

# 岛津质谱工作站中添加化合物名称标注的方法

谯应召

(青岛科技大学山东化工研究院, 山东 济南 250014)

**摘要:** 岛津公司的 GCMSsolution 工作站是一款全中文界面、操作方法简易、功能丰富的色谱-质谱数据工作站。色谱工作者如果需要对目标色谱峰进行化合物名称标注时, 操作需要注意的细节问题较多, 并且工作站对色谱-质谱数据有一定的要求。需要标准的数据文件需要进行一定的数据处理, 其具体操作步骤较为繁琐, 对于该型号工作站的初学者存在一定难度。本文对该型号工作站的 TIC 色谱峰进行标注的方法予以详细说明, 希望对该型号工作站的初学者提供一定程度的帮助。

**关键词:** 气相色谱质谱联用仪; 数据工作站; 报告;

**中图分类号:** O657.7+1

**文献标识码:** B

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。色谱工作者在数据处理之后, 如果需要在谱图和打印报告中标识色谱峰名称, 可以参照本文执行操作。

当数据文件已经采集完成, 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”, 将需要处理的数据文件 (后缀为.qgd) 打开, 如图 1 所示。

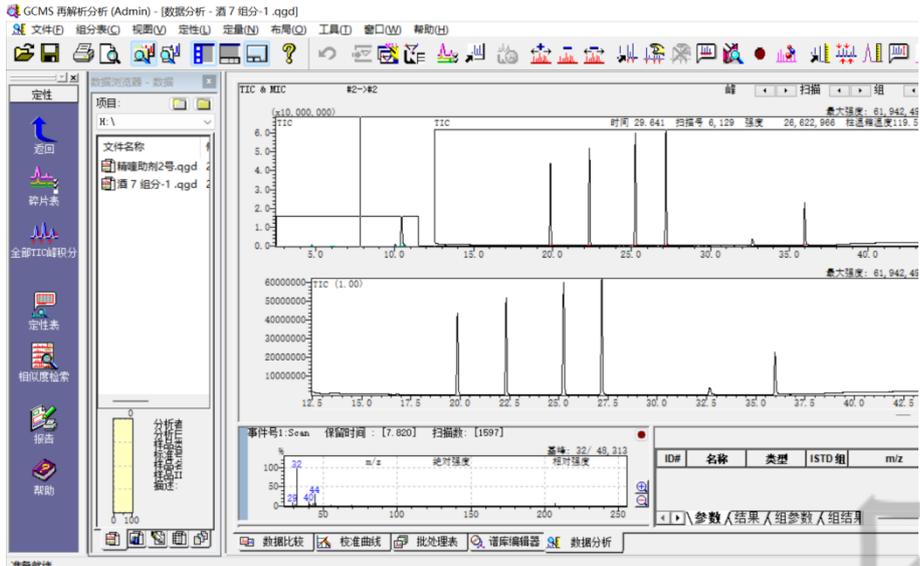


图 1 打开数据文件

## 2 TIC 色谱峰积分

点击 GCMSsolution 再解析模块“助手栏”中的“全部 TIC 峰积分”，将所有需要标注的色谱峰进行正确的积分，如图 2 所示。

图中选择了自动积分（峰高）方式，工作站系统自动将谱图中所有色谱峰的峰高最高的 5 个色谱峰予以积分。如果色谱质谱数据由分段程序采集获得，每个程序段中，均最多积分 5 个色谱峰，积分结果如图 3 所示。

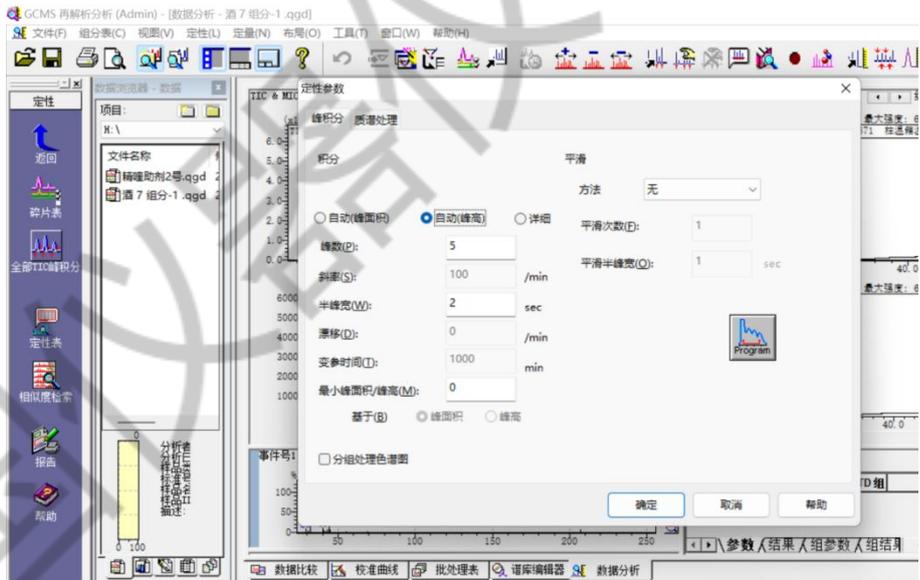


图 2 全部 TIC 峰积分参数

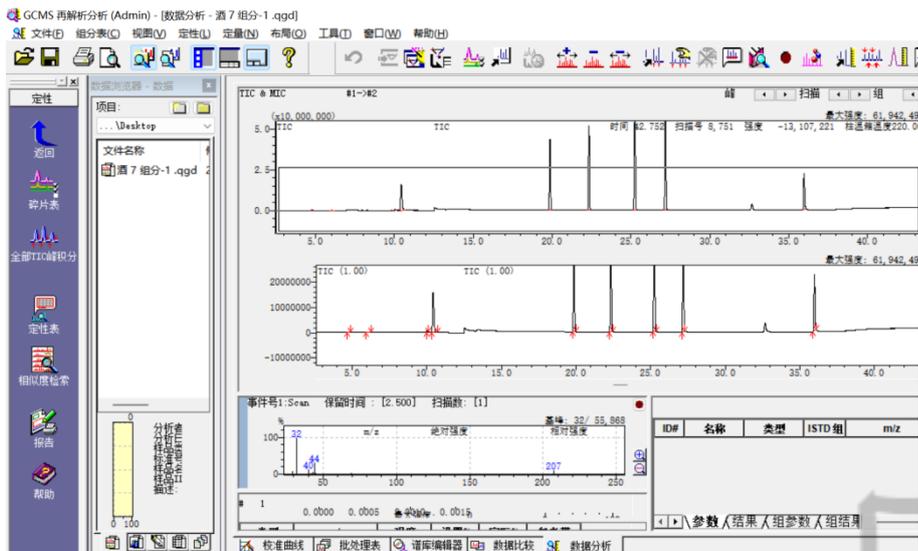


图3 谱图积分结果

### 3 编辑质谱处理表

点击 GCMSsolution 再解析“助手栏”中的“定性表”图标，并选择“TIC”标签，可以查看当前色谱图的各个色谱峰积分结果，如图4所示。

峰号	保留时间	开始时间	结束时间	m/z	峰面积	峰面积%	峰高	峰高%	A/H	标记
1	4.751	4.693	4.877	TIC	671627	0.05	126989	0.05	5.29	
2	6.019	5.923	6.240	TIC	181298	0.01	42499	0.02	4.27	MI
3	10.037	9.967	10.127	TIC	2963794	0.23	840487	0.33	3.53	
4	10.425	10.307	10.717	TIC	10306917	8.15	15819819	6.21	6.52	
5	19.862	19.760	19.980	TIC	20800550	16.45	43371374	17.02	4.80	
6	22.334	22.235	22.440	TIC	23724301	18.76	51516889	20.21	4.61	
7	25.245	25.130	25.360	TIC	30434930	24.06	59460552	23.33	5.12	
8	27.186	27.080	27.300	TIC	29516980	23.34	61444064	24.11	4.80	
9	35.972	35.880	36.110	TIC	11305396	8.94	22260235	8.73	5.08	

图4 TIC 色谱图积分结果

在 TIC 积分结果表中，点击“峰号”，可以全选该表格，此时点击右键，在弹出菜单中选择“注册到质谱处理表”，如图5所示。

峰号	保留时间	开始时间	结束时间	m/z	峰面积	峰面积%	峰高	峰高%	A/H	标记
1	4.751	4.693	4.877	TIC	671627	0.05	126989	0.05	5.29	
2	6.1			TIC	181298	0.01	42499	0.02	4.27	MI
3	10			TIC	2963794	0.23	840487	0.33	3.53	
4	10			TIC	10306917	8.15	15819819	6.21	6.52	
5	19			TIC	20800550	16.45	43371374	17.02	4.80	
6	22			TIC	23724301	18.76	51516889	20.21	4.61	
7	25			TIC	30434930	24.06	59460552	23.33	5.12	
8	27			TIC	29516990	23.34	61444064	24.11	4.80	
9	35			TIC	11305396	8.94	22260235	8.73	5.08	

图5 注册到质谱处理表

再点击“质谱处理表”标签，选中需要修改的组分行，点击右键，选择“编辑组分名称”，将预先已经检索好的各个色谱峰化合物名称输入，然后可以删除掉无用行，如图6所示。

也可以点击菜单栏中“相似度检索”-“检索所有行”，GCMsSolution 工作站将会自动检索所有组分，如图7所示（自动检索获得的组分名称来自质谱库，名称全部为英文，也可以通过右键-“编辑组份名称”功能，将其修改为中文名称）。

峰号	质谱			背景			检索	报告	事件	名称
	保留时间	开始时间	结束时间	保留时间	开始时间	结束时间				
1	6.017	6.023	6.020	5.923	6.240				1	乙醇
2	10.033	10.040	10.037	9.967	10.127				1	乙醇乙
3	10.420	10.427	10.423	10.307	10.717				1	甲醇
4	19.855	19.865	19.860	19.760	19.980				1	异丁醇
5	22.330	22.340	22.335	22.235	22.440				1	正丁醇
6	25.240	25.250	25.245	25.130	25.360				1	异戊醇
7	27.180	27.190	27.185	27.080	27.300				1	正戊醇
8	35.965	35.975	35.970	35.880	36.110				1	乙醇

图6 编辑组分名称

峰号	保留时间	开始时间	结束时间	峰面积	峰面积%	峰高	峰高%	A/H	标记
1	2.240								
2	1.127								
3	1.717								
4	19.800	19.800	19.800	19.700	19.980				
5	22.330	22.340	22.335	22.235	22.440				
6	25.240	25.250	25.245	25.130	25.360				
7	27.180	27.190	27.185	27.080	27.300				
8	35.965	35.975	35.970	35.880	36.110				

图7 自动检索所有行

质谱处理表编辑完毕之后，点击关闭，并保存此数据文件。

#### 4 在数据处理的 TIC 色谱图中中显示组分名称

在 GCMsSolution 的“定性”功能下的色谱图界面中点击右键，在弹出菜单中用鼠标左键

选择“属性”，如图 8 所示。

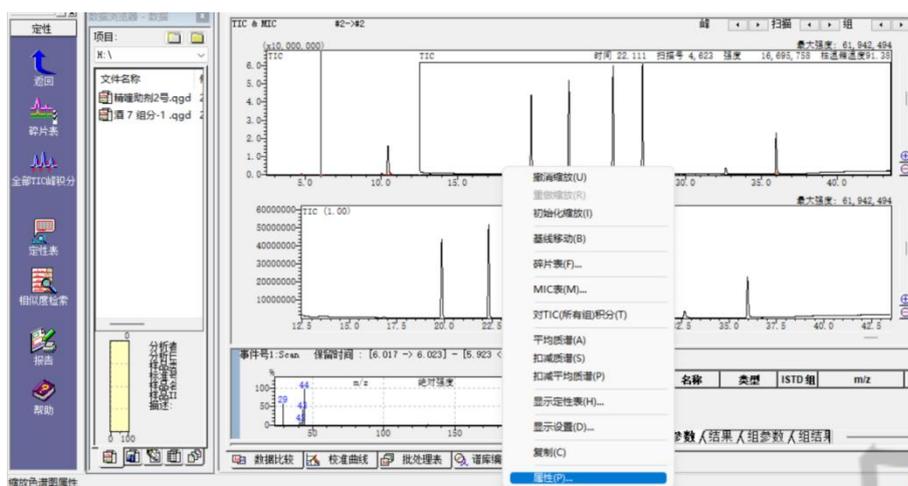


图 8 色谱图属性

在弹出的色谱图视图属性窗口中，勾选“化合物名称”和“质谱处理表化合物名称”，并点击“确定”，如图 9 所示。



图 9 色谱图视图属性

至此，所有目标化合物名称即可标注于色谱峰顶部，如图 10 所示。



图 10 色谱峰标注

## 5 在打印报告中标注组分名称

点击 GCMSsolution 助手栏中的“报告”图标，并编辑报告格式。

在报告模板中添加“色谱图”项目，如图 11 所示。

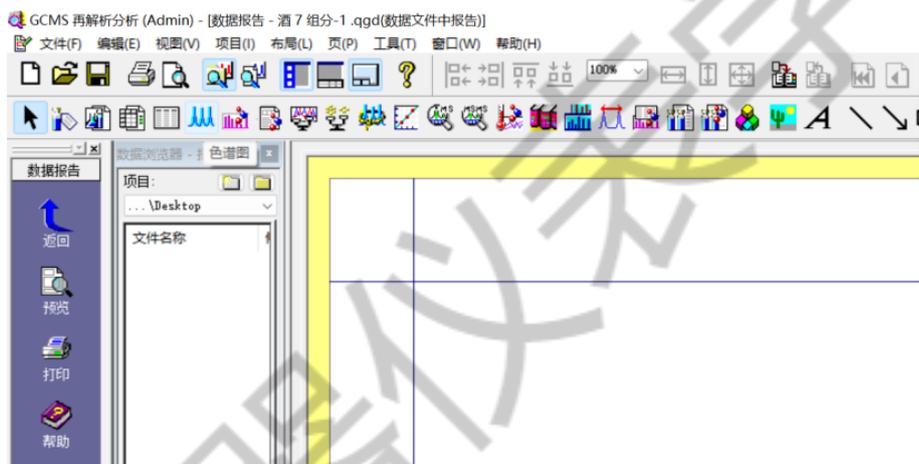


图 11 报告模板

双击刚添加的“色谱图”项目或者点击右键，在弹出菜单中选择“属性”，在 GCMS 色谱图属性页中勾选“名称”和“谱图表组分名”，如图 12 所示。



图 12 GCMS 色谱图属性

即可完成打印模板中的标注，如图 13 所示。

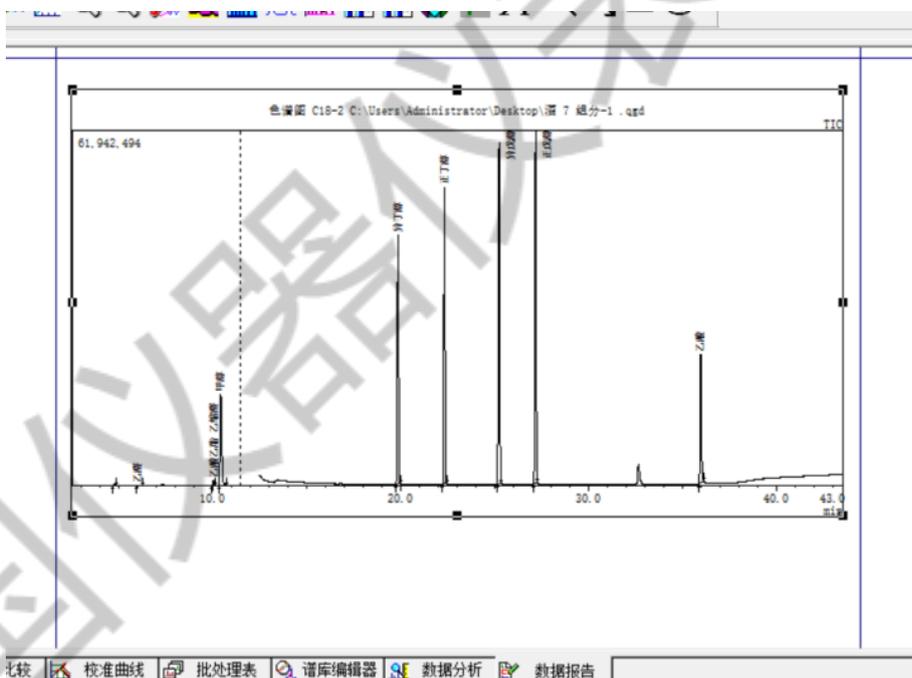


图 13 打印模板完成

## 6 小结

简述 GCMSsolution 工作站为目标色谱峰标注色谱峰名称的方法。