



淮安大学

中国化学会
第十六届全国生物医药色谱质谱
及相关技术学术报告会

会议论文集

BCM

主办单位：中国化学会色谱专业委员会、北京理化分析测试技术学会色谱专业委员会

承办单位：北京理化分析测试技术学会

协办单位：淮安大学



中国·淮安 2026年5月

PL-04

微流控单细胞蛋白质组和多组学分析

方 群

浙江大学化学系, 杭州, 310058

*E-mail: fangqun@zju.edu.cn

基于研究组前期发展的微流控序控液滴 (SODA) 技术, 我们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, 发展了“点取式”单细胞蛋白质组分析 (PiSPA) 流程¹。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。

利用上述系统, 实现深度覆盖的单细胞蛋白质组分析¹、单细胞转录组-蛋白质组联合分析²、单细胞蛋白质组-代谢组联合分析³, 以及单细胞水平的免疫细胞-肿瘤细胞相互作用分析⁴、肿瘤细胞耐药分析⁵、临床样品循环肿瘤细胞 (CTCs) 分析, 以及构建了单细胞蛋白质组分析的基准信息学流程⁶等。基于上述技术和系统, 还研发了商品化微流控单细胞微操控仪——赛鹰 (Celleagle) 系统, 可实现自动化和智能化的单细胞分选、捕获和样品预处理操作, 近期从单个 A549 细胞中定量鉴定最高超过 6000 种蛋白质, 实现了更高深度覆盖的单细胞蛋白质组学分析。

致谢: 感谢国家自然科学基金重点项目 (22234007) 和科学仪器专项 (22527805) 的资助。

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.
2. Y-R. Jiang, L. Zhu, L-R. Cao, Q. Wu, J-B. Chen, Y. Wang, J. Wu, T-Y. Zhang, Z-L. Wang, Z-Y. Guan, Q-Q. Xu, Q-X. Fan, S-W. Shi, H-F. Wang, J-Z. Pan, X-D. Fu, Y. Wang, Q. Fang, Simultaneous deep transcriptome and proteome profiling in a single mouse oocyte, *Cell Rep.*, 2023, 42, 113455.
3. J. Wu, Q-Q. Xu, Y-R. Jiang, J-B. Chen, W-X. Ying, Q-X. Fan, H-F. Wang, Y. Wang, S-W. Shi, J-Z. Pan, Q. Fang, One-shot single-cell proteome and metabolome analysis strategy for the same single cell, *Anal. Chem.*, 2024, 96, 5499-5508.
4. Q-Q. Xu, Y-R. Jiang, J-B. Chen, J. Wu, Y-X. Chen, Q-X. Fan, H-F. Wang, Y. Yang, J-Z. Pan, Q. Fang, Single cell-pair proteomics for decoding immune-cancer cell interactions. *Adv. Sci.*, 2025, 2414769.
5. Q-X. Fan, Y-R. Jiang, J-B. Chen, Y-X. Chen, Q-Q. Xu, J. Wu, H-F. Wang, Y. Yang, J-Z. Pan, Q. Fang, Integrated single-cell proteomic and morphometric analysis reveals heterogeneous drug-resistant subpopulations. *Anal. Chem.*, 2025, 97, 15028.
6. J. Wang, Y. Huang, F. Lu, Q. Xu, Z. Yang, Y. Jiang, S. Shi, J. Pan, Y. Yang, Q. Fang, Benchmarking informatics workflows for data-independent acquisition single-cell proteomics. *Nat. Commun.*, 2025, 16, 10276.

PL-08

外泌体富集纯化新方法及生物学应用

袁辉明, 随志刚, 杨开广, 张丽华*, 张玉奎

中国科学院大连化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: lihuazhang@dicp.ac.cn

外泌体不仅是细胞间通讯中的关键载体, 而且在疾病诊疗中发挥重要作用。尽管目前该领域研究已受到越来越多的关注, 但在富集外泌体的纯度、回收率, 以及制备的通量和产量等方面仍需要提升。此外, 由于缺乏和活性密切相关的质控方法, 制约了在生物学方面的应用。

针对超速离心方法损失严重导致的微量样品中外泌体制备困难的问题, 研制了基于双配体协同捕获机制的微流控芯片。芯片通道内集成的周期性排布的功能化 Y 型微柱阵列, 可显著提升外泌体与功能化表面相互作用的几率; Ti^{4+} 与囊泡磷脂磷酸基团的配位作用和 DSPE 插入脂质双层的疏水锚定作用的协同, 可增强外泌体捕获的效率和选择性。利用该技术从 20 μL 微量血浆中富集的外泌体的纯度和数目均比超速离心方法提高了 2 倍以上, 回收率提高了 5 倍; 实现了肺器官芯片微量培养上清液中外泌体的富集和蛋白质组分析, 并解析了不同烟气暴露造成的毒性机制。

为提高外泌体富集的通量, 发展了具有溶剂诱导相变特性的两性离子聚合物 (PSPP), 基于两性离子的配位作用, 可在 5 min 完成外泌体的分离, 并回收率 >99%。相较于超速离心法, PSPP 法分离的囊泡在细胞摄取、促进细胞增殖与迁移方面表现出更强的生物学活性。该方法在微量血浆、尿液、唾液、房水、肺泡灌洗液等多种临床体液的外泌体富集中展示出稳定的适用性。

为实现外泌体的规模化制备, 研制了电场辅助切向流的外泌体制备仪, 并用于不同代次干细胞培养液中外泌体的富集。利用定量蛋白质组技术, 发现了 4 种与神经保护活性密切相关的功能标记物, 并揭示了保护机理。利用制备的鹿茸干细胞外泌体, 实现了小鼠和大鼠皮肤损伤、颅骨损伤和肠损伤等的修复。

此外, 还建立了植物来源外泌体样囊泡的制备方法, 有望为助力我国中药产业的纵深发展提供新思路。

PL-09

单细胞代谢组分析新方法及其应用研究

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

通讯联系人 E-mail: yu.bai@pku.edu.cn

细胞间存在普遍的异质性, 对单个细胞进行分析与测量, 有利于精确了解细胞复杂的生命活动以及生理状态。基于质谱的在线流式单细胞代谢组, 无需复杂的取样技术, 可实现细胞的连续进样与代谢组分析。然而, 现有方法面临代谢物覆盖深度有限、指认准确度不足、代谢过程动态信息缺乏等挑战, 无法完整地反映体内代谢稳态 [1]。针对上述挑战, 我们发展了深度有机质谱流式分析平台。该平台可实现单个细胞平均分析时间的延长, 利用采集的大量代谢物二级谱图, 丰富了单细胞代谢物鉴定数目。基于二级质谱实现了单细胞内多组构造异构体的定性定量分析。利用3-羟基丁酸 (β -hydroxybutyrate, BHB)/4-羟基丁酸 (γ -hydroxybutyrate, GHB) 异构体含量的相对比值可实现MCF-7细胞三种亚型的精细区分。结合单细胞测序结果提示了BHB下游靶标蛋白质如金属硫蛋白 (metallothionein 2A, MT2A) 的表达差异, 揭示了肿瘤细胞在抗氧化能力方面可能存在的异质性 [2, 3]。针对单细胞中代谢动态信息缺乏无法反映代谢稳态信息的问题, 结合稳定同位素标记策略与有机流式质谱法, 发展了单细胞动态代谢组分析平台。该平台包括高通量的有机流式质谱代谢组数据采集以及自动化的单细胞动态代谢组数据分析。对MDA-MB-231乳腺癌单细胞的代谢活性全局分析结果证实单细胞间代谢活性异质性, 并在单细胞水平实现了代谢网络中通路间的相关性及流动性。以直接接触共培养细胞体系作为模型, 基于神经网络机器学习模型, 建立了无需标记和后续分离的单肿瘤细胞及巨噬细胞的二元分类方法, 实现了对直接共培养细胞模型的快速、直接进样分析。肿瘤细胞及巨噬细胞直接共培养后代代谢浓度和活性的综合分析揭示了二者互作诱导的代谢重编程。动态代谢组分析结果显示肿瘤相关巨噬细胞具有传统M1/M2分类外更精细的分化异质性亚群, 与单细胞转录组联合分析结果揭示了各分化亚群具备促肿瘤、血管生成等潜在生物学功能 [4]。针对硫醇类代谢物活性高、易氧化损失的特点, 通过活细胞标记原位阻断硫醇氧化, 设计并合成巯基反应质谱探针, 标记的同时其增敏基团可提高质谱信号响应, 进而提高硫醇类代谢物的覆盖率。结合液质联用方法在微量细胞构建硫醇亚代谢组数据库和定量方法, 结合有机质谱流式平台, 首次实现单个细胞中27种硫醇代谢物的亚代谢组分析。揭示了RSL3诱导肿瘤细胞铁死亡过程中谷胱甘肽代谢异质性导致的细胞亚型聚类。

参考文献

1. S.J. Qin, D.Y. Miao, X. Zhang, Y. Zhang, Y. Bai*, *TrAC Trends in Anal. Chem.*, **2023**, 117086.
2. S.J. Qin, Y. Zhang, M.Y. Shi, D.Y. Miao, J.S. Lu, L. Wen and Y. Bai*. *Nat Commun.*, **2024**, 15, 4387.
3. S.J. Qin, X.Y. Zhang, Y. Zhang, D.Y. Miao, W.S. Wei, and Y. Bai*, *Chem. Sci.*, **2025**, 16, 3187
4. Y. Zhang, M.Y. Shi, M.X. Li, S.J. Qin, D.Y. Miao and Y. Bai*, *Nat Commun.*, **2025**, 16, 4582.
5. D.Y. Miao, Q.N. Li, Y. Zhang, S.J. Qin, Y. Wang, X.Y. Liu, Y. Bai*, *Nat. Commun.*, **2026**, 17, 3378,

PL-11

微液滴化学

张新星*

南开大学

E-mail: zhangxx@nankai.edu.cn

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 ($\text{OH}^\bullet$)。电子具有极高的还原性，而 $\text{OH}^\bullet$ 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 $\text{OH}^\bullet$ 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。

I-01

复杂样品制备/快速检测方法研究进展

李攻科^{*}, 秦宏林, 陈会婷, 刘子旺, 唐 丽, 夏 凌, 张卓旻, 肖小华, 胡玉斐

中山大学化学学院, 广东省广州市, 510006

* Email: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

摘要正文: 样品制备作为分析过程中最耗时、易引起误差的关键环节, 严重制约了复杂样品快速检测的速度、准确度和精密度。样品制备是将被分析物从样品基体转移到定性、定量评价的过程。从混沌到有序, 这种传质过程不会自动发生, 加速样品制备的策略是如何使热力学第二定律的自发过程逆转并快速定量进行。为提高样品制备效率, 包括分离和富集过程, 必须在传质系统中引入能量以减少熵增。通过引入新相、膜和场, 改变系统中化学势的分布, 是降低系统熵, 提高制样效率有效途径。随着快速灵敏传感检测系统的发展, 快速样品制备技术成为快速检测的瓶颈。为提高样品制样速度, 在样品制备过程中引入额外的能量有助于加速传质和换热, 利用声波、微波和电场等辅助场, 可提高样品制样效率。其次, 通过引入新相加速制样过程中传质, 包括相吸附、相分配、化学转化、空间识别以加速传质。第三, 减少样品量缩短样品制备时间, 包括微萃取、微流体分离等。第四, 阵列/集成策略, 同时完成一批样品制备, 结合高通量分析技术减少单样平均制备的时间。通过联用实现分离富集与识别传感步骤一体化加快检测速度。本文报道了复杂样品快速制备检测一体化方法研究进展, 包括复杂样品表面增强拉曼光谱、化学发光及荧光快速检测方法研究。

关键词: 样品制备; 分子光谱; 一体化; 快速检测; 复杂样品。

参考文献:

- [1] J.N.Yang, X.H. Xiao, L.Xia, G.K.Li, L.L.Shui, *Analytical Chemistry*, 2021, 93:8273-8280.
- [2] H.S.Lai, Z.Y.Chen, G.K.Li, Z.M.Zhang, *Analytical Chemistry*, 2022, 94:16275-16281.
- [3] J.W.Dong, G.K.Li, L.Xia, *Analytical Chemistry*, 2022, 94:16901-1616909.
- [4] R.H.Su, G.K.Li, X.H. Xiao, *Analytical Chemistry*, 2023, 95:6399-6409.
- [5] H.S.Lai, G.K.Li, Z.M.Zhang, *Analytical Chemistry*, 2023, 95:18149-18157.
- [6] D.Li, Z.M.Huo, L.Xia, X.H.Xiao, G.K.Li, *Analytical Chemistry*, 2024, 96:5369-5374.
- [7] B.Y.Huo, L. Xia, Y.L. Hu, G.K.Li, *Biosensors and Bioelectronics*, 2024, 255:116227.
- [8] L.H.Yin, B.Y.Huo, L.Xia, G.K.Li, *Analytical Chemistry*, 2024, 96:11036-11043.
- [9] W.Y.Hu, L.Xia, Y.F.Hu, G.K.Li, *Analytical Chemistry*, 2025, 97:1347-1356.
- [10] D.Li, L.Xia, G.K.Li, *Analytical Chemistry*, 2025, 97: 15482-15491.

*基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (No.22134007) 及面上项目 (No.22576240), 广东省自然科学基金项目 (No.2019B020211001) 及广东省重点领域研发计划项目 (Nos.2025B0202120004 和 2026B0202150002)。

- [11] H.T.Chen,X.S.Yang, L.Xia,G.K. Li, *Journal of Chromatography A*, 2025, 1762(8):466364.
- [12] B.S. Chen, Z.W. Liu, X.S. Yang, X.L.Zhou, L.Xia, G.K.Li, *Chemical Science*, 2026, 17:2028-2044.

I-02

分子印迹的识别萃取与分离分析

师彦平*

(中国科学院兰州化学物理研究所, 甘肃 兰州 730000)

通讯联系人 E-mail: shiyp@licp.cas.cn.

分子印迹技术(molecular imprinting technology, MIT)是为获得与某一特定目标分子在空间形状、大小和官能团相互匹配的分印迹聚合物(molecular imprinted polymers, MIPs)的材料制备技术,其工作原理可被形象地描述为“锁钥原理”。分子印迹聚合物(MIPs)的制备是在模板分子的引导下,首先使模板分子与功能单体进行预组装,然后在交联剂的作用下,固定模板分子与功能单体形成的预组装体系,形成聚合物。通过洗脱聚合物,将其内部的模板分子除去,在聚合物内部留下与模板分子大小、形状和官能团相互匹配的印迹空穴。当MIPs再次吸附模板分子时,印迹空穴可通过形状匹配和官能团间的静电作用、氢键作用、疏水作用等相互作用,实现对模板分子的选择性吸附。

固相萃取技术(solid-phase extraction technology, SPET)作为化学分离和纯化的一个强有力工具,已在制药、生物学、食品分析等领域起着重要的作用。开发萃取能力强、选择性好的固相萃取材料是固相萃取技术的核心步骤。近年来,我们以分子印迹聚合物为固相萃取核心材料,发展了一系列分子印迹固相萃取新技术,实现了目标药物小分子和糖蛋白生物大分子的高选择性识别萃取与分离分析研究工作^[1-9]。

关键词: 固相萃取技术、分子印迹技术、分子印迹聚合物、糖蛋白印迹萃取与分析

参考文献:

1. Kai-Wen Zheng, Jing-Yan Kang, Xiao-Bo Zhao, Ying-Shan Zhang, Yan-Ping Shi*. Sandwich-structured imprinted polymers for colorimetric glycoprotein detection via functionalized CeO₂ nanozyme catalysis. *New Journal of Chemistry*, **2025**, 49: 12841-12851.
2. Kai-Wen Zheng, Yi-Da Zhang, Ying-Shan Zhang, Yan-Ping Shi*. Polyaniline-coated flower-like titanium dioxide magnetic fluorescent imprinted nanoparticles for the determination of transferrin in human serum. *Analytical Letters*, **2025**, 58(4): 608-622.
3. Yi-Da Zhang, Cheng Ma, Yan-Ping Shi*. Janus nanozyme based satellite structure immunosandwich colorimetric strategy for glycoproteins visual detection. *Chemical Engineering Journal*, **2023**, 454: 140495.
4. Yi-Da Zhang, Cheng Ma, Yan-Ping Shi*. Gold bipyramids molecularly imprinted gel colorimetric device for whole blood cholesterol analysis. *Analytica Chimica Acta*, **2022**, 1236: 340584.
5. Yi-Da Zhang, Yan-Ping Shi*. Colorimetric detection of human alpha-2-macroglobulin by janus imprinted nanoparticles constructed dual molecular imprinting immunosandwich strategy. *Analytica Chimica Acta*, **2021**, 1184: 339039.
6. Run-Tian Ma, Xiao-Bo Zhao, Xiao-Yu Sun, Jia Liu, Wei Ha, Yan-Ping Shi*. A fluorescent molecularly imprinted device for the online analysis of AFP in human serum. *Journal of Materials Chemistry B*, **2019**, 7: 6187-6194.
7. Xiao-Yu Sun, Run-Tian Ma, Juan Chen*, Yan-Ping Shi*. Synthesis of magnetic molecularly imprinted nanoparticles with multiple recognition sites for the simultaneous and selective capture of two glycoproteins. *Journal of Materials Chemistry B*, **2018**, 6: 688-696.
8. Xiao-Yu Sun, Run-Tian Ma, Juan Chen*, Yan-Ping Shi*. Magnetic boronate modified molecularly imprinted polymers on magnetite microspheres modified with porous TiO₂ (Fe₃O₄@pTiO₂@MIP) with enhanced adsorption capacity for glycoproteins and with wide operational pH range. *Microchimica Acta*, **2018**, 185: 565.
9. 国家自然科学基金(Nos. 22374160 和 22174153)资助。

I-03

分选芯片-ICP-MS 在线联用技术用于循环肿瘤细胞的测定

胡斌*

武汉大学化学与分子科学学院

通讯联系人 E-mail: binhu@whu.edu.cn

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

参考文献：

1. M.X. Nian, B.B. Chen, M. He, B. Hu, *Anal. Chem.* **2024**, 96, 766-774.
2. Y. Xu, B.B. Chen, M. He, Z.W. Cui, B. Hu, *Anal. Chem.* **2023**, 95, 14061-14067.
3. J. Cai, B.B. Chen, M. He, G.L. Yuan, B. Hu, *Anal. Chem.* **2024**, 96, 14222-14229.
4. X.L. Fu, B.B. Chen, M. He, G.L. Yuan, B. Hu, *Anal. Chem.* **2025**, 97, 6702-6710.

I-04

基于低共熔溶剂的新型样品前处理方法 在食品和环境分析中的应用研究

李祖光*

浙江工业大学化学工程学院, 浙江省 杭州 邮编: 310014

通讯联系人 E-mail: lzg@zjut.edu.cn**摘 要:**

随着分析化学面对的研究样品日益复杂, 特别是食品科学和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, 聚焦于绿色分析化学前沿领域, 制备系列不同结构的新型低共熔溶剂(包括 pH 可切换低共熔溶剂、温度可切换低共熔溶剂、CO₂ 可切换低共熔溶剂、磁性低共熔溶剂、超分子低共熔溶剂和天然低共熔溶剂等), 开展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、微波超声协同萃取等)研究, 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。

参考文献:

1. Yuan, Y.; Shen, L. Q.; Wang, Y.; Gong, B. C.; Li, Z. G.; Qiu, H. D. *Chin. Chem. Lett.* 2025, 110845.
2. Zhang, J. Y.; Li, S.; Yao, L. P.; Yi, Y. X.; Shen, L. Q.; Li, Z. G.; Qiu, H. D. *Chin. Chem. Lett.* 2023, 34, 107750.
3. Zhang, J. Y.; Li, S.; Yao, L. P.; Han, Y. L.; Chen, K. X.; Qian, M. R.; Li, Z. G.; Lin, H. *Anal. Chim. Acta* 2024, 1311, 342714.
4. Jiang, X. Y.; Huang, R. X.; Zhu, G. H.; Shen, L. Q.; Li, P. F.; Yang, X. R.; Xu, F. X.; Li, Z. G. *J. Chromatogr. A* 2025, 1760, 466279.
5. Zhang, J. Y.; Zhang, Z. H.; Yao, L. P.; Qian, M. R.; Li, Z. G.; Han, Y. L.; Bai, S. S.; Lee, M. *Food Chem.* 2023, 411, 135486.

报告人简介:

李祖光教授(博士生导师), 教育部高等学校教学指导委员会委员和浙江省高等学校教学指导委员会委员, 浙江省高校中青年学科带头人, 浙江省分析测试协会色谱质谱分析专业委员会副主任, 中国分析测试协会样品制备分会委员, 中国分析测试协会绿色技术分会委员, 杭州市钱江特聘专家, 分析化学硕士点培养负责人, 浙江大学化学系校友分会理事。1999 浙江大学博士毕业后一直任教于浙江工业大学化学工程学院, 2001 年评聘为副教授, 2006 年评聘为教授。2005 年在台湾中兴大学理学院化学系李茂荣教授(曾任台湾质谱学会理事长等)指导下进行博士后研究。2007 年在德国马普学会化学生态所 Max Planck Institute for Chemical Ecology 留学 1 年。作为项目负责人已完成了国家自然科学基金项目、浙江省自然科学基金项目、浙江省科技厅钱江人才资助项目和重大横向项目等三十几项科研项目。已在《*Food Chemistry*》、《*Environmental Science and Technology*》、《*Green Chemistry*》、《*Journal of Hazardous Materials*》、《*Chemical Engineering Journal*》、《*Chinese Chemical Letters*》、《*Analytica Chimica Acta*》、《*Journal of Chromatography A*》和《*Talanta*》等学术刊物上发表论文 260 多篇, 其中 SCI 收录 140 多篇, EI 收录 50 多篇。《*Chinese Chemical Letters*》(SCI 影响因子为 8.9)编委, 《*Journal of Analysis and Testing*》(SCI 影响因子为 7.0)青年编委, 《*Journal of Future Foods*》(SCI 影响因子 7.2)编委、《浙江农业学报》(核心期刊)编委和《*Food Chemistry International*》副主编。国家科学技术奖励评审专家、科技部国际科技合作项目同行评议专家、国家自然科学基金项目同行评议专家、教育部科研基金和科技奖励评审专家、浙江省科技厅及浙江省自然科学基金委同行评议专家等。(详见

<http://www.homepage.zjut.edu.cn/lzg/>; <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1757520>)

I-05

基于 OZgpg 的磁性二维复合物制备及其磷酸化肽分离富集应用

张 森, 练鸿振*

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

通讯联系人 E-mail: hzlian@nju.edu.cn

MXenes由于其二维的结构以及独特的性质一直受到广泛关注, 被越来越多地应用在能源、生物医药等领域^[1-2], 在分离科学中的表现也日渐受到人们的重视。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的困扰。而目前基于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报道尚不多见。

本课题组使用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Ti₃C₂T_x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。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。

我们还使用HF刻蚀法刻蚀掉Nb₂AlC MAX相中的Al层, 制备Nb₂CT_x MXene, 接着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, 在其表面和层间点缀Fe₃O₄纳米粒子以获得磁性MXene Nb₂C-Fe₃O₄, 然后在空气中灼烧, 在保留原有基本结构的同时, Nb₂C表面原位生成Nb₂O₅, 同时Fe₃O₄被氧化为γ-Fe₂O₃, 得到三明治状的磁性MXene-基金属氧化物m-Nb₂O₅-Fe₂O₃。m-Nb₂O₅-Fe₂O₃可通过Nb₂O₅和Fe₂O₃共同的MOAC作用, 实现对牛奶、人唾液、加标中药注射剂等样品中的磷酸化肽的分离富集。

参考文献:

1. N. H. Solangi, S. A. Mazari, N. M. Mubarak, R. R. Karri, N. Rajamohan, D. V. N. Vo, *Environ. Res.*, **2023**, 222, 115337.
2. N. R. Hemanth, B. Kandasubramanian, *Chem. Eng. J.*, **2020**, 392, 123678.

I-06

纳米气泡颗粒辅助溶剂浮选法构建及应用于黑麦草中黑麦草内酯的富集

高梦瑶, 胡江, 李金蕊, 魏芸*

北京化工大学化工资源有效利用全国重点实验室, 中国北京市朝阳区北三环东路 15 号邮编 100029

通讯联系人 E-mail: weiyun@mail.buct.edu.cn

黑麦草内酯是一种单萜内酯, 广泛存在于众多昆虫和植物体内, 具有抗炎、抗衰老、抗氧化和加速蛋白质降解等生物活性^[1], 可作为众多疾病的潜在候选补充疗法。此外, 有研究发现黑麦草内酯可以作为介导植物间地下相互作用的化学信号分子, 诱导化感物质的生成^[2], 并在植物化感作用中发挥重要作用, 有望推动绿色农业的发展。因此, 对黑麦草内酯开展进一步研究有着重要的实际应用价值。黑麦草是黑麦草内酯的天然来源之一, 广泛分布于全球温带地区, 在我国的长江流域以南的中高山区和云贵高原等地有大面积栽培。目前国内外有关黑麦草内酯的提取、富集及分离纯化方面的研究较少^[3], 相关工艺尚不成熟。因此, 开发并优化高效的提取和富集工艺具有重要意义。溶剂浮选法是一种吸附式气泡分离技术, 具有操作简便、传质条件温和、分离效率与富集系数高、有机溶剂消耗量低等优势。此外, 纳米气泡技术凭借良好稳定性、高比表面积和高传质效率等特点^[4], 能进一步强化溶剂浮选效果。

本研究设计并建立了一种纳米气泡颗粒辅助溶剂浮选法, 用于从黑麦草中富集黑麦草内酯。通过单因素实验探究了浮选条件(包括料液比、下相醇含量、溶液 pH 值、空气流速、浮选时间和热辅助条件)对目标物质提取效率的影响, 并采用响应曲面法进一步优化条件。在最佳条件下(料液比 1: 120, 下相正丁醇体积分数 7%, 悬浮液 pH 值为 7, 空气流速为 55 mL/min, 浮选时间 20 min, 热辅助条件为 35 °C), 黑麦草内酯产率达 12.32 ± 0.61 mg/kg。所建立的纳米气泡颗粒辅助溶剂浮选方法是一种新型、高效的绿色生物分离技术, 同时为分离和富集其他活性成分提供了新的思路和方法。

关键词: 化感作用, 黑麦草内酯, 溶剂浮选, 纳米气泡

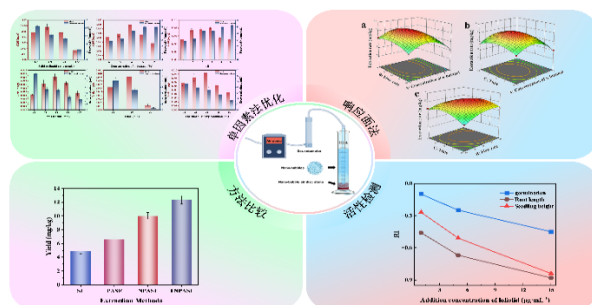


图 1 纳米气泡颗粒辅助溶剂浮选法装置示意图及浮选黑麦草内酯

参考文献:

- [1] Lee Y L, Lee J Y, Park J W, Lee J, Lee H H, Lee D H. **2024**, 34(12): 2675-2862.
- [2] Li F L, Chen X, Luo H M, Meiners S J, Kong C H. *J. Exp. Bot.*, **2023**, 74(3): 964-975.
- [3] Chi H, Qi X, Wang X, Wang Y, Han X, Wang J, Wang H. *Anal. Methods*, **2021**, 13(16): 1939-1944.
- [4] Qin Y, Chen Y, Bao D, Zhou H, Tang X, Zhu Z. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2025**, 64(37): 17981-18001.

I-07

中空共价有机骨架用于气相色谱分离卤代异构体

饶梓睿, 冉旭芹, 李志泉, 钱海龙*

江南大学

E-mail: hlqian@jiangnan.edu.cn

共价有机框架(COF)材料因其可调控的孔结构、高比表面积和卓越稳定性,近年来被广泛应用于色谱分离领域,并展现出作为高性能固定相材料的潜力。目前 COF 色谱固定相研究主要集中于热力学调控,以提高其选择性。然而,色谱分离是受热力学因素和动力学因素共同调控的过程,单纯的热力学调控仍存在局限性。鉴于此,本研究拟从精确设计 COF 的孔道尺寸、官能团及微观形貌入手,探索其对固定相热力学和动力学行为的综合调控机制。通过合成具有单晶结构的三维 COF、具有多级孔结构的 COF 以及含氟中空结构的 COF 材料,系统分析其微观结构特征对色谱分离中的选择性、柱效及分离度等性能指标的影响规律,旨在揭示 COF 结构与热力学吸附能及动力学传质速率之间的内在关系,为开发新型高效色谱固定相奠定理论依据与材料基础。

参考文献:

1. A. P. Cote, A. I. Benin, N. W. Ockwig, M. O'Keeffe, A. J. Matzger, O. M. Yaghi, *Science* **2005**, 310, 1166-1170.
2. Z.-H. Wang, C. Yang, T. Liu, H.-L. Qian, X.-P. Yan, *Anal. Chem.* **2023**, 95, 8145-8149
3. H.-L. Qian, C.-X. Yang, X.-P. Yan, *Nat. Commun.* **2016**, 7, 12104.
4. Z.-R. Rao, X.-Q. Ran, Z.-Q. Li, Y. Chen, X.-P. Yan, H.-L. Qian, *Nat. Commun.* **2026**, <https://doi.org/10.1038/s41467-026-70311-8>.

I-08

水产品质量安全色谱质谱检测样品前处理方法研究

报告作者: 李晋成, 其他作者, 张鑫源^{1,2,3}, 代津津^{1,2,4}, 杨益豪^{1,2,3}, 张荣月⁴, 乔娟⁴, 李晋成^{1,2*}

1. 中国水产科学研究院, 北京 100141; 2. 农业农村部水产品质量安全控制重点实验室, 北京 100141; 3. 上海海洋大学, 水产与生命学院, 上海 201306; 4. 北京石油化工学院, 北京 102617

通讯联系人 E-mail: lijc@cafs.ac.cn

摘要正文: 水产品质量安全一直是国内外关注的焦点, 传统色谱质谱检测技术存在前处理操作复杂、费时费力、效率不高等问题, 成为发展水产品中典型危害因子色谱质谱检测技术的主要瓶颈。针对这一问题, 重点开展绿色样品前处理填料研制, 攻克传统净化填料环境污染的行业痛点。1) 研制壳聚糖固定化碳纳米管(MWCNTs@chitosan)复合材料, 依托一步式加压过滤型净化法, 实现水产品中49种农药的可循环净化, 回收率稳定在 71.2%-119.4%; 2) 攻关硼酸亲和靶向富集技术, 突破痕量硝基呋喃类代谢物检测瓶颈, 样品前处理效率较现有国标方法提升 50%。创新设计表面富含顺式二羟基的介孔GMA-EGDMA 聚合物微球, 通过4-氟-3-甲酰苯基硼酸(FFBA)衍生探针实现硝基呋喃类代谢物特异性识别; 结合 HPLC-QTRAP-MS/MS技术, 建立4种硝基呋喃代谢物残留分析方法, 定量限低至 0.5 $\mu\text{g/kg}$, 加标回收率达 103.1%-112.6%, 较国家标准方法(GB31656.13-2021)缩短前处理时间 50%, 为水产品中痕量危害因子色谱质谱精准检测提供新技术方案。

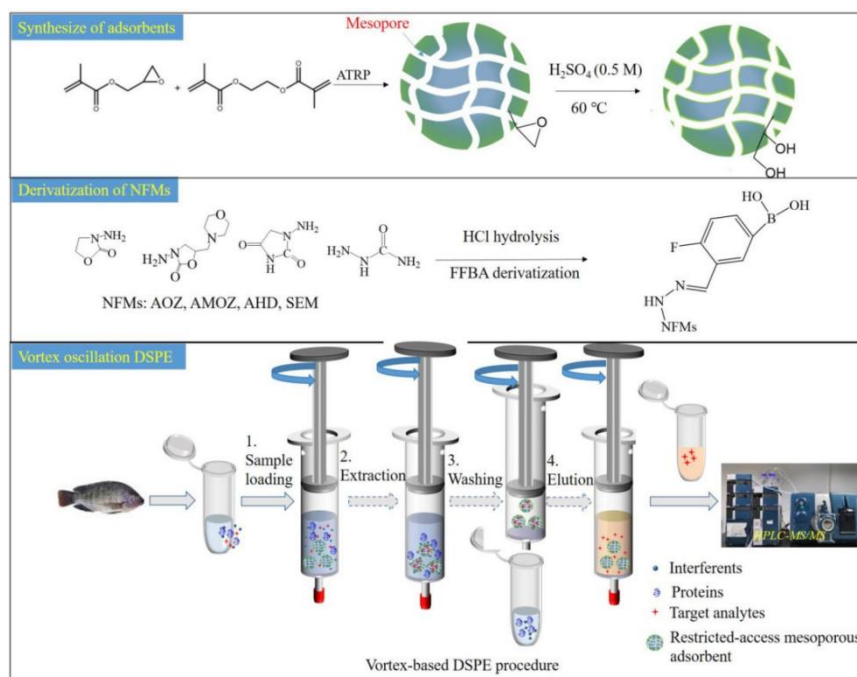


图 1. 基于硼酸亲和和萃取的复合净化填料制备及硝基呋喃类代谢物色谱质谱分析流程^[1]

参考文献:

1. W. D. Huo, J. C. Li*, Y. P. Wen, X. Y. Zhang, H. Liu, Y. C. Mu, C. H. Zhao, C. Y. Zhang, R. Y. Zhang*, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 492, 138258.
2. R. D. Zhou[#], X. Y. Zhang[#], Y. P. Wen, W. D. Huo, Y. C. Mu, H. Liu, C. Y. Zhang, J. C. Li*, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 496, 139295.
3. Y. P. Wen, W. D. Huo, X. Y. Zhang, Y. C. Mu, H. Liu, C. Y. Zhang, L. Qiao, J. C. Li*, *Food Chem.*, **2025**, 481, 143963.
4. R. D. Zhou, Y. P. Wen, W. D. Huo, C. Kong, G. Y. Yang, H. Liu, C. Y. Zhang, Y. C. Mu, D. M. Huang, J. C. Li*, *Food Chem.*, **2025**, 462, 140860.

I-09

生命色谱分析科学体系的构建及其在高原病方药 效应成分筛选范式

郑晓晖^{1,*}, 李谷丰¹, 赵晔¹, 贺怀贞², 王程², 乌仁塔娜³, 贾璞¹

¹ 西北大学, 西安, 710069

² 西安交通大学, 西安, 710069

³ 青海大学, 西宁, 810000

通讯联系人 E-mail: zhengxh318@nwu.edu.cn

针对药物-生命复杂巨系统构建无歧视、高通量、高灵敏、高精度、通用型分离分析方法, 发现高成药性核心效应物质, 是生命科学对分析化学提出的任务与挑战。作者基于药物-生命相互作用的动态性、因果效应性和稳态趋向性, 提出“生命色谱”(The Life Chromatography, Life-C)概念, 构建“生命色谱分析科学体系”(The Life Chromatography Analysis Scientific System, TLCAS)。该体系将色谱技术与生命动态过程相结合, 尝试在体内外结合构建模拟可表征药物在体内趋向性(归经-脏腑-细胞-细胞膜-细胞器-受体)的色谱体系, 遵循“在归经入脏腑、靶向细胞层面筛选, 于细胞器、受体层面确证”思路, 精确精准精良实现药物-生命复杂巨系统中处于时刻变化的分子化、数字化及信息化表征。以低压低氧环境诱发的高原病为研究对象, 基于 TLCAS 开展高原病方药效应成分的筛选辨识与机制研究, 获得具有抗急性高原病及抗纤维化潜力的新药候选化合物 IDHP, 并揭示其活血化瘀和缓解低压缺氧损伤等核心机制; 对防治高原红细胞增多症的中药复方 MK 81.3 进行系统筛选, 并利用 TLCAS 技术从其保留组分中发现显著改善红细胞增多及相关并发症的功效成分“X”, 为该复方药效物质基础的阐明提供科学依据。以高原病方药研究为应用范例, 验证了 TLCAS 在效应物质筛选与机制阐释中的系统性与精准性, 构建了传统医学理论与现代分析科学相融合的解释框架, 并为中式创新药物研发提供了可推广的技术支撑与研究路径。

关键词: 生命色谱; 活谱动峰; 高原病; 效应成分筛选; 中式创新药物

参考文献:

- [1] 贾璞, 边阳阳, 白亚军, 等. 色谱在药物 - 机体复杂巨系统研究中的应用进展. *色谱*, 2021, 39(09): 950-957.
- [2] Bai Y.J., Jia P., Zhao Ye et al. Discovery and therapeutic implications of bioactive dihydroxylated phenolic acids in patients with severe heart disease and conditions associated with inflammation and hypoxia[J]. *Pharmacol Res*, 2022, 185: 106458.

I-10

外泌体分离分析与临床应用研究

刘笔锋*

(华中科技大学生命科学与技术学院, 武汉, 430074)

通讯联系人 E-mail: bfliu@mail.hust.edu.cn

外泌体是细胞分泌到胞外基质中纳米尺度的小囊泡, 负责细胞间通讯。外泌体携带核酸、蛋白质和代谢物等大量疾病标志物, 是液体活检的三大目标之一。从细胞基质或体液如血液、尿液等复杂样本中分离纯化并分析外泌体是当前外泌体研究的一大挑战, 也是临床检验发展的前瞻性方向。本文主要探讨了基于微流控芯片的外泌体分离分析新方法, 结合人工智能技术, 实现肿瘤等重大疾病的临床诊疗应用。

参考文献:

1. H. Xie, *et al.*, *Small*, **2025**, 21: e2408871.
2. H. Xie, *et al.*, *ACS Nano*, **2025**, 19: 8162-8175.
3. X. Zhao, *et al.*, *ACS Nano*, **2025**, 19: 8948-8965.
4. X. Zhu, *et al.*, *Nano Lett.*, **2025**, 25: 14293-14303.

I-11

毛细管电动分离与生物医药分析应用

陈子林*

武汉纺织大学

E-mail: chenzl@whu.edu.cn

本报告将介绍本课题组在毛细管电泳及电色谱及其与质谱联用技术在生物医药分析中应用研究进展。内容包括：毛细管电动分离在药物筛选中应用、毛细管电色谱在手性药物分离分析中应用以及毛细管电泳/电色谱与质谱联用技术及其在生物医药分析中应用等。

参考文献:

1. W. Li[#], B. Zhang[#], Z. Chen*, Talanta, 2021, 232:122444.
2. Z. Li, Z. Mao, W. Zhou, Z. Chen*, Talanta, 2020, 218: 121160.
3. Y. Liu, W. Zhou, Z. Mao, Z. Chen*, Journal of Chromatography A, 2019, 1602: 474-480.

I-12

基于超临界流体的在线萃取-色谱分离单细胞脂质组分析

杨金磊^{1,2}, 赵泊雅², 张四纯^{1,*}, 张新荣¹清华大学, 北京市, 邮编 100084

*E-mail: sczhang@mail.tsinghua.edu.cn

关键词: 单细胞分析, 脂质组学, 超临界流体萃取, 微色谱, 质谱分析

单细胞脂质组学旨在揭示细胞异质性在生命活动中的关键作用, 但对单个细胞内复杂脂质分子进行高覆盖度、高通量的组学分析仍是当前面临的巨大挑战。传统方法通常采用离线样品前处理, 存在单细胞样品过度稀释且通量低、易造成样品损失和引入污染等问题, 难以满足单细胞脂质组学研究的要求。

我们提出将超临界流体在线裂解萃取细胞与色谱分离在线耦合, 用于高通量、高覆盖度的单细胞脂质组分析¹。该方法利用超临界二氧化碳流体卓越的溶解能力, 在温和条件下实现对单个细胞的在线裂解及脂质成分的提取。被萃取的脂质被直接转移至微升级的色谱系统中进行在线分离, 最后通过高分辨率质谱进行检测与鉴定。该平台的优势主要体现在:

1) 高效率与最小化样品损失: 超临界流体萃取步骤与后续分离检测在线连接, 避免了繁琐的离线操作和对单细胞样品的过度稀释, 避免了样品损失和交叉污染, 这对于含量极低的单细胞样品组学分析至关重要。

2) 高灵敏度与高覆盖率: 微色谱系统与质谱检测器的兼容性极佳, 结合 scCO_2 的低粘度和高扩散系数带来的高分离效率, 实现了对单个细胞中 276 种脂质类别 (磷脂、鞘脂、甘油三酯等) 的高灵敏度检测和广谱覆盖。

3) 保持细胞原有信息: 快速温和的萃取过程有助于更好地保留脂质的原始分子形态, 为真实反映单个细胞的代谢状态提供了可能。

我们将利用该平台对卵母细胞进行分析, 以验证方法的可靠性与实用性。结果表明, 本方法能够清晰区分不同细胞类型的脂质谱差异, 并在同类型细胞中识别出具有独特脂质组成的卵母细胞发育阶段。与传统方法约 2 h 相比, 该方法将样品预处理和色谱分离时间显著缩短至每个样品仅 15 min。脂质组学差异阐明了卵母细胞成熟过程中磷脂向鞘磷脂和甘油酯的明显代谢重塑。针对体积相对较小、数量较大的哺乳动物体细胞, 我们还设计了一种全自动选取单细胞并在线裂解提取脂质的装置, 可以实现全自动的高通量单细胞脂质组分析。

综上所述, 本研究建立的基于超临界流体的单细胞在线萃取-色谱分离技术, 为单细胞脂质组学研究提供了一种强有力的工具, 有望在细胞分化、疾病机制及药物响应等前沿领域产生重要影响。

参考文献:

1. J Yang, T Liao, et al. On-Valve $\mu\text{SFE-SFC-MS}$ Enables Fast Analysis of Single Oocyte Lipidome. *Anal. Chem.*, 2025, 97,

34, 18726–18734..

国家自然科学基金(22227803)资助

I-13

毛细管电泳富集技术研究

陈兴国*, 陈永雷, 张会鸽, 吕文娟, 陈宏丽

兰州大学化学化工学院

通讯联系人 E-mail: chenxg@lzu.edu.cn

毛细管电泳是分离科学领域中一种重要的分离分析技术, 具有样品需求量极少(纳升级)、高效、快速、运行成本低等特点, 在各个领域中得到了广泛应用。近年来随着生命分析化学、生物学、现代医药科学和精准医疗等领域的迅速发展, 对复杂样品特别是药物样品中痕量、超痕量待分析物的分离和检测的需求更加迫切。然而毛细管电泳的浓度灵敏度较低已成为其在药物分析中亟待解决的瓶颈问题之一。为解决这一问题, 我们持续围绕提高毛细管电泳的检测灵敏度进行了深入研究。本报告将介绍我们在这一领域取得的代表性成果^[1-5]。

I-14

刺激响应聚合物涂层的构建及毛细管电色谱分离分析研究

齐莉*

中国科学院化学研究所, 活体分析化学国家重点实验室, 中关村北一街2号, 北京, 100190

*E-mail: qili@iccas.ac.cn

基于聚合物涂层的开管毛细管电色谱技术(OT-CEC)的研究具有重要的意义和广泛的实用价值。OT-CEC 兼具高效液相色谱的高选择性和毛细管电泳的高分离效率的优点, 已被广泛应用于药物及其它化合物的分离分析研究中。与填充柱或整体柱毛细管相比, 开管涂层毛细管柱是在毛细管内壁涂覆或键合上具有一定厚度的均聚物, 该固定相能更有效地增加开管柱的柱容量和相对比表面积。不过, 从开管均聚物涂层固定相的重复使用性及其分离效率角度考虑, OT-CEC 依然有极大的提升空间。刺激-响应嵌段聚合物是一类能感知外部环境刺激(如温度、pH 值、光、压力、溶剂、电场等)并改变自身物理化学性质的智能大分子, 其分子结构可发生可逆或不可逆转变, 表现为发光、变色、形变等宏观响应行为。刺激-响应嵌段聚合物还具有功能基团多及结构可调控等优点, 是极佳的开管涂层固定相材料。但迄今为止, 如何通过调控毛细管开管柱的刺激-响应嵌段聚合物涂层厚度、涂层种类及涂覆过程来改善涂层固定相的稳定性并进而提升其分离效率依然是 OT-CEC 研究面临的巨大挑战。

我们通过设计并采用活性/可控自由基聚合技术, 可逆加成-断裂链转移聚合法(RAFT), 合成了系列刺激-响应嵌段聚合物, 并构建了多种 OT-CEC 新体系, 进一步开展了数十种药物、手性化合物及中性化合物的分离分析研究^[1-5]。发现: 随着环境条件(如: 光照、pH 值、温度、溶剂...等)的改变, 嵌段聚合物链的形貌会从伸展状态转变为卷曲状态; 固定相涂层的涂覆类型、刺激响应嵌段聚合物的种类、结构及其亲疏水性在化合物的分离过程中起着关键作用。结果表明: (i) 刺激-响应嵌段聚合物可作为一类良好的新型固定相涂层应用于 OT-CEC 分析中; (ii) 通过改变环境条件可调控嵌段聚合物链的亲疏水性, 所构建的 OT-CEC 体系展示出了实现化合物良好分离的普适性; (iii) 通过采用多层共价键合或光引发原位聚合方式所构建的开管固定相涂层可改善柱管的重复使用性; (iv) 通过改变嵌段聚合物的单体种类、单体嵌段比及聚合物的分子量, 可显著提升化合物的 OT-CEC 分离效率。我们的系列研究工作所展示的 OT-CEC 优越分离特性不仅促进了刺激-响应嵌段聚合物的研发, 也推动了药物及手性化合物的 CE 分析技术的发展, 并为开展面向活体的分析化学研究奠定了良好基础。

关键词: 开管毛细管电色谱; 刺激-响应嵌段聚合物; 聚合物涂层; 分离效率改善

致谢资助: NSFC (22274159, 21874138)

参考文献

1. N. Ali, F. Wang*, L. Qi*, Recent advances in open tubular capillary electrochromatography for enantioseparation of chiral drugs and D,L-amino acids, *TrAC-Trend. Anal. Chem.*, 2026, 194, 118525.
2. N. Ali, Y. Liu, F. Wang*, L. Qi*, Chiral ligand-exchange capillary electrochromatography with thermo-responsive poly(*N,N*-dimethylacrylamide) as coating for efficient separation of D,L-amino acids, *Talanta*, 2025, 293, 128090.
3. N. Ali, Y. Liu, F. Wang*, L. Qi*, *In-situ* growth of dual responsive polymer as coating for open tubular capillary electrochromatographic separation of epimedin, *Anal. Bioanal. Chem.*, 2024, 416, 4571-4580.
4. N. Ali, J. Qiao, L. Qi*, Preparation of pH-responsive block copolymers for separation of cephalosporin antibiotics by open-tubular capillary electrochromatography, *J. Chromatogr. A*, 2023, 1694, 463926.

5. **L. Qi***, J. Qiao, Advances in stimuli-responsive polymeric coatings for open-tubular capillary electrochromatography, *J. Chromatogr. A*, 2022, 1670, 462957.

I-16

基于毛细管电泳的多尺度靶标核酸适配体筛选新进展

屈锋

北京理工大学生命学院, 100081

*E-mail: qufengqu@bit.edu.cn

关键词: 毛细管电泳, 核酸适配体, 高效筛选, 多尺度靶标

毛细管电泳是现代微量分析技术, 其分辨率高, 分析速度快, 分析模式多, 分析物广, 样品和试剂消耗少。核酸适配体是新型化学抗体, 在生物、医学、食品、环境领域有很好的应用前景, 核酸适配体筛选是其广泛应用的瓶颈之一。毛细管电泳在核酸适配体筛选中具有特殊优势, 是现有筛选方法中最高效的方法。针对不同尺度的靶标可建立多种筛选模式, 进一步提高筛选效率。课题组从事毛细管电泳高效筛选核酸适配体方法学研究十八年, 在筛选策略和筛选方法上取得重要进展, 并有实际样品的筛选应用。

建立了针对蛋白质靶标筛选的定性评价方法和策略, 设计了竞争筛选, 在线反应同步竞争筛选模式, 可用于蛋白质和小分子多肽靶标的高效筛选。建立了体液基质血清、唾液、房水中多种靶蛋白的核酸适配体筛选方法。建立了血清基质中外泌体靶标的高效筛选方法, 以及针对耐甲氧西林金黄色葡萄球菌靶标, 呼吸道合胞病毒靶标的适配体筛选方法。

I-17

基于生物流体代谢物质谱的相关疾病早筛早诊

聂宗秀*

海南大学

E-mail: znjie@hainanu.edu.cn

肿瘤困扰着千千万万的患者和家庭，为提高肿瘤的生存率，早筛早诊已成为公认的最佳方法，然而早期病变的症状非常隐匿，很难在更易治疗的阶段对肿瘤进行筛查和早诊，因此研究和开发低成本、快速和非侵入型的早诊方法迫在眉睫。生物流体（血液、呼出气体、尿液、脑脊液等）包含的代谢物分子信息能够实时反映机体健康状况，通过检测其中代谢小分子生物标志物的含量变化并解析相关代谢途径，有望预测肿瘤早期发生。质谱已成为蛋白质组学、代谢组学、脂质组学等新兴“组学”研究的利器，然而传统的质谱方法需要对复杂样品进行严格的预处理和分离富集，阻碍了其在临床研究中的应用。

近年来，课题组开发了用于分析呼出气体中醛类分子的即时检测试纸，研究发现肺癌患者的呼出气体中醛类标志物的含量显著增加；开发了一款解吸分离电离质谱（DSI-MS）平台和多官能团差异化衍生策略，用于含有酸、醛、酮等官能团的小分子化合物的结构鉴定，研究了膀胱癌患者和健康对照者尿液样品的代谢轮廓；并结合机器学习模型，利用基质辅助激光解吸电离质谱（MALDI-MS）高通量获取尿液的代谢指纹图谱，实现了对泌尿生殖系统癌患者的识别和相关代谢通路研究；最后，通过高效提取尿液及血清样本代谢指纹图谱，实现了膀胱癌和良性泌尿系统疾病的快速诊断及肝癌临床筛查。

针对样本前处理简便、分析速度快、灵敏度高的大规模疾病筛查需求，课题组开发了用于分析患者呼吸气、尿液和血清样本中代谢物分子差异的质谱新方法，具有应用于临床中相关疾病早筛早诊的潜力。

参考文献：(5号宋体或 Times New Roman，单倍行距)

1. Z.Z. Li, C. Sun, K. Jia, X. Wang, J. Han, J.Y. Chen, J.Y. Wang, H.H. Liu*, and **Z.X. Nie***, *Anal. Chem.*, **2023**, doi.org/10.1021/acs.analchem.3c02015.
2. L.Y. He, X. Wang, J.Y. Chen, Y.Z. Li, L.P. Wang*, C.Q. Xiong, and **Z.X. Nie***, *Anal. Chem.* 2022, **94**, 10367-10374.
3. Y. Z. Li, L.X. Jiang, Z.P. Wang, Y.R. Wang, X.H. Cao, L.W. Meng, J.H. Fan, C.Q. Xiong*, and **Z.X. Nie**, *Anal. Chem.* 2022, **94**, 9894-9902.
4. J.Y. Chen, Y.Z. Li, Y.M. Jiang, L.C. Mao, M. Lai, L.X. Jiang*, H.H. Liu*, and **Z.X. Nie***, *Adv. Funct. Mater.*, 2021, **31**, 2106743.
5. Y.Z. Li, J.Y. Chen, L.W. Meng, L.Y. He, H.H. Liu, C.Q. Xiong, and **Z.X. Nie***, *Anal. Chem.* 2021, **93**, 13326-13333.

I-19

胍基有机小分子基质在羰基类分子检测和成像中的应用

国新华*, 李梦娟, 冯弘章, 孙雨桐

吉林大学化学学院

guoxh@jlu.edu.cn

基质辅助激光解吸离子化质谱 (MALDI MS) 已经被广泛应用于生物分子检测和成像分析, 并展示其独特的检测灵敏度和检测通量优势。然而, 一些带有负电荷的化合物, 如: 糖分子、磷酸化化合物及核酸等分子离子化效率低, MALDI 质谱分析存在挑战。基质在 MALDI 质谱分析中发挥着重要的作用, 其中反应性基质不仅能够选择性地改善待测物的离子化效率, 而且能够将小分子待测物移到高质量区, 避免基质离子的干扰。¹ 我们前期的研究显示, 含有胍基的反应性基质 2-胍基噻吩能够通过胍基快速与糖分子中的醛基反应, 通过在线衍生极大提高糖分子的离子化效率, 使糖分子的检测灵敏度提高一个数量级以上。² 最近, 我们的研究显示: 2-胍基噻吩基质与常规 CHCA 基质混合可以有效改善代谢物成像分析的重现性。用于脊髓损伤中氧化应激引起脂质的氧化导致羰基化合物的形成及代谢物变化检测, 成功同时检测到脂质和羰基化合物在脊髓切片中的变化。我们通过紫外吸收光分析、MALDI 实验评价和理论计算研究了一系列化合物, 发现 2-胍基噻吩与糖形成的复合物能够提供丰富的碎片信息, 可以实现单糖、多糖高灵敏定量检测及糖的结构分析; 而 2-胍基噻吩同样具有优良的反应性基质性能, 成功用于癌症病人和健康人中 N 糖的分析和癌症早期筛查诊断。

参考文献:

1. R. Wu, R. Liu, H. Hu, L. Qin, L. Chen, Z. Bao, J. Fu, H. Guo, L. Wang, A. Wang, Z. Wang, C. Yang, X. Cheng, D. Chen, H. Liu, Y. Jing, S. Guo, Y. Fu, X. Wang. *Chem. Rev.* 2026, 126, 3324–3528
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5c00786>
2. X. Lin, C. Xiao, L. Ling, L. Guo, X. Guo *Talanta* 235 (2021) 122792

I-20

异构体分辨的精准质谱分析

陈素明^{1,*}¹ 武汉大学高等研究院, 湖北 武汉, 430072

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

同分异构是复杂分子的特殊属性, 异构体可泛指质量相同而结构相异的分子形式。既包括代谢小分子的双键位置异构、立体构型异构, 也包括多肽的序列异构、修饰位点异构、交联连接异构, 化学反应体系中更存在大量亚稳态、短寿命的异构中间体。同分异构体赋予了生命和化学系统的分子结构多样性, 这些异构体尽管结构差别微小, 却会带来功能的巨大差异。实现异构体水平的精准分析, 是深入理解分子结构与功能关系的基石。然而, 异构体理化性质相近、一级质量相同、特征碎片类似, 亚稳态异构体难以捕获, 使得传统质谱技术在这一层面存在巨大挑战, 导致我们对异构体结构与功能关系的认知严重滞后。如何赋予质谱分析异构体分辨能力, 已成为化学测量学领域亟待突破的核心难题。

我们围绕“异构体分辨的精准质谱分析”这一科学问题, 开展了系统深入的研究工作。以构建异构体特异性信息维度为核心理念, 发展了一系列异构体质谱分析新原理与新方法, 并将其应用于复杂体系的精准测量, 取得多项重要科学发现。针对该难题的破解, 我们采用多策略并行的策略: (1) 建立基于化学增强的特异信息构建方法, 发展异构体特异性化学反应体系, 破解双键异构体的质谱定性难题, 为复杂脂质完整结构解析提供关键技术支撑; (2) 建立基于智能预测的多维信息生成方法, 构建异构体多维信息预测模型, 突破异构体分析标准品依赖瓶颈, 实现代谢物与修饰肽异构体水平大规模精准鉴定; (3) 建立基于原位质谱的动态信息获取方法, 发展质谱分辨结合寿命测量模式, 解决异构中间体实时区分难题, 为反应中间过程深入研究提供关键技术手段。

关键词: 质谱分析; 异构体; 构效关系; 智能预测; 原位质谱

参考文献

- [1] Gao, M.; Wan, Q.; Zhou, S.; Wu, P.; Nie, W.; Chen, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 43699-43706.
- [2] Wei, S.; Wan, Q.; Zhou, S.; Nie, W.; Chen, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 32777-32784.
- [3] Sun, J.; Luo, J.; Gao, M.; Wang, F.; Nie, W.; Chen, M.; Chen, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202507483.
- [4] Wan, Q.; Chen, K.; Dong, X.; Ruan, X.; Yi, H.; Chen, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202306460.
- [5] Chen, M.; Hao, Y.; Huang, X.; Wu, P.; Sun, J.; Zhang, B.; Chen, S. *Nat. Commun.* **2026**, *17*, 2554.
- [6] Feng, G.; Gao, M.; Wang, L.; Chen, J.; Hou, M.; Wan, Q.; Lin, Y.; Xu, G.; Qi, X.; Chen, S. *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 2652.
- [7] Nie, W.; Wan, Q.; Sun, J.; Chen, M.; Gao, M.; Chen, S. *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 6671.
- [8] Shen, L.; Zhang, Z.; ...Xiong, N.; Chen, S. et al. *Sci. Adv.* **2024**, *10*, eadk1721.

I-21

质子化位点异构体的离子淌度质谱分析

潘远江*, 郭语涵, 冯鸿儒

浙江大学化学系 杭州 310058

通讯联系人 E-mail: panyuanjiang@zju.edu.cn

质子化是化学反应中最基本的反应之一,也是许多合成和催化过程中的基本步骤。确定质子化位点至关重要,因其会改变杂化状态并引入正电荷,从而导致显著的结构变化。对氨基苯甲酸是研究质子位点转换的基准分子,众多研究团队通过理论与实验手段对其结构及质子化位点进行了深入探究。对氨基苯甲酸存在两种低能质子化异构体,分别是氧质子化异构体和氮质子化异构体,分别由羧基和氨基基团形成。其相对稳定性随溶剂类型而变化,氧质子化异构体在气相中更稳定,而氮质子化异构体因具有较大的溶剂化能,在极性溶剂中稳定性更高。为了扩大质子化后的构象差异,本研究选择 4-二甲基氨基肉桂酸作为研究对象,通过离子淌度串联质谱的方法,分别得到了 4-二甲基氨基肉桂酸的氧质子化异构体和氮质子化异构体的淌度峰,通过进行迁移率后的串联质谱(MS/MS)分析,并观察各异构体的独立碎片得到裂解路径,对各淌度峰进行归属。能量分辨碰撞诱导解离和碎片离子的高分辨率质谱分析显示,主要迁移峰碎片化路径产生 m/z 177 和 160 的特征碎片,可以确定为氮质子化迁移峰,这与理论计算建模研究结果一致,而对次级迁移峰采用类似方法时,则显示出 m/z 174 和 147 的特征碎片。本研究同时对溶剂极性的进行研究,通过改变溶剂极性得到的淌度峰强度的变化与之前的研究结果保持一致,后续研究对类似物及多肽进行类似分析,证明了该分析方法的可行性,对于手性物质和多肽蛋白的研究提供了新思路。

关键词: 质子化位点异构体, 离子淌度, 质谱分析

参考文献: (5 号宋体或 Times New Roman, 单倍行距)

1. X. Xan, ,,,, X. Wang, *Biomed. Chromatogr.*, **2018**, 1, 1-10.
2.
3.

I-22

蛋白质原位化学标记结构质谱分析新方法

刘哲益, 王方军*

化学动力学全国重点实验室, 中国科学院大连化学物理研究所, 大连, 116023

通讯联系人 E-mail: wangfj@dicp.ac.cn

解析蛋白质及其复合物动态结构和界面相互作用分子机制是理解其生物学功能和相关疾病过程干预的关键。我们发展了适用于生物兼容水溶液蛋白质样品的193 nm脉冲激光10 ns快速光化学氧化(PPOP)、高特异赖氨酸反应性分析(LRP)、非限制性尺寸选择酶切(SVP)等新装置和新方法, 不受样品纯度和蛋白尺寸限制, 实现了700 kDa蛋白质复合物组成及结构变化的位点分辨精细表征, 避免了常规氢氘交换质谱法中回交对分析精度的影响, 为微克级样品蛋白-蛋白、蛋白-药物、蛋白-材料识别和调控分子机制解析提供了新策略; 通过整合赖氨酸反应性分析质谱(LRP-MS)和非变性质谱(nMS)的结构质谱策略, 发现了小分子抑制剂SR-4835诱导细胞周期蛋白依赖性激酶12/13-细胞周期蛋白K复合物(CDK12/CDK13-Cyclin K)变构激活解离的抑制新机制, 为CDK12/CDK13小分子抑制剂的理性设计和相关药物研发开拓了新思路。进一步提出了赖氨酸的反应性变化是探测蛋白质-微/纳米材料复合体中蛋白质定位方向、相互作用序列区域、关键结合位点以及材料结合引起蛋白质结构变化的有效指标; 发展了在蛋白质-微/纳米材料复合体活性和变性条件下的两步同位素二甲基化标记的标准化策略, 结合质谱定量分析实现蛋白质上赖氨酸反应性的全面分析, 通过材料结合前后赖氨酸标记反应性的显著性差异确定蛋白质-材料的界面序列区域和关键位点。解析了病毒突刺蛋白S1和人体ACE2受体之间的相互分子机制, 提出利用S1蛋白质RBD Lys386-Lys462的标记反应性调控水平评估小分子活性物质对S1-ACE2识别的干预程度; 阐明了电化学氧化灭活新冠病毒, 引起S1 RBD区域降解的分子机制; 解析了铜钼磷硫二维纳米材料(CIPS)结合新冠病毒S1蛋白并中和病毒的分子机制等。此外, 结合赖氨酸反应性质谱分析得到的局部位点结构信息, 可显著提升蛋白质AI结构预测的准确度及蛋白-蛋白相互作用界面结构表征精度, 并为无序蛋白质共存构象的结构差异分析提供了创新性方法。

参考文献:

1. Z. Y. Liu, S. R. Yang, L. Q. Zhou, M. He, Y. Bai, S. Zhao, F. J. Wang, *Nature Protocols*, 2023, 18, 2600-2623.
2. Y. Bai, Z. Y. Liu, Y. Q. Li, H. Zhao, C. Lai, S. Zhao, K. X. Chen, C. Luo, X. M. Yang, F. J. Wang, *Journal of the American Chemical Society*, 2023, 145, 11477-11481.
3. L. Q. Zhou, Z. Y. Liu, Y. J. Guo, S. W. Liu, H. Zhao, S. Zhao, C. L. Xiao, S. Feng, X. M. Yang, F. J. Wang, *Journal of the American Chemical Society*, 2023, 145, 1285-1291.
4. Z. Y. Liu, X. Chen, S. R. Yang, R. J. Tian, F. J. Wang, *Current Opinion in Chemical Biology*, 2023, 74, 102305.

I-23

超快质谱成像技术-显微质谱成像

杭纬

厦门大学化学化工学院

通讯联系人 E-mail: weihang@xmu.edu.cn

能够在纳米级分辨率下实现无标记、非定向的生化质谱成像 (MSI) 技术, 是化学、物理和生命科学等多学科领域迫切需求的突破能力。虽然质谱成像可呈现组织细胞中大量分子的空间分布, 但如何平衡空间分辨率、检测灵敏度与通量始终是重大技术挑战。本研究报道了一种飞秒激光解吸-激光后电离质谱显微镜 (fs-LDPI-MSM) 的超快分子成像技术。区别于目前广泛采用的微探针扫描模式, 该显微镜系统无需耗时进行逐像素检测, 仅需数秒即可完成单个样本中所有可检测物质的成像。该平台实现了约 700 纳米的空间分辨率、1.5 皮米的烧蚀深度和 60 阿摩尔级的检测限。通过结合激光后电离增强效应与等离激元纳米颗粒, 我们成功可视化小鼠与蜜蜂大脑中多种脂质的空间定位, 并捕捉到单个细胞内靶向药物与微环境紊乱相关内源性化合物的纳米级分布图谱。这些研究成果确立了 fs-LDPI-MSM 系统作为革命性超快分子成像工具的价值, 将为细胞生物学和生物医学领域的高通量单细胞质谱成像带来范式变革。

参考文献:

1. Yixin Leng, Yuyang Zhu, Quanfeng Xu, Yingying Chen, Yizhu Xu, Tongtong Wang, Siyuan Ma, Zhibin Yin, Zhouyi Xu, Wei Hang, Ultrafast Mass Spectrometry Imaging via Laser-Based Mass Spectrometry Microscopy, J. Am. Chem. Soc., 2026 148, 1561-1569

I-24

基于常压质谱的肿瘤治疗监测研究

那娜^{1*}, 欧阳津²¹ 北京师范大学, 北京市新街口外大街 19 号, 100875² 北京师范大学珠海校区, 文理学院化学系, 珠海, 519087通讯联系人 E-mail: nana@bnu.edu.cn

纳米催化技术的飞速发展给肿瘤高效精准治疗策略的建立和发展提供了新契机^[1,2], 但其发展离不开对该类治疗策略的全面评价、监测及机理研究。而肿瘤治疗过程涉及诊疗药物、生物分子以及催化活性中心等多种物质在复杂生物体中的变化, 并且各个物质之间的相互作用及转化也给研究带来更多挑战, 这也对监测手段提出了更高要求。常压质谱具有无需样品预处理、直接快速获取分子信息的优势, 可以快速实现对生物样品中多种物质的实时、连续、在线分析, 在结构解析以及机理探究方面有独特优势^[3]。基于此, 我们在新型纳米催化治疗体系构建的基础上^[4], 设计了常压质谱装置, 对治疗过程中生物相关重要分子、中间体及催化金属活性中心进行监测及研究。在实现对生物体内重要分子及活性物种直接检测的基础上, 我们对纳米催化治疗过程进行监测, 发现GSH及对治疗试剂活性的影响, 并探索了级联酶催化化学动力学治疗过程机理。还构建了肿瘤微环境下原位合成治疗试剂的方案, 有效降低了毒副作用, 提升了肿瘤高选择性治疗。进一步结合质谱监测, 并提出了基于水氧化产生羟基自由基的绿色诊疗机理, 并发现了ROS的氧化脂质过氧化物及具有细胞毒性的碎片分子, 阐述了脂质过氧化过程导致细胞膜损坏, 引发细胞凋亡的治疗机理^[5]。该系列工作不仅拓展了常压质谱在肿瘤治疗过程监测和机理研究中的应用, 也并为高效诊疗策略的建立提供了有效支撑。

关键词: 常压质谱, 催化治疗, 金属活性中心, 过程监测, 中间体**参考文献:**

- Q. Zhao, L. Zheng, Y. Gao, J. Li, J. Wei, M. Zhang, J. Sun, J. Ouyang, N. Na*. *J. Am. Chem. Soc.*, **2023**, 145, 12586.
- Q. Zhao, L. Zheng, Y. Gao, J. Li, J. Wei, M. Zhang, J. Sun, J. Ouyang, N. Na*. *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 14975.
- J. Sun, Y. Yin, W. Li, J. Ouyang, N. Na*, *Mass Spec Rev.*, **2022**, 41, 70.
- X. Wang, X. Ge, Q. Zhao, X. Shen, X. Li, J. Qin, J. Ouyang, N. Na*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, e23888X.
- Y. Yin, X. Ge, J. Ouyang, N. Na*, *Nat. Commun.* **2024**, 2024, 15, 2954.

I-26

面向环境病因学的环境分析化学

刘倩*

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

E-mail: qianliu@rcees.ac.cn

环境分析化学正从传统污染物检测迈向服务健康风险解析的新阶段。面向环境病因学的环境分析化学以阐明环境暴露与疾病发生发展的因果关联为核心目标, 构建从污染物识别、暴露评估到效应解析的全链条研究框架。通过发展高分辨质谱、多组学联用与时空分辨分析技术, 实现复杂环境中多尺度、多组分污染物的精准解析; 结合人群队列与实验模型, 揭示关键致病因子及其作用机制; 进一步整合大数据与计算方法, 建立环境暴露与健康结局之间的定量关联模型。该方向有助于突破传统单一污染物研究范式, 推动环境科学向以健康为导向的精准防控转型, 为公共健康风险评估与政策制定提供科学依据。

参考文献:

1. *Environ. Sci. Technol.* 2025, 59, 19705–19718.
2. *J. Hazard. Mater.* 2025, 496, 139404.
3. *Environ. Sci. Technol.* 2025, 59, 26041–26054.
4. *Sci. China Chem.* 2025, 11, 5575–5591.
5. *Environ. Sci. Technol.* <https://doi.org/10.1021/acs.est.6c00494>.
6. *Environ. Sci. Technol.* 2025, 59, 1712–1723.

I-27

微塑料与添加剂界面环境行为研究

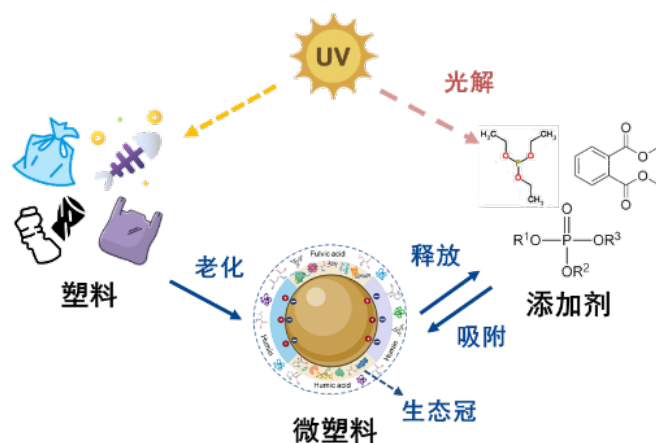
龚正君^{1,*}, 龚新颖¹, 童圆君¹, 黄小英¹, 魏琰¹¹ 西南交通大学环境科学与工程学院, 四川省成都市高新西区犀安路 999 号, 611756

*Email: gzj@swjtu.edu.cn

微塑料污染已成为威胁全球环境安全的重大问题, 由于塑料中含有大量添加剂, 微塑料与添加剂的复合污染场景在环境中普遍存在。然而, 当前对于这种复合污染条件下, 微塑料及其老化过程、生态冠形成如何调控添加剂的吸附、水解及光解等关键环境行为的机制尚不清晰。本研究旨在厘清微塑料-添加剂在多介质环境中的界面行为规律, 明确吸附与转化过程的关键调控机制, 从而为准确评估微塑料及其携带添加剂的复合生态环境风险提供重要的理论支撑与科学依据。

在具体研究进展方面, 我们重点解析了微塑料特性与环境介质对添加剂行为的协同调控机制。在吸附行为上, 我们发现土壤溶解性有机质 (DOM) 与有机磷阻燃剂 (OPFRs) 在PVC表面存在竞争吸附, 导致吸附减弱; 而PS则通过 π - π 及疏水作用吸附DOM, 通过桥接作用促进OPFRs吸附。在转化行为上, 纳米塑料形成的生态冠不仅显著降低了添加剂 (如TPhP) 的吸附量, 还增强了颗粒表面亲水性, 从而促进了TPhP的水解反应。

此外, 针对光解行为, 研究表明老化PVC虽然具有更高的活性氧生成潜力, 但由于其增强的表面吸附与光屏蔽效应, 总体上显著抑制了添加剂的光降解。我们还进一步揭示了环境介质的影响, 发现氧传质动力学是造成水/气体体系差异的主控因素, 而微塑料主要通过改变光子通量分配来调控添加剂的光降解行为。



关键词: 微塑料; 有机磷添加剂; 吸附; 光降解。

参考文献

- [1] Gong Xinying, Ma Junyi, He Yang, Dong Yuxin, Tong Yuanjun, Mao Jiayu, Li Mao, Wang Dongmei, Gong Zhengjun, J. Hazard. Mater., 2025, 496, 139266.
- [2] 董育欣, 马俊羿, 毛佳雨, 童圆君, 魏琰, 王东梅, 龚新颖, 龚正君, 环境化学, 2025, 44(10): 1111-1122.

I-29

面向污染物暴露评估的单细胞分析新方法

邓洁薇¹, 翟筠秋², 李心砚¹, 栾天罡^{1, 3*}

广东工业大学生物医药学院, 广州, 510006

广州中医药大学中药学院, 广州, 510006

五邑大学环境与化学工程学院, 江门, 529020

通讯联系人 Email: cesltg@mail.sysu.edu.cn

当前, 生命科学与环境健康领域的研究正逐步从面向疾病的诊断治疗拓展至污染物的早期暴露风险评估与毒性预警[1,2]。为实现对污染物在单细胞层面毒性效应及其致癌、致突变机制的深入解析, 亟需发展具备原位、实时和高分辨率特性的单细胞分析工具。为此, 我们整合了荧光成像与单细胞质谱技术, 开展了针对环境污染物分析和毒理机制的新方法研究。在荧光分析方面, 我们设计构建了高灵敏、高特异的核酸修复酶纳米探针, 实现了对污染物诱导 DNA 损伤的类型、程度及时空动态变化的原位追踪, 为揭示污染物基因毒性作用机制提供了重要支撑。在代谢分析方面, 我们制备了内壁修饰的固相微萃取探针, 实现了对单细胞中多种污染物及其代谢产物的高效、选择性富集, 并建立了适用于单细胞分析的环境质谱方法, 从而深入解析了污染物在细胞内的富集行为与代谢转化特征。这些研究为系统揭示污染物在细胞水平上的累积特征、基因损伤机制及其代谢调控规律提供了新的方法学基础。

关键词: 环境污染物; 单细胞分析; 荧光成像; 质谱

参考文献:

- [1] Peters, A., Nawrot, T. S., Baccarelli, A. A., Hallmarks of environmental insults. *Cell*, **2021**, 184, 1455-1468.
- [2] Gao, P., Exploring single-cell exposomics by mass spectrometry. *Environ. Sci. Technol.*, **2023**, 57, 12201-12209.

I-30

电纺纳米纤维/共价有机骨架材料应用于水环境中新兴污染物的去除研究

陈朗星^{1,*}, 姜晓文¹, 何锡文¹, 张玉奎²

¹南开大学化学学院, 天津市南开区卫津路 94 号, 300071

²中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号, 116023

*Email: lxchen@nankai.edu.cn

随着工业化进程的加速和人口的持续增长, 大量的新型污染物如药物和个人护理品(PPCPs)、内分泌干扰物和微塑料等不断排入水体, 导致水质恶化, 这不仅破坏了生态平衡, 还对人类的健康和生活质量构成了严重威胁。因此, 开发高效的材料用于污染物去除, 具有十分重要的意义。

共价有机骨架(COFs)作为一类具备高孔隙率和比表面积、功能多样等特点的新型多孔材料, 近年在分离、环境、能源、生物学等众多领域展现出独特的优势和应用价值^[1,2], 特别是在污染物去除领域依旧有很高的发展潜力。其中 C=N 键连接的 COFs 凭借高比表面积带来的丰富的活性位点、单体种类丰富, 以及合成过程简便的优势, 成为当前污染物去除领域应用最为广泛的 COFs 类型之一^[3]。但 C=N 键的可逆性使其在复杂的水环境中易发生水解, 这极大地限制了其长期稳定性和实际应用效果^[4]。通过探寻新的合成方法与策略, 开发其他连接方式的 COFs 有助于提高材料的长期稳定性和应用性。此外, COFs 材料多呈现为粉末状态。在污染物去除中, 难以通过常规的固液分离方法将其从水中完全分离出来, 这大大限制了材料的循环利用效率。通过将 COFs 材料与其他材料复合开发一种便于回收和再生的材料, 为 COFs 材料在污染物去除领域的实际应用提供了新途径。

在此, 我们针对 COFs 材料在水体中污染物去除中的问题。一方面, 从提高 COFs 连接键稳定性入手, 通过构建低可逆性的 C=C 键合方式、亚胺键后修饰策略合成了多种 COFs 及复合材料。另一方面, 将多孔晶态材料与静电纺丝纳米纤维复合, 提高对污染物的可持续去除性能。

(1) 采用表面介导的原位生长策略, 通过在聚丙烯腈(PAN)纳米纤维表面构筑活性位点, 实现了烯键连接 COFs 在 PAN 纳米纤维上的可控生长, 制备了 APAN@TMT-TFPT 纳米纤维复合物并将其用于污染物双酚 A 的吸附去除。

(2) 通过溶剂热合成亚胺键连接的 COFs (COF-Imine), 利用合成后修饰将亚胺键转化为喹啉结构 (COF-QL-Ph)。随后基于原位生长-牺牲模板法制备了中空结构 COF-QL-Ph 纳米纤维复合材料用于高效吸附水体中的 2,4-二氯苯酚。

参考文献:

1. D. Rodriguez-San-Miguel, C. Montoro, F. Zamora, *Chem. Soc. Rev.*, **2020**, 49, 2291-2302.
2. J. Wang, S. Zhuang, *Coord. Chem. Rev.*, **2019**, 400, 213046.
3. H. Qian, Y. Wang, X. Yan, *TrAC Trends Anal. Chem.*, **2022**, 147, 116516.
4. H. Guo, Y. Li, X. He, L. Chen, Y. Zhang, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2023**, 15, 14777-14787.

I-31

液相色谱-质谱联用分析环境污染物及健康效应研究

袁必锋*

复杂生命体代谢与调控全国重点实验室, 武汉大学公共卫生学院, 武汉, 430071

*E-mail: bfyuan@whu.edu.cn

关键词: 色谱质谱联用, 环境污染物, 高覆盖度分析, 代谢综合征, 表观遗传

随着现代农业与工业技术的飞速发展, 环境污染物已广泛渗透至空气、食品及日常用品中, 构成了严峻的公共健康挑战。部分污染物及其代谢产物可在人体内蓄积, 干扰正常生理功能, 进而诱发生殖、内分泌及神经系统等多种疾病。针对这一现状, 本研究建立了基于液相色谱-串联质谱 (LC-MS/MS) 技术的环境污染物系统分析平台。该平台实现了对 12 类共 263 种污染物的高灵敏度、高覆盖度同步检测, 涵盖邻苯二甲酸酯类 (48 种)、非邻苯二甲酸酯类增塑剂 (21 种)、全氟和多氟烷基物质 (21 种)、有机磷酸酯类阻燃剂 (29 种)、溴代阻燃剂 (12 种)、酚类抗氧化剂 (38 种)、紫外线吸收剂 (35 种)、光引发添加剂 (15 种)、个人护理品化学品 (11 种)、合成抗氧化剂 (29 种)、空气污染物 (1 种) 及植物毒素 (3 种)。依托该分析方法, 我们首先揭示了污染物从母体向胎儿的转移规律^[1]。研究发现, 不同污染物的经胎盘转移效率 (TTE) 差异显著: 全氟己酸 (PFHxA) 的 TTE 值最高 (5.526), 而全氟辛烷磺酸 (PFOS) 最低 (0.206)。其次, 在涉及 743 名参与者的流行病学研究中, 我们采用适用于中国人群的连续代谢综合征评分, 以捕捉其渐进性特征及潜在的非单调剂量-反应关系。多污染物联合暴露分析显示, 全氟庚酸 (PFHpA)、三苯基磷酸酯 (TPHP)、2,2-双(4-羟基苯基)六氟丙烷 (BPAF)、双酚 A (BPA) 及 PFOS 的混合暴露与代谢综合征风险增加显著相关。此外, 我们发现环境污染物暴露也诱导细胞和小鼠组织核酸表观遗传修饰图谱变化^[2-3]。为进一步阐明毒性机制, 结合动物模型与体外实验, 深入探究了邻苯二甲酸二(2-乙基己)酯 (DEHP) 长期暴露诱导的病理过程。机制研究表明, DEHP 暴露增强了 DNA 甲基转移酶 1 (DNMT1) 与自噬受体蛋白 SQSTM1 的相互作用, 加速了 DNMT1 的自噬性降解。DNMT1 的缺失导致自噬体形成相关基因启动子区甲基化水平显著降低, 进而转录上调这些基因的表达。这种由表观遗传修饰驱动的自噬过度激活, 最终引发肝脏线粒体功能障碍及脂质异常蓄积。综上所述, 本研究不仅深化了对环境污染物毒性分子机制的理解, 也突显了其在代谢性疾病发生发展中的潜在长期危害, 为相关疾病的预防与干预提供了科学依据。

参考文献:

1. Yuan, K. Y.; Gu, Y. H.; Pei, Y. H.; Yu, S. Y.; Li, T. Z.; Feng, T.; Liu, Y.; Tian, J.; Miao, X.; Xiong, J.; Hu, M.; Yuan, B. F. Comprehensive analysis of transplacental transfer of environmental pollutants detected in paired maternal and cord serums. *J Hazard Mater*, 2025, 486, 136970.
2. Feng, T.; Gu, Y. H.; Hu, Q. S.; Xie, N. B.; Gu, S. Y.; Gang, F. Y.; Xiong, J.; Yuan, B. F. Landscape of environmental pollutant-driven alterations of nucleic acid modifications in hepatoma cells. *J Hazard Mater*, 2026, 503, 141125.
3. Feng, T.; Gu, S. Y.; Shi, L. F.; Gu, Y. H.; Yuan, B. F. Mass spectrometry analysis reveals changes in patterns and correlations of nucleic acid epigenetic modifications in mouse tissues exposed to polystyrene microplastics. *Chin Chem Lett*, 2026, 37, 111546.

I-32

稳定同位素质谱在动物溯源中的应用

胡灿¹, 冯琳², 卫辰洁², 梅宏成¹, 郭洪玲¹, 朱军¹

1. 公安部鉴定中心, 北京 100038;

2. 中国人民公安大学, 北京 100038

通讯联系人 E-mail: hucanjiayou@126.com

生物多样性是人类赖以生存的基础, 近年来涉濒危动物犯罪频发, 严重影响到生物多样性保护。在打击涉濒危动物犯罪的司法实践中, 涉案动物及其制品的地理溯源是案件侦破的关键环节。当前, 动物鉴定技术主要依赖传统的形态学、分子遗传学标记[1]等方法, 仅能实现动物种属的准确鉴别; 但针对动物地理溯源, 目前缺乏科学、客观的检测技术, 相关溯源工作多依赖证人证言, 亟需建立标准化的溯源检测技术。稳定同位素质谱(Isotope Ratio Mass Spectrometry, IRMS)技术是一种有效的溯源手段, 在动物地理溯源领域展现出巨大潜力。其核心原理是: 不同地理区域的环境介质(如大气、降水、土壤等)中稳定同位素(如碳、氮、氧、氢等)比值存在显著差异[2], 这种差异通过食物链逐级传递并在动物体内累积, 最终在动物组织(如毛发、骨骼、肌肉等)中留下特定的同位素“指纹”, 进而反映动物的生存环境与地理来源。为此, 本研究建立了不同动物组织的样品前处理方法和稳定同位素分析方法, 采集了中国 10 个不同地区动物园的动物组织样本, 并进行稳定同位素比值分析。探究了同一动物个体不同部位毛发的 $\delta^{13}\text{C}$ 、 $\delta^{15}\text{N}$ 、 $\delta^2\text{H}$ 、 $\delta^{18}\text{O}$ 值差异, 同一动物园不同个体同位素比值情况[3], 以及动物组织与饮食之间的稳定同位素比值相关性。本研究为法庭科学领域打击非法盗猎与贸易提供关键技术支持。

参考文献:

1. Hebert PDN, Cywinska A, Ball SL, deWaard JR. *Proc Biol Sci*, **2003**, 270(1512):313-321.
2. Hillaire-Marcel, C., Kim, ST., Landais, A. et al. *Nat Rev Earth Environ*, **2021**, 2, 699-719.
3. Feng L, Wei C, Deng X, et al. *Forensic Sci Inter*, **2026**, 379, 11273

I-33

离子液体与生物大分子作用及应用研究

陈旭伟, 舒杨, 王建华

东北大学理学院化学系分析科学研究中心

通讯联系人 E-mail: jianhuajrz@mail.neu.edu.cn

离子液体与生物大分子的相互作用相当广泛, 涉及核酸、蛋白质、脂类以及多糖。本研究的主要研究内容包括ILs-核酸相互作用与DNA分离分析, ILs-蛋白质相互作用与蛋白质分离分析, ILs-磷脂相互作用与药物递送。探索了离子液体与核酸及蛋白质的相互作用机理及其在分离分析等领域中的应用。

I-34

超交联聚合物在痕量污染物检测中的应用研究

张书胜^{1*}, 赵文杰², 张岩皓³, 马雪², 张文芬¹¹ 郑州大学化学学院, ² 河南工业大学化工学院, ³ 郑州大学生态与环境学院

Email: zsszz@126.com

环境和食品样品基质复杂, 所含的污染物易迁移且多以痕量形式存在, 其精准检测面临巨大挑战, 开发高效分离富集技术具有重要意义。超交联聚合物(HCPs)作为一类由轻元素通过稳定共价键连接形成的多孔材料, 具有合成灵活、比表面积高、理化性质稳定及易于功能化修饰的独特优势, 在痕量污染物分离富集领域展现出广阔应用前景。报告汇总了 HCPs 在环境与食品痕量污染物检测中的应用进展与方法开发成果。

在材料制备方面, 创新采用三氯化铁“一物两用”绿色策略, 同步实现 HCPs 的催化合成与 Fe₃O₄ 磁性纳米粒子的原位负载, 成功制备出硼酸基、羧基、吡嗪基及环糊精功能化的系列磁性 HCPs 复合材料。通过“溶剂编织”“点击化学”等精准合成技术, 结合 SEM、TEM、XPS、固态 NMR 及 BET 等多维度表征手段, 明确了材料的微观形貌、化学结构与物理特性。在吸附机理研究中, 借助吸附等温线、动力学及热力学参数计算, 结合 DFT 分子模拟, 阐明了 HCPs 通过疏水作用、 π - π 堆叠、静电作用、硼酸亲和及主客体包含等多重机制, 实现对不同极性污染物的靶向吸附, 揭示了材料化学结构、孔径分布与萃取效能的内在关联。基于此, 建立了“同步萃取 - 分类洗脱”的样品前处理新策略。在实际应用中, 该类材料与技术成功实现了多环芳烃(PAHs)、邻苯二甲酸酯(PAEs)、硝基酚、季铵盐农药(QUATs)、儿茶酚胺等 30 余种痕量污染物的高效富集, 已成功应用于湖水、雨水、工业废水等环境样品, 以及食用油、茶饮料等食品样品的检测。HCPs 凭借功能可调的结构特性与高效的吸附性能, 有效解决了环境与食品中不同极性痕量污染物的分离富集难题。相关材料制备技术与检测方法的开发, 不仅丰富了多孔材料的应用场景, 也为环境监测与食品安全监管提供了更灵敏、抗干扰、绿色高效的技术支撑, 具有重要的学术价值与产业化潜力。未来可通过进一步优化材料功能化修饰、拓展适配污染物种类、开发便携式检测设备联用技术, 推动其在复杂基质痕量污染物检测中的广泛应用。

I-35

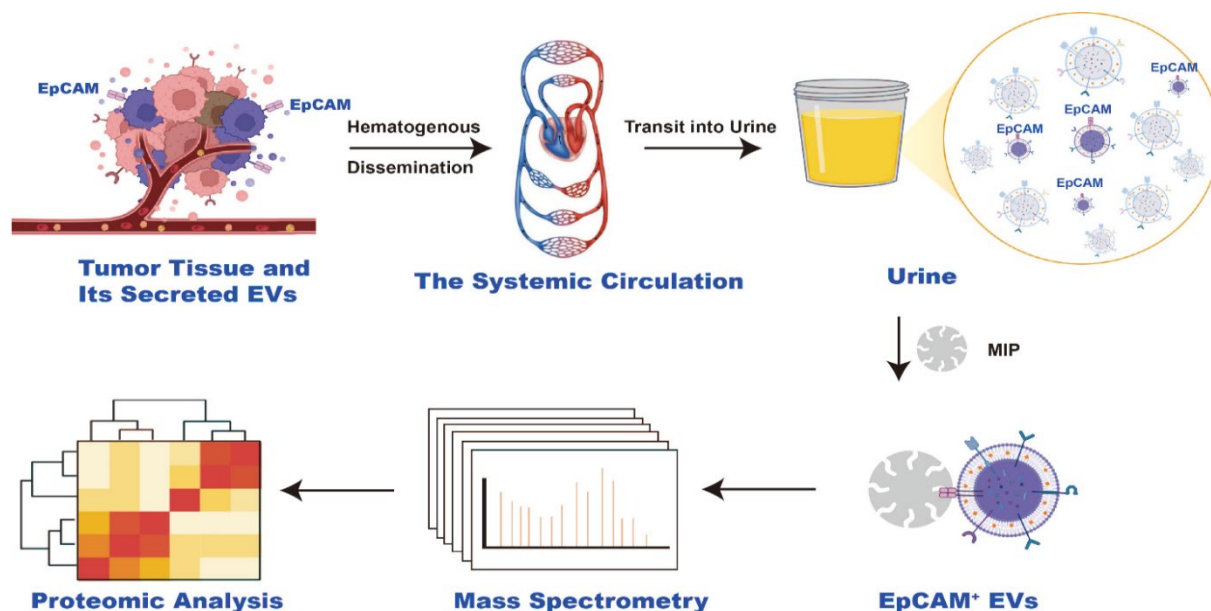
肿瘤来源外泌体的分子印迹富集与组学分析

于文静, 陈鲁茜, 胡良海*

吉林大学超分子化学生物学研究中心, 长春, 130012

通讯联系人 E-mail: lianghaiu@jlu.edu.cn

外泌体是一种细胞分泌的囊泡状结构小体, 广泛存在于细胞、细菌培养液和血浆、尿液等各种体液中, 外泌体蛋白质组成及其翻译后修饰与疾病的发生发展有着密切的联系。由于受到磷脂双分子层膜的保护, 外泌体中蛋白质的修饰形态更为稳定, 因此能够更精确反应机体的生理和病理状态, 是疾病标志物筛选的理想来源, 同时外泌体还是天然的药物载体。我们发展了基于分子印迹的外泌体化学亲和分离新方法, 可对不同亚型的外泌体进行选择富集。针对肿瘤来源外泌体表面分子特征, 开发了以磷脂分子和肿瘤特异性蛋白为靶标的分子印迹识别材料, 为基于外泌体的疾病标志物筛选研究提供了新的解决方案。



参考文献:

1. Kalluri R, LeBleu VS. The biology, function, and biomedical applications of exosomes. *Science*. **2020**; 367(6478): eaau6977.
2. Zhou J, Cheng X, Guo Z, Ali MM, Zhang G, Tao WA, Hu L, Liu Z. Epitope Imprinting of Phospholipids by Oriented Assembly at Oil/Water Interface for the Selective Recognition of Plasma Membranes. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023** 62,19: e202213938.
3. Cai Y, Bu A, Han S, Ding Y, Zhang H, Sun J, Deng Y, Ma J, Wang S, Gu Y, Chang W, Gu Z, Xie Z, Hu L, Zhang Y. A Chemical Glycoproteomic Approach Decrypts Urinary Extracellular Vesicle Surfaceome for Prostate Cancer Diagnosis and Grading *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**; 64(46): e202509399.
4. Feng X, Shen A, Zhang W, Jia S, Iliuk A, Wang Y, Zhang W, Zhang Y, Tao WA, Hu L, High-throughput capture and in situ protein analysis of extracellular vesicles by chemical probe-based array. *Nat. Protoc.* **2025**; 20(4):1057-1081.

I-36

陶胎中残留蛋白的提取及检测

谢瑞文, 刘凯, 李向军*

中国科学院大学

通讯联系人 E-mail: lixiangi@ucas.ac.cn

陶胎作为古代人类烹饪、储存和加工食物的重要载体,其多孔矿物结构能够吸附并保存蛋白质等有机残留物,在古蛋白组学研究中具有重要意义。然而,陶胎中残留蛋白普遍存在含量低、降解严重、与矿物基质结合紧密及杂质干扰强等问题,常规提取方法难以实现高效释放与鉴定。针对这些问题,本研究基于磁性材料的吸附和分离特性,设计并制备了功能化磁性材料,结合SP3技术和质谱技术,旨在提升陶胎古蛋白的提取效率与检测能力。

首先,制备了 $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-CA/GO}$ 有机酸修饰磁性复合材料,通过油酸改性、柠檬酸羧基修饰及石墨烯负载,获得了具有良好分散性、稳定的晶体结构的磁性材料。优化提取条件后,在50%乙醇、磁珠用量100 μg 、孵育20分钟、pH 6.0条件下,BSA的吸附效率和解吸效率分别达82.6%和78.2%。结合MALDI-TOF MS和LC-MS分析,该材料对牛血清蛋白、酪蛋白和乳清蛋白酶解肽段具有一定富集能力,且在模拟装填牛奶和牛肉的陶胎样品中能够检出部分目标肽段。此外,进一步构建了 $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Cu/MMT}$ 铜基修饰磁性复合材料。该材料表现出较好的结晶性和超顺磁性。在优化提取条件下,其蛋白提取率可达89%,并具有较好的循环稳定性。通过MALDI-TOF MS和LC-MS/MS分析, $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Cu/MMT}$ 能够通过铜位点的金属亲和作用与蒙脱土层状载体的协同效应,提取富含组氨酸的特征肽段,在模拟陶胎样品中的信号响应和提取量相比商品化磁珠有所提升。

综上,将功能化磁性材料与质谱检测技术结合,可为陶胎中低丰度残留蛋白的提取与分析提供新的材料选择,也是一次将质谱技术在人文考古中残留蛋白分析的尝试。

参考文献:

1. Warinner C, Korf Z, Richter K, Collins M J. Paleoproteomics [J]. Chem Rev, **2022**, 122(16): 13401–13446.X.
2. Li W, Dang Y, Wang R, et al. Fabrication of magnetic functionalized layered double hydroxide nanomaterials for detecting trace fluoroquinolones residues in meat integrated with HPLC-MS/MS [J]. Journal of Food Composition and Analysis, **2024**, 135
3. Jing J, Li Y, Wu X, et al. Dual-platform (GC-MS & UPLC-HRMS) metabolomics analysis as a novel method to detect organic residues absorbed in pottery: a preliminary study at the Peiligang site, China [J]. Journal of Archaeological Science, **2025**, 184

I-37

超声辅助溶胶凝胶-水热扩孔法制备 $\text{SiO}_2@\text{SiO}_2$ 核壳微球及其在快速分离分析中的应用

唐长伟, 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

$\text{SiO}_2@\text{SiO}_2$ 核壳微球 (CSSMs) 因其高效快速的分离能力而备受关注。超声辅助溶胶凝胶结合水热扩孔技术制备 CSSMs 具有成本低、操作流程简单、壳层厚度均匀、孔径可控等优点。然而, 该方法在合成过程中易出现核壳微球团聚、生成二次粒子等问题。本研究采用超声辅助溶胶-凝胶法结合水热扩孔技术制备了 CSSMs。通过冷冻干燥处理在 SiO_2 核上形成溶剂层, 并优化醇/水溶剂比例, 成功解决了搅拌过程中 CSSMs 聚集和二次颗粒形成的问题。通过调节正硅酸乙酯 (TEOS) 的用量和反应时间, 在 100~600 nm 范围内实现了对 CSSMs 的壳层厚度的有效调控。通过水热处理能有效调整 CSSMs 的孔径, 可从 4 nm 扩孔至 35 nm。利用该技术实现了对 CSSMs 的半制备放大, 产率达 50 g, 制备的 CSSMs 具有良好单分散性和均匀粒度分布。此外, C18 改性的 CSSMs 作为 RPLC 固定相, 用于小分子、肽和蛋白质的快速分离, 并与商业全多孔 Xtimate-C18 柱和 CORTECS-C18 核壳柱进行了比较。CSSM-C18 柱不仅在更短的分析时间内实现了所有化合物的基线分离, 而且色谱峰更窄、对称更好。其对己苯的理论塔板数高达 110520 块/米, 与 CORTECS-C18 柱 (118200 块/米) 相当, 且显著优于 Xtimate-C18 柱 (71260 块/米)。与传统的 LBL 法和 PICA 法相比, 此方法具有成本低廉、操作简便、易控制等优势, 制备出 $\text{SiO}_2@\text{SiO}_2$ 核壳微球壳层厚度均匀, 孔径可调, 而且具有高效的分离能力, 有望取代 LBL 法用于大规模制备 CSSMs。

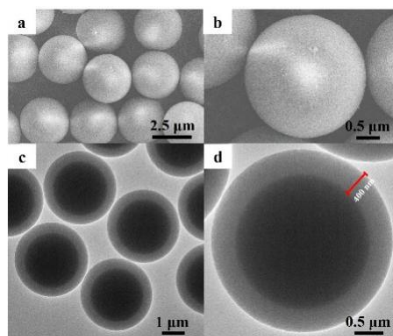


Fig. 1 SEM (a, b) and TEM (c, d) images of CSSMs prepared using ultrasound-assisted sol-gel method combined with hydrothermal pore expansion.

关键词: $\text{SiO}_2@\text{SiO}_2$ 核壳微球; 超声辅助溶胶凝胶法; 水热扩孔; 快速分离, UPLC

参考文献

1. Cheng L.-P.; Cai J.-F.; Ke Y.-X. *J. Inorg. Organomet. P.* 2020, 30, 859-868.
2. Tang C.-W.; Yang Z.-L.; Li C.-L.; Liu J.-W.; Bai Q. *Talanta*, 2025, 283: 127164
3. Tang C.-W.; Li C.-L.; Yang Z.-L.; Liu J.-W.; Bai Q. *J Chromatogr. A*, 2025, 1753: 465990

国家自然科学基金(22174108, 22474108, 21874106)资助

I-38

自组装纳米载体蛋白冠的研究：超速离心与非对称流场流分离的系统性比较

李港，林睿，钟文婉*

中国科学技术大学

通讯联系人 E-mail: wenwanz@ustc.edu.cn

自组装纳米载体通过分子间非共价相互作用（如疏水作用与静电相互作用等）驱动形成纳米级结构，其具有和大多生物分子相似的理化性质，在疫苗、疾病诊疗等医学领域具有广阔的应用前景。近年来研究表明，自组装纳米载体在进入生物环境后会迅速吸附周围生物分子，形成动态蛋白冠。该蛋白冠的形成不仅改变自组装纳米颗粒的表面特性，还可能影响其亚稳态或热力学稳态结构，从而在分子层面调控其生物学行为，包括细胞摄取、生物分布和细胞毒性等。因此，高效、无损地分离自组装纳米载体-蛋白冠复合物对深入理解其组成、构象和功能至关重要。本研究采用非对称场流分离技术（AF4），利用其无固定相和开放通道等结构优势，最大程度上降低外界剪切力和界面相互作用干扰，实现对自组装纳米载体-蛋白冠复合物的温和、高效分离。研究表明，AF4有效克服了传统分离方法(如超速离心、尺寸排阻色谱)存在的样品损失、非特异性吸附、复合物解离或结构变形的局限，更适用于结构动态性强且对外界作用敏感的自组装纳米颗粒体系。总体而言，本研究确立了AF4在自组装纳米载体-蛋白冠研究中的方法学优势，为深入研究自组装纳米载体-蛋白冠相互作用及其构成，以及精确调控纳米颗粒-生物界面的纳米药物递送系统提供了关键技术支持。

关键词：自组装纳米载体；蛋白冠；超速离心；非对称场流分离

I-39

大麻中 Δ^9 -四氢大麻酚薄层色谱快速分析方法研究

叶佳, 彭波, 刘慧莉, 刘雅琼, 刘家澎, 陈明瑞, 陈波, 马铭*

化学生物学及中药分析教育部重点实验室, 植化单体开发与利用湖南省重点实验室,

湖南师范大学, 长沙, 410081

通讯联系人 E-mail: mingma@hunnu.edu.cn

Δ^9 -四氢大麻酚(Δ^9 -THC)作为严格管控的精神活性物质,其快速、准确的鉴别与定量是毒品稽查、司法鉴定及工业大麻合规性监控的关键环节^[1]。然而,由于大麻中广泛存在的同分异构体大麻二酚(CBD)在结构和色谱行为上与 Δ^9 -THC极为相似,常规快速检测方法(如传统薄层色谱)难以实现CBD与 Δ^9 -THC有效区分,易导致假阳性或假阴性结果^[2]。因此,开发能在现场条件下高效排除CBD干扰、选择性检测 Δ^9 -THC的分析方法,对于提升监管效率、保障公共安全具有重要意义。

本研究围绕相关挑战,提出并验证“碱性氧化前处理-薄层色谱分离-智能手机成像定量”集成化现场分析方法(图1)。此方法通过碱性氧化反应,将样品中的干扰物CBD转化为大麻二酚醌,消除其对 Δ^9 -THC检测的干扰。在薄层板上实现 Δ^9 -THC及其氧化产物大麻酚(CBN)与转化产物的完全基线分离,解决传统薄层色谱法难区分同分异构体的难题。定量上,结合智能手机拍照与ImageJ软件,建立内标法校正的定量方法,实现 Δ^9 -THC和CBN现场准确定量。整个分析流程约10分钟完成,具高选择性、操作简便、成本低和设备便携等特点,为 Δ^9 -THC现场快速筛查提供了可靠实用的创新方案。

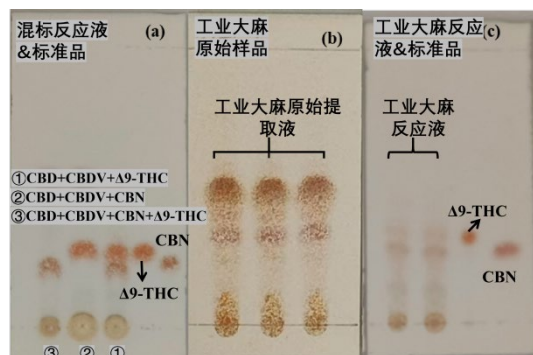


图1 大麻素类化合物反应液与工业大麻样品 TLC 图

(a) 混标反应液以及标准品显色斑点; (b) 工业大麻 1-1 提取母液显色斑点图 (n=3);

(c) 工业大麻反应液 2 以及标准品的显色斑点图。

参考文献:

- [1] M.C. Cash, K. Cunnane, C. Fan, et al. Mapping cannabis potency in medical and recreational programs in the United States[J]. *PLoS One*. **2020**, 15(3): e0230167.
- S. A. Salami, F. Martinelli, A. Giovino, et al. It is our turn to get cannabis high: Put cannabinoids in food and health baskets[J]. *Molecules*. **2020**, 25(18): 4036.

* 国家自然科学基金项目(22276050, 22276049)资助。

I-40

共价有机骨架毛细管气相色谱固定相

严秀平*, 钱海龙, 邓文超, 马甜甜

江南大学食品学院

通讯联系人 E-mail: 111@xxx.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。COFs 作为新型的结晶多孔材料, 为探索分离性能优异的气相色谱固定相带来了新机遇。然而, COF 固定相的发展中仍存在一些关键问题亟需解决。首先, 制备 COF 毛细管柱仍具有挑战性, 这一现状极大阻碍了 COF 固定相发展。其次, COFs 功能化是制备 COF 固定相的必要手段, 但目前制备高分离性能的 COF 固定相仍有难度。本报告将介绍本团队在 COFs 毛细管色谱柱的制备及其在高分辨气相色谱分析污染物的研究进展[1-5]。

参考文献:

1. H.-L. Qian, C.-X. Yang, X.-P. Yan, Nat. Commun. 2016, 7, 12104.
2. W.-C. Deng, H.-L. Qian, C. Yang, S.-T. Xu, X.-P. Yan, ACS Appl. Mater. Interfaces 2023, 15, 54977–54985.
3. T.-T. Ma, W.-C. Deng, H.-L. Qian, S. Xu, C. Yang, X.-P. Yan, ACS Mater. Lett. 2024, 6, 1616–1622.
4. Z.-H. Wang, C. Yang, H.-L. Qian, X.-P. Yan, Anal. Chem. 2023, 95, 8145.
5. W.-C. Deng, H.-L. Qian, C. Yang, S.-T. Xu, X.-P. Yan, Talanta 2025, 282, 127012.

I-41

微纳尺度物质在环形非均匀电场下的运动特征及在分离分析中的应用

李东浩*, 刘璐

延边大学理学院化学系, 延吉市公园路 977 号, 133002

通讯联系人 E-mail: dhli@ybu.edu.cn

当前微纳尺度物质的分离分析目前仍存在诸多瓶颈, 因其理化性质相近等限制, 传统方法分辨率与富集效率不足, 难以满足高精度研究的需求。基于环形非均匀电场的特征, 提出了环形非均匀电场可控分区新理论, 以凝胶为分离基质, 依托样品尺寸及电荷差异产生差异化电场响应, 从而建立了“靶型电泳”新方法。该环形非均匀电场具备径向梯度特征, 即电场强度随半径减小呈指数级提升。受环形电场线疏密分布调控及电场梯度变化, 体系可划分为迁移区、加速区与浓缩区三大功能区。微纳尺度物质在迁移区首先完成聚焦与初步分离, 再于加速区实现完全分离, 最终在浓缩区达成高效富集。通过电场线的精密、可控调控, 可同步完成样品预分离、精准分离与浓缩全过程。基于“靶型电泳”方法, 目前已经成功研发了“靶型多腔电泳”、“靶型凝胶电泳”、“靶型免疫印迹”、“靶型旋转电泳”等系列自主创新技术和新装置, 实现了外泌体、脂质体、蛋白质、多肽、纳米颗粒、核酸等微纳尺度物质的精准分离检测。

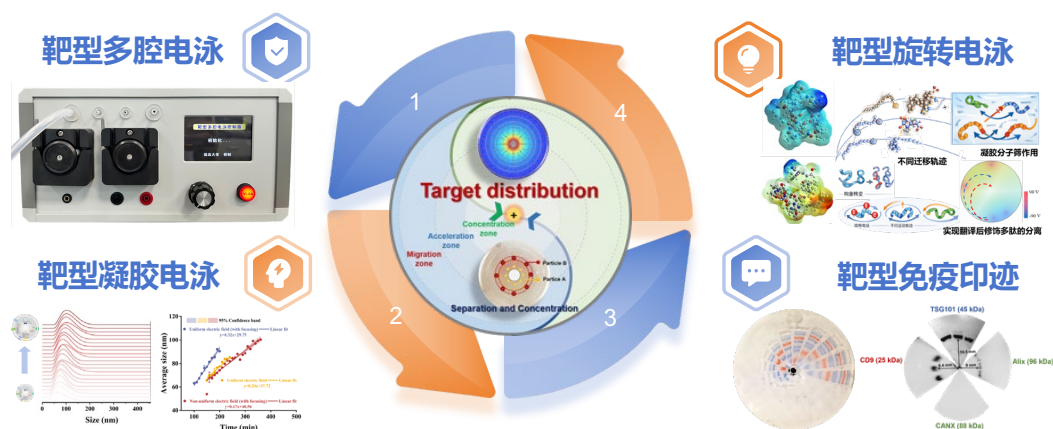


图 1. 环形非均匀电场可控分区及系列靶型电泳。

关键词: 非均匀电场, 凝胶电泳, 微纳尺度物质, 分离, 检测

参考文献:

1. L. Liu, D.H Li, et. al., *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 23, 8474-8482.
2. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 436–443.
3. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 28, 15472-15481
4. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 1287: 342110.
5. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chem.*, **2022**, 94 (23): 8474-8482.
6. L. Liu, D.H Li, et. al., *Lab Chip*, **2020**, 20 (19): 3535-3543.

本项目获得了国家自然科学基金委的项目 (22376177) 的支持。

I-43

有序色谱材料的设计与制备：从结构、材料到空间

张 博*

厦门大学化学化工学院，厦门，361005

通讯联系人 E-mail: bozhang@xmu.edu.cn

色谱材料的进步是分离科学发展的核心驱动力，深刻影响着生命科学、环境健康与新药创制等多领域、多产业的未来发展。近二十年来，亚 2 微米颗粒、核壳微球、胶体晶体等新型分离材料的涌现，显著提升了色谱材料的动力学性能；而亲水相互作用、混合模式及手性固定相的开发，则大幅拓展了高效液相色谱的应用范围。如何从材料本质上进行理性设计和精准制备是推动色谱热力学和动力学进步，发展下一代高效分离介质的核心考量。

本报告将重点介绍我们课题组在色谱材料精准制备领域的最新工作进展：基于新一代微流体平台，实现对色谱材料形貌、孔道结构及其化学的精准控制。在此基础上，级联耦合胶体化学，发展“TiTAN”合成策略，首次实现单分散色谱微球及其内部有序介孔结构的双精准构筑，显著提升了色谱材料的分离效率与选择性，并实现了难拆分物质对的高效色谱分离。本工作基于先进微纳制造和有序介孔化学发展了新型的高效色谱材料合成方法学，有望为下一代分离介质的理性设计和精准制备提供新的思路。

参考文献：

1. J. Zeng, H. Cao, K. Sun, Z. Zhou, L. Lv, J. Chen, X. Huang, X. Wang, B. Zhang, Template-in-template assembly nanostructured microspheres for high performance chromatography, *Nature Communications* 17(1) (2026) 430.
2. K. Sun, J. Zeng, Y. Liu, Z. Zhou, J. Chen, J. Chen, X. Huang, F. Gao, X. Wang, B. Zhang, Microfluidic precision manufacture of high performance liquid chromatographic microspheres, *Angewandte Chemie International Edition* 64(5) (2025) e202418642.

I-44

唾液中葡萄糖、糖化白蛋白的免疫色谱快速检测技术研究

张祥民*, 郭昱昊, 张甜甜, 张文镓, 高明霞

复旦大学化学系

E-mail: xmzhang@fudan.edu.cn

糖尿病作为全球患病率持续攀升的慢性代谢性疾病, 其早期筛查与长期监测需求日益迫切。根据国际糖尿病联盟最新统计数据, 全球成年糖尿病患者人数已超过5.89亿, 超过全球总人口的7%, 预计至2045年将攀升至8.53亿, 患病率突破10%。唾液作为一种无创、易获取的生物样本, 为葡萄糖检测提供了新的可能性[1]。唾液由腮腺、颌下腺、舌下腺及小唾液腺分泌, 其成分通过被动扩散、主动转运及龈沟液渗出等途径与血液进行物质交换, 因此可部分反映系统性生理与病理状态[2]。唾液采集完全无创, 无需专业医护人员, 无感染风险, 提升了患者的依从性, 契合即时检测的要求[3]。研究表明, 唾液葡萄糖与血糖浓度呈现显著正相关[140]。Gupta等人[4]的研究发现, 空腹唾液葡萄糖与空腹血糖的相关系数达到0.79; Abikshyeet等人[5]的研究证实, 唾液葡萄糖在区分糖尿病患者与健康对照方面具有良好的诊断效能。然而, 唾液葡萄糖的临床应用仍有诸多挑战: 唾液中葡萄糖浓度低, 成分复杂, 高黏度, 降解酶, 可能会对检测产生干扰。因此, 开发一操作便捷的唾液葡萄糖检测方法是临床应用的关键。

本研究构建了基于葡萄糖氧化酶-距离直读的侧向流免疫色谱快速检测方法[6], 用于唾液中葡萄糖的快速检测。该方法通过海藻糖酞胺凝胶前体(Alg-Tyr)的酶触发交联机制, 将葡萄糖浓度转化为肉眼可读的迁移距离, 摆脱对光学读取设备的依赖。研究系统优化了葡萄糖氧化酶(Gox)浓度、HRP酶浓度、反应时间及Alg-Tyr负载量等关键参数, 确定最佳检测条件为GOx 200 U/mL、HRP 100 U/mL、Alg-Tyr 1.5 wt%、反应时间10 min, 葡萄糖标准溶液呈现优异的线性响应($R^2 = 0.995$)。针对唾液黏蛋白的干扰, 开发了淀粉填充柱过滤前处理方案, 可有效去除黏蛋白直接用于检测。在实际样本验证中, 30例健康志愿者混合唾液中构建的加标校准曲线 $R^2 = 0.993$; 5名志愿者一日三餐的动态监测结果显示餐后30 min唾液葡萄糖显著上升, 2 h后恢复至基线水平, 与血糖变化规律一致; 15例糖尿病患者空腹唾液检测结果与血糖仪的相关性 $R^2 = 0.802$ 。初步证实了其用于糖尿病筛查与监测的可行性。为糖尿病的无创筛查与居家监测提供了新的选择方案。

参考文献:

1. Nonaka, T.; Wong, D. T. W. *The Journal of the American Dental Association* **2023**, 154 (8), 696–704.
2. X. Xan, ,,,, X. Wang, *Biomed. Chromatogr.*, **2018**, 1, 1-10.
3. Baumann, T.; Kozik, J.; Lussi, A.; Carvalho, T. S. *Scientific Reports* **2016**, 6 (1), 34760.....
4. Aihara, M.; Irie, T.; Yasukawa, K.; Minoura, I.; Miyauchi, N.; Nishi, M.; Katayama, N.; Yachiku, K.; Jinnouchi, H.; Kadowaki, T.; et al. *Clinica Chimica Acta* **2023**, 542, 117272.....
5. Jarnda, K. V.; Wang, D.; Qurrat Ul, A.; Anaman, R.; Johnson, V. E.; Roberts, G. P.; Johnson, P. S.; Jallawide, B. W.; Kai, T.; Ding, P. *Sensors and Actuators A: Physical* **2023**, 363, 114778.
6. Panda, A.; Behura, S. S.; Bhuyan, L.; Dash, K. C.; Kumar, V.; Mukherjee, S. *Journal of Oral and Maxillofacial Pathology* **2020**, 24 (1).
6. Liu, J.; Li, M.; Man, Q.; Huang, L.-h.; Wang, J.; Gao, M.; Zhang, X. *Analytical Chemistry* **2023**, 95 (20), 8011–8019.

I-46

液相色谱微型手性柱研究

袁黎明*, 李毅洁, 龙怡幸, 张成贵, 梁云涛

云南师范大学化学化工学院

通讯联系人 E-mail: yuan_limingpd@126.com

仪器小型化和绿色环保是高效液相色谱的发展方向之一。利用传统手性色谱柱分离手性化合物消耗流动相较多, 所需时间较长, 并且手性柱中的手性固定相填充量较多且价格昂贵。微型填充柱在提升分离效率、实现分离仪器小型化以及降低固定相、流动相消耗方面表现出广阔的应用前景。本研究将纤维素三(3,5-二甲基苯基氨基甲酸酯)、直链淀粉三(3,5-二甲基苯基氨基甲酸酯)分别涂敷在粒径为100 nm、500 nm、1.7 μ m的硅胶表面, 以及涂渍在二维MOFs和石墨烯纳米片上, 制备成多根1.0 cm长的微型填充柱, 在高效液相色谱上分别成功拆分了多种外消旋体。这些手性填充柱分离时间较短, 分析效率提高, 所用流动相少, 减少了环境污染, 能为色谱仪器小型化研究提供所需的小型色谱柱。

参考文献:

1. 国家自然科学基金委员会, 中国科学院. 手性物质化学. 北京: 科学出版社, **2020**
2. 袁黎明. 手性识别材料 (第二版). 北京: 科学出版社, **2020**.
3. Y. Okamoto, M. Kawashima, K. Hatada. *J. Am. Chem. Soc.*, **1984**, 106(18): 5357.

I-47

液相色谱保留指数系统及其在代谢组学中的应用

冯钰锴

武汉纺织大学，生物医学工程与健康学院

通讯联系人 E-mail: yqfeng@whu.edu.cn

在液相色谱-质谱（LC-MS）非靶向代谢组学中，保留时间（RT）的波动限制了代谢物鉴定与数据整合。本研究聚焦于保留指数（RI）系统的构建及其在提升代谢组学分析质量中的核心应用。建立了适用于反相（RPLC）和亲水相互作用（HILIC）色谱模式的标准化RI计算体系，分别利用化学标记的脂肪酸、脂肪胺及N-酰基甘氨酸同系物作为校正标尺，实现了保留时间的标准化。在此基础上，Chen等人提出了HeuSMA策略，该策略以RI为底层逻辑，通过将不同色谱梯度条件下的保留时间转化为统一的RI值，实现了跨梯度数据的峰对齐与整合。该方法构建了“启发式峰列表”，有效克服了单一梯度条件的局限性，显著提高了代谢物覆盖率和峰识别准确性，并已成功应用于人肝细胞癌（HCC）血清样本分析。此外，基于RI系统的色谱峰漂移校正模型（RI-based CPSC）有效解决了长期分析中的系统漂移问题，在157天的跨批次数据中，将峰对齐准确率从15.5%提升至80.9%。综上所述，RI系统不仅是数据校正的有效工具，更是实现多梯度数据整合、提升代谢组学覆盖度的关键技术基础。

参考文献：

1. J.-D. Hao, Y.-Y. Chen, Y.-Z. Wang, N. An, P.-R. Bai, Q.-F. Zhu, Y.-Q. Feng, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 13330–13337.
2. Y.-Y. Chen, N. An, Y.-Z. Wang, P.-C. Mei, J.-D. Hao, S.-M. Liu, Q.-F. Zhu, Y.-Q. Feng, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 7719–7728.

I-49

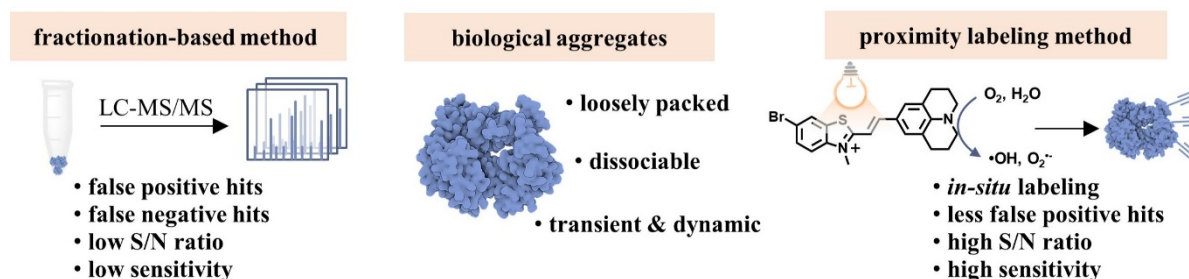
生物聚集体的标记与组学分析

孙瑞, 赵群, 张丽华, 刘宇*

中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁省大连市中山路 457 号, 116023

通讯联系人 E-mail: liuyu@dicp.ac.cn

摘要正文: 生物聚集现象(如蛋白质聚集体、核酸凝聚体、脂滴复合物等)在维持细胞稳态、调控信号通路以及驱动病理过程(如神经退行性疾病)中发挥关键作用。然而, 所形成的生物聚集体具有高度动态性和易解离等特征, 难以实现捕获、分离和富集, 因此精准分析其蛋白质组分与功能具有技术挑战性。领域内广泛使用经典的密度梯度离心分离法, 易造成其他组分污染和关键互作网络组分丢失, 导致组分分析结果存在假阳性、假阴性, 以及灵敏度和信噪比低等问题。领域内尚缺乏原位解析生物聚集体组分和互作网络的分析方法, 限制了对其生物学功能和致病机制的深入研究。针对上述技术挑战, 课题组设计了生物聚集体的化学靶向探针, 在活细胞和病理组织样本中原位光催化标记其蛋白质组分, 并发展了高效富集和分离方法, 实现了对蛋白质凝聚体、聚集体以及脂滴复合物的分离与分析。具体包括: (1) **AggID**技术: 实现蛋白质凝聚体组分的原位标记与时空分辨解析; (2) **AmyloidID**技术: 实现病理聚集体的组织原位标记与组分分析; (3) **LipoID**技术: 揭示脂滴聚集体的互作网络与亚细胞器间的调控机制; (4) 基于色谱的ATTR淀粉样心肌病变早期诊断方法和诊断试剂盒, 对致病TTR蛋白的四聚体和聚集体浓度变化过程定量追踪, 实现疾病早期诊断。

Fig. 1 *In situ* capturing and profiling of biological aggregates

参考文献:

1. H. Guo, W. Wan, Y. Huang, N. Zhao, C. Wu, B. Zhong, R. Sun, H. Feng, J. Yan, D. Shen, X. Dong, Q. Zhao*, X. Zhang*, L. Zhang*, Y. Liu*, *Nat. Chem. Biol.*, **2026**, <https://doi.org/10.1038/s41589-025-02127-4>.
2. H. Feng, Q. Zhao, F. Guo, J. Yan, N. Zhao, J. Ma, R. Sun, K. Shen, Y. Ge, X. Zhang, L. Zhang*, Y. Liu*, *Nat. Commun.*, **2026**, 17, 1260.
3. D. Shen, Q. Zhao, H. Zhang, C. Wu, H. Jin, K. Guo, R. Sun, H. Guo, Q. Zhao, H. Feng, X. Dong, Z. Gao, L. Zhang*, Y. Liu*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **2025**, 122: e2420861122.
4. R. Sun, Y. Huang, H. Feng, N. Zhao, W. Wan, D. Shen, B. Zhong, Y. Zhang, X. Zhang, Q. Zhao, L. Zhang*, Y. Liu*, *Adv. Sci.*, **2025**, 12: 2413063.
5. H. Feng, Q. Zhao, N. Zhao, Z. Liang, Y. Huang, X. Zhang, L. Zhang*, Y. Liu*, *Adv. Sci.*, **2024**, 11: 2306950.

I-50

靶向中性粒细胞胞外诱捕网的化合物筛选和功能研究

边阳阳*

西北大学生命科学学院

E-mail: bianyy@nwu.edu.cn

中性粒细胞作为先天免疫的核心效应细胞，是人类外周血中最丰富的白细胞亚群（占比 50%-70%），也是机体应对感染和炎症的“第一道防线”¹。2004 年 Brinkmann 等首次发现中性粒细胞激活后可释放中性粒细胞胞外诱捕网（Neutrophil Extracellular Traps, NETs），被认为是 21 世纪免疫学领域最重要的发现之一²。NETs 是一种由 DNA、组蛋白、颗粒蛋白等组成的纤维网状结构，是先天免疫的重要防御机制³。NETs 的过量产生会导致血栓、自身免疫、慢性炎症和严重感染等多种疾病的发生。目前，临床上还没有特异性靶向 NETs 的药物⁴。肽基精氨酸脱亚胺酶 4（PAD4）在 NETs 的形成过程中发挥着关键作用，是调控 NETs 的重要靶点⁵。我们以 PAD4 酶为靶点，通过高通量酶活性检测等技术，发现并验证丹参和牡丹皮等提取物具有高 PAD4 酶抑制活性，鉴定到丹酚酸 A、二氢丹参酮 I 和五没食子酰葡萄糖是 PAD4 酶的可逆、混合型抑制剂，IC₅₀ 值分别为 32.3 μ M、5.0 μ M 和 4.5 μ M。进一步研究了二氢丹参酮 I 可以通过抑制 PAD4 催化的组蛋白 H3 瓜氨酸化修饰，发挥抗肿瘤作用。通过计算机辅助虚拟筛选等技术，从化合物中筛选并证明格列喹酮是一种 PAD4 酶抑制剂。在细胞模型中，格列喹酮可以显著抑制 NETs 的形成，在糖尿病小鼠模型中，格列喹酮可通过抑制 PAD4 酶活性，减少 NETs 的生成，进而促进伤口愈合。与此同时，使用中性粒细胞激活过程中释放的游离组蛋白，建立了巨噬细胞凋亡和血红细胞聚集模型，为后续靶向 NETs 的药物筛选和功能研究奠定了基础。

参考文献:

1. Ng, L. G.; Ballesteros, I.; Cassatella, M. A.; Egeblad, M.; Fridlender, Z. G.; Gabrilovich, D.; Gao, Q.; Granot, Z.; Grieshaber-Bouyer, R.; Grimes, H. L.; et al. *Immunity*, **2025**, 58 (8), 1890-1903.
2. Papayannopoulos, V. *Nat Rev Immunol*, **2018**, 18 (2), 134-147.
3. Jorch, S. K.; Kubes, P. *Nat Med*, **2017**, 23 (3), 279-287.
4. Wang, H.; Kim, S. J.; Lei, Y.; Wang, S.; Wang, H.; Huang, H.; Zhang, H.; Tsung, A. *Signal Transduction Targeted Ther*, **2024**, 9 (1), 235.
5. Wong, S. L.; Wagner, D. D. *FASEB J*, **2018**, 32 (12), 6258-6370.

I-51

单个活细胞原位 ToF-SIMS 代谢组学分析

汪福意*

中国科学院化学研究所活体分析化学学院重点实验室, 北京市海淀区中关村北一街 2 号, 100190

通讯联系人 E-mail: fuyi.wang@iccas.ac.cn

基于免标记和高通量质谱分析的单细胞代谢组学研究, 能够获取单个细胞内广泛的分子变化, 为药物疗效、耐药性、副作用及相关生物学过程提供新颖的机制性见解。飞行时间二次离子质谱(ToF-SIMS) 凭借高达 100 nm 的亚细胞级横向分辨率, 已成为一种强大的单细胞质谱成像技术, 可实现细胞代谢物的原位可视化。然而, 该技术对超高真空环境的严苛要求, 使其在天然生理状态下直接分析活细胞时面临重大挑战。研究表明, 传统的细胞化学固定与脱水预处理会不可避免地影响代谢物的内在分布, 如迁移甚至定位改变等。冷冻水合虽被证实能较好地维持细胞在更接近天然状态下的完整性, 但其操作流程繁琐, 特别是冷冻前为预防细胞表面盐分覆盖而进行的预清洗步骤, 是否会干扰代谢物的天然状态仍不明确。单层石墨烯覆盖方法¹进一步推动了 ToF-SIMS 对湿润单个活细胞的膜脂质分子的原位成像, 使细胞在超高真空下数十分钟内不破裂。然而, 石墨烯可能抑制特定分子(如磷脂酰胆碱)的二次离子产额, 且样品制备过程需精细操作以降低其损伤风险。因此, 发展单个活细胞的免预处理、原位代谢组学分析的 ToF-SIMS 分析新方法, 对于直接揭示细胞药物响应、耐药性等生物学过程至关重要。

我们课题组近十余年来致力于原位液体 ToF-SIMS 技术的创新发展, 通过将 ToF-SIMS 与具有极高化学稳定性和真空兼容度的微流控装置联用, 基于表面张力锚定策略, 能够可靠地分析各种液体及固液界面。²⁻³ 该技术的核心是使用一厚度为 100 nm 的薄层氮化硅(SiN)膜窗口, 将装置内的液体密封使其与外部真空环境隔绝, 利用聚焦一次离子束在该膜上钻取一 1-2 μm 的小孔, 利用表面张力将液体弯月面锚定的物理原理, 实现在真空下对液体及固液界面的原位 ToF-SIMS 分析。基于我们前期的研究工作, 我们最近发展了基于原位液体 ToF-SIMS 的单个活细胞代谢组学分析新方法⁴。该方法能够在无需任何样品预处理的情况下, 在细胞天然生长环境中原位监测单个活细胞的真实代谢组状态, 突破了长期以来生物样品 SIMS 分析中存在的真空制约, 未来有望推广至其他基于真空条件的质谱分析技术。以顺铂耐药癌细胞为研究模型, 利用该方法发现了胆固醇、磷脂酰胆碱(PC)/鞘磷脂(SM)以及低不饱和度脂肪酸的升高可能与获得性顺铂耐药性相关。通过抑制胆固醇合成可有效降低细胞对顺铂的耐药性, 表明该策略在克服顺铂耐药方面具有潜在的治疗价值。此外, 利用该方法, 我们首次通过质谱深度剖析实验测定了单个活细胞脂质双层膜的厚度, 其等效氮化硅厚度约为 8.6 nm, 展现了原位液体 ToF-SIMS 在表征纳米级超薄生物界面方面的能力。

参考文献:

- [1] Lim, H.; Moon, D. W.*; et al. *Nat. Methods* **2021**, 18 (3), 316-320.
- [2] Zhang, Y.; Xing, Z.; Fan, B.; Ni, Z.*; Wang, F.*; Hu, X.*; Chen, Y.*; et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202215799.
- [3] Zhang, Y.; Xu, Z.*; Wang, F.*; Zhu, Z.*; et al. *Anal. Chem.* **2018**, 90 (5), 3341-3348.
- [4] Liu, Y.*; Tang, J.*; Wang, F.*; Zhang, Y.*; et al. *Anal. Chem. In Revision*.

I-52

微型化亲和色谱与质谱联用解析蛋白-蛋白相互作用

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单, 上海 200032

通讯联系人 E-mail: jingwu.kang@sioc.ac.cn

亲和纯化-质谱AP-MS是研究蛋白-蛋白相互作用的关键技术。我们发展了一种用于研究特定靶向蛋白互作组的亲和纯化-质谱 (affinity purification-mass spectrometry, AP-MS) 方法。该亲和纯化使用微型固定化金属离子亲和色谱柱 (m-IMAC), 该柱通过在移液器吸头内进行光引发聚合制备 (Spin-tip 柱)。重组 His₆ 标签蛋白 (诱饵蛋白) 通过螯合基团NTA-Ni²⁺可逆地固定在亲和柱上。诱饵蛋白及其相互作用伙伴可从亲和基质上轻松洗脱。随后, 富集的细胞蛋白通过无标记定量蛋白质组学 (label-free quantitative proteomics) 进行分析。我们利用该方法研究了自噬相关适配蛋白 FYCO1 的 GOLD (Golgi dynamics) 结构域的互作组。共鉴定出 96 个蛋白, 其中包括 7 个文献报道的 FYCO1 结合蛋白。在这些蛋白中, CCZ1 和 MON1A 进一步通过生化实验进行了验证, 并通过免疫共沉淀实验确认了 FYCO1 GOLD 结构域与 CCZ1 的直接相互作用。我们将该方法应用于解析 c-Myc/Max 这一主调控转录因子的相互作用网络, 该复合物可调控成千上万个基因的表达, 并在肿瘤发生发展中发挥关键作用。我们采用m-IMAC技术, 实现对 c-Myc/Max 相互作用蛋白的高效富集。结合基于数据非依赖采集 (data-independent acquisition, DIA) 的 LFQ 方法, 我们共鉴定出 574 个 c-Myc/Max 相互作用蛋白, 其中大多数此前尚未被报道。对该相互作用组进行基因本体 (GO) 分析显示, 其在 RNA 加工、染色质组织与重塑、蛋白-DNA 复合体组装以及核糖体生物发生等生物过程中显著富集。本研究提供了迄今为止关于 c-Myc/Max 介导转录调控相关蛋白互作网络最为系统且最新的图谱。该 m-IMAC 纯化平台具有流程简便、操作容易及性能稳定等优势, 是一种适用于高通量互作组分析的通用且高效的方法。

参考文献

1. Zhang, Y.; Han, Y.; Li, X.; Huang, M.; Hao, P.; Kang, J. W, J Med Chem 2025, 68, 5845-5855.
2. Liu, G.; Du, Y.; Fu, T.; Han, Y.; Pan, L.; Kang, J., J Chromatogr A 2022, 1676, 463273.
3. Liu, G.; Fu, T.; Han, Y.; Hu, S.; Zhang, X.; Zheng, M.; Hao, P.; Pan, L.; Kang, J. Anal Chem 2020, 92, 3913-3922.

I-54

智能色谱质谱技术驱动下的本草靶效物质发现

梁鑫淼*, 刘艳芳, 沈爱金

1 中国科学院大连化学物理研究所, 本草物质科学研究所, 大连, 116023

2 赣江中药创新中心, 南昌, 330100

通讯联系人 E-mail: liangxm@dicp.ac.cn

中药作为复杂的物质体系, 长期面临“物质基础不明确、作用机理不清晰”的挑战, 难以从科学层面阐明其多成分协同作用的内在规律, 无法回答中药有效性/安全性的科学原理, 这严重制约了中药的传承创新发展。全面系统地获取中药化合物, 并解析其物质组成结构信息, 是阐明中药科学原理、发现中药靶效物质的基本前提与基础。然而, 中药化学成分骨架丰富、结构多样、数量繁多、极性范围广且含量差异大, 同时还存在大量异构体, 这对其分离纯化及结构表征技术提出了巨大挑战。

本团队围绕中药化合物的分离纯化难题, 系统设计了高通量、高正交、智能化的多维多通道分离纯化预研装置, 自主研制了系列化新型高效色谱分离材料, 构建了五维正交色谱分离体系和柱系统选择方法学, 解决了色谱柱系统的智能选择、方法开发等多个难点问题, 完成了北豆根、葛根、补骨脂、苦地丁等多个饮片化合物的高通量获取。围绕物质组成解析强烈依赖于专家知识的深度及广度、十分耗时费力的问题, 结合本团队的中药化合物库资源和高分辨多级质谱, 我们构建了覆盖生物碱类、黄酮类、萜类等共 4000 余个不同类型化合物的多级质谱数据库, 发展了基于神经网络的质谱分类器, 实现中药化合物大类及亚类的智能分类, 并成功应用于未知成分类别的智能判定; 系统构建了不同骨架的规律知识库, 建立了基于 AI 算法的高通量智能切分及归属模型, 实现结构的智能解析。基于上述技术, 本团队从多个饮片发现了大量新化合物, 特别是新骨架化合物, 并成功发现了具备无成瘾镇痛、新机制抗炎症性肠病、抗非酒精性脂肪肝及特应性皮炎等活性的系列先导组分/化合物, 为中药新药研究及原创药物开发奠定了基础。

I-55

活体单细胞分析及生物医学应用研究

刘 震*

南京大学化学化工学院 生命分析化学全国重点实验室

通讯联系人 E-mail: zhenliu@nju.edu.cn

在活体层面和单细胞水平上的生物医学研究具有重要的科学意义和应用价值。单细胞基因组技术已经取得显著的进步,目前已进入广泛应用阶段,而单细胞蛋白质组和单细胞代谢组的研究越来越收到广泛的关注,是目前的研究热点。分析技术在单细胞分析中扮演着至关重要的作用,例如,单细胞蛋白质组和代谢组中处于核心地位的质谱技术。尽管已经有诸多单细胞分析技术不断涌现,但它们各有优缺点。总体而言,能胜任单细胞分辨的活细胞分析的技术还比较有限,特别是能分析活体单细胞内的稀有生物物种的单细胞技术仍很缺乏。报告人课题组已经发展出基于等离激元增强拉曼光谱的单细胞分析平台,不仅能胜任活体单细胞内的低拷贝数蛋白质和RNA(包括microRNA、mRNA和tRNA等)的检测,具有多元检测、超灵敏分析和核质分辨等优点,而且能对活细胞的迁移表型等进行连续的观察。利用该平台,我们不仅实现了对多个重要细胞内信号通路的研究,揭示了细胞信号通路如何调控细胞命运和迁移表型。更为重要的时,我们还发掘出与细胞脂质代谢及迁移相关的生物暗物质。本报告将介绍该活体单细胞分析技术的主要进展。

参考文献

1. J. Liu, D. Yin, S. Wang, H.-Y. Chen, Z. Liu. Probing Low-Copy Number Proteins in a Single Living Cell. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 13215–13218.
2. J. Liu, Y. Wen, H. He, H.-Y. Chen, Z. Liu. Probing cytoplasmic and nuclear microRNAs in single living cells via plasmonic affinity sandwich assay. *Chem. Sci.*, **2018**, 9, 7241 - 7246.
3. Y. Wen, J. Liu, H. He, S.S.C. Li, Z. Liu. Single-cell analysis of signaling proteins provides insights into proapoptotic properties of anticancer drugs. *Anal. Chem.*, **2020**, 92, 12498–12508.
4. J. Liu, H. He, D. Xie, Y. Wen, Z. Liu. Probing low-copy-number proteins in single living cells using single-cell plasmonic immunosandwich assays. *Nat. Protocol.*, **2021**, 16, 3522–3546.
5. D. Xie, Y. Wen, J. Chen, H. Lu, H. He, Z. Liu. Probing queuosine modifications of transfer RNA in single living cells via plasmonic affinity sandwich assay. *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 12828–12835.
6. Y. Wen, G. Ge, D. Xie, Z. Liu. Single living cell analysis decodes dynamical signaling patterns triggering different phenotypes of cell migration. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 6080–6089.
7. G. Ge, Y. Wen, P. Li, Z. Guo, Z. Liu. Single living cell analysis reveals the modulation of nucleocytoplasmic localization fluctuation of ABL1 on cell migration. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 17502–17512.
8. A. Zhang, W. Qu, P. Guan, Y. Li, Z. Liu. Single living cell “observation-analysis” integrated platform decodes cell migration plasticity orchestrated by nucleocytoplasmic STAT3. *Nano Lett.*, **2024**, 24, 8361–8368.
9. S. Sun, D. Xie, W. Guan, Q. Li, J. He, Y. Li, J. Chen, S. Gao, Z. Liu. Exploring Site-Specific N6-methyladenosine Modifications as New Cancer Biomarkers via SERS-based Single-cell Assay and Histopathological Imaging. *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 16822–16831.
10. H. He, A. Zhang, Z. Guo, Q. Li, S. Gao, W. Guan, Y. Li, J. Chen, S. Sun, J. He, Z. Liu. An artificial antibody-based toolbox accelerates validation of hidden microproteins encoded by the dark genome. *Adv. Sci.*, **2026**, 13, e15707 (<https://doi.org/10.1002/advs.202515707>).

I-56

近场智能显微成像与免标记定量生物分析

张鹏飞*, 陈义

1 北京分子科学国家研究中心, 中国科学院活体分析化学重点实验室, 中国科学院化学研究所, 北京, 100190

2 中国科学院大学, 北京, 101408

通讯联系人 E-mail: pfzhang@iccas.ac.cn

免标记分析方法能够在近生理条件下直接观测生物过程的天然动态, 同时无需外源标记, 简化了样品预处理流程, 为生物分析提供了更为便捷的技术途径。然而, 在单分子层面, 受限于天然信号微弱, 现有免标记手段多仅能获取静态快照, 难以定量分析分子动态行为; 在单细胞层面, 环境背景的波动制约了免标记检测的精度, 通常仅能反映群体平均特征, 难以实现单细胞时空动态特征的定量解析[1-4]。为突破上述瓶颈, 我们提出并研制了近场智能显微成像装置, 实现了免标记定量生物分析。硬件研制中, 基于前期发展的表面等离激元散射显微镜, 引入高效率表面波激发策略、高稳定性光学系统与高时空分辨散射显微成像模块, 实现了生物过程的高灵敏度、高稳定性免标记成像。进而深度融合人工智能技术, 提升了免标记信号的可解析性, 在单分子层面, 通过神经网络连续校正背景演变, 实现了免标记条件下单分子信号的稳定提取与长时间追踪; 在单细胞层面, 借助智能分割、多参数表征及虚拟染色技术, 有效区分了单细胞信号与背景波动, 将免标记成像拓展至单细胞定量分析。基于这一新装置, 我们研究了不同传感表面的单分子行为, 实现了对特异性和非特异性相互作用的免标记定量鉴别, 为高特异性免疫传感器的设计提供了分子依据。同时, 动态监测了多个活细胞对不同尺寸配体的响应过程, 免标记定量解析了其响应动力学, 并定量评估了细胞表面分子识别机制的相似性与异质性。上述研究表明, 近场智能显微成像装置为免标记生物分析提供了一种高信息容量、高分辨的新型研究工具, 显著增强了对单分子与单细胞动态行为的免标记观测与定量分析能力, 有力推动了免标记分析方法从定性描述向精确定量的演进, 为生命过程中分子机制的原位、动态、多尺度解析提供了新的特色研究工具。

致谢: 感谢国家自然科学基金资助项目(资助编号 22404164), 中国科学院高端光学显微成像技术联盟创新技术开发项目, 北京市自然科学基金资助项目(资助编号 2244084), 中国科学院战略性先导科技专项(资助编号 XDB0960000, XDB0960302)。

参考文献: (5 号宋体或 Times New Roman, 单倍行距)

- [1] Zhang, P.; Ma, G.; Dong, W.; Wan, Z.; Wang, S.; Tao, N. *Nat. Methods* 2020, 17: 1010-1017.
- [2] Zhang, P.; Zhou, L.; Wang, R.; Zhou, X.; Jiang, J.; Wan, Z.; Wang, S. *Nat. Commun.* 2022, 13: 2298.
- [3] Zhang, P.; Zhou, X.; Jiang, J.; Wan, Z.; Kolay, J.; Wang, R.; Ma, G.; Wan, Z.; Wang, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61: e202209469.
- [4] Li, L.; Zhang, J.; Huang, C.; Li, Y.; Liu, Z.; Xu, J.; Chen, Y.; Zhao, Y.; Zhang, P. *Anal. Chem.* 2025, 97: 3404.

I-57

超灵敏核酸表观遗传修饰分析及其生物学功能解析

赖玮毅¹, 梁子钰¹, 宋星睿², 汪海林^{1,2*}¹中国科学院生态环境研究中心, 北京市海淀区双清路 18 号, 100085²中国科学院大学, 北京市怀柔区雁栖湖东路 1 号, 101408

*Email: hlwang@reeces.ac.cn

核酸表观遗传修饰(如 DNA 5-甲基胞嘧啶、N6-甲基腺嘌呤等)的精准分析是揭示生命调控机制的关键。然而, 修饰碱基在哺乳动物基因组中往往具有丰度极低($< 10^{-6}$)、动态变化快且易受环境微生物污染干扰的特征, 这对分析方法的灵敏度与选择性提出了极大挑战。本研究建立了超灵敏质谱分析方法, 并基于高灵敏分析技术揭示表观遗传机制。

首先, 针对哺乳动物 DNA N6-甲基腺嘌呤(6mA)是否存在的问题, 我们建立了基于超高效液相色谱-串联质谱(UHPLC-MS/MS)的超灵敏分析平台。针对环境中细菌 DNA 污染严重的瓶颈, 首创了“在线-离线”二维色谱除杂策略, 有效去除了外源性污染的干扰, 检测限为阿摩尔(attomole)级别。基于该方法, 我们精确检出了哺乳动物基因组中痕量 6mA 的存在, 并结合代谢示踪技术揭示了其主要来源于聚合酶的非特异性掺入, 为解决该领域的长期争议提供了决定性的质谱证据。其次, 针对稀缺生物样本中 DNA 5-甲基胞嘧啶(5mC)的动态监测难题, 我们开发了一套集成的微量样品前处理策略。通过研制盐桥修饰磁性材料与工程化增强活性核酸酶, 实现了对目标核酸的原位捕集与高效酶解, 结合质谱离子化增强技术, 成功将检测通量降低至约 20 个细胞, 并基于该技术, 揭示了胚胎发育早期 5mC 的动态变化。综上, 本研究以色谱质谱技术为核心, 突破了复杂生物基质干扰与极微量样本分析的瓶颈, 不仅为表观遗传学提供了精准的测量工具, 也为早期胚胎发育等重大生命过程的机制研究提供了新视角。

关键词: 核酸修饰; UHPLC-MS/MS; 表观遗传

参考文献

- [1] Helm M. *Nat. Rev. Genet.* **2017**, **18**: 275.
- [2] Lai W.; Lyu C.; Wang H. *Anal. Chem.*, **2018**, **90**: 6859–6866.

I-58

人工智能驱动的体液多组学与临床表型整合分析 实现子宫内膜癌风险分层

乔亮*

复旦大学化学系

通讯联系人 E-mail: liang_qiao@fudan.edu.cn

子宫内膜癌发病率持续上升，但现有筛查手段（经阴道超声特异度低）与诊断金标准（有创活检）存在明显局限，且分子分型依赖昂贵耗时的基因测序。液体活检结合MALDI-TOF质谱技术（高通量、快速、低成本）为微创检测提供新可能，但面临数据处理复杂、噪声干扰及模型不可解释等瓶颈。

本研究系统开发了基于MALDI-TOF MS体液多组学、临床表型与人工智能的全流程内膜癌精准诊疗策略。建立了531例发现队列（内膜癌/良性病变）及204例独立外部验证队列，采集血浆、宫颈分泌液、宫腔分泌液分子指纹谱。创新提出等宽分箱方法解决峰对齐难题，开发分析物-算法匹配平台及SHAP可解释性分析。构建的EC-Screen筛查模型在外部验证中灵敏度96.65%、准确度70.45%；EC-Diagnosis辅助诊断模型灵敏度91.30%、准确度85.23%。针对p53abn和NSMP高危亚型，基于宫腔分泌液开发快速分型模型，将分型周期从数周压缩至数天。通过Streamlit部署为2M-EC网页APP，实现60分钟内完成从样本处理到风险报告输出。进一步开发了基于噪音分割策略的PepAI信号提取工具，显著增强了弱信号能力，内膜癌检测AUC从0.780提升至0.930，并鉴定出26个特异性蛋白（9个与前期方法一致）。该工具还识别出4个跨腹盆腔多癌种（肺癌、肝癌、结直肠癌、内膜癌）共享蛋白，为广谱筛查奠定基础。

综上，本研究突破了质谱数据处理与建模技术瓶颈，构建了从筛查、诊断到分型的全流程可解释AI模型及转化平台，为内膜癌微创精准诊疗及多癌种联合筛查提供了新范式。

I-59

变构调控的蛋白质界面识别与体液疾病标志物分离分析

李永明¹, 冯慧霞¹, 赵睿¹, 黄嫣嫣^{2,*}

1. 中国科学院化学研究所, 活体分析化学实验室

2. 北京理工大学, 化学与化工学院

通讯联系人 E-mail: yanyanhuang@bit.edu.cn

蛋白质作为生命活动的物质基础, 不仅是疾病诊疗的分子靶标, 也是亲和分离分析识别和测量的重要对象。围绕蛋白质识别吸附行为的界面调控, 针对传统基质材料作用单一、易引起蛋白失活的问题, 利用金属有机框架(MOF)的可设计性, 构建了具有活性可逆调控的酶-MOF复合识别体系。发展了基于溶剂调控的超薄Zr-MOF纳米片合成方法, 解析了纳米片厚度对蛋白活性的影响。发现并解析了数个原子厚度的界面对葡萄糖氧化酶二聚体相互作用网络的重塑效应。结合理论模拟和计算, 阐明了材料对酶的别构调控作用; 配位网络中的金属节点通过诱导蛋白二聚体构象扭转, 干扰酶催化活性中心的电子传递效率。在此基础上, 构建了具有白蛋白/葡萄糖双门控响应特征的识别界面, 实现了复杂生物环境中蛋白质信号的选择性识别与开关控制, 为发展界面活性可调可控的亲和分离材料提供了新思路。

开展了多肽亲和配基与基质材料的协同识别研究。利用多肽功能化聚合物微纳纤维模拟细胞外基质相互作用, 构建了具有膜蛋白和生物膜拓扑结构主动识别功能的界面材料, 建立了基于多肽分子识别与细胞形貌匹配的全血中肿瘤细胞直接分离方法, 在临床样本中实现了早期肝癌患者循环肿瘤细胞的识别、富集与定量跟踪分析。从中枢神经系统特征脂质组成及外泌体生物膜的脂质排布出发, 开展了磷脂酰丝氨酸(PS)靶向多肽的构建与相互作用筛选。解析了富含精氨酸多肽对PS的高亲和力、高选择性识别及其与PS分布密度相关的膜曲率识别响应能力。基于此, 构建了兼具生物膜脂质分子靶向与曲率响应双重识别能力的亲和分离材料(Exo-RTrap), 建立了临床血液等复杂体液样品中外泌体高选择性分离分析方法。通过特异性捕获患者血清中神经系统来源外泌体, Exo-RTrap实现了淀粉样蛋白、磷酸化tau蛋白等低丰度标志物的测定, 有效区分了健康人、轻度认知障碍和阿兹海默人群, 为疾病的早期筛查、诊疗新靶标的发现和分子机制研究提供方法基础。

参考文献:

1. Y. Li, R. Wei, H. Feng, L. Lei, J. Chen, H. Gao, R. Zhao, H.-Y. Hu, Y. Huang, *Adv. Mater.*, **2026**, e19828.
2. H. Gao, Z. He, J. Chen, H. Feng, R. Zhao, Y. Huang, *Anal. Chem.* **2025**, 97, 2351–2358.
3. J. Chen, H. Feng, C. Zhan, H. Gao, R. Zhao, D. Zhang, G. Zhang, Y. Huang, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 10782–10791.
4. H. Feng, H. Gao, J. Chen, R. Zhao, Y. Huang, *J. Chromatogr. A* **2025**, 1741, 465639.

感谢国家自然科学基金委项目(22374152, 22174145)的资助。

I-60

英克司兰国产设备合成纯化工艺及线性放大

郭黎明*, 张加栋

淮安大学

通讯联系人 E-mail: guolm2022@hyit.edu.cn

英克司兰^{1,2}等小核酸药物的固相合成对单步合成效率要求极高,单步效率存在微小波动(<1%),都会导致最终产物纯度与收率发生急剧且不可逆的恶化³。此外,在自动化控制过程中,阀门内公共流路试剂的残留易引发非预期聚合与副反应,直接影响产物纯度和合成效果。本研究通过从硬件角度优化公共流路死体积,并从工艺角度优化流路调用逻辑,有效降低了错配和 n-x 杂质,显著提升了单步合成效率。

在工艺验证与线性放大阶段,AS 链与 SS 链的小试单步合成效率均达到约 99%。经过从 12 ml (实验室级别)到 140 mm (中试放大量级)的规模放大,AS 链粗品纯度达到 79.8%,SS 链粗品纯度达到 81.3%,不仅实现了平稳过渡,更全面对齐了目前国际主流进口设备 78% - 84% 的行业基准。在后续纯化与后处理环节,采用 HB POR 15Q 填料进行分离,AS 与 SS 单链纯度分别提升至 95.0% 和 95.4%。最终,经退火温度优化及脱盐处理,双链 HPLC 检测纯度高达 98.7%,浓缩 13 倍体积后收率超过 96%。本套国产工艺路径成功实现了“抗衰减”的合成与线性放大,为小核酸药物大规模国产化生产积累了关键技术数据。

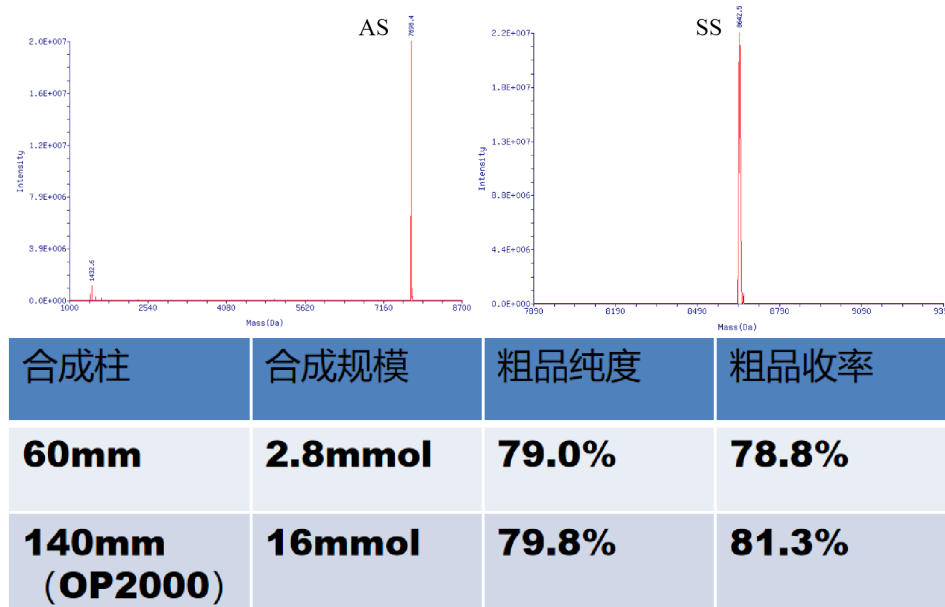


图1 英克斯兰 AS 及 SS 链质谱检测结果和 HPLC 检测粗品纯度汇总

参考文献:

1. Julia B., Kausik K. R., *Nat. Rev. Cardiol.*, **2023**, 20, 600-616.
2. Duran, E. K., Pradhan, A. D., *Clin. Chem.*, **2021**, 67, 183-196.
3. David E. P., Airy T., Ludivine L., et. al, *Org. Process Res. Dev.*, **2025**, 29, 2298-2309.

I-61

糖链精准分离分析

卿光焱,* 熊雨婷, 李闵闵, 张晓雨

中国科学院大连化学物理研究所、医学蛋白质组全国重点实验室

通讯联系人 E-mail: qinggy@dicp.ac.cn

糖链与核酸、蛋白并列为三大生命之链, 深度参与几乎所有重要生命活动。解析糖链结构并实现其精准靶向, 对于新型诊断试剂研发、靶向递送系统构建及创新药物创制, 具有重要的理论意义与应用价值。然而, 糖链结构高度复杂且微观异质性强, 目前天然来源的糖结合蛋白(如凝集素)、人造配体与糖链的亲合力多停留在微摩尔级, 难以满足实际需求; 而传统配体筛选技术在筛选糖链亲和肽时, 常陷入“低亲和力陷阱”, 效率低下, 结果可靠性严重不足。因此, 针对结构复杂、天然结合力弱的糖链靶点, 如何突破传统随机筛选的固有瓶颈, 高效获得具有纳摩尔级亲和力的特异性多肽, 已成为糖科学与生物医学交叉领域中亟待解决的关键科学问题。

针对上述问题, 报告人创新地提出二肽亲水指数规则, 发现由特定疏水氨基酸与亲水氨基酸的组合可实现最优的单糖区分效能, 并以此指导噬菌体展示肽库的定制化构建。经多轮迭代筛选, 成功获得对目标脂多糖具有超强亲和力的特异性多肽, 将糖链识别亲和力由文献报道的微摩尔级, 显著提升至亚纳摩尔级(0.8 nM)。基于亲和肽的优异识别能力, 进一步提出脂多糖精准分离材料设计理念: 创新发展油水乳液界面聚合方法, 首次制备出脂多糖印迹聚合物, 突破了传统分离材料在广谱性和吸附容量上的瓶颈; 同时构建脂多糖特异响应型聚合物, 实现对大肠杆菌脂多糖的高选择性捕获, 为脓毒症血液净化提供了高性能分离材料支撑。针对脂多糖结构解析的挑战, 利用前述糖-肽相互作用的研究基础, 精准改造气单胞菌溶素纳米孔的颈口微区, 将其对糖链的识别亲和力提升50倍, 并由此提出新颖的间歇堵塞识别策略, 显著提升了器件对糖链的分辨能力与检测灵敏度, 为脂多糖结构分析开辟了一条全新的路径(图1)。上述设计思路可进一步扩展至其他类型糖链研究, 为糖链精准分离分析提供了创新性研究范式。

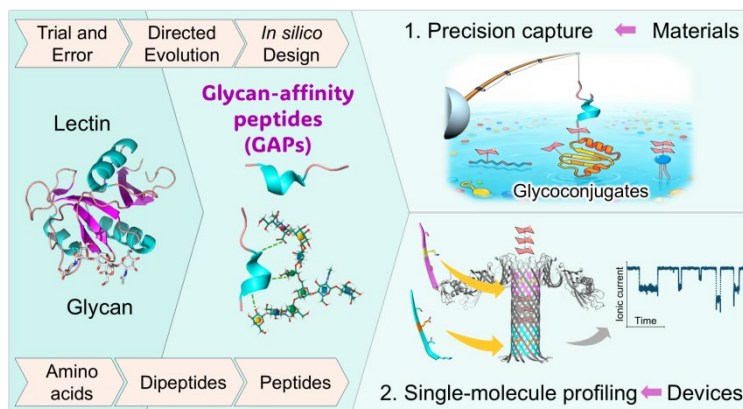


图 1. 研究思路图

参考文献:

1. J. Li, X. Zhao, M. Li, X. Liang,* G. Qing,* et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2026**, DOI: 10.1021/jacs.5c19634.
2. H. Wei, X. Li, Y. Xiong,* G. Qing,* et al. *Adv. Mater.*, **2026**, 38, e17135.

I-62

基于分子识别作用的分离材料设计及用于蛋白质翻译后修饰分析

仰俊伟, 赵燕青, 郑海娇, 贾琼* (五号宋体或 Times New Roman)

吉林大学化学学院, 长春, 130012

通讯联系人 E-mail: jiaqiong@jlu.edu.cn

蛋白质翻译后修饰在生命过程中发挥着重要作用。由于翻译后修饰蛋白质组的低丰度及复杂生物基质干扰, 修饰蛋白质组的样品制备是以质谱为基础的修饰蛋白质组学研究的关键。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)的富集分析, 基于分子识别作用设计了一系列分离材料, 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。

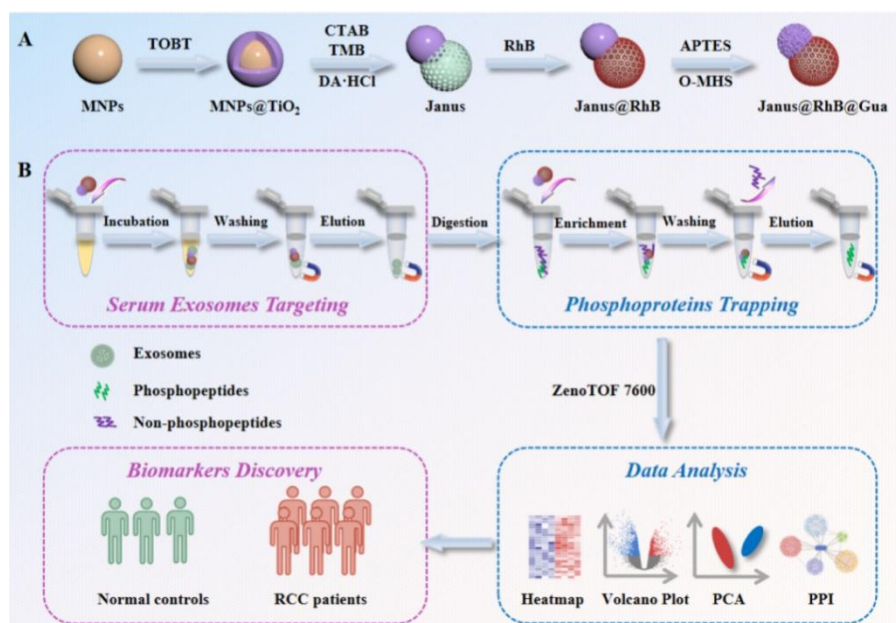


Fig. 1. (A) Synthetic process of Janus@RhB@Gua; (B) Workflow of sEV targeting and phosphoprotein trapping

参考文献:

1. J. Yang, H. Zheng, X. Lv, Z. Wang, W. Zhou, H. Chen, Q. Jia, *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 7262.
2. Y. Zhao, W. Wang, G. Cai, Q. Jia, *TrAC-Trends Anal. Chem.*, **2026**, 198, 118743.
3. G. Cai, H. Zhang, R. Zhu, Y. Zou, Q. Jia, *TrAC-Trends Anal. Chem.*, **2026**, 194, 118499.
4. Y. Zhao, H. Li, H. Zheng, Q. Jia, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 1135.
5. Y. Zhao, W. Xu, H. Zheng, Q. Jia, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 9043.

I-63

食药环多靶标高通量检测小型质谱仪器研制

徐伟^{1*}, 翟雁冰¹, 杜世宇¹, 杨宝坤¹¹北京理工大学, 北京市海淀区中关村南大街5号, 100081

*Email: weixu@bit.edu.cn

公共安全相关的危险生化物质种类繁多, 包括危险化学品, 毒剂, 生物毒素, 病毒微生物等, 这类物质的实时快速检测是保障公共安全的基础。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。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高通量。在公共安全应用方面, 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一体化的采样、预处理、电离试剂盒, 和基于 DIA (数据非依赖的二级质谱采集) 模式的分析方法, 系统可实现对化学毒剂、生物毒剂、微生物等的快速、全自动高通量检测。



Fig. 1 Miniature ion trap mass spectrometer

关键词: 小型质谱; 化学毒剂; 生物毒剂; 微生物

I-64

尺寸排阻-化学亲和双机制精准萃取外泌体的方法研究

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

外泌体 (EXOs) 是由细胞分泌的、粒径范围为 30 至 150 纳米的细胞外囊泡, 广泛存在于生物体液中, 如唾液、尿液和血浆。外泌体携带着母细胞的分子成分, 使其成为肿瘤早期诊断和无创预后评估的理想生物标志物资源。为了有效筛选生物标志物, 第一步是采用简单、高效且大规模的方法从复杂体液中分离外泌体。目前, EXO 主要有物理和化学两种提取方法。与物理方法比较, 化学提取方法具有提取效率高、外泌体纯度和回收率高或/和易于扩大规模的优点, 近年来备受关注。

化学提取是利用锚定在载体表面的配体来特异性识别 EXO 的膜或膜蛋白。就载体结构而言, 目前报道的吸附剂绝大多数是无孔或介孔结构。尽管有比表面积大, 但载体的孔径通常为几到几十纳米的小孔。因此, 大尺寸 EXOs 被限制进入孔内, 与无孔载体一样, 只能被外表面吸附, 从而降低了 EXOs 的有效接触面积和吸附效率。另一方面, 基于相同的原理, 外表面上的官能团也可以吸附大的细胞碎片和囊泡, 同时介孔可以让蛋白质自由进入并被吸附。因此, 采用无孔和介孔吸附剂限制了吸附效率和外泌体纯度。针对该问题, 我们设计了两种超大孔吸附剂, 研究了外泌体的富集性能。

(1) 开发了一种二硬脂酰磷脂乙醇胺官能化的三维 (3D) 单晶有序金属有机骨架 (MOF)。该材料具有超大孔结构, 增加了 EXO 的有效接触面积, 提高了吸附效率[1]; (2) 根据 EXO 的物理特性和膜成分, 开发了一种集尺寸排除和化学吸附于一体的蜂窝状超大孔吸附剂。该吸附剂允许 EXO 进入孔内并被功能团特异性吸附, 同时根据尺寸排阻效应去除大的干扰颗粒, 简化了化学提取前通常需要的多步离心操作[2-4]。用这两种吸附剂从癌症患者体液中提取外泌体, 并用蛋白组学方法分析, 发现了多种与癌症疾病相关的标志蛋白, 证实了外泌体分萃取方法的优越性。

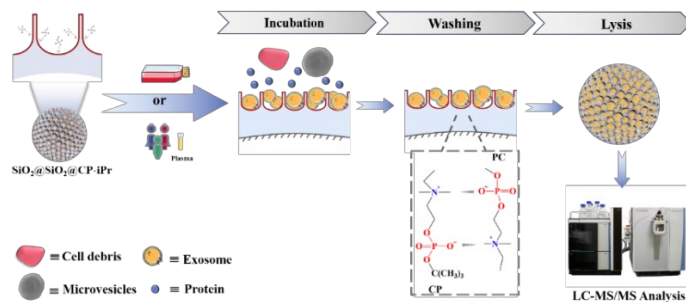


图 1 超大孔吸附剂的萃取原理

关键词: 超大孔吸附剂; 固相萃取; 外泌体; 蛋白组学

参考文献:

- [1] Fang Xu, Mengxi Chen, Yujie Lin, Shenyue Zhou, Jiayi Li, Yuanyuan Yu, Jiayu Xu, Wen Wu, Haiyang Zhang, **Yinmao Wei*** and Weipeng Wang. *Anal. Chem.* **2024**, 96, 17640–17648
- [2] Wenzhuo Dong, Mengxi Chen, Chenyang Wang, Mengqian Jia, Haiyang Zhang, Junjie Ou, **Yinmao Wei***. *Anal. Chem.* **2025**, 97(13), 7510–7517
- [3] Mengqian Jia, Chenyang Wang, Mengxi Chen, Wenzhuo Dong, Haiyang Zhang, Junjie Ou, **Yinmao Wei***. *Talanta* **2025**, 293:128098
- [4] Xiaohuan Tang, Xiaodie Yang, Mengxi Chen, Haiyang Zhang, Jiwei Shen, Chaozhan Wang, Junjie Ou, **Yinmao Wei***, *Anal. Chim. Acta* **1386** (2026) 345031

I-65

智能数学分离赋能复杂体系色谱质谱分析

吴海龙*

湖南大学化学生物传感与计量学国家重点实验室，湖南长沙，410082

通讯联系人 E-mail: hlwu@hnu.edu.cn

针对未知干扰共存复杂体系多组分直接快速同时精准定量分析这一难题，借助现代高阶色谱质谱仪器，系统深入开展相关数学分离及高效精准定性定量方法创新性基础研究，具有十分重要的理论意义和实用价值。将色谱联用技术与“智能数学分离”思想相结合即可形成“物理/化学分离+数学分离”的超强分离分析策略。与传统方法相比，该策略允许在重叠峰和未知干扰存在的情况下直接对感兴趣的多个分析物进行定性定量分析，因此可以大大简化物理及化学预处理步骤和色谱洗脱条件优化过程，节约分析时间，减少有机溶剂的消耗，有效提高所开发方法的通用性。本报告着重围绕“智能数学分离”这一独具特色的分析方法，系统深入地综述了相关理论及其在色谱质谱领域的应用。理论部分，系统介绍本实验室发展的多维数据解析方法学、高效多维校正算法、高维色谱数据预处理方法等；应用部分，重点介绍多种现代色谱联用技术（如HPLC-DAD、LC-MS等）结合“智能数学分离”方法在定量方面的基础应用研究，解决静态乃至动态复杂体系中感兴趣多目标分析物快速精准定量的难题，同时将“智能数学分离”用于非靶向代谢组学数据分析，从复杂重叠和干扰信号中提取有效信息。综上所述，“智能数学分离”策略已很好地实现了各种复杂体系中多组分的快速、同时、绿色定性定量分析，有望开发为新一代智能色谱仪的嵌入式软件，为复杂体系的色谱及质谱分析赋能。

参考文献：

1. H.L. Wu, T. Wang, R.Q. Yu, *Trends Anal. Chem.* **2020**, 130, 115954.
2. H.L. Wu, M. Shibukawa, K. Oguma, *J. Chemom.* **1998**, 12, 1-26.
3. H.L. Wu, Y. Li, R.Q. Yu, *J. Chemom.* **2014**, 28, 476-489.

I-66

核酸适体与亲和分离

刘祥军, 上官棣华*

中国科学院化学研究所

通讯联系人 E-mail: sgdh@iccas.ac.cn

核酸适体是一类可通过折叠形成特定空间构象,从而特异性识别靶标的单链核酸分子(DNA或RNA)。相较于传统亲和配体(如抗体),其具有高亲和力、高特异性、易化学修饰、理化稳定性强、无免疫原性且制备成本低等独特优势,在亲和分离领域展现出巨大应用潜力,已成为新型分子识别工具的研究热点。在此我们重点介绍核酸适体在亲和分离领域的研究进展、核心技术、应用场景及团队相关研究工作。

首先阐述核酸适体的分子特性与筛选原理,重点聚焦 SELEX 技术及新型优化策略,有效破解传统筛选过程中基质干扰、筛选效率低下、适配体亲和力不足等技术难题。随后总结核酸适体介导的亲和分离核心技术,包括适配体-纳米材料复合体系、微流控集成分离等,深入分析其在靶标高效富集、精准纯化中的作用机制。进一步探讨该技术在生物医学、食品安全、环境监测等领域的实践应用,如循环肿瘤细胞分离、真菌毒素与重金属离子富集、生物活性物质纯化等。同时分析当前该领域存在的主要挑战,如核酸适体在生物基质中稳定性较差、在复杂基质中特异性不足、规模化制备难度较大、临床与产业转化滞后等。最后简要介绍本团队近年来在核酸适体高效筛选、亲和分离体系构建及性能优化方面的相关研究工作。

相关介绍为核酸适体与亲和分离技术的深度融合提供理论与实践参考,助力推动该领域的技术创新与产业转化,为精准分离与检测领域的发展开辟新路径。

I-67

LC-HRMS 非靶向分析的质量控制与标准化实践

张庆合*, 高燕, 张燕, 李秀琴, 李康聪

中国计量科学研究院化学计量与分析科学研究所

国家市场监督管理总局重点实验室(营养与健康化学计量及应用)

通讯联系人 E-mail: qhzhang204@163.com

近年来,基于液相色谱-高分辨质谱(LC-HRMS)的非靶向分析技术因其在假定目标物情况下全面解析样本化学信息的能力,已成为食品安全风险筛查、环境污染物识别、代谢组学及法医毒物学等领域的关键科研工具。然而,从“非靶向”数据中挖掘出可靠、可重复且具有生物学或监管意义的差异信号,仍面临巨大挑战。数据质量的高度不可控性、不同实验室或批次间的信号漂移,以及缺乏统一的标准化流程,严重制约了该技术从科学研究向实际监管应用(如标准制定、日常监测)的转化进程。本报告聚焦于LC-HRMS非靶向分析全流程中的质量控制(QC)策略与标准化实践探索。我们将系统阐述构建一套稳健、可追溯的非靶向分析工作流程的核心要素。首先,针对前处理环节,探讨基于QC样本(Pooled QC)的稳定性监控与数据校正方法,以及如何通过同位素内标混合物评估基质效应与提取回收率。其次,在数据采集阶段,重点介绍利用QC样本进行色谱保留时间(RT)校正、质量轴校准以及信号强度归一化的实时监控技术,以确保大型序列数据采集的连续性与可靠性。最后,通过具体的应用案例,展示上述质控策略在提升非靶向筛查准确性方面的实际效果。1)在复杂基质中危害物质的精准识别;2)基于保留时间预测和高分辨质谱库的跨平台数据比对与标准化构建。研究作为未来建立基于LC-HRMS非靶向技术的标准方法提供技术支撑与数据基石。

参考文献:

1. M.A. Stravs, E.L. Schymanski, H.P. Singer, et. al, J. Mass Spectrom., 2013, 48 (12), 1289
2. S. Lennon, J. Chaker, E.J. Price, et. al, TrAC Trends Anal. Chem., 2024, 174, 117674
3. N. Caballero-Casero, L. Belova, P. Vervliet, et. al, TrAC Trends Anal. Chem., 2021, 136, 116201

I-68

复杂中药成分的高效液相色谱快速分析

许旭^{1*}, 赵冰怡¹, 冯江盈¹, 龚灿¹, 马美琳², 任兴发³, 高建平^{2,4}

1. 上海应用技术大学; 2. 上海中医药大学; 3. 奕诺微(上海)分离技术有限公司; 4. 上海中医药大学附属第七人民医院

通讯联系人 E-mail: xuxu3426@sina.com

对于需要检测弱吸收成分的中药样品, 在含量较低不便使用ELSD检测时, 常常需要用低波长紫外检测来改善HPLC检测灵敏度, 这时会得到存在很多干扰峰的复杂谱图。要获得满意的目标成分分离, 需要“瞻前顾后”的排除邻近杂质峰的干扰, 方法开发难度大, 所建立的梯度洗脱条件常常需要较长的分析时间。使用3 μm 粒径色谱柱建立常规HPLC实用分析方法, 既能有效缓解5 μm 柱分析速度慢的问题, 又可避免亚2 μm 的UHPLC柱的高成本及其对仪器的高要求。使用多台仪器同样可以实现批量样品快速分析。所建立的HPLC方法还可转换至UHPLC条件, 实现更快的速度。为复杂中药样品的质量控制提供一种兼顾分离效能、分析速度与设备普适性的实用分析策略。

以经典名方保元汤中组分的分离测定为例, 文献中使用高效液相色谱的多波长检测方法降低部分成分的分离难度, 多组分测定的梯度洗脱时间也多在 60 min 以上。使用 UHPLC 方法有助于加快速度, 但仍然需时较长且成本较高。

我们先用 3 μm 粒径色谱柱建立适用于常规 HPLC 仪器、覆盖全方药材的多组分含量测定方法。使用单一检测波长 203 nm, 在 48 min 内实现毛蕊异黄酮葡萄糖苷、甘草苷、人参皂苷 Rg1、肉桂酸和 6-姜酚与邻近峰的基线分离, 5 种成分的浓度在各自线性范围内线性关系良好, 方法学验证结果符合要求, 并应用于实际样品的含量测定。在此基础上, 建立双波长检测方法(203 nm、280 nm)可将分析时间缩短至 40 min。将 HPLC 单波长检测方法转换至 UHPLC 系统, 使用 1.8 μm 色谱柱的分析时间为 32 min, 可实现保元汤的快速分析。

还将讨论实验中遇到的相关问题和思考。

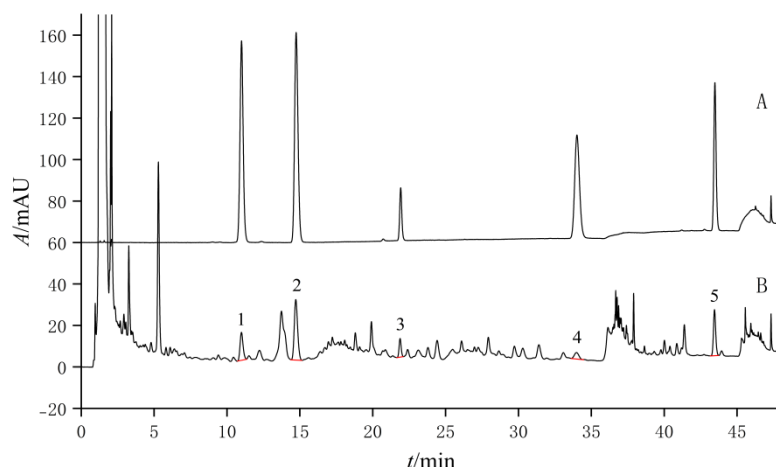


图1 混合对照品(A)和保元汤供试品溶液(B)的HPLC谱图

参考文献: 略

I-70

药靶鉴定方法 PELSA 的样品预处理及其自动化

叶明亮*, 薛连基, 王龔

中科院大连化学物理研究所, 大连市中山路 457 号, 邮编: 116023

*通讯联系人 E-mail: mingliang@dicp.ac.cn

蛋白质-配体相互作用是细胞功能与药物研发的核心基础, 配体免修饰的策略已成为在全蛋白质组层面研究这类相互作用的有力工具。其中, 以肽中心局部稳定性分析技术 (PELSA) 凭借高灵敏度脱颖而出。它通过单次酶切步骤即可检测配体诱导的蛋白局部稳定性变化, 实现结合区域的精确定位与亲和力计算。然而, 手动 PELSA 工作流程包含多个劳动密集型操作步骤, 易引入实验差异且通量受限, 制约了其大规模应用。为解决这些痛点, 我们开发了 AutoPELSA 自动化平台, 可将 PELSA 工作流程 (包括限制性蛋白酶解及后续肽段分离步骤) 全程自动化。该平台能在约 4 小时内完成 96 个样本的分析, 实现天然条件下的高通量检测。AutoPELSA 可可靠识别高亲和力配体 (如星形孢菌素, 鉴定出 114 个激酶靶点) 与低亲和力配体 (包括 α -酮戊二酸, 覆盖 30 个已知靶点) 的作用靶点。此外, 混合配体剂量响应策略还能在单次实验中同时测定多组配体-蛋白质相互作用区域的结合亲和力。总体而言, AutoPELSA 为全蛋白质组水平的配体-蛋白质相互作用鉴定及亲和力分析, 提供了一套可扩展、无需修饰的技术平台。

I-71

哺乳动物组织 RNA 结合蛋白规模化富集鉴定新方法研究

秦伟捷*, 刘彤, 焦雅洁

国家蛋白质科学中心 (北京)

通讯联系人 E-mail: aunp_dna@126.com

RNA 结合蛋白 (RBP) 是一类能与 RNA 相互作用的关键蛋白, 在多种生物学过程中发挥核心作用。RNA 结合蛋白的缺陷或与 RNA 异常互动与多种疾病的发生、发展密切相关, 使其成为极具潜力的治疗靶点。然而 RNA-蛋白相互作用高度动态且相互作用较弱, 因此对其开展规模化研究急需高效的交联和富集技术。目前已经报道了多种细胞系中规模化交联和富集方法, 但由于方法中普遍用到的短波长紫外光交联的组织穿透力有限, 导致难以用于哺乳动物组织/器官中 RBP 的规模化富集鉴定。针对此问题, 本研究提出一种名为 FTYc_UV 的新方法, 该方法结合甲醛与 254 nm 紫外光双交联、代谢标记及无金属巯基-炔点击反应, 可实现小鼠肝脏中 RNA 结合蛋白的大规模富集与鉴定。该方法首先利用甲醛对组织内粗 RNA-蛋白质复合物 (cRPC) 进行原位交联, 解决 254 nm 紫外光组织穿透性差的问题; 同时将代谢标记与无金属巯基-炔点击反应联用, 实现对 RNA 的无损标记。在组织裂解液中经 254 nm 紫外光完成 RNA 与 RNA 结合蛋白的特异性交联后, 再通过甲醛解交联去除非特异性蛋白, 最终实现小鼠肝脏中 RNA-蛋白质复合物的高效富集, 弥补了甲醛交联特异性不足的缺陷和紫外光组织穿透力低的局限。将 FTYc_UV 应用于小鼠肝脏研究, 成功鉴定出 1600 余种 RNA 结合蛋白, 覆盖约 75% 已报道的 RNA 结合蛋白; 此外还筛选得到 420 个候选 RNA 结合蛋白 (其中包含 151 个代谢酶)。上述结果证实了 FTYc_UV 方法的高灵敏度, 也表明该方法可为哺乳动物组织器官中全局解析 RNA-蛋白质相互作用提供有力支撑。

I-72

复杂生物体系中小分子高效分离与精准定量新方法

刘心昱*, 王宇婷, 管朋维, 许国旺*

中国科学院大连化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: liuxy2012@dicp.ac.cn, xugw@dicp.ac.cn

复杂体系中小分子的全景式分离分析仍是当前研究领域的核心与重点,尤其在代谢组学与暴露组学研究场景中,体液、组织等复杂基质中小分子的高效分离与精准定量,是全面解析内源性新陈代谢轮廓、外源性暴露物残留及二者的关联与扰动的基础。然而代谢组与暴露组小分子组成复杂、总数未知、结构多样、浓度分布范围宽,限制了传统色谱分析技术的分离效能与检测灵敏度。因此,全景式测量仍极具挑战,亟需通过基于色谱-质谱技术的方法学和策略创新,破解复杂体系的分析难题。

针对上述难点,为了全面表征人体内的小分子,构建了多模式、多维色谱体系,实现极性和非极性的内源性代谢物(含菌群相关代谢物)和外源性化学残留的高覆盖分析。其中基于一维色谱-单质谱双模式的内源代谢物与外源暴露物一体化同时分析方法,在单次分析中以 HRMS 模式获取高覆盖代谢组信息,同时以多重反应监测(MRM)模式精准定量暴露组,该方法单次进样实现超千个代谢物的高覆盖半定量及200种以上暴露物的精准定量,分析效率极大提高。进一步,为拓宽分离窗口满足极性跨度大的组分分离,搭建了双柱切换二维液相色谱-HRMS/TQMS双质谱(2DLC-dual MS)平行分析系统,可分离物质的极性(logP)从-8到15,外源化合物在MRM模式下的质谱信号响应强度与内源代谢物在HRMS模式下的类似,解决了浓度相差2-3个数量级的内源代谢物与外源暴露物在单一方法下分离度与灵敏度的问题,实现了代谢物和暴露物检测的高覆盖分离、高灵敏分析及大规模精准定量“三效合一”,获得最大化覆盖范围与灵敏度,是覆盖度最广的小分子分析技术,为代谢组-暴露组关联研究提供了全新工具,类似的研究未见报道。

将所建立的方法用于重大慢病的研究,揭示了血清中环境化学物质的暴露特征以及暴露-疾病风险关系,利用代谢组-暴露组关联研究策略,从代谢视角揭示了环境暴露致慢病风险的暴露效应及环境剂量长期暴露的毒性机制,为环境暴露与慢病风险研究提供了良好的科学依据。

I-73

细胞外囊泡的蛋白质组学研究和功能解析

肖华*

微生物代谢全国重点实验室，上海交通大学生命科学技术学院

通讯联系人 E-mail: huaxiao@sjtu.edu.cn

细胞外囊泡是细胞间信号通讯和物质交换转运的重要载体，具有重要的生物学功能和转化应用潜力。然而，由于细胞外囊泡存在的异质性和复杂性，给其分离分析和功能解析带来挑战。我们围绕细胞外囊泡的分离分析及其蛋白质组的生物学功能开展了研究，发展了体液来源细胞外囊泡及其亚群的分离新技术，开展了细胞、微生物、体液、组织等来源细胞外囊泡的蛋白质组学分析，为肺癌、肝癌等发现了新标志物，鉴定了用于肺癌转移和结直肠癌转移预测的细胞外囊泡标志物组合，通过磷酸化蛋白质组学分析，发现了肺癌相关的激酶并构建了调控网络，发现了细胞外囊泡转运功能受体的新功能，揭示了细胞外囊泡蛋白促进肺癌转移的信号通路。在此基础上，我们运用糖蛋白质组学、磷酸化蛋白质组学、基因编辑等技术，全面绘制了高转移肺癌细胞95D和低转移肺癌细胞95C来源细胞外囊泡的糖蛋白质组图谱，利用亲水相互作用色谱结合高分辨质谱对CDCP1进行了位点特异的完整糖肽分析，系统解析了其表面糖链的精细结构（包括9个糖基化位点、86种糖型）。基因敲除实验表明，CDCP1的缺失会显著抑制肺癌细胞的迁移能力。磷酸化蛋白质组学分析和验证实验表明，CDCP1缺失后，ErbB信号通路的标志物磷酸化蛋白SRC和JUN的水平显著下降。糖基化位点突变实验证实，N339和N386是CDCP1关键功能的决定位点。该研究系统揭示了跨膜糖蛋白CDCP1通过细胞外囊泡介导肺癌转移的关键作用，为抗转移研究和肺癌治疗提供了关键靶标。

参考文献：

1. L. Zhang, Y. Wu, S.T. Li, M. Guo, J.Q. Zhao, C.X. Cao, Y. Zhang, H. Xiao, *Journal of Extracellular Vesicles* **2025**, 14, e70128.
2. M.I. Khan, K.R. Chen, L. Zhang, S. Saud, Q. Zhang, H. Xiao, Z.S. Mu, C.X. Cao, *Chemical Engineering Journal*, **2025**, 508, 160850.
3. Z.Y. Wang, L.H. Wu, H.Y. Wang, Y. Zhang, H. Xiao, *Cellular and Molecular Life Sciences*, **2022**, 79:72.
4. Z. Qiao, Y. Zhang, M.L. Ge, S. Liu, X.T. Jiang, Z. Shang, H. Liu, C.X. Cao, H. Xiao, *Molecular & Cellular Proteomics*, **2019**, 18, 1619-1629.

I-74

疾病相关分子的体内原位双模成像

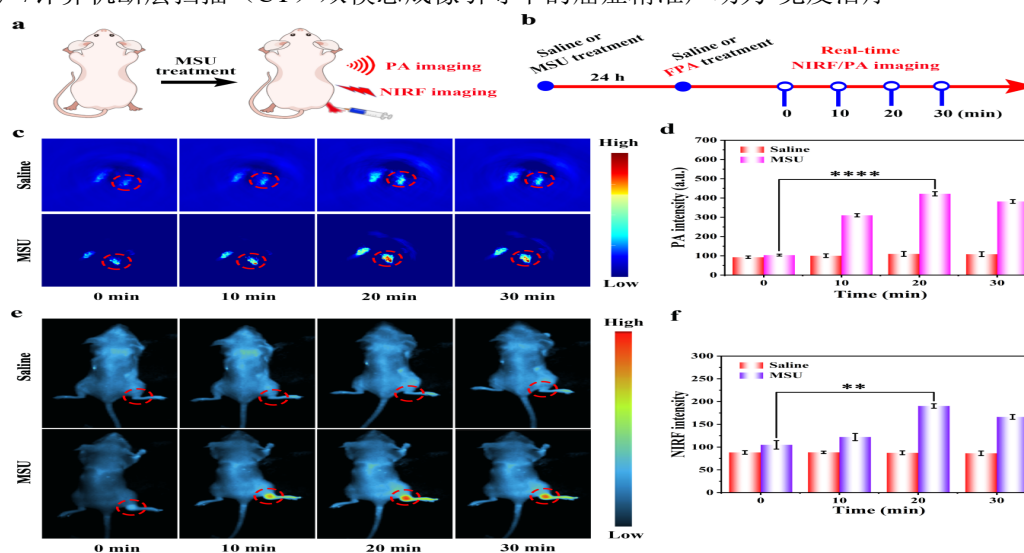
赵书林

广西师范大学

E-mail: zhaoshulin001@163.com

近红外荧光成像依赖于在近红外区被低能光激发的荧光分子，可最大程度减少散射与非特异性自发荧光。光声成像融合了光学成像的优异对比度与声波的高空间分辨率，二者均有利于生物组织的无损原位成像。光声成像不受组织内光散射与损耗的影响，因此能够实现更深的穿透深度与更高的空间分辨率。光声/荧光双模成像克服了单模态成像的固有局限性，实现优势互补，能够为重大疾病的精准诊断、准确定位、边界界定、治疗导航及疗效评估等提供多维度视角，在生物医学研究及疾病临床诊断中具有广阔应用前景。充分利用近红外荧光与光声二者的互补优势需要研发用于活体成像的近红外荧光/光声双模态探针。为此，本研究开发了一系列结合光声与近红外荧光的双模态活体成像方法。并应用于肝炎、关节炎、抑郁症和癌症等疾病的体内原位双模成像可视化诊断。具体内容包括如下七各方面；

1. 花菁 J-聚集体的结构调制及用于体内多路 NIR-II 光声/NIR-II 荧光双模生物成像
2. 硝酰基激活的光声/荧光双模成像探针用于肝炎和关节炎疾病的体内进展评价
3. 硫化氢激活的 NIR-II 荧光/NIR-I 光声双模双比例纳米探针用于肝炎的精确视觉诊断
4. 脑内近红外荧光/光声双模成像用于抑郁症的脑内原位可视化诊断和药物干预示踪
5. 细胞膜包裹的 Cu-WO_{3-x} -Hydro820 纳米反应器用于炎症肝组织的光声/荧光双模成像及催化治疗
6. 线粒体靶向光声/荧光双模态成像探针用于药物诱导肝损伤的可视化精确诊断
7. 光声/计算机断层扫描（CT）双模态成像引导下的癌症精准声动力-免疫治疗



光声/荧光双模成像模式对痛风性关节炎发病过程的监测

参考文献:

1. Lejuan Liao, Yidong Bin, Zongyi He, Liangliang Zhang, Yanli Luo, **Shulin Zhao***, and X. Chris Le*. *JACS Au* 2026, 6, 299-309.

2. Chaobang Zhang, Yinglong Wu, Fang Zeng, Yubei Wen, Jiawei Chen, Gaowei Deng, Liangliang Zhang, **Shulin Zhao***, Shuizhu Wu*, and Yanli Zhao*. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202406694.

I-75

多肽纳米通道的微流控筛选与亲和分离应用

王蔚芝 *

北京理工大学

通讯联系人 E-mail: wangwz@bit.edu.cn

神经损伤生理微环境中相关蛋白、生长因子及损伤响应分子种类繁多、组成复杂、动态变化显著,这对分子识别界面的选择性、抗干扰能力及信号转导效率提出了更高要求。针对上述问题,从多肽分子结构调控出发,依托微流控芯片筛选平台,设计、筛选获得了一系列兼具亲和识别与电信号传输能力的多肽纳米通道。该类多肽通过对称近末端引入可编程酸性侧链,精确调控 α -螺旋或 β -折叠构型中芳香残基的空间取向,诱导形成高度有序的电子传输通道,从而赋予体系良好的导电性能。与此同时,其表面识别界面可对神经生长相关蛋白实现特异性结合,展现出高选择性分子识别能力。进一步研究表明,该多肽纳米通道能够在复杂神经损伤微环境中促进分子识别与神经电生理信号分析的协同。基于此构筑的神经识别电子界面不仅可为神经损伤相关分子的高选择性分离与动态识别提供新策略,也为神经微环境中分子事件的精准测量与功能干预奠定了基础。

参考文献:

1. K. Han, J. Zhang, X. Miao, Y. Yu, L. Zhang, J. Zhao, X. Wang, Q. Wei, Y. Li, Y. Ke, B. Ma, W. Wang. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, 65: e18980.
2. Y. Yu, L. Zhang, B. Wang, J. Zhao, K. Han, Y. Qi, J. Li, X. Wang, B. Sun, J. Zhang, J. Cao, B. Ma, X. Peng, J. Cao, Y. Ke, W. Wang. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147: 11049.
3. L. Zhang, M. Wang, B. Wang, J. Zhao, B. Sun, Y. Yu, K. Han, X. Wang, J. Zhang, M. Wei, J. Deng, J. Li, M. Li, Y. Ke, H. Jiang, H. Yan, X. Chen, X. Peng, Y. Bai, W. Wang. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, 65: e21473.
4. J. Cao, Y. Yu, K. Han, B. Wang, B. Ma, L. Zhang, B. Sun, Y. Li, J. Li, Y. Ma, J. Zhi, J. Zhao, W. Wang. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64: e202507700.
5. L. Zhang, Z. Jiang, X. Yang, Y. Qian, M. Wang, S. Wu, L. Li, F. Jia, Z. Wang, Z. Hu, M. Zhao, X. Tang, G. Li, H. Shang, X. Chen, W. Wang. *Adv. Mater.* **2023**, 35: 2207330.

I-76

小细胞外囊泡表面生物标志物的高灵敏检测及其生物学功能

任廷举, 徐章润*

东北大学, 沈阳, 110819

□通讯联系人 E-mail: xuzr@mail.neu.edu.cn

小细胞外囊泡 (Small extracellular vesicles, sEVs) 在细胞通讯和疾病发展中具有重要作用, 但其成分复杂, 功能解析与临床应用仍面临挑战。最近, 我们针对sEVs表面蛋白、核酸及新型翻译后修饰, 开发了多种高灵敏检测方法, 并初步探讨了这些分子的功能调控机制。开发了一种基于酶促光学报告分子沉积的液体活检方法, 可将sEVs表面蛋白标志物的信号转换为光学报告分子的荧光信号, 实现sEVs高灵敏检测。我们在研究中发现sEVs携带糖基化RNA (glycoRNAs), 进而提出一种双重识别Förster共振能量转移 (Förster resonance energy transfer, FRET) 策略, 通过聚糖探针与RNA杂交探针之间的能量转移信号, 实现对sEVs表面glycoRNAs的高灵敏检测。利用该方法在7种癌细胞系中检测到5种glycoRNAs, 并在100例临床样本中实现癌症与非癌症的准确区分, 对特定癌症类型的分类准确率达89%。进一步研究观察到, glycoRNA可调控肿瘤来源sEVs跨越生物屏障的能力, 影响其在细胞外空间的转运行为。另外, 我们在多种癌细胞系及患者血清来源的sEVs表面蛋白中鉴定到新型翻译后修饰, 该修饰显著影响sEVs与受体细胞间的相互作用。我们进一步改进了FRET成像方法和单细胞glycoRNA检测技术, 开展了大规模临床队列验证, 评估了glycoRNA在卵巢癌早期诊断中的应用。这些研究证实了sEVs表面蛋白与核酸等新型生物标志物的诊断价值, 并为肿瘤精准治疗提供了潜在靶点。

参考文献:

1. T.J. Ren, Y.Z. Zhang, Y.X. Tong, Q. Zhang, T.H. Wang, Y. Wang, C.G. Yang, Z.R. Xu, *Nat. Commun.*, **2025**, 16, 3391.
2. T.J. Ren, Y.Z. Zhang, Q. Zhang, M.L. Tan, J.H. Gu, Y.X. Tong, Y. Wang, C.G. Yang, Z.R. Xu, *ACS Nano*, **2025**, 19, 18630–18643.

I-77

AI 驱动的空间质谱技术新突破

林树海

厦门大学生命科学学院，中国厦门

E-mail: shuhai@xmu.edu.cn

脂质分子结构复杂，异构体繁多且商业化标准品缺乏。液相质谱是脂质组学研究中的主要分析工具，但面临诸多瓶颈，包括二级质谱信息缺失、质谱图搜库速度慢、脂质数据库不完善、鉴定准确性有待提高等问题。有鉴于此，我们开发出 LipidIN 人工智能系统，成功构建了涵盖 1.68 亿条谱图信息的脂质分层谱库，覆盖了大部分可能的脂肪链组成与碳碳双键位置异构体。所开发的快速查询模块显著提升了检索效率，可在 1 秒内完成对全库数据超过万亿次的查询计算。创新性的脂质群智能模型有效降低假阳性率至 5.7%，并在多种物种中注释出 8,923 种脂质。在注释速度、准确率、覆盖度以及假阳性去除率等关键性能指标上，LipidIN 均显著优于现有脂质注释工具。我们进一步运用最优传输和深度学习方法，开发出质谱成像新算法，成功实现超分辨和稀疏采样的重构，以及质谱成像的精准预测。

参考文献：

- [1] Xu H, Jiang T, Lin Y, Zhang L, Yang H, Huang X, Mao R, Yang Z, Zeng C, Zhao S, Di L, Zhang W, Zeng J, Cai Z, **Lin SH**. LipidIN: a comprehensive repository for flash platform-independent annotation and reverse lipidomics. *Nat Commun*. 2025 May 16;16(1):4566.
- [2] Yao B, Yang L, Zhang C, Lv Y, Yang C, Di LJ, Luo J, **Lin SH**. DPM: A Deep Learning and Optimal Transport Framework for Cost-Effective Spatial Metabolomics. *Anal Chem*. 2026 Feb 3;98(4):3217-3225.

I-78

化学测量数据解析方法的变革：从化学计量学到人工智能

邵学广*, 刘旭阳, 付家顺, 谢有超, 郭琼

南开大学化学学院

E-mail: xshao@nankai.edu.cn

随着化学测量技术和分析仪器的的发展, 测量数据已从早期的单点数据逐步发展到一维、二维甚至高维、多模态数据, 测量数据解析方法也随之从传统的一元分析方法发展到多元分析方法和以多模态数据解析为主的人工智能方法。同时, 随着数据分析方法的发展, 对科学仪器性能要求也在发生变化, 新型的测量原理、仪器结构、测量数据的呈现形式等也正在发生着重大的变革。当前, 人工智能(AI)技术迅速发展, 在众多领域中得到广泛应用, 在化学测量数据解析领域中也得到了广泛研究和应用, 促进了测量仪器及数据解析策略和方法的进步与革新。

人工智能在化学测量数据解析中已展现了强大的能力, 在多模态复杂数据分析、成像与影像解析、多组学智能分析、结构与功能预测方面得到了较为广泛的研究与应用, 结合数据库和知识库的不断发展, 大语言模型也得到了应用, 智能体建设快速发展。同时, 感算一体式的智能分析仪器、多模态传感与自主决策系统也得到发展。在我们的工作中, 围绕近红外光谱定量模型的建立和高光谱成像分析, 建立了深度学习模型和自动建模智能体, 实现了基于大语言模型的自动信号处理和建模以及基于近红外漫反射高光谱成像的图像识别。

参考文献:

1. X. Liu, H. An, W. Cai, X. Shao. *TrAC: Trends Anal. Chem.*, **2024**, 172, 117612.
2. X. Liu, C. Duan, W. Cai, X. Shao. *Anal. Chem.*, **2024**, 96(52), 20354-20361.
3. J. Fu, X. Liu, W. Cai, H. Fu, X. Shao. *J. Chem. Infor. Model.*, **2025**, 65(15), 7844-7850.
4. Y. Xie, L. Han, W. Cai, X. Shao. *Spectrochimica Acta Part A.*, **2026**, 345, 126

I-80

连接键化学调控磺酸功能化共价有机框架室温制备用于水体污染物高效去除

夏炎*, 毕孟姿

南开大学化学学院

夏炎, E-mail: nkxiayan@nankai.edu.cn

近年来, 抗生素和微塑料等水体污染物对生态环境和人类健康造成了严重危害。共价有机框架材料 (COFs) 因具有规则的孔道和可设计的活性位点, 在环境修复领域展现出巨大的应用潜力。在 COFs 框架中引入磺酸基 ($-\text{SO}_3\text{H}$), 可赋予材料高密度的负电位点和良好的亲水性, 能通过静电吸引、氢键作用等方式, 提高对特定污染物的吸附能力。然而, 传统 COFs 通常在高温高压下合成, 特别是引入磺酸基等大体积官能团时, 常常会因空间位阻问题难以得到结晶产物。因此, 课题围绕连接键化学调控的思路, 提出了两种室温制备磺酸功能化 COFs 的方法, 并探究了其对常见水体污染物的去除性能。首先在室温下一步制备出一种新型磺酸功能化亚胺 COF ($\text{ImCOF-SO}_3\text{H}$), 并利用离子液体介导的氧化反应, 将亚胺键 ($-\text{C}=\text{N}-$) 转化为酰胺键 ($-\text{CO}-\text{NH}-$), 获得了结构更稳定的酰胺 COF ($\text{AmCOF-SO}_3\text{H}$)。AmCOF-SO₃H 对恩诺沙星、依诺沙星和诺氟沙星的吸附容量分别达到 614、615、579 mg g⁻¹, 较 ImCOF-SO₃H 提升了 2.5 倍以上。酰胺键的引入提供了额外的氢键位点, 与磺酸基团的静电吸附协同, 极大提高了吸附能力; 进一步基于动态亚胺交换的原理, 提出了一种结晶预组装的磺酸功能化 COFs 室温合成新思路。将醛单体与不同链长烷基胺预组装形成富含亚胺键的有序超分子模板, 再引导磺酸功能化二胺单体在此预组装结构上进行动态亚胺交换, 实现了从自支撑柔性气凝胶到高结晶 COFs-SO₃H 的可控制备。这种方法可拓展至多种醛单体和磺酸胺单体的组合, 为磺酸功能化 COFs 的室温通用合成提供了新思路。所得材料在微塑料吸附 (COF-SO₃H-C3) 和有机染料光催化降解 (COF-SO₃H-C18) 方面均表现出良好的应用潜力。

参考文献

1. Yang J, Kang F, Wang X, et al. Design strategies for improving the crystallinity of covalent organic frameworks and conjugated polymers: a review [J]. Materials Horizons, 2022, 9(1): 121-146.
2. Yang H, Tao S, He S, et al. An ethynyl-linked sp-carbon-conjugated covalent organic framework through Sonogashira cross-coupling reactions [J]. Journal of the American Chemical Society, 2025, 147(23): 19667-19674.
3. Luo B, Chen Y, Zhang Y, et al. Benzotrithiophene and triphenylamine based covalent organic frameworks as heterogeneous photocatalysts for benzimidazole synthesis [J]. Journal of Catalysis, 2021

I-81

整合计算机辅助药物设计与 UHPLC-ESI-HRMS 筛选抗阿尔茨海默病潜在多靶点天然产物药物

赵镇文*, 杨劲祺

中国科学院化学研究所

通讯联系人 E-mail: zhenwenzhao@iccas.ac.cn

阿尔茨海默病 (AD) 由多重病理通路驱动, 因此多靶点策略极具研究价值, 但高效实施仍面临挑战。本文建立了一套整合式研究流程: 将基于配体的人工智能虚拟筛选、柱后超高效液相色谱-电喷雾电离-高分辨质谱 (UHPLC-ESI-HRMS) 配体垂钓、分子动力学模拟、细胞实验以及网络药理学相结合, 从大型化合物库中快速筛选出具有理想活性特征天然产物骨架。以 $A\beta_{1-42}$ 和 tau 蛋白为模型靶点, 研究人员基于精选的 ChEMBL 数据库训练了 PyRMD 深度学习模型, 并用于筛选 ZINC15 库中 970 万种化合物。将筛选得到的活性化合物与天然产物数据库匹配, 结果显著富集二芳基庚烷类化合物, 并提示姜黄 (*Curcuma longa*) 是优先级最高的候选植物。随后对姜黄提取物开展 UHPLC-ESI-HRMS 配体垂钓实验, 证实 8 种姜黄素类化合物与 $A\beta_{1-42}$ 存在非共价结合。100 ns 分子动力学 (MD) 模拟预测, 化合物 C1-C4 与 $A\beta_{1-42}$ 纤维核心及 tau 配对螺旋纤维 (PHF) 核心均具有良好结合能力 (结合能 $\Delta G < -10$ kcal/mol)。在 SH-SY5Y 细胞中, 化合物 C1-C3 可剂量依赖性保护细胞免受 $A\beta_{1-42}$ 寡聚体诱导的毒性损伤, 并显著降低 $A\beta_{1-42}$ 纤维聚集及预制纤维体系中的硫黄素 T (ThT) 荧光强度。对 C1-C3 的网络药理学分析显示, 其可调控 107 个潜在 AD 相关靶点, 主要富集于 PI3K-Akt、EGFR、PD-1/PD-L1 通路。尽管 tau 蛋白结合仍为计算预测结果, 需进一步实验验证, 但本研究构建了一个可扩展、闭环式筛选平台, 能够从超大型化合物库中重新发现并实验验证具有多靶点潜力的已知天然活性骨架; 本文以姜黄素类化合物为例, 成功验证了该平台的可行性。

参考文献:

1. J Yang, Y Cao, S Shu, C Yue, Z Shen, Y Zhang, Z Zhao, *Results in Chemistry*, **2026**, 23, 103162.
2. J Yang, X Hu, Y Zhang, L Zhao, C Yue, Y Cao, Y Zhang, Z Zhao, *Chinese Chemical Letters*, **2025**, 36, 110128.

O-01

AIE-共轭聚合物的构建及在全氟烷基化合物检测中的应用

柳春强, 赵慈彬, 王悦, 郝旂, 高瑞霞*

西安交通大学化学学院, 西安, 710049

E-mail: ruixiagao@xjtu.edu.cn

全氟烷基类物质 (PFAS) 已对全球水体造成严重污染并引起了社会的高度关注, 开发快速、超灵敏的现场实时检测新方法迫在眉睫。共轭聚合物 (CPs) 因具备“分子导线”效应而成为极具潜力的荧光传感材料, 然而其传感性能也常因传统聚集猝灭发光而受限。本研究中, 基于受体工程策略设计两种聚集诱导发射 (AIE) 活性的 CPs 用于 PFAS 的痕量检测。探针在 AIE 和能量共振转移的协同作用下, 通过静电和疏水相互作用对 PFAS 显示出从青色到红色的比率响应, 并对全氟辛酸 (PFOA) 和全氟辛烷磺酸 (PFOS) 表现出 nM 级灵敏检测。同时, 构建荧光传感阵列并搭建基于智能手机的便携式检测设备及应用程序, 在线性判别分析算法辅助下实现了六种 PFAS 的区分检测。此外, 探针能够对实际水样中的 PFAS 进行实时、现场和半定量分析。因此, 本研究提出“AIE-CPs 荧光探针+智能终端”新模式, 为 PFAS 监测提供高灵敏、快捷、便携的新方案, 对保障水质安全和公共健康具有重要意义。

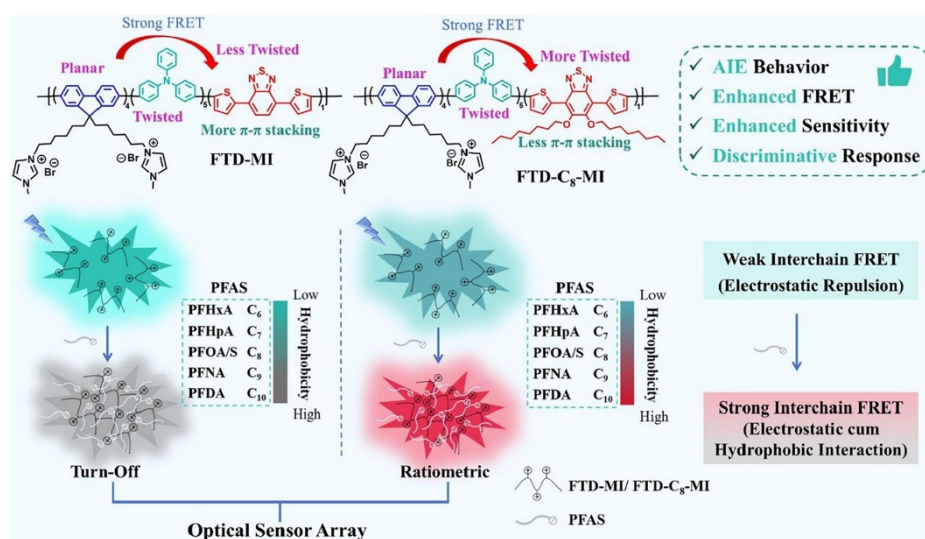


Fig. 1 Strategically designed FRET-integrated AIE-CPs for the rapid and ultrasensitive detection of PFAS

关键词: 聚集诱导能量共振转移; 共轭聚合物; 荧光检测; 全氟烷基类物质

参考文献

- [1] Zhao, C.; Hussain, S.; Hao, Y.; Gao, R.; et al. *Anal. Chem.* **2025**, *97*: 10027-10037.
- [2] Li, Z.; Hussain, S.; Hao, Y.; Gao, R.; et al. *Anal. Chem.* **2024**, *96*: 5150-5159.
- [3] Chen, X.; Hussain, S.; Gao, R.; Hao, Y.; et al. *Sci. Total Environ.* **2023**, *860*: 160467.

O-02

MOFs 衍生功能材料的构建及其在新污染物分析中的应用研究

许旭

辽宁大学化学学院

通讯联系人 E-mail: xuxu@lnu.edu.cn

随着工业化和城市化进程的加速,大量化学品被广泛应用于生产与生活中,导致废水、废气和废渣等污染物不断进入环境。其中,一些具有持久性的新污染物(Emerging Contaminants,简称 ECs)对环境和生态系统构成长期威胁。这些 ECs,包括药物与个人护理产品、全氟化合物、内分泌干扰物、抗生素和微塑料等,因其广泛来源、低浓度、高毒性和环境持久性而受到广泛关注。迫切需要发展和完善新污染物的分离与检测技术,以准确识别污染物种类和浓度,降低其对环境和公共健康的风险。

金属有机骨架(MOFs)是一类新型多孔材料,以其高比表面积和可调孔道结构在分析检测领域备受关注。MOFs 衍生功能材料继承了 MOFs 的结构优势,同时克服了稳定性问题,显著扩展了 MOFs 在分析检测领域的应用范围。课题组聚焦于 MOFs 及其衍生功能材料的精准合成与功能化,设计开发了多种新型 MOFs 衍生材料,如 ZIF-67 衍生的碳纳米管(CNTs)限域离子液体(ILs@CNTs)、ZIF-8 衍生的 Ni₃N 共掺杂碳材料(Ni-NCP),以及 Cu₂Co 双金属普鲁士蓝类似物中空纳米立方体(CuCo-PBANBs)等。结合高效液相色谱和比色法,构建了一体化平台,实现了环境、食品和生物样品中痕量新污染物(如苯脲类除草剂、氨基甲酸酯类农药、全氟辛酸磺酸等)的快速分离与检测(图1),为 MOFs 基材料在环境安全监测与现场分析中的应用提供了重要参考。

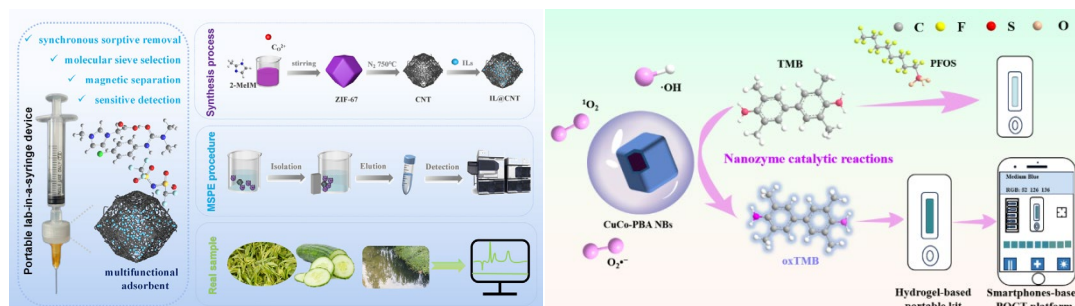


Fig. 1 Schematic diagram of analysis of benuron herbicides and perfluorooctane

参考文献:

1. X. Xu, Y.J. Liao, Y.H. Guo, Y. Jiang, L. Zhang, *J. Chromatogr. A*, **2026**, 1768, 466672
2. X.Y. Zhou, Y. Zhang, T.X. Sun, X. Xu, L. Zhang, *Anal. Chim. Acta*, **2026**, 1405, 345483
3. X. Xu, T.X. Sun, X.Y. Zhou, Z. Liu, L. Zhang, *Food Chem.*, **2025**, 464, 141686.
4. X. Xu, Y.H. Guo, Y.C. Liu, Z. Liu, L. Zhang, *Talanta*, **2025**, 285, 127396.
5. X. Xu, J. Gao, M. Ran, Y. Guo, D. Feng, L. Zhang, *Food Chem.*, **2024**, 431, 137149.
6. X. Xu, M. Ma, X. Zhou, X. Zhao, D. Feng, L. Zhang, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, 16, 15959-15969.

O-03

机器学习辅助分子印迹复合材料研制及在中药手性成分分离分析的研究

陈彦龙*, 苏金城, 杨娜, 廖琼峰*

广州中医药大学中药学院, 510006, 广东广州

通讯联系人 E-mail: chenyl8909@163.com

中药作为中国古代科学的瑰宝,其活性成分结构复杂、立体构型多样,是新药研发的重要资源。然而,从中药复杂体系中高效、高选择性地提取特定手性活性成分,仍面临传统分离方法选择性差、步骤繁琐、效率低等挑战。分子印迹聚合物虽具备特异性识别能力,但其柔性骨架易导致结构塌陷和传质缓慢,限制实际应用性能。针对以上问题,将分子印迹技术与共价有机框架材料相结合,并引入机器学习方法辅助材料理性设计。通过机器学习算法对多孔材料骨架结构、印迹位点分布与目标手性分子之间的关系进行建模与预测,指导合成了一系列具有刚性有序孔道和精准识别位点的分子印迹共价有机框架材料。该材料兼具高比表面积、优异稳定性与特异性识别能力,作为固相萃取吸附剂,成功实现了对中药中 10-DAB、二氢槲皮素、圣草酚等手性活性成分的高选择性富集,并建立了相应的高效液相分析方法。该方法不仅显著提升了目标化合物的纯度和回收率,且材料表现出良好的循环使用性能。机器学习辅助设计的分子印迹复合材料在中药复杂体系手性成分精准分离中的强大潜力,为中药活性成分的定向分离与质量控制提供了新策略。

参考文献:

1. N. Yang, X. Y. Zhang, J. Q. Ma, L. Q. Ouyang, Z. Y. Xie, P. Li, X. Lin, Q. F. Liao, and Y. L. Chen, *J. Chromatogr. A*, **2025**, 1756, 466072.
2. J. Q. Ma, N. Yang, X. Y. Zhang, M. Y. Xiao, C. Cao, Z. Y. Xie, P. Li, Q. F. Liao, and Y. L. Chen, *Food Chem.*, **2025**, 474, 142133.

O-04

基于多元纳米材料的比率荧光传感器构建及其分析应用

王敏, 夏之宁*

西南医科大学

通讯联系人 E-mail: wangmin0216@swmu.edu.cn

样品前处理是复杂样品分析中的关键环节, 传统方法繁琐耗时。比率荧光传感器凭借其内置自校准功能, 可有效消除环境与仪器干扰, 在简化或实现在线前处理的同时, 保证了高准确度与可靠性。然而, 传统比率探针仍存在合成重复性差、功能单一、难以同步实现分离富集与信号读出等不足。为此, 本研究基于多元纳米材料, 构建了三种新型比率荧光传感器, 并结合机器学习, 实现了药物与污染物的高灵敏、智能化分析。首先, 合成了兼具优异磁响应与双发射特性的新型磁性碳点, 以其为单一探针构建了比率荧光传感器。利用磁性碳点对不同分析物的差异化荧光响应, 实现了药物及生物样品中硝苯地平和盐酸阿霉素的灵敏检测, 并可通过磁分离有效消除基质干扰。其次, 制备了基于双金属 (Bi/Eu) 有机框架材料的比率荧光传感器, 结合TiO₂纳米材料, 实现了对全氟辛酸的灵敏识别与光催化降解。进一步, 将碳点、Fe₃O₄与双金属 (Zn/Co) 有机框架材料复合, 构建了兼具磁分离、比率荧光信号输出和强吸附性能的多元纳米探针, 成功用于莫西沙星、拉贝洛尔和芦丁的灵敏识别。针对上述传感器产生的多维度荧光响应数据, 引入机器学习模型进行特征提取与定量回归分析, 有效提升了复杂体系中多目标物的区分与预测能力。本研究展示了多元纳米材料与机器学习融合的比率荧光传感策略, 为复杂样品中药物与污染物的精准分析提供了新思路。

O-05

基于高亲和功能化石墨烯吸附剂的中药活性成分及农药残留分析

苑亚楠^{1,2}, 白立改^{1,2}, 闫宏远^{1,2*}¹ 河北省公共卫生安全重点实验室, 河北大学化学与材料科学学院, 保定, 071002² 药物化学与分子诊断教育部重点实验室, 河北大学药学院, 保定, 071002

通讯联系人 E-mail: yanhy@hbu.edu.cn

中药作为复杂的天然产物体系, 富含多种生物活性成分, 在疾病防治、健康促进及新药研发中价值显著, 同时其质量与安全性直接影响临床疗效与公众健康。在中药质量控制中, 一方面需要准确测定活性成分以确保药效稳定可控, 另一方面必须严格监控外源性污染物的残留, 特别是农药残留, 已成为影响中药安全性与品质评价的关键因素。由于中药基质复杂、共存干扰物多, 高效的前处理技术是实现仪器精准检测的前提。吸附剂及其配套前处理方法的选择, 直接决定了萃取效率、富集倍数及抗基质干扰能力, 进而影响整个中药分析流程的准确度、速度和重现性。针对当前中药样品前处理领域中吸附剂作用力单一、传质慢、选择性不足, 以及前处理操作繁琐、成本高等问题, 本研究致力于开发兼具高亲和作用力、快传质速率、高选择性的新型功能化吸附剂, 并开发操作简便、快速高效、节约低耗的小型化样品前处理技术, 构建适合中药复杂体系的高效快速分离分析方法。采用疏-烯点击化学、自由基聚合等策略, 在氧化石墨烯表面共价修饰低共熔溶剂分子印迹聚合物、亲水分子印迹树脂等功能材料, 设计制备了具有高选择性、快传质速率的分子印迹吸附剂, 发展了小型化管尖固相萃取法和离心辅助管尖基质固相分散法等样品前处理技术, 结合液相色谱检测, 实现了一枝黄花、黄芩等中药中抗肥胖、抗癌活性成分的高效精准检测; 采用再交联策略和席夫碱反应, 在氧化石墨烯表面接枝离子多孔有机聚合物、共价有机框架等高亲和功能材料, 设计合成了富含静电吸附位点与氟-氟亲和作用力的功能化吸附剂, 发展了快速摇床辅助分散滤头萃取法, 结合液相色谱检测, 实现了在复杂中药基质中农药多残留的快速、高效分析。本研究构建的高亲和功能化石墨烯吸附剂及配套前处理方法, 兼顾了中药活性成分分析与外源性农药残留检测的双重需求, 为中药质量与安全性评价提供了一种高效、可靠的新策略, 具有良好的推广应用前景。

参考文献:

1. R. Zhong, X. Wang, J. Li, L. Bai, Y. Yuan*, H. Yan, *Food Chem.*, **2025**, 496, 146693.
2. Y. Yuan, Y. Zhang, Z. Wang, H. Yan*, *Green Chem.*, **2024**, 26, 6787-6798.
3. Y. Yuan, Y. Wang, Y. Zhang, J. Yin, Y. Han, D. Han, H. Yan*, *J. Chromatogr. A*, **2024**, 1715, 464599.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (82373634)、河北省自然科学基金中医药创新发展联合基金培育项目 (H2025201056)、河北省教育厅青年拔尖人才项目 (BJ2025182); 河北大学创新团队计划项目 (IT2023A06); 河北省矿产资源与生态环境监测重点实验室开放课题项目 (HBMREEM202401) 资助

O-06

功能化共价有机骨架材料用于环境水体中持久性有机污染物的选择性富集

李爽^{1,*}, 马继平¹, 陈令新²¹ 青岛理工大学环境与市政工程学院, 青岛, 266520² 中国科学院烟台海岸带研究所, 烟台, 264003

(Email: lishuang@qut.edu.cn)

持久性有机污染物 (Persistent Organic Pollutants, POPs) 具有高毒性、持久性和长距离迁移性, 是目前最难降解的有机污染物, 对环境生态及人体健康构成严重威胁。近些年, 全氟及多氟烷基化合物 (Per- and polyfluoroalkyl substances, PFASs)、阻燃剂和芳基有机磷酸酯 (aryl-OPEs) 等新污染物被陆续纳入《斯德哥尔摩公约》。研究表明, 这些物质表现出更强的毒性, 在环境水体中污染水平甚至高于传统污染物。为实现此类污染物在复杂环境基质中的痕量检测与精准监测, 本研究设计并开发了一系列功能可调的共价有机框架 (COF) 基吸附材料。

我们通过设计合成了一种阳离子型COF修饰棉纤维吸附剂, 借助静电相互作用实现对六种新型PFASs的高效富集¹; 针对六溴环十二烷 (HBCDs), 研制了具有定向卤键识别位点的COF分离膜, 实现了对目标物的选择性捕获与高灵敏度检测²; 为进一步解决aryl-OPEs类污染物分子尺寸差异大的问题, 构建了具有分级孔结构的COF材料, 建立了基于分子尺寸的选择性吸附新方法³。所构建的方法展现出优异的分析性能: 目标物的方法检出限 (LODs) 介于0.01–0.34 ng/L之间, 定量限 (LOQs) 为0.04–1.11 ng/L; 方法精密度高, 日内与日间相对标准偏差 (RSDs) 分别低于12%和19%; 在实际水样加标实验中, 回收率处于59.4%–119.5%之间, 表明方法在复杂环境水体基质中具备良好的适用性与可靠性。

本研究发展的COF基功能吸附材料在复杂水环境中表现出优异的萃取效率、选择性和化学稳定性, 为水体中痕量持久性有机污染物的先进监测提供了可靠的新技术手段。

参考文献:

1. S. Li, Ji. Ma, J. Guan, et al., J. Hazard. Mater., 2023, 442: 130125.
2. J. Cheng, Ji. Ma, S. Li, et al., J. Hazard. Mater., 2023, 451: 131191.
3. J. Cheng, Ji. Ma, S. Li, et al., J. Hazard. Mater., 2024, 461: 132613.

O-07

微纳限域反应增敏光谱检测生物样品中痕量物质研究

夏凌, 董建伟, 杨佳妮, 唐丽, 李攻科*

中山大学化学学院, 广州, 邮编 510006

*E-mail: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

分析方法的选择性、灵敏度是实现复杂样品痕量检测的关键问题。微纳限域空间为样品制备和增敏检测提供了熵增受限的环境。本研究结合微流控技术, 以酶催化反应及聚合反应为模型分别探讨了微纳限域尺度对反应产物限域扩散体系及反应物限域扩散的影响。将微纳限域酶催化反应与荧光检测结合, 发展了微纳限域酶联免疫吸附测定技术, 检测灵敏度提高了三个数量级, 实现体液样品中循环肿瘤细胞MCF-7、癌胚抗原、前列腺特异性抗原、单核细胞分化抗原、白介素-6、白介素-8、干扰素- γ 、单核细胞趋化蛋白-1、基质金属蛋白-9等生物标志物的超灵敏检测。以微纳限域聚合反应可控制备隐性孔雀石绿和氯吡脲印迹膜, 印迹因子分别为18.9和10.5。发展了分子印迹-表面增强拉曼检测方法, 实现了鱼肉、果干中痕量隐性孔雀石绿、氯吡脲的快速检测。方法样品用量少、灵敏快速、准确可靠, 在生物样品痕量分析中有良好应用潜力。

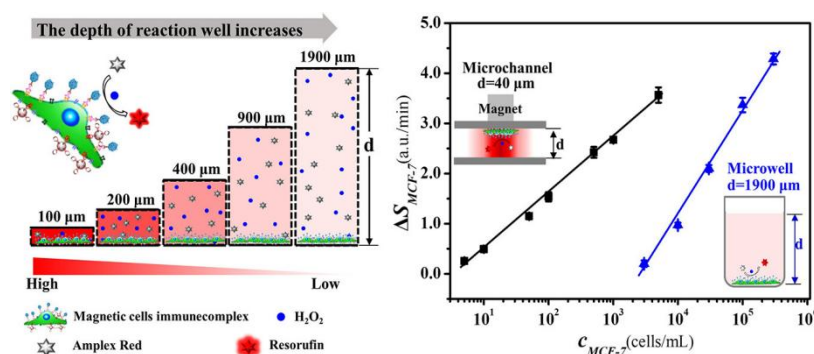


图1 微纳限域酶催化反应增敏荧光检测循环肿瘤细胞

关键词: 微纳限域; 增敏光谱; 快速检测; 生物样品; 痕量分析。

参考文献:

1. J. Dong, G. Li, L. Xia, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 16901-16909.
2. T. Li, J. Dong, L. Xia, G. Li, *Sensor. Actuat. B-Chem.*, **2025**, 441, 137987.
3. J. Yang, X. Xiao, L. Xia, G. Li, L. Shui, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 8273-8280.

*基金项目: 国家基金重点项目 (No.22134007)、国家基金面上项目 (No.22576240), 广东省自然科学基金项目 (No.2019B020211001)、广东省重点领域研发计划项目 (Nos.2025B0202120004 和 2026B0202150002)。

4. J. Yang, L. Xia, G. Li, *Sensor. Actuat. B-Chem.*, **2024**, 398, 134747.
5. J. Dong, G. Li, L. Xia, H. Li, *J. Chromatogr. A*, **2023**, 1699, 464021

O-08

电驱动样品处理-现场快检装置与方法研究

潘加亮*, 郑子凯, 黄诗荃, 张洁仪, 陈秋萍

南方医科大学公共卫生学院

通讯联系人 E-mail: panjialiag707@163.com

对于复杂基质样品, 如动物源性食品, 其现场快检的“速控步”在于耗时费力的样品前处理环节, 该环节误差来源多, 一直是制约检测速度、准确度、精密度的瓶颈问题。在该环节引入电场, 一方面通过加速传质提升样品处理效率, 另一方面可以通过调控各组份电迁移速度以提高选择性^[1-2], 有望解决上述复杂样品现场快检的痛点问题。有鉴于此, 本课题组发展了互溶液-液两相电萃取技术(NMLEE)^[2-5], 并与现场快检技术联用, 开展了一系列装置与方法的研究。研究表明, NMLEE与荧光碳量子点传感、胶体金免疫传感、表面增强拉曼光谱方法结合, 不但能有效去除蜂蜜、肉类、饲料等复杂基质对兽药残留检测的干扰, 还能加快样品处理过程, 满足食品现场快检要求(30 min/样品)。而且, NMLEE处理后的样品溶液能直接进样液质联用(LC-MS/MS)实现准确分析, 表明NMLEE同时兼容现场快筛和实验室确证方法, 这种“一石二鸟”的策略有望节约样品处理的次数, 从而提升食品安全监管的效率。进一步, 我们针对目前食品现场快检难以“多靶标”精准分析的难点, 搭建了NMLEE与便携质谱在线联用装置, 建立了肉类、乳制品中抗菌防腐剂的现场快速方法, 该方法集提取、净化、富集、快速检测于一体, 能实现13种季铵盐类抗菌剂或5种对羟基苯甲酸酯的同时检测, 相比目前常用的快检方法, 多残留的检测通量以及准确度和精密度, 均得到较大的提升。基于NMLEE的快检技术, 有望为食品安全分析提供快速灵敏、抗干扰能力强、操作简便、绿色经济的新工具。

参考文献:

1. P. Nanthasurasak, H.H. See, M. Zhang, R.M. Guijt, M.C. Breadmore*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, 58, 3790-3794.
2. J.H. Yuan, L. Ye, J.Y. Zhang, X.T. Du, A.D. Ma, J.L. Pan*, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 15663-15670
3. J.H. Yuan, H.J. Cao, X.T. Du, T.T. Chen, A.D. Ma*, J.L. Pan*, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 1458-1465
4. H.J. Cao, H.K. Zhang, H.Y. Yan, Q.Q. Liu, J.H. Yuan, L. Ye, X.D. Du, J. Du, A.D. Ma, J.L. Pan*, *Chem. Eng. J.*, **2024**, 487, 150423
5. L. Ye, J.B. Lin, S.R. Huang, X.F. Huang, J.Y. Zhang, Han Xu, R.F. Peng, J. Du*, J.L. Pan*, *Anal. Chem.*, **2026**, 98(6): 4629-4637

O-09

一种新型双配体合成的钼金属配合物用于血清高丰度蛋白的去除

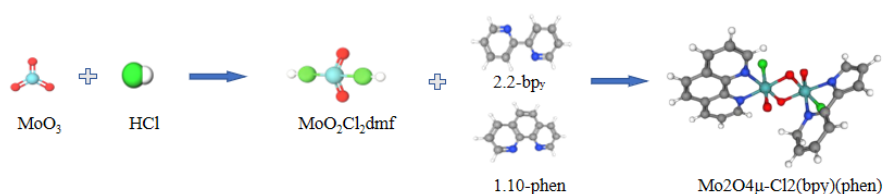
孙世威, 李汲, 陈晴*

沈阳医学院; 中国沈阳

E-mail:chenqing.0906@163.com

摘要: 金属配合物 (Metal Complex, MC) 作为一类由中心金属离子与有机配体通过配位键构成的功能分子, 凭借其可调控的分子结构^[1], 丰富的电子特性^[2], 可控的化学稳定性^[3]以及独特的生物活性^[4]在各个领域中展现出广泛应用, 特别是生物医学方面, 可以作为金属抗癌药物与 DNA 和相关蛋白结合并发挥作用^[5,6], 在本次研究工作中, 通过 $\text{MoO}_2\text{Cl}_2\text{dmf}$ 提供钼金属离子, 2,2'-联吡啶和 1,10-邻菲罗啉提供两个含氮有机配体, 通过水热法进行反应偶联, 制备出一种新型双配体钼金属配合物 $\text{Mo}_2\text{O}_4\mu\text{-Cl}_2(\text{bpy})(\text{phen})$, 并通过 XRD、FT-IR、Raman、XPS、TGA、SEM 和 EDS 表征证实了该金属配合物的结构。通过分子模拟分析发现, 该金属配合物的两个配体与高丰度蛋白 HSA、TRF、IgG 之间存在强疏水相互作用, 因此该配合物对人血清中的这三种高丰度蛋白表现出优异的吸附性能。基于此, 本研究建立了一种新型固相萃取技术, 可实现复杂血清样本中 HSA、TRF、IgG 的高效去除。在 pH 5.0 条件下, 使用 3 mg $\text{Mo}_2\text{O}_4\mu\text{-Cl}_2(\text{bpy})(\text{phen})$ 分别处理 100 $\mu\text{g/ml}$ 的 HSA、IgG、TRF 蛋白质标准品溶液, 吸附效率分别达到了 93.2%、91%、80%, 该材料可被 1% SDS 溶液洗脱回收。回收率分别为 94.1%、93.8%、83%。该材料通过 SDS-PAGE 验证, 为从人血清中去除高丰度蛋白提供了实际可行性。考虑到 MC 具有可调控的分子结构和化学稳定性, 通过合理设计中心金属离子和相应的有机配体, 有望成为生物分离领域中提供一种具有吸引力和高效的吸附剂, 能够从复杂的生物血清样本基质中去除高丰度蛋白, 还适用于对特定低丰度蛋白的富集。

关键词: 固相萃取; 金属配合物; 高丰度蛋白去除



Scheme1. Schematic illustration of the fabrication of the metal complex $\text{Mo}_2\text{O}_4\mu\text{-Cl}_2(\text{bpy})(\text{phen})$ via crystallization of MoO_3 with HCl in DMF and subsequent one-pot hydrothermal reaction with 2,2'-bpy and 1,10-phen ligands.

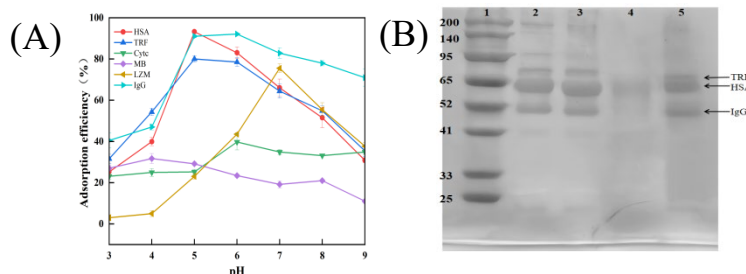


Figure1. (A) Effect of different pH adsorption conditions on the adsorption efficiency of $\text{MoO}_2\text{Cl}_2(\text{DMF})$ -2,2'-bpy-1,10-phen for HSA, TRF, CytC, MB, LZM and IgG. (B) SDS-PAGE assay results. Lane 1: represents the protein marker with molecular weights ranging from 6.5 to 200 kDa. Lane 2: The electrophoretogram of 300-fold diluted human healthy serum is shown for reference. Lane 3: Electrophoretic results of the supernatant obtained after elution with 1% SDS. Lane 4: Supernatant of 300-fold diluted human standard serum after treatment with $\text{MoO}_2\text{Cl}_2\text{dmf}$ -2,2bpy-1.10Phen. Lane 5: Protein standard solution of HSA, TRF and IgG at 100 $\mu\text{g mL}^{-1}$

- [1] Shiga T, Kumamaru R, Newton G N, et al. *Dalton Trans*, **2020**, **49(5)**: 1485-1491.
- [2] Karges J, Stokes R W, Cohen S M. *Trends Chem*, **2021**, **3(7)**: 523-534.
- [3] Jürgens S, Casini A. *Chimia*, **2017**, **71(3)**: 92-101.
- [4] Rauf U, Shabir G, Bukhari S, et al. *Molecules*, **2023**, **28(15)**: 5765.
- [5] Đukić M B, Jeremić M S, Filipović I P, et al. *J. Inorg. Biochem*, **2020**, **213**: 111256.
- [6] Zeng Z F, Huang Q P, Cai J H, et al. *Molecules*, **2021**, **26(13)**: 4028.

O-10

基于冷辅助固相微萃取技术绿色高灵敏分析环境介质中
有机污染物研究

张昕捷, 姚柯, 凌长智, 谌佳欣, 帅琴, 徐生瑞*

中国地质大学(武汉)材料与化学学院

通讯联系人 E-mail: xushengrui@cug.edu.cn

复杂基质中有机污染物的绿色无溶剂分析已成为环境分析领域的重要研究方向之一。冷辅助固相微萃取(CA-SPME)能够同时对样品进行加热和冷却萃取,弥补了常规顶空固相微萃取(HS-SPME)的不足,为挥发性及半挥发性有机物的无溶剂萃取提供了一种灵敏度高、操作便捷的技术途径。实现这一过程的关键在于 CA-SPME 装置的设计与构建。本研究针对现有装置结构复杂、制冷效果不理想、操控性差等问题,设计并搭建了一套基于热电制冷的新型 CA-SPME 装置。在考察装置内部传热传质特性的基础上,建立了 CA-SPME 与气相色谱-质谱联用(GC-MS)高灵敏分析环境介质中 PMMA 微/纳塑料(MNPs)的方法。结果显示,水体和土壤样品中 PMMA 的线性范围分别为 0.5–2000 μg 和 5–1000 μg ;水样的检出限和定量限分别为 0.014 μg 和 0.045 μg ,土壤样品为 0.28 μg 和 0.92 μg ,相对标准偏差(RSD)分别为 9.2%和 13.7%;实际样品加标回收率分别达 91.8%–98.9%(水样)和 75.6%–89.0%(土壤样品)。上述结果表明,所建方法可实现对环境介质中微/纳塑料的绿色高灵敏分析。

在土壤多环芳烃(PAHs)污染物的无溶剂萃取研究中,引入基质固相分散(MSPD)技术,利用研磨过程中固相分散剂与样品间的相互作用促进目标物的释放,提出了一种 MSPD/CA-SPME 联用的高效无溶剂萃取方法,用于土壤中 8 种 PAHs 的绿色分析。结果表明,以硅胶作为固相分散剂能有效增强 PAHs 分子从土壤基体中的解吸,进而提升萃取效率。该方法在 40–4000 ng g^{-1} 浓度范围内呈现良好的线性关系,RSD 为 8.1%–13.4%,检出限介于 4.19–8.54 ng g^{-1} 之间。此外,该方法可拓展应用于其他复杂基质样品中挥发性及半挥发性有机污染物的无溶剂分析。

本研究构建了基于 CA-SPME 技术萃取分析 PMMA 微/纳塑料和土壤中 PAHs 有机污染物的方法,为环境介质中多类型有机污染物的绿色高灵敏萃取分析提供了新途径。

参考文献:

1. S. Xu, H. Li, L. Xiao, M. Wang, S. Feng, J. Fan, J. Pawliszyn, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 2227-2235.
2. S. Xu, H. Li, L. Xiao, S. Feng, J. Fan, J. Pawliszyn, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 10772-10779.
3. H. Li, Y. Zhou, Y. Xiao, J. Fan, S. Feng, S. Xu, *Chin. J. Anal. Chem.*, **2022**, 50, 1289-1298.
4. S. Xu, H. Li, H. Wu, L. Xiao, P. Dong, S. Feng, J. Fan, *Anal. Chim. Acta*, **2020**, 1115, 7-15.
5. S. Xu, Q. Shuai, J. Pawliszyn, *Anal. Chem.*, **2016**, 88, 8936-8941.

O-11

超亲水印迹材料的制备及痕量肿瘤标志物精准萃取新方法

王明伟^{1,2}, 白立改², 闫宏远^{1,2*}¹ 河北省公共卫生安全重点实验室, 河北大学化学与材料科学学院, 保定, 071002² 药物化学与分子诊断教育部重点实验室, 河北大学药学院, 保定, 071002通讯联系人 E-mail: yanhy@hbu.edu.cn

肿瘤作为全球性的公共健康问题, 对人类的生命健康构成重大威胁。肿瘤的早期筛查与诊断对于提升肿瘤治愈率和提高患者生存率意义重大, 肿瘤标志物在生物样品中的浓度变化能够反映肿瘤的发生发展, 对其进行实时监测有利于肿瘤早期诊断, 因此开发生物样品中肿瘤标志物的快速准确检测方法对于保障人类健康意义重大。然而, 由于生物样品组成复杂, 其检测存在特异性弱和基质干扰严重等问题。因此亟需开发特异性好、抗基质干扰能力强、灵敏度高的方法用于肿瘤标志物准确检测。本研究以超亲水绿色印迹材料制备和提高生物样品中痕量肿瘤标志物高选择性萃取为中心, 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性好、吸附容量高和传质速率快的超亲水绿色表面印迹材料。制备过程简单温和, 易于操作。系统优化合成条件, 对制备的超亲水印迹材料的分子识别机理、微观形态和吸附机制进行系统研究, 阐明了其对肿瘤标志物的分子识别机制。以合成的材料为吸附剂, 开发了绿色低碳的新型样品前处理技术, 克服了生物样品组成复杂带来的内源性干扰问题。结合色谱、色谱-质谱等检测手段, 建立了复杂生物体系中肿瘤标志物的快速灵敏分析新方法, 其检测限为 1.1-7.9 ng/mL, 实现了血样、尿样等样品中痕量肿瘤标志物 5-羟吲哚乙酸、3-甲氧基-4-羟基扁桃酸和 4-甲氧基苯乙酸等的准确快速检测, 为肺癌和神经内分泌肿瘤等相关癌症的早期诊断提供了创新的研究思路。

参考文献:

1. M. Wang, L. Zhou, F. Qiao, H. Yan, *Green Chem.*, **2024**, 26, 2000–2010.
2. M. Wang, F. Qiao, H. Yan, *Green Chem.*, **2021**, 23, 5179–5188.
3. M. Wang, T. Tian, L. Bai, D. Han, H. Yan, *Chin. J. Chromatogr.*, **2026**, 44, 191–200.

国家自然科学基金项目 (82373634, 82073605); 河北省教育厅青年拔尖人才项目 (BJK2023027); 河北大学创新团队计划项目 (IT2023A06); 河北省矿产资源与生态环境监测重点实验室开放课题项目 (HBMREEM202401) 资助

O-12

多类农药的限域液膜萃取方法建立及应用

邹依霖^{1**}, 崔梦晴¹, 朴惠兰², 李东浩^{1*}¹ 延边大学理学院化学系, 长白山天然药物研究教育部重点实验室, 吉林省延吉市, 133000² 延边大学国有资产管理处分析测试中心, 吉林省延吉市, 133000

通讯联系人 E-mail: *dhli@ybu.edu.cn; **yilin@ybu.edu.cn.

全球农药施用毒性正处于上升通道, 与《生物多样性公约》第十五次缔约方大会 (COP15) 设定的 2030 年减半目标背道而驰。实现该目标不仅需要各国在政策层面做出承诺, 更需要在全球农药风险监测提供一个可操作、可比较、可验证的科学框架, 为各国制定国家行动方案提供量化依据。农药种类繁多, 按化学结构可分为有机磷、有机氯、拟除虫菊酯类、氨基甲酸酯类、有机杂环类农药等。常见的农药样品前处理技术如固相萃取存在萃取容量不足、液液萃取存在选用的有机溶剂与水溶性农药极性难以匹配的问题, 导致难以实现多类农药同时萃取。本研究选用乙醇作为限域流体, CNFs/CFs 与 CNFs/CμS 交错填充作为基底膜构建限域液膜萃取体系。该限域液膜利用限域乙醇排列形态, 依托氢键与范德华力, 实现多类农药的同时萃取, 可循环使用 5 次且具有良好的准确性与灵敏度。将液膜联合 HPLC-MS 与 GC-MS 方法, 在 20 ~ 500 μg L⁻¹ 加标浓度范围下, 成功应用于自来水中的痕量农药的检测, 加标回收率为 63.52 ~ 119.85% (RSD ≤ 11.07%), 在环境中痕量农药的监测具有应用潜力, 为食品农药检测与含量控制一体化提供技术支撑, 为推动食品质量安全领域技术提供了新思路。

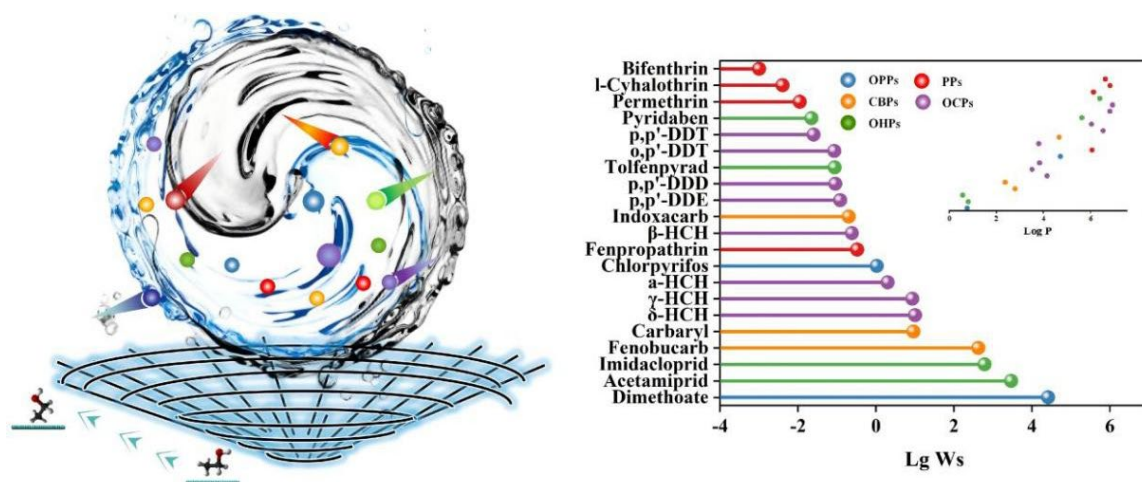


图 1. 多类农药的限域液膜萃取法

参考文献:

- J. Wolfram, D. Bussen, et al., *Science*, 2026, 391(6785):616-621.
- Y. Wei, Y. X. Pang, et al., *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.*, 2024, 64(31): 11468-11492.
- L. M. Halwatura, D. S. Aga, *Sci. Total Environ.*, 2023, 893(000): 11.
- Y. L. Zou, L. Y. Wang, et al., *Anal. Chem.*, 2021, 93(3): 1310-6.
- 致谢: 本项研究得到吉林省科技发展计划项目 (YDZJ202601ZYTS176), 国家自然科学基金项目 (No.22366037 和 22206208) 和广东省基础与应用基础研究基金项目 (2023A1515010108) 资助。

O-13

共价有机框架材料的合成及其在毛细管电色谱手性分离中的应用

吕文娟*, 杨敏, 陈永雷, 高婧睿, 马梅, 陈宏丽, 陈兴国

兰州大学

通讯联系人 E-mail: lvwenj@lzu.edu.cn

手性药物在医药、化工、农业、食品、环境等多个领域都具有重要应用, 不同的手性药物对映体之间经常会表现出显著不同甚至相反的生物活性和药效价值, 拆分得到具有单一活性的光学纯手性药物是提高手性药物生物活性、避免对映体杂质危害人体健康的有效手段。因此, 发展高效、准确、简单、快速、低成本的手性分离分析新方法和新技术, 对于人体健康、食品药品安全以及医药领域的发展都具有非常重要的意义。手性共价有机框架 (CCOFs) 是一类新型的多孔晶型聚合物, 具有材料结构和功能易调控、孔隙率高、传质阻力小、稳定性好等特点, 可对其分子结构和功能进行预测和调控。CCOFs 的以上特点能为其在开管毛细管电色谱 (OT-CEC) 手性分离方向的应用提供坚实基础。我们探讨了不同类型涂层材料以及涂层方式对 OT-CEC 分离包括手性分离的影响^[1], 并进一步将手性诱导类 CCOFs 作为手性固定相应用在 OT-CEC 手性分离领域, 深入研究了手性诱导类 CCOFs 的手性分离能力^[2]。

参考文献:

1. G Wang, W Lv, C Pan, H Chen, X Chen, *Chem. Commun.*, **2022**, 58, 403.
2. M Yang, W Lv, Y Chen, X Wu, J Gao, J Xiao, H Chen, X Chen, *J. Chromatogr. A*, **2024**, 1736, 465334.

O-14

面向毛细管电泳分离分析应用的固定化酶微反应器的设计制备

宋佳一*, 宋永凤, 张文康, 吕少娟, 贾文倩, 王亚琪, 苏萍, 杨屹*

(北京化工大学化学学院, 北京, 100029)

通讯联系人 E-mail: songjy@mail.buct.edu.cn, yangyi@mail.buct.edu.cn

毛细管电泳 (Capillary Electrophoresis, CE) 具有分析时间短、操作简单、分离效率高和样品消耗少等优点, 已逐步发展成为酶分析研究的一种强有力工具。CE 不仅可以实现酶分析中复杂样品的高效分离测定, 还可以基于酶工具实现微量样品的自动化分析。近年来, 基于将酶固定在毛细管内而制备的固定化酶微反应器 (Immobilized enzyme microreactor, IMER) 与 CE 结合, 已成为重要的酶分析方法, 在药物开发、临床诊断、酶动力学和抑制剂筛选、酶介导代谢途径分析和蛋白质组分析等领域得到极大发展。在 CE-IMER 酶分析研究过程中, 主要涉及到 IMER 制备和 CE 分离检测方法研究。相较于 CE 分离检测方法, IMER 的可控制备对于 CE-IMER 的分离分析研究格外重要。在 IMER 制备过程中, 如何发展新型酶固定化方法和策略制备高活性、高稳定性和高重复使用性的固定化酶对 IMER 的应用具有重要意义。本研究利用金属有机骨架材料 (MOFs), 基于内部封装法发展了一系列酶固定化方法用于制备高性能固定化酶^[1-6]。首先, 通过改变 MOFs 封装酶中金属离子和有机配体的配位情况制造缺陷, 合成了介孔结构可调的 MOFs 封装酶, 显著降低了酶促转化过程中的传质阻力, 从而提高了酶促活性。随后, 通过 MOFs 衍生的水滑石材料制备了具有中空胶囊结构的封装酶材料, 验证了中空胶囊结构对天然酶生物构象的保持作用, 从而显著提高了酶活性和稳定性。与此同时, 通过在酶表面引入聚阴离子改变酶表面微环境, 加速和促进了 MOFs 对酶的原位封装, 通过 MOFs 骨架对酶构象的限域效应, 显著提高了酶稳定性。基于以上高性能固定化酶微反应器, 成功应用于蛋白质分离分析、环境污染物和生物标志物分离分析等实际应用研究。

关键词: 毛细管电泳, 固定化酶微反应器, 固定化酶, 酶分析, 分离分析

参考文献:

- [1] Shuyi Zhang, Yijia Gan, Han Wang, Xingyi Qi, Ping Su, Jiayi Song*, Yi Yang* [J]. *Analytical Chemistry*, 2024, 96, 22, 9228-9235.
- [2] Han Wang, Ping Su, Xingyi Qi, Zhuo Mi, Shuo Wang, Wenkang Zhang, Jiayi Song*, Yi Yang* [J]. *Analytical Chemistry*, 2025, 97, 12, 6497-6508.
- [3] Wenkang Zhang, Xingyi Qi, Zhuo Mi, Han Wang, Shaojuan Lv, Yongfeng Song, Ping Su, Jiayi Song*, Yi Yang* [J]. *Analytical Chemistry*, 2025, 97, 13, 7456-7466.
- [4] Hanyue Song, Wenkang Zhang, Shuyi Zhang, Ying Liu, Ping Su, Jiayi Song*, Yi Yang* [J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2024, 16, 19, 24398-24409.
- [5] Han Wang, Ping Su, Wenyu Wei, Jiayi Song*, Yi Yang* [J]. *Small*, 2024, 20, 2401416.

- [6] Zixin Zhou, Wenting He, Hao Chao, Han Wang, Ping Su, Jiayi Song*, Yi Yang* [J]. *Analytical Chemistry*, 2022, 94, 18, 6833-6841.

O-15

毛细管电泳中低共熔溶剂的应用模式探索

张琪*, 丁思慧, 孟浩祥, 吴青, 黄赞豪

江苏大学药学院

通讯联系人 E-mail: zhangqi@ujs.edu.cn

低共熔溶剂 (deep eutectic solvent, DES) 是指由氢键受体 (如季铵盐类) 和氢键供体 (如羧酸、醇类) 以一定摩尔比例混合, 通过超分子氢键网络形成的一种共熔体系, 其凝固点显著低于各组分纯物质的熔点, 是继离子液体之后新一代具有广泛应用价值的功能性液体材料。近年来, 研究人员开始探索 DES 在毛细管电泳 (capillary electrophoresis, CE) 中的应用, 其中最早报道的策略是将“常规亲水性 DES 作为 CE 介质的添加剂”使用。在此基础上, 本课题组提出使用“疏水性 DES 作为 CE 假固定相”的应用模式, 有效避免了先前策略中亲水性 DES 在常规水相 CE 中的稳定性问题。然而在这种策略中, DES 和先前一样依然仅仅扮演着“附加组分”的角色 (在 CE 分离介质中的占比通常不超过 1%), 并没有真正意义上利用到 DES 的本征溶剂特性。基于此, 我们利用 DES“可设计合成”的特性, 提出了一种全新的、环境友好的应用策略, 即将 DES 直接作为 CE 分离介质使用, 实现了从“DES in CE”向“CE in DES”的应用模式转变。对三十余种芳香类化合物及多种结构类型手性化合物的分离研究表明, 在多种应用场景下, DES 作为分离介质在分离效率与绿色性能方面均优于传统水相或有机相体系, 展现出其作为新型、绿色 CE 分离介质的潜力。

参考文献

1. A. Li, S. Xue, Y. Xu, S. Ding, D. Wen, Q. Zhang, *Analytica Chimica Acta*, **2023**, 1239, 340693.
2. S. Ding, Y. Xu, S. Xue, A. Li, Q. Zhang, *J. Chromatogr. A*, **2024**, 1716, 464644.
3. S. Ding, Y. Xu, S. Xue, S. Liu, H. Meng, Q. Zhang, *Talanta*, **2024**, 275, 1261266.
4. H. Meng, S. Ding, S. Xue, S. Liu, Q. Wu, Q. Zhang, *Anal. Chim. Acta*, **2025**, 1336, 343467.
5. Q. Wu, Z. Huang, S. Xue, H. Meng, S. Liu, X. Wang, Q. Zhang, *Sep. and Purif. Technol.*, **2026** 390, 136933.

O-16

CE-MS/CE-LIF 新策略用于复杂样本多靶标分析

杨巾栏, 王安平, 杨丽

东北师范大学化学学院, 吉林长春人民大街 5268 号, 130024

电子邮箱: yangjl282@nenu.edu.cn; yangl330@nenu.edu.cn (通讯作者)

精准生物医药分析面临三大核心挑战: 一是生物样本中靶标物丰度极低(如循环 miRNA、外泌体标志物、多肽分子), 二是复杂基质干扰严重, 三是**多靶标同时检测时通量低、交叉干扰大**。传统离线前处理方法繁琐、样品损失大, 难以满足多靶标精准分析的需求^[1]。为突破上述瓶颈, 本研究发展了一系列基于多功能微柱在线集成的毛细管电泳-质谱/激光诱导荧光(CE-MS/CE-LIF)分析策略(图 1), 实现了从样品纯化、富集、信号转化到分离检测的全流程在线一体化, **成功实现了复杂样本中多种靶标的同时、灵敏、准确检测**。首先, 针对痕量 miRNA 的**多重检测**难题, 我们设计了 RNA-固定化毛细管微反应器(RNA-IMR), 集成于 CE-MS 系统进样端。借助 T7 Exo 介导的循环信号放大, 将靶标 miRNA 转化为富含 polyA/polyG 的输出 DNA, 经微反应器特异性识别与在线脱嘌呤反应, 释放腺嘌呤(A)和鸟嘌呤(G)作为**两种特征信号分子**, 实现 CE-MS **同时检测 miRNA-21 和 miRNA-155**^[2]。其次, 面向肝癌外泌体来源 miRNA 的检测, 我们将外泌体膜亲和捕获与等温核酸扩增(CHA 联合 ExoIII)集成于毛细管前端, 结合 CE-LIF 检测。利用 AFP 适配体特异性捕获肝癌外泌体, 原位释放并扩增 **miRNA-21、miRNA-223 和 miRNA-122** 三种靶标, 实现外泌体中**多靶标的同时灵敏检测**, 检测限达到 fM 级别。最后, 针对临床血清中甲状旁腺激素(PTH)及其拮抗片段 PTH 7-84 的**同时精确定量**, 我们制备了羧基功能化聚苯乙烯纳米球修饰的弱阳离子交换微固相萃取柱(WCX- μ SPE), 与 MS/MS 在线联用。10 μ L 血清样品经在线富集、纯化、洗脱后直接进行 MS/MS 分析, **同时测得 PTH 1-84 和 PTH 7-84**, 检测限分别低至 6.0 pg/mL 和 9.0 pg/mL, 无需使用抗体、操作全自动化^[3]。以上研究通过多功能微柱的设计与在线集成, 突破了传统生物医药分析中灵敏度不足、抗干扰能力差、样品处理繁琐等局限, **为复杂生物样本中多靶标精准诊断提供了通用性技术平台**。

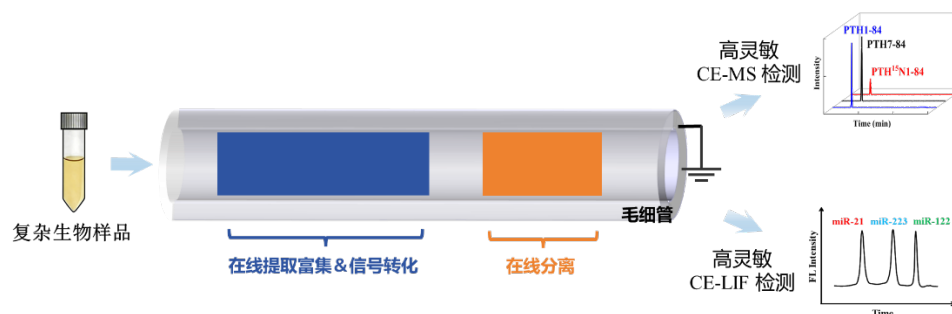


图 1. 基于多功能微柱在线集成的毛细管电泳-质谱/激光诱导荧光分析策略

参考文献:

- [1] Yu Huang, Fan Xia, et al., Chem. Soc. Rev., 2023, 52, 6270.
- [2] Anping Wang, Jinlan Yang*, Li Yang*, et al., Talanta, 2026, 296, 128441.
- [3] Anping Wang, Jinlan Yang, Li Yang*, et al., Anal. Chem. 2025, 97, 23165.

致谢: 作者感谢国家自然科学基金(22406022, 22074014)的资助

O-17

基于带电性质的外泌体分离方法研究

张凌怡*, 陈海红, 刘辰宇, 强子晴, 张维冰

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

通讯联系人 E-mail: zhanglingyi@ecust.edu.cn

细胞外囊泡 (EVs) 是一类由细胞主动分泌、具有脂质双层结构的膜性囊泡。根据其生物发生机制、物理尺寸以及表面蛋白标记物的不同, 细胞外囊泡主要分为三个亚群: 外泌体、微囊泡和凋亡小体。EVs 携带蛋白质、核酸、脂质等丰富的生物活性分子, 蕴含大量细胞生理病理相关的生物信息, 参与细胞间信号传导、物质转运等关键生理过程, 在疾病早期诊断、生物标志物筛选、靶向药物递送等领域展现出极高的研究价值与应用潜力^[1]。EVs 在天然生物样品中含量极低、尺寸微小, 且易与杂蛋白、脂质体、游离核酸等杂质共存^[2], 其富集与纯化已成为制约 EVs 下游生物学功能分析的核心瓶颈。

EVs 表面具有磷脂双分子层、富含唾液酸等带负电荷的基团, 使其具有特定的 Zeta 电位和等电点 (pI) ^[3]。基于电荷的分离技术正逐渐成为新的 EVs 分离纯化研究热点。我们基于细胞外囊泡表面带负电特征, 发展了电荷协同策略, 通过带负电和带正电纳米材料联用, 有效去除复杂样品中杂蛋白, 并同时实现细胞外囊泡富集。在此基础上, 我们进一步采用不同分子量的壳聚糖和聚乙烯亚胺修饰磁性纳米颗粒并进行季胺化, 通过电荷/体积排阻协同分离和纯化细胞外囊泡, 先采用带负电的 Fe₃O₄@PAA 去除大部分带正电荷杂蛋白, 再采用 Fe₃O₄@QCS 吸附剩余带负电蛋白与 EVs, 结合梯度洗脱去除杂蛋白, 实现 EVs 分离纯化与富集。构建的双磁性纳米材料串联分离策略成功去除牛奶中 97.97% 的蛋白, EVs 回收率为 87.81%。对人血浆中的 EVs 进行富集、洗脱、裂解以及酶解, 并进行质谱分析, 共鉴定出 616 个蛋白, 其中 484 种蛋白来源于 EVs。此外, 将鉴定出的蛋白质与 ExoCart 数据库中排名前 100 位的外泌体蛋白进行比较, 鉴定出 51 个蛋白质。

等电聚焦电泳作为一种重要的现代分析化学研究手段, 已经在生命科学、临床医学等领域发挥重要作用。采用玻璃纤维纸条作为等电聚焦载体, 强酸和强碱分别作为正、负电极液, 构建成 CAF-PAD-IEF 系统。通过 H⁺与 OH⁻在纸基流体通道上的逆向迁移自主地建立起均匀、稳定的 pH 梯度。将 CAF-PAD-IEF 方法应用于尿液中外泌体的分离分析, 在不同 pH 梯度条件下均可以实现外泌体的有效分离, 且高效聚焦在 pH 6.5 附近。将该方法应用于胎牛血清 (FBS) 和浓缩尿液中外泌体浓度的测定, 测得浓度与纳米颗粒跟踪分析 (NTA) 测定结果一致, 相对误差分别为 -4.17% 和 -8.70%。将固定化 pH 梯度毛细管等电聚焦 (IPG-CIEF) 柱进行重组, 形成具有一定 pH 值范围的分离空腔, 建立了一种新的蛋白质预富集系统-不连续固定化 pH 梯度毛细管等电聚焦 (DM-IPG-CIEF) 系统。DM-IPG-CIEF 系统成功用于高丰度蛋白质去除和低丰度蛋白质富集。将 DM-IPG-CIEF 系统用于 Hela 细胞外泌体蛋白质预分级和富集, 通过将等电点 3.0-9.0 范围内的外泌体蛋白质聚焦于分离空腔内, 收集并进行质谱鉴定得到 130 种外泌体蛋白质。

参考文献:

1. T. He, Y Wang, X. Li, C. Xiang, S. Tan, R. Fan, J. Tian, L. Pan, W. Wu, D. Li, J. xie, *Inte. J. Pharm.*, **2026**, 689, 126471.
2. J. B. Burton, N. J. Carruthers, P. M. Stemmer. *Mass Spectrom. Rev.*, **2021**, 42, 779-795.
3. J. Li, Y. Zhang, P.Y. Dong, G.M. Yang, S. Gurunathan, *Biomed. Pharmacother.*, **2023**, 65, 115087.

O-18

界面缺陷与配位结构协同调控的磁性碳材料在复杂食品样品中真菌毒素色谱分析中的应用

陈晖 *

化学与材料学院, 江西农业大学

通讯联系人 E-mail: chenhui@jxau.edu.cn

复杂环境与食品基质中痕量真菌毒素的精准检测, 是保障粮油安全与生态环境健康的重要技术需求。针对高盐、高脂及多组分共存体系对色谱分析选择性与稳定性的干扰问题, 本报告围绕“界面结构调控—选择性富集—色谱检测耦合”的主线, 构建了一类可精准调控缺陷与配位结构的磁性碳基材料, 并应用于磁性固相萃取 (MSPE)-高效液相色谱 (HPLC) 体系, 实现复杂样品中黄曲霉毒素 B1 (AFB1) 的高灵敏检测。

首先, 针对传统氮掺杂碳材料在高盐或离子干扰体系中选择性衰减的问题, 构建“牺牲位点工程 (sacrificial-site engineering)”调控策略。通过调节前驱体热转化过程中的配位环境与缺陷密度, 实现磁性碳材料表面活性位点的精准重构。该策略有效削弱无关离子对活性位点的竞争占据, 显著提升了材料在高离子强度体系中对黄曲霉毒素 B1 (AFB1) 的选择性识别能力, 并建立了 MSPE-HPLC 分析方法, 实现复杂油脂样品中 AFB1 的稳定检测, 体现出优异的抗基质干扰性能。

其次, 围绕“热脱氮诱导缺陷工程”构建高活性 Fe-N/C 结构, 通过调控碳骨架中缺陷类型与金属-氮配位结构的协同分布, 平衡吸附亲和力与油相适应性之间的内在矛盾。研究表明, 适度的结构缺陷可优化电子结构与 π - π 相互作用强度, 从而增强对 AFB1 的界面相互作用; 同时保留 Fe-N 活性位点以维持结构稳定性与可重复使用性能。基于该材料构建的 MSPE-HPLC 体系, 在食用油等复杂疏水基质中实现了高灵敏、可重复的定量分析。

基于上述材料构建的 MSPE-HPLC 方法, 在食用油等复杂样品中实现了稳定、可重复的定量分析, 体现出优异的选择性与基质耐受性。结合吸附动力学与界面电子结构分析, 系统阐明了缺陷结构、配位环境与选择性识别行为之间的内在关联机制, 为复杂基质样品中真菌毒素的高可靠检测提供了新的技术路径与理论支撑。

参考文献:

1. Yu, Q., Yan, W.-T., Liu, T., Zhou, J., Chen, H., Fan, G.-R., Wang, Z.-D., Lu, L.-M., Zhang, L., *Food Chem.* **2025**, 460: 145118.
2. J Zhou, H Chen*, Q Yu, X Peng, L Chen, Q Yu, S Zhang, T Liu, H Luo, L Lu*, C Huang*, Lan Zhang*, *Anal. Chem.* **2026**, 98, 4143-4153.

O-19

分散液液微萃取结合毛细管电泳测定海岸带氟喹诺酮类抗生素

李金花^{a,b,*}, 陈令新^b^a 绍兴文理学院高等研究院, 浙江绍兴, 312000^b 中国科学院烟台海岸带研究所, 山东烟台, 264003

通讯联系人 E-mail: jinhuali@usx.edu.cn, jhli@yic.ac.cn

海岸带作为海陆交互作用的关键区域, 承载着复杂的生态系统与高强度的人类活动[1]。随着工业化和城市化的快速发展, 抗生素等新污染物不断涌入海岸带, 具有浓度低、种类多、化学性质复杂等特点, 对海岸带生物多样性及人类健康构成严重威胁[2]。在海岸带水体、生物等基质中, 例如海水、海鲜和海洋生药 (MCD), 氟喹诺酮类 (FQs) 抗生素的残留量通常处于 (超) 痕量水平, 但危害大。因此, 迫切需要发展快速、经济、灵敏的检测方法测定 FQs 药物残留, 为评估其健康危害及消减控制等提供技术支撑和可靠数据。高效的样品制备结合色谱分离分析在污染物等的测定中应用广泛, 其中分散液液微萃取 (DLLME) [3] 结合毛细管电泳 (CE) [4] 备受青睐。

例如, 我们发展了涡旋辅助 DLLME 结合 CE-UV 法同时富集、分离并测定 MCDs、海水和海鲜中的 5 种 FQs[5]。通过单变量优化考察了影响 CE 分离效果和 DLLME 萃取效率的因素, 包括缓冲溶液、有机溶剂、分离电压、萃取剂、分散剂和样品溶液 pH 值等。在最佳条件下, 5 种 FQs 在 6 分钟内实现了基线分离。通过 6 种实际样品 (包括海马、文蛤和昆布 3 种 MCDs、海水以及对虾和鲳鱼两种海鲜) 评估了该方法的分析性能, 结果表明 0.1-5 或 0.01-5 $\mu\text{g/mL}$ 范围内线性良好。在 MCDs 中 5 种 FQs 的检测限 (LOD) 和定量限 (LOQ) 分别为 0.0022-0.0292 和 0.0066-0.0973 $\mu\text{g/mL}$, 在海水和海鲜中分别为 0.0009-0.0262 和 0.0029-0.0874 $\mu\text{g/mL}$ 。该方法的基质效应在海马、海水和对虾中进行了评估, 结果表明 DLLME 能够有效消除基质干扰。在上述 6 种海岸带实际样品测定中均获得满意的回收率。发展的 DLLME-CE 方法被证明操作简便、准确可靠、灵敏度高, 适用于复杂基质中多种抗生素残留的快速精准测定。此外, 我们也总结了基于分子印迹聚合物 (MIPs) 功能材料[6]的离线/在线固相萃取 (SPE) 技术即 MISPE 与 MIPs 作为固定相 (SPs) 在 CE 痕量分析中的研究进展[4]。我们也在开展 MISPE-CE 和 MIPs-SPs-CE 测定海岸带抗生素的研究。DLLME、MISPE 样品制备与 MIPs-SPs 色谱分离技术联用 CE 分离分析技术的持续快速发展, 有望在抗生素等新污染物治理行动和海岸带发展国家战略中扮演重要角色。

关键词: 抗生素; 毛细管电泳; 分散液液微萃取; 分子印迹; 海岸带

致谢: 山东省自然科学基金 (ZR2025MS159) 和国家自然科学基金 (22576231、22176210)

参考文献:

1. 骆永明, 韩广轩, 秦伟, 陈令新, 高志强. 海岸带生态环境与可持续管理, 2021, 北京: 科学出版社
2. 黄晶莹, 闫敬怡, 齐骥, 陈令新, 李金花. 色谱, 2025, 43, 841-856.
3. Y. Wang, J. Li, D. Sun, S. Yang, H. Liu, L. Chen, *J. Chromatogr. A*, 2021, 1658, 462615.
4. S. Peng, Y. Wen, Y. Ming, T. Huang, G. Xu, J. Yan, Z. Song, L. Chen, J. Li, *Talanta*, 2026, 297, 128549.
5. Y. Lou, G. Zhao, J. Yan, D. Sun, J. You, H. Xiao, G. Li, J. Li, *J. Oceanol. Limnol.*, 2026, 44, 137-149.
6. S. Huang, M. Wu, Y. Hu, J. Li, *TrAC Trends Anal. Chem.*, 2026, 199, 118805.

O-20

直接电晕荷电-电雾式检测器研制及其在天然产物分析中的应用

冯诗柔¹, 刘红意¹, 周聪², 刘玉军, 陈应庄^{1*}, 马铭, 陈波

1. 化学生物学及中药分析教育部重点实验室&植化单体开发与利用湖南省重点实验室, 湖南师范大学, 长沙, 410081, 中国; 2. 瓴峰仪器有限公司, 长沙, 中国

通讯联系人: E-mail: yingzhuangchen2020@hunnu.edu.cn

带电气溶胶检测器 (CAD) 因灵敏度高、稳定性好、响应一致性优, 是检测无紫外线吸收非挥发性化合物的理想工具, 在天然产物分析中意义重大。天然产物分子结构、理化特性及含量异质性强, 且含大量无 / 弱紫外吸收成分 (如皂苷、多糖等), 传统检测技术难以精准分析, CAD 为解决该问题提供了有效路径。气溶胶充电是 CAD 检测的核心, 传统等离子体碰撞充电模式 (PCCM) 存在样品稀释、气流返混等缺陷, 降低检测灵敏度与重复性, 无法满足天然产物低含量成分分析需求。本研究借鉴大气压化学电离技术, 创新开发直接电晕充电模式 (DCCM): 取消复杂充电气路, 以高压电晕针直接对干燥气溶胶荷电, 规避混合碰撞问题, 同时简化仪器结构、减少氮气消耗。以咖啡因为基础样品, 结合重楼提取物 (含重楼皂苷 VII)、山银花 (含灰毡毛忍冬皂苷)、三七皂苷及复方中药 (雪域景参胶囊等) 等天然产物样品, 对比 DCCM 与 PCCM 性能。结果显示: DCCM 灵敏度显著提升, 咖啡因最低检测浓度 0.4 ppm, 优于 PCCM 的 1.83 ppm; 测试物响应与浓度呈二次曲线, 相关系数超 0.99; 22 种分析物直接进样, 峰面积 RSD 小于 10%, 响应一致性更优; 天然产物梯度分析中, 重复性更佳 (峰面积 RSD 最低 0.032%), 能检出低含量无 / 弱紫外吸收成分。实际天然产物样品分析证实, DCCM-CAD 可精准实现天然产物中目标成分定性定量, 解决传统检测技术响应不足问题。综上, DCCM 模式提升了 CAD 性能、降低成本、简化结构, 为天然产物分析提供可靠支撑, 也为国产商业化通用型电雾式检测器研制奠定基础。

关键词: 直接电晕充电模式 (DCCM); 电雾式检测器 (CAD); 天然产物分析; 无 / 弱紫外吸收成分; 响应一致性; 等离子体碰撞充电模式 (PCCM)

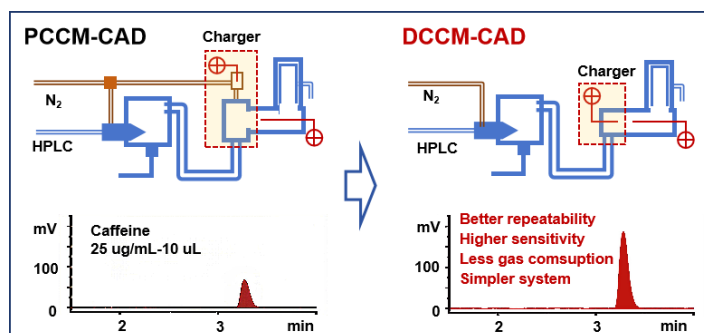


图 1. PCCM 和 DCCM 模式 CAD 原理与检测性能对比

参考文献:

1. S. Feng, H. Liu, C. Zhou, X. Xiong, Y. Chen, M. Ma, B. Chen, *Anal. Chem.* 2025, 97, 7079-7088.
2. R.W. Dixon, D.S. Peterson, *Anal. Chem.* 2002, 74, 2930-2937.
3. L.E. Magnusson, D.S. Risley, J.A. Koropchak, *J. Chromatogr. A* 2015, 1421, 68-81.

O-21

靶型电泳分离纯化索拉非尼介导肝细胞癌来源外泌体及其生物学功能分析

刘璐，金香子，张婷，杨鑫蕾，李东浩*

延边大学理学院化学系

通讯联系人 E-mail: liulu@ybu.edu.cn

外泌体是一类由细胞主动分泌、直径介于30-150 nm的双层膜结构的细胞外囊泡，广泛存在于血液、尿液、唾液等体液中，其携带的蛋白质、miRNA、脂质及代谢物等可通过胞吞与膜融合过程作用与受体细胞，介导细胞间通讯发挥生物学功能。在癌症研究中外泌体不仅作为液体活检的靶标，还参与肿瘤微环境重塑、血管新生、免疫逃逸及耐药传递等过程。靶向药物疗法是常用治疗癌症的手段之一，肿瘤细胞在靶向药物介导下释放的外泌体既可反映供体细胞的应激状态，也可调控受体细胞功能。但是在临床治疗过程中，靶向药介导下癌症外泌体的作用功能还尚不明确，是否通过靶向药物的外源性刺激改变肝癌细胞外泌体的内容物组成来介导细胞间信号传导？外泌体在靶向药物治疗中究竟扮演何种角色？能否通过药物干预实现肿瘤外泌体功能从“促癌”向“抑癌”转变，这些科学问题尚未被阐明。为了深入解析外泌体介导的细胞信号传导及其生物学功能的调控机制，本研究以肝癌靶向药物索拉非尼为外源性干预因子，以肝癌细胞来源外泌体为研究对象，以实验室自主研发的靶型电泳为技术手段，依托靶型多腔电泳、靶型凝胶电泳、靶型免疫印迹等技术系统开展索拉非尼介导的肝癌外泌体高纯度制备、高精度分离、高灵敏检测、多组学分析及生物学功能研究。

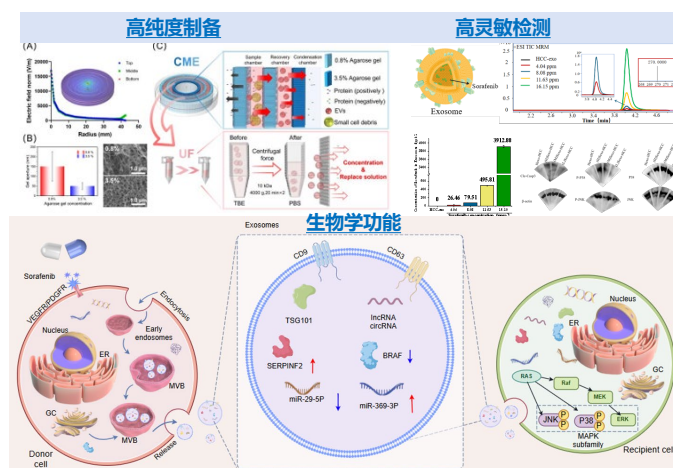


图 1. 靶型电泳在索拉非尼介导肝癌细胞分泌外泌体的高纯度制备、高灵敏检测及生物学功能研究。

参考文献:

7. L. Liu, D.H Li, et. al., *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 23, 8474-8482.
8. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 436–443.
9. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 28, 15472-15481.
10. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 1287: 342110.
11. L. Liu, D.H Li, et. al, *Anal. Chem.*, **2022**, 94 (23): 8474-8482.

12. L. Liu, D.H Li, et. al, *Talanta*, **2026**, 304, 129547.

本研究得到了国家自然科学基金（22304150）的资助。

O-22

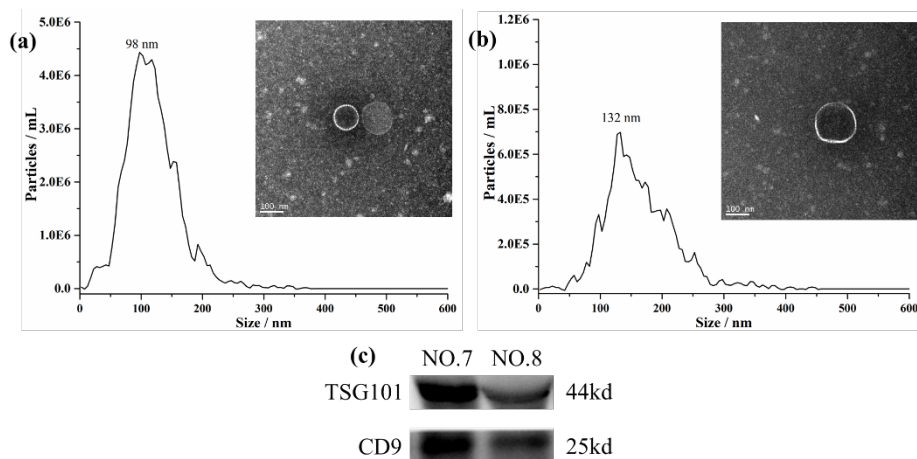
无载体两性电解质自由流等电聚焦电泳系统的构建及其对外泌体的可视化分离研究

张维冰*, 于浩然, 张磊

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上海 200237

通讯联系人 E-mail: weibingzhang@ecust.edu.cn

外泌体在临床诊断、疾病标志物筛选、靶向药物递送等方面有巨大的应用潜力。尿液外泌体已被证明可反映病例生物学, 但一些疾病相关的免疫复合物和蛋白复合物也具有与外泌体相似的生物物理学参数, 再加上实际样本中杂蛋白的干扰, 导致对外泌体实际来源的识别非常困难, 不利于外泌体溯源研究的开展。自由流电泳作为一种根据样品表面带电、密度、粒径等性质进行分离的重要手段, 具有价格低廉、易于操作、可连续分离制备、分离条件温和等优点, 结合外泌体的蛋白质组数据解析, 对发展外泌体分离、纯化方法和外泌体蛋白质分析方法并深入研究其功能具有重要意义。本文构建了一种基于多维自由流电泳装置的外泌体精细分级制备平台, 发展了稳定、高效的外泌体分离方法, 结合质谱对外泌体蛋白进行特征分析, 应用于外泌体溯源研究中。采用碳量子点标记得到可视化的外泌体, 在经过自由流电泳结合金属氧化物亲和色谱纯化构建的多维度外泌体精细分级制备平台后, 实现高浓度、尺寸较小的外泌体和低浓度、尺寸较大的外泌体的分离制备, 杂蛋白残余量分别为初始值的 1.77% 和 3.28%, 进一步利用 HPLC-MS 对外泌体蛋白质组学特征进行研究, 将自由流分离结果与质谱数据结合, 为构建外泌体溯源基础数据库奠定基础。



关键词: 外泌体; 自由流电泳; 分离富集; 质谱; 溯源.

参考文献

- J. Mondal, S. Pillarisetti, V. Junnuthula, M. Saha, S. R. Hwang, I. Park, Y. Lee, *J. Control. Release.*, **2023**, 353, 1127.
- X. Xiang, F. Guan, F. Jiao, H. Li, W. Zhang, Y. Zhang, W. Qin, *Anal. Methods.*, **2021**, 13, 1591.
- M. He, J. Crow, M. Roth, Y. Zeng, A. K. Godwin, *Lab. Chip.*, **2014**, 14, 3773.

O-23

基于滚环扩增-毛细管电泳高灵敏同时分析细胞中多种长链非编码 RNA

张会鸽, 俞睿, 陈兴国, 陈宏丽*

(兰州大学化学化工学院, 兰州, 730000)

通讯联系人 E-mail: hlchen@lzu.edu.cn

长链非编码 lncRNA (如 MALAT1, H19 和 HOTAIR 等) 参与染色质重塑、转录调控和表观遗传修饰等关键生物学过程。由于其异常表达在癌症的发生、进展和转移中发挥重要作用, 已逐渐成为肿瘤分子诊断和预后评估的重要生物标志物。与检测单一 lncRNA 相比, 同时检测多种 lncRNA 可为疾病的筛查诊断提供更有说服力的证据。鉴于此, 我们以四种 MALAT1、H19、HOTAIR 和 ABHD11-AS1 为模型标志物, 基于在同一体系中相同引物引发滚环扩增反应, 将四种 lncRNA 扩增转化为不同荧光标记的核酸链, 利用毛细管电泳-激光诱导荧光 (CE-LIF) 实现同时检测。该方法无需对毛细管内壁进行复杂修饰, 也无需额外标记信号探针改善分离效果, 已成功用于细胞提取物、肿瘤组织样品中 lncRNA 的检测, 为生物样品高通量分析提供了简单高效的检测平台。

关键词: 毛细管电泳、高通量检测、MALAT1、H19、HOTAIR、ABHD11-AS1

参考文献:

1. L.L. Wang, H.G. Zhang, W. Chen, H.L. Chen, J.X. Xiao, X.G. Chen. Recent advances in DNA glycosylase assays. *Chin. Chem. Lett.*, **2022**, 33, 3603-3612.
2. H.G. Zhang, W. Chen, Y.Y. Huang, M.F. Wu, H.L. Chen, X.Y. Liu, H.X. Zhang. Construction of template-free amplification system coupled with capillary electrophoresis for the simultaneous detection of three tumor-associated DNA repair enzymes, *Chin. Chem. Lett.*, **2024**, 12, 36, 110721.
3. Y.Y. Huang; F. Huang; Q.Q. Du; R. Yu; J.F. Lan; J.W. Luo; H.L. Chen; H.G. Zhang; Ligation-mediated circuit-driven cascade amplification with high utilization rate of template for lncRNA MALAT1 detection in cancer mice tissues, *Anal. Chim. Acta*, **2026**, 1383, 344912.

O-24

面向洞庭湖江豚 eDNA 监测的磁性萃取剂富集协同毛细管电动分离方法构建

丁雪沁^{1,*}, 唐欣¹, 薛羽彤², 王崇瑞³

¹ 上海大学, 上海市宝山区, 200444

² 上海通微分析技术有限公司, 上海市浦东新区, 201203

³ 湖南省农业科学院, 湖南省长沙市开福区, 410153

通讯联系人 E-mail: xueqingding@shu.edu.cn

江豚是长江流域珍稀水生哺乳动物, 在“长江十年禁渔”背景下, 对其种群动态进行有效监测是评估禁渔成效与生态恢复效果的关键环节。传统依靠捕捞或目视的监测方式不仅耗时费力, 更会对江豚生存造成干扰。环境DNA (eDNA) 技术通过检测水体中脱落的DNA痕迹实现物种鉴别, 具有灵敏度高、对生物无损伤等优势, 已成为水生生物监测的重要发展方向。然而, 当前eDNA检测技术在实际水样应用中面临DNA含量极低、背景干扰复杂、提取效率不稳定等瓶颈, 亟需发展高效、选择性好的前处理与高灵敏分离分析新方法。

本研究针对洞庭湖水体特性及江豚eDNA检测需求, 构建高选择性富集与高效分离检测一体化的新方法。首先, 设计并合成一系列磁性离子液体或磁性低共熔溶剂, 通过系统表征其物化性质, 并研究其与DNA分子之间的相互作用, 建立磁性液液萃取方法, 通过优化萃取条件, 实现从复杂洞庭湖水样中对痕量eDNA的高效、选择性富集。随后, 采用自制筛分凝胶作为毛细管电泳 (CE) 分离介质, 建立毛细管凝胶电泳分离方法, 依据DNA片段长度对富集后的eDNA进行高分辨率分离检测, 实现江豚eDNA片段的鉴定。本研究发展的方法将磁性溶剂萃取的选择性富集能力与毛细管凝胶电泳的高效分离能力相结合, 为洞庭湖等开阔水域珍稀水生生物的eDNA监测提供一种灵敏度高、选择性好、且环境友好的分析技术方案, 为长江禁渔生态效果评估与江豚种群保护研究提供有力的技术支撑。

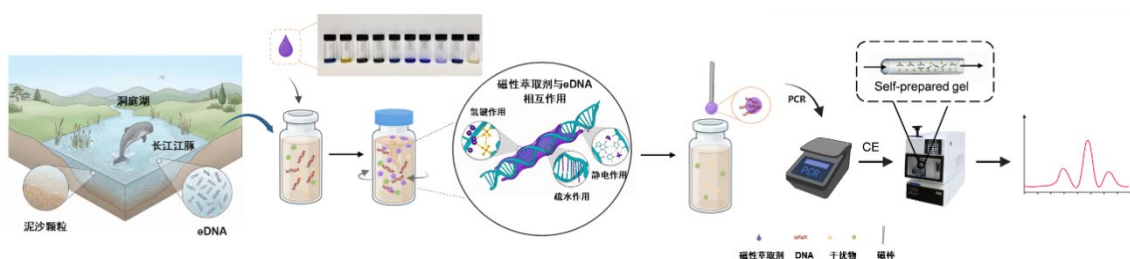


Fig. 1 Flowchart of the Enrichment and CE Separation Procedure for eDNA Samples from Dongting Lake

关键词: 洞庭湖江豚; eDNA 监测; 样品前处理; 毛细管电泳

参考文献

1. X. He, F. Peng, Y. Ma, H. Wang, X. Mo, Y. Ma, X. Tang, Q. Li, X. Ding*. Journal of Chromatography A, 2024, pp 465253.

2. X. He, Y. Ma, H. Wang, Y. Ma, Q. Li, X. Tang, X. Mo*, X. Ding*. *Journal of the Chinese chemical society*, 2024, pp 756.
3. Y. Chen, Y. Ma, F. Peng, X. Ding*. *Analytica Chimica Acta*, 2023, pp 340612.
4. F. Peng, X. Wang, W. Tao, Y. Chen, Y. Ma, X. Ding*. *Langmuir*, 2022, pp 10934.
5. Y. Ma, Y. Chen, F. Peng, X. Ding*. *Langmuir*, 2022, pp 12833.
6. F. Peng, M. Liu, X. Wang, X. Ding*. *Analytica Chimica Acta*, 2021, pp 338899.
7. X. Wang, M. Liu, F. Peng, X. Ding*. *Journal of Chromatography A*, 2021, pp 462626.
8. X. Wang, M. Liu, X. Ding*. *Langmuir*, 2021, pp 11665.
9. M. Liu, X. Ding*, X. Wang, J. Li*, H. Yang, Y. Yin. *RSC Advances*, 2019, pp 23119.

O-25

Key technologies of comprehensive component analysis of complex systems and their application

The cell is the basic structural and functional unit of life. So what is the biochemical composition of cells? DNA, RNA, proteins, peptides, metabolites, and so on. As to metabolites, they mainly include 9 categories and 40 subcategories. Metabolomics is the scientific study of chemical processes involving metabolites. So how do we determine all of these metabolites? LC-SPE-NMR/MS integrated analytical system is a powerful barcode reader for the composition of cells. It can address many biomedical problems through in-depth analysis of diverse biochemical components in animal and plant cells. We therefore established Problem-Oriented Multi-omics Integrated analysis technology based on Mass Spectrometry (POMIMS). Problem-oriented includes finding problems, establishing analytical approaches, combining problems and analytical results, proposing new mechanisms, validating mechanisms, developing products, and multi-omics, including metabolomics, peptidomics, and proteomics, while metabolomics includes carboxylomics, metabolic flux, and microbiomics. On this basis, we have developed numerous original analytical methods and applied them across multiple fields of biomedicine, including clinical disease diagnosis, drug active-ingredient discovery, and mechanism studies.

O-26

功能液体原位质谱分析

张燕燕*

中国科学院化学研究所活体分析化学学院重点实验室, 北京市海淀区中关村北一街 2 号, 100190

通讯联系人 E-mail: zhangyy0816@iccas.ac.cn

功能液体（如电解液等）是实现高效能量存储与精准物质转化的核心载体，其宏观性能由液体中离子/分子之间的弱相互作用动态结构直接决定。以锂离子电池电解液为例，锂离子与溶剂和阴离子之间的配位结构，主宰着锂离子输运行为与界面反应特性，是理解电池容量衰减、寿命骤降的核心分子基础。这类弱相互作用结构的存在形式多样且不稳定，根本原因在于多种结构的动态竞争与平衡，且对化学环境、界面和外场极为敏感。因此，发展原位精准解析功能液体弱相互作用结构及其动态演变的测量新方法，是揭示其微观作用机制的关键。

飞行时间二次离子质谱（ToF-SIMS）通过高动能离子束轰击样品表面、溅射产生二次离子并进行质谱分析，凭借优异的表面灵敏度与空间分辨能力已成为固体表界面分析的前沿技术，广泛应用于新能源、半导体等研究领域。然而，商品化 ToF-SIMS 仪器长期受限于超高真空分析环境中液体的迅速蒸发，难以直接分析液体，更无法原位分析界面液体结构以及外场响应机制。针对上述挑战，申请人通过表面张力限域策略，研发了真空兼容的普适性原位液体 ToF-SIMS 技术，并以此建立了从“本体”到“界面”、从“常温”到“变温”的功能液体原位质谱分析新方法，揭示了功能液体弱相互作用结构的底层作用及其失效机制。

参考文献:

- [1] Liu, Y.; Cui, J.; Xiang, J.; Luo, Q.; Wang, F.; Zhang, F.*. *Anal. Chem.* **2025**, 97(34), 18653-18660.
- [2] Zhang, Y.[#]; Shen, Z.-Z.[#]; Zhang, Y.*; Liang, J.-Y.*; Xin, S.*; et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64, e202425491.
- [3] Lu, C.; Hu, C.*; Zhang, Y.*; Qu, J.*; et al. *Sci. Adv.* **2023**, 9, eadf8412.
- [4] Zhang, Y.; Xing, Z.; Fan, B.; Ni, Z.*; Wang, F.*; Hu, X.*; Chen, Y.*; et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202215799.
- [5] Zhang, Y.; Xu, Z.*; Wang, F.*; Zhu, Z.*; et al. *Anal. Chem.* **2018**, 90 (5), 3341-3348.

O-28

肿瘤微环境高通量单细胞识别方法与代谢组学研究

王朝英*

中央民族大学，生命与环境科学学院

通讯联系人 E-mail: zhaoying.wang@muc.edu.cn

肿瘤微环境（TME）在肿瘤进程中起关键作用，其细胞类型多样、代谢特征复杂且随肿瘤阶段演变[1]。现有的质谱成像技术（MSI）虽可用于代谢物的空间分析，但难以实现单细胞分辨率下的代谢物分布检测。因此，本课题组致力于构建基于ToF-SIMS的单细胞质谱成像分析方法，旨在解决ToF-SIMS在肿瘤组织切片和单细胞分析过程中样品制备方法重复性差、分子碎裂严重，细胞异质性分析困难及不能识别代谢物分子异构体等难题，发展了一系列组织和细胞的样品制备方法、数据校正方法，同时，开发了ToF-SIMS/DESI多模态分析技术、ToF-SIMS细胞异质性代谢组分析技术及ToF-SIMS光化学反应分析双键异构体的单细胞成像分析技术等以实现ToF-SIMS在肿瘤微环境的单细胞识别与代谢组学分析研究。

参考文献：

1. Junttila M R, De Sauvage F J. Influence of tumour micro-environment heterogeneity on therapeutic response. *Nature*, 2013, 501, 346-354.

O-29

异噁唑衍生物蘑菇毒素的质谱快速分析

罗珪, 戴巧莲, Han Zuilhof², 陈波^{1,*}, 陈作红^{1,*}, Gert IJ. Salentijn^{2,*}¹ 湖南师范大学, 长沙, 410081² Wageningen University, Wageningen, 6708WE

E-mail: luowei_hunnu@126.com

误食毒蘑菇导致中毒一直是一个对人类健康造成威胁的全球性问题。近年来我国食源性疾病暴发监测资料分析表明, 毒蘑菇导致的中毒事件和死亡人数最多, 毒蘑菇中毒已经成为我国食源性疾病中致病和致死的最主要因素。鹅膏属 (*Amanita*) 作为一种最主要的毒蘑菇, 其中一些属于鹅膏属鹅膏组 (*Amanita sect. Amanita*) 的物种因含有异噁唑衍生物毒素而引发神经毒性。鹅膏蕈氨酸和异鹅膏胺为主要的异噁唑衍生物蘑菇毒素, 它们在结构上类似于谷氨酸和 γ -氨基丁酸 (GABA), 能够通过刺激 N-甲基-D-天冬氨酸和 GABA 受体引起中枢神经系统症状。目前主要的毒素检测方法为色谱质谱联用技术, 其通常需要进行一定前处理或色谱分离。本研究利用纸喷雾质谱技术和直接喷雾质谱技术, 基于异噁唑衍生物结构特点, 开发阴离子交换纸喷雾质谱技术, 通过阴离子修饰纸基对鹅膏蕈氨酸的选择性富集和原位解吸附, 实现对蘑菇毒素的选择性快速质谱分析; 并通过化学衍生技术, 有效降低鹅膏蕈氨酸和异鹅膏胺在蘑菇提取液中的基质干扰, 实现蘑菇毒素的选择性质谱快速定量分析。

国家自然科学基金 (22276049, 22276050)、湖南省教育厅项目 (23B0075) 资助

参考文献:

1. Luo, W.; Dai, Q.; van Beek, T. A.; Zuilhof, Han.; Chen, B.; Chen, Z.; Salentijn, G. I. J. Paper spray and direct mushroom spray mass spectrometry methods for the analysis of psycho-neurological disorder toxins. *Food Chemistry*, **2025**, 492, 145369.
2. Su, Y.; He, Z.; Yang, Y.; Xu, F.; Lai, M.; Yang, Z.; Zhang, P.; Chen, Z. The distribution and evolution of muscarine and the ibotenic acid biosynthetic gene cluster within the genus *Amanita* section *Amanita* revealed by phylogenomics. *IMA Fungus*, **2026**, 17: e175874.
3. Su, Y.; Liu, J.; Yang, D.; Cai, Q.; Yang, Z.; Chen, Z. Determination of ibotenic acid and muscimol in species of the genus *Amanita* section *Amanita* from China. *Toxicon*, **2023**, 233, 107257.

O-30

低丰度蛋白质的特异性富集及质谱高灵敏检测研究

张雪¹, 刘照胜³, 白玉^{2*}¹ 上海大学医学院, 上海, 200444² 北京大学化学与分子工程学院, 北京, 100871³ 天津医科大学药学与, 天津, 300070

通讯联系人 E-mail: yu.bai@pku.edu.cn

蛋白质组学研究中, 对特定蛋白质进行富集是识别生物标志物、研究疾病机制和开发诊断治疗方法的关键步骤[1-3]。为了克服生物标记物蛋白质特异性提取困难的问题, 本研究开发了一种新型氧化石墨烯(GO)掺杂的有机-无机杂化整体柱, 即 PAS-GO-poly(BMA-co-EDMA)整体柱, 通过调节 pH 值来实现特定等电点蛋白质的特异性分离。通过引入绿色二元致孔剂低共熔溶剂(DESs)和离子液体以增加材料制备的绿色性, 掺杂 GO 来增加其表面活性位点数, 从而提高该 GO 掺杂整体柱的吸附性能。Langmuir 方程模拟后的吸附等温线对应的最大吸附量显著增加了 55.7%且呈现良好相关性($R^2=0.9629$)。与不含 GO 的整体柱相比, 掺杂 GO 后的整体柱对模型蛋白 BSA 的吸附量增加了 36.9%, 对 HeLa 细胞裂解液中使等电点(pI)接近上样 pH 值的蛋白质比例增加 10%以上, 并成功应用于从小细胞肺癌患者血浆中选择性富集神经元特异性烯醇化酶。

本研究提出绿色制备 PAS-GO-poly(BMA-co-EDMA)整体柱, 能够实现特定蛋白生物标志物的选择性富集。通过控制 pH 值来基于 pI 分离蛋白质, 从而克服了传统亲和法的关键局限性。通过整合高吸附能力、稳定性和环境可持续性, 该整体柱能够增强对复杂生物样本中低丰度蛋白质的富集, 并通过有效从患者血浆中分离神经元特异性烯醇化酶的方式证明了其临床相关性。该整体柱有望为特定蛋白质的特异性分离提供了一种高效、精准的新方法, 且具有广阔的临床应用前景。

本工作受国家自然科学基金项目(No. 22304002)资助。

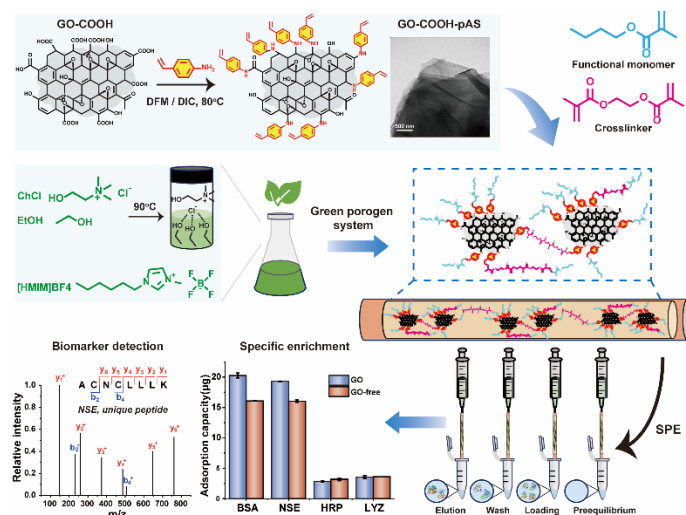


Fig. 1 Green preparation of the GO-incorporated monolith and applications.

参考文献:

1. X Zhang[#], F. Xu[#], R. Wu[#], H. Zhang, Y. Shi, Z. Liu*, X. Dong*, *Anal. Chim. Acta*, **2026**, 1397, 345266.
2. E. Boschetti, P. Righetti*, *Int. J. Mol. Sci.*, **2023**, 24(12), 10329.
3. B. Aslam, M. Basit, M. Nisar, M. Khurshid, M. Rasool*. *J. Chromatogr. Sci.*, **2016**, 55(2), 182-196.

O-31

人工智能驱动蛋白质组质谱数据解析

杨奕*

浙江大学杭州国际科创中心

通讯联系人 E-mail: y_yi@zju.edu.cn

蛋白质和翻译后修饰组成和结构的复杂性需要深度精准的质谱分析和数据解析工具。蛋白质组质谱数据的解析涵盖了从基于序列数据库生成理论参考信息，到实验谱图的匹配、评分与质控，再到最终通过生物信息学分析筛选差异标志物的流程。报告人围绕蛋白质组质谱数据解析科学问题，聚焦参考谱图库预测模型、谱图评分质控算法、生信分析流程框架三个方面，开展人工智能与质谱分析交叉研究。

(1) 传统数据库缺失色谱保留时间和质谱峰强度信息，数据解析主要依靠碎片离子质荷比的比较。针对此问题，发展基于深度学习的质谱图和色谱保留时间预测方法[1]，特别是提出了编码糖链树形结构的新模型架构DeepGlyco[2]，实现了非修饰肽段、具有不同位点的磷酸化肽段乃至具有复杂结构的糖基化肽段的色谱质谱特征预测，增加了蛋白质覆盖深度，提高了修饰定位准确度，增强了糖链异构体的区分能力。

(2) 糖基化修饰高度复杂，质谱采集和数据解析时样品组分间存在显著的相互干扰。针对此问题，发展基于统计推断的糖肽数据解析方法GproDIA[3]，利用机器学习模型对不同糖肽组分的碎片离子色谱特征进行评分，实现区分不同糖肽组分信号之间的区分，改善了糖肽鉴定的可靠性。

(3) 蛋白质组数据解析需要可靠的信息学分析流程，以消除技术变异，识别有生物学意义的差异，特别是单细胞蛋白质组数据因其固有的高稀疏性和显著的技术噪声，对分析流程的选择异常敏感。针对此问题，开发了基于可解释机器学习的智能决策框架SCPDA[4]，实现了分析方法组合的量化评估与决策，应用于单细胞蛋白质组学研究，助力生物学发现。

参考文献:

1. Y. Yang, X. Liu, C. Shen, Y. Lin, P. Yang, L. Qiao. *Nat. Commun.*, **2020**, 11, 146.
2. Y. Yang, Q. Fang. *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 2448.
3. Y. Yang, G. Yan, S. Kong, M. Wu, P. Yang, W. Cao, L. Qiao. *Nat. Commun.*, **2021**, 12, 6073.
4. J. Wang, Y. Huang, F. Lu, Q. Xu, Z. Yang, Y. Jiang, S. Shi, J. Pan, Y. Yang, Q. Fang. *Nat. Commun.*, **2025**, 16, 10276.

O-32

抗代谢障碍性脂肪肝炎中药复方多靶标质谱筛选和机制研究

郭明全^{1,2*}, 徐勇兵^{1,2}

1 中国科学院宁波材料所先进诊疗材料与技术实验室, 浙江宁波 315201

2 宁波慈溪生物医学工程研究所, 浙江慈溪 315300

通讯联系人*Email: guomingquan@nimte.ac.cn

代谢功能障碍相关性脂肪性肝炎(MASH)发病率持续上升, 因其发病机制涉及脂质代谢紊乱、炎症反应、氧化应激及纤维化等多重病理环节, 单一靶点药物研发困难重重, 目前临床 FDA 批准针对性治疗药物匮乏^[1]。MASH 的复杂病理特征与多个关键靶标的异常调控密切相关, 能针对多靶点的联合干预策略成为新药研发的重要方向^[2]。中药复方防治 MASH 显示出独特优势, 茵陈五苓散出自《伤寒论》, 由茵陈、茯苓、泽泻、猪苓、白术、桂枝组成, 临床常用于治疗湿热内蕴、水湿停滞之证, 现代研究表明其具有调脂、抗炎及保肝作用, 但针对 MASH 的药效物质及其多靶点作用机制尚不明确。本研究基于“成分-靶标-疾病”关联网络, 基于五个与 MASH 进展密切相关的关键靶标, 发展多靶标亲和超滤筛选策略^[3-5], 成功从茵陈五苓散中筛选出针对五个靶标的代表性活性成分, 并针对其多成分-多靶标作用进行机制解析: ①CCR2 介导巨噬细胞募集与炎症放大, 山奈酚-3-O-槐糖苷可通过抑制 CCR2 信号减轻肝脏炎性浸润; ②PL(肝脂酶)参与脂蛋白代谢, 绿原酸可调节其活性改善肝脏脂质蓄积; ③HMGCR 是胆固醇合成的限速酶, 异绿原酸 C 通过抑制 HMGCR 降低胆固醇合成, 缓解肝细胞脂毒性; ④PCSK9 介导 LDL 受体降解, 1,3-二咖啡酰奎宁酸通过下调 PCSK9 表达增强脂质清除; ⑤Keap1 是氧化应激关键分子 Nrf2 的负调控因子, 新绿原酸可干预 Keap1-Nrf2 相互作用, 激活抗氧化防御系统。通过分子互作、细胞模型及 MASH 动物模型验证, 发现茵陈五苓散提取物及上述成分可协同调控上述靶标, 显著改善肝脏脂肪变性、炎症及纤维化。本研究揭示了茵陈五苓散通过“多靶点-多成分”协同作用抗 MASH 的分子基础, 为中药复方现代化研究与 MASH 新药发现提供了理论依据与候选分子。

参考文献:

- [1] Do A, Zahrawi F, Mehal W Z.. *Nat. Rev. Drug Discov.*, **2025**,24:171-189.
- [2] Miao L, Targher G, Byrne CD, Cao YY, Zheng MH. *Trends Endocrinol Metab.*, **2024**, 35(8):697-707.
- [3] Hua XW., Xu MJ., Yang M., Zhang YY., Ma JK., Guo MQ. *Food Frontiers*,2025, 6(1), 65-85.
- [4] Zhang H, Chen G, Zhang Y, Yang M, Chen J, Guo M. *Food Chem.* 2022, 375:131856.
- [5] Xu Y., Chen G., Guo M. *Food Frontiers*, 2023,4, 922-932.

O-33

基于针尖微反应器的原位质谱分析

胡军*

江南大学

E-mail: hujun@jiangnan.edu.cn

反应中间体的精准鉴定及其反应过程监测对于微观反应机理的揭示具有重要价值。通过在微纳毛细管的尖端内集成皮升级的微反应器，我们构建了双功能的微反应器/纳升电喷雾喷针，实现了光、电、纳米酶催化反应过程亚毫秒级延迟的原位质谱分析，首次鉴定了多种活性中间体（如氮中心自由基、氮宾离子、碳正离子等），并揭示出其他表征手段难以发现的隐藏反应路径。

参考文献

- 1 Zhu G S, Hui R J, Hu J. Microdroplet stabilization enabled direct mass spectrometric identification of electrogenerated transient carbocation intermediates[J]. *Adv. Sci.* **2025**, *13*: e18157.
- 2 Qu L, Chen H Y, Hu J, et al. Rapid mass spectrometric identification of the radical intermediates in nanozyme-catalyzed reactions using a tip-based microreactor[J]. *Anal. Chem.* **2025**, *97*: 25752-25759.
- 3 Liu C Y, Chen Y, Hu J. Identification of the electrogenerated hidden nitrenium ions by in situ mass spectrometry[J]. *Anal. Chem.* **2024**, *96*: 3354-3361.
- 4 Cheng Q Y, Wang T, Hu J, et al. In situ probing the short-lived intermediates in visible-light heterogeneous photocatalysis by mass spectrometry[J]. *Anal. Chem.* **2023**, *95*: 14150-14157.

O-34

原位电离小型质谱技术在临床药物分析中的应用

李振涛, 陈子林*

武汉纺织大学

通讯联系人 E-mail: chenzt@whu.edu.cn

治疗药物监测 (TDM) 对于优化临床用药、减少药物毒性至关重要, 但传统色谱-质谱联用方法存在耗时长、样品处理复杂、依赖中心实验室等局限, 难以满足床旁快速检测的需求^[1]。本研究基于原位电离技术与小型质谱 (mini-MS) 平台, 建立了两种适用于不同临床场景的药物快速检测新方法, 旨在实现即时检测 (POCT)。首先, 针对临床上需长期监测的精神类药物 (卡马西平、喹硫平、奥氮平), 开发了一种基于纸毛细管喷雾 (PCS) 的微型质谱检测方法。该方法仅需 50 μ L 血浆或全血, 经有机溶剂蛋白沉淀后, 上清液直接点样于 PCS 卡盒, 在 2 分钟内完成质谱分析。在临床相关浓度范围内, 三种药物均呈现良好线性 ($R^2 \geq 0.99$), 检测限分别为 0.05 μ g/mL (卡马西平) 和 5 ng/mL (喹硫平和奥氮平), 回收率和精密度满足临床监测要求^[2]。其次, 针对治疗窗极窄、毒性风险高的抗肿瘤药物甲氨蝶呤 (MTX), 进一步构建了金属有机骨架 (MOF) 功能化固相微萃取 (SPME) 耦合纳喷雾电离 (nano-ESI)-微型质谱方法。通过合成氨基功能化 MOF (NH₂-MIL-101) 修饰的萃取探针, 实现对血浆中 MTX 的高选择性富集与净化, 总分析时间约 7 分钟。该方法灵敏度较传统蛋白沉淀-纸喷雾小质谱检测法提升 2500 倍, 检测限低至 2 ng/mL, 10-5000 ng/mL 范围内线性良好 ($R^2 > 0.99$), 日内、日间精密度 (RSD < 9.5%) 和回收率 (85.6%-114.9%) 优异。两种方法均成功应用于临床真实样本的测定, 测定结果与传统 LC-MS/MS 方法高度一致 (相关系数 > 0.99)。原位电离 (纸喷雾、纳喷雾) 结合小型质谱系统, 可根据不同药物的检测需求, 灵活构建“快速筛查”与“高灵敏富集检测”两类 POCT 模式。该平台兼具便携性、分析速度快、准确性高的特点, 为精神类药物长期监测和甲氨蝶呤等高风险药物的精准管理提供了切实可行的技术方案, 在推动临床个体化用药即时决策方面展现出广阔的应用前景。

参考文献:

1. J. Zhang, J.N. Xiao, Z.Z. Liao, H.J. Xie, Z.T. Li, *Anal. Chim. Acta*, **2026**, 1387, 345071.
2. S.F. Jiao, J.N. Xiao, Z.Z. Liao, J.F. Hu, Z.T. Li, *Anal. Bioanal. Chem.*, **2025**, 417, 5545-5553.

O-35

基于色谱-质谱时空动态与化学发光的手性化合物对映体分析

钟燕辉*, 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 福建福州 350108

*E-mail: yanhuizhong@fzu.edu.cn; zianlin@fzu.edu.cn

手性化合物的对映体选择性分析在生物医药、食品科学及生命代谢研究中具有重要意义。传统方法常受限于分离效率低、通量小、原位分析能力不足。本工作围绕“突破”会议主题, 集成多种色谱-质谱联用技术与金属/共价有机框架 (MOF/COF) 驱动的化学发光传感及分离平台, 开发了一系列手性化合物分析的实用新方法, 在衍生化-质谱高通量定量与成像、植物发芽时空动态监测、MOF 和 COF 增强化学发光快速检测及手性分离等方面取得了多项突破。

1. 手性衍生化 UPLC-MS 与 MALDI-TIMS-MS 用于手性化合物的高通量分析及时空动态研究

本研究建立了两种手性衍生化方法以实现手性化合物的精准分析。第一种采用甲基苄基异氰酸酯 (MBIC), 利用刚性脲结构诱导的分子内氢键差异 (L-型可形成而 D-型不能), 在 UPLC-MS/MS 上于 30 min 内分离 19 对手性化合物对映体, 并成功定量检测了帕金森病患者血清中的 12 种手性化合物; 结合 MALDI-TIMS-MS 成像, 无需分离即在小鼠脑中观察到 24 种手性化合物的分布^[1]。第二种采用手性 α -甲氧基- α -三氟甲基苯乙酰氯, 利用衍生化后对映体的结构差异驱动分离, 在 30 min 内实现了 12 种非极性手性化合物的 UPLC-MS 分析 (检测限 1.4-4.1 ng/L), 并借助 MALDI-TIMS-MS 实现了绿豆发芽过程中手性化合物的时空动态监测^[2]。两种策略分别适用于生物体液定量/组织成像与植物代谢动态追踪, 为手性化合物的高通量分析及手性代谢组学提供工具。

2. 基于功能化材料的化学发光策略用于手性化合物的识别与快速检测

为建立高灵敏度的快速分析方法, 本研究开发了两种基于功能化材料增强鲁米诺化学发光的手性化合物检测平台。一方面, 首次利用 Fe-MIL-101(NH₂) 作为高效催化剂, 通过主客体识别作用选择性结合谷氨酸 (典型手性化合物) 并放大鲁米诺-H₂O₂ CL 信号, 在 0.01-10 μ g/mL 范围内实现谷氨酸的灵敏检测 (LOD=0.003 μ g/mL), 成功应用于癫痫患者血清分析, 结果与 HPLC-MS 一致^[3]。另一方面, 针对手性对映体的精准识别, 设计了一种动态配位手性共价有机框架 (L/D-cys@Co-TFB-DABP), 通过半胱氨酸可逆配位至钴中心, 利用竞争性配体置换机制实现对布洛芬对映体的差异性催化响应 (响应斜率差 24 倍), 对映体过量值测定及血清加标回收 (99.8%-103.6%) 验证了其实用性。该工作首次在单一材料中集成了“配位-催化-检测”功能, 为手性化合物的快速、高选择性分析提供工具。

3. L-半胱氨酸点击后修饰 COF 实现手性化合物的高效识别与分离

通过点击化学反应将 L-半胱氨酸共价接枝于 COF 孔道内壁, 将其作为分散固相萃取介质, 应用于手性氨基酸的对映体选择性拆分。通过高效液相色谱分析萃取前后溶液中氨基酸对映体的组成变化, 计算对映体过量值 (ee/%), 系统评估材料的手性识别与分离性能。结果表明, 该材料可实现手性氨基酸的高选择性拆分, ee 值达 80% 以上。

参考文献:

1. Yanhui Zhong, Peisi Xie, Chengyi Xie, Lei Guo, Weiwei Chen, Shuyi Wang, Xiaoxiao Wang, Fuyue Wang, Zian Lin*, Gongke Li*, Zongwei Cai*, *Chin. Chem. Lett.* **2025**, 37, 112039.
2. Yanhui Zhong, Peisi Xie, Lei Guo, Zian Lin*, Zongwei Cai*, *Talanta* **2026**, 298, 128882.
3. Shuyi Wang, Lingzhao Zheng, Xiaoyu Wang, Yanhui Zhong*, Zian Lin, *Talanta* **2026**, 297, 128739.

O-36

废旧锂电池正极材料中金属回收方法研究进展及色谱贡献

赵兴云^{1,2*}, 王瑞芳¹, 张莉芸^{1*}, 吴荣芳^{1*}, 高利珍^{2*}¹ 山西白求恩医院(山西医学科学院), 山西医科大学第三医院; 同济山西医院, 太原, 030032² 山西大学化学化工学院, 化学生物学与分子工程教育部重点实验室, 太原, 030006通讯联系人 E-mail: xyzhao@sxu.edu.cn; 1315710223@qq.com; wurongfang@sxu.edu.cn

锂离子电池 (LIBs) 产量的激增, 意味着退役的电池数量也会越来越多, 其所带来的资源环境压力也将越来越大。为了建设资源节约型、环境友好型社会, 针对废弃 LIBs 的回收和处理的技术开发十分重要且紧迫。在 LIBs 的所有组件中, 正极材料成本占比最大、结构最为复杂; 因而, 处理退役 LIBs 最主要的挑战即是正极材料的回收。目前全球对于占据 LIBs 市场的电动汽车动力电池正极材料主要为镍钴锰酸锂(Lithium Nickel Cobalt Manganese, NCM)、镍钴铝酸锂(Lithium Nickel Cobalt Aluminate, NCA)、磷酸铁锂(Lithium Iron Phosphate, LFP)。正极材料中的锂、钴、镍是可回收的高价值资源。主要方法包括火法回收、湿法回收、再生修复等, 火法冶金核心是通过高温热解、氧化还原反应, 实现有价金属的分离和富集。由于温度较高, 会伴随产生 CO、CO₂ 及含金属氧化物的粉尘, 需配置尾气净化系统(如除尘、碱洗)以控制污染。湿法冶金是一种通过水溶液中的化学反应从矿石、精矿或二次资源中提取和分离金属的冶金技术。其核心是利用溶剂(如酸、碱或盐溶液)将目标金属溶解为离子态, 再通过化学或电化学方法(如置换、沉淀、电解等)从溶液中回收金属。目前尚缺少一条兼具环境友好性和经济可行性的技术路径。基于此, 本工作主要综述与开展针对退役 LIBs 正极材料的回收再生的色谱方法策略以及产品性能优化进行研究。

参考文献:

1. Tran M K, Rodrigues M T F, Kato K, et al. Deep eutectic solvents for cathode recycling of Li-ion batteries[J]. *Nature Energy*, **2019**, 4(4): 339-345.
2. Peeters N, Binnemans K, Riaño S. Solvometallurgical recovery of cobalt from lithium-ion battery cathode materials using deep-eutectic solvents[J]. *Green Chemistry*, **2020**, 22(13): 4210-4221.
3. Tomina V V, Melnyk I V, Zub Y L, et al. Tailoring bifunctional hybrid organic-inorganic nano-adsorbents by the choice of functional layer composition probed by adsorption of Cu²⁺ ions[J]. *Beilstein journal of nanotechnology*, **2017**, 8(1): 334-347.
4. Afreh P, Gao L, Sidhoum A, et al. Ethanol-enhanced phosphocholine coordination for selective cobalt recovery from a lithium cobalt oxide (LiCoO₂) cathode material[J]. *Journal of Cleaner Production*, **2025**, 508: 145553.

致谢:

感谢国家自然科学基金青年项目(编号:4452632)和山西省科研项目*编号:4245\ [[D282、4247\ [[C245+, 山西大学文瀛青年学者计划项目的支持, 感谢各位老师对课题组的指导以及 32 名课题组在读和已毕业研究生。

O-37

AI 赋能的化学同位素标记技术用于液相色谱-高分辨质谱分析方法开发及环境健康和医学应用

赵先恩^{1,2,3*}, 李俊腾³, 张慧敏³, 朱树芸², 燕少玮², 黄姹², 刘倩^{2*}, 江桂斌²¹ 山东第一医科大学(山东省医学科学院), 医学科技创新中心, 药学院, 山东 济南, 250117² 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, 北京, 100085³ 曲阜师范大学, 化学与化工学院, 山东 曲阜, 273165*Email: xianenzhao@163.com, qianliu@reccs.ac.cn

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

人工智能(AI)与化学同位素标记(CIL)技术深度融合的创新策略展现了强大的AI应用效果和发展前景。其核心在于两种技术的协同赋能: CIL 技术通过引入稳定同位素标签,对分子结构中的目标化学官能团(如氨基、羧基、羰基、羟基、巯基等)进行特异性标记,从而实现对分析物的高效化学衍生化。该策略不仅显著提升LC分离效果、MS离子化效率、MS/MS碎裂特异性,扩大可检测化合物的覆盖范围,更关键的是,它为每个分析物创造了一个天然的“同位素内标”,实现了在复杂基质中无需标准品的高精度相对定量和更多的定性依据,从根本上校正质谱仪的基质抑制/增强效应,为AI模型提供高质量、标准化的原始数据[1, 2]。此外, AI 技术能够被深度整合至分析的全流程,包括数据处理层面、方法开发与优化层面、应用与预测层面。

CIL-AI 联合策略不仅是 LC-HRMS 方法开发范式的革新,通过化学衍生化与 AI 的联动,未来能够实现从“数据”到“预测”的跨越,将为环境健康和医学研究提供强大的技术支持,在精准暴露组学、转化毒理学、医学检验等研究中展现巨大应用潜力。

致谢: 国家自然科学基金(Nos. 22176109, 22193050, 22425041)。

参考文献:

- [1]. Gao, S.; Zhou, X.; Yue, M.; Zhu, S.; Liu, Q.; Zhao, X.-E. *TrAC Trend. Anal. Chem.* 2023, 162, 117022.
[2]. Zhou, X.; Gao, S.; Yue, M.; Zhu, S.; Liu, Q.; Zhao, X.-E. *TrAC Trend. Anal. Chem.* 2023, 160, 116978.

O-38

基于气质联用技术测定婴配粉中游离短链脂肪酸

朱云霄, 李先江*

中国计量科学研究院化学所

通讯联系人 E-mail: lixianjiang@pku.edu.cn

摘要正文 母乳被认为是婴儿营养的最佳天然来源。然而当母乳无法获取或者不够的时候, 婴配粉常常被用作母乳的替代品。在婴配粉母乳化过程中, 游离短链脂肪酸被视作关键营养成分之一。它们不仅影响婴配粉的风味, 也在维持肠道健康、调节免疫力和提供能量代谢方面起到关键作用。本研究旨在开发一种快速、灵敏、高效的方法分析婴配粉中7种游离短链脂肪酸。样品前处理过程中, 采用乙腈-无水硫酸镁金乡目标物提取。经过富集后样品采用丁醇-乙酰氯进行衍生化来增强稳定性和色谱分离度。得到的脂肪酸丁酯再用气质联用仪进行分析。经过系统的条件优化, 本方法实现了7种目标物在14.8分钟内的基线分离, 并表现出良好的线性和重复性。方法的检出限和定量限分别是12.0~34.9 ng/g和40.0~16.5 ng/g。实际样品分析中, 共检测到6种游离短链脂肪酸。这些结果为后期婴配粉配方深度优化和母乳化提供了基础数据。

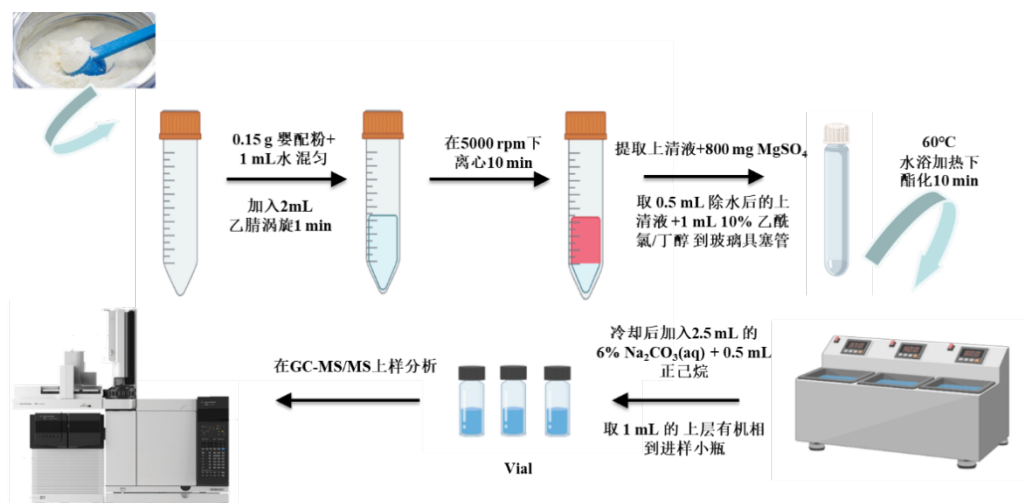


图 1 方法流程图

参考文献:

1. Zhu, Y.; Liu, Y.; Sun, Q.; Chen, J.; Tu, M.; Han, Y.; Li, X., Quantitative analysis of seven free short-chain fatty acids in infant formula using GC-MS/MS. *Food Chem.* **2025**, 491, 145297.
2. 朱云霄; 刘阳; 孙秋; 王晟; 韩晔华; 李先江, 短链脂肪酸检测技术研究进展. *食品安全质量检测学报* **2025**, 16 (17), 98-1

O-40

树莓状纳米聚集体的受控组装及其多维传感应用

张悦文, 朱舒愉, 谢惠敏, 蒲巧生*

兰州大学, 化学化工学院

通讯联系人 E-mail: puqs@lzu.edu.cn

表面增强拉曼散射 (SERS) 技术凭借其独特的“分子指纹”识别能力和超高灵敏度, 已成为分析化学领域的研究热点。然而, 如何在保持高增强因子的同时, 实现基底的可控构筑并解决复杂基质下的信号干扰, 仍是目前限制其大规模应用的核心挑战。本研究以聚苯乙烯 (PS) 微球为核心模板, 通过受控组装技术开发了一系列层级化树莓状纳米聚集体, 并将其从基础溶液检测拓展至纸基快检及集成微流控芯片平台, 用于电子烟油中新精神活性物质的现场智能化快检, 以及紫外光刻辅助组装的微阵列芯片平台, 用于流感病毒等病原体的超灵敏特异性诊断。

研究首先聚焦于基底微观结构的精准调控, 开发了空心树莓状纳米聚集体 (Zhang et al, *Chem. Eng. J.*, 2025, 511, 161872)。针对多环芳烃在金属表面吸附弱且易受基底干扰的难题, 通过在氨基修饰的 PS 微球表面覆盖 Au NPs, 构筑了具有疏水内腔的层级结构。通过精确优化 Au NPs 在 PS 表面的覆盖度, 该结构利用疏水内腔的物理富集作用显著提升了对非极性分子的捕获能力。实验结果显示, 该基底对苾、苈及苯并[a]蒽的检测限分别达到了 4×10^{-8} M、 6×10^{-7} M 和 4×10^{-7} M, 并成功应用于实际水样的监测。

为强化电磁增强效应并克服液相基底重现性差的难题, 本研究设计并构筑了基于银包金核壳结构的实心树莓状纳米聚集体 (Zhang et al, *Anal. Chem.*, 2024, 96, 17620–17630)。利用带正电 PS 微球诱导 Au@Ag NPs 在 5 分钟内快速自组装, 构建了具有高密度热点且胶体稳定的传感体系。银壳层的高等离激元活性结合 PS 核心的模板效应, 使该体系在废水污染物 (R6G、孔雀石绿) 及生物标志物 (腺嘌呤、尿嘧啶) 检测中展现出卓越的重现性, 检测限低至 1×10^{-16} M (MG) 和 3×10^{-8} M (腺嘌呤)。在此基础上, 该工作重点开展了临床转化研究, 成功实现了对患者真实尿液样本中腺嘌呤的痕量检测。作为多种代谢疾病的关键生物标志物, 腺嘌呤在复杂尿液基质中仍能获得高信噪比的光谱信号, 有力证明了该基底在临床生化分析中的实际应用潜力。

在材料研究的基础上, 本研究致力于推动 SERS 技术向现场快速检测转化。通过将树莓状纳米聚集体引入柔性纸基纤维, 利用压力驱动的对流效应构筑了富集与检测一体化纸基传感平台。该平台通过主动对流不仅克服了传统滴涂法中的咖啡环效应, 更实现了目标分子的快速原位富集, 显著缩短了采样时间 (仅需 2 min), 且信号重现性 (RSD) 控制在 10% 以内。该系统实现了对电子烟油中尼古丁及多种新精神活性物质的快速抽取。结合深度学习算法 (1D-CNN) 通过模型对复杂光谱特征的自动化提取, 在复杂基质背景下的分类识别准确率高达 95% 以上。

最后, 为满足生物大分子的特异性诊断需求, 研究开发了基于树莓状纳米聚集体的紫外光刻辅助组装 SERS-微流控芯片, 将富含等离激元“热点”的区域尺寸精确控制在微米量级。依托树莓状结构形成的高密度三维电磁增强空间, 结合抗原-抗体特异性识别机制, 构建了针对流感病毒 (PR8) 的免疫传感体系。实验结果表明, 得益于树莓状形貌与病毒颗粒在尺度上的高度匹配, 该芯片在 10 至 10^5 EID₅₀/mL 范围内表现出良好的对数关系, 最低检测限达 5 EID₅₀/mL。此外, 该平台表现出极强的特异性, 能够准确区分 H1N1、H3N2 等亚型, 并通过集成便携式激发装置与手机终端, 实现了信号的数字化闭环判读, 展示了其在重大传染病现场筛查与即时诊断中的广阔前景。

综上所述, 本研究构建了从材料受控组装到多场景平台集成的完整体系, 为复杂体系中目标物的高通量、智能化、特异性检测提供了创新的技术支撑。

O-41

非对称场流分离-光散射联用技术在多糖构效关系研究中的应用

窦海洋*

河北大学, 保定, 071002

*E-mail: douhaiyang-1984@163.com

场流分离 (Field Flow Fractionation, FFF) 是一种温和的分离表征技术, 基于样品与外力场相互作用机理对样品进行分离^[1]。FFF 池道中没有固定相, 适用于剪切力敏感的物品分离, 具有广泛的分离范围 (1 nm-100 μm)。根据场流分离理论, FFF 与多角度光散射检查器 (Multiangle Light Scattering, MALS) 和浓度检测器 (例如: 示差折光检测器, dRI) 联用可以提供样品的绝对分子量分布、粒径分布和构象等信息^[2-4]。多糖可以分为淀粉和非淀粉多糖。抗性淀粉具有膳食纤维特性, 可以降低血糖, 预防肠道和心血管疾病。非淀粉多糖具有重要的营养和药用价值, 例如: 抗肿瘤、抗氧化和免疫调节等生物活性。多糖结构具有微观不均一性及单糖组成多样性, 其糖苷键具有多种立体连接方式, 可以形成复杂的空间结构, 导致其分离纯化和构效关系研究极具挑战性。该文基于非对称场流分离联用光散射技术 (AF4-MALS-dRI) 对马铃薯抗性淀粉的结构进行了表征, 定量测定了马铃薯抗性淀粉含量。结果表明, 糊化过程使马铃薯直链淀粉 (Amylose, AM) 分子呈松散、无规则卷曲构象, 这有助于马铃薯淀粉的酶解; 在 AM 和支链淀粉 (Amylopectin, AP) 组分之间发现了一种具有长分支构象的中间体, 该结构有利于抵抗 α -淀粉酶对马铃薯淀粉的水解。此外, 该文研究了山药非淀粉多糖对马铃薯淀粉退化行为的影响, 研究发现, 山药非淀粉多糖促进了 AM 含量少的马铃薯淀粉的退化, 抑制了 AM 含量多的马铃薯淀粉的退化。实验结果证明 AF4-MALS-dRI 是一种有力的研究多糖构效关系的方法。

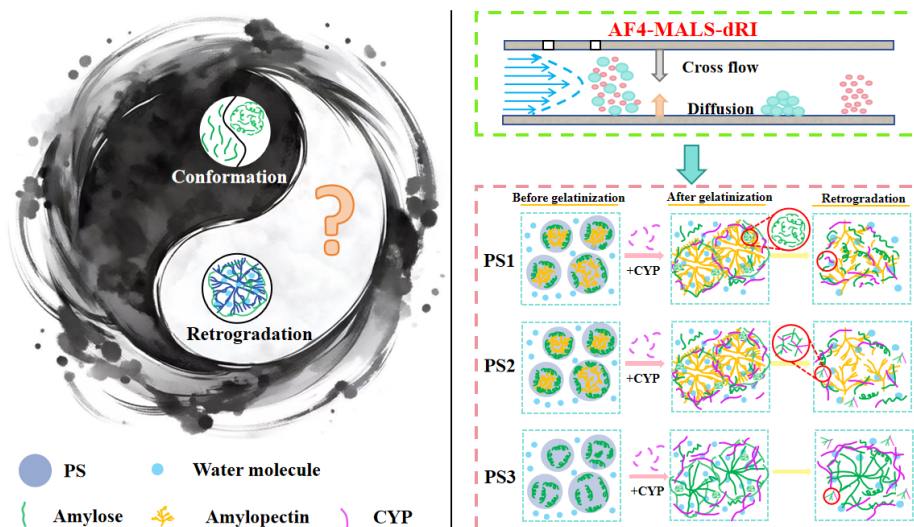


Fig. 1 The schematic diagram of the effect mechanism of Chinese yam polysaccharide on the retrogradation of the potato starch with different AM contents.

参考文献:

- [1] J.C. Giddings*, Field-flow fractionation: Analysis of macromolecular, colloidal, and particulate materials, Science 260(5113) (1993) 1456-1465.
- [2] X. Chen, W. Zhang, Y. Dou, T. Song, S. Shen, H. Dou*, Applications of asymmetrical flow field-flow fractionation for separation and characterization of polysaccharides: A review, J. Chromatogr. A 1635 (2021) 461726.

- [3] X. Zhang, Y. Li, S. Shen, S. Lee, H. Dou*, Field-flow fractionation: A gentle separation and characterization technique in biomedicine, *TrAC, Trends Anal. Chem.* 108 (2018) 231-238.
- [4] M. Wang, L. Yang, T. Yin, Y. Huang, Z. Zhang, Y. Li, H. Dou*, New insight into the structural factors affecting retrogradation of potato starch and Chinese yam polysaccharide blend using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multidetector, *Food Hydrocolloids* 172 (2026) 111902.

O-42

渔业环境和水产品中多金属形态分析及风险评价

胡红美^{1,*}, 程和勇²¹浙江省海洋水产研究所, 舟山, 316021²杭州师范大学材料与化学化工学院, 杭州, 311121通讯联系人 E-mail: huhm@zjou.edu.cn

作为人类优质蛋白质的重要来源, 水产品在世界范围内的消费量急剧增加, 在全球粮食和营养安全中发挥着越来越重要的作用。然而, 水产品在解决粮食危机的同时可能会因有毒金属和类金属(如铅、镉、铬、砷和汞)的存在增加膳食风险。因此, 监测渔业环境及水产品中的重金属对于遵循食品安全条例和保护消费者至关重要。这些金属的毒性、迁移、生物利用度、代谢等性质不仅与总量有关, 更取决于其化学形态, 多金属形态分析十分必要。在线固相萃取与高效液相色谱和电感耦合等离子体质谱联用(在线SPE-HPLC-ICP-MS)同时富集和形态分析具有分析效率高、检出限更低、经济和绿色等优点, 是超痕量多金属形态分析的主要分析手段之一。本报告主要介绍铬、砷、镉、锡、汞、铅等2-5个重金属形态同时富集与检测的在线SPE-HPLC-ICP-MS方法开发及其在渔业环境和水产品生态健康风险评估中的应用。

关键词: 多金属形态分析; 高效液相色谱-电感耦合等离子体质谱; 渔业环境; 水产品; 风险评价

参考文献:

1. P.X. Zeng, Z.Z. Ma, H.M. Hu, M.Y. Ye, Y.C. Wang, H.Y. Cheng, *J. Hazard. Mater.*, **2026**, 504, 141256.
2. P.X. Zeng, H.M. Hu, Y.C. Wang, J.H. Liu, H.Y. Cheng, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 487, 137245.
3. P.X. Zeng, F. Guo, Y.C. Wang, H.M. Hu, J.H. Liu, H.Y. Cheng, *Microchem. J.*, **2025**, 208, 112609.
4. H.M. Hu, F. Guo, X.C. Chen, Y.C. Wang, J.H. Liu, H.Y. Cheng, *Aquaculture*, **2025**, 595(Part 1), 741586.
5. F. Guo, P.X. Zeng, J.H. Liu, H.M. Hu, W.B. Zhu, Y.C. Wang, H.Y. Cheng, *Anal. Chim. Acta*, **2024**, 1294, 342294.
6. F. Guo, P.X. Zeng, J.H. Liu, H.M. Hu, W.B. Zhu, Y.C. Wang, H.Y. Cheng, *Food Chem.*, **2024**, 443, 138552.

O-43

对苯二胺（醌）的色谱质谱分析

张岩皓^{1*}, 张书胜², 蔡宗苇³

1. 郑州大学生态与环境学院, 郑州, 450001

2. 郑州大学化学学院, 郑州, 450001

3. 宁波东方理工大学, 宁波, 315200

通讯联系人 E-mail: yhzhang_chem@outlook.com

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

关键词: 对苯二胺（醌）；色谱-质谱；固相质谱；污染特征

参考文献:

11. Z. Tian, H. Zhao, T. Peter Katherine, M. Gonzalez, J. Wetzel, C. Wu, X. Hu, J. Prat, E. Mudrock, R. Hettinger, E. Cortina Allan, G. Biswas Rajshree, C. Kock Flávio Vinicius, R. Soong, A. Jenne, B. Du, F. Hou, H. He, R. Lundeen, A. Gilbreath, R. Sutton, L. Scholz Nathaniel, W. Davis Jay, C. Dodd Michael, A. Simpson, K. McIntyre Jenifer and P. Kolodziej Edward, *Science.*, **2021**, 371, 185-189.
12. Y. Zhang, C. Xu, W. Zhang, Z. Qi, Y. Song, L. Zhu, C. Dong, J. Chen and Z. Cai, *Environ. Sci. Technol.*, **2021**, 56, 6914-6921.
13. Z. Peng, W. Zhang, D. Yin, X. Zhang, S. Liu, W. Zhao, J. Mao, Y. Zhang and J. Xie, *Chem. Eng. J.*, **2023**, 454, 139978.

O-44

基于功能化材料的典型危害因子高效富集与精准检测

新方法研究

马雯^{1,*}, 袁祯爽¹, 刘芬¹, 刘虎威²

1.天然药物及仿生药物全国重点实验室, 北京大学, 100191

2.化学与分子工程学院, 北京大学, 100871

通讯联系人 E-mail: wen.ma@bjmu.edu.cn

随着现代农业与食品工业的快速发展, 环境与食品中典型危害因子的残留问题日益受到关注。新烟碱类农药作为广泛使用的一类杀虫剂, 其在环境中的残留对生态系统及人体健康构成潜在威胁^{1,2}; 而展青霉素作为食品中常见真菌毒素, 具有细胞毒性与遗传毒性, 严重威胁食品安全³。因此, 发展高效、灵敏、可靠的分析方法用于环境与食品中此类危害因子的精准检测, 具有重要的科学意义与应用价值。本研究以新烟碱类农药和展青霉素为代表性危害因子, 基于功能化金属有机框架 (MOF) 材料, 分别建立了适用于环境水样和食品基质的富集与检测新方法。针对新烟碱类农药, 首次将后修饰 MOF 用于 9 种新烟碱类农药的同时富集。其中, 氨基功能化 MOF 展现出最优的富集性能。在此基础上, 建立了分散固相萃取与液相色谱质谱联用的分析方法, 检测限低至 0.02–0.1 ng/mL, 线性范围覆盖 3–4 个数量级。与商品化固相萃取柱相比, 该材料表现出优异的富集效率及可重复使用性, 成功应用于实际环境水样中痕量新烟碱类农药的检测。针对展青霉素, 设计合成了核酸适配体修饰的 MOF 材料。该材料不仅能够通过适配体的特异性识别实现对展青霉素的高选择性吸附, 同时发现其可作为 MALDI-MS 的基质, 实现展青霉素的高灵敏度直接检测。该双功能策略将特异性富集与高效电离相结合, 简化了样品前处理流程, 显著提升了检测的灵敏度与选择性, 为食品中痕量真菌毒素的快速检测提供了新思路。本研究以两类典型危害因子为切入点, 发展了高效富集-灵敏检测的新方法, 为环境与食品中痕量危害因子的精准分析提供了新的技术支撑。

参考文献:

1. E. A. D. Mitchell, B. Mulhauser, ..., A. Aebi, *Science* **2017**, 358 (6359), 109-111.
2. R. Wang, L. Chu, ..., C. Gu, *Environ. Sci. Technol.* **2026**, 60 (9), 7337–7348.
3. Y. W. Jiang, Y. L. Wu, ..., F. J. Yan, *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* **2024**, 23, e70044.

O-45

基于 LED 激发光源的高灵敏度荧光检测器及其在生物医药、食品安全领域的应用

陈嗣俊, 夏慧丽, 陈逢灶, 尹红锋*

浙江福立分析仪器有限公司

通讯联系人 E-mail: chensj@cnfuli.com.cn

本报告将介绍一款基于 LED 激发光源的高灵敏度荧光检测器, 包括光路、检测池及系统设计。对比其与传统荧光检测器在检测灵敏度、重现性等基础参数的差异, 并开发黄曲霉素、寡聚糖、儿茶酚胺等实际应用案例。

参考文献:

1. 高芳,汪龙飞,卜汉萍,鲍蕾,高效液相荧光色谱法检测婴幼儿配方食品中 7 种母乳低聚糖,食品安全质量检测学报, 2023, 24, 72-79.
2. 方兰云,姚浔平,姚珊珊,固相萃取-HPLC-荧光检测法测定血浆中的儿茶酚胺及其代谢产物,中国卫生检验杂志,2010, 8, 1922 - 1924.

O-46

多孔有机框架@静电纺丝纳米纤维复合膜用于食品中农药残留与兽药残留分析

刘家玮*, 李俭, 苏丽荣, 王琼, 白泉

西北大学化学与材料科学学院

通讯联系人 E-mail: jwliu@nwnu.edu.cn

多孔有机框架材料 (POFs) 是一类含有有机单元的多孔框架材料, 具有比表面积大、孔径可调节、作用位点分布均匀、结构易于修饰等优点。金属有机框架 (MOFs) 和共价有机框架 (COFs) 作为 POFs 材料的典型代表, 二者均可通过功能单体的理性设计与组装, 获得具有高选择性吸附性能的功能化 POFs 吸附剂。静电纺丝纳米纤维 (ESN) 具有独特的三维网络结构和高孔隙率, 并且纤维表面易于功能化, 能够实现 POFs 的高效负载。因此, 本研究将 POFs 与 ESN 结合, 采用原位生长策略, 制备了几种 POFs@ESN 复合膜, 并将其作为薄膜微萃取 (TFME) 和固相萃取 (SPE) 的萃取相, 分别研究其对兽药残留和含氟杀虫剂的萃取性能, 建立了一系列相关分析新方法。具体包括:

(1) 通过静电纺丝与水解改性制备了羧基功能化聚丙烯腈 (PAN) 纳米纤维, 并利用原位生长法将氟化 MOFs (UiO-66-F₄) 负载在纤维表面, 得到 UiO-66-F₄@PAN 复合膜。进一步将此复合膜裁剪为并嵌入 SPE 小柱中, 用于氟喹诺酮类抗生素 (FQs) 的萃取富集。结合 UPLC-MS/MS 技术, 建立了 FQs 高效、高灵敏的分析新方法。该方法线性范围宽、检出限低, 精密度良好, 成功实现了鱼肉、鸡蛋和蜂蜜中 FQs 的准确测定。

(2) 通过静电纺丝技术在不锈钢网表面制备了由 PAN 与聚乙烯亚胺 (PEI) 混纺形成的纳米纤维膜 (PAN-PEI), 再将 ZIF-8 原位生长在纤维表面, 制备了 ZIF-8@PAN-PEI 复合膜。以此复合膜为新型 TFME 萃取涂层, 选择四环素类抗生素 (TCs) 为分析对象, 结合 UPLC-MS/MS, 建立了复杂基质样品中 TCs 高效、高灵敏分析新方法。该方法成功实现了牛肉、鸡蛋和牛奶样品中 TCs 的准确测定, 加标回收率良好。

(3) 通过静电纺丝技术制备了 PAN 与对苯二胺 (PPD) 共混纳米纤维膜 (PAN-PPD), 再利用原位生长法将三嗪基氟化亚胺 COFs (TAPT-TFTA) 负载在纤维表面, 制备了 TAPT-TFTA@PAN-PPD 复合膜。利用 3D 打印技术制造了适配于复合膜固定及大体积样品萃取的高通量装置, 并将复合膜裁剪为合适尺寸且固定在装置中。以含氟拟除虫菊酯 (Pyr) 杀虫剂为分析对象, 通过响应面曲线法优化了萃取条件。结合 UPLC-UV, 建立了 Pyr 高效、高灵敏和高通量分析新方法。该方法成功实现了茶叶、黄瓜、橘子中 Pyr 的准确测定, 回收率良好, 精密度高。

(4) 通过静电纺丝与氨基改性策略, 制备了氨基功能化 PAN 纳米纤维膜, 进一步将三苯基氟化亚胺结构的 COFs (TAPB-TFTA) 均匀负载在纤维表面, 制备了 TAPB-TFTA@PAN 复合膜。将该复合膜裁剪后固定在由 3D 打印制造的夹板式高通量萃取装置中, 对 5 种苯甲酰胺类 (BUs) 杀虫剂进行萃取富集。进一步结合 UPLC-MS/MS, 建立了 BUs 高效、高通量分析新方法。该方法线性范围宽, 检出限低, 能够同步完成 24 个样品的预处理, 并在菠菜、芹菜和苹果中成功检测出 BUs 残留。

参考文献:

1. W. Liu, Z. W. Xu, R. Wang, Y. Zhao, Q. Jia, *Chin. J. Chromatogr.*, **2023**, 41, 891-900.
2. Y. Wu, C. Liu, J. Y. Yu, Y. J. Cho, J. W. Baek, I. Kim, B. Ding, *ACS Nano*, **2026**, 20, 8164-8195.

感谢国家自然科学基金 (22474108) 对研究工作的资助。

O-47

农药制剂跨极性杂质全分析及其暴露风险评估

金香子, 牟志国, 崔美玉, 赵锦花, 葛佳慧, 董美花, 李东浩*

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

2 延边大学, 分析测试中心, 延吉, 133002

通讯联系人 E-mail: dhli@ybu.edu.cn

农药残留及其危害评价主要集中于有效成分, 而部分农药杂质毒性远超其主要成分, 进一步加大环境及健康暴露风险。农药制剂中杂质来源复杂且潜在风险不一, 制剂中大量乳化剂等助剂、反应原材料、副产物及降解代谢杂质等复杂的杂质组成导致的基质效应会对质谱前端离子化过程产生较大影响, 致使低丰度杂质难以检出与准确定性。因此, 针对农药制剂的跨极性杂质全分析对其残留风险及摄食安全性评价尤为用药。本研究基于课题组自主研发的气液微萃取技术与二维组分分离技术, 联用质谱检测技术, 实现农药制剂中“挥发性-难挥发性”“极性-非极性”杂质全分析。基于二维组分分离技术将乳油制剂分为不同极性组分, 通过消除大量乳化剂成功降低了化合物离子竞争及离子抑制的干扰, 显著提升了化合物质谱响应强度。结合气液微萃取技术, 针对不同品牌马拉硫磷制剂中杂质进行全分析, 检出9种杂质, 主要为反应副产物、水解及降解产物。为了探究杂质对农产品的危害性及其残留和迁移行为特点, 以黄瓜为例进行马拉硫磷乳油的模拟暴露实验。对0~168 h暴露时长下黄瓜果皮以及果肉中的杂质进行快速筛查, 发现不同暴露时间下杂质在黄瓜中的检出情况与原制剂中杂质组分含量及组成高度吻合。其中马拉硫磷及各杂质在黄瓜表皮的残留率介于0.002%~2.05%范围之间, 果皮至果肉的迁移率范围在3.30%~191.64%。结合T.E.S.T.以大鼠经口急性半数致死量(LD₅₀)为预测终点, 发现八种杂质极性毒性均明显高于马拉硫磷, 提示农药制剂的生产及监管过程需要对杂质进行全面分析与控制, 以保障农药使用安全性。

参考文献:

1. Bose, S.; Kumar, P. S.; Vo, D.-V. N. et al. Microbial degradation of recalcitrant pesticides: a review. *Environ Chem Lett*, **2021**, 19(4), 3209-3228.
2. Zhao, S. X.; Kaw, H. Y.; Ge, J. H. et al. Sequential ultrasonic solvent-assisted gas-liquid microextraction for the quantification of polycyclic aromatic hydrocarbons in lipid-rich seafood. *J Chromatogr A*, **2026**, 1773, 466845-466854.
3. Yang, L.; Wang, Y.; Wang, Z. et al. Eco-friendly high-throughput screening of cephalosporins impurities: Utilizing 2D-carbon microfiber fractionation system combined with quadrupole time of flight high-resolution mass spectrometer. *J Pharm Anal*, **2024**, 14(5), 100900-100903.

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

O-48

多信源可视化快检平台的构建与应用

常焱林, 李昱娴, 丁亮, 李清豹, 王双寿*

安徽工业大学, 化学与化工学院, 安徽省马鞍山市马向路 1530 号, 243032

E-mail: wangss17@ahut.edu.cn

以比色分析为代表的可视化检测技术已成为食品安全与环境监测等领域现场即时检验的有力工具, 然而, 大多数现有比色方法基于单一信源而设计, 结果易受环境因素和主观判色误差等影响。针对该问题, 我们以显色反应、荧光响应以及智能手机数字化图像分析等技术设计开发了一系列多模可视化快检策略。1) 以滤纸为基底、量子点(QDs)为荧光信源, 结合内滤效应(IFE)等荧光猝灭机制, 构建了比色/荧光比色双响应策略用于食品与环境样品中染料的双模可视化快检^[1,2], 并通过多维比色的方式实现了多染料的同步可视化快检^[3], LOD比法定上限剂量低2个数量级及以上; 2) 融合显色与荧光响应发展了一种总挥发性盐基氮双模可视化快检策略, 并成功应用于非接触式食品新鲜度实时监测^[4]; 3) 以顺式二羟基荧光染料为标记探针, 通过竞争性硼亲和作用设计制备了一种硼亲和介导的显色/荧光双模传感平台, 成功用于食品和生物样品中顺式二羟类化合物的双模可视化快检^[5]; 4) 开发了一种基于金属络合反应触发的显色/荧光响应双模传感策略用于食品与环境重金属离子残留的可视化快检^[6]。5) 以 Ln^{3+} -茚三酮复合物(Ln^{3+} -Nin)为显色-荧光多功能探针, 开发了一种基于 Ln^{3+} -Nin标记的氨基糖苷类抗生素纸上夹心分析平台^[7], 首次实现了基于单一探针标记的不同AGs多模可视化快检与鉴定; 此外, 我们还将比色分析技术融入到微信小程序中, 实现了基于智能手机的屏上直读分析^[8], 不仅解决了色盲不适用等问题, 庞大的微信用户群体也为快检技术的推广提供了便利。实验证明, 与传统单一信源可视化检测方式相比, 多模可视化策略可显著改善响应的选择性, 提高检测灵敏度, 拓展工作范围。

参考文献:

1. S.S. Wang, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, 14, 57251-57264.
2. S.S. Wang, et al., *J. Hazard. Mater.*, **2023**, 445, 130563.
3. S.S. Wang, et al., *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 470, 134154.
4. S.S. Wang, et al., *Sens. Actuators B: Chem.*, **2024**, 409, 135631.
5. M.Z. Jiang, et al., *Sens. Actuators B: Chem.*, **2025**, 430, 137335.
6. S.S. Wang, et al., *Environ. Res.*, **2026**, 299, 124320.
7. S.S. Wang, et al., *Chem. Eng. J.*, **2026**, 535, 175309.
8. J. Gu, et al., *Microchem. J.*, **2025**, 217, 114965.

O-49

化学选择性探针的构建与炔类化合物分析

哈伟*, 马蕊, 梁延鹏, 师彦平*

中国科学院兰州化学物理研究所 天然药物与化学测量研究中心, 兰州, 730000

通讯联系人 E-mail: hawei2012@licp.cas.cn

乙炔基是药物化学中的关键药效团, 可通过与受体结合口袋的互补性结合、作为靶蛋白反应性弹头等机制, 显著增强候选药物分子的成药性, 是多种药物及农药分子结构中的关键药效团^[1]。由于丰度低、响应弱、稳定性差, 含炔基的药物分子发现及其在食品、植物等复杂基质中的分析、分离面临很大挑战。衍生化标记策略可通过识别炔基的高效衍生化反应, 结合标记试剂(化学选择性探针)中紫外发色团、荧光、质谱等标签的引入, 显著提升炔类化合物的稳定性和检测灵敏度^[2]。目前已发展的化学选择性探针体系难以避免植物提取物、食品等复杂体系对标记产物的干扰, 导致低丰度炔类化合物的分析灵敏度较低。此外, 现有基于CuAAC反应的衍生化体系仅能识别端炔化合物, 难以有效覆盖内炔化合物。针对上述问题, 我们设计合成了新型的稳定同位素标记和固相化学选择性探针, 引入钌催化的炔烃-叠氮环加成反应(RuAAC)提高对内炔化合物的覆盖率, 结合HPLC-MS、MALDI-MS和荧光分析技术, 用于食品和药用植物中炔类化合物的高灵敏检测 and 高效筛选研究。

第一、设计了一对新型的稳定同位素标记探针ABI/*d*₅-ABI, 探针的结构主要由3部分构成, (1) 含有5个H或D原子的苯环作为同位素标签; (2) 带正电荷的咪唑啉盐质谱标签; (3) 叠氮基反应位点。利用该对轻/重同位素标记探针, 基于CuAAC反应, 结合HPLC-MS和MALDI-MS分析技术, 成功实现了食品中端炔类固醇激素的定量检测和植物提取物中新型端炔活性天然产物的发现(图1)。

第二、设计合成了新型的固相化学选择性探针Fe₃O₄-CD-Azo-N₃, 该探针主要由四部分构成, (1) 叠氮基反应位点; (2) 咪唑啉盐质谱标签; (3) 偶氮苯“手柄”, 用于探针分子在固相载体上的负载和光控解离; (4) Fe₃O₄-CD固相载体, 用于负载探针分子。利用环糊精与偶氮苯的主客体相互作用, 构建了新型光控可逆固相化学选择性探针体系, 结合HPLC-MS分析技术, 成功实现了食品中端炔类固醇激素的定量检测研究。

第三、使用3-叠氮-7-羟基香豆素荧光探针, 系统优化了RuAAC反应条件, 同时实现了端/内炔化合物的荧光标记与检测, 并成功应用于10多种中草药提取物的筛选, 高效发现了含炔类天然产物的中草药资源, 为炔类天然产物的发现提供了关键技术和资源保障。

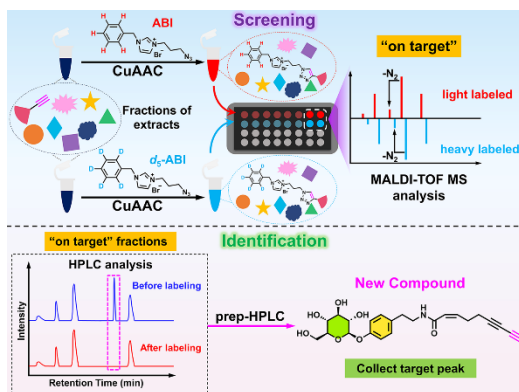


图 1. 基于稳定同位素标记化学选择性探针的炔类天然产物高效发现示意图

参考文献:

1. C. Ngo, W. Fried, S. Aliyari, et al., *J. Med. Chem.*, **2023**, 66, 12237-12248.

2. C. C. Hughes, *Nat. Prod. Rep.*, **2021**, 38, 1684-1705.

感谢国家自然科学基金项目 (Nos. 22274163) 资助。

O-50

钌基纳米酶的可控构建及对酚类新污染物的高效催化降解

尹俊发*, 贾蒙, 汪海林

中国科学院生态环境研究中心环境化学与环境毒理全国重点实验室

通讯联系人 E-mail: jfyin@rcees.ac.cn

酚类新污染物在环境中具有高度持久性, 通常具有显著的内分泌干扰毒性, 对生态系统安全和人类健康构成严重威胁, 因此开发高效降解技术迫在眉睫。贵金属纳米催化剂, 尤其是电子传输速率快、稳定性突出的钌 (Os) 基纳米材料, 近年来在此领域展现出显著的应用潜力。本研究旨在系统构建Os基纳米酶体系, 并解决其在实际应用面临的回收困难和二次污染问题, 从而实现酚类污染物的高效催化降解。

首先, 采用水相软化学一锅法成功制备了柠檬酸功能化的钌纳米颗粒 (Os-citrate NPs)。表征结果确认了该纳米颗粒的成功合成。该材料具备优异的类过氧化物酶活性, 能够在 H_2O_2 存在下高效催化生成羟基自由基 ($\cdot\text{OH}$)。在催化机制方面, 钌原子作为核心催化中心, 可以活化 H_2O_2 中的过氧键, 产生高活性的 $\cdot\text{OH}$; 与此同时, 柠檬酸配体通过配位作用调节钌原子的电子环境, 优化了催化活性中心的电子密度分布, 并维持了纳米材料良好的分散性和稳定性。此外, 实验发现, 少量 OsO_2 掺杂在颗粒表面引入Os-OH官能团, 这些羟基基团能够作为 H_2O_2 分子吸附和活化的额外结合位点, 与钌中心形成协同催化效应, 共同作用提升了整体催化效率。在pH 4.0的优化条件下, 10 μM 的4-NP可在30 min内被Os-citrate NPs几乎完全降解, 该降解过程遵循一级动力学模型。借助UHPLC-Q TOF MS技术对降解过程进行追踪, 准确鉴定了对苯醌、马来酸等关键中间产物, 进而揭示了羟基自由基逐步攻击苯环、最终生成小分子有机酸并部分矿化的降解路径。

针对纳米酶在实际应用中面临的回收困难和潜在二次污染问题, 本研究进一步将Os纳米颗粒负载于磺酸化甘蔗渣木质素 (SBL) 表面, 成功构建了OsNPs/SBL复合材料。表征分析表明, 平均粒径仅为3.3 nm的OsNPs通过非共价作用均匀、稳定地分散于木质素的多孔结构之中。该复合材料不仅保持了较高的类过氧化物酶活性, 其稳态动力学参数更优于多种已报道的贵金属纳米酶。在催化性能评估中, OsNPs/SBL对9种酚类混合物 (包括氨基酚、硝基酚和氯酚等) 在60分钟内的去除率接近100%。以2,4-二氯苯酚为例, 借助UHPLC-Q TOF MS对降解机制进行深入解析, 共鉴定出16种主要中间产物, 揭示了其逐步脱氯、开环氧化, 直至最终生成草酸并实现矿化的降解路径。与Au、Pt等常规贵金属纳米酶相比, OsNPs/SBL展现出更为优异的综合性能, 包括更高的降解效率、更宽的pH适用范围、以及更强的抗盐离子和抗腐殖酸干扰能力。在实际工业废水降解实验中, 该材料对添加的酚类污染物降解效率达到95%–100%, 初步验证了其实际应用的可行性。

本研究得到了国家自然科学基金面上项目 (No. 22474153, 22174156) 的资助。

参考文献:

1. Z. Feng, Y. Guo, Y. Zhang, A. Zhang, M. Jia, J. Yin, G. Shen, *J. Nanobiotechnol.*, **2024**, 22,704
2. C. Tang, T. Fang, S. Chen, D. Zhang, J. Yin, H. Wang. *Chem. Eng. J.*, **2023**, 464, 142726.

O-51

环境和生物体液样本中滥用药物的前处理与质谱分析

李冬梅

1.精神活性物质侦测与防控北京市重点实验室, 北京市禁毒科技中心;

通讯联系人 E-mail: lidongmei_1207@163.com

《2025年世界毒品报告》显示, 药物滥用已导致多起致命过量事件的发生, 对公共健康构成严重威胁。环境及生物体液样本中滥用药物的准确、快速分析, 对样品前处理技术提出了高灵敏度、高选择性及绿色可持续的要求, 已成为当前禁毒工作中一项紧迫且关键的任务。结合本课题组近期发表的研究性论文^[1-2]、综述^[3]及正在开展的相关工作, 本文重点介绍两种创新性前处理策略: 其一, 利用废弃口罩聚丙烯纤维支撑天然深共熔溶剂, 构建注射器式液相微萃取体系, 实现了极低溶剂消耗下的高效富集; 其二, 通过一锅研磨法合成复合磁性吸附剂, 将pH调节与吸附功能集成于同一材料, 避免了传统方法中繁琐的pH预调步骤。两种方法前处理仅需3~5分钟, 分别与液相色谱-串联质谱联用, 在环境水样和生物体液中均表现出良好的线性、检出限及回收率。此外, 探索该前处理技术与小型化质谱的联用研究, 为滥用药物现场快检提供方法支撑并服务禁毒实战。系列工作体现了当前滥用药物分析前处理技术向小型化、自动化、绿色化方向发展的核心趋势, 通过新型材料设计与流程简化, 为污水流行病学监测、环境风险评估及法医毒理学快速筛查提供了可靠且实用的技术方案。

参考文献:

1. Shan Y B, Li J Y, Chen Y, Jia R, Zeng X B, Li Y Y, Chen D, Li D M, *Journal of Chromatography B*, **2025**, 1263, 124701.
2. Shan Y B, Chen Y, Li J Y, Zeng X B, Jia R, Liu Y W, Li D M, Chen D, *Journal of Xenobiotics*, **2025**, 15, 102.
3. Li D M, Wu C H, Li J Y, Shan Y B, Hu Y N, Chen D, *Trends in Analytical Chemistry*, **2026**, 198, 118766.

O-52

高选择性微针阵列固相微萃取技术的构建与样品前处理应用

李邓¹, 朱映西¹, 王丹丹^{1,*}, 夏之宁^{1,2,*}¹ 西南医科大学药学院, 四川泸州, 646000² 重庆大学药学院, 重庆, 401331*E-mail: tcm_anal_cqu@163.com, wangdandan_93@163.com

摘要: 复杂生物样品中药物及其代谢产物的高效富集与精准检测, 是实现精准用药与个体化治疗的关键技术挑战。针对这一需求, 本研究基于天然生物质材料(纤维素、壳聚糖、膨润土), 开发了一系列新型分子印迹聚合物(MIPs), 并通过创新的功能化修饰策略, 实现了对目标药物及其代谢产物的高特异性识别与富集。研究提出了“羟基功能分配策略”与“双功能/双角色策略”, 成功构建了兼具硼酸亲和性与分子结构识别双重选择性的功能材料, 包括磁性多孔纤维素 MIPs、壳聚糖-膨润土复合 MIPs。在此基础上, 进一步构建了微针阵列式固相微萃取技术。该技术表现出优异的吸附容量、快速的吸附动力学、高选择性、良好的重现性与稳定性, 能够有效应对血浆、肝脏等复杂生物基质的干扰, 实现对硼替佐米、双氯芬酸钾、哌拉西林钠等目标药物及其代谢产物的高效萃取与富集。结合 HPLC/UPLC-MS/MS 技术, 所建立的分析方法成功应用于动物体内药物及其代谢产物的定性与定量分析, 展现出高灵敏度、高选择性与良好的准确性。本研究为复杂生物样品的样品前处理提供了新材料与新方法, 有效克服了传统技术在选择性、富集效率和抗基质干扰能力方面的局限, 为高灵敏、高准确的药物监测与代谢研究奠定了关键技术基础。

关键词: 样品前处理; 分子印迹聚合物; 选择性富集; 固相微萃取

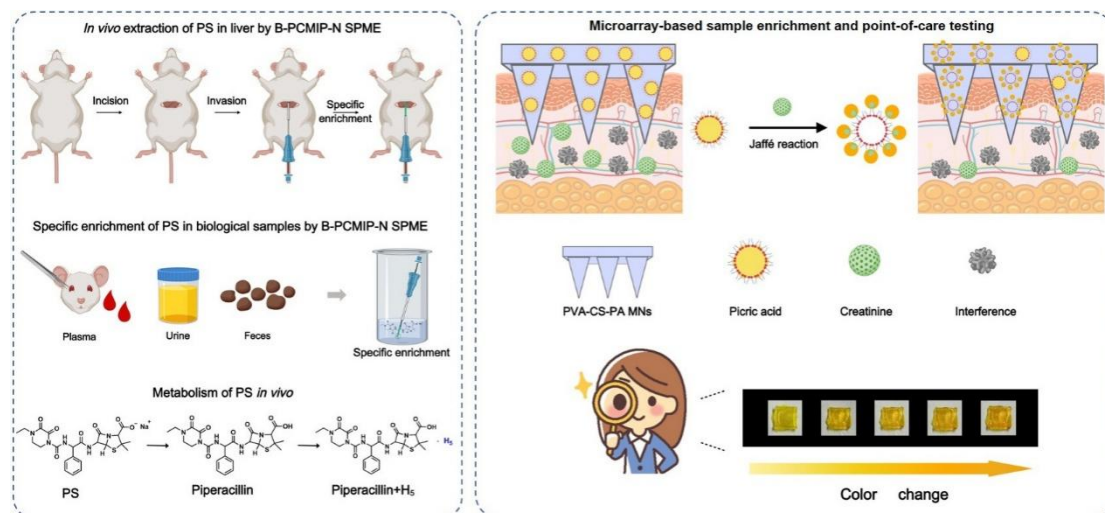


图 1 微针阵列式固相微萃取技术的构建与应用示意图

参考文献:

1. Z. Wen[#], D. Gao[#], J. Lin, S.Y. Li, K.L. Zhang, Z.N. Xia^{*}, D.D. Wang^{*}. Magnetic porous cellulose surface-imprinted polymers synthesized with assistance of deep eutectic solvent for specific recognition and purification of bisphenols. *International Journal of Biological Macromolecules*, 2022, 216: 374-387.
2. Z. Li, D. Gao, J. Zeng, D. Li, J. Lin, Y.X. Zhu, F.M. Ke, Z.N. Xia^{*}, D.D. Wang^{*}. Cellulose based molecularly imprinted polymer by hydroxyl functional allocation strategy with dual selectivity of boric acid affinity and molecular structure limitation to bortezomib: Preparation strategy, selectivity exploration, and metabolism study. *Microchemical Journal*, 2024, 205: 111328.

3. D. Li, M. Wang, Z. Li, J. Zeng, Y. Zhu, J. Lin, Z. Ao, F. Ke, K. Zhang, D. Gao*, D.D. Wang*. Site-selective hydroxyl functionalization: A dual-functional strategy for fabricating porous cellulose molecularly imprinted fiber for *in vivo* piperacillin sodium analysis. *Analytica Chimica Acta*, 2025, 1375: 344559.

O-53

基于阴离子受体的吸附剂制备及其在全氟烷基羧酸 吸附中的应用

王超展*, 张晓霞, 张晓清, 林茜, 卫引茂

合成与天然功能分子教育部重点实验室, 西北大学化学与材料科学学院, 西安, 710127

通讯联系人 E-mail: czwang@nwu.edu.cn

近年来, 由全氟烷基和多氟烷基物质(PFASs)引起的食品、饮用水、环境和健康等问题已引起全球关注。全氟烷基羧酸(PFCAs)是目前应用最广泛, 也是最主要的一类PFASs污染物。痕量PFCAs的吸附去除和分离富集及分析受到广泛的关注。目前, 应用于PFCAs的吸附剂以聚合物基质的弱阴离子交换吸附剂和反相-弱阴离子交换混合模式吸附剂为主, 它们主要通过静电作用和疏水作用吸附PFCAs, 因此萃取选择性差。此外, 样品中的PFCAs浓度通常比基体成分低几个数量级, 这些成分与PFCAs竞争吸附位点, 导致萃取效率低。阴离子受体是一类能够选择性结合目标阴离子的人工合成分子。在众多阴离子受体中, 胍基和脲基经常被用于构建羧酸根阴离子受体。

我们以苯并胍胺(2,4-二氨基-6-苯基-1,3,5-三嗪)为单体, 联苯二氯苄(BCMBP)为交联剂, 通过傅克烷基化反应制备了胍胺官能化超交联聚合物(HCPs) Amino-Triazine-HCP; 并通过溶剂热法合成了胍基共价有机框架吸附剂(TPDGCI); 还采用3,3'-二氨基联苯胺(BD(NH₂)₂)与三苯基甲烷三异氰酸酯构建了富含邻苯二脲单元的多孔有机聚合物BD(NH₂)₂-POP。系统考察了这三种吸附剂对PFCAs的吸附性能。研究表明胍基和邻苯二脲阴离子受体对羧酸根的结合在PFCAs吸附中起着关键作用。该三种材料均具有良好的抗干扰性能和快速的吸附动力学性能, 可有效用于PFCAs的吸附去除和分离富集, 并具有较高的吸附容量。将其作为分散固相萃取(d-SPE)吸附剂, 结合色谱-质谱, 建立了PFCAs的高灵敏分析方法。结果表明这些材料在水中PFCAs的高效吸附方面具有一定的潜力。

本研究得到国家自然科学基金资助项目(No.22474109)资助。

参考文献:

1. Xiaoxia Zhang, Jinchang Liu, Han Zhang, Qinming Zhang*, Jiwei Shen, Yinmao Wei, Chaozhan Wang*, *Sep. Purif. Technol.*, **2025**, 357(Part A), 130039.
2. Xiaoqing Zhang, Mengyuan Li, Xiaoxia Zhang, Yan Cheng, Jiwei Shen, Yinmao Wei, Chaozhan Wang*, *J. Chromatogr. A*, **2025**, 1763, 466408.

O-54

基于生物质改性功能材料固相萃取的环境水与食用油中全氟化合物的分析研究

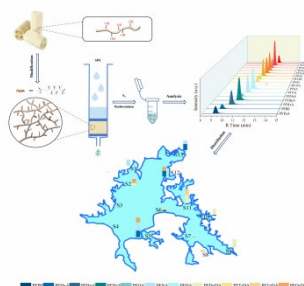
余琼卫*, 杨玥皎

武汉大学化学与分子科学学院

*通讯联系人 E-mail: qwyyu@whu.edu.cn

全氟化合物(PFCs)因其优异的化学稳定性、疏水疏油特性而被广泛应用于工业生产和消费品制造,但也正是因其极高的C-F键能使其成为环境中难以降解的“永久化学品”,并具有生物累积性和多器官毒性。目前,PFCs在水体、土壤、生物体乃至人体中均被广泛检出,已成为全球关注的新型持久性有机污染物。然而,复杂基质中痕量PFCs的高选择性富集与灵敏检测仍是分析化学面临的主要挑战,吸附材料的性能则是影响分析方法灵敏度和选择性的核心因素。本文以废弃生物质资源化利用为切入点,基于氟亲和力作用机制与磁性分离技术,设计并制备了两种新型功能化吸附材料,系统地构建了从环境水到食用油基质中PFCs的高效富集与检测方法。

以天然丝瓜络(LS)为基底,通过1H,1H,2H,2H-全氟辛基三氯硅烷对其表面进行化学修饰,成功制备了氟化丝瓜络(FLS)吸附剂。基于氟-氟相互作用与疏水作用的协同机制,FLS对PFCs表现出优异的选择性吸附能力。将其作为固相萃取吸附剂,结合高效液相色谱-串联质谱(HPLC-MS/MS),建立了16种PFCs的FLS-SPE-HPLC-MS/MS分析方法。将该方法成功应用于东湖水域及多种城市水样(自来水、雨水、废水、瓶装水)中PFCs的污染分析,在东湖13个采样点共检出11种PFCs,浓度范围为0.02–3.45 ng/mL,其中PFDoDA、PFNA、PFOA和PFTeDA为主要污染物,占总量的61.31%,结合周边污染源分布初步揭示了东湖PFCs的空间分布特征与可能来源,为城市湖泊PFCs污染评估提供了数据支撑。



为解决吸附剂分离回收难题,以烟草工业固体废弃物烟梗为前驱体,通过高温热解(800 °C)与酸/碱活化制备高比表面积生物炭(BC),进一步采用化学共沉淀法负载 Fe_3O_4 纳米颗粒,成功制备了磁性生物炭复合材料($\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{BC}$)。以全氟辛酸(PFOA)为模型污染物,系统研究了 $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{BC}$ 的吸附行为与机理。针对食用油基质粘度高、脂质干扰严重的特点,将 $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{BC}$ 作为磁固相萃取(MSPE)吸附剂,建立了食用油中5种典型PFCs(PFPeA、PFBS、PFHxA、PFHpA、PFOA)的MSPE-HPLC-MS/MS分析方法。将该方法应用于9种市售及煎炸油样检测,PFOA在所有样品中均被检出(0.2260–1.6171 ng/g)。

参考文献:

1. M.S. Hong , J.S. Lee , M.C. Lee, *Marine Pollution Bulletin*, **2025**, 214, 117678.
2. Y. J. Yang, X. T. Peng, G.Y. Chen, H.M. Xiao, Q.W. Yu, *Microchemical Journal*, **2025**, 218, 115452.

O-55

功能材料与智能解析技术赋能农药残留精准测量

刘子怡, 胡凌雯, 王筱卓, 王晟*

中国计量科学研究院化学计量与分析科学研究所, 北京, 100029

*E-mail: wangsh@nim.ac.cn (王晟)

农药残留问题已成为社会广泛关注的焦点。面对日益增长的检测需求与复杂样品体系, 当前农药残留检测仍普遍面临“测不准”的共性问题, 尤其在高纯物质中微量杂质的精准解析与复杂基质中多种农药准确定量方面, 存在突出的技术瓶颈。本研究围绕农药相关准确测量方法开展系统研究, 着力攻克上述两大技术问题。

针对高纯物质中微量杂质的快速、准确定性难题, 构建了基于高效液相色谱 (HPLC)、二极管阵列检测器 (DAD)、电雾式检测器 (CAD) 与高分辨质谱 (HRMS) 联用的高效分离与互补验证方法, 有效解决了不同特性杂质检测“死角”问题。引入 MS-DIAL 解卷积技术与 SIRIUS 碎片树人工智能解析系统, 结合主成分切割、DIA 及保留时间预测与置信度分级模型, 实现了杂质鉴定的智能化升级, 实现了对 0.01% 级微量杂质的全面解析, 准确率高, 效率较传统方法提升百倍以上。针对复杂食品基质中多残留农药准确定量的共性难题, 以蔬菜、蛋、奶等高色素、高脂肪样品为对象, 开发了基于功能纳米材料的自分离、“乳化-破乳”新型样品净化等方法, 实现了对色素、油脂等强干扰组分的选择性去除, 有效提升了针对不同极性农药的定量能力。同时, 构建了涵盖 QuEChERS-同位素稀释宽量程定量法等多维度方法, 并创新融合表面增强拉曼光谱技术与机器学习算法, 实现了快速筛查与准确定量的协同优化, 为复杂基质中多特性量农药的准确定值提供了系统解决方案。

在上述核心技术突破的基础上, 研制了一系列高纯标准物质, 填补了国际空白。针对食品基体标准物质制备的技术挑战, 建立了蔬菜中多目标农药人工添加的主因子控制技术, 攻克了高含水量蔬菜中有机磷等多特异性差异化添加难题, 成功研制了黄瓜、韭菜、豇豆中 24 种多特性量农残基体标准物质, 成为国际上特性量多、不确定度优、品种覆盖面广的农残检测基体标准物质之一。牵头制定了《蔬菜中农药标准物质研制 (生产) 技术要求》计量技术规范, 相关技术成功应用于 CCQM-K78.b 等国际比对, 获得国际等效互认。相关研究成果已广泛应用于国家本级食品安全抽检承检机构考核、20 余省市蔬菜农残盲样考核、全国市场监管系统大比武及 CNAS 能力验证计划等, 有力支撑了我国不同层级食品检测机构能力评价体系的构建与完善。

功能材料与智能解析技术赋能农药残留精准测量



图. 功能材料与智能解析技术赋能农药残留精准测量图示

参考文献:

- Hu L, Robertson C, Li X, et al. Microchemical Journal, 2025: 116433.
- Jiang S, Li Q, Quan X, et al. Food Chemistry, 2025: 147143.

3. Peng H, Li H, Li X, et al. Food Chemistry, 2024, 458: 140246.

O-56

用于 PTMs 多元检测的多功能材料的制备及应用

郑海娇^{1, 2*}, 仰俊伟¹, 胡博¹, 贾琼^{1, 2*}

1. 吉林大学化学学院, 长春 130012

2. 吉林大学化学国家级实验教学示范中心, 长春 130012

1. College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China

2. National Demonstration Center for Experimental Chemistry Education,

Jilin University, Changchun 130012, China

通讯联系人 E-mail: HJZheng@jlu.edu.cn; Jiaqiong@jlu.edu.cn

蛋白质翻译后修饰 (Post-Translational Modification, PTM) 是指蛋白质在翻译后的化学修饰, 许多疾病的发生和发展与蛋白质翻译后修饰异常有关。常见的PTMs主要包括磷酸化、糖基化、棕榈酰化等[1-3]。磷酸化几乎参与细胞的所有生命过程, 与癌症的发展发生息息相关。异常的糖基化可病理性重塑肿瘤分子生物学进程, 增强肿瘤细胞对死亡信号的抵抗。棕榈酰化则通过促进蛋白质与细胞膜结合, 调节多种与肿瘤相关的蛋白质的运输和功能。认识到这些重要的PTMs在疾病发生发展的生物过程中起着广泛的作用的同时, 亦激发了我们对癌症治疗更深的思考。

Janus颗粒是表面由两个或两个以上不同物理性质的成分构成的特殊类型的纳米颗粒, 其作为一类特殊的多相多组分功能复合材料, 兼具不同化学组成和功能复合空间分区, 在诸多领域发挥着独特的作用, 对复合材料的发展具有重要意义。本文简单介绍我们所制备的Janus材料在PTMs富集中的应用, 其一, 我们首次合成了一种氧化钽包覆的磁性核壳材料, 随后在该核壳材料上生长介孔硅形成Janus结构, 最后, 利用荧光靶向基团对所合成的Janus进行进一步的功能化, 得到终产物一种具有磁光性质的Janus材料 (命名为Janus-fl-mag), 该材料可通过荧光基团实现特定细胞的靶向识别, 同时利用MOAC机理实现磷酸化肽的磁性富集, 满足荧光识别和磁分离同时进行的复杂应用需求[4]。其二, 我们合成了一种二氧化钛与金复合的Janus材料, 同时实现了肾癌外泌体中磷酸肽及棕榈酰化肽的同时富集, 为肾细胞癌患者血清中的磷酸化和棕榈酰化蛋白标志物的筛查提供了新思路。

参考文献:

1. Zheng, H. J.; Jia, J. X.; Li, Z.; Jia, Q. *Anal. Chem.*, 2020, 92: 2680.
2. Zheng, H. J.; Wang, Z. R.; Jia, Q. *Small Methods*, 2023, 2300254.
3. Zhao, Y. Q.; Xu, W. H.; Zheng, H. J.; Jia, Q. *Anal. Chem.*, 2023, 95: 9043.
4. Yang, J. W.; Zheng, H. J.; Lv, X. L.; Wang, Z. R.; Zhou, W. S.; Chen, H. X.; Jia, Q. *Anal. Chem.*, 2026, 98, 7262.

O-57

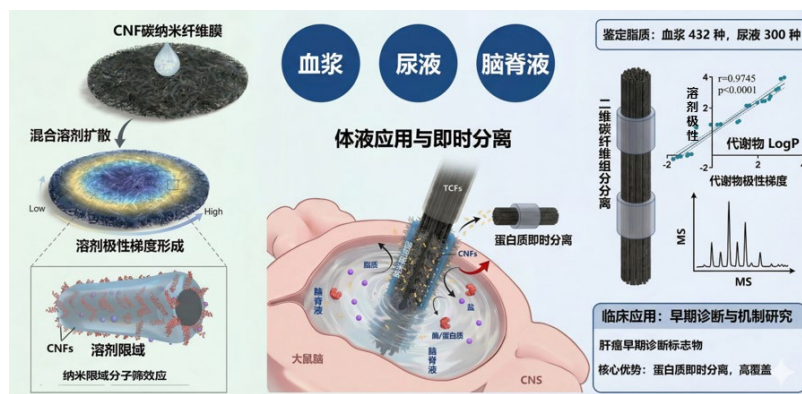
体内脂质极性梯度限域萃取与蛋白质即时分离方法建立及应用

于春宇, 李东浩*

延边大学药学院药物分析

通讯联系人 E-mail: dhli@ybu.edu.cn

摘要: 血浆、尿液及脑脊液等体液中脂质的动态监测对中枢神经系统疾病及肝癌等代谢相关疾病的早期诊断具有重要意义^[1]。然而, 离体样本中酶介导的脂质快速降解及蛋白质干扰严重制约了分析的准确性与代谢物覆盖度^[2]。针对这一难题, 本研究基于碳纳米纤维材料(CNFs), 建立了一种体内脂质极性梯度限域萃取与蛋白质即时分离方法。该方法利用混合溶剂在CNFs表面纳米限域空间内的扩散行为^[3], 形成连续极性梯度溶剂分布, 能够实现血浆及尿液中脂质的高覆盖快速萃取, 以及大鼠脑脊液中脂质的原位快速萃取; 同时, 借助纳米限域空间的分子筛效应及限域作用, 可即时去除血浆、尿液及脑脊液中的酶、蛋白质及盐类干扰物。联合二维碳纤维组分分离及高分辨质谱检测平台, 本方法在人血浆中鉴定出432种脂质, 在尿液中鉴定出300种脂质, 覆盖了宽极性范围的脂质代谢物。方法学验证表明, 该方法仪器精密度、样品稳定性及方法重复性良好, 萃取回收率及代谢物覆盖范围显著优于传统液液萃取和蛋白沉淀法。将该方法应用于肝细胞癌患者血浆及尿液的非靶向脂质组学研究, 分别筛选出4个血浆和5个尿液高价值潜在生物标志物, 相关性分析显示血浆与尿液标志物之间存在协同或负相关的显著关联。本方法实现了体内脂质的高覆盖、快速、在线萃取与蛋白质即时分离, 为中枢神经系统疾病及肝癌等疾病的早期诊断与机制研究提供了灵敏、高效的分析策略。



关键词: 极性梯度限域萃取; 蛋白质即时分离; 碳纳米纤维; 脂质组学; 肝细胞癌

参考文献

- [1] Bowen, T. J.; Southam, A. D.; Hall, A. R.; Weber, R. J. M.; Lloyd, G. R.; Macdonald, R.; Wilson, A.; Pointon, A.; Viant, M. R. *Nature Communications* **2023**, 14 (1), 4653.
- [2] Q. Wang, M. Hoene, C. Hu, L. Fritsche, R. Ahrends, G. Liebisch, K. Ekroos, A. Fritsche, A.L. Birkenfeld, X. Liu, X. Zhao, Q. Li, B. Su, A. Peter, G. Xu, R. Lehmann, Ex vivo instability of lipids in whole blood: preanalytical recommendations for clinical lipidomics studies, *Journal of Lipid Research* **2023**, 64(6), 100378.
- [3] L. Zhao, J. Yuan, Y. Xing, J. Qi, P. Peng, Z. Liu, A. Zheng, Confinement effects on molecular diffusion in zeolites: mechanisms and perspectives, *Chemical Society Reviews* **2026**, 55(1), 210-253.

注：国家自然科学基金项目(No. 82304447, 22574142)

O-58

基于菌膜色谱筛选抗超级细菌多肽研究

于冰¹, 丛海林^{2*}

¹ 青岛大学生物医用材料与工程研究院

² 枣庄学院化学化工与材料科学学院

通讯联系人 E-mail: conghailin@uzz.edu.cn

抗生素的大量滥用导致病原体产生了严重的耐药性。多重耐药细菌严重威胁着人们的生命, 并对生态环境造成有害污染。抗菌肽具有广谱抗菌活性和出色的抗菌耐药性, 使其成为治疗病原菌感染的有效替代品¹。本研究通过菌膜色谱与混合均分法多肽库技术联用成功筛选了新型抗菌肽 K10, 其对金黄色葡萄球菌、大肠杆菌、白色念珠菌等具有很强的抗菌作用, 对多重耐药鲍曼不动杆菌、肺炎克雷伯菌等超级细菌也有良好的抑制作用。在抗菌机制的研究中发现, K10 能够破坏病原菌的细胞膜, 并在病原菌中引发活性氧物质的激增, 它还能诱导白色念珠菌线粒体膜的超极化并损害线粒体功能, 对多种多重耐药菌具有良好的抑制作用, 使细菌难以产生耐药性。K10 在细菌感染的皮肤伤口模型中显示出良好的治疗效果, 可用于预防和控制由耐药菌引起的感染²。

参考文献:

1. Y. Wang, H. Cong, Y. Shen, B. Yu, *Chem. Eng. J.*, **2025**, 504, 158962.
2. S. Zhang, Y. Zhu, J. Zou, M. Zhang, X. Li, Y. Wang, X. Ma, H. Cong, B. Yu, *Chem. Eng. J.*, **2025**, 522, 167748.

O-59

新型水凝胶修饰硅胶混合模式色谱固定相研究

梁晓静*, 李舒宁, 郭勇

中国科学院兰州化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: xiliang@licp.cas.cn

水凝胶是一种具有三维网状结构的亲水聚合物, 具有孔隙结构可调节、功能可设计、相互作用位点多、粘附性能好等优点, 在组织工程、生物医学、可穿戴传感器、催化等领域得到了广泛的应用。鉴于其众多优点, 水凝胶适合用作分离复杂样品色谱固定相的功能基团。然而, 水凝胶在色谱中的应用受到其柔软性的阻碍, 这使得它们不能单独用作固定相。为了解决这一问题并充分利用水凝胶优点, 我们课题组前期进行了一系列的研究。采用原位聚合技术在硅胶表面构建了非共轭柔性网络水凝胶, 结合含氮单体与交联剂, 引入了丰富的作用位点, 实现了对极性与非极性化合物的协同分离[1]。通过双层涂覆策略, 制备了温敏性疏水缔合水凝胶修饰的硅胶固定相, 该材料兼具亲/疏水作用, 并能通过温度调控分离模式, 显著提升了分离速度、选择性及峰形[2]。为提高水凝胶在硅胶表面的修饰稳定性, 在单体聚合中引入单宁酸, 增强了水凝胶的粘附性, 有效掩蔽硅羟基, 显著改善了生物碱分离中的拖尾现象[3]。此外, 在水凝胶网络中引入多孔 MOF 与碳量子点, 制备了纳米复合水凝胶修饰硅胶固定相。纳米复合材料的引入有效抑制了水凝胶修饰层的过度溶胀, 增加了作用位点与传质通道, 进一步提升了分离选择性[4-7]。除亲/疏水分离能力外, 为丰富固定相的功能, 还将离子液体与水凝胶结合, 制备了兼具离子交换与亲/疏水作用的混合模式固定相[8]。为了解决传统水凝胶的核心局限性, 对材料表面亲水性和疏水性的精确调控, 通过 4-氯甲基苯乙烯分别与三戊胺 (TPA, C5 长链) 和三丙胺 (TPrA, C3 短链) 反应合成了不同烷基链长度的离子液体单体, 并将其共聚到硅胶表面制备了 Sil@TPA/TPrA-PIL 水凝胶, 实现了 HILIC、RPLC 和 IEC 多模式色谱分离。与单一链长材料 (Sil@TPA-PIL hydrogel 和 Sil@TPrA-PIL hydrogel) 相比, 通过“烷基链工程”实现的亲水/疏水平衡显著提高了柱效并拓展了分离范围[9]。

参考文献:

1. F. B. Fan, X. F. Lu, S. Wang, X. J. Liang, L. C. Wang*, Y. Guo*, *Talanta*, **2021**, 233, 122548.
2. F. B. Fan, X. F. Lu, L. C. Wang, X. J. Liang*, Y. Guo*, *Anal. chem.*, **2021**, 93(48), 16017-16024.
3. T. Zhang, X.J. Liang*, T. T. Si, S. Wang*, *Talanta*, **2024**, 280: 126768.
4. T. Zhang, S. Wang, X. F. Lu, Y. Guo*, X.J. Liang*, **2023**, 1707, 464300.
5. T. Zhang, X. J. Liang*, L. J. Chang, X. B. Lu, S. N. Li, S. Wang, L. C. Wang*, *Microchem. J.*, **2025**, 210, 113035.
6. S. N. Li, X. J. Liang*, Y. Guo, X. F. Lu, L. C. Wang, *J. Chromatogr. A*, **2026**, 1767: 466665.
7. M. Y. Hao, Yangnan Shangguan, X. Li, X. F. Lu, J. L. Yang, X. J. Liang, L. C. Wang*, Y. Guo*, *J. Chromatogr. A*, **2026**, 1766: 466609.
8. T. Zhang, X. J. Liang*, L. C. Wang, S. Wang, X. X. Liu, Y. Guo*, *Chinese Chem. Lett.*, **2025**, 36, 109889.
9. S. N. Li, X. J. Liang*, Y. Guo, S. Wang*, L. C. Wang, *Anal. Chim. Acta*, **2026**, 1400, 345338.

O-60

手性多孔有机超分子纳米管用于色谱手性分离

章俊辉*, 陈娟, 解颖, 吴嘉蕾, 谢生明, 袁黎明

云南师范大学化学化工学院, 云南省现代分离分析与物质转化重点实验室, 云南昆明, 650500

通讯联系人 E-mail: zjh19861202@126.com

有机分子纳米管是具有中空结构、形状像管状的一类有机分子, 具有独特的化学、物理、限域和分子传输特性。近些年来, 通过共价键或非共价键自组装构建有机超分子纳米管受到了越来越多的关注, 这些有机超分子纳米管在分子识别、催化、人工运输通道、光学器件等领域引起了广泛的研究兴趣。与碳纳米管相比, 有机超分子纳米管具有制备方法多样、容易功能化、结构可调和良好的溶解性等优点。本研究将一些手性多孔有机超分子纳米管作为色谱固定相, 通过静态涂敷法涂敷于毛细管内壁或化学键合于硅胶基质表面制备了毛细管气相色谱和高效液相色谱手性柱, 研究了其手性分离性能。结果表明, 这些手性多孔有机超分子纳米管在色谱手性分离领域展现出优秀的手性拆分性能, 具有良好的研究意义和前景。

参考文献:

1. J. Chen, Y. Xie, H.C. Zhang, B.J. Wang, S.M. Xie, J.H. Zhang, L.M. Yuan. *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 6236-6247.
2. 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.
3. Y. Wang, J.K. Chen, L.X. Xiong, B.J. Wang, S.M. Xie, J.H. Zhang, L.M. Yuan, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 4961-4969.
4. J.H. Zhang, S.M. Xie, L. Chen, B.J. Wang, P.G. He, L.M. Yuan, *Anal. Chem.*, **2015**, 87, 7817-7824.
5. C. Shi, H. Li, X. Shi, L. Zhao, H. Qiu, *Chem. Commun.*, **2022**, 58, 3362-3365.
6. X. Yao, H. Zheng, Y. Zhang, X. Ma, Y. Xiao, Y. Wang, *Anal. Chem.*, **2016**, 88, 4955-4964.
7. H.L. Qian, C.X. Yang, X.P. Yan, *Nat. Commun.*, **2016**, 7, 12104.
8. 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.

O-61

新型色谱固定相的研制及在线评价

姜彦羽, 文杰, 夏之宁*, 王路军*

西南医科大学药学院, 泸州, 646000

*E-mail: wlj@swmu.edu.cn

关键词: 固定相, 液相色谱, 混合模式, 复杂体系

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。此外, 本课题组也基于色谱行为对点击化学反应以及固定相材料进行在线评价, 开拓了色谱行为在化学反应评价与材料表征中的新应用。

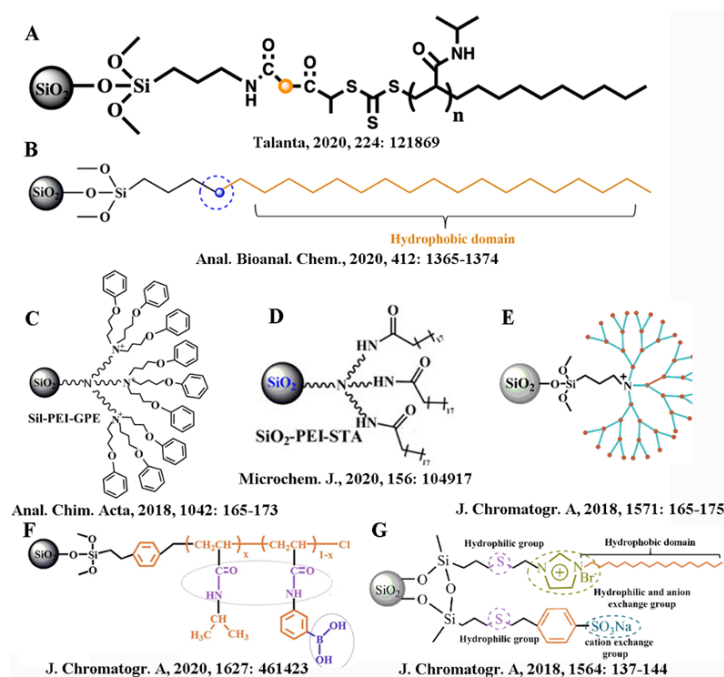


图 1 课题组近期研制的新型混合模式色谱固定相

O-62

双水相对植物多糖的选择性分离及机理研究

裴栋*, 刘建飞, 邸多隆

中国科学院兰州化学物理研究所

E-mail: dongpei@licp.cas.cn

多糖是生物系统中的重要组成成分,在能量储存与结构支撑等方面发挥着关键作用。研究表明,不同物种来源的差异性会直接影响植物多糖的分子结构特征及其药理学功能的表达。然而,植物多糖本身结构的复杂性及其与其它生物分子间的相互作用,使其在精确结构表征与功能解析方面面临诸多挑战。在提取与分离过程中,多糖常伴有蛋白质、色素和酚类化合物等杂质,这些污染物不仅干扰其结构和理化性质的准确测定,也阻碍了对多糖构效关系的深入探究,限制了其在生物医药及相关健康产品中的开发与应用。因此,开发针对目标多糖的高效选择性分离策略,并系统解析其理化特性与生物活性之间的关联,对深入揭示该类生物大分子在疾病预防与治疗中的作用机制具有重要的科学意义[1]。

本研究提出了一种基于低共熔溶剂@双水相(DES@ATPS)的超快速植物多糖纯化策略。以枸杞多糖为模型,在优化条件下,该体系仅需 10 秒涡旋混合即可完成分相,实现了多糖的高效分离纯化,多糖脱色率和脱蛋白率均超过 94%,同时保持较高的多糖保留率。结构表征发现,经 ATPS@DES 处理后的多糖在分子量分布、单糖组成及官能团特征方面与未纯化样品高度一致,未检测到显著的分子链降解或侧链结构重排现象,说明该纯化体系在实现高效分离的同时,能最大程度保持多糖的原始结构特征。进一步的细胞实验结果表明,纯化后的多糖仍保持良好的生物活性。将该策略拓展应用于 10 种不同植物来源多糖体系,在不同原料背景和复杂杂质条件下均表现出稳定而高效的纯化效果,显示出良好的通用性和适用性,为植物多糖在制药与食品工业中的常规纯化提供了一种极具潜力的替代方案[1]。

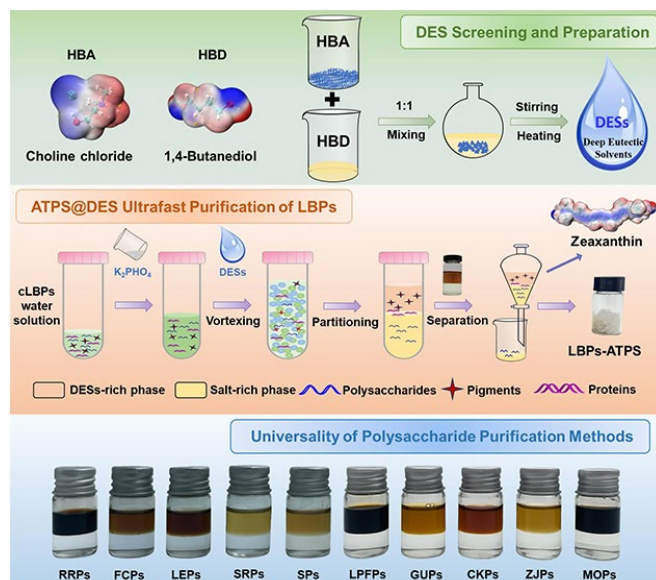


Fig. 1. 基于 DES@ATPS 策略的植物多糖纯化过程

同时,本团队系统建立了基于 PEG1000-K₂HPO₄-KH₂PO₄-H₂O (12:10:10:68, w/w) 双水相体系的 HSCCC 分离平台,首次实现了从多糖水提液复杂体系到均一多糖的同步纯化与分离[2]。从枸杞粗多糖(LBPs-ILs)中一步分离,得到三种均一多糖(126.0 mg LBPs-ILs-1、109.9 mg LBPs-ILs-2 和

65.4 mg LBPs-ILs-3), 图 Fig. 1。该体系表现出优异的脱色性能 (97.1%脱色效率), 明显优于传统的 H₂O₂ 法 (88.5%)。通过对多糖的结构分析发现, 多糖组分在双相体系中的差异分配行为与其单糖组成异质性显著相关。利用该方法成功揭示了枸杞多糖降血糖的主要活性组分。

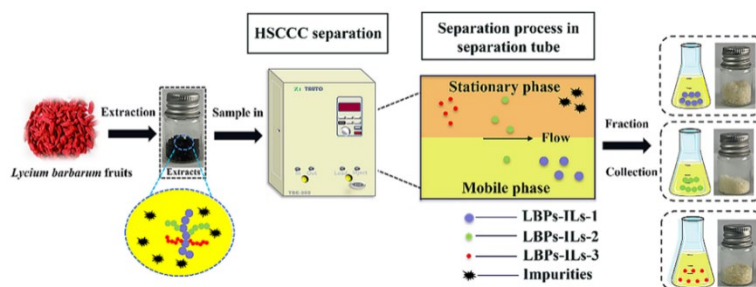


Fig. 2. High-speed countercurrent chromatography (HSCCC) device and separation process of LBPs-ILs.

将该分离策略应用于黄芪多糖 (APS) 的分离纯化, 通过盐离子调控构建三类特征性 ATPS 系统, 实现了 APS 各组分的选择性分离。不同的 ATPS 导致化学成分、单糖组成、分子量、表面形态和 α -葡萄糖苷酶抑制活性 (α -GIA) 存在显著差异[3]。在这些组分中, APS-Na-1 和 APS-Na-2 的 α -GIA 最强, 其 IC₅₀ 值分别为 1.463 和 1.660 mg/mL。相关性分析表明, α -GIA 与 ζ 电位 ($r=0.940$)、糖醛酸含量、葡萄糖含量显著相关, 这表明单糖组成和表面电荷可能在 APS 的降血糖活性中起着关键作用。本研究阐明 ATPS-HSCCC 对 APS 的分离行为和生物活性有显著影响, 为高效分离具有生物活性的天然多糖提供了新的技术方法和理论基础。

参考文献:

1. J.X. Hu, Y. Cao; D.L. Di, Y.X. Wu, L.C. Zhao; D. Pei*; J.F. Liu*, *Anal. Chem.*, 2026, 98, 2244-2256.
2. Y. Cao, R.B. Kou, X.Y. Huang, N.L. Wang, D.L. Di, H. Wang, J.F. Liu*, *Int. J. Biol. Macromol.*, 2024, 256, 128282
3. J.X. Hu, J.F. Liu, C.F. Zhang, D.L. Di, D. Pei*, *Food Biosci.*, 2025, 71: 107299

O-63

核酸及其互作蛋白的功能分析与调控研究

余方志^{1*}, 李乐乐¹, 汪海林²¹ 国家纳米科学中心² 中国科学院生态环境研究中心通讯联系人 E-mail: yufz2021@nanoctr.cn

作为遗传信息的载体,核酸是最重要的一类生物大分子,其涉及到的复制、转录、损伤修复、碱基修饰等过程是决定细胞命运和疾病发生发展的根本原因。在生物体内,上述过程高度动态且十分复杂,需要一系列蛋白质机器的协同作用。因此,发展先进的分析技术和方法对于开展核酸及其互作蛋白的功能研究具有重要意义。在前期的工作中,我们利用超稳定的亲和作用体系建立了一种高效的毛细管电泳核酸分离方法,并结合高灵敏的激光诱导荧光偏振检测技术,实现了对同源重组酶RecA介导DNA链交换的功能分析,发现了RecA核蛋白纤维丝的侧翼链分离新活性。在此基础上,我们发展了双色交替激发-单分子荧光成像技术,可以在单分子水平实时监测RecA介导DNA链交换的反应过程,提出了一种新的同源重组分子模型,揭示了生理条件下不饱和组装RecA核蛋白纤维丝介导DNA链交换反应的分子机制^[1]。最近,我们通过建立超滤耦合-反相离子对液相色谱分析方法,实现了对细胞质DNA感受器cGAS蛋白催化活性的精准测量,系统研究了DNA分子的序列、长度和拓扑结构等对cGAS蛋白核酸识别功能及催化活性的影响,阐明了cGAS蛋白开启cGAMP合成酶活性的关键特征^[2,3]。基于这一机制研究,进一步设计了可激活的动态DNA组装系统,实现了对活细胞中内GAS-STING信号通路的正交调节。

参考文献:

1. F. Yu, D. Zhang, C. Zhao, Q. Zhao, G. Jiang, H. Wang, *Nucleic Acids Res.* **2023**, 6, 2270–2283.
2. F. Yu, X. Li, J. Zhao, Y. Zhao, L. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202305837.
3. X. Li, F. Yu, L. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64, e202417916.

O-64

妊娠期肝内胆汁淤积症的诊疗监测及不良妊娠结局预测

冉霜¹, 燕宇彤¹, 李雪¹, 胥颢², 邵勇³, 张晓清^{1*}, 丁敏^{1*}¹ 重庆医科大学检验医学院, 临床检验诊断学教育部重点实验室, 重庆, 400016² 重庆医科大学附属第一医院检验科, 重庆, 400016³ 重庆医科大学附属第一医院妇产科, 重庆, 400016通讯联系人: dingmin@cqmu.edu.cn

摘要

妊娠期肝内胆汁淤积症(intrahepatic cholestasis of pregnancy, ICP)是一种发生于妊娠中晚期的重要产科并发症。ICP 对孕妇自身的影响相对较小, 但可显著增加围产儿的不良妊娠结局风险。目前, TBA 是诊断 ICP 最有用的实验室证据。然而, 高达 45%的 ICP 患者可能表现出正常的 TBA 水平。熊去氧胆酸(Ursodeoxycholic acid, UDCA)是治疗 ICP 最常用的药物, 治疗中外源性 UDCA 的引入, 使得血清 TBA 无法准确反映人体内源性胆汁酸的代谢水平, 不能客观反映其疗效。本研究基于超高效液相色谱-三重四极杆飞行时间质谱(UPLC-Triple TOF-MS/MS)平台, 结合拟靶标胆汁酸分析策略, 对正常对照组(48例)、首次诊断为 ICP 的患者(No-UDCA 组: 47例)以及使用 UDCA 治疗的 ICP 患者(UDCA 组: 73例)的血清胆汁酸代谢谱进行分析。结果显示三组间的血清胆汁酸谱存在显著差异, 通过对比分析 No-UDCA 组和正常对照组各胆汁酸间显著改变, 共筛选出 22 种候选诊断标志物(Area under the receiver operating characteristic curve, AUC > 0.800), 采用 AUC 排名前 7 位的靶向胆汁酸标志物构建 8 种机器学习诊断模型, 其中支持向量机(SVM)模型具有最佳的 ICP 诊断效能, 其 AUC 达到 1.00, 敏感度为 97.0%, 特异度为 100.0%。进一步研究显示发生不良与非不良妊娠结局孕妇的胆汁酸代谢谱发生显著变化, 筛选出 13 种 ICP 候选预测标志物(AUC > 0.800), 包括多种硫酸化(BAs-S)和葡萄糖醛酸化(BAs-G)胆汁酸。通过组合 AUC 排名前 10 位的靶向胆汁酸标志物构建了 Logistic 回归模型, 其 AUC 值为 0.960, 敏感度为 90.9%, 特异度达到 100.0%。能有效识别 ICP 孕妇发生不良妊娠结局的风险, 为临床早期干预提供依据, 对改善围生儿预后具有重要意义, 为当前颇为棘手的 ICP 诊疗提供一种新的策略。

关键词: 胆汁酸; 妊娠期肝内胆汁淤积症; 诊断; 不良妊娠结局

参考文献:

1. T. Vasavan, S. Deepak, I. A. Jayawardane, et al. J. Hepatol., 2020, 0, 1-10.
2. K. Wu, B. Yin, S. Li, X. Zhu, B. Zhu, Ann. Med., 2022, 54, 2966-2974.
3. P. Li, Y. Jiang, M. Xie, Y. You, Medicine, 2023, 102, e32586.

基金项目: 重庆市自然科学基金项目(CSTB2024NSCQ-MSX0788)资助。

O-65

孤立功能性孔道构建高效 MOF 固定相

徐铭¹, 杨涵¹, 刘佳佳¹, 古志远¹¹ 南京师范大学, 南京, 210023通讯联系人 E-mail: mingxu@njnu.edu.cn

气相色谱因其高灵敏度、快速分析和广泛适用性, 在环境监测与食品安全等领域发挥着不可替代的作用。固定相作为色谱分离体系的核心, 直接决定了分离效率与选择性。然而, 对于结构与性质高度相似的同分异构体, 传统固定相因作用力类型单一且缺乏对分子扩散行为的调控, 往往难以实现有效分离。金属有机骨架 (MOFs) 凭借其可设计的配位环境与多尺度孔道结构, 为构筑新型固定相提供了理想平台。一方面, MOFs 的金属节点与有机配体能够赋予静电作用、配位作用、 π - π 作用和氢键作用等多样化的精细相互作用; 另一方面, 其规整的孔道网络可引入分子筛分与形状匹配效应, 从而在热力学识别与动力学扩散双重维度上调控分析物。前期研究表明, 微孔 MOF 可提供精细的限域作用力, 实现对分析物微小差异的识别; 介孔 MOF 则有利于提高扩散速率和柱容量。然而, 当 MOFs 同时具备微孔与介孔时, 若孔道连通性过高, 扩散路径易趋于无序, 削弱了微孔的限域识别效应与介孔的快速传输优势, 导致分离性能受限。

基于此, 我们提出了分子窗栓策略, 通过逐级延长配体取代基链长对孔道连通性进行精细调控, 从而实现对分析物扩散动力学与固定相热力学作用的双重调节。随着从 PCN-OMe 到 PCN-OEt 再到 PCN-OPr 的逐步演化, 孔道连通性逐渐降低, 扩散路径由紊乱转向均一, 表现为扩散速率显著加快且作用力逐渐减弱。其中, PCN-OEt 在扩散动力学与热力学作用之间实现最佳平衡, 展现出优异的分选性能。进一步地, 我们通过在暴露的铝位点引入二级配体, 阻断跨孔扩散并显著提升沿孔道方向的分子迁移速率。模拟与实验结果均表明, 改性后的 PCN-608-BDC 使扩散速率提升至原有的 13 倍, 吸附焓显著降低, 间/对二甲苯的分离度提升 24 倍, 且色谱柱柱容量大幅增强。该系列工作表明, 通过调控 MOFs 的孔道连通性与位点环境, 可在动力学扩散与热力学作用之间实现协同优化, 为结构类似物的高效色谱分离提供了新的设计理念。

参考文献:

1. Yang, H.; Xu, M.; Mao, M.; Gao, L.; Zhang, H.; Meng, S.-S.; Tang, W.-Q.; Gu, Y.-H.; Yuan, S.; Liu, L.-M.; Gu, Z.-Y.*, Ultrastable Copper Carboxylate Metal–Organic Frameworks, *J. Am. Chem. Soc.*, 2025, 147, 21961.
2. Liu, J.-J.; Xu, M.; Meng, S.-S.; Kong, Y.-K.; Yang, H.; Li, W.; Rong, C.-Y.; Gu, Z.-Y.*, Eliminating the negative pore synergy in hierarchical porous metal-organic frameworks for isomer separation, *Nat. Commun.* 2026. DOI: 10.1038/s41467-026-69971-3.
3. Modulation of the nanoscale chimney effect in metal-organic frameworks enables efficient guest diffusion and separation, *Sci. Bull.* 2026, 71, 692-696.
4. Gao, Y.-X.; Yi, X.-N.; Tang, Z.-C.; Yang, H.; Wang, W.; Xu, M.*; Gu, Z.-Y., Continuously Tunable MOFs Enable Precise Mass Transfer for High-Performance Isomer Separation *Anal. Chem.* 2024, 96, 6476.

O-66

细胞外囊泡高效分离新技术在疾病诊断及预后中的应用研究

王海燕*, 张贺凯, 乔晓强*

河北大学药学院

通讯联系人 E-mail: wanghaiyan2017123@163.com

免疫疗法是晚期 HCC 患者的首选方案,但其疗效个体差异显著。因此,精准预测免疫疗效对于突破治疗瓶颈及改善预后至关重要。本文聚焦与 HCC 免疫治疗疗效预测高度相关的外泌体 PD-L1 和 NUCK1,将高效富集技术与精准分析技术相结合,开发基于水光谱组学的外泌体双靶标精准分析策略,实现 HCC 免疫治疗响应的精准预测。首先,针对外泌体浓度低影响下游分析可靠性的问题,构建基于 UiO-66-NH₂凝胶的高通量标准化分离捕获平台,实现基于多重作用力的外泌体高效、高稳定性捕获与原位释放。获效率高达 88.9±0.7%,外泌体的回收率高达 79.6±5.1%,外泌体纯度测定为 5.8×10⁹ 个 P/μg,是 UC 法分离外泌体纯度的 2.4 倍。其次,为解决外泌体表面低丰度蛋白精准定量的问题,基于水光谱组学,分析溶液中水分子在外泌体溶质扰动下的近红外光谱响应特征,提取与 PD-L1 及 NUCK1 相关有效信息。此外,基于模式样品中一级数据 PD-L1 和 NUCK1 的真实含量以及近红外光谱,通过夹角余弦距离法消除干扰因素带来的差异影响,有效的光谱被选择出来用于后续的建立模型。进一步地,利用水光谱组学提取与 PD-L1 和 NUCK1 的含量相关的光谱波段,建立 PLS 定量模型,结合化学计量学算法进一步确定阈值范围,用于 HCC 的精准免疫治疗响应预测。精准预测率达到 98.5%,盲样分析结果显示准确率达 82.3%,开发的预测技术有望为 HCC 的免疫治疗响应预测提供辅助支持。

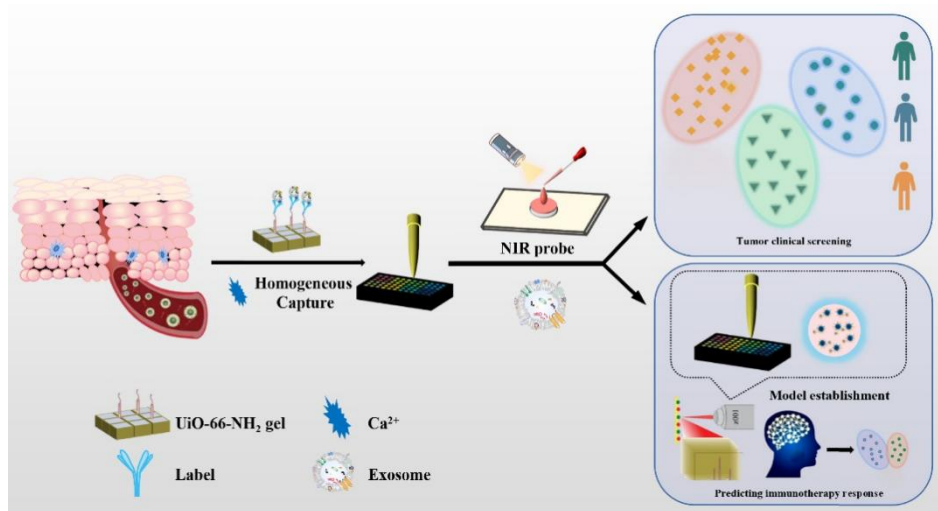


图1 通用型外泌体捕获策略用于肝细胞癌体液外泌体富集和免疫治疗响应预测

参考文献:

1. H. Wang, D Liu, L. Zhang*, X. Gao, Y. Nie, Y. Liu, Y. Jia, X. Qiao*. *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 16103-16112.
2. H. Wang, Y. Liu, L. Zhang*, X. Li, G. Zhao, Z. Song, Y. Jia, X. Qiao*. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 18268-18277.
3. H. Wang, P. Liang, L. Zhang, L. Shi, Y. Ge, L. Zhang*, X. Qiao*. *Chin. Chem. Lett.*, **2023**, 34, 108129.
4. P. Xie, X. Wang, H. Xue, S. He, L. Li, M. Wong, X. Qiao*. *Biosens. Bioelectron.*, **2026**, 298, 118430.

O-67

新冠病毒刺突蛋白 N-糖基化分析

曹丽伟*

南方科技大学

通讯联系人 E-mail: caolw@sustech.edu.cn

摘要正文。

随着新冠病毒的演进，Omicron 亚型刺突蛋白与野生型相比有超过 30 个点突变，但其糖基化位点却高度保守。另外，新冠病毒刺突蛋白的 N-连接糖链参与了与宿主细胞 ACE2 的结合以调控病毒的感染力。然而，Omicron 亚型刺突蛋白的 N-连接糖基化却未被充分研究。基于此，我们通过联合使用多酶酶切、基于亲水色谱的糖肽富集及质谱分析成功对 Omicron 亚型及野生型刺突蛋白的位点特异性糖基化状态进行了研究。通过对刺突蛋白糖基化状态进行聚类分析，我们发现 Omicron 亚型刺突蛋白 RBD 区域糖基化位点的唾液酸化、多岩藻糖基化和单岩藻糖基化发生显著改变，且影响了刺突蛋白与广谱中和抗体的相互作用。通过对比刺突蛋白单体与三聚体，我们发现刺突蛋白的空间结构能够显著影响其糖基化状态。这些结果表明对新冠病毒 Omicron 亚型刺突蛋白糖基化状态的表征能够促进我们对 Omicron 亚型高感染力和传播性的理解，从而促进对该疾病的预防、诊断和治疗。

参考文献：

1. H. Yang, et. al., *Nature Communications*, **2024**, 15, 7715.
2. Y. Li, et. al., *Cell Discovery*, **2023**, 9, 108.
3. C. Ren, et. al., *Oral Science and Homeostatic Medicine*, **2025**, 1, 9610037.

O-68

外泌体分离纯化新方法开发及在临床代谢性疾病中的应用

王嘉希, 陈薇薇, 许金点, 高明霞*, 张祥民*

复旦大学 化学系/人类表型组研究院

通讯联系人 E-mail: jiaxiwang@fudan.edu.cn, xmzhang@fudan.edu.cn

外泌体作为液体活检的关键标志物, 凭借其携带的丰富分子信息(蛋白质、核酸、脂质)及在细胞间通讯中的核心作用, 在应对糖尿病、肥胖等代谢性疾病这一重大公共卫生挑战中展现出巨大的临床转化潜力。然而, 体液的高度复杂性以及外泌体自身的异质性, 对其分析技术提出了严峻挑战。现有分离方法(如超速离心、沉淀法)普遍存在纯度低、操作标准不统一、难以区分不同细胞来源的功能亚型等瓶颈, 导致获取的外泌体群体信息混杂, 掩盖了关键病理亚型的特异性信号。因此, 如何实现外泌体的高效分离与其功能亚型的精准鉴定, 已成为突破液体活检临床转化壁垒的关键技术瓶颈。

本研究基于多维色谱技术开发外泌体及其亚型分离分析平台, 结合外泌体多组学分析, 推动糖尿病等代谢性疾病的早期诊断与精准治疗。具体内容为: (1) 结合体积排阻色谱与创新阵列技术, 建立高效多维色谱分离平台, 实现外泌体及其亚型的高通量精准分离。(2) 建立适用于复杂体液样本(如血液、腹水等)的外泌体分离与表征分析方法, 开展外泌体及其亚型的多组学分析。(3) 结合人工智能多维度分析, 揭示外泌体在糖尿病不同疾病阶段(健康、肥胖、糖尿病前期和糖尿病)的动态变化规律, 筛选出与疾病进程密切相关的标志物。(4) 结合体外细胞实验和动物模型, 验证候选标志物在胰岛素信号通路、炎症反应和代谢重编程中的功能机制, 为糖尿病的早期诊断、治疗监测和评估干预提供科学依据。

综上所述, 本研究致力于突破外泌体分离与亚型精准鉴定的技术瓶颈, 构建集高效分离、多组学解析与功能验证于一体的系统研究平台。研究成果不仅有望揭示外泌体在代谢性疾病进程中的动态变化规律及其功能机制, 筛选出具有临床应用潜力的新型生物标志物, 还将为糖尿病的早期预警、病程监测、疗效评估及干预靶点开发提供科学依据与技术支撑, 为应对代谢性疾病带来的公共卫生挑战贡献新的策略与路径。

参考文献:

1. W. W. Chen, J. D. Xu, H. Y. Yang*, Y. L. Jia, H. Bian, L. H. Huang*, J. X. Wang*. *Analytical Chemistry*, **2025**, 97, 14435-14445.
2. B. Li, Q. F. Tai, H. L. Yu, J. X. Wang*, M. X. Gao, X. M. Zhang*. *Analytical Chemistry*, **2025**, 97, 2786-2794.
3. X. Tong, W. W. Chen, Y. Xia, Y. M. Wang, S. S. Liu, Y. L. Jia, J. X. Wang*, L. H. Huang*. *Analytical Chemistry*, **2025**, 97, 14943-14955.

O-69

基于感光高分子细胞膜色谱筛选中药治疗肺癌活性成分研究

于冰^{1*}, 丛海林²

¹ 青岛大学生物医用材料与工程研究院

² 枣庄学院化学化工与材料科学学院

通讯联系人 E-mail: yubing198@qdu.edu.cn

本研究利用水溶性感光高分子的层层自组装取代毒性大、污染强、易水解的硅烷化试剂, 通过对色谱填料表面肺癌细胞膜涂层制备、性能的创新, 建立了具有结构可控、性能稳定、适合治疗肺癌活性成分精准高效筛选等应用需要的肺癌细胞膜色谱固定相自组装构筑的系统方法。利用感光高分子独特的光、热诱导原位交联反应实现了对色谱填料表面自组装细胞膜涂层的共价键合和固定化。研究了所制备的肺癌细胞膜色谱固定相的物理化学性质, 探索了其在中药治疗肺癌活性成分精准高效筛选等方面的应用。解析了活性成分干预肺癌的关键分子信号通路和靶点, 研究了其对肿瘤突变负荷、肿瘤微环境影响、干预肿瘤免疫或肿瘤代谢实现抗癌作用的分子机制, 获得了具有抗肿瘤活性的天然产物^{1,2}。

参考文献:

1. D. Wang, J. Ye, J. Zou, Z. Wang, B. Yu, H. Cong, *Journal of Ethnopharmacology*, **2026**, 356, 120860.
2. H. Yao, D. Wang, J. Ye, H. Cong, B. Yu, *Journal of Ethnopharmacology*, **2025**, 353, 120288.

多重顶空固相微萃取气相色谱质谱法定量分析不同产地咖啡

施高健, 邓楠*, 孟令杰

西安交通大学分析测试中心, 西安, 710049

通讯联系人 E-mail: dengnan@xjtu.edu.cn

咖啡中挥发性与半挥发性成分是决定咖啡中风味、品质与安全的核心化学组分, 研究其对产业、科研与消费均具有关键价值。咖啡等复杂基质中挥发性物质种类多且易受样品基质干扰, 高效稳定的分析方法对于准确鉴定其中的挥发性与半挥发性成分至关重要。本文采用顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用技术分析了 7 个咖啡产地烘焙咖啡豆中的挥发性物质。咖啡样品 (25mg) 在 60℃ 条件下, 使用 65 μ m 聚二甲基硅氧烷/二乙烯基苯 (PDMS/DVB) 萃取纤维顶空萃取 30 min, 在进样口处 250 °C 解吸 5 min 获得了最优的前处理条件。通过质谱数据库检索结合保留指数法, 初步鉴定到超过 100 种挥发物质, 采用内标法进行相对定量分析, 并结合偏最小二乘-判别分析 (PLS-DA) 方法筛选出了不同产地的差异性物质。另外, 本研究采用多重顶空固相微萃取 (MHS-SPME) 结合外标曲线建立了 2-甲基吡嗪、2, 5-二甲基吡嗪、2, 6-二乙基吡嗪、3,5-二乙基-2-甲基吡嗪、5-甲基糠醛和 2-乙酰吡咯这 6 种物质的定量方法, 该方法最低检出限为 10 ng (2-甲基吡嗪、2, 5-二甲基吡嗪), 最低定量限为 50 ng (2-甲基吡嗪、2, 5-二甲基吡嗪), 回收率 109.4%~119%, RSD 小于 20%, 说明本方法具有较好的重复性、准确性和灵敏度。该方法为咖啡中挥发性与半挥发性物质的定性定量提供了思路, 也为改善咖啡品质提供了理论依据。

关键词: 多重-顶空固相微萃取; 气相色谱质谱; 咖啡; 偏最小二乘-判别分析; 定量

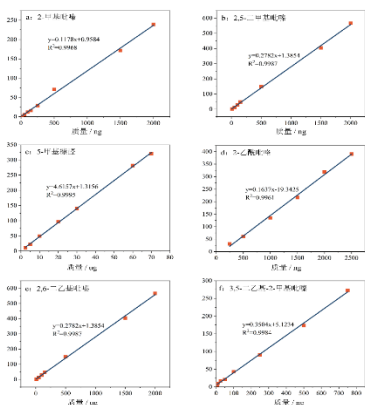


图 1 标准曲线图

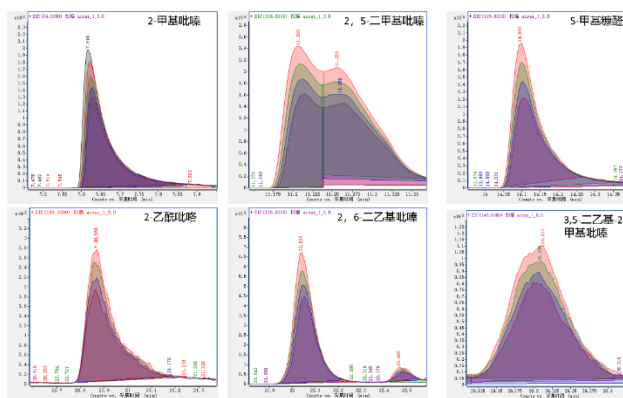


图 2 咖啡样品固相顶空连续萃取气相色谱质谱 EIC 图 (HP-5)

参考文献:

1. Mourão RS, Sanson AL. *Food Bioscience*, 2023, 56.
2. Park SH, Jo A, Lee KG. *Food Chemistry*, 2021, 358.
3. Zakidou P, Plati F, Matsakidou A, et al.. *Molecules*, 2021, 26(15)

超微量及单细胞蛋白质组学深度分析方法的开发与应用

王宇^{1,2,*}, 方群^{1,2}¹浙江大学杭州国际科创中心, 杭州, 311200²浙江大学化学系, 杭州, 310058

通讯联系人 E-mail: wangyu310@zju.edu.cn

单细胞及组织切片等超微量样品的蛋白质组学分析对于揭示细胞异质性、理解疾病发生发展机制以及指导精准医疗具有重要意义。然而, 由于超微量样品中蛋白质含量极低(单细胞仅皮克级), 传统的多步样品前处理过程极易造成严重的样品吸附和损失, 导致蛋白质组鉴定深度不足, 这成为制约超微量组学技术在临床和生物医学中应用的核心瓶颈。

针对上述挑战, 我们致力于开发高灵敏度的超微量蛋白质组学分析方法, 建立了一套涵盖样品分选、前处理、LC-MS分离分析和数据解析在内的完整组学工作流程。我们开发了“点取式单细胞蛋白质组学分析”(PiSPA)技术, 该方法依托微流控液体操控机器人, 将目标细胞的分选提取与后续的细胞裂解、蛋白质还原、烷基化及酶解等多步复杂前处理操作, 高度集成于商品化进样内插管中。通过构建纳升级的高效反应体系, 该策略最大限度地减少了超微量样品在转移和处理过程中的损失, 并实现了与高分辨液相色谱-质谱(LC-MS)系统的无缝自动化联用。

依托该优化的组学分析流程, 我们在单细胞分析的鉴定深度上取得了显著突破, 在单个哺乳动物细胞中实现了超过3000种蛋白质的高深度无标定量解析。进一步地, 我们将该工作流程成功应用于临床外周血中极罕见的循环肿瘤细胞(CTC)的单细胞蛋白质组学分析, 首次实现了单个临床CTC中近1000种蛋白质的定量解析。该高灵敏度的分析策略不仅能够揭示不同病理分型肿瘤细胞的蛋白表达异质性, 同样具备扩展至组织切片等其他超微量临床样品空间组学解析的巨大潜力。

本工作建立的超微量蛋白质组学分析方法, 打通了从复杂生物样本精准获取、极低损耗前处理到高分辨LC-MS检测的全链条组学工作流程, 为肿瘤微环境研究、生物标志物发现及个体化诊疗提供了强有力的分析工具。

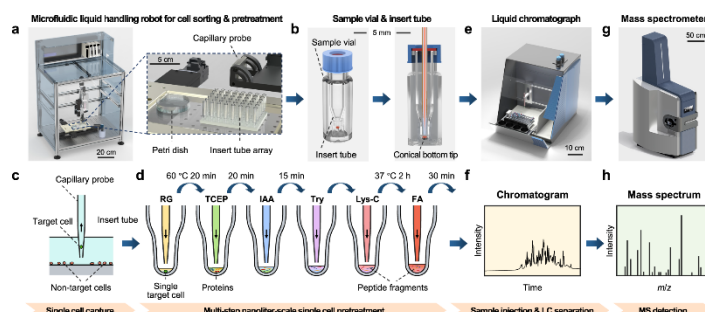


图1 超微量蛋白质组学深度分析流程图

关键词: 蛋白质组学; 微流控; 样品处理; 单细胞分析; 空间组学

参考文献:

1. Y. Wang, Z.-Y. Guan, S.-W. Shi, Y.-R. Jiang, J. Zhang, et al. *Nat. Commun.* **2024**, 15: 1279.
2. Y. Wang, D.-F. Wang, H.-F. Wang, J.-W. Wang, J.-Z. Pan, et al. *Talanta* **2021**, 226: 122136.

O-72

基于多维质谱策略挖掘胆汁酸修饰图谱及其在儿童脓毒症肠道屏障修复中的机制研究

朱泉霏, 冯钰琦*

武汉纺织大学, 生物医学工程与健康学院

通讯联系人 E-mail: qf_zhu@whu.edu.cn; yqfeng@whu.edu.cn

胆汁酸 (Bile Acids, BAs) 作为宿主-微生物共代谢的关键信使, 其结构修饰极大地扩展了代谢组的复杂性, 然而受限于低丰度及异构体鉴定困难, 许多修饰型胆汁酸仍属“代谢暗物质”。本研究整合了化学衍生化、分子网络及保留时间预测等多种前沿质谱分析策略, 利用DMED衍生化结合分子网络 (CD-MN) 技术及AMPP衍生化结合交替双碰撞能量扫描技术, 显著提升了羧基化及低丰度胆汁酸的检测灵敏度与结构解析能力, 并结合极性切换MRM质谱方法与保留时间预测算法, 成功实现了对氨基酸结合胆汁酸异构体的高覆盖鉴定。基于上述技术, 我们在儿童脓毒症队列中全景式挖掘了胆汁酸修饰图谱, 不仅发现了苯乙酰化、多种氨基酸结合等新型胆汁酸, 更揭示了硫酸化胆汁酸DCA-3S与疾病进程的密切关联; 宏基因组分析进一步证实, 肠道共生菌 *Enterococcus raffinosus* 是DCA-3S的主要生产者 (贡献率>80%), 修正了硫酸化胆汁酸仅源于肝脏的传统认知。功能研究表明, DCA-3S作为法尼醇X受体 (FXR) 的激动剂, 可通过激活FXR-MAPK通路, 促进肠上皮细胞增殖与分化并抑制凋亡, 从而修复受损的肠道屏障, 最终显著降低炎症因子水平并改善脓毒症预后。本研究不仅拓展了胆汁酸修饰组的分析维度, 也为儿童脓毒症的诊断提供了新型生物标志物和治疗策略。

参考文献:

1. Q.-F. Zhu, Y.-Z. Wang, N. An, J.-D. Hao, P.-C. Mei, Y.-L. Bai, Y.-N. Hu, P.-R. Bai, Y.-Q. Feng, *Anal. Chem.*, **2022**, 94, 2655–2664.
2. Y.-Z. Wang, P.-C. Mei, P.-R. Bai, N. An, J.-G. He, J. Wang, Q.-F. Zhu, Y.-Q. Feng, *Anal. Chim. Acta*, **2023**, 1239, 340691.
3. Y.-Z. Wang, Y.-Y. Chen, X.-Z. Wu, P.-R. Bai, N. An, X.-L. Liu, Q.-F. Zhu, Y.-Q. Feng, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 11550–11557.

O-73

超声驻波离子信号增强离子源

张凯林*, 刘晗哲, 李建波

天津理工大学生命健康智能检测研究院

张凯林 E-mail: zkl@email.tjut.edu.cn

在离子迁移谱 (IMS) 中, 离子源的电离效率是决定体系性能的关键因素之一, 对检测灵敏度和信噪比等核心指标具有重要影响。然而, 现有离子源普遍存在一定局限性, 其中真空紫外灯离子源虽具有选择性好和安全性高等优点, 但其电离效率相对较低, 因而亟需发展有效策略以提升其电离效率。本研究设计了一种基于双超声换能器 (40 kHz) 构建驻波场的电离效率增强装置, 通过利用驻波场中波节与波腹的声压差实现气体分子的空间汇聚, 从而促进光电子与样品分子的高效碰撞。以丙酮为模型化合物进行测试, 实验结果表明, 在三倍半波长条件下开启超声后, 总离子电荷提高约 1.9 倍, 峰值强度提高 11.5 倍, 信噪比提升约 21 倍, 同时基线噪声降低约 1.8 倍, 而离子峰漂移时间及半峰宽基本保持不变。进一步对三倍半、四倍半及五倍半波长条件进行对比, 结果表明三倍半波长条件下增强效果最优。结合纹影成像实验与 COMSOL 声场仿真分析, 验证了驻波场对气体分布的调控机制。本研究为提升真空紫外灯离子源电离效率提供了一种有效方法, 对提高 IMS 检测性能具有重要意义。

O-74

Dynamic single-cell metabolomics reveals cell-cell interaction between tumor cells and macrophages

Yi ZHANG, Mingying SHI, Mingxuan LI, Shaojie QIN, Daiyu MIAO, Yu BAI*.

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University

Corresponding author E-mail: yu.bai@pku.edu.cn

Single-cell metabolomics provides critical insights into cellular heterogeneity and underlying molecular mechanisms. However, conventional metabolite concentration measurements offer only a static snapshot of the metabolome, failing to capture the activity information within biological pathways. To address this, we develop a universal platform for dynamic single-cell metabolomics based on stable isotope tracing¹. This integrated system combines a high-throughput single-cell sampling platform with an untargeted computational pipeline for isotope tracing data analysis. It facilitates comprehensive profiling of metabolic activity and flow analysis across interconnected metabolic networks at the single-cell level, and reveals heterogeneity in metabolic activities among single cells. The significance of activity profiling is demonstrated using a 2-deoxyglucose inhibition model, which uncovers subtle metabolic alteration within single cells which is undetectable by concentration analysis alone. Furthermore, coupling this system with a neural network model enables metabolomic characterization of directly co-cultured tumor cells and macrophages. This approach elucidates complex cell-cell interaction mechanisms in the tumor microenvironment and firstly identifies diverse polarization subtypes of tumor-associated macrophages based on their distinct metabolic signatures. These metabolic subtypes align with the updated macrophage diversity atlas derived from single-cell RNA-sequencing. Collectively, the developed platform enables a more comprehensive understanding of cellular metabolism by integrating complementary static and dynamic dimensions at the single-cell level.

Reference:

1. Y. Zhang., M.Y. Shi., M.X. Li., S.J. Qin., D.Y. Miao., Y. Bai. *, *Nat. Commun.*, **2025**, 16: 4582.

O-75

蛋白质组学在植物、细菌及鱼类疾病研究中的应用进展

褚宏伟*, 马铭, 陈波

湖南师范大学化学化工学院

通讯联系人 E-mail: chuhongwei@hunnu.edu.cn

基于液相色谱-质谱联用技术的蛋白质组学已得到越来越广泛的应用,并成为研究多种生物系统分子机制的有力工具。近年来,报告申请人基于蛋白质组学技术,针对植物、细菌及鱼类疾病开展了多项组学研究。

1.发展蛋白质提取新方法及其应用,发展了短链-长链离子液体结合分步式提取新方法,增加植物叶蛋白质提取效率(*Anal. Chim. Acta*, 2025, 1372, 344439),成功应用到多种植物的叶蛋白质组分析;发展了离子液体 TEAA 辅助 NP-40 的溶剂体系 *i*-TAN,用于细胞膜蛋白复合物提取(*Anal. Chem.*, 2022, 94, 758-767; *Carcinogenesis*. 2021, 42, 753-761.)。

2.针对中药单体大麻二酚抑菌机制尚不完善的问题,通过整合蛋白质组学和代谢组学分析,以地衣芽孢杆菌、金黄色葡萄球菌和屎肠球菌为模型菌株,系统探究大麻二酚的抑菌作用机制,为其在食品安全领域的应用提供理论依据。研究结果发现大麻二酚能显著破坏细菌细胞壁和膜结构,导致细胞形态异常;综合蛋白质组和代谢组发现大麻二酚通过干扰细菌的能量代谢、膜转运和蛋白质合成等多重机制发挥抗菌作用,表现出与传统抗生素(如青霉素)部分相似但更具广谱性的作用特征(*J. Proteomics*, 2025, 315, 105411)。

3.基于蛋白质组学技术探究了草鱼(*Ctenopharyngodon idella*)的抗病机制(审稿中)。蛋白质组学结果的比较显示,抗病草鱼在感染维氏气单胞菌后表现出增强的免疫调节能力(如过氧化物酶活性、MHC I 类抗原)以及可控的炎症反应,而普通草鱼则表现出不受控制的细胞凋亡和严重的肠道损伤。

这些研究展示了蛋白质组学在应对多个生物领域关键挑战方面的应用潜力,为可持续农业、新型抗菌药物替代品的开发以及水产养殖实践的改进提供了理论支撑。

参考文献:

1. S. Komatsu, Plant Proteomic Research 2.0: Trends and Perspectives, *Int. J. Mol. Sci.*, **2019**, 20(10): 2495.
2. M. Liu, M. Feng, K. Yang, Y. Cao, J. Zhang, J. Xu, S.H. Hernandez, X. Wei, M. Fan, Transcriptomic and metabolomic analyses reveal antibacterial mechanism of astringent persimmon tannin against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* isolated from pork, *Food Chem.*, **2020**, 309: 125692.
3. J. Bai, Y. Tang, X. Deng, Z. Liu, S. Li, E. Hu, L. Xiong, W. Peng, X. Huang, C. Wang, X. Xu, X. Xu, K. Zhang, Y. Zhou, Q. Qin, S. Liu, Integrated volatile metabolomics and transcriptomics provide insights into the formation of characteristic flavor in gynogenetic grass carp and its offspring, *Aquaculture*, **2025**, 601, 742313.
4. X. Guo, H. Chen, Y. Tong, X. Wu, C. Tang, X. Qin, J. Guo, P. Li, Z. Wang, W. Liu, J. Mo, A review on the antibiotic florfenicol: Occurrence, environmental fate, effects, and health risks, *Environ. Res.*, **2024**, 244, 117934.

O-76

核酸适体在分离检测和靶向治疗中的应用研究

刘祥军*, 上官隽华

中国科学院化学研究所

通讯联系人 E-mail: xjliu@iccas.ac.cn

核酸适体 (aptamer) 是一类高亲和力、高特异性识别靶标物质的单链核酸分子, 采用指数富集配体系统进化技术 (SELEX) 筛选得到, 具有靶标范围广、易合成、易化学修饰、免疫原性低等优点, 目前在分析、传感、成像和靶向药物递送等领域得到了广泛的研究和应用。

肠型/胎盘型碱性磷酸酶 (IAP/PLAP) 异源二聚体在一些肿瘤中高表达, 其检测有望用于肿瘤的早期诊断及术后监控。然而, 它是否会脱落到细胞外液中仍不清楚。以本课题组发现的 IAP-PLAP 的核酸适体 BG2 为配基, 发展了捕获并快速检测细胞培养基和血浆中游离 IAP/PLAP 异源二聚体的方法, 证实了 IAP-PLAP 游离蛋白的存在, 并发现衰老细胞游离 IAP/PLAP 的浓度和细胞表面的量明显降低, 表明 IAP/PLAP 与肿瘤细胞的增殖密切相关; 进一步利用该方法检测血浆样品中添加的 IAP-PLAP, 回收率良好, 为液体活检提供了一种新方法 (图 1)。

在靶向治疗方面, 基于核酸适体 HG1-9 对肿瘤细胞的特异性, 羰基亚胺的光活性, 以及光解产物 DNNH 强的光诱导细胞毒性, 设计合成了光活性核酸适体药物偶联物 (ApDC) HG1-9-DNP, HG1-9-DNP 对转铁蛋白受体高表达的肿瘤细胞具有特异性识别能力, 且具有低的暗毒性和强的光毒性, 在可见光照射下, 释放 DNNH, 随着孵育时间的增加, DNNH 逐渐进入细胞核, 将细胞阻滞在 G2/M 期, 诱导细胞凋亡, 表现出非常强的细胞毒性, 优异的识别特异性和强的光毒性使得 HG1-9-DNP 有望用于肿瘤的靶向治疗 (图 2)。

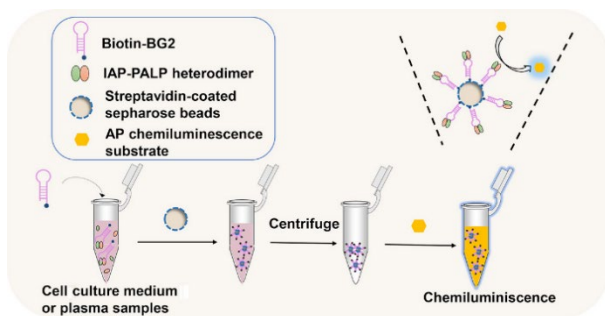


Fig. 1 Schematic illustration of isolation and detection of IAP-PLAP heterodimer

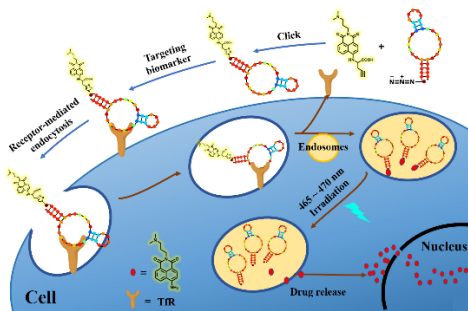


Fig. 2 Photoactivity Schematic Diagram of the ApDC HG1-9-DNP

参考文献:

1. Y. Li, P. Yan, X. Zhang, J. Sheng, X. Liu*, D. Shangguan*, ACS Appl. Bio Mater. 2025, 8, 11272–11279.
2. J. Liu, X. Liu*, M. Yi, Y. Sun, T. Bing, N. Zhang, D. Shangguan*, Chem. Commun., 2022, 58, 10797–10800.

O-77

基于毛细管激光诱导荧光的单颗粒检测及多目标数字分析平台

郭超^{1*}, 冯雪霖¹, 郭雨¹, 陈义²¹ 徐州医科大学药学院, 江苏徐州, 221004² 中国科学院化学研究所, 北京, 100190

*E-mail: guochao@xzhmu.edu.cn

关键词: 毛细管激光诱导荧光; 单颗粒检测; 泊松分布; 荧光编码; 生物标志物; 高灵敏检测

为解决传统生物检测方法灵敏度不足、多目标同步分析能力匮乏的问题^{1,2}, 本研究构建了一款毛细管激光诱导荧光 (CLIF) 单颗粒检测装置, 开发了适用于低丰度生物标志物检测的高灵敏、多目标数字分析平台。该系统以 3D 打印毛细管微量检测池为核心, 搭配球透镜聚焦系统、激光光源及硅光电二极管检测模块, 实现了荧光单颗粒信号的高效捕获与精准定量。基于泊松分布规律建立数字分析方法, 以荧光强度编码的 2 μm 聚苯乙烯 (PS) 微球为捕获载体、300 nm 荧光 PS 球为信号标签, 通过统计阳/阴性微球比例实现目标物定量, 并利用 PS 微球的编码特性实现多目标同步检测。性能表征结果显示, 以 FITC 为模型体系, 该装置检测线性范围达 0.1 nM~500 nM ($R^2>0.999$), 最低检测限低至 47 pM; 可实现 2 μm 、300 nm 荧光 PS 单颗粒的精准识别, 能高效区分不同荧光强度编码的 2 μm PS 微球, 300 nm 荧光颗粒最低检测浓度达数百个颗粒/mL。本研究构建的 CLIF 装置兼具低检测限、宽线性范围、低成本、易操作的优势, 融合荧光编码与泊松分布数字分析的技术策略, 突破了传统单颗粒检测技术的局限, 为核酸、蛋白等低丰度生物标志物的高灵敏、多目标同步检测提供了新型技术平台, 在临床诊断、环境监测、食品安全等领域具有良好的应用前景。

致谢: 感谢国家自然科学基金 (No. 22404142) 对本项目的资助!

参考文献:

1. Y. Leng, K. Sun, X. Chen and W. Li, *Chem. Soc. Rev.*, **2015**, 44, 5552-5595.
2. T. Jet, G. Gines, Y. Rondelez and V. Taly, *Chem. Soc. Rev.*, **2021**, 50, 4141-4161.

O-78

核酸驱动的光动力学逻辑激活策略构建及应用

胡盛强,* 张亮亮, 赵书林

广西师范大学化学与药学学院, 桂林, 中国, 541006

*zn_sqhu@163.com

摘要: 基于核酸的与门调控光动力学治疗可通过识别双重或多重内源性肿瘤信号, 有效改善传统 PDT 靶向性不足、脱靶光毒性显著以及单一刺激易引发假阳性激活等问题, 显著提升肿瘤治疗的精准性与安全性, 为构建智能可控的精准诊疗体系提供了重要思路。本研究将核酸逻辑单元与上转换纳米粒等功能载体相结合, 构建了集靶向递送、成像示踪与可控激活于一体的刺激响应型核酸纳米探针; 以肿瘤微环境中过表达的特异性生物标志物 (如 miRNA、ATP 或蛋白酶) 为输入信号, 通过核酸链置换反应、靶标诱导构象折叠及胞内核酸级联逻辑电路实现多信号响应的与门调控, 进而调控上转换发光行为与光敏剂空间分布, 并借助 FRET/ACQ 淬灭 - 恢复机制实现光敏剂的精准激活, 最终仅在多重信号同时存在时特异性启动光动力反应, 在增强治疗效果的同时有效降低对正常组织的损伤。该研究不仅为肿瘤精准诊疗提供了一类新型智能平台, 也进一步拓展了核酸分子机器在活体生物学中的应用范畴, 为下一代智能诊疗系统的开发与构建奠定了理论与技术基础。

参考文献

- [1] Xiaolan Tang, Zhihong Zhou, Liuyan Zhou, Yong Huang, Liangliang Zhang,* Shulin Zhao, and Shengqiang Hu*. *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 7687–7696.
- [2] Lifang Pang, Xiaolan Tang, Lijia Yao, Liuyan Zhou, Shengqiang Hu,* Shulin Zhao, and Liangliang Zhang*. *Chem. Sci.*, **2023**, 14, 3070.
- [3] Liuyan Zhou, Xiaokun Li, Luyin Wang, Zhihong Zhou, Shengqiang Hu,* Shulin Zhao, and Liangliang Zhang*. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 18497–18503.
- [4] Shengkai Zhang, Lijia Yao, Xiaofei Lv, Meijun Lu, Fengli Gao,* Liangliang Zhang, Shulin Zhao, and Shengqiang Hu*. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 4227–4234.
- [5] Shengqiang Hu,† Lixian Huang,† Liuyan Zhou, Tingchan Wu, Shulin Zhao, and Liangliang Zhang*. *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 3830–3839.

O-79

基于 GPCR-G 蛋白相互作用的色谱筛选方法的建立及评价

蔺裕锦, 张颖异, 寸思迪, 欧圆圆, 李倩*, 赵新锋*

西北大学 生命科学学院

通讯联系人 E-mail: 20185365@nwu.edu.cn or zhaoxf@nwu.edu.cn

药物诱导的GPCR与下游G蛋白的相互作用是药物发挥药效的关键环节^[1-2], 然而现有亲和色谱法主要聚焦GPCR与药物的结合与解离特性实现中药等复杂体系中活性成分的筛选, 缺乏对药物诱导的蛋白-蛋白相互作用的研究, 导致后期研究风险较大。本研究以三种GPCR及其下游三种G蛋白 α 亚基为对象, 以环形卤代烷烃脱卤素酶 (cpHalo) ^[3]为连接臂, 设计了GPCR-G蛋白三元复合物^[4], 细胞中表达获得了大量三元复合物; 通过cpHalo与其底物间特异性共价反应, 将三元复合物一步固定至大孔硅胶表面, 制备了GPCR-G蛋白色谱固定相; 以GPCR不同类型的配体为流动相添加剂, 以GTP保留时间为指标, 系统研究了配体诱导下的GPCR-G蛋白相互作用规律, 主成分分析法对不同配体进行归属, 建立了GPCR-G蛋白级联响应型色谱方法, 实现了不同GPCR的激动、拮抗和别构配体的选择性识别; 在此基础上, 对DNA编码化合物库和中药提取液中靶向GPCR的潜在活性成分进行了筛选, 并对潜在活性成分诱导的GPCR-G蛋白相互作用进行了系统研究, 为高内在活性成分的筛选提供了可靠方法。

参考文献:

1. N. Thakur, A.P. Ray, L. Sharp, B. Jin, A. Duong, N.G. Pour, S. Obeng, A.V. Wijesekara, Z.G. Gao, C.R. McCurdy, K.A. Jacobson, E. Lyman, M.T. Eddy, *Nat. Commun.*, **2023**, 14, 794.
2. W. Jang, S. Lu, X. Xu, G. Wu, N.A. Lambert, *Nat. Chem. Biol.*, **2023**, 19, 687–694.
3. C. Deo, A.S. Abdelfattah, H.K. Bhargava, A.J. Berro, N. Falco, H. Farrants, B. Moeyaert, M. Chupanova, L.D. Lavis, E.R. Schreiter, *Nat. Chem. Biol.*, **2021**, 17, 718–723.
4. T. Li, X. Zheng, L. Qu, Y. Ou, S. Qiao, X. Zhao, Y. Zhang, X. Zhao, Q. Li, *Chin. Chem. Lett.*, **2024**, 35, 109792.

基金标注: 国家自然科学基金项目 (22574129, 22374116)

O-80

多孔磁性氧化石墨烯材料高效提取城市废水中病毒核酸

贺奔宇¹, 谢文菁¹, 汪海林¹, 彭汉勇^{1*}, 乐晓春², 江桂斌¹¹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, 北京 100085;²阿尔伯塔大学, 加拿大 T6G 2G3;

通讯联系人 E-mail: hypeng@rcees.ac.cn

废水病毒监测能够及时发现早期的病毒传播信号, 极大地增强疾病预防的及时性。针对废水病毒监测中RNA提取效率低、干扰物多等技术瓶颈, 本研究创新性地构建了一种具有高效核酸捕获能力的磁性多孔纳米复合材料(aMGO)。该材料通过琼脂糖包裹四氧化三铁磁性纳米微球(Fe_3O_4)与氧化石墨烯(GO)的复合体系, 实现了对水体中SARS-CoV-2病毒RNA的高效捕获。这种琼脂糖物理包裹的方式能够实现对不同纳米颗粒的完全负载, 且具有三维多孔网络结构(平均孔径500 nm), 其微观孔道可物理阻隔核酸酶等大分子的干扰, 保护提取的RNA。同时, 氧化石墨烯片层通过 $\pi-\pi$ 堆积作用高效吸附病毒RNA, 结合 Fe_3O_4 磁性纳米颗粒实现快速磁分离(响应时间<5 min), 病毒RNA吸附效率和回收率超过90%。保存稳定性测试显示室温下RNA完整性可维持72h。实际检测某市污水处理厂进水样品时, 成功检出SARS-CoV-2病毒RNA, 灵敏度达10 copies/mL, 且吸附于aMGO的RNA在室温下可稳定保存72小时。开发的aMGO-RT-qPCR为基于废水的社区感染预警提供了新的技术, 其RNA提取和保存可用于多种类型病毒的监测, 如诺如病毒、流感病毒等多种病原体, 在公共卫生监测领域具有重要应用前景。

关键词: 病毒监测; 分子诊断; 废水; RNA提取; 多孔磁性材料

参考文献

- [1] B. He, F. Wang, X. Jin, X. Zhang, R. Sha, Y. Liang, Y. Wang, W. Xie, J. Shi, **H. Peng***, Porous agarose layered magnetic graphene oxide nanocomposite for virus RNA monitoring in wastewater. *Anal. Chem.* 2024, 96, 9167.
- [2] A. Yuan, R. Sha, W. Xie, G. Qu, H. Zhang, H. Wang, X. C. Le, G. B. Jiang, **H. Peng***, RNA-activated CRISPR/Cas12a nanorobots operating in living cells. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 26657. (Supplementary Cover)
- [3] Z. Deng, W. Liao, L. Bu, J. Li, J. Li, L. Wang, A. Yuan, W. Xie, Y. Wang, **H. Peng***, Advancements in CRISPR-diagnostic techniques for rapid on-site monitoring of environmental virus. *TrAC Trend. Anal. Chem.* 2024, 181, 118046.
- [4] Z. Ye, W. Liao, Z. Deng, L. Wang, B. Wen, D. Zhang, H. Wang, W. Xie, **H. Peng***, Fast-track synthesis of DNA-functionalized gold nanoparticles for biosensing applications. *TrAC Trend. Anal. Chem.* 2024, 175, 117724.
- [5] A. Yuan#, H. Hao#, R. Sha, H. Xiao, F. Yang, B. Pang, J. Li*, M. Jin, W. Xie, L. Zhao, Y. Wang, Y. Zhang, J. Li, **H. Peng***, *In situ* imaging of cellular inflammatory response to antibiotic exposure with a DNzyme nanorobot. *Environ. Sci. Technol.* 2024, 58, 20619.
- [6] A. Yuan, T. Sun, L. Chen, D. Zhang, W. Xie, **H. Peng***, CRISPR/Cas12a corona nanomachine for detecting circulating tumor nucleic acids in serum. *Anal. Chem.* 2024. 96, 20074.

O-81

随机尿儿茶酚胺代谢物在 PPGLs 诊断中的应用研究

贾媛媛¹, 何一帆², 张磊³, 甄乾娜², 孙琪¹, 丁敏^{1*}, 张晓清^{1*}

1 重庆医科大学检验医学院, 临床检验诊断学教育部重点实验室, 重庆, 400016

2 重庆医科大学附属第一医院内分泌实验室, 重庆, 400010

3 重庆医科大学附属第一医院检验科, 重庆, 400010

摘要

嗜铬细胞瘤和副神经节瘤 (Pheochromocytoma and paraganglioma, PPGLs) 是少见的神经内分泌肿瘤, 临床表现多样性、诊断面临诸多困难。《嗜铬细胞瘤和副神经节瘤诊治专家共识 (2020 年版)》建议检测血浆或尿中游离儿茶酚胺代谢物 (Catecholamines, CAs) 作为 PPGLs 的首选实验室检测指标。样本采集存在血浆采集有创, 24 h 尿液采样不便等问题。因此, 寻求一种简便、可靠的 CAs 检测方案对 PPGLs 诊断具有重要的临床意义。本研究采用磁性分子印迹聚合物 (Magnetic molecularly imprinted polymer, MMIP) 前处理方法结合高效液相色谱 (High performance liquid chromatography, HPLC)-荧光法/二极管阵列检测器法 (Fluorescence detection/diode array detection method, FLD/DAD) 检测随机尿中去甲肾上腺素 (Norepinephrine, NE)、甲氧基去甲肾上腺素 (Normetanephrine, NMN)、肾上腺素 (Epinephrine, E)、甲氧基肾上腺素 (Metanephrine, MN)、多巴胺 (Dopamine, DA)、3-甲氧酪胺 (3-methoxytyramine, 3-MT) 以及肌酐 (Creatinine, Cr) 含量, 以内标法定量。研究通过对表观健康人随机尿样本进行分析, 采用非参数法建立随机尿 CAs 参考区间; 通过分析纳入 PPGLs 患者和非嗜铬细胞瘤患者随机尿样本, 用于评估随机尿 CAs 对 PPGLs 的诊断效能。结果显示这五种代谢物联合诊断效率较高, 特异度和灵敏度也较高, 表明随机尿 CAs 对 PPGLs 具有良好诊断效能。

关键词: 嗜铬细胞瘤; 副神经节瘤; 儿茶酚胺代谢物; 随机尿; 诊断

基金项目: 重庆市自然科学基金项目 (CSTB2024NSCQ-MSX0788) 资助。

通讯作者: 丁敏 (1963), 女, 教授, 研究方向为色谱质谱分析方法与临床检验新方法; 张晓清 (1980), 女, 教授, 研究方向为电分析化学与临床检验新方法。

E-mail: dingmin@cqmu.edu.cn, xzhang5@cqmu.edu.cn

参考文献:

1. Garcia-Carbonero R., Matute Teresa F., Mercader-Cidoncha E., et al., *Clinical & Translational Oncology*, 2021, 23: 1995-2019.
2. 王庭俊, 谢良地, *中华高血压杂志*, 2021, 29: 708-714.
3. Zhang D., Tan H., Liu Y., et al. *Microchemical Journal*, 2025, 210: 113026.

O-82

难治愈疾病与关键蛋白翻译后修饰的刍议及技术革命初探

刘照胜¹, 黄艳萍^{*1}, 张玉奎^{**2}

1.天津医科大学药学院; 2.中国科学院大连化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: huangyanping@tmu.edu.cn; ykzhang@dicp.ac.cn

难治愈疾病（如恶性肿瘤、慢性病、神经退行性疾病及罕见病等）的病理机制复杂，研究其分子分类学和精准医学，寻找新靶点，开发有效临床治疗手段刻不容缓。翻译后修饰（post-translational modifications, PTMs）的改变是多种病理状态的基础，可为疾病提供有价值的治疗靶点。

α -突触核蛋白病是一类以病理性 α -突触核蛋白（ α -synuclein, α -syn）细胞内积聚为特征的神经退行性疾病。这类疾病包括帕金森病（Parkinson's disease, PD）、路易体痴呆、多系统萎缩以及约50%的阿尔茨海默病病例。蛋白质酰基化在神经退行性疾病中发挥着重要作用。但缺乏高效富集技术，存在深度覆盖瓶颈。

分子印迹聚合物（Molecularly Imprinted Polymer, MIP）是一种制备的具有分子识别空腔的高分子材料，采用MIP进行PTMs富集，可规避常规方法中往往需特异性抗体以降低大规模筛选新型修饰成本。我们分别以 PEPACr、QLATKla、KsuccYTSSK为模板，合成了巴豆酰化、乳酰化及琥珀酰化修饰肽MIPs，其印迹因子分别为3.09、13.1和71.1、回收率分别为 92.37%、83.0%，其中 PEPACr-MIP用于小鼠肝脏蛋白样品鉴定，结果显示经 PEPACr-MIP 处理后鉴定到的巴豆酰化位点数是未处理的 2.2 倍；通过虚拟印迹策略，以棕榈酰化修饰多肽类似物-棕榈酸（PAA）为虚拟模板，合成新型虚拟印迹整体柱（DMIP），其印迹因子2.23，回收率最高为 86.85%，用于富集人血浆样品中棕榈酰化修饰多肽/蛋白，结果显示富集后棕榈酰化蛋白含量为富集前的2倍，棕榈酰化多肽含量为富集前的5倍。

因此，以分子印迹技术为抓手，采用合成新策略，制备酰基化修饰 MIP 整体柱，绕开了抗体富集的经典路线，为 PTMs 位点特异深度覆盖提出了一条特异性强、制备周期短且费用低的塑料抗体新途径。该技术革命有望为发现病理性 α -syn 特异性酰基化修饰位点提供助力，从而推动该类神经退行性疾病临床新疗法的发现。并以此为契机，在技术革命的引领下，面向难治愈疾病的关键蛋白病，全面开展基于分离分析科学的蛋白质组学驱动的精准医学研究，开创临床救治新范式。

参考文献:

1. X. Zhang, Q. Wei, X. Meng, L. Zhao, Z.-S. Liu, Y.-P. Huang, *Anal. Chem.*, **2023**, 95(2), 1241-1250.
2. W.-R. Pu, D.-Y. An, Y. Wang, X. Zhang, Y.-P. Huang, Z.-S. Liu, *Anal. Chim. Acta*, **2022**, 1204, 339697.
3. 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. Actuators B Chem.*, **2022**, 356, 131338.
4. 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.
5. D.-Y. An, W.-R. Pu, Y. Wang, X. Zhang, Y.-P. Huang, Z.-S. Liu, *Microchim. Acta*, **2022**, 189, 85.
6. Z.-H. Wei, X. Zhang, X. Zhao, Y.-J. Jiao, Y. P. Huang, Z.-S. Liu, *Talanta*, **2021**, 224, 121810.

O-83

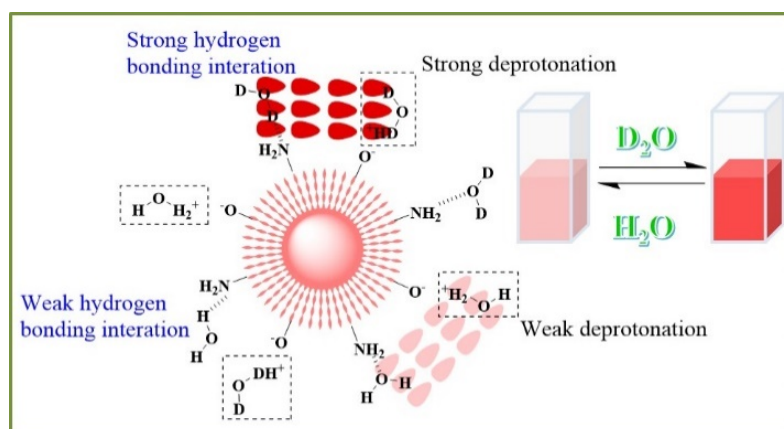
红光碳点的设计制备及水和重水的超灵敏分析研究

韩羊霞, 哈伟, 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

区分重水 (D_2O) 与普通水 (H_2O) 对于高纯 D_2O 在核工业、化学分析、生物代谢途径示踪等领域的应用至关重要, 同时关系到水质完整性保障及人类健康维护。然而, 由于两者物理化学性质高度相似, 这一区分工作颇具挑战性。基于 D_2O 相较于 H_2O 具有更强的氢键强度和使酚羟基去质子化的能力, 我们通过室温一步法策略成功合成了具有优异光学性能、耐盐性、抗光漂白性、长期储存稳定性及生物相容性的红色发光碳点 (RCDs)。基于 D_2O 表现出优异的氢键强度和易使酚羟基去质子化这一事实, RCD 传感器对 H_2O 中 D_2O 含量及 D_2O 中 H_2O 含量的检测灵敏度分别达到 0.060% 和 0.15%。总的来说, 这项研究扩大了碳纳米材料的应用潜力, 并引入了一种非常简单的分析 D_2O 同位素纯度的策略。

图 1. RCDs 区分检测 D_2O 和 H_2O 的示意图

参考文献:

1. Y. Han, H. Zhang, Y.-P. Shi*, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 7961-7967.
2. C. Jiang, Y. Meng, Y. Huang, C. Liu, Y. Yin, X. Zhao, S. Cao*, Z. Jiang*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, 5320-5329.

O-84

基于含氟多孔聚合物-冷辅助固相微萃取的复杂基质中氟化液晶单体高灵敏检测方法

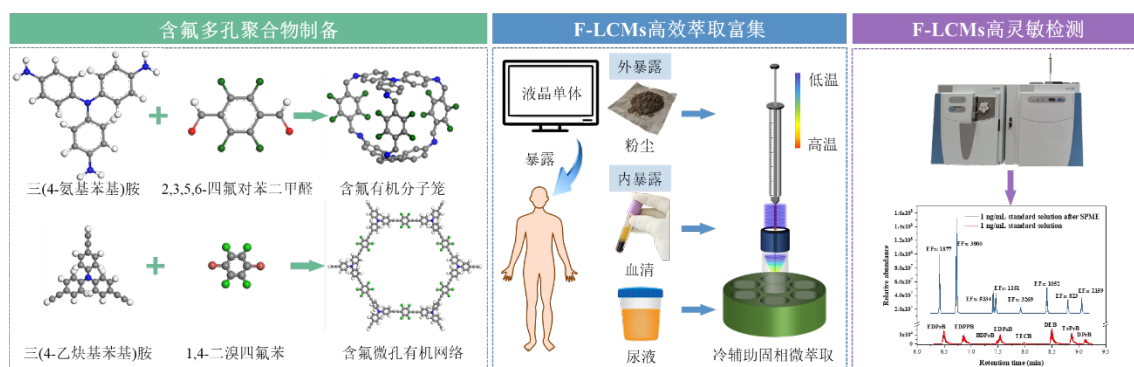
李鹏飞¹, 韩晔红¹, 闫宏远^{1,2*}

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

液晶单体 (LCMs) 在液晶面板的使用、回收和处置过程中会释放到环境介质中, 并可通过呼吸吸入、皮肤接触和饮食摄入等途径进入人体, 对生态环境和人群健康构成威胁^[1-2]。其中, 以氟化液晶单体 (F-LCMs) 的毒性尤为突出, 与非氟化 LCM 相比, F-LCM 表现出更强的持久性、长距离迁移性和生物积累性, 凸显了其灵敏检测方法的紧迫性^[1]。然而, 复杂基质中的痕量目标物往往需要经过合适的样品前处理技术才能实现其准确灵敏检测^[3]。固相微萃取 (SPME) 由于具有操作简便且富集能力强的优势, 已成为一种被广泛应用的样品前处理技术。纤维涂层作为 SPME 技术的核心, 可显著影响萃取效率和最终分析方法性能^[4]。为此, 本研究针对氟化液晶单体的结构特征和理化性质, 设计制备了具有大比表面积和快传质速率的含氟多孔聚合物 (含氟微孔有机网络和含氟有机分子笼), 并将其作为冷辅助固相微萃取纤维涂层, 实现了痕量氟化液晶单体的高选择性萃取 (1.3-13.2 倍) 和高效富集 (富集倍数为 660-5334)。与气相色谱-串联质谱联用实现了复杂基质粉尘、尿液和血清中痕量 F-LCMs 的超灵敏检测, 定量限低至 0.24-19.4 pg mL⁻¹, 较现有方法灵敏度提高 2-3 个数量级。该方法显著减少了有机溶剂的使用, 并改善了传统前处理技术中繁琐的净化步骤^[5,6]。建立的方法为研究 F-LCMs 及其类似污染物的环境分布、迁移转归和人群健康风险评估提供了有力的技术支持。



国家自然科学基金项目（82373634, 82073605）；河北大学创新团队计划项目（IT2023A06）；河北省矿产资源与生态环境监测重点实验室开放课题项目（HBMREEM202401）资助。

O-85

MOFs 复合材料的构效设计及其在萃取新方法中的应用研究

王雪梅*, 张震, 张婕, 陈姬云, 慕甫, 陈军

高原交汇区水资源安全与水环境保护教育部重点实验室

西北师范大学化学化工学院

E-mail: wangxuemei@nwnu.edu.cn

样品前处理是仪器分析的核心环节,其目的是浓缩痕量组分、消除基质干扰、提高检测灵敏度并保护分析仪器,是复杂环境样品分析检测的关键步骤。以固相(微)萃取为代表的现代样品前处理技术具有快速、自动化、无溶剂或少溶剂的优点,大幅提升了分析效率。固相(微)萃取技术的核心是吸附剂,其性能直接影响分析结果的准确度。金属有机框架(MOFs)因其超高的比表面积、可修饰的孔道、纳米尺寸的孔隙环境以及优异的物理化学性质,在吸附分离领域展现出显著优势。此外,以MOFs为基础,通过功能组分的定向复合与空间结构的精准设计制备的MOFs复合材料实现了在吸附容量、传质效率、选择性、稳定性以及独特界面行为等方面的独特优势^{1,2}。“结构-性能”构效关系的设计思路使MOFs复合材料能够精准应对复杂样品前处理面临的多重挑战(图1)。

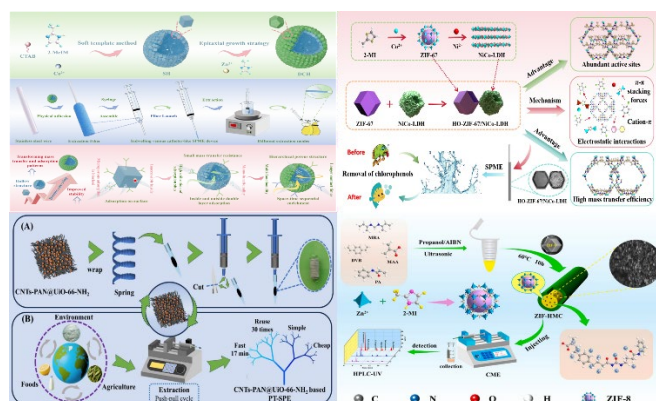


图1 MOFs复合材料在固相(微)萃取技术中的应用

近年来,围绕MOFs复合材料在固相(微)萃取领域中已开展了诸多创新性研究。其中,以“化粉末为整体”为核心的萃取新方法设计理念,正推动膜萃取、移液器尖端固相萃取、膜保护固相萃取、纤维固相微萃取和管内固相微萃取等萃取模式成为当前固相(微)萃取技术发展的重要方向^{3,4}。无论是直接或间接方式制备的整体式材料,或将其与整体式装置结合,使萃取新方法向着高效、自动化、小型化和原位化的方向发展。同时,人工智能(AI)和机器辅助学习(ML)等策略的引入也可从方法层面提升单一检测技术对多目标物的分离分析和精准定量检测的能力。这些新型技术的融合应用都将加速固相(微)萃取技术在环境监测、生物医药及现场快检等领域的实用化进程,实现从实验室方法到可靠分析工具的跨越。

参考文献:

1. Z. Zhang, X. Wang*, J. Liu, J. Zahng, W. Li, D. Xu, X. Du, X. Lu, *Chem. Eng. J.*, **2025**, 522, 167543.
2. J. Zhang, X. Wang*, J. Chen, Z. Zhang, Z. Ma, B. Zhang, X. Du, X. Lu, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 497, 139612.
3. X. Wang*, F. Mu, J. Chen, J. Liu, R. Peng, X. Du, X. Lu, *Sep. Purif. Technol.*, **2025**, 376, 134046.
4. X. Wang*, J. Chen, J. Liu, J. Zhang, X. Du, X. Lu, *Talanta*, **2025**, 281, 126812.

O-86

脓毒症精准治疗：基于双重亲和策略的高效脂多糖清除材料

熊雨婷*, 卿光焱

中国科学院大连化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: xiongyt@dicp.ac.cn

脓毒症是一种由感染引起的全身炎症反应的疾病，发病率和死亡率居高不下，治疗成本高昂，已成为全球重大健康威胁。据统计，全球约五分之一死亡与脓毒症相关，而在重症监护室中，脓毒症更是导致患者死亡的首要原因。脂多糖（又称内毒素）作为脓毒症的核心致病因子，在疾病早期及时清除对于阻断病情恶化、挽救患者生命至关重要。然而，由于脂多糖结构多样、血液中含量极低且血液成分复杂，实现其高效、高特异性清除一直是临床面临的重大挑战。

为解决这一难题，研究团队开展了系列创新工作。早期研究提出基于噬菌体展示技术的“特异性识别”策略，针对大肠杆菌脂多糖筛选出高亲和力多肽配体（PEP-1），并将构筑成瓶刷状聚合物，在脓毒症兔模型中实现>70%的脂多糖清除率[1]。随后，针对脂多糖广谱清除需求，设计了由两个组氨酸构成的二肽作为结合单元，通过与脂多糖保守的类脂 A 结构域结合，实现了对多种细菌来源的脂多糖的广谱清除（清除率 54%-87%）[2]。

近期，研究团队创新性地融合高亲和多肽与分子印迹聚合物技术，成功开发出新型“双亲和”脂多糖捕获材料[3]。该研究首先瞄准脂多糖的保守结构核心（Kdo₂-类脂 A）作为靶标，通过噬菌体展示技术筛选出一种新型高亲和肽（P-HK），该肽对脂多糖表现出卓越结合能力。同时，巧妙利用脂多糖的两亲性质，通过乳液界面聚合的方法，构建了表面具有脂多糖精准匹配空腔的印迹聚合物小球。最终，将印迹聚合物与亲和肽偶联，构建了一种新型“双亲和”脂多糖捕获材料，实现了“形状选择性识别”与“肽特异性亲和”的协同增效。实验结果显示，该材料在对大肠杆菌脂多糖的清除中，不仅在缓冲液中清除率高达 99.2%，在全血环境实现了 95.4%脂多糖清除率，并对多种细菌来源的脂多糖均表现出广谱清除能力。同时，该材料还具备优异的抗蛋白黏附性能和良好的生物相容性，为其血液净化应用提供了关键安全保障。在脓毒症兔模型治疗中，基于该材料的血液灌流实现了 84.8%的脂多糖清除率，有效缓解了多器官损伤，显著提升了存活率。

该研究通过创新的“双亲和”技术路径，攻克了脂多糖特异性清除的难题，在清除效率、吸附容量、广谱性和生物相容性等方面均实现突破性提升，为脓毒症治疗提供了一种精准、高效的全新技术方案，也为其它血液毒素的特异性清除提供了重要参考。

参考文献:

1. Z. Shi, X. Zhang, X. Yang, X. Zhang, F. Ma, H. Gan, J. Chen, D. Wang, W. Sun, J. Wang, C. Wang, L. Lyu, K. Yang, L. Deng, G. Qing, *Adv. Mater.* **2023**, 35, 2302560.
2. J. Chen, Z. Shi, X. Yang, X. Zhang, D. Wang, S. Qian, W. Jing, C. Wang, Q. Li, Z. Wang, Y. Song, G. Yang, G. Qing, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2023**, 15, 32251–32261.
3. H. Wei, X. Li, Y. Xiong, X. Zhang, M. Li, H. Zhang, X. Chen, D. Wang, H. Qin, Y. Chang, X. Wang, G. Qing, *Adv. Mater.* **2026**, 38, e17135.

O-88

碳材料表面功能调控及其在复杂生物体系分离识别中的应用

谢文菁, 彭汉勇*, 江桂斌

中国科学院生态环境研究中心, 环境化学与环境毒理全国重点实验室

通讯联系人 E-mail: hypeng@rcees.ac.cn

碳基材料因其独特的物理化学性质在分离科学中具有重要潜力, 然而, 其表面化学性质的复杂性制约其功能精准调控, 表面官能团种类的细微差异可直接影响其界面行为、分子识别能力及生物效应。因此, 如何精准调控碳材料表面化学性质, 同时实现对目标分子的高选择性分离识别, 是当前分离科学在碳材料功能化研究中面临的核心科学挑战。

本研究系统开展了碳基材料功能调控与表面解析、分离方法开发及应用研究。首先, 设计并制备了表面富含链状氨基酸结构的碳点, 利用表面官能团与靶标分子之间的特异性相互作用, 实现对肿瘤细胞表面高表达的大中性氨基酸转运体 1 (LAT1) 的选择性识别, 可在复杂生物体系中实现了目标分子的精准结合与分离识别, 提高靶向分离识别效率, 实现精准靶向肿瘤而不影响其它正常组织器官。同时, 建立了免柱层析分离方法, 采用一步减压过滤提纯技术, 实现高纯度碳点的快速规模化制备, 为碳材料表面功能精准调控及其在复杂基质中分离识别应用提供了可靠技术基础。在此基础上, 基于纳米材料表面化学与微环境相互作用机制, 构建了 pH 响应的多功能碳酸锰纳米颗粒, 实现在复杂环境中目标功能组分的选择性分离、可控释放与靶向富集。该部分研究为碳材料表面活性组分的分离识别提供了新方法, 拓展了分离科学在环境健康领域的应用场景。

然而, 碳材料表面官能团结构多样、组成复杂, 选择合适的表面分析方法以准确表征碳基材料表面组成并精准识别关键活性位点, 有利于碳材料与生物活性分子相互作用的分子机制解析。以石墨烯和高定向热解石墨 (HOPG) 为研究对象, 开发了高温高真空退火处理方法, 有效去除表面杂质干扰, 成功获得超净表面的碳材料; 结合原位飞行时间-二次离子质谱 (ToF-SIMS) 和 X 射线光电子能谱 (XPS), 实现了碳材料表面化学组分的高灵敏度分离检测与动态演变追踪。基于质谱的碎片离子解析, 将 $C_5H_2^+$ 系列离子峰确认为石墨类材料表面的特征缺陷峰; 根据特征离子峰质谱成像, 明确了石墨烯与铜箔基底的相互作用特征峰, 揭示了其内在作用机制。该系列研究为碳材料表面结构的精准解析提供了关键表征方法, 为解析碳材料分离介质上的界面化学分子机制提供了重要技术支撑。

参考文献:

1. W. Xie[#], H. Wang[#], H. Xu[#], W. Su[#], T. Yuan, J. Chang, Y. Bai, Y. Fan, Y. Zhang^{*}, Y. Li, X. Li, L. Fan^{*}. *Nat. Commun.*, **2025**, 16, 2716.
2. W. Xie[#], Q. Hao[#], Z. Ye[#], R. Sha, B. Wen, H. Wang, H. Zhang, G. Jia, X. C. Le, G. Jiang, H. Peng^{*}. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2025**, 64, e202503004.
3. W. Xie, L.-T. Weng, K. M. Ng, C. K. Chan, C.-M. Chan^{*}. *Carbon*, **2017**, 112, 192-200.
4. W. Xie, L.-T. Weng, K. M. Ng, C. K. Chan, C.-M. Chan^{*}. *Carbon*, **2015**, 94, 740-748.

O-89

基于双功能协同的细胞外囊泡分离新方法及应用研究

余媛媛, 陈梦茜, 张海洋*

苏州大学 药学院

通讯联系人 E-mail: hyzhang2020@suda.edu.cn

摘要正文

细胞外囊泡 (Extracellular vesicles, EVs) 作为细胞间通讯与功能调控的媒介, 广泛存在于血液、尿液、泪液和唾液等各种体液中。EVs 所携带的 miRNA 是最具潜力的癌症诊断生物标志物之一, 对早期诊断和预后评估具有重要意义。然而, EVs 的高效分离及其内部 miRNA 的精准检测仍面临技术挑战, 尤其是应用最为广泛的超速离心法结合 miRNA 提取与 RT-qPCR 检测策略, 操作繁琐、效率较低, 且在分离与提取过程中易导致 miRNA 的损失, 限制了 EVs 内的 miRNA 在临床转化中的应用。

本研究基于双功能基底材料和分子信标探针技术, 构建了以多孔材料为基底的 EVs 分离及其内 miRNA 原位高通量检测一体化方法。通过在材料表面修饰氨基增加表面修饰位点, 进一步修饰 Ti^{4+} 和脂探针, 制得双功能 EVs 亲和材料。利用 EVs 磷脂膜结构特点实现 EVs 高效分离, 并结合分子信标探针实现 miRNA 的高通量原位检测。通过形貌与结构表征验证了材料的成功制备。结合 Western blot 检测 EVs 标志蛋白, 以及荧光共定位分析, 证实了材料对于 EVs 的高效捕获能力及用于 miRNA 原位检测的可行性, 并呈现出良好的线性响应。与传统 EVs 分离及 miRNA 检测方法相比, 本项目研究方法在分离效率和检测灵敏度方面均具显著优势, 并且可以减少 EVs 分离以及 miRNA 提取过程造成的样品损失, 可以用于微升级尿液 EVs 的 miRNA。该方法成功区分了前列腺癌患者与健康志愿者尿液 EVs 中 miR-21-5p 与 miR-375-3p 的表达差异, 显示出良好的诊断能力。

参考文献: (5 号宋体或 Times New Roman, 单倍行距)

1. F. Xu, M. Chen, Y. Lin, S. Zhou, J. Li, Y. Yu, J. Xu, W. Wu, Y. Chen, **H. Zhang***, Y. Wei*, W. Wang*, Anal. Chem., **2024**, 96, 17640-17648.
2. W. Dong, M. Chen, C. Wang, M. Jia, **H. Zhang***, J., Y. Wei*, Anal. Chem., **2025**, 97, 7510-7517.
3. F. Zhou, L. Pan, X. Ma, J. Ye, Z. Xu, C. Yuan, C. Shi, D. Yang, Y. Luo, M. Li, P. Wang, Anal. Chem., **2024**, 96, 15665-15673.
4. J. Feng, Y. Shu, Y. An, Q. Niu, Q. Fan, Y. Lei, Y. Gong, X. Hu, P. Zhang, Y. Liu, C. Yang, L. Wu, Anal. Chem., **2023**, 95, 7743-7752.

O-90

固定化酶构建及在活性成分靶向筛选中的研究

申刚义*, 李淼, 刘慧杰, 刘佳, 王嫚

中央民族大学 药学院 民族医药教育部重点实验室, 北京, 100081

*E-mail: shengyi@muc.edu.cn

摘要: 从特色中药材中靶向筛选蛋白酶抑制剂是当前生命医学领域的重要方向。相对于自由溶液状态的酶, 固定化酶兼具稳定性强、能重复使用、易分离和可连续化操作等优势, 为提高靶酶筛选体系的稳定性与适用性提供了新平台。本课题组以疾病相关的靶点酶为抓手, 发展构建一系列固定化酶技术, 结合现代分析仪器, 开展了从特色中药材中快速筛选酶抑制剂活性成分的研究。先后将单靶点固定化拓展至多靶点分区固定化, 构建了 CEC-IMER、SPR-LC 联用和杂化纳米花微反应器-UPLC-MS/MS 等多种筛选系统, 从特色民族药材新疆紫草、醉马草、多裂骆驼蓬中筛选各种酶抑制剂活性成分^[1-4]。相关研究对于推进中医药现代化具有重要的方法学意义和潜在的应用价值。

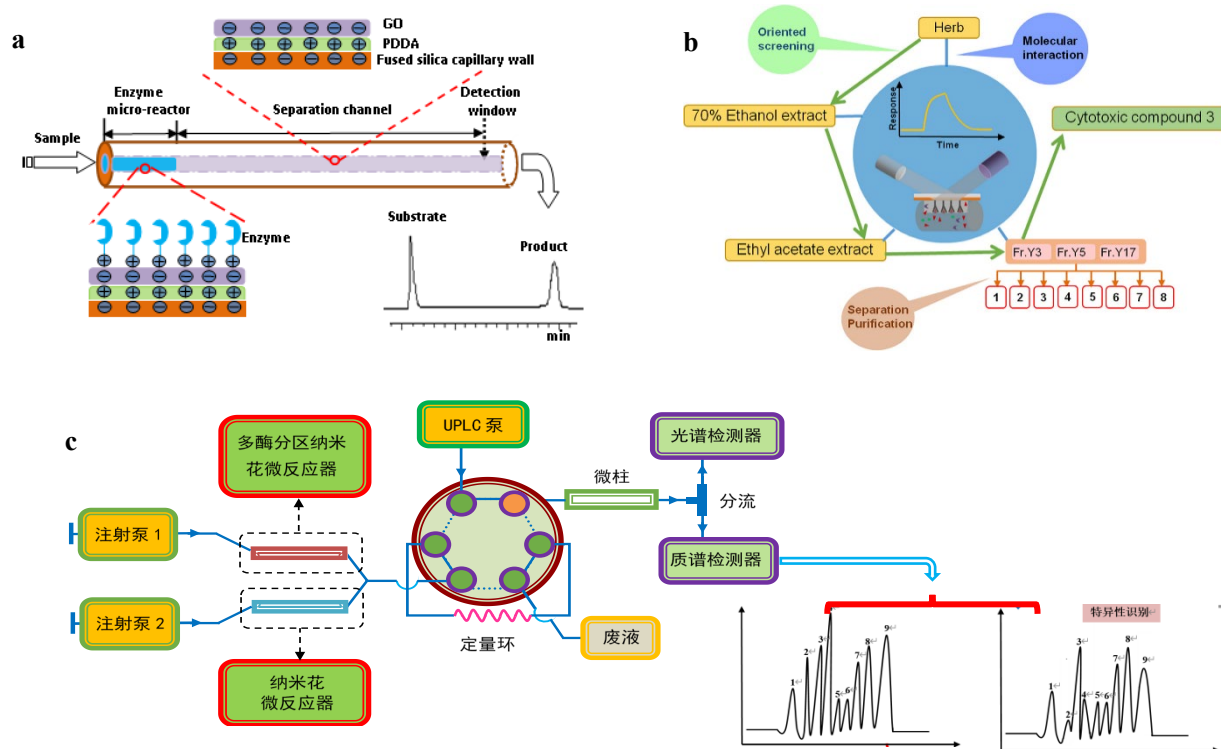


图 筛选系统示意图. a: CEC-IMER; b: SPR-LC; c: 酶分区纳米花微反应器-UPLC-MS/MS

参考文献:

1. 申刚义*, 等, 分析化学, **2017**, 11, 1727-1733.
2. 申刚义*, 等, 分析测试学报, **2019**, 38, 734-738.
3. 申刚义*, 等, 化学进展, **2020**, 34, 392-405.
4. Shen Gangyi*, et al, *Chinese Herbal Medicines*, **2023**, 15, 329-336.

基金: 受国家自然科学基金 (No. 82374161、81573834、81001595)、中央高校基本科研业务费支持。

O-91

液相色谱串联质谱法测定唾液中的 63 种吲哚/吡唑酰胺类合成大麻素

吕建霞, 杨哲, 蒋力维, 吴一荻, 吕建霞*

1. 精神活性物质侦测与防控北京市重点实验室, 北京市禁毒科技中心; 2. 国家毒品实验室北京分中心

通讯联系人 Email: ljx19801128@sina.com

摘要: 合成大麻素被吸食后会经肺很快进入到血液, 然后经过超滤、被动扩散等方式被滤出进入唾液。唾液易获取、可操作性强, 在实际执法中是一种更为实用的生物检材。为了对唾液中的合成大麻素进行检测分析, 本研究建立了液相色谱串联三重四级杆质谱法(LC-MS/MS)同时检测唾液中的 63 种吲哚/吡唑酰胺类合成大麻素。63 种合成大麻素经乙腈提取, 以 0.1%甲酸-水和甲醇-乙腈溶液(v/v, 1:1)为流动相, 采用岛津 Shim-pack GIST-HP C18 AQ (100 mm×2.1 mm, 1.9 μm) 色谱柱进行分离, 柱温 40 °C, 流速 0.4 mL/min, 进样量 1 μL, 在多反应监测(MRM)模式下进行检测。结果表明, 采用该方法, 63 种合成大麻素可在 15 min 内被全部检测分析, 在各自的线性范围内线性关系良好, 检出限可低至 0.01 ng/mL, 定量限可低至 0.04 ng/mL, 满足实际样品分析需求。以不含目标物的唾液样品为基质样品, 在 40 ng/mL 的加标水平下进行加标回收试验, 各待测物的加标回收率在 80%~120%之间。本方法具有准确、快速、灵敏、分离效果好等优点, 可以对唾液中 63 种吲哚/吡唑酰胺类合成大麻素进行定性定量检测分析, 从而为实际执法提供技术支撑。

Abstract: Synthetic cannabinoids (SCs), which are among the most widely abused new psychoactive substances, are much more potent and have greater efficacy than natural cannabis. Since the emergence of so-called first-generation SCs, subsequent developments have led to eighth-generation indole/indazole amide-based SCs. As of July 1, 2021, the entire category of SCs was added to the list of controlled substances. SCs can be disguised in various ways and are commonly sold in the form of electronic cigarette oil. After smoking, SCs quickly enter the bloodstream through the lungs. The SCs in the blood are filtered out into saliva through ultrafiltration and passive diffusion. Due to the lipophilicity of drug precursors compared to metabolites, they are more likely to enter saliva through the lipid membrane barrier. Therefore, the target substances for saliva analysis are mainly drug precursors. Saliva samples, as biological samples, are easy to obtain, highly operable, and convenient compared to urine and blood samples, making them a very practical biological sample. Therefore, it is significant to study a detection method for SCs in saliva, which can provide technical support for actual law enforcement.

In this study, a liquid chromatography-Tandem Mass Spectrometry (LC-MS/MS) method was developed for the simultaneous determination of 63 indole/indazole amides SCs in saliva. 63 SCs were extracted by using acetonitrile. Under the schedule of multiple reaction monitoring (MRM), the mobile phase system contained 0.1% formic acid-water and methanol-acetonitrile (v/v, 1:1), gradient elution. Target analytes were separated on a SHIMADZU Shim-pack GIST-HP C18 AQ (100 mm×2.1 mm, 1.9 μm) at a column temperature of 40 °C and a flow rate of 0.4 mL/min. The injection volume was 1 μL. The results showed that the 63 SCs were identified in 15 min under the optimized conditions. The 63 SCs had a good linear relationship. The limits of detection (LODs) could reach 0.01 ng/mL, and the limits of quantitation (LOQs) could reach 0.04 ng/mL, which could meet the requirements of the analysis of the 63 SCs in actual samples.

The recoveries of 63 SCs were 80%-120%. This method was accurate, rapid, sensitive and effective to separation for the determination of 63 SCs in saliva, which could satisfy the requirement of actual law enforcement.

参考文献:

- [1] ZNALEZIONA J, GINTEROVÁ P, PETR J, ONDRA P, VÁLKA I, ŠEVČÍK J, CHRASTINA J, MAIER V, *Anal Chim Acta*, **2015**, 874, 11-25.
- [2] CASTANETO M S, GORELICK D A, DESROSIERS N A, HARTMAN R L, PIRARD S, HUESTIS M A. *Drug Alcohol Depend*, **2014**, 144, 12-41.
- [3] ALVES V L, GONÇALVES J L, AGUIAR J, TEIXEIRA H M, CÂMARA J S, *Crit Rev Toxicol*, **2020**, 50(5), 359-382.
- [4] WEAVER M F, HOPPER J A, GUNDERSON E W, *Addict Sci Clin Pract*, **2015**, 10(1), 8.
- [5] 岳琳娜, 严慧, 向平, 刘伟, 宋粉云, *分析测试学报*, **2021**, 40(5), 690-698.
- [6] 李乐, 赵君博, 严慧, 刘万卉, 向平, 吴何坚, *法医学杂志*, **2021**, 37(4), 459-469.
- [7] 钱振华, 贾薇, 刘翠梅, *分析化学*, **2020**, 48(11), 1564-1572.
- [8] 刘俊亭, *中国法医学杂志*, **2021**, 36(1), 10-13.
- [9] 钱振华, 刘翠梅, 花镇东, 高利生, *质谱学报*, **2018**, 39(3), 323-330.
- [10] 王冠翔, 王继芬, 黑海, *化学通报*, **2021**, 84(12), 1345-1350.
- [11] 闻武, 李彭, 郑晓雨, 赵阳, 郑琿, *中国法医学杂志*, **2021**, 36(5), 474-476.
- [12] 于维彪, 王涛, 杨健, 才志成, 洪玉, 刘博, 孙大伟, 张大雷, *中国药物依赖性杂志*, **2023**, 32(4), 286-289.
- [13] 尉莹, 尉景文, *中国药物依赖性杂志*, **2023**, 32(4), 298-299.
- [14] 宋辉, 李想, 朱昱, *中国法医学杂志*, **2022**, 37(2), 198-199.
- [15] 曾莞勇, 范妮, 崔超丹, *中国药物滥用防治杂志*, **2022**, 28(4), 439-442.
- [16] 陈深树, 李亚庆, 康刚, 钟超群, 程良红, *中国法医学杂志*, **2021**, 36(4), 436-437, 439.
- [17] 郭颖, 吴波, 杨乔, 王学虎, 崔明伟, 苏梦翔, *中国司法鉴定*, **2023**, (3), 53-60.
- [18] 宋辉, 许英健, 李想, 朱昱, 张志远, *中国药物依赖性杂志*, **2022**, 31(6): 422-426.
- [19] ALLEN K. R. *Ann, Clin. Biochem.*, **2011**, 48(6), 531-541.
- [20] ANZILLOTTI L, MAREZZA F, CALÒ L, ANDREOLI R, AGAZZI S, BIANCHI F, CARERI M, CECCHI R, *Talanta*, **2019**, 201, 335-341.
- [21] STRANO-ROSSI S, ANZILLOTTI L, CASTRIGNANÒ E, ROMOLO F S, CHIAROTTI M, *J. Chromatogr. A*, **2012**, 1258, 37-42.
- [22] KNEISEL S, AUWÄRTER V, KEMPF J, *Drug Test. Anal.*, **2013**, 5(8), 657-669.
- [23] TOMAI P, GENTILI A, CURINI R, GOTTARDO R, TAGLIARO F, FANALI S, *J. Pharm. Anal.*, **2021**, 11(3), 292-298.
- [24] JÚNIOR E F, BITENCOURT V S, SOUZA Á B M D, CALADS E D, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2024**, 244, 116139-116149.
- [25] CHINTAN S, JYOTI S, BISWA P N, PRATEEK P, GAURAV K S, HIMANSHU K, *Mater. Today: Proc.*, **2023**.
- [26] 杨哲, 蒋力维, 杨思瑶, 吴一荻, 吕建霞, *色谱*, **2024**, 42(10), 943-953.
- [27] 王园媛, 李璐璐, 吕佳, 陈永艳, 张岚, *色谱*, **2023**, 41(6), 482-489.
- [28] 黄钰, 张婷婷, 胡爽, 贾薇, 王优美, 苏梦翔, 花镇东, *质谱学报*, **2022**, 43(4), 426-437.
- [29] 杨梅, 冯毅, 伏劲松, 刘太阳, 刘军虎, 孙思, 龙慧, 刘文锋, *四川师范大学学报(自然科学版)*, **2025**, 48(1), 61-71.

- [30]梁艳, 雷春妮, 王波, 张欢, 王新潮, 周小平, 漆珍珍, 朱梦晨, *色谱*, **2024**, 42(4), 368-379.
- [31]赵倩茹, 刘骅, 孟雅萍, 李翔, 高瑞芳, 李祥胜, *色谱*, **2023**, 41(12), 1084-1094.

O-93

基于薄膜荧光传感的微型色谱检测器研究

刘忠山*, 王洁, 胡定芳, 房喻

陕西师范大学化学化工学院

通讯联系人 E-mail: zhongshan.liu@snnu.edu.cn

随着我国社会治理的精细化水平持续提升,对环境污染物、毒品、爆炸物、化学战剂等有毒有害化学物质的跟踪监测和实时筛查提出了更高要求,促使检测技术从实验室向现场的关键转变。尽管基于紫外可见吸收、激光诱导荧光发射、质谱等原理的检测技术是可靠性验证的重要手段,但其在便携性、响应速度及监测时效等方面的局限日益显现,难以满足真实场景下突发事件的实时监测要求。相比之下,薄膜荧光传感是国际公认的新一代微痕量探测技术,薄膜荧光传感器具有小体积、低功耗、易携带、易维护等优势,已成功实现多类有毒有害化学物质的快速检测。但现有的薄膜荧光传感器普遍缺少分离系统,当其面向多样化的真实样品时,面临基质干扰、响应信号弱、选择性识别能力不足等诸多问题。此外,如何将荧光传感器与现有的色谱分离系统高效集成也鲜见报道。针对荧光传感器死体积大、与分离单元串联匹配性差等问题,我们发明了管式荧光传感器(体积: $3 \times 3 \times 2 \text{ cm}^3$; 重量: 34 g; 功耗: 0.24 W),并创制兼具分离性能与传感响应的荧光整体柱,自主构建了零死体积的微分离检测系统,实现了微纳克级有害物质混合物的分离和高灵敏检测。相比于商品紫外可见吸收检测器和激光诱导荧光检测器,基于薄膜荧光传感的微型色谱检测器能够检测沙林模拟物、烷烃、全氟有机化合物等光惰性目标物质。

参考文献:

1. J. Wang, R. Wen, J. Kong, J. Liu, Z. Liu*, Y. Fang*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2025**, 64, e202502020.
2. H. Hu, L. Peng, W. Xu, S. Zhang, Z. Liu*, Y. Fang*, *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 8197.
3. S. Lin, X. Chang, Z. Wang, J. Zhang, N. Ding, W. Xu, K. Liu, Z. Liu*, Y. Fang*, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 16051-16058.

O-94

C18 杂化核壳固定相的制备及应用

马淑娟^{1,*}, 郭甜甜², 朱敏², 张梦晴², 欧俊杰²⁽¹⁾中国科学院分离分析化学重点实验室, 大连化学物理研究所, 大连 116023⁽²⁾合成与天然功能分子化学教育部重点实验室, 西北大学, 西安 710127)

通讯联系人 E-mail: shujuanm@163.com

摘要:

有机—无机杂化策略为核壳型二氧化硅微球的结构优化与功能拓展提供了重要途径。通过有机功能单元与无机硅氧骨架的稳定共价键合, 可提升材料结构可调性与化学稳定性, 并实现表面功能多样化, 从而在保证高效传质的同时增强分离选择性^[1,2]。相较于传统C18固定相易受残余硅羟基影响而导致峰形劣化的问题, 所构建的杂化固定相在表面化学性质与结构协同调控方面展现出潜在优势, 为复杂体系中高效分离提供了新的材料设计思路^[3]。针对传统巯基修饰方法步骤繁琐、耗时较长的问题, 本研究以硅酸四乙酯和3-巯丙基三甲氧基硅烷为前驱体, 通过“一锅法”在无孔SiO₂表面构建了具有放射状孔道结构的巯基杂化核壳型二氧化硅微球(SiO₂@SiO₂-thiol), 实现壳层中巯基的均匀引入, 并获得具有良好单分散性以及孔径可调的核壳微球(粒径2.7 μm, 壳层厚度158 nm, 比表面积70.4 m² g⁻¹)。在此基础上, 进一步通过巯基—烯点击反应得到C18固定相(Hybrid-thiol-C18)。为了比较结构差异对色谱性能的影响, 先采用类似的工艺制备了无机核壳硅胶微球, 再使用巯基烷基化试剂在硅球表面引入巯基基团, 最后利用巯基—烯反应进行C18官能团的衍生, 得到Thiol-C18固定相微球。结果表明, Hybrid-thiol-C18与Thiol-C18在选择性及分离效率上存在显著差异。对于多环芳烃类化合物, 以荧蒹为探针, Thiol-C18的柱效(146,680 plates m⁻¹)明显高于Hybrid-thiol-C18, 但在除草剂利谷隆的分析中, 同等条件下, 在Hybrid-thiol-C18上的柱效可达到60,900 plates m⁻¹, 而在Thiol-C18上仅为35,880 plates m⁻¹, 体现了结构在调控分离行为方面的多样性。此外, 两种固定相在全氟酸类物质(PFASs)的LC-MS分析中也展现出良好的分离性能。

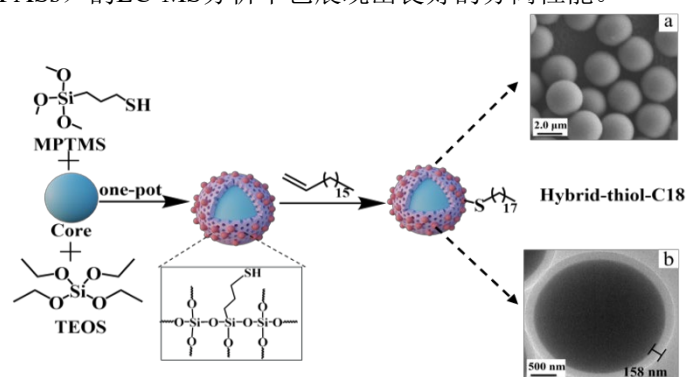


图1 C18 核壳型杂化二氧化硅微球的构建

关键词: 色谱固定相, 一锅法, 核壳型杂化微球, 液相色谱

参考文献:

- [1] Liu B., Li H., Quan K., et al. Periodic mesoporous organosilica for chromatographic stationary phases: From synthesis strategies to applications[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2023, 158, 116895
- [2] Shin J. H. and Schoenfish M. H. Inorganic/organic hybrid silica nanoparticles as a nitric oxide delivery scaffold[J]. Chemistry of Materials, 2008, 20, 239-249
- [3] Zhang M., Tan T., Li Z., et al. A novel urea-functionalized surface-confined octadecylimidazolium ionic liquid silica stationary phase for reversed-phase liquid chromatography[J]. Journal of Chromatography A, 2014, 1365, 148-155。

O-95

多糖纯化系统开发及应用评价

杜欣颖 孙江岑 李笃信*

(苏州大学 药学院, 江苏省 苏州市, 215123)

*通讯作者 Email: duxin.li@suda.edu.cn

纵观生命科学领域的发展历程, 重大科学突破往往伴随着关键工具的创新。小分子化合物领域已建立了完善的制备型高效液相色谱技术体系, 蛋白质和核酸类生物大分子则拥有专用的蛋白纯化系统。然而, 与上述三类分子的研究工具发展相比, 糖类的纯化长期缺乏专用的自动化仪器。这一工具缺失导致糖类研究长期停留在“色谱分离-馏分收集-离线检测-合并组份”的离线循环中, 效率低下且盲目性强。本研究开发了一种主动衍生化检测方法, 构建了相应的检测模块, 形成了糖质纯化专用系统, 实现了糖类在检测和自动化馏分收集。利用该装置实现了几种多糖的台阶梯度纯化和卡拉胶寡糖的线性梯度洗脱, 并进行了结构表征, 极大地促进了糖科学研究进展。

关键词: 多糖纯化; 系统开发; 应用评价;

Development and application of polysaccharide purification system

Xinyin Du Jiangcen Sun Duxin Li*

(College of pharmaceutical Sciences, Soochow University, Suzhou, China)

Abstract: Throughout the development of life sciences, major scientific breakthroughs have often been accompanied by the innovation of key tools. A complete preparative HPLC has been established for small-molecule compounds, and protein and nucleic acid biomacromolecules have special protein purification systems. However, compared to the development of research tools for the above three types of molecules, the purification of sugars has long lacked dedicated automated instruments. The lack of this tool has led to the carbohydrate research using the offline cycle of “LC separation - fraction collection - offline detection - combined components”, which is inefficient. In this study, an active derivatization detection method was developed, a detection module was constructed, an automatic system for sugar purification was constructed. The step gradient purification of several polysaccharides and linear gradient elution of carrageenan oligosaccharides were realized using the device, and structural characterization was performed, which greatly promoted the progress of sugar science research.

Keywords: Polysaccharides purification; System development; Evaluation

参考文献

1. Yao, Z., K. Zhu, T. Gu, O. J. Schmitz and D. Li An active derivatization detection method for inline monitoring the isolation of carbohydrates by preparative liquid chromatography. *J Chromatogr A* 1719: 464730(2024).

O-96

简单、低成本且快速单细胞蛋白质组学技术分享

高明霞*, 张文镓, 翁凌霄, 张祥民*

复旦大学化学系, 上海, 200438

*E-mail: mxgao@fudan.edu.cn; xmzhang@fudan.edu.cn

关键词: 单细胞分析, 蛋白质组学, 固定蛋白质酶解

单细胞 mRNA 测序技术已经发展成为成熟的高覆盖率、低成本、高通量检测平台。由于蛋白质是生物功能的主要执行者, 与基因组或转录组分析相比, 在单细胞水平上测量蛋白质的组成和丰度可以更直接地了解细胞水平上的功能异质性和生理调节机制。基于液相色谱-质谱联用(LC-MS/MS)的单细胞蛋白质组学在过去的十年里得到了快速的发展, 能在单次测试中对单个细胞中数千种蛋白质进行定量分析。本实验室在张祥民老师的支持和带领下, 长期致力于单细胞技术的发展, 2015 年开发了 iPAD-100 (An integrated proteome analysis device for 100 cells) 系统¹, 该系统通过一次性将细胞与裂解试剂、酶的混合液共同吸入毛细管中, 随后在系统中进行消化和富集, 直接进行分离分析, 成功实现了对于 100 个人结直肠腺癌上皮细胞 (DLD) 细胞的分析。在 2018 年提出了 iPAD-1 (An integrated proteome analysis device for 1 cell) 系统², 该方法直接将 2 nL 含有单个细胞、裂解试剂和酶的混合液吸入 22 μm 的毛细管中进行超声和加热处理, 并使用 22 μm 内径的短毛细管柱进行分析。每个样品的分析时间仅需要 1 个小时, 在一个 HeLa 细胞内成功鉴定到了 181 种蛋白质。2024 年基于皮升级体积单细胞反应器 (picoliter Single-Cell Reactor, picoSCR)³ 的单细胞蛋白质组样品前处理平台及样品液滴无接触转移技术, 将该系统应用于单个 HeLa 细胞样品的分析, 从一个细胞中鉴定到超过 1400 种蛋白质。2025 年, 我们进一步开发了一种简单灵活的策略用于单细胞蛋白质组分析, 通过构建微升级的单细胞蛋白固定与消化管反应器 (microliter single-cell protein immobilization and digestion tube reactor, SPIDR)⁴, 无缝整合单细胞取样、样品预处理和液相色谱串联质谱 (LC-MS/MS) 进样, 从单个哺乳动物细胞中实现了超过 4000 种蛋白的定量。这些工作为实现单个哺乳动物细胞内的更多蛋白质的鉴定提供了一种新的思路。

参考文献:

1. Q. Chen, G.Q. Yan, M.X. Gao, X.M. Zhang*, Anal. Chem. 2015, 87(13), 6674-6680.
2. X. Shao, X. Wang, S. Guan, H. Lin, G.Q. Yan, M.X. Gao, C. Deng, X.M. Zhang*, Anal. Chem. 2018, 90, 14003-14010.
3. L.X. Weng, G.Q. Yan, W. Liu, Q.F. Tai, M.X. Gao*, X.M. Zhang*, J. Proteome Res. 2024, 23, 7, 2441-2451.
4. W. Zhang, L.X. Weng, G.Q. Yan, W. Liu, X. Wang, M.X. Gao*, X.M. Zhang*, Anal. Chem. 2025, 97, 25245-25256

O-97

代谢组学解析 IDH1 突变型胶质瘤代谢脆弱性及靶向治疗策略

于迪¹, 刘洋², 杨春章², 刘心昱¹, 许国旺^{1,*}¹ 中国科学院大连化学物理研究所, 大连, 116023² 美国国立研究院癌症研究所, 贝塞斯达, 20892

*Email: xugw@dicp.ac.cn

胶质瘤是最常见且恶性程度最高的原发性脑肿瘤之一, 具有高复发率和差预后的特点。异柠檬酸脱氢酶 1 (IDH1) 突变广泛存在于低级别胶质瘤和继发性胶质母细胞瘤中, 可通过催化 α -酮戊二酸生成 2-羟基戊二酸并消耗 NADPH, 进而引发显著代谢重编程, 形成区别于野生型肿瘤的特异性代谢依赖。本研究基于人胶质瘤组织及细胞模型, 利用非靶向代谢组学系统解析 IDH1 突变相关代谢异常[1], 并探索其潜在治疗靶点。结果表明, 除 2-羟基戊二酸显著积累外, IDH1 突变型胶质瘤中还原型谷胱甘肽水平明显下降, 提示氧化还原稳态受损。进一步研究发现, 突变细胞中活性氧水平及氧化损伤升高, 同时 Nrf2 活性增强, 其下游谷胱甘肽合成相关基因显著上调, 说明 IDH1 突变细胞对转录因子 Nrf2 调控的抗氧化通路存在依赖。基于这一脆弱性, 研究筛选发现雷公藤甲素可有效抑制 Nrf2 转录活性, 阻断谷胱甘肽合成, 诱导活性氧过度积累, 从而选择性抑制 IDH1 突变型胶质瘤细胞增殖并诱导凋亡; 在动物模型中亦表现出良好的抗肿瘤效果[2]。

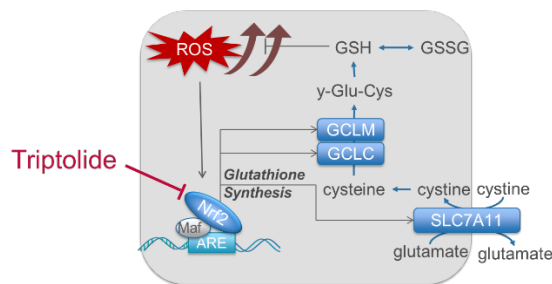


Fig. 1 Selective therapeutic effect of triptolide on IDH1-mutant glioma

为进一步解析胶质瘤中关键代谢通路的动态变化, 本研究建立了基于芯片纳喷雾质谱的高灵敏稳定同位素示踪方法[3], 可在低细胞量条件下实现代谢流分析, 并将其应用于 IDH1 突变型胶质瘤细胞代谢研究; 同时拓展了酰基肉碱和酰基辅酶 A 等脂肪酸氧化相关代谢物的检测能力[4], 为揭示胶质瘤代谢重编程提供了新的技术支撑。

参考文献:

1. Yu, D.; Xuan, Q.; Zhang, C.; Hu, C.; Li, Y.; Zhao, X.; Liu, S.; Ren, F.; Zhang, Y.; Zhou, L.; Xu, G. *Metabolites* 2020, 10, 478.
2. Yu, D.; Liu, Y.; Zhou, Y.; Ruiz-Rodado, V.; Larion, M.; Xu, G.; Yang, C. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020, 117, 9964–9972.
3. Yu, D.; Zheng, F.; Wang, L.; Li, C.; Lu, X.; Lin, X.; Zhou, L.; Xu, G. *Anal. Chem.* 2021, 93, 13765–13773.
4. Yu, D.; Zhou, L.; Xuan, Q.; Wang, L.; Zhao, X.; Lu, X.; Xu, G. *Anal. Chem.* 2018, 90, 5712–5718.

O-98

共价有机骨架固定化乙酰胆碱酯酶的制备及开心散活性成分的快速筛选

张晨晴¹, 严鲸¹, 候卓悦¹, 胡锴^{1*}, 张书胜²¹河南中医药大学, 河南, 郑州 450046; ²郑州大学, 河南, 郑州 450001Email: hk5268@126.com

阿尔茨海默病(AD)是一种高发性神经退行性疾病,核心症状为认知功能衰退,病理机制与胆碱能损伤、A β 沉积及tau蛋白过度磷酸化密切相关¹。临床治疗AD的关键策略之一是抑制AChE以提高突触间隙乙酰胆碱水平²。中药复方“开心散”在改善认知障碍方面效果显著³,但具有AChE抑制活性的成分尚不明确。因此,开发有效的方法来筛选这些药物中的AChE抑制剂是至关重要的。

本研究常温合成COF并固定AChE,得到COF@AChE复合材料。经SEM、XRD、FT-IR对其结构进行了表征;系统优化了COF合成时间、载体用量、AChE浓度、固定化时间、体系pH及催化反应时间等关键参数,确定其最优条件。用Ellman方法考察了COF@AChE复合材料的性能,结果表明COF@AChE具有良好的pH、热稳定性以及重复使用性;以石杉碱甲为模型抑制剂,对COF@AChE进行了抑制动力学研究,测定了其抑制常数和IC₅₀;得出其K_i为0.1046 μ M, K_{is}为0.1363 μ M, IC₅₀为6.514 μ M,表明该抑制剂对固定酶的抑制能力较强。采用该方法比较了开心散中各单味药材提取物的AChE抑制活性,结果显示远志与石菖蒲提取物的抑制活性最强;将所构建的方法与UPLC-Q-Orbitrap高分辨质谱仪相结合,应用于开心散提取物中AChE抑制剂的筛选。

关键词: 乙酰胆碱酯酶; 共价有机框架; 固定化酶; 开心散

参考文献:

1. J. Wang, X. Meng, J. Yang, Y. Tang, F. Zeng, Y. Wang, Z. Chen, D. Chen, R. Zou, W. Liu, Improvements in Exercise for Alzheimer's Disease: Highlighting FGF21-Induced Cerebrovascular Protection, *Neurochemical Research* 50(2) (2025) 95.
2. X. Zhao, Q. Hu, X. Wang, C. Li, X. Chen, D. Zhao, Y. Qiu, H. Xu, J. Wang, L. Ren, N. Zhang, S. Li, P. Gong, Y. Hou, Dual-target inhibitors based on acetylcholinesterase: Novel agents for Alzheimer's disease, *European Journal of Medicinal Chemistry* 279 (2024) 116810.
3. X. Shan, S. Lv, P. Huang, W. Zhang, C. Jin, Y. Liu, Y. Li, Y. Jia, X. Chu, C. Peng, C. Zhang, Classic Famous Prescription Kai-Xin-San Ameliorates Alzheimer's Disease via the Wnt/ β -Catenin Signaling Pathway, *Molecular Neurobiology* 61(4) (2024) 2297-2312.

O-99

基于 MOFs 材料的预制菜中格孢霉毒素分析新方法

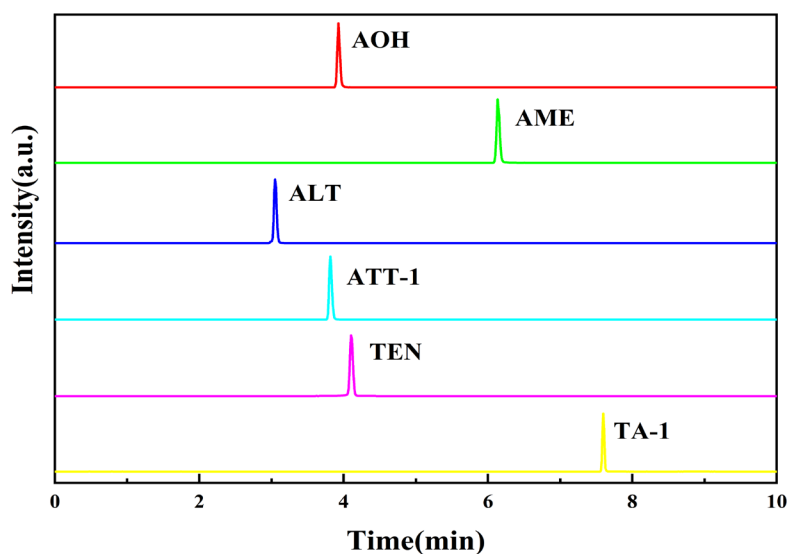
梁潇¹, 张艳², 万益群¹, 刘翻^{3,*}

1.南昌大学化学化工学院; 2.江西中医药大学; 3.南昌大学分析测试中心

通讯联系人 E-mail: fan_liu@ncu.edu.cn

链格孢霉毒素是一类由链格孢属真菌产生的次生代谢物, 广泛存在于蔬菜、水果和谷物当中, 对食品安全与人类健康造成极高风险。预制菜在生产、储存和运输过程中可能因原料污染或加工不当导致链格孢霉毒素污染, 对食品安全构成严重威胁。

利用MIL-101(Fe)作为吸附材料, 将分散固相萃取作为前处理方法, 基于尺寸排阻、 π - π 堆积、氢键作用等多种机理协同作用, 实现对6种链格孢霉毒素(AOH, AME, ALT, ATT-1、TEN和TA-1)的选择性分离和富集, 结合UHPLC-MS/MS技术实现了南昌拌粉、莲花血鸭、黄桃罐头、速冻饺子和山药脆等预制菜中6种链格孢霉毒素的准确定性定量分析。在优化条件下, 6种目标物在0.5-200 $\mu\text{g/L}$ 浓度范围内均呈现良好的线性关系, 该方法的定量限(LOQ)范围为0.07至0.37 $\mu\text{g/L}$, 回收率为76.2%至108.3%。



参考文献:

1. Zhang, Y., Liu, C., & Van Der Fels-Klerx, H. J. (2025). Occurrence, toxicity, dietary exposure, and management of *Alternaria* mycotoxins in food and feed: A systematic literature review. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 24(1), 70085.
2. Liu M.H., Zhang Y., Cheng R., Tan T., Guo L., Liu F., Wan Y.Q.(2025). Determination of five alternaria toxins in peppermint by dispersive solid-phase extraction coupled with ultrahigh performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry based on MOF-808-TFA, *Food Chemistry*, 2025, 471(142822).

O-100

基于色谱质谱的临床样本核酸修饰与代谢组研究及应用

郭成*

浙江大学肿瘤研究所, 恶性肿瘤预警与干预教育部重点实验室

E-mail: cheng_guo@zju.edu.cn

核酸修饰(尤以甲基化修饰为典型)广泛存在于 DNA、mRNA 及各类非编码 RNA 中。异常核酸修饰可通过介导染色体失活、干扰 RNA 剪接、影响 RNA 稳定性及翻译效率等关键生物学过程,进而驱动肿瘤的发生与进展。现有研究已证实,核酸修饰在恶性肿瘤等疾病的发生发展进程中发挥关键调控作用。然而,受核酸修饰种类繁多、结构高度相似且修饰丰度差异悬殊等特点制约,针对复杂临床样本中核酸修饰的精准定性鉴定与定量分析,仍面临巨大技术挑战。前期,我们建立了一系列反相色谱-串联质谱(RPLC-MS/MS)以及亲水相互作用色谱-串联质谱(HILIC-MS/MS)技术,为细胞、尿液、血液和组织里的 DNA/RNA 修饰分析提供了高灵敏、高通量的分析方案¹⁻⁵。运用这些方法,我们全面分析了不同分子亚型乳腺癌组织以及外周血白细胞的 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。

代谢组学通过表征、鉴定和定量生物体内的代谢物来研究生物系统的代谢网络及其调控机制,是检测疾病发展过程中代谢物紊乱、筛选疾病诊断生物标志物和寻找新药物靶点的重要工具。近年来,我们运用超高效液相色谱-高分辨串联质谱,开展了基于质谱的尿液、血清非靶向代谢组学研究,发现了潜在的结直肠癌早期诊断无创标志物,以及可用来预测乳腺癌新辅助化疗疗效的代谢物^{6,7}。此外,我们运用基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱,开发了背景干扰低、适用性广的可用于代谢物高灵敏检测的新基质,并实现了多种小分子代谢物在肾脏等组织器官的空间分布检测⁸。

关键词: 色谱质谱分析; 核酸修饰; 代谢组; 癌症; 生物标志物

参考文献

1. C. Guo, Y. Hu, X. Cao, Y. Wang, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 17060-17068.
2. Y. Hu, X. Hong, Z. Yuan, J. Mu, X. Zhang, Z. Fang, Y. Yuan, S. Zheng, C. Guo, *Chin. Chem. Lett.*, **2023**, 34, 108023.
3. K. Shi, X. Hong, D. Xu, T. Pan, H. Wang, H. Feng, C. Guo, Y. Pan, *Chin. Chem. Lett.*, **2025**, 36, 110079.
4. C. Guo, X. Hong, Y. Hu, T. Pan, Y. Zhou, H. Lei, Y. Pan, *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 4886-4894.
5. Z. Zhou, D. Li, N. Wang, X. Hong, W. Su, C. Guo, C. He, L. Yue, *J. Hazard. Mater.*, **2026**, 502, 140616.
6. Q. Chen, Z. Xu, J. Mu, X. Hong, Y. Huang, J. Yu, Y. Yuan, N. Zhu, C. Guo, *Chin. Chem. Lett.*, **2026**, 37, 112327.
7. Z. Fang, G. Ren, S. Ke, Q. Xu, Y. Chen, X. Shi, C. Guo, J. Huang, *Breast Cancer Res.* **2025**, 27, 2.
8. G. Ma, X. Zhao, M. Guo, Y. Liu, K. Shi, C. Guo, Y. Pan, *Anal. Chim. Acta*, **2022**, 1201, 339620.

O-101

基于生物质谱技术解析血管病理性重构的分子特征与细胞异质性

林灵, 胡一苇, 乔亮*

复旦大学化学系, 附属中山医院

通讯联系人 E-mail: liang_qiao@fudan.edu.cn

血管病理性重构是机体应对机械力及代谢等应激损伤的复杂适应性过程。传统的体外模型无法精准模拟血管重塑的多维病理微环境, 制约了精准标志物及干预靶点的开发。本研究以生物质谱技术为核心, 整合仿生微流控与多组学分析, 从体外力学微环境、临床靶点转化及单细胞代谢三个尺度, 系统解析血管损伤与重构过程中的分子网络与细胞异质性。

在力学微环境模拟与机制探索方面, 构建了集成细胞培养与气动调控的多层仿生微流控芯片。该系统精准重构了梯度机械拉伸力, 实现了生理与压力超负荷病理状态的血管微环境模拟, 进而揭示了病理牵拉诱导的关键分子网络特征, 包括氧化应激、钙离子转运及鞘脂代谢的异常激活。

在临床靶点转化与蛋白质组学解析方面, 聚焦急性主动脉夹层(AAD), 联合分析BAPN诱导模型小鼠主动脉组织与临床血浆的DIA定量蛋白质组数据。通过引入基于亚细胞定位与炎症相关性的多维优选算法, 锁定40种高潜力候选靶标; 并在独立临床验证队列中采用PRM靶向定量策略, 确立了由8种蛋白构成的诊断标志物组合。功能研究进一步证实了该组合核心成员中性粒细胞弹性蛋白酶(ELANE)在血管壁破坏与夹层演进中的关键驱动机制。

在单细胞代谢与异质性演化方面, 开发了时间分辨的单细胞代谢与脂质组学分析方法。通过对巨噬细胞泡沫化过程的动态追踪, 绘制了代谢重塑图谱, 揭示并验证了晚期泡沫细胞向细胞凋亡与铁死亡双向演进的命运分歧。

综上, 本研究建立了从力学微环境响应、血浆蛋白标志物筛选到单细胞代谢重塑的多维研究范式, 系统阐释了不同病理应激下血管损伤修复的细胞命运演化与分子网络特征, 为血管重构的早期诊断与精准干预提供了关键的数据支撑与理论基础。

关键词: 血管病理性重塑; 生物质谱技术; 仿生微流控芯片; 标志物组合; 细胞异质性

参考文献:

1. Y. Liu, J. Zheng, L. Zhong, Z. Wang, D. Zhao, H. Lin, *et al. Adv. Sci.*, **2025**, 12, e2415024.
2. Y. Hu, Y. Zou, L. Qiao, L. Lin, *Mol. Ther.*, **2024**, 32, 3288-3312.
3. Y. Zou, W. Henry, E. Ricq, E. Graham, V. Phadnis, P. Maretich P, *et al. Nature*, **2020**, 585, 603-608.

O-102

Keratin-mediated H₂S consumption enables HMGB1 sulfhydration for inflammation resolutionXiao-Zheng Huang^{1,2,3,5}, Shu-Ying Han⁵, Rui Liu^{1,2,3,4,5,*}, Jin-Ao Duan^{1,2,3,5,*}¹State Key Laboratory of Technologies for Chinese Medicine Pharmaceutical Process Control and Intelligent Manufacture (Nanjing University of Chinese Medicine), Jiangsu, Nanjing, 211112, China²Jiangsu Collaborative Innovation Center of Chinese Medicinal Resources Industrialization, National and Local Collaborative Engineering Center of Chinese Medicinal Resources Industrialization and Formulae Innovative Medicine, National Administration of Traditional Chinese Medicine Key Laboratory for Chinese Medicine Resources Recycling Utilization, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China³Jiangsu Key Laboratory of Research and Development in Marine Bio-resource Pharmaceuticals, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing, 210023, China⁴Animal-Derived Chinese Medicine and Functional Peptides International Collaboration Joint Laboratory, Nanjing 210023, China⁵School of Pharmacy, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China

*Correspondence: liurui@njucm.edu.cn (R.L.), dja@njucm.edu.cn (J.D.)

Abstract Despite the dynamic fluctuation of H₂S and other reactive sulfur species in physiology and disease, biomaterials modulating endogenous H₂S remain scarce. Here, we demonstrate that keratins regulate H₂S homeostasis and protein redox state through sulfhydration. Chemoproteomics further identified P25691 (K2) as the most hyperreactive keratin. Moreover, KF potently suppresses LPS-induced inflammatory fever and is processed *in vivo* to K2-derived peptides (K2Ps) and its sulfhydrated analogue (K2P-SSH). Relative to K2Ps, K2P-SSH shows enhanced anti-inflammatory and antioxidant activity. Mechanistically, K2P-SSH confers cytoprotection by inducing widespread protein sulfhydration. Specifically, K2P-SSH sulfhydrates Cys23 and Cys106 of high-mobility group box 1 (HMGB1), inhibiting its disulfide bond formation and dimerization, blocking TLR4 binding, and thereby exerting anti-inflammatory and antioxidant effects. Taken together, this study reveals an unanticipated role of K2 in regulating H₂S homeostasis and protein redox state through sulfhydration, and identifies K2P-SSH as a mediator that alleviates oxidative-inflammatory stress via sulfhydration of HMGB1^{C23C106}.

Keywords: Keratin; Sulfhydrylation; HMGB1; anti-inflammation

O-103

微针在体检测与诊疗一体

祁晓月*

北京理工大学

通讯联系人 E-mail: qixiaoyue@bit.edu.cn

微针(MN)阵列可在拇指大小的贴片上集成数百根微米级的针,具有可穿戴、可拓展、无痛透皮特性,在生物标志物的实时监测和个性化诊疗中展现出广阔的治疗前景。本研究构建了针上电化学检测、荧光传感和场效应晶体管多种检测策略,同时可联合微流控实现在体、实时、高通量检测^[1-8]。此外,传感微针通过负载纳米颗粒进行信号增强,从而推动高灵敏检测新技术的发展。例如,金属有机骨架(MOF)具有超高的比表面积、天然的孔道,可用于开发MOF传感微针阵列,通过孔道富集效应实现对靶标生物标志物(压力激素、药物分子、miRNA、蛋白)的在体分析^[3-4]。进一步地,微针阵列可负载药物分子,其微米级针阵可穿透角质层直达真皮,避免传统注射的疼痛与风险,同时规避口服药物的首过效应,兼具透皮贴剂的便捷性与透皮给药的高效性,适用于大分子药物和窄窗药物的可控递送^[4,8]。基于上述优势,微针平台集成生物标志物在体实时检测和可控递药,进而通过管理中枢实现闭环诊疗。

关键词: 微针; 生物标志物; 在体检测; 可穿戴; 实时传感

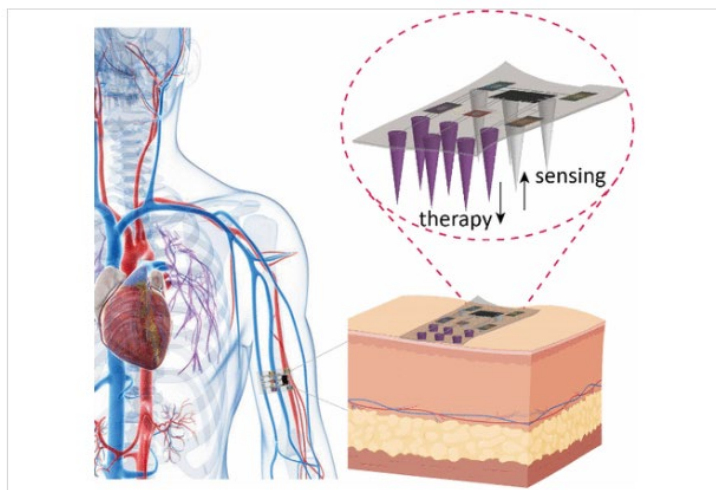


Fig. 1可穿戴微针用于诊疗一体平台的构建

本研究受国家自然科学基金(No. 22404004)、中国科协青年人才托举项目(No. YESS20240473)、北京市自然科学基金(No. 7244520)、北京市科协青年人才托举项目(BYESS2023417)、河北省自然科学基金面上项目(C2025105024)资助。

代表性论文(均为中科院1区top期刊)

1. Qi, X.*; Liu, K.; Chen, Q.; Deng, Y. *Adv. Func. Mater.*, 2024, 34, 2307174.

2. **Qi, X.***; Liu, K.; Lu, X.; Deng, Y.; Chang, Z. *Talanta*, 2023, 253, 123921.
3. Li, Z.; Wang Y.; Zhang R.; Liu Z.; Chang, Z.; Deng, Y.; **Qi, X.*** *ACS Nano*, 2024, 18, 23876.
4. Liu, K.; Wang, H.; Zhu, F.; Chang, Z.; Du, R.; Deng, Y.; **Qi, X.*** *ACS Nano*, 2024, 18, 14207.
5. **Qi, X.***; Liu, K.; Chang, Z.* *Chem. Eng. J.*, 2022, 441, 135953.
6. **Qi, X.***; Chen, Q.; Chang, Z.; Deng, Y. *Nano Res.*, 2022, 15, 5646.
7. Chang, Z.; Zeng, L.; Sun, C.; Zhao, P.; Wang, J.; Zhang, L.; Zhu, Y.*; **Qi, X.*** *Coord. Chem. Rev.*, 2021, 445, 214072.
8. Chen, W.; Wainer, J.; Ryoo, S.; **Qi, X.**; Chang, R.; Li, J.; Lee, S. H.; Min, S.; Wentworth, A.; Collins, J. E.; Tamang, S.; Ishida, K.; Hayward, A.; Langer, R.; Traverso, G.*; *Sci. Adv.*, 2022, 8(1), eabk1792.
9. Wang, Y.; Liu, Z.; Huang, H.-W.; Lee, J. S.; Liu, K.; Yu, M.; Qi, X.* *TrAC-Trend. Anal. Chem.*, 2026, 195, 118593.

O-104

基于 ToF-SIMS 和 AFADESI-MSI 的脑神经递质高空间分辨成像方法

陈艳华, 候梓涵, 方向, 马宏喆, 王朝英, 陈艳华*

国家民委质谱成像与代谢组学重点实验室(中央民族大学), 生物成像与系统生物学研究中心, 中央民族大学生命与环境科学学院

通讯联系人 E-mail: chenyanhua@muc.edu.cn

针对 TOF-SIMS 在脑组织中对小分子神经递质特异性识别不足, 而 AFADESI-MSI 成像分辨率有限的问题, 本研究建立了 TOF-SIMS 和 AFADESI-MSI 的跨模态代谢成像方法, 并用于脑神经递质的高空间分辨成像。该方法可有效区分结构相似的神经递质, 显著降低假阳性信号。采用该方法, 成功绘制了小鼠全脑中 23 个神经递质的亚微米级空间分布图谱, 并清晰分辨出酪氨酸、谷氨酸和肌肽在小脑各层的特异性分布, 表明其具有高空间分辨的能力。进一步将该方法用于氟西汀干预后小鼠脑代谢变化分析。OPLS-DA 揭示氟西汀诱导的代谢改变呈区域依赖性, 共筛选出 9 个差异神经递质。脑区特异性分析表明, 皮层、丘脑及纹状体区域变化显著, 而胼胝体变化较小。成像结果显示, 药物干预导致 5-HT 及其主要代谢产物 5-HIAA 在上述区域下调, 伴随色氨酸蓄积及犬尿氨酸通路的同步抑制; 同时, 谷氨酸与组胺在多个脑区普遍降低, 多巴胺呈现区域特异性波动, 而内源性保护分子肌肽与牛磺酸则在皮层及纹状体中显著上调。结合通路富集, 明确氟西汀通过重塑色氨酸代谢、重建兴奋/抑制平衡实现对神经化学微环境的多维度调控。将其用于远志在抑郁模型小鼠脑组织的空间代谢研究, 发现其提取物可通过重塑核心脑区神经递质平衡并改善脑内代谢微环境, 发挥多通路协同的抗抑郁效应。

O-105

基于环糊精空间取向精准调控的 OT-CEC 手性分离体系研究

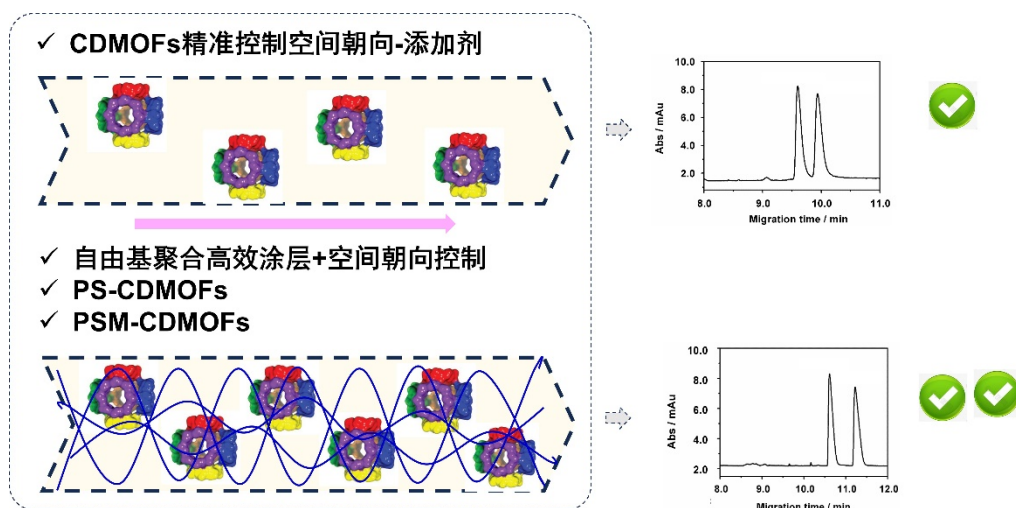
乔娟^{1*}, 张妍¹, 齐莉²¹北京石油化工学院, ²中国科学院化学研究所

通讯联系人 E-mail: qiaojuan@bipt.edu.cn

肽类药物等手性活性物质药理特性独特, 在疾病诊疗中占据重要地位, 其高效手性拆分与精准定量分析, 对疾病机制研究、药物研发意义重大。但肽类手性对映体结构差异极微, 且需在复杂生物基质中分离, 杂质干扰多、目标物含量低, 导致其对映体拆分始终面临突出的技术挑战, 成为领域内亟待突破的难题。当前手性药物分离主流技术为高效液相色谱与毛细管电泳[1-3], 毛细管电色谱则兼具两者优势, 分离选择性与效能俱佳, 在手性分离领域优势显著, 其核心性能取决于色谱固定相和手性识别分子。其中开管毛细管电色谱(OT-CEC)样品耗量低、分离效率高, 尤其适配复杂生物样品中神经递质分析—这类样品普遍取样量少、杂质含量高、样本量大, 因此 OT-CEC 在神经递质手性分离中表现突出, 已成为该领域极具应用前景的前沿技术。

构建 OT-CEC 手性分离体系的核心难点在于手性识别分子的空间取向精准调控。以环糊精类手性分子为添加剂时, 其发挥识别作用的空腔取向杂乱, 导致对映体与识别分子相互作用效率偏低; 传统固定化策略多依托环糊精羟基反应, 但其分子上大量羟基位点多、活性相近, 难以实现选择性键合, 无法精准调控手性分子空间取向, 直接制约分离效果提升。

针对关键问题, 本文以环糊精为研究对象, 提出全新解决方案(图 1): 构建环糊精金属有机骨架(CD-MOFs), 利用 MOFs 材料的刚性框架结构, 精准固定环糊精立体取向, 解决其空腔无序排布问题; 再通过自由基聚合将 CD-MOFs 与聚合物共聚, 将共聚产物修饰于毛细管内壁, 实现高效稳定涂覆, 最终达成手性分离目标。在 CD-MOFs 结构中, 环糊精与金属离子特异性配位, 实现取向定向控制, 固定于毛细管内壁后, 既能提升拆分效率, 又可通过共聚提高固定量[4,5]。本研究具体内容为: 先合成 CD-MOFs 材料, 将其与苯乙烯单体共聚, 制备 PS@CD-MOFs 杂化材料, 利用聚苯乙烯成膜性与 CD-MOFs 手性识别能力, 将材料涂覆于毛细管内壁实现手性拆分; 为增强共价键合能力、避免涂层脱落, 进一步制备苯乙烯-马来酸酐共聚物, 与 CD-MOFs 共聚得到 PS-MAn@CD-MOFs 杂化材料。研究表明, polymer@CD-MOFs 杂化材料同时具备高效手性识别、稳定涂覆与牢固共价键合性能, 可实现手性分子高效分离, 未来有望用于复杂生物样品中微量神经递质的手性分离, 为相关疾病病理研究、靶向药物开发及临床诊疗优化提供坚实的技术支撑。



致谢：北京市自然科学基金（No. 2242005），北京石油化工学院致远科研基金（No. 2204004）。

参考文献：

1. Y. Zhang, Z.X. Yu, X.T. Zhu, R.Y. Zhang, N. Li, M. Wang, J. Qiao *. *J. Chromatogra. B*, **2026**:1268, 124839.
2. M. Yang, Q. Wang, X.L. Wang, C.F. Chen, C. Liu, J. Qiao*, *Microchimi. acta*, **2026**, 193, 187.
3. S.F. Ge, X.T. Zhu, C.F. Chen, R.Y. Zhang, M. Wang, N. Li, X.N. He, J. Qiao*, *Dyes Pigments*, **2026**, 246, 113309.
4. M. Yang, X.T. Zhu, R.Y. Zhang, Z.W. Zhao, L. Qi, M. Wang, N. Li, J. Qiao*, *Inorg. Chem. Commun.*, **2025**, 178, 114517.
5. X.T. Zhu, R.Y. Zhang, Y.C. Wang, H.X. Jia*, J. Qiao*, *Inorg. Chem. Commun.*, **2024**, 113226.

O-106

离子有机单晶用于高效手性拆分

陈佳*, 刘慧凤, 邱洪灯*

中国科学院兰州化学物理研究所, 甘肃 兰州, 730000

通讯联系人 E-mail: jiachen@licp.cas.cn; hdqiu@licp.cas.cn

手性化合物的精准分离在生命健康、药物研发等领域具有重要意义。目前超过半数的临床药物含有一个或多个手性中心, 并且全球销量最好的十大“重磅炸弹”药物超半数均为手性分子。气相色谱因分析速度快、分离效率高以及无需有机流动相等优点, 备受大家关注, 然而高性能的手性色谱填料是实现手性拆分的关键与核心。鉴于此, 我们以联吡啶手性阳离子单体与 4,4'-联苯二磺酸阴离子单体通过离子自组装策略成功构筑了块状的手性离子有机单晶材料。单晶 X 射线衍射结果显示, 该晶体属于 C2221 空间群, 晶胞参数为 $a=9.0954 \text{ \AA}$, $b=228.981 \text{ \AA}$, $c=20.898 \text{ \AA}$, 晶胞角度 α 、 β 、 γ 均为 90° 。联吡啶手性阳离子单体中带正电的氮原子和 4,4'-联苯二磺酸中带负电的氧原子之间形成离子键。bc 平面上, 每个离子被四个电荷相反的离子环绕, 形成了单层结构。相比之下, 沿 a 轴方向分子之间的相互作用相对较弱, 层状结构是通过 AB 堆积形成, 主要依靠于骨架中苯环间的 π - π 相互作用。之后对块状手性离子有机单晶进行超声剥离获得厚度约为 10 nm 的二维纳米片。在此基础上, 分别制得了二维纳米片涂覆的毛细管气相色谱柱、联吡啶手性离子液体涂覆的毛细管气相色谱柱以及块状手性离子有机单晶涂覆的毛细管气相色谱柱。色谱实验结果证明, 二维纳米片涂覆的毛细管气相色谱柱在分离性能上明显优于联吡啶手性离子液体涂覆的毛细管气相色谱柱以及块状手性离子有机单晶涂覆的毛细管气相色谱柱。在验证了策略可行性后, 我们还考察了该方法的普适性, 主要是引入了具有更大 π 共轭体系的芘核心, 合成了芘基的手性离子液体与 4,4'-联苯二磺酸阴离子单体自组装得到手性离子有机单晶 (BPIM-PBDS)。相比于联吡啶, 芘核心不仅增强了层间的 π - π 作用, 还使纳米片在高温下更趋稳定。得益于这种结构上的精细调控, BPIM-PBDS 超声所得的二维纳米片涂覆的毛细管气相色谱柱展现出了更强的手性拆分性能, 可成功分离非甾体抗炎药、抗真菌药物和治疗心血管系统药物在内的 20 余种手性药物分子 (图 1)。该研究可为手性离子有机单晶及二维纳米片的制备提供新思路, 同时还为离子有机单晶材料的潜在应用开辟了新方向。

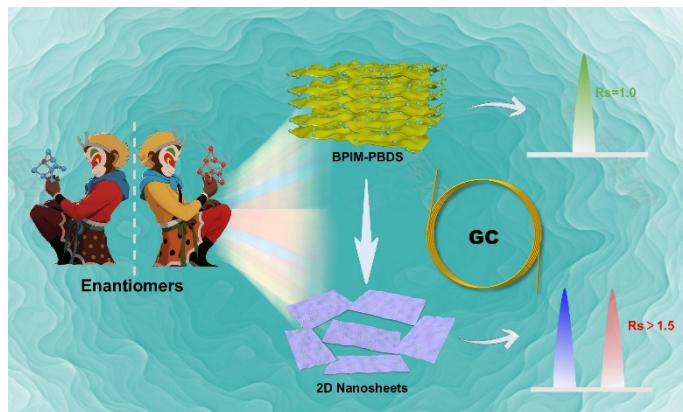


图 1 BPDS-PBIM 单晶及 2D Nanosheets 用于手性气相色谱分离示意图

参考文献:

1. H. Liu, J. Chen, H. Qiu, et al., *Chem. Sci.*, **2024**, 15, 18818.
2. H. Liu, J. Chen, H. Qiu, et al., *Anal. Chem.*, **2026**, 98(9), 6505-6515.

O-107

两性离子型亲水相互作用色谱固定相的设计与色谱性能

赵文杰^{1*}, 张朋成¹, 宋雅¹, 胡永兴¹, 张书胜²¹河南工业大学, 河南 郑州 450001²郑州大学, 河南 郑州 450001

Email:wjiezhang@126.com

亲水相互作用色谱 (hydrophilic interaction chromatography, HILIC) 作为一种针对极性化合物分离的高效液相色谱技术, 凭借其在极性分析物分离领域的广泛适用性, 近年来受到色谱分离领域工作者的持续关注。两性离子型固定相因材料表面同时修饰有等量相反电荷 (正电荷与负电荷) 而呈现独特的界面化学特性: 一方面, 其表面带电基团可与带电分析物发生特异性静电相互作用; 另一方面, 极性基团在界面形成的亲水层能够提供稳定的亲水相互作用。这种双重作用机制使其在极性分析物的选择性分离中展现出显著优势与巨大应用潜力, 成为 HILIC 固定相研究的重要分支。本工作主要汇报我们近几年在亲水相互作用色谱固定相方面的研究进展。

通过亲核取代反应将聚乙烯马来酸酐键合到氨基硅胶表面, 然后将残余的聚乙烯马来酸酐水解制备了弱阳离子交换/HILIC 固定相 (Sil-PolyCOOH), 该固定相对核苷、碱基及糖类极性化合物表现出良好的分离能力, 其保留机制涉及亲水分配与多重分子间作用。进一步通过氨解反应制备了两性离子型 HILIC 固定相 (ZIC-Sil-Poly), 其在极性化合物分离中兼具分配与氢键/静电作用机制, 并成功应用于生物样品中生物碱的快速检测。本工作的研究内容发表在《色谱》和 *Journal of separation science* 上。

通过“巯基-烯烃”点击化学在硅胶表面键合吡啶磺酸盐甜菜碱, 制备了第一类两性离子固定相。该固定相在分离核苷/碱基方面展现出良好的亲水色谱性能。通过系统考察柱温、水相含量、pH 值等参数对极性分析物保留行为的影响, 结合 Tanaka 亲水性测试与修正的线性溶剂化能关系 (LSER) 模型分析, 揭示了其保留机理涉及复杂的表面吸附、分配及静电相互作用。优化色谱条件后, 成功实现了 HILIC 模式下乳制品中三聚氰胺的检测。基于本工作, 受邀为纪念 HILIC 之父 Andrew Alpert 教授的 *J. Chromatogr. A* 专刊撰写研究论文。

设计合成了由 1,4-二氮杂双环[2.2.2]辛烷季铵阳离子和磺酸阴离子组成的两性离子, 并通过亲核取代反应将其接枝到硅胶表面, 制备了新型固定相 Sil-DBO-PS。系统考察了流动相条件对极性溶质保留行为的影响, 并利用热力学、田中 HILIC 测试和 LSER 模型深入解析了其保留机理与主导作用力。Sil-DBO-PS 在分离核苷/碱基、维生素及苯甲酸混合物时表现出优异的柱效、选择性和良好的重现性, 其性能与或优于部分市售色谱柱。本工作发表在 *Analytica Chimica Acta*。

通过在亚 1 μm 、孔径约 35 nm 的多孔硅胶整体颗粒上同时键合 4-乙烯基-1,3-磺丙基吡啶内盐 (VSPB) 和十八烷基硅烷 (C18) 制备而成, 制备了一种新型混合模式色谱固定相 (SMP-C18-SB) 该固定相。在反相和亲水相互作用两种模式下, 该色谱柱对烷基苯、核苷、两性离子化合物、多肽及蛋白质均表现出优于商品 C18 柱的分离性能, 其保留机制综合了疏水、氢键及亲水相互作用。该柱还具有背压低、稳定性高的特点 (连续进样 1000 次后, 保留时间和峰面积 RSD 分别低于 0.11% 和 1.02), 适用于含极性、非极性和两性离子化合物的复杂样品分离。本工作发表在 *J. Chromatogr. A*。

国家自然科学基金 (22176050, 22574040) 资助项目

O-108

MOFs-酶人工受体系统构建及糖尿病感染治疗应用

李永明^{1,2}, 黄嫣嫣^{1*}, 赵睿^{1*}¹ 中国科学院化学研究所, 北京, 100190² 北京理工大学化学与化工学院, 北京, 100081

通讯联系人 E-mail: yyhuang@iccas.ac.cn; zhaorui@iccas.ac.cn

生物体依赖受体系统感知并响应内外环境刺激, 从而实现生物功能的精准调控。受此启发, 构建人工受体系统并重塑其输入、输出行为, 可为生物催化、生物传感、疾病治疗等领域提供新型工具, 满足定制化性能需求。金属有机框架 (Metal-organic frameworks, MOFs) 是一类由金属节点与有机配体自组装形成的多孔晶体材料, 具有模块化结构与优异化学可调性。其拓扑结构、表面性质与形貌可被精准设计以适配特定功能, 在生物活性调控领域展现出巨大应用潜力。围绕 MOFs-蛋白质相互作用的研究已实现酶活性调控、药物递送等多方面应用。部分 MOFs 可通过金属位点与酶活性中心组氨酸的配位作用作为酶抑制剂, 这揭示了 MOFs 作为人工合成受体的潜在价值。然而, 如何在 MOFs-蛋白体系中引入新型输入信号并实现定制化的感知-响应过程, 仍极具挑战性且鲜有报道。

基于以上背景, 我们以二维 MOFs 纳米片为载体, 设计了 MOFs-酶复合体系, 重构了酶的抑制-激活通路, 并将其作为人工合成受体系统用于氧化应激水平调控。超薄二维锆基 MOFs (Zr-BTB) 可吸附葡萄糖氧化酶 (Glucose oxidase, GOD) 并通过变构作用抑制其活性。在此过程中, GOD 的二级结构未发生明显变化, 但其辅酶 FAD 的分子构象与空间取向改变, 导致电子传递受阻, 进而使酶活性下降。不同于天然酶活性受二聚化、翻译后修饰等上游信号调控, 本研究选用内源性且不直接参与 GOD 活性调控的白蛋白作为信号分子, 实现对 GOD 活性的精准控制。白蛋白可破坏 Zr-BTB-GOD 之间的相互作用, 并以浓度依赖性方式恢复 GOD 活性, 进而实现氧化应激水平的可控调节。该合成系统在糖尿病感染模型中可满足不同创面愈合阶段的抗菌需求, 表现出高效抗菌性能。

参考文献:

1. M. Xu, S. Yuan, X. Chen, Y. Chang, G. Day, Z. Gu, H. Zhou, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 8312-8319.
2. L. Feng, Y. Qiu, Q. Guo, Z. Chen, J. Seale, K. He, H. Wu, Y. Feng, O. Farha, R. Astumian, J. Stoddart, *Science* **2021**, 374, 1215-1221.
3. Y. Li, R. Wei, H. Feng, L. Lei, J. Chen, H. Gao, R. Zhao, H. Hu, Y. Huang, *Adv. Mater.* <https://doi.org/10.1002/adma.202519828>.
4. 国家自然科学基金项目资助

O-109

二维金属有机框架固定相研究

汤雯淇, 徐铭, 古志远*

南京师范大学, 南京, 210023

通讯联系人 E-mail: E-mail: guzhiyuan@njnu.edu.cn

金属有机框架(MOFs)材料具有高度可设计的孔道结构和优异的稳定性, 近年在分离科学领域受到广泛关注。其中, 二维MOF纳米片因其超薄层状结构、高比表面积以及丰富的可及活性位点, 在分子识别与传质调控方面展现出独特优势, 是一类极具潜力的色谱固定相材料。然而, 二维MOF纳米片在组装过程中普遍存在层间堆积现象, 其堆积模式直接影响孔道连通性与分子扩散路径, 进而决定其分离性能。基于此, 本研究聚焦于二维锆基MOF(Zr-MOF)材料, 围绕二维Zr-MOF纳米片的堆积结构调控, 发展可控的二维MOF纳米片堆积调控策略, 并揭示堆积结构与分离性能的内在关系, 开发具有高选择性、高灵敏度的新型色谱固定相材料。为二维MOF纳米片的结构可控设计和精准分离应用提供了新的思路与方法, 对新型高性能色谱材料的研发具有重要的理论意义和应用价值。

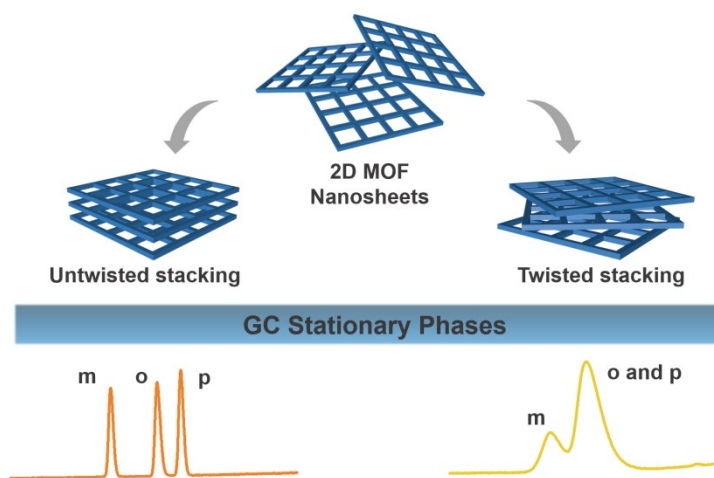


图1 二维金属有机框架固定相材料用于异构体高效分离。

关键词: 二维金属有机框架; 色谱分离; 固定相; MOF纳米片堆积

参考文献:

- [1] Tang, W. Q.; Zhao, Y. J.; Xu, M.; Xu, J. Y.; Meng, S. S.; Yin, Y. D.; Zhang, Q. H.; Gu, Lin; Liu, Da-Huan; Gu, Zhi-Yuan G, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 6920-6925
- [2] Xu, M.; Cai, P. Y.; Meng, S. S.; Yang, Y. H.; Zheng, D. S.; Zhang, Q. H.; Gu, L.; Zhou, H. C.; Gu, Z. Y., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61(37), e202207786
- [3] Gu, Z. Y.; Yan, X. P., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, 49 (8), 1477-1480
- [4] Tao, Z. R.; Wu, J. X.; Zhao, Y. J.; Xu, M.; Tang, W. Q.; Zhang, Q. H.; Gu, L.; Liu, D. H.; Gu, Z. Y., *Nat. Comm.*, 2019, 10 (1), 2911

O-110

All-in-One Magnetic Multicomponent COFs as an Universal Analytical Platform Combined with Machine Learning: Rapid Analysis of Multitarget Pollutants via Synergistic Extraction and Selective Desorption

Jing Gong¹, Yanlong Chen^{1,*}, Jincheng Su¹, Wenwei A², Xingyuan Zhang¹, Zhiyong Xie³, Aihua Huang¹, Shusheng Zhang⁴, Qiongfeng Liao^{1,*}

¹School of Pharmaceutical Sciences, Guangzhou University of Chinese Medicine, Guangzhou, Guangdong Province, 510006, China.

²Guangzhou Customs District Technology Center, Guangzhou, Guangdong Province, 510623, China.

³School of Pharmaceutical Sciences (Shenzhen), Sun Yat-sen University, Shenzhen, Guangdong Province, 518106, China.⁴Center for Modern Analysis and Gene Sequencing, Zhengzhou University, No. 100 of Kexue Road, Zhengzhou 450001, China.

*Corresponding authors:E-mail addresses:

chenyl8909@163.com (Yanlong Chen)

zyfxliao@gzucm.edu.cn (Qiongfeng Liao).

Abstract

As persistent organic pollutants (POPs) like perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances (PFASs), chlorobenzenes (CBs), and polybrominated biphenyls (PBBs) have been associated with various health issues, monitoring their contaminant residues in seafood is crucial for mitigating health risks and evaluating the accumulation of POPs in the research area. However, the simultaneous extraction and detection of POPs in complex seafood matrices remain a significant analytical challenge. Here, a novel multi-component penicillamine-functionalized covalent organic framework (OH-F-PCOF) was designed as magnetic solid phase extraction (MSPE) adsorbent for simultaneous extraction POPs. Molecular simulations confirm that it can simultaneously adsorb POPs, including PFASs, CBs, and PBBs. A green simultaneous extraction–stepwise elution (SESE) strategy was developed, enabling the rapid extraction of PFASs, CBs, and PBBs, followed by sequential elution using tailored solvents and headspace desorption. Combining the green SESE strategy with HPLC–MS/MS and GC–MS allows for trace-level detection of PFASs (0.0031–0.0044 ng/g), CBs (0.1210–0.1431 ng/g), and PBBs (0.1579–0.2242 ng/g) in seafood samples from various maritime regions. Furthermore, a machine learning approach based on random forest algorithm is established to model the POPs from different sea areas and varying depths seawater. This method maximizes extraction efficiency and reduces pretreatment time, establishing a generalizable platform for the rapid co-extraction and selective analysis of multiple POPs in complex matrices.

Keywords:

Sample preparation, simultaneous extraction-stepwise elution, persistent organic pollutants, covalent organic framework, machine learning, food samples

JI-02

组蛋白 β -羟基丁酰化的新型调控因子鉴定和功能解析

张锴*

¹天津医科大学, 省部共建天津市医学表观遗传学协同创新中心通讯联系人 E-mail: kzhang@tmu.edu.cn

摘要

组蛋白修饰在基因转录中发挥重要的调控功能, 一旦失调往往导致肿瘤等重大疾病的发生。近年来, 随着质谱技术的快速发展大量的新型组蛋白修饰被发现, 然而其功能尚不清楚。这些新修饰的催化酶和识别蛋白等调控元件的鉴定, 对于理解其肿瘤生物学功能具有重要意义(1-7)。组蛋白赖氨酸 β -羟基丁酰化(Kbhb)是一种连接酮体代谢与基因转录的表观遗传机制。然而, β -羟基丁酸转化为组蛋白 Kbhb 的辅因子—— β -羟基丁酰辅酶 A(BHB-CoA)的分子机制尚不明确。本研究我们采用基于色谱-质谱的化学蛋白质组学技术, 首次鉴定到 ACSS2 是 β -羟基丁酰辅酶的催化酶, 并发现了其与 KAT7 协同调控组蛋白 H3K9bhb 促进癌基因转录。

通过分子对接计算, 我们首先预测出 KAT7 是一种新的组蛋白 β -羟基丁酰转移酶, 并通过亲和富集和 LC-MS/MS 在鉴定出的 1171 个 Kbhb 底物中, 发现 KAT7 优先催化组蛋白 Kbhb, 尤其是 H3K9bhb。接下来, 我们通过亲和光交联技术, 发现 KAT7 的互作蛋白质 ACSS2, 进而发现其是一种 BHB-CoA 合成酶。进一步的研究揭示, ACSS2 能感应细胞内的 β -羟基丁酸并转位进入细胞核, 在染色质特定区域与 KAT7 结合并共定位。ACSS2 生成的 BHB-CoA 可为 KAT7 催化组蛋白 H3K9bhb 提供底物。有趣的是, 我们证实 β -羟基丁酸通过驱动 ACSS2-KAT7-H3K9bhb 信号轴, 促进肿瘤细胞的表观遗传调控和恶性行为。本研究首次发现了 BHB-CoA 的调控酶, 还揭示了 KAT7 利用 ACSS2 生成的 BHB-CoA 催化组蛋白 Kbhb 促进肿瘤生长的分子机制。

参考文献:

1. Wang, S.; Niu, Z.; Zhang, Y.; Liu, R.; Zhu, R.; Han, Y.; Wang, A.; Zhang, J.; Zhang, H.; Zang, Y.; Zhao, Y.; Zhai, G.; Zhang, K., *Science Advances*, **2025**, 11(33): eadv8448.
2. Zhai, G.; Niu, Z.; Jiang, Z.; Zhao, F.; Wang, S.; Chen, C.; Wang, A.; Zang, Y.; Han, Y.; Zhang, K., *PNAS* **2024**, 121 (50), e2421496121.
3. Niu, Z.; Chen, C.; Wang, S.; Lu, C.; Wu, Z.; Wang, A.; Mo, J.; Zhang, J.; Han, Y.; Yuan, Y.; Zhang, Y.; Zang, Y.; He, C.; Bai, X.; Tian, S.; Zhai, G.; Wu, X.; Zhang, K., *Nature Communications*, **2024**, 15, 3561.
4. Huang, Y.; Zhai, G.; Fu, Y.; Zang, Y.; Lin, Y.; Zhang, K., *Cell Chemical Biology*, **2024**, 31, 514-522.
5. Dong, H. Y.; Zhao, Y. J.; Bi, C. F.; Han, Y.; Zhang, J. J.; Bai, X.; Zhai, G. J.; Zhang, H.; Tian, S. S.; Hu, D. Q.; Xu, L. Y.; Zhang, K. *Nature Chemical Biology*, **2022**, 18: 142.
6. Dong, H. Y.; Zhang, J. J.; Zhang, H.; Han, Y.; Lu, C. C.; Chen, C.; Tan, X. X.; Wang, S. Y.; Bai, X.; Zhai, G. J.; Tian, S. S.; Zhang, T.; Cheng, Z. Y.; Li, E. M.; Xu, L. Y.; Zhang, K. *Nature Communications*, **2022**, 13: 6628.
7. Huang, P.; Zhai, G.; Li, Y.; Han, Y.; Chen, C.; Lu, C.; Zhang, K., *Analytical Chemistry*, **2022**, 94, 10705-10714.

JI-03

基于固相微萃取的体液和呼出气中痕量标志物高灵敏检测新方法

尚海飞, 陈佳钰, 王明伟, 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, 071002² 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

在疾病早期阶段, 体液和呼出气中痕量标志物的变化能够揭示出机体内部的微小变动, 尤其是体液中的特异性生物标志物, 其高灵敏检测可以在疾病早期实现准确诊断, 从而为患者争取更多的治疗时间并提高治疗效果, 对疾病早期的发现起着至关重要的作用。然而, 由于生物样本的复杂性, 现有的检测方法普遍面临灵敏度低和基质干扰严重等问题。因此, 亟需开发具有较强抗基质干扰能力和高灵敏度的检测方法, 以应对复杂生物样本中痕量疾病生物标志物的高灵敏检测需求。固相微萃取技术 (SPME) 作为一种小型化样品前处理技术, 已广泛应用于生命分析领域。SPME 技术的核心在于其纤维涂层, 涂层的选择和功能性直接影响分析物的富集效率, 进而决定了检测方法的灵敏度和可靠性。基于此, 本研究制备了系列功能化涂层, 包括微孔有机网络、超交联材料以及分子有机笼等, 成功实现了复杂生物样品中痕量疾病标志物的高效萃取, 富集因子可达 1 万倍以上。通过对萃取参数的优化, 并结合气相色谱质谱联用技术 (GC-MS), 建立了人体呼出气样本中痕量疾病标志物的高灵敏检测新方法, 定量限低至 4.7-39.6 pg/mL, 与现有方法相比灵敏度提高了 2-3 个数量级, 成功实现了肺癌、胃癌、乳腺癌等相关疾病标志物的准确快速检测。在此基础上, 进一步开发了系列冷辅助固相微萃取 (CA-SPME) 方法, 并结合气相色谱-质谱联用技术, 建立了用于血清、尿液等生物样本中痕量内暴露标志物的高灵敏检测新方法, 富集倍数可达到 823-5334 倍。与传统 SPME 技术相比, CA-SPME 技术的萃取效率提升了 1.2-1.5 倍, 并且与现有检测方法相比, 灵敏度提高了 2-3 个数量级。本课题组开发的 CA-SPME 技术不仅促进了复杂生物体系中痕量分析物的高效萃取富集, 还拓宽了固相微萃取技术在半挥发性组分检测中的应用范围, 同时为毒理学机制研究和健康风险评估提供了重要的技术支持。

参考文献:

1. X. Liu, M. Wang, L. Bai, Y. Han, H. Yan, *Anal. Chem.*, **2026**, 98, 3316–3325.
2. P. Li, F. Zhang, H. Wang, H. Yan, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 27885–27893.
3. F. Zhang, P. Li, Y. Lu, Y. Han, H. Yan, *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 15422–15429.
4. X. Li, P. Li, Y. Lu, J. Yin, H. Yan, *Environ. Health.*, **2025**, 3, 1125–1138.
5. H. Shang, M. Wang, Z. Wang, M. Wang, L. Bai, H. Yan, *Anal. Chim. Acta*, **2026**, 1389, 345099.
6. P. Li, M. Wang, L. Bai, D. Han, H. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 499, 140060.
7. P. Li, L. Wang, H. Ma, J. Yin, H. Yan, *Sep. Purif. Technol.*, **2025**, 378, 134522.
8. P. Li, M. Xiao, Y. Han, L. Bai, H. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 490, 137876.

国家自然科学基金项目 (82373634, 82073605); 河北大学创新团队计划项目 (IT2023A06); 河北省矿产资源与生态环境监测重点实验室开放课题项目 (HBMREEM202401) 资助。

JI-04

AI 与结构驱动蛋白手性分离分析

李功玉*

南开大学化学学院，天津，邮编 300071

通讯联系人 E-mail: ligongyu@nankai.edu.cn

蛋白质异构化，尤其是手性翻转引起的精细构象变化，是调控生命活动及疾病进程的关键分子机制。然而，由于此类修饰通常不改变分子量且结构差异极微，传统质谱技术在分离度和灵敏度方面面临巨大挑战，限制了对这一维度生物学信息的深入认知。报告人长期从事“蛋白构象分辨质谱”前沿方法学研究，针对现有技术瓶颈，通过创制非变性离子源硬件、开发多维手性差示放大策略以及构建手性分辨蛋白质组学新体系，实现了对蛋白质异构体的高效分析。相关工作将蛋白质构象分析的时间分辨率提升至微秒级，并在蛋白质组学尺度上实现了手性修饰的规模化鉴定。基于上述技术，报告人揭示了手性化学修饰与氧化还原压力协同调控蛋白质聚集的分子机制，为解析神经退行性疾病的病理机制及药物靶点发现提供了新的视角。本次报告将介绍课题组在构象分辨质谱技术开发方面的最新进展，重点阐述其在蛋白手性规模化分离分析与鉴定中的应用研究成果。

参考文献：

1. Weida Qin, Ruomeng Li, Juan Liu, Jun Liu, Xiaoli Wang, Binbin Hu, Zhen Zheng, Zhilin Yu and **Gongyu Li***. *Nat. Commun.* 2025, 16, 6841.
2. Xiaoli Wang, Tingting Liang, Anran Jin, Chenao Zhang, Jiaxin Zhou, Mingrui Li, Ziyi Sun and **Gongyu Li***. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147, 26, 23136-23144.
3. Yamei Wang, Dongbei Jin, Lifang Ren, Ning Wang, Yifei Jia, Zhen Zheng, Wensheng Cai, Haohao Fu* and **Gongyu Li***. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147, 7, 5828-5838.
4. Jun Liu, Xiaoli Wang, Xiangjun Si, Rui Zhao, Weida Qin, and **Gongyu Li***. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, e18076.
5. Jiaxin Zhou, Juan Liu, Xilin Liu, Lixia Ren, Zhilin Yu, Zhen Zheng and **Gongyu Li***. *Sci. Adv.* 2026, eacb2729.

JI-05

基于靶向多肽的分离富集与胞内递送

赵睿*

中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街 2 号

通讯联系人 E-mail: zhaorui@iccas.ac.cn

亲和分离分析以其高特异性、高亲和力等特点, 在复杂体系的高选择性分离分析中发挥着重要作用。与抗体等生物大分子相比, 多肽作为亲和识别元件具有稳定性高、易于合成与修饰、空间位阻小等优势。本研究以外泌体CD81胞外小环片段为识别单元, 基于碱基互补配对原则和亮氨酸遗传密码子的简并性, 设计得到九条反义肽。通过亲和筛选, 成功获得了位点特异性识别并稳定结合CD81蛋白胞外小环的多肽APQQ。利用新型反义肽为分子探针, 发现亲和多肽APQQ与CD81蛋白胞外小环的特异性识别是触发蛋白向细胞紧密连接重新定位和靶向聚集的关键信号, 揭示了之前少有研究的胞外小环在介导细胞-细胞相互作用中的关键作用。进一步, 从多价协同识别原理出发, 以表面亲水并富含醛基的无孔聚合物微球为亲和介质, 利用高亲和力、高选择性且构象灵活、易于修饰的反义肽APQQ为亲和配基, 设计合成了以单价、串联二价和并联多价多肽为功能识别单元的亲和分离微球。进行了不同临床分期腺癌患者尿液样本中外泌体的捕获研究, 成功实现了腺癌外泌体的高选择性捕获和多种肿瘤标志蛋白的分析检测, 为胃肠道腺癌无创液体活检和疾病标志物筛选提供了新工具与新方法。此外, 针对蛋白质等生物大分子难以跨越细胞膜屏障的关键瓶颈, 发展了基于共价膜锚定机制的穿膜肽(CPPs)递送新策略。设计合成了含不同动态共价锚定基团(如醛基、巯基、苯硼酸基)的阳离子型CPPs, 考察了不同CPPs的入胞行为。研究发现, 苯甲醛功能化CPPs(CBA-CPPs)能在低微摩尔浓度下以非能量依赖方式快速、高效进入胞质, 且细胞毒性小。机理研究表明, CBA-CPPs可通过亚胺键共价锚定天然膜蛋白, 引起膜扰动, 促进CPPs的直接入胞。光亲和临近标记与蛋白质组学分析进一步揭示了CBA-CPPs与细胞膜及胞内蛋白质的互作网络。此外, CBA-CPPs通过可逆亚胺键及其他非共价作用与蛋白质货物形成了更稳定的递送复合物, 实现了多种生物活性蛋白及多肽的高效胞质递送, 为基于CPPs的胞内生物大分子递送提供了新途径。

参考文献:

1. H. Feng, Y. Huang, Y. Jin*, R. Zhao*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2026**, e4706958.
2. K. Xu, Y. Hao, H. Gao, H. Feng, J. Chen, R. Zhao, Y. Huang*. *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 741-748.
3. 徐坤, 黄嫣嫣, 赵睿*. 多肽识别导向的外泌体分离富集方法研究进展. *色谱*, **2025**, 43, 446-454.
4. K. Xu, H. Gao, Y. Li, Y. Jin, R. Zhao*, Y. Huang*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202400129.
5. 感谢国家自然科学基金委和中国科学院化学研究所的资助.

JI-06

ESI-MS 在大气气溶胶成核关键团簇研究中的应用

孔祥蕾^{1, 2*}

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

2, 南开大学化学学院, 天津市生物传感与分子识别重点实验室, 天津 300071

通讯联系人 E-mail: kongxianglei@nankai.edu.cn

气溶胶对全球气候、生态及人类健康有着重要的影响。新粒子形成(NPF)是气溶胶的重要来源之一, 是导致PM_{2.5}质量浓度迅速增加的重要原因。NPF的过程涵盖了从分子到纳-微米粒子的微观进程, 研究对象尺寸跨度大, 必须结合多种不同实验技术来进行研究。但由于缺少有效的实验手段, 对于NPF过程中尺寸为1-2 nm关键团簇的精准研究仍非常困难。我们近期的实验表明将ESI-高分辨质谱与红外光解离光谱相结合的方法为此类研究提供了一种独特的实验研究手段。进一步结合量子化学计算, 可以实现一些关键物种的结构确定, 为其动力学模型的建立提供基础数据。本项研究中, 我们采用实验室自行搭建的高分辨质谱-光解离光谱装置, 对有机酸/硫酸-氨/胺形成的二元和三元成核机制中关键物种进行了深入的分析。并揭示了其中一些关键团簇物种的生长途径。进一步改变实验条件和装置, 可以创造出复杂但可控的团簇生长环境, 可揭示多组分成核的团簇在源与汇的竞争中形成新粒子的复杂过程。该方法已经初步显示出了很好的灵活性和可扩展性。

参考文献:

1. S. Zhou, Y. Hou, K. Yang, X. Kong, ChemPhyChem. 2025, 26, e202500066.
2. S. Zhou, Y. Hou, X. Kong, J. Phys. Chem. A 2023, 127, 8159–8167.
3. L. Jiao, M. Du, S. Xu, M. Kou, X. Kong, CCS Chem. 2025, 7(5): 1459-1471.

JI-08

多孔有机框架材料的设计制备及其在有机污染物富集分离中的应用研究

王 春*

河北农业大学理学院

通讯联系人 E-mail: chunwang69@126.com

有机框架材料具有比表面积大、空隙可调、易于进行功能化修饰等优点，为理性设计高效吸附剂提供了广阔设计空间。本研究设计制备了系列功能基团修饰的COFs、基于分子笼的COFs材料，将其作为固相萃取吸附剂，用于富集食品、环境样品中的有机污染物（如烟碱类杀虫剂、氟喹诺酮抗生素、内分泌干扰物等）并深入探讨了其吸附机理。

参考文献：

1. Shuofeng Li, Ying Zhao, Zhi Li, Guoxin Liu, Qianqian Wang*, Chun Wang, Qiuhua Wu*, Knitting organic cage into hyper crosslinked polymers for the efficient capture of fluoroquinolones in pork sample, *Analytical Chemistry*, **2025**, 97, 19321–19330. 中科院一区
2. Mingming Xu, Junmin Wang, Lihong Zhang, Qianqian Wang, Weihua Liu, Yangjuan An, Lin Hao, Chun Wang*, Zhi Wang, Qiuhua Wu, Construction of hydrophilic hypercrosslinked polymer based on natural kaempferol for highly effective extraction of 5-nitroimidazoles in environmental water, honey and fish samples, *Journal of Hazardous Materials*, **2022**, 429, 128288.
1. Wenqiu Song, Weihua Liu*, Qianqian Wang, Lin Hao, Qiuhua Wu, Chun Wang*, A recyclable and durable azo-linked porous organic polymer for fast enrichment and sensitive detection of diamide insecticides in environmental and food samples, *Food Chemistry*, **2025**, 484, 144371.
2. Yiran Dou, Cong Liu, Xiaocui Chen, Xiumin Yang, Lin Hao, Qianqian Wang, Zhi Wang, Qiuhua Wu, Chun Wang*, Green synthesis of azo-linked porous organic polymer for enrichment of nitroimidazoles from water, shrimp and Basa fish, *Food Chemistry*, **2024**, 446, 138875.
3. Chengcheng Fan, Chenhuan Wang, Bin Zhao, Zixuan Cai, Qianqian Wang, Lin Hao, Zhi Wang, Qiuhua Wu, Chun Wang*, Preparation of ionic porous polymers for extraction of four phenolic endocrine disrupting chemicals from fish and water samples, *Food Chemistry*, **2024**, 449, 139270.
4. Zixuan Cai, Zhi Li, Qianqian Wang, Zhi Wang, Qiuhua Wu, Chun Wang*, Synthesis of cyano and ionic dual-functional hypercrosslinked porous polymer for effective adsorption and detection of endocrine disrupting chemicals in milk matrix, *Journal of Hazardous Material*, **2024**, 462, 1327460.
5. Linna Guo, Miao Tian, Zhi Li, Qianqian Wang, Qiuhua Wu, Lin Hao*, Chun Wang*, Preparation of hypercrosslinked porous polymer with manifold functional groups for sensitive determination of phenylurea herbicides in beverages and celtuce samples, *Food Chemistry*, **2023**, 427, 136674.
6. Jie Li, Yushi Yang, Zhijun Zhou, Shuofeng Li, Lin Hao, Weihua Liu, Zhi Wang, Qiuhua Wu, Chun Wang*, Fluorine-functionalized triazine-based porous organic polymers for efficient adsorption of aflatoxins, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **2023**, 71(6), 3068-3078.

JO-01

仿生识别分离材料的构筑及生物标志物高选择性萃取研究

白立改^{1,2}, 苑亚楠^{1,2}, 王明伟^{1,2}, 刘海燕^{1,2}, 闫宏远^{*2,3}

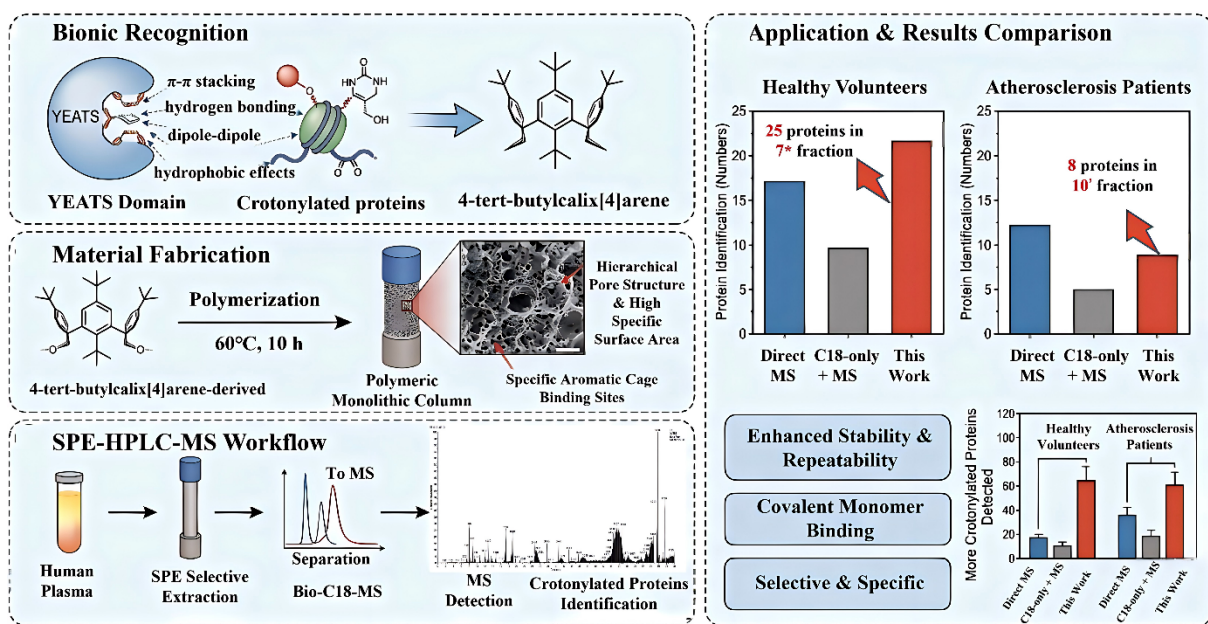
(1: 河北大学药学院; 2: 药物化学与分子诊断教育部重点实验室; 3: 河北大学化学与材料科学学院。河北省保定市五四东路 180 号, 071002。)

通讯联系人 E-mail: yanhy@hbu.edu.cn

蛋白质巴豆酰化是一类关键的翻译后修饰, 与动脉粥样硬化等多种疾病的发生发展密切相关。由于其具备开发为生物标志物或治疗靶点的潜力^[1], 亟需建立高灵敏、高特异性的检测方法。然而, 人血浆中巴豆酰化蛋白丰度极低且基质干扰严重, 难以对其进行直接分析。

受 YEATS 结构域通过芳香笼精准识别巴豆酰化蛋白的机制启发^[2], 本研究以 4-叔丁基杯[4]芳烃衍生物为单体, 制备了一种多孔芳香笼功能化分离材料。该材料借助疏水、氢键、 π - π 堆积及偶极-偶极相互作用等多位点协同效应, 实现对巴豆酰化蛋白的选择性识别; 其兼具多级孔结构、高比表面积与优异的生物相容性, 可实现高效传质并与巴豆酰化蛋白发生特异性结合。将该分离材料与 Bio-C18 柱联用, 建立了固相萃取-高效液相色谱-质谱 (SPE-HPLC-MS) 联用方法, 用于人血浆中巴豆酰化蛋白的选择性萃取与检测。针对动脉粥样硬化患者与健康志愿者的血浆样本, 从随机选择的两个色谱馏分中分别检测到 8 种和 25 种巴豆酰化蛋白质, 检测数量均显著高于单独使用 Bio-C18 柱分离后检测或直接采用质谱检测的结果。

相较于传统基于蛋白质配体的亲和识别方法, 本研究建立的方法具备以下优势: 无需采用复杂耗时的配体偶联工艺, 且识别位点通过共价键与材料结合, 提升了材料的稳定性与可重复性; 该材料的大孔结构、高传质速率与良好生物相容性, 增大了大分子蛋白与分离材料的接触概率, 为巴豆酰化蛋白构建了理想的识别微环境。此外, 本研究不仅建立了一种用于巴豆酰化蛋白鉴定的特异性富集分离方法, 也为其他翻译后修饰蛋白的富集分离提供了可行思路。



参考文献:

- [1]. T. Peng, T. Das, K. Ding, H. C. Hang, *Protein Sci.* **2023**, 32(4): e4618.
- [2]. S. Pan, R. Chen, *Mol. Aspects Med.* **2022**, 86: 101097.

JO-02

共轭微孔聚合物在固相微萃取有机污染物中的应用研究

臧晓欢*, 侯方圆, 婉娜娜, 黄雯, 王春

河北农业大学

通讯联系人 E-mail: zangxiaohuan@hebau.edu.cn

固相微萃取方法 (SPME) 因其操作方便、萃取效率高和环境友好而展现出良好的应用前景[1]。SPME 的富集效率直接决定分析方法的灵敏度, 而涂层材料又决定着 SPME 纤维的性能, 因此对涂层材料的研究一直是研究者关注的热点[2]。

共轭微孔聚合物 (CMPs) 是一类具有 π 共轭骨架和永久微孔结构的多孔有机聚合物, 由刚性共轭单元通过共价键连接, 其微孔结构主要由分子设计与空间位阻效应共同决定[3]。这种独特结构赋予 CMPs 高比表面积、丰富的微孔道、良好的热稳定性和化学稳定性, 使其在 SPME 涂层材料领域展现出广泛的应用潜力。通过分子设计对 CMPs 进行功能化修饰 (如引入亲水性、疏水性或特定化学基团), 可进一步提升其对污染物的选择性吸附性能, 为有机污染物的检测和去除提供了更加多样化的选择。

本研究采用傅克烷基化反应, 合成了具有微孔结构和富氮吡咯框架的卟啉基共轭微孔聚合物 (PCMP)。以 PCMP 作为纤维涂层材料, 采用溶胶-凝胶技术制备的 SPME 纤维用于萃取儿童乳饮料中的 11 种邻苯二甲酸酯 (PAEs), 由于卟啉基中富氮结构可与酯基形成氢键, 从而对 PAEs 表现出较强的吸附能力。结合 GC-MS 建立了 PAEs 的测定方法[4], 方法的检出限为 $0.01\sim 3.00\ \mu\text{g L}^{-1}$, 加标回收率为 $80.1\%\sim 119\%$ 。该方法表现出良好的重复性和较高灵敏度与精密度。另外, 本研究将 1,3,5-三嗪基团引入共轭微孔聚合物网络中, 通过傅克-烷基化反应生成了一种具有疏松多孔结构的三嗪基 CMP, 然后将其作为涂层材料固相微萃取含卤素内分泌干扰物, 由于 $\pi\text{-}\pi$ 堆积、静电和疏水相互作用, 它表现出很强的吸附能力。与 GC-ECD 相结合建立了测定蔬菜和水果样品中 12 种含卤素内分泌干扰物的分析方法[5], 方法的检出限为 $0.020\sim 0.040\ \text{ng g}^{-1}$, 相对加标回收率为 $76.6\%\sim 123\%$, 说明该方法适合水果蔬菜实际样品的测定, 为含卤素内分泌干扰物的分析检测提供了一种新的方法。此外, 以 2,4-双(氯甲基)三甲基苯和四苯基甲烷为原料通过 Friedel-Crafts 反应合成了三维 CMP, 再经过后修饰的方法制备了羧基功能化的三维 CMP, 并将其作为涂层材料采用物理粘覆法制备 SPME 纤维, 与 GC-FID 相结合, 建立了一种检测环境水样和莲藕样品中硝基苯类化合物 (NBs) 的新方法。该方法对于环境水和莲藕样品中 13 种 NBs 检出限分别为 $0.1\sim 0.7\ \text{ng mL}^{-1}$ 和 $1.5\sim 6.0\ \text{ng g}^{-1}$, 相对回收率分别在 $80.1\%\sim 118.9\%$ 和 $80.2\%\sim 119.9\%$ 范围内, 表明该方法具有优良的准确度和精密度。

以 CMPs 材料作为涂层制备的 SPME 纤维在处理复杂食品基质的应用中不仅使用寿命较长而且重复使用性良好, 为食品中有机污染物分离、检测提供了新的技术支持。

参考文献:

1. 张瑞灿, 赵迎, 霍萌月, 谢书宇, 陈冬梅, *化学通报*, **2024**, 87, 540-549.
2. N. Reyes-Garcés, E. Gionfriddo, G. A. Gómez-Ríos, M. N. Alam, E. Boyacı, B. Bojko, V. Singh, J. Grandy, J. Pawliszyn, *Anal. Chem.*, **2017**, 90, 302-360.
3. Y. Song, P. C. Lan, K. Martin, S. Ma, *Nanoscale Adv.*, **2021**, 3(17), 4891-4906.
4. F. Hou, Q. Chang, N. Wan, J. Li, X. Zang, S. Zhang, C. Wang, Z. Wang, *Food Chem.*, **2022**, 388, 133015.
5. N. Wan, Q. Chang, F. Hou, J. Li, X. Zang, S. Zhang, C. Wang, Z. Wang, *Anal. Chim. Acta*, **2022**, 1195, 339458

JO-03

基于网络药理学探究茯苓多糖通过脑-肠轴改善失眠的作用研究

李志伟*, 李欣媛, 张博文, 谢英花, 刘浩帆, 赫雅倩

(河北科技大学化学与制药工程学院, 河北 石家庄 050018)

通讯联系人 E-mail: lizhiwei@hebust.edu.cn

摘要: 失眠是常见的睡眠障碍疾病, 脑-肠轴紊乱在其发病机制中扮演重要角色, 而茯苓多糖作为中药茯苓的核心活性成分, 具有潜在的神经调节与肠道稳态调控作用。本研究旨在基于网络药理学方法, 系统探究茯苓多糖通过脑-肠轴改善失眠的潜在作用靶点及分子机制, 为其临床应用提供理论依据。

首先研究了茯苓多糖的组成和结构, 采用 TCMSP、Genecards 及 OMIM 等数据库分析药物活性成分和失眠相关作用靶点, 使用 Cytoscape3. 10. 0 软件绘制“疾病-药物-成分-靶点”网络图, 借助 STRING 平台等构建 PPI 网络, 分析获得核心作用靶点, 将共同靶点导入微生信中进行 GO 分析、KEGG 通路分析, 解析核心靶点的生物学功能及潜在通路; 结合动物实验考察茯苓多糖对失眠模型小鼠的睡眠时长、脑肠水平及肠道菌群结构的影响, 验证网络药理学预测结果, 为茯苓多糖调节失眠的有效性、安全性及作用机制提供现代科学依据。

经筛选得到茯苓多糖与失眠的交集靶点共 44 个, 核心靶点涉及 CASP3、NR3C1、STAT3 等; PPI 网络显示核心靶点间存在紧密相互作用; KEGG 通路富集分析提示神经活性配体-受体相互作用通路、激素信号通路、5-羟色胺能突触及 cAMP 信号通路为关键通路。经动物实验证实, 茯苓多糖可延长失眠小鼠总睡眠时间, 缩短入睡潜伏期, 调节血清中 IL-6、TNF- α 及 HPA 轴(如 CRH、ACTH、CORT) 水平和海马中 5-HT、DA 等水平; 并能改善肠道菌群多样性及丰度, 与网络药理学预测结果一致。

总之, 我们的研究结果表明, 茯苓多糖可通过调控脑-肠轴及相关信号通路, 调节神经递质的释放、抑制炎症反应、维持肠道菌群稳态, 从而发挥改善小鼠失眠的作用, 为中药多糖治疗失眠提供了新的研究方向与理论支撑。

参考文献

1. Mei C, Han L, Lu M, *et al.* Investigation of the mechanism of Shen-Ling-Bai-Zhu-San polysaccharide in counteracting lactose intolerance diarrhea via network pharmacology, molecular docking, and experimental validation. *J. Food Biochemistry*, 2026, 2026(1): 7563745.
2. Hyeyun K, Injune P, Kyunyong P, *et al.* The positive effects of Poria cocos extract on quality of sleep in insomnia rat models. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2022, 19(11): 6629
3. Liu Y, Chen L K, Zhang H, *et al.* Exploring the mechanism of BuNao AnShen Capsules in the treatment of insomnia based on network pharmacology and experimental validation. *Journal of Ethnopharmacology*, 2026, 3 56120769
4. Liu R, Wu Z, Yin Y, *et al.* Zhi-Gan Formula improved insomnia and anxiety comorbidity in a mouse model via PACAP signaling in the medial prefrontal cortex. *Journal of ethnopharmacology*, 2026, 360121185.

D-09

抗体药中聚山梨酯 80 的降解途径分析策略

王喆, 生宁, 李新健, 许轩, 张金兰*

天然药物及核药基础与新药创制全国重点实验室

中国医学科学院 北京协和医学院, 药物研究所 (北京, 100050)

通讯联系人 E-mail: zhjl@imm.ac.cn

摘要: 聚山梨酯 80 (吐温 80) 是抗体药物中应用最广泛的非离子表面活性剂类稳定剂, 可有效防止治疗性抗体在储存、运输过程中发生变性、聚集、表面吸附与絮凝, 但其易降解特性是制约抗体药稳定性与临床安全性的关键因素。由于 PS80 为组分复杂、结构多样的聚合型混合物, 传统分析方法难以全面表征其降解行为。本研究首先开发了基于超高效液相色谱-高分辨质谱 (UHPLC-HRMS) 分析新方法结合自主研发的 Polymer Studio 药用辅料智能化分析软件, 可实现 PS80 成分及降解杂质的快速定性、相对定量与整体-亚类-化合物三维层级分析, 可用于系统解析抗体药中 PS80 的降解途径、产物特征及关键影响因素。在此基础上, 针对抗体药中高风险宿主细胞蛋白 (HCPs), 进一步开发了 DDA-PRM-dMRM 整合质谱分析策略, 可实现未知 HCPs 全景筛查与已知高风险 HCPs, 尤其是显著酶解 PS80 的高风险 HCPs 的精准定量。上述分析策略可为抗体药处方优化、生产工艺改进、质量控制及质量标准完善提供技术支持, 解决由于 PS80 降解产生的药品质量和安全问题, 有效提升含 PS80 抗体药物的稳定性与质量可控性。

参考文献:

1. □Z. Wang, Y. Wang, C. Tie, J. Zhang, *J. Chromatogr. A*, **2020**, 1609, 460450.
2. □X. Li, Z. Wang, B. Zheng, Y. Wang, J. Zhang, *Anal. Chem.*, **2023**, 95, 9156-9163.
3. □X. Xu, L. Wang, G. Wu, S. Xu, Y. Li, N. Sheng, J. Zhang, *J. Proteome Res.*, **2025**, 24, 4259-4269.

D-10

在线光化学衍生结合串联质谱技术表征抗体药物二硫键连接方式

周柯江, 瑕瑜*

清华大学化学系, 北京市海淀区, 100084

通讯联系人 E-mail: xiayu@mail.tsinghua.edu.cn

抗体药物中二硫键的精准分析对其质量控制至关重要。现有基于质谱的“自下而上”策略依赖于复杂的离线前处理, 存在还原不可控、易遗漏低丰度错配, 并高度依赖已知序列数据库。为突破以上瓶颈, 本研究构建了一种在线可调的二硫键-烯烃反应, 通过与液相色谱-串联质谱在线联用, 实现了二硫键的在线可控部分还原/烷基化, 为复杂抗体药物偶联物(ADC)及未知序列抗体的多维质量属性集成分析提供了新方法。

研究首先搭建了程序化光化学反应系统, 与反相色谱在线联用, 并通过控制丙酮浓度实现了对二硫键部分还原动力学的调控。该平台在模型蛋白中达到了84-100%的二硫键表征率, 并成功应用于人血清IgG混合物的亚类与种型相对定量。其次, 基于色谱分离后在线光还原, 实现了母体与还原产物肽段的保留时间对齐, 从而特异性识别并定量了阿达木单抗中全部16对天然二硫键及90种低丰度错配形式, 显著提升了二硫键错配分析的覆盖率和可信度。针对抗体药物偶联物, 本研究通过单次进样分析, 在曲妥珠单抗-美坦新(T-DM1)中实现了同步完成偶联位点鉴定、二硫键图谱解析(覆盖率达100%)与游离巯基定量, 克服了高空间位阻连接子的分析难题, 提升了ADC异质性表征的通量。为突破对已知序列的依赖, 本研究发展了靶向二硫键特征同位素指纹的从头测序策略, 利用溴代试剂衍生结合数据提取算法, 实现了对未知抗体互补决定区高变序列的初步从头测序。

综上, 本研究建立的在线可调控光化学衍生-串联质谱集成体系, 有效解决了传统方法在还原可控性、流程整合性及序列依赖性方面的局限, 为抗体药物的高效、高置信度、多维质量属性分析与未知序列解析提供了可靠的工具。

参考文献:

14. Adhikari, S.; Yang, X.; Xia, Y., *Anal. Chem.* **2018**, 90, 13036-13043.
15. Yang, X.; Xia, Y., *J. Am. Soc. Mass. Spectrom.* **2021**, 32, 307-314.
16. Yang, X.; Zhang, L.; Xia, Y., *Anal. Chem.* **2021**, 93, 15231-15235.
17. Zhou, K.; Xia, Y., *Anal. Chem.* **2024**, 96, 17396-17404

Y-01

光裂解型磁化学选择性探针用于低丰度代谢物分析

付小康, 白沛蓉, 朱泉霏*, 冯钰锜*

武汉纺织大学 生物医学工程与健康学院, 武汉, 430200

通讯联系人 E-mail: qf_zhu@whu.edu.cn, yqfeng@whu.edu.cn

直接进样质谱因具有高通量优势而在代谢组学中展现出重要应用潜力,但复杂生物样本中严重的基质效应和离子抑制仍显著限制了低丰度代谢物的检测灵敏度。针对这一问题,本研究构建了一种光裂解型磁化学选择性探针 M-iTASO-ONH₂, 该探针将光敏质谱探针与磁性固相材料相结合,集成了羰基代谢物选择性标记、磁分离除杂和光控释放三种功能。通过在磁珠表面固载光敏试剂,并经脱保护获得活性羟胺(-ONH₂)反应基团,该探针实现了对羰基化合物的高效捕获。随后,经 365 nm 紫外光照射以快速光解释放含磺酸的标记产物,再结合负离子模式流动注射质谱进行检测。结果表明,该探针具有良好的制备重现性,光敏试剂在羧基磁珠上的固载量为 5.0 ± 0.2 nmol/mg,批次间 RSD 为 3.3%。在最优条件下,标记后的目标物可在 20 s 内完成光控释放,且磁分离过程能够有效降低样本基质干扰。与前期均相标记策略相比, M-iTASO-ONH₂ 显著提升了复杂样本中羰基代谢物的检测性能,可将离子抑制控制在 1.0-18.5% 范围内,同时保留磺酸标记产物在负离子模式下的高响应优势。该方法为复杂生物样本中低丰度羰基代谢物的高通量、高灵敏分析提供了新的技术手段,也为直接进样质谱中基质效应问题的解决提供了新思路。

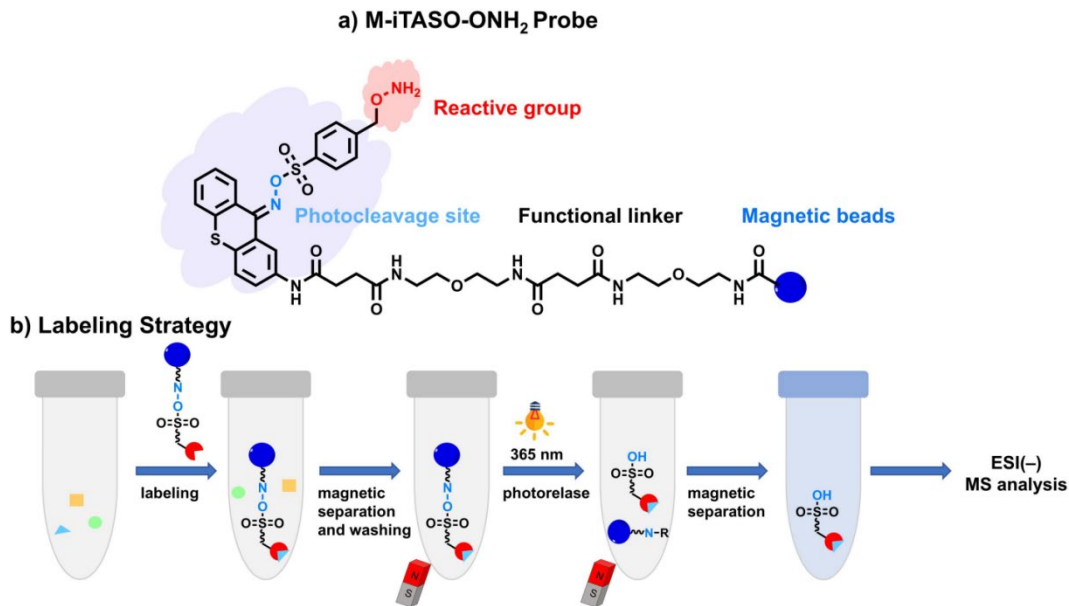


图 1. (a) 光裂解型磁化学选择性探针 M-iTASO-ONH₂ 的结构示意图; (b) 标记策略流程图

参考文献:

1. P.-R. Bai, N. An, Y.-Z. Wang, Y.-Y. Chen, Q.-F. Zhu, Y.-Q. Feng, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 1495-1499.
2. X.-Z. Wu, K.-W. Tan, X. Zhang, J.-J. Tan, N. An, F. Cong, W. Wu, A. Temerdashev, Q.-F. Zhu,

H. Wang, Y.-Q. Feng, *J. Agric. Food Chem.*, **2025**, 73, 19813-19822.

3. X.-K. Fu, S.-Q. Han, W. Ha, Y.-P. Shi, *J. Agric. Food Chem.*, **2023**, 71, 14814-14824.

感谢国家自然科学基金项目 (Nos. 22504105, 22361132526, 22274119 和 22474101) 资助

Y-02

微液滴发生方法开发及其界面 NO_2 反应质谱研究陈欢¹, 张新星^{1*}¹ 南开大学化学学院, 天津市南开区卫津路 94 号, 300071

* Email: zhangxx@nankai.edu.cn

摘要:

长期以来, 体相水被认为是一种稳定且相对惰性的液体, 常用作化学反应的溶剂。但近年来的研究发现, 当体相水被分散成微米级液滴时, 其气液界面会产生高达 10^9 V/m 的超强电场。该电场能将水中的氢氧根 (OH^-) 撕裂成羟基自由基 ($\cdot\text{OH}$) 和电子, 使微液滴展现出强氧化还原能力。尽管上述现象已被证实, 但微液滴特殊性质的来源仍存在关键争议: 微液滴奇特的理化性质源于本征属性还是外部活化因素。针对此问题, 团队开发了两种制备未活化微液滴的方法, 即干冰生成法和绝热膨胀法。借助自研高灵敏快响应温度测试装置发现, 绝热膨胀法产生的微液滴处于过冷状态 (-34.4°C), 干冰法制备的微液滴温度比体相水低约 2 K。利用高速摄像机, 揭示了这两种方法生成微液滴的原理。质谱实验表明, 20 种不同的未活化微液滴反应与传统气动喷雾的微液滴反应无显著差异, 表明微液滴特殊的理化性质根植于其内在固有性质, 并非外部活化因素。鉴于微液滴广泛存在于自然界 (如云、雾、海洋飞沫), 其对大气环境的潜在影响亟需进一步研究。以典型大气污染物 NO_2 为例, 发现 NO_2 可在微液滴界面同时发生氧化反应和还原反应, 生成 HNO_3 和 HONO 。前者是酸雨形成的主要原因; 后者通过光解等反应释放 $\cdot\text{OH}$, 促进挥发性有机物等多种物质氧化和臭氧的形成。这一结果证明微液滴是大气中关键反应的重要场所。

关键词: 质谱分析、微液滴、大气化学

Y-03

微纳限域双印迹膜富集/荧光检测一体化分析贝类毒素研究

唐丽, 夏凌, 李攻科*

中山大学化学学院, 广东省广州市, 510006

* Email: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

痕量生物毒素即能引起严重食品安全问题, 快速检测技术是及时发现食品安全隐患、避免风险的重要手段。本文发展了微纳限域双印迹膜富集/荧光检测一体化分析贝类中冈田酸(OA)、短裸甲藻毒素-2(PbTx-2)方法。以聚甲基丙烯酸甲酯基材构建富集检测芯片, 通过原位生长将OA、PbTx-2双印迹膜固载在芯片微通道中。以ZIF-8分别包覆7-二乙基氨基-4-甲基香豆素和罗丹明B, 再分别修饰OA和PbTx-2适配体, 构建双荧光探针, 实现贝类毒素的增敏检测。基于芯片微纳限域制备双印迹膜, OA和PbTx-2的印迹因子分别为4.1和5.9, 发展OA和PbTx-2富集/荧光检测一体化方法的检出限分别为0.58 $\mu\text{g/L}$ 和6.45 ng/L 。方法成功用于4种贝类样品中OA和PbTx-2同时检测, 回收率均在89.7-109.0%, 相对标准偏差均在3.0-7.3%, 分析结果与标准方法结果吻合, 相对误差均在-4.8-7.3%。目标物在微通道中同时原位富集与检测, 避免样品转移损失, 方法灵敏快速、准确可靠。为分子印迹膜制备及生物毒素快速检测提供了新思路。

关键词: 微纳限域; 双印迹膜; 富集检测; 一体化; 贝类毒素。

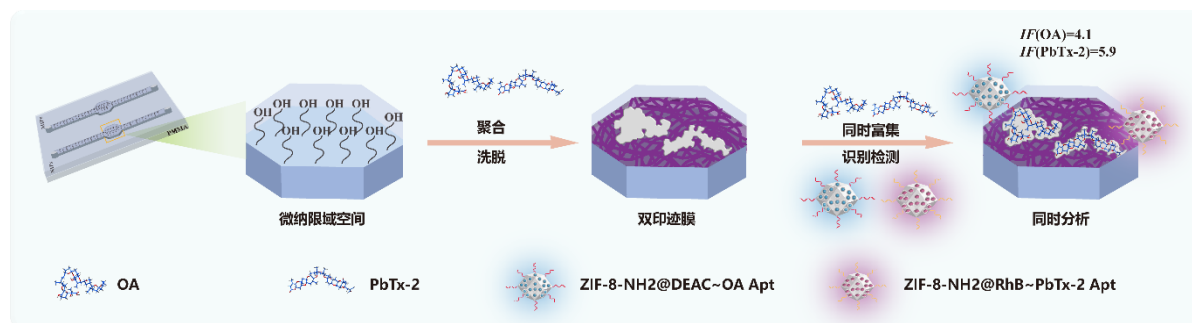


图1 微纳限域双印迹膜富集/荧光检测一体化分析贝类毒素

参考文献:

1. Mafra, L.L., Souza, D.A. de, Menezes, M., Schramm, M.A., Hoff, R., **2023**. Curr. Opin. Food Sci., 53, 101078.
2. Jia, Y., Zhang, X., Fang, J., Jia, D., Tian, T., Du, Y., Wei, Q., Li, F., **2024**. Biosens. Bioelectron., 264, 116690.
3. Jiang, T., Ju, P., Bi, F., Chi, J., Wen, S., Jiang, F., Chi, Z., **2025**. Biosens. Bioelectron. 267, 116745.

*基金项目: 国家自然科学基金重点项目(No.22134007)及面上项目(No.22576240), 广东省自然科学基金项目(No.2019B020211001), 广东省重点领域研发计划项目(Nos.2025B0202120004和2026B0202150002)。

Y-04

磁-光 Janus 复合材料用于血清外泌体捕获与磷蛋白富集

仰俊伟, 王子瑞, 胡博, 郑海娇*, 贾琼*

吉林大学化学学院

通讯联系人 Email: jiaqiong@jlu.edu.cn

肾细胞癌是泌尿系统常见的恶性肿瘤,其早期诊断与生物标志物的发现至关重要。血清外泌体作为细胞间通讯的关键介质,其携带的差异化表达蛋白可能与疾病密切相关。磷酸化是一种关键的蛋白质翻译后修饰,与肾细胞癌中重要信号通路的发展有关。与直接在血清中检测磷蛋白相比,外泌体的磷脂双分子层能够保护磷酸化蛋白免受血清中磷酸酶的降解,从而检测到更多的生物学信息。因此,设计并开发一种血清外泌体磷酸化蛋白组学研究平台至关重要。本研究中,我们设计了一种 Janus 复合材料用于血清外泌体靶向与磷酸化肽富集。该材料具有较高的血清外泌体提取效率(14000 $\mu\text{g/mL}$),并结合液相色谱-串联质谱(LC-MS/MS)检测磷酸化肽时表现出高灵敏度(检测限为 0.1 $\text{fmol}/\mu\text{L}$)。在肾细胞癌患者与正常人血清外泌体中鉴定出 4095 条磷酸化肽段,包括 2293 条 O-磷酸化肽段和 1802 条 N-磷酸化肽段,且涵盖单磷酸化、多磷酸化等形式,归属于 986 个磷酸化蛋白,其中筛选并鉴定得到了 12 种差异化表达的磷酸化蛋白。总而言之,该研究构建了一种新型的血清外泌体磷酸化蛋白组学研究平台,为肾细胞癌患者血清中的磷酸化蛋白标志物的筛查提供了新思路,同时为后续大规模验证性临床试验设计提供依据。

参考文献:

1. J. Yang, H. Zheng, X. Lv, Z. Wang, W. Zhou, H. Cheng, Q. Jia. *Anal. Chem.*, **2026**, 98(10), 7262.
2. Y. Zhao, H. Li, H. Zheng, Q. Jia. *Anal. Chem.*, **2025**, 97(2), 1135.
3. Y. Zhao, W. Xu, H. Zheng, Q. Jia. *Anal. Chem.*, **2023**, 95(23), 9043.

Y-05

面向二甲苯异构体分离的超稳定铜基羧酸金属有机骨架固定相

杨涵, 徐铭, 毛敏, 高磊, 张豪, 孟莎莎, 汤雯淇, 顾育豪, 袁帅, 刘玲梅, 古志远*

南京师范大学

通讯联系人 E-mail: guzhiyuan@njnu.edu.cn

对二甲苯 (pX) 是工业中重要的基础原料, 广泛用于生产聚对苯二甲酸乙二醇酯塑料, 以及作为半导体器件制造中的显影溶剂。pX 的纯度对于确保塑料产品质量和集成电路芯片的器件良率至关重要。然而, 二甲苯异构体之间相近的沸点和分子尺寸, 给检测 pX 中痕量异构体杂质带来了巨大挑战。解决这一难题的关键在于发展兼具高稳定性与分离性能的色谱固定相。本文提出一种纳米包覆策略, 通过 AB 堆积, 在 Cu(II) 与 4,4',4'',4'''-(1,3,6,8-萘四基)四苯甲酸 (H₄TBAPy) 的组装过程中对铜的桨轮簇进行保护。该结构限制了水分子对 Cu-O 键的接近, 从而构筑出目前在水 (室温, 240 天) 及酸碱溶液 (pH=0–13) 中稳定性最高的 MOF 之一。水蒸气吸附实验、密度泛函理论 (DFT) 计算和径向分布函数 (RDF) 分析进一步证实了 Cu₂TBAPy 的高耐水性。同时, Cu₂TBAPy 独特的堆积结构产生了与二甲苯分子尺寸相近的孔道, 为其色谱分离提供了有利环境。得益于优异的稳定性和尺寸匹配效应, 该材料对二甲苯异构体表现出卓越的分性能: 间二甲苯/对二甲苯的分离度高达 18.2, 色谱柱使用寿命长达 31 个月, 超越了所有已报道材料。二甲苯异构体杂质的检测限低至 1.33 pg。Cu₂TBAPy 卓越的稳定性与分离性能, 为高稳定性 MOF 固定相的设计与合成提供了重要指导。

参考文献:

1. H. Yang, M. Xu, M. Mao, L. Gao, H. Zhang, S. S. Meng, W. Q. Tang, Y.-H. Gu, S. Yuan, L. M. Liu, Z. Y. Gu*, Ultrastable Copper Carboxylate Metal–Organic Frameworks, *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, 21961–21972.
2. H. Furukawa, F. Gándara, Y. B. Zhang, J. Jiang, W. L. Queen, M. R. Hudson, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 4369–4381.
3. S. Yuan, L. Feng, K. Wang, J. Pang, M. Bosch, C. Lollar, Y. Sun, J. Qin, X. Yang, P. Zhang, Q. Wang, L. Zou, Y. Zhang, L. Zhang, Y. Fang, J. Li, H. C. Zhou, *Adv. Mater.* **2018**, 30, 1704303.

Y-06

基于固体结合肽的 GPCRs 可逆固定相制备及色谱评价

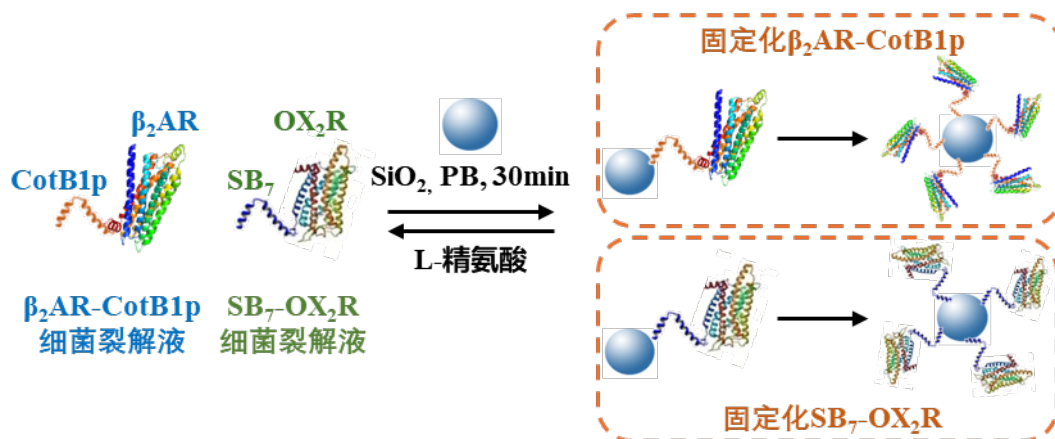
欧圆圆, 张子龙, 朱慧婷, 赵雪, 李倩, 赵新锋*

西北大学生命科学学院, 西安, 710069

通讯联系人 E-mail: zhaoxf@nwu.edu.cn

关键词: 固体结合肽; GPCRs; 色谱固定相; 亲和色谱

针对GPCRs固定化中标签体积大、受体蛋白构象不一致、蛋白与载体不可回收等问题, 本研究受文献启发^[1-3], 发展了一种基于固体结合肽(SBP)可逆吸附技术的GPCRs固定化新方法, 并将其应用至受体-药物相互作用研究。具体而言, 以饱和吸附量和亲和力为指标筛选获得两种高亲和力固体结合肽CotB1p和SB₇作为标签, 将其融合于 β_2 AR和OX₂R的C末端, 在最优条件下(20 mM磷酸盐缓冲液, 150 mM NaCl, pH 8.0), 30分钟内即可实现融合受体蛋白在未修饰硅胶表面的快速、可逆吸附, 经检测, 其与大孔硅胶的亲和常数分别为 5.29×10^{-6} M和 7.75×10^{-5} M, 吸附行为符合Langmuir模型。该技术具备的优势有: 1) 标签小(1.57 kDa), 对受体活性影响小; 2) 固定化受体构象统一; 3) 载体可重复使用; 4) 操作简便, 30分钟内完成。所制备的色谱固定相在色谱分析中表现出良好的稳定性与重复性, 与Halo Tag共价法相比, 采用该方法测定药物-受体的结合常数提高两个数量级, 分析准确性显著提升。综上, 该研究为GPCRs的快速、低成本、可逆固定化提供了新策略, 为药物成分高活性筛选奠定了基础。

图 1 β_2 AR 和 OX₂R 可逆固定化示意图

参考文献:

1. T.Q. Aguiar, L. Domingues, Recombinant protein purification and immobilization strategies based on peptides with dual affinity to iron oxide and silica, *Biotechnol. J.*, **2023**, 18, e23001523.
2. M.A. Abdelhamid, K. Motomura, T. Ikeda, T. Ishida, R. Hirota, A. Kuroda, Affinity purification of recombinant proteins using a novel silica-binding peptide as a fusion tag, *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, **2014**, 98, 5677-5684.
3. M.A. Abdelhamid, T. Ikeda, K. Motomura, T. Tanaka, T. Ishida, R. Hirota, A. Kuroda, Application of volcanic ash particles for protein affinity purification with a minimized silica-binding tag, *J. Biosci. Bioeng.*,

2016, 122 (5), 633-638.

i 基金资助：国家自然科学基金项目（22574129, 22374116）

Y-07

低共熔溶剂-分子印迹冷冻凝胶固相微萃取纤维涂层制备及其在痕量多氯化萘高灵敏检测中的应用

杨岚森¹, 何若琳², 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, 071002² 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

多氯化萘(PCNs)作为一种新污染物,已被《斯德哥尔摩公约》禁止生产和使用。然而,PCNs仍会通过垃圾焚烧等多途径无意产生排放入环境中,并通过食物链进入人体,从而对公共健康构成重大威胁^[1]。然而,监测复杂样品中痕量PCNs水平通常需要高灵敏检测技术。固相微萃取(SPME)因其操作简便、高富集能力和环境兼容性而备受关注,但其发展受限于商业化纤维涂层的种类和高昂成本^[2]。分子印迹聚合物(MIPs)因其对目标分子的选择性识别能力备受关注。然而,传统MIPs的合成通常存在以下问题:传统功能单体可能对人类健康存在生殖毒性和致癌风险;高温合成条件可能导致模板分子的热运动增加,抑制高亲和位点的形成,进而影响印迹效率^[3]。本工作合成了12种新型低共熔溶剂(DES),并选定最佳DES作为绿色功能单体,通过分子印迹技术和冷冻凝胶技术制备分子印迹冷冻凝胶/氧化石墨烯(MIC/GO)复合材料。所得MIC/GO表现出优异的热稳定性(高达320℃),并展现出对PCN的高亲和力(印迹因子为3.17–4.48)。这些特性使MIC/GO可作为SPME纤维涂层。结合气相色谱-串联质谱技术,建立了复杂样本中PCNs的高灵敏检测方法(LODs为0.25–0.88 pg/g)。与传统分析方法相比,该方法显著减少了有机溶剂消耗,并显著提升了分析性能。

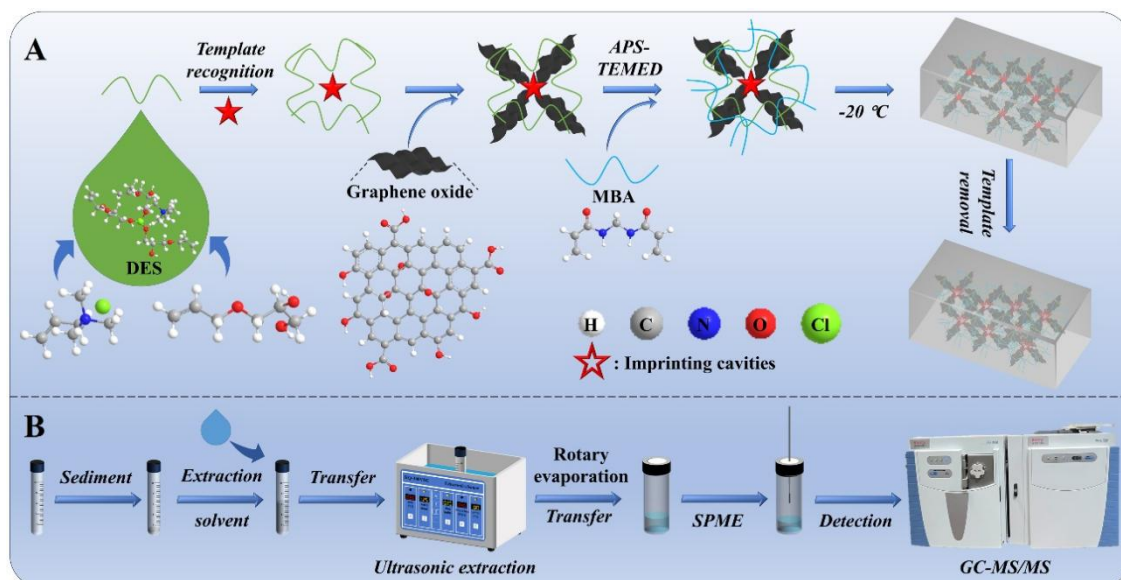


图1 (A) 分子印迹冷冻凝胶复合材料合成及 (B) 检测流程示意图。

参考文献:

1. L. Yang, P. Li, Y. Han, D. Han, H. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 469, 133909.
2. P. Li, F. Zhang, H. Wang, H. Yan, *Anal. Chem.*, **2025**, 97(50), 27885-27893.

3. L. Yang, X. Yang, L. Wang, H. Ma, H. Yan, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 497, 139665.

国家自然科学基金项目（82373634, 82073605）；河北大学创新团队计划项目（IT2023A06）；河北省矿产资源与生态环境监测重点实验室开放课题项目（HBMREEM202401）资助。

Y-08

脂质-膜曲率双重响应多肽的构建与生物分离分析应用

冯慧霞, 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, 北京, 100190

E-mail: yyhuang@iccas.ac.cn, zhaorui@iccas.ac.cn.

脂质参与并调控众多重要的生命活动。作为生物膜的主要成分, 脂质分子通过自组装形成双层结构, 进一步与蛋白质、糖类等相互作用, 精准控制细胞内外的物质交换和信号传递。从自然界分子识别相互作用原理出发, 以生物膜脂质及相关生命过程为靶标, 构建具有高亲和力、高选择性的靶向分离分析体系, 对于复杂生物体系中功能微纳颗粒的捕获、分子谱解析和疾病机制研究具有重要意义。

从生物膜脂质识别原理出发, 构建多肽-膜曲率相互作用体系, 开展了生物膜脂质识别响应多肽的设计、合成与筛选。通过以不同尺寸和脂质组分的脂质体为模型, 结合荧光偏振和石英晶体微天平技术, 鉴定了与磷脂酰丝氨酸(PS)具有高亲和力、高特异性识别的多肽。进一步研究显示, 多肽优先结合曲率高的脂质体, 表现出显著的尺寸识别能力。基于外泌体具有半径小、曲率高且PS外翻的特性, 以脂质识别响应多肽为识别元件, 构建了多肽功能化亲和分离材料, 实现了细胞培养液、尿液和血清等复杂样品中外泌体的高效捕获。建立了临床体液样品中外泌体的特异性分离分析新方法, 结合酶联免疫吸附技术, 实现了外泌体中的淀粉样蛋白、磷酸化tau蛋白等的检测, 探索了健康人、轻度认知障碍和阿尔兹海默人群的有效区分。进一步将脂质识别响应的多肽分离系统与基于质谱的蛋白质组学分析相结合, 鉴定了阿尔兹海默患者和健康人外泌体的差异表达蛋白, 解析了不同类型老年痴呆外泌体标志蛋白的特征, 为阿尔兹海默病的早期筛查和诊疗新靶标的发现提供新方法。

参考文献:

1. H. Feng, Y. Huang, Y. Jin*, R. Zhao*, *Angewandte Chemie International Edition*, 2026: e4706958.
2. H. Feng, H. Gao, J. Chen, R. Zhao*, Y. Huang*, *Journal of Chromatography A*, 2024: 465639.
3. X. Tang[#], H. Feng[#], Y. Li, T. Miao*, H. Gao, R. Zhao, Y. Huang*, *Biosensors and Bioelectronics*, 2025, 269: 116940. (# co-first authors)
4. 感谢国家自然科学基金的资助。

Y-09

单分散聚合物微球的设计、制备及其在离子色谱中的应用

刘昊林, 沈亦帆, 许经纬, 双陈冬, 李爱民*

南京大学环境学院, 水污染控制与资源绿色循环全国重点实验室

通讯联系人 E-mail: liaimingroup@nju.edu.cn

摘要: 离子色谱作为分析无机离子、小分子酸及胺类化合物的关键技术, 近年来备受关注。然而, 现有商品化固定相在分离消毒副产物(如小分子有机酸)时面临严峻挑战^[1]。在化学机制层面, 由于对固定相微观环境与目标分子间的作用机理认识不足, 现有修饰策略多依赖增加亲水性、调节链长等“试错式”经验^[2], 导致分离往往陷入“保留两极化”与“选择性缺失”的双重困境; 在物理传质层面, 受限于填料均一性不足及孔道结构未针对小分子优化, 物理扩散受阻, 导致色谱柱柱效低、分析速度慢。尽管已有研究利用热力学模型或分子动力学阐释保留机制, 但仍缺乏系统性的理论指引^[3]。基于此, 本研究引入材料基因组学理念, 旨在通过“理论模拟指导定向设计”, 实现固定相构建从“经验试错”向“理性设计”的跨越。首先, 利用密度泛函理论(DFT)和分子动力学(MD)模拟, 针对消毒副产物的静电势及空间位阻特征, 计算并筛选出适宜的功能基团与孔道结构; 随后, 以自制单分散聚苯乙烯(PS)微球为基质, 采用改良的单步溶胀法一步实现微球的溶胀与氯甲基化, 并通过化学衍生法引入优选基团完成季铵化修饰, 制备得到新型固定相; 最后, 将该固定相应用于IC-ESI-MS/MS分析系统, 系统评估了其对于九种常见卤乙酸及卤氧化物的分离性能。

关键词: 离子色谱; 消毒副产物; 密度泛函理论; 分子动力学; 聚苯乙烯微球

参考文献:

1. Liu H L, Xu J W, Shen Y F, et al. *Polymers*, 2026, 18(3), 389.
2. Liu J W, Zhang Y D, Yan Y Q, et al. *Journal of Chromatography A*, 2025, 1739: 465549.
3. Liu X Y, Wang Y, Cong H L, et al. *Journal of Chromatography A* 2021, 1653: 462313.

Y-10

SPE-LC-MS/MS 同时测定烟草中还原糖、氨基酸及 Amadori 化合物

王筱倩, 夏凌, 李攻科^{*}

中山大学化学学院 5100060

通讯联系人 E-mail: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

摘要: 美拉德反应是还原糖与氨基酸间的重要非酶褐变过程, 在烟草风味形成及化学稳定性调控中发挥关键作用。糖、氨基酸及Amadori化合物作为反应不同阶段的核心物质, 其准确定量分析对于评价烟草品质具有重要意义。本文发展了固相萃取(SPE)/超高效液相色谱-串联质谱同时分析糖、氨基酸及Amadori化合物的方法, 测定烟草中43种美拉德反应化合物, 涵盖3种还原糖、17种氨基酸、17种Amadori化合物及6种中间产物。分别研究了SPE填料种类与用量、pH、上样流速、洗脱条件及色谱质谱检测参数。样品前处理采用亲水-亲脂平衡填料自组装SPE柱、甲醇洗脱液, 选择Titank C₁₈色谱柱及多反应监测模式采集数据。对43种目标化合物分析方法的相关系数为 0.9980-0.9998, 检出限分别为氨基酸0.10-0.50 $\mu\text{g/L}$ 、还原糖 1.0×10^2 - 2.5×10^2 $\mu\text{g/L}$ 、Amadori化合物0.10-0.50 $\mu\text{g/L}$ 。方法成功应用于烟草样品分析, 回收率为80.4%-115.0%, RSD为 0.5%-9.2%。本研究为深入研究美拉德反应提供了技术支撑, 有助于食品加工工艺优化及食品安全评价。

关键词: 固相萃取; LC-MS/MS; 美拉德反应; Amadori化合物; 烟草分析。

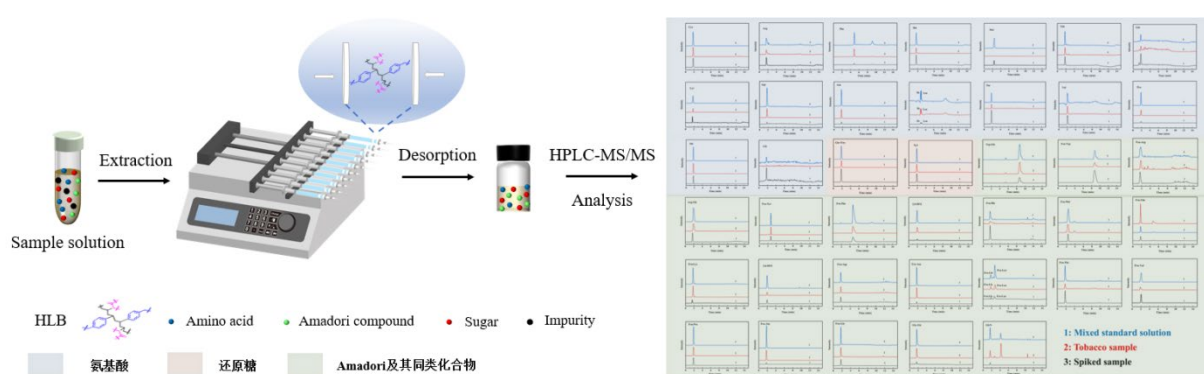


图1 烟草中氨基酸、还原糖、Amadori 化合物分析方法研究

参考文献:

1. J.L. Cao, C. Yang, J. Zhang, et al, *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, **2025**, 65(2):406-28.
2. X.H. Pan, X.P. He, Z. Liu, *Analytica Chimica Acta*, **2018**, 1019:65-73.
3. Z.W. Liu, X.Q. Wang, H.L. Qin, et al, *Chinese Chemical Letters*, **37** (2026) 11742.

*基金项目: 广东省基础与应用基础研究基金项目 (No.2024A1515011077)、广东工业有限公司科技项目 (No.2024440000340031)。

Y-11

芳胺 COF 涂覆试纸：一种亚硝酸盐高效去除与
双模式可视化检测一体化平台

丁亮, 李清豹, 王双寿*

*安徽工业大学, 化学与化工学院, 安徽省马鞍山市马向路 1530 号, 243032

* Email: wangss17@ahut.edu.cn

亚硝酸盐 (NO_2^-) 作为一种被广泛使用的食品添加剂, 常见于香肠、罐头肉类、鱼制品及腌渍蔬菜等加工食品中用于防腐和发色, 但过量的 NO_2^- 会严重危害人体健康; 此外, NO_2^- 是一种普遍存在的环境污染物, 尤其是在渔业水环境中, 其过量积累是导致水产养殖中水产品患病甚至死亡的关键诱因。因此, 去除和检测 NO_2^- 对食品安全和环境监测均具有重要意义。目前, NO_2^- 的检测高度依赖于色谱、质谱、电化学等仪器分析技术^[1], 虽然结果准确, 但便携性差、操作繁琐, 难以满足现场快速检测需求, 而现有吸附材料多集中于单一去除应用, 可同时实现 NO_2^- 高效去除与可视化检测的一体化策略极度匮乏。因此, 本研究以芳胺 COF 功能化试纸为基底, 利用其高比表面积和残留氨基与 NO_2^- 发生重氮反应, 实现对 NO_2^- 的高效吸附去除及双模式可视化检测, 此外, 其周期性共轭骨架赋予 COF 强的紫外-可见光吸收和荧光发射能力, 而重氮化反应生成的重氮盐具有宽谱吸收特性, 易发生基于内滤效应 (IFE) 的荧光猝灭^[2,3], 据此构建 NO_2^- 比色/荧光比色双模可视化传感平台^[4-7]。研究表明, 所构建的 COF 试纸对 NO_2^- 的比色/荧光比色检出限 (LOD) 分别低至 $1.8 \mu\text{g/mL}$ 和 $2.2 \mu\text{g/mL}$, 低于饮用水中 NO_2^- 含量的法定上限标准, 对河水、自来水、肉罐头和火腿肠等食品和环境样品中 NO_2^- 的加标回收率为 $93.03\%\sim 108.33\%$ 。分析结果与荧光定量、Griess 显色和智能手机数字化图像分析等技术的测定结果高度一致。此外, COF 试纸还对环境水样中的 NO_2^- 展示了强的去除能力 (去除容量高达 1.76 mg/mg), 在环境分析与食品安全领域展示了良好的应用前景。

关键词: 亚硝酸盐; 比色; 可视化快检; 吸附

参考文献

- [1] Wang, B. Y.; Wu, Z. L.; Qin, W. D. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2017**, 247, 774-779.
- [2] Wang, S. S.; Ding, L.; Liu, M. L. et al. *Chemical Engineering Journal*, **2026**, 535, 175309.
- [3] Wang, S. S.; Ding, Y. W.; Zhang, L. et al. *Journal of Hazardous Materials*, **2023**, 445, 130563.
- [4] Wang, S. S.; Zhang, L.; Jin, Q. et al. *Food Chemistry*, **2022**, 390, 133087.
- [5] Wang, S. S.; Ding, Y. W.; Zhang, L. et al. *Journal of Hazardous Materials*, **2024**, 470, 134154.
- [6] Wang, S. S.; Zhang, L.; Wang, H. L. et al. *Sensors and Actuators: B. Chemical*, **2024**, 409, 135631.
- [7] Jiang, M. Z.; Xu, R. H.; Yang, C. Y. et al. *Sensors and Actuators: B. Chemical*, **2025**, 430, 137335.

Y-12

撞击流反应结晶器制备中药纳米晶体的研究

秦润祥, 王学重*

北京石油化工学院, 新材料与化工学院, 恩泽生物质精细化工北京市重点实验室

*通讯联系人 E-mail: wangxuezhong@bipt.edu.cn

姜黄素是一种具有抗炎、抗氧化、抗肿瘤等多种药理活性的天然多酚类化合物,但其极低的水溶性(约 11 ng/mL)和口服生物利用度(<1%)严重限制了临床应用。前期研究发现,纳米级的姜黄素颗粒在溶解度和生物利用度上有显著的提升。在本工作中研究了撞击流反溶剂结晶制备姜黄素纳米颗粒的工艺技术。以聚乙烯吡咯烷酮 K30(PVP K30)为稳定剂,系统开发了姜黄素纳米晶体的制备工艺,制备的姜黄素纳米晶体具有平均粒径小(Peak 1 = 75.64 nm, D50 = 76.2 nm)、粒径分布窄(PDI ≈ 0.15)、球形形貌规整且分散性良好的特点。此外,纳米晶体保持了热力学稳定的 Form I 晶型,结合 PVP K30 的空间位阻稳定作用,具有良好的物理稳定性和长期储存潜力。

实验优化了关键工艺参数,包括添加剂类型(PVP K30)、结晶温度和撞击流反应结晶器的喷口速度。采用 X 射线衍射(XRD)、动态光散射(DLS)和扫描电子显微镜(SEM)对产物进行全面表征。XRD 结果表明纳米晶体保持了热力学稳定的 Form I 晶型,特征衍射峰($2\theta = 8.9^\circ$ 、 12.3° 、 14.5° 、 17.2° 等)与原料药高度一致。DLS 分析显示平均粒径(Peak 1)为 75.64 nm, D50 为 76.2 nm, 多分散系数(PDI)约为 0.15, 表明粒径分布均匀。SEM 观察证实纳米晶体呈规则球形, 粒径 50-150 nm, 分散性良好。在本工作中还探索了撞击流反溶剂结晶的机理,可以分为四个阶段:(1)快速成核阶段——高过饱和度驱动 Form I 晶核同步形成;(2)各向同性受控生长阶段——低过饱和度下均匀生长结合 PVP 初步吸附形成球形形态;(3)持续强化稳定阶段——PVP 包覆层动态优化;(4)最终稳定化阶段——PVP 吸附平衡建立,维持长期稳定性。该机理揭示了 PVP K30 通过氢键($O-H \cdots O=C$)与空间位阻的协同作用调控晶体各向同性生长的分子作用机制。

本研究成功制备了平均粒径小于 300 nm、球形形貌、高结晶度的姜黄素纳米晶体,为难溶性天然活性成分的纳米化制备提供了新的技术路径。



图 1 撞击流反应装置



图 2 撞击流喷嘴

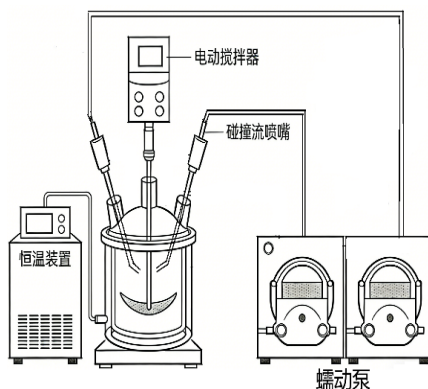


图 3 撞击流反应结晶流程图

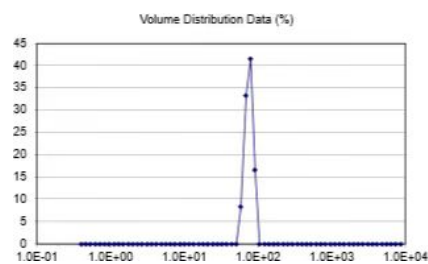


图 4 姜黄素纳米晶体 DLS 粒径分布

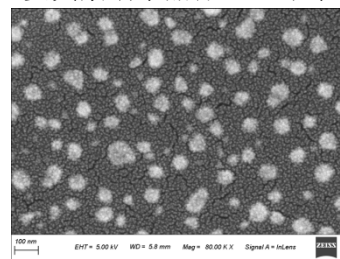


图 5 姜黄素纳米晶体 SEM 图像

Y-13

基于循环电泳芯片系统测定物质扩散系数研究

扈洪志, 夏凌, 李攻科*

中山大学化学学院, 广州 510006

E-mail: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

摘要 扩散系数作为物质在流体中传递行为的一个基本物理化学参数, 在表征物质传递过程以及物质定性分析鉴别中有重要作用^[1]。传统的毛细管电泳法测量扩散系数时, 常常会受到焦耳热、吸附和电分散的影响, 导致峰展宽和精度降低。微芯片电泳具有样品消耗少和焦耳热小等优点^[2], 但通常需要多个检测点或重复进样, 从而引入系统误差。因此我们研制了循环电泳芯片系统, 通过周期性改变芯片通道内电场方向, 使样品往复通过荧光检测点, 完成峰展宽数据的分析, 据此发展了物质扩散系数测定的新方法。通过循环电泳芯片系统完成了荧光染料和荧光标记氨基酸的扩散系数测定, 罗丹明B、罗丹明6G的扩散系数分别为 $0.85 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ 、 $1.18 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$, 赖氨酸、精氨酸的扩散系数分别为 $1.41 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ 、 $1.30 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$, 方法的相对标准偏差小于10%。实现了罗丹明6G和荧光标记半胱氨酸混合溶液中2种组分的分离鉴别。循环电泳芯片系统可用于荧光染料、氨基酸的快速定性鉴别研究, 有良好的应用前景。

关键词 芯片电泳 循环 微流控芯片 扩散系数

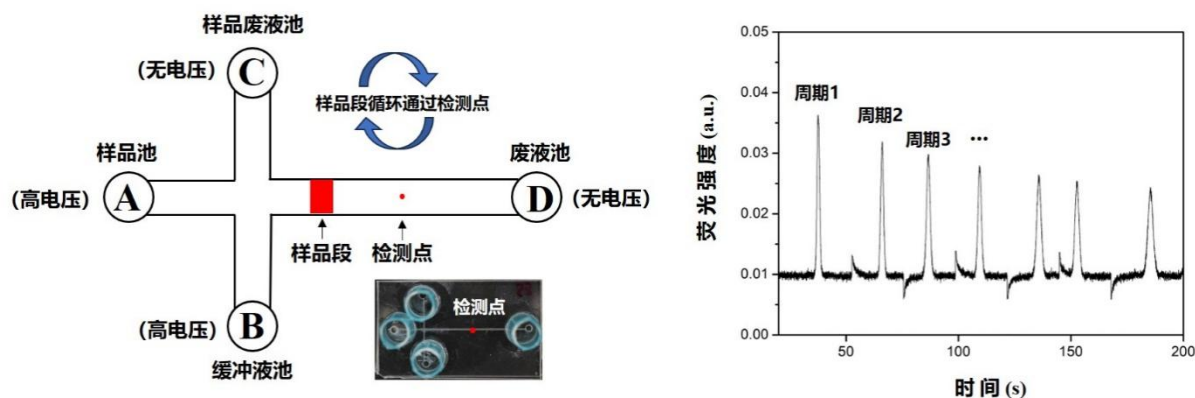


图1 循环电泳芯片系统与罗丹明B电泳图谱

参考文献:

1. S. J. Manzi, G. A. Ranzuglia, P. M. Centres, V. D. Pereyra, *Electrophoresis*, **2024**, 45, 300–309.
2. A. Khodabandehloo, David D. Y. Chen, *Anal. Chem.*, **2017**, 89, 7823–7827.

*基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (No.22134007)、面上项目 (No.22576240)、广东省自然科学基金项目 (No.2019B020211001)、广东省重点领域研发计划项目 (Nos.2025B0202120004 和 2026B0202150002)。

P-01

高结晶度黄色荧光共价有机框架的制备及其静电纺丝纳米纤维膜 用于两性霉素 B 的荧光-比色检测与吸附

王明月, 高蝶*

(西南医科大学药学院, 泸州, 四川, 646000, *E-mail: gaodie_1203@126.com)

本研究介绍了一种高结晶性黄色荧光共价有机框架 (COF-W) 及其静电纺丝纳米纤维膜 (COF-W-PP), 用于同步检测与吸附两性霉素 B (AMB)。COF-W 通过 3,6-二氨基吡嗪 (DAC) 与 2,5-二甲氧基对苯二甲醛 (DMTP) 的席夫碱缩合反应合成, 形成具有 D- π -A 结构的框架, 借助分子内电荷转移 (ICT) 效应产生荧光。其多孔骨架与亚胺键可通过氢键和 π - π 相互作用特异性捕获 AMB, 破坏 ICT 平衡, 导致荧光猝灭和颜色变化, 由此构建了荧光/比色双模式检测平台。通过在不荧光滤纸上将 COF-W 掺入 PVP/PVDF 聚合物基质, 制备了静电纺丝 COF-W-PP 膜, 显著提升了材料稳定性和实用性能。COF-W 对 AMB 展现出高选择性, 检测限 (LOD) 为 $0.02 \mu\text{M}$, 最大吸附容量达 $379.98 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ 。在实际水样和血浆样品中, 其检测回收率为 $79.38\%\sim 114.39\%$, 吸附效率超过 91% 。COF-W-PP 膜呈现清晰的比色响应: 颜色梯度随 AMB 浓度升高而加深, 结合智能手机分析软件可实现快速现场检测。机理研究表明, 多重氢键、静态猝灭、光诱导电子转移 (PET) 和内部过滤效应 (IFE) 协同驱动识别与猝灭过程。此外, COF-W 还展现出良好的生物相容性与低细胞毒性, 为其在生物样本及活体分析中的应用提供了可能。

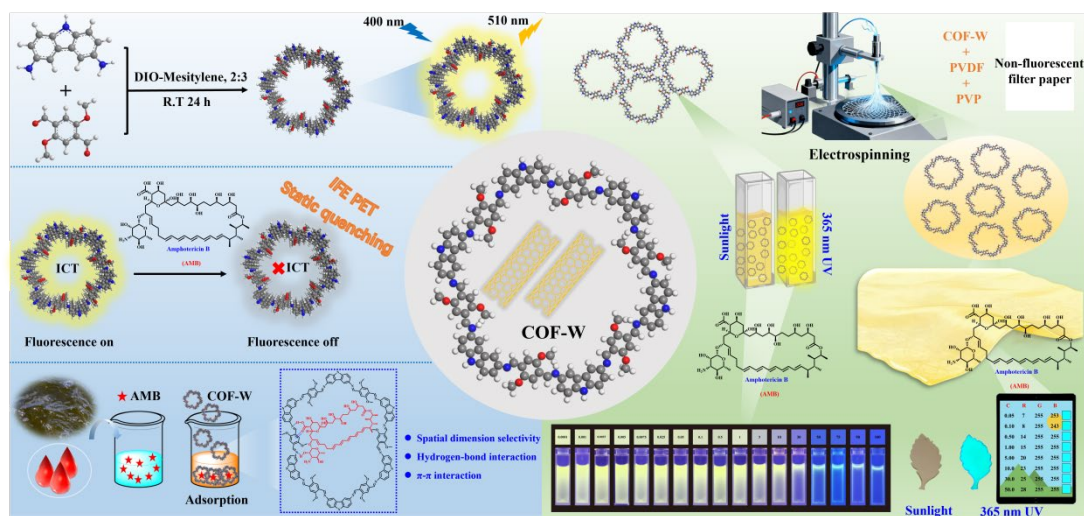


图 1 COF-W 和 COF-W-PP 膜的制备和应用过程

P-02

MXene@TiO₂ 固相微萃取涂层结合 LC-MS/MS 测定血清中溶血磷脂酰胆碱和磷脂酰胆碱侯卓悦¹, 赵迪¹, 张晨晴¹, 胡锴^{1,*}¹河南中医药大学, 河南, 郑州 450046Email: hk5268@126.com

脂质因其特殊的理化性质而参与多种生物学功能, 在构成细胞屏障、细胞信号转导、体内能量储备以及调控生长发育等生物过程中发挥重要作用¹。近年来, 代谢组学与脂质组学研究表明, 磷脂类化合物的代谢异常与 AD、抑郁症和糖尿病等多种疾病的发生与发展密切相关²⁻³, 特别是 LPCs 和 PCs 的代谢紊乱通过多种途径参与 AD 的病理进程。因此, 建立生物样本中内 LPCs 和 PCs 的精确定量分析方法, 检测和分析不同群体中 LPCs 和 PCs 浓度水平, 对 AD 的早期预测和临床诊断具有重要意义。

本研究合成一种 MXene@TiO₂ 复合材料, 将其作为 SPME 的涂层材料, 建立了一种 SPME-UPLC-MS/MS 联用分析方法, 用于 AD 患者和健康对照者血清样本中的 6 种 LPCs 和 2 种 PCs 的定量分析, 在 0.01-40 $\mu\text{g mL}^{-1}$ 范围内线性关系良好, 相关系数 $R^2 \geq 0.9917$; 检出限 (LODs, S/N=3) 为 0.03-0.24 ng mL^{-1} , 定量限 (LOQs, S/N=10) 为 0.09-0.72 ng mL^{-1} ; 日内精密度 (n=6) 和日间精密度 (n=3) 分别为 3.2-9.9% 和 2.9-10.7%; 加标回收率为 80.9-119.5%, RSDs 为 0.8-16.9%。结果表明, 该方法适用于复杂生物基质中 LPCs 和 PCs 的定量检测, 为 AD 的磷脂代谢研究提供了可靠的分析手段。

关键词: 固相微萃取; LC-MS/MS; 溶血磷脂酰胆碱; 磷脂酰胆碱;

参考文献:

1. HU C, WANG M, HAN X. Shotgun lipidomics in substantiating lipid peroxidation in redox biology: Methods and applications[J]. Redox Biology, 2017, 12: 946-955.
2. HAN X. Multi-dimensional mass spectrometry-based shotgun lipidomics and the altered lipids at the mild cognitive impairment stage of Alzheimer's disease[J]. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular and Cell Biology of Lipids, 2010, 1801(8): 774-783.
3. MAPSTONE M, CHEEMA A K, FIANDACA M S, et al. Plasma phospholipids identify antecedent memory impairment in older adults[J]. Nature Medicine, 2014, 20(4): 415-418.

P-03

环糊精增敏的磁性低共熔溶剂分散液液微萃取富集水样中的抗抑郁药

杨丽, 冯哲坤, 冯新慈, 胡爽*

山西医科大学药学院

通讯联系人 E-mail: hurrah3743@163.com

抗抑郁药物残留在水生环境中广泛存在, 对生态系统和人类健康构成潜在风险^[1], 因此需要开发高效的样品前处理方法以实现其痕量分析。磁性低共熔溶剂 (MDES) 作为一类有前景的萃取剂, 无需离心即可实现相分离^[2]; 然而, 其对疏水性差异较大的多种分析物的萃取效率有待进一步提高。

本研究制备了一种掺杂大环分子的MDES, 并将其作为萃取剂, 结合涡旋辅助分散液液微萃取 (VA-DLLME) 与高效液相色谱-紫外检测 (HPLC-UV), 用于环境水样中六种抗抑郁药物 (包括米氮平、西酞普兰、去甲替林、氯米帕明、帕罗西汀和氟西汀) 的富集和测定 (图1)。该萃取剂兼具MDES的顺磁性和 β -环糊精衍生物的分子包含能力。在最优萃取条件下, 该方法表现出良好的线性 ($r > 0.9986$)、较低的检测限 (0.1 或 0.2 ng·mL⁻¹) 和高精密度 ($RSD \leq 9.7\%$)。富集倍数在57至258之间, 相较于纯MDES提高了101%~125%, 尤其对疏水性较弱的分析物萃取效果显著增强。

本研究在将顺磁性分离与超分子识别相结合。 β -环糊精衍生物的引入提高了萃取性能, 并扩展了MDES在复杂水基质中痕量抗抑郁药物监测中的适用性, 该方法具有简便、快速、无需离心和高效等特点。

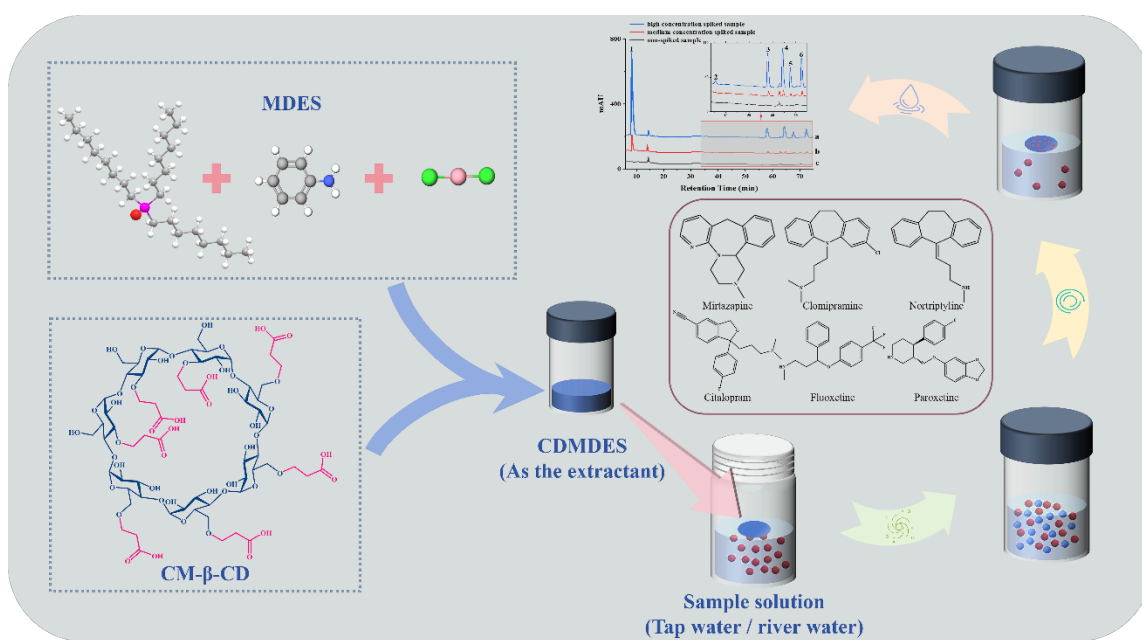


图1 萃取流程示意图

参考文献:

1. M. Angel Aguirre, A. Canals, *Trac-Trends Anal. Chem.*, **2022**, 146, 116500.
2. F. Mohamadpour, F. Mohamadpour, *Sustain. Environ. Res.*, **2024**, 34(1), 8.

P-04

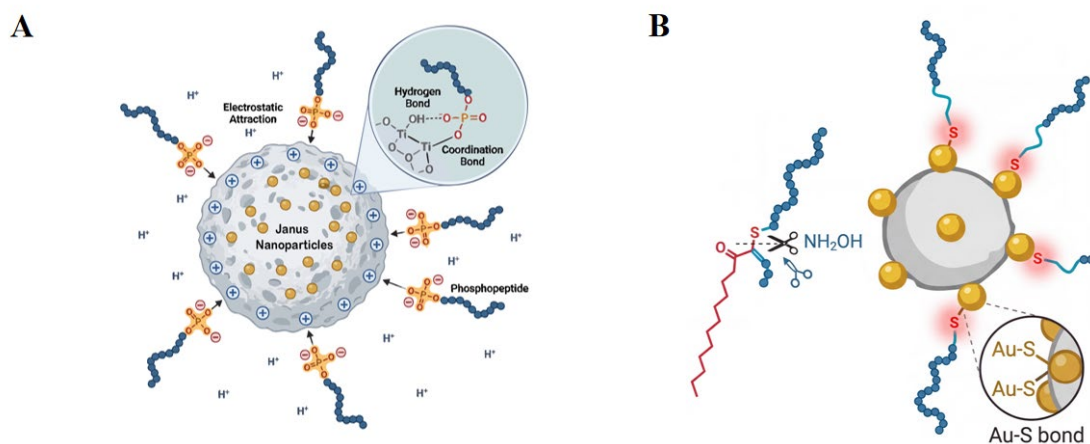
TiO₂-Au Janus 双功能富集：肺癌外泌体磷酸化与棕榈酰化蛋白质组学分析

胡博, 仰俊伟, 王子瑞, 郑海娇*, 贾琼*

吉林大学化学学院

通讯联系人 E-mail: hjzheng@jlu.edu.cn, jiaqiong@jlu.edu.cn

本研究设计并制备了一种具有不对称结构的 TiO₂-Au Janus 纳米复合材料, 旨在实现对复杂生物样本中磷酸化肽段和棕榈酰化肽段的高选择性、高灵敏度双重富集。通过 pH 调控的静电自组装策略, 成功制备了系列具有不同 Au 负载密度的 Janus 材料。经条件优化, 具有低 Au 负载的 Janus II 在酸性条件下 (pH 2.5) 对磷酸化肽段表现出优异的静电吸附与配位富集能力; 而高 Au 负载的 Janus IV 在中性至弱碱性条件下通过 Au-SH 共价键特异性捕获棕榈酰化肽段。理论计算进一步揭示了 TiO₂ 表面与磷酸基团的多齿配位作用以及 Au 表面与半胱氨酸巯基的特异性结合机制。在标准蛋白体系中, 该方法对两类修饰肽段的检测限低至 0.1 fmol/μL, 并在 5000 倍过量干扰蛋白下保持高选择性及良好的可重复使用性 (7 次循环)。进一步将该材料应用于肺癌患者与健康个体血清外泌体的对比分析, 结合 LC-MS/MS 技术, 成功富集并鉴定到在肺癌病理进程中发挥关键作用的磷酸化与棕榈酰化蛋白, 为肺癌生物标志物的发现提供了新的技术平台与潜在靶点。



P-05

Antibody-Free Exosome Enrichment and SERS Detection Strategy Based on TiO_2 -Phospholipid Affinity

Zuotong Shi¹, Xu Yin, Yuncong Cao, Tongtong Li, Mingshi Jin*.

Department of Chemistry (College of Science), Yanbian University, Yanji133002, Jilin, China

*Email: msjin1231@163.com

To address the high cost and operational complexity associated with antibody- or aptamer-dependent exosome capture methods, this study leverages the natural affinity between titanium dioxide (TiO_2) and phospholipid bilayers to construct a surface-enhanced Raman scattering (SERS) detection platform that requires no biological recognition elements. First, a gold nanoparticle-decorated TiO_2 nanotube array (AuNPs/ TiO_2 NTAs) was fabricated via anodic oxidation. This material integrates two functions: efficient exosome enrichment and high SERS activity. Enrichment relies on the strong affinity of TiO_2 toward phosphate groups of phospholipids, combined with the size-exclusion effect of the nanotube structure, while the deposited AuNPs provide a high SERS response. Using rhodamine 6G as a model molecule, the nanotube length and gold loading were systematically optimized to achieve the best SERS performance. Second, a core-shell SERS probe (AuNPs@4-NTP@ TiO_2) was synthesized via a sol-gel method. In this design, the inner AuNPs amplify the Raman signal, the intermediate 4-nitrothiophenol (4-NTP) serves as a stable signal reporter with characteristic peaks, and the outer TiO_2 shell not only enables secondary capture of exosomes but also prevents leakage of the reporter molecule, ensuring long-term signal stability. The material morphology was optimized by adjusting the ratios of titanium tetraisopropoxide, water, and acetic acid, and the resulting probes were characterized using SEM, TEM, EDS, and zeta potential measurements. Fluorescence labeling experiments further confirmed the exosome-capturing ability of the probes. Finally, the two materials were assembled into a “capture substrate-exosome-SERS probe” sandwich structure, achieving successful exosome recognition and signal readout. This method completely avoids the use of antibodies and aptamers, significantly reducing both detection cost and operation time, and provides a simple, stable, and easily scalable new strategy for exosome analysis.

References:

- [1] S Zheng, et al., *Analytical Chemistry*, 2025, 97, 6320-6328
- [2] N Rahimi, et al., *Progress in Solid State Chemistry*, 2016, 3, 86-105
- [3] L He, et al., *Talanta*, 2025, 127545, 0039-9140
- [4] X Ma, et al., *Int J Nanomedicine*, 2021, 16, 7575-7608.

P-06

界面增强的无标记 FeOOH-介孔 TiO₂纳米复合材料生物传感器用于高灵敏外泌体检测及癌症鉴别

周铂凯, 刘书言, 庞云聪, 李彤彤, 金明实*

延边大学 理学院 化学系

通讯联系人 E-mail: msjin1231@ybu.edu.cn

基于外泌体的液体活检在癌症诊断中潜力巨大, 电化学生物传感器凭借高效、灵敏及操作简便等优势, 已成为生物样本检测领域的重要工具。为此, 本研究开发了一种基于 FeOOH-介孔 TiO₂ (FeOOH-mTiO₂) 的新型电化学生物传感器, 用于血清中外泌体的无标记检测。该传感器通过精密界面结构设计, 有效解决了外泌体分析中高捕获效率与高检测灵敏度难以兼顾的关键难题。该复合材料由 FeOOH 与介孔 TiO₂ 复合而成, 其中介孔结构的高比表面积为 TiO₂ 与外泌体膜上磷酸基团之间的特异性相互作用提供了丰富的结合位点。同时, 该设计促进了 Ti-O-Fe 界面键的形成, 增强了电子转移, 显著改善了电化学响应。该传感器无需抗体捕获或复杂表面修饰, 即可实现宽检测范围和低检测限。临床测试结果显示, 肝细胞癌与结直肠癌患者血清中的外泌体水平显著高于健康对照组。本研究通过创新的材料设计, 推动了外泌体液体活检技术的发展, 展现出在癌症临床诊断与监测中的广阔应用前景。

参考文献:

1. L. He, *Talanta.*, **2025**, 286, 127545.
2. D Dudzik, S Macioszek, et al, *Trends in Analytical Chemistry.*, **2021**, 143, 116382-116401.
3. L Keller, K Pantel, *Nature Reviews Cancer.*, **2019**, 19, 553-567.
4. A S Kulkarni, Lin Huang, et al, *J. Mater. Chem. B*, **2021**, 9, 3622-3639.

P-07

人参挥发性组分全分析及其对 NIH/3T3 细胞抗衰老研究

赵锦花¹, 金香子², 朴惠兰¹, 李东浩^{2*}¹ 延边大学分析测试中心, 吉林 延吉 133002² 延边大学理学院化学系, 农产品质量与安全评价吉林省高校重点实验室, 吉林 延吉, 133002E-mail:dhli@ybu.edu.cn 通讯联系人 E-mail: dhli@ybu.edu.cn

人参 (*Panax ginseng* C.A. Meyer) 作为中国传统名贵道地药材, 其品质受产地环境、栽培年限及药用部位等多重因素影响。挥发性组分作为其重要的次生代谢产物, 不仅决定了人参的特征香气, 更是其产地溯源与质量评价的核心标志物。本研究旨在建立高效的人参挥发性组分全谱解析体系, 并通过及其在细胞模型中的抗衰老生物学效应评价, 验证了物质基础差异所带来的生物学功能差异。利用气液微萃取 (GLME) 技术结合气相色谱-质谱联用 (GC-MS) 对不同产地、年份及部位的人参样品进行挥发性组分全分析, 并运用主成分分析 (PCA) 和偏最小二乘判别分析 (PLS-DA) 等化学计量学方法成功构建了产地鉴别模型, 根据 VIP 值筛选出在产地、年份、部位鉴别中贡献度大的标志物化合物。在生物学功能验证方面, 通过构建 H₂O₂ 诱导的 NIH/3T3 细胞衰老模型, 系统评估了不同年份人参精油对细胞抗衰老保护作用。结果显示, 人参挥发性组分能显著抑制细胞衰老并缓解皮肤光衰老损伤, 其中 26 年生人参精油抗衰老效果最为显著。蛋白印迹 (Western Blot) 检测证实, 其作用机制主要通过上调 Sirt1、PGC-1 α 的表达水平而起到干预细胞衰老, 进一步促进 PARP1 的激活, 同时抑制 NLRC4 炎症小体的表达, 从而实现抗氧化与抗炎的双重防护。综上所述, 本研究实现了人参挥发性组分从“全谱解析”到“功能验证”的系统化研究, 为人参品质评价、真伪鉴别及其在化妆品领域的应用开发提供了坚实的科学依据。

关键词: 人参; 气液微萃取; 挥发性组分; NIH/3T3 细胞; 抗衰老

参考文献

- 1.X. Xan, ,,,, X. Wang, *Biomed. Chromatogr.*, **2018**, 1, 1-10.
- 1.Gu Y, Han J, Jiang C, et al, *Ageing Research Reviews*, **2020**,59: 101036-101047
- 2.Lee J, Ng S, Hsu J, et al, *International Journal of Molecular Sciences*, **2022**, 23(3): 1387-1401.
- 3.Hu Z, Zhou Q, Zhang C, et al, *Science*, **2015**, 350(6259): 399-404.
- 4.Potenza M A, Montagnani M, Santacroce L, et al, *Journal of Ginseng Research*,**2023**, 47(3): 359-365.

P-08

离子有机框架材料用于氢同位素的高选择性分离

王娟娟¹, 陈佳^{1*}, 邱洪灯^{1,2*}¹中国科学院西北植物资源化学重点实验室, 甘肃省天然药物重点实验室, 中国科学院兰州化学物理研究所, 兰州 730000;²中国科学院赣江创新研究院稀土重点实验室, 赣州 3410001

*E-mail: jiachen@licp.cas.cn; hdqiu@licp.cas.cn

氘(D)与氢(H)同位素在科学及工业应用中具有重要作用。然而, 两者的物理化学性质几乎完全相同, 使得它们的分离非常困难¹。基于多孔材料的动力学量子筛分(KQS)为D₂/H₂的分离提供了一种有效的方法²。尽管已有碳分子筛、沸石、多孔有机笼、金属有机框架(MOFs)及共价有机框架(COFs)等多孔材料被报道用于D₂/H₂的分离, 但实现亚纳米尺度孔径的精确调控仍然十分困难³。因此, 发展具有超微孔结构的新型框架材料成为该领域的一项迫切需求。

本研究以四苯乙烯(TPE)衍生的多齿咪唑盐和磺酸为合成砌块, 通过阳离子- π 相互作用辅助离子键合策略, 在绿色溶剂中成功合成了离子有机框架(IOFs)材料。IOFs具有狭窄且均匀的超微孔结构及较高的比表面积, 展现出优异的氢同位素(H₂和D₂)分离潜力。通过动力学量子筛效应进行分离实验, 其D₂/H₂选择性达到了前所未有的12.7。本研究不仅拓展了除MOFs、COFs和HOFs之外的框架材料新维度, 也为合成具有高选择性分离氢同位素的多孔材料提供了一种新思路。

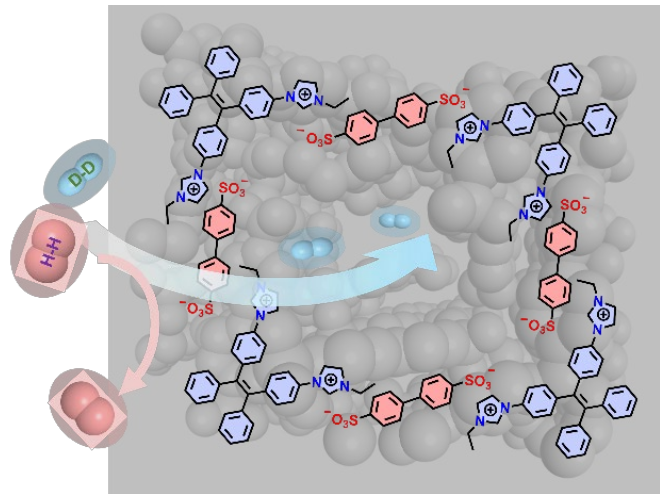


图1 离子有机框架材料对氢同位素的高效分离

参考文献:

- [1] Kim, J. Y.; Balderas-Xicohtencatl, R.; Zhang, L.; Kang, S. G.; Hirscher, M.; Oh, H.; Moon, H. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 15135-15141.
- [2] Liu, M.; Zhang, L.; Little, M. A.; Kapil, V.; Ceriotti, M.; Yang, S.; Ding, L.; Holden, D. L.; Balderas-Xicohtencatl, R.; He, D.; Clowes, R.; Chong, S. Y.; Schütz, G.; Chen, L.; Hirscher, M.; Cooper, A. I. *Science* **2019**, *366*, 613-620.
- [3] Nam, J.; Cho, C.; Jung, S.; Jung, M.; Kim, Y.; Hong, Y.; Lee, S.; Oh, H.; Choe, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202420379.

P-09

基于微流控在线衍生化 UPLC-MS/MS 同步检测活体脑脊液中神经递质与烟碱类化合物的方法

王红娟, 崔利利, 田雨闪, 李晓, 宋政, 韩书磊, 陈欢*

国家烟草质量监督检验中心

通讯联系人 E-mail: redbri2013@163.com

本研究旨在开发一种高效、自动化的分析方法, 以解决传统检测神经递质与烟碱类化合物时前处理繁琐、时效性差且无法同步定量的难题, 最终实现对活体动物脑脊液中多目标物的动态监测。通过构建微流控芯片在线衍生化系统, 将待测样品与 100 mM 碳酸钠水溶液、2% 苯甲酰氯乙腈溶液、混合氘代内标溶液 (工作浓度 30 ng/mL) 按体积比 1:2:2:1 自动混合, 衍生化后的溶液通过六通阀直接联用超高效液相色谱-质谱仪进行分析。色谱分离采用 Discovery HS F5-3 色谱柱 (15 cm × 2.1 mm, 3 μm), 流动相为 A (10 mM 甲酸铵+0.1%甲酸水溶液) 和 B (0.1%甲酸乙腈溶液), 进行梯度洗脱 (0-10 min, B 相 10%→90%→10%)。质谱检测使用电喷雾正离子源和多反应监测模式, 鞘气流速 12 L/min, 雾化气温度 130 °C。应用验证以大鼠为模型, 腹腔注射烟碱 (0.5-1 mg/kg) 后, 通过微透析导管收集脑脊液样品。结果表明, 该方法成功实现了对 19 种目标化合物 (包括 11 种神经递质如多巴胺、5-羟色胺, 以及 8 种烟碱类化合物如烟碱、可替宁) 的同步检测, 分析时间不超过 10 min。方法学性能优异: 线性范围宽 (0.1-100 ng/mL, $R^2 > 0.989$), 加标回收率良好 (80.13-117.5%), 日内和日间精密度高 ($RSD \leq 12.71\%$), 且具有高灵敏度 (检出限 LOD 为 0.006-0.743 ng/mL, 例如 5-羟色胺 LOD 低至 0.006 ng/mL)。关键技术优化包括使用玻璃注射器替代塑料注射器消除了流速误差, 以及采用含甲酸铵的流动相显著改善了峰形与响应。在活体应用层面, 该方法成功实现了对烟碱刺激下大鼠脑脊液内神经递质 (如多巴胺浓度变化 $RSD < 4.3\%$) 动态变化的实时监测。本研究建立的微流控在线衍生化-UPLC-MS/MS 联用方法, 实现了神经递质与烟碱类化合物的同步、自动化检测, 规避复杂前处理; 具备高灵敏度与高精密度; 为活体动物脑内化学物质动态监测提供了可靠工具, 适用于神经药理与环境毒理学研究。

参考文献:

1. J. Le, Z. Lin, L. Song, H. Wang, Z. Hong, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2019**, 176, 112807.
2. Y. Xu, Q. Zhang, P. Li, G. Hong, D. Wang, J. Liu, H. Zhou, G. Chai, B. Lu, S. He, W. Zhang, S. Sun, J. Zhang, J. Mao, *Anal. Chem.*, **2019**, 91(4), 2916-2922.
3. M. Zhu, L. Cui, G. Liu, P. Yu, Q. Hu, H. Chen, H. Hou, *Anal. Methods*, **2024**, 16(24), 4010-4012.

P-10

基于构效关系的金属有机框架复合材料在固相微萃取中的应用

张震, 张新中, 陈姬云, 张婕, 王雪梅*

高原交汇区水资源安全与水环境保护教育部重点实验室

西北师范大学化学化工学院

E-mail: zhangzhqr@163.com

近年来, 金属有机框架材料(MOFs)及其复合材料因其微观结构可调、功能性丰富、孔隙率高、比表面积大等优点而被广泛应用于各类污染物的吸附和去除。以MOFs为基底构筑的多功能化复合材料, 在固相微萃取等样品前处理领域中均能展现出数倍于母体材料的性能优势。然而, 随着材料制备技术的持续革新与发展, 材料间的简单复合已经无法满足人们对于材料性能提升的要求。其中, 以MOFs作为结构基底, 通过功能组分的定向复合与空间结构的精准设计, 可为复合材料提供良好的刚性支撑骨架、优异的水稳定性以及丰富的吸附活性位点, 进而在吸附容量、传质效率、稳定性以及独特时空吸附特性等方面展现出独特优势^[1, 2]。

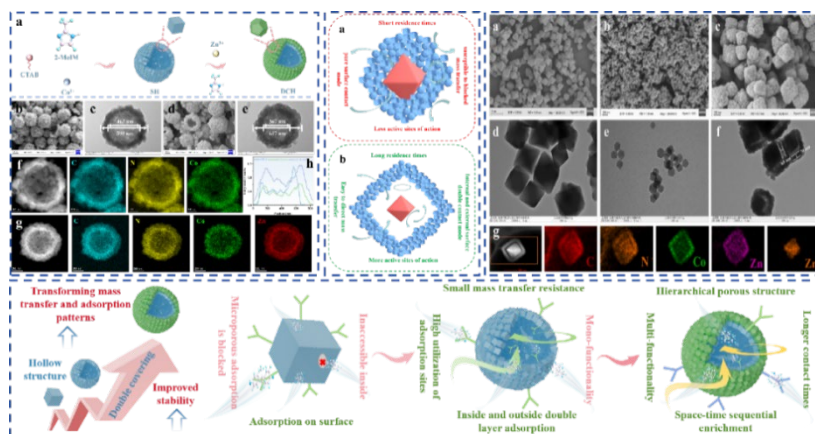


图1 基于构效关系的金属有机框架复合材料在固相微萃取中的应用

在现有研究基础上, 在复合材料设计中系统考虑各组间的功能化和空间结构配置关系, 不仅可实现材料间的功能互补与有效整合, 还能产生超越单一组分性能的空间协同增强效应。例如, 具有中空或蛋黄-壳等特殊结构的复合材料, 在传质效率、活性位点可利用性以及时空吸附行为等方面, 均显著优于传统实心或普通核壳结构材料。这种结构调控可显著改变材料的吸附模式与传质路径, 从而通过结构设计实现性能的定向提升(图1)。因此, 复合材料性能优化策略已不再局限于传统“1+1>2”的简单叠加思路, 而是逐步发展为基于“1+1>>2”构效关系的结构导向型复合设计, 即通过精细调控材料结构以实现效能的大幅跃升^[3, 4]。

参考文献:

1. Z. Zhang, J. Zhang, X. Wang*, X. Zhang, W. Li, D. Xu, X. Du, X. Lu, *Small*, **2025**, 21(35), 2506627.
2. X. Wang*, Z. Zhang, J. Ru, P. Huang, Y. Ma, J. Zhang, X. Du, X. Lu, *Sep. Purif. Technol.*, **2025**, 328, 125041.
3. Z. Zhang, X. Wang*, J. Zhang, X. Zhang, J. Liu, X. Du, X. Lu, *Talanta*, **2024**, 278, 126474.
4. Z. Zhang, X. Wang*, J. Liu, J. Zhang, W. Li, D. Xu, X. Du, X. Lu, *Chem. Eng. J.*, **2025**, 522, 167543.

P-11

基于三嗪基有机分子笼-冷辅助顶空固相微萃取的尿液中超痕量液晶单体高灵敏检测方法

刘雪松^{1,2}, 朱泽宇¹, 闫宏远^{1,2*}¹ 新型药物制剂与辅料全国重点实验室, 河北大学化学与材料科学学院, 保定, 071002² 药物化学与分子诊断教育部重点实验室, 河北大学药学院, 保定, 071002*E-mail: yanhy@hbu.edu.cn

液晶单体 (LCMs) 可通过呼吸吸入、皮肤接触和饮食摄入等途径进入人体, 具有持久性、生物累积性和潜在毒性, 已引发广泛关注¹, 但复杂生物基质中超痕量 LCMs 的高灵敏检测仍然存在不足。近年来气相色谱-质谱 (GC-MS) 和液相色谱-质谱 (LC-MS) 已用于 LCMs 检测, 但生物样品基质复杂, 目标物含量低, 需要合适的样品前处理技术实现超痕量 LCMs 的高效净化和萃取富集。本研究针对商业化微萃取纤维传质速率低、萃取效率不足等问题, 设计合成了三嗪基多孔有机分子笼 (T-POC) 微萃取涂层, 利用多孔有机分子笼的离散结构、高热稳定性和强疏水性特点, 实现了 LCMs 的快速传质和高效萃取。在 T-POC 微萃取涂层的基础上, 开发了新型冷辅助顶空固相微萃取技术 (CA-HS-SPME), 降低萃取涂层的温度从而提高吸附容量和富集效果², 相较于常规 HS-SPME, 萃取富集效率提升了 6-52%; 该装置采用循环液体制冷设备, 实现了制冷温度的精准可控调节。本研究开发的 T-POC-CA-HS-SPME-GC-MS 方法具有灵敏度高 (定量限为 1.5-8.9 pg mL⁻¹), 精密度高 (RSD ≤ 10.3%), 准确度高 (78.5-105.7%), 富集效果显著 (富集因子为 2911-5537) 等特点, 成功用于尿液样品中痕量 LCMs 的灵敏检测, 为环境健康风险监测提供了可靠的检测技术手段³。

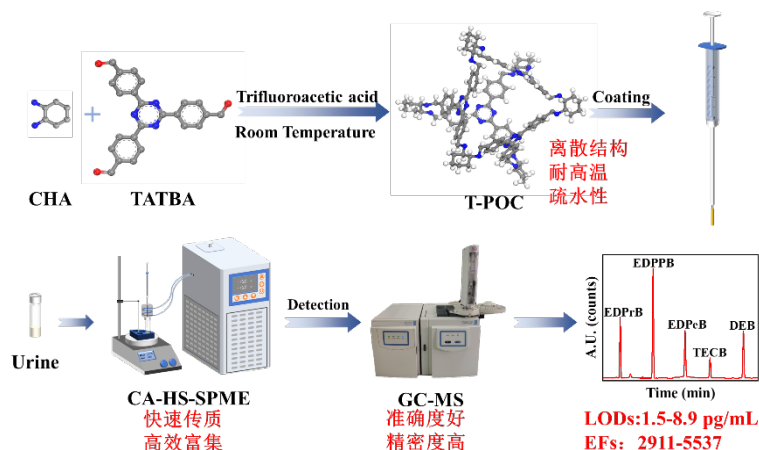


图1: T-POC制备和LCMs检测流程图

参考文献:

1. X. Li, P. Li, L. Li, J. Yin, H. Yan, *Environ. Health*, **2025**, 3(10), 1125-1138.
2. P. Li, L. Wang, H. Ma, J. Yin, H. Yan, *Sep. Purif. Technol.*, **2025**, 378, 134522.
3. X. Liu, M. Wang, L. Bai, Y. Han, H. Yan, *Anal. Chem.*, **2026**, 98(4), 3316-3325.

国家自然科学基金项目 (82373634, 82073605); 河北大学创新团队计划项目 (IT2023A06); 河北省矿产资源与生态环境监测重点实验室开放课题项目 (HBMREEM202401) 资助。

P-13

磁性羧基化超交联有机聚合物用于对水中多环芳烃和阳离子型农残的分类萃取和检测

马雪¹, 付蒙蒙¹, 王楠¹, 赵文杰^{1*}, 张书胜^{2*},

河南工业大学 化学化工学院, 河南 郑州, 450001

郑州大学 化学学院, 郑州, 450001

*E-mail: wjiezhang@126.com; zsszz@126.com

关键词: 羧基化多孔材料、分类萃取、磁性固相萃取、多环芳烃、阳离子农残

设计制备一种磁性羧基功能化的超交联聚合物, 以 1, 4-亚苯基二乙酸为反应单体, 1, 4-对二氯苄为交联剂, 无水 FeCl_3 为 Friedel-Craft 反应催化剂, 基于自下而上的策略, 首先制备了羧基化超交联微孔有机聚合物, 再将三氯化铁作为铁源, 将生成的 Fe_3O_4 磁性纳米粒子锚定在微孔材料上制备了磁性羧基化超交联有机聚合物复合材料。三氯化铁在反应过程中一物两用, 符合绿色化学特征。采用红外光谱、 ^{13}C 固体核磁、扫描和透射电镜、氮气吸附、磁滞回线等技术对磁性复合材料的结构、形貌、表面积和磁响应强度等性质进行表征。将其用作混合模式固相萃取吸附剂, 用于萃取环境水样中 15 种多环芳烃和 4 种季铵盐类阳离子型农药, 通过对萃取和洗脱等因素条件进行优化, 实现了水中多环芳烃和季铵盐类阳离子型农药同时萃取和分步洗脱分类, 结合 GC-MS 和 HPLC-MS/MS 技术, 建立了环境水样中多环芳烃和阳离子农残的分析新方法, 多环芳烃的检出限低至 $0.8\text{--}7.9\text{ ng}\cdot\text{L}^{-1}$, 实际样品的加标回收率为 79.5%-109.4%, RSD 为 1.1%-14.3%。阳离子农残的检出限为 $0.02\text{--}16.31\text{ ng}\cdot\text{L}^{-1}$, 实际样品的加标回收率为 89.4%-103.2%, RSD 为 2.9%-5.8%。

P-14

基于花状双手性 D-His-ZIF-L@BSA 的协同手性识别用于手性药物中间体的高对映选择性分离

马雪¹, 王楠¹, 于阿娟², 赵文杰^{1*}, 张书胜²,

河南工业大学化学化工学院, 河南郑州, 450001

郑州大学化学学院, 郑州, 450001

*E-mail: wjiezh@126.com

关键词: 花状纳米复合材料; 牛血清白蛋白固定化; D-His-ZIF-L; 对映选择性分离; 手性药物中间体。

双手性协同分离策略是提升手性选择剂对映选择性的一种极具潜力的方法。本研究通过共价固定法首次构建了花状双手性复合材料 D-His-ZIF-L@BSA。该设计将牛血清白蛋白 (BSA) 固有的对映选择性与手性金属有机框架 D-His-ZIF-L 所提供的结构稳定性和丰富手性微环境进行协同整合, 进而实现协同手性识别。系统表征结果证实该花状手性复合材料已成功制备。研究全面考察了影响对映体拆分效果的关键因素, 对照实验验证了 D-His-ZIF-L 与 BSA 之间的协同作用是提升对映分离性能的核心所在。将该复合材料用于分离官能团相似但分子尺寸不同的手性药物中间体 1,1'-联-2-萘酚 (1-BINOL) 与 1-苯乙醇 (1-PE) 时, 其表现出良好的对映选择性, 对映体过量值 (ee) 分别为 33.63% 和 100%, 且呈现出显著的立体选择性反转现象。值得注意的是, 1-苯乙醇的分离可在 60 秒内达到平衡。本研究为开发高效稳定的蛋白基双手性分离材料提供了全新策略。

P-15

径向孔道结构可控的核壳型二氧化硅微球可控制备关键技术研究

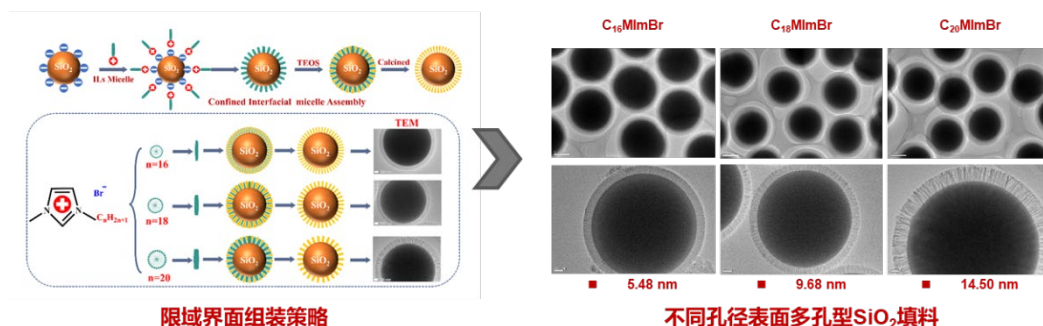
全凯军, 杨小敏, 邱洪灯*, 陈佳*

中国科学院兰州化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: quankj@licp.cas.cn; hdqiu@licp.cas.cn; jiachen@licp.cas.cn

以二氧化硅为代表的高性能单分散微球是现代高效色谱分离技术的核心与基石, 既是推动色谱技术向更高性能发展的关键材料, 也是实现复杂样品精准分离的根本保障。而微球孔径结构的精确可调性则进一步实现了分离性能的质变, 通过孔道设计匹配分析物尺寸并优化传质路径, 已成为突破宽分子量样品高效分离瓶颈、实现高通量与高分辨率兼得的关键技术核心。

基于此, 本课题组利用离子液体高度可设计的结构优势, 设计并合成了一系列不同烷基链长的咪唑离子液体新型致孔剂体系, 通过合理调控烷基链长度、用量和配比, 建立了一种多尺度、多层次的协同调控策略, 实现了径向孔道结构核壳微球的可控构筑, 其壳层厚度可在 50–300 nm、孔径可在 3–20 nm 范围内精细调节。在此基础上, 进一步开展了亚 2 微米核壳型色谱填料的制备工艺放大研究, 目前已实现百克级稳定制备, 为高性能色谱分离介质的开发奠定了材料基础。

图 1. 核壳型 SiO_2 孔径调控机理及结果表征图

基金项目: 国家自然科学基金 (No: 22104145); 甘肃省自然科学基金 (No. 25JRRA472); 兰州市青年科技人才创新项目 (NO.2025-QN-025)

参考文献:

- [1] Bei Liu, Yali Yang, Kaijun Quan, Jia Chen, Haixia Zhang, Hongdeng Qiu, Preparation of core-shell silica particles with tunable pore size by phenylethanol as swelling agent for chromatographic separation. *Mater. Lett.*, 2024, 364, 136343.
- [2] X. Yang[#], K. Quan[#], J. Wang, J. Liu, B. Liu, J. Chen, M. Guan, H. Qiu, Particle size and pore adjustment of dendritic mesoporous silica using different long alkyl-chain imidazolium ionic liquids as templates, *Micropor. Mesopor. Mater.*, 2022, 345, 112249.
- [3] Z. Liu[#], K. Quan[#], H. Li, J. Chen, M. Guan, H. Qiu, Preparation of silica-based superficially porous silica and its application in enantiomer separations: a review, *J. Anal. Test.* 5 (2021) 242-257.

P-16

重组蛋白 A 亲和层析分析柱的制备、表征及应用开发

葛远翔, 任兴发, 胡晓钧, 黄明贤, 通讯作者: 葛远翔

奕诺微(上海)分离技术有限公司

通讯联系人 E-mail: 236062214@mail.sit.edu.cn

本研究围绕重组蛋白A亲和层析相关色谱填料及色谱柱的制备、表征与应用开展系统研究, 依次开展蛋白A亲和层析柱、蛋白A分析柱的研发, 为生物大分子分离纯化提供工艺参考。研究首先开展重组蛋白A亲和层析柱制备与性能优化, 采用不同接枝工艺将两种重组蛋白A固定于层析基质, 通过动态载量、接枝率检测, 分析重组蛋白A类型及接枝工艺对层析柱性能的影响规律; 并以环氧活化琼脂糖为基质, 设计转化剂(乙二胺)用量、转化时间、蛋白A接枝用量及接枝时间为影响因素的四因素三水平正交试验, 明确各因素在重组蛋白A色谱填料制备中的作用, 优化填料制备工艺参数。同时, 设计并制备以大孔硅胶为基质的蛋白A分析型色谱填料, 通过“氨基化改性-丁二酸酐羧基化修饰-EDC/NHS介导原位键合”的分步修饰策略, 实现重组蛋白A在硅胶基质表面的高效接枝, 进而装填为分析型色谱柱。以兔IgG为目标检测物, 对该分析柱的检测性能进行表征, 对检测工艺进行优化, 并确定其线性范围, 验证了硅胶基蛋白A分析柱在生物大分子检测中的应用可行性, 并采用其他厂家的十八烷基色谱柱对兔IgG和蛋白A、其他厂家的蛋白A柱对兔IgG和抗体样品进行分析。本研究不仅优化了重组蛋白A亲和层析填料的制备工艺, 还开发出硅胶基蛋白A分析型色谱填料, 为亲和层析及分析色谱在生物大分子分离检测领域的应用提供了工艺依据与材料支撑。

1. Wu Y., Zhang N., Luo K., et al, *Trends in Analytical Chemistry*, **2022**, 153(0), 116647.
2. Liu H. F., Ma J., Winter C, *mAbs*, **2010**, 2(5), 480-499.
3. Demir F., Albarri R., Unal D. O., *Current Pharmaceutical Analysis*, **2025**, 20(8), 729-742.

P-17

混合模式 WCX 色谱柱在儿茶酚胺分析中的应用

杨松雪, 黄明贤, 任兴发*

奕诺微(上海)分离技术有限公司, 上海, 201000

*E-mail: renxingfa-enormicro@titansci.com

关键词: 弱阳离子交换(WCX)色谱填料; 硅胶改性; 儿茶酚胺; 高效液相色谱

弱阳离子交换(WCX)色谱填料在生物活性小分子分离分析中具有重要应用价值^[1], 尤其适用于儿茶酚胺等强极性、易离子化化合物的分离检测。针对目前高性能 WCX 填料依赖进口、传统聚合物基填料柱效低及机械稳定性差等问题, 以硅胶为基质, 设计并制备了一种新型硅胶基 WCX 色谱填料, 并系统研究其制备条件、结构表征及在儿茶酚胺分析中的应用性能。

研究采用“氨基化-酰化”步法制备硅胶基 WCX 色谱填料, 通过单因素实验优化氨基化、酰化反应的温度、时间、试剂配比等关键工艺参数, 同时引入两种苯基硅烷封尾剂进行表面修饰, 制备得到三种具有差异化结构的混合模式 WCX 色谱柱。利用元素分析、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)及热重分析等技术对填料进行全面表征, 结果证实功能基团成功键合于硅胶表面, 封尾处理可有效屏蔽残余硅羟基, 显著降低非特异性吸附, 提升填料的结构性、表面均一性, 同时增强对儿茶酚胺类化合物的分离选择性。采用高压匀浆法完成色谱柱装填, 以尿嘧啶、细胞色素 C 为探针评价柱性能, 验证了自制混合模式 WCX 色谱柱具备优良的离子交换能力与柱效。

以肾上腺素、去甲肾上腺素、多巴胺三种典型儿茶酚胺为研究对象, 系统优化流动相 pH 值、缓冲盐浓度、有机相比比例等色谱条件, 确定最优分离参数: 20 mM 磷酸钠缓冲盐-乙腈(92:8, v/v), pH=6.2, 流速 1.0 mL/min, 柱温 30 °C, 检测波长 280 nm。在此条件下开展分离性能对比实验, 结果表明: 未封尾 WCX 柱受残余硅羟基影响, 峰形不对称、分离度偏低; 两款苯基封尾 WCX 柱性能有所提升, 其中一款表现最优, 三种儿茶酚胺分离度最高达 4.952, 峰形对称、保留稳定, 洗脱顺序为肾上腺素 < 去甲肾上腺素 < 多巴胺。与商品化色谱柱对比, C18 柱依赖疏水作用, 对极性儿茶酚胺保留弱、组分重叠严重, 且流动相中需要加入离子对试剂, 对色谱柱损害极大; PFP 柱虽有一定选择性, 但杂峰较多、抗干扰能力差; 自制混合模式 WCX 色谱柱依托离子交换主导的多重作用机制, 实现了儿茶酚胺的高效、高选择性分离。

参考文献:

- [1] FRITZ J S. Early milestones in the development of ion-exchange chromatography: a personal account [J]. Journal of Chromatography A, 2004, 1039(1-2): 3-12.

P-18

生物医药色谱分析填料的研究与筛选

韩燕, 任兴发, 黄明贤*

奕诺微(上海)分离技术有限公司, 上海, 201000

E-mail: hmx-enormicro@titansci.com

生物医药主要包含生物大分子(如多肽、抗体、核酸等), 其色谱分离分析方法与传统小分子化合物有显著不同。生物大分子中官能团、化学组成、以及结构等方面的复杂性, 甚至维持其生物活性方面的考虑, 都需要设计不同类型的色谱填料并针对不同的生物大分子选择合适的色谱分析模式。本研究基于硅胶表面的键合、聚合、以及键合与聚合相结合的方式, 制备了一系列新型分子排斥色谱(Size Exclusion Chromatography, SEC)、离子交换色谱(Ion Exchange Chromatography, IEC)、疏水相互作用色谱(Hydrophobic Interaction Chromatography, HIC)、以及亲水相互作用色谱(Hydrophilic Interaction Chromatography, HILIC)等填料。通过对不同生物医药大分子色谱分析方法的建立, 展示了各种色谱填料与色谱模式的特点和适用性, 对生物医药色谱分析有一定的指导意义。

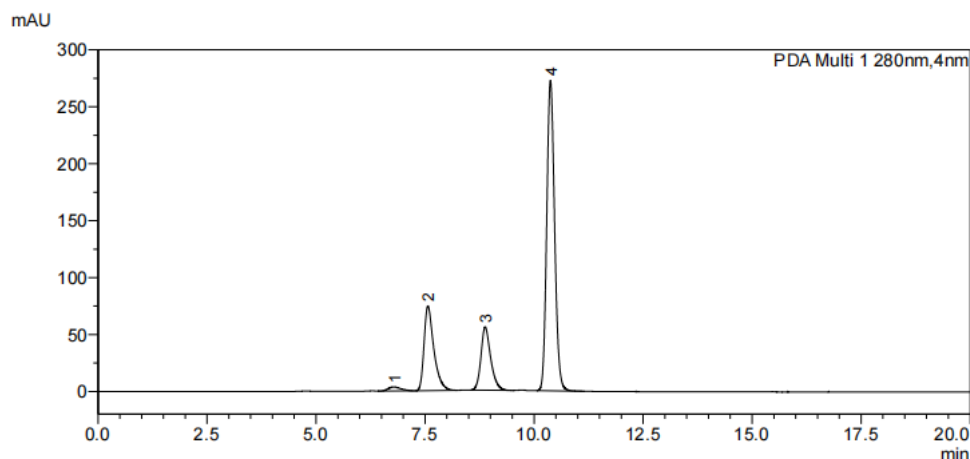


Fig. 1 SEC 柱测试蛋白谱图

1. 甲状腺球蛋白 2. 卵清白蛋白 3. 核糖核酸酶 A 4. 尿嘧啶

P-19

靶型凝胶电泳-激光诱导荧光联用平台构建及肝癌外泌体在线分离分析应用

李婉祯¹, 刘璐^{1*}, 李东浩^{1*}¹ 延边大学长白山天然药物研究教育部重点实验室通讯联系人 E-mail: dhli@ybu.edu.cn

摘要: 肝细胞癌具有显著的个体间及病灶内差异, 传统组织取样难以反映动态生物学特性¹。外泌体因物理尺寸与表面蛋白的双重多样性而携带反映疾病进程的特异性分子信息², 解析其异质性亚群具有重要意义。但传统方法难以同步实现外泌体亚群高分辨分离与在线灵敏检测。本研究构建靶型凝胶电泳-激光诱导荧光(LIF)检测器在线分离检测一体化平台, 利用环形非均匀电场质荷比分离效应以及凝胶分子筛效应³, 在 75 V 电压、1.0% 琼脂糖凝胶及 TBE 缓冲体系条件下实现肝癌外泌体精细分离; 通过 LIF 检测器捕获荧光标记亚群迁移行为⁴, 获得不同尺寸亚群的蛋白标记特征图谱。结果显示, FAM 标记的 PD-L1 适配体标记下, 肝癌外泌体呈现多峰分布且荧光信号显著, 而正常细胞外泌体无明显信号, 证实 PD-L1 在肝癌外泌体中特异性富集; 同一样本肝癌外泌体分别经 FITC-CD9 抗体与 FAM-PD-L1 适配体标记后, 发现 CD9 标记呈现连续宽峰, 而 PD-L1 标记呈现离散尖峰, 表明通用标志物与肿瘤特异性蛋白在不同尺寸亚群中的分布模式存在显著差异。本研究表明, 该联用平台可有效区分肿瘤来源与正常细胞来源外泌体, 并能解析同一样本外泌体中不同蛋白标志物的表达异质性, 为基于“尺寸-蛋白”特征的外泌体亚群精准识别提供了技术基础。

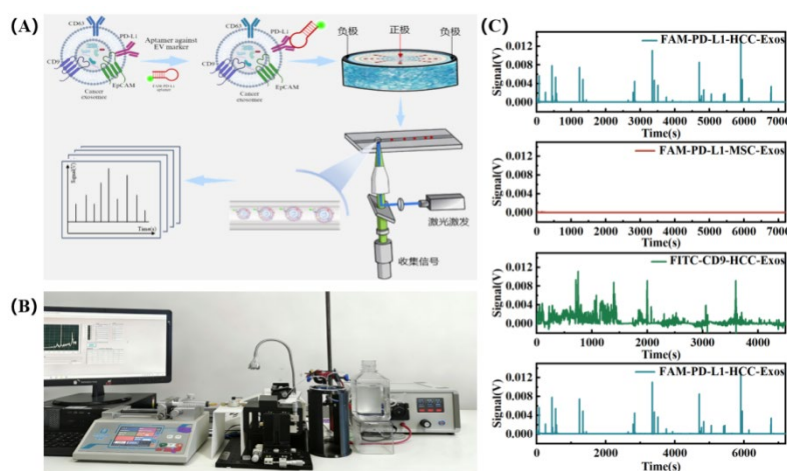


Fig. 1 (A) 在线分离检测外泌体原理图。(B) 在线分离检测一体化装置示意图。(C) 在线分离检测不同来源外泌体及不同蛋白标志物。

关键词: 凝胶电泳, 激光诱导荧光, 外泌体, 分离检测, 异质性分析

参考文献:

1. Y. Sun, L. Wu, YU. Zhong, et al. *Cell*, **2021**, 184(2): 404-421. e16.
2. D. Wu, J. Yan, X. Shen, et al. *Nature Communications*, **2019**, 10(1): 3854.
3. L. Liu, R. Yang, J. Cui, et al. *Analytical Chemistry*, **2022**, 94(23): 8474-8482.

4. Y. Wang, J. Wu, P. Sun, et al. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2022**, 372: 132645.

本项目获得了国家自然科学基金委的项目（22376177）的支持。

P-20

靶型免疫印迹高灵敏检测索拉非尼介导的肝癌外泌体抗肝癌作用

张婷¹, 金香子¹, 李东浩¹, 刘璐¹¹ 延边大学理学院化学系, 吉林省延吉市公园路 977 号, 133002

通讯联系人 E-mail: liulu@ybu.edu.cn

摘要: 外泌体作为天然的细胞间信息传递载体, 具有生物相容性好、靶向性强、可穿透生物屏障等独特优势。索拉非尼 (Sorafenib) 作为肝细胞癌的一线治疗药物, 其临床应用得到证实, 但在临床治疗过程中索拉非尼介导的肝癌外泌体 (SHCC-exo) 是否发挥药物载体功能尚不明确¹。高效利用外泌体作为载体负载索拉非尼, 有望改善药物在体内的分布、提高药物递送效率, 进而实现对肝癌的高效、精准治疗²。为验证外泌体负载索拉非尼这一治疗策略可显著提升抗肝癌作用, 需对肝癌相关通路蛋白进行检测, 但此类通路蛋白丰度较低, 传统 Western blot (WB) 检测易出现假阴的现象。靶型免疫印迹 (Concentric-Type Immunoblotting, CIB) 将环形非均匀电场与 WB 相结合, 利用加速区的精细分离和浓缩区的高效浓缩, 可解决 WB 中分辨率低和灵敏度低的不足^{3,4}。本研究聚焦索拉非尼介导的肝癌外泌体的抗肝癌作用, 通过超高速离心法制备了肝癌来源外泌体, 并构建了高灵敏靶型免疫印迹检测体系, 成功实现了肝癌来源外泌体定性蛋白 ALIX, CD9, TSG101 的高灵敏检测。基于 LC-MSMS 定性定量分析了肝癌外泌体中索拉非尼的浓度依赖性关系, 证实索拉非尼介导后的肝癌分泌的外泌体可以作为天然药物载体。进一步通过 CIB 技术发现 SHCC-exo 通过激活肝癌细胞上的 MAPK 信号通路上的 p38 和 JNK 蛋白发挥抗肝癌作用。本方法建立的靶型免疫印迹的高灵敏检测新方法有望替代传统 WB 技术, 在更广泛的蛋白质检测领域展现重要应用价值。

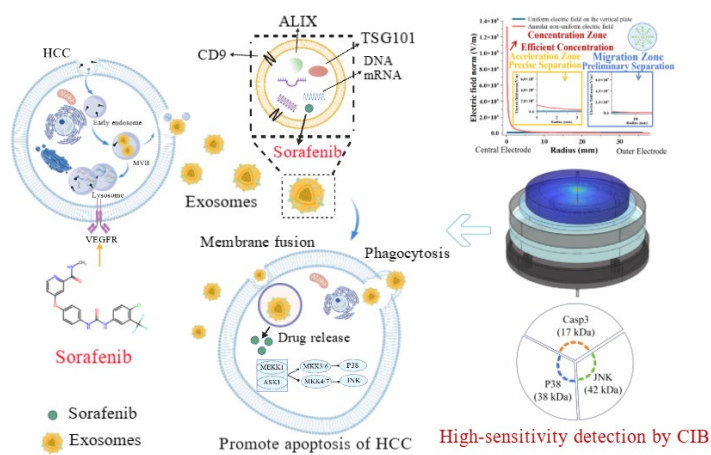


Fig. 1 CIB 高灵敏检测 SHCC-exo 对肝细胞癌的抑制作用。

参考文献:

1. T. Lu, W. Zhu, C. Lin, et al. *Journal of Nanobiotechnology*. **2026**, 24(1), 89.

2. T. Yong, X. Zhang, N. Bie, et al. *Nature communications*. **2019**, 10(1), 3838.
3. F. Liu, W. Li, Y. Xing, et al. *Analytical Chemistry*. **2025**, 97 (28), 15472-15481.
4. L. Liu, R. Yang, J. Cui, et al. *Analytical Chemistry*. **2022**, 94 (23), 8474-8482.

本研究得到了国家自然科学基金（22304150）的资助。

P-21

MOF 纳米粒子在微流控芯片电泳手性分离中的应用

马芸芸, 黄露露, 曲昭玮, 蒲巧生*

兰州大学化学化工学院, 甘肃省兰州市城关区天水南路 222 号, 730000

通讯联系人 E-mail: puqs@lzu.edu.cn

手性药物对映体的高效分离是临床药物分析与质量控制的核心要求, 常见的手性分离分析方法往往存在分离时间长、手性选择剂用量较大、某些对映体分离效果不够理想等不足^[1]。本工作尝试利用简单的金属有机框架(MOF)后修饰方法合成了 L-苯丙氨酸(L-Phe)功能化 UiO-66-NH₂ (UiO-66-NH₂-L-Phe) 与 L-酪氨酸(L-Tyr)功能化 Co-MOF-74 (Co-MOF-74-L-Tyr) 两种多孔手性 MOF 纳米粒子, 将这些纳米粒子作为微流控芯片电泳缓冲添加剂, 构建了高效手性对映体分离分析体系。结果表明, 当两种手性 MOF 纳米粒子的添加量仅为 0.01 wt% 时, 即可在 30 s 内实现氨氯地平、阿替洛尔两种心血管药物的手性拆分(图 1)。机理研究证实, 手性 MOF 纳米粒子的氨基酸侧链与金属节点等手性识别位点通过氢键、 π - π 堆积及配位作用与药物对映体复合物, 从而实现对映体的高效识别^[2]。

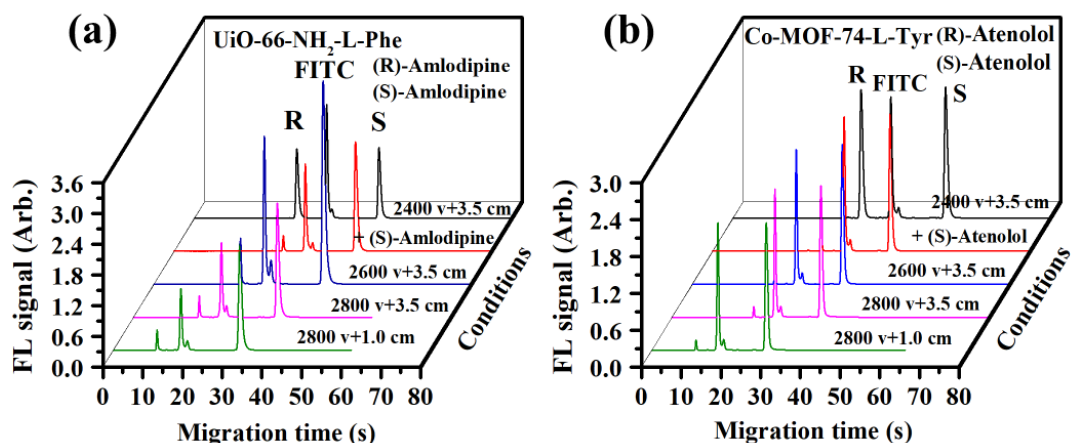


图 1. (a) UiO-66-NH₂-L-Phe 纳米粒子分离手性药物氨氯地平的电泳谱图; (b) Co-MOF-74-L-Tyr 纳米粒子分离手性药物阿替洛尔的电泳谱图

关键词: MOF 纳米粒子, 芯片电泳, 手性分离, 氨基酸, 快速分析

参考文献:

1. Wang, Z., Wang, W., Sun, L., Liang, A., Duan, J., Zhang, Y., Tang, B., Luo, A. *Anal. Chim. Acta.* **2025**, **1337**, 343541.
2. Corella-Ochoa, M.N., Tapia, J.B., Rubin, H.N., Lillo, V., González-Cobos, J., Núñez-Rico, J.L., Balestra, S.R.G., Almora-Barrios, N., Lledós, M., Güell-Bara, A., Cabezas-Giménez, J., Escudero-Adán, E.C., Vidal-Ferran, A., Calero, S., Reynolds, M., Martí-Gastaldo, C., Galán-Mascarós, J.R. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, **141**(36), 14306-14316.

感谢国家自然科学基金(No.22376086、22327805)的资助

P-22

低成本高精度微流控气压控制装置的制作

梅凡, 曲昭玮, 王威*, 蒲巧生*

兰州大学化学化工学院, 甘肃省兰州市城关区天水南路 222 号, 730000

通讯联系人 E-mail: puqs@lzu.edu.cn

气压广泛用于微流控驱动与控制, 但微流控系统对压力稳定性和响应速度有较高的要求¹⁻²。目前商业化低成本压力控制方案往往体积较大, 而微型化的压力控制单元大多价格昂贵, 在一定程度上限制了微流控技术的广泛应用³。本工作旨在开发一种低成本、高精度、快速响应的微型化气压驱动装置, 实现无需人工干预的稳定、可重复全自动压力控制。装置由微型空压机(10 L/min, 300 kPa)、微型电气比例阀(10 - 1000 mbar)和压力传感器(0 - 1000 mbar, 1% FS)构成(图 1), 可利用通用数据采集卡(如NI USB-6001)控制。基于PID算法实现比例阀输入电压的实时调节, 并根据传感器反馈自动补压, 完成目标压力的持续精确输出。性能测试结果表明: 在0 - 1000 mbar范围内, 压力输出与设定电压呈良好线性关系($R^2=0.99999$), 压力分辨率达0.5 mbar, 5 mbar阶跃变化的响应时间仅0.2 s, 当气源压力波动1000 mbar时, 输出压力变化小于1 mbar; 连续输出的相对标准偏差(RSD)低于0.1% ($n=10$)。装置硬件成本低, 可灵活设定压力波形, 可长时间自动化运行。该装置已成功应用于微流控液滴生成(图 1)。

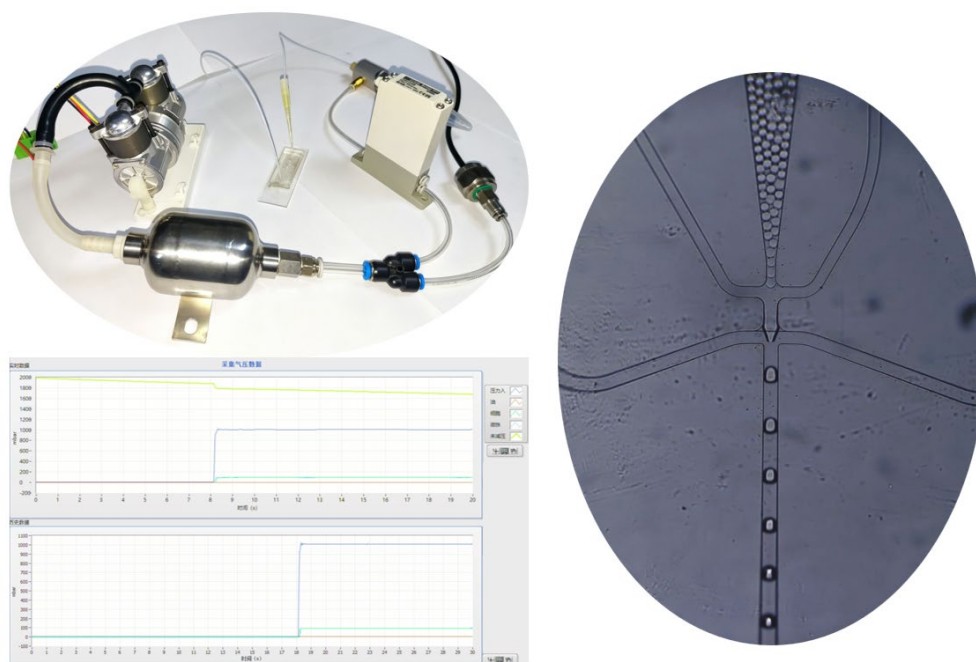


图 1 低成本气压进样系统装置、压力波形及微液滴生成效果图

关键词: 低成本; 微流控; 气压控制; 电气比例阀; 液滴生成

感谢国家自然科学基金(No.22376086、22327805)的资助。

参考文献:

1. Siddique, A.-B.; Mirhosseini, S.; Swami, N. S., Diaphragm-based microfluidic platforms for reconfigurable sample manipulation: from enrichment to activated sorting. *Lab on a Chip* **2026**, *26* (5), 1658-1681.
2. Wu, W., A pressure-driven gas-diffusion/permeation micropump for self-activated sample transport in an extreme micro-environment. *Analyst* **2018**, *143* (20), 4819-4835.
3. Zein, M.; Moussahou, R.; Kelouwani, S.; Hébert, M., Precision Pressure Pump Featuring Dual-Valve Control and Onboard Compression for Microfluidic Systems. **2025**, *14* (12), 593.

P-23

牛奶中乳铁蛋白的测试

韩燕, 黄明贤, 上官露露, 任兴发*

奕诺微(上海)分离技术有限公司, 上海, 201000

E-mail: renxingfa-enormicro@titansci.com

关键词: 乳铁蛋白, 牛奶, 肝素亲和柱

乳铁蛋白(Lactoferrin, LF)是一种存在于哺乳动物乳汁中的天然糖蛋白, 相对分子量约为80 kD, 具有两个铁离子结合位点, 属于铁结合糖蛋白, 具有具有促铁转运, 抗菌、抗病毒、免疫调节等作用^[1]。近年来作为功能性营养成分在乳制品中应用日益广泛, 对其含量的准确定量检测具有重要的食品安全意义。参考GB 5009.299—2024《食品安全国家标准 食品中乳铁蛋白的测定》^[2], 牛奶经EnormChrom® IAC-Heparin肝素亲和纯化柱进行前处理后, 采用反相高效液相色谱法分离检测。色谱条件为: Enormicro Cathenovo® C4, 300Å, 5 μm, 4.6 × 250 mm色谱柱, 流动相A为0.1% 三氟乙酸水溶液, 流动相B为乙腈, 梯度洗脱, 检测波长280 nm。实验结果表明, 乳铁蛋白在1 - 200 μg/mL范围内呈现良好线性关系, 相关系数R²大于0.9998。该方法前处理简便、检测速度快、准确度与精密度良好, 可用于牛奶中乳铁蛋白的定量分析, 为乳制品品质评价提供了可靠的技术支撑。

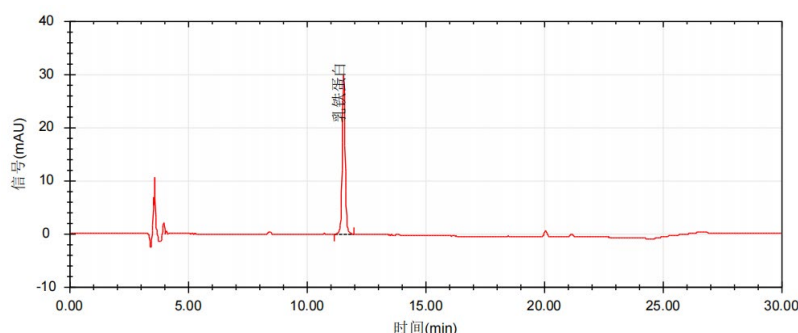


Fig. 1 乳铁蛋白测试谱图

参考文献:

1. 苏霞, 刘松雁, 朱子晨, 赵兴鑫, 王昊, 杨晓霞, 苗新发. 生鲜乳及乳制品中乳铁蛋白检测方法的研究[J]. 今日畜牧兽医, 2024, 40(02): 11-13
2. 中华人民共和国国家卫生健康委员会, 国家市场监督管理总局. 食品安全国家标准 食品中乳铁蛋白的测定: GB 5009.299—2024[S]. 北京: 中国标准出版社, 2024

P-24

RNA 在线毛细管微反应器-质谱联用技术用于末端脱氧核苷酸转移酶的超灵敏检测

黄国梁^{1#}, 王安平^{1,2#}, 杨丽^{1*}

1. 东北师范大学化学学院; 2. 吉林化工大学化学与制药工程学院

通讯联系人 E-mail: yangl330@nenu.edu.cn

末端脱氧核苷酸转移酶 (TdT) 是一种特殊的非模板依赖性 DNA 聚合酶, 在人类适应性免疫系统 (HAIS) 中起着至关重要的作用。在免疫球蛋白重组过程中的 V(D)J 重组中, TdT 通过诱导单链 DNA (ssDNA) 的 3'羟基端聚合形成随机核苷酸序列, 从而增加抗体和 T 细胞受体的多样性, 使其更有效地识别和应对各种病原体。除了其关键的生理作用外, 有研究证明, TdT 的过度表达与多种类型的白血病如急性髓细胞白血病 (AML) 和急性淋巴细胞白血病 (ALL) 高度相关, 这使得 TdT 成为白血病的重要生物标志物以及潜在治疗靶点^[1]。因此, TdT 的准确定量在白血病的临床诊断和发病机制研究中具有重要意义。

质谱法 (mass spectrum, MS) 凭借其高灵敏度、高通量和强大的分子结构分析能力, 已成为生物分子分析的重要平台。与其他生物分析技术相比, 基于质谱的检测方法具有优越的定量能力, 更容易标准化, 不易产生系统误差等特点, 具有作为各类生物分子 RMPs 的巨大潜力^[2]。然而, 开发基于 MS 的 TdT 临床 RMPs 依然存在一些挑战。一方面, TdT 较大的分子量使其在电喷雾过程中离子化效率差, 导致其质谱响应较低。另一方面, 为了防止质谱仪器的污染, 生物样品在质谱分析前往往要经过复杂的预处理过程, 这可能会导致样品损失, 影响 TdT 在临床样本中检测结果的准确性。因此, 开发高灵敏、样品处理简便以及操作简单的质谱检测方法, 在满足 TdT 在临床检测中的需求、进一步发挥 TdT 作为生物标志物在临床检测中的重要作用方面尤为重要。

为此, 本工作提出了一种基于 RNA 微反应器 (PL@Au@RNA) 的直接质谱法, 用于超灵敏、准确和快速的 TdT 检测^[3]。本方法的核心基于固定化的 TdT 聚合反应, 并结合后续的脱嘌呤反应, 将目标 TdT 信号转化为具有高质谱响应的报告分子 (腺嘌呤), 从而显著提高检测灵敏度。通过将微反应器的出口端经刻蚀制备成多孔尖端作为电喷雾质谱进样器, PL@Au@RNA 微反应器可以直接与 ESI-MS 在线偶联, 从而将信号分子直接引入质谱进行分析, 避免了复杂的样品预处理过程。本工作制备的 RNA 微反应器既可以作为 TdT-腺嘌呤信号转换和放大的平台, 又实现了与 ESI-MS 界面的耦联和集成, 可以在极低的样品消耗下实现对 TdT 的快速和高灵敏分析。

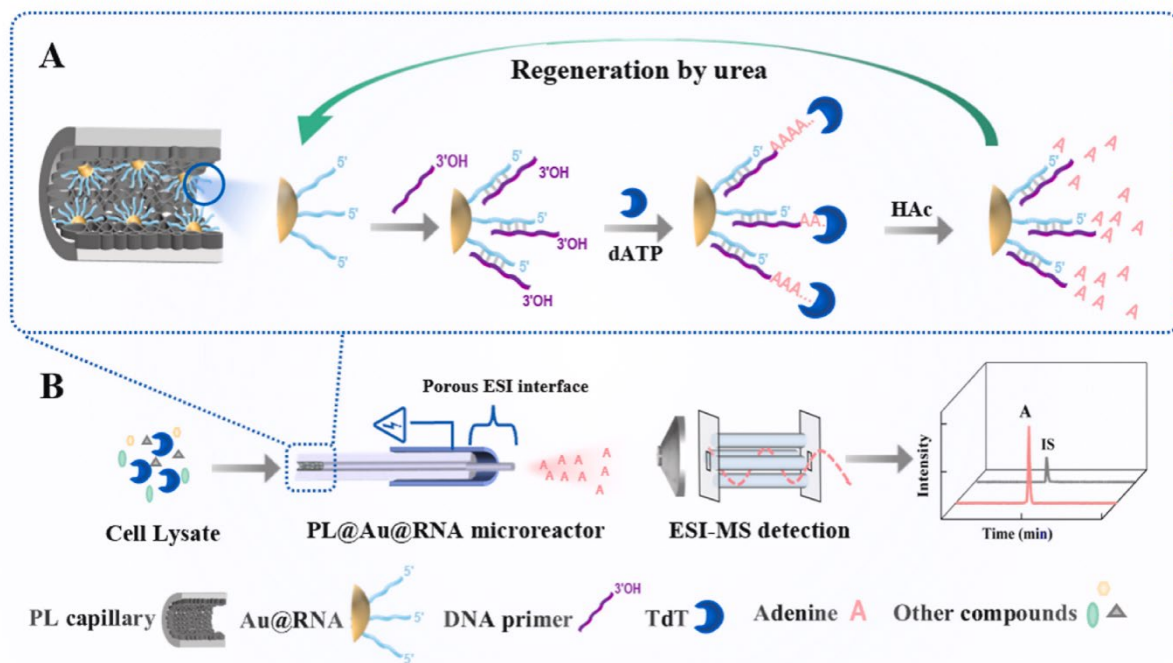


图 1. PL@Au@RNA 微反应器在线质谱法检测 TdT 过程示意图

致谢：作者感谢国家自然科学基金（项目编号：22474017）的资助

参考文献：

1. Borrow J, Dyer SA, Akiki S, et al. Molecular roulette: Nucleophosmin mutations in aml are orchestrated through n-nucleotide addition by TdT[J]. Blood, 2019, 134(25): 2291-2303.
2. Chen Y Y, Gui Z, Hu D, et al. Adolescent alcohol exposure changes RNA modifications in adult brain by mass spectrometry-based comprehensive profiling analysis[J]. Chinese Chemical Letters, 2024, 35(1): 108522.
3. Wang A, Qi Z, Tian M, et al. In-line RNA-based microreactor direct mass spectrometry for ultrasensitive and rapid assay of terminal deoxynucleotidyl transferase activity[J]. Talanta, 2024, 279126631-126631.

P-25

抗体非依赖型在线毛细管固相微萃取-质谱法用于临床血清中甲状旁腺激素及其拮抗片段的高灵敏检测

闫美婷^{1#}, 王安平^{1,3#}, 杨丽^{1*}, 国新华^{2*}

1. 东北师范大学化学学院; 2. 吉林大学化学学院; 3. 吉林化工大学化学与制药工程学院

通讯联系人 E-mail: yangl330@nenu.edu.cn; guoxh@jlu.edu.cn

甲状旁腺激素(PTH)是由甲状旁腺主细胞分泌的碱性单链多肽,其全长形式 PTH 1-84 在机体钙磷代谢调控中具有重要作用。血液中 PTH 水平的准确测定对于甲状旁腺疾病、慢性肾病及肾性骨病的临床诊断具有重要意义。然而,临床样本中 PTH 含量通常处于 pg/mL 水平,且血清基质复杂,并伴有多种代谢片段干扰,因而其准确定量仍面临较大挑战。尤其是传统免疫分析在部分情况下易受 PTH 7-84 等片段交叉反应的影响,难以同时兼顾检测准确性与片段分辨能力。

相较于传统免疫分析,质谱法凭借其优异的定性能力、高分辨率和高灵敏度,已成为实现 PTH 准确定量的重要手段。目前,基于质谱的 PTH 检测多采用抗体富集、酶解及特征肽段定量相结合的策略。尽管该类方法在一定程度上提高了检测选择性,但仍存在抗体成本高、前处理繁琐、分析周期长和样品消耗大的问题;同时,基于酶切片段的检测模式对干扰片段的排除仍有一定局限。

基于上述背景,我们开发了一种新型阳离子交换毛细管固相微萃取-质谱在线联用技术,用于临床血清中 PTH 1-84 及其主要代谢片段 PTH 7-84 的高灵敏检测^[1]。该方法以羧基功能化聚苯乙烯纳米球修饰毛细管内壁,构建兼具阳离子交换与疏水保留双重作用的毛细管微萃取柱,并与质谱耦联,成功实现对目标物的在线萃取、富集与检测一体化分析(图 1)。所建立的方法在血清基质中对 PTH 1-84 和 PTH 7-84 的检出限分别低至 6.0 pg/mL 和 9.0 pg/mL,线性范围分别为 13.0–1600 pg/mL 和 20.0–2000 pg/mL;同一毛细管微萃取柱经 30 次连续检测及 45 天保存后仍保持良好的稳定性。此外,该方法仅需 10 μ L 样本即可实现临床血清实际样本中 PTH 1-84 及 PTH 7-84 的快速、准确同时定量,为 PTH 临床标准化检测方法的建立提供了新的技术途径,具有重要的实际应用价值。

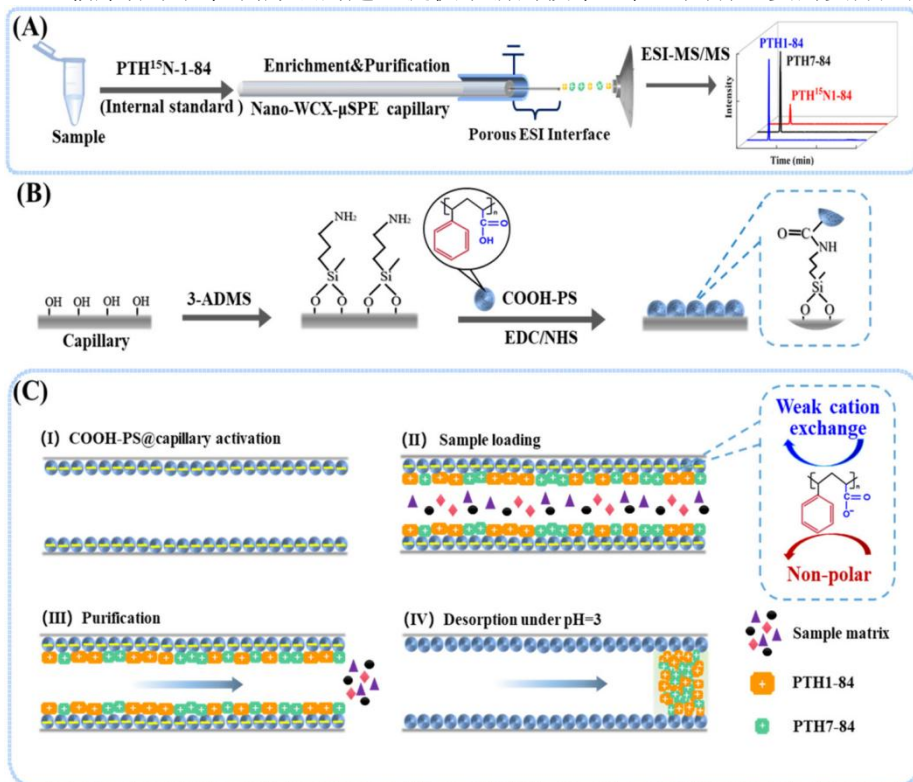


图 1. (A) 实际样品的检测流程; (B) 毛细管微柱的制备过程; (C) 目标物的在线萃取流程

致谢：作者感谢国家自然科学基金（项目编号：22474017）的资助

参考文献：

1. A.P. Wang, J. L. Yang, S. Q. Zhao, Y.Y. Li*, L. Yang*, X.H. Guo*, Antibody-Free Inline Dual-Retention Nano-WCX- μ SPE-MS/MS for Quantification of Intact Parathyroid Hormone and Antagonistic Fragments in Clinical Serum. *Anal. Chem.*, 2025, 97(42), 23165-23173.

P-26

新型 RNA 微反应器-毛细管电泳/质谱在线联用技术用于多种 miRNAs 的同时高灵敏检测

王蒙^{1, #}, 王安平^{1, 2, #}, 杨巾栏^{1, *}, 杨丽^{1, *}

¹ 东北师范大学化学学院 ² 吉林化工大学化学与制药工程学院

通讯联系人 E-mail: yangl330@nenu.edu.cn; yangjl282@nenu.edu.cn

微小 RNA (miRNAs) 是重要的疾病诊断生物标志物, 短序列、低丰度、高同源性的特性及复杂生物基质干扰, 使其高灵敏多重检测成为分析领域难题, 传统及现有检测方法存在操作繁琐、通量有限等不足。毛细管电泳-质谱联用 (CE-MS) 兼具高效分离与高灵敏定量优势, 已成为分离和表征各种生物分子的强大工具。miRNAs 电离效率低、进样体积小等问题导致直接检测灵敏度不足, 额外前处理又易造成样品损失。为了解决这些限制, 我们开发了一个集成的微反应器辅助 CE-MS 平台, 建立了 miRNA 高灵敏检测新策略^[1]。以 miRNA-21 和 miRNA-155 作为目标分析物, 本方法能够在单次进样中完成在线的纯化/预浓缩、信号转换、CE 分离和 MS 检测, 从而避免了复杂的样品处理, 显著提高了对 miRNAs 检测的准确性和灵敏度 (图 1)。在实际样品检测中, 该方法成功实现 MCF-7 癌细胞内源性 miRNA-21 和 miRNA-155 水平的准确定量, 在生物分析与临床诊断领域展现出良好的应用前景。

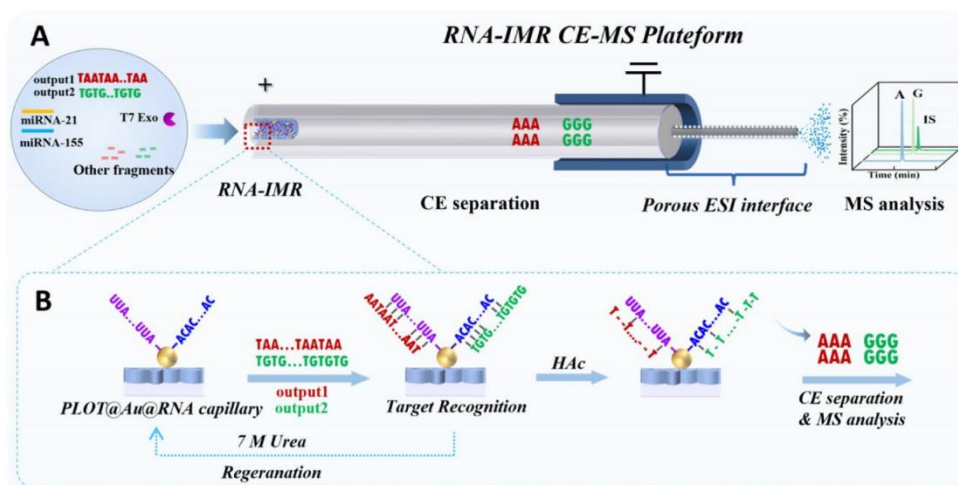


图 1 (A) RNA-IMR 和 CE-MS 在线耦合的建立和分析。(B)在线脱嘌呤、信号转换、放大过程。

致谢: 作者感谢国家自然科学基金 (项目编号: 22074014) 的资助。

参考文献:

1. Wang, A.; Zhao, S.; Tian, M.; Yang, J.*; Yang, L.* Ultrasensitive and multiplexed microRNA analysis: Integrated RNA microreactor-capillary electrophoresis-mass spectrometry platform. *Talanta*, 2026, 296, 128441.

P-27

滥用药物芬太尼的液相微萃取-便携式质谱分析研究

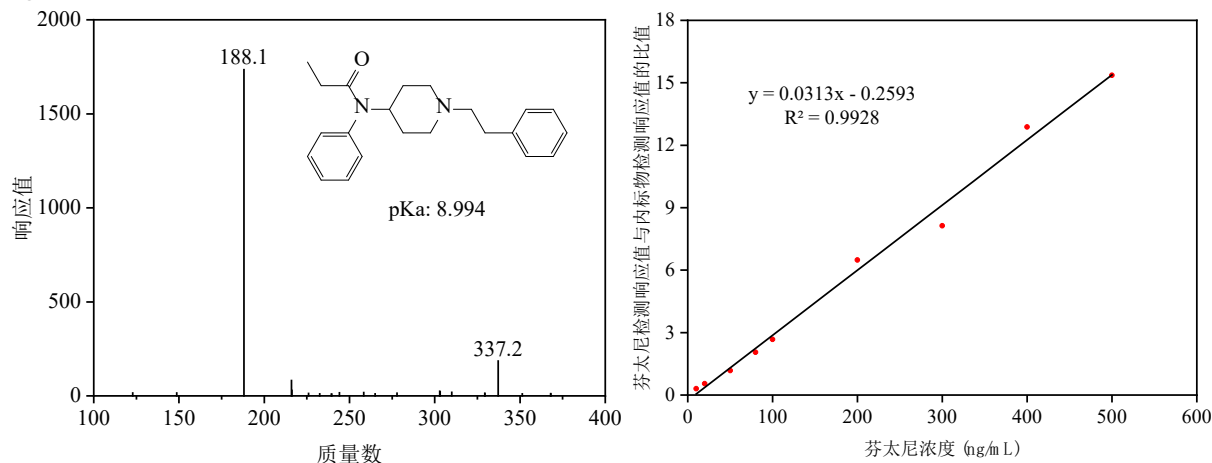
李佳益^{1,2}, 李冬梅^{1,2*}, 单雅冰^{1,2*}, 曾宪彬^{1,2}, 李昕怡^{1,2}, 李莹莹^{1,2}

1.精神活性物质侦测与防控北京市重点实验室, 北京市禁毒科技中心;

2.国家毒品实验室北京分中心

通讯联系人 E-mail: lidongmei_1207@163.com; shanyabing2020@163.com

《2025年世界毒品报告》显示, 合成类阿片尤其是芬太尼类药物滥用已导致多起致命过量事件, 对公共健康构成严重威胁, 全球缉获量达19.5吨, 呈现显著上升趋势, 开发芬太尼类的吸毒现场快速检测技术, 已成为当前禁毒工作中一项紧迫且关键的任务。本研究建立了基于薄荷醇和百里香酚组成的天然深共熔溶剂的聚丙烯纤维的液相微萃取和便携式离子阱质谱快速检测芬太尼的分析方法。裁剪1.5 cm×1.5 cm口罩中间层, 塞入5 mL注射器针头与针管中间的空隙, 滴加10 μ L的天然深共熔萃取剂, 连接到注射器柱管上。拉推注射器6个循环, 达到萃取平衡, 使用0.5 mL磷酸盐缓冲液进行2次拉推循环洗涤, 使用100 μ L的甲醇(含5%甲酸)进行2次拉推循环, 解吸含有芬太尼的萃取剂, 并进行小质谱检测分析。测试芬太尼标准品和尿液基质实际样品获得一级谱图信息, 并利用离子阱质谱本身具备的串联质谱的功能, 对样品的一级谱图的主要离子进行二级谱信息收集。在10~500 ng/mL的浓度范围内, 芬太尼的线性关系良好, 相关系数(R^2)为0.9928, 检出限为5 ng/mL, 定量限为10 ng/mL。结果表明该方法适用于尿液基质中芬太尼的药物滥用监测分析。



参考文献:

1. Shan Y B, Li J Y, Chen Y, Jia R, Zeng X B, Li Y Y, Chen D, Li D M, *Journal of Chromatography B*, **2025**, 1263, 124701.
2. Shan Y B, Chen Y, Li J Y, Zeng X B, Jia R, Liu Y W, Li D M, Chen D, *Journal of Xenobiotics*, **2025**, 15, 102.
3. Fan X M, Jiao B, Zhou X Y, Zhang W P, Ouyang Z, *Analytical Chemistry*, **2025**, 97(28): 9111-9125.
4. Smith B L, Hankinson T, Maher S, *Annual Review of Analytical Chemistry*, **2024**, 17: 69-102.
5. Zhai Y B, Fu X Y, Xu W, *Mass Spectrometry Reviews*, **2023**: 1-20.

P-28

银离子加合增敏单细胞质谱技术用于 表儿茶素神经保护异质性研究

闫勇杰, 李航, 徐姝婷*

江南大学食品学院, 分析食品安全学研究所, 无锡, 214122

通讯联系人 E-mail: shutingxu@jiangnan.edu.cn

单细胞质谱流式技术作为一种新型的高通量单细胞分析手段, 凭借其免标记、高灵敏度以及多组分同时定性定量的显著优势, 为深度解析细胞异质性与单细胞代谢网络提供了丰富的分子维度信息¹。多酚类化合物(如表儿茶素)在对抗神经细胞氧化应激、调节关键鞘脂代谢通路以维持细胞膜完整性方面表现出卓越的神经保护潜力²。然而, 深入揭示其分子机制面临着严峻的分析化学挑战: 神经保护机制涉及的鞘脂类化合物高度依赖质谱的正离子模式进行检测, 但表儿茶素等酚类物质在该模式下电离效率极差, 导致信号严重受抑制。现有的衍生化方法多面临反应可逆或产生强背景干扰等问题, 难以满足高通量单细胞在线分析的需求³。因此, 提表儿茶素在质谱正模式下的灵敏度是酚类物质单细胞异质性分析的一个重要研究方向。本工作发展了一种基于金属离子加合增敏的信号增敏方法, 用于提升表儿茶素及其类似物在正模式下的质谱响应。该敏化策略可在线触发, 并与高通量的单细胞质谱流式分析系统良好兼容。装置采用了鞘气辅助的三层同轴毛细管结构: 内层为细胞进样通道, 中层为含有金属离子的提取溶剂, 外层为辅助气流。当细胞流出内层时, 中层溶剂迅速完成细胞内容的微体积提取, 并在电离发射器尖端在线触发金属阳离子与目标分析物的配位加合反应。经过系统的筛选与优化, 本研究确定以银离子作为增敏试剂。在不影响常规脂质检测的前提下, 该方法将单细胞内表儿茶素的质谱响应信号大幅提升了17倍, 同时将与氧化损伤密切相关的糖鞘脂信号显著增强了10倍。系统实现了约30个细胞/分钟的高通量检测速率, 能够高效收集单细胞代谢数据。将该方法应用于氧化损伤的HT22细胞模型, 共成功匹配到了114种物质, 包括表儿茶素及其代谢物、内源性代谢物和脂质。揭示了神经细胞在药物吸收与代谢响应上的高度异质性: 聚类分析将表儿茶素干预后的细胞群清晰地划分为两个截然不同的亚群。第一类干预亚群成功恢复了鞘脂代谢稳态, 神经酰胺水平降低, 且有效维持了细胞膜磷脂的完整性; 而第二类亚群尽管经过相同处理, 却依然表现出神经酰胺的持续积累, 提示其鞘脂介导的氧化-凋亡轴已被不可逆地激活。这些发现表明, 银离子加合增敏技术克服了单细胞代谢组学中的关键电离限制, 为研究细胞特异性药物作用及推进神经退行性疾病的精准治疗策略提供了坚实的分析基础。

关键词: 单细胞质谱流式技术、银离子增敏、表儿茶素、鞘脂

参考文献:

1. H. Yan, H. Zhao, X. Zhao, X. Pan, J. Feng, F. Xu, S. Zhang, X. Zhang, Label-free mass cytometry for unveiling cellular metabolic heterogeneity, *Anal. Chem.*, **2019**, 91, 9777-9783.
2. M. Gaggini, S. Fenizia, C. Vassalle. Sphingolipid Levels and Signaling via Resveratrol and Antioxidant Actions in Cardiometabolic Risk and Disease. *Antioxidants*, **2023**, 12, 5: 1102.
3. Y. Lin, G. Chen, Y. Jheng, H. Liao. Enhancing Hydroxyl Metabolite Analysis through In Situ

Derivatization-Enabled Desorption Electrospray Ionization-Mass Spectrometry. *Analytical Chemistry*, **2025**, 97, 48: 26570-26579.

P-29

Comparing Sprayed Water Microdroplets with Several Ionization Methods on the Capability of Ionizing Ambient Air

Bowen Li, Xinxing Zhang*

College of Chemistry, Nankai University, Tianjin, 300071, China

zhangxx@nankai.edu.cn

In recent years, microdroplet chemistry has attracted considerable attention owing to its exceptional capacity to enhance chemical reaction rates by several orders of magnitude over bulk water, and to trigger spontaneous reactions that cannot occur in bulk solutions. These distinctive phenomena are primarily ascribed to the strong electric field ($\sim 10^9$ V/m) present at the air-water interface of microdroplets. Furthermore, during the separation or approach of oppositely charged microdroplets, "microlightning" is observed, producing a local electric field with an intensity of approximately 3×10^9 V/m. Such a high electric field on the surface of microdroplets or between two oppositely charged microdroplets could ionize ambient air.

In this study, to obtain an overall sense of the ability of ionizing ambient air by sprayed microdroplets, we used six other ionization methods to ionize air and monitored the ionic products with a mass spectrometer. These methods include: a vacuum ultraviolet (VUV) lamp, an X-ray generator, a piece of $^{241}\text{AmO}_2$ material for α -ray emission, a piezoelectric pistol (PP), a dielectric barrier discharge (DBD) ionization device, and an arc discharge device. We compared the mass spectra from sprayed water microdroplets with those from the six ionization sources and found that they were strikingly similar. These results reveal the high ionization capability of water microdroplets and rationalize the observation of various radical and ion related reactions initiated by water microdroplets.

参考文献:

1. B. Li, X. Gao, D. Xing, X. Zhang, *J. Phys. Chem. A*, **2025**, 129, 7183-7188.

P-30

Spontaneous Deprotonation of Compounds in Sprayed Microdroplets and Electrospray

Yifan Qiao, Xinxing Zhang*

College of Chemistry, Nankai University, Tianjin, 300071

*zhangxx@nankai.edu.cn

Electrospray ionization (ESI) is a common method for ionizing analytes in mass spectrometry (MS). It is widely accepted that the deprotonated ion $[M-H]^-$ is produced by high voltage applied to the capillary in ESI-MS. In this study, we observed a strong $[M-H]^-$ signal of 2,4,6-trinitrotoluene (TNT) in the mass spectrum by simply spraying the solution without any applied voltage. More substituted toluenes, when sprayed, showed that the intensities of $[M-H]^-$ correlated with their acidity. Furthermore, the addition of TEMPO, a scavenger of hydroxyl radical, further excluded the possibility of $[M-H]^-$ formation via radical oxidation. Finally, the $[M-H]^-$ signals showed modest changes upon application of an external voltage, and the relative intensity only increased by 22% at -4 kV. These results demonstrate that the $[M-H]^-$ signals of weakly acidic compounds are caused by their spontaneous deprotonation on microdroplet surfaces, and provide a plausible origin for the $[M-H]^-$ signal in ESI-MS.

Unpublished work

P-31

OPTIC enables orthogonal chemoproteomic profiling of drug – target interactions and affinities

Yun Wu, Chunhui Deng*

Department of Chemistry, Fudan University, 2005 Songhu Road, Shanghai, 200032, P.R. China.

E-mail: chdeng@fudan.edu.cn

Elucidating the global pharmacological interactome of therapeutics is critical for delineating their efficacy, off-target toxicities, and resistance mechanisms. While competitive chemoproteomics enables the simultaneous profiling of DTIs and DTAs, current label-free approaches are fundamentally plagued by two opposing challenges: high biochemical background noise that generates false positives, and stochastic single-point quantitative outliers that distort curve fitting, leading to severe algorithmic false negatives. Here we present OPTIC, an orthogonal label-free chemoproteomic platform that integrates affinity purification–mass spectrometry with competitive binding assays to improve the specificity and fidelity of drug–target profiling. OPTIC is supported by InteractomeProfiler, a companion analysis suite featuring an R^2 -Gain Score-weighted regression framework that detects and penalizes localized outliers, thereby rescuing authentic dose–response relationships missed by conventional models. Across a rapid three-day workflow, OPTIC enabled high-confidence profiling of drug–target interactions and relative affinities across distinct therapeutic modalities. For the small-molecule inhibitor olaparib, OPTIC recovered the canonical targets PARP1 and PARP2 together with their relative affinities. Applied to the monoclonal antibody trastuzumab, OPTIC uncovered a previously uncharacterized translation-associated protein complex, and the derived EC_{50} values showed strong correlation with calculated binding free energies. Together, OPTIC establishes a generalizable label-free framework for high-confidence mapping of drug–target interactions and affinities.

参考文献

1. Swinney, D. C. & Anthony, J. How were new medicines discovered? *Nat Rev Drug Discov* **10**, 507–519 (2011).
2. Renaud, J.-P. et al. Biophysics in drug discovery: impact, challenges and opportunities. *Nat Rev Drug Discov* **15**, 679–698 (2016).
3. Meissner, F., Geddes-McAlister, J., Mann, M. & Bantscheff, M. The emerging role of mass spectrometry-based proteomics in drug discovery. *Nat Rev Drug Discov* **21**, 637–654 (2022).

P-32

Plasmonic Heterojunction Nanomaterials for Noninvasive Pan-Cancer Metabolomic Screening

Jia Qi¹, Hairu Lin¹, Caiyun Fang², Jia Li^{3*}, Fangying Shi^{4*}, Chunhui Deng^{5*}

¹ Department of Chemistry, Zhongshan Hospital, Institutes of Biomedical Sciences, Fudan University, Shanghai 200433, China;

² Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai 200433, China;

³ School of Materials Science and Chemical Engineering, Ningbo University, Ningbo, 315211, China;

⁴ Department of Gastroenterology and Hepatology, Zhongshan Hospital, Fudan University, Shanghai 200032, China;

通讯联系人 E-mail: chdeng@fudan.edu.cn

摘要正文: Cancer remains a major global health challenge, underscoring the urgent demand for early diagnostic strategies. Altered cancer metabolism can be captured through serum analysis by laser desorption/ionization mass spectrometry (LDI-MS). Here, we report the design of gold nanoparticle-modified manganese–cobalt oxide heterojunctions (Au/MCOHs) as a high-performance LDI-MS nano-matrix. The Au/MCOHs combine strong ultraviolet absorption, enhanced charge separation, and favorable surface potential to achieve efficient laser energy conversion and ionization. Leveraging this platform, we performed serum metabolomic analysis on 698 participants, comprising healthy controls and patients with six different cancer types. Machine learning models distinguished cancer patients from healthy controls with area under the curve (AUC) values up to 0.955. Critically, early-stage cancers were also detected, with AUCs ranging from 0.776 to 0.938. Thirteen cancer-associated metabolites were identified, and a combined diagnostic panel achieved an AUC of 0.865. This study demonstrates how rationally engineered plasmonic heterojunction nanomaterials can bridge materials innovation and clinical translation, offering a robust, non-invasive route for pan-cancer metabolomic screening.

参考文献:

1. Bray F, Laversanne M, Sung H, et al. *CA Cancer J Clin.*, **2024**, 74(3), 229-263.
2. Zhang H, Zhao L, Jiang J, et al. *Nat Commun.*, **2022**, 13(1), 617.
3. Shafer M, Low V, Li Z, Blenis J. *Cell Metab.*, **2025**, 37(2), 316-329.
4. Yang C, Ji S, Shen S, Yu H, Deng C. *TrAC, Trends Anal Chem.*, **2025**, 186, 118190.
5. Chen X, Wang Y, Pei C, et al. *Adv Mater.*, **2024**, 36(28), 2312755.
6. Shi F, Zhou J, Wu Y, et al. *Anal Chem.*, **2022**, 94(29), 10497-10505

7. Low J, Yu J, Jaroniec M, Wageh S, Al-Ghamdi AA. *Adv Mater.*, **2017**, 29(20), 1601694.
8. Pei C, Wang Y, Ding Y, et al. *Adv Mater.*, **2023**, 35(18), 2209083.

P-33

Smart peptidomic diagnostics: Hydrophilic molecular traps with machine learning-driven pattern recognition

Yanchao Zhang^a, Man Zhang^a, Wantong Zhang^a, Shuangshuang Ji^{b,*}, Xufang Hu^c, Nianrong Sun^{d,*}, Chunhui Deng^{e,*}

^a Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai 200433, China

^b Maiyuan Biological Technology Co., Ltd., Yangzhou 225000, China

^c School of Chemical Science and Technology, National Demonstration Center for Experimental Chemistry and Chemical Engineering Education, Yunnan University, Kunming 650091, China

^d Department of Gastroenterology and Hepatology, Zhongshan Hospital, Fudan University, Shanghai 200032, China

^e Center for Medical Research and Innovation, Shanghai Pudong Hospital, Fudan University Pudong Medical Center, Department of Chemistry, Institutes of Biomedical Sciences, Fudan University, Shanghai 201399, China

E-mail addresses: jsmy202011@163.com (S. Ji), sunnianrong@fudan.edu.cn (N. Sun), chdeng@fudan.edu.cn (C. Deng).

With the rapid advancement of artificial intelligence, smart diagnosis is emerging as a transformative force in modern medicine. Herein, we developed a hydrophilic molecular trap to combine with machine learning to collect and analyze hydrophilic peptide patterns fully from human serum samples, enabling effective smart peptidomic diagnostics. Utilizing a hydrophilic molecular trap combined with high-throughput mass spectrometry, high-quality hydrophilic peptide profiles were extracted from serum samples of gastric cancer (GC) patients, pancreatic ductal adenocarcinoma (PDAC) patients, and healthy controls (HC). Machine learning clearly distinguished GC, PDAC, and HC, with the area under the receiver operating characteristic curve exceeding 0.949 for all paired group comparisons. Furthermore, 4 (HC vs. PDAC), 5 (HC vs. GC) and 3 (GC vs. PDAC) key peptides features were selected out, which could be used to achieve precise diagnosis in paired groups. This work demonstrates the strong clinical potential of our smart peptidomic diagnostic approach for accurate disease diagnosis and real-time monitoring.

参考文献:

1. F. Bray, M. Laversanne, H. Sung, et al., *CA Cancer J. Clin.*, **2024**, 74, 229-263.
2. R.L. Siegel, T.B. Kratzer, A.N. Giaquinto, et al., *CA Cancer J. Clin.*, **2025**, 75, 10-45.
3. E.C. Smyth, M. Nilsson, H.I. Grabsch, et al., *The Lancet*, **2020**, 396, 635-648.
4. L. Zhang, S. Sanagapalli; A. Stoita, *World J. Gastroenterol.*, **2018**, 24, 2047-2060.

P-34

Ultra-hydrophilic MXene nanoplatfom unraveling plasma intact N-glycopeptide in epidural-related maternal fever

Ziye Xia, Chunhui Deng*

Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai 200433, China.

Corresponding Author's E-mail: chdeng@fudan.edu.cn

Abstract

Epidural-related maternal fever (ERMF) affects 15%–25% of women with epidural analgesia, but its mechanisms are unclear, hindering prevention. Given its involvement in inflammation and the link between inflammation and protein glycosylation, an efficient nanoplatfom is desired to provide insights into ERMF through N-glycoproteome analysis. Herein, we constructed an ultra-hydrophilic magnetic MXene-based nanoplatfom (MMX-Cys) for efficient N-glycopeptide enrichment. By integrating the high surface area of MXene, the hydrophilicity of L-cysteine, MMX-Cys demonstrated ultra-hydrophilicity with a water contact angle of $\sim 0^\circ$. It exhibits high sensitivity ($1 \text{ fmol} \cdot \mu\text{L}^{-1}$), excellent selectivity (HRP: BSA = 1:100), and good reproducibility in enriching glycopeptides from standard protein digests. Applied to plasma samples from ERMF patients and healthy controls, MMX-Cys based nanoplatfom enabled the identification of 1195 intact N-glycopeptides corresponding to 91 glycoproteins. Differential expression analysis revealed 18 significantly altered glycopeptides from 10 glycoproteins, predominantly involved in humoral immunity and complement activation, including immunoglobulin heavy chains (IGHG1, IGHG2, IGHA1, IGHA2) and complement component C2. This study presents an effective tool for N-glycopeptide analysis and provides glycoproteomic evidence supporting the inflammatory pathogenesis of ERMF. The MMX-Cys based nanoplatfom holds great potential in offering a foundation for future biomarker discovery and mechanistic studies.

Reference

1. Fusi L, Maresh MJA, Steer PJ, Beard RW, Lancet, 1989, 333, 1250-1252
2. Zhang H, Li N, Shi F, et al., Anal. Chem., 2024, 96, 18824-18833
3. Segal S, Anesth. Analg., 2010, 111, 1467-1475
4. Patel S, Ciechanowicz S, Blumenfeld YJ, Sultan P, Am. J. Obstet. Gynecol., 2023, 228, S1283-S1304
5. He M, Zhou X, Wang X, Signal Transduct. Target. Ther., 2024, 9, 194

P-35

COFs 基荧光探针的构建及其在炭疽生物标志物检测中的应用

张慧慧, 康琪, 冷晗, 陈玮, 陈旭伟*

东北大学理学院化学系

通讯联系人 E-mail: chenxuwei@mail.neu.edu.cn

炭疽杆菌是一种杆状的革兰氏阳性细菌, 可引发严重的炭疽病。其产生的孢子具有极强的环境稳定性, 能够通过气溶胶传播, 人类可因接触被污染的空气、土壤、水源或动物产品而感染, 进而引发胸痛、疲劳、发热等症状, 严重时可导致休克甚至死亡, 对公共健康构成重大威胁^[1]。因此, 发展高效、灵敏的检测方法对于疾病防控和公共安全具有重要意义。吡啶二羧酸 (DPA) 是炭疽孢子的特征性成分, 也是关键的生物标志物^[2]。实现对 DPA 的快速、准确检测对于炭疽的早期预警至关重要。

基于此, 本研究以 2,5-二氨基苯甲酸 (Pa-COOH) 和 2,4,6-三甲酰基间苯三酚 (Tp) 作为构筑单体, 通过 Schiff base 脱水缩合反应制备了一种羧基功能化的 COFs 材料 (TpPa-COOH)。在此基础上, 通过配位作用将 Eu^{3+} 引入框架结构中, 成功构建了双发射荧光复合材料 TpPa-COOH@ Eu^{3+} 。当 DPA 存在时, 其可取代 Eu^{3+} 配位环境中的水分子并与之发生配位, 从而触发“天线效应”, 即能量从 DPA 向 Eu^{3+} 转移, 使 Eu^{3+} 的特征荧光发射峰明显增强; 与此同时, TpPa-COOH 本身的固有荧光发射峰强度基本保持不变。基于双发射信号的协同变化, 构建了一种具有自校准能力的比率型荧光传感体系。实验结果表明, 该传感器对 DPA 具有优异的检测性能, 检测限低至 $9.5 \text{ nmol} \cdot \text{L}^{-1}$, 并展现出良好的选择性。在实际水样分析中, 其检测结果与 HPLC-MS 方法一致, 进一步验证了该传感体系的可靠性与实用性。

综上所述, 本研究提出了一种基于 COFs 材料的高灵敏比率型荧光检测策略, 不仅为炭疽生物标志物的快速准确检测提供了有效手段, 也为开发具有自校准功能的荧光探针提供了新的思路。

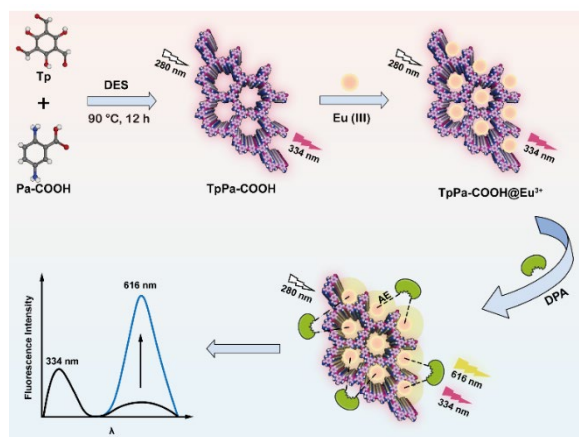


图 1 TpPa-COOH@ Eu^{3+} 复合材料的制备及检测 DPA 的机理

参考文献:

1. N. Ivanova, A. Sorokin, I. Anderson, N. Galleron, B. Candelon, V. Kapatral, A. Bhattacharyya, G. Reznik, N. Mikhailova, *Nature*, **2003**, 423, 87-91.
2. S. Lv, L. Tan, L. Zhu, X. Jia, K. Iqbal, N. Jin, D. Wang, W. Ye, D. Hui, *Anal. Chem.*, **2025**, 97, 16975-16985.

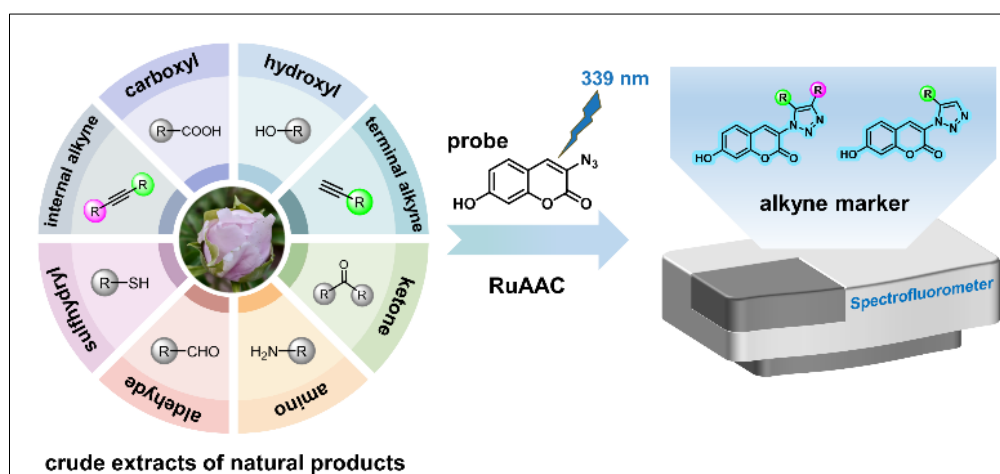
P-36

化学选择性荧光探针结合 RuAAC 反应的炔烃天然产物发现研究

梁延鹏^{1,2}, 师彦平^{1*}, 哈伟^{1*}¹ 中国科学院兰州化学物理研究所, 甘肃 兰州, 730000² 中国科学院大学, 北京, 100049*通讯联系人 E-mail: shiyp@licp.cas.cn; hawei2012@licp.cas.cn

炔基是药物分子中重要的药效团结构。天然产物因其结构多样且具有显著药理活性, 已成为药物研发的重要资源。然而, 炔烃天然产物数量稀少, 其化学不稳定性与传统分离鉴定方法靶向性不足的问题, 制约了炔烃天然产物的高效发现。经典的基于铜催化叠氮-炔环加成 (CuAAC) 反应的荧光检测法虽已成功用于端炔天然产物的筛选, 但该反应依赖末端炔基去质子化, 无法识别内炔天然产物, 底物适用范围存在明显局限。因此, 需要发展针对内炔天然产物的荧光检测方法, 以拓展炔烃天然产物的发现范围。

本研究基于钌催化叠氮-炔环加成 (RuAAC) 反应, 构建了荧光“开启” (off-on) 标记策略。以 3-叠氮-7-羟基香豆素为荧光探针, 实现了对内炔和端炔天然产物的高效荧光标记。经系统优化反应条件, 确定最优参数为: 反应温度 20°C、时间 5 h、钌催化剂浓度 6 mM、探针浓度 4 mM。该方法表现出低检测限 (内炔: 3.95 μM ; 端炔: 1.55 μM), 优异的选择性 (仅对炔基官能团产生荧光响应, 对羟基、羧基、氨基等官能团无响应) 以及良好的普适性 (对 10 种不同结构内炔和端炔化合物的均有效)。将该方法应用于含炔烃化合物中草药资源 (22 种) 的筛选研究, 结果显示党参、紫锥菊、红花、野菊花、柴胡、美形金钮扣和羌活呈现显著的荧光激活。借助基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱 (MALDI-TOF MS), 完成了对目标中草药中已知炔基化合物标记产物的鉴别, 验证了化学选择性荧光标记策略的准确性。本研究建立的荧光标记策略可同时适用于内炔和端炔天然产物, 弥补了 CuAAC 荧光检测法无法识别内炔化合物的不足, 为新型炔基天然产物的快速与高覆盖筛选提供了一种新策略, 为天然药物先导分子发现提供了重要的技术支撑。



参考文献:

1. X-K Fu, R Ma, L-J Kang, P Jin, X-B Zhao, Y-P Shi, W Ha. *J. Agric. Food. Chem.*, **2025**, 73, 21162-21174.

2. X-K Fu, S-Q Han, W Ha, Y-P Shi. *J. Agric. Food. Chem.*, **2023**, 71, 14814–14824.

国家自然科学基金项目（No. 22274163）资助。

P-37

鞣花酸生物 MOF 材料的设计制备及其抗结直肠癌研究

徐未^{1,2}, 师彦平^{1,*}, 哈伟^{1,*}¹ 中国科学院兰州化学物理研究所, 甘肃 兰州, 730000² 中国科学院大学, 北京, 100049

通讯联系人 E-mail: shiyp@licp.cas.cn; hawei2012@licp.cas.cn

结直肠癌 (Colorectal cancer, CRC) 是一种位于结肠和直肠组织的高度异质性恶性肿瘤, 其为全球诊断第三多、第二致命的癌症, 给社会与公众健康带来沉重负担。化疗在其综合治疗体系中占据不可或缺的地位, 然而, 传统化疗药物存在选择性差、显著的毒性副作用以及耐药性易感性等问题, 这些极大限制了其临床疗效。因此, 开发新型响应型药物高效递送载体对治疗癌症至关重要。

本研究创新性以铜离子与天然多酚鞣花酸配位, 合成了一种新型生物金属有机框架材料 (bioMOF), 并将其应用于化疗药物表柔比星 (EPI) 的负载, 构建了 MOF/EPI 载药体系。利用 MOF 的大比表面积与高孔隙率的优势, bioMOF 实现了对 EPI 的高效负载, 负载率高达 99.6%。利用荧光光谱考察了药物的体外释放行为, 结果表明, 在模拟肿瘤微环境的弱酸性 (pH 5.0) 和高谷胱甘肽 (GSH) 条件下, 可实现 EPI 的可控释放, 24 h 释放率为 50.8%。体外活性评价研究表明所制备的 bioMOF 可消耗细胞内 GSH 并促进细胞中铜累积, 进而激活铜死亡通路; 新型 bioMOF 可有效促进结直肠肿瘤细胞内活性氧产生, 并引发线粒体膜电位下降及线粒体功能障碍, 进一步加剧结直肠癌细胞死亡。bioMOF 兼具药物高效负载、定位递送与自身抗肿瘤双重功能 ($IC_{50} = 48.62 \mu M$), 为结直肠癌协同治疗提供了新思路, 在协同抗肿瘤纳米药物领域具有良好应用前景。

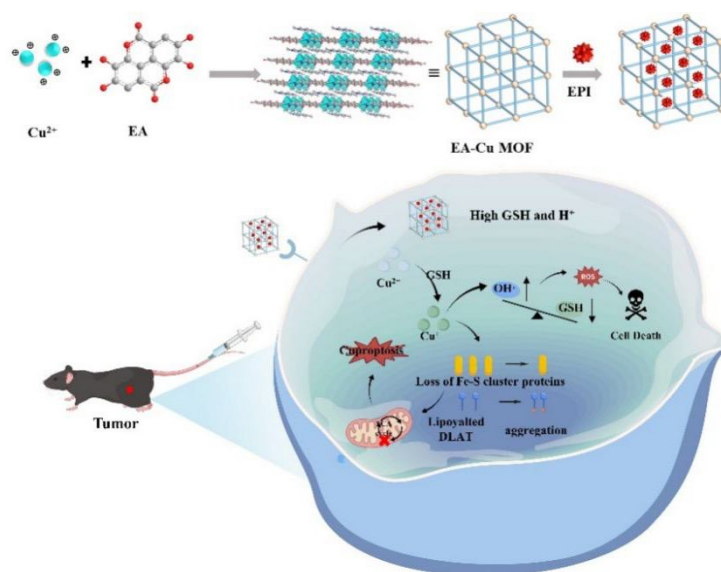


Fig.1 Schematic illustration of the preparation of Cu-EA bioMOF and MOF/EPI for cuproptosis to enhance cancer therapy.

参考文献:

1. R. Zhu, W. Yuan, A. Xia, X. Sun, W. Yan, T. Wu, G. Wang, Y. Li, Q. Yin, Y. Li, *Adv. Funct. Mater.*, **2024**, 34, 2407685.
2. W. Ha, J.-L. Yang, Y.-P. Shi, *ACS Appl. Nano Mater.*, **2023**, 6, 9617-9627.

感谢甘肃省科技重大专项 (25ZDFA002) 资助。

P-38

一种基于质谱与荧光探针技术的生物医药分析方法

马军岩*

安阳师范学院

E-mail: junyanma@aynu.edu.cn

在本项研究中,我们将色谱质谱技术与荧光探针技术有机结合,可实现优势互补、短板互补,有效突破单一技术在复杂生物样本分析中的局限,构建“靶向识别-高效分离-精准检测-可视化验证”的一体化分析体系(SNMS)。该体系中,荧光探针可作为特异性识别工具,通过靶向结合目标生物分子(如硫醇蛋白、手性代谢物、糖链等)实现精准标记,同时增强目标组分的信号响应,解决传统色谱质谱对痕量、低溶剂可及性目标物检测灵敏度不足的问题;色谱质谱技术则负责对标记后的复杂混合物进行高效分离,借助液相色谱-串联质谱(LC-MS/MS)、高分辨质谱等技术,实现对标记产物的精准定性、定量及结构解析,明确目标分子的修饰位点、含量及代谢特征。例如,基于氟化吡啶的多功能荧光探针可实现活细胞硫醇蛋白质组的原位荧光成像,结合LC-MS/MS技术建立可视化引导蛋白质组学工作流程,显著提升低溶剂可及性半胱氨酸残基的捕获与鉴定效率;高灵敏度荧光探针与色谱质谱联用,可实现手性代谢物、糖链等缺乏生色基团生物标志物的痕量检测与定量分析,为疾病早期诊断提供可靠依据。这种方法可广泛应用于药物研发、临床诊断、生物医学研究等多个领域,涵盖肿瘤相关生物标志物的筛选、神经递质的实时监测、药物代谢动力学分析、疫苗与生物制剂的质量控制等场景,既发挥了色谱质谱技术在复杂体系分离与精准检测中的核心作用,又借助荧光探针技术的可视化与高灵敏特性,拓展了分析技术的应用边界。未来,随着智能响应型荧光探针的研发提速及色谱质谱技术的不断优化,二者的结合将向更高灵敏度、更高特异性、更便捷的原位分析方向发展,为生物医药领域的技术创新、疾病机制研究及精准医疗的推进提供更加强有力的技术支撑。

参考文献

1. Fu Q R, Wang H, Lan Y X, et al. Journal of Chromatography A, 2014, 1335: 102-110.
2. Bhushan K R, Misra P, Liu F B, et al. Journal of the American Chemical Society, 2009, 131(1): 28-29.
3. Zhang J Z, Gong S Y, Li Q H, et al. Analytical Chemistry, 2025, 97(16): 5892-5900.

P-39

多肽识别动力学与往复流协同的级联单细胞识别与捕获

韩恺, 王蔚芝*

北京理工大学

通讯联系人 E-mail: wangwz@bit.edu.cn

微流控芯片中的单细胞捕获技术需要同时优化两个截然不同但相互级联的过程：其一是实现快速“点对点”识别的精确相互作用调控；其二是决定结合稳定性和持续时间的“面对面”界面接触^{1,2}。由于这两个过程跨越了不同的空间尺度，构建能够同时耦合这两者的工程化亲和界面仍是一项极大的挑战^{3,4}。鉴于此，本文报道了一种动态微流控单细胞捕获平台，该平台将基于多肽的快速识别界面与动力学匹配的流场调控完美融合。我们理性设计了一系列具有反平行 β -折叠结构且靶向 PD-L1（程序性死亡受体配体-1）的多肽，并最终筛选出一条具有柔性识别末端和静电主导结合特性的优化序列（EAF）。在分子水平上，该多肽序列极大地促进了快速且特异性的“点对点”识别。在发生自组装后，EAF 能够形成纳米纤维，密集且有序地展示其识别基序，从而显著增强了其与细胞膜之间的多点特异性相互作用。此外，通过将该亲和界面与往复流微流控设计相耦合，系统能够产生局部扰动的流场，有效增加了细胞与界面的接触概率，进而实现稳定的界面结合。这种协同的动力学调控策略不仅促进了靶标的快速识别，还确保了稳定的界面结合，最终实现了高效且持久的单细胞捕获。综上所述，本研究提出了一种构建动态亲和界面的通用策略，成功将分子识别动力学与微流控调控相统一，为单细胞分离提供了一个通用且高效的平台。

参考文献：

1. Adams, A.A. et al. Highly efficient circulating tumor cell isolation from whole blood and label-free enumeration using polymerbased microfluidics with an integrated conductivity sensor. *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 8633-8641 (2008).
2. Chang, K.-C. & Hammer, D.A. The forward rate of binding of surface-tethered reactants: effect of relative motion between two surfaces. *Biophys. J.* **76**, 1280-1292 (1999).
3. Dura, B. et al. Profiling lymphocyte interactions at the single-cell level by microfluidic cell pairing. *Nat. Commun.* **6**, 5940 (2015).
4. Hur, S.C., Mach, A.J. & Di Carlo, D. High-throughput size-based rare cell enrichment using microscale vortices. *Biomicrofluidics* **5**, 022206 (2011).

P-40

基于“ β -glue”多肽设计策略实现对 MUC1 的长效稳定识别

孙蓓蕾, 王蔚芝*

北京理工大学

通讯联系人 E-mail: wangwz@bit.edu.cn

膜蛋白是分子识别的重要靶点, 而持久识别对于稳定界面结合及可靠细胞检测仍具挑战性¹⁻⁴。这主要源于其细胞外区域的动态性与结构异质, 尤其是在以 MUC1 为代表的异二聚体体系中, 细胞外片段易脱落, 而膜邻近区域可及表位有限, 难以实现高亲和且稳定的结合。然而, 靶向异二聚体界面有望通过同时结合两个亚基, 从而抑制解离并提升检测可靠性。MUC1 的 SEA 结构域连接 MUC1-N 与 MUC1-C, 其界面富含 β -sheet 并形成稳定氢键网络, 为界面识别提供结构基础⁵⁻⁷。针对该类界面, 识别分子需具备三个关键特征: 1) 与 β -sheet 界面匹配, 以延伸主链氢键并跨界面增强侧链相互作用; 2) 刚柔并济, 以适应细胞外及膜邻近环境; 3) 多价相互作用, 以提高结合强度并抵抗解离。在此, 我们提出一种基于 β -turn 的“ β -glue”肽设计策略, 用于靶向该动态且不稳定的膜界面。通过设计、筛选, 优化了能够匹配 SEA 结构域连接界面的靶向肽 LA, 实现同时锚定 MUC1-N 与 MUC1-C。进一步地, LA 自组装形成纳米纤维, 提供多价结合位点并产生协同效应, 从而增强界面结合并抑制亚基解离。该策略整合 β -sheet 界面匹配与超分子多价靶向性, 使组装体作为“ β -glue”稳定异二聚体连接并实现持久识别。由此构建的识别体系进一步应用于 MUC1 的电化学检测及体内荧光成像, 表现出稳定且持久的靶向能力。综上所述, 本研究提供了一种针对异二聚体或非共价组装膜蛋白的识别分子开发策略, 实现了长效且稳定的识别, 为复杂膜蛋白的高可靠检测提供了新的设计思路。

参考文献:

1. Zhang, L. et al. Side-Chain Engineering Guides the Design of β -sheet Inhibitor to Anchor Protein-Protein Interaction Interfaces. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2026, 65, e21473.
2. Ma, B. et al. Nanoflower-Shaped Peptide Assemblies Driven by Serrated β -sheets and Hydrophobic Interactions for High-Affinity MUC1 Recognition. *Anal. Chem.* 2025, 98, 953–966.
3. Wang, X. et al. π - π Stacking Network-Based Supramolecular Peptide Nanoprobe for Visualization of the ICB-Enhanced Ferroptosis Process. *Anal. Chem.* 2024, 96, 13317–13325.
4. Zhao, J. et al. Sequence-Prescribed β -sheet for Enhanced Electron Tunneling: Boosting Interface Recognition and Electrochemical Measurement. *Anal. Chem.* 2024, 96, 11092–11102.
5. Wu, G. et al. A Mucin1 C-terminal Subunit-Directed Monoclonal Antibody Targets Overexpressed Mucin1 in Breast Cancer. *Theranostics.* 2018, 8, 78–91.
6. Chen, W. et al. MUC1: Structure, Function, and Clinic Application in Epithelial Cancers. *Int. J. Mol. Sci.* 2021, 22, 6567.
7. Mao, W., Zhang, H., Wang, K., Geng, J. & Wu, J. Research Progress of MUC1 in Genitourinary Cancers. *Cell. Mol. Biol. Lett.* 2024, 29, 135.

P-41

阳离子- π/π - π 相互作用协同介导的自组装导电多肽用于神经电信号重建

王博, 王蔚芝*

北京理工大学化学与化工学院

通讯联系人 E-mail: wangwz@bit.edu.cn

开发兼具生物相容性与导电功能的分子体系对于神经损伤后电生理功能的重建具有重要意义。多肽自组装分子因其结构可设计和良好的生物相容性, 成为构建导电生物材料的理想候选分子。然而, 多肽自组装体内部动态且复杂的非共价网络往往难以构筑长程有序的电子传输通路, 导致其电导率难以满足损伤神经网络电信号重建的需求。

本工作基于多肽序列设计, 通过在序列中调控芳香氨基酸的类型与空间排布, 以及阳离子残基的分布方式, 构建了从“协同作用充分匹配”到“部分削弱”再到“相互作用失配”的一系列多肽, 并筛选得到能够自组装为反平行 β -折叠且能靶向神经损伤过表达靶标蛋白 NgR1 的目标多肽 WWE。研究发现, 多肽能够稳定组装为反平行 β -折叠结构, 并进一步组装为纳米长纤维, 而当相互作用被削弱或打破时, 则表现为无序或聚集体的形貌。电学测试表明, 随着序列中芳香族氨基酸个数和阳离子- π 相互作用力的增加, 电流信号逐渐加强, 表现出显著提升的电导率。在此基础上, 进一步功能验证表明, 该多肽组装体可促进缺氧低糖诱导的损伤原代神经元的修复及其电生理活动的恢复。

参考文献:

1. Y. Yu, L. Zhang, B. Wang, J. Zhao, K. Han, Y. Qi, J. Li, X. Wang, B. Sun, J. Zhang, J. Cao, B. Ma, X. Peng, J. Cao, Y. Ke, W. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 11049.
2. N. L. Ing, R. K. Spencer, S. H. Luong, H. D. Nguyen, A. I. Hochbaum, *ACS Nano* **2018**, 12, 2652.
3. A. Grosvirt-Dramen, Z. J. Urbach, P. J. Hurst, C. E. Kwok, J. P. Patterson, F. Wang, A. I. Hochbaum, *ACS Nano* **2025**, 19, 10162.
4. Z. Li, H. Wu, Z. Zhang, Y. Tang, J. Zhao, Y. Guo, S. Qiu, Z. Su, X. Gao, M. Li, *Adv. Mater.* **2025**, 37, e11235.
5. H. Yorita, K. Otomo, H. Hiramatsu, A. Toyama, T. Miura, H. Takeuchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 15266.

P-42

LLPS-肽嵌入电极微针系统：瞬时诊疗的时空精确性

宋禹凡, 韩恺, 王蔚芝*

北京理工大学

通讯联系人 E-mail: wangwz@bit.edu.cn

随着精准医疗的新兴发展, 可监测疾病并提供智能治疗的智能化床旁即时检测 (POC) 电学系统具备广阔的应用前景。目前, 集诊断与治疗功能于一体的可穿戴微针系统潜力巨大, 相关研究也已投入大量精力。尽管该领域研究成果显著, 但在局部病灶、尤其是异质性肿瘤的应用场景中, 仍面临两大难题: 一是时空一体化原位诊疗难以实现, 二是装置难以贴合凸起的病灶部位。本研究将快速原位自响应治疗与原位实时诊断功能整合至微针系统中, 在实现时空同步原位诊疗的同时, 保障了微针设备的轻量化设计, 使其具备良好的可穿戴性能。此外, 本系统搭配蓝牙模块, 可通过智能手机实时查看诊断数据。本研究成功构建了适用于异质性疾病的实时诊断—自响应治疗一体化平台, 对微针诊疗系统的发展具有积极意义。值得注意的是, 该微针系统软硬件具备灵活适配性, 可为其他疾病、尤其是异质性局部病灶的治疗提供新思路与应用潜力。同时, 本研究采用的诊疗原位一体化方案操作简便、替代性良好, 具备一定的参考价值。本研究制备的微针系统还具备监测其他生理信号的潜力, 可进一步拓宽应用场景 (如运动健康监测等)。这款床旁即时检测电学系统能够大幅减少大型诊断设备的依赖与使用, 在一定程度上降低能耗。

参考文献:

1. Wang, H. et al. Liquid-liquid phase separation of peptides: a molecular foundation for next-generation biomaterials. *Chem. Soc. Rev.* **55**, 1234-1256 (2026).
2. Hu, Y. et al. Microneedle Sensors for Point-of-Care Diagnostics. *Adv. Sci.* **11**, 2306560 (2024).
3. Yuan, C. et al. Peptide self-assembly through liquid-liquid phase separation. *Chem. Rev.* **123**, 10245-10278 (2023).
4. Ghane-Motlagh, B. et al. Physicochemical properties of peptide-coated microelectrode arrays and their in vitro effects on neuroblast cells. *Biosens. Bioelectron.* **85**, 462-469 (2016).

P-44

针对脓毒症治疗中内毒素特异性清除的独特双亲和策略

熊雨婷*, 卿光焱

中国科学院大连化学物理研究所

通讯联系人 E-mail: xiongyt@dicp.ac.cn

脓毒症是一种由感染引起的全身炎症反应的疾病,发病率和死亡率居高不下,治疗成本高昂,已成为全球重大健康威胁。据统计,全球约五分之一死亡与脓毒症相关,而在重症监护室中,脓毒症更是导致患者死亡的首要原因。内毒素(又称脂多糖)作为脓毒症的核心致病因子,在疾病早期实现及时清除对阻断病情恶化、挽救患者生命至关重要。然而,由于内毒素结构多样、血液含量极低且血液成分复杂,实现其高效、高特异性清除一直是临床面临的严峻挑战。

目前,临床上已有少量用于内毒素清除的血液净化产品,但其清除机制主要依赖于非选择性或弱选择性的物理吸附。此类材料因特异性不足,在清除内毒素的同时,往往伴随脓毒症治疗所需活性药物、血浆蛋白、血细胞等有益成分的大量流失,严重削弱血液净化的治疗效果,且给患者术后康复带来极大健康隐患。

为了解决血液净化材料对内毒素清除选择性及效率方面的瓶颈问题,研究团队创新性地融合高亲和多肽与分子印迹聚合物技术,成功开发出新型“双亲和”内毒素特异性捕获材料[1]。该研究首先瞄准内毒素的保守结构核心(Kdo₂-类脂A)作为靶标,通过噬菌体展示技术筛选出一种新型高亲和肽(P-HK),该肽对内毒素表现出卓越结合能力。同时,巧妙利用内毒素的两亲性质,通过乳液界面聚合的方法,构建了表面具有内毒素精准匹配空腔的印迹聚合物小球。最终,将印迹聚合物与亲和肽偶联,构建了一种新型“双亲和”内毒素捕获材料,实现了“形状选择性识别”与“肽特异性亲和”的协同增效。实验结果显示,该材料在对大肠杆菌内毒素的清除中,不仅在缓冲液中清除率高达99.2%,在全血环境实现了95.4%内毒素清除率,并对多种细菌来源的内毒素均表现出广谱清除能力。同时,该材料还具备优异的抗蛋白黏附性能和良好的生物相容性,为其血液净化应用提供了关键安全保障。在脓毒症兔模型治疗中,基于该材料的血液灌流实现了84.8%的内毒素清除率,有效缓解了多器官损伤,显著提升了存活率。

该研究通过创新的“双亲和”技术路径,攻克了内毒素特异性清除的难题,在清除效率、吸附容量、广谱性和生物相容性等方面均实现突破性提升,为脓毒症治疗提供了一种精准、高效的全新技术方案,也为其它血液毒素的特异性清除提供了重要参考。

参考文献:

1. H. Wei, X. Li, Y. Xiong, X. Zhang, M. Li, H. Zhang, X. Chen, D. Wang, H. Qin, Y. Chang, X. Wang, G. Qing, *Adv. Mater.* **2026**, 38, e17135.

P-45

基于 HOF/COF 异质结的荧光-纳米酶双模传感器用于单宁酸的
选择性检测

兰悦, 高蝶*

西南医科大学药学院, 四川省泸州市, 646000

通讯联系人 E-mail: gaodie1203@swmu.edu.cn

摘要:

单宁酸(TA)是一种天然多酚类化合物,广泛存在于植物、水果及多种饮料中,在食品安全、环境安全及人体健康等多个领域发挥着重要作用,引起了广泛的研究兴趣。在食品与饮料领域,TA作为一项关键的质量参数,其浓度直接影响风味特征、色泽稳定性及涩感。从环境角度来看,TA是腐殖质形成的重要前体物质,其降解可能生成新型卤代芳香族消毒副产物,这些副产物通常具有较高的毒理学风险。此外,在多种废水(包括生活污水以及林业、软木加工等行业排放的废水)中均可检测到较高水平的TA残留。因此,建立灵敏、可靠的TA检测方法,对于食品质量保障、环境监测及健康风险评估具有重要意义。

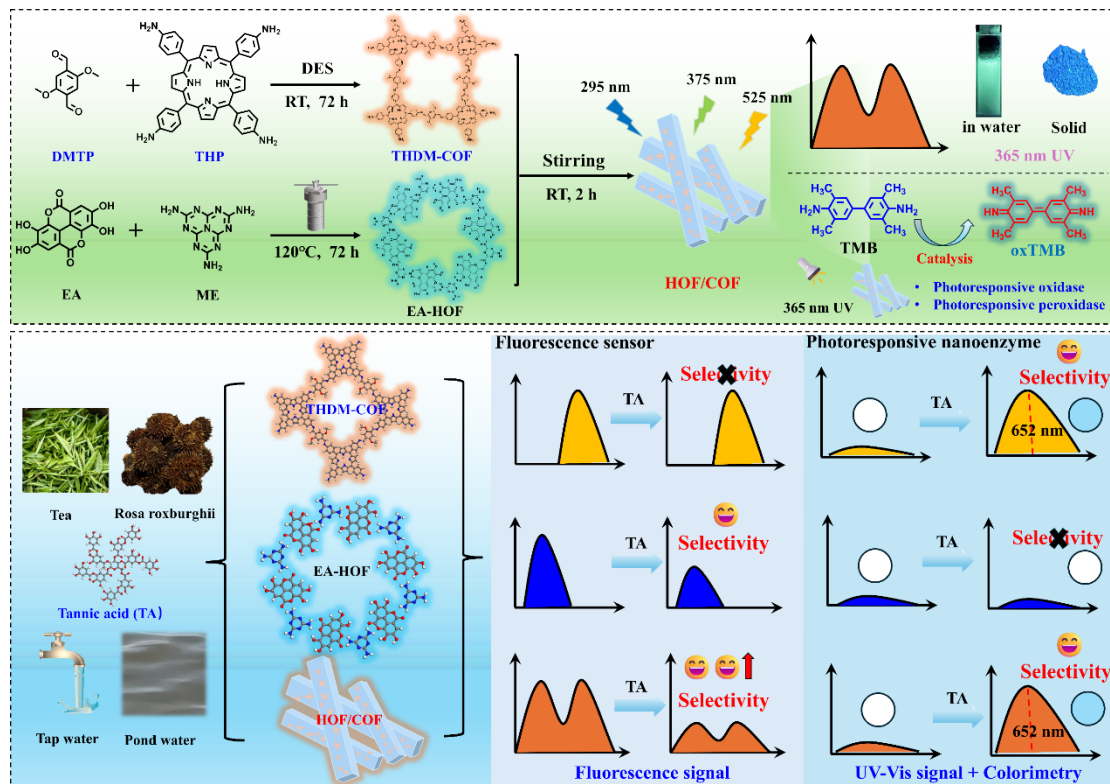
目前,用于TA检测的分析技术,如高效液相色谱、质谱和电化学方法等已较为成熟,但仍受限于复杂的样品前处理流程、对精密仪器的依赖以及现场应用的适应性不足。荧光传感因其高灵敏度、快速响应和操作简便等优势,已成为一种颇具前景的替代策略。基于碳量子点(CDs)、金属有机框架(MOFs)及复合探针体系等多种荧光探针已被成功开发用于TA检测。然而,多数荧光传感器仍依赖单一信号输出,易受环境和仪器波动影响,从而可能降低结果的可靠性。为提升检测的准确性和稳健性,融合两种独立响应机制的双模式传感策略(如荧光-比色双模式策略)被提出,此类方法通过信号交叉验证实现自校准,显著增强了检测的可靠性。

氢键有机框架(HOFs)和共价有机框架(COFs)是两类新兴的晶态多孔材料,具有结构明确、比表面积高、官能团可调等优点,在传感应用中展现出巨大潜力。HOFs和COFs通常为全有机且不含金属,这从根本上消除了因金属离子浸出导致的信号不稳定及生物相容性风险,使其成为构建高稳定性和生物安全性传感平台的理想构筑单元。将HOFs与COFs集成为异质结构,可有效结合HOFs温和的合成条件与溶液可加工性,以及COFs优异的化学稳定性和结构刚性。此类异质结中丰富的分级孔道与可调的界面相互作用(如氢键、 π - π 堆积),不仅为荧光调控和催化反应提供了充足的活性位点,还能促进界面电荷转移与能级匹配,从而协同提升材料的荧光性能和类酶催化活性。因此,HOF/COF异质结被认为是开发高性能、无金属荧光纳米酶的极具潜力的候选材料。赋予HOF/COF异质结光响应特性(如光响应氧化酶样活性和过氧化物酶样活性),可显著拓展其功能。

本文提出了一种基于氢键有机框架/共价有机框架(HOF/COF)异质结的新型双模传感平台,用于单宁酸(TA)的检测。该平台巧妙地将HOF的荧光识别能力与COF的光响应纳米酶活性集成于一体。HOF组分引入丰富的氢键位点,能够实现TA的特异性识别,并通过光致电子转移(PET)、动态猝灭和内滤效应(IFE)的协同机制调控荧光信号。COF组分提供了稳定的多孔骨架,并同时展现出光响应氧化酶样和过氧化物酶样活性,可用于比色检测。异质结的形成诱导了显著的界面协同效应,从而提升了检测的灵敏度与选择性。HOF/COF异质结成功应用于多种实际样品(刺梨、茶叶及环境水样)中TA的分析检测。

关键词: 氢键有机框架; 共价有机框架; 异质结; 单宁酸; 双模传感器。

Scheme



参考文献:

- [1] Cai, Y. Y., Dong, T., Bian, Z. H., Liu, H., Liu, X., Liu, A. H., Metal-organic frameworks based fluorescent sensing: Mechanisms and detection applications. *Coordin Chem Rev.*, 2025, 529.
- [2] Wang, Z. G., Bie, C. B., HOF/COF 2D/2D S-scheme heterojunction for photocatalytic H₂ production. *J Mater Sci Technol.*, 2026, 243, 206-

P-46

循环固相传感基底快速定量检测中药材中真菌毒素残留

王博, 郭黎明, 马翔宇, 张加栋*

淮安大学

通讯联系人 E-mail: jiadongzhang@hyit.edu.cn

表面增强拉曼散射 (SERS) 技术因其高灵敏度已成为痕量物质检测的强大工具, 然而, 传统方法制备的SERS基底普遍存在信号均匀性差、成本高昂及一次性使用等问题, 限制了其在实际检测场景特别是食品快速筛查中的广泛应用 [1-2]。为解决此问题, 本研究发展了一种基于阳极氧化铝(AAO)模板与银纳米颗粒 (Ag NPs) 复合的可重复使用SERS基底的简易制备方法 [3]。该方法的核心在于利用正己烷-乙醇体系的液-液界面选择性富集单分散Ag NPs, 并借助静电吸附作用和AAO纳米孔道产生的毛细力, 引导Ag NPs在其表面及孔口进行紧密、有序的自组装, 形成“粒子在上, 孔阵在下”的稳定复合结构, 使得该基底的电场增强因子达到近312倍。此结构不仅产生了高密度的电磁“热点”, 还通过机械互锁效应使Ag NPs与基底牢固结合。性能表征表明, 该基底对SERS信号报告分子(4-ATP)表现出卓越的增强效应与优异的信号重现性。本研究通过适配体的特异性识别特性结合4-ATP的强SERS信号 (图1) [4], 在对AFB₁的检测实验中LOD达到了100 pg/L, LOQ达到了333.3 pg/L。

更重要的是, 得益于其稳固的结构, 本研究中该基底经水、乙腈两种溶剂10次剧烈清洗后, SERS信号强度未发生明显衰减, 展现了突出的可重复使用性 (图2)。本研究制备的SERS基底具有工艺简便、成本低、性能稳定且可重复使用的综合优势, 为开发适用于中药材中有害物质 (如真菌毒素、农药残留) 的高通量、低成本现场检测器件提供了有力的材料平台。

关键词: 表面增强拉曼散射 (SERS); 可重复使用基底; 毒素检测

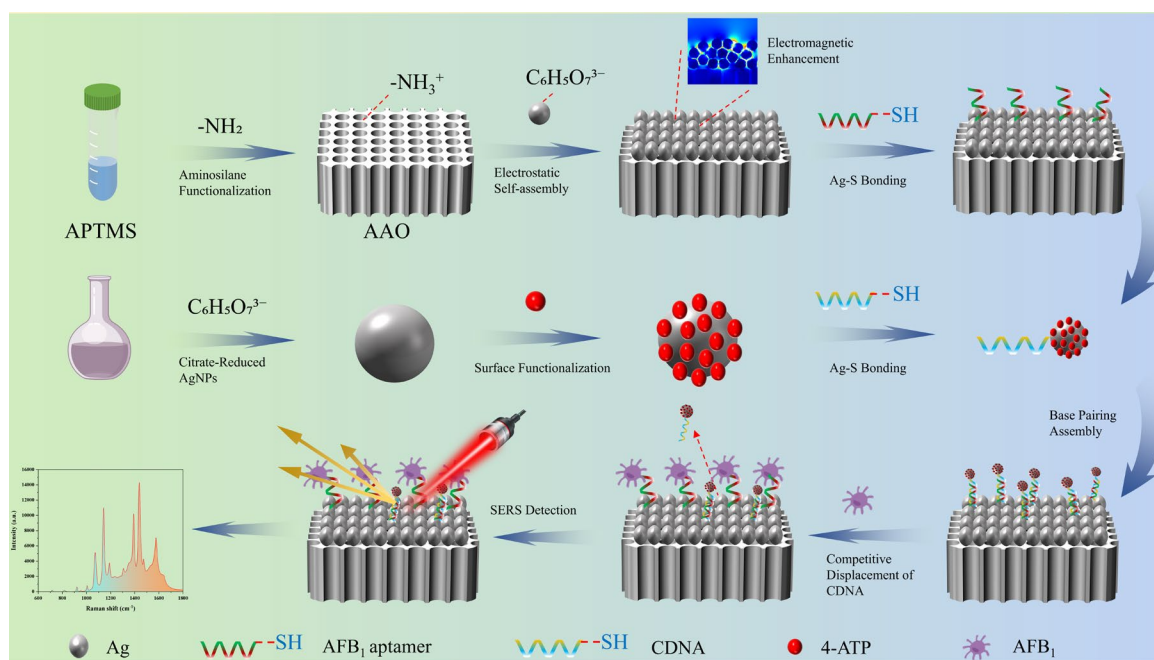


图1. 可重复使用SERS基底的制备机理示意图：展示了银纳米颗粒在AAO模板上形成稳定互锁结构的过程及特异性识别的检测方法。

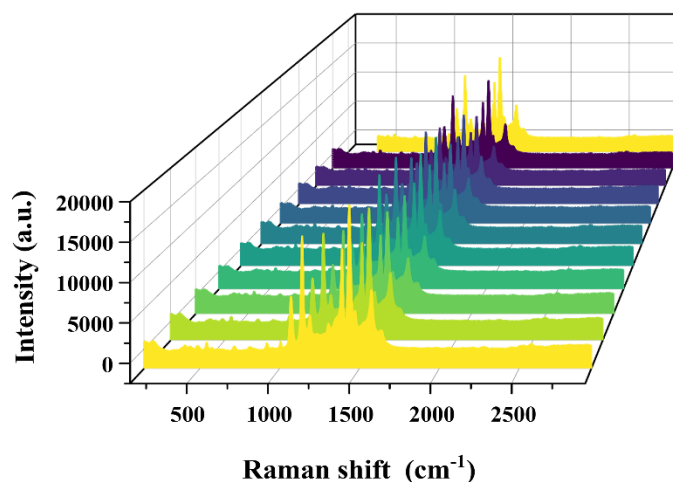


图 2. SERS 基底冲洗测试信号图。第一次为初始信号，之后经过 5 次水洗 5 次乙醇冲洗信号未有明显衰退。

参考文献：

- [1] Saleem M, Hassan MM, Ahmad W, et al (2026) Recent advancements in SERS strategies for biotoxin detection in different food matrices. Chemical Engineering Journal 529:172667.
- [2] Long B, Zhang Q, Zhang L, et al (2025) Recent advances in nanomaterial biosensors for the detection of antibiotics to ensure food safety. Chemical Engineering Journal 521:166634.
- [3] Dong J, Li C, Wang Y, et al (2024) Fabrication of complexed nanostructure using AAO template for

- ultrasensitive SERS detection. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 312:124044.
- [4] Fan X, Zhang Z, Liu Z, et al (2026) Aptamer-engineered SERS sensors: Molecular recognition meets plasmonic enhancement for precision detection. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 196:118664.

P-47

基于双酶活性 Cu-MOF@POMs 复合纳米球的酚类污染物自供电传感微器件的构建及性能研究

窦彦超, 张加栋, 郭黎明, 马翔宇*

淮安大学

通讯联系人 E-mail: xiangyuma@hyit.edu.cn

在这项工作中, 我们成功在 Cu-MOF 表面原位生长了 POMs, 并通过多种表征手段证实了两者的复合, 成功制备出了可以通过调控 pH 来获得不同酶活性的复合纳米酶, 在低 pH 值时显过氧化物酶活性, 而在弱碱性 pH 值时显漆酶活性。其中 $\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}^+$ 氧化还原对是漆酶的活性核心, 能高效催化酚类物质的需氧氧化。POMs 是优异的电子受体/给体, 能与 Cu-MOF 形成快速电子通道, 大幅提升类氧化酶催化循环速率, 增强信号, 并且 POMs 中高价金属中心可以可逆地接收和释放多个电子, 通过与 H_2O_2 结合, 使其发生断裂, 生成高活性的羟基自由基 $\cdot\text{OH}$ 。基于此, 我们构建了一种简便、灵敏的自供电微器件用于酚类污染物的现场检测。通过负载 Cu-MOF@POMs 纳米球的双室结构, 在不同 pH 下分别激活漆酶和过氧化物酶活性, 当对苯二酚 (HQ) 在漆酶活性的作用下被氧化时, 产生的电子通过外电路传输, 驱动过氧化物酶室的还原反应, 由此形成开路电位信号。该信号强度与 HQ 浓度正相关, 对 HQ 的检测限低至 $0.188\mu\text{M}$, 并可直接使用电压表现场测试, 可用于初步评价酚类的浓度。另外, 其具有优异的选择性和稳定性, 为现场测试提供了一种新策略, 具有广泛的应用前景。

关键词: 双酶活性; 自供电; 酚类检测

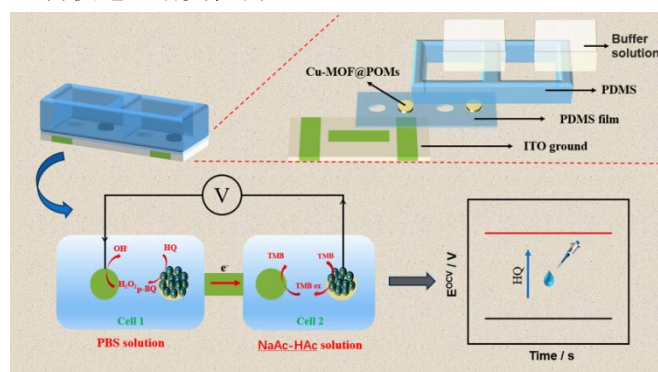


图 1 HQ 传感微器件的结构及传感机理图

参考文献:

1. L. Ming, C. Jin, W. Wei, *et al.* Oxidase-like MOF-818 Nanozyme with High Specificity for Catalysis of Catechol Oxidation, *J. Am. Chem. Soc.*, 2020, 142, 15569–15574.

2. L. Xiao, Y. Jiao, C. Jing, *et al.* Facile preparation of four-in-one nanozyme catalytic platform and the application in selective detection of catechol and hydroquinone, *Sensors and Actuators: B. Chemical.*, 2021, 337, 129763.
3. M. Pan, P. Hong, Z. Xin, *et al.* Dual nanozyme sensor enables rapid at-home cancer surveillance, *Talanta.*, 2025, 295, 128237.

P-48

Key toxicological targets identification for atherosclerosis induced by
environmental hazardous substance nicotine exposure and its
antagonists screening from active components of *Dendrobium
officinale*

Heng Li, Qingping Xiong*

淮安大学

通讯联系人 E-mail: qpxiong@gmail.com

Precise toxicological mechanism of atherosclerosis (AS) induced by environmental hazardous substance nicotine exposure remains unclear, impeding its prevention strategies and antagonist development. Additionally, it is yet unknown whether *Dendrobium officinale*'s active components can antagonize nicotine-induced AS. This study aimed to elucidate nicotine exposure-induced AS toxicological mechanisms and identify *Dendrobium officinale*'s active components-derived antagonists. Firstly, using ApoE^{-/-} mice AS model fed high-fat diet with nicotine, we confirmed that nicotine exposure can aggravate AS, while *Dendrobium officinale* extract (DOE) significantly alleviated it. Through multi-dimensional artificial intelligence analysis, we identified MMP9, CCR1, and HMOX1 as core targets of nicotine exposure-induced AS. Next, UHPLC-Q-TOF-MS/MS identified 40 active components in DOE. Meanwhile, eight key DOE's active components were successfully screened as nicotine's potential antagonists. Furthermore, molecular dynamics simulations further validated the strong binding affinity of two representative antagonists, including L-tryptophan and citric acid, to nicotine-induced AS core targets. Finally, in vitro experiments and multivariate statistical analysis demonstrated that core targets mediated nicotine exposure-induced AS, while L-tryptophan and citric acid effectively inhibited them. Take together, MMP9, CCR1 and HMOX1 were crucial mediators of nicotine exposure-induced AS, effectively antagonized by erianin, nobilin D, naringenin, dihydroresveratrol, citric acid, syringic acid, vanillic acid and L-tryptophan from DOE's active components. Keywords: Environmental hazardous substance nicotine exposure; Atherosclerosis; Toxicological mechanisms; Active components of *Dendrobium officinale*; Antagonist.

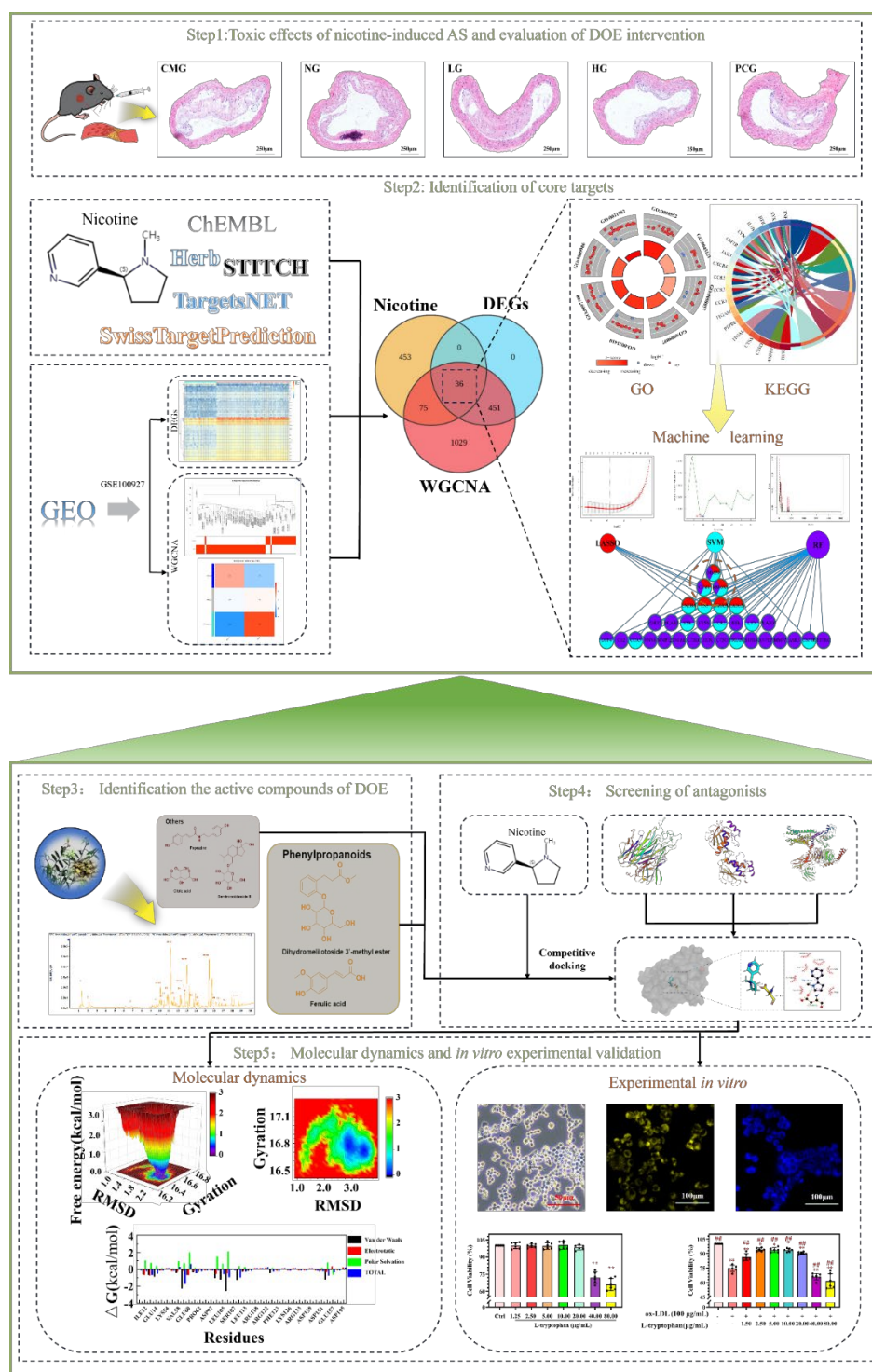


Fig. 1. Detailed work-flowchart of the overall research idea

P-49

Spatial Molecular Engineering of Hole Semiconductors Enables Record Efficiency and Durability in Inverted Perovskite Solar Cells

Zhe Wang⁺, Zongyuan Yang⁺, Chenzhe Xu⁺, Zhihui Wang,^{*} Zhaolong Ma, Mengyuan Li, Rui Kong, Hui Cheng, Xin Xiong, Suhao Yan,^{*} Xueping Zong,^{*} Lixin Xiao,^{*} and Mao Liang^{*}

Huaian University

通讯联系人 E-mail: wangzhihui@hyit.edu.cn

Abstract: Conventional small-molecule hole-transporting materials (SM-HTMs), although morphologically robust, typically suffer from limited hole mobility, interfacial energy misalignment, and inefficient charge extraction, which collectively hinder power conversion efficiencies (PCEs) above 25% in inverted perovskite solar cells (PSCs). Herein, breaking from conventional design paradigm, novel spatial molecular engineering was targeted proposed for SM-HTMs to overcome inherent limitations while reinforce advantages. By spatially exposing the functional heterocyclic core to release its full potential, the tailored WH13 dramatically enhances the perovskite/HTM interfacial interactions, promotes crystallization and facilitates hole extraction. More importantly, the resultant planar-steric architecture enables long-range π -stacking order while supporting nanocrystal-level film-formation, thereby achieving an optimal balance between charge transport dynamics and morphological features. Consequently, WH13-based inverted PSCs achieve a champion PCE of 26.6% (certified 26.24%) with exceptional operational stability (>99%, ISOS-L-1 500 h), representing the highest efficiency reported to date for SM-HTM-based PSCs. This spatial molecular engineering strategy establishes a generalizable design paradigm for next-generation HTMs, opening a promising pathway toward high-performance, operationally stable and commercially viable PSCs.

参考文献:

- [1] X. Zhang, S. Wu, H. Zhang, A. K. Y. Jen, Y. Zhan, J. Chu, Nat. Photon. 2024, 18, 1243–1253.
- [2] M. A. Green, E. D. Dunlop, M. Yoshita, N. Kopidakis, K. Bothe, G. Siefer, X. Hao, J. Y. Jiang, Prog. Photovoltaics 2025, 33, 795–810.
- [3] Y. Li, Z. Zheng, X. Zheng, X. Liu, Y. Yang, Y. Zhu, Z. Wang, X. Ren, M. Fu, R. Guo, J. Guo, Z. Xiao, Y. Rong, X. Li, eScience 2025, 100449.
- [4] Y. Zhang, Z. Yang, M. Li, Z. Wang, Y. Xiong, X. Guo, X. Zong, Y. Wang, M. Liang, Adv. Energy Mater. 2025, 15, 2501855.
- [5] M. Azam, Y. Ma, B. Zhang, Z. Wan, X. Shao, H. A. Malik, X. Yang, J. Luo, C. Jia, Energy Environ. Sci. 2025, 18, 6744–6753.

P-50

调控氮化碳上的氧还原途径以增强 H_2O_2 光合作用

盛波*, 李佳锐, 张静

淮安大学

通讯联系人 E-mail: bosheng@hyit.edu.cn

利用石墨氮化碳 (CN) 进行光催化氧还原反应 (ORR) 生成 H_2O_2 被认为是一种利用无限太阳能的绿色可持续途径。然而, 该过程受限于单电子转移过程的副反应, 从而降低了整体效率。本文提出了一种通过调控氧还原途径来优化 H_2O_2 光合成的有效方法。具体而言, 在 NaBH_4 存在下, 通过引入氰基和氮缺陷对 CN 进行改性。最佳光催化剂 BCN 的 H_2O_2 生成速率达到 $570 \mu\text{mol/g/h}$, 效率提高了 11 倍。机理分析表明, 原始 CN 中的单电子氧还原途径在 B_xCN 中转变为双电子途径, 这有助于提高 ORR 效率并加速 H_2O_2 光合成过程中 $\text{O}_2 \cdot^-$ 的转化。这项工作揭示了一种通过调控氧还原反应途径来优化 H_2O_2 光合成的有效方法。

关键词: 光催化, 氮化碳, 双电子转移, H_2O_2 生成, 氧还原

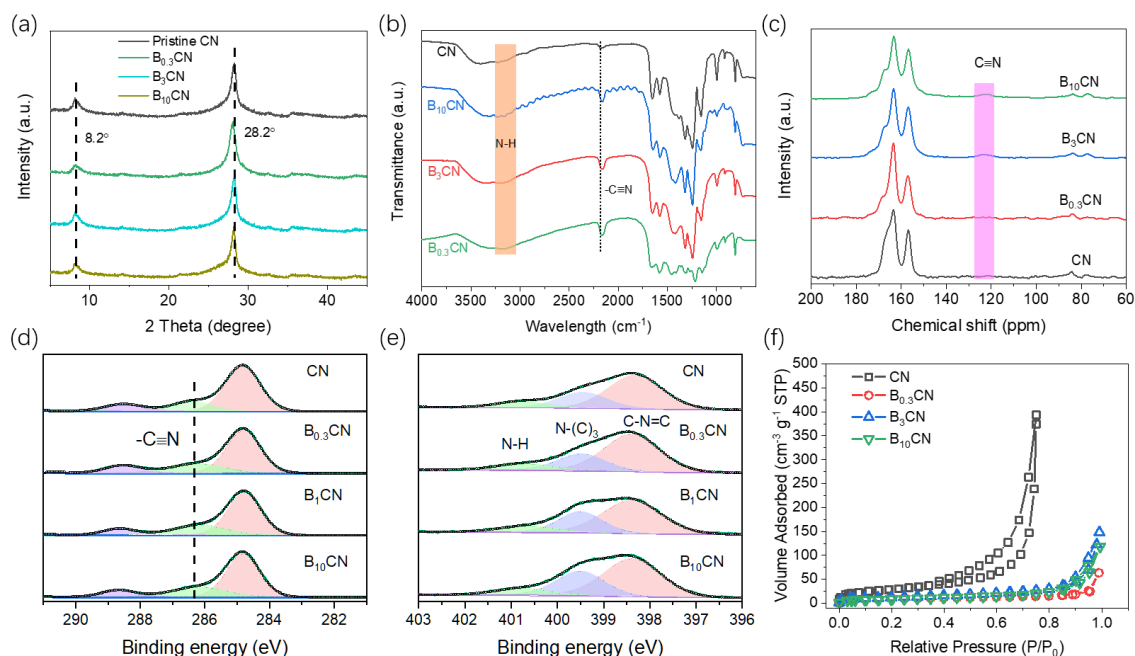


图 1. BCN 的 XRD (a)、FT-IR (b)、ssNMR (c)、XPS (d-e) 和 N_2 (f)

P-51

电场驱动制备高分散 ENP 膜及其去除水中 Cr(VI) 的研究

周一铭, 孙杨硕, 蒋贵阳, 舒蕾霖, 张静*

淮安大学

通讯联系人 E-mail: zhangjing860321@hyit.edu.cn

本研究成功采用电场驱动物理技术, 将纳米零价铁 (NZVI) 负载于聚偏氟乙烯 (PVDF) 膜上, 制备出高度分散且稳定的 NZVI-PVDF 复合膜 (ENP)。该方法避免了有毒物质的生成, 并显著抑制了 NZVI 的团聚与氧化, 对废水中六价铬 (Cr(VI)) 的还原具有高效性。扫描电子显微镜 (SEM) 和原子力显微镜 (AFM) 分析表明, 与传统负载方法相比, 该技术有效减少了 NZVI 的团聚现象。所得 NZVI 颗粒平均直径为 17.29 nm, 膜表面均方根粗糙度 (Sq) 为 127.338 nm, 确保了更高的 Cr(VI) 还原活性位点可用性。此外, 负载 NZVI 后, PVDF 膜的表面接触角从 77.4° 降至 63.1°, 表明其亲水性增强。Cr(VI) 还原实验结果表明, 在最优条件 (施加电压 6 kV、pH=2、温度 25 °C、常压) 下, 对于初始浓度为 100 mg/L 的 Cr(VI) 溶液, ENP 膜在 1 小时内实现了 99.8% 的 Cr(VI) 去除率。这些发现表明, 电场驱动的 NZVI 负载方法将为工业废水处理提供一种有前景、经济且环境友好的策略, 有效克服 NZVI 团聚问题, 同时拓展其在水处理技术中的实际应用。

关键词: 电场驱动; 纳米零价铁; 聚偏氟乙烯; 膜

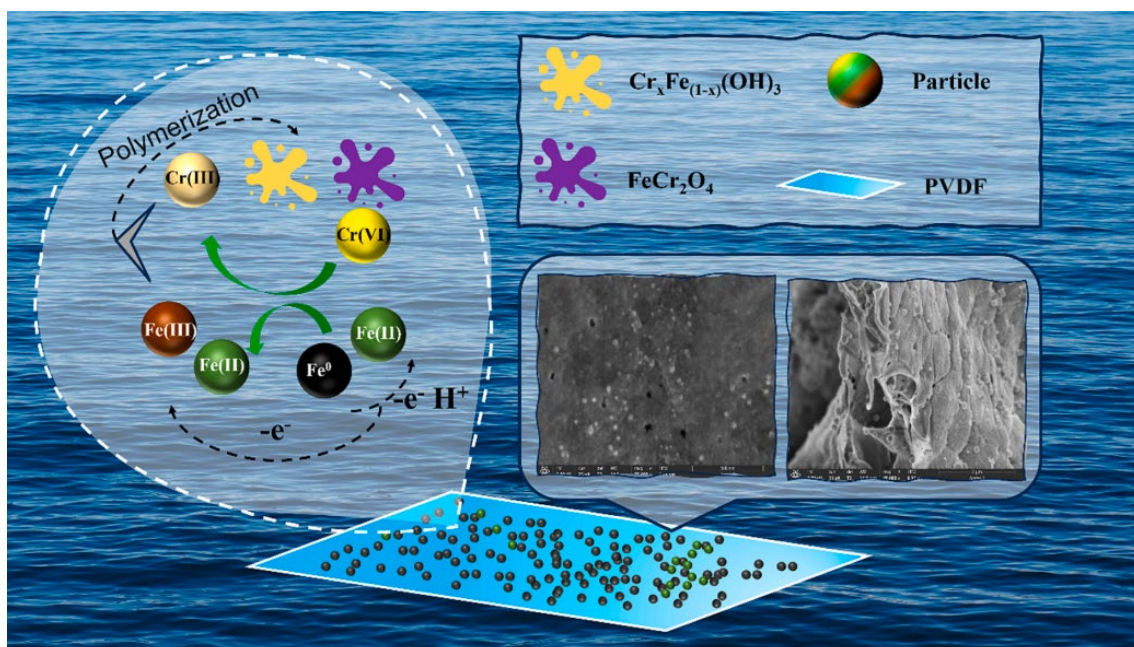


图 1 ENP 膜反应机理示意图

P-52

基于芳伯胺 COF 功能化试纸的亚硝酸盐双模可视化快检

李清豹, 丁亮, 王双寿*

*安徽工业大学, 化学与化工学院, 安徽省马鞍山市马向路 1530 号, 243032

* Email: wangss17@ahut.edu.cn

亚硝酸盐(NO_2^-)作为一种常见的食品添加剂,在腌制食品和加工肉制品中被广泛使用,但过量摄入会严重危害人体健康;同时,它也是一种重要的环境污染物,对渔业水体或水产养殖构成危害。因此,开展 NO_2^- 的分析检测研究具有重要意义。目前, NO_2^- 的检测高度依赖仪器分析技术^[1],如电化学法、离子色谱、质谱等,虽可获得理想的检测结果,但成本和技术门槛高、便携性差,难以满足现场快速筛查的需求,而现有快速检测方法多基于 Griess 显色原理设计^[2],比色信号单一,容易受到样品基质干扰,可靠性不足。多模可视化快检策略^[3-5]为解决上述问题提供了可行的途径之一,但目前仍鲜有文献报道。基于 1,3,5-苯三甲酰氯(TMC)和对苯二胺(PPD)衍生的共价有机框架材料(COF)具有高的比表面积、丰富的芳香伯氨基、强的紫外-可见光吸收和荧光发射能力,因此可与 NO_2^- 发生重氮反应,所得重氮盐具有光吸收谱宽,易通过内滤效应(IFE)诱导荧光猝灭^[6-8],为设计新型 NO_2^- 多模可视化快检体系提供了可能。于此,本研究以 TMC-PPD-COF 包覆的滤纸为纸传感器,开发了集比色/荧光比色于一体的 NO_2^- 多模可视化传感平台,在酸性条件下响应时间快至 1 min,且比色/荧光比色的检出限(LOD)分别低至 1.8 $\mu\text{g/mL}$ 和 2.2 $\mu\text{g/mL}$,对自来水、河水、午餐肉、香肠等实际样品的加标回收率为 93.03%~108.33%,与国标方法(GB 5009.33-2025)的测定结果高度一致。更重要的是,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,在环境分析与食品安全领域展示了良好的应用前景。

关键词: 亚硝酸盐; 双模比色; 可视化快检; 食品安全

参考文献

- [1] Wang, B. Y.; Wu, Z. L.; Qin, W. D. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2017**, 247, 774-779.
- [2] Li, D.; Wang, Y. H.; Zhao, L. et al. *Biosensors and Bioelectronics*, **2018**, 99, 389-398.
- [3] Jiang, M. Z.; Xu, R. H.; Yang, C. Y. et al. *Sensors and Actuators: B. Chemical*, **2025**, 430, 137335.
- [4] Wang, S. S.; Ding, Y. W.; Zhang, L. et al. *Journal of Hazardous Materials*, **2023**, 445, 130563.
- [5] Wang, S. S.; Ding, Y. W.; Zhang, L. et al. *Journal of Hazardous Materials*, **2024**, 470, 134154.
- [6] Wang, S. S.; Wang, H. L.; Yuan, Z. H. et al. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **2022**, 14, 57251-57264.
- [7] Wang, S. S.; Zhang, L. et al. *Sensors and Actuators: B. Chemical*, **2024**, 409, 135631.
- [8] Wang, S. S.; Ding, L.; Liu, M. L. et al. *Chemical Engineering Journal*, **2026**, 535, 175309.

P-53

PM_{2.5} 中聚乙烯微塑料的快速质谱分析新策略

马金峰¹, 罗沛如¹, 张岩皓^{2,*}, 张书胜^{1,3}

1. 郑州大学化学学院, 郑州, 450001

2. 郑州大学生态与环境学院, 郑州, 450001

3. 郑州大学现代分析与基因测序中心, 郑州, 450001

* yhzhang_chem@outlook.com

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

参考文献:

1. Tournier. V, ,,,,,, Marty. A, *Nature.*, **2020**, 580, 216–219.
2. J. Feng, ,,,,,, S. Zhang, *Anal. Chem.*, **2021**, 93, 5521–5528.

P-54

环境/食品中对苯二胺抗氧化剂及其醌衍生物的快速质谱分析

张许¹, 彭子芳², 张岩皓^{1*}, 张书胜^{1,3}, 蔡宗菁⁴

1. 郑州大学生态与环境学院, 中国郑州, 450001

2. 郑州大学公共卫生学院, 中国郑州, 450001

3. 郑州大学化学学院, 中国郑州, 450001

4. 东方理工大学, 中国宁波, 315200

*E-mail: yhzhang_chem@outlook.com

对苯二胺 (PPDs) 抗氧化剂在橡胶制品中的大规模使用导致这些化学添加剂及其剧毒醌转化产物 (PPDQs) 被大量释放到环境中, 并通过食物链在生物体内富集。目前, PPDQs 的高毒性已对环境和食品安全产生重要影响, 建立高效、灵敏的检测方法用于监测环境和食品中的 PPDs 和 PPDQs 对于保障环境质量、食品安全及人类健康至关重要。然而, 由于环境和食品样品基质复杂且浓度低, PPDs 和 PPDQs 的分析通常需要复杂的样品制备和长时间的仪器分析, 不利于快速检测。本工作制备了一种新型磁性单层纳米 MXene (SNM@Fe₃O₄) 作为表面辅助激光解吸电离-飞行时间质谱 (SALDI-TOF MS) 基质和吸附剂, 用于快速分析中国南北方的实际水样中的 PPDs。进一步, 使用对氨基偶氮苯 (*p*-AAB) 对多层 MXene 进行修饰, 制备了新型材料 *p*-AAB/MXene, 作为 SALDI-TOF MS 基质和吸附剂成功用于 PM_{2.5} 和饮料样品中 PPDQs 的检测。上述两种 SALDI-TOF MS 方法缩短了样品前处理时间, 具备较高的灵敏度和准确性, 实现了快速准确地筛选复杂基质中低浓度的 PPDs 和 PPDQs, 具有应用于环境和食品安全日常评估的良好潜力。

参考文献:

1. Y. Zhang, ,,,, Z. Cai, *Environ. Sci. Technol.*, **2022**, 56, 11, 6914-6921.
2. Z. Peng, ,,,, J. Xie, *Chem. Eng. J.*, **2023**, 454, 139978.
3. X. Zhang, ,,,, S. Zhang, *J. Chromatogr. A*, **2025**, 1745, 465759.

P-55

基于液相色谱-高分辨质谱联用技术的酶解时间介导的 mRNA 疫苗核苷酸序列匹配度分析方法研究

赵恒智, 王逸冉, 段艳, 赵璇, 纪宏, 李文东, 李珉*

北京市药品检验研究院 (北京市疫苗检验中心)

通讯联系人 E-mail: mirandali418@sina.com

mRNA疫苗研发周期短、免疫效果好,能快速应对突发的大流行类疾病,在新冠疫情的爆发中迅速登上了防疫一线。然而,作为新技术疫苗,mRNA疫苗产品的相关质量分析方法也尚未发展成熟,对建立准确、高效分析方法仍有较高的研究需求。因此,开展mRNA疫苗类制品的质量分析研究对于保障人民用药安全、守护群众身体健康以及mRNA疫苗企业及行业的发展都具有十分重要的意义。

作为mRNA疫苗质量分析的一大关键质量属性,mRNA的核苷酸序列匹配度对于mRNA疫苗的质量至关重要,其直接影响着mRNA疫苗的有效性和安全性。目前,USP中关于“mRNA疫苗和治疗药物的质量分析方法”指南草案第三版中提供的mRNA序列确认方法为测序法以及逆转录-聚合酶链式反应法。尽管以上两种方法均能够对mRNA序列进行确认,但这些方法难以对mRNA中的核苷酸修饰情况进行分析确认。液相色谱-高分辨质谱联用技术是一种具有高通量、高灵敏度及高特异性的理化分析技术,具有方法开发快速,更适用于紧急情况等优势。在本工作中,基于液相色谱-高分辨质谱联用技术,构建了mRNA疫苗核苷酸序列匹配度分析新方法。在mRNA疫苗样品分析中,能够实现单一酶解时间下核苷酸序列匹配度至97%以上,双酶解时间下汇总核苷酸序列匹配度至100%。该方法通过精确控制酶解时间,能够更为全面、完整地获取核苷酸序列及修饰相关信息,为mRNA疫苗核苷酸序列确认提供一种简便、快捷、高效的分析方法,为mRNA疫苗类产品的质量分析及监管提供了新的思路。

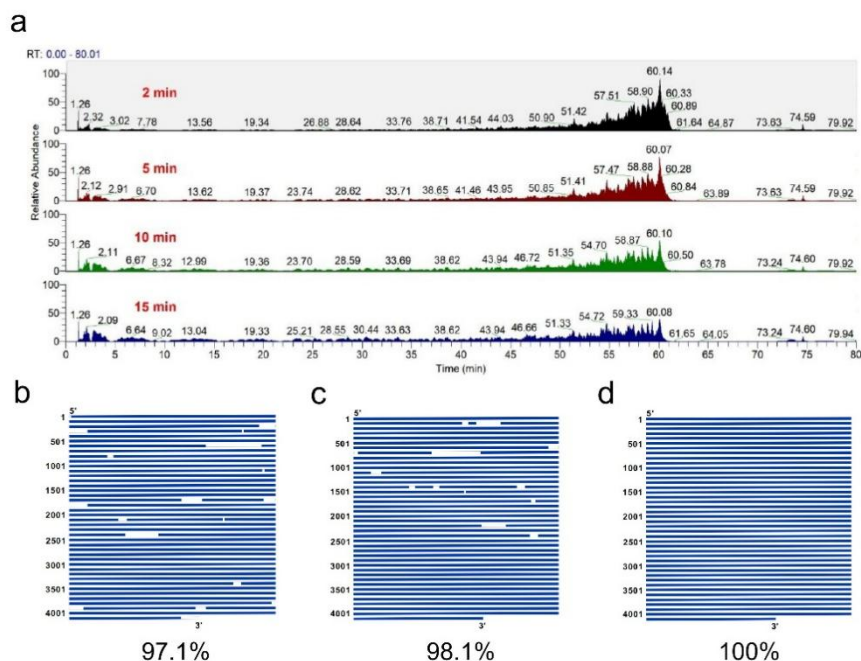


图 1 (a) 不同酶解时间下 mRNA 的总离子流色谱图；(b) 2 分钟酶解后的 mRNA 核苷酸序列覆盖度分析结果（蓝色代表已匹配序列；白色代表未匹配序列）；(c) 5 分钟酶解后的 mRNA 核苷酸序列覆盖度分析结果；(d) 2 分钟酶解叠加 5 分钟酶解后的 mRNA 核苷酸序列覆盖度分析结果

参考文献：

1. Pardi N, Hogan M J, Porter F W, et al. *Nat. Rev. Drug Discov.*, **2018**, 17, 261-279.
2. Goyon A, Scott B, Yehl P, et al. *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 8674-8681.

P-56

离子色谱法同时测定磷酸钠药用辅料中的九种无机阴离子的方法

段艳, 李文东, 纪宏, 赵恒智, 王逸冉, 李珉*

(北京市药品检验研究院(北京市疫苗检验中心) 国家药品监督管理局监管科学创新研究基地)

通讯联系人 E-mail: mirandali418@sina.com

摘要: **目的** 现行版《中华人民共和国药典》收载的药用辅料大多采用容量法或化学反应法进行无机阴离子杂质控制。这些方法的特异性、灵敏性和准确性较差, 存在主观目测误差, 并且不便于同时测定多个阴离子杂质。本研究建立基于离子色谱法同时检测磷酸钠药用辅料中 9 种无机阴离子含量的分析方法。**方法** 采用 AS11 型阴离子色谱柱, 以 100 mmol/L 氢氧化钾溶液与水为淋洗液, 梯度淋洗, 流速为 1.0 mL/min, 同时测定了磷酸钠药用辅料中的次磷酸根、氯离子、亚磷酸根、碳酸根、硝酸根、硫酸根、磷酸根、焦磷酸根、三偏磷酸根等无机阴离子的含量。**结果** 各无机阴离子在检测条件下线性关系良好, 相关系数 R 均大于 0.999; 加样回收率 ($n=9$) 在 86%~115%; 精密度试验中, 各峰的保留时间的 RSD 均小于 0.3% ($n=6$), 峰面积的 RSD 均小于 10.0% ($n=6$)。表明该方法操作简便, 准确灵敏, 9 种被测组分峰型良好, 分离度好; 对 14 批样品进行测定, 氯离子均低于 0.005%, 硫酸根、硝酸根均低于 0.01%, 碳酸根均低于 0.50%, 只有 1 批样品检出焦磷酸含量 0.76%, 其他离子浓度均较低。**结论** 该方法能较好分离磷不同价态的无机阴离子, 避免了离子间的相互干扰, 且不受主成分磷酸根离子浓度大的影响; 灵敏度高; 可为其他药用辅料及食品、药品、疫苗佐剂、化妆品等相关杂质的质量控制提供参考。

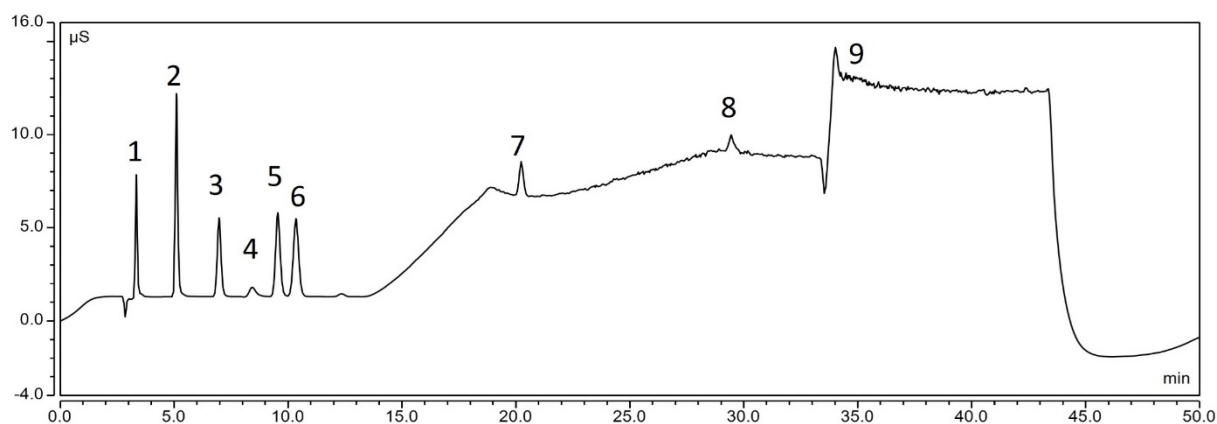


图 1. 色谱图

参考文献:

1. USP 43-NF 38 [S]. 2022: Issue 3
2. Denise Hatton, William F. Pickering. Separation of oxyanions of phosphorus by single column ion chromatography – ScienceDirect. Talanta, Volume 40, Issue 3, March 1993, 307-311.
3. Monica M. McDowell, Michelle M. Ivey, Mary E. Lee, Verena V.V.D. Firpo, Tina M. Salmassi, Crist S. Khachikian, Krishna L. Foster, Detection of hypophosphite, phosphite, and orthophosphate in natural

geothermal water by ion chromatography. *Journal of Chromatography A*, 1039 (2004) , 105–111.

P-57

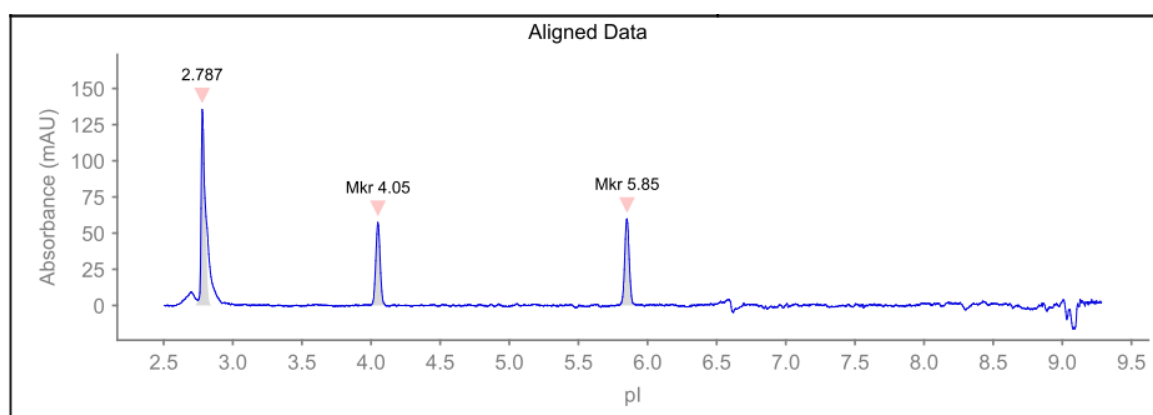
全柱成像毛细管等电聚焦电泳分析乙型肝炎病毒表面抗原电荷异质性

王逸冉, 李珉, 段艳, 赵恒智, 邵天舒, 赵璇, 纪宏*

北京市药品检验研究院 (北京市疫苗检验中心)

通讯联系人 E-mail: wyrscarlet@163.com

乙肝是严重威胁公共健康的重大传染病, 其病毒抗原 (HBsAg) 是感染诊断、病毒复制活性评估及治疗监测的核心标志物。全柱成像毛细管等电聚焦电泳 (image capillary isoelectric focusing, iCIEF) 作为一种高分辨分析技术, 可依据蛋白质等电点 (isoelectric point, pI) 差异实现对HBsAg的精细分离。该技术兼具分离效率高、样品用量少、重现性好及符合药典合规要求等优势, 为HBsAg的纯度鉴定、工艺稳定性评价与产品一致性验证提供了关键技术支撑。本研究建立了对HBsAg等电点的iCIEF检测方法并进行验证。通过优化检测HBsAg在iCIEF过程中的聚焦时间、样品终浓度等参数, 建立测定HBsAg的iCIEF方法。取2.5 μ L的HBsAg、35 μ L的1%甲基纤维素、10 μ L的200mmol $\cdot$ L⁻¹的亚氨基二乙酸、4 μ L两性电解质溶液、30mg尿素、各1 μ L的pI为4.05和5.85的pI标记物及纯化水, 配制为100 μ L供试品体系进行聚焦分析, 聚焦条件为预聚焦电压1500V、持续时间1min, 聚焦电压3000V、持续时间4.5min。优化后方法的专属性、准确度、精密性、重复性、线性及耐用性均良好。建立的iCIEF方法适用于HBsAg的pI检测, 可为HBsAg的表征提供依据以及相关疫苗研发和生产过程中的质量控制提供参考, 为乙肝疫苗、诊断试剂及治疗性药物的质量提升与创新研发提供科学依据, 对提升临床诊断与生物制品质控水平具有重要意义。



P-58

基于红光碳点的荧光开关型传感器，通过适配体介导的 FRET 实现甲胎蛋白的灵敏检测

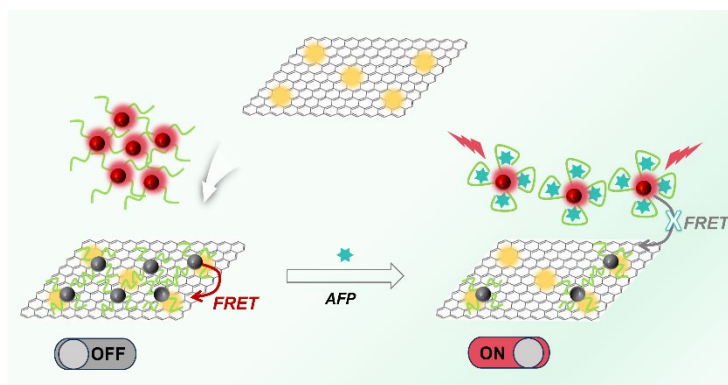
陈玮，孙珺扬，冷晗，张慧慧，陈旭伟*

东北大学

通讯联系人 E-mail: chenxuwei@mail.neu.edu.cn

甲胎蛋白（AFP）是一种在胎儿发育期间大量产生的血清糖蛋白，具有重要的生理和病理作用。它最初在卵黄囊中表达，随后在胎儿肝脏和胃肠道中持续生成，并成为主要的血清结合蛋白。在临床上，AFP浓度的异常表达通常与胎儿发育缺陷密切相关；而在成年人中，其水平升高是肝癌和生殖细胞肿瘤等癌症的关键生物标志物。因此，开发准确的AFP检测方法对于癌症的早期诊断和产前监测均具有重要意义。

在本工作中，我们探究了适配体功能化的红光碳点（RCDs-apt）作为优异的信号标记在荧光传感中的应用潜力。首先，通过RCDs上的氨基与AFP适配体上的羧基之间的酰胺化反应，构建了RCDs-apt偶联物；其次，以氧化石墨烯（GO）为基底，采用沉淀沉积和刻蚀的方法制备了硫醇修饰的GO-AuNPs（GO-AuNPs-SH）。当没有AFP存在时，GO-AuNPs-SH与RCDs-apt之间通过 π - π 堆积作用介导的FRET过程，导致RCDs-apt的荧光发生猝灭。而当加入AFP后，适配体能够特异性识别并结合AFP，使RCDs-apt从GO-AuNPs-SH表面解离，从而恢复了RCDs-apt的荧光。基于适配体介导的荧光“Off-On”过程，我们开发了一种用于AFP检测的荧光传感器。通过实验证明，该传感器表现出优异的灵敏度和选择性，线性检测范围为 $0.1\text{--}12\text{ ng mL}^{-1}$ ，检出限低至 20.7 pg mL^{-1} 。此外，该传感器还成功地应用于血清样本中AFP含量的检测，回收率在98.2%–109.6%之间。本工作彰显了红光碳点传感器作为早期疾病筛查工具的应用潜力，并为基于FRET的生物传感技术的发展提供了新思路。



参考文献:

1. W. DeGroat, H. Abdelhalim, K. Patel, D. Mendhe, S. Zeeshan, Z. Ahmed, *Sci. Rep.*, **2024**, 14, 1-13.
2. A. Matonóg, A. Drosdzol-Cop, *Front. Endocrinol.*, **2024**, 15, 1307619.
3. A.T. Kal-Koshvandi, *Trends Anal. Chem.*, **2020**, 128, 115920

P-59

集成深度学习与鱼骨形微流控的病原体多重快检平台

王昕昱, 马海燕, 张悦文*, 蒲巧生*

兰州大学化学化工学院

zhangyw@lzu.edu.cn

快速、灵敏地检测食源性致病菌对确保食品安全和保护公众健康至关重要。本研究开发了一种集成了深度学习算法的创新型微流控荧光数字分析平台, 实现了对超低浓度的病原体的现场检测。该生物传感器采用交错鱼骨形双螺旋微流控设计, 集成了细菌捕获、检测、使用量子点-适配体进行精确识别并释放的过程。

利用基于 Resnet-18 的卷积神经网络 (CNN) 对荧光图像进行自动化分析, 可直接从荧光图像定量大肠杆菌浓度, 简化了数据处理步骤并提高了检测灵敏度。实验结果显示, 该平台提供的线性检测范围为 10 至 3×10^6 CFU/mL ($R^2 = 0.990$), 在低细菌浓度下实现高达 100% 的捕获效率 (4×10^2 CFU/mL), 并在 1.5 小时内实现了低至 2 CFU/mL 的检测限。CNN 模型有效地过滤了背景噪声和基质干扰, 预测准确率达到 99% 以上。在牛奶和鸡肉样品进行验证, 系统展现出优异的回收率 (96.7% 至 104.0%) [1]。

同时, 借助该鱼骨形双螺旋微流控芯片, 通过将识别分子刀豆蛋白 A 更换为万古霉素和纳米抗体 Nb17, 并结合量子点-适配体和异硫氰酸荧光素标记的纳米抗体 Nb13, 从而实现了对金黄色葡萄球菌和 PR8 病毒的高效捕获与检测, 金黄色葡萄球菌的检测线为 54 CFU/mL, PR8 病毒的检测线为 500 EID₅₀/mL。

为进一步提升性能, 团队制造了一种由二氧化硅自组装修饰的纳米多孔鱼骨结构 PDMS 芯片, 以实现不同革兰氏阴性菌-沙门氏菌和副溶血弧菌的捕获与多重检测。鱼骨形结构能打破层流、增强混沌对流[2], 从而显著增强细菌与芯片通道的接触能力, 故而提高捕获效率, 相比直通道结构检测性能提高 30% 至 40% 左右; 而纳米多孔结构可以解决液体界面在固体结构表面可能出现的流体停滞和流体阻力现象[3]。因此, 本研究构建的兼具鱼骨结构与纳米多孔特性的界面能进一步优化流体动力学效应, 提升微流控芯片的捕获与检测性能。此方法通过材料学、微流控技术与生物识别的结合, 有效解决了微流控芯片捕获效率低、多重检测交叉干扰的难题。

为解决现场快检 (POCT) 难题, 本研究利用 3D 打印技术自主搭建了便携式荧光检测仪, 以结合智能手机实现了检测数据的即时读取与分析。仪器光路设计为斜射式光路设计, 配置 LED 激发光源与多通道信号区分滤镜轮。针对不同浓度 (6×10^2 - 6×10^6 CFU/mL) 的大肠杆菌的检测结果表明, 荧光强度与大肠杆菌浓度之间呈现出良好的线性关系 ($R^2 = 0.972$)。本研究通过材料科学、微流控技术与人工智能的交叉融合, 为复杂食品基质中病原体的快速、可靠检测提供了实用化的智能化方案。

参考文献:

- [1] Ma H. Y., Li G. J., Zhang H. H., Wang X. Y., Li F. Y., Yan J., Hong L., Zhang Y. W., Pu Q. S. *Sensors and Actuators B-Chemical*, **2025**, 436.
- [2] Wang J. Z., Zhang Z. C., Xu X. F. *Chemical Engineering Science*, **2025**, 318.
- [3] Mun B., Jeong H., Kim R., Gu B., Kim J., Son H. Y., Rho H. W., Lim E. K., Haam S. *Chemical Engineering Journal*, **2024**, 482.

P-60

体相功能化 PDMS 芯片

黄翔宇, 张博*

厦门大学化学化工学院, 厦门, 361005

通讯联系人 E-mail: bozhang@xmu.edu.cn

聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 因低成本、透明性高、易于复制微结构和便于快速迭代等优势, 长期占据微流控研究的核心位置。然而, 随着微流控逐步从实验室概念验证走向长期运行、高一致性和并联放大场景, PDMS 的问题已不再局限于器件的成功制备, 而在于其界面功能难以长期、稳定且一致地定义。天然疏水性、疏水恢复及由此引发的润湿漂移, 会导致液体流动不稳定、通道间稳定性波动以及器件间重现性不足。现有表面活化、涂层、接枝等后处理方法虽然能够改善器件可操作性, 但其后修饰效果通常依赖改性液体对受限空间的可达性、反应均匀性及后续稳定性, 在小通道和并联结构等高复杂度的微流控器件中存在明显局限。

基于此, 本研究提出一种体相功能化氟化 PDMS 策略, 尝试将界面修饰由“成型后修饰”前移至“材料构建”阶段。具体而言, 将全氟烯烃引入 Sylgard 184 PDMS 预聚物中, 在固化成型过程中同步完成含氟链段与 PDMS 网络的共聚接枝; 随后通过 FC-40 氟油浸泡预处理, 诱导体相内含氟链段向表面迁移富集, 从而建立低表面能、可恢复的氟化表界面。XPS 结果显示, 各掺杂样品均出现明显 F 1s 信号, 证实含氟链段已成功引入 PDMS 网络; 氟油预处理后, 样品水接触角显著升高并可在约 12 h 后稳定于约 115°。进一步研究表明, 等离子体处理虽会暂时扰动表面化学, 但氟油环境能够促进疏水性-CF₂ 基团重新富集, 实现表面性能恢复; 同时, 该体系在丙酮中的溶胀率下降, 对多种非极性和低极性溶剂的接触角提高, 并可支持 10 μm 小通道内四氢呋喃液滴的长时间稳定生成。上述结果表明, 体相功能化氟化策略不仅可以保持 PDMS 原有的结构复制优势, 还有望赋予其界面功能的同步建立与复制的能力, 从而支撑其作为面向高复杂度微流控器件的器件开发材料。

关键字: PDMS; 微流控; 表面改性; 氟化学

参考文献:

1. Kaiyue Sun, Juxing Zeng, Ya Liu, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64, e202418642.
2. Juxing Zeng, Hanchen Cao, Kaiyue Sun, et al. *Nat. Commun.* **2026**, 17: 430.
3. Jikai Chen, Hanchen Cao, Ruichen An, et al. *Anal. Chem.*, **2026**

C-01

基于金属有机骨架材料 UiO-66 的固相微萃取技术用于甲基叔丁基醚的测定

卫辰洁¹, 冯琳¹, 邓显贺², 李亚军², 梅宏成², 郭洪玲², 胡亮², 朱军^{2*}, 胡灿^{2*}

1 中国人民公安大学; 2 公安部物证鉴定中心

通讯联系人 E-mail: zhujun001cn@126.com (J.Z.); hucanjiayou@126.com (C.H.)

我们报道了基于金属有机骨架 (MOF) 的固相微萃取 (SPME) 探针的研制, 该探针可通过气相色谱-质谱联用 (GC-MS) 灵敏检测痕量甲基叔丁基醚 (MTBE)。通过聚二甲基硅氧烷粘合剂将五种 MOF (IRMOF-8、MOF-5、UiO-66、MIL-101 (Cr) 和 ZIF-8) 涂覆在不锈钢丝上, 用于 MTBE 的萃取和富集。结合气相色谱-质谱联用技术, 比较了 5 种制备的 MOF 涂层和 4 种商用涂层的萃取性能, 并对萃取温度、萃取时间、解吸温度和解吸时间等关键参数进行了优化。每种 MOF 对 MTBE 萃取的分析性能与计算得出的 MOF 和 MTBE 之间的结合能相关联。在优化条件下, MTBE 的检测在 0.0148–1.48 $\mu\text{g/mL}$ 范围内表现出良好的线性关系 (相关系数 >0.998), 检测限为 0.074 ng。方法具有令人满意的精密度 (相对标准偏差 $\leq 5.45\%$) 和准确度 ($\delta \leq 9.46\%$), 日间精密度 ($n=3$) 为 3.17%。与传统方法相比, 绝对质量检测限显著降低。此外, 制备的 UiO-66 涂层 SPME 表现出优异的选择性、稳定性和可重复使用性。该方法在水和土壤基质中的回收率为 86%–111%。最后, 该方法成功应用于实际汽油样品中 MTBE 的检测。结果证实, 所制备的 UiO-66 SPME 探针是一种从复杂基质中萃取 MTBE 的可行方法, 凸显了其在环境分析和纵火现场调查中的应用潜力。

参考文献:

1. R. Karinen, V. Vindenes, I. Morild, L. Johnsen, I.L. Nygaard, A.S., *J Forensic Sci*, **2013**, 58, 1393-1396.
2. K. Hollaender, S.T. Storrer, *Environ. Claims J.*, **2014**, 26, 333-347.
3. J. Atienza, P. Aragón, M.A. Herrero, R. Puchades, Á. Maquieira, *Crit. Rev. Anal. Chem.*, **2005**, 35, 317-337.
4. W.R. Hartley, A.J. Englande Jr, D.J. Harrington, *Water Sci. Technol.*, **1999**, 39, 305-310.
5. A. Safarzadeh-Amiri, *Water Res.*, **2001**, 35, 3706-3714.
6. F. Alshahrani, B. Tawabini, T. Saleh, M. Alrayaan, S. Alaama, R. Nasser, *Sci Rep-UK*, **2022**, 12, 19651.
7. V. Jalili, A. Ghiasvand, H. Ebrahimzadeh, R. Zendehdel, *J. Chromatogr. A*, **2024**, 1725, 464949.
8. Q. Zhang, N. Song, Y. Wang, W. Chen, Y. Wang, B. Yue, H. Yao, Y. Qiao, H. Xu, *Microchem. J.*, **2025**, 115671.
9. K. Burda, M. Black, S. Djulamerovic, K. Darwen, K. Hollier, *Forensic Sci. Int.*, **2016**, 264, 70-81.
10. D. Leszczyńska, A. Hallmann, N. Treder, T. Bączek, A. Roszkowska, *Talanta*, **2024**, 270, 125613.
11. M. Varshney, S.P. Sharma, A.N. Yadav, M. Vimal, M. Sathe, V. Kumar, *Forensic Chem.*, **2025**, 44, 100667.
12. J.K. Chen, W.Q. Fu, C.L. Feng, F.C. Wu, *Environ. Eng.*, **2018**, 36, 47-51+57.
13. P. Dewsbury, S.F. Thornton, D.N. Lerner, *Environ. Sci. Technol.*, **2003**, 37, 1392-1397.
14. M.J. Trujillo-Rodríguez, H. Yu, W.T.S. Cole, T.D. Ho, V. Pino, J.L. Anderson, A.M. Afonso, *Talanta*, **2014**, 121, 153-162.
15. A.H. Kori, M.S. Jagirani, M. Soylak, *Anal. Lett.*, **2023**, 56, 2385-2400.
16. M. Locatelli, A. Kabir, M. Perrucci, H.I. Ulusoy, S. Ulusoy, N. Manousi, S.A. Ozkan, *Microchem. J.*, **2024**, 207, 111903.
17. A. Hayat, S. Rauf, B. Al Alwan, A. El Jery, N. Almuqati, S. Melhi, M.A. Amin, Y. Al-Hadeethi, M. Sohail, Y. Orooji, W. Lv, *Mater. Today Energy*, **2024**, 41, 101542.
18. R. Majidi, A. Farhadi, I. Danaee, N.B. Panah, D. Zarei, S. Nikmanesh, *Prog. Org. Coat.*, **2023**, 183, 107803.
19. L. Xu, J. Chen, J. Zhang, *J. Hazard. Mater.*, **2025**, 481, 136530.
20. X. Hu, J. Hou, L. Pang, Z. Feng, J. Liu, H. Feng, Y. Kong, C. Liu, *Microchim. Acta*, **2025**, 192, 269.
21. Y. Wang, X. Wang, Z. Guo, Y. Chen, *Talanta*, **2014**, 119, 517-523.
22. M.O. Aziz-Zanjani, A. Mehdinia, *Microchim. Acta*, **2014**, 181, 1169-1190.
23. J. Takitane, V. Leyton, G. Andreuccetti, H. Gjerde, V. Vindenes, T. Berg, *Forensic Sci. Int.*, **2018**, 289, 165-174.
24. K. Xu, S. Zhang, X. Zhuang, G. Zhang, Y. Tang, H. Pang, *Adv. Colloid Interfac.*, **2024**, 323, 103050.
25. Y. Luo, S. Bag, O. Zaremba, A. Cierpka, J. Andreo, S. Wuttke, *Angew. Chem. Int. Edit.*, **2022**, 61, e202200242.
26. W. Xiang, Q. Wang, Z. Li, J. Dong, J. Liu, L. Zhang, *Sep. Purif. Technol.*, **2024**, 330, 125268.
27. X. Chen, Y. Zhuang, J. Chen, J. Lin, J. Chen, Z. Han, *Microchem. J.*, **2022**, 181, 107828.
28. P. Dong, G. Xie, M. Ni, *Energy*, **2021**, 222, 119920.
29. K.X. Wang, M.R. Cai, D.G. Yin, X.L. Hu, H.Y. Peng, R.Y. Zhu, *Appl. Organomet. Chem.*, **2022**, 36, e6680.
30. M. Saeed-Ul-Hassan, M. Ehtisham, A.K. Badawi, A.M. Khan, R.A. Khan, B. Ismail, *Nanoscale Adv.*, **2024**, 6, 3668-3679.
31. N. Ilić, K. Tan, F. Mayr, S. Hou, B.M. Aumeier, E.M.C. Morales, *Adv. Mater.*, **2025**, 37, 2413120.
32. N. Chang, Z.Y. Gu, H.F. Wang, X.P. Yan, *Anal. Chem.*, **2011**, 83, 7094-7101.
33. D. Behera, P. Priyadarshini, K. Parida, *Dalton. T.*, **2025**, 54, 2681-2708.

34. M. Kandiah, M.H. Nilsen, S. Usseglio, S. Jakobsen, U. Olsbye, M. Tilset, *Chem. Mater.*, **2010**, 22, 6632-6640.
35. X. Feng, H.S. Jena, C. Krishnaraj, K. Leus, G. Wang, H. Chen, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2021**, 13, 60715-60735.
36. Q. He, F. Zhan, H. Wang, W. Xu, H. Wang, L. Chen, *Mater. Today Sustain.*, **2022**, 17, 100104.
37. S. Tang, C. Luo, Z. Wang, X. Liu, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2025**, 64, 4048-4056.
38. H. Wu, Y.S. Chua, V. Krungleviciute, M. Tyagi, P. Chen, T. Yildirim, W. Zhou, *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, 135, 10525-10532.
39. M.N. Alam, L. Ricardez-Sandoval, J. Pawliszyn, *Anal. Chem.*, **2015**, 87, 9846-9854.
40. W. Wang, Z. Li, S. Zhang, S. Yang, X. Zang, C. Wang, *J. Chromatogr. A*, **2019**, 1602, 83-90.
41. G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **1996**, 54, 11169.
42. G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B*, **1999**, 59, 1758.
43. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, 77, 3865.
44. P.E. Blöchl, *Phys. Rev. B*, **1994**, 50, 17953.
45. S.T. Sun, Q. Yan, N. Li, L.J. Huang, Q. Shuai, *Rock Min. Anal.*, **2020**, 39, 408-416.
46. H. Poojary, K. Selvamuthukumar, R. Parveen, G. Illanad, D. Mandal, S. Koo, C. Ghosh, *Green Chem. Lett. Rev.*, **2025**, 18, 2486135.
47. C. Achten, W. Püttmann, *Environ. Sci. Technol.*, **2000**, 34, 1359-1364.
48. D.A. Cassada, Y. Zhang, D.D. Snow, R.F. Spalding, *Anal. Chem.*, **2000**, 72, 4654-4658.
49. P. Dewsbury, S.F. Thornton, D.N. Lerner, *Environ. Sci. Technol.*, **2003**, 37, 1392-1397.
50. V. Fernández-Fernández, M. Ramil, R. Cela, I. Rodríguez, *Anal. Bioanal. Chem.*, **2022**, 414, 4149-4165.
51. M. Wen, X. Wang, Y. Ge, C. Wang, M. Zhang, J. Li, *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 480, 136275.
52. H. Zhang, K. Wan, J. Yan, Q. Li, Y. Guo, L. Huang, *J. Environ. Sci.*, **2024**, 135, 118-129.
53. S. Cai, L. Yu, E. Huo, Y. Ren, X. Liu, Y. Chen, *Langmuir*, **2024**, 40, 6869-6877.
54. M.A. Khan, A.R. Safira, M. Aadil, M. Kaseem, J. Magnes. Alloy., **2024**, 12, 586-607.

C-02

氟改性三维六足状 ZIF-8@PVDF 复合膜用于膜式固相萃取 全氟羧酸

朱士萍¹, 张文敏², 张兰^{1,*}¹福州大学化学学院, 食品安全与生物分析教育部重点实验室(福州大学), 福州, 福建, 350002²张文敏, 闽江师范高等专科学校化学与生物技术学院, 福建 福州 350108

*Email: zlan@fzu.edu.cn

关键词: 氟改性 ZIF-8; 复合膜; 膜式固相萃取; 全氟羧酸

摘要: 全氟羧酸(PFCAs)作为一类环境水体中的持久性有机污染物,其痕量富集对样品前处理技术提出了高选择性与高效率的要求。本研究拟采用两步法制备氟改性三维六足 ZIF-8@PVDF 复合膜,并将其用于膜式固相萃取(MF-SPE)环境水样中的典型全氟羧酸。首先,通过调节三氟乙酸(TFA)的加入量,实现对 ZIF-8 的氟官能团化修饰,并诱导其形成三维六足形貌。将此氟改性的 ZIF-8 晶体与聚偏氟乙烯(PVDF)共混,经相转化法制备 ZIF-8@PVDF 基底膜。随后,将该基底膜浸泡于 ZIF-8 生长液中进行二次原位生长,以进一步增强膜表面 ZIF-8 的负载量与结构稳定性。通过扫描电镜、X 射线衍射、红外光谱及接触角测试等手段对复合膜的形貌、晶体结构、化学组成及表面润湿性进行系统表征。该复合膜结合了 ZIF-8 的高比表面积与 PVDF 的优良成膜性,其中氟改性预期通过 F-F 疏水亲氟效应增强对全氟羧酸的选择性吸附,二次原位生长有助于修复膜表面缺陷并增加有效吸附位点,同时 ZIF-8 微孔的尺寸排阻物理截留、金属节点与羧基之间的配位或静电作用以及 PVDF 基质提供的额外疏水作用将产生协同效应,从而有望实现对目标物的高亲和力与快速传质。研究将系统优化萃取参数(如膜厚度、上样速率、样品 pH、洗脱溶剂等),评估膜的萃取动力学、富集能力、重复使用性能及对实际水样的适用性。预期该方法操作简便、溶剂消耗少、通量高,可为环境中痕量全氟羧酸的高效前处理提供一种新型功能膜材料。

参考文献:

1. H. X. Di, Y. L. An, J. R. Yang, D. Y. Luan, X. W. (D.) Lou, Fluorine Modified Zeolitic Imidazolate Framework Enables Long-Life Zn-I₂ Batteries by Suppression of Polyiodide Shuttle, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202513312.
2. J.Y. Wu, Y.F. Huang, X.J. Huang, Efficient trap of polar aromatic amines in environmental waters by electroenhanced solid phase microextraction based on porous monolith doped with carboxylic carbon nanotubes, *Sep. Purif. Technol.* 2022, 282, 120067.

感谢国家自然科学基金委和食品安全与生物分析教育部重点实验室资助

C-03

腐植酸改性磁性柚子皮锚定 ZIF-8 复合材料对 15 种农药广谱性吸附的研究

张新中, 张震, 范琳, 刘经纬, 王雪梅*

高原交汇区水资源安全与水环境保护教育部重点实验室

西北师范大学化学化工学院

E-mail: zxz19881212@163.com

磁性固相萃取 (MSPE) 是以磁性或可磁化的材料作为吸附剂基质的一种分散固相萃取技术, 通常是以 Fe_3O_4 、 CoFe_2O_4 与 NiFe_2O_4 为磁核, 外部包覆或原位生长功能性材料^[1]。与常规固相萃取方法相比, MSPE 能够减少有机溶剂的使用, 简化了繁琐的样品洗脱步骤, 在外部磁场作用下, 实现与样品的快速分离^[2], 在有机污染物的检测和分析过程中发挥了重要作用。生物炭是一种由富含碳的生物质, 在无氧或缺氧条件下经过高温裂解生成的具有高度芳香化、富含碳素的多孔固体颗粒物质。具有丰富的孔隙结构、较大的比表面积且表面含有较多的含氧活性基团, 因此具有多种功能^[3]。生物炭由于成本低、制备简便、原料丰富、环境友好等, 是一种很有前途的吸附剂。

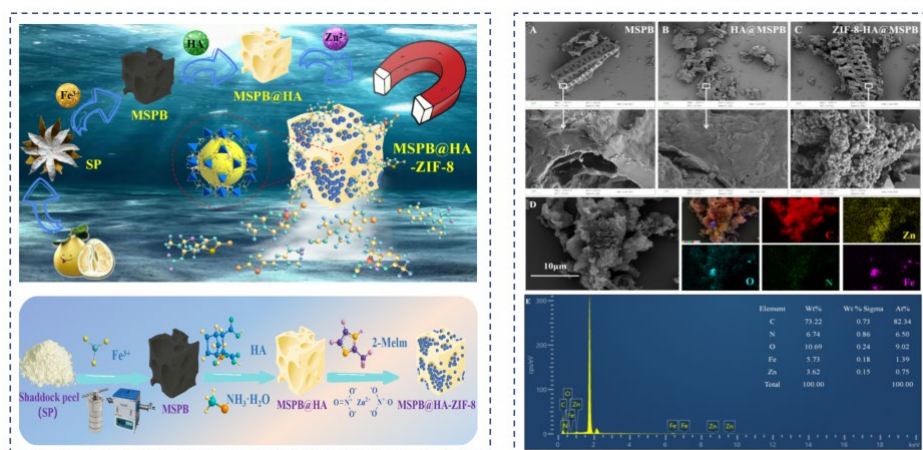


图1 MSPB@HA-ZIF-8的制备、吸附过程及形貌表征示意图

本研究以农产品废料-柚子皮为基底, 引入磁性 Fe^{3+} 进行腐植酸 (HA) 改性, 增加更多活性基团, 并进一步修饰具有较大比表面积的 ZIF-8, 使其具备更强的吸附功能性, 创造性的制备了 MSPB@HA-ZIF-8 复合材料, 以此为吸附剂, 建立了 MSPE-MSPB@HA-ZIF-8-LC-MS/MS 方法, 实现了对环境水样和药食同源物质中 15 种农药的高效吸附和灵敏检测 (图 1)。与传统的磁性材料相比, MSPB@HA-ZIF-8 具有不易团聚、亲水性高、循环次数多等优点, 并且具备良好的环境安全性, 对植物有促进生长的益处。构建的方法具有灵敏度高, 普适性强等优势。该研究有望促进农产品的废物利用, 实现废料的高值化利用, 促进生态可持续发展和复杂基质中农药的富集分离。

参考文献:

1. Q. Fu, Z. Xia, X. Sun, H. Jiang, L. Wang*, S. Ai*, R. Zhao*, *TrAC-Trend. Anal. Chem.*, **2023**, 162, 117054.
2. Q. Zhou*, Y. Yuan, Y. Sun, X. Sheng, Y. Tong, *J. Chromatogr. A.*, **2021**, 1639, 461921.
3. M. Andrunik*, M. Skalny, T. Bajda, *Sep. Purif. Technol.*, **2023**, 309, 123106.

C-04

基于多区域亲和载体的蛋白分离与保护研究

张越*, 王浩然, 王锦, 孙楠, 王进义*

西北农林科技大学化学与药学院

通讯联系人 E-mail: yzhang2019@nwfafu.edu.cn; jywang@nwsuaf.edu.cn

高效的蛋白质分离与功能保持对于生物分析、生物制药开发及疾病治疗等领域至关重要。传统亲和材料往往依赖于单一的识别位点或作用模式,极大限制了其在复杂生物体系中的适应性与应用效能。本研究提出一种多区域亲和策略用于蛋白质处理,通过整合多种纳米载体与亲和作用实现多种不同类型蛋白质的选择性分离与保护。基于金属有机骨架在过渡金属碳化物(MXene)表面的界面自组装,使载体能通过多价配位、亲/疏水及静电等作用与生物酶结合,显著增强其传质效率和负载性能,实现不同类型复杂基质中溶菌酶的特异性捕获与分离;利用无定形配位聚合物与MXene的界面聚合,获得可以同时针对抗体蛋白Fc、Fab区域的纳米载体,大幅提升特异亲和性, K_d 可达 5.08×10^{-7} M,有效模拟Protein A/G类免疫亲和载体,实现复杂生物样本中抗体的高效富集与高纯度分离;通过丙烯酰胺类单体的活性聚合制备构象灵活的低交联水凝胶纳米粒子(HNPs),促进其与碳酸酐酶锌催化中心和周围结构域的同时亲和,结合常数高达 1.948×10^{-9} M,使HNPs呈现出类抗体亲和特性,并通过可逆活性抑制提高碳酸酐酶对高温、蛋白水解酶、变性试剂的耐受性;进一步将HNPs负载于MXene载体,可在保护碳酸酐酶固有生物学功能的基础上,实现其高效、高选择性分离富集。本研究基于多区域亲和策略构建的非生物亲和载体,将吸附材料简单的分离功能拓展至集特异性识别、选择性分离、高效活性保护于一体的多功能平台,极大丰富了其在样品前处理、生命分析与医药研究方面的应用。

参考文献:

1. S. Bianco, M. Hasan, A. Ahmad, S.-J. Richards, B. Dietrich, M. Wallace, Q. Tang, A. J. Smith, M. I. Gibson, D. J. Adams, *Nature*, 2024, 631, 544-548.
2. S. Paul, M. Gupta, A. K. Mahato, S. Karak, A. Basak, S. Datta, R. Banerjee, *J. Am. Chem. Soc.*, 2024, 146, 858-867.
3. J. Schilz, C. Clement, F. Greiner, A. Skerra, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61, e202200079.
4. P. Mayrhofer, M. R. Anneser, K. Schira, C. A. Sommer, I. Theobald, M. Schlapschy, S. Achatz, A. Skerra, *Nat. Commun.*, 2024, 15, 10693.
5. A. Ghosh, M. Sharma, Y. Zhao, *Nat. Commun.*, 2024, 15, 3731.

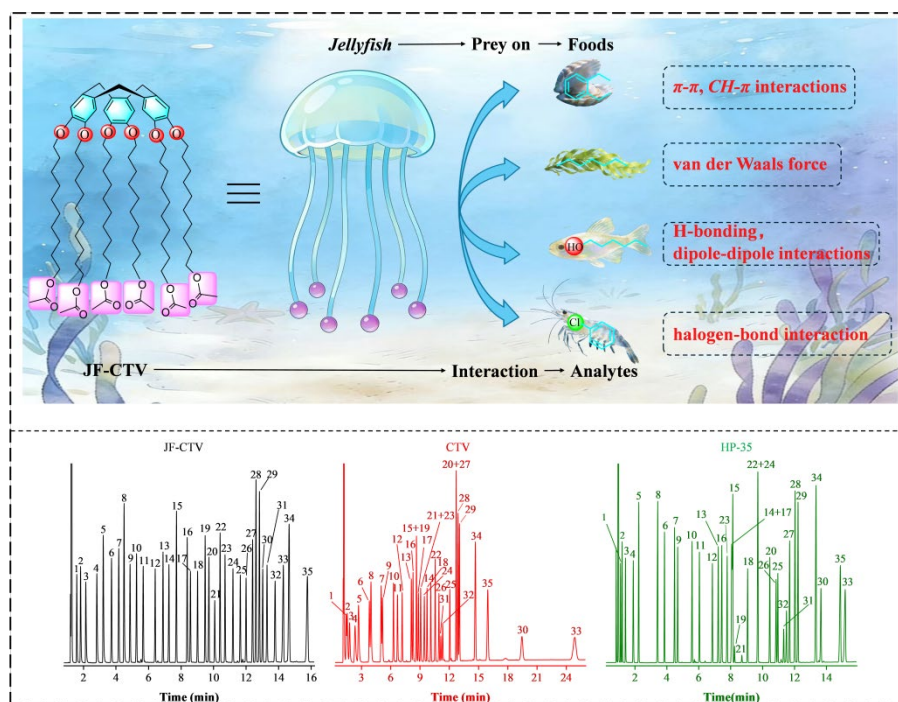
C-05

基于水母构造的酯基功能化环三藜芦烃气相色谱固定相的研究

孙涛¹, 杨心宇¹, 刘献明¹, 张文芬², 张岩皓², 张书胜^{2*}¹ 洛阳师范学院, 河南省洛阳市伊滨区吉庆路 6 号, 471934² 郑州大学, 河南省郑州市科学大道 100 号, 450001

*Email: zsszz@126.com (S. Zhang)

环三藜芦烃 (CTV) 是一类碗状大环化合物, 具有刚性的 C_3 对称结构、良好的化学稳定性, 以及富 π 电子空腔, 在超分子化学、配位化学、催化和传感等领域受到了广泛关注。本工作设计合成了一种水母构造的 CTV 衍生物 (JF-CTV, 图 1), 并首次用作气相色谱固定相的研究。JF-CTV 保留了碗状结构特征, 其骨架上缘同时修饰了非极性烷基链和极性酯基官能团, 具有两亲性。6 个长烷基链的引入增加了 JF-CTV 空穴深度 (13 Å) 并构筑了纳米级分离通道。酯基极性官能团的引入增加了固定相的作用位点, 使其对极性分析物具有高选择性。静态法涂渍的 JF-CTV 色谱柱是中等极性, 柱效为 3960 板/米。研究结果表明 JF-CTV 色谱柱能够基线分离丁醇、戊醇、己醇、庚醇、二乙基苯、氯硝基苯、二甲基苯酚和二氯苯甲醛等重要的位置异构体 ($R > 1.5$)。与未衍生化的 CTV 色谱柱和常用的商品化 HP-35 色谱柱对比, JF-CTV 色谱柱能够基线分离 35 组分不同类型分析物组成的复杂混合样品并表现出更高的分辨率 (图 1)。此外, JF-CTV 色谱柱能够准确测定十余种商品化试剂的微量异构体杂质, 在色谱分析领域具有良好的应用前景。



参考文献:

- [1] Tao Sun, Xinyu Yang, Mengyi You, Minglin Li, Xin Shen, Haolong Qi, Mengyao Duan, Zhiqiang Cai, Donatella Nardiello, Maurizio Quinto, Xianming Liu, Shusheng Zhang. *J. Chromatogr. A*, **2026**, DOI: 10.1016/j.chroma.2026.466954.

- [2] Tao Sun, Xin Shen, Xinyu Yang, Haolong Qi, Kexin Yang, Yilin Xing, Mengyi You, Mengyao Duan, Zhiqiang Cai, Donatella Nardiello, Maurizio Quinto, Xianming Liu, Shusheng Zhang. *Anal. Bioanal. Chem.*, **2025**, 417,7095-7107.
- 

C-06

手性杀菌剂腈苯唑的不依赖标准品分析

刘凯, 谢瑞文, 秦思萌, 李向军*

中国科学院大学化学科学学院

通讯联系人 E-mail: lixiangj@ucas.ac.cn

手性是自然界与生命体系中普遍存在的基本特征, 从氨基酸、蛋白质等生物分子到多种药物均具有手性结构。长期以来, 手性研究主要集中于医药领域, 但随着环境分析化学和生态毒理学的发展, 越来越多证据表明, 大量进入环境的有机污染物同样具有手性特征, 并在环境体系中表现出显著的对映体选择性行为^[1]。

全球约 30% 的农药属于手性化合物, 其中 90% 以上以外消旋体形式施用, 仅少数以单一对映体产品上市^[2]。然而, 当前农药风险评估多基于外消旋体整体, 缺乏对对映体差异的系统考察。事实上, 手性农药在环境行为及毒性方面普遍表现出显著的对映体选择性, 主要体现在生物活性、降解速率及生态毒性方面^[3,4]。这些研究表明, 忽略手性信息可能导致环境风险评估偏差, 因此在对映体水平开展系统分析具有重要意义。

本研究成功建立了一种不依赖标准品的手性分析方法, 通过 HPLC-手性光谱联用并结合理论计算, 实现了手性杀菌剂腈苯唑的手性分离、构型指认与 ee% 定量, 并验证其在环境样品中的适用性, 为手性农药环境分析提供了一种通用、低成本的新策略。

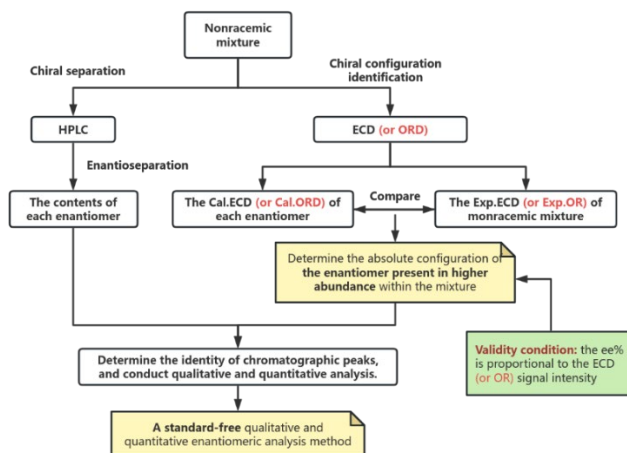


图 手性对映体分析流程

参考文献:

1. Vashistha VK, Sethi S, Mittal A, et al. Stereoselective analysis of chiral pesticides: a review. *Environ Monit Assess.* 2024;196(2):153.

2. Tudi M, Daniel Ruan H, Wang L, et al. Agriculture Development, Pesticide Application and Its Impact on the Environment. *Int J Environ Res Public Health*. 2021;18(3):1112.
3. Ji C, Song Z, Tian Z, et al. Enantioselectivity in the toxicological effects of chiral pesticides: A review. *Sci Total Environ*. 2023;857(Pt 3):159656.
4. Mamboungou J, Fernandes ÉKK, Vieira LG, Rocha TL. Hazardous fipronil insecticide effects on aquatic animals' health: Historical review and trends. *Sci Total Environ*. 2024;954:176334.

C-07

基于稳定同位素特征的亚洲黑熊毛发溯源技术研究

冯琳¹, 卫辰洁¹, 邓显贺², 李亚军², 梅宏成², 郭洪玲², 朱军^{3*}, 胡灿^{2*}

1 中国人民公安大学; 2 公安部鉴定中心; 3 公安部禁毒情报技术中心

通讯联系人 E-mail: zhujun001cn@126.com (J.Z.); hucanjiayou@126.com (C.H.)

亚洲黑熊 (*Ursus thibetanus*) 作为濒危物种, 非法盗猎与跨境走私严重威胁其生存, 影响生物多样性。亚洲黑熊的溯源检测对于打击相关犯罪至关重要, 然而, 当前亚洲黑熊溯源主要依赖证人证言, 缺乏科学技术手段, 为此本文首次在法庭科学领域, 采用稳定同位素比质谱 (IRMS) 技术, 以亚洲黑熊毛发为研究对象开展溯源技术研究。本文采集了中国 11 个不同地区动物园中共 22 只黑熊的毛发样本, 并进行稳定同位素丰度比分析。结果显示, 同一个体不同毛发的 $\delta^{13}\text{C}$ 、 $\delta^{15}\text{N}$ 、 $\delta^2\text{H}$ 、 $\delta^{18}\text{O}$ 值无显著差异; 同一动物园不同黑熊个体的同位素丰度比受饲养环境主导, 个体代谢虽引发差异, 但不会掩盖地域特征。不同地区亚洲黑熊毛发同位素丰度比因食源、水源差异呈现特征性分布。本研究建立的亚洲黑熊毛发稳定同位素溯源技术, 为法庭科学领域打击黑熊非法盗猎与贸易提供了关键技术支撑, 也为其他濒危物种的犯罪调查提供了参考。

参考文献:

55. Kozakai C, Seryodkin I, Pigeon K E, et al., *Bears of the World*, Cambridge University Press, 2020, 110-121.
56. Escobar L E, Awan M N, Qiao H, *Biol. Conserv.*, 2015, 191, 400-407.
57. Mills J, Servheen C, *Bears: Their Biology and Management*, 1994, 9, 161.
58. Dutton A J, Hepburn C, Macdonald D W, *PLoS ONE*, 2011, 6, e21243.
59. 代云川, 中国林业科学研究院, 2020.
60. 张留栓, 中国林业科学研究院, 2022.
61. 姬云瑞, 张留栓, 黄湘元, 等., *兽类学报*, 2022, 42, 387-397.
62. 苏凯文, 任婕, 黄元, 等., *野生动物学报*, 2022, 43, 259-265.
63. IUCN, Garshelis D, Steinmetz R, *IUCN Red List Threat. Species*, 2020, e.T22824A166528664.
64. 崔雨新, 张伟, 王小明, *动物学杂志*, 1998, 5, 27-30.
65. 谭建锡, 胡忆文, 禹思宇, 等., *中国口岸科学技术*, 2023, 5, 22-27.
66. 朱弘, 曹件生, 尚素微, 等., *中国法医学杂志*, 2024, 39, 640-641, 643.
67. Peppin L, McEwing R, Carvalho G R, et al., *J. Forensic Sci.*, 2008, 53, 1358-1362.
68. 邵建宏, 罗宝正, 薄清如, 等., *野生动物学报*, 2017, 38, 575-579.
69. Shih C C, Huang C C, Li S H, et al., *Conserv. Genet.*, 2009, 10, 1845-1847.
70. Wu H, Zhang S N, Wei F W, *Conserv. Genet.*, 2010, 11, 1215-1217.
71. Mackensen A, Schmiedl G, *Earth-Sci. Rev.*, 2019, 197, 102893.
72. Hillaire-Marcel C, Kim S T, Landais A, et al., *Nat. Rev. Earth Environ.*, 2021, 2, 699-719.
73. Li R, Zhu G, Chen L, et al., *Earth Syst. Sci. Data*, 2025, 17, 2135-2145.
74. Hobson K A, Piatt J F, Pitocchelli J, *J. Anim. Ecol.*, 1994, 63, 786.
75. Franzoi A, Larsen S, Franceschi P, et al., *Sci. Rep.*, 2021, 11, 20800.
76. Han H, Wei W, Hu Y, et al., *Curr. Biol.*, 2019, 29, 664-669.
77. Bai Y, Wang X, Ha L, et al., *Food Chem.*, 2025, 465, 141911.
78. Hale C, Ogden R, Ciavaglia S A, et al., *Forensic Sci. Int.: Anim. Environ.*, 2021, 1, 100027.
79. Koike S, Nakashita R, Kozakai C, et al., *Eur. J. Wildl. Res.*, 2016, 62, 23-31.
80. Mizukami R N, Goto M, Izumiyama S, et al., *Ursus*, 2005, 16, 93-101.
81. Careddu G, Ciucci P, Mondovì S, et al., *Sci. Rep.*, 2021, 11, 14118.
82. 马姣, 江左其杲, 金泽田, 等., *人类学学报*, 2025, 44, 884-894.
83. Funes D S H, Bonilla K, Baudelet M, et al., *Forensic Sci. Int.*, 2023, 346, 111622.
84. O'Connell T C, Hedges R E M, *J. Archaeol. Sci.*, 1999, 26, 661-665.
85. Meier-Augenstein W, Hobson K A, Wassenaar L I, *Bioanalysis*, 2013, 5, 751-767.
86. Coplen T B, Qi H, *Forensic Sci. Int.*, 2016, 266, 222-225.
87. Farag M R, *Adv. Anim. Vet. Sci.*, 2015, 3, 559-568.
88. Jeschke M, *C3 and C4 Photosynthesis – Implications for Crop Production*, NuTechSeed, 2024.
89. Vogel J C, *Fractionation of the Carbon Isotopes During Photosynthesis*, Springer, 1980.
90. 翟增康, 赵珉, 魏永胜, 等., *陕西林业科技*, 2020, 48, 71-89, 93.
91. DeNiro M J, Epstein S, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1978, 42, 495-506.
92. Zhao Y, Zhang B, Chen G, et al., *J. Agric. Food Chem.*, 2013, 61, 7055-7060.
93. Zhao Y, Zhang B, Guo B, et al., *CyTA J. Food*, 2016, 14, 163-168.
94. Zhao Y, Tu T, Tang X, et al., *Meat Sci.*, 2020, 165, 108129.

95. Minagawa M, Wada E, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1984, 48, 1135-1140.
96. Bateman A S, Kelly S D, Jickells T D, *J. Agric. Food Chem.*, 2005, 53, 5760-5765.
97. 马锐麒, 温雯雯, 冯长涛, 等., *环境化学*, 2024, 43, 1304-1314.
98. Li R, Zhu G, Chen L, et al., *Earth Syst. Sci. Data*, 2025, 17, 2135-2145.
99. Hillaire-Marcel C, Kim S T, Landais A, et al., *Nat. Rev. Earth Environ.*, 2021, 2, 699-719.
100. Jimbo M, Matsumoto N, Sakamoto N, et al., *Mammal Study*, 2020, 45.

C-08

基于 ReMALDI 质谱的酮酸化合物分析新方法

玲玲*, 王梦真, 丁传凡

宁波大学质谱技术与应用研究院

通讯联系人 E-mail: lingling@nbu.edu.cn

α -酮酸类化合物是生物体内重要的代谢中间体, 在糖酵解、三羧酸循环及氨基酸代谢等关键生理过程中发挥着核心调控作用。其中, α -酮戊二酸(α -KG)和丙酮酸(PA)作为三羧酸循环的重要调节因子, 其异常水平与多种代谢性疾病密切相关^[1,2]。此外, α -酮酸类化合物还广泛应用于膳食补充剂、食品添加剂及抗氧化剂等领域^[3]。因此, 建立复杂样品中 α -酮酸类化合物的快速、灵敏、选择性检测方法, 对于疾病诊断和食品药品质量控制具有重要的科学意义和应用价值。然而, 传统分析方法如气相色谱、高效液相色谱及液相色谱-质谱联用技术等往往存在分离时间长、衍生化步骤繁琐等局限性。基质辅助激光解吸电离飞行时间质谱(MALDI-TOF MS)虽具有高通量、高耐盐性、灵敏度高等优势, 但常规基质易对低分子量分析物产生干扰, 且 α -酮酸类化合物本身电离效率较低, 限制了其直接检测。本研究将3,4-二氨基二苯甲酮(DABP)开发为一种新型反应型MALDI基质, 用于 α -酮酸类化合物的选择性高灵敏检测。DABP分子中的邻苯二胺结构可与 α -酮酸在温和条件下快速反应生成咪唑衍生物, 同时过量DABP作为基质辅助电离, 显著提升了 α -酮酸的离子化效率。研究系统优化了反应溶剂、时间、温度及基质浓度等条件, 确定最佳反应条件为: 甲醇/水(1:1, v/v)溶剂体系、DABP浓度5 mg·mL⁻¹、60°C反应1小时。方法学评价表明, 该策略对 α -KG和PA的检出限分别为0.8 μ M和0.45 μ M, 线性范围跨越三个数量级($R^2 > 0.999$), 准确度高(95.1%-102.9%), 重现性良好(RSD: 0.8%-4.9%)。与常规碱性基质1,5-二氨基萘和9-氨基吡啶相比, DABP反应型基质展现出更优异的检测灵敏度和选择性。该方法成功应用于 α -KG胶囊、洋葱及啤酒等复杂样品中 α -酮酸的含量测定, 加标回收率为92.3%-104.3%。本研究为 α -酮酸类化合物的快速、简便、高通量检测提供了新策略, 在代谢组学分析、食品药品质量监控及临床诊断等领域具有广阔的应用前景。

参考文献:

1. Mooney, B. P.; Miernyk, J. A.; Randall, D. D. *Annu. Rev. Plant Biol.* 2002, 53, 357–375.
2. Kand'ar, R.; Kopčıl, M.; Laštovičková, L. *J. Pharm. Biomed. Anal.* 2022, 214, No. 114738
3. Song, Y.; Li, J.; Shin, H.-D.; Liu, L.; Du, G.; Chen, J. *Bioresour. Technol.* 2016, 219, 716–724.

C-09

功能化共价有机骨架材料的研制及在环境污染物前处理中的应用

高蝶^{1,*}, 兰悦¹, 刘秋宜¹, 邹玥萌¹, 夏之宁^{2,*}

1. 西南医科大学药学院; 2. 重庆大学药学院

通讯联系人 E-mail: gaodie1203@swmu.edu.cn; tcm_anal_cqu@163.com

样品前处理是痕量分析中的关键环节, 所选用方法需具备高选择性、高富集效率及对目标物强吸附能力等特点。吸附剂的合理选择对提升萃取选择性及吸附效率至关重要。共价有机骨架(Coalent organic frameworks, COFs)作为一种由有机结构单元通过共价键连接形成的晶态多孔材料, 具有高比表面积、孔径可调、密度低、化学稳定性好及易于表面功能化等优势, 在环境污染物前处理领域展现出良好的应用潜力。然而, 传统 COFs 材料在溶剂中分散性较差, 且对目标物缺乏特异性识别能力, 这在一定程度上制约了其实际吸附性能的发挥。为此, 本课题组针对上述问题开展了系统性研究, 通过设计与构筑不同类型的 COFs 材料, 并对其进行化学后修饰, 实现了材料性能的显著提升。具体而言, 通过引入特定官能团, 有效改善了 COFs 在溶液体系中的分散性; 进一步结合分子印迹(MIP)识别位点或复合水凝胶结构, 制备了具有高选择性吸附能力的 COF-MIP 复合材料及杂化水凝胶材料, 实现了对目标污染物的精准识别与高效富集。例如, 我们以 1,3,5-三(3,3'',3'''-三氟-4',4'',4'''-三(对甲酰苯基)苯)和 2,5-二(烯丙氧基)对苯二甲酰肼为前驱体, 通过系统优化溶剂配比、体积、温度与时间等关键结晶参数, 成功合成了具有高结晶度和高比表面积的氟功能化 COF(F-COF)。进一步在其表面引入兼具线性识别能力的卤键作用位点与具有空间选择性的 MIP 识别空腔, 构建了 SiO₂@F-COF@MIP 复合材料。该材料对四溴双酚 A 表现出优异的选择性吸附能力, 结合高效液相色谱-二极管阵列检测器(HPLC-DAD), 实现了对水样及鱼肉样品中四溴双酚 A 的高选择性富集与高灵敏度检测。此外, 以 4,4',4''-(1,3,5-三嗪-2,4,6-三基)三苯胺与 2,5-二乙烯基对苯二甲醛为单体, 通过优化合成条件, 在室温下首次成功制备了具有高结晶度的双发射荧光 COF(TD-COF)。该材料兼具良好的荧光性能与吸附能力, 可作为同时用于荧光传感与高效吸附(结合 HPLC 分析)铬黑 T、铬蓝黑 R 和铬蓝 SE 三类染料的多功能平台。进一步, TD-COF 与巯基化海藻酸钠通过硫醇-烯点击反应, 构建了杂化水凝胶材料 GelTSA@TD-COF, 显著提升了其对铬蓝黑 R 和铬蓝 SE 的最大吸附容量, 展现出作为高选择性吸附剂的潜力。实际水样中三种染料的检测与吸附实验, 进一步验证了 TD-COF 与 GelTSA@TD-COF 在环境污染物分析中的实际应用价值。

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, *Separation and Purification Technology*, 2024, 329, 125169.
2. Q.Y. Liu, Y.M. Zou, Y.L. Yang, L.C. Wang, L.L. Li, M.Y. Wang, M. Tian, J.J. Wang, Y.Q. Tao, D.D. Wang*, D. Gao*, Fabrication of a novel dual-emission fluorescence covalent organic framework and its luminescent hybrid hydrogel material: Application in the detection and adsorption of eriochrome azo anionic dyes, 2023, 34, 101810.

C-10

基于改进 QuEChERS 前处理与液相色谱-质谱联用的鱼肉中烷基酚类及其代谢物同步检测研究

张轩萍^{1,2}, 陈玟霏^{1,2}, 张庆合², 李晓敏^{2*}¹北京化工大学, 北京, 100020²中国计量科学研究院, 北京, 100029

通讯联系人 E-mail: lixm@nim.ac.cn

随着烷基酚 (APs)、烷基酚聚氧乙烯醚 (APEOs)、烷基酚羧酸盐 (APECs) 及双酚类 (BPs) 等内分泌干扰物作为一类高关注度新型污染物的广泛检出, 其在环境介质和生物样本中的残留风险日益引起重视^[1]。这类物质涵盖了完整的代谢链条 (APEOs→APs→APECs)^[2], 不同代谢阶段物质种类多、残留浓度低、极性差异大; 同时, 加之鱼肉等生物基质成分复杂, 液相色谱-质谱联用技术 (LC-MS/MS) 检测过程中基质效应明显, 导致这类物质的全代谢链条的同步检测面临巨大挑战。因此, 亟需发展能够整体解决上述复杂体系中多类型、低浓度目标物测量难题的分析方法。

本研究建立了一种基于 QuEChERS^[3]前处理与 LC-MS/MS 联用分析方法, 有效解决了鱼肉基质中多类型 9 种目标物 (AP、APEC、APEO、BPA 等) 同步提取、基质干扰去除及色谱检测兼容性的难题。针对羧酸类 (NP₂EC、OP₂EC) 与烷基酚类化合物在液相色谱中响应和峰形难以兼顾的问题, 通过在水相中添加 2mM 乙酸铵, 既改善了羧酸类物质的峰形与响应, 又避免了对烷基酚类的过度抑制, 典型谱图如图 1。针对鱼肉基质中多组分目标物极性跨度大、同步高效提取效率低的问题, 优化了 QuEChERS 的提取溶剂组合, 采用乙腈-1%甲酸溶液与二氯甲烷分步提取策略, 通过溶剂极性梯度的协同作用, 实现了全部目标物的高效提取。针对鱼肉基质复杂、杂质干扰严重的挑战, 通过优化吸附剂的种类与用量, 确定 PSA 为最佳净化材料, 在保证 9 种目标物回收率 (76.05-102.86%) 的同时, 有效去除脂肪酸、色素等干扰杂质, 降低了基质效应。优化后的方法实现 9 种目标物的高效检测, 检出限低至 0.40-37.70 ng/g, 为复杂生物基质中全代谢链条新型污染物的准确测量提供了可靠手段。

该方法操作简单、通量高、稳定性强, 创新地通过前处理与分离检测的协同优化, 突破了宽极性、多代谢阶段目标物同步检测的局限, 显著降低了复杂基质干扰, 为内分泌干扰物的高效检测与风险评估提供了可靠技术保障。

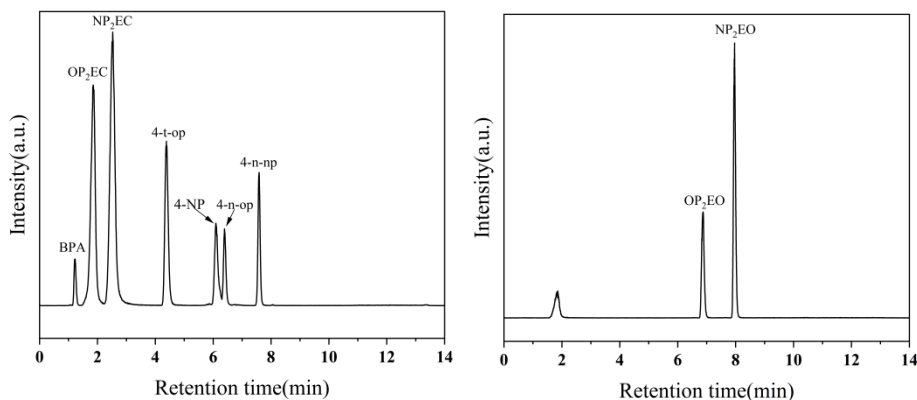


图 1 烷基酚类物质及双酚 A LC-MS/MS 总离子流图 (a) 负离子模式下 BPA、OP₂EC、NP₂EC、4-t-OP、4-NP、4-n-

OP、4-n-NP 的总离子流图；(b) 正离子模式下 OP₂EO、NP₂EO 的总离子流图

参考文献：

- [1] LINDBORG A R, OVERDAHL K E, VOGLER B, et al. Assessment of Long-Chain Polyethoxylate Surfactants in Wastewater Effluent, Stormwater Runoff, and Ambient Water of San Francisco Bay, CA [J]. ACS ES&T Water, 2023, 3(4): 1233–42.
- [2] BABAEI P, NIKRAVAN MADAN E, GÜLLÜ G, et al. Levels, distribution, sources and human exposure pathways of alkylphenol and alkylphenol ethoxylates in indoor dust in Türkiye [J]. Environmental Pollution, 2024, 344: 123447.
- [3] LEE H J, JUNG Y S, SEO D, et al. Development and validation of QuEChERS-based LC-MS/MS method for simultaneous quantification of eleven N-nitrosamines in processed fish meat, processed meat, and salted fish products [J]. Food Chem, 2024, 459: 140281.

C-11

C₃N₄量子点敏化铁基 MOF 复合材料的制备及其光催化降解刚果红性能研究

张长波*, 郑玉国, 史阵雨

兴义民族师范学院生物与化学学院, 贵州兴义

通讯联系人 E-mail: zhangchangbo@iccas.ac.cn

随着工业印染废水大量排放, 以刚果红为代表的有机染料污染物具有高毒性、难降解与易生物富集等特性, 对生态环境与人体健康构成严重威胁。光催化降解技术因高效、绿色、无二次污染等优势, 已成为环境污染物治理的重要研究方向。MIL-101(Fe)作为典型铁基金属有机框架材料, 具备大比表面积、高孔隙率与优良吸附性能, 在光催化领域展现良好应用潜力, 但其本征光生电子-空穴对复合速率快、电荷分离效率低、可见光响应范围窄等问题, 显著制约其催化性能。为突破上述瓶颈, 本研究以柠檬酸与尿素为原料, 采用低温固相法制备C₃N₄量子点, 通过一步水热负载法构建C₃N₄量子点/MIL-101(Fe)异质结复合材料, 系统调控量子点负载量以优化结构与催化性能。利用X射线衍射、透射电镜、X射线光电子能谱、氮气吸附-脱附、紫外-可见漫反射光谱、荧光光谱及光电化学测试对材料进行表征, 结果表明C₃N₄量子点均匀分散于MIL-101(Fe)表面, 复合材料结晶度高、形貌规整、比表面积显著提升, 有效拓宽可见光吸收范围并大幅抑制光生载流子复合。光催化降解实验显示, 最优配比复合材料在可见光照射下, 20min内对100mg/L刚果红溶液降解效率达99.5%, 远高于纯MIL-101(Fe) (72.3%)。自由基捕获实验证实, 超氧阴离子自由基是降解过程的主要活性物种。本研究构建的C₃N₄量子点/MIL-101(Fe)复合体系为高效MOF基光催化剂设计提供新思路, 可为环境有机染料污染物的快速、深度降解提供新型材料与技术支撑, 适用于环境水样中有机污染物的分离分析与快速降解处理。

参考文献:

1. Wang C-C, Li J-R, Lv X-L, et al. Photocatalytic organic pollutants degradation in metal-organic frameworks[J]. *Energy & Environmental Science*, 2014, 7: 2831-2867.
2. Rojas S, Horcajada P. Metal-organic frameworks for the removal of emerging organic contaminants in water[J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120: 8378-8415.
3. Sun P, Xing Z, Li Z, et al. Recent advances in quantum dots photocatalysts[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2023, 458: 141399.
4. Zhao F, Liu Y, Hammouda S B, et al. MIL-101(Fe)/g-C₃N₄ for enhanced visible-light-driven photocatalysis toward simultaneous reduction of Cr(VI) and oxidation of bisphenol A in aqueous media[J]. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2020, 272: 119033.
5. Zhou J, Yang Y, Zhang C Y. A low-temperature solid-phase method to synthesize highly fluorescent carbon nitride dots with tunable emission[J]. *Chemical Communications*, 2013, 49: 8605-8607.
6. Peng B, Yang D, Li Z, et al. Iron-based nanoporous metal-organic frameworks with side-chain amino substituents for efficiency-regulated oxygen evolution reaction[J]. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2024, 136: 341-348.

C-13

微量血清磷脂酰胆碱-神经酰胺-鞘脂同系物的多靶标同步定量及其与冠心病严重程度的关联

李汶煜, 王思明*

(北京医院(国家老年医学中心)实验研究部, 老年疾病国家临床医学研究中心, 国家卫生健康委老年医学重点实验室, 衰老机制与衰老相关疾病干预研究北京市重点实验室, 中国医学科学院老年医学研究院, 北京 100730)

*邮箱: wangsiming4446@bjhmoh.cn

磷脂酰胆碱、溶血磷脂酰胆碱、神经酰胺及相关鞘脂同系物与冠状动脉粥样硬化的发生发展密切相关, 其准确定量有助于冠心病相关代谢异常的识别及风险评估^[1,2]。本研究建立了一种基于液相色谱-串联质谱的人血清脂质同系物分析方法, 仅需 10 μL 血清即可同时测定 50 余种磷脂酰胆碱、溶血磷脂酰胆碱、神经酰胺及相关鞘脂同系物。采用甲醇-甲基叔丁基醚-水作为萃取体系, 使用 ACQUITY UPLC HSS T3 (1.8 μm) 色谱柱进行分离; 以含 5 mmol/L 甲酸铵和 0.1%甲酸的乙腈-水溶液 (6:4, v/v) 为流动相 A, 以含 5 mmol/L 甲酸铵和 0.1%甲酸的异丙醇-乙腈溶液 (9:1, v/v) 为流动相 B, 进行梯度洗脱; 采用电喷雾离子源正离子多反应监测模式检测。方法学验证结果表明, 该方法线性关系良好, 相关系数均 ≥ 0.9995 。磷脂酰胆碱及其衍生物、神经酰胺及其衍生物、鞘脂及其衍生物的线性范围分别为 0.465~119.05 $\mu\text{g/mL}$ 、1.3~2660 ng/mL 和 2.69~86.2 $\mu\text{g/mL}$; 检出限分别低于 0.054 $\mu\text{g/mL}$ 、0.023 ng/mL 和 0.032 $\mu\text{g/mL}$, 定量限分别低于 0.18 $\mu\text{g/mL}$ 、0.077 ng/mL 和 0.107 $\mu\text{g/mL}$ 。各分析物回收率均为 85%~115%; 日内精密度分别低于 3.65%、4.89%和 3.94%, 日间精密度分别低于 7.21%、9.16%和 6.68%。采用该方法对 400 余例接受冠状动脉造影受试者的血清样本进行检测, 磷脂酰胆碱、神经酰胺及鞘脂同系物的平均人群浓度分别为 41.34 $\mu\text{g/mL}$ 、259.35 ng/mL 和 29.5 $\mu\text{g/mL}$ 。Spearman 相关性分析显示, 磷脂酰胆碱和神经酰胺同系物与冠心病严重程度及相关临床生化和脂质代谢指标均存在显著相关性, 提示其可能作为冠心病相关的潜在代谢标志物。该方法具有样本用量少、前处理简便、灵敏度高和重复性好的特点, 可实现人血清中 50 余种相关脂质同系物的高效测定, 为阐明其与冠心病的关联及推动生物标志物转化应用提供了方法学基础。

参考文献:

1. Leiberer A, Mundlein A, Brandtner EM, Saly CH, Ramadani H, Vonbank A, Mader A, Doppeide JF, Jylha A, Laaperi M, Laaksonen R, Marz W, Fraunberger P, Kleber M, Drexel H, Lipid profiles of patients with manifest coronary versus peripheral atherosclerosis - Is there a difference? J Intern Med. 2021, 290:1249-1263.
2. Bay B, Fuh MM, Rohde J, Worthmann A, Gossling A, Arnold N, Koester L, Lorenz T, Blaum C, Kirchhof

P, Blankenberg S, Seiffert M, Brunner FJ, Waldeyer C, Heeren J, Sex differences in lipidomic and bile acid plasma profiles in patients with and without coronary artery disease. *Lipids Health Dis.* 2024, 23: 197.

C-14

多裂骆驼蓬对阿尔茨海默病模型小鼠的神经保护作用

刘慧杰¹, 李淼², 木力得尔·赛力克³, 李霄⁴, 申刚义*¹ 中央民族大学药学院 民族医药教育部重点实验室, 北京, 100081

*Email: shengy@muc.edu.cn

摘要: 本研究旨在探讨特色药材多裂骆驼蓬 (*Peganum multisectum* (Maxim.) Bobr.) 对AD模型小鼠的神经保护效应及潜在机制。采用AlCl₃灌胃联合 D-半乳糖腹腔注射建立 AD 小鼠模型; 通过 Y 迷宫、新物体识别及 Morris 水迷宫评价认知功能; 检测过氧化氢酶 (CAT) 活性评估氧化应激水平。结果显示, 提取物可显著提高 AD 小鼠 Y 迷宫自发交替率与新物体识别指数, 缩短水迷宫逃避潜伏期并增加平台穿越次数 ($P<0.05$); 显著升高脑组织 CAT 活性, 减轻氧化应激损伤。综上, 多裂骆驼蓬提取物可有效改善 AD 模型小鼠认知障碍, 减轻氧化应激损伤, 发挥神经保护作用, 为后续深入开展研究奠定基础。

关键词: 多裂骆驼蓬; 阿尔茨海默病; 认知功能; 氧化应激; 神经保护

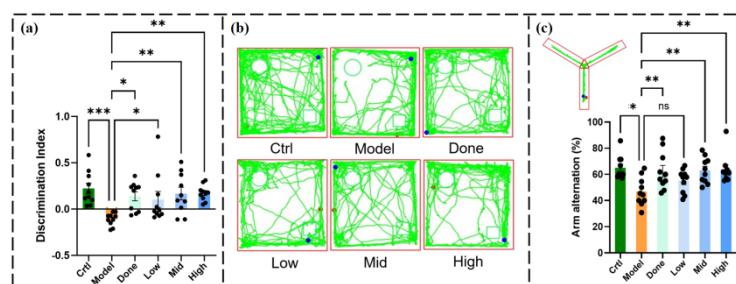


图 1 提取物对 AD 模型小鼠认知功能及脑组织 CAT 活性的影响 (a) 新物体识别实验辨别指数 (b) 新物体识别实验运动轨迹图 (c) Y 迷宫自发交替率 (d) 脑组织 CAT 活性

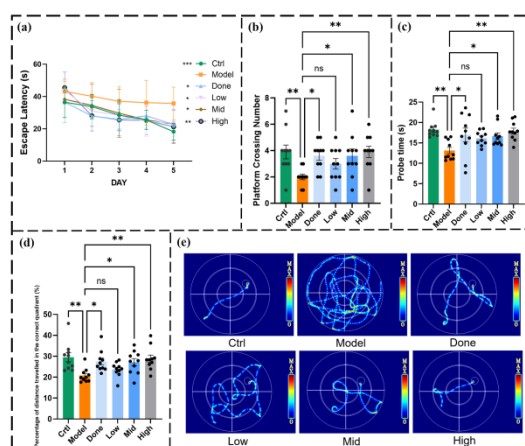


图 2 提取物对 AD 模型小鼠空间学习记忆的影响 (Morris 水迷宫实验) (a) 训练期逃避潜伏期 (b) 探查实验平台穿越次数 (c) 探查实验目标象限停留时间 (d) 探查实验目标象限运动距离占比 (e) 探查实验游泳轨迹图

基金: 受国家自然科学基金 (No. 82374161)、中央高校基本科研业务费支持。

C-15

基于尺寸排阻色谱-质谱联用的靶向环肽高效筛选方法研究

张伯阳, 张博*

厦门大学化学化工学院, 厦门, 361005

通讯联系人 E-mail: bozhang@xmu.edu.cn

多肽类药物因兼具小分子药物的穿透性与蛋白质药物的特异性, 已成为现代药物开发领域的核心研究方向之一。其中靶向环肽的筛选是实现多肽药物高效研发的关键环节。传统多肽筛选方法多依赖磁珠法, 通过人工多次重复筛选实现目标多肽的富集与鉴定, 该方法不仅耗时费力, 且筛选通量低、结果重复性较差, 难以满足大规模药物研发的需求。本研究基于分析化学技术的分离与鉴定策略, 通过位点特异性修饰、精准分离纯化与多轮验证相结合的策略, 建立一套高效、可靠的环肽筛选体系。其具备结果可信度高、筛选通量高的优势, 可有效突破传统方法的技术瓶颈, 提升靶向多肽的筛选效率与质量。

本研究基于微流控滴液技术制备单分散性金属氧化物微球。以含 3% EM90 的十六烷为连续相, 以溶胶-凝胶前驱物(四甲氧基硅烷(TMOS))为主前驱体、乙酸催化剂、PEG 结构导向剂的体系)为分散相, 在特定流速比下生成单分散液滴。经 40°C 孵育固化、多溶剂洗涤及分步高温煅烧(300°C 介孔化与 600 °C 骨架固化), 制得具有可控孔结构的单分散二氧化硅微球。

该合成策略允许对孔道结构进行精确控制。通过改变前驱体组成及致孔剂添加量, 可以实现其孔道尺寸可在十几埃至数千埃的大跨度内连续可调。这一宽谱孔道调控特性不仅覆盖了介孔至大孔的全范围, 更赋予了微球极高的结构灵活性, 使其可以在高通量多肽筛选、蛋白质分离等涉及不同尺度分子的分离应用中提供材料基础。

本研究通过位点特异性修饰构建多类型环肽库, 经尺寸排阻色谱纯化除杂, 与目标蛋白孵育后分离环肽-蛋白复合物, 再经蛋白变性-质谱鉴定筛选高亲和力环肽, 通过多轮验证获得高特异性靶向环肽, 为多肽药物研发提供高效技术方案。

相较于传统及现有环肽筛选技术, 本方法依托分析化学精准分离与鉴定手段, 全程步骤可控、杂质干扰小, 显著提升了筛选结果的可信度与特异性; 同时结合尺寸排阻色谱高效分离与质谱高通量鉴定优势, 可实现批量快速筛选, 大幅缩短周期, 突破传统磁珠法通量低、耗时的瓶颈。综上, 该策略实现从分离纯化到多轮验证均实现高效精准可控, 有效克服传统方法缺陷, 可获得高特异性、高亲和力的靶向环肽有力推动多肽药物开发领域发展。

关键字: 尺寸排阻色谱; 环肽库筛选; 微流控

参考文献:

1. Kaiyue Sun, Juxing Zeng, Ya Liu, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64, e202418642.
2. Juxing Zeng, Hanchen Cao, Kaiyue Sun, et al. *Nat. Commun.* **2026**, 17: 430.

3. Jikai Chen, Hanchen Cao, Ruichen An, et al. *Anal. Chem.*, **2026**.

C-16

GC-MS/MS 结合 GC-MS/O 分析 86 种卷烟主流烟气中的酚类化合物

李庆祥¹, 彭钰涵¹, 黄贝笛², 王晓瑜², 毕一鸣^{1,*}, 李海锋¹, 张晓兵^{2*} (五号宋体或 Times New Roman)

1. 浙江中烟工业有限责任公司
2. 中国烟草总公司郑州烟草研究院

通讯联系人 E-mail: biyiming@zjtobacco.com, zhangxiaobing985@sohu.com

烟气基质极为复杂, 其微量成分的分离、分析具有一定挑战。虽然针对卷烟烟气中的酚类化合物的分离及测定已有较多研究, 但定量分析方法主要基于GC-MS, 检出卷烟主流烟气中的酚类数量均不超过35个。化学气相色谱-串联质谱(GC-MS/MS)具有灵敏度高、选择性好、线性响应范围宽等系列优点, 该方法已经在农残、环境污染物、香味成分的多靶标检测中得到了应用^{1,2}, 是突破烟气中酚类化合物定性及定量分析通量的理想技术手段。为实现卷烟主流烟气中酚类嗅觉活性成分的准确定量及嗅觉特征鉴定, 检索食品、环境、农业等研究领域报道的不良气味及香味酚类成分, 得到86种酚类化合物靶标清单, 采用GC-MS/MS建立了定量方法, 对1种烤烟型市售卷烟及1种混合型市售卷烟以及21个单料烟卷烟样本进行了检测, 在此基础上配制了4组标准溶液以模拟各成分单口烟气释放量, 采用气相色谱-质谱/嗅闻仪(GC-MS/O)对主流烟气中酚类检出成分进行嗅觉特征分析, 解决了烟气复杂体系中痕量成分嗅觉特征鉴定的技术难题, 并探讨了不同部位、不同质量烤烟卷制酚类嗅觉不良成分释放量差异规律。结果表明: ①在30米长、内径0.25mm的DB-5(膜厚0.25 μ m)、DB-624(膜厚1.4 μ m)、DB-35(膜厚0.25 μ m)、DB-WAX(膜厚0.25 μ m)共4种色谱柱中, DB-WAX色谱分离性能最好, 可良好分离多组酚类异构体, 如2-甲基苯酚、3-甲基苯酚和4-甲基苯酚, 2,3-二甲基苯酚、2,4-二甲基苯酚、2,5-二甲基苯酚、2,6-二甲基苯酚、3,4-二甲基苯酚和3,5-二甲基苯酚等; ②86种酚类化合物的检出限为0.5~56.0 ng/支, 定量限为2.0~186ng/支, 方法灵敏度高; 86种酚类化合物的回收率在80%~117%之间, 方法准确度高; 各靶标物日内和日间精密度均小于10%, 且其中56种酚类化合物的日内、日间精密度均小于5%, 方法重复性好。③在1种烤烟型市售卷烟以及21种烤烟单料烟烟气中均检出66种酚类成分, 所检出酚类化合物中有8种为在烟气中首次报道²。④基于GC-MS/O, 采用气味强度法、稀释因子(FD)法共嗅辨出26种卷烟主流烟气酚类化合物具有嗅觉活性, 9种为辛香、甜香、烟熏香成分, 令人愉悦; 17中气味特征具有嗅觉不良或潜在不良特征, 可划分为马厩味、酚类药物气味、皮革味、焦枯气味四类, 结合FD值和气味强度鉴定出其中17种对烟气嗅觉感受贡献较大。⑤对21个单料烟酚类化合物单位焦油释放量及四个不同气味FD加和值衍生指标进行比较, 结果初步表明上部烟叶、低次烟叶主流烟气中酚类嗅觉活性成分具有释放量偏高的特点, 卷烟烟气中酚类化合物释放量整体上具有强、极相关性, 可能和生成来源近似相关。

参考文献:

1. L. Frydel, Z. Prus, K. Cwynar. Desalin. Water Treat., **2025**, 321: 101015.
2. L. Pan, Y. Qin, M. Chen. Ind. Crop. Prod. **2023**, 193: 116186.
3. A. Rodgman, T. Perfetti. The chemical components of tobacco and tobacco smoke[M]. Boca Raton: CRC Press, **2009**.