

新时代下仪器分析课程的使命与挑战

周晓菲², 曹雨晴¹, 朱峰¹, 戚丽¹, 刘林海¹, 晏妮¹, 朱志强^{1,*}

¹ 上饶师范学院化学与环境科学学院, 江西 上饶 334001

² 江西省广丰中学, 江西 上饶 334600

摘要: 在我国科技发展需求和新百年时代变革的背景下, 特别是国家正在经历从“制造大国”向“制造强国”转变的历史性跨越期, 探讨了仪器分析课程的新使命, 即从基础化学教育的层面为培养学生的创新意识和创造能力提供指引, 为国家的仪器设备产业化发展提供一定支撑。为实现这一宏大艰巨的新使命, 在仪器分析教学过程中应突出仪器分析的“顶天立地”的特征以及其在化学教育中连通化学中各个分支和其他学科中所处的重要地位, 仪器分析的教学也为智能制造教育提供了极好的切入点。同时本文分析了当前仪器分析教学所面临的挑战, 即新时代的仪器分析课程如何培养出不但要能真正理解仪器、会使用仪器, 而且要具有能创新制造仪器并能发展相应产业的新一代人才, 以使教学能更好地适应社会发展趋势和国家战略需求, 并指出在教学实践中迎接这种挑战的方法。

关键词: 仪器产业化; 仪器分析; 使命与挑战

中图分类号: G64; O6

Missions and Challenges of Instrumental Analysis Course in the New Era

Xiaofei Zhou², Yu-Qing Cao¹, Feng Zhu¹, Li Qi¹, Linhai Liu¹, Ni Yan¹, Zhiqiang Zhu^{1,*}

¹ School of Chemistry and Environmental Science, Shangrao Normal University, Shangrao 334001, Jiangxi Province, China.

² Guangfeng Middle School of Jiangxi Province, Shangrao 334600, Jiangxi Province, China.

Abstract: Against the backdrop of China's scientific and technological advancement demands and the transformative epoch of the new century, particularly as the nation progresses from a “manufacturing giant” to a “manufacturing powerhouse”, this paper discusses the evolving mission of instrumental analysis course. The mission includes fostering students' innovation consciousness and creativity at the level of basic chemistry education, and supporting the industrial development of national instrumentation. To fulfill this ambitious mission, the teaching of instrumental analysis should emphasize its pivotal role in bridging various chemical sub-disciplines and other fields, serving as an excellent introduction to intelligent manufacturing education. The paper also addresses the pedagogical challenges in training a generation proficient in understanding, using, and innovating in instrumentation to advance the industry, which is essential to better adapt to societal development trends and national strategic demands. Strategies to address these challenges within educational practices are also proposed.

Key Words: Instrument industrialization; Instrumental analysis; Mission and challenge

收稿: 2023-10-13; 录用: 2023-11-10; 网络发表: 2023-11-27

*通讯作者, Email: zhiqiangz@jccas.ac.cn

基金资助: 国家自然科学基金(22364019); 江西省高等学校教学改革研究课题(JXJG-19-16-11); 江西省基础教育研究课题(SZUSYHX2021-960); 江西省教育厅科学技术研究项目(GJJ2111713, GJJ2201824); 上饶市科技局基础应用研究计划(SKB2021009)及大学生创新创业计划(202310416009)

科学技术是引领人类社会持续发展的重要力量。习总书记指出：“当今世界，谁牵住了科技创新这个‘牛鼻子’，谁走好了科技创新这步先手棋，谁就能占领先机、赢得优势。”而科学技术的进步和创新，与先进的科学仪器研制相辅相成，密不可分。科学仪器是人的感官在时间和空间尺度上的延伸，是人类认识世界改造世界不可或缺的工具。对此，中国古人就有清晰的认识，“工欲善其事，必先利其器”中的“器”就是指的先进的测量仪器或工具。诺贝尔化学奖获得者R. R. Ernst也曾指出：“现代科学的进步越来越依靠尖端仪器的发展。”因此，发展具有自主知识产权的先进科学仪器事业是把我国建设成为科学强国的重要条件和必要组成部分。另一方面，正是我国独立自主研制的大科学装置，例如，球面射电望远镜(Five-hundred-meter Aperture Spherical radio Telescope, FAST)、新一代同步辐射装置、中国科学院合肥等离子体研究所用于热核聚变研究的EAST (全超导托卡马克核聚变实验装置, Experimental Advanced Superconducting Tokamak)装置等，奠定了我国在部分科学前沿领域的创新引领地位，成为我国乃至全世界原创成果的策源地，对我国的技术创新、产业发展和国力提升提供了强大动力。

当代科学仪器在分析测试领域的应用，已深入到我们生活的方方面面^[1]。国内分析界一位德高望重的前辈曾经用“顶天立地”非常形象地概括了仪器分析方法在当代基础科学研究和社会生产生活应用之间所扮演的至关重要的沟通连接作用(见图1)。“顶天”是指以当代分析仪器为基础的分析测试方法已经深入到人类生活的每个角落，从活体的无损分析、可视化分析、精准分析和多维度分析到与之相关的食品安全、环境检测与监控、产品鉴定等等，无不与人类生活质量的提高休戚相关。另一方面，“立地”则指出科学仪器的研制不仅仅属于分析化学的范畴，它还会带动数学、物理、机械、电子、软件等相关诸多领域的发展。例如，MEMS传感器(Microelectro Mechanical Systems)就是在微电子技术基础上整合了电子、机械、材料、物理学、化学、生物学、医学等多种学科的技术而发展起来的，已广泛应用于医疗、汽车电子、运动追踪、手机等领域，深入到日常生活的方方面面。成为世界瞩目的重大科技领域之一。反过来，这些日常相关的应用领域又能促进一些基础科学的进步与发展。例如，大批量数据处理和优化的算法、发展新的统计分析工具都能推动基础数学的发展^[2]；而科学仪器的测量基础本身就依赖于物理原理。人类历史上已一再上演这样生动的例子，一个新的物理现象的发现，带动了一批新的以之为基础的科学仪器的发展，而这些科学仪器又为新颖的实验现象的观测奠定了坚实的基础。纵观一百二十多年的诺贝尔奖，大约有三分之一的科学奖项是颁授给那些在测量方法或科学仪器的改进上取得突破成就的，其他更多则是利用这些测量方法或科学仪器的改进而做出新的重大科学发现或凝练出科学理论^[3]。

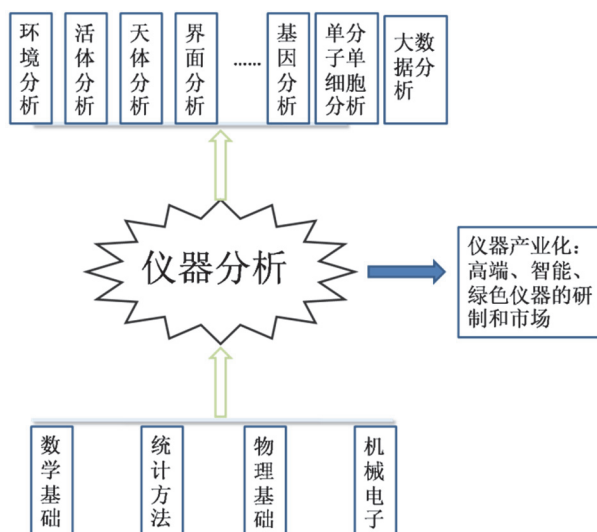


图1 仪器分析的“顶天立地”

然而,当代科学仪器的发展,除了上述各个学科的进步之外,也越来越依赖于国民经济的发展和在科学仪器研制方面的大量资金投入。单纯依靠国家资金投入的模式难以做到面面俱到。一个良性的发展模式是国家投入通常集中于大型的科学装置,社会资本作为有益的补充,融入到社会生产生活的各个层面。两者相辅相成,形成完整的仪器产业链条,又反哺科学仪器的研制升级改造。因此,仪器产业是一个国家的朝阳产业,是其国民经济的重要组成部分,是支撑一个主权的国家科技发展的关键一环。从这个角度看,仪器产业化无疑是“顶天立地”更生动的体现。然而,我国目前的仪器产业基础还是相对薄弱的,多集中于中低端科学仪器,而高端科学仪器,例如核磁共振谱仪、电感耦合等离子体质谱仪、EUV(极紫外光刻机, Extreme Ultraviolet Lithography)光刻机等,绝大多数都需要靠进口。而这些高端仪器,还常常被以各种借口限制引进。例如,2011年作者之一参与的科技部的重大仪器专项“新型等离子体质谱关键部件研制与创新应用研究”,就是以实现我国自主的等离子体质谱仪产业为目标而设立的,所参与的协作单位中,就有多个被限制购买国外的电感耦合等离子体质谱仪。当前,国家对于科学仪器产业越来越重视,投入也越来越大,因此未来发展前途一片光明,正是青年学生值得投身其中的朝阳领域。由科学技术部批准并由中国分析测试协会主办的两年一届的北京分析测试学术报告会及展览会(BCEIA),在2023年度的主题就是“学科+产业”的新型创新模式^[4],注重产学研相结合,这无疑准确地把握时代脉搏,势必引领学科的发展。

仪器分析课程,是化学学科的一门重要的课程,也是化学中与仪器科学最接近的一门课程。它所涉及的技术方法在现代化学研究中越来越重要,新合成的分子和材料都少不了分析仪器的表征和鉴别。通过这样的方式,仪器分析关联当代化学的各个分支,使化学成为一个整体。然而,仪器分析课程所涉及的方法众多,且很多方法都牵扯到一些物理理论和技术,加之很多分析仪器较为昂贵,学生很难独自进行操作及了解其内部结构,使得这门课程学习比较困难,学生普遍感觉仪器分析较为抽象,课堂教学难以达到预期的教学效果^[5],更加谈不上通过教学培养学生的分析仪器运用能力以及传播仪器产业化的崭新观念。针对这些新时代的要求和仪器分析课程面临的新挑战,本文作者结合多年的教学实践,谈谈如何在有限的教学时间内将仪器分析的课程内容结合成一个整体,充分体现当代仪器分析“顶天立地”的深刻特征,并在教学过程中融入仪器产业化的内涵,使上课的学生更容易举一反三、触类旁通,理解更多的仪器分析方法,同时也能够明白自己作为新时代建设者的使命担当,为祖国的科技创新添砖加瓦。另外,由于仪器分析贴近国情现实和国家实际需求,教学中很容易穿插科技创业的例子作为思政教育的题材^[6]。

1 以不同分析方法为板块的仪器分析内容形成整体

作为一门大学基本课程,其本身应该是浑然天成、自成一个整体的。仪器分析从初学者角度看是较为零散的,碎片化严重。然而,通过整理归纳,可以将其凝练成“一个核心”和“三个基本点”。

1.1 仪器分析的“一个核心”

仪器分析课程所涉及的方法虽然五花八门,但传统的本科课程大体可以分成四大部分:光谱分析法、色谱分析法、电化学和质谱分析法。这些方法内容很多,又包含一系列的衍生方法。如果分开来学,很容易让学生搞混淆,张冠李戴。但这些方法,包括它们的现代衍生方法,都有一个核心,那就是“谱”。或者说,这些谱学方法,正如它们的命名那样,无论光谱分析、色谱分析和质谱分析都是围绕如何获得待分析检测物质的某种“谱图”并如何解读该谱图所展开的。由于电化学本质与所谓的谱学联系较远,在本文中暂时不讨论电化学,将在后续的工作中再详细论述。

既然是谱学,那就要搞清楚何为“谱”。这最早可以追溯到牛顿分光。原本白色的太阳光,经过三棱镜折射投影到屏幕上按照白光的成分分解成七种颜色的光(其实还有其他的肉眼不可见的红外紫外成分),这就产生了最早的“谱”的概念。谱,本意是依照事物的类别、系统编制的表册,如家谱菜谱等,引申为构成事物的成分。例如,光谱即是一束(复合)光中所包含的各种单色光的成分,色谱即为各种不同的物质,而质谱则是各种不同质荷比的离子。这些不同的成分就是谱学方法所需

要获取的样品信息，可以用于定性地鉴别样品分子的种类、结构或形态，继而可以定量地测定待测样品的相对或绝对含量。这就概括出仪器分析的两大基本功能：定性和定量。从这点来看，各种具体的谱学方法是相通的。理解了这一点，许多课程内容自然就会了然于胸。在此基础上最适宜采用比较法教学，对比各种方法的异同，可以帮助学生温故知新，融会贯通，培养学生的知识迁移能力，达到事半功倍的效果^[7]。

1.2 仪器分析的“三个基本点”

仪器分析的核心是“谱”，那各种仪器如何获取它对应的“谱”呢？当然，各种仪器的工作原理和运行方式都不同，获得谱的方式也就不一样，甚至各种谱本身的含义也可能有差别。但是，总体上看，每种谱学仪器方法获取“谱”的过程无外乎包含三个步骤：首先，产生待测样品的分子所需要的形态，可称之为“源”。例如，原子吸收光谱就要产生气态的原子，质谱就需要产生待测分子的离子，等等。色谱的这一部分相对简单些，但也包括了通常的样品预处理及样品的注入。其次，分析样品的“谱”成分信息。显然，这才是仪器工作的核心。对光谱仪器而言，需要一个光谱波长分析器，通常有两类，一类是以光栅、棱镜为代表的色散型分析器，另一类是Michelson干涉仪为代表的干涉型分析器。它们的工作原理略有不同，但本质上都是获取光谱成分的信息。对质谱而言，目前流行的有四类质量分析器^[8]，分别是飞行时间质谱型、磁扇型、四极杆或离子阱型，以及Fourier变换回旋共振和轨道阱型(此两者都涉及到离子的回旋运动，都需要通过Fourier变换获取质荷比信息，因此可归为一类)。而色谱则是由其核心部件色谱柱来完成。无论哪种谱学方法，都需要上述分析“谱”的装置。第三则是检测，需要相应的检测器。检测光用的光学检测器，检测离子的通常用多通道采集板或电子检测器；色谱稍微特殊点，因为其主要要做的是分离，通常需要和其他的方法联用来鉴定是何物质，但这一部分可以总体地看成检测部分。值得一提的是，这里的检测分析还包括了定性和定量的内容。定性分析都是通过谱峰归属来完成，不同的谱学方法谱峰的归属标识都是一个丰富多彩的论题，需要借助的知识也是包罗万象；而定量分析则相对单一，都是充分利用线性关系，例如使用标准曲线，或者是在此基础上采用内、外标或标准加入法。这也体现了分析科学的对立统一。综上所述，这几大类谱学仪器的基本构成就是这三个部分，即“基本点”，其他的部件都属于辅助的配套部分。这是从仪器的基本构造方面统一地来看各种谱学仪器。当然，在课堂教学中，对此一点可以发散学生的思维，以增强学生的学习效果。例如，可以提问，如果要设计一种在神舟飞船上使用的简易质谱仪，应该怎样设计？可以预先给学生一些背景只是做铺垫，比如，在宇宙飞船等航天器上的科学仪器必须要考虑仪器本身的“密度”，通常不能超过水的密度，因为太重或体积太大，都会极大增加发射成本。另一方面，太空中和我们地球表面是不同的，那里空气非常稀薄，近乎真空，且离子浓度较高，尤其是在等离子层。在这些背景知识的铺垫下，结合前面所讲的质谱仪的三个基本点，可以设计一台不带离子源、真空装置而只有飞行管和检测器的简易质谱仪。而事实上，很多国外的飞行器就是这样的。这样的课堂设计，既加深了学生对谱学仪器基本构成的理解，又增加了学生的兴趣，激发学生的理想。

2 仪器分析和其他化学分支相结合

作为化学的一门基础课程，仪器分析与其他化学分支也是紧密联系的，在教学时也不应人为地割裂开，理应加强化学各门分支之间的联系、协同学习，希望能在有限的课堂学习时间内达到事半功倍的效果，使得学生更容易掌握应具备的基础知识。在此抛砖引玉，希望引起广大的化学工作者和化学教育工作者的重视。在大学化学课程中，还有两门课，结构化学和有机波谱分析，均与仪器分析紧密相关。其实在仪器分析课程里，对每种分析方法基本上都是遵循原理+仪器构造+应用的模式，这大致也与上述三门课程相当。这又是另一种三个基本点，非常适合于比较这些方法，尤其是比较各个方法的实际应用范围和领域。结构化学介绍的是物质的结构，尤其是分子的结构和分子内的各种相互作用，这正是产生各种光谱特征或离子解离碎片的依据；而光谱或质谱解析作为定性的

工具，也需要从谱峰结构上反推出分子的结构和内部运动方式。而有机波谱分析可视为仪器分析在有机分子定性分析中的应用。这几门课程相得益彰。

3 仪器分析和其他学科相结合，融入产业化的元素

正如前言所述，仪器分析是化学学科里沟通基础仪器科学和当代应用的一门课程，因此不但和许多其他学科的课程有紧密联系，同时也和很多前沿性的应用密切相关。仪器分析课程自然要突出仪器本身，而对仪器的理解自然涉及到仪器的构造以及仪器的产业，虽然这些内容很多超出了仪器分析的大纲，但根据笔者的经验，在教学中如果适当提及这些，既能够使學生更好地理解仪器方法的基本原理，也能够使學生理解发展仪器产业对国家建设的重要性，是很好的思政教育的内容。

在前面我们已经提到过仪器分析中各种仪器方法的核心是“谱”，而各种分析仪器就是为了获得相应的谱。那么能否用统一的观点来看待各种仪器是如何获得“谱”，以加深对仪器工作方式的理解呢？当然可以。关键在于把握一个关键的量：“时间”。用统一的观点来看，各种仪器都是通过“消耗时间”来获取相关的“谱”的信息。事实上，几乎每种仪器都有一个“扫描(scan)”过程，这就是“消耗时间”：把某个可调控的物理量设定成关于时间的某种特定的单调函数(一般是线性的)形式，通过改变时间参量自然地获取该物理量的瞬时值，而由该物理量直接换算成“谱”参量。下面分别具体阐述。首先，对于色谱型仪器，本身就是要获得物质“保留时间”的信息，也即色谱型仪器“消耗”待分离的分子通过色谱柱的时间。这个“时间”的含义是直接的。

再来看光谱仪器。在光谱仪器中，如果使用的是色散型分析器，例如光栅，是基于布拉格公式通过改变(扫描)光栅的角度获得光的波长参数，具体的光谱仪器是通过一个受控马达带动光栅的角度改变来实现波长扫描。一旦扫描开始，马达就按照预先的设定带动光栅逐点地改变到相应的角度，检测器同时记录下相应的光强度信号，最后处理器根据相应的时间找出对应的波长和光强度，逐点地画出 x - y 曲线，就得到了我们熟悉的光谱图。这样的讲述方式，学生就比较容易理解光栅的作用和布拉格公式，也能直观地了解一台光谱仪器的精密程度取决于哪些产业要素。另一方面，如果光谱仪器采用的是干涉型波长分析器，其本质也是一样的。以常见的Michelson干涉仪(图2A^[9])为例，它有一个固定的镜子和一个可移动的镜子，光通过分束镜在这两面镜子处反射形成干涉；当动镜移动时，两面镜子之间的光程差发生改变；记录干涉信号随动镜移动距离的变化关系(图2B)再作Fourier变换即能得到通常的光谱；这个采集光信号的过程只不过是空间来换时间，因为动镜的运动速度是固定的，因此动镜运动的距离就对应与运动所消耗的时间，因此Fourier变换型光谱仪所记录的也相当于是光(干涉)强度关于时间的函数，最终通过Fourier变换就获得了光强度关于频率的函数即获得了光谱。虽然此两者的仪器构造差别很大，但通过关键的“时间”这个参量将它们统一起来。历史上正是这个Michelson干涉仪，不但引出了狭义相对论，还是发现引力波装置——激光干涉引力波天文台(Laser Interferometer Gravitation Wave Observatory, LIGO)的核心，只不过在LIGO中，动镜移动的距离长达数公里(图3^[10])。要使得在这么长的距离始终保持动镜和固定镜子之间的平直，背后都离不开高端仪器制造产业的发展和技术支撑。

最后再来看质谱仪器。飞行时间类型的质谱仪最简单，粗略地说，就是让处于同一起跑线的各种离子赛跑，记录它们到达检测器的时间(也就是飞行时间)和相应的信号强度，而这个飞行时间直接相关于离子的质荷比，这就得到了离子质荷比和离子强度的信息，也就是得到了质谱。对于磁扇形质谱，工作方式也是一样的，只不过是根据离子偏转的距离来转化为相应的质荷比。而四极杆或离子阱型质谱仪，也是通过“扫描”交变电场的频率或电压而得到相应的离子强度，和色散型光谱仪相似，同样离不开“时间”。最后，Fourier变换回旋共振和轨道阱质谱仪，都是让离子做回旋运动，记录投影到某个镜像面的时间间隔而得到离子旋转的频率，后者直接相关于离子的质荷比，同样通过Fourier变换而得到通常的质谱。综上所述，四种类型的质谱仪工作原理虽然都不一样，但在实际的仪器工作中，都是通过某种“消耗时间”而得到质谱图。

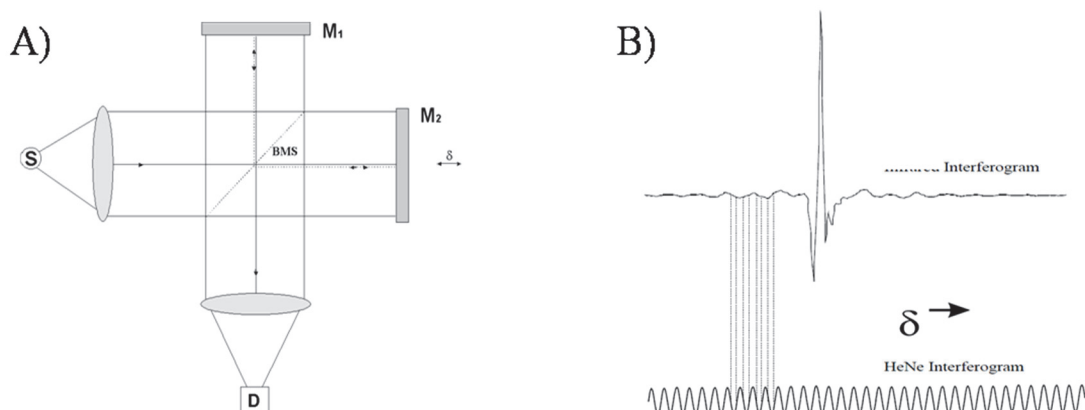


图2 A) Michelson干涉仪: S代表光源, M_1 代表固定的镜子, M_2 代表可移动的镜子, D代表检测器, BMS代表分束镜; δ 是动镜所移动的距离(这个距离越大, 所得到的光谱的分辨率越大); B) 干涉图



图3 LIGO照片^[10]

以上逐条分析了各类仪器获取相应谱的方式, 从某种意义上说, 这也是通过理解如何获取“时间”而实现统一地理解各类仪器的工作过程。这样的梳理不但有助于学生更深入地理解相应的“谱”, 还能使他们能更好地了解仪器的构造, 对仪器就不再是抽象陌生的, 对仪器的工作运行方式做到“心中有图像”, 从而对仪器的构造、制造产生一定的兴趣。还可以进一步地了解仪器产业的内容以及我们国家仪器产业的现状, 激励他们从事高端仪器的研发和应用, 为国家发展高端化、智能化、绿色化制造业学以致用、贡献一份力量, 彻底改变我国在高端仪器领域薄弱的局面。这里还有许许多多生动的例子, 例如海外留学归来的优秀学子周振带着“做中国人的质谱仪器”的梦想, 于2004年创立广州禾信分析仪器有限公司, 在国家863计划、国家重大科学仪器设备开发专项、国家火炬计划等重点项目支持下, 开展质谱仪器自主开发, 逐步推出在线单颗粒质谱检测系统、在线VOCs (Volatile organic compounds, 挥发物有机物)及恶臭气体质谱监测系统、在线环境污染源在线溯源等质谱仪器, 实现出口美国、德国等历史性突破, 成为“中国制造”的骄傲。这些优秀的科研人员都是响应并践行习总书记“把论文写在祖国大地上”的突出代表。另一方面, 让化学的本科学生了解仪器产业的现状, 也有助于开阔他们的视野、开拓他们的就业渠道。

4 结语

在仪器分析的教学中,通常要求让学生掌握各种仪器分析方法的原理、仪器结构、分析方法及应用等知识,同时培养解决实际问题的能力和工匠精神。在新时代的背景下还要求提高思政素质,在课程中融入家国情怀,使学生明确自己的使命担当。在有限的课时内要将这些内容进行有机融合,做到浑然一体,需要探索新的道路和教学方法。在本文中我们总结了我们的多年教学实践摸索出的经验方法,抓住仪器分析的核心,用统一的观点处理各种谱学方法,使仪器分析课程本身、仪器分析课程与其他的化学分支以及其他相关大学课程作为一个整体,让学生锻炼举一反三的能力,达到融会贯通的效果,同时又能使学生了解仪器产业的现状,在潜移默化中培养学生的民族自信、爱国情怀、责任担当。

致谢: 本文所涉及的一些关于仪器产业化的想法得益于陈焕文教授的启蒙、指点和教诲,在此致以诚挚的谢意!

参 考 文 献

- [1] 吉林大学,张寒琦,等. 仪器分析. 第3版. 北京: 高等教育出版社, 2009.
- [2] 徐文伟, 张弓, 白铂, 艾超, 吴瑾. 中国科学: 数学, **2021**, 51 (7), 1095.
- [3] 陈焕文, 朱志强. 分析化学, **2011**, 39 (10), 1463.
- [4] BCEIA 2023第二十届北京分析测试学术报告会暨展览会. [2023-11-23]. <http://www.bceia.org.cn/>
- [5] 郭明, 夏琪涵, 周建钟, 文先红, 吴荣晖, 李铭慧. 化学教育(中英文), **2019**, 40 (6), 30.
- [6] 杜振霞, 杨屹, 苏萍, 胡高飞, 吕超, 张丽娟. 化学教育(中英文), **2022**, 43 (4), 39.
- [7] 薛冰纯, 吴雅琴, 刘二保. 化学教育(中英文), **2015**, 36 (10), 22.
- [8] 陈焕文, 魏开华, 丁健桦, 丁秋平, 费强, 冯国栋, 郇延富, 马庆伟, 聂宗秀, 欧阳永中, 等. 分析化学手册第九分册. 质谱分析. 第3版. 北京: 化学工业出版社, 2016.
- [9] Hollas, J. M. *Modern Spectroscopy*, 4th ed.; John Wiley & Sons Ltd.: West Sussex, UK, 2004.
- [10] 引力波探测器LIGO长什么样,有图片嘛? [2023-10-21]. <https://www.zhihu.com/question/406169245/answer/1331310899>