

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。

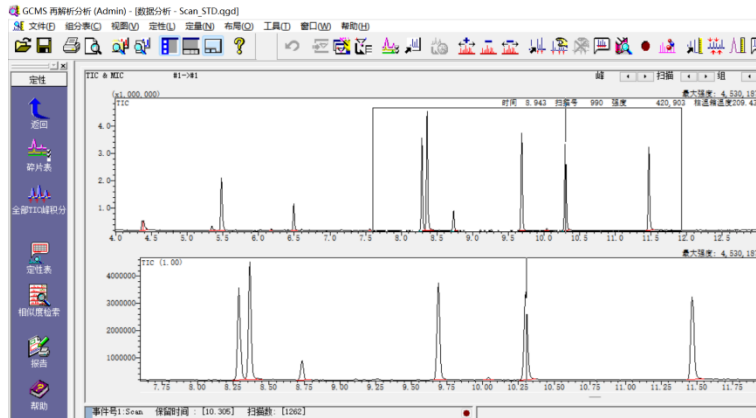


图 1 打开数据文件

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。

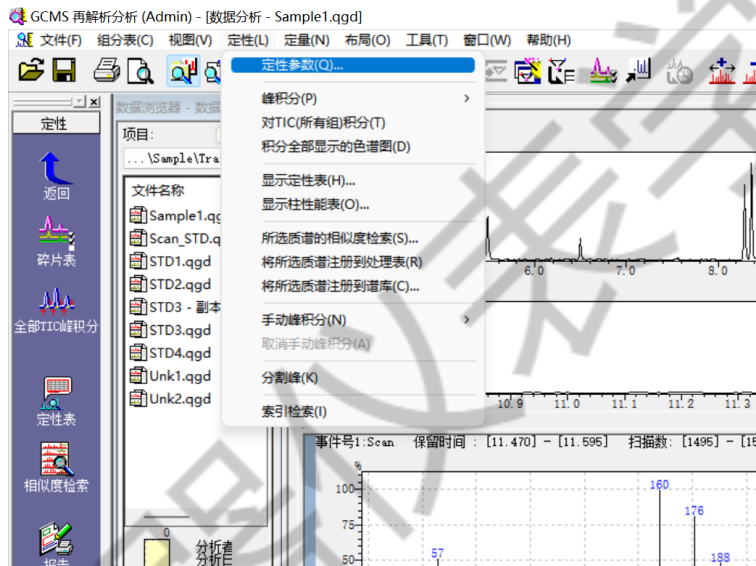


图 2 定性参数

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。