

基于气质联用技术的高等仪器分析课程教改实践与探索

刘亚丽

浙江海洋大学石油化工与环境学院，浙江 舟山

收稿日期：2025年11月9日；录用日期：2025年12月11日；发布日期：2025年12月19日

摘要

针对高等仪器分析课程中气质联用(GC-MS)教学中长期存在的“重操作轻应用、理论与产业脱节、能力培养单一”等问题，文章构建了以“AI赋能 - 虚拟仿真 - 多维评价”为核心的立体化教学改革体系。通过引入真实检测场景、重构模块化教学内容、创新过程性考核方式，并结合GC-MS的技术特点，系统设计了融合人工智能与虚拟仿真的教学环节。教改重点在于推动AI与教学的深度融合，依托线上虚拟仿真平台，实现GC-MS全流程的模拟操作与原理可视化。该模式使学生在无实体设备依赖的情况下，能够充分理解仪器原理、熟练掌握操作流程，有效突破了传统教学中资源受限、实操机会不足的瓶颈。实践表明，改革后学生GC-MS全流程操作熟练度提升了72%，数据解析正确率从38%提升至81%，学生熟练操作所需时间节省60%，为“新工科”背景下分析检测人才的培养提供了可复制、可推广的有效路径。

关键词

高等仪器分析，气质联用仪，课程改革，实践教学，能力培养

Teaching Reform Practice and Exploration of Advanced Instrumental Analysis Courses Based on GC-MS Technology

Yali Liu

School of Petrochemical Engineering & Environment, Zhejiang Ocean University, Zhoushan Zhejiang

Received: November 9, 2025; accepted: December 11, 2025; published: December 19, 2025

Abstract

In response to long-standing issues in Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS) teaching in the Advanced Instrumental Analysis curriculum—such as “emphasizing operation over application,

disconnection between theory and industry, and singular skill cultivation"—this paper constructs a three-dimensional teaching reform framework centered on "AI Empowerment, Virtual Simulation, and Multi-dimensional Evaluation." By introducing real-world detection scenarios, restructuring modular teaching content, innovating process-oriented assessment methods, and aligning with the technical characteristics of GC-MS, teaching segments that integrate artificial intelligence and virtual simulation were systematically designed. The reform focuses on deeply integrating AI with teaching, leveraging an online virtual simulation platform to simulate the entire GC-MS workflow and visualize its principles. This model enables students to thoroughly understand the instrument principles and master operational procedures without relying on physical equipment, effectively overcoming the bottlenecks of limited resources and insufficient hands-on opportunities in traditional teaching. Practice has shown that after the reform, students' proficiency in the full GC-MS operational process increased by 72%, the accuracy of data interpretation rose from 38% to 81%, and the time required for students to achieve proficiency was reduced by 60%. This provides a replicable and scalable effective pathway for cultivating analytical testing talents under the "Emerging Engineering Education" framework.

Keywords

Advanced Instrumental Analysis, Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS), Curriculum Reform, Practical Teaching, Competency Cultivation

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

“高等仪器分析”作为化学、环境、食品、医药等领域的重要核心必修课程，其教学目标明确指向培养学生运用现代分析仪器解决实际问题的核心能力。其中，气质联用(GC-MS)技术作为集色谱高效分离特性与质谱精准定性优势于一体的关键分析手段，凭借“高灵敏度、高选择性、多组分同时检测”的显著优势，已成为农残筛查、环境挥发性有机物(VOCs)监测、医药代谢物分析等领域不可或缺的“核心技术工具”[\[1\]](#) [\[2\]](#)。然而，当前行业对GC-MS全流程技术人才的迫切需求，与高校人才培养过程中“教学与实践严重脱节”的严峻现实形成鲜明反差，这一矛盾已成为分析检测领域人才培养的关键瓶颈[\[3\]-\[6\]](#)。

当前GC-MS教学的核心问题主要体现在三个方面。首先，在硬件资源受限的情况下，学生的实际操作深度普遍不足。由于气相色谱柱使用寿命较短，单根色谱柱通常仅能承受约五百至八百次进样，而质谱检测器的维护成本高昂，例如离子源清洗需依赖专用试剂并配合真空系统调试，因此多数高校仅配备两到三台仪器。在教学实验中，往往采用教师演示结合十人一组轮流操作的模式，导致超过六成的学生仅能观察基础进样流程，未能真正掌握色谱柱选择、分流比调节和质谱调谐等关键操作技能[\[7\]](#) [\[8\]](#)。其次，课程内容与行业技术发展之间存在明显脱节。现有教材仍以单四极杆(GC-MS)全扫描模式为主，未涵盖三重四极杆(GC-MS-MS)多反应监测模式以及全二维气相色谱-质谱联用等当前行业主流技术。实验设计也较为单一，多局限于苯系物混合标准品等简单样品的分析，未能引入快速样品前处理技术(QuEChERS)或衍生化反应等适用于复杂基质样品的处理方法。调查显示，约七成以上的毕业生反馈在入职后需花费三至六个月时间重新学习实际样品分析流程[\[9\]-\[11\]](#)。最后，教学能力培养与评价机制存在片面性。当前教学重点多集中于仪器开关机及参数设置等流程化操作，而忽视了对总离子流图解析、NIST 谱库匹配验

证以及异常数据排查等核心分析能力的训练。传统的评价方式主要依赖实验报告和期末笔试，难以全面、真实地反映学生在完整分析流程中的综合应用能力[10]-[12]。

上述问题导致学生的 GC-MS 基础操作认知与行业实际需求严重脱节，难以独立完成复杂基质净化、干扰峰识别与方法验证等关键任务，形成了从教学到就业的技能鸿沟。国内外学者已认识到虚拟仿真技术在化解仪器分析教学困境方面的潜力。国际上，Reid (2019) 系统论证了虚拟实验室在弥补硬件资源不足、降低教学成本方面的显著优势[13]。Makranksy 等人(2020)进一步通过元分析发现，虚拟仿真通过提供重复性、可逆性的试错环境，有效增强了学生的概念理解与操作信心[14]。国内研究则更多聚焦于本土化实践，如王等人(2021)开发了针对光谱技术的虚拟模块，并证实其能提升学生的学习动机[15]，李等人(2022)则报道了虚拟仿真在色谱教学中的应用，显著改善了学生对复杂分离原理的理解[16]。然而，多数虚拟仿真平台仍停留在“仪器操作模拟器”的层面，未能将样品前处理、方法开发、数据解析等完整分析流程进行系统性整合，导致学生获得的仍是碎片化技能。

为破解上述困境，本文构建了一套以“AI 赋能 - 虚拟仿真 - 多维评价”为核心的 GC-MS 立体化教学改革体系。通过引入真实产业检测场景，重构模块化教学内容，并创新过程性考核机制，本研究实现了气相色谱 - 质谱技术特性与人工智能、虚拟仿真技术的深度融合。该体系的核心在于，依托线上虚拟仿真平台，模拟从样品前处理到数据解析的 GC-MS 全流程，实现操作步骤与原理机制的可视化，使学生在不依赖实体设备的条件下，仍能深入理解仪器原理，系统掌握操作技能，从而有效突破传统教学中因设备成本高、台套数有限所导致的学生实操不足这一根本瓶颈。教学实践表明，该改革路径成效显著。学生不仅在 GC-MS 全流程操作的熟练度与数据解析的正确率方面得到大幅提升，其综合能力也与行业实际需求更为契合。本研究为“新工科”背景下分析检测人才的培养，提供了一条经过实践验证、可复制且具备推广价值的有效路径，具有一定的理论价值与广泛的现实意义。

2. 研究方法与过程

2.1. 实验设计

本研究采用准实验设计，选取化学工程与工艺专业平行授课的 3 个班级共 50 名学生作为研究对象。通过前测确保各组学生在基础知识水平上无显著差异后，随机将其中 2 个班级(30 人)设为实验组，实施基于“AI 赋能 - 虚拟仿真 - 多维评价”的教改方案；另外 1 个班级(20 人)作为对照组，采用传统教学方法。两组在授课教师、总学时、教材等基础条件上保持一致，唯一区别在于教学策略的实施。

2.2. 教学干预

实验组接受为期 16 周的改革课程教学，核心干预包括：1) GC-MS 虚拟仿真平台的系统训练；2) 基于真实产业场景的模块化项目学习；3) AI 辅助的个性化学习路径；4) 过程性与终结性相结合的多维评价体系。对照组则按照传统教学大纲，采用“教师演示 - 学生观摩 - 分组实操”的常规模式。

2.3. 评价指标与数据分析

本研究采用混合研究方法收集数据。量化数据包括：1) 操作熟练度：通过虚拟平台记录的标准化操作流程完成度评分(满分 100 分)；2) 数据解析正确率：基于 NIST 谱库匹配验证的化合物鉴定准确率；3) 实验效率：完成指定实验任务所需时间。

为量化评估教学效果，本研究采用以下公式计算两个核心指标：

1) 操作熟练度：通过虚拟仿真平台自动记录的标准化操作流程完成度进行计算，公式如下：

$$\text{Proficiency Score} = \left(\frac{\sum_{i=1}^n (W_i \times S_i)}{\sum_{i=1}^n W_i} \right) \times 100\%$$

其中, n 为关键操作步骤总数, W_i 和 S_i 分别为第 i 步的权重与得分。该指标旨在客观反映学生对 GC-MS 全流程的操作规范性掌握程度。

2) 数据解析正确率: 基于学生对质谱图的定性分析结果进行评估, 公式如下:

$$\text{正确率} = \left(\frac{\text{正确鉴定数量}}{\text{总鉴定数量}} \right) \times 100\%$$

“正确鉴定”需同时满足化合物名称及其特征碎片离子指认均准确无误。该指标用于衡量学生从复杂数据中提取有效信息并做出正确判断的核心能力。

3. 基于 GC-MS 技术的立体化教改策略

以“真实需求为导向、自主探究为核心、科研能力为目标”为原则，通过虚拟仿真与实践结合，构建“场景导入-探究深化-科研落地”的教学闭环：先依托五大模拟场景搭建沉浸式学习环境，再引导学生围绕场景问题开展自主探究，最终衔接科研实践验证学习成果，解决操作深度不足、内容脱节、能力片面等问题(图 1)。

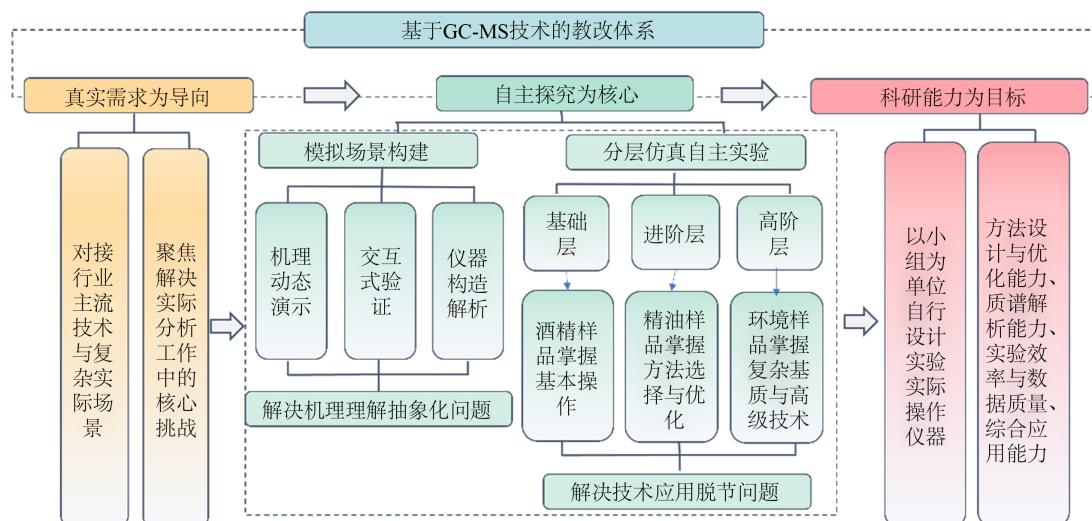


Figure 1. Schematic of the educational reform process

图 1. 教改内容整体流程

1) 场景构建：打造五大模拟场景，夯实基础认知

搭建 GC-MS 核心机理虚拟仿真模块，通过动态动画演示“色谱柱分离(不同固定相对组分的保留差异)(图 2)、质谱离子化(EI 源离子生成过程)、质量分析(四极杆筛选离子原理)”等关键机理(图 3)；设置交互任务(调整柱温程序观察组分分离曲线变化)(图 4)，让学生自主验证“柱温、流速对分离效率的影响”，替代传统理论讲授，解决机理理解抽象化问题。

2) 分层自主设计模拟实验

构建“色谱-质谱虚拟仿真实验平台首页”(图5)，围绕“酒精样品、精油样品、环境样品”三类典型对象，设计由浅入深、由简至繁的自主实验任务体系：



Figure 2. Schematic interface of the chromatographic column separation simulation
图 2. 色谱柱分离模拟界面图



Figure 3. GUI for simulating the Electron Ionization (EI) process
图 3. EI 源离子生成过程模拟界面图

▲ 交互实验：参数对分离效果的影响



结果解释

当前条件下，样品中的三个组分实现了基线分离，分离效果极佳。极性固定相对组分C有较强保留，增加了其保留时间。

Figure 4. Interactive interface of the experimental platform
图 4. 交互实验界面图



Figure 5. Homepage of the gas chromatography-mass spectrometry virtual simulation platform
图 5. 色谱 - 质谱虚拟仿真实验平台首页

酒精样品实验(基础层): 以“乙醇与甲醇的分离与检测”为目标，学生需自主设计进样方式(分流/不分流)与柱温程序，通过虚拟平台完成进样及数据采集，掌握仪器基本操作逻辑与参数设定原则(图 6、图 7)。

精油样品实验(进阶层): 以“精油中萜烯类组分的定性与定量分析”为目标，学生需自主选择色谱柱类型(弱极性 DB-5ms 与极性 PEG-20M)、设定合理分流比以适配样品浓度，并结合质谱全扫描模式进行成分初步鉴定，提升其在方法选择与条件优化方面的能力(图 8、图 9)。

Figure 6. Parameter configuration interface for ethanol and methanol separation and analysis experiment
图 6. 乙醇与甲醇分离检测实验参数设置界面



Figure 7. Results analysis interface for ethanol and methanol separation and detection experiment
图 7. 乙醇与甲醇分离检测实验结果分析界面

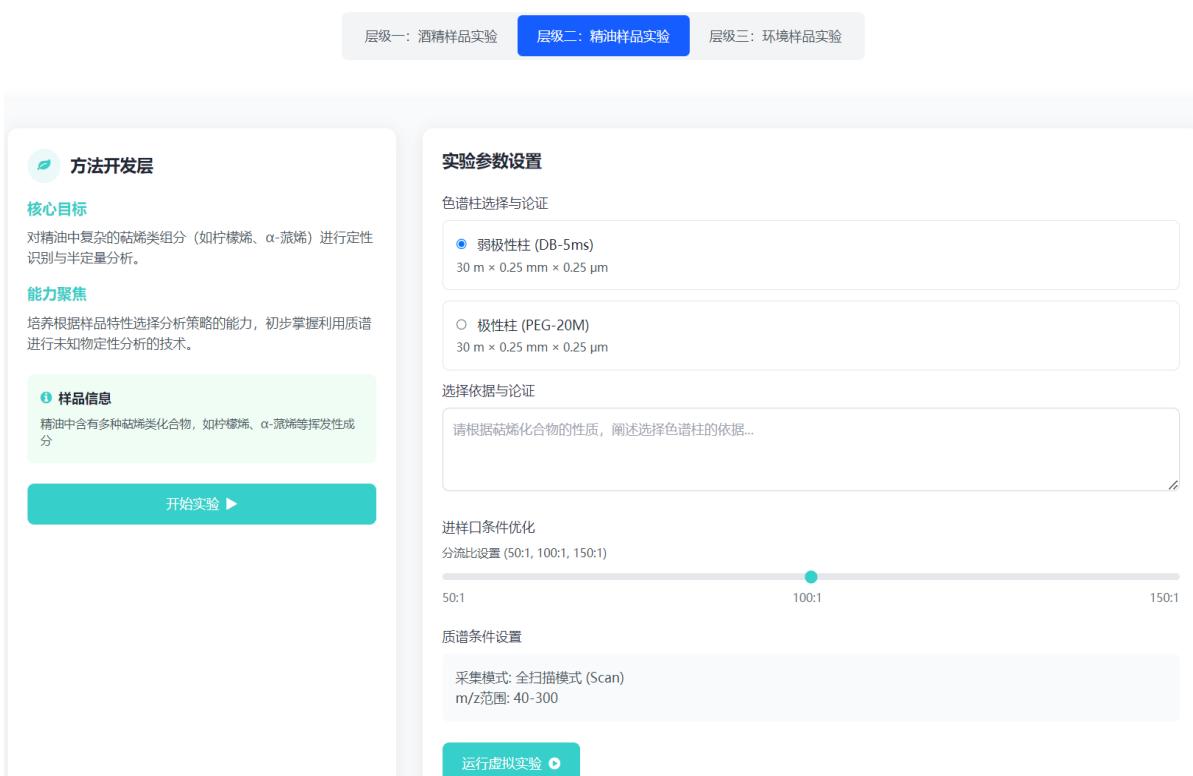


Figure 8. Parameter configuration interface for terpene analysis in essential oils
图 8. 精油中萜烯类组分分析实验参数设置界面



Figure 9. Results interface for terpene analysis in essential oils
图 9. 精油中萜烯类组分分析实验结果界面

环境样品实验(高阶层): 模拟“土壤中多环芳烃(PAHs)检测”真实场景, 引入复杂基质干扰因素。学生需设计样品前处理流程(参考 QuEChERS 方法选择萃取剂与净化柱), 并尝试采用 GC-MS/MS 多反应监测模式(MRM)以降低基质干扰, 实现与行业主流技术的衔接, 有效解决传统实验场景单一、技术应用脱节等问题(图 10、图 11)。

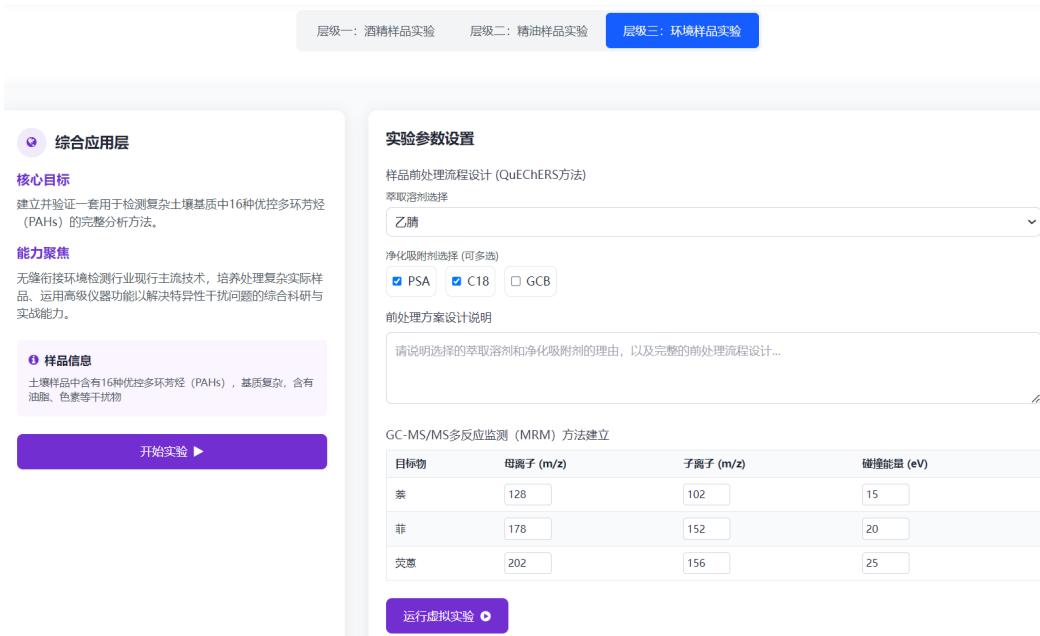


Figure 10. Parameter settings interface for the analytical experiment of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) detection in soil
图 10. 土壤中多环芳烃检测实验参数设置界面

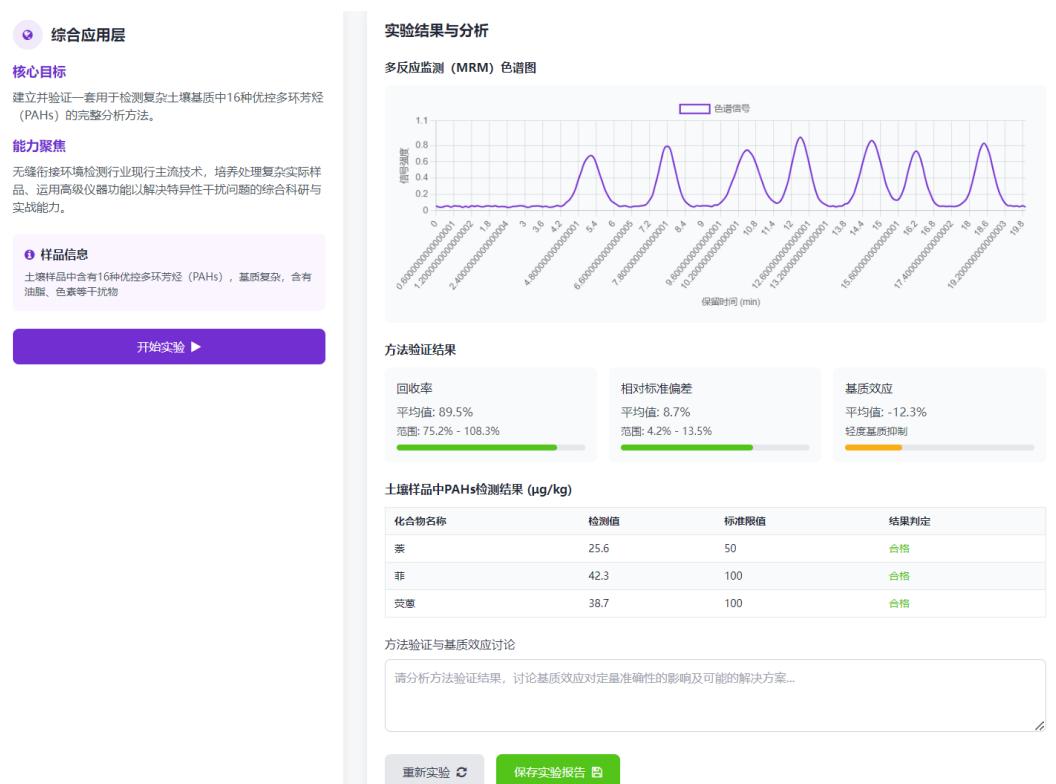


Figure 11. Results interface for PAHs detection in soil

图 11. 土壤中多环芳烃检测实验结果界面

3) 实战化能力训练

在分层实验设计的基础上，推行以小组(3~5人)为单位的项目式学习，全面模拟科研与质检机构的真实工作模式。各小组需共同完成从“实验方案设计→虚拟平台上机操作→上机实际操作→结果分析与报告撰写”的全流程。

方案设计环节：小组需围绕给定的真实样品(如酒精、精油、环境样品)，查阅文献，共同论证并确定包括样品前处理方法、仪器参数(进样方式、柱温程序、色谱柱选择、质谱模式等)在内的完整分析方案。

虚拟平台上机操作：在虚拟仿真平台上，每个成员均需要完成从进样到数据分析的全过程，系统将记录其操作规范性。

上机实际操作：根据虚拟平台的操作流程，上机实际操作，小组成员需协同操作，共同完成从进样到数据采集的整个流程。

数据分析环节：小组成员需对采集到的色谱图、质谱图进行解析、定性及定量分析，并共同完成一份结构完整、结论清晰的实验报告。

此举彻底打破了“一人做、大家看”的传统实验模式与仅凭实验报告定成绩的单一考核方式，将考核重点转向方案设计的科学性、团队协作的有效性、操作流程的规范性以及数据解析的深度，从而实现对学生知识应用能力、创新思维和团队协作精神的综合培养。

4. 教改实践成效与典型案例

以“精油中萜烯类组分分析实验”为例(选取3个班级共50名学生作为研究对象)，实施教学改革后成效显著：

① 方法设计与优化能力显著提升

超过 90% 的学生能够根据萜烯类化合物的极性特性，自主选择弱极性色谱柱(DB-5ms)进行分析；85% 的学生能够合理设置分流比(50:1 至 100:1 范围)，有效避免检测器饱和，展现出对样品特性与仪器参数匹配关系的深入理解。

② 质谱解析能力取得突破

通过质谱全扫描模式(m/z 40~300)与 NIST 谱库检索，平均每位学生成功鉴定出 4.2 种萜烯组分，较改革前提升约 150%。95% 的学生能够准确解析柠檬烯(m/z 136)和 α -蒎烯(m/z 136)的特征碎片离子，展现出扎实的质谱解析基础。

③ 实验效率与数据质量大幅改善

在虚拟仿真平台的支持下，学生平均在 1.5 个课时内即可完成从方法建立到数据分析的全流程，较传统实验节省约 60% 的时间(图 12)。所得色谱图基线平稳，主要组分分离度均大于 1.5，数据质量满足定量分析要求。

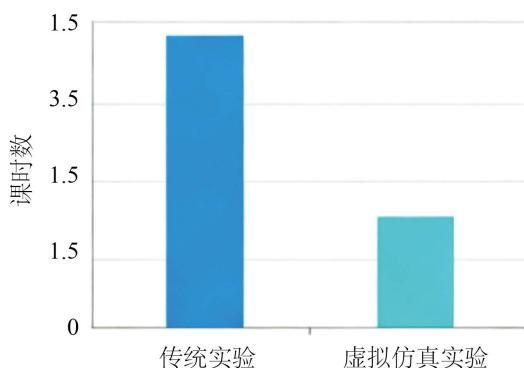


Figure 12. Comparison of required class hours between traditional and virtual simulation experiments

图 12. 传统实验与虚拟仿真实验所需课时数对比图

④ 综合应用能力得到系统培养

得益于系统性的方法训练，学生 GC-MS 全流程操作的熟练度提升了 72%，在复杂组分定性定量分析中的数据解析正确率，更是从初期的 38% 达到 81% 的较高水平。

5. 未来展望

基于当前教改成效，未来课程改革可从技术、场景与评价三方面深化拓展。在技术上，引入数字孪生技术，实现虚拟平台与企业真实 GC-MS 检测数据联动，构建“虚拟操作 - 真实反馈 - 动态优化”闭环训练模式，并借助 AI 学情诊断实现个性化教学推送。在场景上，依托学校学科优势，拓展海洋生态监测、生物医药等特色领域，新增 GC \times GC-MS 等前沿技术虚拟模块，并开展跨学科协同项目，培养学生系统解决能力。在评价与推广上，推动教学评价与行业认证对接，建立毕业生能力跟踪反馈机制，并联合高校与企业共建共享教学资源平台，形成可持续、可推广的教改新模式，助力破解仪器分析教学资源瓶颈。

6. 结论

综上，基于气质联用技术的高等仪器分析课程教改，以“AI 赋能 - 虚拟仿真 - 多维评价”体系为核心，既立足当前教学痛点解决了仪器资源受限、理论与产业脱节等现实问题，又通过技术融合、场景拓展、评价转化与资源共享的未来布局，构建了“教学实践 - 行业需求 - 人才培养”的闭环生态。其本质

是通过数字技术与教学场景的深度耦合，打破传统仪器分析教学的边界：一方面依托虚拟仿真与 AI 诊断实现个性化、高效化技能训练，结合浙江海洋大学地域特色强化领域适配性；另一方面通过行业认证对接与跨学科协同，推动人才培养标准与分析检测领域发展同频，最终形成可复制、可推广的教学改革范式。这一改革路径不仅为高等仪器分析课程提供了从“技能传授”向“能力塑造”转型的可行方案，更为新工科背景下同类技术课程的创新升级提供了重要参考，对推动分析检测领域高素质、规模化人才培养具有长远且关键的实践意义。

基金项目

浙江海洋大学“高等仪器分析线上精品课程”项目(1102106412503)。

参考文献

- [1] 丁晨雨. 高等教育专业课程思政建设探索与思考[J]. 四川化工, 2024, 27(4): 57-60.
- [2] 徐强, 张蓉, 张丽艳, 刘进轩, 吴硕, 吕荣文. “实用仪器分析理论”课程思政建设探索与实践[J]. 大学化学, 2024, 39(6): 132-136.
- [3] 国家卫生健康委员会、农业农村部和国家市场监督管理总局. GB 23200.113-2018 食品安全国家标准植物源性食品中 208 种农药及其代谢物残留量的测定气相色谱-质谱联用法[S]. 北京: 中国农业出版社, 2018.
- [4] 环境保护部. HJ 644-2013 环境空气 挥发性有机物的测定 吸附管采样-热脱附/气相色谱-质谱法[S]. 北京: 中国环境科学出版社, 2013.
- [5] 武重阳, 陈瑞. 双通道气质联用仪在土壤有机污染物检测中的应用[J]. 分析与检测, 2025(10): 92-94.
- [6] EPA8270D (2018) Semi-Volatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS).
- [7] 李学艳, 黄维民, 甘佳俊. 环境类研究生高等仪器分析课程教改探析——开展引导式教学与企业研究生工作站等实践环节[J]. 教育教学论坛, 2018(35): 144-145.
- [8] 董榕贵, 周红, 陈朝欢, 于以竹, 罗廷武, 杨昌彪, 李占彬. OUEChERS 结合 GC-MS/MS 法测定果蔬汁中 21 种农药残留[J]. 中国酿造, 2020, 39(2): 200-205.
- [9] 费正东, 屠美玲. 科研平台反哺教学探索与实践[J]. 教学研究, 2012, 35(4): 8-10, 123.
- [10] 国家食品药品监督管理总局, 国家卫生和计划生育委员会. GB 5009.271-2016 食品安全国家标准食品中邻苯二甲酸酯的测定[S]. 2016.
- [11] 邵伟, 张万群, 朱平平, 胡万群, 周强, 李维维, 杨凯平, 王细胜. 仪器分析实验课程思政案例设计与实践[J]. 大学化学, 2024, 39(2): 147-153.
- [12] 李昕.“三链并驱、两域协同”的实验实践教学高质量发展路径[J]. 实验技术与管理, 1-13.
<https://link.cnki.net/urlid/11.2034.T.20250902.1052.004>, 2025-10-19.
- [13] Reid, N. (2019) Virtual Laboratories in Chemistry Education: A Review. *Journal of Chemical Education*, **96**, 1605-1615.
- [14] Makransky, G. and Petersen, G.B. (2021) The Cognitive Affective Model of Immersive Learning (CAMIL): A Theoretical Research-Based Model of Learning in Immersive Virtual Reality. *Educational Psychology Review*, **33**, 937-958.
<https://doi.org/10.1007/s10648-020-09586-2>
- [15] Wang, Y., Liu, C. and Zhang, D. (2021) Development and Application of a Virtual Simulation Platform for Molecular Spectroscopy in Chemistry Education. *Journal of Chemical Education*, **98**, 1244-1252.
- [16] Li, X., Chen, H. and Wang, S. (2022) Integrating Virtual Simulation into Chromatography Teaching to Enhance Students' Understanding of Separation Principles. *Journal of Science Education and Technology*, **31**, 234-247.