

使用软电离ACQUITY QDa质谱检测对生物基塑料中的挥发性有机化合物进行直接实时分析

Rachel Sanig, Jan-Christoph Wolf, Cristian Cojocariu

Waters Corporation, Plasmion GmbH

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

摘要

本应用简报重点介绍在Waters ACQUITY QDa检测器上使用Plasmion SICRIT冷等离子体电离源直接实时评估生物基塑料袋中挥发性有机物特征的应用。这套仪器系统展示了一种具有成本效益的正交技术，只需极少的样品前处理，在对分析速度、可靠性和灵活性有严格要求的塑料产品测试领域，该技术可有效提高生产率。此外，分析配置占地面积小，便于在现场完成分析。

优势

实时、直接分析回收或生物基塑料材料中的挥发性有机化合物，以对原材料和最终产品中的潜在有害物质和难闻气味进行质量控制。

简介

目前全球有99%的塑料是由来自化石燃料的化学品制成的；环保材料逐渐受到更多青睐，越来越多的消费品制造商开始针对塑料包装采用可持续的解决方案。其中，生物基塑料就是一种前景良好的解决方案，它是由有机或植物来源的可再生材料合成的。这种材料的主要优点是大多数可回收、可堆肥或可生物降解，并且降解时间相对较短。因此，生物基塑料有望用于油基塑料的应用领域，并取代不可生物降解的薄膜和一次性塑料。然而，尽管生物基塑料存在上述优点，但仍需要进一步研究，选择性、综合地确定原材料的最佳组合，并优化所得生物基塑料的适当物理化学性质。

要了解生物基塑料制造中涉及的化学过程，分析此类材料中的挥发性有机化合物(VOC)是一种重要方法。通常情况下，这种分析可以阐明在加工过程中或在意外环境条件下导致热降解的化学过程。与传统塑料一样，生物基塑料需要添加剂（如增塑剂）或添加更多化学品，因为它们通常比传统塑料更不稳定且扩散阻隔性更低¹。这些化学物质可能会从包装迁移到消费品中，通过散发挥发性气味物质对健康构成风险或改变产品质量²。通过对最终产品中存在的VOC进行快速、实时的分析，可以获知是否存在可能导致难闻气味的化合物，甚至是潜在有害的挥发性化学物质。VOC分析的传统方法是静态顶空或动态气相色谱-质谱联用法(GC-MS)或反应质谱法。然而，此类技术可能需要样品前处理、成本高昂或占用大量实验室空间。

本应用简报采用了一种新的分析方法，使用配备有Plasmion GmbH冷等离子体电离源的Waters ACQUITY QDa检测器，直接实时评估了几个生物基塑料袋的挥发性有机物特征。

实验

样品前处理

直接对三种不同的市售生物基塑料袋(BIOTEC GmbH & Co. KG)分别重复分析三次，所需的样品前处理步骤仅包括将每个塑料袋切割成重量相似的碎片并放入单独的样品瓶中（表1）。

样品名称	描述	重量(mg)
C1 500	生物塑料500	11.58
C2 400	生物塑料400	11.61
C3 GF 106/02	生物塑料G2 106/02	11.66

表1.生物基塑料袋碎片

分析设置

使用的分析仪器是Waters ACQUITY QDa检测器，搭配使用流过式介质通路放电源(SICRIT) (Plasmion GmbH, 德国) (图1)。这一配置可以在易于操作、占用空间小的分析工具上应用，只需将样品放在电离源前面即可直接检测样品的化学成分。分析过程中，化学成分在质谱检测器负压的作用下直接进入电离源，并在传输过程发生电离。在入口毛细管产生冷的环形等离子体，从而发生电离。这意味着分析物在进入质谱检测器的过程中经过等离子体环，从而通过反应性物质和紫外线辐射发生电离或电荷转移。由于分析物与等离子体没有直接接触，因此SICRIT是一种“软”电离方法，这意味着分析物将保持完整，不会碎裂。此外，电离主要产生质子化的[M+H]⁺物质，有利于鉴定化学分子离子³。

在此设置中，通过将装有塑料碎片的样品瓶保持在SICRIT源上5秒钟来分析样品，并在以下概述的条件下收集数据。将一个小管连接到SICRIT源，以便从样品瓶中直接取样。

分析条件

采集模式:	全扫描
质量范围:	30-1250 Da
电离模式:	ESI+
毛细管电压:	0.8 kV
锥孔电压:	30 V

离子源温度： 100 °C

探头温度： 40 °C



图1. Plasmion SICRIT与Waters ACQUITY QDa检测器组合

结果与讨论

实验从分析空白样品开始，以评估VOC的背景水平并对质谱仪基线信号进行基准测试。随后对每个生物基塑料袋

进行技术分析，重复三次。图2[A]显示了总离子流(TIC)色谱图的示例。

通过评估每次采集的平均质谱，揭示了所有样品中存在的化合物。如 m/z 141的提取离子流色谱图(XIC)所示(图2[C])，该质荷比被假定为8-壬烯醛，这是塑料容器和塑料袋中常见的一种化学气味⁴。SICRIT-QDa分析表明，三个样品中均存在痕量的该化学物质，其中样品C1 500 (>50%生物基)中的含量较小，这可能是由于该样品的生物基聚合物占比高于样品C2 400 (>40%生物基)和C3 GF 106/02 (>20%生物基)。

对数据的进一步调查显示，所分析的生物基塑料袋样品之间存在显著差异，例如 m/z 147的提取离子流色谱图(XIC)所示(图2[B])。

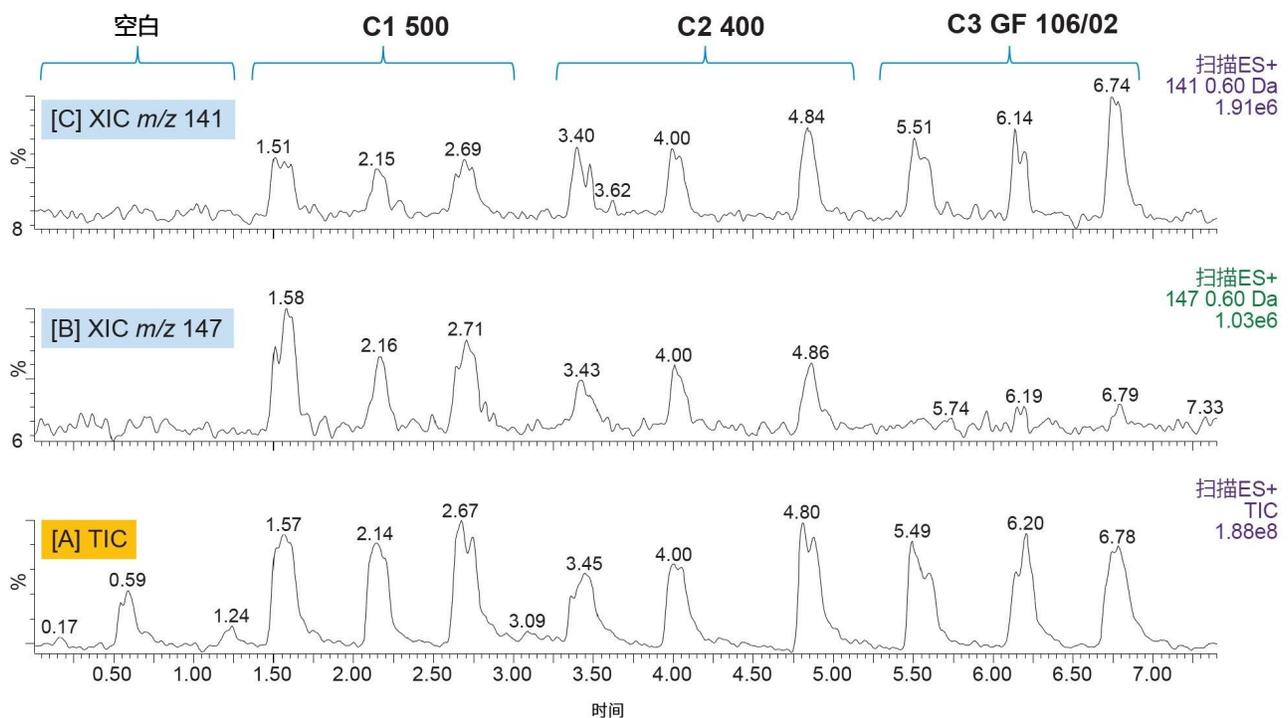


图2.[A]重复采集三次得到的空白样品和三个塑料袋样品的总离子流色谱图(TIC)。[C] 8-壬烯醛(m/z 141, $[M+H]^+$)的提取离子流色谱图(XIC); [B] m/z 147, $[M+H]^+$ 的XIC, 表明所分析的生物基塑料袋样品之间存在差异。

最有可能为增塑剂化合物的 m/z 147在C1 500和C2 400样品中含量最高，而在C3 GF 106/02样品中不存在，图3的XIC叠加图可以更清楚地看到这一点。有趣的是，制造商称样品C3 GF 106/02不含增塑剂，这与我们的发现相符。

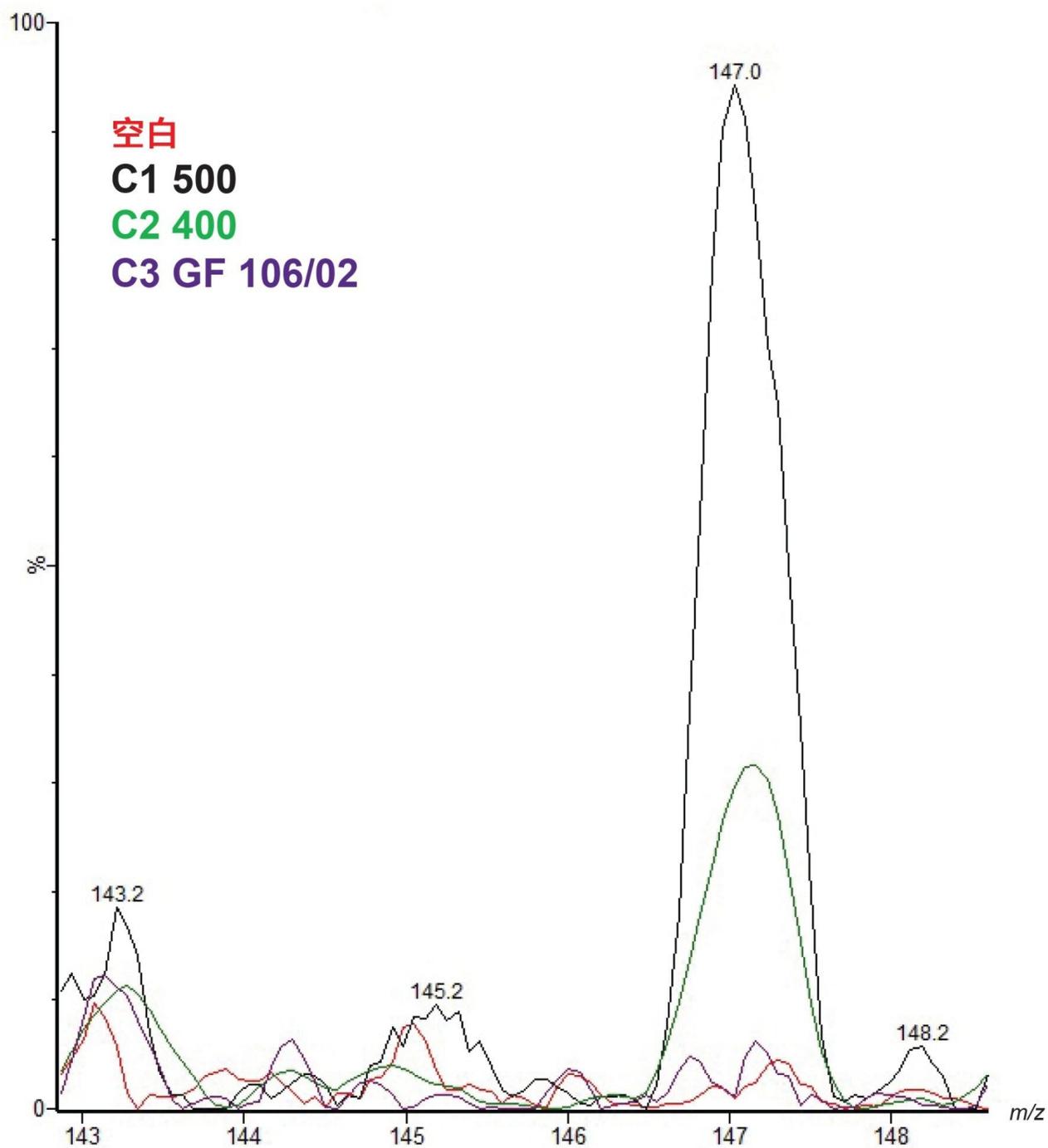


图3. m/z 147的叠加XIC显示该化合物在样品C1 500和C2 400中的丰度较高，而在样品C3 GF 106/02中不存在。

结论

这些初步结果表明，Waters ACQUITY QDa检测器与SICRIT软电离的结合为分析实验室提供了一种可行的选择，可用于分析塑料袋等生物基塑料产品中的挥发性有机化合物。这种分析配置是一种经济有效的正交技术，只需极少的样品前处理，在对分析速度、可靠性和灵活性有严格要求的塑料产品测试领域，该技术可有效提高生产率，能够对最终产品进行质量控制检查以确保批次间质量。此外，分析配置的占用空间小，有利于使用包含内标的Waters ACQUITY QDa检测器进行现场分析，简化仪器启动，从而实现快速轻松的系统操作。

参考资料

1. Cecchi T., de Carolis C. “Assessment of the Safety of BioBased Products.” Chapter in: *Biobased Products From Food Sector Waste*. Springer, Cham. 2021. DOI: 10.1007/978-3-030-63436-0_10.
2. Osorio, J. “Comparison of LC-ESI, DART, and ASAP for the Analysis of Oligomers Migration From Biopolymer Food Packaging Materials in Food (Simulants).” *Analytical and Bioanalytical Chemistry* .2021. DOI: 10.1007/s00216-021-03755-0.
3. M. Weber, J-C. Wolf, C. Haisch. Gas Chromatography–Atmospheric Pressure Inlet–Mass Spectrometer Utilizing Plasma-Based Soft Ionization for the Analysis of Saturated, Aliphatic Hydrocarbons, *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*. 2021 32 (7), 1707–1715. DOI: 10.1021/jasms.0c00476.
4. Robert A. Sanders, David V. Zyzak, Thomas R. Morsch, Steven P. Zimmerman, Peter M. Searles, Melissa A. Strothers, B. Loye Eberhart, Amy K. Woo. Identification of 8-Nonenal as an Important Contributor to “Plastic” Off-Odor in Polyethylene Packaging, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2005 53 (5), 1713–1716. DOI: 10.1021/jf048395j.

致谢

Jan-Christoph Wolf - Plasmion GmbH

Rachel Sanig, Cristian Cojocariu - Waters Corporation

特色产品

[ACQUITY QDa质谱检测器 <https://www.waters.com/134761404>](https://www.waters.com/134761404)

[MassLynx MS软件 <https://www.waters.com/513662>](https://www.waters.com/513662)

720007504ZH, 2022年1月

© 2022 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私](#) [商标](#) [网站地图](#) [招聘](#) [Cookie](#) [Cookie](#) [设置](#)

沪 ICP 备06003546号-2

京公网安备 31011502007476号