# 新手快速入门之如何在 CDS 软件中编辑 GCMS 采集方法?

刘炜

(富美实(上海)化学技术有限公司,上海 200000)

上一节我们学习了如何在 CDS 软件中进行 HPLC 方法参数的编辑,本节中主要学习如何进行 GCMS 采集方法编辑。GCMS 是由 GC 和 MS 两个部分组成,因此参数编辑也是独立的,GC 参数编辑在之前的章节中已经介绍过,这里就不再多赘述,有需要了解的小伙伴可以查看该系列之前发布的文章。

1 点击 Aq 界面上方菜单栏方法 Method, 进入方法参数编辑页面



# 4 进入质谱采集参数界面

我们首先要做的就是调谐文件选择,一般调谐文件默认是最近一次的 atune,如果有其 它需求,比如环境行业有 BFB 调谐和 DFTPP 调谐,可以调用对应的调谐文件来进行参数 采集。然后就是离子源和四极杆温度设置,这两个温度基本上就是默认,离子源 230℃, 四极杆 150℃。右侧的检测器设置中,质谱运行时间建议与程序升温运行时间一致,然后 溶剂延迟时间一般为 2~5 分钟,根据所测化合物的第一个出峰保留时间来进行调整优化。

General	<ul> <li>Method</li> </ul>	Tune File						Detector Settings				SIM Table				
Properties	Chromatograms	Tune fi	le	atu	atune			Run time (min)	10.0					PARA		
Instrument Setup	Timed Events	Tune ty	Tune type				So	Solvent delay (min)	3.0				And and	1		
Aglert 890 MSD	Iune     Autotuae     Autotuae     Autotuae     Autotuae     Autotuae     Costautotuae     Costautotuae     Costautotuae     Autotuae     Autot	Tune EM vo	M volts	885	885			Trace ion detection				Compound name	(m/z)	(ms)	Plot ion	
							Ele	Electron multiplier (EM) mode		•	•	Compound1	74.1	100		
			ce temperature (°C)	Act	ual	Setpoint	Ga	Gain factor Applied EM volts	1000	1						
		Source		230		230	- FN		200							
		Coad t	emperature ( 'c	150	150 150		Limit		Sum limit te							
		Time Segments						quisition type	SIM and Scar	SIM and Scan						
		Sc	scan time segments SMM Time Segments													
			Time S (min) (	tart mass	End mass (m/z)	Threshold	Scan speed	Frequency (scan/s)	Cycle time (ms)	Step size (m/z)						
			2 9	2	550	150	1.562 [N=2]	▼ 2.92	342.63	0.1						

增益因子默认为 1,如果想要提高出峰响应,可以将增益因子改大,但坏处就是 EM 电压会升高,相当于缩短电子倍增器来获得更高的响应值,响应足够的情况下不推荐更改。 另外的重要参数就是 m/z 扫描范围,扫描范围的设置根据你所测试的参数分子量,将测试 参数的分子量数值落在扫描范围内即可,阈值一般默认 150。如果你需要采用 SIM 模式, 那你首先需要在 SCAN 模式下确认每个化合物的出峰时间及定量离子,定性离子,然后再 去 SIM Table 中编辑采集参数。

### 5 色谱图部分主要勾选实时绘图

一个是总离子流图,另外一个是基峰图,勾选之后我们在软件采集 Aq 界面就能看到 实时在线图谱了。

#### Acquisition Method – Untitled



# 6时间事件这个功能主要是自定义一些内容

比如我们可以设置采集过程中某一时间段 MS 不采集数据,某一物质出峰时间段内提 高增益因子来获得更高响应,还有更改离子源温度等等,这个功能一般用不到。



老规矩全部编辑完成后选择另存为方法,在弹出的对话框内选择保存路径并输入方法 名称即可。以上就是如何用 CDS 软件编辑 GCMS 采集参数全部内容,剩下的一些功能都 是与调谐和维护有关,不属于采集参数编辑部分,这里就不多介绍,感兴趣的小伙伴们可 自行去点击查看。在下一节中我们分享如何使用 CDS 软件编辑 LCMS 方法参数。