下，并能相应地增加迁移距离和色谱作用力，进而实现分离。文中使用蛋白质 Marker 探索了旋转电场和蛋白质电泳行为之间的关系：利用两个铂丝电极在凝胶外缘环形运动以调控电场旋转，电场线和等势线呈现点电荷电场形式；蛋白质 Marker 迁移方向随电极的运动而不断改变，实现了蛋白质的可控偏转和分离。在此过程中随着电极移动距离的增加，蛋白质在凝胶中的移动距离逐渐增加，由此提高了凝胶的利用率和蛋白质所受色谱作用。综上，将凝胶电泳中的电场旋转，可以在分离蛋白质的同时改变其迁移距离并提高分离效果。

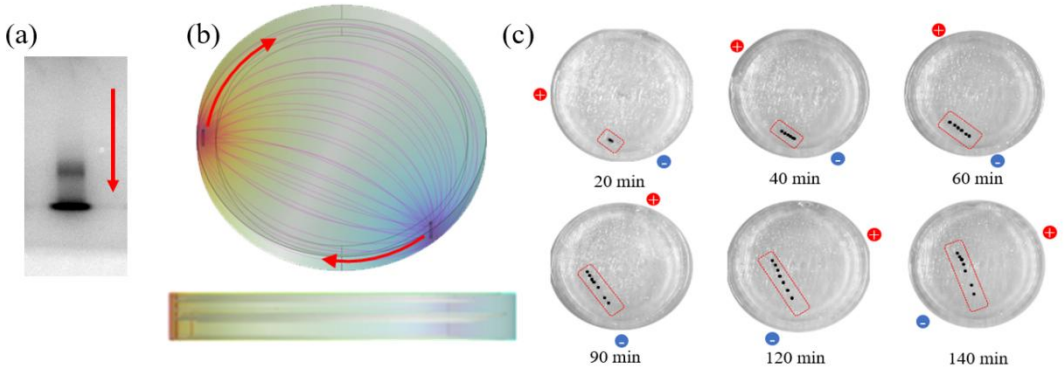


图 1.平板凝胶电泳的结果(a)以及旋转电泳中的电场线分布(b)和蛋白质迁移轨迹(c)。

关键字 凝胶电泳，旋转电场，蛋白质，分离

参考文献

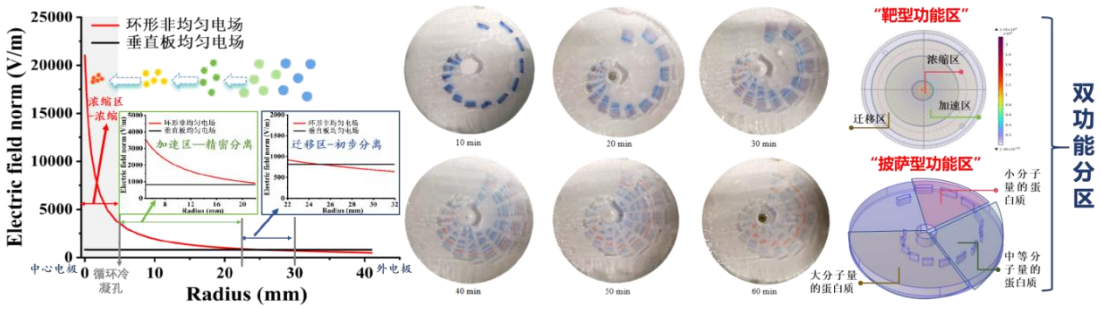
1. Maxwell Wei-Hao Li, et al. Lab on a Chip, **2019**, *19*, 3979-3987.
2. Liu L, et al. Analytical Chemistry, **2022**, *94*, 8474-8482.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

靶型凝胶电泳的双功能分区策略用于高分辨分离蛋白质

刘菲、刘璐、李东浩*
延边大学

蛋白质是生命活动的重要组成部分，参与多种生命过程。蛋白质的分离分析对于理解生命活动的规律、揭示疾病原理以及诊断治疗具有重要意义。但由于蛋白质复杂多样且含量较低，如何对其进行精细分离与高效浓缩是亟待解决的关键科学问题。凝胶电泳是一种常用的蛋白质分离技术，但采用单一浓度的凝胶难以在相同的条件下对全部目标蛋白进行有效分离。然而，梯度凝胶虽能够实现对不同分子量蛋白质的高分辨率分离，但仍存在制备过程繁琐和操作困难等问题。因此，迫切需要发展更加简便、高效、经济的新型蛋白质分离新技术，以满足现代蛋白质研究的需求。本研究利用内电极和环形外电极形成的环形非均匀电场[1]、凝胶分子筛效应以及不同电荷-尺寸比的蛋白质的特征，提出了一种同时高分辨分离和高效浓缩蛋白质的靶型凝胶电泳的双功能分区策略。首先通过调控梯度电场分布实现蛋白质的迁移速度梯度可控，探究了不同电荷-尺寸比的蛋白质在迁移区、加速区和浓缩区这三个“靶型功能区”的迁移行为特征；在此基础上，采用螺旋式进样方式探究了不同分子量的蛋白质的分离度，并将其分为大、中、小三种“披萨型功能区”；双功能分区的结合既能有效提高目标蛋白质的分离范围，同时实现对大中小分子量的蛋白质的高分辨分离，又能高分辨分子量差异小的蛋白质。同时，利用圆环形几何特征在中心区域同心收敛，实现蛋白质的分离浓缩一体化，提高后续的检测灵敏度。该技术在保持广泛适用性和高分辨率的同时，降低实验成本，简化操作流程，有望成为一种多功能、快速、高效的分离与浓缩一体化的蛋白质分离新方法。



关键字 环形非均匀电场，凝胶电泳，蛋白质，分离

参考文献

1. Lu Liu, et al. Analytical Chemistry, **2022**, *94*, 8474-8482.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

SEC 和 AF4 研究不同降解程度的大枣多糖对大豆 7S 球蛋白抗原性的影响

李佳琪、张西瑞、窦海洋*
河北大学

大豆蛋白因其营养价值高和功能特性好，被广泛应用于食品工业中[1]。目前，全球大约有 0.3%~0.4%的人口对大豆蛋白过敏[2]。Gly m 5（β-伴大豆球蛋白，也称为 7S 球蛋白）约占大豆蛋白的 30%。7S 球蛋白由α'，α和 β亚基组成，这些亚基在人体中均具有致敏性[3]。因此，降低 7S 球蛋白的抗原性至关重要。研究证明美拉德反应不仅可以降低大豆蛋白的抗原性，还能增强某些功能特性[4]。本研究通过美拉德反应利用大枣多糖（Jujube polysaccharide, JU）对 7S 球蛋白进行改性；采用尺寸排阻色谱（Size exclusion chromatography, SEC）和非对称场流分离（Asymmetrical flow field-flow fractionation, AF4）联用紫外可见光检测器（Ultraviolet-Visible detector, UV）、多角度光散射检测器（Multiangle light scattering, MALS）和示差折光检测器（Differential refractive index, dRI）探究了超声辅助过氧化氢（H_2O_2)处理对 JP 降解程度和 JP-7S 共聚物的影响；通过直接竞争性 ELISA 法研究了不同降解程度的 JP 对 7S 抗原性的影响。结果表明， 2.0% H_2O_2 超声处理的 JP 与 7S 美拉德反应最充分，形成的 JP-7S 共聚物结构致密，破坏了 7S 的线性抗原表位，减少了构象抗原表位。结果表明 AF4-UV-MALS-dRI 是评价 JP 降解程度和 JP-7S 共聚物形成的有效方法。

关键字 大枣多糖，大豆 7S 球蛋白，降解，非对称场流分离，抗原性

参考文献

1. Lin, X., Ye, L.Y., He, K., Zhang, T.T., Sun, F., Mei, T.T., et al, Food Chemistry, **2022**, *373*, 131589.
2. Riascos, J.J., Weissinger, S.M., Weissinger, A.K., Kulis, M., Burks, A.W., & Pons, L, Journal of Agricultural Food Chemistry, **2016**, *64(19)*, 3890-3900.
3. Xi, J., & He, M.X, Food Research International, **2020**, *134*, Article 109199.
4. Ma, X.B., Chi, C.D., Pu, Y.F., Miao, S., & Liu, D.H, Food Chemistry, **2022**, *387*, Article 132876.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

基于非对称场流分离技术纯化灵芝多糖及其抗肝癌活性研究

张晨婧、郭雨曦、窦海洋*
河北大学基础医学院

灵芝作为最新纳入“药食同源”目录的名贵中药材，在我国已有 2000 多年的使用历史。多糖是灵芝发挥不同药理作用的主要活性成分之一，多糖的结构与其生物活性密切相关，提取的粗多糖中含有许多杂质，影响多糖活性的研究。因此，制备高纯度的灵芝多糖是研究其构效关系的必要条件。

非对称场流分离技术（Asymmetrical flow field-flow fractionation, AF4）是一种温和的基于样品粒径大小对样品进行分离的技术，AF4 流道中没有固定相或填料，降低了多糖在分离过程中降解风险。本研究发展了一种基于 AF4 在线联用紫外可见光检测器、多角度光散射检测器和示差折光检测器（AF4-UV-MALS-dRI），结合超滤和 Sevag 法的灵芝多糖纯化表征方法，改进了灵芝子实体多糖（Ganoderma lucidum fruit body polysaccharide，GLFP）的纯化工艺；研究了纯化的 GLFP 对人肝癌细胞（HepG2 细胞）的抗肿瘤活性。结果表明：发展的 GLFP 分离纯化方法在保护其活性的基础上提高了分离纯化效率，得到了高纯度的 GLFP，总糖含量为 108.37 ± 0.45%。随着 GLFP 浓度增加，HepG2 细胞生长受到抑制，GLFP 可作用于 HepG2 细胞死亡受体通路，增加 HepG2 细胞总凋亡率，GLFP 展现出良好的抗肿瘤活性。

关键字 非对称场流分离；灵芝多糖；抗肝癌活性

参考文献

1. J. Lu, R. He, P. Sun, F. Zhang, R.J. Linhardt, A. Zhang, Int. J. Biol. Macromol, **2020**, *150*, 765-774.
2. S. Dai, W. Zhang, Y. Dou, H. Liu, X. Chen, J. Shi, H. Dou, Food Res. Int, **2021**, *149*, 110673.
3. S.S. Ferreira, C.P. Passos, P. Madureira, M. Vilanova, M.A. Coimbra, Carbohydr. Polym, **2015**, *132*, 378-396.
4. H. Dou, B. Zhou, H.D. Jang, S. Lee, J. Chromatogr. A, **2014**, *1340*, 115-120.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

富含硫酮和氨基基团的磁性共价有机骨架选择性萃取痕量金属离子

高银忠、王振华*
齐鲁工业大学

通过在磁性纳米颗粒表面简单地包覆富含硫酮和氨基基团的共价有机框架，制备了一种具有高吸附容量的核壳式磁性共价有机框架（MCOF-SN）纳米复合材料，用于选择性提取铜（Cu2+）、镉（Cd2+）、铅（Pb2+）、钴（Co2+）和镍（Ni2+）离子并使用 ICP-MS 进行测定。所制备的磁性共价有机骨架对 Cu2+、Cd2+、Pb2+、Co2+和 Ni2+离子具有高吸附容量，分别达到 52、65、162、34 和 42 mg g−1。优化了影响磁固相萃取的参数。最佳实验条件为：样品的 pH 值为 4-5；洗脱液为 1 mL 的 HNO3（1%，v/v）溶液；吸附剂用量为 15mg。在最佳实验条件下，水中 Cu2+、Cd2+、Pb2+、Co2+和 Ni2+离子的检出限（LOD）分别为 0.26、0.16、0.25、0.08 和 0.17 ng L−1，富集因子分别为 192、191、196、188 和 190 倍，其相对标准偏差（RSD）分别小于 5%（20 ng L−1，n=3）。基于 0.1 克样品，中草药样品的检出限分别为 0.52、0.32、0.50、0.16 和 0.34 μg kg−1。所提出的 MSPE-ICP-MS 方法操作简单、灵敏度高、抗基质干扰能力强，已成功应用于水和中草药等基质复杂的样品。

关键字 萃取；金属离子；共价有机骨架；磁性纳米复合材料；水和中草药样品

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

基于非对称场流分离技术及天然低共熔溶剂提取纯化山药皮多糖

杨柳、王沐、窦海洋*
河北大学

山药是我国传统药食同源中药材之一[1]，山药皮是山药加工的主要副产物，约占加工品产量的 20%。多糖是山药皮主要的生物活性成分之一，具有增强机体免疫力、降血糖和血脂等一系列功效。因此，从废弃山药皮中高效回收和利用多糖已成为提高其商业价值的一种趋势[2]。天然低共熔溶剂（Natural Deep Eutectic Solvent, NADES）提取法是近几年来出现的新型提取方法之一[3]，相较于传统溶剂，NADES 合成方法简单、绿色环保，并且在提取过程中可以避免温度过高对多糖结构和活性产生的不利影响。

本研究以山药皮粉末为原料，采用超声辅助 NADES 提取山药皮多糖。考察了不同种类 NADES 对山药皮多糖的提取效率及总糖含量影响，并与水提法进行了比较。经过初步筛选，甜菜碱和尿素组成的 NADES 提取效率最高。此外，考察了 NADES 成分的摩尔比、含水量、料液比、提取时间和提取温度对山药皮多糖提取效率和总糖含量的影响。结果表明：在 70 ℃条件下，以甜菜碱-尿素的摩尔比为 1: 2，含水量为 40%，液料比为 1: 40 g/mL，提取时间 30 min，山药皮多糖提取效率为 150.3±6.4 mg/g。采用碱性蛋白酶酶解蛋白质结合非对称场流分离（Asymmetrical flow field-flow fractionation, AF4）技术分离纯化山药皮多糖。结果发现，碱性蛋白酶可以将蛋白质酶解为小分子酶解产物，部分酶解产物可以通过 AF4 中的超滤膜除去，截留在 AF4 流道中的蛋白质则可以根据粒径大小将其与多糖组分分开。收集多糖片段，则可获得高纯的山药皮多糖，总糖含量为 102.9±2.5%。结果表明，超声辅助 NADES 结合酶解蛋白质及 AF4 是一种绿色高效的提取纯化山药皮多糖方法。

关键字 非对称场流分离技术；天然低共熔溶剂

参考文献

1. Y. Li, S. Ji, T. Xu, et al, Trends Food Sci. Technol., **2023**, *134*, 29-40.
2. H.O. Wang, S. Liu, X.J. Zhou, et al, Int. J. Food Sci. Technol., **2020**, *55(3)*, 14405.
3. M. Cai, H. Xing, B. Tian, et al, Carbohydr. Polym., **2021**, *269*, 118329.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

基于非对称场流分离技术探究内源性非淀粉多糖对山药淀粉温度循环回生的影响

王沐、杨柳、窦海洋*
河北大学

山药是我国传统食药同源中药材之一，拥有数千年的食用历史[1]。其中山药淀粉（Yam starch, YS）约占山药块茎干重的 70%[2]。淀粉是人类日常生活中碳水化合物的主要来源，由直链淀粉和支链淀粉组成。淀粉回生是热加工淀粉食品在储存过程中不可避免的现象，回生的淀粉又称为三型抗性淀粉（RS3），其具有膳食纤维特性，在预防糖尿病、心血管疾病等方面具有一定功效[3]。

由于淀粉分子的结构的复杂性和分子量较大，其分离和表征具有挑战性。非对称场流分离技术（Asymmetrical flow field-flow fractionation, AF4）被证明是一种有力分离淀粉方法，由于其没有固定相或填料，降低了柱吸附和剪切降解的风险[4]。淀粉回生受多种因素的影响，包括非淀粉多糖（Non-starch polysaccharides, NSP）和储存温度。本研究采用 AF4、傅里叶红外变换光谱（Fourier transform infrared spectroscopy, FTIR）和 X-射线衍射（X-ray diffractometer, XRD）等方法，系统地研究了内源性 NSP 和温度循环储存对 YS 回生行为的影响。提出了内源性 NSP 在温度循环储存过程中对 YS 回生的影响机制。结果表明：4/-20 ℃的温度循环储存有利于 YS 的回生，这是由于在冷冻储存过程中形成了富含淀粉的区域。山药 NSP 不仅可以与直链淀粉或支链淀粉分子相互作用形成可促进 YS 短期回生的聚集体，还可以与支链淀粉竞争水分子，在反复冻融储存过程中起到协同作用，进而促进 YS 的回生。

关键字 非对称场流分离；淀粉回生

参考文献

1. L. Zhang, S. Wang, W. Zhang, G. Chang, L. Guo, X. Li, W. Gao, Food Chem., **2024**, *446*, 138897.
2. H. An, Q. Ma, F. Zhang, C. Zhai, J. Sun, Y. Tang, W. Wang, Food Hydrocoll., **2024**, *146*, 109174.
3. X. Liu, L. Qiao, Y. Kong, H. Wang, B. Yang, Food Chem.: X, **2024**, *21*, 101103.
4. H. Dou, B. Zhou, H.D. Jang, S. Lee, J. Chromatogr. A, **2014**, *1340*, 115-120.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

基于便携式气体压力计的钙离子分析方法

卓大力、邹志荣*
四川师范大学

这项研究提出了一种基于便携式压力计的钙离子（Ca^{2+}）检测新方法。通过加入草酸钠（$Na_2C_2O_4$），使钙离子与其反应生成草酸钙（CaC_2O_4）沉淀。随后，加入稀硫酸（H_2SO_4）溶解 CaC_2O_4，并将其转化为草酸（$H_2C_2O_4$）。在酸性条件下，草酸与高锰酸钾（$KMnO_4$）发生氧化还原反应，释放二氧化碳（CO_2），导致密封反应瓶内气体压力升高。通过便携式压力计测量压力变化，从而实现对钙离子浓度的定量检测。在 1-80 mmol L^{-1} 浓度范围内，压力变化值与钙离子浓度呈良好线性关系，检出限为 0.429 mmol L^{-1}。将该方法进一步应用于实际样品的检测，回收率介于 99%至 110%之间。整个反应过程仅需 400 秒，具有低成本、高灵敏度、快速和简便的优点，适用于即时检测钙离子的浓度。

关键字 钙离子；气体压力计；便携；即时检测；葡萄糖酸钙口服液

参考文献

1. D. Liu, J. Wang, L. Wu, Y. Huang, Y. Zhang, M. Zhu, Y. Wang, Z. Zhu, C. Yang, TrAC-Trend. Anal. Chem., **2020**, *122*, 115701.
2. Z. Zhu, Z. Guan, D. Liu, S. Jia, J. Li, Z. Lei, S. Lin, T. Ji, Z. Tian, C. Yang, Angew. Chem. Int. Ed., **2015**, *54*, 10448-10453.

分会场：48.场流分离与仪器
交流形式：墙报

无需色谱分离的无机锑形态分析的氢化物发生智能手机读数比色系统

董潇屿、邹志荣*
四川师范大学

锑是环境水系中有毒的准金属元素，水样中锑的浓度被要求不高于 0.02 μg/mL。现场分析锑需要小型化/便携式分析系统/设备。本文将氢化物发生与智能手机读数比色法相结合，用于无机锑的形态分析，并且无需色谱分离。分析 Sb(III)浓度时，用掩蔽剂将 Sb(V)掩蔽；分析锑的总浓度时，分析前将 Sb(V)还原为 Sb(III)。Sb(III)通过氢化物发生转化为 SbH3, SbH3 与 HAuCl4 发生反应，在试纸上原位生成金纳米颗粒(Au NPs)，试纸颜色由淡黄色变为黑色，可以用裸眼和智能手机 RGB 模式进行比色分析。将该小型、易于使用的智能手机读数分析系统进一步用于实际样品中无机锑的现场分析，回收率为 95～105%。

关键字 氢化物发生 锑 形态分析 目视比色 智能手机

参考文献

1. T. Tolessa, Z. Tan, J. Liu, Anal. Chim. Acta, **2018**, *1004*, 67-73.
2. Z. Zou, S. Ye, J. Xiao, C. Jiang, S. Zhang, C. Tan, X. Xiong, K. Huang, Food. Chem., **2023**, *428*, 136806.