

## 出國報告（出國類別：開會）

### 參加「61 屆美國質譜協會質譜研討會」出國報告

服務機關：衛生福利部食品藥物管理署

姓名職稱：楊凱智 技士

出國地區：美國

出國期間：102 年 6 月 8 日至 6 月 15 日

報告日期：102 年 8 月 23 日

## 摘要

「61 屆美國質譜協會質譜研討會 (61st Conference on Mass Spectrometry, ASMS)」於 2012 年 6 月 9 日至 6 月 13 日在美國明尼阿波利斯舉行，為提升本署檢驗技術及加快檢驗方法研擬速度，並與國際接軌，除了學習各國之先進質譜技術外，並以壁報發表本署研究成果。質譜儀為目前檢驗儀器的主流，具有良好的定性鑑別能力及準確的定量能力，而為食品安全把關及確保民眾健康，本署也逐漸進行利用高解析度質譜進行非目標物篩檢 (Non-Targeted screening)，對於違法添加物及禁用藥物進行把關。61st ASMS 邀請學者專家進行質譜儀及相關議題發表口頭及壁報論文，論文主題包括蛋白質體學、脂質體學、代謝物分析、臨床化學、先進質譜研發等，內容豐富，參加此次會議可謂獲益良多。

國內消費者意識日漸高漲，對於食品安全要求日漸注重，從三聚氰胺開始到順丁烯二酸酐澱粉等突發新聞事件及農藥、動物用藥等殘留藥物問題，檢驗分析都扮演了極為重要的角色。為保護國民食品安全，本署積極研發極快速檢驗方法縮短檢驗流程，並使用精密的質譜儀器進行分析，而引進國外最新知識技術為不可或缺來提升國內檢驗技術增進的方式，建議持續參加美國質譜協會質譜研討會，發表相關研究成果並建立國際間交流及溝通管道。

## 目次

壹、目的.....	1
貳、過程.....	2
參、心得.....	9
肆、建議.....	10
伍、附件	

附件一：61st ASMS 會議照片

附件二：壁報發表摘要「Rapid Analysis of Pesticides in Commercial Fruit Juices and Fruit Wine by Liquid Chromatograph High Resolution Orbitrap Mass Spectrometer」

附件三：研討會口頭及壁報發表各主題一覽表

附件四：「衛生福利部食品藥物管理署出國人員出國經驗分享」-參加 61 屆美國質譜協會研討會出國報告

## 壹、目的

近年來質譜儀技術進步快速，包括飛行式質譜儀（Q-TOF）、高解析四極桿傅立葉轉換電場軌道質譜儀（Q-Orbitrap）、串聯管柱式氣相層析飛行式質譜儀（GCXGC-TOF MS）等精密儀器逐漸開發及提升性能，並於蛋白質體學、基因體學、脂質體學等大分子分析取得重大突破，而食品安全及環境污染物分析，高解析度質譜儀也逐漸開始應用於非目標物篩檢（Non-Targeted screening），期望擴大有害物及非法添加物的篩檢範圍及效率。61 屆美國質譜協會質譜研討會（61st Conference on Mass Spectrometry, ASMS）為專門針對質譜儀及相關議題近期發展所舉辦之研討會，會議上進行口頭及壁報論文發表及討論，並包含多場次的廠商技術及應用的發表會。美國質譜協會創立於 1969 年，協會所舉辦的質譜研討會為每年舉辦。食品檢驗技術之開發及公告方法研擬為本署重要工作，此次參加會議為提升本署質譜分析技術及加快公告方法之研發速度，並與國際接軌，本人受派參加 2013 年 6 月 9 日至 6 月 13 日在美國明尼阿波利斯舉辦之第 61 屆美國質譜協會質譜研討會，除了學習各國之先進質譜技術外，並以壁報發表本署研究成果，期能建立與質譜儀專家之交流溝通管道。

## 貳、過程

2013 年美國質譜年會 (American Society for Mass Spectrometry, ASMS) 為第 61 屆美國質譜年會，6 月 9 日至 6 月 13 日於美國明尼蘇達州明尼阿波利斯 (Minneapolis Minnesota, USA) 舉行。研討會議程中分為 8 個演講場及壁報展覽場，每日皆有不同主題及贊助廠商演講 (vendor workshop)，會議主題眾多內容相當豐富。會議入選之口頭及壁報論文主題包括蛋白質體學 (proteomics)、脂質體學 (lipidomics)、基因體學 (genomics)、核酸 (nucleic acids)、生物標記 (biomarkers)、臨床化學 (Clinical Chemistry)、質譜影像化 (imaging MS)、代謝物 (metabolites)、離子泳動式質譜 (ion mobility MS)、環境汙染、食品安全等。壁報發表部分區分為 4 天，每天所展示的壁報主題皆為不同，以蛋白質體學、基因體學、新型質譜技術應用為主。

此次壁報論文共有 3002 篇，口頭論文共有 383 篇。此次本署報名第 61 屆美國質譜年會，並獲接受以壁報發表論文，篇名為「Rapid Analysis of Pesticides in Commercial Fruit Juices and Fruit Wine by Liquid Chromatograph High Resolution Orbitrap Mass Spectrometer」(附件二)。

此次參加 61 屆美國質譜年會共 6,329 人參加，以美國人為主(78%)，非美國籍 1,392 人(22%)。研討會中發表之論文各主題如附件三，茲將重要內容整理如下：

### 一、使用非目標性之環境計量及 GCxGC-TOF-MS 評估污水處理廠之污染物去除效率 (Use of non-targeted environmetrics and GCxGC-TOF-MS to assess the sewage treatment plant removal efficiency of emerging contaminants)

現代社會日常生活中充滿大量的化學物質，歐盟評估超過每人每日接觸約 30,000 種化合物，這些化合物如：致癌、致突變、生殖毒性、持久性有機污染物 (POPs)、農藥及有毒金屬等，流至污水處理廠 (sewage treatment plants, STPs) 比例很高。然而，污水處理廠的設計主要是去除有機營養成分，但去除上述有害物的能力較低，因此研究藉由儀器檢測出污水處理廠淨化不足的有害化合物，並加強污水處理廠對於該化合物的去除能力。

檢體從瑞典市政府污水處理廠收集而得，經過過濾後以二氯甲烷萃取及膠過濾層析 (GPC) 淨化，並以 GC-MS 及 GCxGC-TOF-MS 分析。GC-MS 的資料庫用於初步鑑別

之後再用 GCxGC-TOF-MS 確認，GCxGC-TOF-MS 用於鑑定無法對照 GC-MS 資料庫的波峰訊號。合併的出水口水樣檢體用來建立模組，將進口水樣檢體對照模組進行分析，評估淨水效果。

污水處理廠的效率大致上良好，但約 200 種化合物淨化效果不足，其中 68 種化合物係經由 GCxGC-TOF-MS 質譜圖及色層分析的滯留時間定性確認。出水口檢體淨化不足之有害化合物，其濃度範圍約為 0.2 至 12,000 ng/L，主為芳香族化合物（aromatic, 68%）或 S,N,O-heterocyclic（31%）及化學結構穩定的化合物。其中三分之一的化合物是與交通污染有關的，主要是多環芳香化合物的衍生物（ketones, quinones）。此外，除了上述外其他是為數眾多的藥品及個人護理用品（pharmaceuticals and personal care products），其中又以化妝品中添加劑佔了很大的比例，紫外線阻斷劑二苯甲酮（oxybenzone）被發現在藥品及個人護理用品濃度最高為 230 ng/L。其他檢測到的化合物如：苯並噻唑（benzothiazoles）、苯磺酰胺（benzenesulfonamides），有機磷酸酯類化合物（organophosphates），酚類抗氧化劑（phenolic antioxidants）及異氰酸酯（isocyanates）等聚合物添加劑。

研究發現大部分的化合物含有極性官能基，具高水溶性更容易通過污水處理廠不易被去除。近期開發 GCxGC-TOF-MS 用於對環境污染物分析具有明顯提升，本研究成果可被用來檢驗淨化不足之有害化合物，並加以應用來設計新的污水處理廠處理技術，用來提高淨化效果。

## 二、GC / MS / MS 於 NIST SRM2585 中同時測定雙酚 A，烷基酚及烷基酚聚氧乙烯醚 ( Simultaneous Determination of Bisphenol A, Alkylphenols and Alkylphenol Ethoxylates in NIST SRM 2585 by GC/MS/MS )

雙酚 A (BPA) 廣泛使用於聚碳酸酯塑料和環氧類樹脂，烷基酚聚氧乙烯醚 (APEs) 使用在許多產品製造中，如家用清潔劑，藥品及個人護理用品。屋塵中 BPA 和 APEs 已被發現是潛在的內分泌干擾物。由於屋塵類檢體之成分複雜故分析困難，使用認證的標準參考物質室內灰塵，有利於評估不同分析方法之精準度。研究的目的是測量在 NIST SRM 2585 屋塵中之有機污染物 (BPA 及 APEs)。

NIST SRM 2585 屋塵標準物質與碳 13 ( $^{13}\text{C}$ ) 同位素內部標準樣品加入含 0.1% 三氟醋酸 (TFA) 的甲醇，再超音波震盪。萃取液以 HLB 萃尿管柱 (200 mg, 5 mL) 進

行固相萃取 (SPE)，檢液以含 0.1%TFA 之 10 mL 甲醇的沖提。淨化後的檢液以氮氣吹乾，殘留物以 200  $\mu$ L 的丙酮溶解，並以 50  $\mu$ L 的 2,2,2-trifluoro-*N*-methyl-*N*-(trimethylsilyl) acetamide (MSTFA)進行衍生化反應。衍生化後的產物，以 GC / MS / MS 多重反應偵測模式 (MRM) 進行分析。

檢測標準物質 SRM 2585 中下列化合物：bisphenol A (BPA)、4-*tert*-octylphenol (OP)、OP monoethoxylate (OP1EO)、OP diethoxylate (OP2EO)、4-*n*-nonyl phenol (4nNP)、4nNP monoethoxylate (4nNP1EO)、branched nonylphenol (NP)、NP monoethoxylate (NP1EO)、NP diethoxylate (NP2EO)、NP triethoxylate (NP3EO) 及 NP tetraethoxylate (NP4EO)。方法顯示具良好的回收率，其範圍為 83.5% (NP1EO) 到 106% (NP2EO)。方法檢測極限 (MDL) 範圍為 0.02  $\mu$ g/g (OP2EO) 至 5.1  $\mu$ g/g (NP3EO)。共 9 種目標分析物於 SRM 2585 中被檢測出，平均濃度為 ( $\mu$ g/g, n=8)：37.6 $\pm$ 1.3 (BPA)，0.97 $\pm$ 0.07 (OP)，3.34 $\pm$ 0.20 (OP1EO)，9.58 $\pm$ 0.24 (OP2EO)，17.3 $\pm$ 0.77 (NP)，23.3  $\pm$ 0.86 (NP1EO)，36.2 $\pm$ 1.1 (NP2EO)，57.3 $\pm$ 5.3 (NP3EO)，98.5 $\pm$ 8.9 (NP4EO)，4nNP 及 4nNP1EO 未檢出。本方法也將用於加拿大屋塵研究 (CHDS)，未來可能會檢測超過 1000 個檢體，檢測的數據將有助於更深入理解人體暴露於含這些化合物的室內屋塵所造成的影響。

### 三、使用統計模組及即時分析游離源進行草本補充品中摻偽物和污染物之篩檢

(Screening herbal supplements using statistical modeling to find and identify adulterants and contaminants using direct analysis in real time (DART)-MS)

USFDA 食品安全現代化法案包括監測草本成分的規定，以確保草本活性成分的存在和含量，同時監測潛在的污染物和摻偽物。直接分析游離源質譜儀 (DART-MS) 能夠快速、廉價的分析和測量物質。因此設計流程來完成對照用自定模組，用以識別污染物及摻偽物並進行自動統計分析。

用商業膠囊產品 (黑升麻, Black Cohosh) 做為檢體進行分析，加入幾種不同濃度的農藥，並以 DART-MS 分析，調整溶劑揮發氣體溫度來分析檢體。收集得到的質譜圖用於創建統計模型，用來同時檢測補充品及其污染物。

收集黑升麻膠囊將 30 個檢體製成錠片各 3 片，其中對照空白檢體做為背景值扣除。農藥添加之檢體被導入的統計數據模組 (AnalyzeIQ software)，用來確定這些添加後的

檢體是否能在統計模型中檢出污染物的質譜圖。該研究建立農藥污染模型，運用這種模式進行樣品分析，確定是否存在農藥污染，表現出草本補充品內的摻偽物和污染物的檢測能力。

#### 四、以直接分析游離源質譜儀篩檢大量檢體中污染物其優點與限制

##### ( Screening Large Sample Sets for Contaminants by DART-MS: Limitations & Advantages )

成熟的分析技術（如 GC / LC-MS）提供了良好的樣品分析，但常伴隨著冗長的方法開發及樣品製備工作，尤其樣品前處理流程使方法開發增加時間。而質譜儀技術提供良好的定性能力，直接分析游離源具備了快速分析及多功能性，這兩種儀器組合是一種高通量的檢驗方式，藉此能迅速控制食品、藥品、化妝品中的污染物保護消費者的安全，但卻可能無法避免基質干擾的缺點。

檢驗 212 種食品和化妝品中 9 種塑化劑及 42 種零售食品包裝的 8 種光引發劑，調查直接分析游離源配合高解析度值譜儀的局限性及優點。所有的檢體先以 GC-MS 及 LC-MS/MS 方法定量 17 種的目標分析物。再以 DART-TOF -MS 和 DART-Exactive 搭配內標或無內標的方式直接分析樣品，進行定性和定量分析，並與 GC/LC 分析的結果進行比對。

兩組檢體分析結果顯示出 DART-MS 容易處理液體樣品中大部分污染物，並在 ppm 級濃度時 DART-MS 有較快的分析效率且具有足夠準確的定性篩檢能力。但 DART-MS 部分瓶頸是無法克服的，當樣品為固體或是複雜樣品進行定量時，DART-MS 狀況並不理想。對於塑化劑檢驗結果，DART-MS 篩檢未能符合 GC/LC 檢驗結果，其中偽陽性來自於鄰苯二甲酸酯離子碎裂成短鏈塑化劑類似物。而偽陰性多數發生在分析物濃度較低時（低於 5ppm）或含有同位素波峰的化學干擾時，結構異構體無法靠碎片離子比率區分。本實驗標準品及檢液於線性最低點，鄰苯二甲酸酯（ $M+H^+$ ）為 3 ppb，光聚合引發劑為 3 ng/cm<sup>2</sup>。儘管感度夠低，同位素離子無法偵測或不符合理論離子強度比時，陽性檢體經常被判斷為陰性。最後研究結果與目前主流意見（DART-MS 分析速率極快）相反，DART-MS 定量篩檢樣品時間僅稍快於一般的 GC-MS 分析。

#### 五、精確質量及同位素波峰比於複雜樣品基質的分析:高解析度質譜儀器的非目標物分



析能力

( Mass Accuracy and Isotopic Abundance Measurements in Complex Sample Matrices : Capabilities of HR-MS Instrumentation for Non-Targeted Analyses )

非目標物分析，在不同的研究領域如食品安全和代謝物具有廣泛應用。而儘管高解析度質譜儀具泛用性，但非目標物分析仍相當具有挑戰性，部分原因是由於離子抑制，同質化合物干擾及滯留時間變化造成檢測、鑑定及數據處理的困難。具體來說，質量精準度在 3 ppm 及 5% 內的絕對同位素波峰比，可以確定 80-99% 的化學方程式。而 Orbitrap 及 Q-TOF 在複雜樣品基質中與不同濃度的混合標準品提供了良好的分析結果，這些儀器可用來進行數據分析及克服非目標物分析的難處。

48 種化合物質量範圍 100-1150  $m/z$ ，層析滯留時間為 50 分鐘，每個標準品濃度為 200、50、10、1  $pg/\mu L$ 。將標準品添加到食品基質中，包含蘋果汁、優格、嬰兒食品及嬰幼兒配方奶粉。兩種 ESI-HRMS 儀器進行了性能比較：Q-Exactive ( Thermo ) 及 MaXis 4G ( Bruker )，搭配 UHPLC 系統為 Shimadzu Nexera 及 Kinetex C18 層析管柱。共 100 個檢體，每個檢液共注射 5 次進行分析，然後以精確質量及絕對同位素波峰比率評估數據。每個檢體進行 5 重複分析，總數據共有 4800 個數據，設定精確質量為 5 ppm，進行超過 24 小時連續的液相色層分析，以 Q-Exactive 檢驗結果為基準進行對照。單純混合標準品及嬰幼兒配方奶粉測得最佳的質量準確度，其次是蘋果汁和嬰兒食品，而最差的是優格。由於優格基質使數據產生嚴重質量偏差，因此使用鎖定質量 ( Lock mass ) 校正優格基質數據後再進行數據處理。校正後質量準確度顯著提升，大多數信號可以達到 3 ppm 的精確質量。

Orbitrap 整體的絕對同位素偏差為 A+1: 1.69 ppm +2.30、A+2: 1.59 ppm +4.33 ( 平均值+ SD )，然而當感度下降時仍可能產生誤判。例如當感度範圍大於  $1E7$ 、 $1E6$ - $1E7$ 、 $1E5$ - $1E6$ 、 $1E5$  的絕對同位素偏差符合比例為 100、94、81 及 29%。對於單一同位素峰感度小於  $1E5$  時，42% 的化合物沒有辦法檢測到的 A+1 訊號。Q-TOF 也以上述方式檢測精確質量和絕對同位素比率。這些實驗結果有助於建立這類儀器的使用注意事項及非目標物實驗流程設計。

六、以高效液相飛行式質譜儀分析威士忌中非揮發性成分統計分析

( Advances in MS for Characterization of Additives and Contaminants : Non-volatile

### Profiling of Whiskies Using UHPLC/QTOF-MS)

新蒸餾威士忌的香氣和風味大多為揮發性成分，而大多數商業釀造威士忌會存放於木桶中三年或更長的時間進行熟成。在此期間，非揮發性成分從橡木桶萃取產生的色澤、風味及口感上的變化。乙醇濃度、儲存設施中溫度濕度及木桶的殘留成分，都會影響威士忌最終的成分組成。研究目的是為了區分來自不同地區的威士忌，評估非揮發性成分組成的差異。

62 個威士忌檢體，包含 12 個單一麥芽蘇格蘭威士忌，10 個調和麥芽蘇格蘭威士忌，16 個波本威士忌及加拿大、愛爾蘭、田納西州和其他美國威士忌。威士忌酒齡為 3 年至 16 年。以 Agilent 1290 UHPLC/6430 QTOF-MS 系統及 5 cm x 2.1 mm Zorbax Eclipse 1.8  $\mu\text{m}$  C18 管柱，水(含醋酸)/甲醇(含醋酸)為移動相。QTOF-MS 使用負離子模式，質量範圍為 100-1700  $m/z$ 。數據分析使用安捷倫 MassHunter 及 Mass Profiler Professional 軟體。

數據利用分子特徵進行分析、過濾及統計比較，用來區分每個不同來源威士忌的組成。大致上波本威士忌及田納西威士忌與其他威士忌可明顯區分開來，愛爾蘭、加拿大及蘇格蘭威士忌並沒有因為地區而明顯區分，而是因威士忌的發酵原料及酒齡差異較大，其中單一麥芽與調和麥芽蘇格蘭威士忌數據明顯有差異。

### 七、自動化農藥篩檢軟體系統

#### ( Software System for Automated Pesticide Screening )

食品安全的重要性逐漸增加，促使越來越多檢驗人員對於廣泛潛在的化學污染物進行分析。利用高效液相層析儀配合高解析度質譜進行全質量掃描，儀器的高解析度及質量精確度，可進行目標物篩檢外亦可以進行非目標列表（非目標物）上的化合物鑑定。但由於數據龐大，使得手動處理數據具有相當大挑戰性及壓力，因此研究農藥篩檢自動化軟體的創建及測試為主要目標。

移動相梯度以水：乙腈 (95:5,v/v) 開始，結束時水：乙腈 (5:95,v/v)，分析時間為 25 分鐘，使用 Kinetex<sup>a</sup> 1.7  $\mu\text{m}$  C18 (100 x 2.1 mm) 管柱 (Phenomenex, Torrance, CA) 配合 HPLC 系統 (Accela) 及 Exactive 質譜儀 (Thermo Scientific)，數據處理使用 Xcalibur 軟體 (Thermo Scientific)。質譜儀使用正離子模式，解析度為 50k。自動化數據處理使用 Spectrus 軟體 (ACD/Labs)。進行目標物篩選時，使用 207 化合物組成的列表，包含了名稱及分子式。另一個數據庫，包含了農藥、動物用藥、香料、色素、常見藥物、天然毒素的化學結構用來針對非目標物進行篩檢。

實驗上採用果汁和食品萃取物添加混合農藥標準品濃度為 10-500 pg/ $\mu$ L。自動化軟體可以檢測到檔案中的高解析度及精確質量波峰數據。對於目標物分析，精確質量及化學方程式提供了  $m/z$  理論值，可以精確至  $\pm 0.05$  Da，並使用同位素波峰質譜圖輔助確認。資料庫中包含部份波峰滯留時間資料，對於大多數的化合物可以提供更多定性資訊，軟體可以根據上述的資料，標示波峰名稱及  $m/z$  並標示為檢出或未檢出。非目標物以 ACD / Labs 的 Spectrus 軟體進行數據處理，自動檢視任何顯著的訊號，檢視這些物質於數據庫中是否對於消費者是否有害，軟體能夠方便地讓分析者從資料庫中找到農藥或其他化合物並能迅速數據處理及檢查有問題的化學結構。

雖然資料庫永遠不可能包含完整數量龐大的農藥資料或有害物，但目前自動化系統能夠檢測樣品中至少 200 個以上化合物，當檢體中農藥檢出時仍可以判定，而無需進行數百個或數千個再確認分析。

## 參、心得

本人此次有幸派赴美國研習先進質譜儀技術及知識，參加 61 屆美國質譜協會質譜研討會（61st Conference on Mass Spectrometry, ASMS），個人對於質譜儀技術及知識收穫良多，同時也希望帶回之資訊能對相關檢驗工作有所助益，並於 8 月 13 日在「衛生福利部食品藥物管理署出國人員出國經驗分享」研習活動中報告心得分享，演講內容見附件四。此次研討會國際間知名質譜儀專家齊聚一堂，口頭發表及壁報內容皆相當具有先進的發展，亦對本署未來相關研究發展計畫有相當大的助益。此行之重要心得列述如下：(1)對於食品安全及環境物染物檢驗，高解析度質譜儀的應用目前以非目標物篩檢（Non-Targeted screening）為主，多數的研究與廠商應用資料皆以極大的資料庫（data base）配合精確質量及同位素峰比率進行大範圍的檢驗，而高解析度質譜儀目前已經越來越多以軌道阱高解析度質譜儀（Q-Orbitrap）進行應用，使用比率已經多過於飛行式質譜儀（Q-TOF）。(2)美國質譜協會質譜研討會口頭及壁報發表量多達近 4000 篇領先全球，多數研究都具有相當的突破性及代表性，參加該會議並於會議上發表能提升我國質譜分析的能見度亦能增加質譜儀的技術及知識。(3)美國在質譜技術投注大量人力及物力，長期發展先進質譜儀開發、蛋白質大分子及代謝物小分子分析、質譜影像化、改良離子化技術等方面已是具全球領導的地位，實是我國效法的對象。

## 肆、建議

從三聚氰胺開始到順丁烯二酸酐澱粉等突發新聞事件，食品安全日漸受到重視，而國際間非法添加物及禁用藥物更難掌握，對於本署於食品安全把關具極大挑戰性。為使本署發揮極大效能及健全衛生檢驗體系，針對本次質譜研討會所得之心得，建議如下：

### (1) 持續提升國家實驗室檢驗能力：

食品藥物管理署為衛生單位食品藥物管理之首，作為領導實驗室品質以及實驗室公信力之指標本研究檢驗組身為國家實驗室，檢驗能力以及精進實驗技術實是研究檢驗組未來的目標，未來將持續加強國家實驗室檢驗能力。以本次質譜研討會為例，美國於質譜領域內具有卓越的成就，為我國努力的目標。

### (2) 持續專業人才培訓及儀器設備精進：

國際間各式的檢驗方法日新月異，儀器設備的進步更是一日千里，目前我國已經進步到以氣相層析串聯質譜（GC/MS/MS）、液相層析串聯質譜（LC/MS/MS）做為檢測的主要儀器設備，研究檢驗組目前也已採購高解析四極桿傅立葉轉換電場軌道質譜儀用來快速篩檢非目標物（Non-Targeted screening）。另有關專業人才部分，世界各國投入大量人力用以研發質譜技術，目前我國投入該領域的人力仍略顯不足，歐、美、日本等先進國家之經驗值得參考。

### (3) 建立國際間交流及溝通管道：

我國須持續精進檢驗能力、食品安全管理、及增進質譜技術就必須引進國外經驗以及相關的知識，故建議持續參加美國質譜協會質譜研討會。

附件一、61st ASMS 會議照片

61st ASMS 會場



61st ASMS 會場



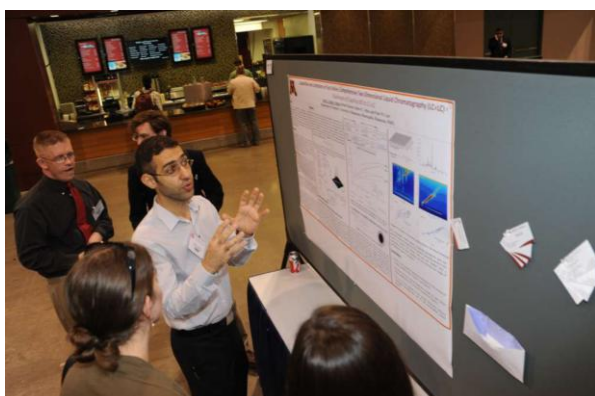
61st ASMS 口頭論文發表



61st ASMS 口頭論文發表



61st ASMS 壁報論文發表



61st ASMS 壁報論文發表



附件三

61st Annual Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics  
June 9 – 13, 2013, Minneapolis, MN

ORAL SESSIONS

Monday

Monday	MOA am	Quantification of Targeted Proteins and Post-translational Modifications
Monday	MOB am	Instrumentation: Time-of-Flight Mass Spectrometry: In Memory of Bob Cotter
Monday	MOC am	FAIMS and DMS: New Developments and Applications
Monday	MOD am	Biotherapeutics and Biomarkers: Advances in Quantitative Analysis
Monday	MOE am	Integrated Qualitative and Quantitative LC-MS for Small Molecule Analysis
Monday	MOF am	Covalent Labeling, Chemical Probes, and Crosslinking for Biomolecule Structural Characterization
Monday	MOG am	Fundamentals of Peptide Fragmentation
Monday	MOH am	Nucleic Acids
Monday	MOA pm	PTMs: Comprehensive Analysis
Monday	MOB pm	Tdop-Down and Middle-Down Protein Analysis (Honoring Fred McLafferty's 90th birthday)
Monday	MOC pm	Clinical Chemistry: Dried Blood Spot Analysis
Monday	MOD pm	Biotherapeutics, Impurities and Degradants: Structural Characterization
Monday	MOE pm	High Mass Accuracy in Drug Discovery and Development
Monday	MOF pm	Protein-Protein and Protein-Ligand Interactions
Monday	MOG pm	Fundamentals of Ion Activation and Dissociation
Monday	MOH pm	Photoionization

Tuesday

Tuesday	TOA am	Quantitative Proteomics
Tuesday	TOB am	Imaging MS: Increasing Speed and Information Content

Tuesday	TOC am	Functional Foods, Phytochemicals, and Supplements
Tuesday	TOD am	PTMs: Glycosylation
Tuesday	TOE am	Systems Biology/Cellular Pathways
Tuesday	TOF am	Metabolomics/Lipidomics: New MS Technologies and Applications
Tuesday	TOG am	Ion Mobility: Separations
Tuesday	TOH am	Antibodies and Antibody-Drug Conjugates
Tuesday	TOA pm	Instrumentation and Methods: FT, Ion Traps and Hybrid Instruments
Tuesday	TOB pm	Imaging MS: Biological Applications
Tuesday	TOC pm	Characterization of Product Variants in Biosimilars
Tuesday	TOD pm	Phosphoproteomics
Tuesday	TOE pm	Food Safety: Advances in MS for Characterization of Additives and Contaminants
Tuesday	TOF pm	Ion Mobility: Structures
Tuesday	TOG pm	Metabolites: Unusual and Uncommon
Tuesday	TOH pm	Microorganisms: Identification and Characterization

### Wednesday

Wednesday	WOA am	PTMS: Advances in Isolation, Derivatization and Separation
Wednesday	WOB am	Informatics: Protein Quantification
Wednesday	WOC am	Carbohydrates: New MS Approaches
Wednesday	WOD am	Quantitative Analysis by MS in Drug Discovery and Development: Novel Approaches
Wednesday	WOE am	Instrumentation: New Developments in High Resolution and Mass Accuracy
Wednesday	WOF am	Emerging Environmental Contaminants
Wednesday	WOG am	Fundamentals: Ion Spectroscopy (Honoring Rob Dunbar's 70th Birthday)
Wednesday	WOH am	H/D Exchange: Biological Applications
Wednesday	WOA pm	Forensic Applications
Wednesday	WOB pm	Principles of Protein Identification and Characterization



Wednesday	WOC pm	Gas-Phase Ions: Reactions, Dynamics and Theory
Wednesday	WOD pm	Biomarkers of Drug Response, Efficacy and Toxicity: Novel MS Approaches
Wednesday	WOE pm	Instrumentation: New Developments in Ionization and Sampling
Wednesday	WOF pm	Ecological and Human Health Environmental Chemistry and Toxicology
Wednesday	WOG pm	Glycoproteins and Glycans: New MS Approaches
Wednesday	WOH pm	H/D Exchange: New Development in Technology

Thursday

Thursday	ThOA am	Ambient Ionization: Instrumentation and Applications
Thursday	ThOB am	Informatics: Metabolomics
Thursday	ThOC am	Regulated Bioanalysis and Diagnostics using High Resolution LC/MS
Thursday	ThOD am	Disease Biomarkers and Pathways
Thursday	ThOE am	Space Science, Astrobiology, and Atmospheric Chemistry
Thursday	ThOF am	Imaging MS: Pharmaceutical Applications
Thursday	ThOG am	Energy, Petroleum, and Biofuels: Advances in MS Design and Informatics
Thursday	ThOH am	Epigenetic Modifications and Mechanisms
Thursday	ThOA pm	Ambient and Atmospheric Pressure Ionization: Fundamentals
Thursday	ThOB pm	Proteomics: Infection Diseases
Thursday	ThOC pm	Lipids and Profiling
Thursday	ThOD pm	Biomarkers in Drug Discovery and Development
Thursday	ThOE pm	Plant"omics"
Thursday	ThOF pm	Polymer- and Packaging-Related Contaminants and Degradants in Food, Drugs, and Consumer Products
Thursday	ThOG pm	Energy, Petroleum, and Biofuels: Advances in Sample Preparation and MS interface Design
Thursday	ThOH pm	History: Celebration of 100th Anniversary of Mass Spectrometry

61st Annual Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics  
June 9 – 13, 2013, Minneapolis, MN

POSTER SESSIONS

All Week Museum History Display

All Week Special Special Posters

Monday

Monday MP01 Small Molecules: Quantitative Analysis I

Monday MP02 Drug Metabolism: High Throughput Analysis

Monday MP03 Metabolomics: Identification of Unknown Metabolites

Monday MP04 Metabolomics: Untargeted Metabolite Profiling (Methods)

Monday MP05 Metabolomics: Sample Preparation

Monday MP06 LC-MS: Chromatography

Monday MP07 LC-MS: Sample Preparation (Small Molecules)

Monday MP08 MALDI Sample Preparation

Monday MP09 Diagnostic Clinical Chemistry: Peptides/Proteins

Monday MP10 Imaging MS: Disease Markers

Monday MP11 Lipids General

Monday MP12 Lipids: Identification and Structural Analysis

Monday MP13 Nucleic Acids: General

Monday MP14 Nucleic Acids: RNA

Monday MP15 Instrumentation: New Developments in Ionization and Sampling

Monday MP16 Instrumentation: New Developments in Mass Analyzers

Monday MP17 Ambient Ionization: Instrumentation

Monday MP18 Informatics: General

Monday MP19 Informatics: Workflow and Data Management

Monday MP20 Informatics: Crosslinking and Structure Analysis

Monday MP21 Crosslinking

Monday MP22 H/D Exchange: Protein Structure/Function

Monday MP23 Proteins: General

Monday	MP24	New Advances in Quantitative Proteomics
Monday	MP25	Protein Therapeutics: Quantitative Analysis
Monday	MP26	Biomarker Quantitation: Proteins and Peptides
Monday	MP27	Biomarker Discovery: Cancer
Monday	MP28	Immunology
Monday	MP29	Molecular Systems Biology and Disease
Monday	MP30	Forensics
Monday	MP31	Environmental Analysis: General I
Monday	MP32	Plant"omics"
Monday	MP33	Agriculture
Monday	MP34	Natural Products
Monday	MP35	Astrobiology & Atmospheric Chemistry
Monday	MP36	Polymers

#### Tuesday

Tuesday	TP01	Ion Activation/Dissociation
Tuesday	TP02	Ion/Molecule, Ion/Ion, Ion/Electron Interactions
Tuesday	TP03	Photoionization: Instrumentation & Applications
Tuesday	TP04	Instrumentation: New Developments in Ionization and Sampling
Tuesday	TP05	Instrumentation: New Concepts
Tuesday	TP06	Peptides: Fragmentation Mechanisms
Tuesday	TP07	Peptides: Ion Activation/Dissociation Strategies
Tuesday	TP08	Peptides: Quantitative Analysis I
Tuesday	TP09	Proteins: Conformation Analysis
Tuesday	TP10	Protein Covalent Labeling
Tuesday	TP11	Biomolecular Structure
Tuesday	TP12	Intact Proteins: PTM Discovery
Tuesday	TP13	Intact Proteins: Quantitative Analysis
Tuesday	TP14	Intact Proteins: Sequence Analysis
Tuesday	TP15	Protein Therapeutics: Structural Characterization

Tuesday	TP16	Informatics: Intact Proteins
Tuesday	TP17	Informatics: Systems Biology and Large-Scale Analyses
Tuesday	TP18	Biomarker Discovery: Proteins
Tuesday	TP19	Neurodegenerative, Cardiovascular and Infectious Disease
Tuesday	TP20	New Technologies in Biomarker Discovery
Tuesday	TP21	Proteomics: Plasma and Tissue
Tuesday	TP22	Epigenetic Modifications/Histones
Tuesday	TP23	Metabolomics: General
Tuesday	TP24	Metabolomics: Untargeted Metabolite Profiling Applications
Tuesday	TP25	Drug Metabolism: Quantitative Analysis
Tuesday	TP26	Small Molecules: Quantitative Analysis II
Tuesday	TP27	Lipids: Quantitative Analysis
Tuesday	TP28	Informatics: Quantification/Validation
Tuesday	TP29	Toxicology
Tuesday	TP30	Diagnostic Clinical Chemistry: Small Molecules I
Tuesday	TP31	Environmental Analysis: Pharmaceuticals and Pesticides
Tuesday	TP32	Elemental Analysis
Tuesday	TP33	Ion Mobility Applications
Tuesday	TP34	Ambient Ionization: Applications I
Tuesday	TP35	Carbohydrates I
Tuesday	TP36	Glycoproteins I
Tuesday	TP37	Food Safety

### Wednesday

Wednesday	WP01	Mass Spectrometry - History & Education
Wednesday	WP02	Nanomaterials
Wednesday	WP03	Environmental Analysis: General II
Wednesday	WP04	Environmental Analysis: Hydrocarbons and DOM
Wednesday	WP05	Energy: Hydrocarbons and Petrochemical
Wednesday	WP06	Small Molecules: Quantitative Analysis III

Wednesday	WP07	Diagnostic Clinical Chemistry: Small Molecules II
Wednesday	WP08	Forensics - Drugs of Abuse
Wednesday	WP09	Imaging MS: Method Development I
Wednesday	WP10	Imaging MS: Software
Wednesday	WP11	Imaging MS: Pharmaceutical Applications
Wednesday	WP12	Imaging MS: Small Molecules
Wednesday	WP13	Informatics: Small Molecule Identification and Characterization
Wednesday	WP14	Small Molecules: Qualitative Analysis
Wednesday	WP15	Drug Metabolism: Qualitative Analysis
Wednesday	WP16	Drug and Metabolite Analysis: Novel Approaches for Dried Biological Samples
Wednesday	WP17	Metabolomics: Quantitative Analysis
Wednesday	WP18	Metabolomics: Clinical Applications
Wednesday	WP19	Food "omics" MS Characterization of Food and Nutritional Supplements
Wednesday	WP20	Food Safety
Wednesday	WP21	H/D Exchange, Software and Hardware
Wednesday	WP22	H/D Exchange: Protein Structure/Function II
Wednesday	WP23	Proteins: Non-Covalent Interactions
Wednesday	WP24	Antibody & Antibody Drug Conjugates
Wednesday	WP25	Analysis of Biosimilars
Wednesday	WP26	Biomarkers: Discovery
Wednesday	WP27	Biomarker Quantitation: New Methods
Wednesday	WP28	Proteins: Complexes and Aggregation
Wednesday	WP29	Proteins PTM I
Wednesday	WP30	Peptides: PTM Identifications
Wednesday	WP31	Informatics: Peptide Identification / Characterization I
Wednesday	WP32	Informatics: Post-Translational Modifications
Wednesday	WP33	Peptides: Quantitative Analysis II
Wednesday	WP34	Phosphopeptides: Enrichment Methods

Wednesday WP35 Advances in Separation Techniques for Proteomic Applications  
Wednesday WP36 Interactions and Pathway Analysis  
Wednesday WP37 Ambient Ionization: Applications II  
Wednesday WP38 Ion Mobility Fundamentals

Thursday

Thursday ThP01 Ion Mobility - FAIMS  
Thursday ThP02 Imaging MS: Large Molecules  
Thursday ThP03 Imaging MS: Quantitative Analysis  
Thursday ThP04 Imaging MS: Method Development II  
Thursday ThP05 Imaging MS: Instrumentation  
Thursday ThP06 Instrumentation: General  
Thursday ThP07 LC-MS Instrumentation  
Thursday ThP08 LC-MS Sample Preparation (Proteins & Peptides)  
Thursday ThP09 Advances in Sample Preparation Methods for Improved Protein Identification and Quantification  
Thursday ThP10 High Throughput Analysis/Robotics  
Thursday ThP11 GCMS: Instrumentation & Applications  
Thursday ThP12 High Mass Accuracy / High Performance MS: Instrumentation  
Thursday ThP13 High Mass Accuracy / High Performance Applications  
Thursday ThP14 Peptides: General  
Thursday ThP15 Peptidomics  
Thursday ThP16 Peptides: Sequence Analysis  
Thursday ThP17 Phosphopeptides: Quantitative Analysis  
Thursday ThP18 Protein: PTM II  
Thursday ThP19 Glycoproteins II  
Thursday ThP20 Carbohydrates II  
Thursday ThP21 Biomarker Quantitation: Glycans, Lipids & Metabolites  
Thursday ThP22 Biomarker Discovery: Cancer and Neuroscience  
Thursday ThP23 Proteomics: Clinical Applications  
Thursday ThP24 Proteins: Membrane

Thursday	ThP25	Microorganisms: Identification and Characterization
Thursday	ThP26	Homeland Security
Thursday	ThP27	Food Safety - Pesticides
Thursday	ThP28	Lipids: Profile Analysis
Thursday	ThP29	Small Molecules: Quantitative Analysis IV
Thursday	ThP30	Ambient Ionization: Fundamentals
Thursday	ThP31	Ionization Mechanisms
Thursday	ThP32	Energy: Biofuels
Thursday	ThP33	Informatics: Pathway Analysis
Thursday	ThP34	Informatics: Peptide Identification / Characterization II
Thursday	ThP35	Ion Spectroscopy
Thursday	ThP36	Ion Structure / Energetics