

贾龙, 徐永福

中国科学院大气物理研究所大气边界层物理和大气化学国家重点实验室

Email (jialong@mail.iap.ac.cn)

## 气体-气溶胶原位电离源开发背景

### 在环境领域, 测量气溶胶分子面临的挑战

#### 离线方法: 液质联用仪等

- 富集后通过溶剂提取分析, 时效性差
- 富集过程干扰气-粒平衡, 造成样品浓度失真
- 溶剂引入背景杂质, 干扰气溶胶样品信号
- 溶剂与一些气溶胶样品发生化学反应
- 盐类物质会抑制有机分子的电离

#### 在线方法: 气溶胶质谱仪

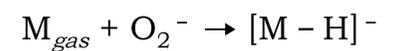
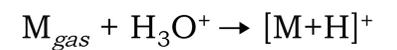
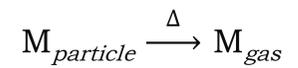
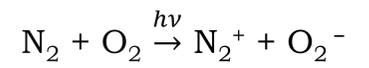
- 采用硬电离技术, 难以获取气溶胶的完整分子信息

### 电离源: 使分子成为带电离子的装置

#### GAS原位软电离源



#### GAS电离原理



## 气体-气溶胶原位电离源介绍

### 技术原理

- 高能光子 + 热解析

### 技术优势: 原位软电离+高灵敏

- 无损在线: 在线原位电离气态、液态和固态样品
- 简单快速: 无萃取、浓缩、预分离等前处理
- 干净真实: 无溶剂和盐类干扰
- 高灵敏度: 纳克级检出限 (硫酸盐6.2 ng/m<sup>3</sup>, 有机物1.2 ng/m<sup>3</sup>, 基于Q-Exactive)

### 应用场景

- 电子鼻: 嗅探和测量VOC、呼吸气体、气味等
- 气态分子和自由基: 火焰、大气光化学等
- 固态和液态: 气溶胶、药物、化妆品、食品、化工、农残等

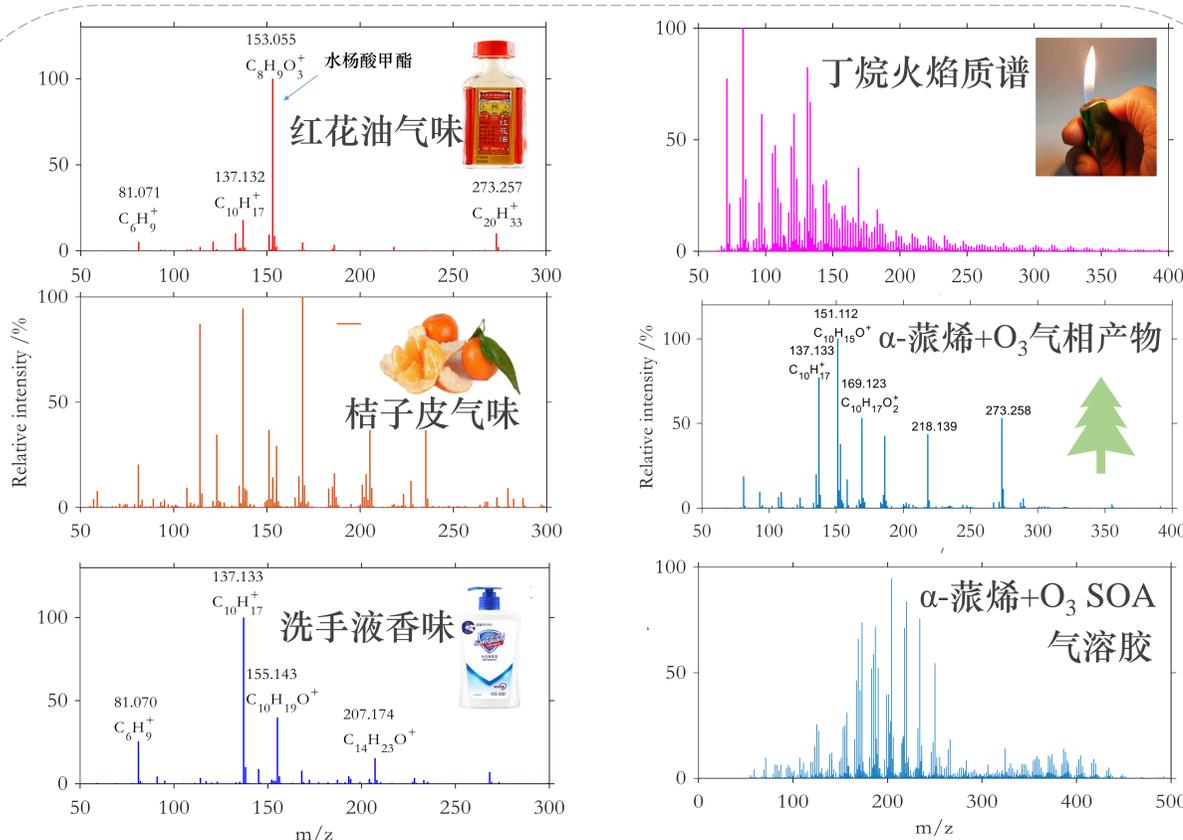


### 通用性

- 通过基座与质谱连接, 兼容传统商业质谱

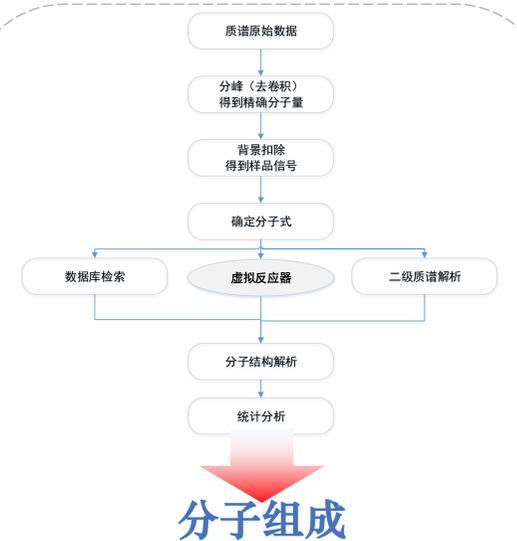
## 气溶胶原位电离源应用

### 气体-气溶胶原位电离源 + Orbitrap MS



气体-气溶胶原位电离源: 可使传统质谱具备在线测量和解析气态和颗粒态分子的能力

### 高分辨质谱数据处理系统



Compounds (MCM name)	MW (Da)	[M-H] <sup>-</sup> ion (m/z)	Formula	Molecular structure
2-oxoethaneperoxoic acid (HCOCO3H)	89.9953	88.9875	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	
3-hydroperoxy-2-oxopropanal (ALCOCH2OOH)	104.011	103.0031	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	
5-hydroxy-3,4-dioxopentanal (H1C2C3C4CHO)	130.0266	129.0188	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	
2-hydroxy-3-oxobutaneperoxoic acid (CO2H3CO3H)	134.0215	133.0137	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>5</sub>	
3,5-dioxopentaneperoxy acid (CHOC3COOH)	146.0215	145.0137	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>5</sub>	
3-hydroxy-4-oxopentaneperoxy acid (H3C2C4CO3H)	148.0372	147.0294	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>5</sub>	
3-Formyl-2,2-dimethylclobutanecarboxylic acid (C721CHO)	156.0786	155.0708	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	

## 专利和软著

- 气态和颗粒态有机物分离机构及电离装置 (ZL202221027247.9) 贾龙, 徐永福 (实用新型)
- 气态和颗粒态有机物电离系统及电离方法 (ZL202210469809.3) 贾龙, 徐永福 (发明专利)
- 高分辨质谱数据处理系统 (2022SR1406111) 贾龙 (软件著作权)