

DOI:10.7524/j.issn.0254-6108.2013.06.023

精喹禾灵在高岭土和蒙脱石中的吸附行为*

丁春霞^{1,2} 龚道新^{2,3**} 肖浩^{2,3} 任颖俊^{2,3} 杨丽华^{2,3}

(1. 湖南农业大学理学院, 长沙, 410128; 2. 湖南农业大学资源环境学院, 长沙, 410128;
3. 湖南农业大学农业环境保护研究所, 长沙, 410128)

摘要 采用批量平衡实验,研究了精喹禾灵在蒙脱石和高岭土中的吸附行为及作用机理.结果表明,精喹禾灵在这两种供试黏土矿物中的吸附过程分为快速吸附、慢速吸附和吸附平衡3个阶段,吸附平衡时间都约为12 h;Langmuir模型能较好地描述其在两种供试黏土矿物中的吸附行为;蒙脱石和高岭土对精喹禾灵的最大吸附容量的关系为蒙脱石>高岭土;傅立叶变换红外光谱以及X-射线衍射分析显示,在吸附过程中精喹禾灵分子进入了蒙脱石层间,而未进入到高岭土层间;蒙脱石主要是通过其层间结构对精喹禾灵进行吸附,而高岭土则主要是通过硅氧外表面发生吸附,其吸附作用力主要是氢键.

关键词 蒙脱石, 高岭石, 黏土矿物, 精喹禾灵, 吸附.

精喹禾灵(quizalofop-*p*-ethyl)又名精禾草克,化学名称为(R)-2-[4-(6-氯-2-喹恶啉氧基)苯氧基]丙酸乙酯,是一种杂环氧基丙酸酯类内吸传导型选择性茎叶处理除草剂^[1],被广泛用于烟草、油菜、花生、马铃薯、大豆、番茄等多种阔叶作物地中防除多种禾本科杂草.但随着该除草剂的广泛使用,它对生态环境产生的不利影响也日趋增多.有文献报道,精喹禾灵及其代谢产物具有生殖毒性、基因毒性、可诱导肝脏中毒^[2-4]以及对水生生物有剧毒^[5-6],因此,精喹禾灵除草剂的使用可能会对生态环境及水生生物具有潜在的威胁.

农药在土壤中的迁移被认为是饮用水和地下水的重要潜在污染源之一^[7].土壤组分对农药的吸附直接影响到农药的生物活性,同时也影响到其在土壤-水环境系统中的行为和归趋^[8].蒙脱石和高岭土是土壤中普遍存在的极其重要的硅酸盐矿物^[9],这些活性矿物组分通过直接吸附污染物或影响天然有机质的结构与构象^[10],对各类有机污染物在土壤介质中的迁移、转化及其生态环境效应产生重要影响.近年来,利用天然或改性黏土矿物吸附有机污染物已成为人们研究的热点之一. Khoury G A等^[11]借助X-射线衍射(XRD)等技术研究了除草剂草甘膦在蒙脱石中的吸附机理,推断出草甘膦可能是通过其分子中的氨基部分或其它配体与蒙脱石内表面产生配位作用而被吸附. Wang C J等^[12]利用傅里叶红外光谱(FT-IR)和X-射线衍射(XRD)等手段研究了抗生素环丙沙星与蒙脱石作用的机理,结果表明,环丙沙星与蒙脱石间表面吸附作用力主要有静电引力和氢键作用力,同时,环丙沙星还通过离子交换作用进入了蒙脱石层间.关于精喹禾灵在土壤及黏土矿物中的吸附研究目前尚未见报道.

本文采用批量平衡法,借助现代分析技术,研究了精喹禾灵在高岭土和蒙脱石中的吸附特征,以期探索精喹禾灵在土壤中的迁移转化及残留规律,揭示其环境行为和修复治理此类农药的污染提供科学依据.

1 材料与方 法

1.1 主要试剂及仪器

材料及试剂:供试的蒙脱石、高岭土分别由浙江安吉县荣建矿产精制厂和邢台市中纬矿物材料有限公司提供,蒙脱石和高岭土的比表面积分别为63.685 m²·g⁻¹和26.002 m²·g⁻¹;精喹禾灵标准品(纯度为

2012年9月6日收稿.

* 农业部农药残留试验基金项目(2010H216)资助.

** 通讯联系人, Tel:(0731)84617710; E-mail:gdx4910@163.com

96.7%),由湖南化工研究院提供;甲醇为色谱纯,其余化学试剂均为分析纯。

实验仪器:Agilent 1260型高效液相色谱仪(美国安捷伦科技有限公司),WQF-310型红外光谱仪(北京瑞利分析仪器公司),XRD-6000型X射线衍射仪(日本岛津公司),FD-1B-50型冷冻干燥机(北京博医康实验仪器有限公司),Quadrascorb SI型比表面分析仪(美国康塔仪器公司)。

1.2 精喹禾灵在高岭土和蒙脱石上的吸附平衡实验

吸附平衡时间实验方法参照文献[13],准确称取2.00 g高岭土或蒙脱石于250 mL锥形瓶中,分别加入50 mL $0.05 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 的氯化钙溶液进行溶解,用 $0.01 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ HCl溶液或 $0.01 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ NaOH溶液调节pH值至7.0,然后用 $0.05 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 氯化钙定容至100.0 mL,在超声波清洗器里振荡15 min,使其成均匀的悬浊液。在一系列50 mL具塞离心管中,依次加入1.00 mL上述矿物悬浊液,2.00 mL $20 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 精喹禾灵标准溶液,2.00 mL蒸馏水。将上述离心管置于摇床中,于 $25 \text{ }^\circ\text{C}$ 、 $150 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 条件下避光恒温振荡,分别在1、3、5、7、9、12、16、20、24 h后取出,以 $3500 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 离心15 min,取上清液2.00 mL转入150 mL的分液漏斗中,然后分别用20、15、15 mL二氯甲烷萃取3次,合并二氯甲烷萃取液在旋转蒸发器上浓缩至干,用甲醇定容至5.00 mL,过 $0.45 \text{ }\mu\text{m}$ 孔径的有机滤膜,再用HPLC测定精喹禾灵的含量。以上各处理均重复3次,同时做空白对照实验。蒙脱石或高岭土对精喹禾灵的吸附量通过差减法求得,计算公式如下:

$$C_s = (C_0 - C_e) \times V/m_s$$

式中, C_0 为精喹禾灵的初始浓度($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$); C_e 为溶液中精喹禾灵的平衡浓度($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$); V 为溶液体积(L); C_s 为蒙脱石或高岭土对精喹禾灵的吸附量($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$); m_s 为所加蒙脱石或高岭土的质量,g。

1.3 精喹禾灵在高岭土和蒙脱石上的等温吸附实验

在一系列50 mL具塞离心管中,依次加入1.00 mL上述高岭土或蒙脱石的悬浊液,2.00 mL不同浓度的精喹禾灵标准溶液,2.00 mL蒸馏水,将上述离心管置于摇床中,在 $25 \text{ }^\circ\text{C}$ 、 $150 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 条件下振荡12 h,其余处理同1.2。

1.4 HPLC 检测条件

色谱柱:Ultimate XB-C18, $5 \text{ }\mu\text{m} \times 4.6 \text{ mm} \times 150 \text{ mm}$;流动相:甲醇:水($V:V$) = 80:20;流速: $0.6 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$;进样量: $20 \text{ }\mu\text{L}$;柱温: $25 \text{ }^\circ\text{C}$;检测波长: 235 nm ,采用外标法定量。

1.5 傅里叶变换红外光谱(FT-IR)和X射线衍射(XRD)分析条件

将吸附了精喹禾灵的蒙脱石或高岭土样品与未做吸附的相应样品在冷冻干燥机中冷冻干燥24 h之后,取适量与溴化钾混合均匀,压成圆片,供FTIR分析,波数范围为 $400\text{—}4000 \text{ cm}^{-1}$,分辨率为 4 cm^{-1} 。同时将上述样品在XRD-6000型转靶X射线衍射仪上进行分析,实验条件为:电压40 kV,电流30 mA,用封闭式铜靶射线源,扫描速度为 $5 \text{ }^\circ\cdot\text{min}^{-1}$ 。

2 结果与讨论

2.1 精喹禾灵在高岭土和蒙脱石上的吸附平衡时间

精喹禾灵在高岭土和蒙脱石上的吸附过程可分为3个阶段,即初始的快速阶段、后期的缓慢阶段和平衡阶段。快速阶段主要为表面吸附,缓慢阶段为扩散过程^[13],最后为吸附达到饱和,处于动态平衡过程,这与大多数黏土矿物对有机农药的吸附过程一致^[14]。精喹禾灵在两种黏土矿物中吸附平衡时间都约为12 h,在吸附开始的前5 h,蒙脱石和高岭土对精喹禾灵的吸附量均迅速增加,几乎呈直线增加,到第5 h时其吸附量均达总吸附量的80%左右,之后随着时间的延长,两种供试黏土矿物对精喹禾灵的吸附量则缓慢上升,到12 h时其吸附量基本不再变化,最后吸附达到平衡状态。但相比较而言,蒙脱石对精喹禾灵的吸附量和吸附速率比高岭土要大,与后面等温吸附结果一致,这可能是由于蒙脱石特有的层间结构使吸附主要发生在层间,增大了其与农药的接触面积,使得农药除了在其表面吸附外还可通过层间嵌入作用而被吸附^[15]。

2.2 精喹禾灵在蒙脱石和高岭土上的吸附等温线

在 $25 \text{ }^\circ\text{C}$ 、pH值为7.0的条件下,蒙脱石和高岭土对精喹禾灵的吸附等温线见图1。

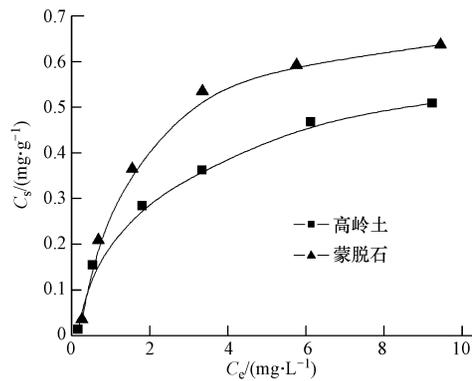


图1 蒙脱石和高岭土对精喹禾灵的吸附等温线

Fig. 1 Adsorption isotherms of quizalofop-*p*-ethyl on montmorillonite and kaolinite

从图1可以看出,精喹禾灵在蒙脱石和高岭土上的吸附量随着浓度的增加而逐渐增加,在平衡浓度较低时,其吸附量迅速增加,几乎呈直线上升,之后则逐渐减缓.将其等温吸附数据用 Freundlich 方程和 Langmuir 方程分别进行拟合,拟合得到的有关参数见表1.

表1 精喹禾灵在蒙脱石和高岭土上吸附的 Freundlich 和 Langmuir 方程拟合

Table 1 The parameters of Freundlich and Langmuir equations for quizalofop-*p*-ethyl adsorption on montmorillonite and kaolinite

黏土矿物类型	Freundlich 吸附等温方程			Langmuir 吸附等温方程		
	K_f	n	R^2	$K/(L \cdot mg^{-1})$	$B/(mg \cdot g^{-1})$	R^2
蒙脱石	0.264	2.175	0.963	0.690	0.738	0.996
高岭土	0.227	2.714	0.974	0.607	0.590	0.990

从表1可见,通过比较拟合相关系数 R^2 ,不难看出 Langmuir 吸附等温方程更适合描述高岭土和蒙脱石对精喹禾灵的吸附过程,说明两种黏土矿物对精喹禾灵的吸附更符合单分子层吸附.同时,蒙脱石对精喹禾灵的最大吸附量为 $0.738 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$,明显大于高岭土的 $0.590 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$,造成这种差异的原因可能与农药的性质以及供试黏土矿物的结构有关,蒙脱石具有独特的二维纳米层间域结构,这种特有空间结构使得其对土壤或水体中的重金属元素和有机污染物有较好的吸附能力^[16-17];其次,蒙脱石的比表面积也比高岭土大得多,这也可能是蒙脱石的吸附能力比高岭土大的另一个原因.

2.3 傅里叶变换红外光谱(FT-IR)分析

精喹禾灵在蒙脱石上吸附前后的傅里叶变换红外光谱图如图2a所示.从图2a可以看出,蒙脱石吸附精喹禾灵后,蒙脱石分子中各基团的特征峰并没有出现十分显著的变化,只有几处峰发生了轻微的偏移:一是蒙脱石分子中 Al—OH 的伸缩振动峰由原来的 3626 cm^{-1} 移动到 3614 cm^{-1} ;二是水分子的弯曲振动峰由原来的 1639 cm^{-1} 移动到 1649 cm^{-1} ,这些变化可能是由于精喹禾灵分子中电负性较大的氧或者氮与蒙脱石表面 Al—OH 中的羟基或者水分子产生了氢键作用所致.

高岭土与精喹禾灵作用前后的红外谱图如图2b所示.由图2b可以看出,在高岭土吸附精喹禾灵前后,明显发生变化的有:高岭土中羟基振动峰由 3683 cm^{-1} 移至 3701 cm^{-1} 处,游离羟基伸缩振动峰由 3456 cm^{-1} 移至 3415 cm^{-1} ;吸附精喹禾灵后高岭土的红外谱图中还新增了 2979 cm^{-1} 和 1749 cm^{-1} 等处弱峰,黏土矿物吸附农药会引起矿物光谱发生变化,矿物表面吸附农药较多时,在谱图中会出现被吸附农药的吸收峰^[18],可见,精喹禾灵和黏土矿物已形成复合物,而且由于被吸附后的精喹禾灵分子中的 C=O 伸缩振动峰由原来的 1730 cm^{-1} 移到 1749 cm^{-1} 处,故可以推断出精喹禾灵分子的 C=O 与高岭土表面发生了作用,这种作用力可能是精喹禾灵分子中 C=O 中的氧与高岭土表面中的羟基之间形成了氢键,使得高岭土分子中的羟基缔合程度增高,波数发生改变,并使精喹禾灵分子中的 C=O 等富电子基团的电子密度下降,导致振动吸收峰位置向高波数移动,这一结果与四环素^[19]和甲萘威^[20]在高岭土表面的吸附机理相类似.

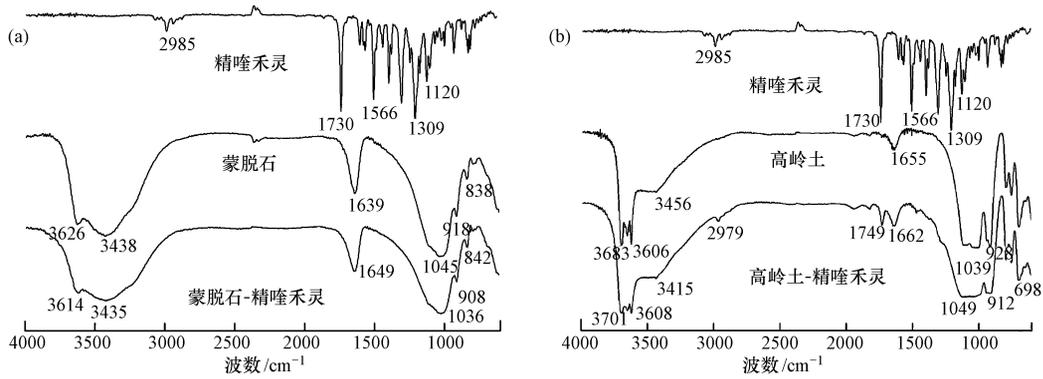


图2 精喹禾灵和蒙脱石(a)、高岭土(b)及其吸附作用后的复合物的傅里叶红外光谱图
Fig.2 FT-IR spectra of montmorillonite(a), kaolinite(b) quizalofop-*p*-ethyl and their complexes

2.4 X-射线衍射(XRD)分析

有机分子进入黏土矿物层间最明显的现象就是矿物的层间距发生变化,高岭土和蒙脱石吸附精喹禾灵前后的X-射线衍射图如图3所示。

从图3a可以看出,高岭土吸附精喹禾灵前后其层间距没有发生明显变化,这说明精喹禾灵并没有进入高岭土的层间,这可能是因为高岭土是一种1:1型的层状黏土矿物,它由一层Si—O四面体和一层Al—O八面体组成,层与层之间由氢键紧密联系在一起^[21],这样就使得分子量较大的精喹禾灵很难进入其层间。

蒙脱石吸附精喹禾灵前后的X射线衍射图如图3b所示。从图3b可以看出,吸附精喹禾灵前后的蒙脱石在 d_{001} 面和 d_{100} 面衍射角度均有不同程度的变化,蒙脱石在 d_{001} 面和 d_{100} 面衍射角分别为 $2\theta = 5.86^\circ$ 和 $2\theta = 19.96^\circ$,吸附精喹禾灵后其在 d_{001} 面和 d_{100} 面衍射角分别为 $2\theta = 5.80^\circ$ 和 $2\theta = 19.82^\circ$,根据布拉格方程计算得: d_{001} 面层间距由1.507 nm增大到1.522 nm, d_{100} 面层间距由0.444 nm增大到0.476 nm,结果表明,蒙脱石在吸附精喹禾灵的过程中,有部分精喹禾灵进入到了蒙脱石层间,这与前面红外光谱分析推断的结果一致。由于蒙脱石是2:1型的层状硅酸盐矿物,单位晶胞由两片顶角朝里的Si—O四面体中夹一片Al—O或Mg—O八面体形成一层^[22]。蒙脱石结构层与层之间没有共用的氧或羟基,层间是可交换的水合阳离子和水分子,因此层与层之间的结合力较弱,结构外的阳离子或中性分子可与蒙脱石层间域中的阳离子或中性分子通过离子交换或插入置换的形式进入层间^[23]。由于精喹禾灵在中性环境中主要是以分子形式存在,因此,精喹禾灵可能是通过插入置换的形式进入了蒙脱石层间,从而使得吸附精喹禾灵后的蒙脱石层间距增大。这一结果与蒙脱石吸附阿特拉津的机理相似^[24]。

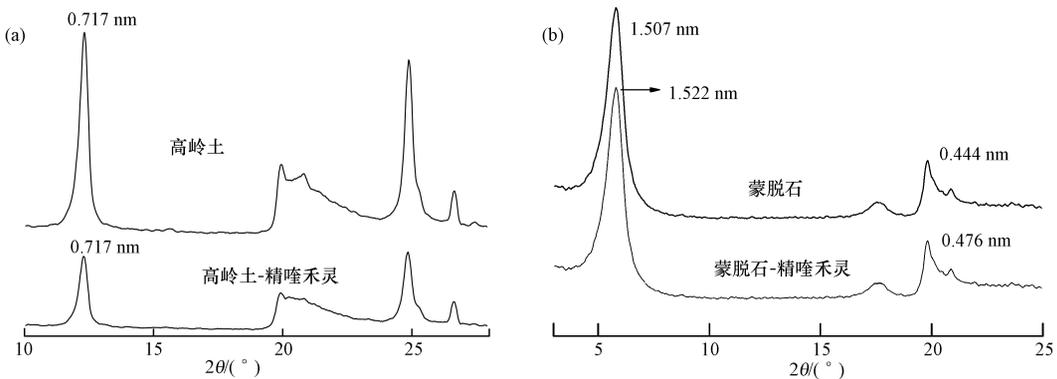


图3 高岭土(a)和蒙脱石(b)吸附精喹禾灵前后的X射线衍射图

Fig.3 XRD patterns of kaolinite (a) and montmorillonite (b) before and after quizalofop-*p*-ethyl adsorption

3 结论

(1)蒙脱石和高岭土对精喹禾灵的吸附可用Langmuir方程较好地拟合,它们对精喹禾灵的吸附容

量大小为:蒙脱石 > 高岭土。

(2) 精喹禾灵在高岭土上的吸附主要是以硅氧外表面的吸附为主,吸附性质主要是物理吸附,即以氢键为主,而未进入高岭土层间;精喹禾灵在蒙脱石上既有表面吸附作用(即氢键作用吸附),又可以通过插入置换的方式进入蒙脱石层间域。

(3) 由于蒙脱石能将精喹禾灵吸附进入其层间,因此,在含蒙脱石较多的土壤中,精喹禾灵在土壤中的滞留时间将较长,这样就可以降低该除草剂在环境介质中的迁移能力,从而减缓其对水体的污染。

参 考 文 献

- [1] 韩熹莱. 中国农业百科全书(农药卷)[M]. 北京:农业出版社,1993:164-165
- [2] Mustafa Y, Arikan E S. Genotoxicity testing of quizalofop-*p*-ethyl herbicide using the *Allium cepa* anaphase-telophase chromosome aberration assay[J]. Caryologia, 2008, 61: 45-52
- [3] Elefsiniotis I S, Liatos G D, Stamelakis D, et al. Case report: mixed cholestatic/hepatocellular liver injury induced by the herbicide quizalofop-*p*-ethyl[J]. Environmental Health Perspect, 2007, 115: 1479-1481
- [4] Borjan M. Evidence on developmental and reproductive toxicity of quizalofop-ethyl[R]. California: California Environmental Protection Agency (CEPA), 1999, 4-4
- [5] Doganlar Z B. Quizalofop-*p*-ethyl induced phytotoxicity and genotoxicity in *Lemna minor* and *Lemna gibba*[J]. Journal of Environmental Science and Health, Part A: Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering, 2012, 47(11): 1631-1643
- [6] Zhang X, Wang S, Wang Y, et al. Differential enantioselectivity of quizalofop-ethyl and its acidic metabolite: Direct enantiomeric separation and assessment of multiple toxicological endpoints [J]. Journal of Hazardous Materials, 2011, 186: 876-882
- [7] 王晓峰, 王晓燕. 国外降雨径流污染过程及控制管理研究进展[J]. 首都师范大学学报(自然科学版), 2002, 23(1): 91-96
- [8] Senesi N. Binding mechanisms of pesticides to soil humic substances[J]. Science of the Total Environment, 1992, 123/124: 63-76
- [9] 高海英, 杨仁斌, 龚道新. 蒙脱石的吸附行为及其环境意义[J]. 农业环境科学学报, 2006, 25(增刊): 438-442
- [10] 王劲文, 刘文, 巩莹, 等. 菲与吡啶在沉积物及黏土矿物上的吸附行为[J]. 环境化学, 2009, 28(2): 185-190
- [11] Khoury G A, Gehris T C, Tribe L, et al. Glyphosate adsorption on montmorillonite: An experimental and theoretical study of surface complexes[J]. Applied Clay Science, 2010, 50: 167-175
- [12] Wang C J, Li Z H, Jiang W T, et al. Cation exchange interaction between antibiotic ciprofloxacin and montmorillonite[J]. Journal of Hazardous Materials, 2010, 183(1/3): 309-314
- [13] 赵瑾瑾, 贺小敏, 冯伟亮, 等. 甲基对硫磷和西维因在黏土矿物表面的吸附解吸附特征[J]. 应用化学, 2010, 27(1): 112-116
- [14] Chang P H, Li Z H, Jean J S, et al. Adsorption of tetracycline on 2: 1 layered non-swelling clay mineral illite [J]. Applied Clay Science, 2011
- [15] Wu Q F, Li Z H, Hong H L, et al. Adsorption and intercalation of ciprofloxacin on montmorillonite[J]. Applied Clay Science, 2010, 50(2): 204-211
- [16] 吴平霄. 黏土矿物材料与环境修复[M]. 北京: 化学工业出版社, 2004: 17-70
- [17] 朱利中, 陈宝梁. 膨润土吸附材料在有机污染控制中的应用[J]. 化学进展, 2009, 21(2/3): 420-429
- [18] 刘维屏, 王琪全, 李克斌. 近代分析技术研究农药与土壤活性组份作用机理[J]. 中国环境科学, 1998, 18(2): 102-106
- [19] Li Z, Schulz L, Ackley C, et al. Adsorption of tetracycline on kaolinite with pH-dependent surface charges[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2010b, 351: 254-260
- [20] 贺小敏, 李爱民, 马先锋, 等. 甲萘威在蒙脱石和高岭石表面的吸附行为研究[J]. 环境科学与技术, 2010, 33(8): 62-64
- [21] Miranda-Trevino J C, Coles C A. Kaolinite properties, structure and influence of metal retention on pH[J]. Applied Clay Science, 2003, 23: 133-139
- [22] 吴平霄, 廖宗文. 农药在蒙脱石层间域中的环境化学行为[J]. 环境科学进展, 1999, 7(3): 70-77
- [23] 欧阳天贽. 除草剂苄嘧磺隆在几种粘粒矿物与地带性土壤表面的吸附研究[D]. 武汉: 华中农业大学博士论文, 2003: 1-99
- [24] Sawhney B L, Singh S S. Sorption of Atrazine by Al- and Ca-saturated smectite[J]. Clay and Clay Mineral, 1997, 45: 333-338

Adsorption of quizalop-*p*-ethyl on montmorillonite and kaolinite

DING Chunxia^{1,2} GONG Daoxin^{2,3*} XIAO Hao^{2,3} REN Yingjun^{2,3} YANG Lihua^{2,3}

(1. College of Science, Hunan Agricultural University, Changsha, 410128, China;

2. College of Resource and Environmental, Hunan Agricultural University, Changsha, 410128, China;

3. Institute of Agricultural Environmental Protection, Hunan Agricultural University, Changsha, 410128, China)

ABSTRACT

Batch equilibrium experiments were performed to study the adsorption characteristics and adsorption mechanisms of quizalofop-*p*-ethyl on montmorillonite and kaolinite. The results showed that the adsorption of quizalofop-*p*-ethyl on the two clay minerals could be divided into three phases: fast adsorption phase, slow adsorption phase, and equilibrium phase 12 h. The adsorption isotherms of quizalofop-*p*-ethyl on the two clay minerals were well fitted by the Langmuir equation. The adsorption capacity of quizalofop-*p*-ethyl on montmorillonite was larger than on kaolinite. FT-IR spectroscopy and XRD analysis indicated that quizalop-*p*-ethyl could enter the interlayer of montmorillonite, but not kaolinite. Hydrogen bonds might exist between quizalofop-*p*-ethyl and kaolinite minerals.

Keywords: montmorillonite, kaolinite, clay mineral, quizalofop-*p*-ethyl, adsorption.

赛默飞世尔科技发布首台“三合一”LC-MS, 以创新性分析和适用性革新生命科学研究

2013年6月10日,赛默飞世尔科技推出新型“三合一”系统——Thermo Scientific Orbitrap Fusion Tribrid 液相色谱质谱仪(LC-MS)。该系统集成3种质量分析器——四极杆、Orbitrap 和线性离子阱,为复杂生物样品提供分析。

Orbitrap Fusion 系统解决高通量问题的一个方法是通过串联质量标签(TMT)。该技术能够使质谱仪同时对多个样品中的蛋白质进行相对定量研究。与先前的工具相比,Orbitrap Fusion 仪器显著改善了数据的深度和质量,从而获得更为出色的TMT结果。新平台借助MS3选择性的优势提高定量准确度,而且较之以往的分析系统,在单位时间内可获取两倍的MS3扫描次数,且灵敏度也获得显著提升。用户也可以从赛默飞世尔科技公司订购全新TMT试剂,最多可同时对10个样品进行全面分析。

Orbitrap Fusion LC-MS的核心是配置3个不同的质量分析器,这些分析器共同协作,将分析性能提升至全新的高度,从而实现全新的实验方法。

- 四极杆用于进行母离子选择,分辨率最低可达0.4 amu,具有出色的灵敏度和选择性;
- 超高场Orbitrap提供超过450000的分辨率和高达15 HZ的扫描速率,具有无法逾越的分析选择性和速度;
- 多级杆离子回旋通道及双压线性离子阱提供MS_n HCD、CID和ETD裂解,可在最高达20 HZ的扫描速度下进行快速、灵敏的质量数分析。同步的母离子选择增强了仪器的信噪比。

三合一配置使用户能够以比现有的商业化仪器更快的速度识别更多的低丰度蛋白质。其独特的结构能够在Orbitrap和线性离子阱质量分析器中实现同时的母离子隔离、裂解和数据采集。与已有仪器相比,所采集得到的数据质量更高,扩展了可能的实验范围。可在任意MS_n分析阶段选择不同裂解模式并以Orbitrap或线性离子阱分析器检测的能力使得一系列新型实验成为可能,从而能够获取来自代谢物、多聚糖、翻译后修饰和序列多态性方面的全新水平的结构信息。

在典型代谢组学实验中,科研人员经常会面临未知物和目标化合物。为了识别未知物,必须在LC-线性离子阱仪器上重新运行样品以获取MS_n数据,但在第二次运行时匹配色谱保留时间会比较困难,进而导致了不确定性。利用其独特的三合一质量分析器配置,新型Orbitrap Fusion Tribrid LC-MS克服了这一问题,通过确凿的未知物鉴定结果为用户提供革新众多小分子实验方法的能力。

Orbitrap Fusion LC-MS的新型智能软件提供了动态扫描管理(Dynamic Scan Management, DSM),具有随实验自动调整扫描参数以获得最佳结果的能力。