

# 通讯故障导致质谱软件崩溃的维修经历

高学旺

(中国科学院理化技术研究所 公共技术中心, 北京 100190)

**摘要:** 赛默飞的高分辨气相色谱质谱联用仪从外观直观看, 由气相色谱, 质谱, 控制系统三部分组成, 三部分的数据交互主要通过交换机进行转发完成, 当交换机发生故障时, 数据信号转发则不能正常进行, 此时 tune 软件界面会提示通讯故障, 由此可以让仪器管理员第一时间找到故障来源。中国科学院理化技术研究所有一台高分辨气相色谱质谱联用仪, 在使用过程中, 出现 tune 软件崩溃无法打开的情况, 经过多次尝试后发现是交换机故障导致, 本文根据维修过程的回溯, 希望给相关仪器管理员在遇见类似情况时提供一个维修思路。

**关键词:** 通讯故障; 气质联用; 轨道阱质谱仪

质谱是研究离子的科学和技术, 质谱仪通常由离子源、质量分析器与检测器三部分组成。离子源的作用主要是将固体、液体、或者气体样品经离子化变成带有电荷的气态分子。气态离子经加速电场的作用, 形成离子束, 进入质量分析器。在质量分析器中, 再利用电场或磁场使不同荷质比的离子在空间上或时间上分离, 或是通过过滤的方式, 将它们分别聚焦到检测器得到质谱图, 从而获得质量与浓度(或强度)相关的图谱。

气相色谱的分离效率高, 能够将复杂有机化合物通过毛细管柱进行逐一分离; 而质谱的灵敏度好, 且定性能力强, 通过检索普图库可以很方便地确定有机物的种类和结构。气相色谱质谱联用仪则结合了二者的优势, 对于分析复杂基质有机物提供了一个强有力的分析手段。中科院理化所于 2019 年购买一台赛默飞的高分辨气质联用仪, 该设备自安装使用以来, 为理化所以及周边科研单位提供必要的技术支撑服务, 目前理化所公共技术中心的所有仪器均对外开放共享。

气质联用的离子源, 质量分析器需要在真空条件下工作, 所以需要使用机械泵或者分子泵来维持真空状态, 如果真空不能维持, 则仪器无法正常工作。赛默飞的 Orbitrap 系列高分辨质谱仪配有一个外置机械泵, 两个内置分子涡轮泵, 机械泵定期更换泵油的情况下, 故障率很低, 一般不会出问题。源区的分子涡轮泵一般 3 年左右需要维护轴承, 如果轴承不及时维护有可能由于轴承磨损导致分子泵发生故障。需要维护的时候通常会听见尖锐的刺耳声, 这个声音会随着时间的延长逐渐变大, 这个时候一般仪器真空还正常, 还能正常使用 1-2 周

左右,如果坚持不关机维护分子涡轮泵的话,对应的分子泵叶片大概率会碎掉导致完全报废。和维护分子泵轴承相比,更换全新的分子涡轮泵费用就显得比较昂贵,所以为了避免出现这种问题,质谱日常维护还是必不可少的。

2024 年 8 月初,仪器管理员对高分辨气质联用仪进行周期维护,更换泵油,维护离子源后打开仪器总电源开始抽真空,机械泵抽真空 2 小时后,打开设备电子开关,确认真空状态正常,开始对设备进行烘烤 (bakeout) 12 小时,通常仪器烘烤结束后需要冷却 3 小时,电子元器件稳定 5 小时,经烘烤结束后真空显示值为 5-6E-10。继续烘烤 12 小时真空显示 1-2E-10,真空状态良好,于是开始调试仪器。首先做了 Leak Check 和 Traping Gas Control,检漏结束后仪器报错并自动设置成 Off 状态,

表 1 高分辨气质联用仪调试时报错信息

|                                                                                   |                                                                    |
|-----------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| Exactive GC                                                                       |                                                                    |
|  | Exactive GC                                                        |
|                                                                                   | Setting system to Off because Optics HV overload (Offs Hi) - Alarm |
| <div>OK</div>                                                                     |                                                                    |

咨询售后工程师,确认了仪器内部温度 26.1℃,湿度 54.1% (通过查询仪器状态栏确认,路径为: Instrument/Performance/Performance Status/Ambient Temperature, Ambient Rel. Humidity),工程师怀疑是近期雨水比较多,房间里面湿度比较大导致的仪器报错。将房间除湿机打开,同时温度设置为 18℃加快除湿进度。

第二天发现仪器由于系统自动升级关机重启了,打开 tune 软件查看仪器真空状态,以及温湿度状态时,发现 tune 软件无法正常打开,同时弹出一个对话框

表 2 高分辨气质联用仪 tune 软件崩溃报错信息

|                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| Exactive GC                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                 |
|                                                                                                                                                                | An error occurred during execution of the program ExactiveTune. |
| The dump file                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                 |
| C:\ProguamData\Thermo\Exactive\CrashDump\ExactiveTune—2024-08-14T08-32-27.dump has been written and may contain useful information to make ThermoFisher able to find a sulotion for your problem very fast. Please, contact your account manager. |                                                                 |
| We are very sorry for the inconvenience. Please, restart the program on demand.                                                                                                                                                                   |                                                                 |
| <div>OK</div>                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                 |



C:\Users\Thermo>ping 172.16.0.100

Pinging 172.16.0.100 with 32 bytes of data:

Reply from 172.16.0.100: bytes=32 time<1ms TTL=128

Reply from 172.16.0.100: bytes=32 time<1ms TTL=128

Reply from 172.16.0.100: bytes=32 time<1ms TTL=128

Reply from 172.16.0.100: bytes=32 time<1ms TTL=128

Ping statistics for 172.16.0.100:

Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),

Approximate round trip times in milli-seconds:

Minimum = 0ms, Maximum = 0ms, Average = 0ms

C:\Users\Thermo>ping 172.16.0.200

Pinging 172.16.0.200 with 32 bytes of data:

Reply from 172.16.0.200: bytes=32 time<1ms TTL=64

Reply from 172.16.0.200: bytes=32 time<1ms TTL=64

Reply from 172.16.0.200: bytes=32 time<1ms TTL=64

Reply from 172.16.0.200: bytes=32 time<1ms TTL=64

Ping statistics for 172.16.0.200:

Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),

Approximate round trip times in milli-seconds:

Minimum = 0ms, Maximum = 0ms, Average = 0ms

C:\Users\Thermo>ping 172.16.0.150

Pinging 172.16.0.150 with 32 bytes of data:

Reply from 172.16.0.150: bytes=32 time=1ms TTL=64

Reply from 172.16.0.150: bytes=32 time=1ms TTL=64

Reply from 172.16.0.150: bytes=32 time=1ms TTL=64

Reply from 172.16.0.150: bytes=32 time=1ms TTL=64

Ping statistics for 172.16.0.150:

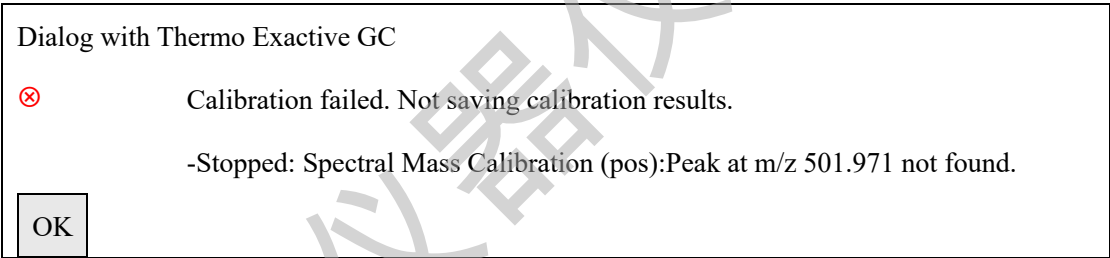
Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),

Approximate round trip times in milli-seconds:

Minimum = 1ms, Maximum = 1ms, Average = 1ms

此时控制系统和设备各个模块通讯正常，配置仪器过程也很顺利，重启电脑并 reset 仪器后再次进行 ping 也正常，打开 tune 软件正常。仪器真空状态，以及温湿度均正常。开始调试校准仪器，校准仪器不通过，提示质量轴偏差较大，实测值 502.063，理论值 501.971，偏差 0.092，

表 3 高分辨气质联用仪质量轴校准不通过报错信息



这个问题主要是由于重新系统时校正文件丢失导致的质量轴偏差较大，需要 service 权限进行两点校准后才能改善质量轴偏差的情况。经两点校准后仪器调试正常。

总结：由于交换机数据交换速率延迟时间短，数据交互效率高，且设备性能稳定，气质联用以及其它多种分析设备的数据通讯均采用交换机完成。由于交换机故障率比较低，由此导致控制系统端报错时容易忽视通讯的问题，在遇到控制系统端异常时可以首先通过 ping 对应模块的 ip 地址来确认是否是通讯故障导致，在确保通讯正常的情况下再逐一排查可能的问题所在。如果确实是控制系统本身导致的需要重新安装系统，最好提前备份比较关键的数据，比如系统配置文件，系统校准文件等，这样在重装系统后就能大大减少设备的调试过程。