



T/CAIA

团体标准

T/CAIA/YQ 008—2024/T/CSTM 01082—2024(IDT)

质谱仪器分类与代码

Classification and code of mass spectrometers

2024-01-05 发布

2024-04-05 实施

中国分析测试协会
中关村材料试验技术联盟

发布

前 言

本文件参照 GB/T 1.1—2020 《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》，GB/T 20001.3 《标准编写规则 第 3 部分：分类标准》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

T/CSTM 01082—2024 与 T/CAIA/YQ 008—2023 一致程度为等同 (IDT)。

本文件由中国材料与试验标准化委员会科学试验标准化领域委员会 (CSTM/FC98) 和中国分析测试协会共同提出。

本文件由中国材料与试验标准化委员会科学试验标准化领域委员会 (CSTM/FC98) 和中国分析测试协会共同归口。

质谱仪器分类与代码

1 范围

本文件规定了质谱仪器术语和定义、分类与代码。

本文件适用于质谱仪器的分类、编码、命名、统计、管理等。本文件不适用于氦质谱检漏仪、离子迁移谱。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 4946 气相色谱法术语

GB/T 6041 质谱分析方法通则

GB/T 13966 分析仪器术语

GB/T 14666 分析化学术语

GB/T 33864 质谱仪通用规范

JJ/G 964 毛细管电泳仪检定规程

SN/T 5436 乳及乳制品发酵剂、发酵产品中乳酸菌计数 流式细胞仪法

YB/T 4304 熔融提取-质谱分析方法通则

3 术语和定义

GB/T 4946、GB/T 6041、GB/T 13966、GB/T 14666、GB/T 33864、JJG 964、SN/T5436 和 YB/T 4304 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1

质谱仪器 mass spectrometer

使待测物质电离形成离子，利用电磁学原理使离子按照质荷比不同而分离并测定离子信号的仪器，通常由进样系统、离子源、质量分析器、离子检测器、真空系统、电子测控系统和数据处理系统等主要部分组成。

[来源：GB/T 33864-2017, 3.1, 有修改]

3.2

直接离子化分析 direct ionization analysis

指质谱仪在使用时不联用色谱、毛细管电泳等分离模块，样品直接进样后采用直接离子化技术实现离子化，然后进行质谱分析，包括真空环境直接离子化和敞开式大气压环境直接离子化两种情况。

3.3

液相色谱 liquid chromatography

用液体作为流动相的色谱法。

[来源：GB/T 13966-2013, 8.17]

3.4

高效液相色谱 high performance liquid chromatography

具有高分离效能的柱液相色谱法。

[来源：GB/T 13966-2013, 8.18]

3.5

超高效液相色谱 ultra performance liquid chromatography

与传统高效液相色谱法（HPLC）相比，在更高操作压力下进行分离的液相色谱法。

[来源：GB/T 13966-2013, 8.44]

3.6

多维液相色谱 multi-dimensional liquid chromatography

将不同的分离机制的液相色谱柱串联使用，实现对复杂样品高效分离的分离技术。

3.7

气相色谱 gas chromatography

用气体作为流动相的色谱法。

[来源：GB/T 13966-2013, 8.3]

3.8

全二维气相色谱 comprehensive two-dimensional gas chromatography, GCxGC

将二个气相色谱柱串联使用的分析方法，将第一气相色谱柱全部流出物进入第二气相色谱柱进行第二次分离的多维气相色谱法。

[来源：GB/T 4946-2008, 3.1.4.2, 有修改]

3.9

离子色谱 ion chromatography

用电导检测器对阳离子和阴离子混合物作常量和痕量分析的色谱法。分析时在分离柱后串联一根抑制柱，来抑制流动相中的电解质的背景电导率。

[来源：GB/T 13966-2013, 8.36]

3.10

超临界流体色谱 supercritical fluid chromatography

用处于临界温度及临界压力以上的流体作为流动相的色谱法。

[来源：GB/T 14666-2003, 5.2.1.5]

3.11

薄层色谱 thin layer chromatography

将固定相（如硅胶）薄薄地均匀涂敷在底板（或棒）上，试样点在薄层一端，在展开罐内展开，由于各组分在薄层上的移动距离不同，形成相互分离的斑点，测定各斑点的位置及其密度就可以完成对试样的定性、定量分析的色谱法。也可以用检测器加以检测。

[来源：GB/T 13966-2013, 8.38]

3.12

毛细管电泳 capillary electrophoresis

根据在电解质溶液中，带电粒子在高电场强度作用下，以不同的速度定向迁移的现象来达到化学组分分离的目的。各组分分离后通过检测器进行检测，并根据各组分的迁移时间和响应值进行定性、定量分析。电泳的分离介质一般为充满盐溶液（可以含各种添加剂）的弹性石英毛细管。

[来源：JJG 964-2001, 2, 有修改]

3.13

热解吸 thermal desorption

将吸附在固体（吸附剂）表面的有机物通过加热的方式使其从固体（吸附剂）上解吸成气体状态的技术。

3.14

流式细胞术 flow cytometry

一种对液流中排成单列的细胞或其他生物微粒（如微球，细菌，小型模式生物等）逐个进行快速定量分析和分选的技术。

[来源：SN/T5436-2022, 3.4]

3.15

激光烧蚀 laser ablation

一种利用高功率激光脉冲将样品表面物质通过高温烧蚀方式气化成分子、原子甚至等离子体的技术。

3.16

电子轰击离子化 electron impact ionization

用一定能量的电子（如70eV）轰击样品分子，从而使样品分子电离并形成离子的过程。

3.17

快速原子轰击离子化 fast atom bombardment ionization

用能量为数千电子伏特的离子束（如Ar离子或Xe离子等）与中性气体分子碰撞实现电荷交换变为中性原子束后，去轰击样品分子并使之离子化的过程。常用于电离热不稳定的有机物分子。

[来源：GB/T 13966-2013, 6.35, 有修改]

3.18

二次离子化 secondary ionization

由高能离子束轰击试样表面产生样品离子的过程，所产生的样品离子被称为二次离子。

3.19

电喷雾离子化 electro spray ionization

样品溶液在强电场（3~5KV）作用下,使得经喷雾产生的带电样品液滴在运动过程中其溶剂分子与周围气体的碰撞过程中被挥发,最后形成样品离子的过程。

3.20

解吸附电喷雾离子化 desorption electro spray ionization

通过电喷雾电离过程产生的离子与样品表面的样品分子相互作用,并在氮气的辅助吹扫与干燥作用下,使得样品分子带电并发生去溶剂化,从固体表面或液体样品中形成气相离子的过程。

3.21

纳升电喷雾离子化 nano electro spray ionization

电喷雾离子化（ESI）技术的一种,与ESI相比,使用了直径更小的毛细管,如直径为纳米的毛细管,样品流量通常为每分钟纳升级。

3.22

脉冲直流电喷雾离子化 pulsed direct current electro spray ionization

使用脉冲直流电压作为电喷雾离子化（ESI）的工作电源,使溶液中的样品分子发生脉冲式电喷雾离子化的过程。

3.23

电喷雾萃取离子化 extractive electro spray ionization

由电喷雾电离产生试剂(如甲醇、水等)的初级带电液滴或离子,与产生的待分析样品分子喷雾在空间进行碰撞融并发生液-液萃取和电荷转移,产生带电样品分子液滴的过程。带电样品分子液滴进一步发生去溶剂化作用,从而获得待测样品分子离子。

3.24

电喷雾辅助激光解吸离子化 electro spray assisted laser desorption ionization

一种结合了激光解吸电离(LDI)和电喷雾电离(ESI)特性的混合电离方法,用激光辐射样品并解吸出气相待测样品分子,后由电喷雾电离产生的离子与激光解吸产生的样品分子相互作用产生样品离子的过程。

3.25

极性反转电喷雾离子化 polarity reversal electro spray ionization

电喷雾电离（ESI）技术的一种,与传统的ESI相比,采用极性反转的高压进行电离,它可以增强样品信号强度与信噪比。

3.26

化学离子化 chemical ionization

通过气相中样品分子与反应离子碰撞并发生分子-离子反应,使样品分子离子化的过程。

[来源: GB/T 14666-2003, 6.2.7, 有修改]

3.27

大气压化学离子化 atmospheric pressure chemical ionization

大气压化学电离源常用于液相色谱-质谱联用仪器中。通过电晕针放电将溶剂电离,带电的溶剂分子与样品分子进行分子离子反应,将电荷转移给样品分子,使得样品分子离子化的过程。

[来源: GB/T 6041-2020, 4.3.5, 有修改]

3.28

质子转移反应 proton transfer reaction

使用气相水合质子与样品分子发生碰撞并将质子转移至待测样品分子使之离子化的过程。

3.29

光致离子化 photo ionization

一定波长的光束照射原子(或分子),使原子(或分子)失去电子而产生样品离子的过程。

3.30

基质辅助激光解吸离子化 matrix-assisted laser desorption ionization

用激光照射样品与基质形成的共结晶混合物,使之从激光中吸收能量并从基质传递给样品分子,引发样品分子的脱附和电离,并发生电荷转移反应产生样品离子的过程。这种电离源能够获得单电荷的离子。在生物大分子和有机高分子分析中有广泛应用。

[来源: GB/T 6041-2020, 4.3.6, 有修改]

3.31

单光子离子化 single photon ionization

分子吸收一个光子发生离子化的过程。

3.32

多光子离子化 multiphoton ionization

原子或分子在激光或其他强光源照射下,吸收多个光子并发生电离产生样品离子的过程。

3.33

激光解吸离子化 laser beam ionization

激光束照射固体原子(或分子)样品,使原子(或分子)发生解吸并电离生成气相离子的过程。

[来源: GB/T 13966-2013, 6.31, 有修改]

3.34

放电离子化 discharge ionization

利用一定气压下的气体样品放电而产生样品离子的过程。包括发光、电弧、火炬、电晕和火花放电等不同方法。

3.35

介质阻挡放电离子化 dielectric barrier discharge ionization

在一定气压条件下,交流高压电极中一个或两个用绝缘介质覆盖,当施加的电压超过击穿电压时,电极间的气体被击穿,形成稳定气流的等离子体束,再通过潘宁电离实现样品离子化的过程。

3.36

辉光放电离子化 glow discharge ionization

在真空环境下，利用辉光放电源使样品分子离子化的过程。

3.37

低温等离子体离子化 low temperature plasma ionization

由离子、电子和中性粒子组成的高密度电荷的等离子体气体状态，其中电子温度约为10 eV或更低，气体温度从室温到几千开尔文不等。

3.38

电晕放电离子化 corona discharge ionization

利用在导线表面产生的高强度电场，引发空气电离发生的放电，并使样品分子离子化的过程。

3.39

解吸电晕束离子化 desorption corona beam ionization

通过直流高压放电所产生的强电场激发加热的氦气，从而形成可见的辉光电晕束，通过电晕束与样品分子作用从而使样品中待测物质分子发生电离的过程。

3.40

火花放电离子化 spark ionization

采用火花放电使样品分子发生电离的过程。

3.41

电感耦合等离子体离子化 inductively coupled plasma

电感耦合等离子体电离源由射频发生器、工作线圈、炬管及工作气体组成。射频发生器将高频电流通过工作线圈，在线圈的轴线方向上产生一个强烈振荡的环形磁场，当位于线圈内部的炬管中通入氩气时，点火器的高频火花放电在炬管内使少量氩气电离，炬管中的导电粒子在磁场作用下运动方向随磁场的频率而振荡，形成与炬管同轴的环形电流，原子、离子、电子在强烈的振荡运动中互相碰撞产生更多的电子与离子，最终在炬管口形成稳定、持续的氩等离子体使经炬管进入等离子体炬焰中的样品气溶胶在高温和惰性气氛中充分电离。这种电离源主要用于元素分析。

[来源：GB/T 6041-2020, 4.3.7, 有修改]

3.42

热离子化 thermal ionization

通过加热金属灯丝产生高温，涂在灯丝表面的样品物质在高温下获得能量而发生蒸发并电离，样品分子可以失去电子形成正离子，也可以获得电子成为负离子。

3.43

场解吸离子化 field desorption

涂在发射体表面的样品分子或原子在强电场(大于10⁷V/cm)的作用下发生解吸和离子化的过程。

[来源：GB/T 14666-2003, 6.2.9, 有修改]

3.44

场离子化 field ionization

气态试样分子或原子在强电场(大于 10^7V/cm)作用下离子化的过程。

[来源: YB/T 4304-2012, 3.13.1, 有修改]

3.45

四极杆质量分析器 quadrupole mass analyzer

由四根柱状电极构成的质量分析器,四根电极在包含直流和射频交流成分的电压作用下产生四极场为主的空间电场分布,不同质荷比的离子在不同参数的四极电场作用下,发生空间和时间上的分离从而实现质量分析。

3.46

飞行时间质量分析器 time of flight mass analyzer

根据飞行时间的不同实现不同质荷比的离子的分离和检测的装置。由离子化源产生的离子经同一电场加速后进入等电位场离子漂移管,电荷数相同的离子将获得相同动能,并在等电位场离子漂移管中以恒定的速度飞向离子接收器;离子到达接收器所用的飞行时间和离子的质荷比(m/z)相关。

[来源: YB/T 4304-2012, 3.13.1, 有修改]

3.47

直线飞行时间质量分析器 linear time of flight mass analyzer

离子经过电场加速后沿等电位场直线离子漂移管向检测器飞行的质量分析器。

3.48

单次反射飞行时间质量分析器 single-reflectron time-of-flight mass analyzer

带有静电场离子反射镜能使离子做单次反射的飞行时间质量分析器。

3.49

多次反射飞行时间质量分析器 multi-reflectron time-of-flight mass analyzer

带有静电场反射镜能使离子做多次反射的飞行时间质量分析器。

3.50

离子阱质量分析器 ion trap mass analyzer

在一组电极上加射频和直流电压,使电极之间形成对被测离子的囚禁电场。通常,囚禁电场主要包含四极电场,通过调整电场参数,使不同质荷比的离子运动依次被激发,继而从囚禁空间出射,并被检测器检出形成质谱信号。

[来源: GB/T 6041-2020, 4.5.4.2, 有修改]

3.51

二维离子阱质量分析器 linear ion trap mass analyzer

由x、y两对沿z轴向延伸的电极,形成一个二维的射频四极囚禁场,用z轴两端的电极形成轴向势垒,使离子囚禁在一个沿z轴延伸的线形空间。由于不同质荷比的离子状态不同,通过调整工作电压参数,从而实现具有质量选择性的离子操作和质谱分析。

3.52

三维离子阱质量分析器 3D ion trap mass analyzer

由一个环形电极和两个端盖电极组成。在环形电极和端盖电极之间施加工作电压，能够实现对被测离子囚禁和逐出。通过调整电压参数，可对离子进行质量选择性的稳定囚禁、不稳定逐出以及共振逐出等一系列操作，实现离子的质量分析。

3.53

磁质量分析器 magnetic analyzer

基于洛伦兹定律，根据离子在磁场中发生偏转的原理，使不同质荷比的离子束按空间位置分开的一种质量分析器。

[来源：GB/T 13966-2013, 6.108, 有修改]

3.54

单聚焦质量分析器 single-focusing mass analyzer

能够使离子束方向聚焦的质量分析器。采用磁分析器使速度(能量)相同但有一定角度(方向)分散的离子束在磁场中作不同轨迹的圆周运动，既实现不同质荷比离子的分离，又实现离子束方向聚焦。

3.55

双聚焦质量分析器 double-focusing mass analyzer

能够同时实现离子束的方向和速度聚焦的质量分析器。按照像差大小可分为一级聚焦和二级(高级)聚焦两类;按照实现双聚焦的质量范围可分为单质量双聚焦和全质量(多质量)双聚焦两类;按照几何排列形式可分为正向尼尔-约翰逊结构质量分析器(离子束先通过静电分析器、后通过磁分析器)、反向尼尔-约翰逊结构质量分析器(离子束先通过磁分析器后通过静电分析器)和马-赫型结构质量分析器(离子先通过 31.8° 静电分析器，后通过 90° 磁分析器)。

3.56

傅里叶变换质量分析器 fourier transform ion cyclotron resonance mass analyzer

基于洛伦兹定律，根据离子在磁场中的圆周运动频率与其质量相关的原理，采用磁场和静电场将离子束缚并获得对应于离子运动频率的电流信号，再采用傅里叶变换方法分析与频率相关的离子质量的仪器装置。

3.57

静电阱质量分析器 electrostatic trap mass analyzer

采用静电场束缚离子的傅里叶变换质谱分析装置。其束缚电场的形式有称为Orbitrap的双曲对数场形式、线形双反射器形式和平面反射器形式等。工作时，离子在至少一个维度上做简谐振动，或等时性往复运动。离子在电极上感应出的镜像电荷或电流信号的频率，通常和离子质荷比的平方根成反比，故可采用傅里叶变换得到的频谱，经过转换得到质谱信号。

3.58

离子回旋共振质量分析器 ion cyclotron resonance mass analyzer

以强磁场为主束缚离子的傅里叶变换质谱分析装置。通常采用超导线圈产生轴向强磁场，离子在强磁场中受洛伦兹力发生回旋运动，而在轴向采用静电势垒来束缚离子。通过加高频场共振激发使所有离子以一定半径回旋运动，并在外周电极上感应出镜像电荷或电流，镜像电荷或电流信号的频率和离子质荷比成反比，故可采用傅里叶变换得到的频谱，经过转换得到质谱信号。

4 分类

4.1 分类原则

按仪器结构和原理对质谱仪器进行分类，具体按照联用技术、离子化技术、质量分析器三个维度划分。

4.2 分类方法

采用分面分类法，按“分面—亚面—类目”建立类表结构体系。根据质谱仪器的结构组成为三个分面，每一分面根据对应的原理逐次分为若干亚面或若干类目。

4.2.1 分面一：按照联用技术划分

根据质谱仪器联用技术分为直接离子化分析、色谱联用以及常用非色谱联用三个亚面。根据不同的色谱类型分为液相色谱、气相色谱、离子色谱、薄层色谱、超临界流体色谱、毛细管电泳 6 个类目；各类目再根据该色谱原理不同，再逐一划分。常用非色谱联用分为热解吸、流式细胞术、激光烧蚀 3 个类目。

- 1) 直接离子化分析；
- 2) 色谱联用划分为：
 - a) 液相色谱包括：
 - 液相色谱；
 - 高效液相色谱；
 - 超高效液相色谱；
 - 多维液相色谱；
 - b) 气相色谱包括：
 - 气相色谱；
 - 全二维气相色谱；
 - c) 离子色谱；
 - d) 超临界流体色谱；
 - e) 薄层色谱；
 - f) 毛细管电泳；
- 3) 常见非色谱联用划分为：
 - a) 热解吸；
 - b) 流式细胞术；
 - c) 激光烧蚀。
- 4) 其他。

4.2.2 分面二：按照离子化技术划分

根据离子化原理不同，对常用的离子化技术进行分类。分为轰击离子化、电喷雾离子化、化学离子化、光致离子化、放电离子化、热离子化、场致离子化七个亚面。各亚面根据该种离子化原理是否有不同细分，再逐一划分若干类目。

- 1) 轰击离子化包括：
 - a) 电子轰击离子化；

- b) 快速原子轰击离子化;
- c) 二次离子化;
- 2) 电喷雾离子化包括:
 - a) 电喷雾离子化;
 - b) 解吸附电喷雾离子化;
 - c) 纳升电喷雾离子化;
 - d) 脉冲直流电喷雾离子化;
 - e) 电喷雾萃取离子化;
 - f) 电喷雾辅助激光解吸离子化;
 - g) 极性反转电喷雾离子化;
- 3) 化学离子化包括:
 - a) 化学离子化;
 - b) 大气压化学离子化;
 - c) 质子转移反应;
- 4) 光致离子化包括:
 - a) 基质辅助激光解吸离子化;
 - b) 单光子离子化;
 - c) 多光子离子化;
 - d) 激光解吸离子化;
- 5) 放电离子化包括:
 - a) 介质阻挡放电离子化;
 - b) 辉光放电离子化;
 - c) 低温等离子体离子化;
 - d) 电晕放电离子化;
 - e) 解吸电晕束离子化;
 - f) 火花放电离子化;
 - g) 电感耦合等离子体离子化;
- 6) 热离子化;
- 7) 场致离子化包括:
 - a) 场解吸离子化;
 - b) 场离子化;
- 8) 其他。

4.2.3 分面三：按照质量分析器类型划分

根据质谱仪器的主质量分析器（输出最终分析结果的质量分析器）的不同原理，划分为五个亚面，分别为四极杆质量分析器、飞行时间质量分析器、离子阱质量分析器、磁质量分析器、傅里叶变换质量分析器。各亚面根据该种质量分析器原理不同，再逐一划分若干类目。

- 1) 四极杆质量分析器;
- 2) 飞行时间质量分析器包括:
 - a) 直线飞行时间质量分析器;
 - b) 单次反射飞行时间质量分析器;
 - c) 多次反射飞行时间质量分析器;
- 3) 离子阱质量分析器包括:

- a) 二维离子阱质量分析器；
- b) 三维离子阱质量分析器；
- 4) 磁质量分析器包括：
 - a) 单聚焦质量分析器；
 - b) 双聚焦质量分析器；
- 5) 傅里叶变换质量分析器包括：
 - a) 静电阱质量分析器；
 - b) 离子回旋共振质量分析器；
- 6) 其他。

5 代码

5.1 代码结构

质谱仪器代码分为英文代码和数字代码两种方式。

5.2 英文代码结构和编码方法

5.2.1 英文代码结构

质谱仪器英文代码由三个分面各类目代码组合构成，代码结构从左往右依次为分面一、分面二、分面三的代码。英文代码的位数不作限制，代码根据质谱仪器的结构进行顺序组合。代码结构见图 1。

5.2.2 英文代码编码方法

三个分面各类目的英文代码用其英文简称表示，具体英文代码见表 1。

5.2.3 示例

示例如下：

- 1) 直接离子化分析的质谱仪器，如电感耦合等离子体离子化四极杆质谱，其英文代码为 ICP-Q；
- 2) 采用联用技术的单质谱仪器，如与气相色谱联用的电子轰击离子化四极杆质谱，其英文代码为 GC-EI-Q；
- 3) 采用联用技术的串联质谱仪器：如与液相色谱联用，采用电喷雾离子化的四极杆飞行时间质谱，其英文代码为 LC-ESI-QTOF。

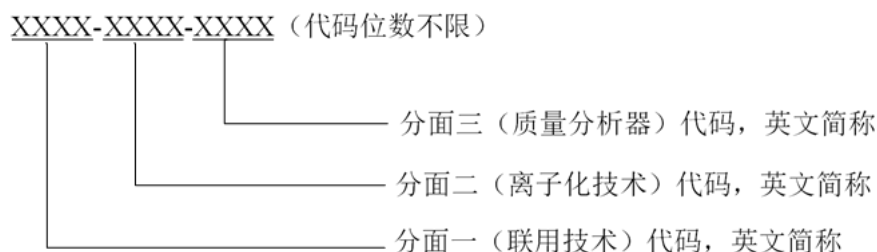


图 1 质谱仪器英文代码结构

5.3 数字代码结构和编码方法

5.3.1 数字代码结构

质谱仪器数字代码为三个分面各类目的数字组合，由 10 位阿拉伯数字构成。前三位数字为联用技术代码、中间三位数字为离子化技术代码，后四位数字为质量分析器代码。代码结构见图 2。

5.3.2 联用技术数字代码编码方法

联用技术数字代码编码方法包括下列内容：

- 1) 联用技术代码以 3 位阿拉伯数字表示。具体数字代码见表 1；
- 2) 直接离子化分析，以代码 000 表示；
- 3) 色谱联用亚面，首位数字用 1 表示。第二位以数字 1 开始，顺次表示不同色谱类型，如液相色谱用 1 表示，气相色谱用 2 表示。第三位数字表示该色谱原理下的细分项；如该类目下无细分或与上位名字相同，用数字 0 表示；
- 4) 常见非色谱联用亚面，首位数字用 2 表示。第二位以数字 1 开始，顺次表示表示不同类目。第三位数字表示该类目的细分项，如无细分用数字 0 表示；
- 5) 表 1 未列出的其他联用技术，以代码 999 表示。

5.3.3 离子化技术数字代码编码方法

离子化技术数字代码编码方法包括下列内容：

- 1) 离子化技术代码以 3 位阿拉伯数字表示。具体数字代码见表 1；
- 2) 轰击离子化、电喷雾离子化、化学离子化、光致离子化、放电离子化、热离子化、场致离子化七个亚面分别以数字 1~7 表示；
- 3) 各亚面各类目代码的首位数字为其亚面的数字代码 1~7；其余两位数字从 01 开始，顺次表示不同类目。如类目与亚面名字相同，后两位用 00 表示；
- 4) 若使用复合离子化技术，则以该仪器的标准配备或主要离子化技术对应代码表示；
- 5) 表 1 未列出的其他离子化技术，以代码 999 表示。

5.3.4 质量分析器数字代码编码方法

质量分析器数字代码编码方法包括下列内容：

- 1) 质量分析器各类目代码以 2 位阿拉伯数字表示。具体数字代码见表 1；
- 2) 四极杆质量分析器、飞行时间质量分析器、离子阱质量分析器、磁质量分析器、傅里叶变换质量分析器五个亚面分别以数字 1~5 表示；
- 3) 各亚面各类目代码的首位数字为其亚面的数字代码 1~5；后一位数字从 1 开始，顺次表示不同类目。如类目与亚面名字相同，后一位用 0 表示；
- 4) 表 1 未列出的其他质量分析器，以代码 99 表示；
- 5) 质量分析器分面的数字代码结构由 4 位数字组成。若为单质谱仪器，质量分析器的分面代码以“00”+“相应类目数字代码”组合表示；若为串联质谱仪器，质量分析器的分面代码以两个相应类目的数字代码组合表示。若三种及以上质量分析器串联，分面代码以“99”+“主质量分析器对应的类目数字代码”组合表示。

5.3.5 示例

示例如下：

- 1) 直接离子化分析的质谱仪器，如电感耦合等离子体离子化四极杆质谱，其数字代码为 0005070010；
- 2) 采用联用技术的单质谱仪器，如与气相色谱联用的电子轰击离子化四极杆质谱，其数字代码为 1201010010；
- 3) 采用联用技术的串联质谱仪器，如与液相色谱联用的电喷雾离子化四极杆飞行时间质谱，其数字代码为 1102001022。

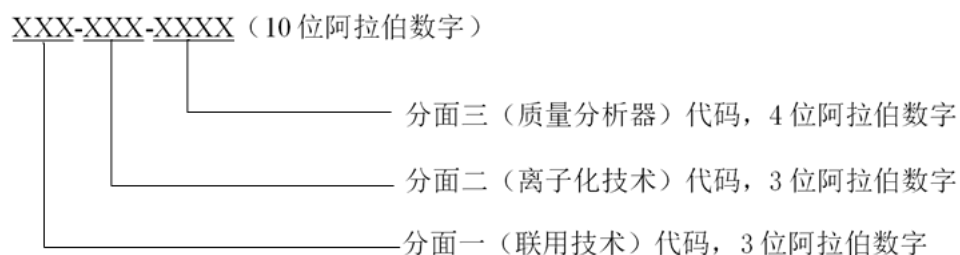


图2 质谱仪器数字代码结构

5.4 分类代码表

分类代码表见表1。

表1 质谱仪器分类代码表

分面	亚面	类目	英文代码	数字代码	
联用技术	直接离子化分析			000	
	色谱联用	液相色谱	液相色谱	LC	110
			高效液相色谱	HPLC	111
			超高效液相色谱	UPLC	112
			多维液相色谱	LC-LC	113
			气相色谱	GC	120
		气相色谱	全二维气相色谱	GC×GC	121
			离子色谱	IC	130
		超临界流体色谱	SFC	140	
		薄层色谱	TLC	150	
		毛细管电泳	CE	160	
	常见非色谱联用				2
		热解吸	TD	210	
		流式细胞术	FC	220	
		激光烧蚀	LA	230	
其他				999	
离子化技术	轰击离子化			1	
		电子轰击离子化	EI	101	
		快速原子轰击离子化	FABI	102	

分面	亚面	类目	英文代码	数字代码	
		二次离子化	SI	103	
	电喷雾离子化			2	
		电喷雾离子化	ESI	200	
		解吸附电喷雾离子化	DESI	201	
		纳升电喷雾离子化	nano-ESI	202	
		脉冲直流电喷雾离子化	PDESI	203	
		电喷雾萃取离子化	EESI	204	
		电喷雾辅助激光解吸离子化	ELDI	205	
		极性反转电喷雾离子化	PR-ESI	206	
	化学离子化			3	
		化学离子化	CI	300	
		大气压化学离子化	APCI	301	
		质子转移反应	PTR	302	
	光致离子化			4	
		基质辅助激光解吸离子化	MALDI	401	
		单光子离子化	SPI	402	
		多光子离子化	MPI	403	
		激光解吸离子化	LDI	404	
	放电离子化			5	
		介质阻挡放电离子化	DBDI	501	
		低温等离子体离子化	LTP	502	
		辉光放电离子化	GDI	503	
		电晕放电离子化	CDI	504	
		火花放电离子化	SI	505	
		解吸电晕束离子化	DCBI	506	
		电感耦合等离子体离子化	ICP	507	
	热离子化			6	
		热离子化	TI	600	
	场致离子化			7	
		场解吸离子化	FD	701	
		场离子化	FI	702	
	其他			999	
	质量分析器	四极杆质量分析器			1
			四极杆质量分析器	Q	10
		飞行时间质量分析器			2
			直线飞行时间质量分析器	LTOF	21
			单次反射飞行时间质量分析器	SRTOF	22
			多次反射飞行时间质量分析器	MRTOF	23
		离子阱质量分析器			3
			二维离子阱质量分析器	2DIT	31
			三维离子阱质量分析器	3DIT	32

分面	亚面	类目	英文代码	数字代码
	磁质量分析器			4
		单聚焦质量分析器	SFMS	41
		双聚焦质量分析器	DFMS	42
	傅里叶变换质量分析器			5
		静电阱质量分析器	ET	51
		离子回旋共振质量分析器	ICR	52
	其他			99

附录 A
(资料性)
起草单位和主要起草人

本文件起草单位：广东省麦思科学仪器创新研究院、广州禾信仪器股份有限公司、暨南大学、宁波大学、中国计量科学研究院、中国广州分析测试中心、赛默飞世尔科技（中国）有限公司、杭州谱育科技发展有限公司、宁波华仪宁创智能科技有限公司、常州磐诺仪器有限公司、中国科学院苏州生物医学工程技术研究所、上海质谱仪器工程技术研究中心、北京东西分析仪器有限公司、江苏天瑞仪器股份有限公司、钢研纳克检测技术股份有限公司、苏州安益谱精密仪器有限公司、北京清谱科技有限公司、山东英盛生物技术有限公司、安捷伦科技（中国）有限公司、珀金埃尔默企业管理（上海）有限公司、岛津企业管理（中国）有限公司、西北核技术研究院。

本文件主要起草人：朱芷欣、刘丹、周振、黄正旭、罗德耀、周志恒、丁传凡、丁力、黄泽建、陈江韩、徐牛生、俞晓峰、姚继军、闻路红、周向东、程文播、王世立、韩娜、刘召贵、沈学静、张小华、高俊海、景叶松、朱颖新、王海鉴、朱敏、潘晨松、洪义、李磊、陈政阁、黎彦、刘虎威、李志明、沈小攀。