

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。

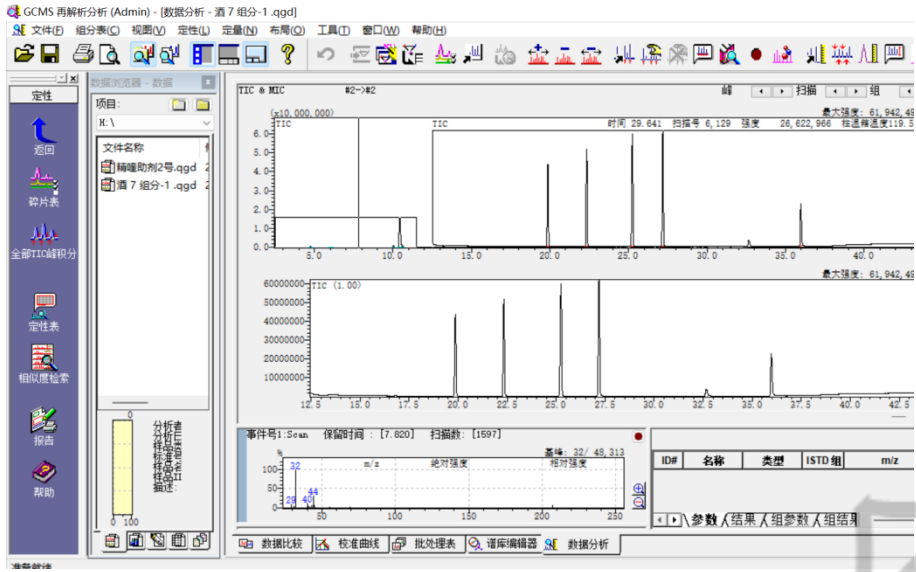


图 1 打开数据文件

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。

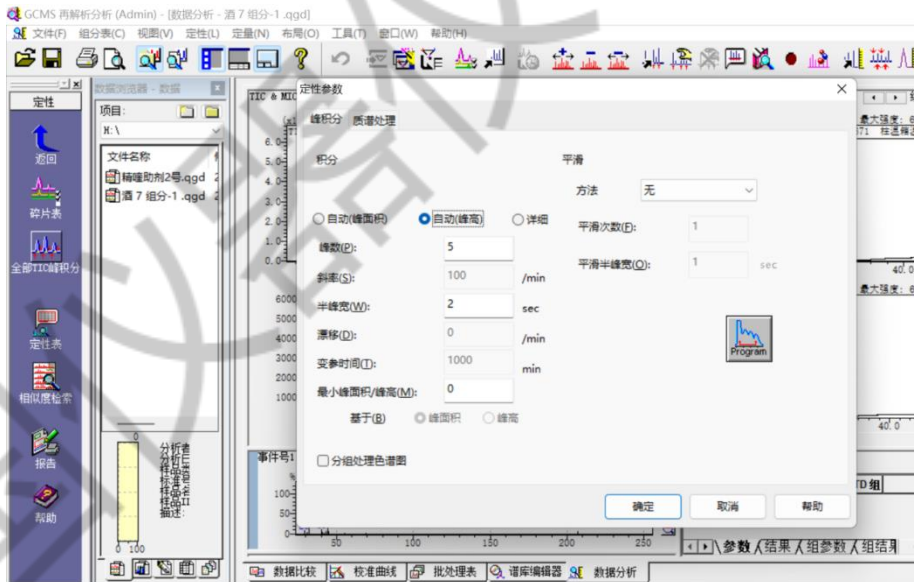


图 2 全部 TIC 峰积分参数