**国家市场监管技术创新中心（质谱）**

**2025年度开放课题申请指南**

**1、变频式四极杆射频电源关键技术研究**

**拟解决的关键问题：**四极杆质谱（Quadrupole-MS）是一种快速、灵敏、准确的质谱分析技术，可精确定量，四极杆射频电源是四极杆质谱中的关键核心技术。四极杆质谱中四极杆主要有两种模式：单质量数分辨功能和离子传输功能，单质量数分辨时往往较高的射频频率以实现较高的质量分辨，而离子传输时则需要较低的射频频率以实现较宽的质量传输范围，已有的商品化Q-Trap、Q-TOF以及三重四极质谱仪中四极杆电源频率往往较为固定，无法很好的兼顾两种模式最佳工作状态。本课题拟基于DDS技术和可变高压电容技术进行全新变频式射频电源的研制和开发，针对四极杆两种功能模式无法同时兼顾的问题，利用DDS技术实现频率的数字化调节，利用可变高压电容实现射频电源与四极杆的阻抗匹配，进而实现四极杆高质量分辨筛选和高效离子传输，进一步提高质谱仪器的性能参数。

**研究内容：**1）研制DDS频率信号发生模块，产生所需要的射频电源频率，并更具需要进行频率的变换。2）研制射频初级和次级放大模块，实现DDS频率信号到100w级功率放大。3）研制直流DC和交直流耦合模块，实现RF和DC的耦合输出。4）研制基于可变高压电容的射频电源匹配模块，实现射频电源和四极杆的实时匹配。研制基于上述关键技术的射频电源样机一台。

**考核指标：**

1. 发表学术论文一篇（论文首页或提交界面）。

**2、采用反应质谱研究过渡金属离子催化乙烯和乙炔三聚环化反应**

**拟解决的关键问题：**采用含量丰富的有机小分子乙烯、乙炔环化生成苯是有机合成、医药、农药、化工等领域的一类重要反应，其核心研究问题是选择和设计具有优良催化效果的催化剂体系。过渡金属容易和有机小分子发生氧化反应，在环化反应中表现出较高的催化活性。但目前对其中间产物结构与“两态反应”机理（TSR）的了解仍然非常有限。本项目采用反应质谱的方法，结合理论计算的方法，使用团簇模型，系统研究过渡金属离子催化乙烯、乙炔三聚环化反应的动力学和热力学信息及微观机理，探究过渡金属相对论效应、d轨道上电子排布等因素对反应中间产物结构和“两态反应”机理的影响，得到一般性的规律，为帮助指导设计过渡金属环化反应催化剂提供理论依据。

**研究内容：**

本项目采用反应质谱的研究方法，结合高精度理论计算方法，使用团簇模型，研究过渡金属离子（根据前期研究预测，初步选择Ti族、V族、Cr族、贵金属、Fe、Co、Ni等过渡金属，后面会根据具体研究情况调整）催化乙烯、乙炔三聚环化生成苯的中间产物结构及反应机理。具体研究内容包括：（1）中间产物几何结构和电子结构的计算。（2）反应机理的实验和理论计算机理的对照。（3）总结：根据体系同一周期金属d轨道上的电子排布情况以及同一族金属的相对论效应，分析中间产物MC2H2+、MC4H4+和MC6H6+结构，金属的活化性质以及反应的微观机理，找到对反应进程产生关键性影响的因素。

**考核指标：**

1. 发表学术论文一篇（论文首页或提交界面）。

**3、采用反应质谱研究过渡金属离子催化乙烯和乙炔三聚环化反应**

**拟解决的关键问题：**采用含量丰富的有机小分子乙烯、乙炔环化生成苯是有机合成、医药、农药、化工等领域的一类重要反应，其核心研究问题是选择和设计具有优良催化效果的催化剂体系。过渡金属容易和有机小分子发生氧化反应，在环化反应中表现出较高的催化活性。但目前对其中间产物结构与“两态反应”机理（TSR）的了解仍然非常有限。本项目采用反应质谱的方法，结合理论计算的方法，使用团簇模型，系统研究过渡金属离子催化乙烯、乙炔三聚环化反应的动力学和热力学信息及微观机理，探究过渡金属相对论效应、d轨道上电子排布等因素对反应中间产物结构和“两态反应”机理的影响，得到一般性的规律，为帮助指导设计过渡金属环化反应催化剂提供理论依据。

**研究内容：**

本项目采用反应质谱的研究方法，结合高精度理论计算方法，使用团簇模型，研究过渡金属离子（根据前期研究预测，初步选择Ti族、V族、Cr族、贵金属、Fe、Co、Ni等过渡金属，后面会根据具体研究情况调整）催化乙烯、乙炔三聚环化生成苯的中间产物结构及反应机理。具体研究内容包括：（1）中间产物几何结构和电子结构的计算。（2）反应机理的实验和理论计算机理的对照。（3）总结：根据体系同一周期金属d轨道上的电子排布情况以及同一族金属的相对论效应，分析中间产物MC2H2+、MC4H4+和MC6H6+结构，金属的活化性质以及反应的微观机理，找到对反应进程产生关键性影响的因素。

**考核指标：**

1. 发表学术论文一篇（论文首页或提交界面）。

**4、基于自主研制串联质谱技术的新生儿疾病筛查研究**

**拟解决的关键问题：**新生儿遗传代谢缺陷是一个世界性的难题，可影响人口素质的提高，给社会和家庭带来沉重的经济负担和精神压力。质谱技术作为一种强大的分析方法，具有高选择性、高准确性和高灵敏度的特点，已成为新筛的首选。本项目将基于国家市场监管技术创新中心（质谱）自主研制的串联质谱装置，开发新生儿筛查方法，解决因基质干扰影响导致的假阳性或假阴性难题，并将其应用于新筛监测中，为临床提供一种高效的新方法。

**研究内容：（1）四极杆-线形离子阱串联质谱方法建立：**基于自主研制的串联质谱装置，优化建立新生儿筛查的质谱方法，包括离子光学、离子传输、离子捕获富集等条件，实现对目标化合物的准确测量。**（2）新生儿筛查方法建立：**对萃取溶剂、萃取时间、温度等进行选择和优化，开展离子操控技术研究，对目标化合物的碎裂规律深入研究，建立新生儿筛查的高效质谱方法。**（3）临床样本检测：**对上述所建立方法进行确证和验证，并检测不少于100例实际临床样本。

**考核指标：**

1. 研发基于自主研制串联质谱的新生儿筛查方法1套；
2. 临床样本检测数量不少于100例；
3. 发表学术论文1篇（论文首页或论文收录证明）。