岛津气质联用仪工作站色谱峰定性操作步骤

谯应召

(青岛科技大学山东化工研究院,山东省济南市250014)

摘要: GCMSSolution 为岛津公司气相色谱-质谱联用仪使用的数据处理工作站,其功能丰富,操作界面良好,全中文界面,气相色谱-质谱联用仪的基本操作对于新用户而言易于上手。 但是气相色谱质谱联用仪操作需要更多的原理知识支持,工作站的扩展功能较为丰富,对用 户而言存在一定难度。色谱工作者使用该型号工作站进行色谱峰定性操作时,相关的功能和 参数较多,细节问题较多。本文对质谱定性操作的具体步骤,各个按钮和参数的给出详细讲 解,希望对色谱工作者有所帮助。

关键词 气相色谱质谱联用仪; 定性操作; 数据处理工作站; 参数 中图分类号: O657.7+1 **文献标识码: B**

概述

Shimadzu GCMS 使用 GCMSsolution 工作站进行数据采集和处理,全中文界面,操作较为简易。色谱工作者在获得数据文件之后,如果需要进行色谱峰定性操作,可以参照此文件执行。

简介

当以 scan 方式采集的质谱数据文件已经保存,此时运行 GCMSsolution 的"GCMS 再解 析"模块,按照下文步骤执行操作。

1 打开数据文件

点击 GCMSsolution 再解析模块之"助手栏"的"定性"图标,并点击菜单栏中的"文件"-"打 开数据文件",将需要处理的(必须为 scan 方式采集的)数据文件(后缀为.qgd)打开,如 图 1 所示。



图 1 打开数据文件

此时需要首先设置候选质谱库,点击菜单栏的"定性"项目,选择"定性参数",如图2所示。



图 2 定性参数

在系统弹出的"定性参数"-"相似度检索"项目中,指定候选质谱库文件,如图3所示。 参数表列

最小 SI: 系统检索结果中相似度指数(SI)低于此值的结果将不予显示。

最大命中数:系统检索结果中给出的候选组分个数。

检索深度: 可以指定重要碎片个数,以提高检索速度。

反检索: 以质谱图中的质谱图为基准极性质谱检索。可以消除质谱图中噪声和背景 干扰影响。

保留指数允许误差:

根据数据文件中组分的保留指数与谱库中保留指数偏差,滤除检索结果。

后检索: 再初步的检索结果中,可以限定索引,缩小命中化合物范围。

参数		×	
积分 质谱处理 相似度检索 保留	路上 色谱柱性能		
禁废文件 夕(1)。	最小SI(S):		
D:\GCMSsolution\library\NIST20	-1.lib 0	检索深度(D): 无预检索 ~	
		是士命中数/M). 25 ▲	
	0		
	0		
5检索(P): 回 匹配大小写(C)		
索引		参教	
1 大设置			
			$\mathbf{'} \mathbf{/}$
		-//	
		-//	
	٢	确定 取消 帮助	
	(确定 取消 帮助	
	(确定 取消 帮助	

2 获得色谱峰顶质谱图

以保留时间 11.5min 的色谱峰为例,在目标色谱峰顶点或者顶点附近双击,获得此时间 点的质谱图,如图 4 所示。



点击 GCMSsolution 再解析图标中的"扣减质谱"图标,如图 5 所示,在目标色谱峰附

近的基线部位双击,系统自动扣除背景获得新质谱图,如图6所示。



图 6 扣减之后的质谱图

4 检索质谱库

在质谱图中点击鼠标右键,再弹出菜单中选择"相似度检索",如图7所示。



图 7 相似度检索

GCMSsolution 系统自动返回检索结果,如图 8 所示。



图 8 质谱检索结果

至此可以获得定性结果。

背景扣除的方式

GCMSSolution 支持四种背景扣除的方式。

A 点-B 点: 上文中操作方式。

A 区间-B 点: 首先点击"平均质谱"图标, 然后拖动鼠标左键, 选中色谱峰内区间, 然后点击"扣减质谱", 双击基线某数据点。

A 点-B 区间: 首先色谱峰内双击, 然后点击"平均和扣减质谱", 选中基线中的某个区间。

A 区间-B 区间: 首先点击"平均质谱"图标, 然后拖动鼠标左键, 选中色谱峰内区间, 然后点击"平均和扣减质谱", 选中基线中的某个区间。

小结

简述 GCMSSolution 工作站质谱检索的基本步骤。