

岛津色谱质谱数据工作站质谱库基本操作

谯应召

(青岛科技大学山东化工研究院, 山东 济南 250014)

摘要: GCMSolution 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质谱库相关操作时, 相关的功能和参数较多, 细节问题较多。本文对质谱库相关操作的具体步骤, 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; 质谱库; GCMSolution; 参数

中图分类号: O657.7+1

文献标识码: B

GCMSolution 工作站自带有质谱谱库编辑器, 可以进行质谱库内容查阅、用户自建谱库等功能, 不需要调用其他第三方软件, 操作方法较为简易。

Shimadzu 的 NIST 谱库安装光盘中也保存有 AMDIS、MS Seach、MS Interpreter 等工具, 也可以进行质谱数据的处理, 不过预先需要将岛津的质谱数据另存为 AIA 格式。

1 质谱库的安装

GCMSolution 工作站支持 NIST/EPA/NIH 或其他商用质谱库 (例如 Wiley 质谱库), 在预先已经安装 GCMSolution 工作站的电脑上, 运行 NIST 安装光盘内的 setup 程序, 系统自动弹出“Nist Library 安装向导”界面, 并自动完成安装操作, 如图 1 所示。

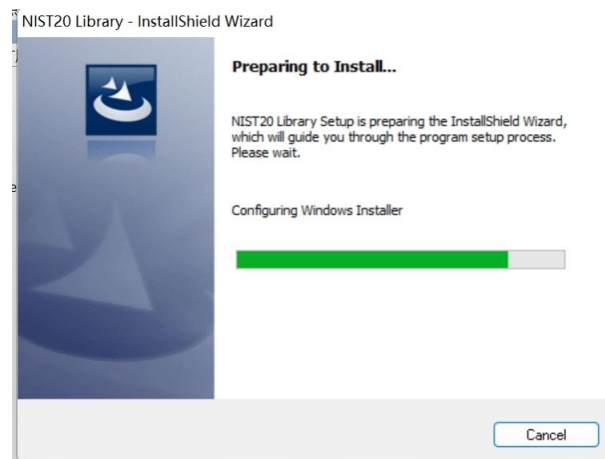


图 1 Nist Library 安装向导界面

NIST 质谱库由 24 个文件组成，分别隶属于 NIST20-1、NIST20-2、NIST20s 三个子库，所有文件均安装在 C:\GCMS\Solution\library 目录下。分子量小于 500 的化合物信息存储于 NIST20-1 子库中，分子量大于 500 的化合物信息存储于 NIST20-2 子库中，每个化合物对应一张质谱图，作为标准质谱图。其他来源的质谱图作为补充，存储于 NIST20s 子库中。

谱库文件后缀的意义如下所示：

NIST20-1.LIB	存储 NIST 谱库首要信息，包括化合物分子量、化合物信息、CAS 号。
NIST20-1.FOM	存储化合物分子式
NIST20-1.SPC	存储化合物质谱图
NIST20-1.NAM	存储化合物名称
NIST20-1.STR	存储化合物结构图
NIST20-1.NCV	存储化合物索引
NIST20-1.ADD	存储化合物谱图信息
NIST20-1.C2S	存储化合物在不同子库之间的索引

2 质谱库内容检索

在日常 GCMS 分析中，可以通过质谱库的检索，获取待测组分的特征离子、保留指数等质谱信息，可以提高分析效率。

例如色谱工作者在进行复杂色谱图的某组分定性操作时，可以首先查阅到目标组分的特征离子，叠加显示于 TIC 色谱图上，那么可以预先缩小相似度检索的范围，以提高工作效率。或者筛选掉相似度检索给出的明显不合理结果，例如 TIC 色谱图中保留时间较短的组分色谱峰，相似度检索返回了保留指数较大结果，显然是不合理的，可以将此条候选记录筛选掉。

2.1 质谱库内容检索的操作步骤：

1 运行 GCMS\Solution 再解析，点击“助手栏”中的“谱库编辑器”图标，如图 2 所示。

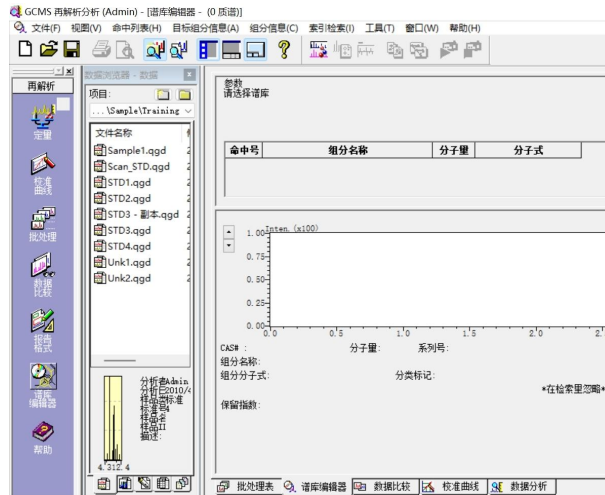


图2 谱库编辑器

然后点击“文件”-“打开谱库文件”，选择合适的质谱库，如图3所示。

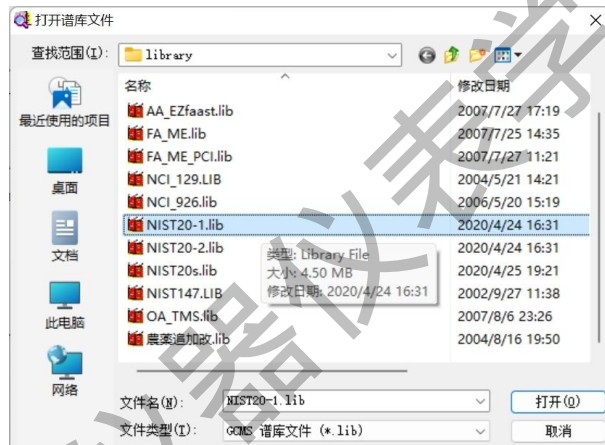


图3 选择质谱库

在工作界面的“索引”列中，选择合适的索引，例如“分子式”，如图4所示。

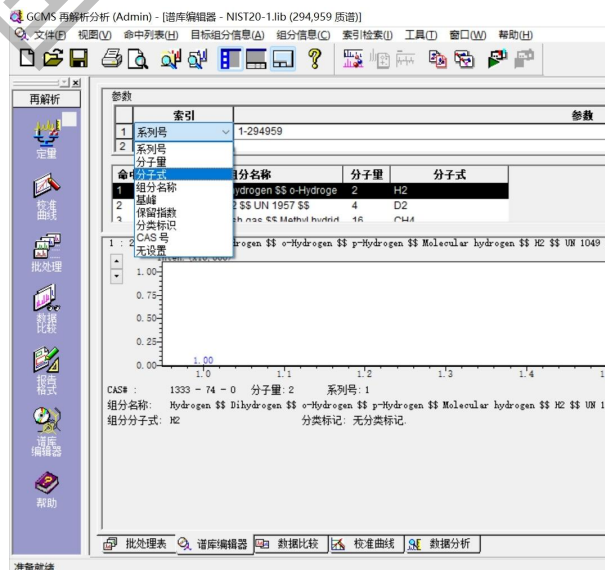


图4 选择索引

在工作界面的“参数”列中，输入需要检索物质的分子式（以乙醇为例，输入 C2H6O，需要注意字符的大小写），如图 5 所示。



图 5 输入分子式

点击“开始索引检索”按钮，工作站将给出乙醇的质谱信息，包含质谱图、结构式、CAS 号、英文名称、保留指数、分子量等信息，如图 6 所示。

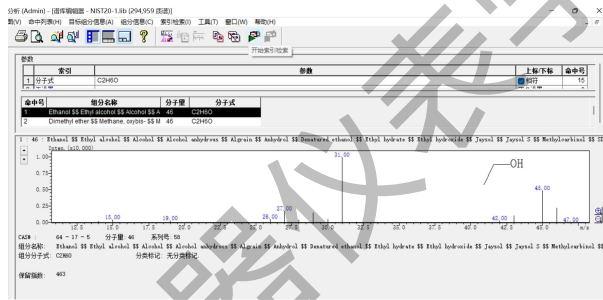


图 6 索引检索结果

3 用户自建质谱库

点击 GCMSolution 再解析部分“辅助栏”中的“谱库编辑器”，点击“文件”-“创建个人谱库”，并命名和保存，如图 7 所示。



图 7 新建质谱库

这样就建立了用户质谱库，谱库内无质谱记录。可以用两种方法，向该质谱库中添加记录。

3.1 从其他谱库复制

打开其他质谱库文件，在该谱库中点击需要导入自建库的化合物记录，工作界面中出现该物质的质谱信息。

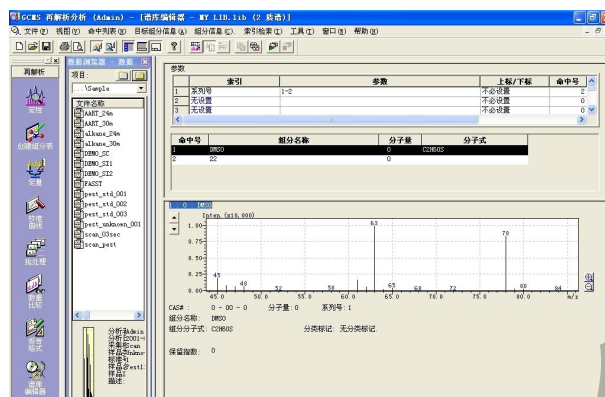


图 8 其他质谱库

在该物质的质谱图中点击鼠标右键，弹出菜单中选择“复制到其他谱库”，如图 9 所示。

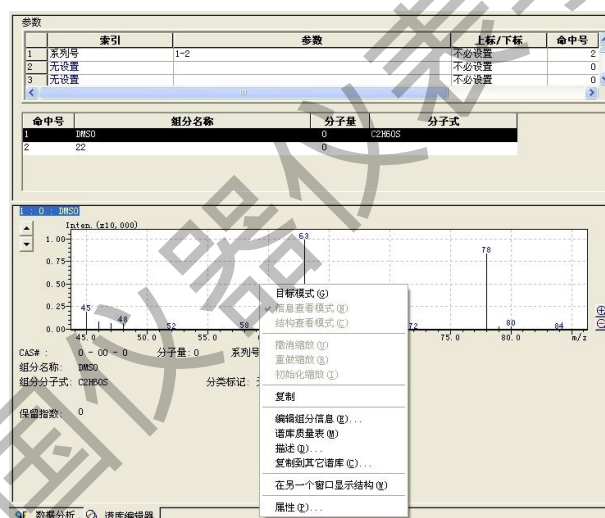


图 9 复制到其他质谱库

弹出界面中，选择“自检质谱库”，该条记录被加入到自建质谱库中，如图 10 所示。



图 10 选择自建质谱库

3.2 从数据文件提取质谱

打开 SCAN 方式采集到的数据文件，双击目标组分色谱峰，并进行质谱背景扣除，获取最终的目标组分质谱图，如图 11 所示。

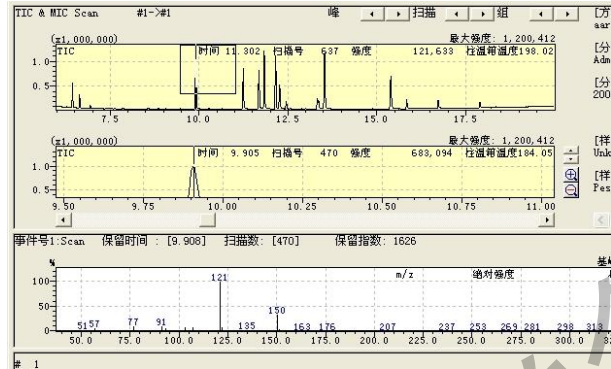


图 11 获得目标组分质谱图

点击 GCMSolution 再解析菜单栏中的“定性”，选择“注册当前质谱到谱库”，如图 12 所示。

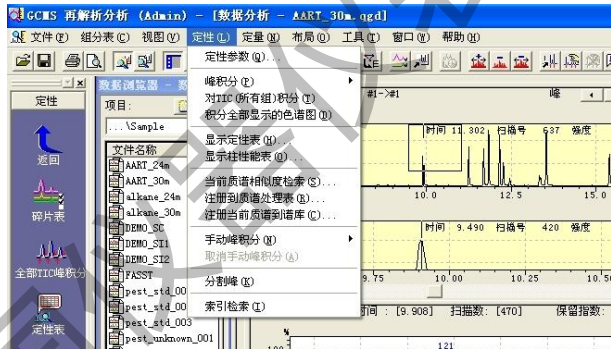


图 12 注册到谱库

在弹出界面中，选择需要导入的自建质谱库，如图 11 所示，该质谱信息将被记录到自检质谱库中，并在弹出的界面中编辑组分信息，如图 13 所示。

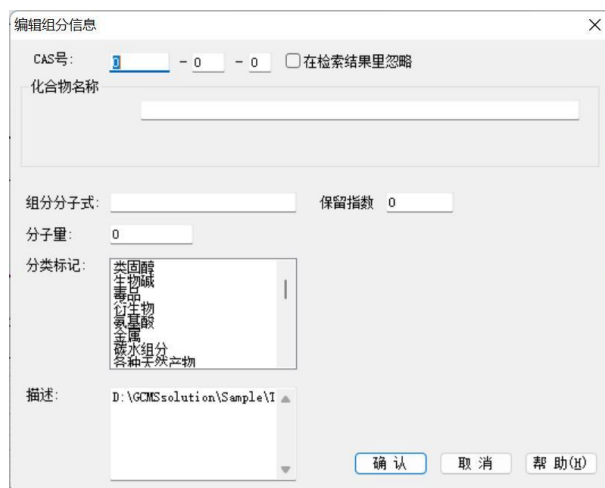


图 13 编辑组分信息

4 自建库中记录的忽略

严格说来自建谱库的内容是只读的，不可以删除。但是可以设定将某条记录在检索中隐藏。

打开自建质谱库后，点击“文件”-“删除检索结果中忽略的组分”，该条记录将不再会被检索到，如图 14 所示。

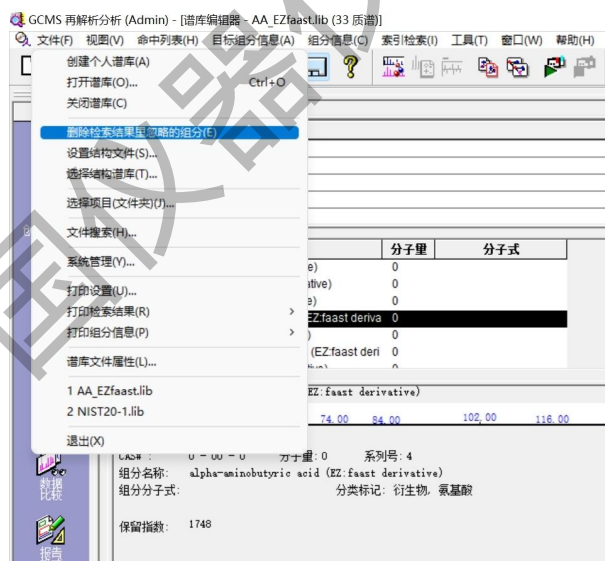


图 14 忽略记录

5 小结

简单说明 GCMSsolution 的质谱谱库操作方法。