

GCMSsolution 对未分离组分的定量操作方法

谯应召

(青岛科技大学, 山东 济南 250014)

摘要: 以 Shimadzu 的 GCMSsolution 工作站为例, 讲述 GCMS 未分离组分的定量处理方法

关键词: GC-MS;组分定量

1 情况简介

某用户使用 Shimadzu 的气相色谱-质谱联用仪 GCMS-QP2020 开展《HJ 639-2012 水质挥发性有机物的测定 吹扫捕集 气相色谱-质谱法》分析项目, 在方法开发时, 使用了较高的色谱柱温度和流量, 造成邻二甲苯和苯乙烯组分未完全分离, 在 TIC 图上只能观察到一个色谱峰, 观察苯乙烯和邻二甲苯的质量色谱图, 两个组份的保留时间差异较小, 如图 1 所示:

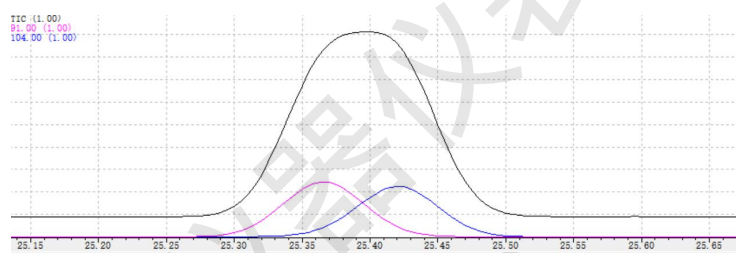


图 1 苯乙烯和邻二甲苯的合峰

与气相色谱方法不同, 只要具有不同的定量和定性碎片, 不能分离的组分采用 GCMS 方法是可以定量的。

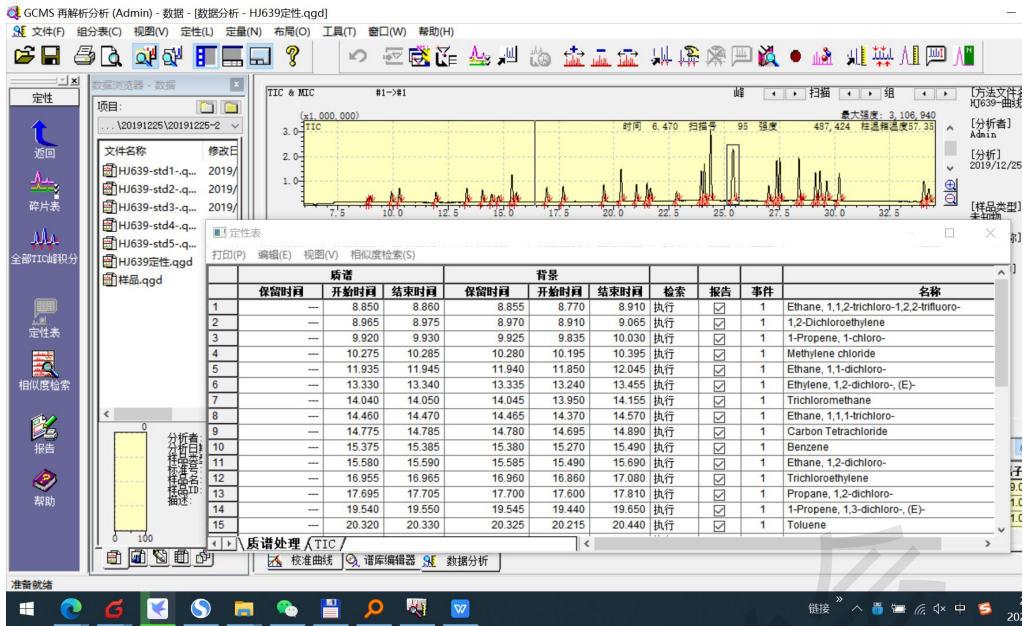
2 操作方法

下面以 Shimadzu 的 GCMSsolution 工作站为例, 讲述一下具体的定量操作方法。

2.1 积分并创建质谱处理表

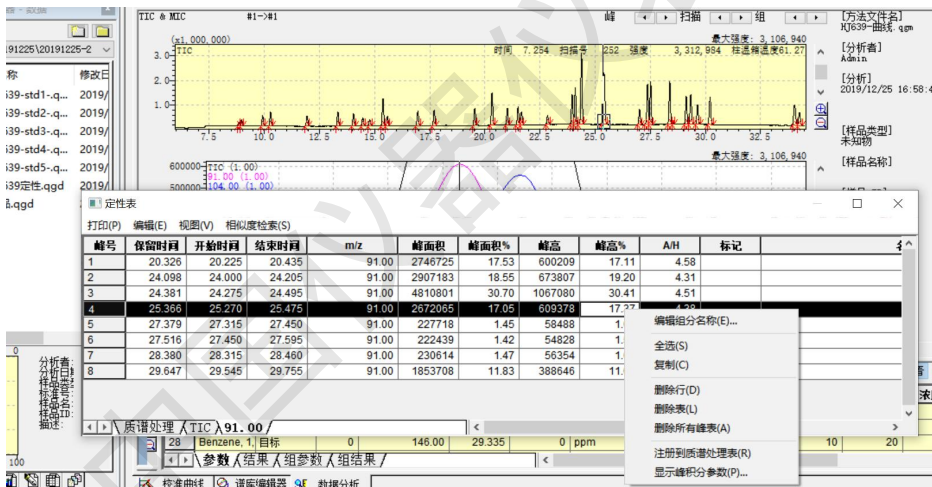
打开数据文件之后, 首先点击助手栏的“定性”图标, 再点击“全部 TIC 峰积分”图标, 选择合适的积分参数, 将全色谱图正确积分并创建质谱处理表。

然后将苯乙烯和邻二甲苯合峰在质谱处理表中删除。



点击“定性”菜单下“峰积分”选项，选择对应的质荷比，单独积分质荷比 91（邻二甲苯）和质荷比 104（苯乙烯）的两个质量色谱峰。

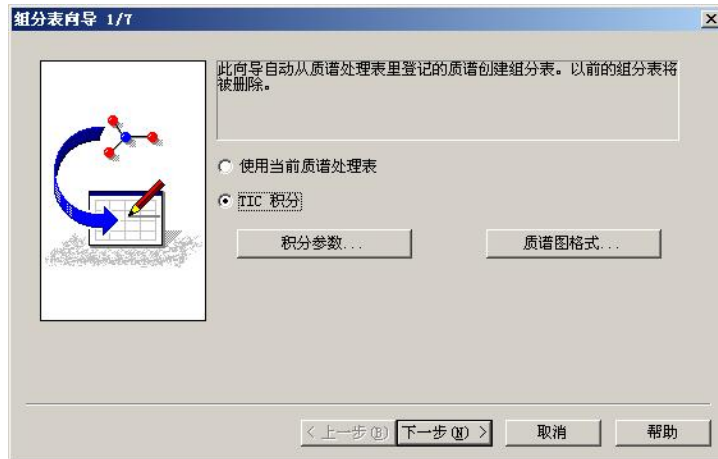
再点击“定性表”，选中积分到的色谱峰，点击右键，注册到质谱处理表中。



至此，质谱处理表建立完毕。

2.2 创建定量方法

点击助手栏中的“创建组分表”图标，再点击“向导（新建）”，编辑组分表：

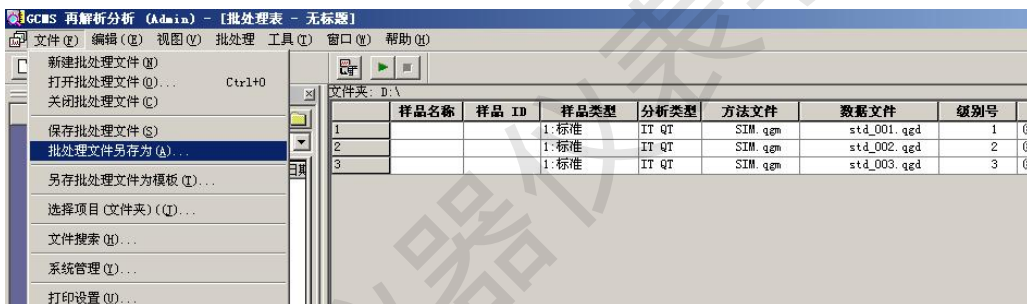


注意此图中选择“使用质谱处理表”，最终完成向导并保存成方法文件。

加入标准品数据文件

可以用“批处理”模块或者“标准曲线”模块将数据添加至刚刚保存的方法文件中。

批处理法需要建立如下图所示的批处理表，也可以将待测样品数据一并加入。



最后，点击“批处理”开始，即可获得标注曲线和待测样品的定量结果。

