

# 质谱平台的运行管理和开放共享

卢巧梅

(福州大学 福建省高校测试中心, 福建 福州 350116)

**摘要:** 质谱法(mass spectrometry, MS)是现代分析仪器的一种重要技术. 以福州大学测试中心质谱平台为例, 介绍仪器基本配置和管理情况, 重点讨论一部分质谱仪开放共享的实践尝试及存在的问题, 希望能为同类型仪器的开放共享和科学管理提供一些参考.

**关键词:** 质谱; 开放共享; 自主操作

中图分类号: O657.63; G311

文献标志码: B

文章编号: 1006-3757(2022)02-0159-04

DOI: 10.16495/j.1006-3757.2022.02.008

## Operation Management and Open Sharing of Mass Spectrometer Platform

LU Qiao-mei

(Fujian College Association Instrumental Analysis Center of Fuzhou University, Fuzhou 350116, China)

**Abstract:** Mass spectrometry (MS) is an important technology in modern instrumental analysis. Taking the MS platform of Fujian College Association Instrumental Analysis Center of Fuzhou University as an example, the basic configuration, test services and management status of MS are introduced. The open sharing of MS and exiting problems have been discussed in detail. It is hoped to provide some references to other similar large instruments on their open sharing and scientific management.

**Key words:** MS; open sharing; independent operation

质谱(mass spectrometre, MS)是解析有机化合物结构的强大工具,其结合色谱方法快速、强大的分离能力,是复杂体系混合物分离分析的重要利器<sup>[1]</sup>. 福州大学福建省高校测试中心拥有 6 套质谱仪器(色谱-质谱联用为主,配置如表 1 所列),已建成种类较丰富、功能较齐全的质谱平台(以下简称平台),能实现非极性到强极性化合物的定性、定量分析<sup>[2-3]</sup>.

随着《国家重大科研基础设施和大型科研仪器开放共享管理办法》的实施,许多高校都积极推动大型仪器的开放共享<sup>[4-5]</sup>. 平台综合考虑仪器价值、

使用复杂程度、维护成本等因素,将质谱仪逐步开放,探索开放共享的管理模式和保障措施,并对存在问题进行梳理和探究.

### 1 开放共享的管理模式

#### 1.1 逐步开放机制

2 套单四级杆 GC-MS 适用于低沸点、非极性有机物分析,仪器操作和数据分析较简单,全部向校内师生开放. LC-QqQ-MS 的超高灵敏度对于痕量组分定量极具优势,配备两种离子源能满足不同极性有机物的检测要求,该仪器于 2013 年开放. 随着高分

收稿日期:2022-01-26; 修订日期:2022-03-09.

基金项目:国家自然科学基金(21705026),福建省自然科学基金(2021J01632)[National Natural Science Foundation of China (21705026), Natural Science Foundation of Fujian Province (2021J01632)]

作者简介:卢巧梅(1983-),女,博士,高级工程师,研究方向为色谱-质谱分析和大型仪器管理研究,E-mail:luqm@fzu.edu.cn.

表 1 质谱平台仪器配置一览表

Table 1 Instrument configuration list of mass spectrometry platform

仪器名称及缩写	品牌型号	投入年份	离子源	质量分析器	分辨率	多级质谱	自主操作
液相色谱-离子阱质谱(LC-IT-MS)	1100 LC/MSD Trap XCT, Agilent	2005	电喷雾电离、大气压化学电离	离子阱	低	是,时间串联	是
液相色谱-三重四级杆质谱(LC-QqQ-MS)	TSQ Quantum Access MAX, Thermo Fisher Scientific	2012	加热电喷雾电离、大气压化学电离	三重四级杆	低	是,空间串联	是
液相色谱-四级杆飞行时间质谱(LC-QTOF-MS)	1260-6520B, Agilent	2012	电喷雾电离	四级杆-飞行时间	高	是,空间串联	否
气相色谱-质谱(GC-MS)	5973-6890, Agilent	2005	电子轰击	四级杆	低	否	是
全二维气相色谱-高分辨飞行时间质谱(GC×GC-HR TOF-MS)	GC×GC PEGASUS HRT 4D plus, LECO	2018	电子轰击、化学电离	飞行时间	高	否	否
气相色谱-质谱(GC-MS)	GCMS-QP 2020 NX, Shimadzu	2021	电子轰击	四级杆	低	否	是

辨 LC-QTOF-MS 的引入和补充,采用低分辨率 LC-IT-MS 能够提供丰富的结构解析和碎片信息,所以于 2015 年实现开放共享。

2 套高分辨质谱仪(GC×GC-HR TOF-MS 和 LC-QTOF-MS)价值和复杂程度较高,上机操作和

数据分析需要一定的专业背景和经验<sup>[6]</sup>。由于校内外未知物精准定性的需求高、测试任务较饱满,故暂未开放给师生独立操作。考虑各质谱仪的特色及适用范围,不太熟悉该技术的师生可参照图 1 进行选择。

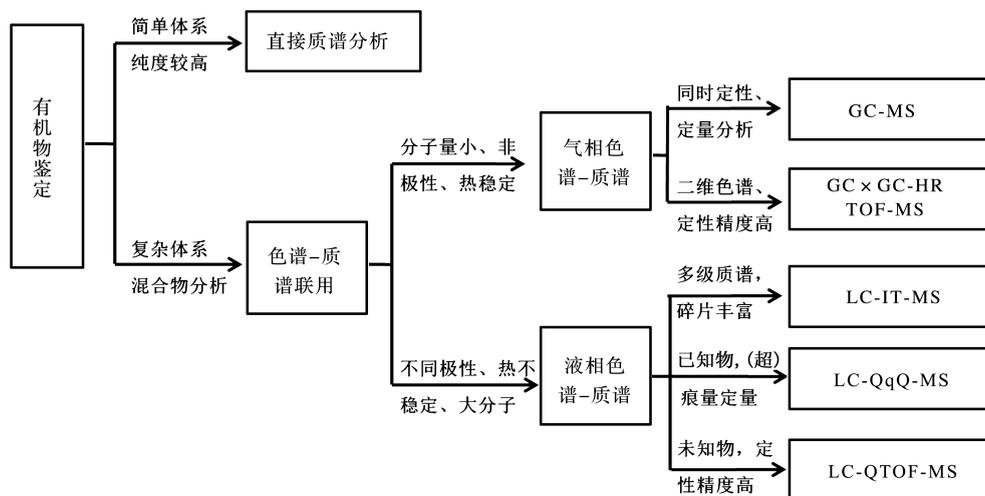


图 1 平台质谱仪的适用范围

Fig. 1 Application of mass spectrometry platform

## 1.2 自主操作和资格认定

基于平台上4套质谱仪实现开放和自主操作,校内师生可通过培训、考核和资格认定后获得不同级别的仪器使用权限。考核通过者均为初级用户,需管理员在场才能操作仪器。初级用户操作仪器满10个机时,再次考核合格者可晋升为中级资格,可在工作日使用仪器。类似的,中级用户操作仪器满50个机时升级为高级用户,可在任何时间段预约使用仪器。

截止目前,质谱平台已培训校内师生50余人,涉及5个学院8个课题组。特别是研究生,可以利用上述仪器进行课题研究,从测试方法开发、仪器参数优化、定量方法建立到实际样品分析各环节,锻炼了学生分析问题、解决问题能力,发挥了大型仪器人才培养和实验室“传帮带”的作用。

## 1.3 建成开放共享服务平台

“互联网+”技术已成为提高大型仪器管理水平、服务能力以及开放共享的有效途径<sup>[7]</sup>。中心建成“大型仪器开放共享服务平台”,所有质谱仪测试均采用网络预约。校内外用户可在中心官网上查询各套质谱仪的信息及使用状态,后续的预约测试、费用缴纳、数据上传等所有流程已实现一站式操作。

## 2 开放共享的保障措施

### 2.1 完善制度规程,强化安全管理

质谱仪逐步开放后使用者增加,实验室的安全风险和仪器故障风险随之增加。平台全方位落实“谁使用,谁负责”的监管机制<sup>[8]</sup>,配置门禁系统和监控系统,先后制订《常规化仪器开放共享平台实验室管理制度》《用户自主操作仪器管理暂行规定》等制度,并编制一整套质谱仪器操作规程,使用者必须严格按照规程来操作仪器。例如,针对高级用户,在非上班时间独立操作仪器时,管理员借助QQ群、摄像头等方式要求使用者在试验期间,定期打卡签到、拍照仪器操作界面,以便随时把握人员、仪器和实验室的安全情况。

### 2.2 专人专管与技术队伍设置

大型仪器的专人管理能有效降低仪器的故障率<sup>[9-10]</sup>。目前,平台由3名专职人员以主、副岗形式管理,在质谱仪器运行管理、维护保养、故障处理上具有多年操作经验。而且,3名管理员均为化学专业博士,主持过多项国家级和省校级基金项目,并承担研究生培养工作。这些专业背景和科研素养都有助

于管理员参与仪器功能开发和后续维护。

## 3 存在问题和对策思考

质谱平台是福建省高校测试中心开放使用最早、最彻底的一批仪器。近三年多次获得福建省科技厅“关于重大科研基础设施和大型科研仪器向社会开放服务绩效评价工作”的奖励,也印证了质谱仪在开放共享服务上获得了较好成效。

然而,经过几年摸索,发现仍存在一些问题:(1)仪器方面。平台有4套质谱仪使用超过10年,已进入故障高发期。并且早期购买的质谱仪在部分软(硬)件参数和功能上已无法满足快速发展的科研需求,仪器的补充更新迫在眉睫。为此,设立贵重仪器开放测试基金和购买仪器维保合同,同时争取福州大学“双一流”建设经费用于质谱仪的维护维修和更新换代,方可保障可持续运行。(2)人员方面。目前绩效方案中尚缺少仪器开放共享的工作量认定、考核评价等模块,这不利于调动管理人员积极性。建议进一步重视大型仪器开放共享工作,明确岗位职责、完善绩效考核与奖励政策,以此提高管理员的主动性和积极性,激励其愿意参与到仪器开放共享工作中。(3)开放共享占比方面。质谱平台现有仪器开放共享率为66.7%,然而纵观全单位,已实现开放共享的仪器占比仅19.6%,开放共享的力度仍然不够。建议进一步理顺顶层设计和管理机制,加强开放共享理念的宣传,做到能开放的仪器尽量开放,提高大型仪器的共享共用覆盖率。

### 参考文献:

- [1] 汪聪慧. 有机质谱技术与方法[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2011. [WANG Cong-hui. Techniques and methods in organic mass spectrometry [M]. Beijing: China Light Industry Press, 2011.]
- [2] Zoccali M, Tranchida P Q, Mondello L. Fast gas chromatography-mass spectrometry: a review of the last decade [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2019, 118:444-452.
- [3] Bhole R P, Jagtap S R, Chadar K B, Zambare Y B. Liquid chromatography-mass spectrometry technique-A review [J]. Research Journal of Pharmacy and Technology, 2020, 13(1):505.
- [4] 宋妮, 张秀丽, 王聪, 吕志华, 任素梅. 质谱实验室大型仪器设备开放共享的实践与探索[J]. 分析测试技术与仪器, 2018, 24(1):57-60. [SONG Ni,

- ZHANG Xiu-li, WANG Cong, LV Zhi-hua, REN Su-mei. Practice and exploration of opening and sharing of large scale instruments and equipment in mass spectrometry laboratories [J]. *Analysis and Testing Technology and Instruments*, 2018, 24(1):57-60.]
- [ 5 ] 吴丹. 实验室大型仪器设备使用效率及管理模式研究[J]. *实验室科学*, 2021, 24(3):229-232. [ WU Dan. Research on the use efficiency and management mode of large instruments in laboratory[J]. *Laboratory Science*, 2021, 24(3):229-232.]
- [ 6 ] 韩彬. 超高压液相色谱-四级杆-飞行时间质谱仪的管理、维护与故障处理[J]. *分析测试技术与仪器*, 2019, 25(1):7-10. [ HAN Bin. Management, maintenance and troubleshooting of ultra-high performance liquid chromatograph tandem quadrupole time of flight mass spectrometer [J]. *Analysis and Testing Technology and Instruments*, 2019, 25(1):7-10.]
- [ 7 ] 詹美燕, 李春明. “互联网+”高校大型分析测试仪器开放共享的管理探索与实践——以华南理工大学材料平台公共分析测试中心为例[J]. *科技管理研究*, 2020, 40(4):127-131. [ ZHAN Mei-yan, LI Chun-ming. Exploration and practice of open-sharing for large analytical instruments in universities with “Internet +”: taking public analysis and testing center of material platform in South China university of technology as an example[J]. *Science and Technology Management Research*, 2020, 40(4):127-131.]
- [ 8 ] 赵明, 王安冬, 祝永卫, 郭梅芳, 宋秀庆, 杨金福. 高校大型仪器开放共享平台的安全管理研究[J]. *实验室研究与探索*, 2019, 38(4):282-285. [ ZHAO Ming, WANG An-dong, ZHU Yong-wei, GUO Meifang, SONG Xiu-qing, YANG Jin-fu. Research on security management of large instrument open sharing platform in colleges [J]. *Research and Exploration in Laboratory*, 2019, 38(4):282-285.]
- [ 9 ] 谷淑波, 宋雪皎, 金敏. 高校青年教师参与实验室大型精密仪器管理制度初探[J]. *分析测试技术与仪器*, 2019, 25(1):53-56. [ GU Shu-bo, SONG Xue-jiao, JIN Min. Study on system of young teachers in colleges and universities to participate in large-scaled equipment management [J]. *Analysis and Testing Technology and Instruments*, 2019, 25(1):53-56.]
- [ 10 ] 郭盛, 高翔, 尹婵娟. 高校实验技术人员岗位考核的探索与实践[J]. *实验技术与管理*, 2021, 38(2):242-245. [ GUO Sheng, GAO Xiang, YIN Chan-juan. Exploration and practice on post assessment of experimental technicians in colleges and universities [J]. *Experimental Technology and Management*, 2021, 38(2):242-245.]