

安捷伦案例研究

寻求清晰结果：与 CEMS 的 Imma Ferrer 博士和 Michael Thurman 博士展开对话

在当今众多全球问题（气候变化、人口增长、城市扩张、资源减少、温室气体排放等）的巨大压力下，“拯救环境”的理念可能拥有无数的含义。尽管如此，无论这个理念如何定义，它从未像现在这样主导我们的共同意识，或者说，从未像现在这样紧迫。

事实上，无论从哪个方面，都有“拯救环境”的工作要做，但从哪里开始呢？对 Imma Ferrer 博士和 Michael Thurman 博士而言，答案就像科罗拉多高地山涧中流淌的水一样清晰。这两位科学家均供职于科罗拉多大学博尔德分校的环境质谱中心 (CEMS)，他们致力于开发环境水化学分析的新方法。CEMS 的重心，即“检测水中的药物、激素及其他有机污染物，并评估去除这些化合物的方法的有效性”，正是他们了解人类活动对环境水质影响的热情所在。

安捷伦与这一活力二人组（他们不仅是科学研究中的搭档，也是实验室外生活中的伴侣）展开对话，了解技术进步如何影响他们的工作，以及他们的工作反过来如何影响解答重要问题的方式。



Imma Ferrer 博士

研究科学家
科罗拉多大学，CEMS
美国



Michael Thurman 博士

研究科学家
科罗拉多大学，CEMS
美国

安捷伦：是什么激励您进入科研领域？

Thurman 博士：“我在太空竞赛年代长大，当时科学很重要，科学家拥有重要地位。那些对科学的早期印象与我对户外活动的热爱相结合，促使我自然而然地获得了地球化学博士学位。”

Ferrer 博士：“我的经历很不相同。我在一个大城市里长大，在学校中与科学有大量接触。科学始终让我很感兴趣，而且我很幸运遇到一些非常好的老师，尤其是在大学期间。另外，我的一个姐姐成为了一名化学家，这也激励我追随她的脚步。”

安捷伦：您如何看待与为您的实验室提供分析仪器的安捷伦的合作关系？

Thurman 博士：“一位同事在 2003 年提出了与安捷伦进行正式合作的想法。我认为这是一个好主意，因为那个时候我们已经与安捷伦进行了多年的非正式合作。我在 1985 年购买了我的第一台惠普质谱仪，而 Imma 在 1998 年购买了一台单四极杆质谱仪。”

Ferrer 博士：“在过去 10 年左右的时间里，安捷伦将仪器放置在我们的实验室中，作为我们正式合作的一部分，并在推出新型号时更换这些仪器。我们还享有安捷伦服务与支持，但这些仪器非常稳定，很少用到那些服务与支持。”

安捷伦：这些年来，您遇到过哪些挑战？

Ferrer 博士：“一开始，人们会找到我们说，‘请尽可能多地告诉我们这个水样中有什么。’因此，挑战在于缩小重要且相关化合物的范围，当然还要弄清楚我们实际能够检测到哪些化合物。”

Thurman 博士：“2004 年，台式精确质量系统刚刚起步，实际上没有任何工具可以与仪器配合使用，那时软件才刚刚开始开发。我们在这一领域做了大量开创性的工作，包括与安捷伦合作申请了同位素间距专利，并且我们还撰写或与人合作撰写了大约 30 篇安捷伦应用简报。今天，有许多强大的软件工具，但我们也开发了自己的风格、自己的方法，似乎软件在很多方面也随之发展起来。”

“现在我们的挑战是‘大数据’。这些仪器能够生成如此之多的信息，但我们该如何处理？”

Ferrer 博士：“从样品进入我们实验室的那一刻起，我们可以在一天内运行完样品。但是我们可能需要花费数周或数月时间从单个样品中提取数据。软件成为这个过程中非常重要的一部分。”

安捷伦：您正在使用 Agilent MassHunter Explorer 软件，它将数据提取、分析和鉴定功能整合到一套简化的工具中以提供关键见解。它在您的工作中是如何发挥作用的？

Ferrer 博士：“以前，我们必须聚焦于单个样品；MassHunter Explorer 软件使我们得以更宏观地一次性看清一切。我们开始看到通过单独查看每个样品可能无法发现的联系。”

Thurman 博士：“它使我们能够快速从单个样品转向获得整体概况。它让我们可以结合相应背景查看大量数据，从而做出合理选择，尽快找到答案。这使我们的工作更有实际意义，因为人们急于了解情况，他们不希望你说‘我们将在一两年后给你答案。’”

Imma 做了一件有趣的事情：她将我们的许多提取物样品保存在冰箱中，以便后续重新分析。我们可以使用新软件回顾性分析旧样品，这非常有意义。随着像 MassHunter Explorer 这样的新工具的出现，我们不仅可以回顾性地查看数据文件，还可以回顾性地分析样品本身。”

Ferrer 博士：“一个给定的样品可能有数千个或甚至一万个‘特征’，但其中一些是始终存在的背景离子，因此必须缩小范围以锁定重要特征。该软件帮助我们快速聚焦于数量少得多的重要化合物。”

Thurman 博士：“该软件还使我们能够用数据展示一些我们凭直觉知道的事情，这真是太好了。例如，我们知道哪些样品是不含污染物的‘天然’样品，知道哪些样品被污染。这款软件帮助我们展示数据，以确认我们从采样和地质情况中知道的这些直觉假设。软件使我们能够将它们分开；有各种统计工具包可以帮助我们确定显著性。然后我们可以深入研究那些样品。”

Ferrer 博士：“在此之前，这种分析涉及很多我们所说的‘峰点击’。那种做法是有效的，但是获得答案的过程很慢，而且很难捕获所有信息。”

Thurman 博士：“二十五年前，我们能做的只有靶向分析。首先获得标准品，然后运行样品，再寻找特定的化合物。今天，如果实验室没有使用这些软件工具进行精确质量分析，他们无疑会处于不利的地位。”

安捷伦： MassHunter Explorer 在哪些方面达到甚至超过了您的期望？

Ferrer 博士：“我认为我们得到的比我们预期更多。以前，我们会运行样品，分析数据，然后写论文。现在，有如此多有趣的结果有待分享，我们要写的论文可以排成一排。”

Thurman 博士：“我可以举例来说这有多令人兴奋。当圣海伦火山喷发时，一位同事从那里采集样品并把它们冷冻干燥。大约一年前，我们分析了其中一些样品，从中发现了一些我们在房屋火灾污染物中发现的相同化合物。突然间，所有这些此前不知道的化合物和异构体都在其中，为我们展示了从未想过的联系。这种兴奋会让你偏离原来的议题，有时让你跟不上写作的步伐。”

安捷伦： 现在是什么激励着您？

Ferrer 博士：“今天可用的新工具带来了如此重大的见解，我们终于能够开始提出关于健康和保护环境等的重大问题，而不仅仅是专注于找出可能存在哪些单独的化合物。”

Thurman 博士：“我们正处于这样一个阶段，我们正在获得有趣的结果，可以开始解答这些重要问题，但是有如此之多的数据和如此之多的论文，可能很难从中发现重点。行业合作，例如我们与安捷伦的合作，为我们提供了结识新朋友、交流想法和专业知识的良机。这些对话会带我们走向此前可能从未想过的方向。”

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE97930836

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2023
2023年5月23日，中国出版
5994-6176ZHCN