

气相色谱质谱仪
GCMS-QP2010 Plus

系统用户手册
(适用于 **GCMSsolution 版本 2.5**)

使用产品前请仔细阅读本说明书。请妥善保管本说明书以备今后参考。

 **SHIMADZU CORPORATION**
KYOTO JAPAN

ANALYTICAL & MEASURING INSTRUMENTS DIVISION

© 岛津公司 2001-2007。保留所有权利。未经岛津公司书面许可，不得以任何形式复制本出版物的全部或部分。

使用前，务必阅读和理解本操作手册。妥善保存本操作手册。

本出版物的内容可能会有改变，恕不另行通知，供应商也不承担任何义务。

尽管在本出版物制作过程中非常小心，但如发现本出版物任何差错或遗漏，岛津将尽快修正，但不一定在发现后立即修正。请通知我们任何差错或遗漏，在此深表谢意。

Microsoft® Windows® 是微软公司的注册商标。

Microsoft® Windows®2000 和 Windows®XP 是微软公司的商标。

Adobe®、Acrobat® 和 Distiller® 是 Adobe Systems Incorporated 的注册商标。

Acrobat Reader™ 和 Acrobat PDFWriter™ 是 Adobe Systems Incorporated 的商标。

保证信息

感谢您购买 GCMS-QP2010 Plus。
岛津公司对本产品提供了以下保证。

1. 保证期限 自首次使用日（仅限国内使用）算起一年时间，或机械泵或涡轮分子泵维修或检修结束后算起 6 个月时间。

2. 条款 保修期内，如果仪器出现品质故障，厂商将提供免费的更换部件、免费维修。

3. 不在担保之列的项目

保证书的内容不包括下述因素所引发的故障：

- a) 使用不当；
- b) 由岛津公司技术支持部门之外的其他公司所做的维修或改动；
- c) 外部因素；
- d) 苛刻条件下的操作，如：具有高温、高湿度、腐蚀性气体及振动等影响因素的环境；
- e) 火灾、地震或其它自然力；
- f) 初次安装后进行迁移或运输；
- g) 保证书不包括消耗品或消耗性部件的更换。



注

磁盘、CD-ROM 及其他记录媒体被认作消耗性部件。

© 2001-2007 岛津公司

更换部件的可用性

本产品停产后，提供为期七 (7) 年的部件更换服务。此后，可能终止提供此类部件。

请注意，岛津公司并不生产仪器的某些部件。关于这些部件，在收到产品停产通知后，我们将对上述期限内的部件用量进行估算，并保证一定的库存量。然而，由于估算不当或部件供应商的控制，那些非岛津公司制造的部件在本品停产后的 7 年时间内可能不再供应。

安全操作注意事项

气相色谱质谱仪是一种用于定性和定量分析的分析仪器。

注意以下各点，促进仪器的安全操作。

1. 仅使用本仪器进行特定类型的分析。
2. 执行本操作手册中规定的步骤。
3. 严格遵守所有警告和注意事项。
4. 未经岛津公司授权代表书面许可，不得拆装或改装本仪器。
5. 有关维修或维护事宜，请联系岛津公司代表。



注

以下对警告、注意事项及其他相关项目进行了说明：



警告

表示潜在的危险情况，如果不能避免，可能导致严重的人身伤害甚至死亡。



注意

表示潜在的危险情况，如果不能避免，可能导致轻度至中等程度的人身伤害或设备损坏。



注

强调说明的附加信息，这些信息是为了确保产品的正确使用。



注

在本手册和仪器中，我们使用了下列符号。



表示具有高压危险。



表示高温组件危险。



参考用户手册以获取有关搬运或操作方面的详细信息。



警告

擅自对设备进行维修有危险。如果需要服务或修理，请联系受过特殊培训的岛津公司工程师。



警告

不要擅自拆卸或改动仪器，否则将引发安全危险。



警告

请阅读本手册以了解如何安全维护和操作仪器，并遵守所有规定的流程。
不按规定操作将会发生危险。

安装现场注意事项



气相色谱质谱仪所使用的溶剂可燃而且有毒。仪器要安装在通风良好的室内。否则，溶剂挥发出来的蒸气可能会引发中毒、或者燃烧并引发火灾。
不要在含有可燃气体的地方使用此仪器，否则，仪器可能会引燃可燃气体并引发火灾。



不要将可燃物放在仪器后面的柱箱排风口附近，否则，它们可能会燃烧并引发火灾。



实验台或者用于安放仪器的其他表面应该保持水平、稳定而且具有足够的强度来支持仪器的重量。否则，仪器可能会倾倒或者从表面掉落。



不要将仪器安装在腐蚀性气体或者过多灰尘的地方。否则，会影响仪器性能并导致使用寿命缩短。

安装注意事项



警告

仪器的安装和设置必须由岛津公司工程师进行。为了避免不必要的伤害，如果仪器安装完毕需要移动，请与岛津公司代表联系。

电源

电源要求

对于 100 V - 115 V 型号

单相交流电，频率 50 - 60 Hz

GC:	1800 VA
MS:	1000 VA
计算机（包括 CRT 显示器）:	参见计算机使用手册。
打印机:	参见打印机使用手册。

对于 220 V - 240 V 型号

单相交流电，频率 50 - 60 Hz

GC:	2600 VA
MS:	1000 VA
计算机（包括 CRT 显示器）:	参见计算机使用手册。
打印机:	参见打印机使用手册。



警告

本仪器一定要使用带有断路器的专用电源。不要与其他仪器共用一个电源。不要使用随仪器自带电源线之外的电源线，否则将会引发火灾或导致触电。

- 请注意，额外的选件将会增加所需的电流量。



警告

仪器要接地。在发生意外或电路短路时，接地能够有效地防止触电。接地极应该在 100 Ω 或以下。



警告

不要在电缆上放重物，避免让热的物品靠近电缆。不要过度弯折或者拉伸电缆。一旦电缆被损坏，将引发火灾或者导致触电。如果电缆被损坏，请与岛津公司联系。

周围环境

温度：18 - 28 $^{\circ}\text{C}$ ，并且应保持温度恒定（规格担保范围）；15 - 35 $^{\circ}\text{C}$ （运行担保范围）
湿度：40 - 70 %（避免冷凝）



注

安装现场应该尽量避免诸如尘土、振动、噪音、腐蚀性气体和磁场这样的不利因素。为了保证仪器的良好性能，请注意下列规定。

1. 使用过程中尽量避免温度波动。
2. 不要将仪器暴露在冷空气或热空气中。
3. 避免太阳光直射。

虽然此仪器可以在工作担保范围内使用，但在规定担保范围之外过度使用也会导致仪器使用寿命缩短这样的问题。

气体

载气：氦气

供应压力：300 - 980 kPa

纯度：99.995 % 或更高

- GC 压力和流速设定范围随供应压力而变化。通常，供应压力必须达到 700 - 800 kPa。
- 某些可选附件可能需要上述规定气体之外的其他气体。更多信息，请参考随附件所带的用户手册。
- 某些应用（比如农用化学品分析）可能需要更高纯度 (99.999 - 99.9999 %) 的氦气。



必须采用至少具有上述纯度的氦气作为流经气体管道的载气。如果使用纯度低于上述规定的载气，可能会影响仪器性能。更多信息，请参考章节 2.3 “气体要求”，第 13 页。



只能使用氦气作为载气。
使用其他气体可能会引发危险。

高压气注意事项



使用高压气瓶供应载气。操作气瓶时，须严格遵守以下建议。

1. 将气瓶安置在仪器安装地点以外的通风区域内。避免太阳光直射。使用管线把气体从气瓶输送到仪器。关于可燃性气体的使用，必需严格遵守相关法规。
2. 气瓶温度绝不能超过 40 °C。气瓶附近两米之内不能有明火。
3. 选择通风条件好的地点安装仪器，将气体泄漏检测纳入年检程序。当使用高度可燃的气体（例如，乙炔和氢气）或者具有潜在可燃性的气体（例如氧气和一氧化氮）时，仪器 5 米以内不能吸烟，也不允许存在明火。安装并维护有效的灭火器。
4. 用锁链或其他方式固定气瓶，防止滑落。
5. 气体使用结束，须立即关闭主要的气瓶阀门。
6. 每隔 3 个月，至少对压力计进行一次检查，以确定其是否能正常工作。
7. 提供警告标志（胶接铝牌），提示氢气的使用。有关详细信息，请向岛津公司授权代表咨询。免费提供必须安装的警告标志。

经法律授准，方可使用 300 m³ 或更大容量的气瓶。

详细信息，请查阅相关法规。

操作注意事项



警告

对溶剂进行处理时，始终要戴护目镜。如果溶剂进入眼睛，可能会导致失明。一旦溶剂进入眼睛，请立即用大量清水冲洗，并寻求医护治疗。



警告

注射样品时一定要戴护目镜，以防止与注射器有关的机械伤害或溶剂溅入眼睛等危险。进样口通常都有几百千帕的压力来保证载气进入色谱柱。因此，将液体样品注入注射器时，活塞可能从注射器管上脱落，或者，液体会发生反向运动，造成样品喷射。而且，当注入大量样品液体时，进样隔垫会以更快的速度坏掉，样品可能从进样口射出。



警告

不要将溶剂放在靠近计算机、打印机或其他仪器的地方，否则，可能造成火灾或仪器损坏。



警告

不要在靠近仪器的地方使用易燃喷雾剂（发胶、杀虫喷雾剂等等），以防止这些喷雾剂发生燃烧并引起火灾。

有关仪器检查、维护、调整和转移的注意事项



为了防止造成人员伤害或者仪器损坏，请不要对仪器进行拆卸或者改动，或者擅自进行维修。



如果电缆变脏，将插头从插座拔下，然后用干布擦去灰尘。如果灰尘积累过厚，可能会造成火灾。



清洁仪器表面时，用柔软的布片蘸水或中性清洁剂进行清洁。然后用干净布片擦干。



建议对机械泵和涡轮分子泵定期进行维护。有关维护时间间隔，请参考各自的使用手册。

警告标签



注意

不要阻塞排气口

不要在仪器顶端放置任何东西，否则可能会阻塞排气口，造成仪器过热。

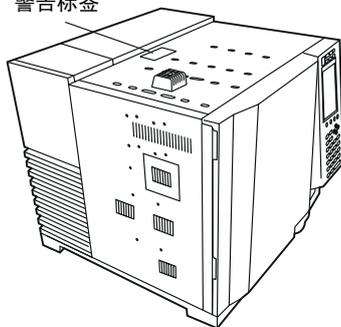


警告

不要用手触摸

进样口、监测器和顶盖温度很高。

警告标签

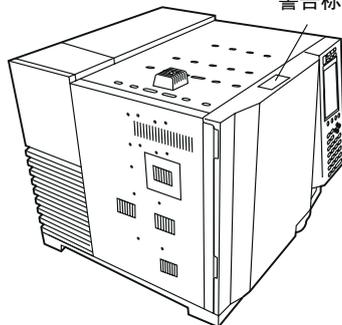


警告

氢气使用注意事项

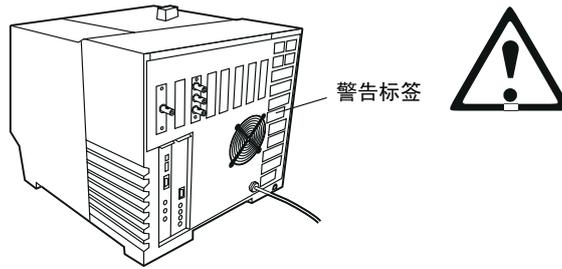
切断氢气，将未使用的色谱柱接头盖上盖，防止氢气在色谱柱温箱聚集并引发爆炸。

警告标签

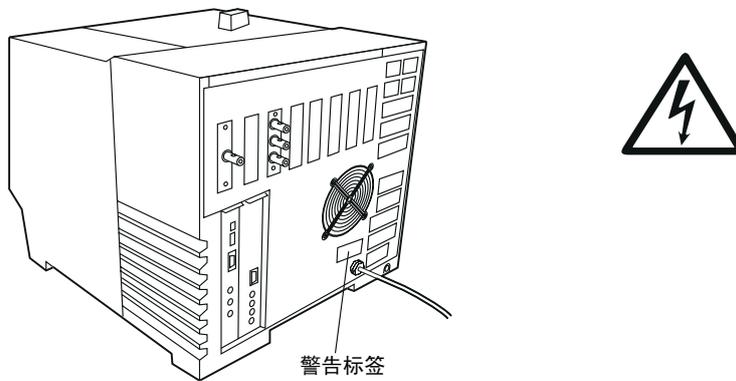




排气口非常热
将温度敏感材料远离出口。



高压
取下盖子之前先断开电源线。有关维修事宜，请求助于专业维修人员。





警告

氢气使用警告

使用氢气时，一定要小心，以防止发生意外。

1. 正确连接输气管道。不要将氢气管道连接至进气口，否则，氢气会大量泄漏。
2. 设备不用时，应该关闭氢气瓶主阀门。此外，还应该保证气体不会从气源主阀门泄漏。
3. 每次使用时，都要对氢气气流管道进行检查，看是否发生泄漏。
4. 当发生氢气泄漏时，为了防止氢气浓度达到爆炸浓度，应该对设备所在的房间进行通风。
5. 分析完成，在开展其他操作之前，应立即关闭氢气瓶主阀门。

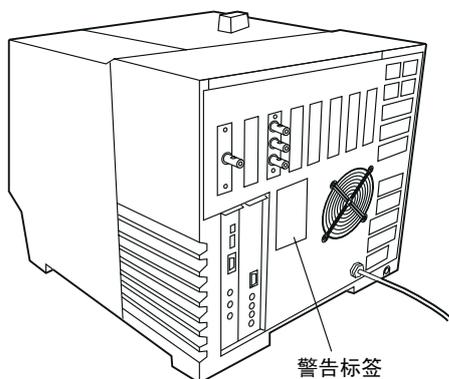


注意

连接气体管道时的注意事项

当压力超过规定值时，会损坏压力调节器。

不要超过 800 kPa 的最大气源压力或操作手册中规定的最大压力。

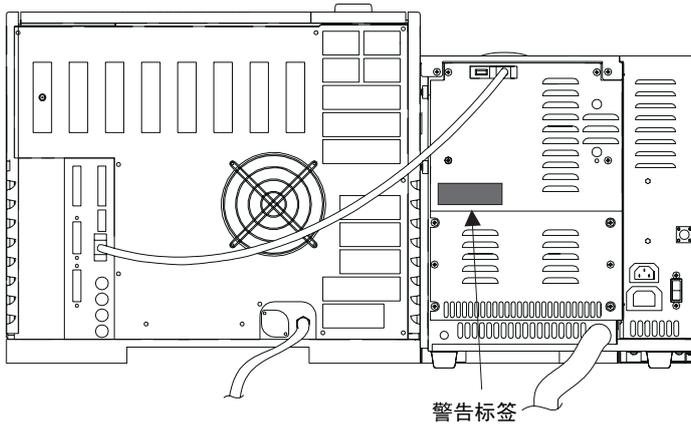




警告

高压

不要开启盖子。危险！高压可能会造成电击。



警告标签



应急处理

一旦出现紧急情况，如气相色谱质谱仪出现故障，请采用以下措施应急。

重新使用仪器之前，应该采取充分的预防措施，并且，在必要的情况下，联系岛津公司代表。

发生紧急情况时 ...

1. 关闭气相色谱和质谱仪。
2. 关闭所有附件。
3. 关闭所有载气和气体管道阀门。
4. 切断电源。
 - 如果电源线连接在配电板上，关闭配电板。
 - 如果电源线连在插座上，将电源线从插座上拔下。

环境措施



WEEE 标记

致欧盟所有岛津设备用户：

带有这种标志的设备均出售于 2005 年 8 月 13 日或之后，这就意味着，这些设备均不得作为普通家庭垃圾处理。注意，本设备仅供业内 / 专业人员使用。

设备达到使用期限后，请联系岛津公司技术部门。他们会就设备收回事宜向您提供建议。

与您携手，我们将共同致力于防治电子废品及电器设备的污染，通过回收和循环利用，保护自然资源。有关详细信息，请联系岛津公司技术部门。

简介

感谢您购买 GCMS-QP2010 Plus 仪器。请在使用仪器之前仔细阅读此用户手册，以便使仪器发挥最佳性能并充分利用仪器的功能。

本操作手册要求用户必须学会使用 Windows。有很多与 Windows 相关的功能和术语，如果需要，请参阅《Windows 用户手册》。没有使用过 Windows 的用户，请在使用本操作手册前详细阅读《Windows 用户手册》。

使用本手册

使用前，务必阅读和理解本操作手册。将本手册保存在随时可供翻阅的地方。

窗口和对话框名称都采用斜体。

菜单名称和命令，以及辅助栏图标名称都以黑体显示。

菜单顺序按照菜单名称（或项目名称）排列，后面跟一个“>”，然后是项目名称（或子菜单名称），如下面的例子所示：

主菜单项目 > 子菜单项目 > 所选菜单项目

开始 > 设置 > 控制面板

文件 > 打印

当菜单顺序通向某个带有标签的对话框时，供选择的标签以同样的方式显示：

方法 > 设置参数 > 一般标签

有关本指南和操作指南等的 PDF 版本应该放在您电脑的“GCMSsolution\Manual”文件夹中。必要时请参考这些文件。

目录

前言	i
保证信息	i
更换部件的可用性	ii
安全操作注意事项	iii
安装现场注意事项	v
安装注意事项	vi
电源	vi
周围环境	vii
气体	viii
高压气注意事项	ix
操作注意事项	x
有关仪器检查、维护、调整和转移的注意事项	xi
警告标签	xii
应急处理	xvi
环境措施	xvii
简介	xviii
使用本手册	xviii
目录	xix
1 概述	1
1.1 GCMS-QP2010 Plus	1
1.2 特性	2
1.3 部件名称	3
1.3.1 GC/MS 分析系统	3
1.3.2 GCMS-QP2010 Plus 离子源	5
1.3.3 机械泵	6
1.4 标准附件	7
1.5 软件概述	8
1.6 软件操作流程	9
2 基本操作	11
2.1 简介	11
2.2 GC 基本知识	12
2.2.1 仪器参数	12
2.2.2 进样口说明	12
2.3 气体要求	13
2.4 仪器启动与关闭	14
2.4.1 启动仪器	14
2.4.2 关闭仪器	26
2.5 日常启动与关闭	27
2.5.1 日常关机	27
2.5.2 日常启动	29
2.6 色谱柱更换	30
2.6.1 关闭真空系统	30
2.6.2 更换色谱柱	31
2.7 系统配置	39
2.7.1 系统配置	39
2.8 系统检查与调谐	41
2.8.1 系统检查	41
2.8.2 调谐	54
2.8.3 高质量数的调整	58
2.9 一般操作	60

2.9.1	管理文件	60
2.9.2	打开和保存文件	63
2.9.3	使用帮助	65
2.9.4	系统管理概念	67
2.9.5	系统管理	70
2.9.6	模板	80
3	数据采集	83
3.1	概述	83
3.1.1	“采集方法建立”窗口	83
3.1.2	“数据采集”窗口	84
3.1.3	助手栏	85
3.1.4	数据采集整个流程	86
3.2	方法建立参数	88
3.2.1	仪器参数	88
3.2.2	进样器（自动进样器）标签	89
3.2.3	GC 参数（GC 标签）	91
3.2.4	MS 参数（MS 标签）	95
3.3	单次运行设置	102
3.3.1	“样品登录”对话框	102
3.4	数据采集	105
3.4.1	待机	105
3.4.2	开始	105
3.4.3	数据分析	106
3.4.4	停止	106
3.5	仪器监视器	107
3.5.1	仪器监视器	107
4	定性分析	109
4.1	概述	109
4.1.1	“定性数据分析”窗口	109
4.1.2	定性分析步骤	110
4.2	显示质谱	112
4.2.1	显示质谱	112
4.2.2	谱图平均与背景处理	113
4.2.3	显示质谱计算结果	114
4.3	峰积分	116
4.3.1	手动峰积分	116
4.3.2	自动峰积分	118
4.3.3	处理	125
4.3.4	通过批处理进行峰积分	127
4.4	相似度检索	128
4.4.1	所显示质谱图的相似度检索	128
4.4.2	差减质谱图的相似度检索	130
4.4.3	指定谱库质谱	131
4.5	打印结果	132
4.5.1	色谱图和质谱	132
4.5.2	相似度检索结果	132
4.5.3	定制报告	133

5	定量分析	135
5.1	概述	135
5.1.1	“再解析”窗口	135
5.1.2	定量分析步骤	139
5.2	组分表	141
5.3	创建校准曲线	147
5.4	进行定量并确认结果	149
5.5	相似度检索	153
5.5.1	化合物的相似度检索	153
5.5.2	执行差减结果相似度检索	155
5.5.3	指定谱库质谱	156
5.6	分析未知峰	157
5.7	分组	158
5.8	打印结果	160
5.8.1	校准曲线	160
5.8.2	定制报告	160
6	生成自定义报告	163
6.1	创建报告格式	163
6.1.1	“报告”窗口	163
6.1.2	报告工具栏	164
6.1.3	创建报告格式文件	167
6.2	使用报告格式文件	171
6.2.1	打开报告格式文件	171
6.2.2	将数据导入报告格式文件	171
6.2.3	打印报告	171
7	连续分析	173
7.1	概述	173
7.1.1	自动数据采集与数据分析	173
7.1.2	自动再解析	174
7.2	自动数据采集与数据分析	175
7.2.1	创建批处理表	175
7.2.2	执行连续分析	188
7.3	自动再解析	189
7.3.1	创建批处理表	189
7.3.2	执行连续再解析	191
8	定量浏览器	193
8.1	概述	193
8.1.1	定量浏览器窗口	193
8.2	在定量浏览器窗口中的主要操作	194
8.2.1	显示多重数据的定量结果列表	194
8.2.2	同时执行多重数据的峰积分 / 定量	196
8.2.3	输出定量结果列表作为汇总报告	196
8.3	检查校准曲线	197
8.4	手动峰积分和手动峰识别	198
8.5	保存定量浏览器窗口的布局	199

9	数据浏览器	201
9.1	概述	201
9.1.1	数据浏览器窗口	201
9.1.2	打开数据文件	202
9.1.3	改变单元格布局	203
9.2	对色谱图单元格的操作	204
9.2.1	设置显示的色谱图	204
9.2.2	处理其它单元格	204
9.2.3	更改显示范围	205
9.2.4	打印单元格图像	206
9.3	对质谱单元格的操作	207
9.3.1	显示指定保留时间内的质谱	207
9.3.2	差减质谱质谱	207
9.3.3	执行质谱相似度检索	207
9.3.4	处理其它单元格	209
9.3.5	更改显示范围	209
9.3.6	打印单元格图像	210
9.4	保存数据浏览器窗口的布局	211
10	维护	213
10.1	注意事项	213
10.2	更换灯丝	214
10.2.1	更换灯丝的步骤	215
10.3	清洁离子源盒和推斥极电极	216
10.3.1	拆卸离子源盒和推斥极电极	217
10.3.2	重新组装离子源盒和推斥极电极	219
10.3.3	清洁离子源盒和推斥极电极	221
10.3.4	必要的材料	221
10.4	真空泵维护	222
10.4.1	更换机械泵油	222
10.4.2	涡轮分子泵维护	224
10.5	清洁风扇	225
10.5.1	清洁风扇	225
10.6	检查泄漏	226
10.6.1	GC 载气泄漏检查	226
10.6.2	MS 真空泄漏检查	230
10.6.3	利用峰监测检查真空泄漏	231
10.6.4	利用石油醚检查真空	233
10.7	软件安装	234
10.7.1	安装前	234
10.7.2	GCMSsolution 安装	234
10.7.3	卸载 GCMSsolution	240
10.7.4	DAO 安装	243
10.8	计算机接口卡安装	247
10.8.1	安装计算机接口卡	247
10.8.2	计算机接口卡驱动程序安装 (Windows 2000)	248
10.8.3	计算机接口卡驱动程序安装 (WindowsXP)	250
10.8.4	安装 MS 驱动程序 (Windows 2000)	252
10.8.5	安装 MS 驱动程序 (Windows XP)	257

11 故障处理	261
11.1 操作问题和补救措施	261
11.1.1 通过 MS 上的 LED 指示灯指示的错误状态	261
11.1.2 GCMSsolution 软件启动错误	262
11.1.3 真空系统自动启动错误	263
11.1.4 MS 灯丝打开错误	264
11.1.5 自动调谐和分析错误	265
11.2 真空系统保护功能	268
11.2.1 概述	268
11.2.2 保护功能	268
附录 A 峰处理和质谱操作	269
A.1 积分和峰处理参数	269
A.1.1 积分参数	269
A.1.2 峰宽	272
A.1.3 斜率	272
A.1.4 漂移	274
A.1.5 处理共流出峰	276
A.1.6 T.DBL	278
A.1.7 峰处理时间	280
A.1.8 使用时间程序的峰处理	281
A.1.9 最小面积 / 高度	282
A.1.10 平滑	282
A.2 质谱操作	283
A.2.1 质谱背景修正 (减除)	283
A.2.2 质谱平均	283
A.2.3 在自动处理期间执行质谱操作和相似度检索	284
A.3 相似度检索参数和功能	285
A.3.1 相似度检索计算	285
A.3.2 预检索功能	286
A.3.3 相似度检索参数	286
A.3.4 检索后处理功能	287
A.4 峰的识别、定量计算和校准	288
A.4.1 ID 号	288
A.4.2 峰识别	288
A.4.3 定量计算方法	294
A.4.4 校准	296
A.5 故障处理	300
A.5.1 峰处理	300
A.5.2 峰识别	304
附录 B PDF 输出	305
B.1 设置 PDF 输出	305
B.1.1 准备 PDF 输出	305
B.1.2 安装 PostScript 打印机驱动程序	306
B.1.3 [PDF Export] 标签	320
附录 C 技术指标	323
C.1 性能	323
C.2 硬件	324
C.3 工作站	325
C.3.1 计算机	325
C.3.2 软件	325
C.4 安装要求	327
C.4.1 安装示例	328

附录 D 消耗性部件与维护部件列表	329
D.1 消耗性部件列表	329
D.2 维护部件列表	330
附录 E 技术注意事项	335
E.1 真空特性	335
E.2 检测器放大倍数	336
E.3 离子化电压 / 发射电流和灯丝寿命	337
附录 F GCMS 术语词汇表	339
F.1 缩写	339
F.2 词汇表	340
索引	I

索引

1 概述

1.1 GCMS-QP2010 Plus

此章节是关于 GCMS-QP2010 Plus 的概述。

GCMS-QP2010 Plus 仪器是一款用于高精度 GC/MS 分析的台式气相色谱 / 质谱仪。该仪器能够通过质谱测量进行定性分析或检测未知物质，并通过选择离子监测 (SIM) 测量对痕量成分进行定量。

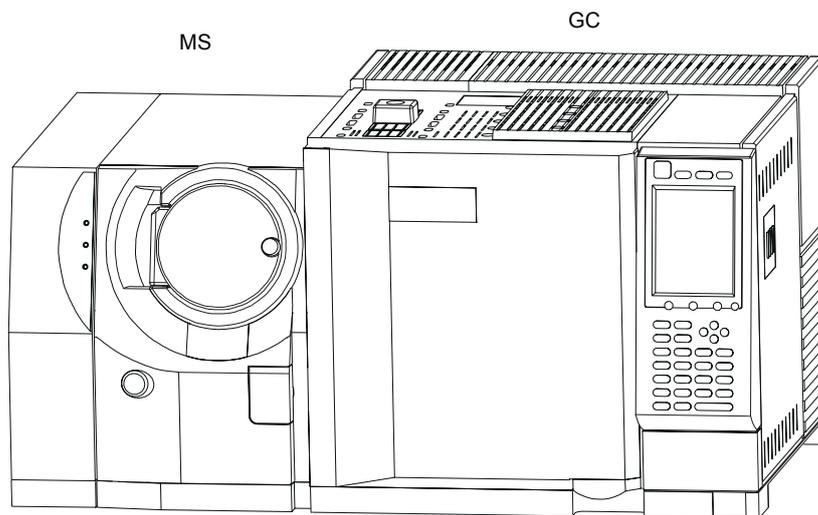


图 1.1 GCMS-QP2010 Plus

标准型号的产品包含下列组件：

- GC-2010 高性能气相色谱仪
- 由带有机械泵的涡轮分子泵组成的真空差动泵
- 用于对真空室压力进行监控的真空计
- 直接耦合的 GC/MS 接口
- 带有独立温度控制的电子轰击 (EI) 离子源
- 电子能量 / 电流可变的灯丝离子源
- 带有预杆的四极质量过滤器
- 带有转换打拿极的电子倍增检测器
- 电源和仪器控制电路

GCMSsolution Ver. 2.5 软件用于控制 GCMS-QP2010 Plus 并进行数据采集和再解析。该软件包括下列功能：

- 对 GCMS-QP2010 Plus 以及外围设备（例如，自动进样器）进行控制并通过自动调谐来自动调整仪器
- 用于对数据进行高质量精确管理的 QA/QC 功能
- 建立分析方法
- Scan 与 SIM 数据采集
- 定性处理，包括对质谱图进行显示和处理以及谱库检索
- 定量处理，包括生成组分表、校准曲线和浓度计算
- 定制报告
- 通过批处理方式进行连续数据采集 / 分析

1.2 特性

本章是对 GCMS-QP2010 Plus 功能和性能特性的说明。

高灵敏度

四极杆离子聚焦 GC/MS 系统在同类产品中具有最高的灵敏度，极大地拓宽了 GC/MS 的应用范围。

高质量范围

该仪器能够实现高质量范围分析，最高可达 m/z 1090，极大地拓宽了 GC/MS 应用范围。

紧凑

GCMS-QP2010 Plus 只需很小的空间，即使在安装了自动进样器选件时也是一样。

直观操作

由于 GCMSsolution 软件比较直观，即使 GC/MS 新手也能对数据进行采集和分析，并且在熟悉的 Windows 环境下生成报告。QA/QC 功能能够对仪器状态和数据精度进行管理。

多重组分分析

GCMS-QP2010 Plus 灵敏度非常高，能够对更多组分进行 SIM 测量。可同时对最多 64 条通道的离子进行监测。由于时间划分设置可以分配给 128 个组，每个组最多可以有 64 条通道，因此可以对更多组分进行高灵敏度分析。

1 概述

1.3 部件名称

本仪器由气相色谱仪 (GC)、质谱仪 (MS)、机械泵、包括监视器和打印机在内的个人计算机系统 (PC) 以及其他选件构成。对 GC-2010 气相色谱仪来说, 请参考单独的 GC-2010 用户手册。

1.3.1 GC/MS 分析系统

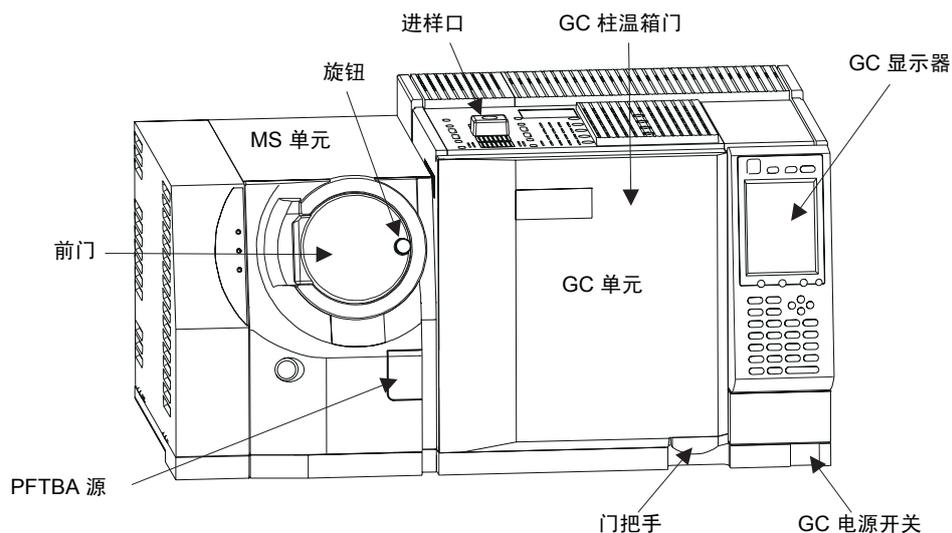


图 1.2 GCMS-QP2010 Plus (正视图)

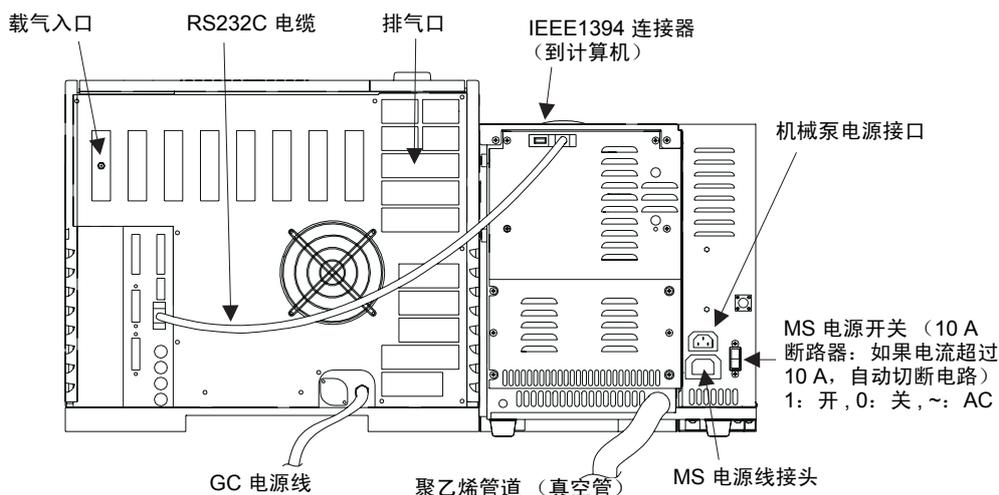


图 1.3 GCMS-QP2010 Plus (后视图)

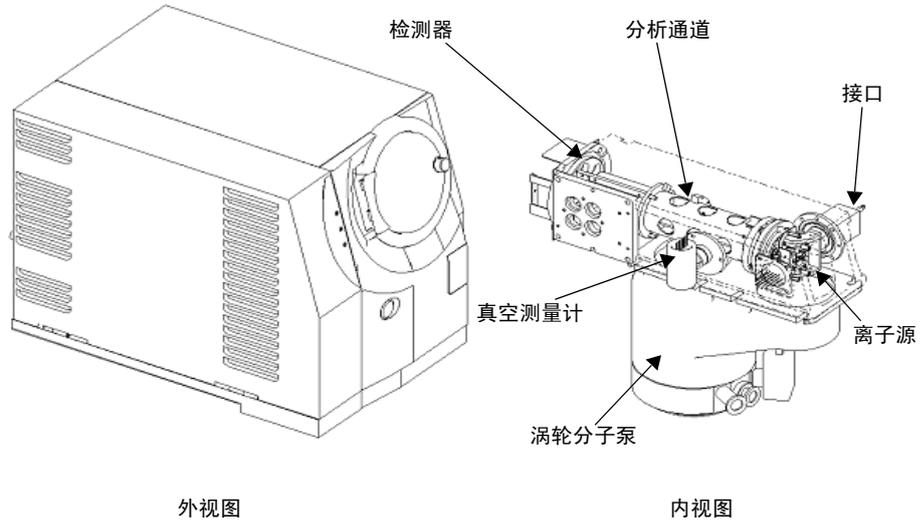


图 1.4 质谱仪



1.3.2 GCMS-QP2010 Plus 离子源

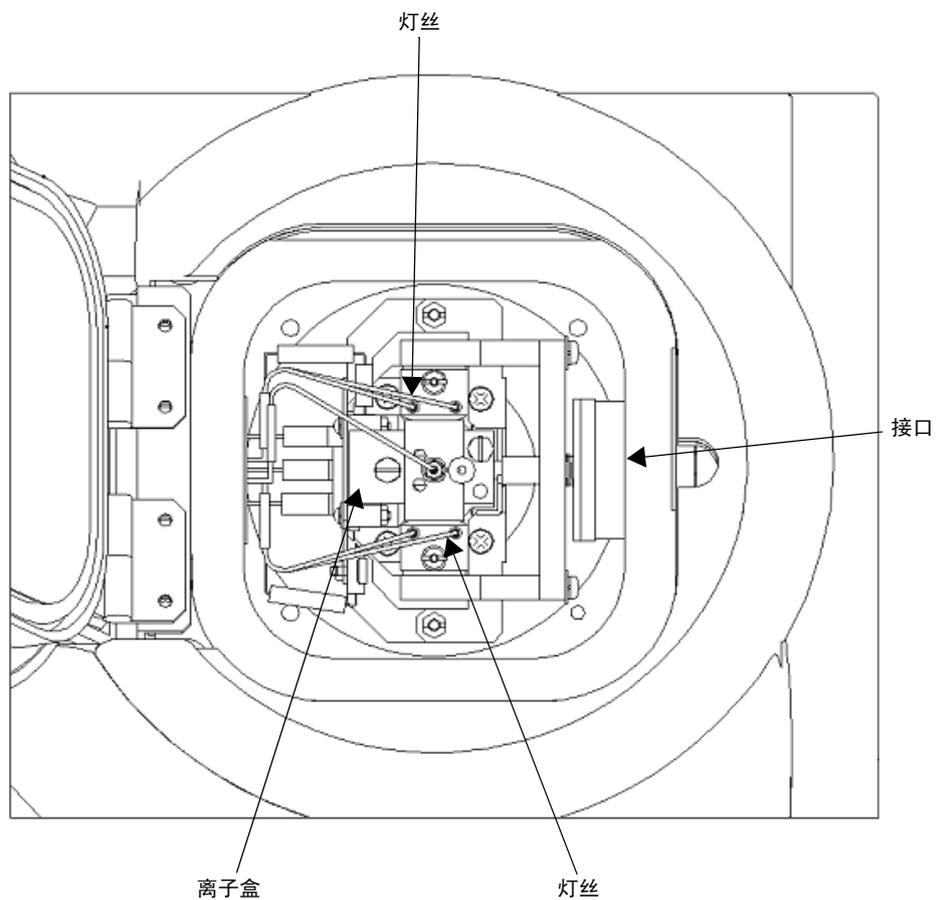


图 1.5 离子源



1.3.3 机械泵

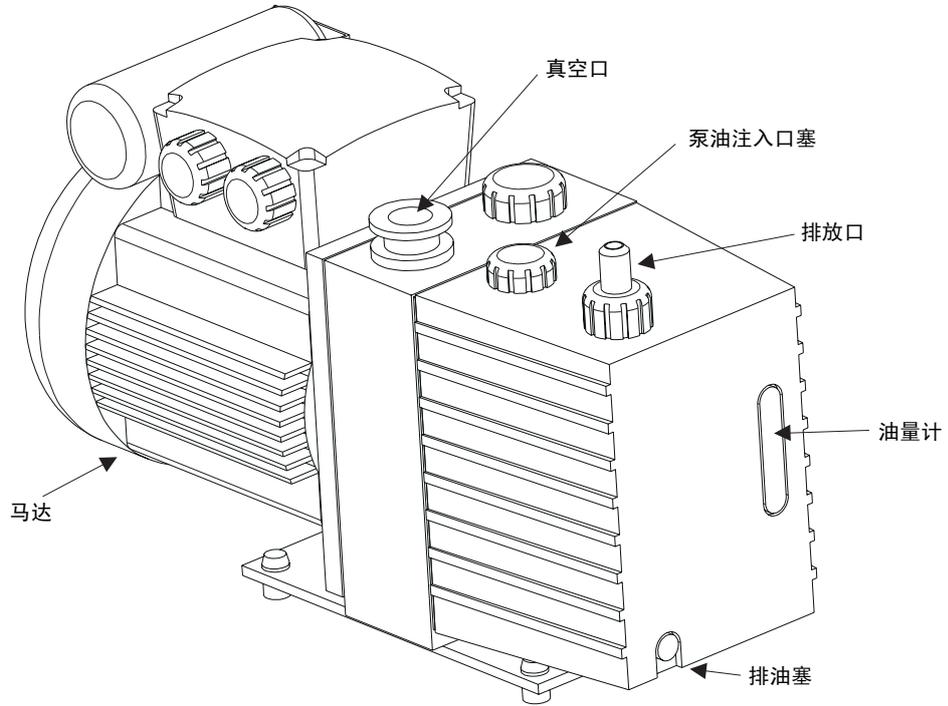


图 1.6 机械泵

1.4 标准附件

本章是对仪器标准附件的说明。有关 GC-2010 气相色谱仪所含附件，请参考 GC-2010 用户手册。

部件名称	部件编号	数量
螺母, SSNE16 / 012 (5 颗)	670-11009	1
垫圈, GVF-004 (10 个)	670-15003-03	1
垫圈, GVF-005 (10 个)	670-15003-04	1
镊子, AA	086-16101	1
Phillips 2 号螺丝刀	086-11002	1
离子源固定夹具	225-10194-91	1
隔垫 (10 片)	225-10164-91	1
扳手 (5/16 -1/4)	086-03410	1
3 号六角型扳手	086-03804	1
5 号六角形扳手	086-03806	1
一字 100 螺丝刀	086-10403	1
4 号螺丝刀	086-12011	1
六角形 1.5 螺丝刀	086-10513	1
色谱柱安装夹具 (到接口)	225-11657-08	1
色谱柱安装夹具 (到注射器)	225-11657-09	1
平行销	026-11007-02	1
电缆, IEEE1394	225-19050	1
电缆, RS232C	225-19051	1
密封垫圈	221-48990	1
机壳	670-12546	1
接口罩	225-11674	1
聚乙烯管	016-31331	1
软管夹	037-61019	2

1.5 软件概述

本章节是有关 GCMSsolution 的概述。

GCMSsolution 是一个用来控制 GCMS-QP2010 Plus、自动进样器和其他外围设备的 Windows 软件。它提供数据采集、定性分析、定量分析和报告创建功能。

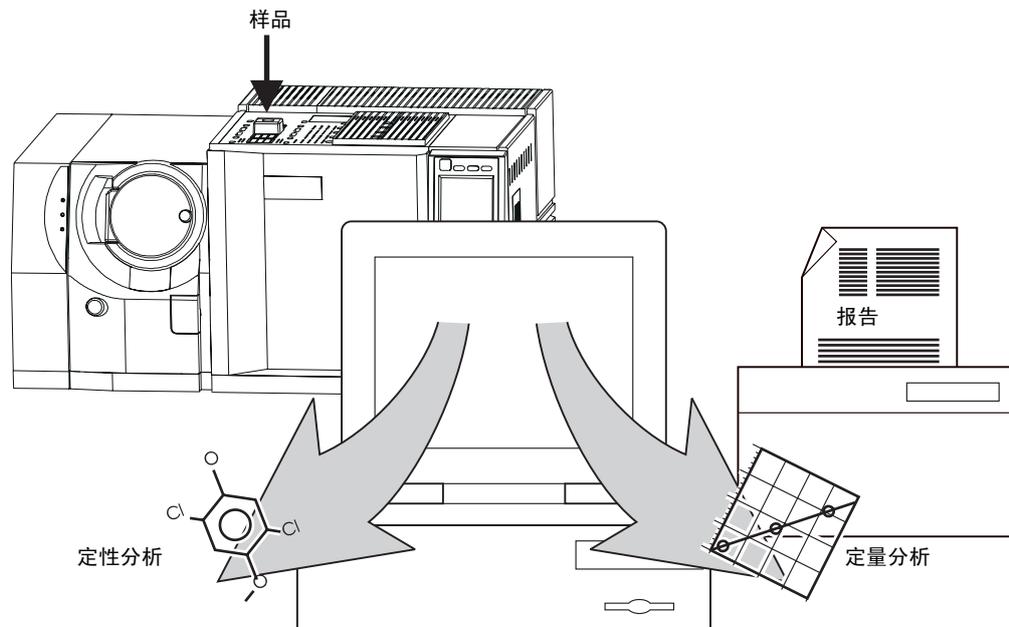


图 1.7 软件功能

该程序使用对 Windows 2000 和 Windows NT 4.0 操作系统通用的命令。使用前，应仔细阅读相关操作系统的用户手册。在对 Windows 操作（例如，打开和保存文件）有一个基本的了解之后方可阅读本手册。

1.6 软件操作流程图

此流程图对 GCMSsolution 的基本操作顺序做了说明。我们对相应流程说明所在的章节都做了适当说明和列示。

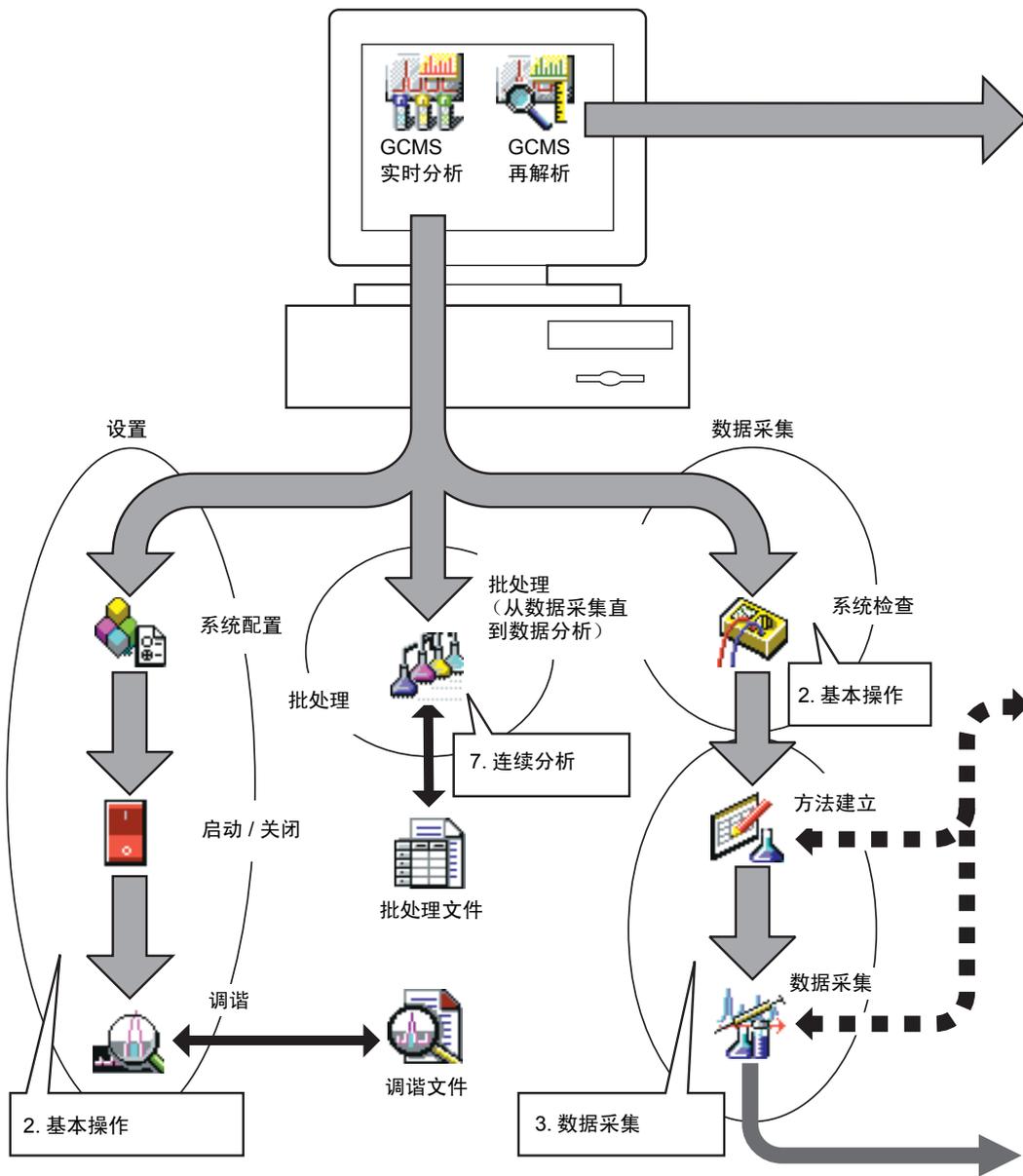


图 1.8 软件操作流程图（第 1 部分）

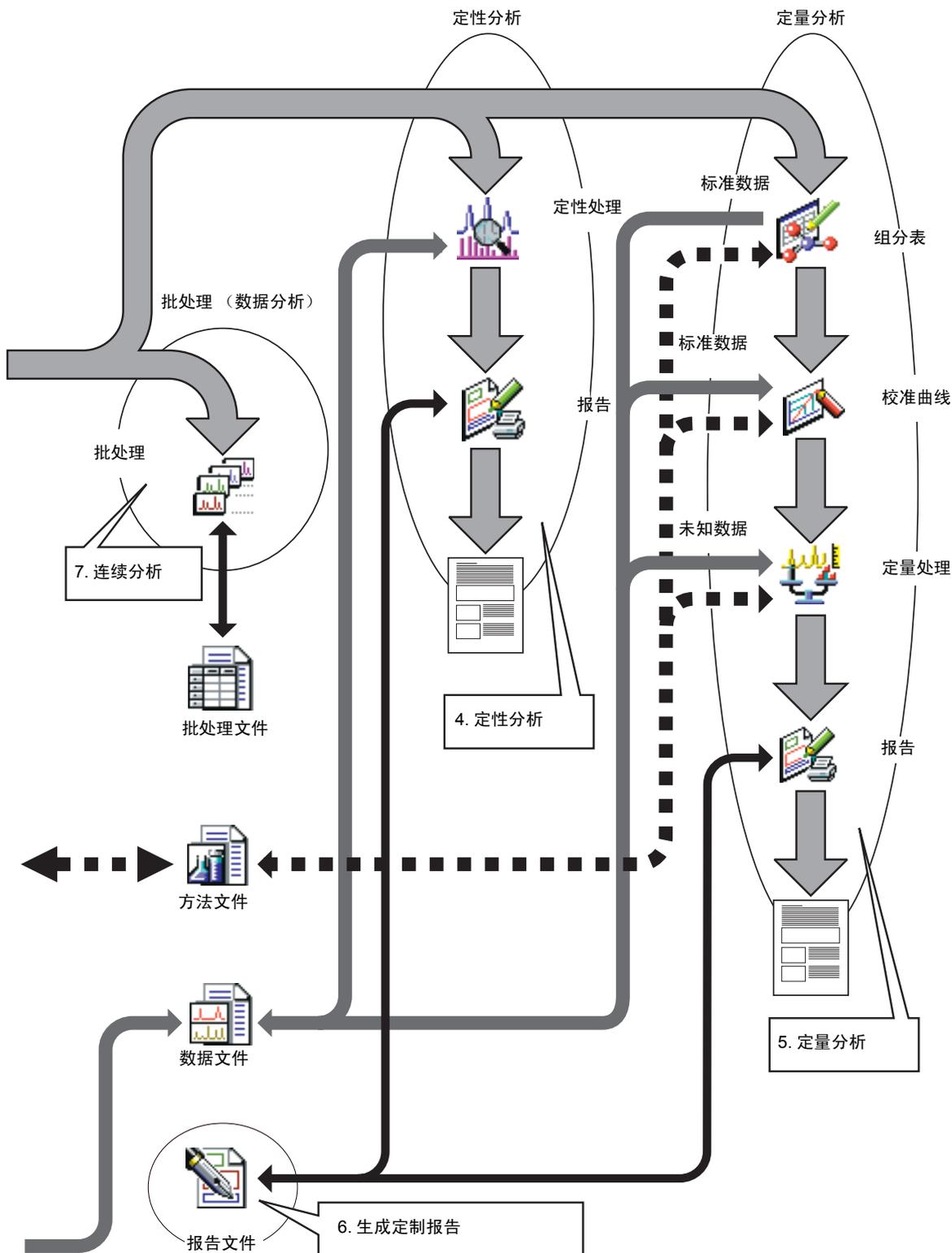


图 1.9 软件操作流程 (第 2 部分)

2.1

简介

本章节是对 GCMSsolution 基本操作步骤的说明：

- GC 基本知识
- 气体要求
- 仪器启动与关闭
- 日常启动与关闭
- 色谱柱更换
- 系统配置
- 系统检查与调谐
- 一般操作

了解这些主题对 GCMS-QP2010 Plus 仪器和 GCMSsolution 软件的操作至关重要。

2 基本操作

2.2 GC 基本知识

有关 GC-2010 气相色谱仪的特定信息，请参阅随其提供的用户手册 (P/N 221-40406)。请注意，GC-2010 标准操作步骤可能与下列所述操作步骤不同。

2.2.1 仪器参数

GCMS-QP2010 Plus 仪器参数，包括 GC 温度和压力参数，可以从计算机上进行设置。参数保存在一个名为“方法文件”的文件中。方法文件可以保存在硬盘上并将保存的参数加载至软件。有关方法文件的更多信息，请参阅章节 2.9.1 “管理文件”，第 60 页。

GC-2010 参数可以直接从小键盘或者计算机上的方法文件进行设置。

2.2.2 进样口说明

使用 GC/MS 系统，必须防止空气发生泄漏进入载气。

保证载气的纯度可以：

1. 防止毛细管柱老化。
2. 延长 MS 灯丝和离子源的寿命。
3. 减小分析仪的背景噪音。

如下图所示，为了防止空气发生泄漏进入载气，GCMS-QP2010 Plus 通过金 (Au) 垫圈对标准进样口进行密封。

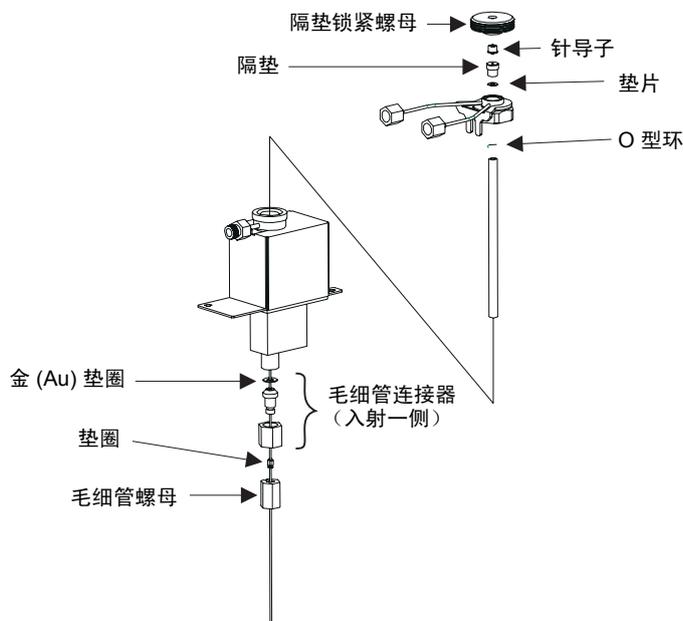


图 2.1 进样口

2.3 气体要求

本章节是对系统所使用的载气的说明。为了增强安全性并保持仪器性能，必须遵守下列规范。

载气：氦气

供应压力：300 - 980 kPa

纯度：99.995 % 或更高

- GC 压力和流速设定范围随供应压力而变化。通常，供应压力必须达到 700 - 800 kPa。
- 某些可选附件可能需要上述规定气体之外的其他气体。更多信息，请参考随附件所带的用户手册。
- 某些应用（比如农用化学品分析）可能需要更高纯度 (99.999 - 99.9999 %) 的氦气。



注

一旦空气发生泄漏进入供气管道，会使得气体纯度下降，影响系统性能。供应给 GC 的氦气必须满足或超过规定的纯度标准。气体纯度下降会影响系统性能。

2 基本操作

2.4 仪器启动与关闭

本章详细说明如何启动和关闭安装好的仪器。

2.4.1 启动仪器

1. 打开载气。

- (1) 在确定载气是否是纯度不低于 99.995 % 的氦气后，一定要保证载气管道按照下图所示正确连接。
- (2) 打开载气气瓶的主阀门。
- (3) 确保气体压力，或者 GC 载气入口压力为 300 - 980 kPa (约 3 - 9.8 kgf/cm²)。



注

更换气瓶时，一定要保证气瓶连接处不能有气体泄漏。

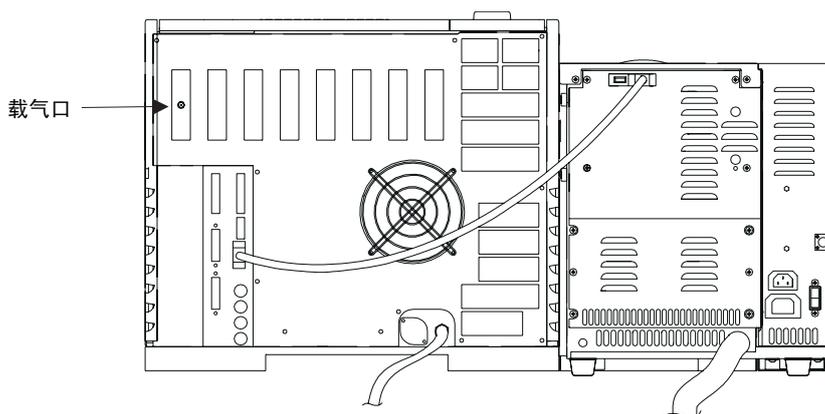


图 2.2 载气入口



2. 按照下列步骤检查进样口玻璃衬管，确定玻璃衬管是否适合该应用。

(1) 拿住隔垫螺母，取下进样口的玻璃衬管螺母。将隔垫螺母垂直向上提起并取下。

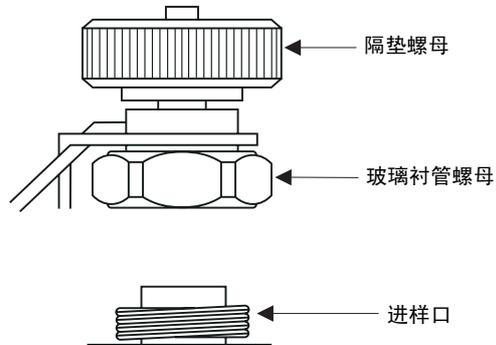


图 2.3 进样口螺母组件



注意

取下玻璃衬管螺母时一定要握住隔垫螺母，这一点很重要。如果取下玻璃衬管时不握住隔垫螺母，就会被进样管拉出来。隔垫螺母会击中玻璃衬管并打破衬管。



- (2) 用镊子取下玻璃衬管并判断其是否适合应用。请参考下图。检查石英棉，看其是否干净以及位置是否正确。

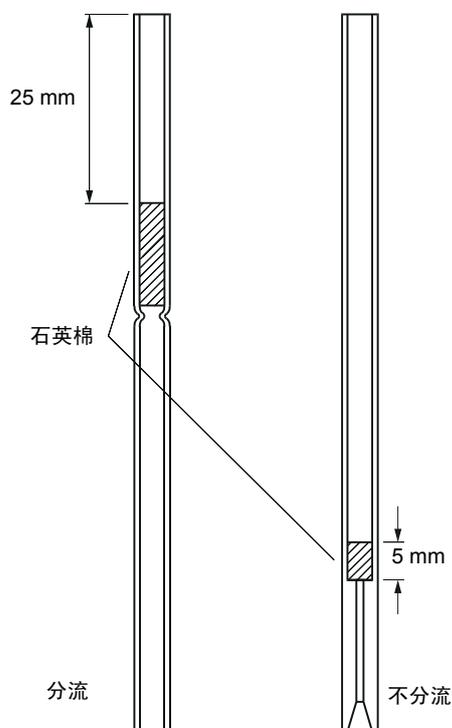


图 2.4 填充玻璃衬管

- (3) 如果石英棉被污染，将其取下擦干净或者进行更换。在指定位置填充适量干净的石英棉。对分流进样来说，大约是 10 mg，对不分流进样来说，大约是 2 mg。



- (4) 按照下述方法安装玻璃衬管和石墨垫圈。参考上部进样口总成图。
- a) 如下图所示，将 O 型环临时滑动到玻璃衬管上，使其距离顶端约 4 mm。将玻璃衬管插入进样口，一直到达底部。位置摆放正确时，O 型环距离衬管顶端约 3 mm。
 - b) 将进样口螺母组件放在玻璃衬管顶端。
 - c) 利用随设备所带的六角扳手正确拧紧螺母。

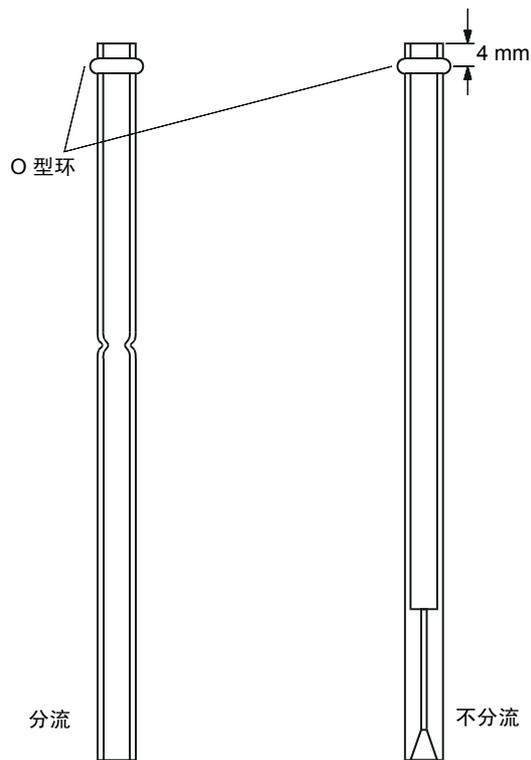


图 2.5 安装 O 型环



3. 安装色谱柱支架和毛细管柱。

安装色谱柱吊架

按照下列步骤将色谱柱吊架安装至连接孔：

- (1) 挤压吊架顶端的接头，以便吊架末端能够插入连接孔。标准色谱柱安装位置位于吊架背面。连接两个色谱柱时，一个安装在前面，一个安装在后面。

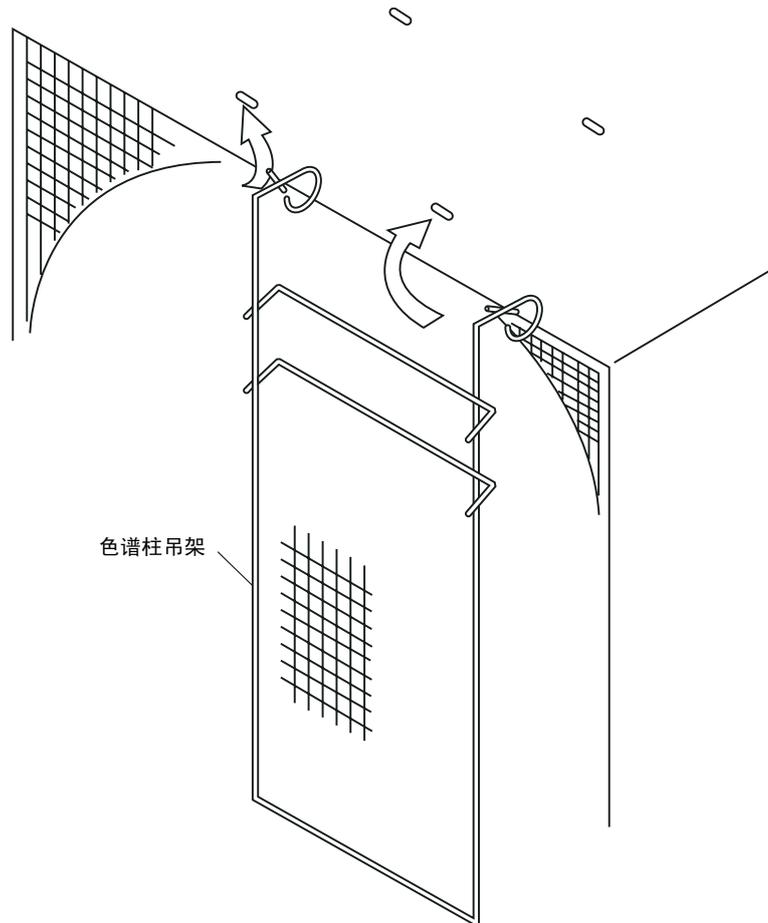


图 2.6 将色谱柱连接至色谱柱吊架

将毛细管柱连接至进样口

- (1) 将毛细管柱推过聚胺酯垫圈和螺母。请参阅图 2.7 “使用色谱柱安装夹具”。
- (2) 将毛细管柱末端插入色谱柱安装夹具 (P/N 225-11657-09) 内，保持毛细管柱从夹具末端伸出约 1 cm 长；如图 2.7 “使用色谱柱安装夹具” 所示，拧紧螺母将其固定。将毛细管柱末端伸出来的部分切掉。



- (3) 如图 2.8 “用胶带标记色谱柱” 所示，用胶带在拧紧的螺母下方对毛细管柱做标记。
- (4) 将毛细管柱从夹具上取下，不要去掉胶带，用丙酮擦拭毛细管柱。将色谱柱插入进样口，用手拧紧螺母对其进行固定。如果垫圈是新的，用扳手将螺母再拧一整圈。如果垫圈以前曾使用过，用扳手将螺母转动 20 到 40 度将其拧紧。
- (5) 将用来对色谱柱做标记的胶带去掉。

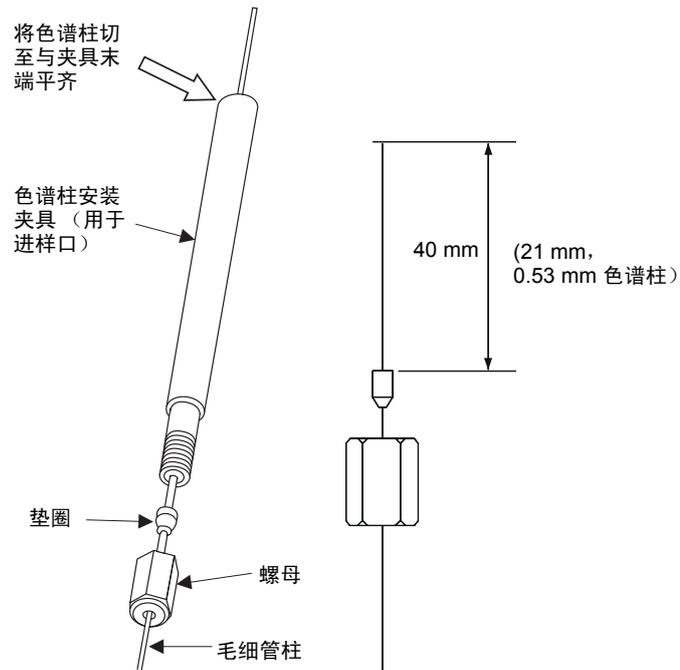


图 2.7 使用色谱柱安装夹具

部件名称	部件编号
聚胺酯垫圈	670-15003-03（用于 0.25 mm 色谱柱）
	670-15003-04（用于 0.32 mm 色谱柱）
	670-15003-07（用于 0.53 mm 色谱柱）
色谱柱安装夹具	225-11657-09
螺母	670-11009
毛细管柱切刀	221-50595-91（选件）



注

石墨垫圈被夹具压紧，因此贴到色谱柱上；而聚胺酯垫圈不会被压紧，可以在色谱柱上滑动。为了保证色谱柱正确定位，要用胶带在聚胺酯垫圈和螺母下方对色谱柱做标记。安装完毕，一定要将胶带去掉。

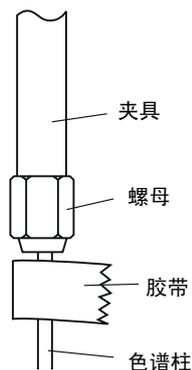


图 2.8 用胶带标记色谱柱

将毛细管柱连接至 MS

- (1) 将毛细管柱推过聚胺酯垫圈和螺母。请参阅图 2.9 “使用色谱柱安装夹具”。
- (2) 将毛细管柱末端插入色谱柱安装夹具 (P/N 225-11657-08) 内，保持毛细管柱从夹具末端伸出约 1 cm 长；如图 2.10 “将毛细管柱连接至 MS” 所示，拧紧螺母将其固定。拧紧螺母，将其固定。将毛细管柱末端伸出来的部分切掉。
- (3) 如图 2.8 “用胶带标记色谱柱” 所示，用胶带在拧紧的螺母下方对毛细管柱做标记。
- (4) 将毛细管柱从夹具上取下，不要去掉胶带，用丙酮擦拭毛细管柱。将色谱柱插入 MS 接口，用手拧紧螺母对其进行固定。如果垫圈是新的，用扳手将螺母再拧一整圈。如果垫圈以前曾使用过，用扳手将螺母转动 20 到 40 度将其拧紧。
- (5) 将用来对色谱柱做标记的胶带去掉。

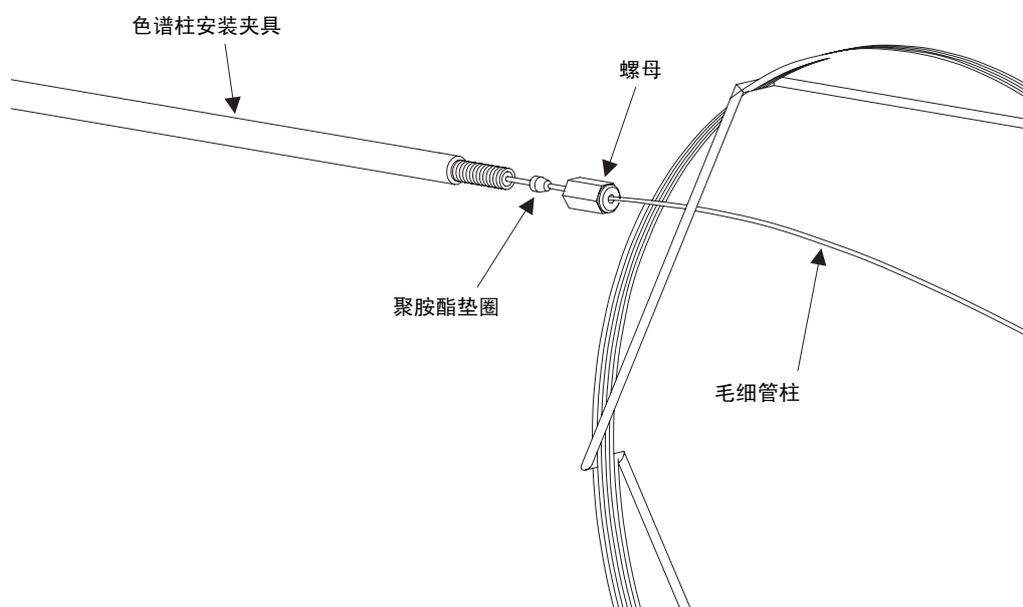


图 2.9 使用色谱柱安装夹具

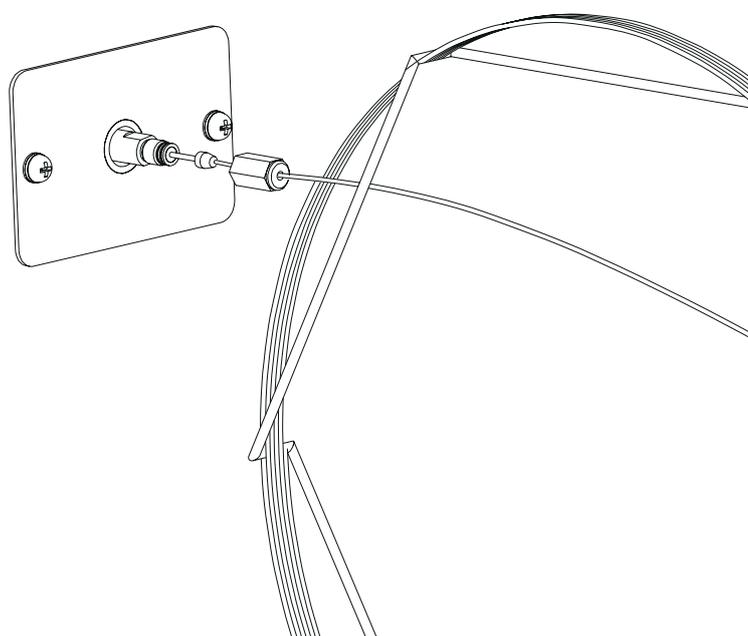


图 2.10 将毛细管柱连接至 MS



注

为防止背景噪音，一定要使用聚胺酯垫圈将色谱柱连接至 MS。石墨垫圈被夹具压紧，因此贴到色谱柱上；而聚胺酯垫圈不会被压紧，可以在色谱柱上滑动。为了保证色谱柱正确定位，要用胶带在聚胺酯垫圈和螺母下方对色谱柱做标记。安装完毕，一定要将胶带去掉。

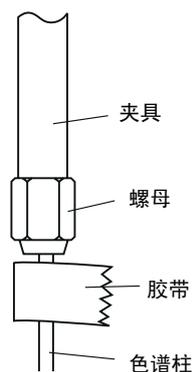


图 2.11 用胶带标记色谱柱

4. 打开仪器。

- (1) 确保控制仪器电源的断路器打开，然后打开 GC。
- (2) 打开计算机、监视器和打印机，并启动 Windows。
- (3) 打开 MS。MS 左上角的电源指示灯会亮起。

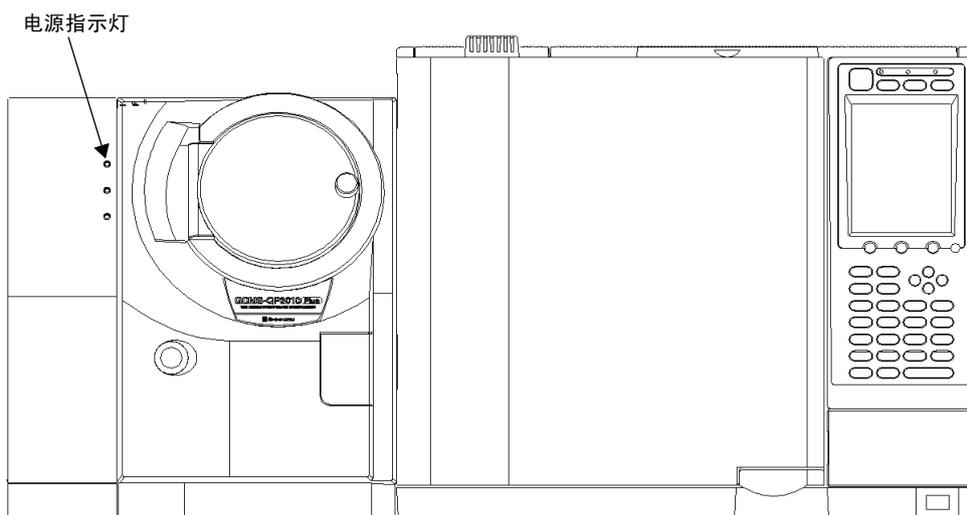


图 2.12 启动 MS

5. 启动 GCMSsolution.

- (1) 双击 **GCMS Real Time Analysis** 图标。屏幕出现“登录”对话框。



图 2.13 “登录”对话框

- (2) 输入您的用户名和密码。第一次使用软件时，使用缺省用户名“Admin”，密码栏空白。

输入所需的信息后，单击**确认**按钮。

GCMSsolution 软件启动，屏幕出现“GCMS 实时分析”窗口。

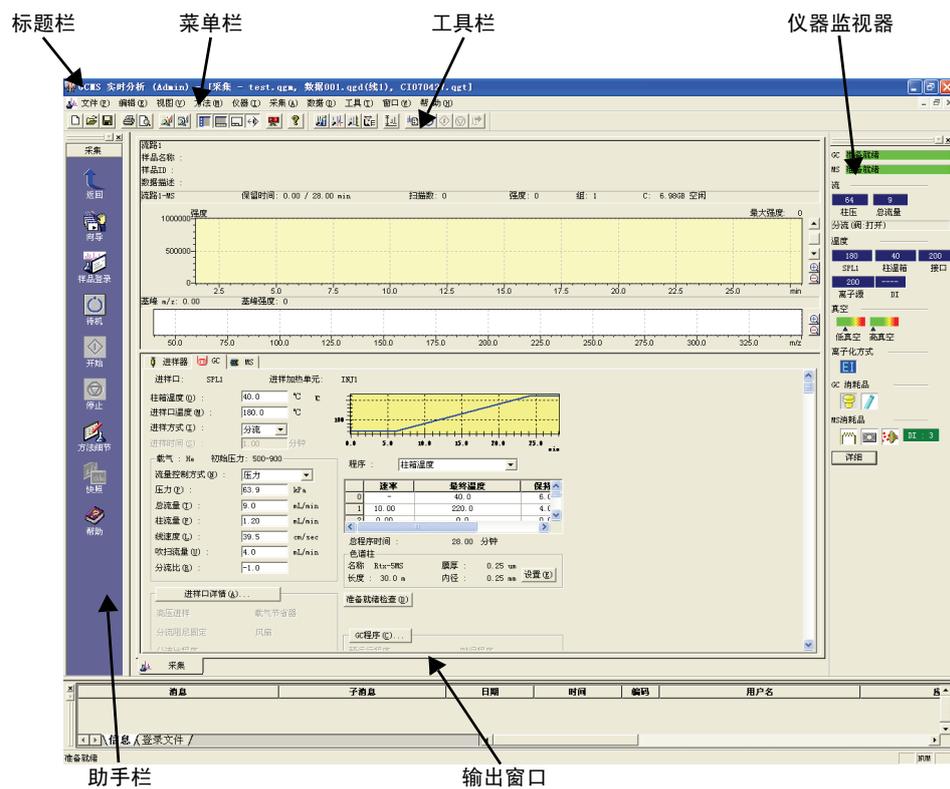


图 2.14 “GCMS 实时分析”窗口



6. 启动真空系统。



注意

如果仪器关闭很长时间而且周围温度比较低，机械泵油会变得非常粘稠。当油的粘度过高且机械泵工作时，机械泵马达会承受过多负荷。主电源断路器（位于仪器背后，参见章节 1.3.1 “GC/MS 分析系统”，第 3 页）会切断仪器电源，关闭仪器。

仪器关闭并在寒冷环境下时，要升高周围温度，当机械泵温度至少达到最低温度要求 (18 °C) 后，再启动仪器。



注意

启动真空系统之前，检查 MS 前面板门上的旋钮是否拧紧。



注意

启动真空系统后，不要拧紧 MS 前面板门上的旋钮。否则，关闭仪器后，不可能再松开旋钮。



- (1) 单击助手栏中的**真空控制**图标。屏幕出现“真空控制”对话框。



图 2.15 “真空控制”对话框

- (2) 单击**自动启动**按钮。

“启动”指示灯闪烁，屏幕显示进程栏，真空系统启动顺序开始启动。如进程栏所提示的那样，各个组件按顺序启动，当真空系统可以工作时，屏幕显示“已完成”。



图 2.16 真空启动完成

- (3) 关闭“真空控制”对话框。



2.4.2 关闭仪器

1. 关闭真空系统。

(1) 单击助手栏中的**真空控制**图标，打开“真空控制”对话框。



(2) 单击**自动关闭**按钮。

“关闭”指示灯闪烁，屏幕显示进程栏，真空系统关闭顺序开始启动。如进程栏所提示的那样，各个组件按顺序关闭，当真空系统关闭完成时，屏幕显示“已完成”。



图 2.17 真空系统关闭完成

(3) 关闭“真空控制”对话框。

2. 退出 GCMSsolution。

(1) 选择“文件”菜单中的“退出”。屏幕显示确认消息，提示是否退出程序。



图 2.18 退出 GCMSsolution 确认

(2) 单击**确定**按钮退出 GCMSsolution。

3. 关闭电源和载气。

(1) 关闭计算机、显示器和打印机。

(2) 关闭 GC。

(3) 关闭 MS。

(4) 关闭载气气瓶的主阀门。

2.5

2 基本操作

日常启动与关闭

当 GC/MS 系统每天都使用时，不要关闭 GC 和 MS 组件（包括真空系统），使其保持工作状态。通常，退出软件并关闭计算机。本章节是有关其他系统仍然处于运行状态时计算机和软件的打开和关闭说明。

2.5.1 日常关机

设备每天都使用时，每次使用后，真空系统应该仍然保持运行状态，而不是关闭后再重启，这么做的目的是为了更快达到合适的分析状态。本章节是对真空系统仍然保持运行状态时的日常关机步骤的大致说明。

1. 选择“工具”菜单下的“日常关机”，打开“日常关机”对话框。

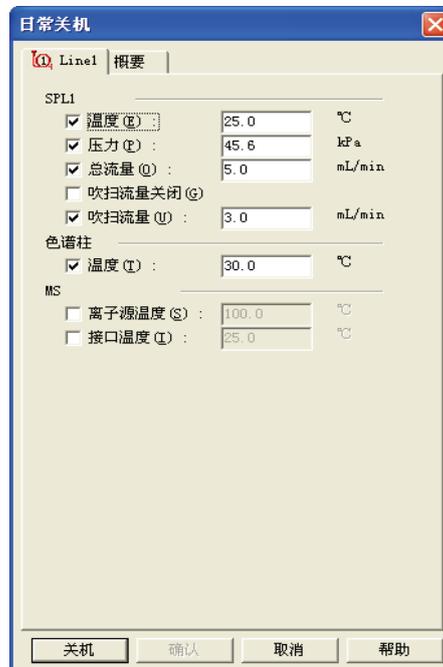


图 2.19 “日常关机”对话框



2. 在 Line 1 和 概要 标签中为使用中的设备输入所需的设置。
3. 单击**关机**按钮。“日常关机”对话框关闭。根据本窗口中所输入的参数，仪器将仍然处于运行状态。
4. 退出 Windows。
5. 关闭计算机、显示器和打印机。



注

不要关闭 GC 或 MS。
不要关闭主电源。
不要将 GC 色谱柱入口压力变为 0。

2.5.2 日常启动

当真空系统仍然处于运行状态时，要按照下列步骤进行操作，就像执行日常关闭步骤那样。

1. 打开计算机、监视器和打印机，并启动 Windows。
2. 双击 **GCMS Real Time Analysis** 图标。屏幕出现“登录”对话框。



图 2.20 “登录”对话框

3. 输入您的用户名和密码，然后单击**确认**。GCMSsolution 软件启动，屏幕出现“GCMS 实时分析”窗口。

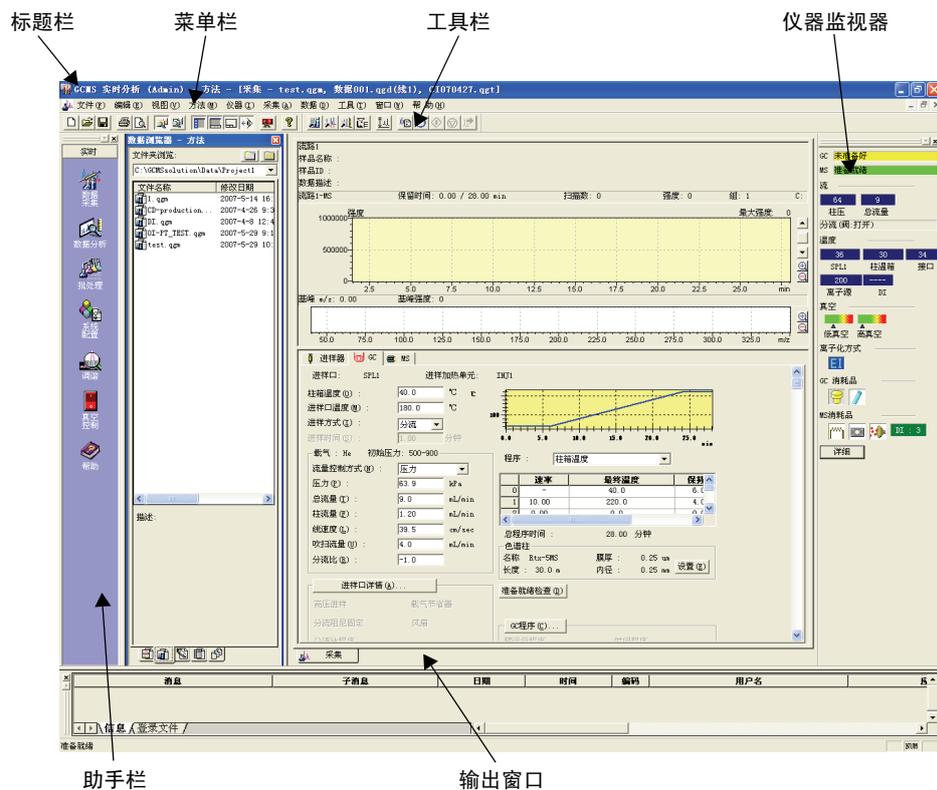


图 2.21 “GCMS 实时分析”窗口

2 基本操作

2.6 色谱柱更换

本章节是对色谱柱性能下降时对色谱柱进行更换或者用更适合应用的色谱柱替换原来色谱柱的说明。如果错误更换色谱柱，可能会导致真空泄漏。

2.6.1 关闭真空系统

1. 单击助手栏中的**真空控制**图标，打开“真空控制”对话框。



2. 单击**自动关机**按钮。

“关闭”指示灯闪烁，屏幕显示进程栏，真空系统关闭顺序开始启动。如进程栏所提示的那样，各个组件按顺序关闭，当真空系统关闭完成时，屏幕显示“完成”。



图 2.22 真空系统关闭完成

3. 关闭“真空控制”对话框。



注意

如果真空系统关闭后要打开真空室前门，把前门上的旋钮向左转一圈，松开旋钮。



2.6.2 更换色谱柱

1. 将当前安装的色谱柱取下。

松开进样口和 MS 连接上的螺母，取下毛细管柱。如果 MS 上的聚胺酯垫圈和螺母仍然在毛细管柱上，可以不用取下垫圈和螺母而将色谱柱储存起来。

安装毛细管柱所需的聚胺酯垫圈和螺母属于消耗性部件，应该储存足够数量的这些零件。请参阅章节 D.1 “消耗性部件列表”，第 329 页。

2. 安装新的色谱柱。

将毛细管柱连接至进样口

- (1) 将毛细管柱推过聚胺酯垫圈和螺母。请参阅图 2.23 “使用色谱柱安装夹具”。
- (2) 将毛细管柱末端插入色谱柱安装夹具 (P/N 225-11657-09) 内，保持毛细管柱从夹具末端伸出约 1 cm 长；如图 2.23 “使用色谱柱安装夹具”所示，拧紧螺母将其固定。将毛细管柱末端伸出来的部分切掉。
- (3) 如图 2.24 “用胶带标记色谱柱”所示，用胶带在拧紧的螺母下方对毛细管柱做标记。
- (4) 将毛细管柱从夹具上取下，不要去掉胶带，用丙酮擦拭毛细管柱。将色谱柱插入进样口，用手拧紧螺母对其进行固定。如果垫圈是新的，用扳手将螺母再拧一整圈。如果垫圈以前曾使用过，用扳手将螺母转动 20 到 40 度将其拧紧。
- (5) 将用来对色谱柱做标记的胶带去掉。

部件名称	部件编号
聚胺酯垫圈	670-15003-03 (用于 0.25 mm 色谱柱)
	670-15003-04 (用于 0.32 mm 色谱柱)
	670-15003-07 (用于 0.53 mm 色谱柱)
色谱柱安装夹具	225-11657-09
螺母	670-11009
毛细管柱切刀	221-50595-91 (选件)

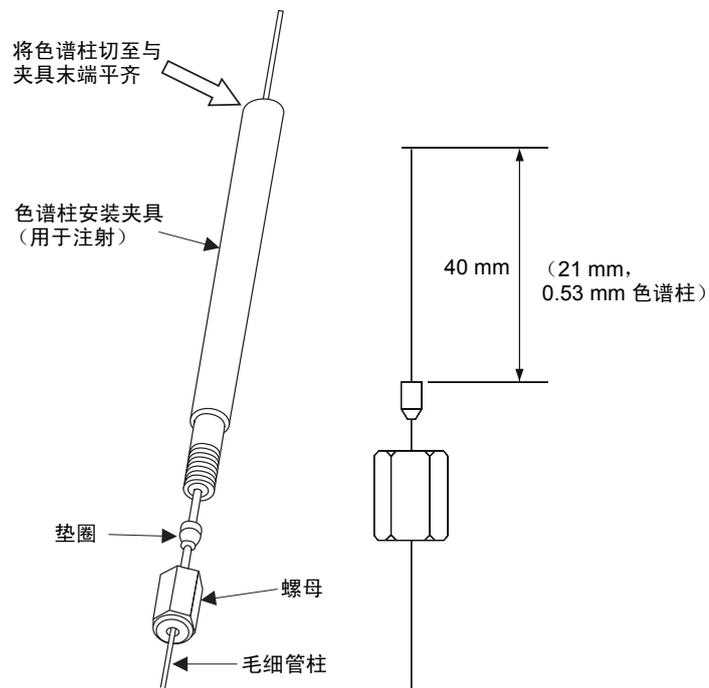


图 2.23 使用色谱柱安装夹具



注

石墨垫圈被夹具压紧，因此贴到色谱柱上；而聚胺酯垫圈没有被压紧，可以在色谱柱上滑动。为了保证色谱柱正确定位，要用胶带在聚胺酯垫圈和螺母下方对色谱柱做标记。

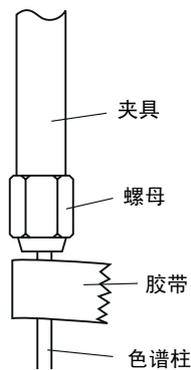


图 2.24 用胶带标记色谱柱



将毛细管柱连接至 MS

- (1) 将毛细管柱推过聚胺酯垫圈和螺母。请参阅图 2.25 “使用色谱柱安装夹具”。
- (2) 将毛细管柱末端插入色谱柱安装夹具 (P/N 225-11657-08) 内, 保持毛细管柱从夹具末端伸出约 1 cm 长; 如图 2.26 “将毛细管柱连接至 MS” 所示, 拧紧螺母将其固定。拧紧螺母, 将其固定。将毛细管柱末端伸出来的部分切掉。
- (3) 如图 2.24 “用胶带标记色谱柱” 所示, 用胶带在拧紧的螺母下方对毛细管柱做标记。
- (4) 将毛细管柱从夹具上取下, 不要去掉胶带, 用丙酮擦拭毛细管柱。将色谱柱插入 MS 接口, 用手拧紧螺母对其进行固定。如果垫圈是新的, 用扳手将螺母再拧一整圈。如果垫圈以前曾使用过, 用扳手将螺母转动 20 到 40 度将其拧紧。
- (5) 将用来对色谱柱做标记的胶带去掉。

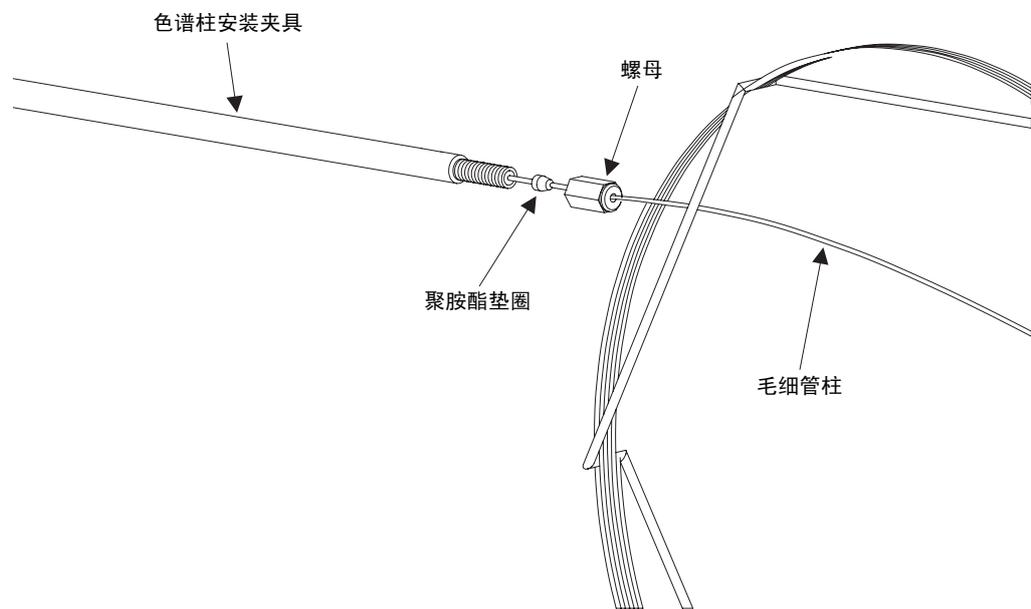


图 2.25 使用色谱柱安装夹具

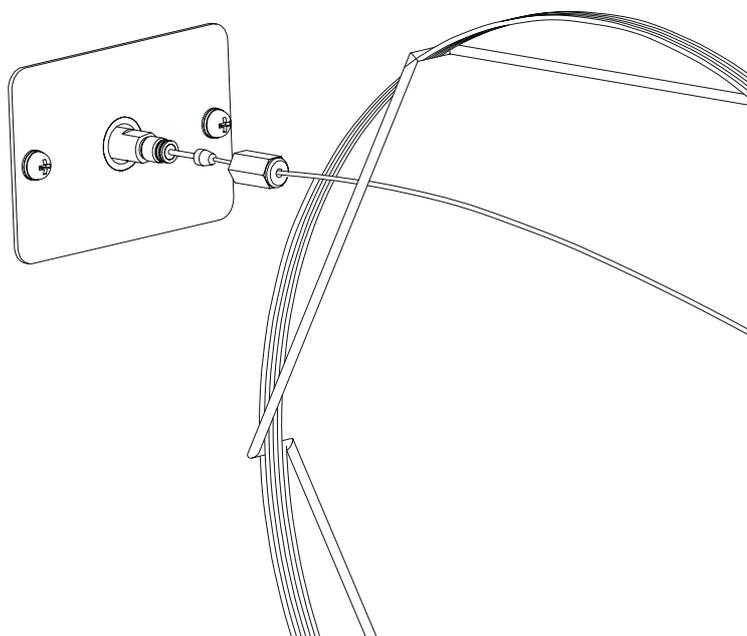


图 2.26 将毛细管柱连接至 MS



注

为防止背景噪音，一定要使用聚胺酯垫圈将色谱柱连接至 MS。石墨垫圈被夹具压紧，因此贴到色谱柱上；而聚胺酯垫圈没有被压紧，可以在色谱柱上滑动。为了保证色谱柱正确定位，要用胶带在聚胺酯垫圈和螺母下方对色谱柱做标记。

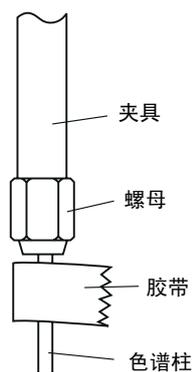


图 2.27 用胶带标记色谱柱



注

当螺母重复使用时，设备会提供一个冲头，将卡在安装螺母 (SSNE 16/012) 内的垫圈取下。为了减少接口螺丝的磨损，螺母只能重复使用两到三次。

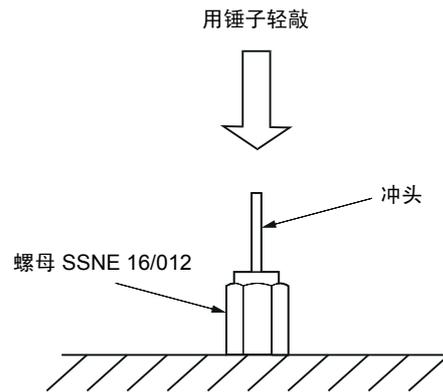


图 2.28 用冲头取下垫圈

3. 打开仪器。

- (1) 确保控制仪器电源的断路器打开，然后打开 GC。
- (2) 打开计算机、监视器和打印机，并启动 Windows。
- (3) 打开 MS。MS 左上角的电源指示灯会亮起。

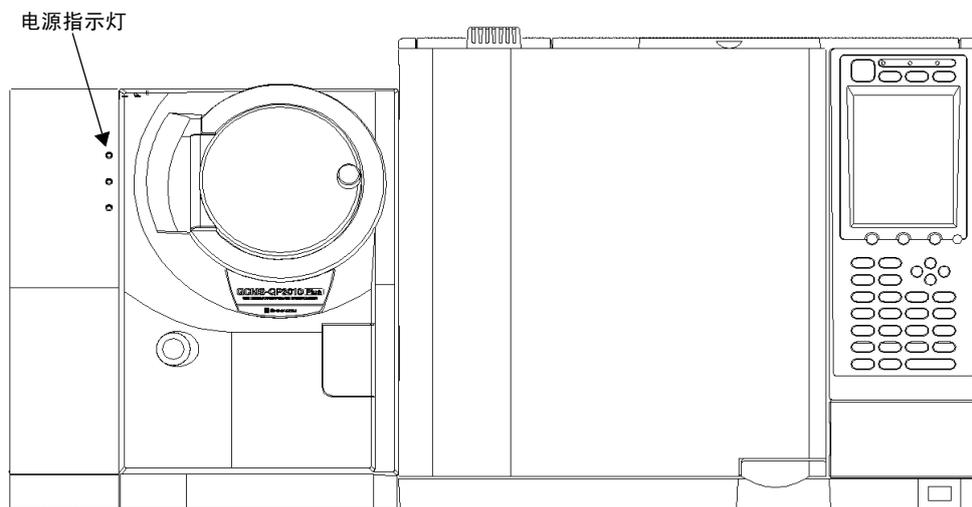


图 2.29 启动仪器



4. 启动 GCMSsolution.

(1) 双击 **GCMS 实时分析** 图标。屏幕出现“登录”对话框。



图 2.30 “登录”对话框

(2) 输入您的用户名和密码。第一次使用软件时，使用缺省用户名“Admin”，密码栏不要填任何东西。

单击**确定**按钮。

GCMSsolution 软件启动，屏幕出现“GCMS 实时分析”窗口。

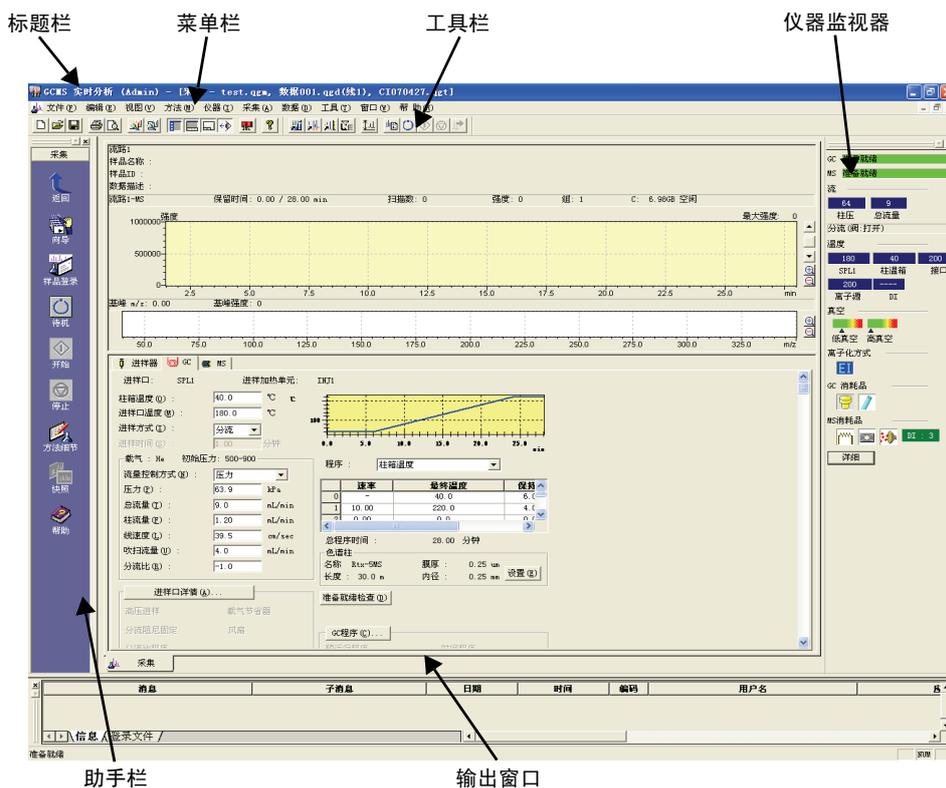


图 2.31 “GCMS 实时分析”窗口



5. 启动真空系统。



注意

如果仪器关闭很长时间而且周围温度比较低，机械泵油会变得非常粘稠。当油的粘度过高且机械泵工作时，机械泵马达会承受过多负荷。主电源断路器（位于仪器背后，参见章节 1.3.1 “GC/MS 分析系统”，第 3 页）会切断仪器电源，关闭仪器。
仪器关闭并在寒冷环境下时，要升高周围温度，并且当机械泵温度至少达到最低温度要求 (18 °C) 后，启动仪器。



注意

启动真空系统之前，一定要确认前门旋钮处于拧紧状态。



注意

启动真空系统后，不要拧紧 MS 前面板门上的旋钮。否则，关闭仪器后，不可能再松开旋钮。



注意

当用内径较大的色谱柱更换原来的色谱柱时，大量载气可能会流入 MS，从而阻碍真空系统的启动。启动真空系统之前，调整载气压力，使流入色谱柱的气流低于 15 mL/min。



(1) 单击助手栏中的**真空控制**图标。屏幕出现“真空控制”对话框。



图 2.32 “真空控制”对话框

(2) 单击**自动启动**按钮。

“启动”指示灯闪烁，屏幕显示进程栏，真空系统启动顺序开始启动。如进程栏所提示的那样，各个组件按顺序启动，当真空系统可以工作时，屏幕显示“已完成”。



图 2.33 真空系统启动完成

(3) 关闭“真空控制”对话框。

2.7

系统配置

2 基本操作

本章节是有关系统配置的说明。对自动进样器、进样口、色谱柱、检测器、辅助的温度控制、辅助气流以及其他组件的属性做了说明。

2.7.1 系统配置

1. 单击助手栏中的**系统配置**图标，打开“系统配置”对话框。



图 2.34 “系统配置”对话框

配置中可以包含的组件在左侧的“可用的组件”列表框中列了出来。此树形结构包括各种 GC、自动进样器、进样口、检测器和辅助选项。若要查看某个特殊组件的可用选项，单击各自图标左侧的加号 (+)。

2. 将某个组件加入配置，在“可用的组件”列表框中选择其图标并单击右箭头按钮。另外，还可以双击该图标，或者将图标从左侧窗口拖动至右侧窗口，然后松开鼠标左键。在右侧的“已用于分析的组件”列表框中会显示当前系统配置。



可用的 GCMS 模块

模块	可选值
GC	GC-2010
自动进样器	AOC-20i AOC-20i+s AOC-20d(M) AOC-20d(S)
进样口	SPL OCI WBI PTV
色谱柱	色谱柱
检测器	FID FPD FTD ECD TCD MS
其它单元	其它单元
附加加热器 *	
附加流路 *	

* 连接至主单元的单元会自动显示。

3. 双击“已用于分析的模块”列表框中列出的每个组件，打开“属性”对话框并输入必要的参数。绝大多数参数可以采用缺省设置。对色谱柱属性来说，选择使用的色谱柱的类型会自动输入其规格。确保 MS 离子源选择正确。按照应用和配置更改其他参数。有关每个 GC/MS 系统组件的参数的更多信息，请咨询在线 GCMS 帮助。

若要打印配置和参数，单击“系统配置”对话框中的**打印**按钮。

4. 当配置中所包含的所有组件在“已用于分析的模块”列表框中都已经列出并且输入属性后，单击**设置**按钮，退出“系统配置”对话框。

2.8

2 基本操作

系统检查与调谐

本章节是对如何进行系统检查和调谐 GC/MS 系统的说明。系统检查是一项在对仪器操作进行验证分析之前运行的诊断性检查。通过选择“调谐”窗口中的相关项目对系统进行调谐。

2.8.1 系统检查

概述

参数	描述	系统检查失败时的措施
维护	检查 GC/MS 消耗品已经使用了多长时间或多少次。	更换部件并将其使用次数（时间）重置为零。
GC 检查	检查 GC 系统状态。	如果需要进行调整或者维修，请与岛津公司代表讨论调整或维修事宜。 如果必须更换某个部件，按照操作建议进行更换。
MS 检查	对有关 MS 分析精度的各种数值进行检查。	如果需要进行调整或者维修，请与岛津公司代表讨论调整或维修事宜。 如果必须更换或调谐某个部件，按照操作建议进行更换或调谐。
根据需求情况运行自动调谐功能。	当系统检查失败时，执行自动调谐。	
或者		
运行自动调谐	无论系统检查结果如何都运行自动调谐。	
报告输出	打印系统检查结果。	



1. 单击助手栏中的**系统检查**图标，打开“系统检查”对话框。



图 2.35 “系统检查”对话框



注

系统检查中所输入的标准是用于测试的标准，并不反映制造商的规格。
当执行自动调谐时，当前调谐文件被覆盖。根据所调谐的项目，某些先前获得的校准曲线可能无法继续使用。

“系统检查”对话框

“系统检查”对话框中出现下列项目。

项目	描述
上次运行日期	显示上次执行系统检查的日期。
结果信息	显示通过、失败和其他信息。
已用时间	显示系统检查过程中已经用去的时间。

系统检查

按照“系统检查”对话框中所选的项目执行系统检查。

项目	描述
维护	检查 GC/MS 损耗件或维修部件已经使用了多长时间或多少次。
GC 检查	检验 GC 系统状态。
MS 检查	对有关 MS 分析精度的各种数值进行检查。
根据需求情况运行自动调谐功能。	如果显示“信号强度不稳”、“质量轴未对准”或者“质谱图峰值半宽故障”信息，运行自动调谐。
运行自动调谐	无论系统检查结果如何都运行自动调谐。
报告输出	打印系统检查结果。

若要显示每条项目的详细设置，单击**高级 >>**按钮。

**注**

某些检查只能对 EI 离子源进行。还有一些检查只能在 MS 结束操作后才能进行。不能执行的检查被禁止。更多信息，请参考 GCMS 帮助。

自动调谐通常利用缺省参数进行：

- “分辨率调整”选中
- “质谱图峰值半宽” = “0.6”
- “灵敏度调整”选中
- “质量数校准”选中

可以通过单击助手栏中的调谐图标改变自动调谐参数。选择高级 MS 参数标签中将要使用的调谐文件。

根据调谐文件中所输入的参数对系统进行调谐。请注意，根据所调谐的项目，某些先前获得的校准曲线可能无法继续使用。

按钮

“系统检查”对话框中出现下列按钮。

按钮	描述
运行	启动系统检查。
停止	停止系统检查。只有在执行系统检查时才允许执行此操作。
关闭	关闭“系统检查”对话框。
浏览结果	显示系统检查的结果。结果可以从“系统检查结果”对话框中打印出来。
帮助	打开帮助文件。
高级	显示高级参数。只有获得“改变系统检查设置”授权的用户才能访问这些参数。



单击“运行”，启动系统检查。屏幕显示系统检查用去的时间，进程栏对系统检查进度进行跟踪。



图 2.36 "系统检查" 对话框

如果系统检查完成并且未发现任何问题，进程栏上方显示“通过”。如果检测到问题，显示“失败”。

2. 单击**高级 >>** 按钮，显示 GC 和 MS 高级标签。选择 GC 标签以选择系统检查过程中将要检查的维护项目和消耗性部件。



图 2.37 系统检查 GC 高级参数标签



GC 维护项目

项目	描述
LCD 背景灯	检查背景灯工作的时长。
风扇马达	检查风扇马达持续工作的时间。
CRG 制冷剂	检查 CRG 制冷剂消耗计数器。
隔垫	检查当前安装的隔垫已经用过的次数。更多信息，参考 GCMS 帮助。
衬管	检查当前安装的玻璃衬管已经用过的次数。更多信息，参考 GCMS 帮助。

3. 选择 MS 标签以选择系统检查过程中将要检查的维护项目和消耗性部件。



图 2.38 系统检查 GC 高级参数标签



MS 维护项目

项目	描述
灯丝	检查灯丝使用的时间。更多信息，参考 GCMS 帮助。
离子源	检查离子源使用的时间。更多信息，参考 GCMS 帮助。
检测器	检查检测器已经打开使用的时间。更多信息，参考 GCMS 帮助。
涡轮分子泵	检查涡轮分子泵已经打开并持续运行的时间。更多信息，参考 GCMS 帮助。
机械泵	检查机械泵已经打开并持续运行的时间。更多信息，参考 GCMS 帮助。
机械泵油	检查机械泵油已经使用的时间。更多信息，参考 GCMS 帮助。
重置	打开对话框，重置维修部件的使用时间或使用的次数。

 **注**

只有岛津公司代表才能将涡轮分子泵的使用时间清零。

重置按钮打开一个对话框，通过该对话框，可以对部件的使用时间或次数进行重置。单击**清零**按钮，将维修部件使用的时长或者次数重置为零。

- 单击**重置**按钮时，屏幕出现“重置消耗性部件使用时间”对话框。每次更换消耗性部件时，都要对使用时间或次数进行重置。



图 2.39 “重置消耗品”对话框

**注**

只有获得“改变系统检查设置”授权的用户才能对使用时间或次数进行重置。

- 当单击**清零**按钮时，数值变为 0。
- 如果部件先前曾经更换过，输入相应的值。
- 当单击**确定**按钮时，数值被改变。
- 所显示的数值与“重置消耗品”对话框上次显示的数值相同。数值不会自动更新。

重置项目

	项目	描述
GC	隔垫	单击 清零 按钮，将使用次数重置为 0。用户无法定义该数字。
	玻璃衬管	
	CRG 制冷剂（色谱柱箱）	
	CRG 制冷剂 (INJ#2)	
MS	1 号灯丝	输入相应的时间。
	2 号灯丝	
	离子源	
	1 号机械泵油	输入相应的时间。
	2 号机械泵油	只有在安装了第二个机械泵的情况下才显示此项目。输入相应的时间。



5. 单击 GC 标签，选择 GC 检查项目。



图 2.40 系统检查高级 GC 标签

GC 检查项目

项目	描述
热传感器	检查温度传感器在 300 °C 或以上的温度下使用了多长时间。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
直流电压	测量直流电压并检查误差是否在标准范围内。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
环境	测量室内温度和空气压力，并检查这些数值是否在理想的工作条件内。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
初始压力	测量载气的初始压力并检查该数值是否高于环境设定值。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
CPU	检查 CPU 寄存器和实时时钟。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
检测器 ROM	检查每个检测器的检测器 ROM。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
检测器 ADC	检查每个检测器的检测器 ADC。更多信息，请参考 GCMS 帮助。



项目	描述
检测器高压	分别检查各个检测器的高压。只有在安装了 FID、FTD 或 FPD 时，才执行此检查。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
检测器点火	检查每个检测器的点火脉冲和点火过程。只有在安装了 FID、FTD 或 FPD 时，才执行此检查。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
ECD 池频率	测量每个检测器 ECD 的脉冲电压范围并将池的脏度和阈值进行比较。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
流量单元板 ROM	检查每个流量控制电路 (SLOT) 的 ROM。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
流量单元板 ADC	检查每个流量控制电路 (SLOT) 的 ADC。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
流量控制	检查每个流量端口的流量控制是否正确。更多信息，请参考 GCMS 帮助。

6. 单击 MS 标签，选择 MS 检查项目。

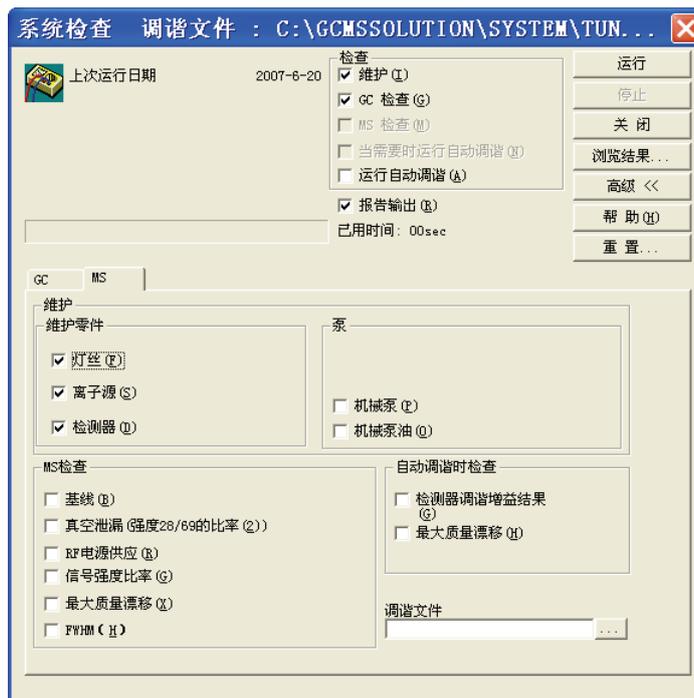


图 2.41 系统检查 MS 高级参数标签



注

MS 标签中输入的参数相当于系统检查标准，并不反映厂商规格。

MS 检查项目

项目	描述
基线	确定基线波动值 (RMS)。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
28/69 的强度比	对 $m/z=28$ (氮气) 和 $m/z=69$ (PFTBA) 测得的比率进行评估。该比率用来确定是否存在泄漏情况。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
RF 电源	确认高频电源是否工作正常。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
信号强度比率	将 PFTBA 信号强度与先前自动调谐的结果进行对比。若想使用自动调谐条件下输入的调整灵敏度参数，必须选中“调谐条件”对话框中的“质量数校准”。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
最大质量偏移	确定质量轴是否发生偏移。如果在自动调谐过程中更改此参数，必须选中自动调谐条件下的“校准质量数”选项。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
FWHM	确定谱峰半峰宽与为 $m/z = 69, 219$ 和 512 所输入的半峰宽值的偏移量。如果在自动调谐过程中需要对此参数进行校正，必须选中自动调谐条件下的“调整分辨率”选项。更多信息，请参考 GCMS 帮助。



7. 自动调谐过程中在 MS 标签 “自动调谐检查” 部分中选择想要检查的项目。



图 2.42 系统检查 GC 高级参数标签

当选中 “运行必要的自动调谐” 或 “运行自动调谐” 时，系统在运行自动调谐后对这些项目进行检查。

自动调谐后检查

项目	描述
检测器增益调谐结果	确定自动调谐得出的检测器电压设置。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
最大质量偏移	确定质量轴偏移。请注意，在自动调谐条件下，必须选中 “校准质量数” 选项。更多信息，请参考 GCMS 帮助。



8. 选择系统检查过程中用于自动调谐的调谐文件。

调谐文件

项目	描述
调谐	调谐中所显示的文件用于在系统检查过程中对仪器进行自动调谐。若要选中或改变文件，可以直接输入完整的文件路径，或者通过单击右侧的浏览按钮打开“选择调谐文件”对话框。从“选择调谐文件”对话框中选择相应的文件并单击 确定 。文件名就会显示在“调谐”中。

9. 单击运行按钮运行系统检查。

10. 选择**查看结果 ...**来显示“系统检查结果”对话框。此操作显示上次系统检查的结果。

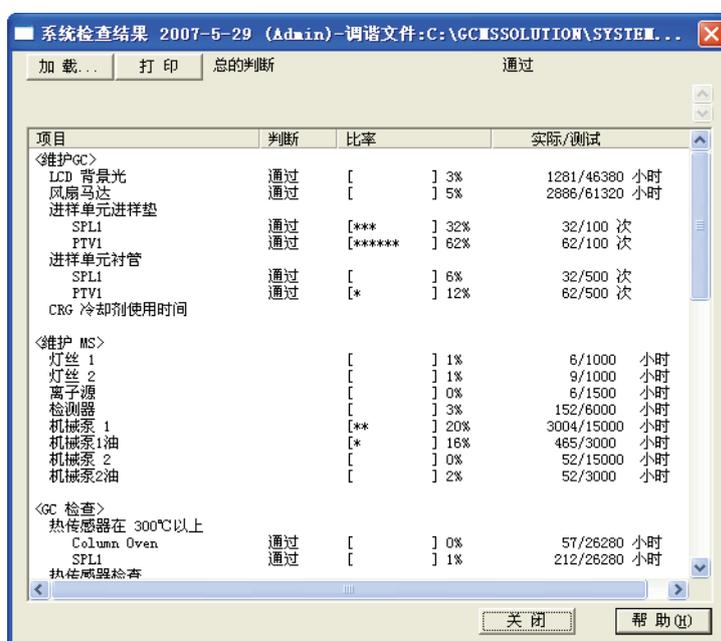


图 2.43 “系统检查结果”对话框



注

检查后，结果自动显示。可以打印当前和以前的系统检查结果。没有必要通过运行系统检查的方法来显示或打印先前的结果。



系统检查表

列	说明
项目	执行的检查项目。
判断	项目是否通过测试以及建议措施。
比率	测得的数值与标准值之间的比率。允许对系统状态进行快速检查。
实际 / 标准	项目实测值和标准值。

“系统检查结果”对话框中的按钮。

按钮	描述
加载	打开日志文件夹中保存的以往结果。文件自动保存和命名。系统为文件分配一个 14 个字符的名称。第一个字符为系统编号。第二个字符是下划线 ()。第三到第六个字符代表年度。第七和第八个字符代表月份。第九和第十个字符代表日期。第十一和第十二个字符代表小时，第十三和第十四个字符代表分钟。因此，如果在 2000 年 1 月 1 日 13:00 对系统 1 行系统检查，名称就是 1_200001011300.qgc。
打印	打印当前显示的结果。

11. 单击打印按钮，打印当前显示的系统检查结果。

维护、GS、MS 和后期调谐检查项目及其结果都被打印出来，后面是具体的 GC 和 MS 信息。

随系统检查结果打印的文本

文本	描述
标题	打印用户姓名、日期和系统检查时间以及打印时间。
页脚	在中间位置打印页码和页数。



2.8.2 调谐

在“调谐”窗口，可以对控制 MS 的参数进行调整，以便获得理想的质谱峰。

有两种调谐方法：自动调谐和手动调谐。自动调谐按照自动调谐条件的规定自动调整各种仪器的控制参数。在手动调谐中，各种控制参数用于手动调整质量峰值。打开“调谐”窗口时，系统显示上次保存或用于数据采集的调谐文件。除非另有其他规定，在系统检查或数据采集过程中，使用的是“调谐”窗口中自动打开的文件。

有关创建或访问调谐文件的操作说明如下。

1. 单击“GCMS 实时分析”窗口中助手栏上的**调谐**图标。显示“调谐”窗口。

若要创建新的调谐文件，请从“文件”菜单中选择“新建调谐文件”。继续执行第 2 步。

对当前文件进行调谐，依次选择**文件 > 打开调谐文件**以显示“打开调谐文件”对话框。选择适当的调谐文件，然后单击**打开**。继续执行第 3 步。

2. 单击助手栏中的**自动调谐条件**图标，或者依次选择**调谐 > 自动调谐条件**，打开“调谐信息”对话框。



图 2.44 “调谐信息”对话框



调谐条件

选择自动调谐过程中采用哪些参数，然后输入这些参数。参数包括：调整分辨率、调整灵敏度、校准质量数和调整质量模式。选择自动调谐过程中将要加入的参数。当调谐条件发生改变时，MS 系统检查或自动调谐结果可能会发生变化。

仪器参数	描述
调整分辨率	调整分辨率，使通过标准 (PFTBA) 在半高值下获得的峰值宽度接近半峰宽 (FWHM) 的输入值。
峰轮廓 FWHM	0.3 - 2.0 u (“u”表示原子质量单位) 注：虽然分辨率随着半峰宽的降低而升高，信号强度却呈下降趋势。
调整灵敏度	通过“目标离子”调整，将特定离子的透镜系统灵敏度调至最大。
校准质量数	由标准 (PFTBA) 生成的质谱图用于校正质量轴的偏移。
调整质量模式	调整透镜系统以最大化 m/z 502 峰值并对强度进行纠正，使按照磁场类型中的 MS 测得的标准质谱图 and 主仪器质谱图之间的强度模式相等。模式校准按照规定的强度比设定强度纠正参数。

选定合适的参数并输入必要数值后，单击**确定**按钮并关闭“调谐信息”对话框。



3. 单击助手栏中的**启动自动调谐**图标或者工具栏上的**启动调谐**按钮，自动对仪器进行调谐。自动调谐还可以通过**调谐 > 启动调谐**命令的方式来启动。

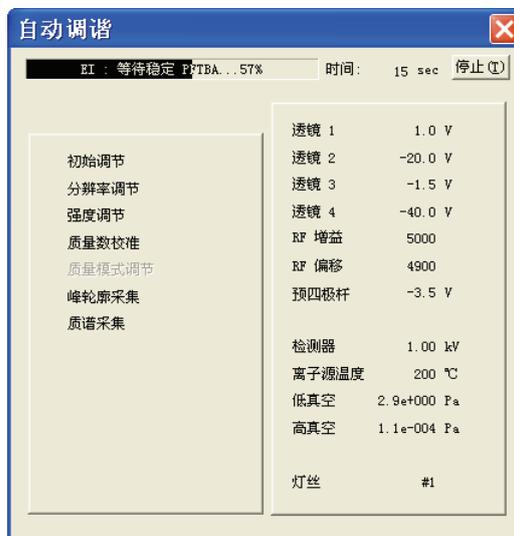


图 2.45 “自动调谐”对话框

自动调谐完成后，保存文件。第一次保存文件，依次选择**文件 > 调谐文件另存为**或者用新名称来保存文件。依次选择**文件 > 保存调谐文件**来覆盖已经存在的调谐文件。

4. 单击助手栏中的**查看调谐结果**图标来查看调谐结果。屏幕显示对应每个 m/z 的峰轮廓。

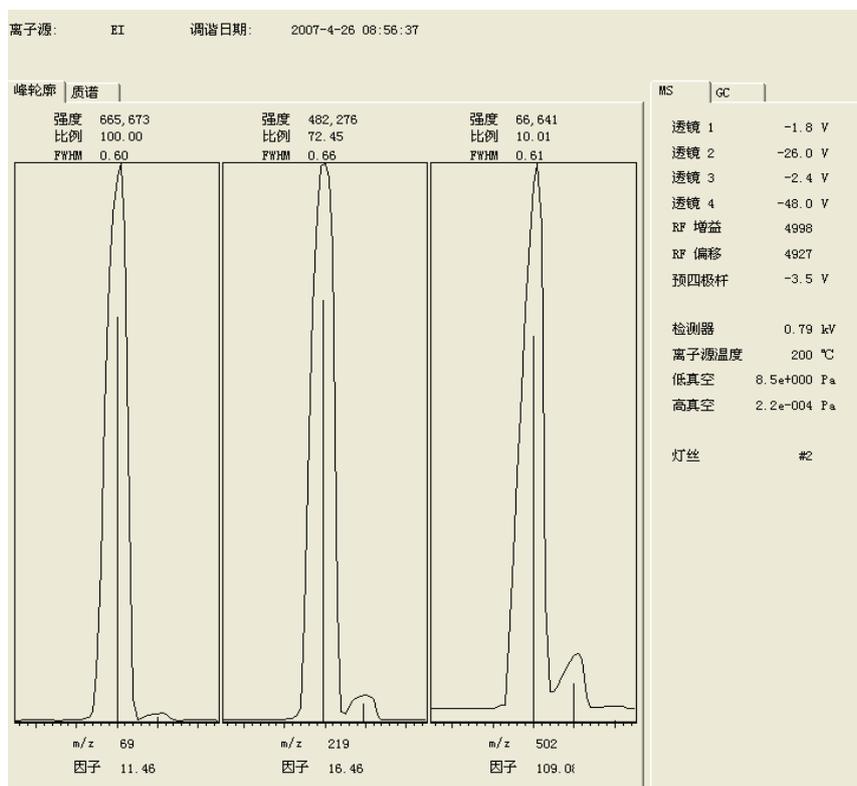
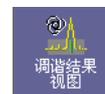


图 2.46 调谐结果 - 峰轮廓



5. 单击工具栏上的  按钮打印调谐结果。

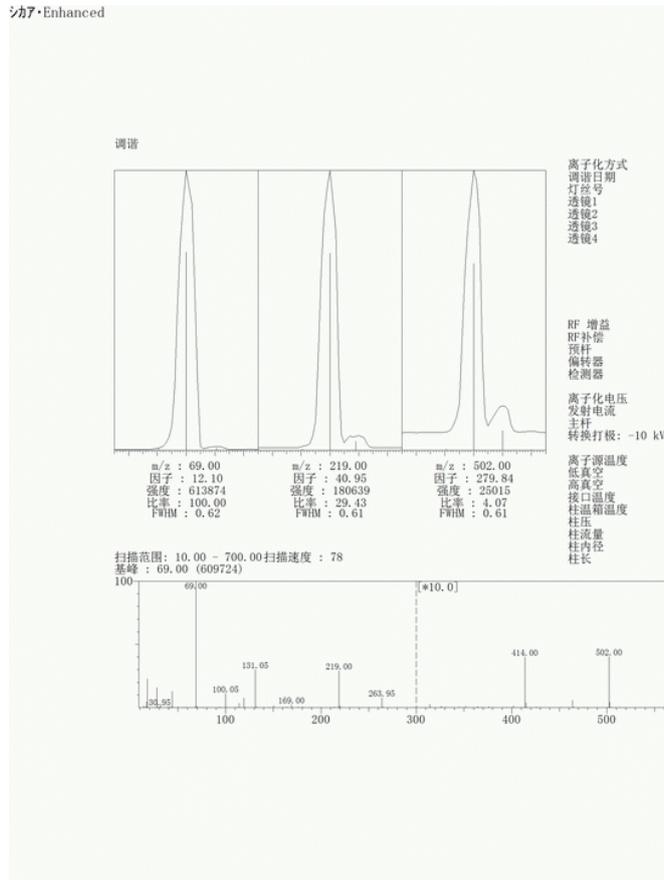


图 2.47 打印出的调谐报告



注

通过单击助手栏中的**峰监测视图**图标显示的“峰监测”画面与真空泄漏检查和其他操作过程中所显示的画面相同。
有关真空泄漏检查的更多信息，请参阅章节 10.6 “检查泄漏”，第 226 页。





2.8.3 高质量数的调整

此仪器具有可以对质量最高为 m/z 614 的分子进行质量校准的自动调谐的功能。在正常操作范围内很少发生质量位移（最高约 m/z 700）。

然而，在大于 m/z 700 的高质量范围内， m/z 可能会发生校准位移。

为了保证在高于 m/z 700 的范围内进行准确校准，必须通过下列流程进行手动校准。

分析条件（色谱柱：DB-5 ms，内径 0.25 mm，长 30 m，厚 0.25）

样品 1：Tris (perfluoroheptyl) -S-triazine 1 % 溶液（丙酮）

样品 2：Tris (perfluorononyl) -S-triazine 1 % 溶液（丙酮）

GC：进样口 250 °C，色谱柱头压力 100 kPa，总流量 30 mL/min，无分流注射（1 min. 进样）

COL 50 °C (1 min) _ 5 °C /min_ 100 °C (1 min) _ 30 °C /min_ 250 °C (10 min)

MS：I/F 250 °C，离子源 200 °C

1. 执行自动调谐命令。
完成后，打开峰值显示器并关闭灯丝。
2. 注入 1 μ L 样品 1 并启动 GC。
3. 在从峰值显示器窗口中打开的质量校准窗口中，将指针对准 m/z 866 的最高单元。
4. 样品注入后 8 分钟，打开灯丝。
5. 10 分钟之后，可以对 3 分钟的峰值部分进行校准。单击**居中**按钮对峰值进行校准。
6. 接下来，注入 1 μ L 样品 2，关闭灯丝，然后启动 GC。
7. 与样品 1 相同，在质量校准窗口中，将指针对准 m/z 1066 的最高单元，8 分钟后打开灯丝。然后和第 5 步一样对峰值进行校准。
8. 单击**补充**按钮，然后单击**确定**。
9. 保存调谐文件。如果出现“您是否采集并保存峰轮廓 / 质谱图数据？”，单击**否**按钮。



注

会有少量注入的三氮杂苯痕迹留在进样口、色谱柱等仪器内并阻碍校准后的分析。在这种情况下，将色谱柱温度设定在 250 °C 并进行老化处理。虽然老化 1 小时即可进行浓度为 1 ppm 的样品的分析，但是要进行超微量分析，建议换衬管或老化几个小时。

2.9

一般操作

2 基本操作

2.9.1 管理文件

1. 文件类型

类型	描述	提取
数据文件	保存原始采集的数据，例如色谱和质谱，包括： <ul style="list-style-type: none">• 峰值积分和浓度计算结果• 柱箱温度状态和数据采集过程中产生的误差• 分析中所使用的方法文件的内容，包括参数设置• 报告生成时，报告格式文件的内容• 进行批处理时，批处理文件的内容• 分析中所使用的调谐文件的内容	.qgd
方法文件	保存与仪器、数据采集、定性、定量、数据查看和 QA/QC 有关的参数。系统会把系统配置保存起来，这样，打开方法文件时，可以对系统配置进行检查。方法中所使用的校准曲线也被保存。	.qgm
报告格式文件	对报告中包含哪些信息和信息布局情况以及诸如页眉和页脚这样的其他报告格式信息加以保存。	.qgr
批处理文件	保存自动数据采集和分析中所使用的批处理表格。GCMS 实时分析和 GCMS 后处理分析可以访问同一个文件。	.qgb
调谐文件	保存用于调整仪器的调谐参数以及通过这些参数得出的调谐结果。	.qgt
谱库文件	保存用于相似度检索的质谱和组分信息。谱库文件包括可选的 NIST 商业数据库和由目标组分的质谱和组分信息建立的个人谱库。在谱库文件中的质谱和信息中查找与质谱匹配的项目。	.lib*1
浏览文件	保存布局信息，比如：加载的方法 / 数据文件名、文件顺序以及统计计算设置。	*.qgq
布局文件	保存布局、加载至每个单元的数据以及与显示相关的信息。	*.lyt

*1 谱库由多个文件组成。对商业和个人谱库来说，文件的构成会多少有些不同。复制谱库文件时，一定要将所有相关文件都复制。

商业谱库：.lib, .c2s, .fom, .nam, .ncv, .spc, .str

个人谱库：.lib, .com, .flg, .fom, .nam, .spc



2. 文件管理

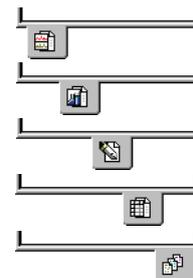
“数据浏览器”窗口按照类型显示各种文件，方便对文件进行管理。数据浏览器的五个标签为：数据、方法、报告格式、批处理和所有文件。可以在不返回 Windows 桌面的情况下从“数据浏览器”窗口中移动、复制或删除任何文件。

(1) 打开“数据浏览器”窗口

依次选择**文件 > 数据浏览器**以打开“数据浏览器”窗口。屏幕上出现数据浏览器时，文件菜单中数据浏览器左侧会出现一个复选框，以便其能够被看见。依次选择**文件 > 数据浏览器**，关闭“数据浏览器”窗口。

(2) 显示文件类型

单击与相应文件类型相对应的标签。位于数据浏览器列表框下方的标签为：数据、方法、报告格式、批处理和所有文件。所选类型的文件被显示出来。



(3) 更改文件显示方式

右键单击列表框并选择**文件视图**，改变文件显示方法。从“文件视图”的子菜单中选择文件显示方式：**大图标**、**小图标**、**列表**和**详细信息**。当“数据浏览器”窗口处于活动状态时，还可以通过**视图 > 文件视图**命令来改变文件显示方式。

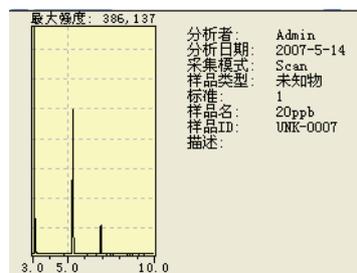


注

“文件视图”子菜单左侧的复选标记表示当前的显示模式。

(4) 确认数据。

用鼠标右键单击列表框并选择**数据预览**，在列表框下方显示数据预览。数据标签被选中时，会显示色谱图和样品信息。如果其他标签被选中，会显示文件注释。





(5) 改变项目

若要改变文件目录或者项目，单击复选框中最右边的**选择属性**按钮。屏幕出现“项目（文件夹）选择”对话框。

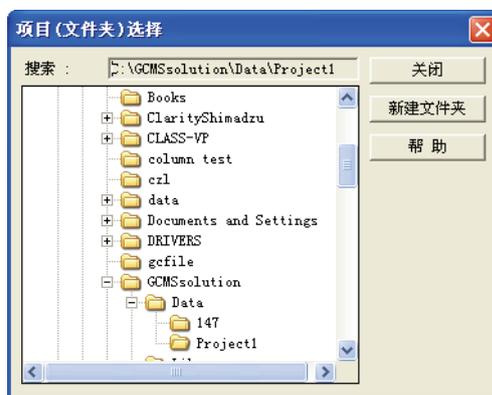


图 2.48 “项目（文件夹）选择”对话框

当屏幕出现“项目（文件夹）选择”对话框时，打开的文件夹是当前选中的项目。层次排列与 Windows 资源管理器中的顺序相同。选择目标文件夹，单击**确定**按钮。“项目（文件夹）选择”对话框关闭，最新选择的项目中的文件显示在列表框中。

(6) 创建新项目

单击**创建新项目**按钮，该按钮位于**选择项目**按钮左侧，打开“创建新项目（文件夹）”对话框。



图 2.49 “创建新项目（文件夹）”对话框

为项目输入一个名称。从当前打开的项目中复制方法、批处理和 / 或报告格式文件，选择相应的复选框。

输入名称并选择要复制的文件后，单击**确定**按钮。“创建新项目（文件夹）”对话框关闭，先前复制的文件（如果有文件被复制的话）显示在列表框中。



2.9.2 打开和保存文件

本章节是对如何打开和保存文件（比如数据或方法文件）的说明。打开和保存命令与 Windows 中所使用的命令类似。更多信息，可参考 Windows 用户手册。

1. 打开文件

虽然下面的步骤只对打开方法文件做了说明，然而这些操作适用于所有文件。

- (1) 选择**文件 > 打开或者文件 > 打开方法文件**，或者单击工具栏上的**打开**按钮。屏幕显示“打开方法文件”对话框。

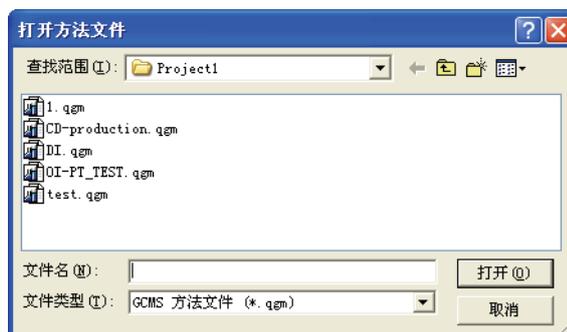


图 2.50 “打开方法文件”对话框

- (2) 单击“查找范围”复选框按钮，上下滚屏，改变目录或驱动器。单击**向上一级**按钮，打开包含当前打开的文件夹的目录。若要打开下层目录，从列表框中选择一个文件夹并单击**打开**按钮，或者双击该文件夹。直到目标文件所在的文件夹出现在复选框中时，才能变更和展开目录。
- (3) 从列表框中选择想要的文件，确保文件名文本框中显示正确的文件名。单击**打开**按钮打开所选文件。





2. 保存新文件

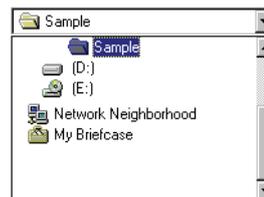
虽然下面的步骤只对保存新建数据文件的方法做了说明，然而这些操作适用于所有文件。

- (1) 选择 **文件 > 另存数据文件为**，打开“数据文件另存为”对话框。



图 2.51 “数据文件另存为”对话框

- (2) 单击“保存在”复选框按钮，上下滚屏，改变目录或驱动器。单击 **向上一级** 按钮，打开包含当前打开的文件夹的目录。若要打开下层目录，从列表框中选择一个文件夹并单击 **打开** 按钮，或者双击该文件夹。直到目标文件所在的文件夹出现在 **保存在** 复选框中时，才能变更和展开目录。如有必要，单击 **新建文件夹** 按钮创建一个新文件夹。
- (3) 在文件名文本框中输入文件名，然后单击 **保存** 按钮，将文件保存为该文件名。





2.9.3 使用帮助

1. 打开特定主题的帮助文件

若想获取有关活动窗口或对话框的信息，按 F1 键。如果可用的话，GCMS 帮助窗口将打开与活动窗口或对话框相关的帮助主题。



图 2.52 GCMS 帮助窗口

此外，某些窗口和对话框包含帮助按钮，单击时，直接链接至相关的帮助主题。



2. 通过键盘打开帮助文件
选择帮助 > 目录以打开 GCMS 帮助窗口。



图 2.53 GCMS 帮助内容窗口

单击 GCMS 帮助窗口左侧的“索引”标签。列表框中显示关键词索引。
滚动列表框，查找需要的主题。选择关键词，单击显示按钮，打开帮助主题。



注

当同一关键词出现在一个以上的主题中时，系统会将找到的主题列出来。列表显示在 GCMS 帮助窗口的右侧。滚动屏幕，查找所需的主题。从列表中选择主题，然后单击显示按钮。



图 2.54 发现的主题列表

**注**

GCMS 帮助窗口可以随意移动和调整大小。要改变窗口位置，通过标题栏拖动窗口。若要改变窗口大小，可以拖动窗口边框或者右下角。

2.9.4 系统管理概念

在 GCMS-QP2010 Plus 中，系统安全以用户管理为中心。GCMSsolution 软件允许管理员为每个用户选择授权级别。授权级别决定用户对仪器、数据和方法的使用权限。这样做可以防止不应该对方法进行更改的用户意外地改变权限并对系统进行保护，防止被没有权限关闭系统的用户将系统关闭。

1. 用户和组

系统管理包括用户、组和授权系统。下图对用户、组和授权系统做了详细说明。每个用户属于一个或多个组。每个组被指定一定级别的授权。每个授权级别包含指定的权限。

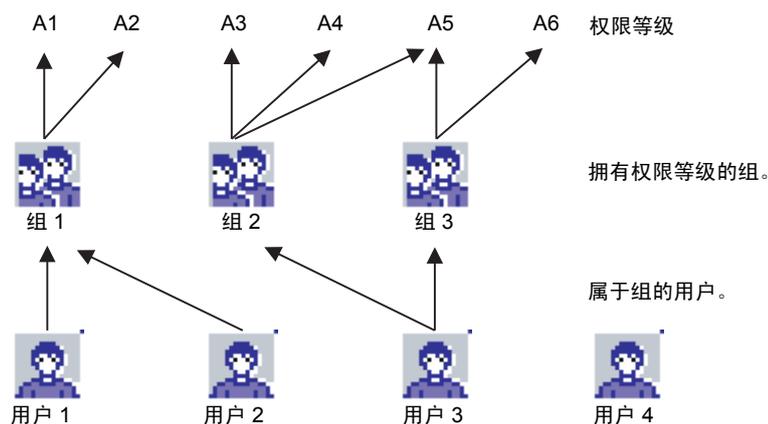


图 2.55 用户、组和权限等级

- 用户 1 只属于组 1，可以在组 1 所拥有的权限 1 和权限 2 下进行操作。
- 和用户 1 一样，用户 2 只属于组 1，也可以在权限 1 和权限 2 下进行操作。
- 用户 3 属于组 2 和组 3，可以在两个组所拥有的所有权限 3 — 6 下进行操作。
- 用户 4 不属于任何组，因此，没有任何权限。



权限等级	描述	缺省组		
		H/W 管理员	方法建立者	操作员
用户管理	添加或删除用户、设定政策和执行章节 2.9.5 “系统管理”，第 70 页中所述功能的权限。			
编辑系统配置	更改系统配置和执行章节 2.7 “系统配置”，第 39 页中所述功能的权限。	○	○	
编辑方法 (仪器参数)	编辑方法文件中输入的仪器参数和执行章节 2 “基本操作”，第 11 页中所述功能的权限。		○	
编辑方法 (采集显示设置)	对方法文件中数据视图参数或者通过视图 > 数据视图参数访问的参数进行编辑的权限。		○	
编辑方法 (数据处理参数)	对方法文件中的定性和定量分析参数或者章节 4 “定性分析”，第 109 页和章节 5 “定量分析”，第 135 页中所述参数进行编辑的权限。		○	
编辑报告模板	编辑报告格式文件并执行章节 6 “生成自定义报告”，第 163 页中所述功能的权限。		○	
编辑批处理表	编辑批处理表并执行章节 7 “连续分析”，第 173 页中所述功能的权限。		○	○
创建模板	为方法、批处理和报告格式文件创建模板并执行章节 2.9.6 “模板”，第 80 页中所述功能的权限。		○	
修改自动调谐设置	改变调谐条件并执行章节 2.8.2 “调谐”，第 54 页中所述功能的权限。	○		
修改系统检查设置	更改系统检查参数并执行章节 2.8.1 “系统检查”，第 41 页中所述功能的权限。	○		
开关真空系统	启动和关闭仪器并执行章节 2.4 “仪器启动与关闭”，第 14 页中所述功能的权限。	○		
运行系统检查和自动调谐	按照章节 2.8 “系统检查与调谐”，第 41 页中的规定进行系统检查和自动调谐的权限。	○	○	○



权限等级	描述	缺省组		
		H/W 管理员	方法建立者	操作员
运行峰监视	进行峰监视的权限。	○		
运行批处理数据采集	按照章节 7.2 “自动数据采集与数据分析”，第 175 页中的规定运行自动数据采集和分析的权限。		○	○
运行单个数据采集	收集单个样品数据并执行章节 3.3 “单次运行设置”，第 102 页中所述功能的权限。		○	
运行后处理分析	对 GCMS 后处理分析中的数据进行分析并执行章节 4 “定性分析”，第 109 页和章节 5 “定量分析”，第 135 页中所述功能的权限。		○	○

2. 管理员

管理员是拥有执行 GCMSsolution 软件中所有功能权限的用户。软件安装后，系统管理员可以通过用户名为“Admin”并且拥有系统管理员特权的缺省用户来访问并设置软件。



2.9.5 系统管理

“系统管理”对话框能够让系统管理员执行很多功能。添加新用户时，同时为它们指定用户名、密码和访问权限。组被添加或编辑。设定用于控制用户登录的参数。一旦发生改变或者添加用户，系统会通过事件日志对修改情况进行记录。

1. 选择文件 > 系统管理 以打开 “系统管理” 对话框。



图 2.56 “系统管理”对话框

2. 通过密码标签可以更改在系统中注册的用户密码。如果尚未给某个用户指定密码，标签上的所有字段都被停用。

参数	描述
用户名	显示当前登录的用户的名称。
旧密码	输入当前所使用的密码。
新密码	输入一个新密码。
确认新密码	输入与新密码完全相同的密码，目的是确认密码输入正确。



注

如果用户没有通过密码登录，则用户标签被用来输入密码。更多信息，见下一节，其中对用户标签做了详细说明。



3. 用户标签显示系统中所有已注册的用户。选择一个用户名称可以显示用户在“分配的组”中属于哪个组。添加用户，单击**添加**按钮。屏幕出现“添加用户”对话框。

图 2.57 “添加用户”对话框

为每个用户输入下列信息。

属性	描述
用户 ID	为新用户键入用户 ID。此用户 ID 用于登录。
用户名	为新用户输入用户名。
描述	输入对该用户的描述，例如，全名。
使用密码	复选此处，让用户在登录时输入密码。复选时，密码和确认密码字段被激活。
密码	如果使用密码被复选选中，输入一个用户登录时输入的密码。
确认密码	再次输入密码，确认密码是否输入正确。
管理员	复选此处将用户变为管理员。
组列表	选择用户将要属于的组（一个或多个）并单击 添加 按钮，或者双击该组。该组被移动至“已选择的组”列表框内。
已选择的组	显示用户所属的组。若要用户从组中删除，选择该组并单击 删除 按钮，或者双击该组。



注

如果密码已经使用，在策略 1 标签中设定最小密码长度。

设定新用户后，单击**确定**按钮，“添加用户”对话框关闭。

若要删除用户，选择用户标签中的相应用户并单击**删除**按钮。

若要显示用户属性，选择 用户标签中的相应用户并单击**属性**按钮。屏幕出现“用户属性”对话框。



图 2.58 “用户属性”对话框



显示有关每位用户的下列属性。

属性	描述
用户 ID	显示所选用户的用户 ID。此字段无法更改。
用户名	显示所选用户的用户名。
描述	显示所选用户的描述。
使用密码	复选此处，让用户在登录时输入密码。复选时，密码和确认密码字段被激活。如果该标签已经被复选，则输入的密码当前正在使用中。
密码	如果使用密码被复选选中，输入一个用户登录时输入的密码。
确认密码	再次输入密码，确认密码是否输入正确。
管理员	复选此处将用户变为管理员。如果已经被复选，则用户当前拥有系统管理员的特权。
组列表	选择用户将要属于的组（一个或多个）并单击 添加 按钮，或者双击该组。该组被移动至“已选择的组”列表框内。
已选择的组	显示用户所属的组。若要用户从组中删除，选择该组并单击 删除 按钮，或者双击该组。



注

如果密码已经使用，在策略 1 标签中设定最小密码长度。
用户属性编辑完毕之后，单击**确定**按钮，“用户属性”对话框关闭。



4. 组标签显示所有已输入的组。选中一个组，显示该组被授予的权限。若要创建一个新组，单击**添加**按钮。屏幕出现“添加组”对话框。



图 2.59 “添加组”对话框

为每个新组输入下列信息。

属性	描述
组名	为新组输入一个名称。
描述	为新组输入简要的说明。
权限列表	选择该组将要被授权拥有的权限（一项或多项）并单击 添加 按钮，或者双击该权限。该权限被移动至“选择的权限”列表框内。
选择的权限	显示该组所拥有的权限。若要删除某项权限，选中该权限并单击 删除 按钮，或者双击该权限。

设定组之后，单击**确定**按钮，“添加组”对话框关闭。

若要删除组，在组标签中选择相应的组并单击**删除**按钮。

若要显示组的属性，在组标签中选择相应的组并单击**属性**按钮。屏幕出现“组属性”对话框。

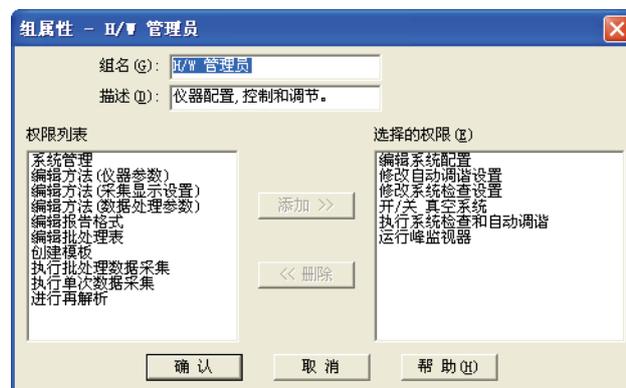


图 2.60 “组属性”对话框

显示下列有关每个组的属性。

属性	描述
组名	显示所选组的名称。
描述	显示有关已选择组的简要说明。
权限列表	选择该组将要被授权拥有的权限（一项或多项）并单击 添加 按钮，或者双击该权限。该权限被移动至“选择的权限”列表框内。
选择的权限	显示该组所拥有的权限。若要删除某项权限，选中该权限并单击 删除 按钮，或者双击该权限。

编辑完组的属性之后，单击**确定**按钮，“组属性”对话框关闭。



5. 事件日志标签显示用户管理中所做的一切变更和活动的历史记录。若要将日志用于其他应用或 GCMSsolution 功能，单击**另存为文本**按钮将其保存为文本文件。屏幕出现“转换事件日志”对话框。

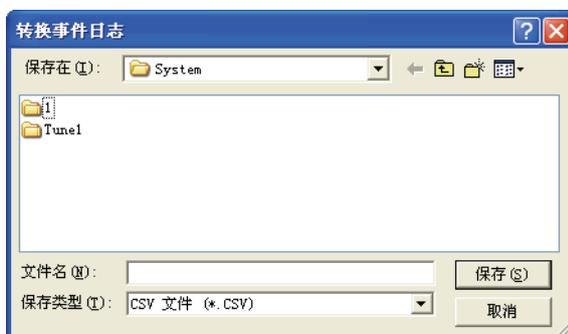


图 2.61 “转换事件日志”对话框

选择一个目录，输入文件名，单击**保存**按钮，将文件保存。更多信息，请参考[章节 2.9.2 “打开和保存文件”，第 63 页](#)。

若要删除事件日志，单击**清除全部事件**按钮。屏幕出现确认消息。单击**是**按钮清除日志。

6. 通过策略 1 标签输入一般用户管理参数。
只有经过系统管理员授权的用户才能执行此页上的设置操作。

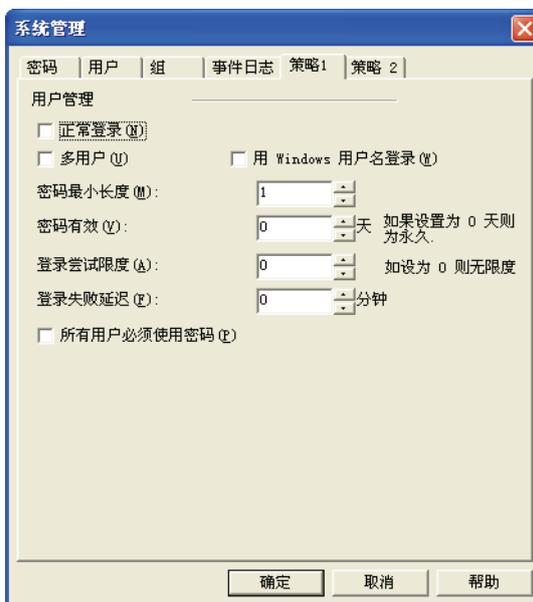


图 2.62 系统管理策略 1 标签



参数	描述		默认
正常登录	复选	登录时必须输入用户名。	
	未复选	“登录”对话框包含一个复选框，其中列出了所有已输入的用户，用户名可以选择。默认情况下，显示上次登录的用户名。	未复选
多用户	未复选	每次只能有一个用户登录。登录后，GCMSsolution 应用启动而不显示“登录”对话框。	未复选
	复选	多个用户可以同时登录进 GCMSsolution 软件。每次启动 GCMSsolution 应用，都会显示“登录”对话框。	
用 Windows 用户名登录		只有在单用户模式下可用。GCMSsolution 启动时会搜索 Windows 的登录用户名，如果为 GCMSsolution 注册了同样的用户名，用户登录时，系统将跳过“登录”对话框。	未复选
密码	最小长度	为密码选择最少字符数。有效范围是 1 - 8 个字符。	1
	有效	选择密码被接受的时间长度。超过这一时间，必须更改密码。当选择 0 时，密码没有时间限制。	0
尝试登录限制		当登录失败次数超过限制次数时，屏幕会出现提示，而且在登录锁定期规定的时间内禁止登录。当选择 0 时，尝试登录没有限制。	0
登录失败延迟		在规定时间内禁止登录。	0
所有用户必须使用密码		要求当用户下次打开“用户属性”列表框时，没有密码的用户必须设一个密码。	未复选

**注**

如果超过密码的有效期，系统会显示提示信息，要求用户更改密码。单击**确定**按钮，显示更改密码对话框。



7. 策略 2 标签用于附加的用户管理设置。
只有经过系统管理员授权的用户才能执行此页上的设置操作。



图 2.63 系统管理策略 2 标签



	设置项目	描述	默认
审查追踪	在创建方法文件时运用审查跟踪功能	这么做，在创建新方法时会强制采用审查跟踪设置。通过选择模板的方式创建新方法时也是一样。	未复选
	禁止对仪器参数进行编辑	防止用户更改方法文件中的仪器参数。参数可以在监控工具栏中更改。	未复选
报告	禁止在输出报告中有多个文件	防止加载和打印报告属性文件标签中个别项目的文件。	未复选
	在页眉输出报告类型	在页眉中打印报告输出的应用类型。	未复选
	在页眉输出数据状态	在页眉中打印数据状态。	未复选
	在页眉输出安全等级	在页眉中打印安全等级。	未复选
文件管理	禁止数据文件覆盖	在单次运行和批量运行分析中，当保存至当前的数据文件时，文件名必须更改。在 GCMS 后处理分析画面中，当前数据文件不能被覆盖。	未复选
	禁止方法文件覆盖	在 GCMS 分析和 GCMS 后分析数据采集画面和校准曲线画面中，当前的方法文件不能被覆盖。	未复选
	禁止报告文件覆盖	在所有应用的报告生成画面中，当前报告文件不能被覆盖。	未复选
	禁止批处理文件覆盖	在所有应用的批处理表画面中，当前批处理文件不能被覆盖。	未复选



注

这些设置都保存在系统文件夹（在标准安装情况下，一般位于 C:\GCMSsolution 内）的“SysAdmin.mdb”数据库内。此外，个别用户的屏幕颜色设置等信息保存在同一文件夹下的“SysAdmin.upf”内。

出于安全考虑，为了防止意外事故或者失误，建议对这些文件进行备份。



2.9.6 模板

如果方法、批处理或报告格式文件预计将拥有类似的参数，可以创建有关各个类型文件的模板以节省时间并避免参数设置中的错误。

1. 创建模板

虽然下列步骤只对如何创建方法文件模板做了说明，然而此操作同样适用于批处理和报告格式模板。

- (1) 输入模板中将要包含的方法参数。选择**文件 > 另存方法为模板**。屏幕出现“另存为模板”对话框。



图 2.64 “保存为模板”对话框

- (2) 在新模板文本框中为模板输入一个名称，单击**确定**按钮。如果这个名称的模板不存在，模板就会被保存。如果这个名称的模板已经存在，屏幕会出现覆盖当前文件的确认信息。单击**确定**，覆盖该文件并保存模板。



2. 从模板中生成新文件

虽然下列步骤只对如何从模板中创建新的方法文件做了说明，然而此操作同样适用于批处理和报告格式文件。

- (1) 依次选择**文件 > 新建方法文件**，打开“新文件”对话框。

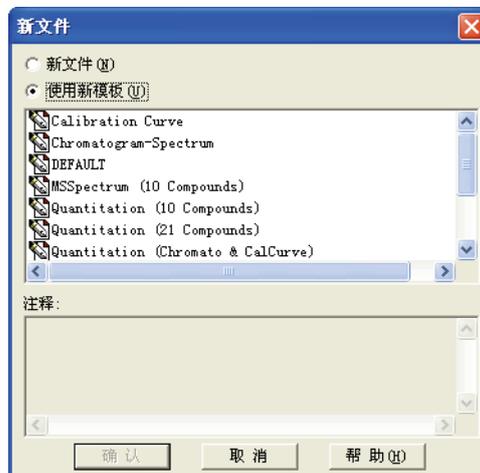


图 2.65 “新文件”对话框

- (2) 选择**使用模板**单选按钮，从列表框中选择将要使用的模板。单击**确定**按钮。屏幕显示按照模板内容生成的新文件。

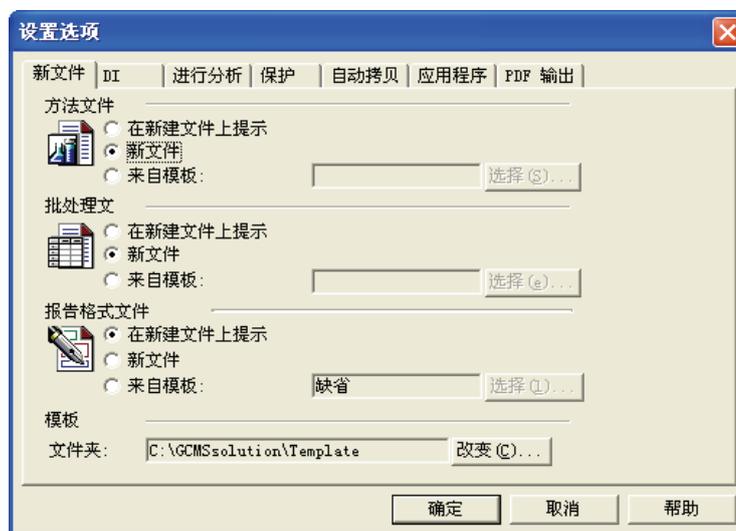


图 2.66 “设置选项”对话框



- (3) 单击**从模板创建**选项按钮，从列表框中列出的模板中选择相应的模板，单击**确定**。
模板内容出现在新创建的文件中并出现编辑画面。



注

如果新文件不应该包含模板内容的话，则应该选择“新文件”单选按钮。

3 数据采集

3.1 概述

本章节是对有关数据采集的窗口和功能的说明。

3.1.1 “采集方法建立”窗口

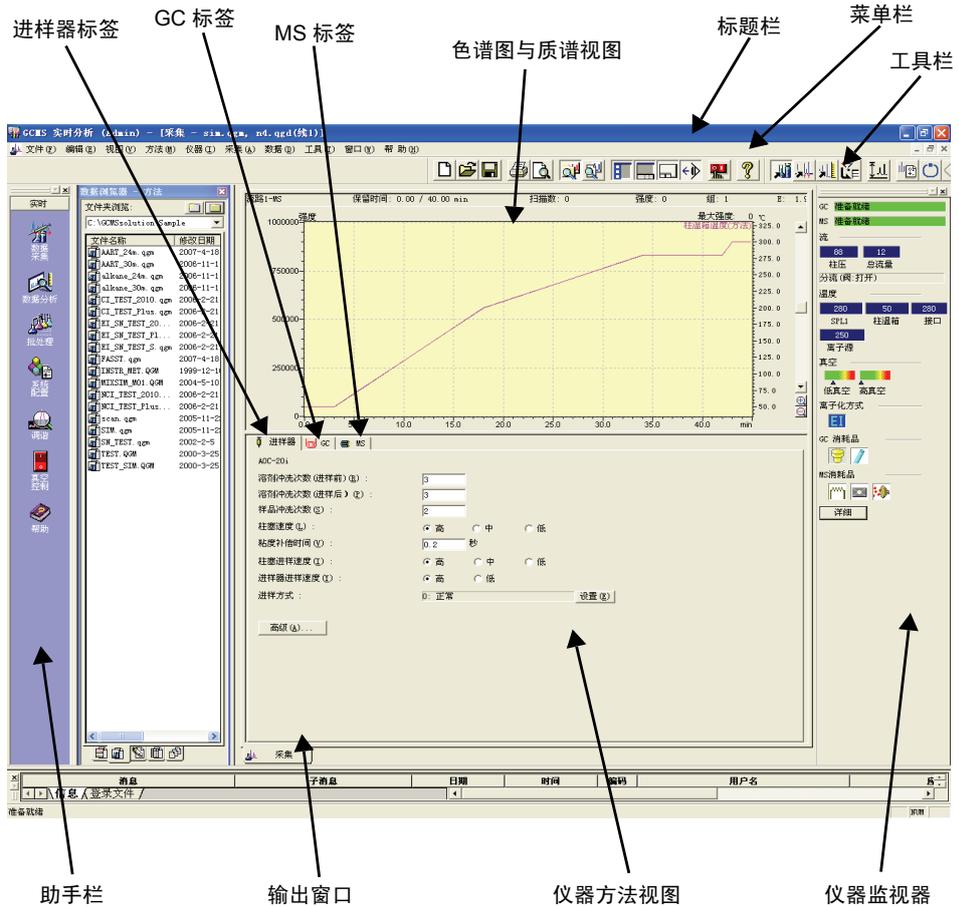


图 3.1 “方法建立”窗口

当方法 > 仪器参数被选中时，屏幕显示此画面布局。也可以通过单击助手栏中的方法建立图标或者数据采集参数工具栏按钮。当“实时分析”窗口关闭时，系统为每个用户都保存此画面布局。

画面中的项目在下表中做了说明。



“采集方法建立”窗口

标题栏	显示当前工作中的应用名称、进程名或者方法文件名。
菜单栏	显示所显窗口中的各种命令菜单。
工具栏	显示所显示窗口的各种命令工具按钮。
助手栏	列出一般操作程序的相应命令图标。通常，通过单击这些图标可以选择各自的操作。
色谱图 / 质谱视图	显示数据采集过程中从检测器传来的实时数据。
仪器方法视图	对仪器的每个单元都设定了数据采集过程中将要使用的参数。若想修改参数设置，单击与该单元相对应的标签。
仪器监视器	实时显示各种仪器参数。用于确定仪器是否可以立即用于分析。

3.1.2 “数据采集”窗口

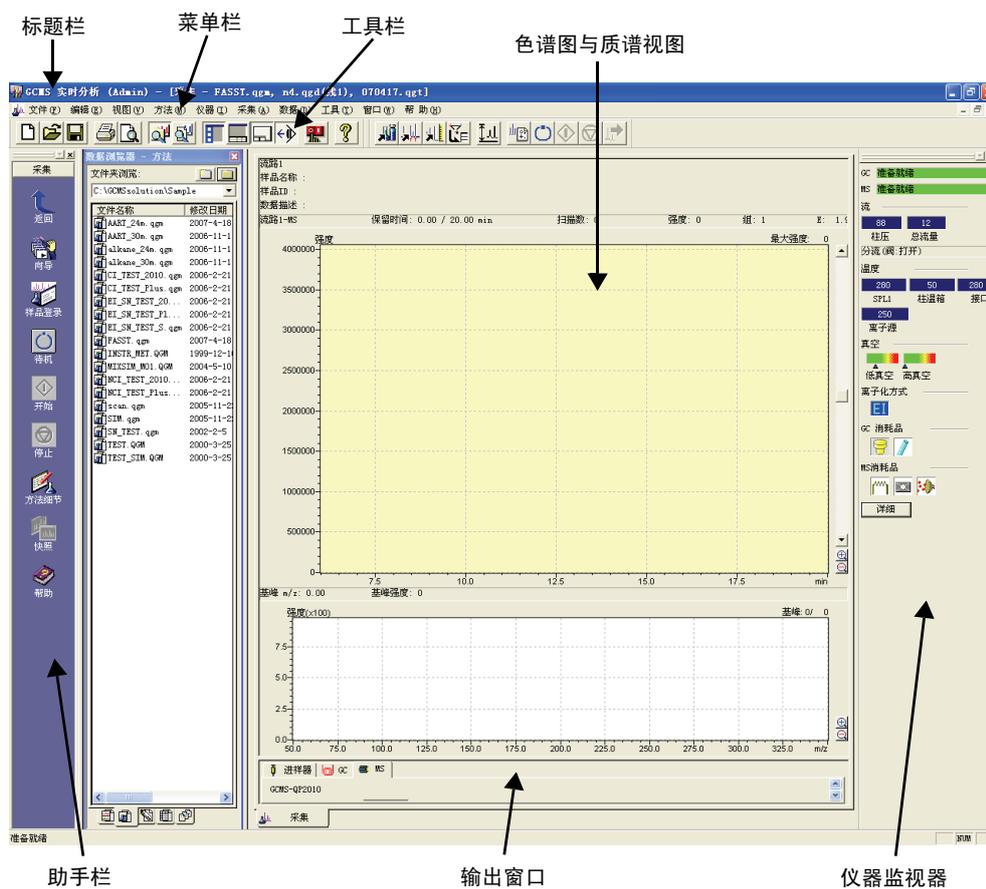


图 3.2 “数据采集”窗口



当从助手栏中选择**数据采集**，或者从方法菜单或者工具栏中选择**仪器参数**时，屏幕显示此布局。当仪器参数菜单项旁边未显示复选标记并且**数据采集参数**工具栏按钮没有被逆选时，方法建立模式被激活。当“实时分析”窗口关闭时，系统为每个用户都保存此画面布局。

标题栏	显示当前所使用的应用名称、进程名或者方法文件名。
菜单栏	显示所显窗口中的各种命令菜单。
工具栏	显示所显示窗口的各种命令工具按钮。
助手栏	列出一般操作程序的相应命令图标。通常，通过单击这些图标可以选择各自的操作。
色谱图 / 质谱视图	显示数据采集过程中从检测器传来的实时数据。
仪器监视器	实时显示各种仪器参数。用于确定仪器是否可以立即用于分析。

3.1.3 助手栏

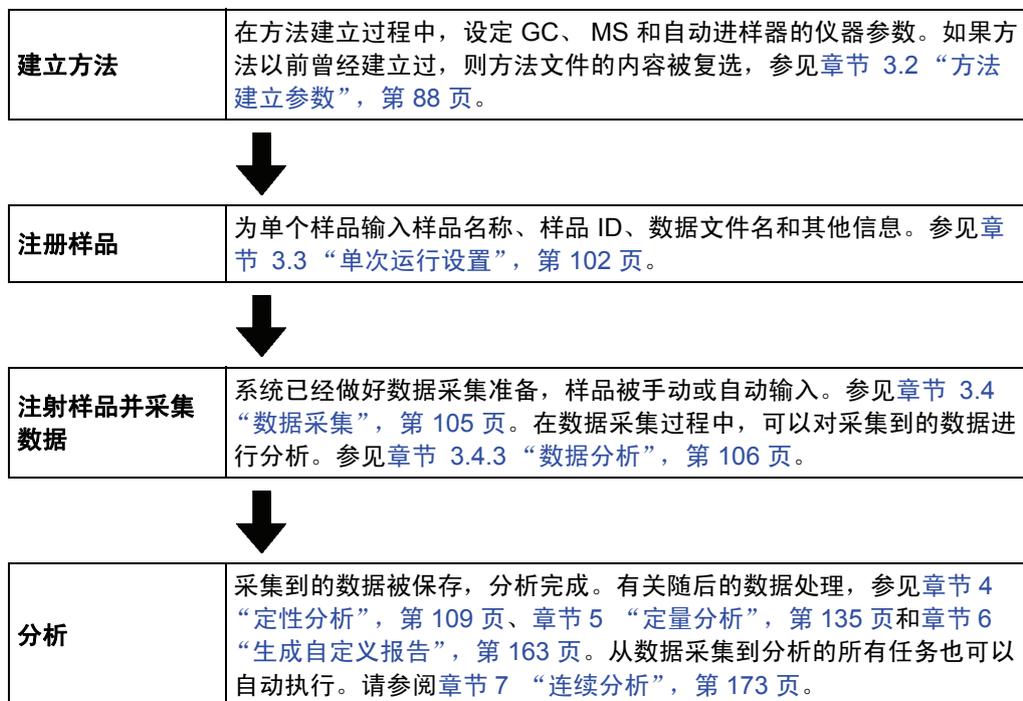
这部分内容是对数据采集过程中“采集助手栏”中所显示的各种图标的说明。

	顶点	返回实时助手栏。
	仪器方法向导	为分析用的 GC、MS 和自动进样器设置仪器参数。
	注册样品	用于单次运行中向通过数据采集获得的数据文件分配文件名，选择瓶号并确定是否打印报告。
	待机	将仪器参数视图中的参数集下载至仪器并将仪器置于准备就绪模式，以便启动数据采集。
	开始	启动数据采集。显示保留时间并实时显示色谱或质谱图。
	停止	MS 操作被挂起。GC 温度提升程序和 GC 时间程序继续运行。如果按下 CG 仪器上的 STOP 按钮，GC 操作将停止。
	方法细节	显示方法细节。可以选择开 / 关。
	快照	显示 GCMS 再解析，并且能够对从数据采集开始到单击 快照 按钮这段时间的 MS 数据进行检验。
	指南	对数据采集流程进行说明。



3.1.4 数据采集整个流程

数据采集流程执行如下。



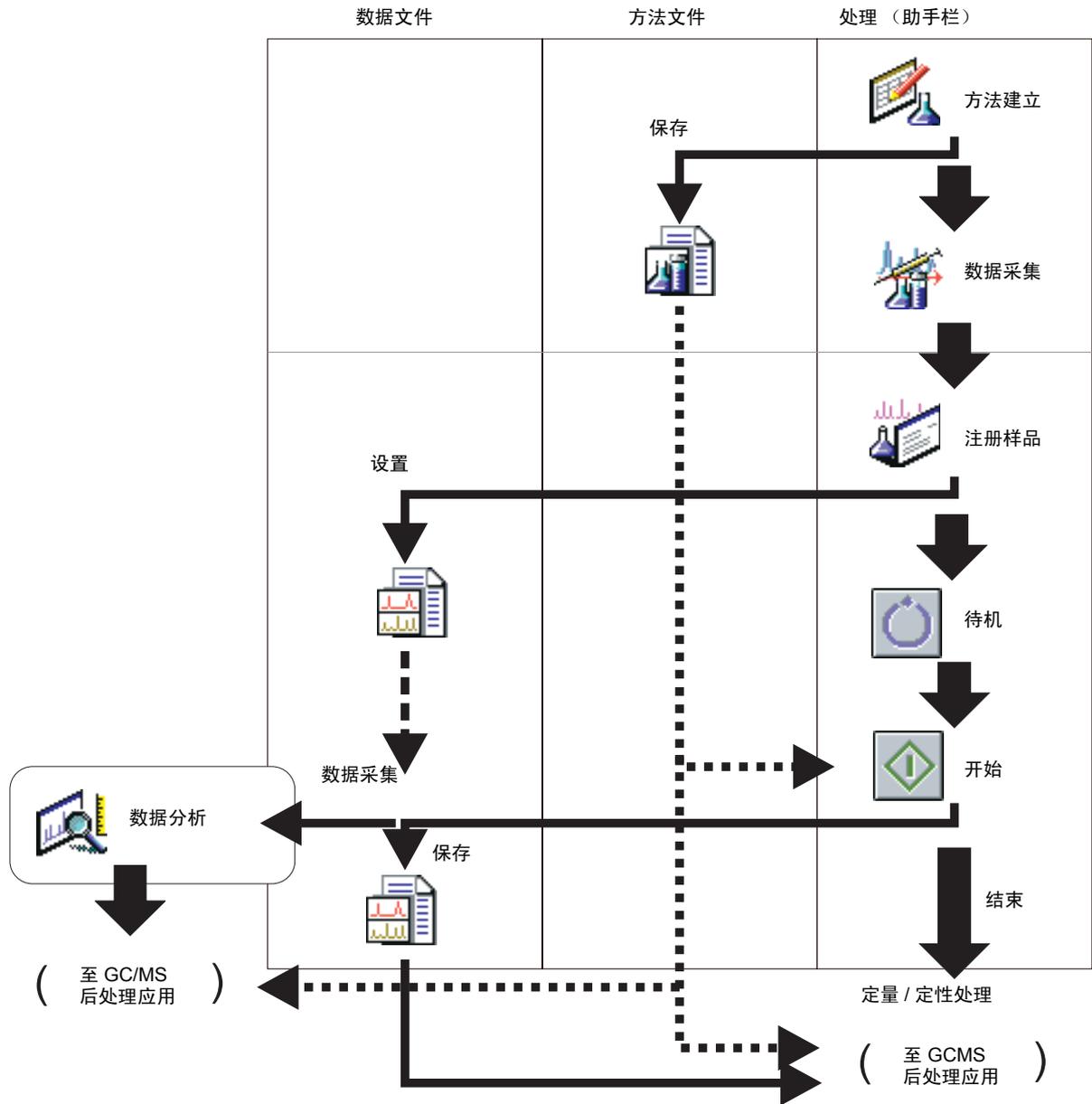


图 3.3 数据采集流程

3 数据采集

3.2 方法建立参数

这部分内容是对如何利用“采集”窗口中的参数建立方法的说明。当某个方法被保存为方法文件时，可以通过同样的方法获得一致的分析结果。

建立方法之前，通过 GCMS 实时分析应用对系统进行配置。可以在**仪器参数**中或者通过**方法向导**来建立方法。

3.2.1 仪器参数

单击助手栏中的方法向导打开方法向导窗口。

(1) 进样器

当在系统配置中选择 AOC 时，显示进样器。有关参数和设置，参见[章节 3.2.2 “进样器（自动进样器）标签”](#)，第 89 页。单击**下一步**按钮继续。

(2) GC 参数 (1)

当在系统配置中选择 GC 时，显示 GC 参数 (1)。有关参数和设置，参见[章节 3.2.3 “GC 参数（GC 标签）”](#)，第 91 页。单击**下一步**按钮继续。

(3) GC 参数 (2)

当在系统配置中选择 GC 时，显示 GC 参数 (2)。有关参数和设置，参见[章节 3.2.3 “GC 参数（GC 标签）”](#)，第 91 页。单击**下一步**按钮继续。

(4) MS 参数 (1)

当在系统配置中选择 MS 时，显示 GC 参数 (1)。有关参数和设置，参见[章节 3.2.4 “MS 参数（MS 标签）”](#)，第 95 页。单击**下一步**按钮继续。

(5) MS 参数 (2)

当在系统配置中选择 MS 时，显示 GC 参数 (2)。有关参数和设置，参见[章节 3.2.4 “MS 参数（MS 标签）”](#)，第 95 页。设置完成，单击**确定**按钮。“仪器方法向导”窗口关闭，方法文件创建成功。如果需要额外的设置，在“仪器参数”窗口中编辑 GC 和 MS 标签。



3.2.2 进样器（自动进样器）标签

选择视图 > 仪器参数 > 进样器标签。屏幕上显示进样器标签。



图 3.4 仪器参数进样器标签

可以通过缺省值进行数据采集和分析。当需要更为详细的设置时，可参考下表。

参数	描述	单位	范围	默认
用溶剂冲洗的次数 (前处理)	规定注射器在进样之前用溶剂冲洗的次数。 当选择“溶剂冲洗”作为进样模式时，此设置不可用。		0 - 99	0
用溶剂冲洗的次数 (后处理)	规定在注入气相色谱仪之后用溶剂冲洗注射器的次数。当要注射不同类型的样品或者同一样品被注射多次时，要改变此设置。		0 - 99	1
用样品冲洗的次数	规定注射器在进样之前用样品冲洗的次数。当要注射不同类型的样品或者同一样品被注射多次时，要改变此设置。		0 - 99	2
活塞速度 (吸入)	吸入样品时，规定活塞的速度。 此速度适用于样品冲洗和样品注射时的样品吸入过程。对泵吸和溶剂冲洗而言，吸入速度始终都采用高速。		高、中、低	高
粘度补偿 时间	规定吸入和注射之间的等待时间。低粘度液体通过活塞被同步吸入注射器。如果使用的液体粘度比较高，就需要规定较长的等待时间。	秒	0 - 99.9	0.2



参数	描述	单位	范围	默认
活塞速度 (注射)	选择样品注射过程中的活塞速度。此速度不是注射器向进样端口下降的速度。		高、中、低	高
注射器注入速度	选择注射器向进样口下降的速度。		高, 低	高
进样方式	为进样选择正常或“溶剂冲洗”模式中的一种。按下 设置 按钮改变进样模式。			0
高级	允许进行更为详细的设置。			
进样方式	设置进样方式。通过单击 设置 ... 按钮打开“进样方式”窗口进行设置。从下列 5 个选项中选择。 0: 正常进样 (仅限样品) 1: 样品 + 空气 + 溶剂 2: 样品 + 溶剂 3: 样品 + 空气 + 标准 + 空气 + 溶剂 4: 样品 + 标准 + 溶剂 当选择正常进样 (即, 溶剂冲洗方式) 之外的其他进样方式时, 在样品进样之前选择下列两种选项中的一种来设置溶剂冲洗次数。 与进样前的样品冲洗次数相同 与进样后的溶剂冲洗次数相同 设置后, 单击 确定 按钮完成设置。		0 - 4 3: 当配备 AOC-20s 时可以选择。 4: 只有配备 AOC-20s 时方可选择。	0

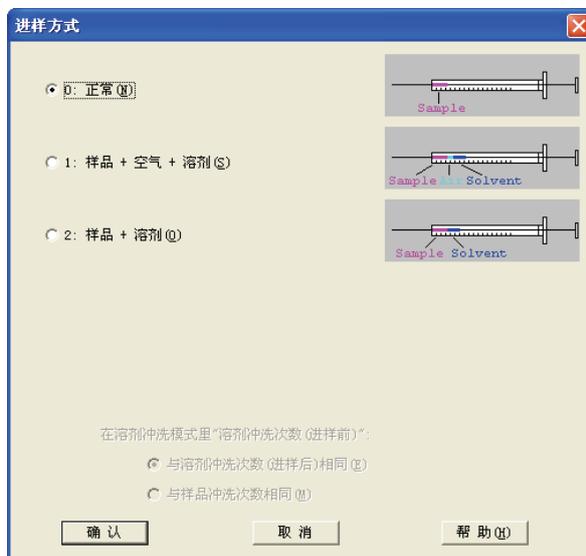


图 3.5 “进样方式”对话框

**注**

当高级按钮被选中时，会出现更为详细的自动进样器参数。有关特定参数的更多信息，请参考 GCMS 帮助。

3.2.3 GC 参数（GC 标签）

这部分内容是对如何设置气相色谱仪参数的说明。
选择视图 > 仪器参数 > GC 标签。屏幕显示 GC 标签。

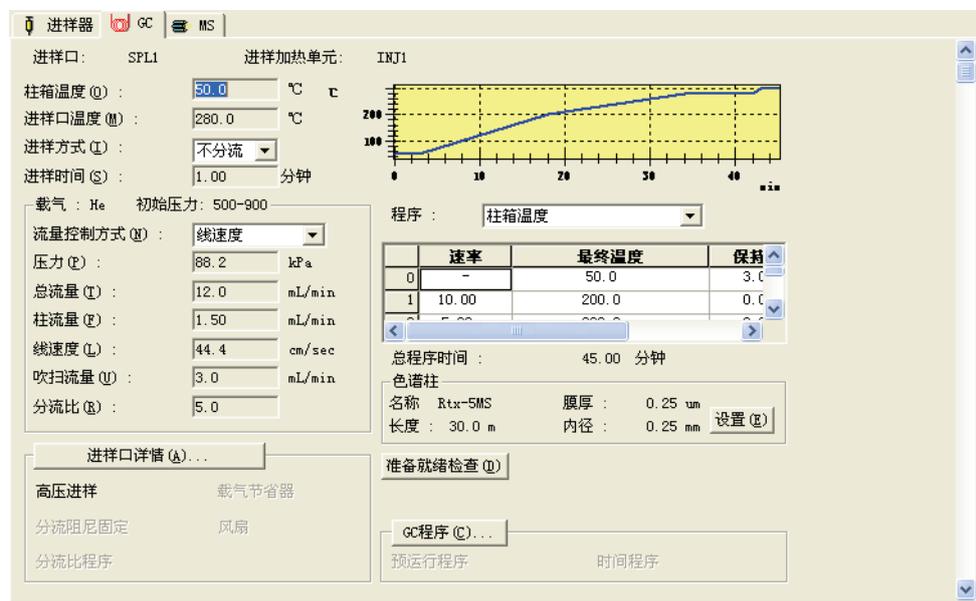


图 3.6 仪器参数 GC 标签

**注**

控制方式参数决定显示哪些载气参数。载气参数包括柱口压力、柱流量、线速度、分流比、总流量和载气流量。对没有电子流量控制器的仪器无法设置压力和流量控制参数。

**注**

如果使用宽内径色谱柱（内径 0.53 mm），低炉温下的流量控制范围变窄，可能导致 GC 流量控制错误。按照下列指导原则设置流量时一定要小心。



控制范围（采用满容量进样，色谱柱内径 0.53 mm，长 30 m）

柱箱温度 (°C)	流量设置范围 (mL / min)
50	10 - 15
100	7 - 15
150	6 - 15
200	4 - 15

根据流量不同，即使在更高温度下正常运行，柱箱温度降低时，也会产生误差。

参数	描述	单位	范围	默认
柱箱温度	指定柱箱温度。	°C	-99 - *	50
进样口温度	指定进样口温度。	°C	-99 - *	25
进样方式	选择进样方式。对 OCI/WBI 来说，此参数不显示。		分流 / 不分流 / 直接	分流
采样时间	如果选择不分流作为控制方式，采样时间参数规定样品进样时间和分流路径打开时间二者之间的时间间隔。	min.	0 - 9999.99	1
流量控制方式	选择载气流量控制方式。当进样方式为分流或不分流时，流量可以选择。		流量 / 线速度 / 压力	分流方式下不可用
压力	当进样方式选择直接并且在流量控制方式中选择流量时，此参数被禁用。	kPa	0 - 970	100 kPa
		kgf/cm ²	0 - 9.89	
		psi	0 - 140.7	
总流量	总流量 = 柱流量 + 分流流量 + 吹扫流量。在程序升温气相色谱仪中，此数值保持恒定不变。当进样方式选择直接并且在流量控制方式中选择线速度或压力时，此参数被禁用。	mL/min	0 - 1200	50
柱流量	显示色谱柱内的体积流量。柱流量由柱前压自动计算出来。 当系统配置窗口中的方式设定为“Dual TMP”时，建议柱流量参数设置为 15 mL/min 或更低。对 Single TMP 型号来说，我们还建议将此参数设置为 2 mL/min 或更低。这是因为，当超过这些值时，真空度不足，对离子生成会有不利影响。	mL/min		



参数	描述	单位	范围	默认
线速度	显示线速度。线速度由柱前压自动计算出来。	cm/sec		
吹扫流量	指定吹扫流量。在没有 Purge APC 的情况下，被禁用。	mL/min	0.0 - 1200	
分流比	确定分流比或柱流量与分流流量的比率。当分流比设定时，系统根据计算所得的载气流量设置总流量，这样就能根据柱箱温度确定所需的分流比。无论炉子温度是多少，将分流比设为 -1.0 来确定总流量。当进样方式参数中选择直接时，此参数被禁用。		-1, 0 - 120000	-1
进样口详情	打开“进样口详细设置”窗口。当对详细内容设置完毕时，字符显示为黑体。对 WBI 来说，此参数禁用。			
程序	允许输入时间程序步骤。可以从下拉列表中选择将要编程的项目（柱箱温度、压力和/或流量）。		柱箱温度、流量、压力、吹扫流量	
速度	温度、压力和流速程序增加或降低的比率，以增量单位表示。			
温度 / 压力 / 流量	程序中的温度、压力或流量值。			
保持时间	程序中温度、压力或流量保持的时间。	min.	0 - 9999.99	
色谱柱	显示系统配置中设定的与色谱柱相关的参数。若要改变这些参数，单击色谱柱中的设置按钮。			
就绪后自动零修正	当仪器准备好可以使用时，自动进行零修正。用于除 MS 之外的检测器。			
CRG（柱温箱）	使用柱箱 CRG。当 GC2010 系统配置窗口中的 CRG（柱温箱）选项被复选时，显示此参数。			
CRG（INJ）	利用 CRG 来冷却进样口。当 GC2010 系统配置窗口中的 CRG（INJ#2）选项被复选时，显示此参数。			

* 有关上限，请参考 GCMS 帮助。



数据采集过程中，如果想更改由时间控制的 GC 参数，建立一个时间程序。单击 **GC 程序** 按钮，打开“GC 程序”对话框。

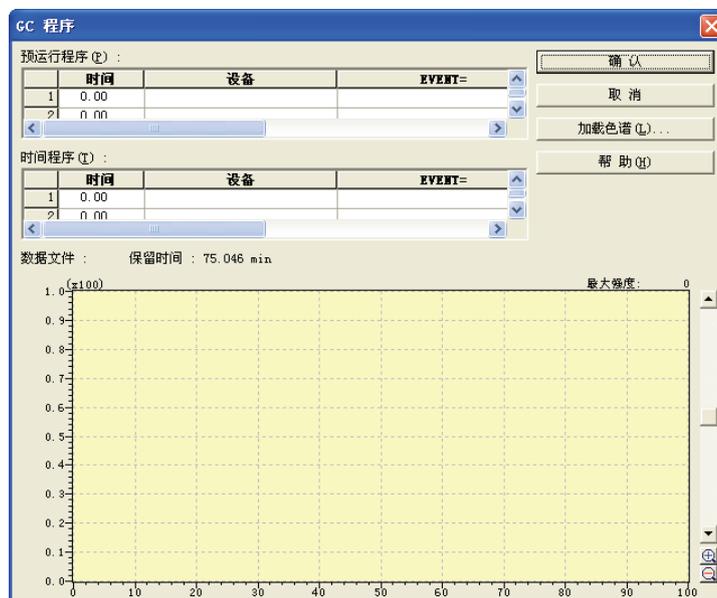


图 3.7 “GC 程序”对话框

预运行程序是一个在分析之前对各设备的操作进行控制的一个时间程序。

运行时间程序是一个在分析过程中对各设备的操作进行控制的一个时间程序。

参数	描述	单位	范围
时间 (min)	输入保留时间，在该时间执行命令。	min.	0 - 655
设备	从复选框列表中选择将要使用的单元。设备在仪器配置菜单中做了定义。		
事件	选择适当的命令。 更多信息，请参考 GCMS 帮助。		
设置	输入有关所选设备和事件的值。更多信息，请参考 GCMS 帮助。		



注

当点击“GC 程序”对话框中的**加载色谱**按钮时，打开“打开 GCMS 数据文件”对话框，可以从当前数据文件中读取 TIC。在选中一个时间（分钟）字段的同时单击色谱图，将该保留时间输入所选的时间（分钟）字段。

3.2.4 MS 参数（MS 标签）

这部分内容是对 MS 参数的说明。依次选择**方法 > 仪器参数 > MS 标签**来查看 MS 参数。

GCMS-QP2010

离子源温度 (I) : 250 °C

接口温度 (I) : 280 °C 检测器电压 (U) : 相对于调谐结果 绝对值

溶剂延迟时间 (S) : 7 min 0.9 kV

微扫描 (M) : 0.2 u 阈值 (H) : 0

使用MS程序 (U): GC 程序时间 : 45.00 min

组号1 -事件号1

	开始时间 (min)	结束时间 (min)	采集方式	间隔 (秒)	扫描速度	开始 m/z	结束 m/z	通道1 m/z
1	9.50	12.31	SIM	0.20				128.00
2	12.31	15.26	SIM	0.20				152.00
3	15.26	17.00	SIM	0.20				166.00
4	17.00	19.88	SIM	0.20				178.00
5	19.88	24.53	SIM	0.20				202.00
6	24.53	29.09	SIM	0.20				228.00
7	29.09	34.59	SIM	0.20				252.00
8	34.59	40.00	SIM	0.20				276.00
9	0.00	0.00	Scan	0.00	0	0.00	0.00	

图 3.8 仪器参数 MS 标签

可以通过缺省值进行数据采集和分析。当需要更为详细的设置时，可参考下表。



参数	描述	单位	范围	默认
离子源温度	输入离子源温度。	°C	100 - 300	来自系统配置的数值
接口温度	GC 连接时，连接至 MS 的 GC 加热端口温度可以定义。GC 未连接时，接口温度看起来是灰色的。	°C	0 - *	25
溶剂切除时间	样品注入后，设定一旦溶剂洗提就打开灯丝的时间。正常情况下，样品注射进去时，大量溶剂进入分析系统。这样会导致离子源内的真空急剧下降，对灯丝和其他组分造成不利影响。为了防止这种现象发生，当溶剂经过分析系统时，要关闭灯丝。 注： 当利用在溶剂之前洗提的峰对样品进行分析时，采用 MS 程序来关闭和打开灯丝。	min.	0.00 ~ GROUP1 的开始时间	2.00
检测器电压	设置检测器电压。 选择单选按钮，决定将编辑列表框中的设置作为绝对值还是作为相对值处理。当把“绝对”改为“相对”时，增益设为 0。 绝对：当直接设置电压时使用。 相对于调谐结果：当根据将要使用的调谐文件中的电压设置绝对值时使用。可以使用正号 (+) 和负号 (-)。 注意： 请注意，当电压设为高值时，将会检测出更多的离子，检测器可能会被损坏。然而，随着仪器的老化和灵敏度的下降，检测器电压可逐渐升高。	kV	绝对：0.50 - 3.00 相对：- 2.50 - 2.50	相对 0



参数	描述	单位	范围	默认
阈值	设置噪音阈值水平。低于此数值的离子信号将作为噪音处理并从数据中删除。当在“采集模式”中选择“Scan”时，此参数可以设置。	计数	0 - 9999	1000
使用 MS 程序	规定是否使用 MS 程序。复选时， 设置 按钮被激活。			
微扫描峰宽	执行微扫描测量时设置扫描宽度。设置范围是（0.00 到 1.00）。设为“0”时，不执行微扫描。 关于微扫描测量：在 SIM 分析中，采集数据时，MS 控制固定在设定的 m/z 值上。微扫描是一种测量方法，通过 MS 在一分钟以上的时间范围内进行扫描来采集数据。采用此方法可以提高分析数据的可再现性。	u	0.00 - 1.00	0

* 有关上限，请参考 GCMS 帮助。



根据采集模式为“Scan”或“SIM”的不同，下类参数会不同。

扫描参数

	开始时间 (min)	结束时间 (min)	采集方式	间隔(秒)	扫描速度	开始 m/z
1	5.00	10.00	Scan	0.60	256	100.00
2	0.00	0.00	Scan	0.00	0	0.00

图 3.9 扫描参数

参数	描述	单位
开始时间	设置数据采集开始时间。	分钟
结束时间	设置数据采集结束时间。	分钟
采集方式	选择扫描。	
事件时间	选择单次扫描的时间间隔。	秒
开始 m/z	设置开始质量范围 m/z。	u
结束 m/z	设置结束质量范围 m/z。	u
扫描速度	设置在规定 m/z 范围内的扫描速度。此速度将根据测量 m/z 范围和间隔从可能的设置中自动选择并显示。较小的数值（较慢的扫描）能减少数据中的噪声。	

SIM 参数

	开始时间 (min)	结束时间 (min)	采集方式	间隔(秒)	扫描速度	开始 m/z	结束 m/z	通道1 m/z
1	9.50	12.31	SIM	0.20				128.00
2	12.31	15.26	SIM	0.20				152.00

图 3.10 SIM 参数

参数	描述	单位
开始时间	设置数据采集开始时间	分钟
结束时间	设置数据采集结束时间	分钟
采集方式	选择 SIM。	
事件时间	选择单次扫描的时间间隔。	秒
Ch1-m/z - Ch64-m/z	为每条通道设置 m/z。	u



FASST（快速自动 Scan/SIM 类型）参数

	开始时间 (min)	结束时间 (min)	采集 方式	间隔(秒)	扫描 速度	开始 m/z	结束 m/z	通道1 m/z	通道2 m/z	通道3 m/z	通道4 m/z
1	6.00	8.17	Scan	0.30	1111	50.00	350.00				
	6.00	8.17	SIM	0.20				185.00	109.00	0.00	0.00
2	8.17	10.57	Scan	0.30	1111	50.00	350.00				

图 3.11 如果“Scan”和“SIM”都被选中。

如果相邻两行的开始时间和结束时间都分别设成同一时间，则根据两行的时间间隔逐行采集数据。在这种情况下，第一行称作事件 1，第二行称作事件 2。

组号显示在表的左侧一列。如果为一个组设置两个事件，则只在事件 1 一行显示组号。每一行的事件号和组号以“组号-事件号”的方式显示在表的左上方。

每个组的最大事件数为 2。将事件 1 的采集模式设为“Scan”，事件 2 的采集模式设为“SIM”。

有关详细内容，参见 FASST 测量操作手册。



注

最多可以设置 128 个组。

然而，对 2.40 版以前的 GCMSsolution 来说，如果打开的方法文件中含有 65 个以上的组，则文件可能会运行不正常。如果一个数据文件含有 65 个以上的组，在显示该文件的仪器参数时可能会运行不正常。系统将无法显示第 65 个组以后的色谱。

在数据采集过程中改变 MS 参数，应该使用时间程序。选择“使用 MS 程序”复选框，然后单击**设置**按钮打开“MS 程序”对话框。

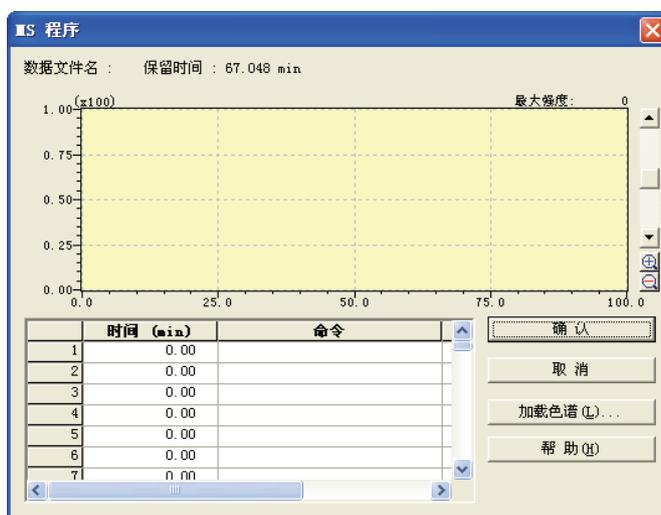


图 3.12 “MS 程序”对话框

按照下列说明向 MS 程序中输入参数。

参数	描述	单位	范围	
时间 (min)	指定执行命令的保留时间。	分钟		
命令	选择数据采集过程中执行的命令。单击目标单元格，该单元格会变成一个复选框。从复选框中选择一个命令。			
	检测器电压 =	在指定时间改变检测器电压。	kV	0.50 - 3.00
	灯丝开	在指定时间打开灯丝。		没有数值。
	灯丝关	在指定时间关闭灯丝。		没有数值。
	PFTBA 开	在指定时间打开标准 (PFTBA) 电磁阀。		没有数值。
	PFTBA 关	在指定时间关闭标准 (PFTBA) 电磁阀。		没有数值。
	反应气 1 开	打开反应气 1 电磁阀。		没有数值。
	反应气 1 关	关闭反应气 1 电磁阀。		没有数值。
	反应气 2 开	打开反应气 2 电磁阀。		没有数值。
反应气 2 关	关闭反应气 2 电磁阀。		没有数值。	
数值	为需要数值的命令参数指定一个数值。			



注

当“MS 程序”对话框的**加载色谱**按钮被选中时，“打开 GCMS 数据文件”对话框打开，可以从当前数据文件中读取 TIC。在选中一个时间（分钟）字段的同时单击**色谱**，将该保留时间输入所选的时间（分钟）字段。

3.3

3 数据采集

3.3.1 单次运行设置

这部分内容是有关单次运行参数（包括：样品名、样品 ID、数据文件名和进样器参数（如果使用的话））的设置说明。

3.3.1 “样品登录”对话框

选择数据采集助手栏中的**样品登录**图标。“样品登录”对话框打开。



图 3.13 “样品登录”对话框

样品名	指定样品名。名称用来识别数据文件并且输出在报告中。
样品 ID 号	指定样品 ID 号或者批号。设置此项目很有用，因为它可被用作数据文件的查找参数。可以在数据采集过程中对其进行更改。最多可输入 31 个字符。
数据文件	为保存所采集的数据指定文件名。 系统会自动加上文件扩展名。当只输入文件名时，文件路径与数据采集时所打开的方法文件的路径相同。
基线数据	为微分色谱图（基线色谱图）指定一个数据文件名。只有在使用 GC 检测器时才使用此字段。
数据描述	指定将被记录在数据文件中的注释。



当单击文本区域右侧的**文件夹**按钮时，系统会打开“选择数据文件”对话框。选择数据保存路径并输入文件名。



图 3.14 “选择数据文件”对话框



注

如果“样品登录”对话框多次用于对样品进行分析，或者，如果所输入的文件名与现有文件名相同，要确认分析开始时是否覆盖文件。可以通过为文件名加一个数字并利用批处理表中的自动增加功能避免覆盖数据。在开始进行数据采集之前检查一下，看是否存在文件名重复的现象。

进样器参数（参见图 3.13 “样品登录”对话框）

瓶号	指定瓶子在自动进样器中所占据的位置。
进样体积	指定注射的样品量。此体积是在“多重进样次数”中设置的进样次数。
多次进样次数	规定样品注射的次数。
调谐文件	如果“调谐文件”字段保持空白，则系统采用上次数据采集过程中使用的或者上次调谐所保存的调谐文件。当只输入文件名时，文件路径为 GCMSsolution\System\Tune#。（# 为系统编号；GCMSsolution 是安装过程中指定的文件夹。）
注射器容量	检验系统配置中规定的注射器容量。注意，无法从“样品登录”对话框中编辑此参数。
报告	数据采集完成后选择打印报告。输入用于打印报告的报告格式文件全名，或者单击 文件夹 按钮通过浏览的方式查找文件。屏幕显示“选择报告格式文件”对话框。选择文件，单击 打开 按钮。现在，完整路径显示在“报告”文本框中。当只输入文件名时，文件路径与数据采集时所打开的方法文件的路径相同。



当单击“报告”文本区域右侧的**文件夹**按钮时，系统打开“选择报告格式文件”对话框。打开文件保存的目录，选择文件名。



图 3.15 “选择报告格式文件”对话框

有关样品登录高级参数的说明，请参考 GCMS 帮助。

3.4

3 数据采集

数据采集

这部分内容是有关仪器准备和数据采集的说明。采集过程中，系统显示实时数据；采集完成时，保存为数据文件。

3.4.1 待机

在待机时间内，方法被下载至仪器，仪器已经做好分析准备。

选择数据采集助手栏上的**待机**图标。



注

当选中**待机**图标并且方法尚未保存时，屏幕会出现一个对话框提示用户对方法进行保存。

若保存方法，选择**是**按钮。如果方法先前已经保存过，用新信息覆盖旧的方法文件。如果方法尚未保存，屏幕会出现“另存方法文件为”对话框。选择一个目录，输入文件名，单击**保存**按钮。方法被下载至仪器。

如果要将方法下载至仪器但不保存，选择**否**按钮。方法被下载至仪器。若要终止方法下载，选择**取消**按钮。

3.4.2 开始

选择数据采集助手栏上的**开始**图标。采集和分析按照所选方法中的规定完成。

屏幕显示实时质谱图和色谱图。



注

无论是否使用自动进样器或 GC 单元上的**开始**按钮也可以启动数据采集。



3.4.3 数据分析

数据采集过程中，采集到的数据被写入数据文件。如果通过选择数据采集助手栏上的**快照**图标启动 GCMS 再解析应用程序，采集到的数据就会显示出来。



注

有关 GCMS 再解析应用程序的更多信息，请参阅[章节 4 “定性分析”，第 109 页](#)和[章节 5 “定量分析”，第 135 页](#)。

3.4.4 停止

数据采集和分析在运行过程中可以被停止。选择数据采集助手栏上的**停止**图标。



注意

如果通过“停止”命令将数据采集和分析停止，MS 程序会立即停止，但 GC 温度程序会直到样品处理完毕才会停止。这样能防止将样品残留物留在色谱柱内。若要立即停止 GC，按下 GC 单元上的“停止”按钮。

3.5

3 数据采集

3.5.1 仪器监视器

在这部分内容中，对监视仪器当前状态的流程做了说明。单击仪器监视器部分的“详细”按钮为消耗性部件设定数值并初始化使用时间。

3.5.1 仪器监视器



图 3.16 仪器监视器

项目	描述
GC、MS、HS	根据 GC、MS、HS 当前状态的不同，显示为不同的颜色。更多信息，请参考 GCMS 帮助。
单元	选择流路 1 或流路 2 单选按钮，显示与该单元相对应的信息。只有两条流路连接在一起时，才会显示这些按钮。
真空	以图表的方式表示真空。三角形指示器根据实际值的不同而移动。当系统配置窗口中的离子真空计被设为“无”时，不显示高真空。
GC 消耗品、MS 消耗品	图标的背景色发生改变表示需要维护或更换。
其他参数	设置其他参数，单击 详细信息 ... 按钮打开“仪器监视器详情”窗口。有关每个参数，请参考 GCMS 帮助。



本页空白。

4.1

概述

4 定性分析

这部分内容对如何通过 GCMS 再解析应用程序对先前采集的数据进行定性分析并打印报告做了说明。

4.1.1 “定性数据分析”窗口

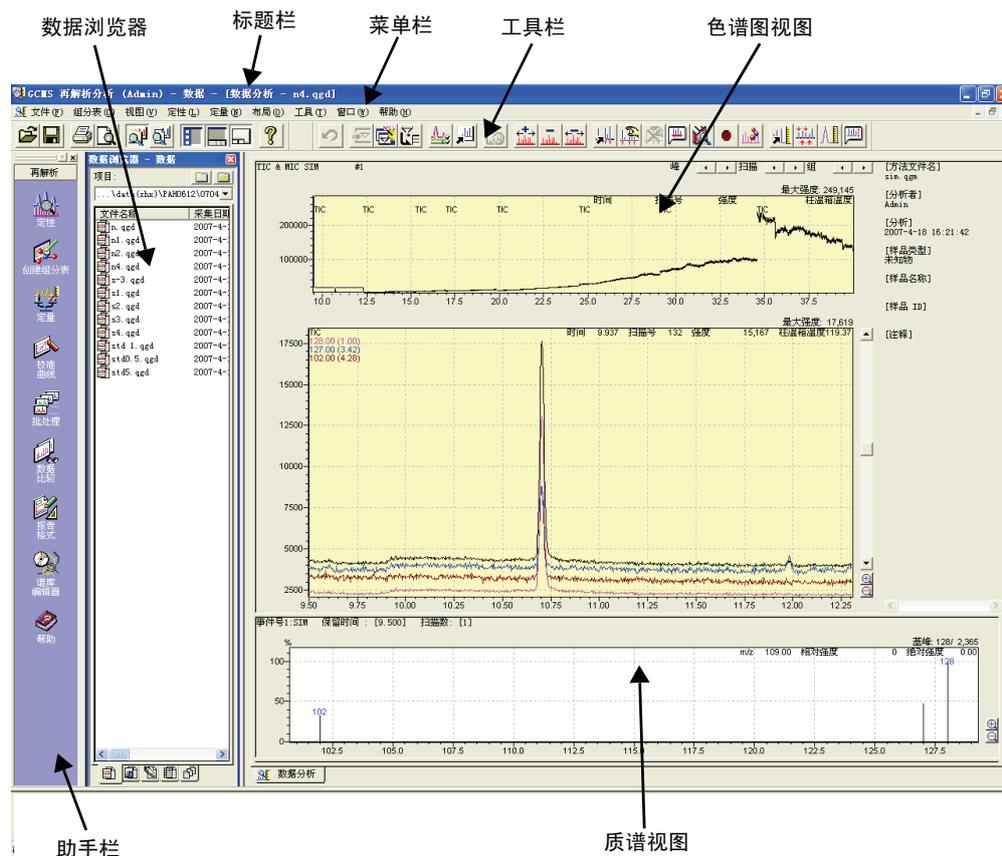


图 4.1 “定性数据分析”窗口

标题栏	显示应用程序名称、用户、活动窗口和文件。
菜单栏	显示活动窗口中当前可用的菜单。
工具栏	显示活动窗口中当前可用的命令按钮。
助手栏	显示适合特定功能或窗口的命令图标。要打开窗口或激活命令，请单击相应的图标。
数据浏览器	按照类型（包括“数据”、“方法”、“报告格式”、“批处理”和“所有文件”）显示所有文件。双击文件图标或者将其拖动至相应的位置就可以轻松打开数据用于分析。
色谱图视图	从当前数据文件中显示色谱图。所有采集的数据显示在上方的 TIC 窗口中。TIC、MIC 和 MC 显示在下方的 MC 窗口中。
质谱视图	显示当前保留时间的质谱。



4.1.2 定性分析步骤

定性分析的步骤说明如下。

方法建立	GC 和 MS 仪器参数和定性、定量、数据视图以及 QA/QC 参数在方法文件中设置。通过 GCMS 实时分析或者利用既有方法文件在确认其内容之后创建一个新的方法文件。有关方法建立的更多信息，请参阅章节 3.2 “方法建立参数”，第 88 页。
样品注射和数据采集	数据在 GCMS 实时分析中采集。在“数据采集”窗口中输入有关单个样品的信息，或者在“批处理”窗口中输入有关多个样品的信息。启动单次处理或批处理。有关数据采集的更多信息，请参阅章节 3.3 “单次运行设置”，第 102 页和章节 3.4 “数据采集”，第 105 页。
数据分析	打开 GCMS 再解析，单击助手栏中的定性分析图标。本章是有关定性分析和报告的说明。

1. 查看采集到的数据

打开 GCMS 再解析，单击助手栏中的定性分析图标。

“数据分析”窗口以定性分析模式出现。

单击数据浏览器的数据标签并双击相关的数据文件。

采集到的数据显示在色谱图视图中。

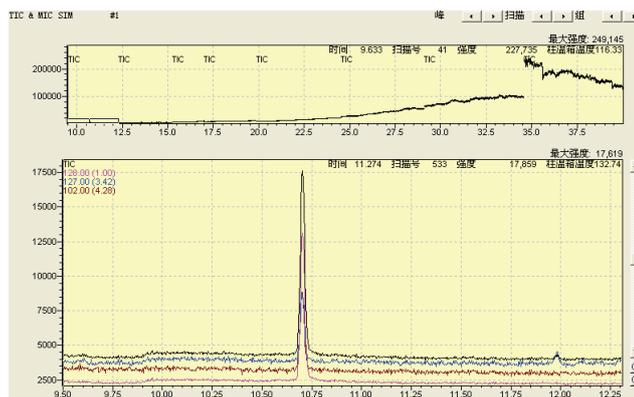


图 4.2 色谱图视图



2. 峰积分

在质谱可被选中用于相似度检索之前必须对峰进行积分。可以通过手动或自动方式对峰进行积分。请参阅[章节 4.3 “峰积分”](#)，第 116 页。

3. 相似度检索

相似度检索尝试将来自积分峰的质谱与属于谱库文件中已知组分的质谱进行匹配。在列表中显示有关每个质谱具有不同相似度的候选化合物。选择一个候选化合物，通过在已知化合物和样品质谱之间进行比较确定样品组分。请参阅[章节 4.4 “相似度检索”](#)，第 128 页。

4. 打印定性分析报告

通过相似度检索将目标组分与来自谱库里的待匹配项目进行比较；可以打印检索出来的待匹配项目三种类型的报告。请参阅[章节 4.5 “打印结果”](#)，第 132 页。

4.2

4 定性分析

显示质谱

这部分内容对如何在色谱图的任意保留时间显示质谱的说明。

4.2.1 显示质谱

1. 若要显示有关特定保留时间的质谱，双击色谱图上的相应位置。质谱显示在“质谱视图”中。
2. 若要显示与化合物表中注册的化合物相关的质谱，在表中选择相应的行。如果已经进行过定量分析并且化合物已经被识别，质谱通过“定性参数”对话框“质谱处理”标签中设置的峰保留时间生成。然后质谱显示在“质谱视图”中。
3. 若要显示在质谱处理表中注册的质谱，在表中选择相应的行。质谱显示在质谱视图中。
4. 若要从定性峰积分数据中显示质谱，选择定性峰表中相应的行。质谱图按照“定性参数”对话框质谱处理标签中设置的峰保留时间生成。然后质谱显示在质谱视图中。



注

如果保留时间在 FASST 测量间隔时间内，将显示扫描质谱。



4.2.2 谱图平均与背景处理

1. 若想获得干净的质谱，需要对大量质谱进行平均。首先，单击**视图 > 质谱计算 > 平均**，打开色谱图视图中的“平均”功能，或者用鼠标右键单击色谱图并选择**质谱计算 > 平均**。通过平均模式下的色谱图视图，将鼠标从开始保留时间拖动至结束保留时间设置想要平均的范围。平均后的质谱显示在质谱视图中。围绕峰顶进行平均通常是最有效的。
2. 若要扣除背景质谱，首先显示原始或平均后的质谱。然后，通过选择**视图 > 质谱计算 > 差减**打开色谱图视图中的差减功能，或者用鼠标右键单击色谱图并选择**质谱计算 > 差减**。通过差减模式中的色谱图视图，确定代表背景的保留时间并双击。质谱视图中所显示的色谱图是原始或平均质谱与背景质谱之差。

平均背景质谱也可以差减。首先，显示原始或平均质谱。然后，通过选择**视图 > 质谱计算 > 差减平均质谱**打开色谱图视图中的差减平均质谱功能，或者用鼠标右键单击色谱图并选择**质谱计算 > 差减平均质谱**。通过平均差减模式中的色谱图视图，确定代表背景的一系列保留时间并将鼠标从开始保留时间拖动至结束保留时间来设定范围。这段时间范围的质谱被平均，然后作为背景从质谱视图当前所显示的质谱中被差减掉。围绕峰开始和结束的范围通常被用作背景。
3. 若要重复差减背景质谱，选择**视图 > 质谱计算 > 差减**命令。通过差减模式中的色谱图视图，在按住 [Shift] 键的同时确定代表背景的保留时间并双击。然后，在不清除先前结果的情况下显示差减结果。或者从菜单中选择**质谱计算 > 差减平均质谱**命令，确定代表背景的保留时间范围，将鼠标从开始保存时间拖动至结束保存时间来设定范围。平均质谱从通过拖动鼠标定义的范围中差减掉而不清除先前的结果。



注

如果质谱平均在 FASST 测量时间间隔中进行，则使用扫描质谱。
如果将要差减的质谱通过 FASST 获得，扫描质谱被用于差减。



注

工具栏包括**平均质谱**、**差减质谱**和**平均与差减质谱**按钮，便于访问质谱计算功能。使用工具栏上的下列三个质谱计算按钮。



平均质谱按钮 单击按钮并将鼠标从开始保留时间拖动至结束保留时间设置想要平均的范围。平均后的质谱显示在质谱视图中。



差减质谱按钮 单击按钮，确定代表背景保留时间并双击。质谱视图中所显示的色谱图是原始或平均质谱与背景质谱之差。



平均与差减质谱按钮 单击按钮，确定代表背景的一系列保留时间，将鼠标从开始保留时间拖动至结束保留时间来设定范围。这段时间范围的质谱被平均，然后作为背景从质谱视图当前所显示的质谱中被差减掉。

4.2.3 显示质谱计算结果

用于计算结果性质谱的保留时间范围显示在质谱视图顶端。有关时间范围显示方式的简单举例，见下表。

[10.000]	10.000 分钟保留时间下的质谱。
[10.000 -> 10.100]	保留时间范围在 10.000 分钟到 10.100 分钟的平均质谱结果。
[10.000] - [10.500]	当 10.500 分钟保留时间下的质谱从 10.000 分钟保留时间下的质谱中差减后的结果质谱。
[10.000 -> 10.100] - [10.500]	10.500 分钟保留时间下的质谱从保留时间范围在 10.000 分钟到 10.100 分钟之间的平均质谱差减后的结果质谱。
[10.000 -> 10.100] - [10.500 -> 11.000]	保留时间范围从 10.500 分钟到 11.000 分钟的平均质谱作为背景从保留时间范围在 10.000 分钟到 10.100 分钟的平均质谱中差减掉之后的结果质谱。
[10.000 -> 10.100] - [10.500] - [10.040]	记录 10.500 分钟保留时间下的质谱从保留时间范围在 10.000 分钟到 10.100 分钟之间的质谱差减掉之后以及将 10.040 分钟保留时间下的质谱从中进一步差减后的结果质谱。



注

若保存结果质谱图供未来参考，选择**定性 > 注册至质谱处理表**将其注册至质谱处理表，或者鼠标右键单击质谱并从弹出菜单中选择**注册至质谱处理表**。选择**定性 > 显示定性表**以查看质谱处理表。选择相应的行可以显示保存在表内的质谱。

4.3

4 定性分析

峰积分

这部分内容是对如何在采集到的数据中对色谱图进行积分的说明。可以通过手动或自动方式对峰进行积分。

4.3.1 手动峰积分

1. 单击 **TIC/MIC 手动峰积分** 工具栏按钮，或者执行 **定性 > 手动峰积分** 命令。



2. 指针移动到色谱图上时，显示为一条垂直线。将鼠标从想要对其进行积分的色谱图峰的起点拖动至终点。

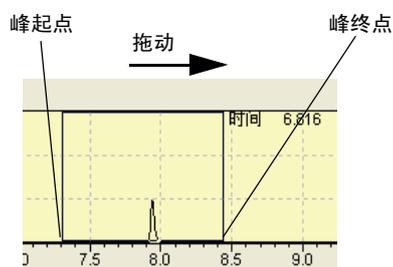


图 4.3 手动积分峰选择

屏幕出现“选择基线”对话框。

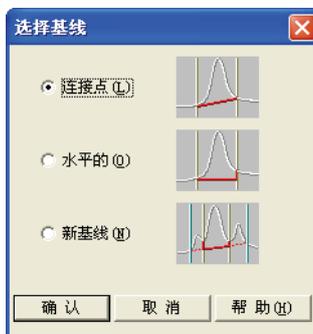
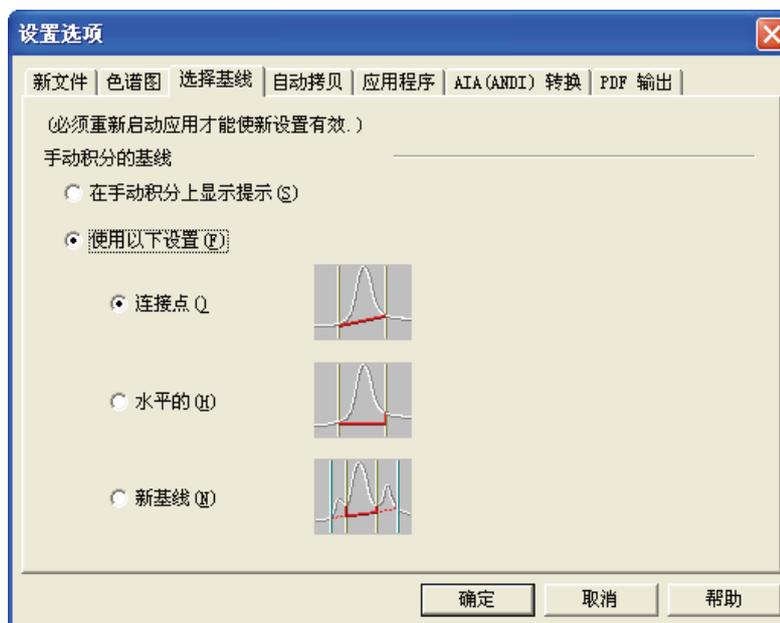


图 4.4 “选择基线”对话框



注

选择工具 > 选项命令，屏幕出现“选择基线”标签。



对峰进行手动处理时，如果选择“在手动积分上显示提示”按钮，屏幕会显示“选择基线”窗口。如果选择“使用后面的设置”按钮，则按照后面三个选项中的选择来画基线而不显示“选择基线”窗口。

3. 从**连接点**、**水平的**和**新基线**中选择如何画基线。单击**确定**按钮。

- **连接点** 采用色谱图中的开始和结束时间点作为基线的起点和终点。基线起点和终点必须与色谱图重合。
- 从所选的色谱图起点和终点之间强度最低的点开始水平地画基线。至少要保证起点或终点必须与色谱图重合。
- 选择**新基线**并单击**确定**按钮后，再次利用拖动功能单独从峰确定基线。峰的开始和结束时间从第一次拖动中被确定下来。关闭“选择基线”对话框后，基线起点和终点从第二个拖动确定下来。



图 4.5 指定新基线



注

确定基线后，峰在色谱图上被标出，质谱被显示出来。如果当前显示的是另外一个保留时间的质谱，单击位于色谱图视图顶端的“峰”按钮（◀▶），直到已被标记的峰被选中显示其质谱。

4.3.2 自动峰积分

1. 选择定性 > 定性参数。屏幕出现“定性参数”对话框。

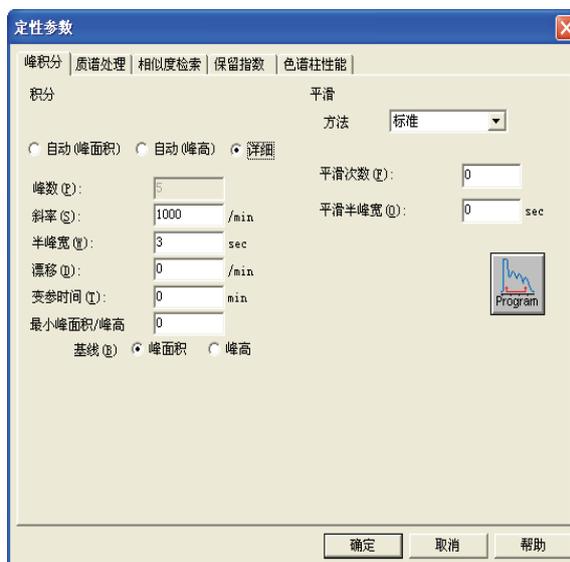


图 4.6 定性参数 峰积分标签



2. 在定性参数峰积分标签中输入峰积分参数。

峰积分参数

按照峰积分参数的规定进行峰积分。只有执行定性峰积分时，才显示**程序**按钮。用于定性峰积分的时间程序从组分表中的程序单元中设置。

参数	描述	单位	范围
积分	<p>从“自动（面积）”、“自动（高度）”或“详细”中选择对峰进行积分的方式。</p> <p>自动（面积）：斜率会自动调整，直到获得输入的峰号。如果在调整斜率后没有获得峰号，则采用面积最大的峰作为峰号参数。对来自“定性峰表”的最后斜率进行确认。</p> <p>自动（高度）：斜率会自动调整，直到获得输入的峰号为止。如果在调整斜率后没有获得峰号，则采用最高的峰作为峰号参数。对来自“定性峰表”的最后斜率进行确认。</p> <p>详细：按照斜率、宽度、漂移和 T.DBL 参数对峰进行积分。</p>		
峰号	<p>如果选择“自动（面积）”或“自动（高度）”作为积分方法，就会设定斜率调整过程中的目标峰号。根据色谱图的不同，可能不会直接找到此参数。如果无法获得峰号，系统会将具有最大面积的峰或者最高的峰包含进来，直到满足参数为止。</p> <p>如果选择“详细”作为积分方法，此参数被禁用。</p>		
斜率	<p>此参数决定峰检测的灵敏度。</p> <p>用于寻找峰起点和终点的斜率用于计算峰的切线。当斜率达到设定值时，峰的起点被确定。当负的斜率达到设定值时，峰的终点被确定。起点和终点从宽度参数的四分之一值计算。</p> <p>斜率参数高，灵敏度就低。斜率参数低，灵敏度就高，但同样能检测到宽峰。</p> <p>斜率参数注意事项</p> <p>斜率参数按照 T.DBL 参数规定的时间间隔改变。</p> <p>为了防止基线被检测为峰，对于基线漂移大的分析，斜率必须大于漂移。</p>	min ⁻¹	0 - 4E+11



参数	描述	单位	范围
漂移	此参数用于确定基线。通常，该数值设为 0，基线会自动得到纠正。如果自动基线纠正错误，输入能够获得正确基线的数值。漂移必须大于用来确定基线的斜率。 根据分离方法是否提供完全或者不完全分离，漂移参数会导致不同的结果。	min ⁻¹	-1E+7 - 1E+7
T.DBL	此参数是斜率和峰宽自动变化的时间间隔。 为了防止斜率和峰宽自动改变，输入一个大于最终分析时间的数值。当峰宽随时间而增加时，例如进行 GC 等温分析时，斜率和宽度参数必须要随时间而改变。当 T.DBL 是 0 时，随着峰变宽，斜率和宽度参数自动发生改变。如果自动确定的时间间隔错误，输入一个由下列公式确定的 T.DBL 参数。在每个 T.DBL 时间间隔，宽度加倍，斜率减半。 T.DBL (min) = (峰宽 / 半高峰宽) x (峰保留时间) x 2 T.DBL 参数注意事项 峰宽和斜率参数按照 T.DBL 参数决定的时间间隔改变。	min.	0 - 10000
峰宽	此参数是检测到的最窄的峰的半高宽度。 峰宽参数是用来区别噪声和峰的标准。由于噪声比峰窄，如果峰宽按照半高最窄的峰来设定，比这个宽度更窄的峰就可以作为噪声被区别出来并去掉。如果此数值设定错误，峰积分就会出现错误。 此宽度参数不能大于色谱图中最窄的峰的半高宽度。 宽度参数注意事项 宽度参数按照 T.DBL 参数规定的时间间隔改变。 包括时间程序在内，每个色谱图的 T.DBL 参数最多可自动改变 15 次。对 MS 定量分析来说，宽度参数最多只能改变两次。	秒	0.04 - 200
最小面积 / 峰高	低于这个设定的峰面积 / 高的峰不作为峰而被识别，也不会处理或在报告中输出。		
基数	此操作用于设置最小面积 / 高度中使用面积还是高度。 注： 定量标签中的设置决定定量计算采用峰面积还是峰高。		



参数	描述	单位	范围
平滑	从“无”、“标准”和“Savitzky-Golay”中选择平滑方法。 无：不执行平滑。 标准：像在 CLASS-5000 软件中那样，利用移动平均法执行平滑。 Savitzky-Golay：利用 Savitzky-Golay 法执行平滑。		
平滑次数	如果采用标准平滑方法，此参数指的是执行平滑的次数。如果第一次移动平均影响比较小，对平滑次数参数进行设置。通过多次平滑，提高移动平均效果。当平滑次数为 0 时，不执行平滑。 如果平滑方法选择“无”或者“Savitzky-Golay”，此参数被禁用。		0 - 99
平滑宽度	如果选择标准平滑方法，此参数指的是移动平均的平均宽度，单位为秒。 如果选择 Savitzky-Golay 作为平滑方法，此参数指的是平滑的点数。 只有奇数点有效。即使输入的是偶数，也只对奇数点进行平滑。 如果平滑方法选择“无”，此参数被禁用。	秒 点	0 - 200 3 - 25

**注**

更多信息，参见附录 A “峰处理和质谱操作”，第 269 页、章节 A.1 “积分和峰处理参数”，第 269 页和章节 A.5 “故障处理”，第 300 页。



峰积分时间程序

单击**程序**按钮后，屏幕显示“峰积分时间程序”对话框。

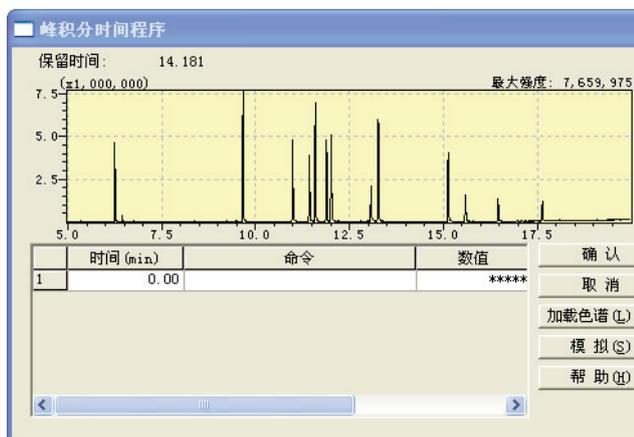


图 4.7 “峰积分时间程序”对话框

如果通过默认方法参数无法对峰进行最佳处理，利用此对话框创建一个时间程序，让峰积分参数随时间而改变。

峰积分启动时，定性分析继续对**峰积分标签**中输入的参数进行处理。时间程序按照设定的时间改变参数。峰处理继续对改变后的参数进行处理。

利用先前取得的色谱图简化时间程序的建立。选择**加载色谱**按钮，然后选择相应的数据文件。

单击“时间”一列，然后单击所需时间的色谱。保留时间被自动输入表中。从下拉列表中选择一条命令，然后为命令（后面有个“=”号）输入数值。



注

对 FASST 测量时间间隔来说，显示的是“扫描 TIC”。

命令	描述	单位	范围
积分开 / 关	发生在积分关和开之间的峰被认为是不必要的，因此也不对其进行积分。		开 / 关
拖尾开 / 关 / 自动	此程序自动进行拖尾处理。在指定的拖尾开和拖尾关时间之间强制执行拖尾处理。对拖尾自动来说，拖尾处理从指定的时间自动执行。		开 / 关 / 自动



命令	描述	单位	范围
水平基线开 / 关	对水平基线开和水平基线关之间的峰基线进行处理，使之变为水平。		开 / 关
峰检测 / 顶 / 尾	两个或多个峰被强行作为一个峰处理。		检测 / 顶 / 尾
前探峰开 / 关	对前探峰开到前探峰关这段时间进行前处理。		开 / 关
峰宽 =	<p>改变峰宽峰积分参数。</p> <p>注意事项</p> <p>当使用 T.DBL 时，峰宽值随时间而改变。有关更多信息，可参考峰积分参数表中的 T.DBL 参数。通常，当 T.DBL 命令被禁用（T.DBL 值大于分析结束时间）时，峰宽命令只能用于时间程序。</p> <p>程序对结合“峰宽 =”命令使用有效 T.DBL 值按照下列方法进行处理： 当为 T.DBL 设定一个由用户指定的值时：最初，峰宽值等于分析开始时的峰宽值。通过 T.DBL 计算当前峰宽值。然后，每次达到 T.DBL 时间，峰宽值加倍。</p> <p>当 T.DBL 设为 0（自动 T.DBL）：峰宽值在程序设定的时间发生改变。然后，峰宽值根据峰的宽度加倍。每次分析（包括利用 T.DBL 进行的分析）的峰宽变化限制：最多 15 次。对 MS 定量处理来说：最多 2 次。</p>	秒	0.04 - 200
斜率 =	<p>改变斜率峰积分参数。</p> <p>注意事项</p> <p>采用 T.DBL 时，斜率值随时间而改变。有关进一步信息，参见“峰积分参数表”中的 T.DBL 参数。通常，当 T.DBL 命令被禁用（T.DBL 值大于分析结束时间）时，斜率命令只能用于时间程序。</p> <p>程序对结合“斜率 =”命令使用有效 T.DBL 值按照下列方法进行处理： 当为 T.DBL 设定一个由用户指定的值时：最初，斜率参数等于分析开始时的斜率值。通过 T.DBL 计算当前斜率值。然后，每次达到 T.DBL 时间，斜率值减半。</p> <p>当 T.DBL 设为 0（自动 T.DBL）：斜率值在程序设定的时间发生改变。然后，斜率值根据峰的宽度减半。</p>	min ⁻¹	0.0 - 4E+11
漂移 =	改变漂移峰积分参数。	min ⁻¹	-1E+7 - 1E+7



命令	描述	单位	范围
T.DBL=	设定 T.DBL 峰积分参数。 注意事项 T.DBL 随时间改变峰积分的斜率和峰宽参数值。通常，不要将此命令与时间程序中改变斜率或宽度参数的峰宽或斜率命令一起使用。 通过用户指定的 T.DBL 进行处理：最初，T.DBL 参数等于分析开始时的 T.DBL 值；利用此数值计算当前峰宽和斜率值。然后，峰宽和斜率值在指定时间发生改变（峰宽加倍、斜率减半）。 自动处理（T.DBL 设为 0）：峰处理参数中的斜率和峰宽值与开始时的数值发生改变；T.DBL 处理自动进行。	分钟	0.0 - 10000.0



注

更多信息，参见附录 A “峰处理和质谱操作”，第 269 页、章节 A.1 “积分和峰处理参数”，第 269 页和章节 A.5 “故障处理”，第 300 页。

3. 在峰积分表内输入每个参数后，单击**确定**按钮。
峰标记和基线被添加到色谱图视图中显示的色谱图，并且对峰进行积分。

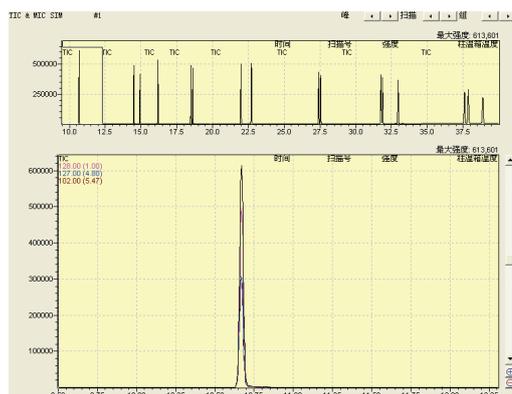


图 4.8 色谱图视图



4.3.3 处理

处理中有“移动检测点”和“分峰”。可以在色谱图视图、数据分析窗口中的定量视图、校准窗口中的单/多色谱图显示视图或者定量浏览器窗口中的色谱图视图（单）中执行这些操作。

1. 移动检测点

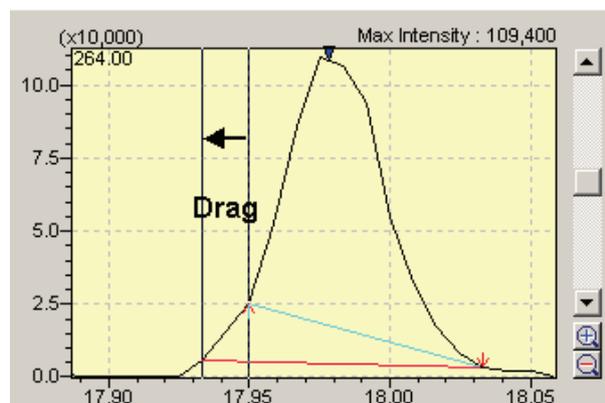
此操作允许移动指针来规定峰的起点和终点。



注

可以对峰的拖尾或前边缘进行移动。峰检测点无法移动到相邻峰的区域。

- (1) 如果鼠标指针移动到靠近检测点的地方，指针变成三角形。
- (2) 将指针从先前的检测点拖动至新检测点。鼠标指针移动的同时，指针变成垂直线。

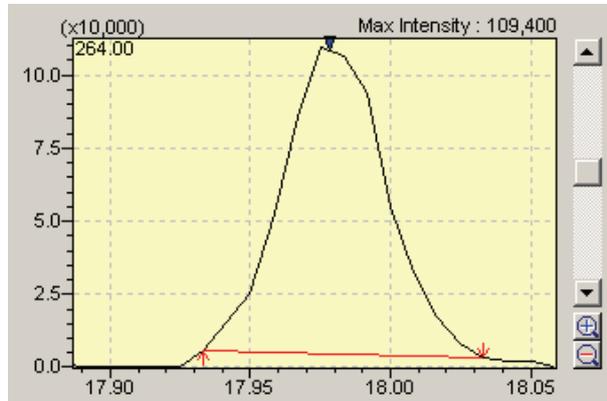


注

鼠标指针移动时，所画的基线（红线）根据指针位置而改变。



- (3) 当检测点移动到新位置时，执行数据处理，标记、基线、面积、高度和浓度都得到更新。



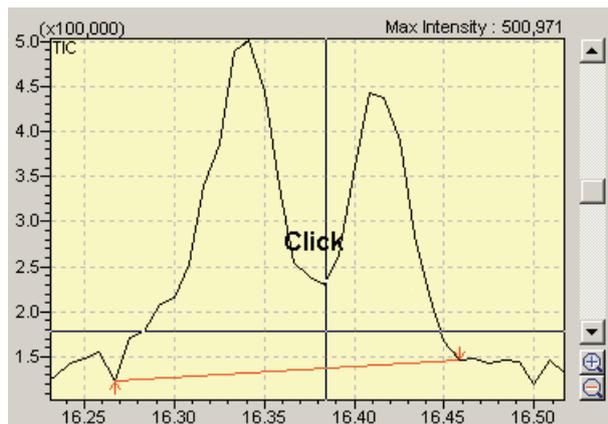
注

对手动峰处理来说，峰处理标记以“MI”表示。

2. 分割峰

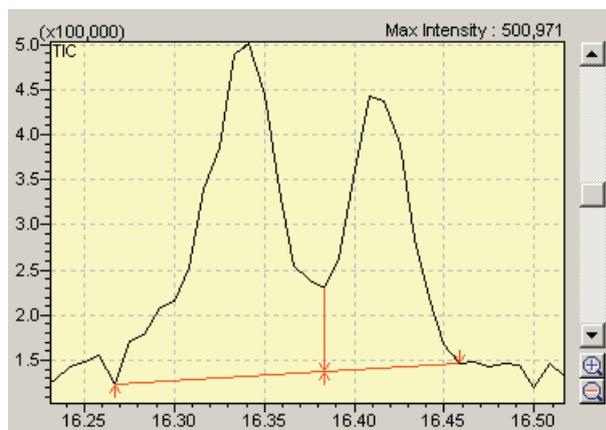
如果选择此命令，色谱图区域将变成“分割峰”模式，可以在指定的保留时间将峰分流。若要取消此模式，再次选择此命令即可。

- (1) 从菜单（鼠标右键单击色谱图，显示菜单）中选择“分割峰”命令时，色谱图上的鼠标指针变成十字线。
- (2) 在峰的分割点上点一下。在该点画一条垂直的边界线。





对两个峰进行峰处理。每个峰的标记、基线、面积、高度和浓度都被更新。



注

对手动峰处理来说，峰处理标记以“MI”表示。

4.3.4 通过批处理进行峰积分

有关批处理过程中对峰进行积分的信息，参见[章节 7 “连续分析”](#)，第 173 页。

4.4

4 定性分析

相似度检索

这部分内容是对如何将质谱视图中显示的质谱与谱库文件中的类似质谱进行比较的说明。它还备选质谱和目标质谱之间的对比以及组分的识别做了说明。

4.4.1 所显示质谱图的相似度检索

1. 单击色谱图视图顶端的“峰”按钮 (), 选择一个通过相似度检索来识别的峰。所选的峰的质谱或者目标质谱显示在质谱视图中。

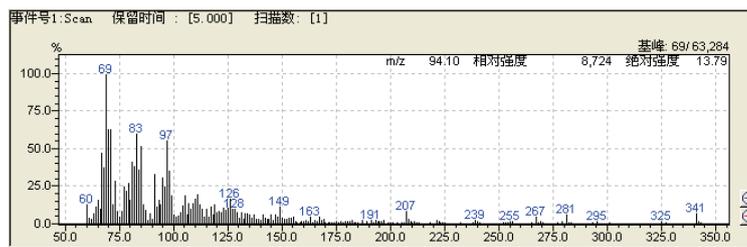


图 4.9 质谱视图

2. 单击**相似度检索结果**工具栏按钮, 打开“相似度检索结果”窗口。



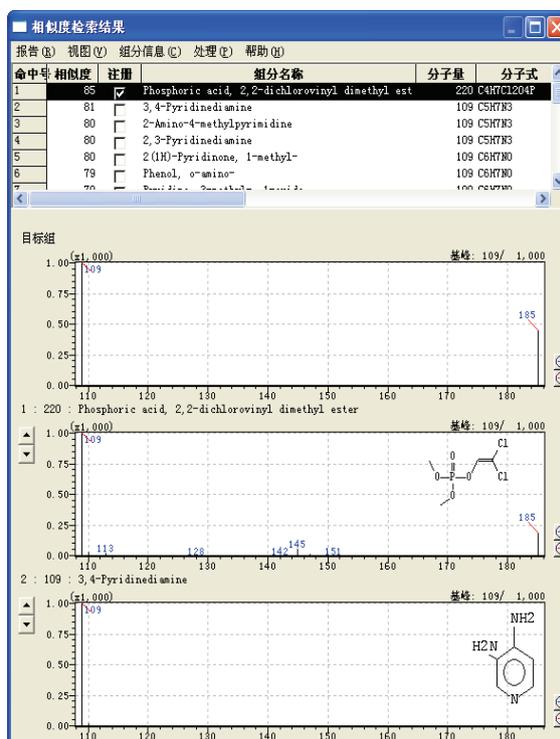


图 4.10 “相似度检索结果”窗口

随后，组分在“相似度检索结果”窗口中列出，首先列出的是相似度最高的组分。此列表可以利用中间质谱左侧的()按钮自下而上滚动。中间质谱变成列表中当前所选组分的质谱。

最顶端的质谱是目标质谱，第二个质谱是来自谱库的备选组分质谱。窗口下部的信息根据视图菜单中当前所选的显示选项不同而变化。如果“比较”被选中，下部会包含第二个备选质谱，该质谱与第二个质谱来自同一个谱库。如果“信息”被选中，有关备选质谱的组分信息被显示出来。如果“差减”被选中，下部显示从目标质谱中去掉备选质谱之后得出的结果质谱。



注

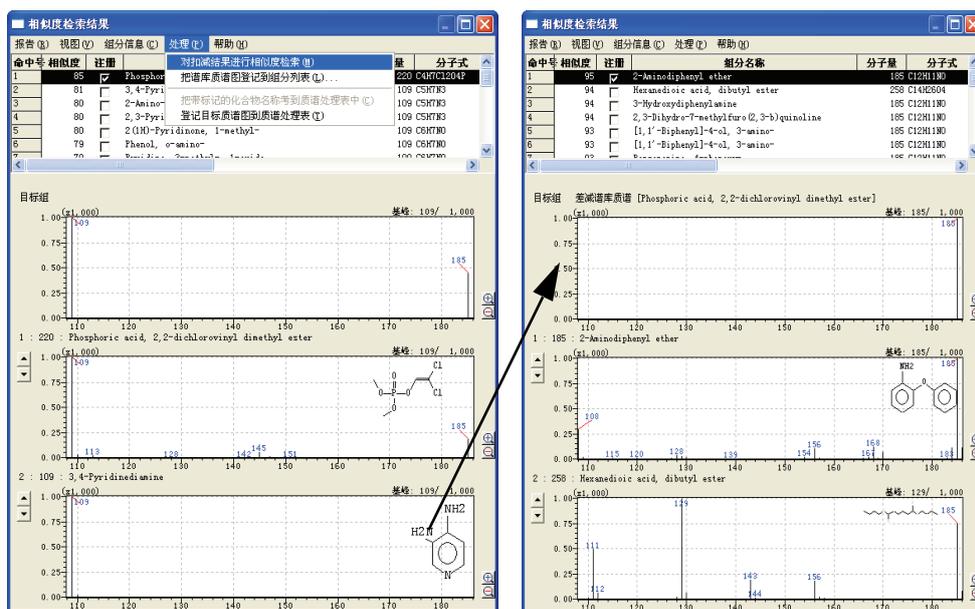
用于相似度检索的谱库文件在“定性参数”对话框的相似度检索标签中选择。若要打开“定性参数”对话框，可以单击**定性参数**工具栏按钮或者选择**定性 > 定性参数**。根据谱库文件名可以选择 5 个谱库文件。可以为 Min.SI 下的每个文件输入最低相似度指数。也可以在此标签中指定最高命中数和其他参数。有关相似度检索参数的更多信息，请参考 GCMS 帮助。



4.4.2 差减质谱图的相似度检索

如果您以前知道目标质谱由多种组分的质谱构成，去掉相似度检索找到的质谱然后再次执行相似度检索，就能获得更为精确的检索结果。

1. 选择处理 > 对差检结果相似度检索命令。
2. 系统打开一个新的相似度检索窗口，同时显示被差减的质谱和检索结果。



3. 您还可以为差减结果再次执行相似度检索。（最多连续两次）



4.4.3 指定谱库质谱

您可以将谱库质谱添加至相似度检索窗口命中列表的末尾。

通过这么做，您可以显示质谱的相似度检索结果和相似度指数，然后执行差减结果相似度检索。

1. 选择处理 > 将谱库质谱注册至命令列表命令。
2. “指定谱库质谱”窗口打开。
输入谱库文件名和您想要添加至命中列表的质谱的序列号。



4.5 打印结果

这部分内容是对如何打印默认定性分析报告的说明。

4.5.1 色谱图和质谱

若要打印定性分析中所显示的色谱图和质谱报告，请依次选择**文件 > 打印图像 > 打印**或者单击**打印**工具栏按钮。依次选择**文件 > 打印图像 > 预览**，或者单击**打印预览**工具栏按钮，在打印之前通过屏幕查看报告。系统采用默认的报告格式来打印色谱图和质谱。若要编辑默认的报告格式，依次选择**文件 > 打印图像 > 编辑格式**。



打印图像报告

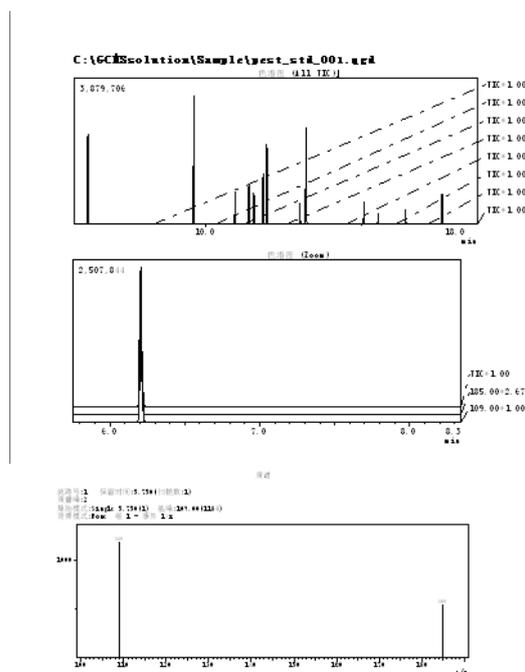


图 4.11 打印出的报告

4.5.2 相似度检索结果

利用“相似度检索结果”窗口中的“报告”菜单打印下述三种默认的报告。



菜单命令	描述
检索结果	打印目标质谱和当前显示的备选组分质谱。
比较	打印目标质谱、当前显示的备选组分质谱和将备选质谱从目标质谱中去除之后的结果质谱。
比较信息	打印组分信息、质量表、结构式和谱库中有关备选组分的数据。



图 4.12 相似度检索结果报告选择

4.5.3 定制报告

从打开的数据文件中打印定制报告，选择**文件 > 报告**。屏幕显示“报告”窗口。您可以创建一个新的报告格式并选择当前打开的数据文件作为每个项目的数据文件，也可以打开一个现有的报告格式文件并选择当前打开的数据文件作为每个项目的数据文件。打印该报告。有关建立定制报告格式的信息，参见[章节 6 “生成自定义报告”](#)，第 163 页。



本页空白。

5.1 概述

这部分内容是对通过 GCMS 再解析应用程序对所取得的数据进行处理的说明。它还对组分识别、校准曲线生成、浓度计算和报告打印做了说明。

5.1.1 “再解析”窗口

1. “数据分析”窗口

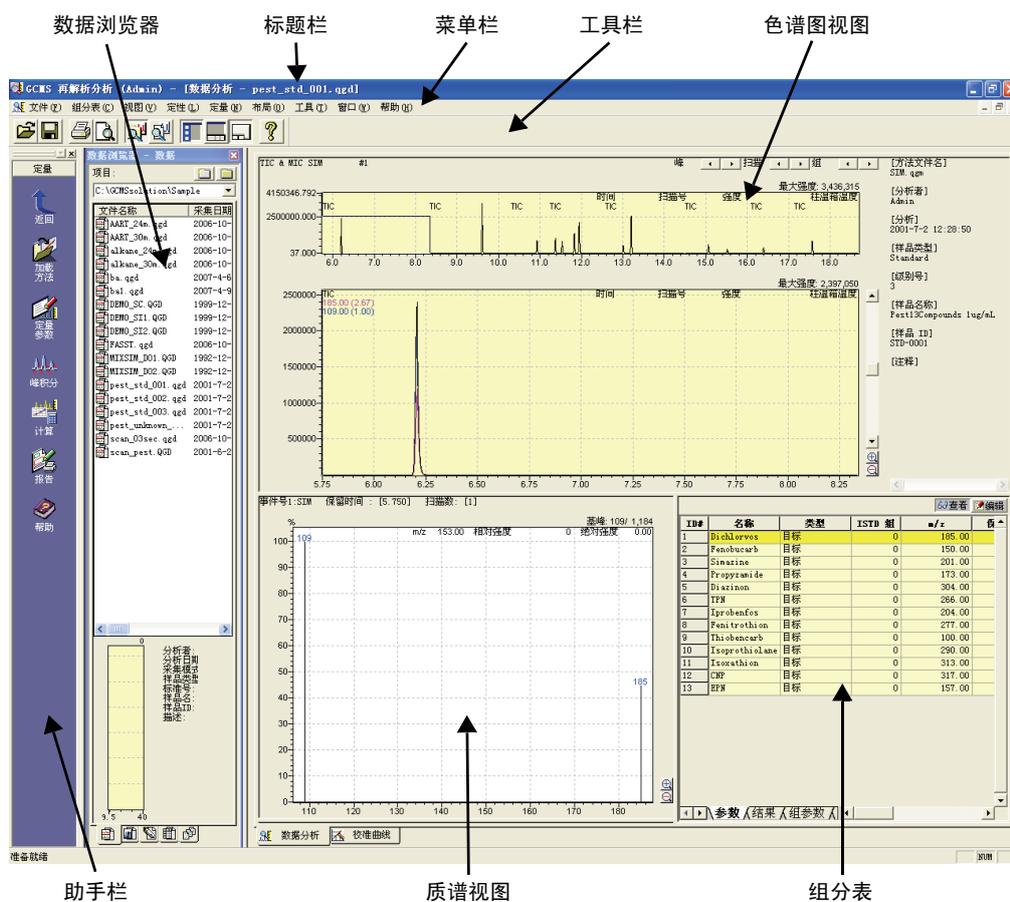


图 5.1 “数据分析”窗口

画面中的项目在下表中做了说明。



标题栏	显示应用名称，用户，活动窗口和文件。
菜单栏	显示活动窗口中当前可用的菜单。
工具栏	显示活动窗口中当前可用的命令按钮。
助手栏	显示适合特定功能或窗口的命令图标。要打开窗口或激活命令，单击相应的图标。
数据浏览器	按照类型，包括：数据、方法、报告格式、批处理和所有文件，显示所有文件。双击文件图标或者将其拖动至相应的位置就可以轻松打开数据用于分析。
色谱图视图	从打开的数据文件中显示色谱图。
质谱视图	显示有关保留时间或组分表中选定组分的质谱。
组分表	显示下表： <ul style="list-style-type: none"> • 组分表：包括有关组分识别，校准曲线生成以及浓度计算的参数。 • 组分结果表：显示组分识别和浓度计算结果。 • 分组表：包含该组有关校准曲线生成和浓度计算的参数。 • 分组结果表：显示安装分组表中的参数得出的分组结果。

2. “校准曲线”窗口

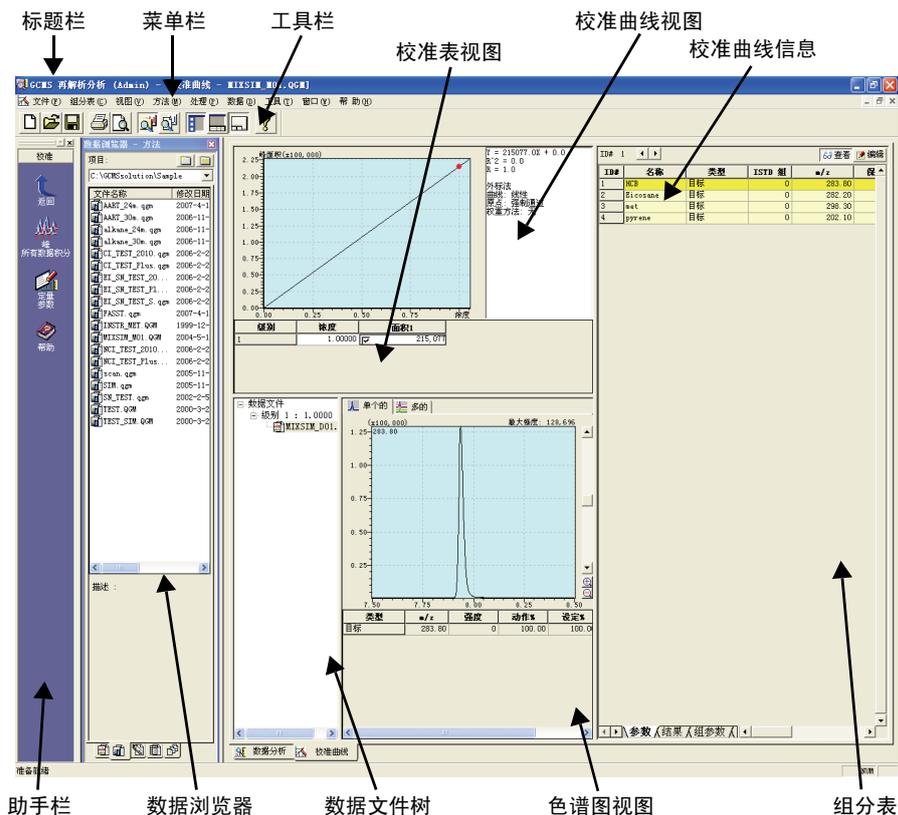


图 5.2 “校准曲线”窗口



标题栏	显示应用名称、用户、活动窗口和文件。
菜单栏	显示活动窗口中当前可用的菜单。
工具栏	显示活动窗口中当前可用的命令按钮。
助手栏	显示适合特定功能或窗口的命令图标。打开窗口或激活命令，请单击相应的图标。
数据浏览器	按照类型（包括“数据”、“方法”、“报告格式”、“批处理”和“所有文件”）显示所有文件。双击文件图标就可轻松打开方法文件用于生成校准曲线，还可以把数据文件拖动至数据文件树用于分析。
校准曲线视图	显示有关组分表或结果表中所选组分的校准曲线。
校准曲线信息	显示所显校准曲线的类型和统计计算结果。
校准表视图	显示当前所显校准曲线中每个层次的浓度、响应因子或面积 / 高度。
数据文件树	显示每个层次上可被访问用来生成校准曲线的数据文件。所选的数据文件是当前所显组分和定量结果表所属的数据文件。
色谱图视图	显示有关组分表或量化结果表中所选组分的色谱图。
组分表	显示下表： <ul style="list-style-type: none">• 组分表：包括有关组分识别，校准曲线生成以及浓度计算的参数。• 组分结果表：显示组分识别和浓度计算结果。• 分组表：包含该组有关校准曲线生成和浓度计算的参数。• 分组结果表：显示安装分组表中的参数得出的分组结果。



3. “定量数据分析”窗口

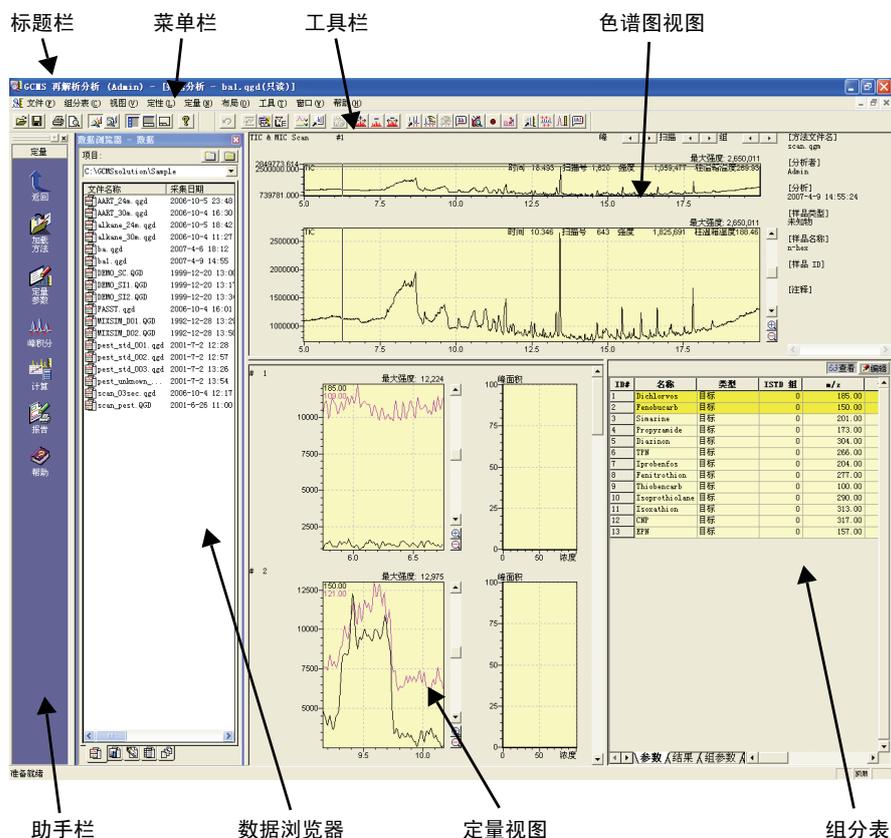


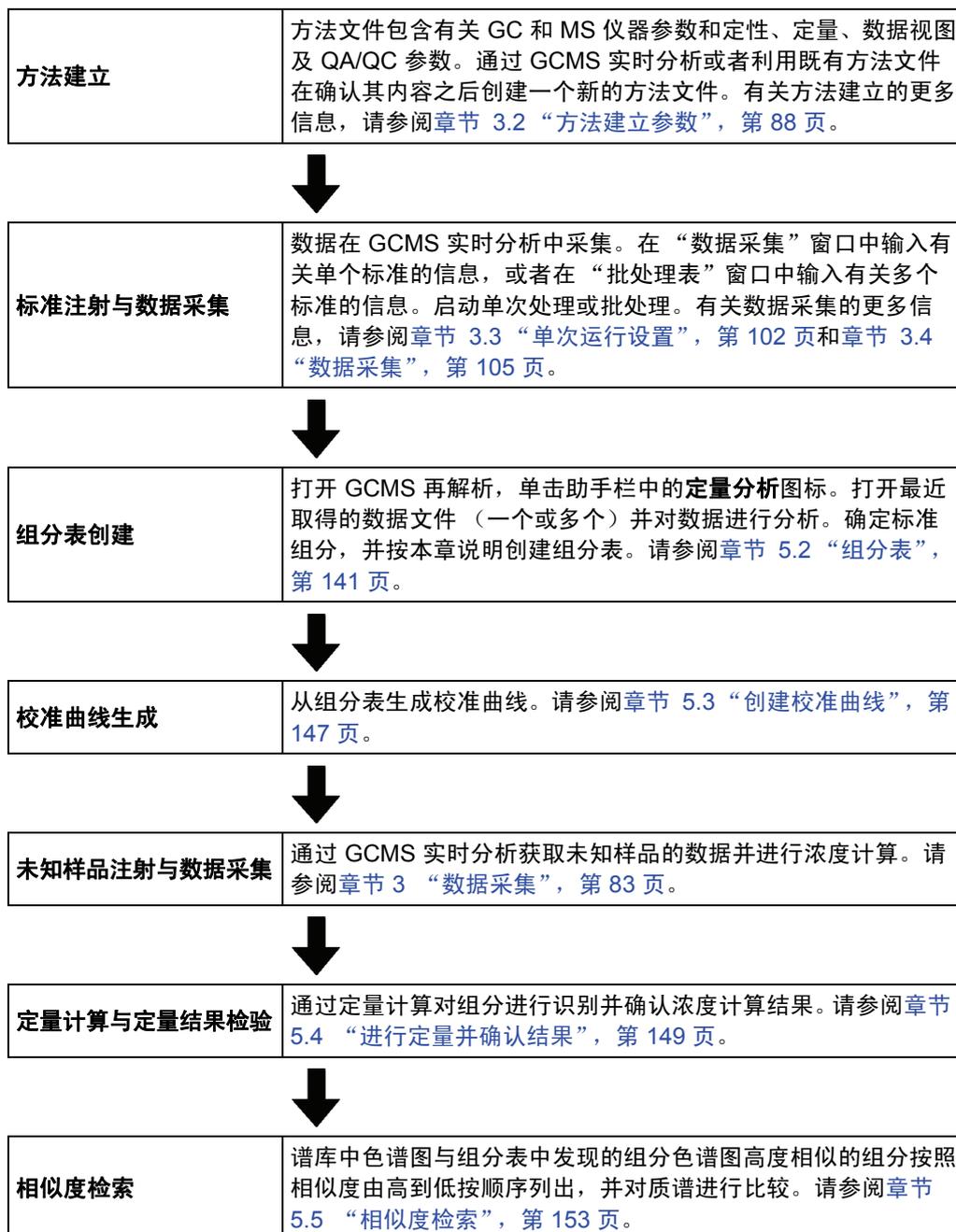
图 5.3 “定量数据分析”窗口

标题栏	显示应用名称、用户、活动窗口和文件。
菜单栏	显示活动窗口中当前可用的菜单。
工具栏	显示活动窗口中当前可用的命令按钮。
助手栏	显示适合特定功能或窗口的命令图标。打开窗口或激活命令，请单击相应的图标。
数据浏览器	按照类型（包括“数据”、“方法”、“报告格式”、“批处理”和“所有文件”）显示所有文件。双击文件图标或者将其拖动至相应的位置就可以轻松打开数据用于分析。
色谱图视图	从打开的数据文件中显示色谱图。
定量视图	显示有关组分表或量化结果表中所选组分的校准曲线和色谱图。每次最多显示 5 个组分的数据。
组分表	显示下表： <ul style="list-style-type: none"> 组分表：包括有关组分识别，校准曲线生成以及浓度计算的参数。 组分结果表：显示组分识别和浓度计算结果。 分组表：包含该组有关校准曲线生成和浓度计算的参数。 分组结果表：显示安装分组表中的参数得出的分组结果。



5.1.2 定量分析步骤

定量分析的步骤说明如下。





定量分析处理

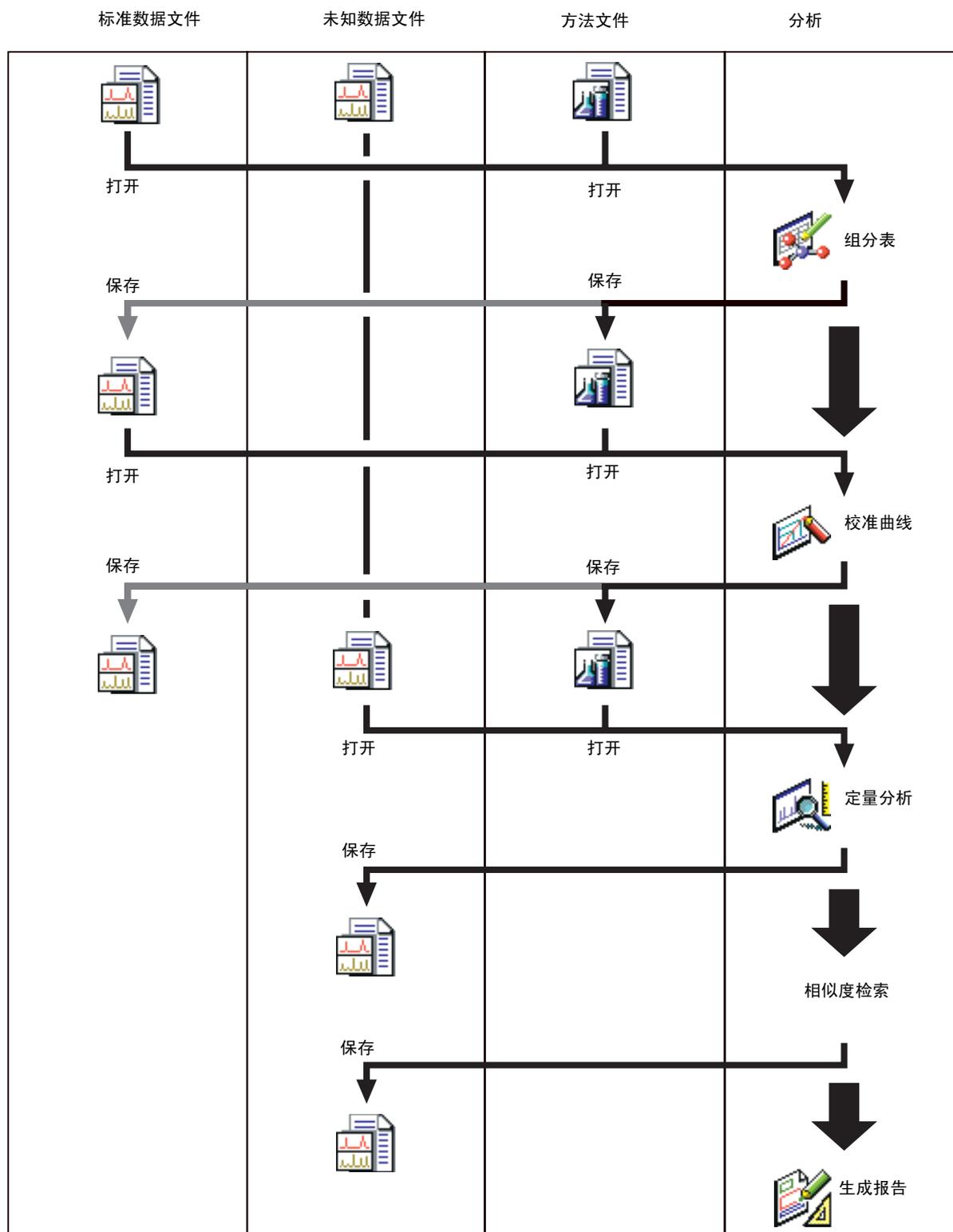


图 5.4 定量分析处理

5.2 组分表

这部分内容是对峰积分、定量和修正曲线生成必须要用到的组分表的创建方法的说明。可以直接向组分表输入信息，或者在组分表向导的帮助下创建流程。

1. 打开采集到的数据。
启动 GCMS 再解析，单击助手栏中的**创建组分表**图标。“数据分析”窗口以组分表的形式显示。
2. 单击“数据浏览器数据”标签并双击该标准的数据文件图标。数据显示在色谱图视图中。
3. 单击助手栏中的**向导（新）**图标。组分表进入编辑模式，屏幕显示组分表向导。

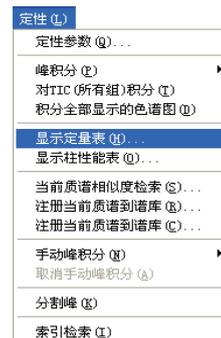


图 5.5 组分表向导画面 1/7

4. 完成组分表向导 1/7 画面。

选择**使用当前质谱处理表**或者**TIC 积分**单选按钮。

若要在选择“使用当前质谱处理表”之间检查质谱处理表内容，单击**取消**按钮并临时关闭向导。选择**定性 > 显示定性表**或者单击助手栏中的**定性表**图标以打开“定性表”窗口。检验质谱处理标签上的质谱处理表。单击助手栏中的**向导（新）**图标以重新打开组分表向导。



有关“定性表”窗口的更多信息，请参考 GCMS 帮助。



当“TIC 积分”被选中时，积分参数和质谱图格式按钮被激活。单击积分参数按钮，对“定性参数”对话框“峰积分”标签的内容进行检验。单击质谱图格式按钮，对“定性参数”对话框“质谱处理”标签的内容进行检验。

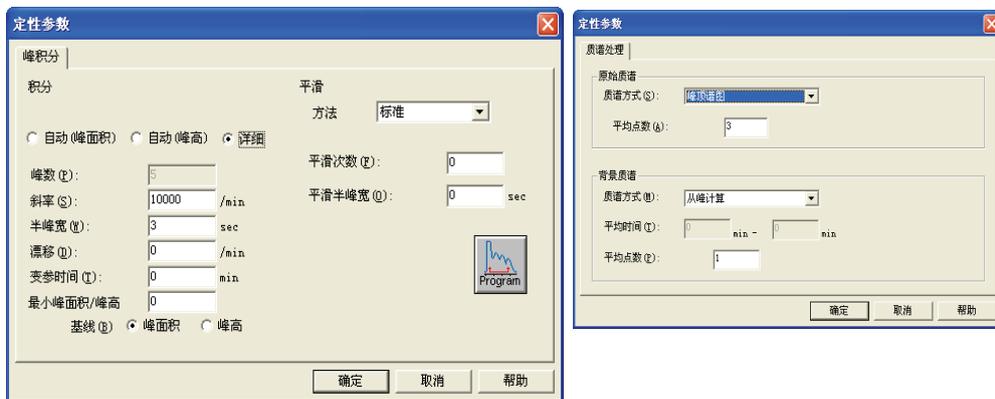


图 5.6 峰积分与质谱图格式参数



注

有关在“峰积分”和“质谱处理”标签中设置参数的更多信息，参见 GCMS 帮助。

单击下一步按钮，进入组分表向导 2/7 画面。

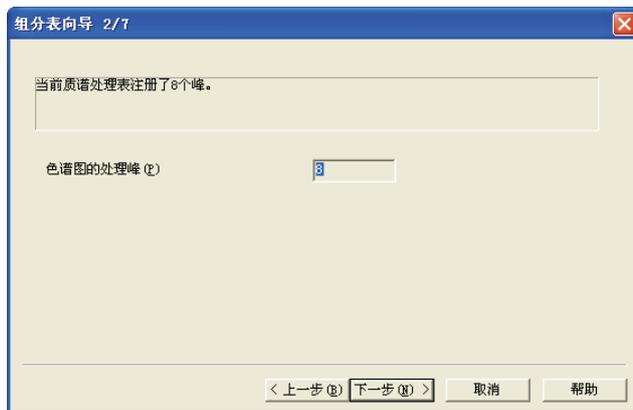


图 5.7 组分表向导 2/7 画面

5. 完成组分表向导 2/7 画面。

当前质谱处理表中注册的峰数作为此文本框的值被显示。



单击**下一步**按钮，进入组分表向导 3/7 画面。



图 5.8 组分表向导 3/7 画面

6. 完成组分表向导 3/7 画面。

组分表由质谱处理表内的峰构成。如果本来不应该加入组分表的峰被选中，单击复选框解除对它们的选择。突出显示某行会显示有关被选组分的质谱。

单击**下一步**按钮，进入组分表向导 4/7 画面。



图 5.9 组分表向导 4/7 画面

7. 完成组分表向导 4/7 画面。

输入定量方法、校准曲线和浓度参数。



有关设置组分表向导 4/7 画面参数的更多信息，请参考 GCMS 帮助。

单击**下一步**按钮，进入组分表向导 5/7 画面。



图 5.10 组分表向导 5/7 画面

8. 完成组分表向导 5/7 画面。

输入校准曲线每个层次的浓度、峰识别中将要使用的参考离子的数量以及质量的十进制格式。如果在组分表向导 4/7 中选择“内标法”作为定量方法，也要输入内标的数量。

单击**下一步**按钮，进入组分表向导 6/7 画面。



图 5.11 组分表向导 6/7 画面



9. 完成组分向导 6/7 画面。

对每个组分 ID 的信息进行编辑。若要改变组分，可直接输入 ID 号或者使用 ID 号文本框右侧的旋转控制箭头。与所选 ID 相关的质谱显示在质谱视图中。

在“类型”复选框中为组分类型选择“参考”或者“目标”。

指定一个组分名称。当组分表向导 1/7 中的“使用当前质谱处理表”被选中并且在表中指定组分名称时，组分名称就会被显示出来。第一个单选选项取决于组分在“质谱处理表”中的输入方法。如果对质谱处理表执行相似度检索，谱库中第一个命中组分的名称就是第一个名称选项。如果不执行相似度检索，第一个名称选项是“RT: ”后面跟着保留时间。当“设置名称”选项被选中时，可以向文本框中输入名称。

在屏幕右侧的表内，“目标离子”和“参考离子”按顺序从具有最大相对强度的离子列出来。

若要改变“类型”列中的单元格，单击该单元格。该单元格变成一个复选框；选择“目标离子”、“参考离子”或“未使用”。如果更改目标或参考离子，首先将“目标离子”或“参考离子”改为“未使用”，然后将其他离子改为“目标离子”或“参考离子”。

若要更改 m/z，单击相应的单元格。单击单元格中出现的按钮，显示质谱。确定从中获取 m/z 的质谱位置，双击该位置。m/z 被选中，参考离子比率被重新计算。

单击**下一步**按钮，进入组分表向导 7/7 画面。



图 5.12 组分表向导 7/7 画面



10. 完成组分表向导 7/7 画面。

当确定要创建含有所需组分数目（在组分表向导 3/7 画面中指定的组分数目）的组分表时，单击**完成**按钮。组分表将显示在组分表视图的参数标签中。

11. 设置定量参数。

组分表创建后，对定量参数做必要的修改。选择**定量 > 定量参数**或者单击**定量参数**工具栏按钮。屏幕出现“定量参数”对话框。



图 5.13 “定量参数”对话框

当确认参数无误后，对方法和数据文件进行保存。



注

定量参数时间程序从峰积分标签中访问。对定量参数而言，峰积分的时间程序从组分表的“程序”列访问。

5.3

5 定量分析

创建校准曲线

这部分内容是对利用组分表中的数据创建校准曲线的说明。

1. 单击助手栏中的**校准曲线**图标，打开“校准曲线”窗口。
2. 单击数据浏览器的“方法”标签，双击用于创建校准曲线的方法文件。利用方法文件保存的组分表被显示出来。



ID#	名称	类型	ISTD 组
1	Dichlorvos	目标	0
2	Fenobucarb	目标	0
3	Simazine	目标	0
4	Propyzamide	目标	0
5	Diazinon	目标	0
6	TFN	目标	0
7	Iprobenfos	目标	0
8	Fenitrothion	目标	0
9	Thiobencarb	目标	0
10	Isoprothiolane	目标	0
11	Isoxathion	目标	0
12	CHF	目标	0
13	EPN	目标	0

图 5.14 组分表

3. 单击数据浏览器的“数据”标签，选择用于创建校准曲线的数据文件，将其从数据浏览器拖动至数据文件树。

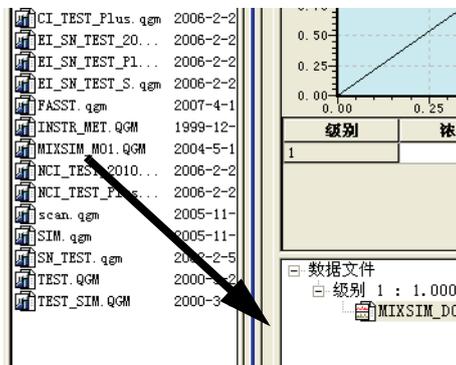


图 5.15 拖动数据文件图标至数据文件树



注

当创建具有两级或更多级的校准曲线时，将每一级的数据文件拖至数据文件树中的相应位置。



4. 单击助手栏中的对所有数据进行峰积分图标。
校准曲线生成并且显示在校准曲线视图中。

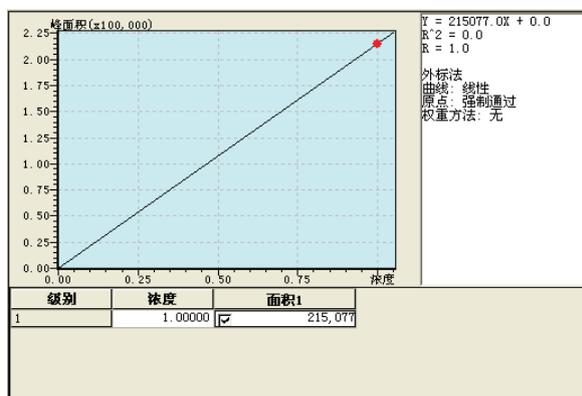


图 5.16 校准曲线视图

保存方法文件。

5.4 定量分析

5.4 进行定量并确认结果

这部分内容是对如何进行定量处理计算并查看结果的说明。同时也对组分表和校准曲线做了讨论。

1. 单击助手栏中的定量图标，打开“定量数据分析”窗口。
2. 打开将要对其执行定量分析的数据文件。

单击数据浏览器中的“数据”标签，双击数据文件图标打开文件。数据显示在各自的视图中。

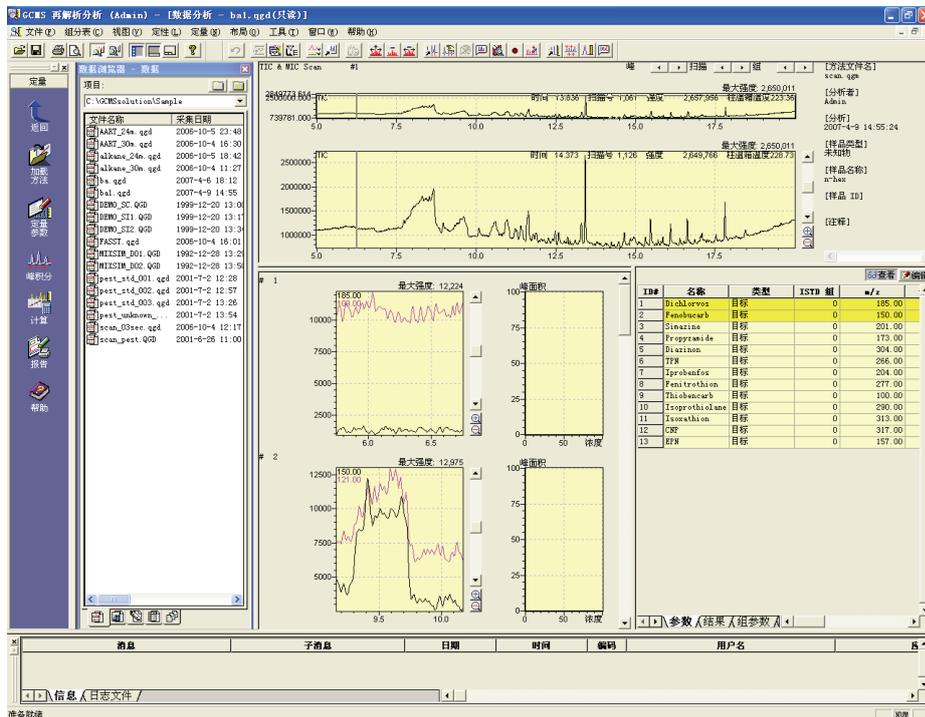


图 5.17 “定量数据分析”窗口



3. 单击助手栏中的**加载方法**图标，打开“加载方法”对话框。



图 5.18 “加载方法”对话框

4. 选择将要用来保存校准曲线的方法文件，单击**打开**按钮。校准曲线和组分表被显示出来。

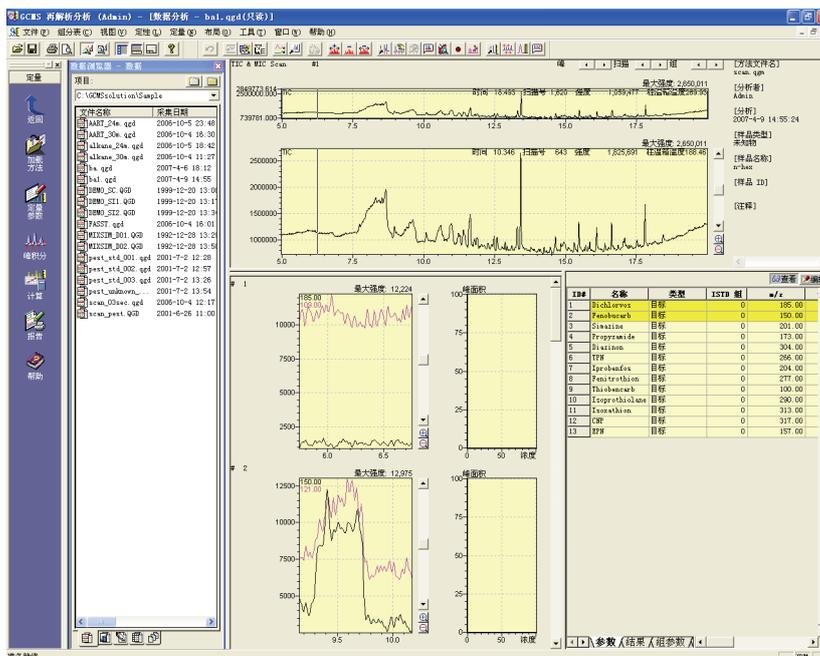


图 5.19 校准曲线和组分表被显示出来

5. 单击对所有 ID 进行定量工具栏按钮或者选择**定量 > 计算**。定量后，结果可以查看。



6. 单击组分表的“**结果**”标签，显示定量结果。



下表是对结果表中所包含的信息的说明。



结果表

ID#	名称	类型	ISTD 组	m/z	保留时间	保留指数
1	Dichlorvos	目标	0	185.00	6.250	0
2	Fenobucarb	目标	0	150.00	9.667	0
3	Simazine	目标	0	201.00	10.992	0
4	Propyzamide	目标	0	173.00	11.433	0
5	Diazinon	目标	0	304.00	11.592	0
6	TFN	目标	0	266.00	11.892	0
7	Iprobenfos	目标	0	204.00	12.017	0
8	Fenitrothion	目标	0	277.00	13.075	0
9	Thiobencarb	目标	0	100.00	13.267	0
10	Isoprothiolane	目标	0	290.00	15.133	0

图 5.20 结果表

色谱柱	描述
ID#	显示组分 ID 号。
名称	显示组分名称。
浓度	显示计算出的浓度。
保留时间	显示已识别的峰的保留时间。
类型	显示组分表中输入的类型。如果峰尚未识别，则显示“未知”。
m/z	显示组分表中输入的 m/z 值。
面积	显示已识别的峰的面积。
峰高	显示已识别的峰的高度。
单位	显示组分表中所选的单位。
回收率	<p>显示计算出的百分比回收率。百分比回收率通过对加料样品的定量进行计算。</p> <p>回收率计算公式： $(\text{百分比回收率}) = (\text{计算所得的已加料样品浓度} - \text{计算所得的未加料样品浓度}) / (\text{添加量}) \times 100$ </p> <p>创建批处理表时，未加料和已加料的样品总是顺序输入，未加料的样品在已加料的样品之前。输入未加料的样品信息，并设置批处理表中的样品类型。给加料的样品设定信息并设定样品类型。</p>
方式	<p>如果已经执行峰积分，显示峰积分模式。</p> <ul style="list-style-type: none"> 自动：表示自动峰积分和识别已经执行。 手动积分：表示手动峰积分或识别已经执行。
检索	表明是否对识别的质谱执行过相似度检索。若要显示检索结果，双击单元格或者从单击鼠标右键弹出的菜单中选择“显示组分表检索结果”。
SI	当选中定性参数模式匹配而且在组分表中注册标准质谱图时，相似度计算结果被显示出来。在 FASST 测量时间间隔内对扫描质谱执行相似度计算。



注

未识别的组分显示在灰色的行内。已识别的组分显示在绿色的行内。

5.5 定量分析

5.5.1 相似度检索

这部分内容是关于谱库中与组分表内的组分质谱高度相似的质谱的列表和显示方式的说明。来自谱库的质谱或者备选质谱按照与组分表中的组分或者目标组分的相似度按顺序显示。它还对备选和目标质谱之间的对比做了说明。

5.5.1 化合物的相似度检索

1. 以定量或组分表的模式打开“数据分析”窗口。单击数据浏览器的数据标签并双击相关的数据文件图标。组分表被显示出来，如果色谱图和校准曲线可用的话，也被显示出来。

2. 从定量菜单中选择 [组分表相似度检索] 命令。屏幕显示“定量参数”对话框的组分表检索标签。

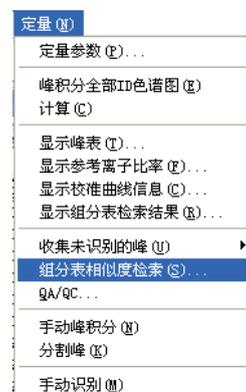
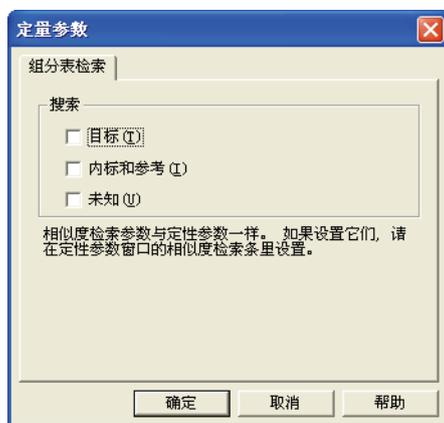


图 5.21 定量参数组分表检索标签

3. 从“目标”、“ISTD 和参考”和“未知”中选择加入到相似度检索的组分类型。每次检索可以加入不止一个类型。

做好选择后，单击**确定**按钮，执行相似度检索。



注

如通过 FASST 获得相似度检索目标组分，则检索采用 [扫描质谱] 进行。



4. 若要查看检索结果，双击目标组分所在的行或者从单击鼠标右键弹出的菜单中选择**显示组分表检索结果**。屏幕出现“相似度检索结果”窗口。

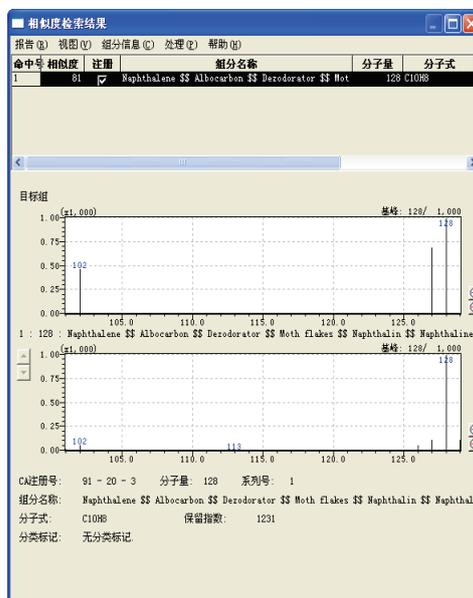


图 5.22 “相似度检索结果”窗口

随后，组分在“相似度检索结果”窗口中列出，首先列出的是相似度最高的组分。此列表可以利用中间质谱左侧的  按钮进行滚动显示。中间质谱变成列表中当前所选组分的质谱。

最顶端的质谱是目标质谱，第二个质谱是来自谱库的备选组分质谱。窗口下部的信息根据视图菜单中当前所选的显示选项不同而变化。如果“比较”被选中，下部会包含一个备选质谱，该质谱与第二个质谱来自同一个谱库。如果“信息”被选中，有关备选质谱的组分信息被显示出来。如果“差减”被选中，下部显示从目标质谱中去掉备选质谱之后得出的结果质谱。



CA注册号:	91 - 20 - 3	分子量:	128	系列号:	1
组分名称:	Naphthalene \$\$ Albocarbon \$\$ Derodator \$\$ Moth Flakes \$\$ Naphthalin \$\$ Naphthaline \$\$				
分子式:	C10H8	保留指数:	1231		
分类标记:	无分类标记.				

图 5.23 视图菜单中所选的信息

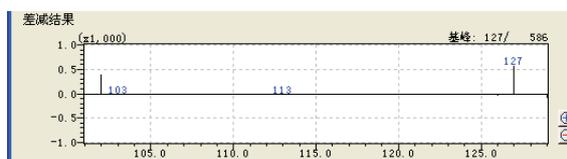


图 5.24 视图菜单中选中“差减”

**注**

用于相似度检索的谱库文件在 [定性参数] 的相似度检索标签中选择。若要打开“定性参数”对话框，可以单击**定性参数**工具栏按钮或者选择**定性 > 定性参数**。



图 5.25 谱库文件选择

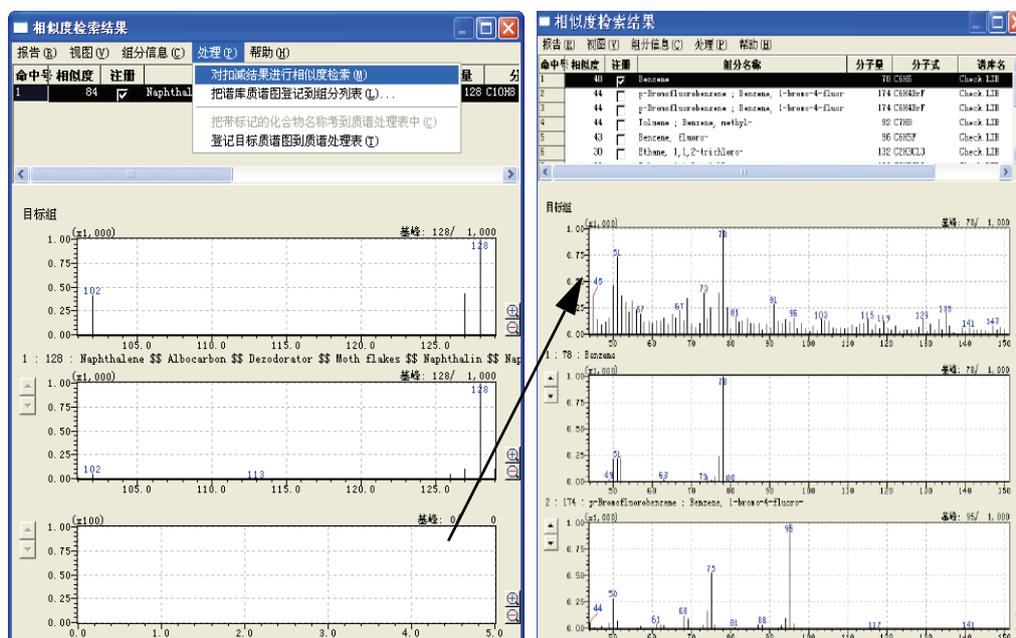
可以在谱库文件名下选择 5 个谱库文件。可以为 Min.SI 下的每个文件输入最低相似度级别。也可以在此标签中指定最高命中数和其他参数。有关相似度检索参数的更多信息，请参考附录 A “峰处理和质谱操作”，第 269 页和 GCMS 帮助。

5.5.2 执行差减结果相似度检索

如果您以前知道目标质谱由多种组分的质谱构成，去掉相似度检索找到的质谱然后再次执行相似度检索，就能获得更为精确的检索结果。



1. 选择处理 > 差减结果相似度检索命令。
2. 系统打开一个新的相似度检索窗口，同时显示差减后的质谱和检索结果。



3. 您还可以为差减结果再次执行相似度检索。（最多连续两次）

5.5.3 指定谱库质谱

您可以将谱库质谱添加至相似度检索窗口命中列表的末尾。
通过这么做，您可以显示质谱的相似度检索结果和相似度指数，然后执行差减结果相似度检索。

1. 选择处理 > 将谱库质谱注册至命令列表命令。
2. “指定谱库质谱”窗口打开。
输入谱库文件名和您想要添加至命中列表的质谱的序列号。



5.6 分析未知峰

这部分内容是关于对组分表中不是目标组分的组分质谱进行分析的方法说明。它主要用来分析杂质和其他未知组分。

1. 以定量或组分表的模式打开“数据分析”窗口。单击数据浏览器的数据标签并双击相关的数据文件图标。

组分表被显示出来，如果色谱图和校准曲线可用的话，也被显示出来。

2. 从“定量”菜单的“收集未识别的峰”中选择“TIC”或“MIC”。未识别的峰被积分并在结果表中列出。



3. 从定量菜单中选择 [组分表相似度检索] 命令。屏幕显示定量参数组分表检索标签。

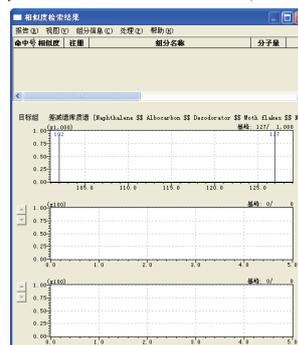
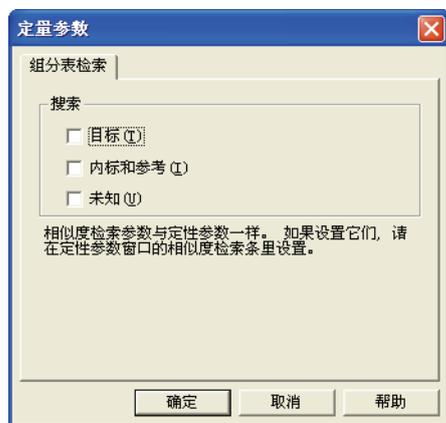


图 5.26 定量参数组分表检索标签

4. 选择“未知”作为待检索的组分类型并单击确定按钮。执行相似度检索。
5. 若要查看检索结果，双击目标组分所在的行或者从单击鼠标右键弹出的菜单中选择显示组分表检索结果。屏幕出现“相似度检索结果”窗口。

5.7

分组

5 定量分析

这部分内容是对具有类似特征的组分进行分组并对各个组的浓度进行计算的方法说明。

1. 单击助手栏上的**校准曲线**图标。画面显示为“校准曲线”模式。
2. 加载方法文件。单击数据浏览器中的“方法”标签，双击将要加载的方法文件图标。



被加载的方法文件中注册的组分表显示出来。

ID#	名称	类型	ISTD 组	m/z	保
1	MCB	目标	0	283.80	
2	Eicosane	目标	0	282.20	
3	met	目标	0	298.30	
4	pyrene	目标	0	202.10	

图 5.27 组分表

3. 双击数据浏览器中的“数据”标签，将校准曲线的数据文件从数据浏览器拖至数据文件树。
4. 单击“组分”表中的**编辑**按钮，改成“编辑”模式。在“组分”表中创建一个组。
5. 单击“组参数”标签。



组参数

输入组名、组类型、浓度等信息。对校准曲线来说，应该从下列选项中选择分组类型：

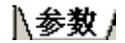
默认：“定量”参数中选择的分组方法

组校准：将分组后的组分的峰面积和峰高组合起来，利用校准曲线对各自的组进行定量。

浓度总和：为每个组分画一条校准曲线，对每个组分进行定量并将组分浓度结合起来。



6. 单击“参数”标签。为“组分”表中所选每个组分设置组号。



7. 单击视图按钮并切换至“视图”模式。



8. 单击助手栏上的对所有数据进行峰积分图标。校准曲线被显示。



9. 组定量结果显示在“组分”表的“组结果”标签上。

ID#	名称	峰面积	保留时间	类型
1	Dichlorvos	100.00000	6.211	目标
2	Fenobucarb	100.00000	9.607	目标
3	Simazine	100.00000	10.927	目标

图 5.28 组分表

5.8 打印结果

这部分内容是对如何打印默认定量分析报告的说明。

5.8.1 校准曲线

显示“校准曲线”窗口并打开相应的方法文件。检查数据文件树中所列数据文件是否正确。若要打印校准曲线报告，选择**文件 > 打印图像 > 打印**或者单击**打印**工具栏按钮。依次选择**文件 > 打印图像 > 预览**，或者单击**打印预览**工具栏按钮，在打印之前通过屏幕查看报告。系统采用默认的报告格式来打印校准曲线。若要编辑默认图像的格式，选择**文件 > 打印图像 > 编辑格式**。



打印图像报告

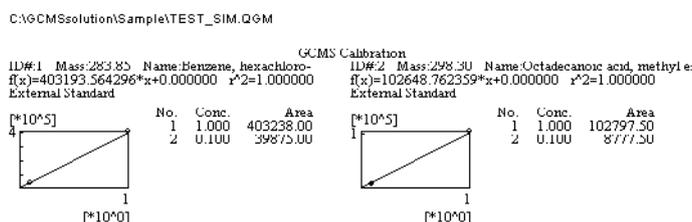


图 5.29 打印图像预览

5.8.2 定制报告

从“数据分析”窗口中打开的文件中打印定制报告，选择**文件 > 报告**。屏幕显示“数据报告”窗口。您可以创建一个新的报告格式并选择当前打开的数据文件作为每个项目的数据文件，也可以打开一个现有的报告格式文件并选择当前打开的数据文件作为每个项目的数据文件。打印该报告。有关建立定制报告格式的信息，参见[章节 6 “生成自定义报告”，第 163 页](#)。

有关从报告格式模板中生成报告的步骤说明如下。

1. 在“数据分析”窗口中打开将要用于报告的数据文件。选择**文件 > 报告**来显示“报告”窗口。
2. 选择**文件 > 新建格式文件**，打开“新文件”对话框。检查**使用模板**单选按钮是否被选中。选择“工具”菜单中的“选项”，在出现的“设置选项”窗口“新文件”标签上选择“新建文件提示”，才能打开“新文件”对话框。



图 5.30 “新文件”对话框

3. 从列表选择一个报告格式模板，单击**确定**按钮。“数据报告”窗口中显示包括来自打开的数据文件的数据在内的格式报告。
4. 若要打印报告，使用**文件 > 打印**命令，或者单击**打印**工具栏按钮。有关通过“定量结果（图）”模板生成的报告详细说明如下。

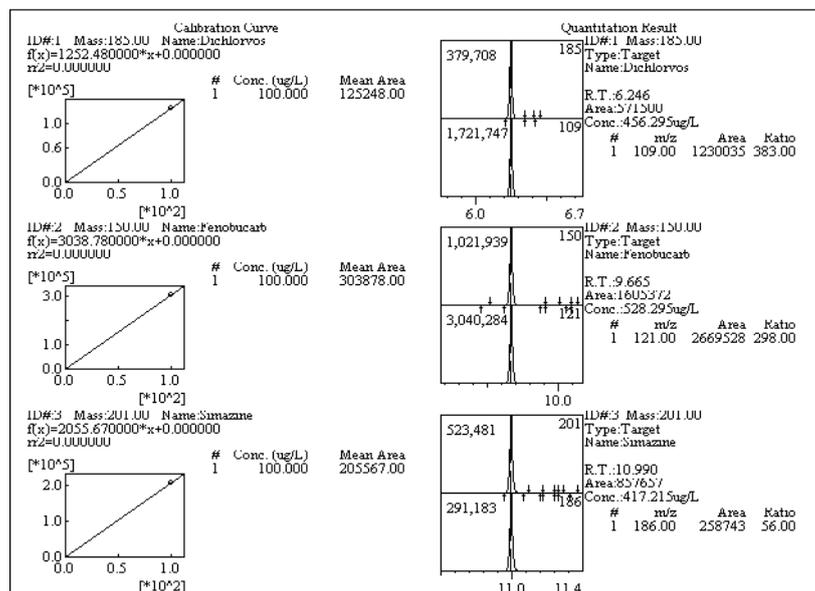


图 5.31 通过“定量结果（图）”生成的报告模板



本页空白。

6 生成自定义报告

6.1 创建报告格式

这部分内容是有关创建定制报告格式的说明。此格式可以后用于数据打印。

6.1.1 “报告”窗口

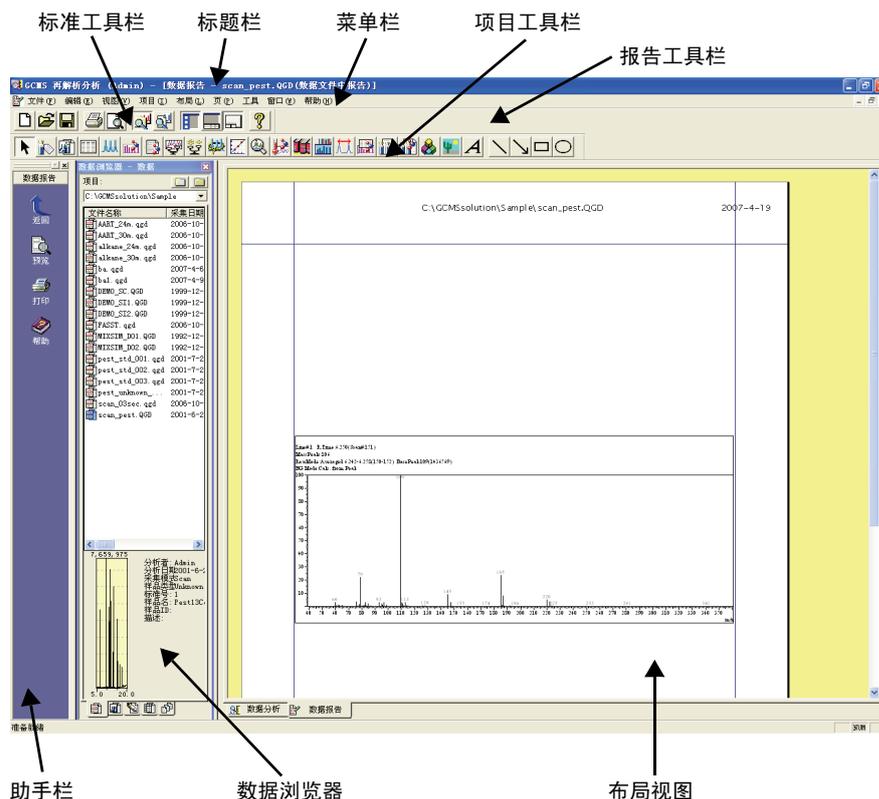


图 6.1 “报告”窗口

标题栏	显示应用程序名称，用户，活动窗口和文件。
菜单栏	显示活动窗口中当前可用的菜单。
工具栏	显示活动窗口中当前可用的命令按钮。
助手栏	显示适合特定功能或窗口的命令图标。要打开窗口或激活命令。请单击相应的图标。
数据浏览器	按照类型，包括：数据、方法、报告格式、批处理和所有文件，显示所有文件。双击文件图标可以打开报告“格式”文件。可以通过将数据文件拖至相关项目的方法轻松将数据文件分配给报告中的某个项目。
布局视图	显示报告页面当前项目的布局。页面中包括哪些项目，项目的位置以及它们的属性都可以在此页面中设置。



6.1.2 报告工具栏

1. 对象工具

按钮	名称	功能
	指示器	移动页面上的项目和调整项目尺寸。
	样品信息	插入有关所输入的样品信息，例如用户名，样品名，样品类型和瓶号，以及“样品信息属性”中规定的其他信息。
	方法内容	插入“方法属性”中规定的仪器参数和数据处理参数。
	峰表	插入“峰报告属性”中规定的峰表。
	色谱图	插入“色谱图属性”中规定的色谱图。
	质谱图	插入“质谱图属性”中规定的质谱图和任何附加信息。
	质量表	插入“质量表属性”中规定的质量表。
	定量图	插入色谱图和参考离子表，以及数据表中规定的其他信息。
	定量表	插入“定量结果表属性”中规定的定量结果表。
	组结果	插入将出现在报告中的数据文件的组结果。
	校准曲线	插入校准曲线和表，以及“校准属性”中规定的其他信息。
	调谐	插入调谐条件和结果，以及“调谐属性”中规定的其他信息。
	状态日志	插入“状态日志报告属性”中规定的 MS 状态日志。
	谱库检索	插入“谱库属性”中规定的有关目标和备选组分的信息。
	质谱对比	插入“质谱对比属性”中规定的对比结果。
	色谱柱性能	插入“色谱柱性能报告属性”中规定的表。
	质谱检查	插入将出现在报告中的数据文件的质谱检查结果。
	汇总表 (浓度)	显示多种数据的浓度列表。
	汇总表 (组分)	显示每个组分多种数据（浓度、面积、高度等等）的定量结果。



按钮	名称	功能
	配置	插入“配置控制属性”中规定的有关系统配置的信息。
	图画	插入“图画属性”中规定的任何图画文件，例如公司标志。
	文本	插入“文本属性”中规定的文本。
	线	画一条可以根据其“形状属性”做进一步规定的线。
	箭头	画一个箭头。
	长方形	画一个可以根据其“形状属性”做进一步规定的长方形。
	椭圆	画一个可以根据其“形状属性”做进一步规定的椭圆。

2. 格式工具

按钮	名称	功能
	左对齐	将所选对象沿最左侧边缘对齐。
	右对齐	将所选对象沿最右侧边缘对齐。
	顶对齐	将所选对象沿最顶端边缘对齐。
	底对齐	将所选对象沿最底端边缘对齐。
	缩放	按照显示的百分比缩放“布局视图”。直接输入一个百分比，或者从缩放复选框中选择一个。
	宽度相同	增加所选对象的宽度，使之与最宽的项目宽度保持一致。
	高度相同	增加所选对象的高度，使之与最高的项目高度保持一致。
	统一尺寸	增加所选对象的尺寸，使之与最宽的项目的宽度和最高的项目的高度都保持一致。
	插入	向报告格式增加页。新增加的页插入在当前显示的页的后面。
	删除	删除当前显示的页。
	第一页	如果有多页，转到报告格式的第一页。



按钮	名称	功能
	前一页	如果有多页，转到前一页。
	下一页	如果有多页，转到下一页。
	最后一页	如果有多页，转到最后一页。

3. 标准工具

按钮	名称	功能
	打印	打印报告。
	预览	打开打印预览画面，以便在报告打印之前对其进行检查。
	打开	打开现有的报告格式文件。
	保存	保存报告格式文件。此操作会覆盖现有文件；如果要保存为新的文件名，应选择 文件 > 另存格式文件 。



注

若要将工具栏变成浮动面板，双击工具栏命令按钮周围的区域，或者单击工具栏并将其拖动至理想的位置。



图 6.2 浮动面板

此功能可帮助您最有效地利用屏幕。当必须减少工具栏宽度时，使用此功能。若想将面板还原至工具栏原来位置，可以双击该面板标题栏，也可以将面板拖至工具栏。



6.1.3 创建报告格式文件

1. 单击助手栏中的**报告格式**图标。“报告”窗口打开并显示一个新的无标题文件。
2. 打开新文件后，从“文件”菜单中选择**页面设置**。屏幕出现“页面设置”对话框。

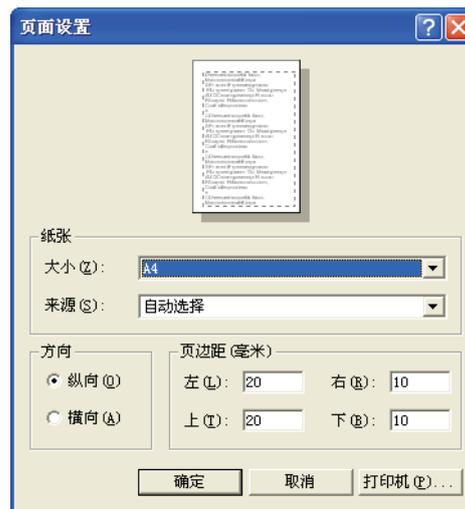


图 6.3 “页面设置”对话框

3. 输入下列参数。

组	参数	描述
页面	大小	选择打印所使用的纸张大小。
	来源	选择纸盒或者打印机进纸方式。
方向	纵向或者横向	确定是水平（横向）还是垂直（纵向）使用打印纸。
页边距 (毫米)	左、右、上和下	输入距离页面左、右、上、下边缘的距离，单位为毫米。
	打印机	选择默认的打印机。



4. 单击工具栏项目按钮，或者从“项目”菜单中选择一个项目。将鼠标指针拖到“布局视图”中的理想位置，将项目放入报告。

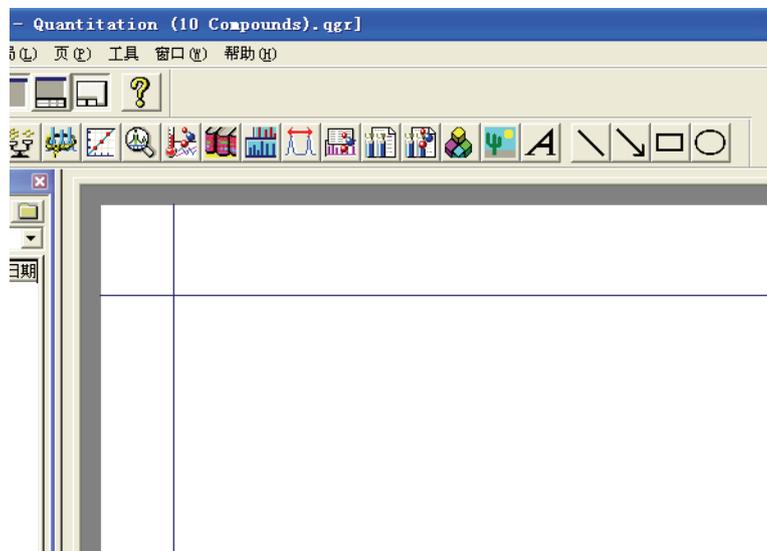


图 6.4 布局视图

屏幕出现相关属性对话框。



图 6.5 属性对话框

5. 设置各个**属性标签**的参数。虽然绝大多数参数会因项目而异，然而每个项目都有一个用来设置位置、尺寸、标题、字体和颜色的**常规标签**和一个用于确定源数据文件的**文件标签**。输入所有参数后，单击**确定**按钮。属性对话框关闭，输入的参数被采用。

将额外的项目添加至报告并输入它们的参数。



6. 如果报告由多页构成，单击**插入**按钮，在当前所显示的页的后面增加页。



7. 选择**视图 > 页眉 / 页脚**。屏幕出现“页眉 / 页脚”对话框。



图 6.6 “页眉 / 页脚”对话框

8. 下表内容可以在页面中左对齐、居中，或者右对齐，具体由它们所在的文本框决定。在**页眉标签**中输入将要在报告顶端打印的信息，在**页脚标签**中输入将要在报告底端打印的信息。

将鼠标光标放在左、中或右文本框内，单击按钮，为相关文本输入变量。

按钮	名称	功能	变量
	字体	单击 字体 按钮，打开“字体”窗口。选择页眉或页脚的显示字体，包括尺寸、格式和颜色，然后单击“确定”。	
	版本	单击 版本 按钮，将 GCMSsolution Ver.2 加入 页眉或页脚文本中。	\$ 版本 \$
	文件名	单击 文件名 按钮，将数据文件名加入到页眉或页脚文本中。当为每个项目使用不同的数据时，加入相关项目的数据文件名。	\$ 文件名 \$
	报告编号	单击 报告 # 按钮，将报告编号加入页眉或页脚文本中。报告在打印时被连续编号。在“报告选项”对话框中输入第一个报告的编号。	\$ 报告 # \$
	页码	单击 页 # 按钮，将页数加入到页眉或页脚文本中。	\$ 页 # \$
	日期	单击 日期 按钮，将 Windows 格式的日期加入到页眉或页脚文本中。	\$ 日期 \$
	时间	单击 时间 按钮，将 Windows 格式的时间加入到页眉或页脚文本中。	\$ 时间 \$
	用户名	显示用户名。	\$ 用户 \$



9. 为包含的所有项目设定属性并输入页眉和页脚文本后，单击**预览**按钮查看打印的报告。



按钮	命令
打印	打印该报告。请参阅 章节 6.2.3 “打印报告” ，第 171 页。
下一页	预览下一页。
前一页	预览前一页。
两页	同时预览两页。
一页	每次预览一页。
放大	放大预览的报告。
缩小	缩小预览的报告。
关闭	退出预览窗口。

10. 将新建格式保存为报告格式文件。

单击**保存**工具栏按钮。



第一次保存报告格式时，会出现“报告格式文件另存为”对话框。

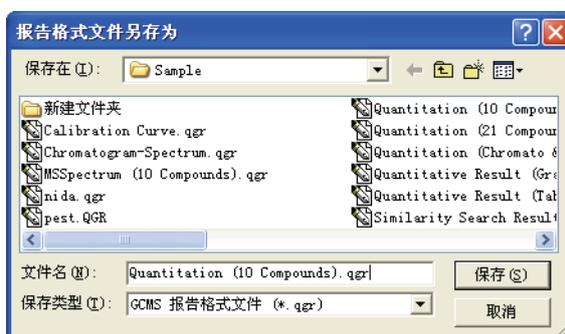


图 6.7 “报告格式文件另存为”对话框

选择文件将要保存的目录并输入一个文件名。单击**保存**按钮，报告格式被保存为报告格式文件 (*.qgr)。

利用**保存**按钮，通过覆盖现有文件的方式将修改保存至报告格式文件。请参阅[章节 6.2.1 “打开报告格式文件”](#)，第 171 页。



除非要用修改后的文件覆盖当前文件，否则，利用**文件 > 另存格式文件**为以新的名称保存文件。屏幕出现“另存为”对话框。选择文件将要保存的目录，输入文件名，然后单击**保存**按钮。

6.2 使用报告格式文件

这部分内容是对打开现有报告格式文件、导入数据和打印报告的操作步骤的说明。

6.2.1 打开报告格式文件

1. 单击助手栏**报告格式**图标。屏幕显示“报告”窗口。
2. 利用**文件 > 打开格式文件**、**打开**工具栏按钮或者数据浏览器打开相应的报告格式文件。报告格式文件显示在“布局视图”中。



6.2.2 将数据导入报告格式文件

1. 单击数据浏览器的“数据”标签。有关当前所选项目的所有数据文件都被列出。
 2. 在数据浏览器中单击相应的数据文件并将其拖至数据质油附中。数据文件被加载至报告，同时数据被显示出来。
- 也可以通过选择**文件 > 加载数据文件**的方式来导入数据。



6.2.3 打印报告

1. 单击助手栏中的**打印**图标，显示“打印”对话框。



图 6.8 “打印”对话框



注

单击“打印机”名称旁边的**属性**按钮更改打印机参数。有关打印机参数的详细信息，可参考打印机手册。

2. 从“全部”，“页面”或“所选页”中选择将要打印的页。“全部”打印报告的每一页。“页面”允许打印某个页码范围内的页。“所选页”打印在执行打印命令之前选中的报告部分。
3. 在副本“份数”中输入打印的副本份数。
4. 单击**确定**按钮打印报告。

7 连续分析

7.1 概述

这部分内容是对两种类型自动处理的说明。其中一种方法供 GCMS 实时分析对来自多个样品的数据进行采集和分析。另外一种方法供 GCMS 再解析对来自多个数据文件的数据进行分析。对两种类型的自动化来说，首先必须创建方法文件。

7.1.1 自动数据采集与分析

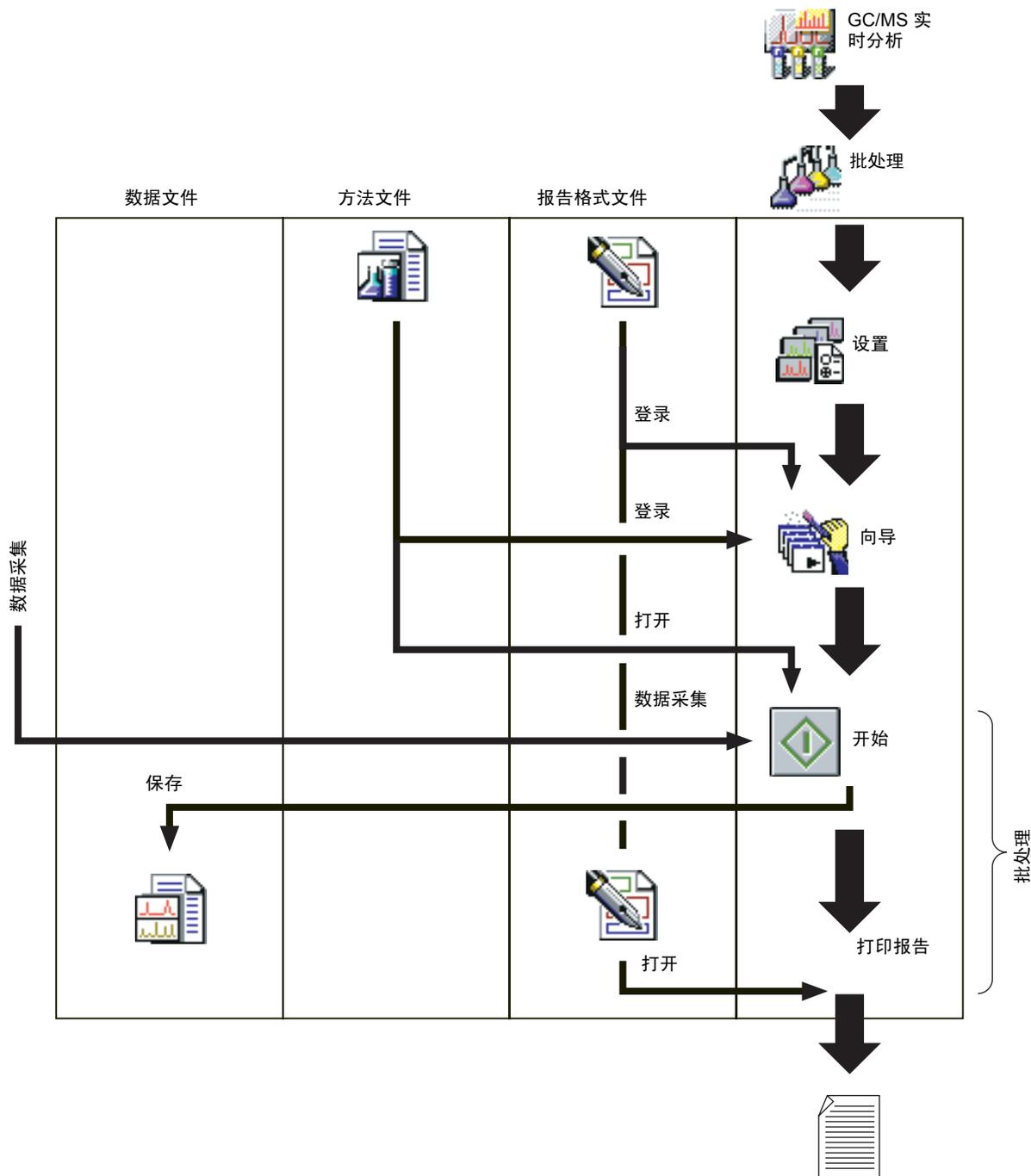


图 7.1 自动数据采集与分析



7.1.2 自动再解析

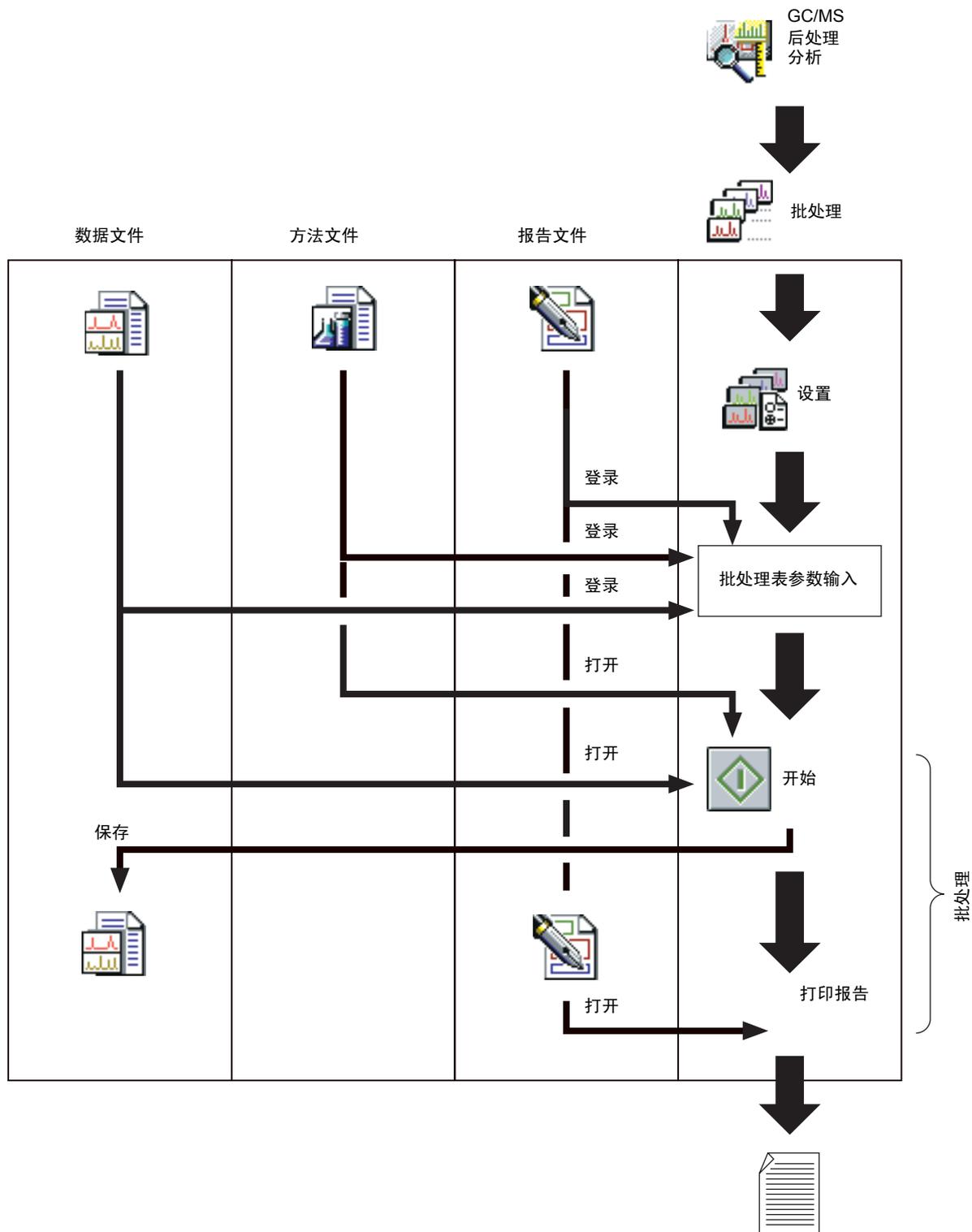


图 7.2 自动再解析

7 连续分析

7.2 自动数据采集与数据分析

这部分内容是对利用自动进样器通过“GCMS 实时分析”对数据进行采集和分析的说明。有关定性和定量分析参数的信息，请参阅第 109 页第 4 章“定性分析”和第 135 页第 5 章“定量分析”。

7.2.1 创建批处理表

1. 启动 GCMS 实时分析，单击助手栏中的批处理图标。屏幕显示“批处理表”窗口。

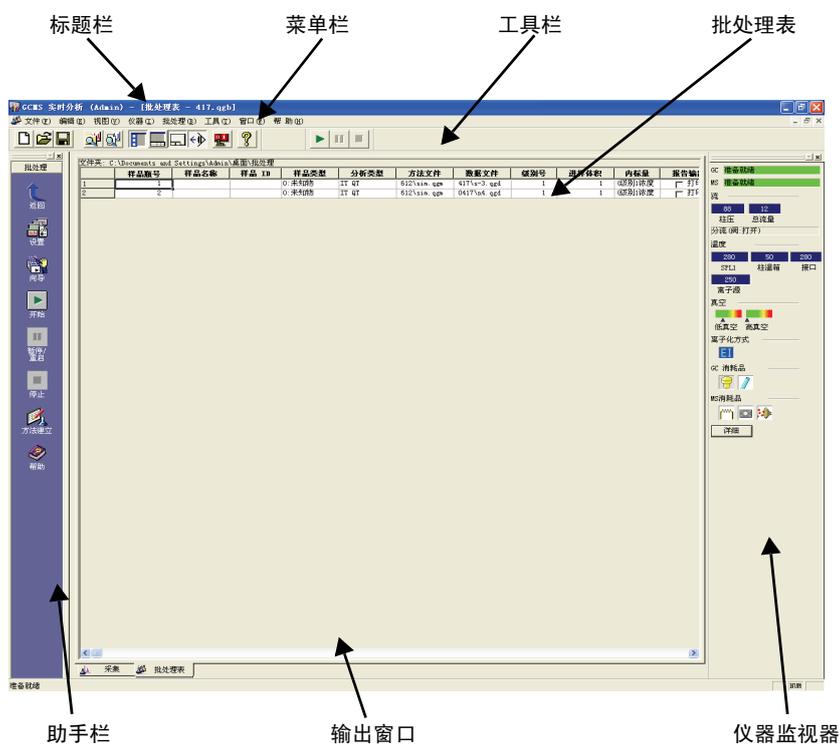
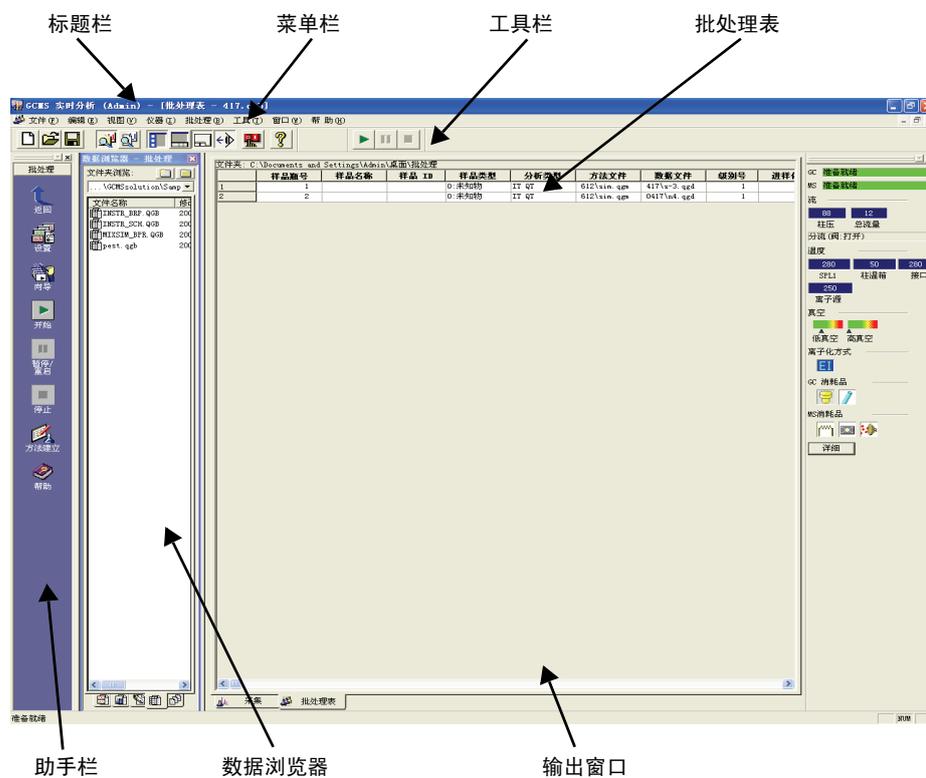


图 7.3 “批处理表”窗口



7 连续分析

7.2 自动数据采集与数据分析



2. 单击助手栏中的设置图标，屏幕就会显示“设置”对话框。

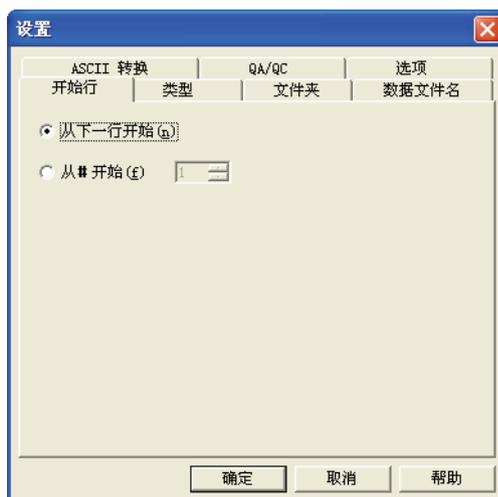


图 7.4 “设置”对话框



开始行标签

表明批处理由哪行开始。

参数	描述
从下一行开始	批处理从处理停止后面的行开始。如果没有为该行创建数据文件，批处理将从该行开始。批处理开始前，屏幕会显示一条信息，让您确认是从下一行开始还是从第一行开始。
从 # 开始	批处理从标明的行开始。批处理开始前，屏幕会显示一条信息，让您确认是从提示的行开始还是从第一行开始。

类型标签

选择用于批处理数据采集和再解析的行。

参数	描述
行 1	选择批处理表中使用的行。
行 2	只有在系统配置中多个分析行被激活的情况下才可以选择行 2 和行 1 & 2。
行 1 和行 2	当选择行 1 & 2 时，两行同时被添加至批处理表（或者从批处理表中删除）。通过这种方式，对所提示的每个样品的行 1 和行 2 都进行处理。



文件夹标签

此标签决定某一类型文件的默认查找目录。举例来说，如果输入一个数据文件的文件名，但没有输入完整路径，程序将从这个标签中指定的文件夹中获取完整路径。

参数	描述
使用当前文件夹	此程序使用数据浏览器中当前选择的文件夹。此文件夹通常是保存批处理文件的文件夹。
使用指定文件夹	允许为数据、方法和报告格式文件输入默认的目录。若要浏览某个目录，单击“数据文件”、“方法文件”和“报告格式文件”文本框右侧的 文件夹 按钮。
使用相同文件夹	若要为数据、方法和报告格式文件使用相同的文件夹，复选“使用相同文件夹”。“数据文件”文本框中所提示的文件夹被用作所有文件的默认文件夹。

数据文件名标签

参数	描述
自动生成文件名	复选时，利用“所选项目”方框中的信息自动为文件命名。从左侧选择方框中选择文件名中将要用到的项目（一个或多个），单击 添加 按钮来移动“所选项目”方框内的项目。如果要从文件名中删除某个项目，在“所选项目”中选中它，然后单击 删除 按钮。确定项目在文件名中出现的顺序，在“所选项目”方框中选择项目，然后单击 上 和 下 按钮。名称中可能包含的项目：批处理文件名、批处理表行号、方法文件名、用户名、样品名、样品 ID 和当前日期。
自动增量格式	从四个自动增量格式中选择一个。可供选择的选项包括：1, 2, ...；01, 02, ...；001, 002, ...；和 0001, 0002,



ASCII 转换标签

复选“输出 ASCII 文件”时，批处理结果被导出至 ASCII 文件。

参数	描述
输出每一批 输出每个分析	提示在对整个批次（输出每一批）或者批处理表的一行（输出每个分析）进行处理之后是否将所选信息输出至文本文件。
输出文件	允许将完整路径输入到“输出文件”文本框内，或者通过浏览相关路径的方式选择文件名并通过单击文本框右侧的 文件夹 按钮输入文件名。
覆盖 自动增加	如果相同文件名的文件已经存在，提示是否覆盖当前文本文件或者在原有文件名的基础上增加后缀。
输出项	从下列选项中选择加入到文本文件的项：“数据文件属性”、“组分定量结果”、“组分检索结果”、“定性峰表”、“柱性能表”、“质谱处理表”、“质谱检索结果”、“色谱图 (TIC)”、“色谱图 (MIC)”和“质谱图”。选中的项被导出至文本文件。
分隔符	用于确定信息在文本文件中的分隔方法。选项包括“制表符”、“逗号”以及“其他”。如果选择“其他”，在文本框右侧输入分隔符。

QA/QC 标签

选择“执行 QA/QC”来执行 QA/QC。

参数	描述
输出文件（文本形式）	允许将完整路径输入到“输出文件”文本框内，或者通过浏览相关路径的方式选择文件名并通过单击文本框右侧的 文件夹 按钮输入文件名。输出的文件通过制表符来确定界线。
合并文件、覆盖文件、 自动增加	表明如果已经存在同样名称的文件，是否添加至文件（合并文件）、覆盖原来文件（覆盖文件）或者通过自动在文件名后面添加一个数字的方法生成一个新文件。
输出 HTML 格式文件 (< 文件名 >.htm)	复选时，除了将 QA/QC 结果输出为文本文件外，还将其导出为 HTML 文件。HTML 文件与“输出文件”文本框中的文件名相同，扩展名为“.htm”。
输出 CSV 格式文件 (< 文件名 >.csv)	选择是否额外输出 CSV 格式文件。CSV 文件与“输出文件”文本框中的文件名相同，扩展名为“.csv”。



可选项目标签

批处理表最多可包含 5 个由“表样式”建立的“选项”栏。如果这些“选项”栏被包含进来，利用“可选项目”标签为栏分配一个标题。最多可输入 31 个字符。标题可以作为数据文件属性或者报告样品信息的参考。

3. 单击助手栏中的向导图标，系统会显示“批处理表向导”。



图 7.5 批处理表向导 - 初始画面

批处理表向导 - 初始画面

参数	描述
批处理表	选择 新建 ，建立一个新表。选择 附加 ，在当前显示的批处理表最后一行添加。
批类型	选择批处理表中使用的“分析行”。根据系统配置某些类型不能输入。只能从行 1 & 2 或者行 1 或行 2 中选择。
样品类型	<p>选择批中包含的样品的类型</p> <ul style="list-style-type: none"> 当标准样品和未知样品都要加入到批处理中时，选择“标准和未知”。单击下一步按钮之后，输入标准信息，然后输入未知信息。批处理表中标准的行在未知行之前。在这个方法下进行定量的数据处理时，根据标准分析结果，产生新的校准曲线。校准曲线保存在方法文件中。更新的方法用于后面的分析，根据校准曲线定量未知样品分析结果。 选择“仅未知”仅为未知样品创建批处理表。单击下一步按钮之后，屏幕显示未知样品参数画面。在批处理表中仅创建未知样品行。



参数	描述
方法	允许将完整路径输入到“输出文件”文本框内，或者通过浏览相关路径的方式选择文件名并通过单击文本框右侧的 文件夹 按钮输入文件名。如果方法文件目前在“数据采集”窗口中被打开，则显示其默认的方法文件名。此处提示的方法文件被默认地输入到批处理表中，但是可以在表内指定不同的文件。
数据处理	指定是否执行定量和 / 或定性分析。如果“定量”被选中，“分析类型”将包括“定量积分”和“定量计算”。如果“定性”被选中，“分析类型”将包括“定性积分”、“制作质谱处理表”和“相似度检索”。

输入所有参数后，单击**下一步**按钮。

如果选择“标准和未知”或者“仅标准”作为“样品类型”，“批处理表向导”将前进至“标准样品 (1)”画面。如果选择“仅未知”，“批处理表向导”将前进至“未知样品 (1)”画面。



图 7.6 批处理表向导 - 标准样品 (1) 画面



批处理表向导 - 标准样品 (1)

当在第一个“批处理表向导”画面中选择“标准和未知”或者“仅标准”作为“样品类型”时，显示此画面。

参数	描述
瓶号	如果使用自动进样器，输入第一个标准瓶在架子上的位置编号。右侧的文本框表示样品瓶最终的位置，此位置是由当前提示的校准点数量计算而来。确认标准样品正确地放在自动样品盘上。只有在使用自动进样器时才需要此参数。
校准点数	校准曲线上的点数由方法文件确定，并且显示为默认。此数值可以在“向导”中更改。改变校准点数量会导致瓶号中显示的最终样品瓶位置发生改变。
平均计数	指定每个标准瓶的进样数。标准分析的总数等于校准数乘以平均计数。
进样体积	用于输入进样体积。一旦“向导”完成，批处理表每行的体积都可以更改。
样品名	指定标准的样品名。此参数结合样品 ID 使用，用于将特定样品文件和标准文件与其他文件区分开。此参数属于可选参数。
自动增加	选择自动增加时，样品名以数字的形式自动增加，为后续行创建唯一的样品名。
样品 ID 号	指定样品 ID。此参数用于区别样品，而且当利用不同方法对同一样品进行分析或者当利用同一方法对几个样品进行分析时，非常有用。此参数属于可选参数。
自动增加	选择自动增加时，样品 ID 以数字的形式自动增加，为后续行创建唯一的 ID。

输入所有参数后，单击**下一步**按钮。

批处理表向导前进至“标准样品 (2)”画面。



图 7.7 批处理表向导 - 标准样品 (2) 画面

批处理表向导 - 标准样品 (2)

当在第一个“批处理表向导”画面中选择“标准和未知”或者“仅标准”作为“样品类型”时，显示此画面。

参数	描述
自动创建文件名	规定是否自动生成文件名。只有当新的批处理表被创建时才能更改此参数。当添加至某个已经存在的批处理表时，系统会提示当前设置。此参数被选中时，不能定义数据文件名。
数据文件名	指定数据文件名。选择自动增加来自动增加文件名的扩展名。每个数据文件名必须唯一。
报告输出	指定是否生成报告。如果选择此项，要指定报告格式文件。
报告格式文件	打印报告时，此项指定报告格式文件。文件夹图标用来查找报告格式文件。
数据描述	允许按照需要在数据文件中输入描述信息。

输入所有参数后，单击**下一步**按钮。

批处理表向导前进至“未知样品 (1)”画面。



图 7.8 批处理表向导 - 未知样品 (1) 画面

批处理表向导 - 未知样品 (1)

这是在批处理表中设置未知样品的第一个向导画面。

参数	描述
瓶号	如果使用自动进样器，输入第一个样品瓶的位置编号。右侧的文本框表示样品瓶最终的位置，此位置是由当前显示的样品计数计算而来。确认样品正确地放在自动样品盘上。 只有在使用自动进样器时才需要此参数。
样品计数	用于输入要采集数据的未知样品数。如果没有未知样品，输入 0， 下一步 按钮变成 完成 按钮，不必输入其他任何参数。
进样体积	用于输入进样体积。一旦“向导”完成，批处理表每行的体积都可以更改。
样品名	为未知样品指定一个样品名称。此参数结合样品 ID 使用，用于将特定样品文件和标准文件与其他文件区分开。此参数属于可选参数。
自动增加	选择自动增加时，样品名以数字的形式自动增加，为后续行创建唯一的样品名。
样品 ID 号	指定样品 ID。此参数用于区别样品，而且当利用不同方法对同一样品进行分析或者当利用同一方法对几个样品进行分析时，非常有用。此参数属于可选参数。
自动增加	选择自动增加时，样品 ID 以数字的形式自动增加，为后续行创建唯一的样品 ID。

输入所有参数后，单击**下一步**按钮。

批处理表向导前进至“未知样品 (2)”画面。



图 7.9 批处理表向导 - 未知样品 (2) 画面

批处理表向导 - 未知样品 (2)

如果未知样品输入批处理表向导未知样品 (1) 画面，则显示此画面。

参数	描述
自动创建文件名	规定是否自动生成文件名。只有当新的批处理表被创建时才能更改此参数。当添加至某个已经存在的批处理表时，系统会提示当前设置。此参数被选中时，不能定义数据文件名。
数据文件名	指定数据文件名。选择自动增加来自动增加文件名的扩展名。每个数据文件名必须唯一。
报告输出	指定是否生成报告。如果选择此项，要指定报告格式文件。
报告格式文件	打印报告时，此项指定报告格式文件。文件夹图标可用来查找报告格式文件。
数据描述	允许按照需要在数据文件中输入描述信息。

输入所有参数后，单击**完成**按钮。批处理表向导关闭，批处理表生成。

如果特定行的参数与“向导”中输入的参数不同，直接在批处理表中更改。



	样品名称	样品 ID	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	级别号	内标量
1	Pest13Compound	STD-0001	1:Standard(I)	IT QT	SIM.qgm	pest_std_001.qgd	3	1111111
2	Pest13Compound	STD-0002	1:Standard	IT QT	SIM.qgm	pest_std_002.qgd	2	1111111
3	Pest13Compound	STD-0003	1:Standard	IT QT	SIM.qgm	pest_std_003.qgd	1	1111111
4	Pest13Compound	UNK-0004	0:Unknown	IT QT	SIM.qgm	pest_unknown_001.qgd	1	1111111

图 7.10 批处理表

4. 可以不通过批处理表向导来创建批处理表并且在“批处理表”窗口中对当前的表进行编辑。

如果不利用“向导”创建一个批处理表，新创建的表最初只有一行。编辑批处理表的最后一行时，会自动增加新的空白行。批处理表最多可包含 1000 行。



弹出式菜单

鼠标右键单击兴趣单元，显示相关的弹出式菜单。在菜单中选择适当的命令。可用的命令包括从复制、粘贴到编辑“表样式”。



图 7.11 右键单击弹出菜单

顺序输入

当许多行的瓶号、样品名、样品 ID 和数据文件等信息都按顺序排列时，可通过自动增加信息的方式输入多行信息。突出显示相应的列，选择**编辑 > 输入列数据**。例如，如果要自动填写“样品 ID”列，会显示下列对话框。



图 7.12 自动填写样品 ID 列

在所显示的“样品名”对话框中，单击**确定**按钮，在第 1 – 30 行中输入样品 ID 为从 test001 到 test030。

更改批处理表的列

若要隐藏或显示表的列，或者改变列的显示顺序，通过**编辑 > 表样式**命令或者从单击鼠标右键弹出的菜单中选择**表样式**来打开“表样式”对话框。

有关批处理表的更多信息，参考 GCMS 帮助。



7.2.2 执行连续分析

这部分内容是对开始和停止批处理的说明。同时也对批处理模式下助手栏中的其他批处理表命令做了说明。

1. 开始

单击助手栏中的**开始**图标，**开始**工具栏按钮，或者选择**批处理 > 开始**来开始批处理。批处理首先从第一行或者“设置开始行”标签中指定的行开始。



2. 暂停

若要暂停批处理，单击助手栏中的**暂停 / 重启**图标或者**暂停 / 重启**工具栏按钮，或者选择**批处理 > 暂停 / 重启**。连续数据采集和分析被临时暂停。可以在暂停过程中对未处理的行进行编辑。不能对当前正在处理的行进行编辑。

若要继续进行处理，单击助手栏中的**暂停 / 重启**图标或者**暂停 / 重启**工具栏按钮，或者再次选择**批处理 > 暂停 / 重启**。批处理由原来暂停的行继续进行。



3. 停止

若要停止批处理，单击助手栏中的**停止**图标或者**停止**工具栏按钮，或者选择**批处理 > 停止**。无论批处理当前是否正在进行还是已经暂停，都会停止。



4. 编辑方法

单击助手栏中的**方法建立**图标，编辑批处理表所使用的方法文件。“数据采集”窗口打开，批处理表中所选的方法文件（包括仪器参数）显示出来。在批处理过程中不能对方法进行编辑。



7 连续分析

7.3 自动再解析

这部分内容是对 GCMS 再解析应用中数据处理方法的说明。有关定性和定量分析参数的信息，请参阅第 109 页第 4 章“定性分析”和第 135 页第 5 章“定量分析”。

7.3.1 创建批处理表

1. 打开 GCMS 再解析，单击助手栏中的批处理图标。屏幕显示“批处理表”窗口。

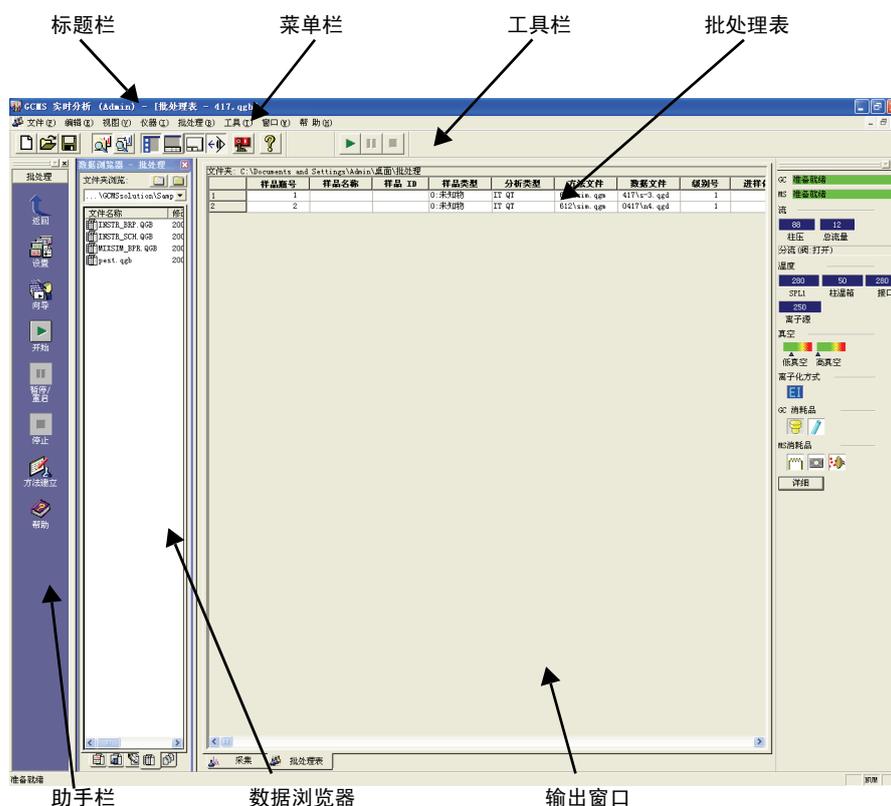


图 7.13 “批处理表”窗口



2. 单击助手栏中的**设置**图标，屏幕就会显示“设置”对话框。

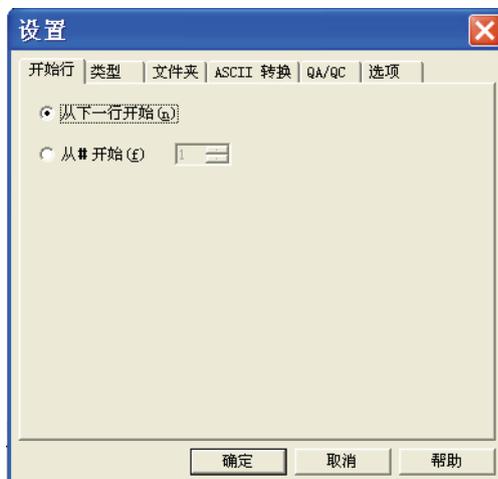


图 7.14 “设置”对话框

有关“设置”对话框的更多信息，参见章节 7.2.1 “创建批处理表”第二个主题。

3. 可以从数据文件中自动创建批处理表。单击助手栏中的**选择数据文件**图标，屏幕会显示“选择数据文件”对话框。



图 7.15 “选择数据文件”对话框

选择用于数据处理的文件。一直按住“Ctrl”或“Shift”键，同时用鼠标单击文件，可以选择多个文件。选中一个文件并单击下箭头按钮，在下面的文本框中显示该文件。在底部文本框中选中一个文件并通过上或下箭头按钮来改变文件顺序。批处理表生成，行的顺序和所选文件的顺序相同。当单击**打开**时，通过所选数据文件中的样品信息生成批处理表。



GCMS 再解析可以打开并修改 GCMS 实时分析中创建的批处理文件，然而，有关数据采集的参数不显示，只能执行数据处理操作。

7.3.2 执行连续再解析

1. 开始

单击助手栏中的**开始**图标或者**开始**工具栏按钮，或者选择**批处理 > 开始**来开始批处理。批处理分析首先从第一行或者“设置开始行”标签中指定的行开始。



2. 停止

若要停止批处理，单击助手栏中的**停止**图标或者**停止**工具栏按钮，或者选择**批处理 > 停止**。如果批处理当前正在进行，处理过程终止。





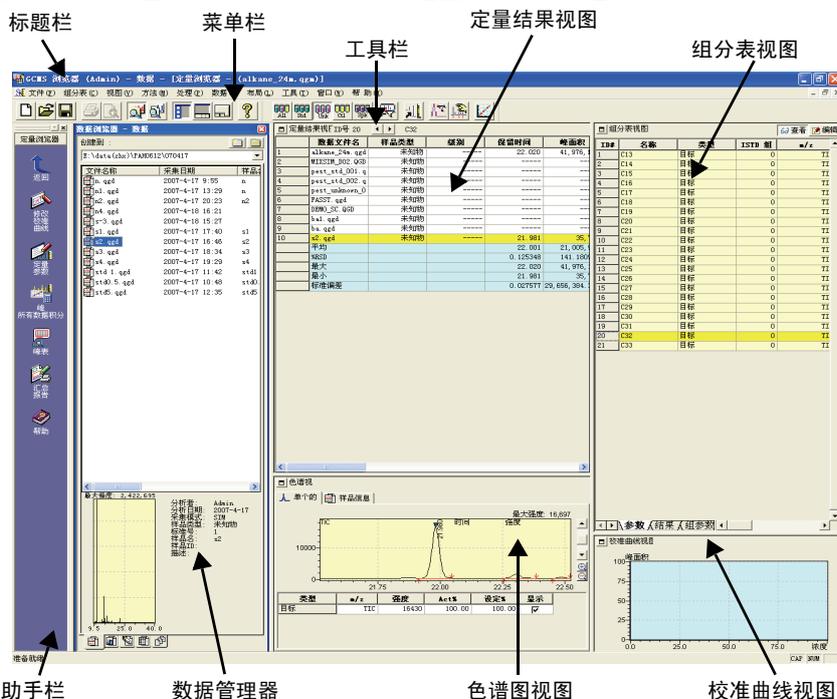
本页空白。

8.1

概述

8 定量浏览器

在“定量浏览器”中，列出了方法文件“组分表”中指定的每种组分多重数据（浓度、区域、高度等）的定量结果。所列的定量结果将在需要时经过统计计算（平均、%RSD、最大、最小、标准偏差）后显示。可以打印出这些结果作为汇总报告。



8.1.1 定量浏览器窗口

标题栏	显示当前使用的应用程序名或进程名以及方法文件名。
菜单栏	显示所显示窗口的各种命令菜单。
工具栏	显示所显示窗口的各种命令工具按钮。
助手栏	列出一般操作程序的相应命令图标。
数据管理器	通过双击文件图标可以迅速打开的数据文件或方法文件。
定量结果视图	此视图可以加载多重数据文件并以表格格式显示定量结果（浓度、区域、高度...）和统计（平均、%RSD、最大、最小和标准偏差）。
组分表视图	此视图可以显示当前加载的方法文件的“组分表”和“分组表”，以及在“定量结果”视图中所选数据文件的“识别结果”和“分组结果”。
色谱图视图	在“定量结果”视图上所选的数据文件中，将显示“组分表”视图上所选定的ID色谱图。
校准曲线视图	在当前加载的方法文件中，显示在“组分表”视图中所选的组分的校准曲线。

8.2

8 定量浏览器

在定量浏览器窗口中的主要操作

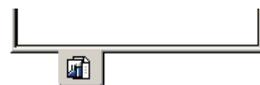
显示多重数据的定量结果列表。	以表格格式显示峰积分和定量结果以及统计。(参数: 8.2.1 “显示多重数据的定量结果列表”)
同时执行多重数据的峰积分 / 定量。	同时对多重数据的所有组分执行峰积分 / 定量。而且改变峰积分的参数或识别或修改校准曲线。(参数: 8.2.2 “同时执行多重数据的峰积分 / 定量”)
输出定量结果列表作为汇总报告。	输出定量结果和统计列表作为汇总报告。(参数: 8.2.3 “输出定量结果列表作为汇总报告”)

8.2.1 显示多重数据的定量结果列表

“定量浏览器”显示根据一个组分表计算的多重数据的定量结果。组分表可通过直接指定的方法文件加载, 或通过用于定量在“定量浏览器”中加载的数据文件的方法文件加载。

1. 加载方法文件

- (1) 单击“数据管理器”中的“方法”标签。“数据浏览器”变成方法文件模式。
- (2) 双击要加载的方法文件图标。将自动加载包含在方法文件中用于确定校准曲线(样品类型: 标准)的所有数据文件。



2. 加载数据文件

- (1) 单击“数据管理器”中的“数据”标签。“数据浏览器”变成数据文件模式。
- (2) 双击适当的数据文件。



3. 加载批处理文件

- (1) 单击“数据管理器”中的“批处理”标签。“数据浏览器”变成批处理文件模式。
- (2) 将适当的批处理文件拖放到“定量浏览器”。“定量结果”视图在批处理文件中搜索其样品类型是“标准”的行, 并且加载找到的第一行的方法文件和使用该方法文件的所有数据文件。如果在批处理文件中找不到这样的行, “定量结果”视图将搜索“未知”行, 并且加载找到的第一行的方法文件和使用该方法文件的所有数据文件。





4. 切换数据类型

在“定量结果”视图中，可以通过数据的样品类型，例如 [标准]、[未知]、[控制] 和 [添加] 提取和显示数据。也可以显示 [所有] 数据，而不考虑数据的样品类型。可以通过 [视图] 菜单上的 [数据类型] 或按工具栏上的按钮来切换这些显示选项。



注

[标准] 在这里是指方法文件中构成校准曲线的数据。即使数据的样品类型是真正标准的，如果它不构成打开方法文件中的校准曲线，将仍被视作 [未知]。

5. 切换组分以显示定量结果列表

在“定量结果”视图中，将显示“组分表”视图中各种组分的定量结果。要进行切换，请利用“定量结果”视图上部 ID 旋转按钮选择所需的组分，或选择“组分表”视图中的组分行。



注

对于“定量结果”视图中的“标准”样品，可以显示“组分表”中相同级别的计算浓度与设置浓度的差别。



注

目标组分的校准曲线在“校准曲线”视图中显示。

6. 排序“定量结果”视图中的所有行

选择 **视图 > 定量结果 > 按文件名排序** 菜单，按照文件名对“定量结果”视图中的所有行排序。

7. 显示 / 隐藏“定量结果”视图中的项目，或更改顺序

选择 **视图 > 定量结果 > 表类型** 命令，或在“表类型”窗口中设置参数。



8. 确认统计

统计（平均、%RSD、最大、最小和标准偏差）是根据此视图中显示的数据进行计算和显示。除数据文件名、样品名、样品 ID、样品类型、设置浓度、级别 #、标记和统计外，您可以对所有单元格执行统计计算。

8.2.2 同时执行多重数据的峰积分 / 定量

1. 如果单击助手栏中的**对所有数据进行峰积分**，将对所有数据文件中的所有组分 ID 执行峰积分和定量。
2. 要只分析在“定量结果”视图所选的数据文件，请选择**处理 > 峰积分 > 对所有 ID 进行峰积分**命令。
3. 要只分析在“定量结果”视图所选数据文件中显示的 ID，请选择**处理 > 峰积分 > 按照 ID 进行峰积分**命令。



8.2.3 输出定量结果列表作为汇总报告

1. 单击助手栏中的**汇总报告**图标，将出现“报告编辑器”窗口。（报告格式已经加载。）
2. 要改变报告格式，请双击“汇总（组分）”项目，并在“汇总（组分）属性”窗口中进行编辑。如果选择**文件 > 另存格式文件**命令，所作的更改将保存到名为“MS Report Quantitative Browser Report.qgr”的文件中，并将在下一次汇总输出时使用。
3. 如果不需要更改格式，请单击助手栏中的**打印**图标。将打印出报告。

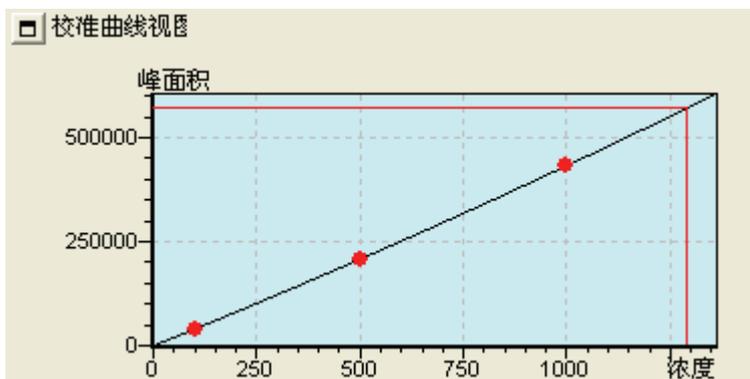


8.3

8 定量浏览器

检查校准曲线

校准曲线视图显示组分表中的“参数”或“结果”标签选择的组分之校准曲线。如果组分表视图中显示了“组参数”或“组结果”标签，则将只显示组校准曲线。



校准点和进行平均前的点在校准曲线视图中显示。同时将在校准曲线上显示参照线，以便指示在定量结果视图所选数据文件中识别峰面积，以及计算的浓度。利用这些参照线可以轻松地确认与定量结果对应的校准曲线部分。

1. 修改校准曲线

单击助手栏中的**修改校准曲线**图标，将打开“校准曲线”窗口。

在“定量浏览器”窗口中加载的方法文件将自动加载。



参考

向校准点添加标准样品的数据文件，或从校准点删除标准样品的数据文件请参见“5.3 创建校准曲线”。



从“校准曲线”窗口返回“定量浏览器”窗口时，浏览器会自动对修改过校准曲线的所有数据文件的组分 ID 重新定量。

8.4

8 定量浏览器

手动峰积分和手动峰识别

色谱图视图由“单个”标签和“样品信息”标签。这两个标签都显示定量结果表中所选的数据文件信息。



“单个”标签中显示“组分表”中所选的组分色谱图，并且可以确认是否正确检测或正确识别到目标峰。参照图标的色谱图（最大：5）将被目标色谱图覆盖。另外，参照图标的表格信息将在该色谱图下面显示。对于这些色谱图，可以手动指定峰（手动峰积分），或更改要识别的峰（手动识别）。

1. 手动峰积分

- (1) 选择**处理 > 峰积分 > 手动峰积分**命令。色谱图上的光标变成垂直线，通过用鼠标拖动该线以选择使用峰的时间范围。将显示“基线”对话框，选择基线的样式。



注

在执行手动峰积分时，也将自动执行峰识别。

2. 手动识别

- (1) 选择**处理 > 手动识别**命令。色谱图上的光标变成垂直线，单击保留时间中的峰区域以进行识别。峰将被识别。如果错误的峰已被识别，通过拖动色谱图中峰上显示的识别标记可以更正要识别的峰。

8.5

保存定量浏览器窗口的布局

可以将定量结果视图 / 组分表视图中加载的方法文件名、数据文件名、选择的（突出显示的）数据文件 / 组分的信息保存成浏览文件（扩展名：*.qqq）。通过重新加载此浏览文件，可以轻松地恢复这些文件的状态。

1. 选择布局 > 浏览文件另存为命令。

参考

对于使用“文件另存为”对话框，请参阅“2.9.2 打开和保存文件”。



注

将为每个可以登录的用户（而不是此浏览文件）保存视图位置、大小和色彩信息等。



8 定量浏览器

8.5 保存定量浏览器窗口的布局

本页空白。

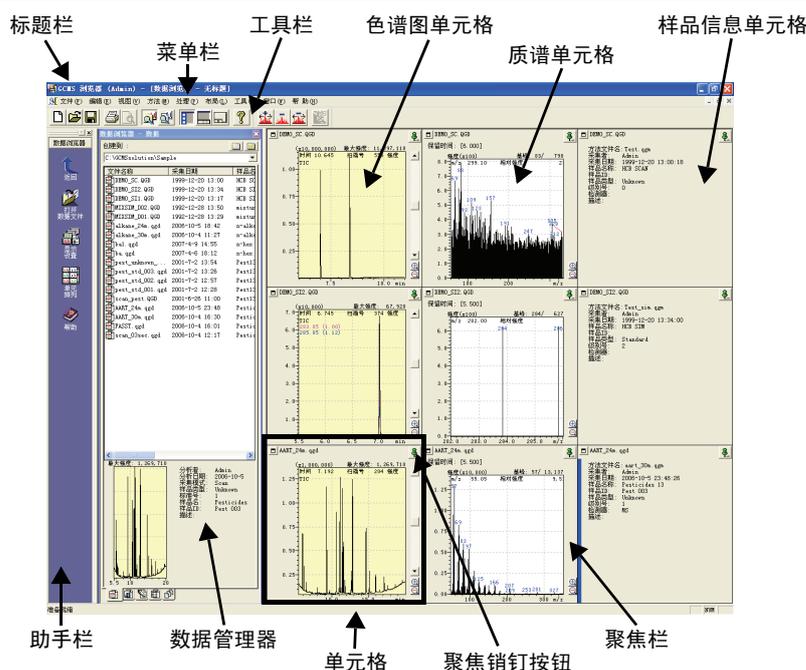
9.1

概述

9 数据浏览器

在“数据浏览器”中，可以同时显示多重数据文件中的色谱图和质谱。“数据浏览器”窗口由用于显示信息的单元格组成。每个单元格显示通过单个数据文件加载的色谱图或质谱，并且通过增加单元格，可以同时显示最多 64 个单元格的信息（水平和垂直方向各 8 个单元格）。通过操作单元格（缩放、更改保留时间等），可以对各个单元格上的色谱图或质谱同时应用该操作。通过取消聚焦销钉，即可单独操作单元格。

9.1.1 数据浏览器窗口



标题栏	显示当前使用的应用程序名或进程名以及数据文件名。
菜单栏	显示所显示窗口的各种命令菜单。
工具栏	显示所显示窗口的各种命令工具按钮。
助手栏	列出一般操作程序的相应命令图标。
数据管理器	通过双击文件图标可以迅速打开的数据文件。
色谱图单元格	通过指定的组和质量显示色谱图及其信息（TIC、MIC、MC）。
质谱单元格	显示指定保留时间的质谱及其信息。
样品信息单元格	显示数据文件的样品信息（方法文件名、获取方式、获取日期等）。
单元格	一个单元格可以加载一个数据文件。在“数据浏览器”窗口中，会同时显示最多 64 个单元格的信息（水平和垂直方向各 8 个单元格）。
聚焦销钉按钮	如果按下单单元格的销钉（用绿色表示），则该单元格将接收发自其它单元格的信息。
聚焦栏	针对聚焦单元格显示。菜单命令对具有聚焦栏的单元格有效。

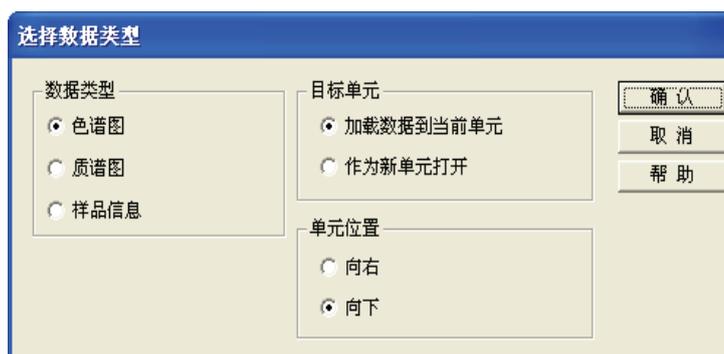


9.1.2 打开数据文件

1. 单击“数据管理器”中的“数据”标签。



2. 双击所需的数据。
将打开“选择数据类型”窗口。



3. 选择数据类型和锁定单元格。

参数	描述
数据类型	色谱图：显示色谱图及其信息。 质谱：显示质谱及其信息。 样品信息：显示样品信息。
目标单元格	将数据加载到当前单元格： 加载到当前所选的单元格。 在新单元格中打开： 添加一个新单元格。
单元格位置	向右： 为一栏添加一个单元格并显示。如果选择“在新单元格中打开”，浏览器将添加与数据文件相同的栏数，然后将数据文件加载到第一行中。 向下： 为一行添加一个单元格并显示。如果选择“在新单元格中打开”，浏览器将添加与数据文件相同的行数，然后将数据文件加载到第一栏中。

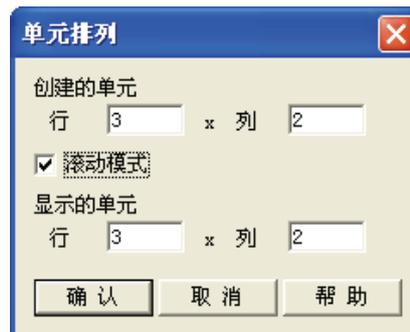
4. 数据文件被加载到指定的单元格中。



9.1.3 改变单元格布局

指定在窗口显示的单元格数量。

1. 单击助手栏中的**单元格排列**图标。
将打开“单元格排列”窗口。



2. 执行以下设置。

参数	描述
创建的单元格	按照在网格中指定的单元格数量划分数据浏览器。 行： 指定行数。 栏： 指定栏数。
滚动模式	如果选中此选项，在需要时将显示水平和垂直滚动条。
显示的单元格	指定每次在数据浏览器中显示的行数和栏数。只在选择“滚动模式”时有效。

9.2

9 数据浏览器

对色谱图单元格的操作

此窗口通过指定的组和质量显示色谱图（TIC、MIC、MC）。显示的色谱图在碎片表中确定。色谱图将被覆盖或以层叠方式显示。如果对多个组（SIM 图标集）执行分析，将只显示其中一个组的色谱图。通过“视图”菜单中的“下一个组”命令或“上一个组”命令，可以改变要执行分析的组。

9.2.1 设置显示的色谱图

色谱图单元格中显示的色谱图在“碎片表”窗口中确定。

1. 选择视图 > 碎片表命令，将显示“MS 碎片表”。



2. 在“MS 碎片表”窗口中，选择在色谱图窗口中显示 TIC、MIC 或“无”。另外，指定 MC m/z 和放大因子。在显示 MIC 色谱图时，需要事先设置 MIC 表。要编辑 MIC 表，请单击方法 > 数据加载格式命令。

9.2.2 处理其它单元格

如果单击聚焦销钉按钮，该销钉将钉住（用绿色表示），通过操作该单元格，可以对其它用销钉钉住的单元格应用类似操作。



1. 如果放大一个色谱图，其它色谱图单元格上的色谱图也将以相同的时间和强度范围放大。
2. 如果双击色谱图，将在质谱单元格上显示对应于保留时间的质谱。



3. 如果在色谱图上执行质谱计算，也将在其它色谱图单元格上执行相同时间范围内的质谱计算，并且计算的质谱将在已加载相同数据文件的每个质谱上显示。



注

如果保留时间在 FASST 测量间隔时间内，将显示扫描质谱。

9.2.3 更改显示范围

1. 要设置色谱图的显示范围，请在色谱图上拖动或单击助手栏中的显示设置图标。
2. 如果打开“色谱图设置”窗口，请执行以下设置。



参数	描述
显示模式	选择“覆盖”或“层叠”。
范围设置	如果选中“范围设置”，将指定强度轴的范围和时间基准。如果选中“OFF”，将显示从分析的开始时间到当前组结束的色谱图。单击“初始化”按钮以建立 X 轴和 Y 轴标准。
显示色谱图信息	选择是否显示色谱图信息。



9.2.4 打印单元格图像

1. 要打印报告，请选择**文件 > 为所选的单元格打印图像**命令，将显示“报告编辑器”窗口。（报告格式已经加载。）
2. 要更改报告格式，请双击项目并在属性窗口中进行编辑。如果选择**文件 > 格式文件另存为**命令，所做的更改将保存到名为“Data Browser MS Chromatogram Report.qgr”的报告格式文件中，并且将用于色谱图单元格的下一次图像打印。
3. 如果不需要更改格式，只需单击助手栏中的**打印**图标。将打印出报告。



9.3

9 数据浏览器

对质谱单元格的操作

此窗口显示指定保留时间内的质谱。

9.3.1 显示指定保留时间内的质谱

1. 双击保留时间内的色谱图单元格。在此情况下，需要用聚焦销钉同时钉住色谱图单元格和质谱单元格。

9.3.2 差减质谱

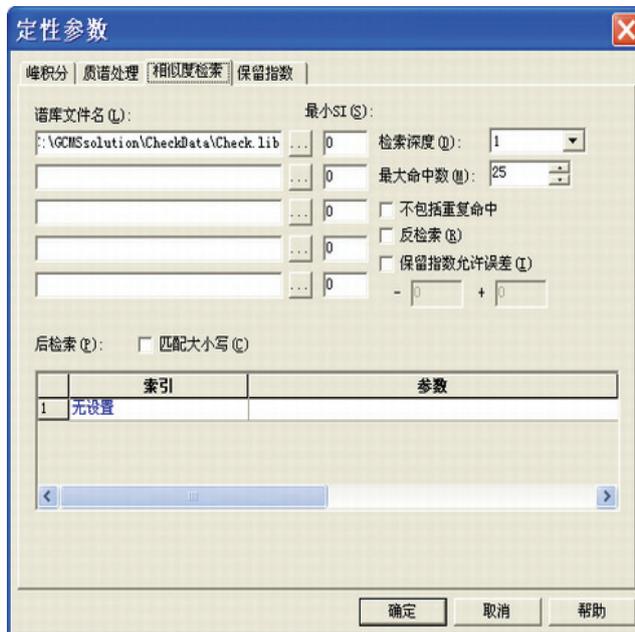
1. 将聚焦销钉钉在质谱单元格上，然后单击工具栏中的**减去质谱**图标。
2. 将聚焦销钉钉在色谱图单元格上，然后双击色谱图单元格上的色谱图以指定所需的保留时间。将会减去质谱，并且在质谱单元格上显示结果。

参考

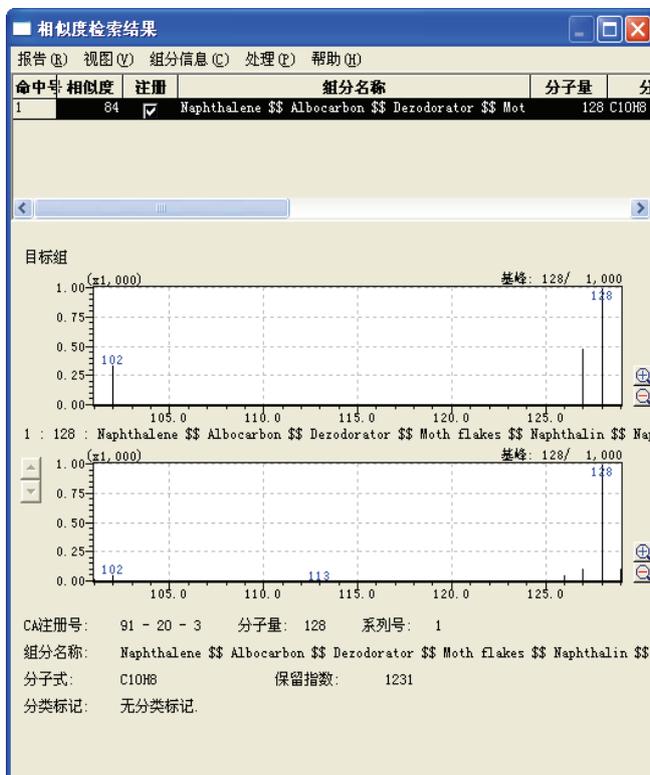
有关质谱的平均或减去平均的质谱，请参阅“4.2.2 谱图平均与背景处理”。

9.3.3 执行质谱相似度检索

1. 选择**处理 > 当前质谱相似度检索**命令。
如果库文件名未指定用于相似度检索，请在“相似度检索”标签上的“定量参数”中设置，并选择**处理 > 当前质谱相似度检索**命令。



2. 将打开“相似度检索结果”窗口。





9.3.4 处理其它单元格

如果单击聚焦销钉按钮，该销钉将钉住（用绿色表示），通过操作该单元格，可以对其它用销钉钉住的单元格应用类似操作。



1. 如果放大一个质谱，其它质谱单元格上的质谱也将以相同的 m/z 和强度范围放大。
2. 如果双击质谱，将在扫描数据色谱图单元格上显示 m/z 的质量色谱图。

9.3.5 更改显示范围

1. 要设置质谱的显示范围，请在质谱上拖动或单击助手栏中的显示设置图标。
2. 如果打开“质谱设置”窗口，请执行以下设置。



参数	描述
范围设置	如果选中“范围设置”，将指定强度轴和 m/z 轴的范围。如果选中“OFF”，将显示从开始分析 m/z 到当前组结束的质谱。单击“初始化”按钮以建立 X 轴和 Y 轴标准。
显示质谱信息	选择是否显示质谱信息。



9.3.6 打印单元格图像

1. 要打印报告，请选择**文件 > 为所选的单元格打印图像**命令，将显示“报告编辑器”窗口。（报告格式已经加载。）
2. 要更改报告格式，请双击项目并在属性窗口中进行编辑。如果选择**文件 > 格式文件另存为**命令，所做的更改将保存到名为“Data Browser MS spectrum Report.qgr”的报告格式文件中，并且将用于质谱单元格的下一次图像打印。
3. 如果不需要更改格式，只需单击助手栏中的**打印**图标。将打印出报告。



9.4

保存数据浏览器窗口的布局

在数据浏览器中，可以将每个单元格的信息（例如数据文件名、数据类型、单元格位置等）保存成布局文件 (*.lyt)。通过打开此布局文件，您可以轻松地重新加载与每个单元格有关的数据文件系列。

1. 选择布局 > 格式文件另存为命令。

参考

对于使用“文件另存为”对话框，请参阅“[2.9.2 打开和保存文件](#)”。



本页空白。

10.1

10 维护

注意事项

阅读并遵守以下 MS 维护注意事项，确保获得最优 MS 性能并防止意外事件。
在执行 GC 维护前，按照 GC 用户手册中的说明关闭所有模块，包括 MS。



警告

1. 在执行维护操作时，要遵照所有相关的注意事项。
2. 在处理离子源盒或质谱仪内部时要戴干净的手套。
3. 用洁净的工具拆卸部件。不干净的工具或手套带来的杂质会产生背景噪声。用不起毛的布和丙酮清洁要在质谱仪内部使用的所有工具。
4. 将部件拆下后放在干净的布上，确保它们保持洁净。
5. 记下部件的组装方式，确保以正确的方式重新组装。
6. 需要打开电源单元或移动 MS 的操作应该由岛津公司代表执行。用户只能执行换柱和离子源盒维护的操作。

10.2

10 维护

更换灯丝

因为过度使用或在真空度降低时，灯丝会燃尽。本节介绍如何更换灯丝。在执行此更换步骤时，请遵照以下注意事项。



警告

有触电危险。关闭仪器并确认主电源开关关闭。确认仪器的电流断路器关闭。



警告

离子源和接口通常会在操作期间变热。在维护前，请在关闭仪器后让其冷却至少 10 分钟。

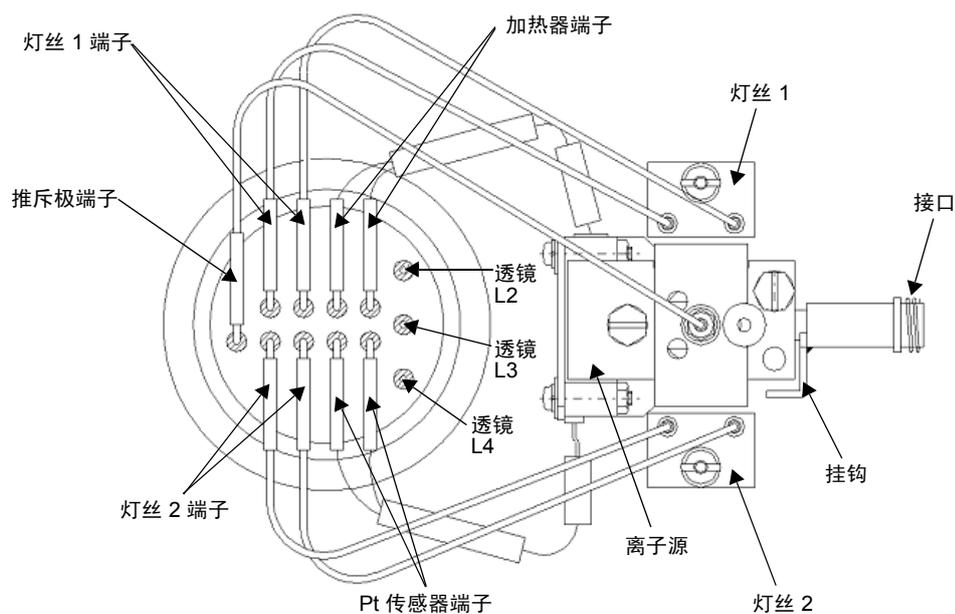


图 10.1 离子源箱图解



10.2.1 更换灯丝的步骤

1. 按照第 26 页第 2.4.2 节“关闭仪器”中的说明关闭仪器。
2. 确认主仪器开关关闭。
3. 确认仪器的电流断路器关闭。
4. 旋转旋钮并打开前面板。
5. 拉引针 (1) 上的引线端子，拆开灯丝连线。
6. 松开锁紧螺母 (2) 并拉出灯丝 (3)。

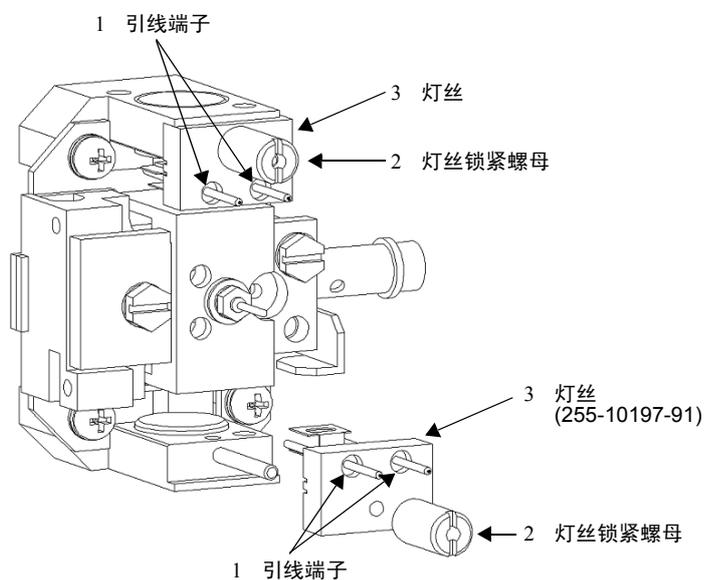


图 10.2 离子源

7. 完全插入新灯丝并拧紧螺母。
8. 将引线端子推入引针，重新连接灯丝。



注

安装灯丝时的注意事项：

1. 完全插入灯丝。
2. 在安装灯丝时，不要让灯丝导线接触任何其它部位。

10.3

10 维护

清洁离子源盒和排斥极电极

离子源的功能是通过电子轰击样品，导致离子化并因此产生离子。因此，源部件会慢慢地被污染。如果离子源或排斥极电极被污染，将不能有效地产生离子，导致灵敏度降低。定期拆下离子源盒并进行清洁。



警告

有触电危险。关闭仪器并确认主仪器开关和电流断路器关闭。



警告

在操作用于清洁离子源盒的有机溶剂时要特别小心。使用有机溶剂的部位要适当通风。



警告

离子源和接口通常会在操作期间变热。在维护前，请在关闭仪器后让其冷却至少 10 分钟。



警告

在烘干 / 烘焙后离子源盒和排斥极电极仍然很烫，小心烫伤。在维护前要确保部件已充分冷却。



10.3.1 拆卸离子源盒和排斥极电极

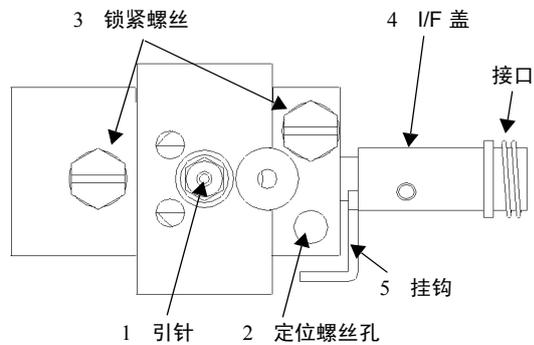


图 10.3 拆下灯丝的离子源盒图解

1. 按照第 26 页第 2.4.2 节“关闭仪器”中的说明关闭仪器。
2. 确认主仪器开关关闭。
3. 确认仪器的电流断路器关闭。
4. 旋转旋钮并打开前面板。
5. 小心地用镊子从排斥极电极上拉出引线端子（见上图）。
6. 拧固定 / 松开离子源盒的定位螺丝到离子源盒上的螺纹孔里。
7. 将支撑离子源盒的锁紧螺丝 (3) 松开半圈。



8. 将接口盖 (4) 向右侧推，然后向下旋转挂钩 (5)。

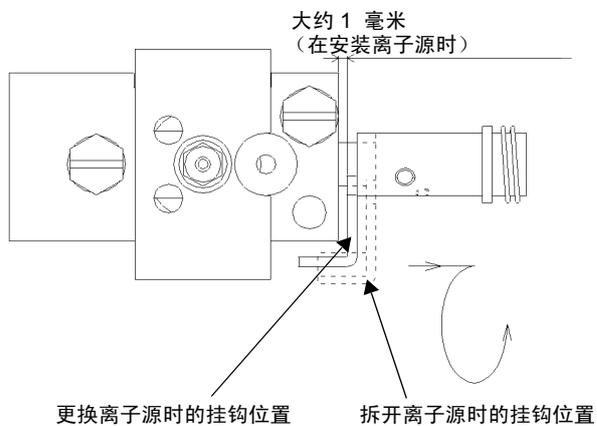


图 10.4 固定挂钩

9. 松开锁紧螺丝 (3) 并拆开离子源盒。

10. 拆开夹具，然后拆下离子源盒和推斥极。

11. 用扳手松开螺母，然后拆开推斥极电极。

12. 按照第 221 页第 10.3.3 节“清洁离子源盒和推斥极电极”中的说明进行清洁。



10.3.2 重新组装离子源盒和推斥极电极

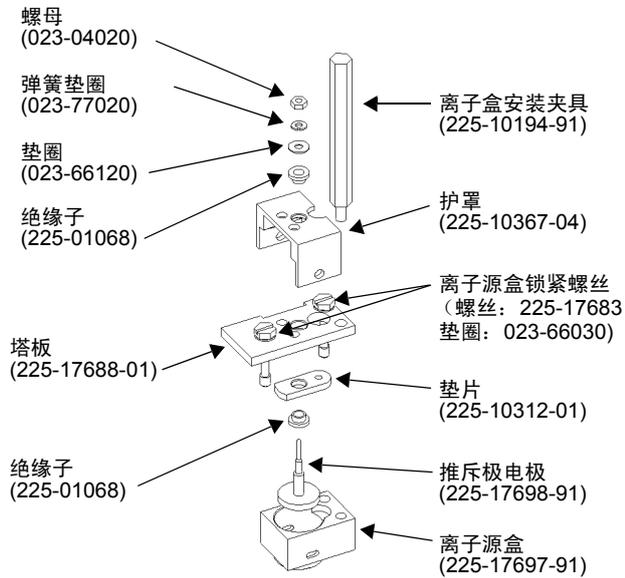


图 10.5 离子源盒和安装夹具

1. 将推斥极电极放入离子源盒并进行调整，使推斥极位于离子源盒的中央。

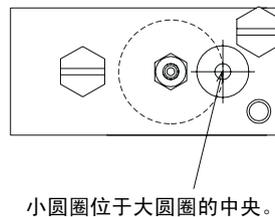


图 10.6 固定推斥极电极

2. 如图中所示，将此部件安装在离子源盒中。（图 10.5 “离子源盒和安装夹具”）用两颗锁紧螺丝将此部件暂时锁定到位。
3. 将安装夹具安装到离子源盒上。



4. 拉起接口盖上的挂钩，然后将其安装到盒体上。

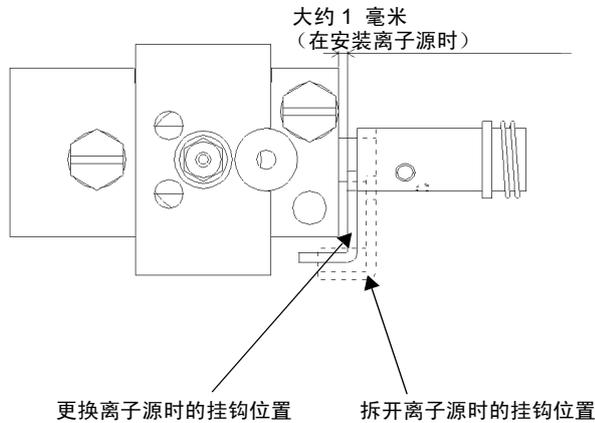


图 10.7 固定挂钩

5. 垂直方向调整夹具，使接口盖可以完全插入箱体。
6. 拆卸夹具并拧紧用于固定该部件的两颗锁紧螺丝。应首先拧紧左侧的螺丝。
7. 连接排斥极引线端子。



注

1. 确认接口末端的护盖已牢固地安装在离子源的小孔中。
2. 确保已连接该排斥极电极的引线端子。
3. 确认该离子源已直立固定。



注

- 重新组装离子源盒和透镜 1 时要注意以下事项：
1. 在拧紧螺丝时不要太用力；否则会使透镜变弯或损坏绝缘部件。
 2. 用电路测试机确保排斥极电极和离子源盒已绝缘。
 3. 不要清洁绝缘子部件。如果该部件被污染，可以购买新部件。



10.3.3 清洁离子源盒和推斥极电极

1. 用砂纸磨光部件。请参阅第 221 页第 10.3.4 节“必要的材料”。



注

打磨离子源盒和推斥极电极时要注意以下事项：

1. 在打磨电极时小心不要弄弯它。
2. 用干净的压缩空气源吹掉表面的灰尘。
3. 在丙酮或石油醚中进行超声波清洁。
4. 在 90 - 120 °C 的温度下烘干 30 分钟。在分析微量或易吸附的组分时，在商用加热炉中以 400 °C 的温度烘焙一小时。
5. 将干燥的离子源盒和推斥极存放在清洁箱中。

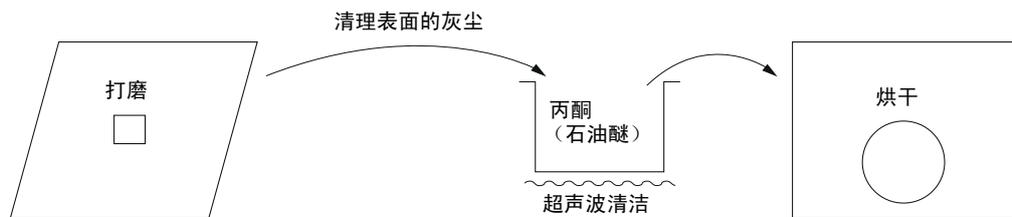


图 10.8 清洁离子源盒和推斥极电极

10.3.4 必要的材料

1. 砂纸

- P/N 085-35124-02 (普通规格, 20 张)
- P/N 085-35124-03 (精细规格, 20 张)

如果部件被严重污染, 先用普通规格砂纸打磨, 然后用精细规格砂纸打磨。如果部件被轻度污染, 只需要用精细规格砂纸打磨。

10.4

10 维护

真空泵维护

本节中说明如何更换机械泵油以及如何更换主涡轮分子泵的润滑油。机械泵油在关闭系统后仍然很烫手。在进行维护前，请等待至少 10 分钟。

10.4.1 更换机械泵油

机械泵（型号 E2M1.5）需要每隔 3000 小时更换一次泵油。必须更换泵油以防止真空度下降、泵油泄漏和过大的噪声。

泵油必须具有适合机械泵使用的正确特性。只能使用符合以下规格的纯正泵油：机械泵油 Ultragrade 15 1L (P/N 017-30163-11)。

泵油更换步骤



警告

有严重烫伤的危险。在关闭机械泵后的片刻，机械泵油仍然很烫。在进行维护前，请等待至少 10 分钟。

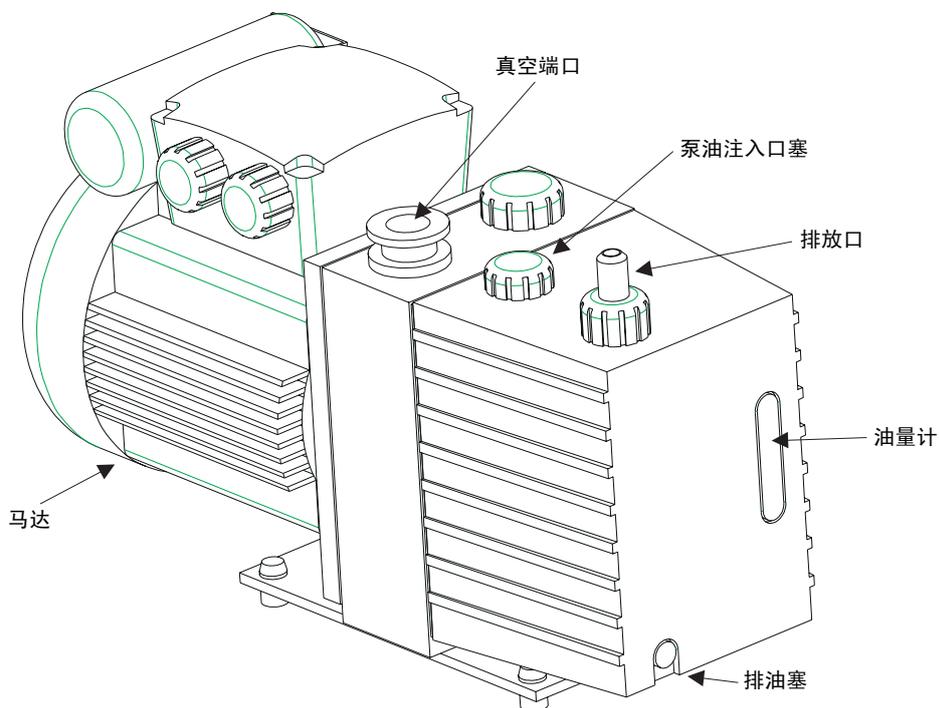


图 10.9 机械泵



1. 按照 2.4.2 “关闭仪器”一节中的“关闭仪器”，第 26 页中的说明关闭仪器。
2. 等待至少 10 分钟。
3. 关闭机械泵马达开关。
4. 用适当的容器接油，并戴上橡胶手套拔下排油塞排油。操作注意：在拔下排油塞时，泵油将会泄出。
5. 在排放完泵油后，暂时装上排油塞并打开马达开关。
6. 单击助手栏中的**真空控制**图标，打开“真空控制”对话框。



图 10.10 “真空控制”对话框

7. 单击窗口下部的**高级**按钮，访问手动操作系统。单击“真空系统”组中与更换机械泵油项目相邻的**机械泵启动**按钮。

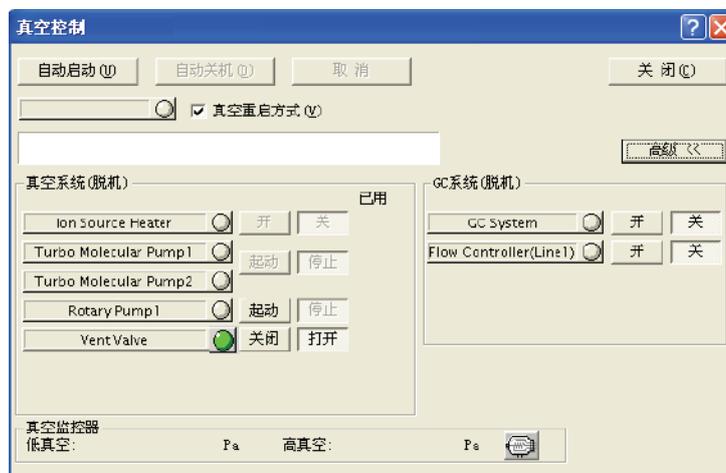


图 10.11 “高级真空控制”对话框

8. 保持机械泵运转 5 - 10 秒钟。机械泵将通过运转排放泵内残留的泵油。
9. 单击“真空控制”对话框中的**机械泵停止**按钮。



- 10.** 关闭机械泵马达开关。
- 11.** 拔下排油塞，排放残留的泵油。
- 12.** 塞上排油塞，然后拔下泵油注入口塞。加注新泵油，直到油量达到油量表的最大油量标记（约 0.28 升）。
- 13.** 重新装上泵油注入口塞。



注

除了更换泵油，还应该每隔 1500 小时对机械泵进行检修。请参阅 E2M1.5 的用户手册。

10.4.2 涡轮分子泵维护

与 GCMS-QP2010 Plus 连接连续使用时，无需进行额外的维护。但是，旋转部件具有有限的工作寿命，应该每隔 3 年更换一次以防止出现意外。
如果设备不是长期使用，则应该每隔 6 个月使其运转 8 小时。如果将其闲置长达 6 个月以上时间，则可能出现故障。

10.5

10 维护

清洁风扇

必须定期清洁风扇和风扇网罩。



注

如果风扇或风扇网罩上已经积聚了灰尘，则不要使用仪器。未充分冷却会导致性能下降。

10.5.1 清洁风扇

1. 按照第 26 页第 2.4.2 节“关闭仪器”中说明的步骤关闭仪器。确保所有电源开关关闭。
2. 从 MS 的排气口真空吸尘。
3. 从气相色谱 (GC) 背面的风扇和风扇网罩真空吸尘。
4. 从个人计算机 (PC) 系统和任何其它仪器模块（如自动进样器）的通风孔真空吸尘。



警告

为防止在清洁风扇和风扇网罩时受到伤害或出现意外，应确保仪器关闭并且检查是否关闭了所有的电源开关。

检查泄漏

本节中说明如何检查仪器是否有泄漏。如果存在气体泄漏，请按照第 230 页第 10.6.2 节“MS 真空泄漏检查”中说明的方法查找泄漏位置并采取相应的措施。

操作有气体泄漏的仪器会导致灵敏度降低、噪声增大、灯丝烧断或其它问题。务必在执行维护后检查是否有泄漏。

GC 泄漏与 MS 泄漏有不同的症状。通常，如果有 GC 泄漏，载气将从系统往外泄漏；而如果有 MS 泄漏，空气被吸入系统。要检查是否有 GC 泄漏，请参阅第 226 页第 10.6.1 节“GC 载气泄漏检查”。要检查是否有 MS 泄漏，请参阅第 230 页第 10.6.2 节“MS 真空泄漏检查”和第 231 页第 10.6.3 节“利用峰监测检查真空泄漏”。

10.6.1 GC 载气泄漏检查

为了检查 GC 载气泄漏，进样口柱连接处安装有一个塞子（用导线堵住的聚胺酯垫圈），并且用堵头螺母密封分流口和排气口。如此将载气密封在进样口流路、载气流路和分流和吹扫气流路中。通过观察密封载气压力随时间的变化来检测泄漏。通过 GC-2010 键盘和显示面板监视气流可以发现载气压力的变化。

1. 按照第 26 页第 2.4.2 节“关闭仪器”中的说明关闭仪器。关闭 MS 电源，但打开 GC-2010 的电源。
2. 打开气相柱温箱，取出进样侧的柱。
3. 在进样口中的柱位置上安装塞子。
4. 在分流和吹扫气的入口分别安装 G 型堵头螺母。

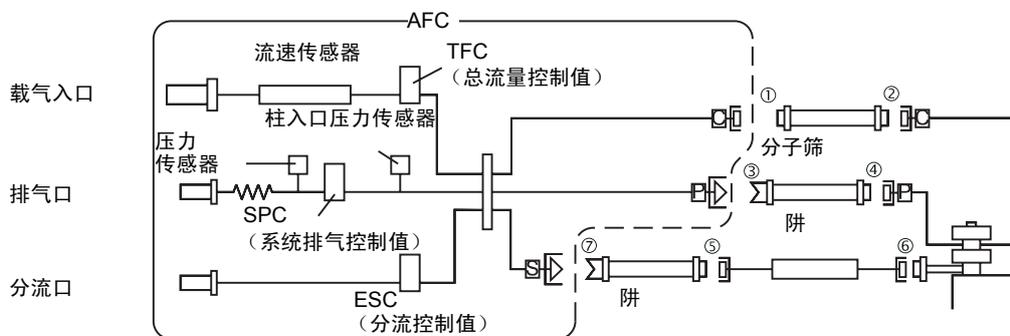


图 10.12 流路图解

5. 确保载气供应压力（气缸压力）超过 350 kPa。
6. 在 GC-2010 “Flow key” 屏幕中，将进样模式设置成“直接”，并将控制模式设置成“压力”。
7. 将进样压力设置为 350 kPa，按 ON/OFF（PF 菜单）并打开 AFC。



- 8.** 等待 5 分钟，确认进样压力介于 300 到 400 kPa 之间。如果该压力超过 400 kPa，略微松开柱螺母并让压力降低。如果该压力低于 300 kPa，略微提高进样压力。
- 9.** 确认总流量低于 2 mL/min。总流量超过 2 mL/min 表示载气泄漏。
- 10.** 按 “Flow key” 屏幕中的 ON/OFF (PF 菜单) 并关闭 AF 控制。
- 11.** 在关闭 AF 控制后使压力稳定。
- 12.** 确认每小时压力的下降不超过 30 kPa。每小时压力下降超过 30 kPa 表示有泄漏。
- 13.** 如果载气在压力下密封，可以利用气体泄漏电子检测器（商用）在每个流路的连接处（如 G 型螺母和进样口螺母）检查是否存在泄漏。
- 14.** 如果检测到泄漏，拧紧部件或拆下部件检查故障。如果卸下 G 型螺母，请更换三个铝垫片。



- 15.** 如果在步骤 14 后因为压力下降而检测到泄漏，则要更换进样口隔垫，并且确认 O 型环正确安装在进样口的玻璃衬管上。按照步骤 8 - 12 中的说明反复进行压力泄漏检测。

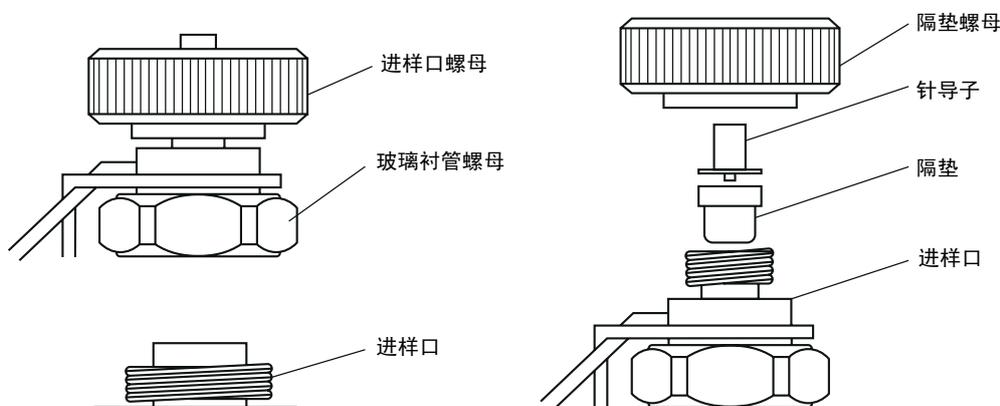


图 10.13 进样口组件顶部

- 16.** 如果在步骤 15 后检测到泄漏，则拧紧进样口组件的螺母，并且按照步骤 8 - 12 中的说明反复进行压力泄漏检测。
- 17.** 如果连续检测到泄漏，则该泄漏处可能位于载气、分流口或排气口的流路中。拧紧第 226 页第 10.6.1 节“GC 载气泄漏检查”中显示的流路图解中的 (1) - (7) 连接处，或拆下部件并检查故障。如果卸下 G 型螺母，请更换三个铝垫片。
- 18.** 按照步骤 8 - 12 中的说明反复进行压力泄漏检测。



注

在压力下密封 GC 载气的注意事项：

1. 确保在拆卸和重新装上 G 型或 M 型螺母后没有泄漏。
2. 如果卸下 G 型螺母，请更换三个铝垫片。
3. 除了进样口连接和第 226 页第 10.6.1 节“GC 载气泄漏检查”流路图解的 (1) - (7) 部件，不要触摸任何其它 GC 部件。有关其它方面维护的事宜，请联系岛津公司代表。



压力密封载气的步骤

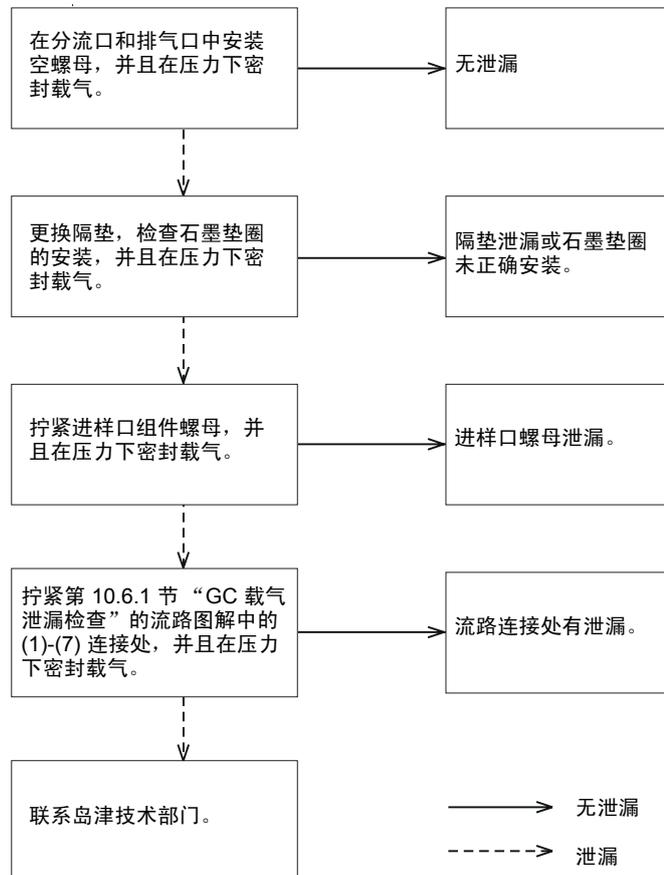


图 10.14 压力密封载气的步骤



10.6.2 MS 真空泄漏检查

本节中说明 MS 真空泄漏检查的步骤。较大的泄漏会导致机械泵停机，较小的泄漏会导致涡轮分子泵功能异常。

确保 O 型环正确安装在 MS 门上。O 型环可密封两个界面的连接处，防止真空泄漏并维持 MS 中的适当真空。

如果打开 MS 门进行维护，请遵照以下注意事项以免发生泄漏。



注

遵照以下注意事项以免发生真空泄漏：

- 不要忘记安装 O 型环。
- 正确安装 O 型环。
- 清除 O 型环上的所有异物。
- 清除密封面上的异物，包括 O 型环残屑。
- 不要刮擦密封面。
- 不要忘记安装柱与接口连接之间的聚胺酯垫圈。
- 牢固地拧紧柱接口螺母。
- 定期（约 80 到 100 次进样时）更换 GC 隔垫。

如果机械泵或涡轮分子泵不能正常运转：

1. 从机械泵排气的声音几分钟后仍不减小。
2. 涡轮分子泵运转，但真空系统在 5 分钟后关闭电源。



如果在步骤 2 中出现这种情况，则表示真空泄漏。等待 MS 排气，然后按照以上注意事项检查前门和柱与接口之间的连接，防止真空泄漏。如果发生真空泄漏的位置不是前门或柱与接口的连接处，请联系岛津公司技术部门。

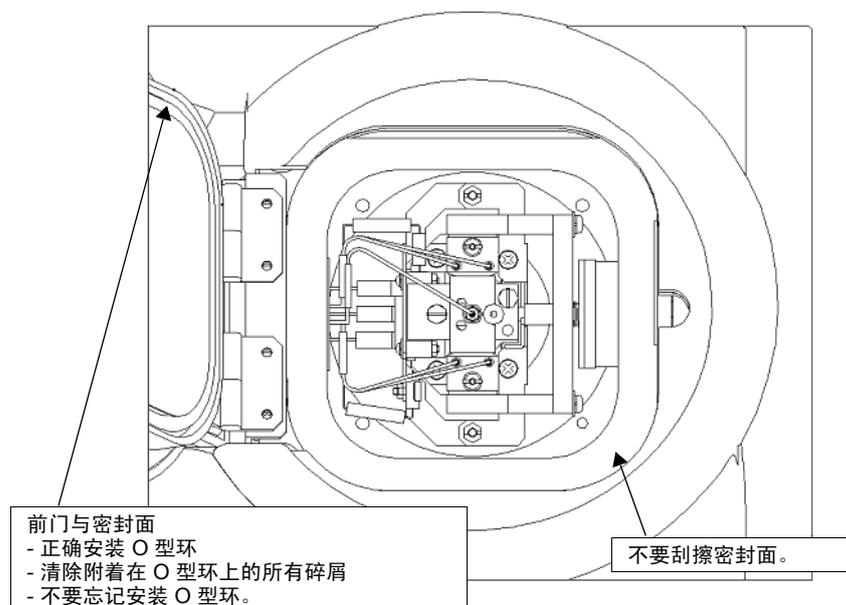


图 10.15 前门与密封面

10.6.3 利用峰监测检查真空泄漏

非常小的真空泄漏会使仪器的功能异常，影响仪器的性能。本节中说明了检查这些泄漏的步骤。本节中说明的操作适用于仪器和涡轮分子泵正常运转并且涡轮泵指示灯在“真空控制”对话框中显示绿色的情况。

此方法可通过“峰监测”窗口监测水 (m/z 18) 和氮 (m/z 28) 峰。通过比较这两个峰的高度可以检查很小的真空泄漏。

1. 单击 GCMS 实时分析助手栏中的**调谐**图标。将打开“调谐”窗口。
2. 单击助手栏中的**峰监测视图**图标。将打开“峰监测”窗口。





3. 将要监测的图标中的 m/z 设置为 18（水）和 28（氮），或选择水、空气监测组。
4. 将检测器电压设置为约 1.00 - 1.50 kV，以便可以看到 m/z 18 和 m/z 28 的峰。
5. 打开灯丝。
6. 比较 m/z 18 和 m/z 28 的高度。如果 m/z 28 的高度是 m/z 18 高度的两倍以上，则表示有真空泄漏。
7. 如果检测到真空泄漏，请按照第 26 页第 2.4.2 节“关闭仪器”中的说明关闭仪器。关闭仪器主开关。
8. 遵照第 230 页第 10.6.2 节“MS 真空泄漏检查”中说明的防止真空泄漏注意事项行事。



注

如果连接了可选的进样附件，即使 GC/MS 中没有泄漏，真空泄漏检查的结果也可能不符合标准。

吹扫不充分可能导致 28 m/z 与 18 m/z 的比率较高。如果出现这种情况，则增加 GC 总流量到约 200 mL/min 进行吹扫。



10.6.4 利用石油醚检查真空



注

在利用石油醚检查真空泄漏时的注意事项：

1. 只能使用石油醚。
2. 不要将石油醚溅到任何电路上。
3. 除接口与柱的接触面外，不要让石油醚接触任何其他部位。

此步骤建立在 MS 中出现真空泄漏时产生抽吸的基础上。如果出现泄漏，“峰监测”窗口中会出现 m/z 43 峰，此时可以检测到柱与接口间接触面上的石油醚。通过监测此 m/z 43 峰的波动可以对真空进行检查。

1. 单击 GCMS 分析助手栏中的调谐图标。将打开“调谐”窗口。
2. 单击助手栏中的峰监测视图图标，将打开“峰监测”窗口。
3. 在“峰监测”窗口中将要监测的图标的 m/z 设置为 43（石油醚的碎片图标）。将放大因子设置为 50 - 100。
4. 将检测器电压设置为 1.00 - 1.50 kV。
5. 打开灯丝。
6. 在注射器中装满石油醚。
7. 将石油醚注射到前门接触面上以及柱和接口之间。
8. 在“峰监测”窗口中观察 m/z 43 峰。如果 m/z 43 峰剧烈波动（增大），表示有石油醚的部位出现真空泄漏。
9. 重复步骤 7 和 8 中说明的步骤。如果 m/z 43 峰没有变化，则没有出现泄漏。
10. 如果检测到真空泄漏，请按照第 230 页第 10.6.2 节“MS 真空泄漏检查”中说明的防止真空泄漏的注意事项行事。



本节中说明当 GCMSsolution 或其它应用程序功能异常时如何重新安装。

10.7.1 安装前

在安装软件前检查以下项目。

安装盘

安装程序保存在 CD-ROM 中。

此程序解压缩保存在 CD-ROM 中的程序文件，并且在安装期间将它们复制到计算机硬盘。



注

软件不能通过将 CD-ROM 内容复制到计算机硬盘进行安装。必须通过此节说明的方法进行安装。

Windows 安装

需要 Windows 2000 或 Windows XP。

在新计算机中，检查并确保计算机硬盘中已安装 Windows 并且正常运作。

需要 Internet Explorer 3.02 或更高版本。



注

如果要重新安装 GCMSsolution 软件，请首先卸载 GCMSsolution 软件。请参阅第 240 页第 10.7.3 节“卸载 GCMSsolution”。

10.7.2 GCMSsolution 安装

1. 启动计算机并登录 Windows。将 GCMSsolution 安装盘插入 CD-ROM 驱动器。

如果在启动 Windows 后显示“找到新硬件向导”窗口，单击**取消**按钮并关闭此窗口。这表示计算机中尚未安装 MS 的驱动程序。在安装 GCMSsolution 后安装驱动程序。请参阅第 252 页第 10.8.4 节“安装 MS 驱动程序 (Windows 2000)”。

GCMSsolution 安装程序自动启动，并且显示“欢迎”窗口。

**注**

如果“欢迎”窗口未自动打开，请通过 Windows 的“开始”菜单选择“运行”。输入 E:\GCMSsolution\Setup.exe 作为程序名称以执行（其中 E: 是 CD-ROM 驱动器），然后单击**确定**按钮。



图 10.16 “欢迎”窗口

2. 阅读“欢迎”窗口的内容，然后单击**下一步**按钮。

**注**

如果单击“欢迎”窗口中的**确定**按钮，并且显示检测 DAO 失败消息，单击**确定**按钮以停止安装。请参阅第 243 页第 10.7.4 节“DAO 安装”，在安装“Data Access Objects (DAO) Setup”后，试图重新安装 GCMSsolution。

显示“检测 Internet Explorer”窗口。



图 10.17 “检测 Internet Explorer”窗口



3. 单击“检测 Internet Explorer”窗口中的**确定**按钮。
屏幕将切换到“安装 HTML 帮助”窗口。

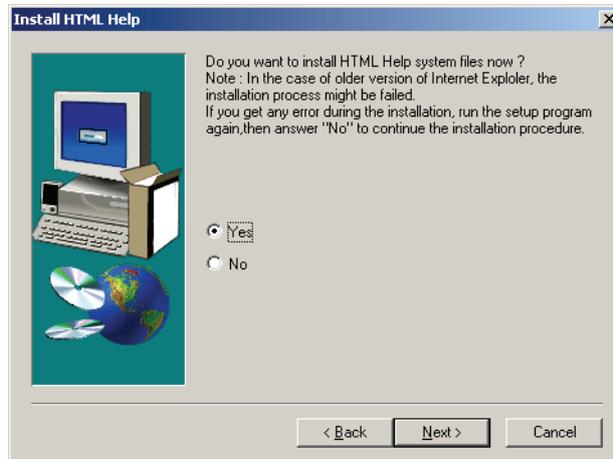


图 10.18 “安装 HTML 帮助”窗口

4. 选择**是**并单击**下一步**按钮。
将显示“是否使用 GC 检测器？”窗口。



图 10.19 “是否使用 GC 检测器？”窗口

5. 单击**是**按钮后将开始安装 GCsolution。如果单击“否”按钮或安装完成时，屏幕将返回到 GCMSsolution 安装程序画面。将显示 GCMSsolution 的“用户信息”窗口。

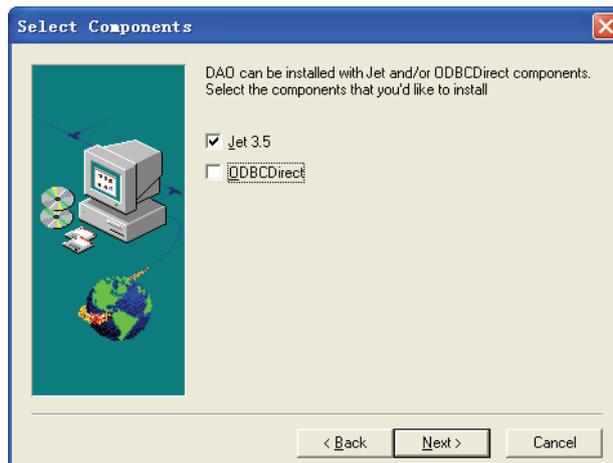


图 10.20 “用户信息”窗口



6. 在“用户信息”窗口中输入用户名和公司。然后单击**下一步**按钮。显示“选择目标位置”窗口。



图 10.21 “选择目标位置”窗口

7. GCMSsolution 应用程序将安装在“选择目标位置”窗口中指定的目标文件夹中。通常已选择缺省目录。

**注**

要更改目标文件夹，单击“选择目标位置”窗口中的**浏览**按钮。将打开“选择文件夹”对话框。



图 10.22 “选择文件夹”对话框

在“路径”文本框中输入完整路径，或双击“文件夹”列表框以选择安装文件夹。要更改驱动器，请单击“驱动器”框并选择驱动器。



注

GCMSsolution 利用其安装文件夹中的“Data”文件夹作为其创建项目文件夹的缺省位置，项目文件夹用于保存主要文件，如方法和数据文件。

如果为创建项目文件夹指定其它路径，在下次登录 GCMSsolution 时将缺省显示指定的项目文件夹。

如果使用 Windows XP 操作系统并且在不是缺省文件夹的其它位置上创建项目文件夹，将可能无法执行某些操作，如创建文件夹并在创建的文件夹中保存文件，这是因为 Windows XP 针对文件夹的缺省安全设置比以前版本的 Windows 系统（如 Windows 2000）更严格。

在这种情况下，可通过 Windows 的系统操作更改文件夹的安全设置。

单击**下一步**按钮，将显示“复制程序文件”状态消息。程序文件已安装。

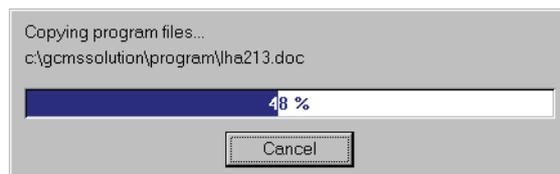


图 10.23 “复制程序文件”状态消息



注

要停止安装，单击**取消**按钮。

将显示“退出安装”对话框。

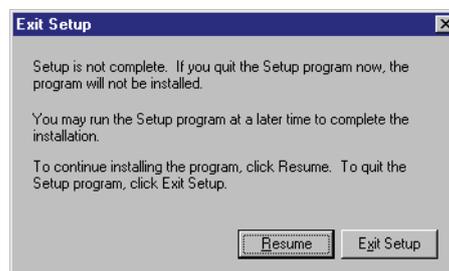


图 10.24 “退出安装”对话框

要继续安装，单击**继续**按钮。

要停止安装，单击**退出安装**按钮。安装将停止，并且退出 GCMSsolution 安装程序。



8. 当安装完成，“安装完成”窗口打开。



图 10.25 “安装完成”窗口

9. 单击“安装完成”窗口中的**完成**按钮。“安装完成”窗口关闭。GCMSsolution 安装已完成。

此时可以重新打开 GC、MS 和所有其它附件的电源。



10.7.3 卸载 GCMSsolution

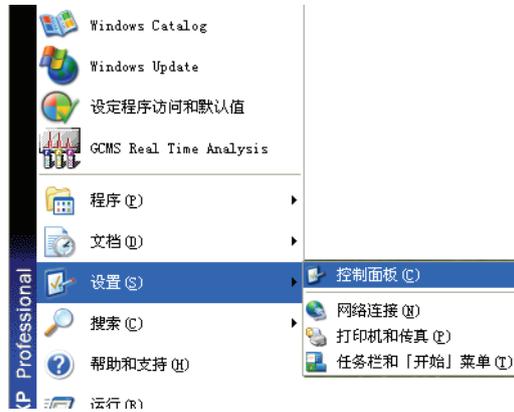


图 10.26 Windows 开始菜单

1. 在 Windows 开始菜单中，选择控制面板。将打开“控制面板”窗口。

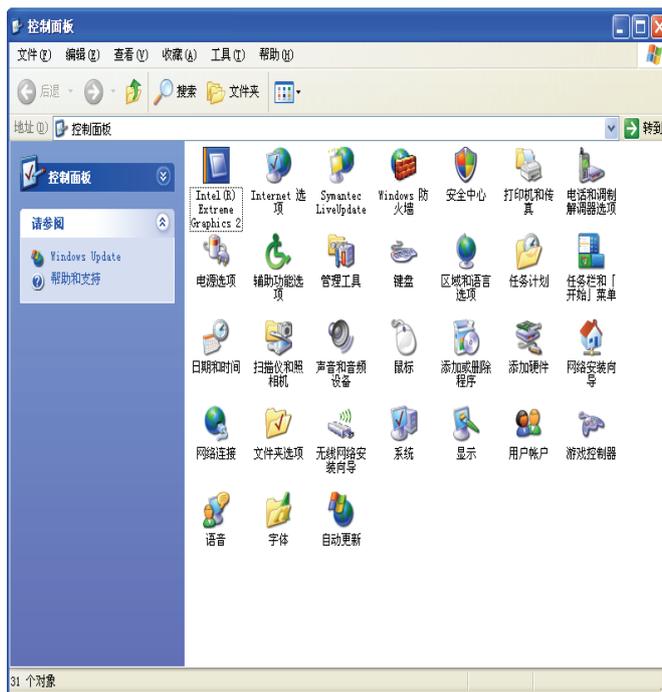


图 10.27 Windows 控制面板

2. 双击添加或删除程序图标。

将打开“添加或删除程序”窗口。





图 10.28 “添加或删除程序”窗口

3. 在“当前安装的程序”选项卡底部的列表框中单击以选择“GCMSsolution Ver. 2”。单击**更改 / 删除**按钮。

如果已经安装 GCsolution，同时也将其卸载。卸载过程与卸载 GCMSsolution 相同。

4. 将显示“确认文件删除”消息。确认要删除该程序，或单击**否**按钮取消操作。



图 10.29 确认文件删除消息



注

在卸载期间，将出现“是否删除共享文件？”对话框询问是否要删除共享文件。在此显示的所有文件都只由 GCMSsolution 使用；因此，单击**全部**按钮。



图 10.30 “是否删除共享文件？”对话框

如果单击**全部**按钮，将删除由系统使用的所有共享文件。单击**是**按钮以删除当前显示的文件。

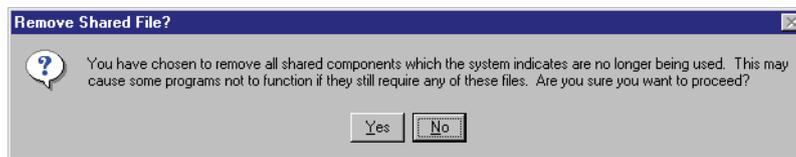


图 10.31 “是否删除共享文件？”确认

将显示“从计算机中删除程序”对话框，并且删除 GCMSsolution 程序文件。

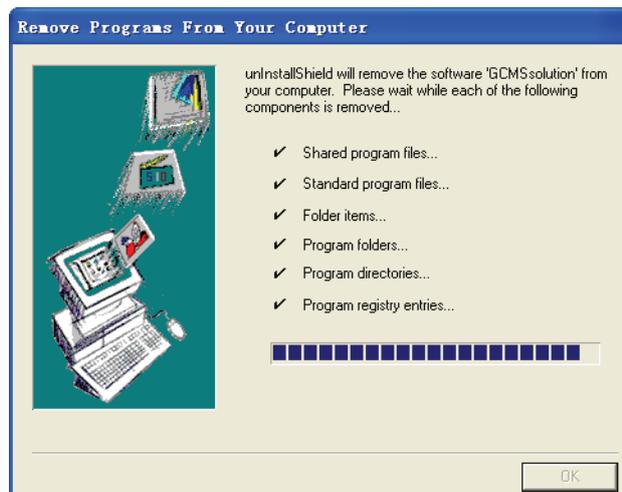


图 10.32 “从计算机中删除程序”对话框



5. 卸载过程完成时，“从计算机中删除程序”状态框中的**确定**按钮将激活。单击**确定**按钮完成 GCMSsolution 卸载过程。

**注**

要在卸载 GCMSsolution 后重新安装，请在重新安装 GCMSsolution 前重新启动计算机。

10.7.4 DAO 安装

1. 双击“控制面板”窗口中的**添加或删除程序**图标，打开“添加或删除程序”对话框。



图 10.33 “添加或删除程序”窗口

2. 单击**添加新程序**按钮，然后单击**CD 或软盘**按钮。
将显示“从软盘或光盘安装程序”窗口。



图 10.34 “从软盘或光盘安装程序”窗口



3. 单击“从软盘或光盘安装程序”窗口中的**下一步**按钮。
将显示“运行安装程序”窗口。



图 10.35 “运行安装程序”窗口

4. 将 GCMSsolutio 安装盘插入 CD-ROM 驱动器。如果显示 GCMSsolution 安装窗口, 单击**取消**按钮结束安装。在“打开”文本框中输入 DAO 安装程序的完整路径。例如, 如果 CD-ROM 驱动器是驱动器 E, 则输入以下内容:

E:\ Dao\Disk1\Setup.exe

单击**完成**按钮。

将启动“Data Access Objects (DAO) Setup”并显示“欢迎”窗口。

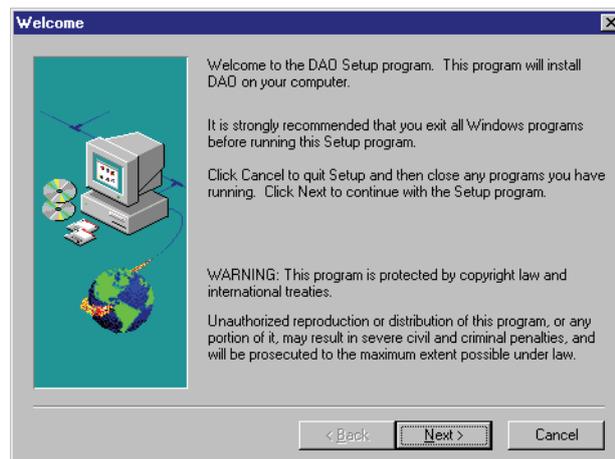


图 10.36 DAO 安装程序“欢迎”窗口



5. 阅读“欢迎”窗口中的内容，然后单击**下一步**按钮。
将显示“选择组件”窗口。



图 10.37 “选择组件”窗口

6. 在“选择组件”窗口中只选中 Jet 3.5 复选框，然后单击**下一步**按钮。
将打开第二个“选择组件”窗口，可在其中选择要用于 Jet 3.5 的数据格式。

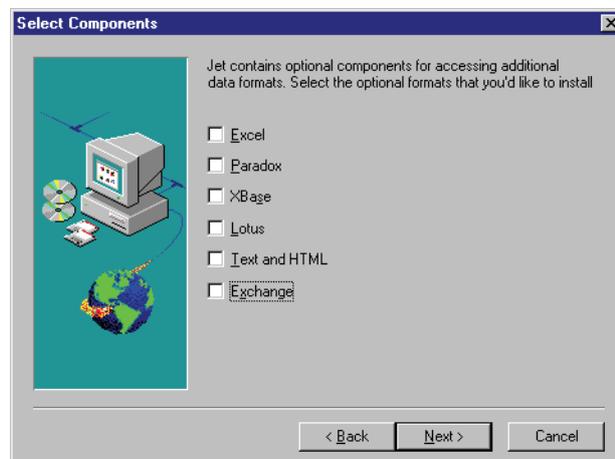


图 10.38 第二个“选择组件”窗口



7. 取消选中所有复选框，然后单击**下一步**。
完成后即已安装 DAO，将显示“信息”消息。

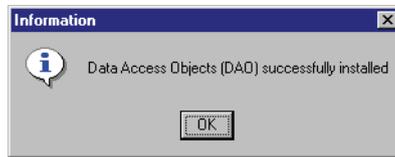


图 10.39 DAO 安装完成

8. 单击**确定**按钮以完成“Data Access Objects (DAO) Setup”。



注

在 DAO 安装完成后开始安装 GCMSsolution。



注

如果在安装 DAO 期间出现以下消息，则表示安装失败：
“找不到 OLE automation DLL、OLEAUT32.DLL，或者因为版本太老而与 DAO3.5 不兼容。如果继续运行 DAO，将无法注册。是否继续？”
继续安装 DAO 直到安装完成。然后安装 GCMSsolution 以完成安装过程。
如果 GCMSsolution 安装失败，请重新安装 DAO 和 GCMSsolution。

计算机接口卡安装

本节中说明了如何安装连接 MS 与计算机的计算机接口卡以及计算机接口卡和 MS 的驱动程序。

10.8.1 安装计算机接口卡

在计算机中安装计算机接口卡的步骤如下：

1. 关闭计算机和外围设备（打印机等）的电源。
2. 拔下计算机的电源线。
3. 拆下计算机箱盖。请参阅计算机的使用手册。
4. 拆下用于安装计算机接口卡的 PCI 扩展槽的保护盖。用螺丝起子拆下扩展槽螺丝。
5. 将计算机接口卡插入 PCI 扩展槽，然后拧紧螺丝以固定接口卡。
6. 装回计算机箱盖。
7. 重新连接计算机电源线。



注

有关此步骤的详细描述，请参阅计算机附带的用户手册。



10.8.2 计算机接口卡驱动程序安装 (Windows 2000)

在计算机中安装接口卡后安装驱动程序。

1. 打开计算机。在操作系统引导过程中将自动开始安装驱动程序。
2. 在开始菜单中选择**设置 > 控制面板**。将打开“控制面板”窗口。

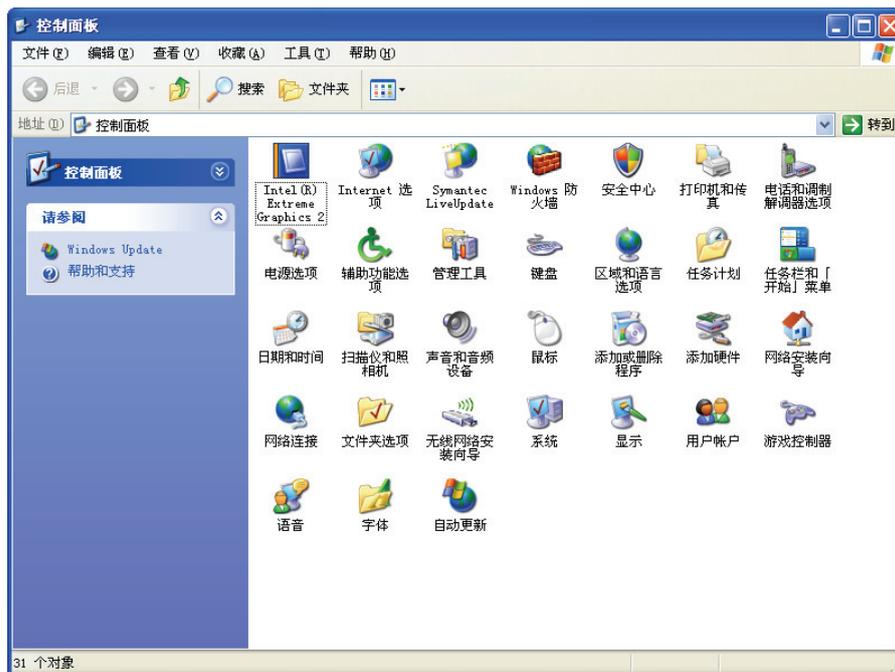


图 10.40 “控制面板”窗口



3. 双击“控制面板”中的**系统**图标，打开“系统属性”窗口。



图 10.41 “系统属性”窗口

显示“硬件”选项卡并单击**设备管理器**按钮。

4. 将打开“设备管理器”窗口。确认该驱动程序在“IEEE 1394 总线主控制器”下显示。

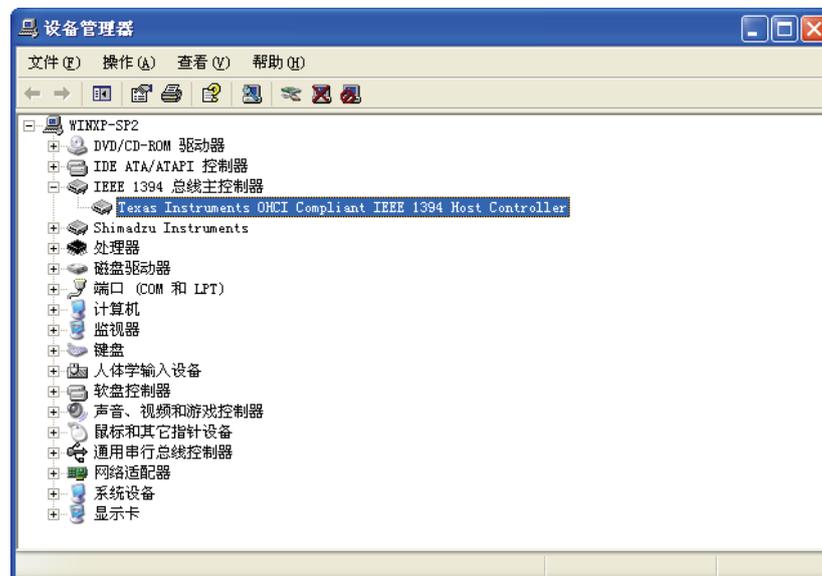


图 10.42 “设备管理器”窗口



10.8.3 计算机接口卡驱动程序安装 (WindowsXP)

在计算机中安装接口卡后安装驱动程序。

1. 打开计算机。在操作系统引导过程中将自动开始安装驱动程序。
2. 在开始菜单中选择**设置 > 控制面板**。



3. 将打开“控制面板”窗口。单击“控制面板”中的**性能与维护**图标。





4. 单击“控制面板”中的**系统**图标，打开“系统属性”窗口。

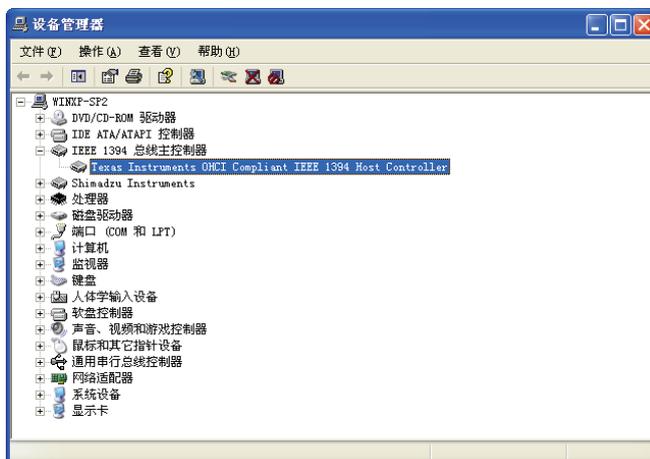


5. 显示“硬件”选项卡并单击**设备管理器**按钮。





6. 将打开“设备管理器”窗口。确认该驱动程序在“IEEE 1394 总线主控制器”下显示。



10.8.4 安装 MS 驱动程序 (Windows 2000)

1. 在 Windows 运行期间将 MS 连接到计算机接口卡。将自动打开“找到新硬件向导”。



图 10.43 “找到新硬件”向导



2. 单击**下一步**按钮。屏幕将切换到“找到新硬件”向导的下一个屏幕 - “安装硬件设备驱动程序”。



图 10.44 “安装硬件设备驱动程序” 屏幕

选择“显示该设备已知驱动程序的列表，以便我选择一个特定的驱动程序”并单击**下一步**按钮。

3. 屏幕将切换到“找到新硬件”向导的下一个屏幕 - “硬件类型”屏幕。

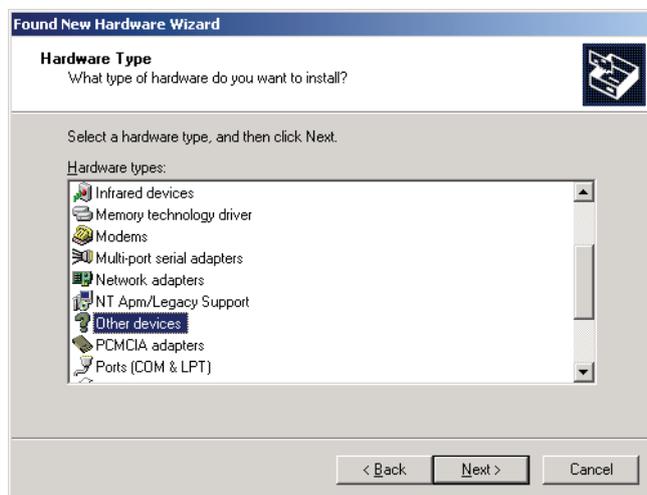


图 10.45 “硬件类型” 屏幕

选择“其它设备”并单击**下一步**按钮。



4. 屏幕将切换到“找到新硬件”向导的下一个屏幕 - “选择设备驱动程序”屏幕。

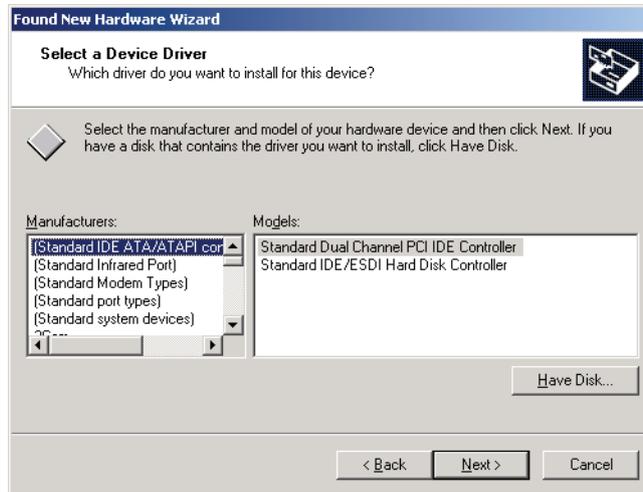


图 10.46 “选择设备驱动程序”屏幕

单击**从磁盘安装**按钮。

5. 将打开“从磁盘安装”窗口。
将 GCMSsolution 安装盘插入 CD-ROM 驱动器。如果显示 GCMSsolution 安装窗口，单击“取消”按钮结束安装。



图 10.47 “从磁盘安装”窗口

在“要复制的厂商文件来自”文本框中键入 E:\Driver（其中 E: 是 CD-ROM 驱动器），然后单击**确定**按钮。



6. 屏幕将返回到“选择设备驱动程序”屏幕。

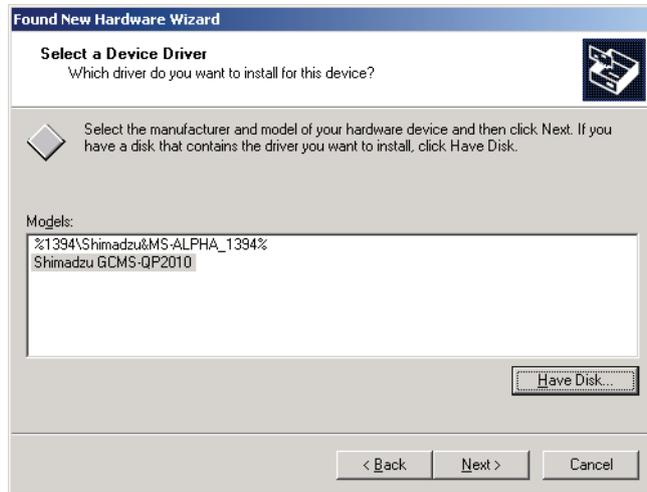


图 10.48 “选择设备驱动程序”屏幕

选择“Shimadzu GCMS-QP2010”并单击**下一步**按钮。如果打开“更新驱动程序警告”窗口，单击**是**按钮。

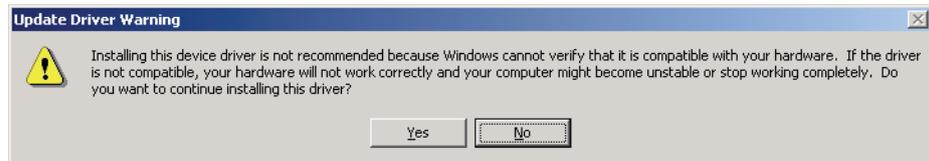


图 10.49 “更新驱动程序警告”窗口

7. 屏幕将切换到“找到新硬件”向导的下一个屏幕 - “开始设备驱动程序安装”屏幕。



图 10.50 “开始设备驱动程序安装”屏幕

单击**下一步**按钮。



8. 屏幕将切换到“找到新硬件”向导的最后一个屏幕。
单击**完成**按钮。



图 10.51 “完成找到新硬件向导”

9. 打开“设备管理器”窗口并确认“Shimadzu GCMS-QP2010”显示在 Shimadzu Instruments 下面。
要显示“设备管理器”窗口，请参阅第 248 页第 10.8.2 节“计算机接口卡驱动程序安装 (Windows 2000)”。

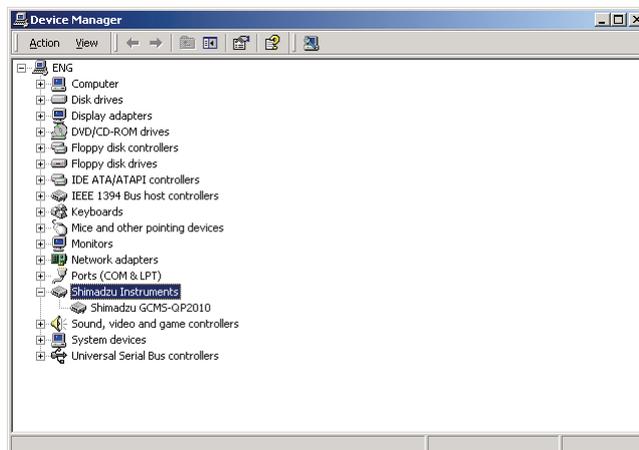


图 10.52 “设备管理器”窗口



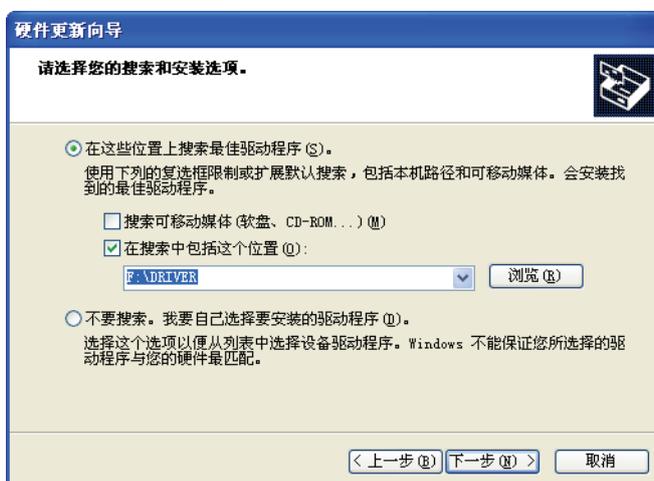
10.8.5 安装 MS 驱动程序 (Windows XP)

1. 在 Windows 运行期间将 MS 连接到计算机接口卡。将自动打开“找到新硬件向导”。



选择“从列表或指定位置安装（高级）”并单击**下一步**按钮。

2. 将打开“请选择搜索和安装选项”窗口。



将 GCMSsolution 安装盘插入 CD-ROM 驱动器。如果显示 GCMSsolution 安装窗口，单击“取消”按钮结束安装。

选中“搜索时包含该位置：”复选框，在文本框中键入 E:\Driver（其中 E: 是 CD-ROM 驱动器）。

单击**下一步**按钮。



3. 将自动开始安装设备驱动程序。



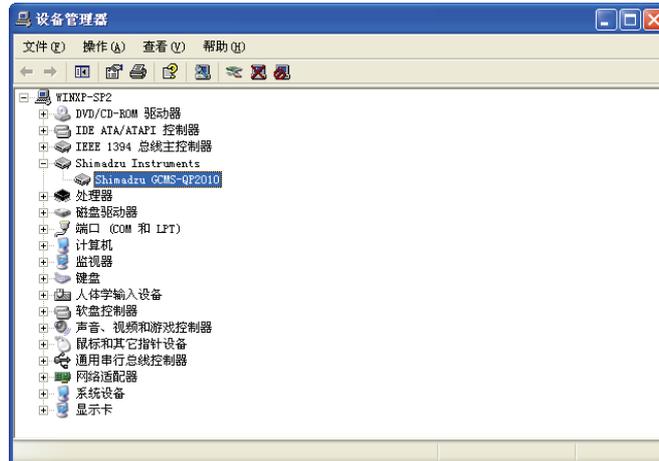
4. 如果显示以下窗口，请单击完成按钮。





5. 打开“设备管理器”窗口并确认“Shimadzu GCMS-QP2010”显示在 Shimadzu Instruments 下面。

要显示“设备管理器”窗口，请参阅“10.8.3 计算机接口卡驱动程序安装 (WindowsXP)”一节。





本页空白。

11.1 操作问题和补救措施

本节中说明在分析期间可能出现的操作问题、导致这些问题的原因及建议采取的解决方案。如果在采取补救措施后症状仍然存在，或如果出现新的问题，请联系岛津公司技术部门。

11.1.1 通过 MS 上的 LED 指示灯指示的错误状态

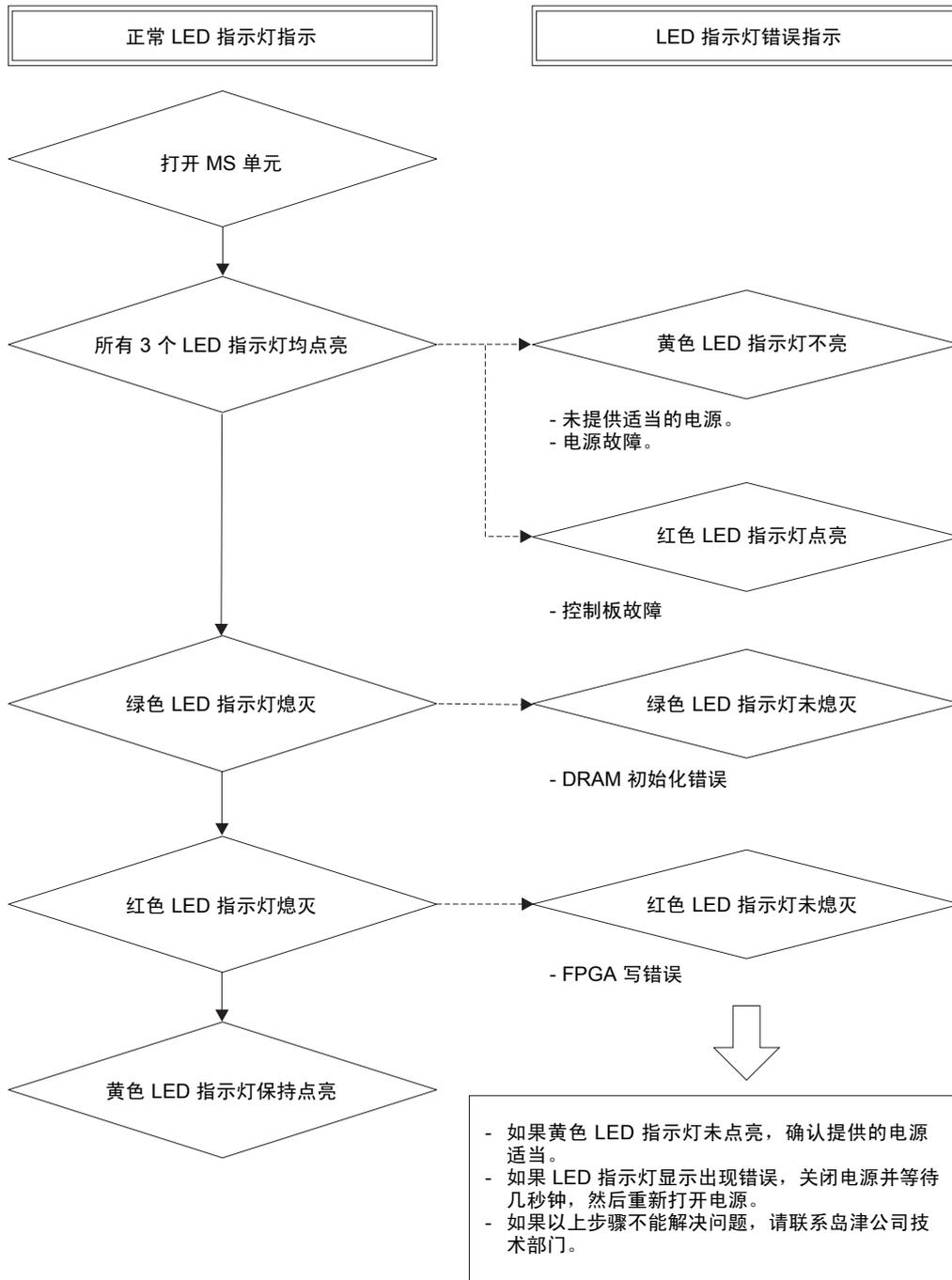


图 11.1 LED 指示灯错误指示



11.1.2 GCMSsolution 软件启动错误

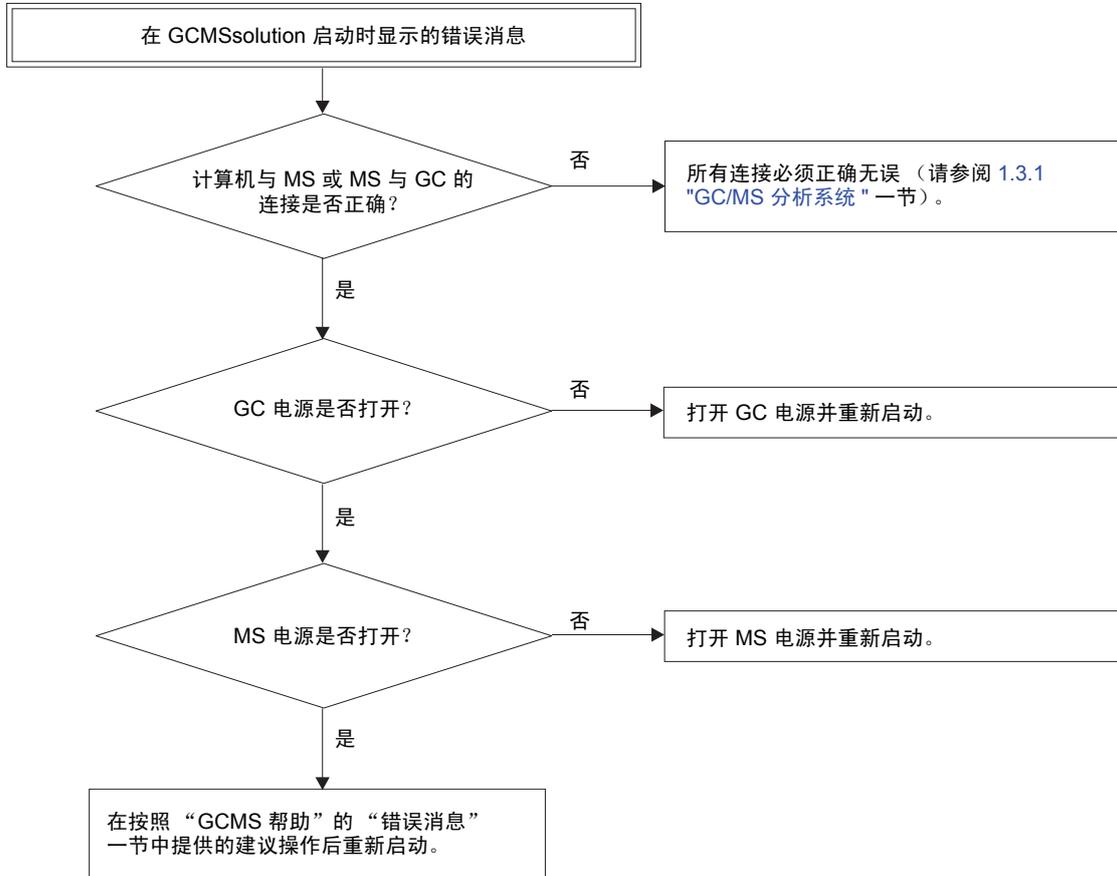


图 11.2 软件启动错误



11.1.3 真空系统自动启动错误

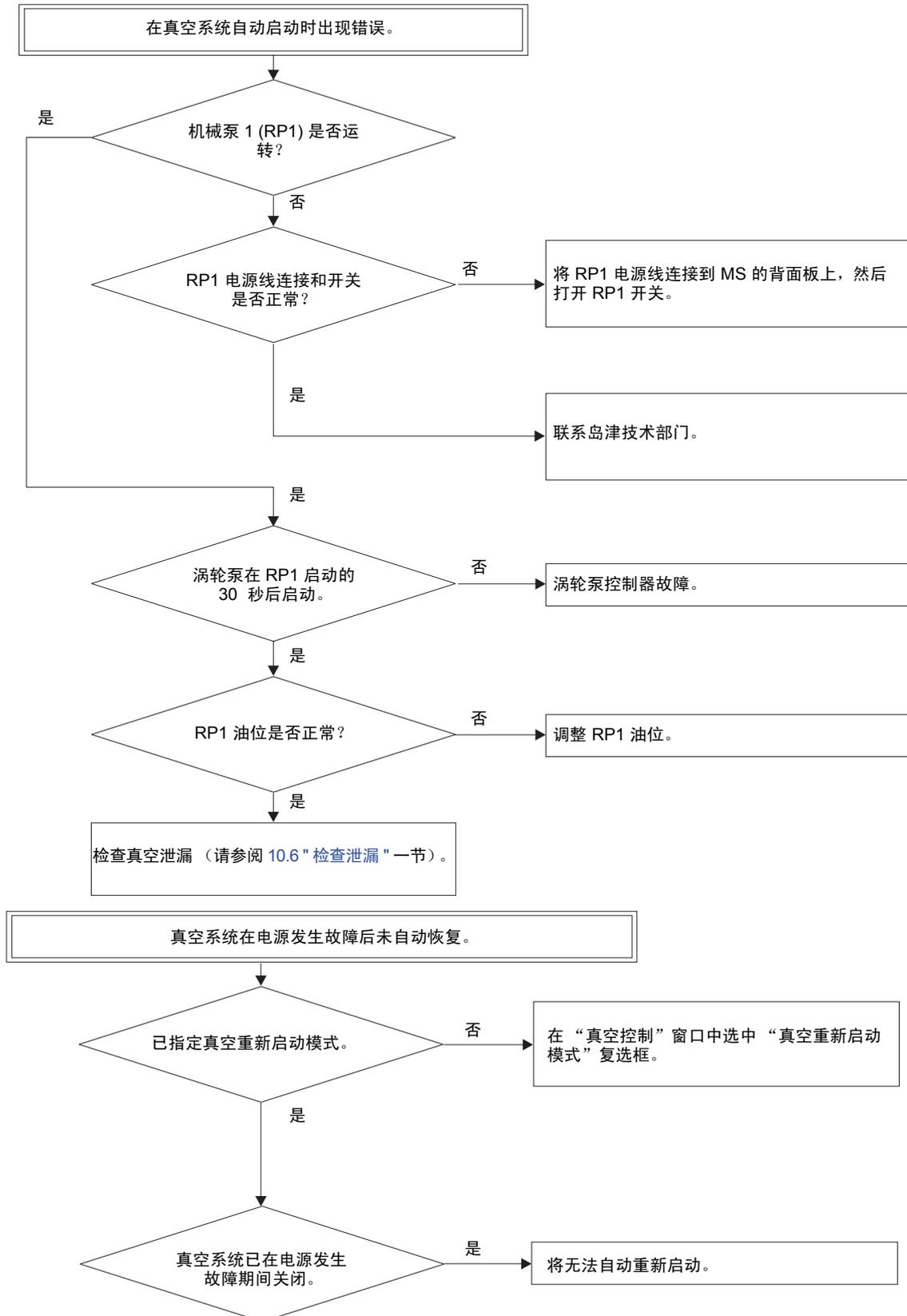


图 11.3 真空系统启动错误



11.1.4 MS 灯丝打开错误

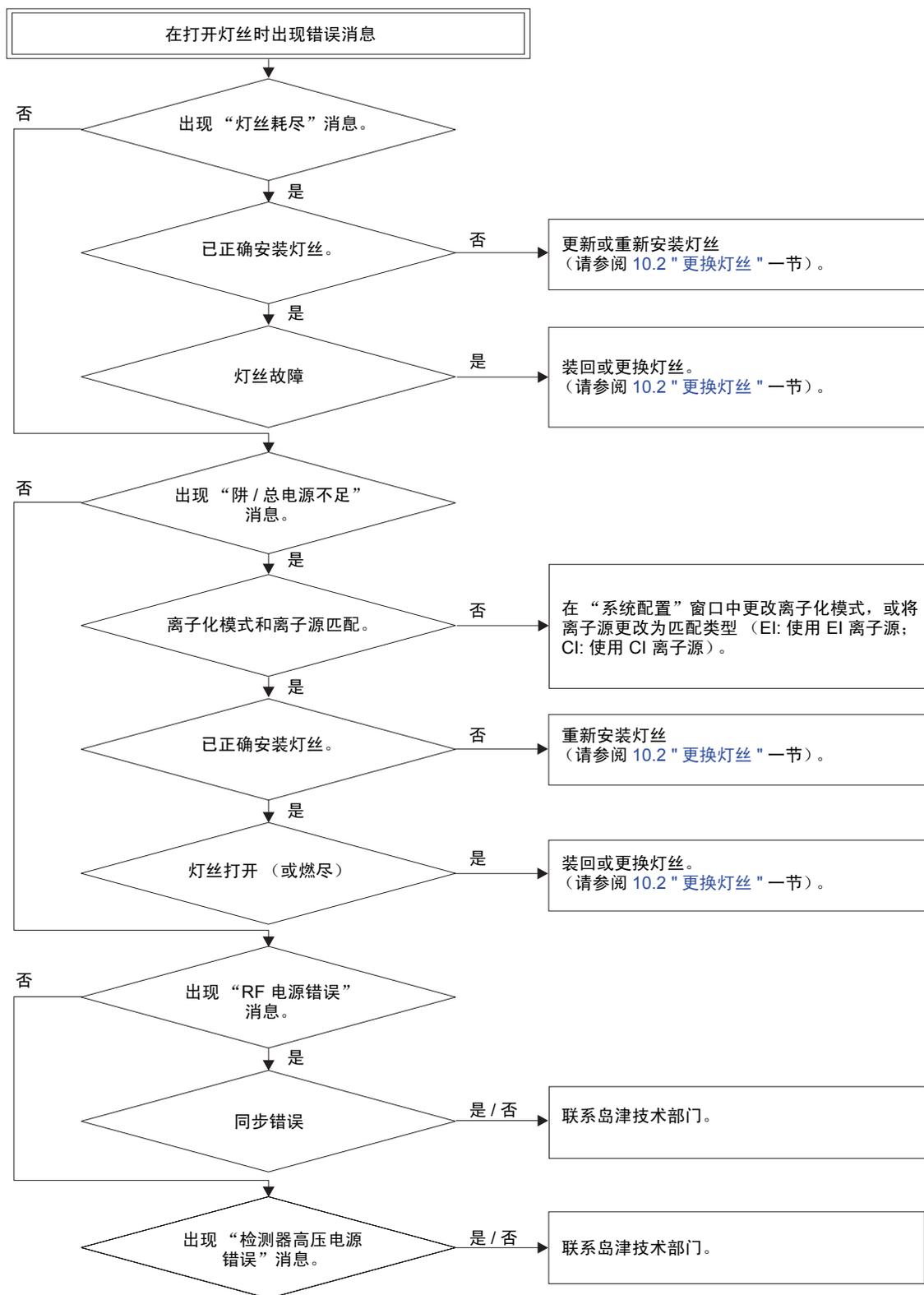


图 11.4 MS 灯丝打开错误



11.1.5 自动调谐和分析错误

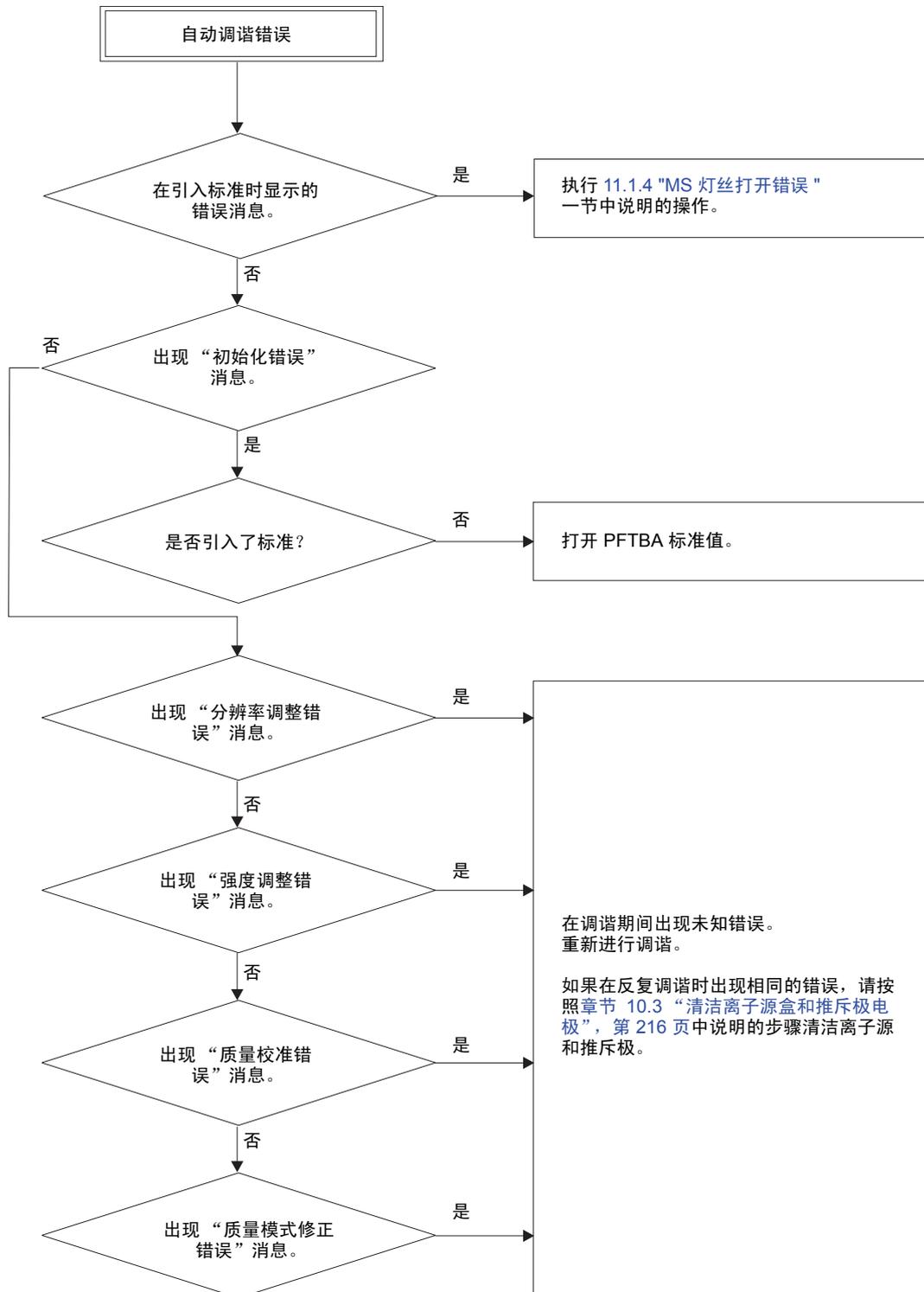
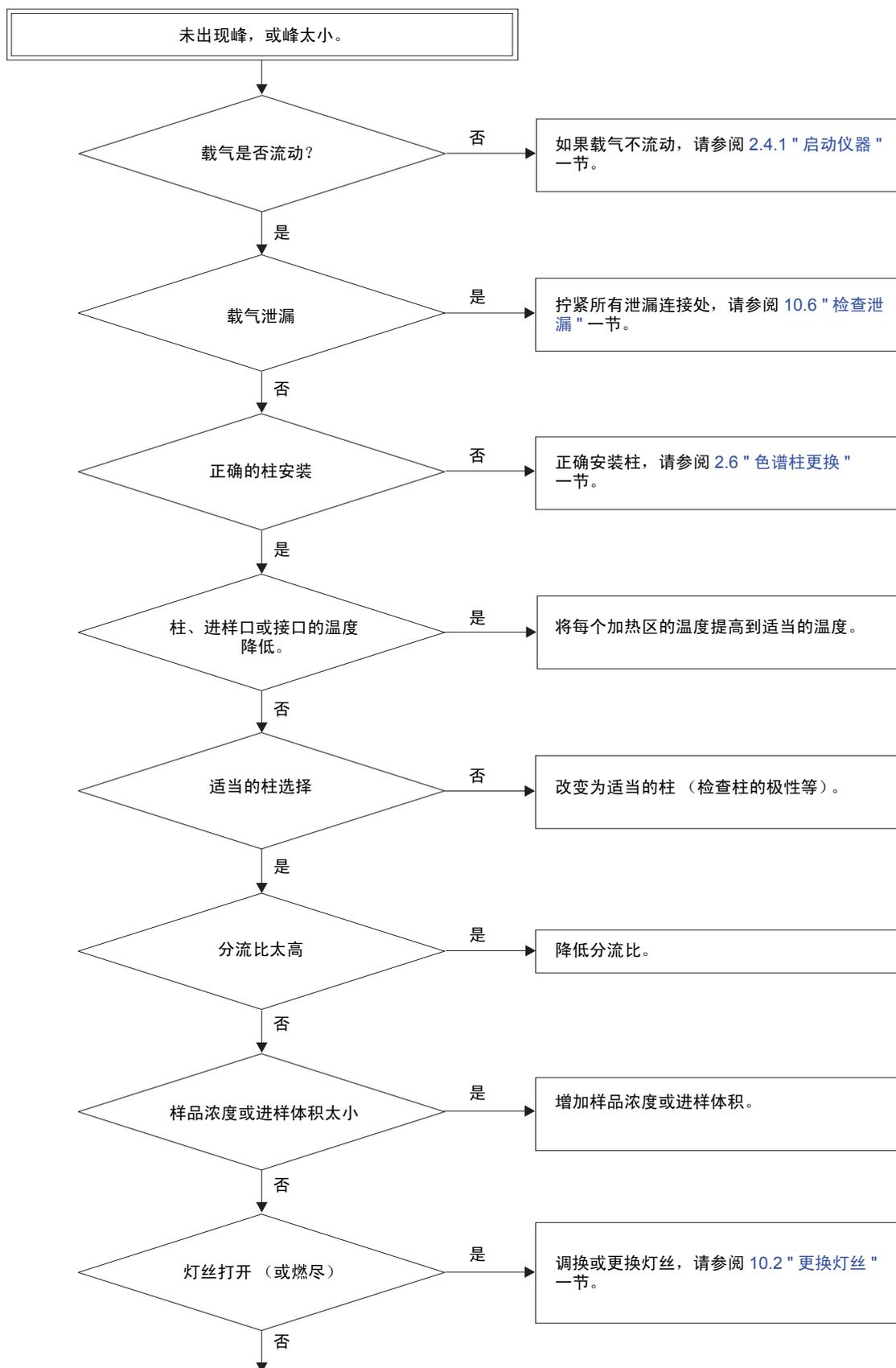


图 11.5 自动调谐错误



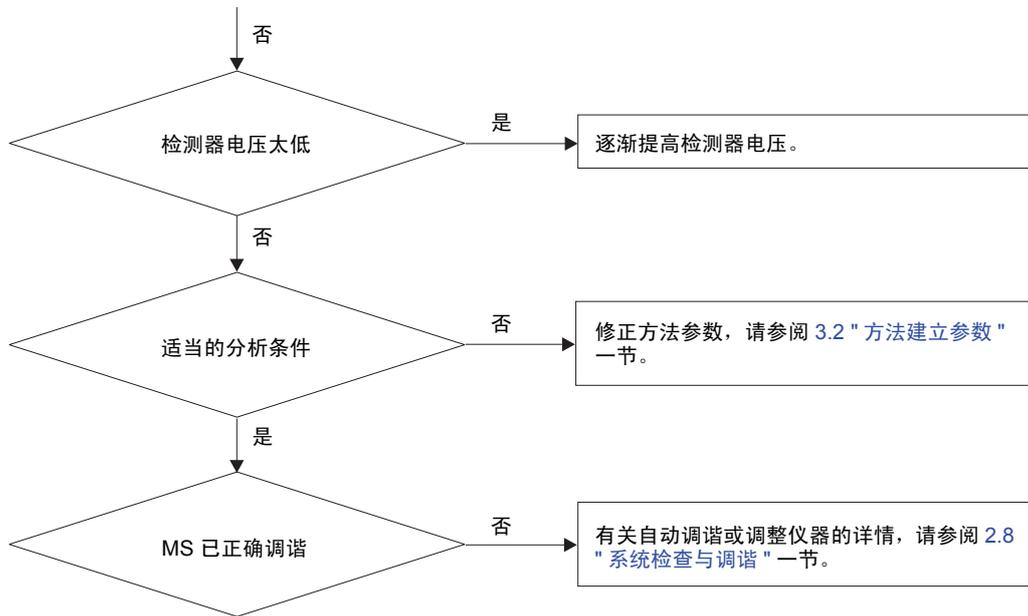


图 11.6 没有峰或峰太小

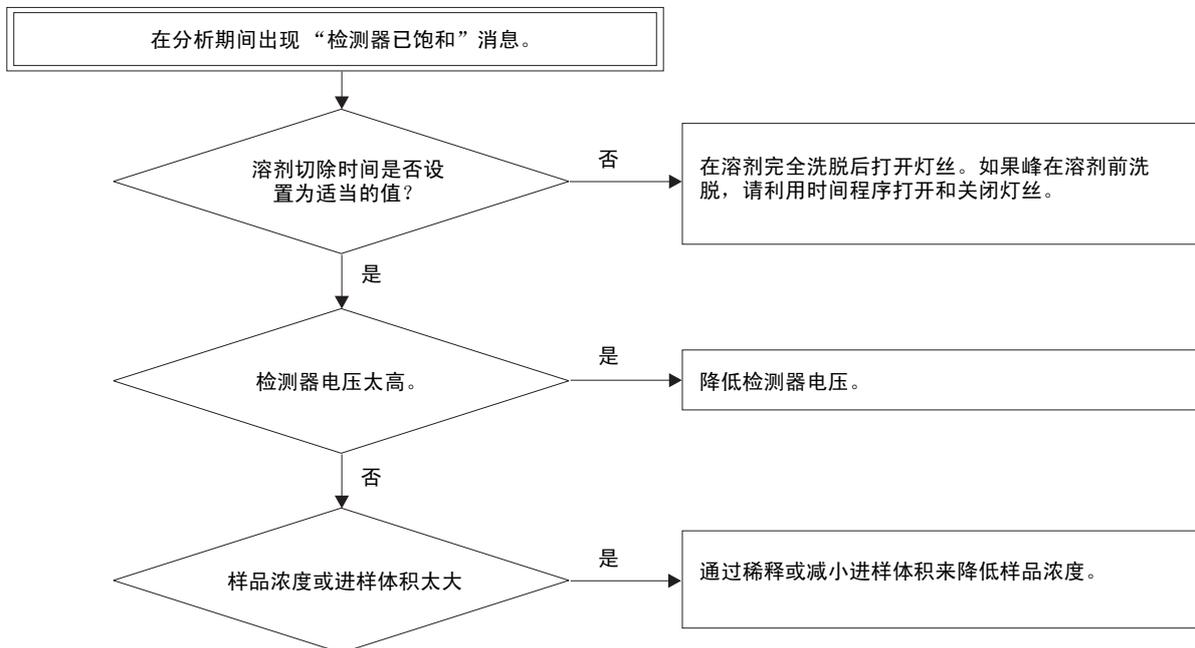


图 11.7 分析错误

11.2

真空系统保护功能

本节中说明在真空系统中检测到某些异常时可采用的保护功能。

11.2.1 概述

在 GCMS-QP2010 Plus 中，抽真空期间将对三个项目进行监测。如果检测到某些异常现象会出现系统保护。

- 涡轮分子泵的状态。
- 涡轮分子泵的反压。（“仪器监测器”中的低真空显示反压）
- 分析室真空。（“仪器监测器”中的高真空显示真空）
- 如果在“系统配置”窗口中将“离子真空计”设置为“无”，将不显示高真空。

11.2.2 保护功能

1. 在以下情况下，灯丝、检测器高电压和 RF 电源将关闭：

- (1) 低真空（通过派蓝尼 (Pirani) 真空计监测）超过 100.0 Pa。
- (2) 涡轮分子泵不是处于“就绪”状态。
- (3) 高真空（通过电离真空计监测）超过 $1.0E-2$ Pa。

在以下条件下，灯丝、检测器高电压和 RF 电压将重新打开。

- (1) 低真空（通过派蓝尼 (Pirani) 真空计监测）低于 80.0 Pa。
- (2) 涡轮分子泵处于“就绪”状态。
- (3) 高真空（通过电离真空计监测）低于 $0.8E-2$ Pa。

2. 如果以下一种或多种情况持续时间超过 5 分钟，真空系统将自动停止。

- (1) 低真空（通过派蓝尼 (Pirani) 真空计监测）超过 100.0 Pa。
- (2) 涡轮分子泵不是处于“就绪”状态。

真空系统 LED 指示灯在真空系统停止时亮红色并闪烁。

A.1

积分和峰处理参数

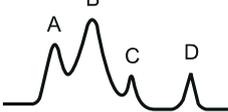
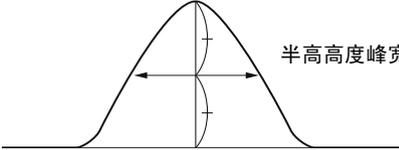
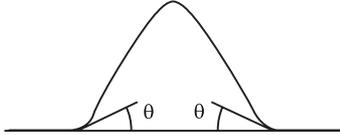
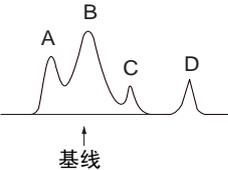
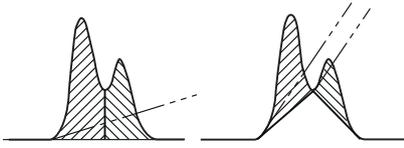
本节中说明峰检测算法并解释可以执行的峰处理的类型。说明的参数可以组合使用以正确检测并鉴别峰。

A.1.1 积分参数

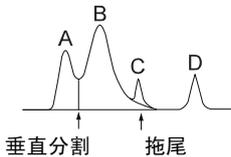
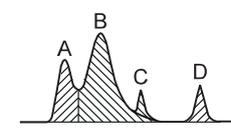
在下表中，峰处理参数按照在处理过程中出现的顺序进行描述。必要时指定设置范围。缺省值在圆括号中显示。

通常，参数的缺省值可用于正确地检测峰。对于复杂的色谱图，通过参照[章节 A.5.1 “峰处理”](#)，[第 300 页](#)确定最优值。



峰的处理顺序	参数	功能描述范围 (缺省值)	注释
峰检测 	峰宽	最小峰宽 0.04 - 200 秒 (2.0 秒)	设置的峰宽为分析期间出现的最窄峰的半高高度。 
	斜率	峰检测灵敏度 0 - 4E+11 /min. (100.0 /min.)	峰检测的灵敏度 斜率 = $\tan \theta$ 
	峰处理模式	自动 (面积) 自动 (高度) 详细	斜率会自动调整, 以便得到指定的峰数量。 如果在调整斜率后未得到指定的峰数量, 将包括具有最大面积的峰直到得到指定的峰数量。 斜率会自动调整, 以便得到指定的峰数量。 如果在调整斜率后未得到指定的峰数量, 将包括最高峰直到得到指定的峰数量。 设置参数。如果在自动模式下执行峰处理, 最终斜率值可在质谱处理表中确认。
	峰数	检测到的最大峰数 (5)	如果在自动模式下进行峰处理, 可以指定要检测的峰数。对于某些类型的色谱图, 峰数可能达不到指定的数量。
基线处理 	漂移	基线起伏的大小 -1E+7 - 1E+7 /min (0.0 = 自动处理)	峰与基线漂移之间的区别  如果漂移设置为 0, 将自动执行基线修正。



峰的处理顺序	参数	功能描述范围 (缺省值)	注释
分离度差的峰的处理  峰面积测量 	无	自动	如果峰未充分分离（共流出），它们通常会通过画出一条与峰和峰之间的基线及峰谷垂直的垂直线来进行分割。取决于峰与峰之间的峰谷宽度，它们可能会通过基线分割。
其它	T.DBL.	宽度和斜率改变时间 0 - 10000 分钟 (1000 分钟)	在指定的 T.DBL 时间，峰宽度参数会加倍，并且峰的检测灵敏度参数会减半。当此参数设置为 0 时，将执行自动处理。
	最小面积 / 高度	最小面积 / 高度 $0 - 10^9$ (0)	面积（或高度）小于此值的峰不在相似度检索和定量的范围内。
	平滑方法	无	未执行平滑处理。
		标准 Savitzky-Golay	执行了移动平均 通过 Savitzky-Golay 方法执行了平滑处理。
	平滑宽度	平滑移动平均时间宽度 0 - 200 秒 (0 秒) (3 - 25 点)	对于有噪声的色谱图，在一般的峰处理情况下可能无法正确执行峰检测。在这些情况中，应用移动平均可以执行辅助平滑。此参数指定进行平均的时间范围。 利用 Savitzky-Golay 方法设置平滑点数时只能使用奇数。
平滑次数	平滑重复次数 0 - 99 (0)	可通过重复移动平均过程提高指定色谱图的平滑效果。此参数指定重复的次数。	



A.1.2 峰宽

峰宽是优化峰检测的最重要的峰处理参数。

要设置峰宽，请确定色谱图上要分析的最窄峰。使用小于此峰半高宽度的峰宽值。对于峰宽约为指定峰宽 1/4 的峰进行峰检测。

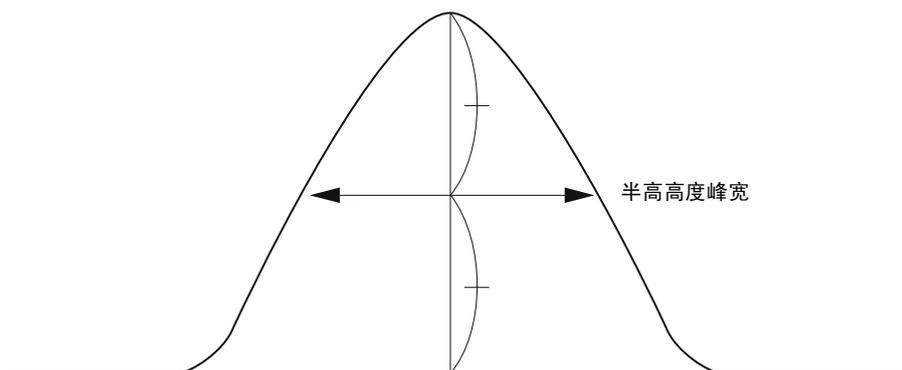


图 A.1 确定半峰宽值

如果峰宽设置不正确，在峰检测和峰面积测量过程中会出错。峰宽参数会极大地改变处理峰的方式。用适合要分析的最窄峰的值来设置此参数。



注

利用峰宽删除不必要的峰
噪声峰通常比目标峰窄。利用最小目标峰的峰宽来确定峰宽值可以从峰处理中消除噪声峰。

A.1.3 斜率

峰检测是利用下图中所示的峰斜率执行的。峰斜率是峰起点处色谱图的线性斜率。

峰起点是当峰斜率大于设置值时确定的位置。反之，峰终点是在斜率小于设置值的负值时确定的位置。

起点和终点可根据峰宽参数的四分之一值来计算。

斜率也叫作峰检测灵敏度。



当斜率值增大时，峰检测灵敏度降低。反之，当斜率值减小时，峰检测灵敏度提高，可以检测平滑的宽峰。

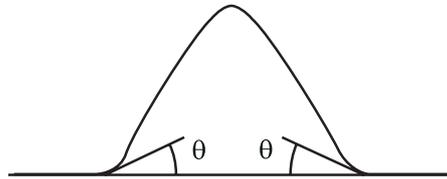


图 A.2 峰检测与斜率



注

斜率值标准

峰处理的最优斜率值取决于如噪声条件和峰宽等因子。对于毛细管 GC，通常会观察到以下值。

斜率 = 最大峰高 / 2000

例如，如果最大峰的高度是 146896，则斜率值将设置为约 70 (/min)。

最大峰高度可以在从“GCMS 再解析”窗口或“色谱图比较”窗口中轻松获得。

如果检测到太多不必要的峰，将斜率值加倍直到获取所需的峰处理。反之，如果未检测到目标峰，将斜率值减半直到它们可以被检测到。



A.1.4 漂移

1. 自动基线处理 (漂移 = 0)

如果基线参数设置为 0，将自动执行基线修正。如果峰之间的峰谷宽度 (T2) 比紧临的前面峰半高处的预计宽度 (T1) 小，两个峰将共流出。峰将按照下一节中所述的处理方法被分割。如果 T2 大于 T1，基线将作调整以分离这两个峰。

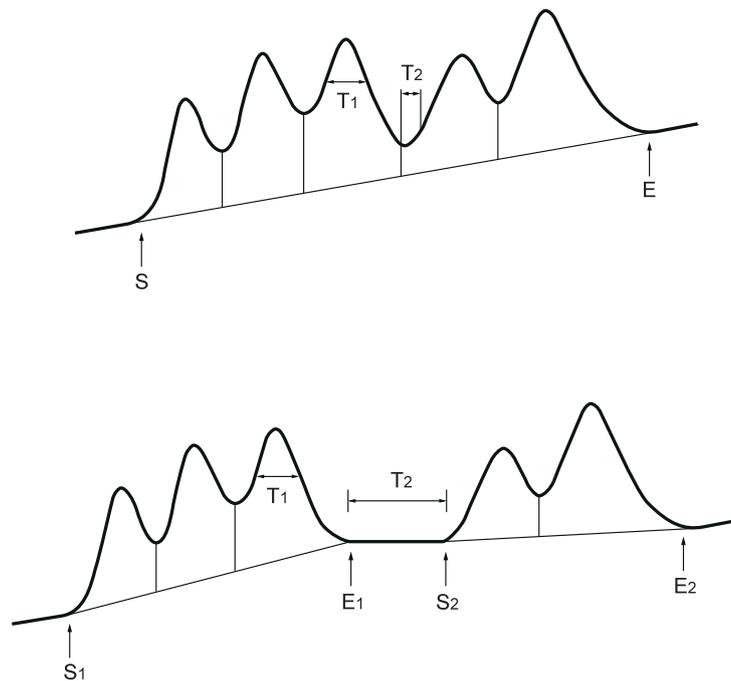


图 A.3 窄峰谷与宽峰谷的自动漂移处理

2. 特定漂移值的基线处理 (漂移 ≠ 0)

在时间程序中为漂移指定非 0 值将导致对要处理的区域进行基线修正，即使该区域中的峰谷宽度 (T2) 很窄。

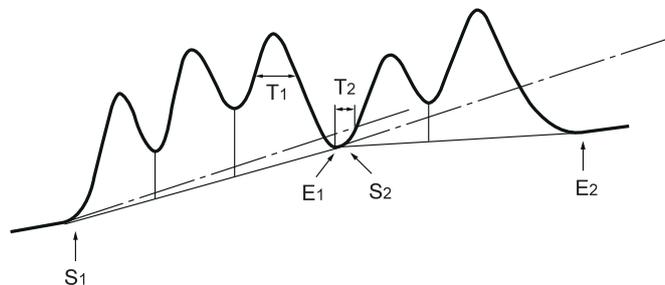


图 A.4 在偏差设置为非 0 值时的基线处理

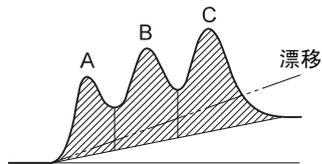


基线修正的方法完全不同漂移值为 0 的方法。用漂移值设置的斜率从峰起点 (S) 处起沿点线延伸如图所示。当峰终点低于漂移斜率线时即确定了修正的基线。

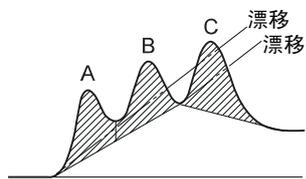


注

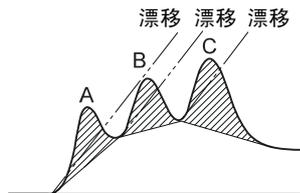
1. 漂移参数的变化将导致对于相同的色谱图具有不同的基线，如下所示。



使用较低的漂移设置，三个峰 A、B 和 C 将作为共流出峰处理。



A 和 B 作为共流出峰处理，而 C 作为完全分离峰处理。



使用较高的漂移设置，峰将完全分离。

2. 设置的漂移值要比为出现峰的色谱图部分的基线漂移值略高。

如果漂移设置得太低，峰的终点将落在漂移线以下，从而导致峰被作为共流出解析。



A.1.5 处理共流出峰

通过峰宽、斜率和漂移参数检测到未正确分离的两个或更多峰被认为是共流出。

将自动确定共流峰只是垂直分离或要作为在拖尾区中以更小峰流出的拖尾峰处理。

垂直分离

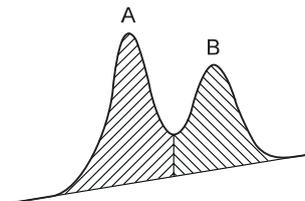


图 A.5 垂直分离

共流出峰通常通过垂直分离进行处理。

拖尾处理

根据两个峰的高度比、峰谷高度及分离条件确定是否使用拖尾处理。然后可以确定拖尾峰和处于尾部的峰。

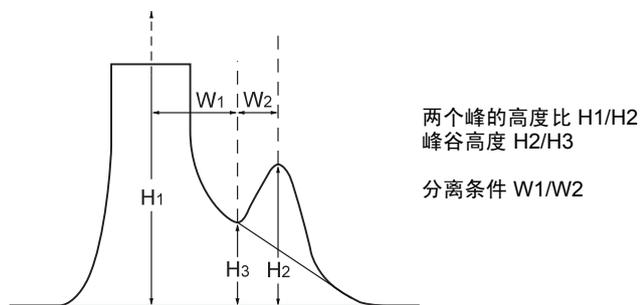


图 A.6 拖尾处理

处理共流出峰

共流出峰的自动处理如下图所示。

A 峰作为拖尾处理，而 B 和 C 峰作为主峰 A 尾部的峰处理。

位于尾部的共流出峰（如 C 峰）通过垂直分离进行处理。



E、F 和 G 峰也是共流出峰，并且通过垂直分离进行处理。

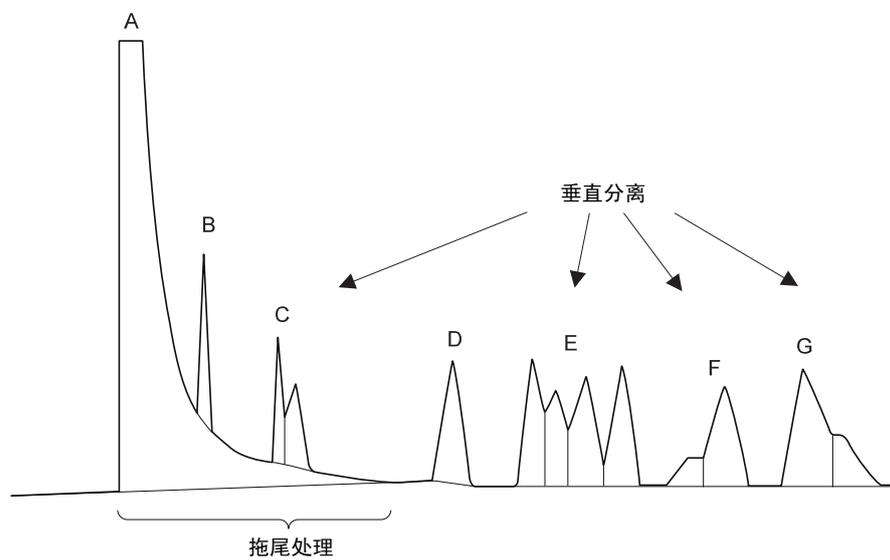


图 A.7 通过垂直分离在尾部处理的共流出峰



A.1.6 T.DBL

1. 峰宽与斜率值自动改变 (T.DBL = 0)

如果 T.DBL 设置为 0，斜率和峰宽参数将根据峰的宽度自动改变。GC 恒温分析中的峰开始较窄，峰宽随时间慢慢变大。初期流出的峰具有很大的斜率，因此需要相对较低的峰检测灵敏度（斜率）；稍后峰变得越来越宽，需要提高峰检测灵敏度。峰宽值也必须随着时间增大以便检测更宽的峰。



图 A.8 斜率和峰宽值在 T.DBL = 0 时自动改变

对于其中的峰宽不随时间增大的色谱图不能使用设置为 0 的 T.DBL（自动），例如在程序升温 GC 分析中。如果宽峰在尖峰出现后变长（在下一个图形中），或在宽峰后出现窄峰，也不应该使用此设置。在这些情况下，将 T.DBL 设置为非 0 值。



图 A.9 使用非 0 的 T.DBL 值

2. 如果将 T.DBL 设置为非 0 值，斜率（峰检测灵敏度）和峰宽（峰半高处的最小峰宽）参数会以 T.DBL 指定的时间间隔通过改变两个因子（如下所示）中的其中一个进行改变。

利用 T.DBL 自动改变斜率和峰宽

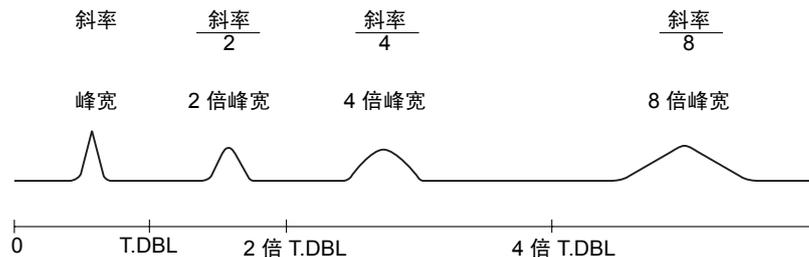


图 A.10 利用 T.DBL 改变斜率和峰宽



注

对于定性处理，每个色谱图最多可以改变 15 个峰宽。对于定量处理，最多可以改变 2 个峰宽，包括在时间程序中改变峰宽或 T.DBL。每个 ID 要计算一个色谱图。

通常，T.DBL 设置为峰到达其两倍于起始峰宽时所需的时间。如果在色谱图上很难找到具有两倍峰宽的峰，此值可以如下进行计算。



图 A.11 在找不到具有双倍峰宽的峰时确定 T.DBL

- (1) 用起始的最尖峰半高峰处的峰宽作为峰宽参数。在此示例中使用了 2 秒。
- (2) 测量保留时间和最后一个小峰在半高峰处的峰宽。使用了 20 分钟的保留时间，以及 30 秒半高峰处的峰宽。
- (3) 增大一倍所需的时间 = (2 秒 / 30 秒 × 20 分钟 × 2) = 2.7 分钟。
通用公式：

$$T.DBL = \frac{\text{第一个峰在半高峰处的峰宽}}{\text{最后一个峰在半高峰处的峰宽}} \times \text{最后一个峰的保留时间} \times 2$$

3. 禁用 T.DBL，使峰宽和斜率值无法自动改变。
对于大多数程序升温 GC 分析，峰宽不会随时间增加，并且峰宽和斜率值不应该自动改变。要禁用 T.DBL，请将其设置为比峰处理最终时间还要长的时间值。



A.1.7 峰处理时间

只能在通过峰处理开始和结束时间指定的间隔时间内进行峰处理。

如果因为峰斜率提高而使峰处理结束，将无法确定峰的面积。

如果因为峰斜率降低而使峰处理结束，峰面积将根据当时的面积确定。

如果因为共流出峰的峰斜率提高而使峰处理结束，则会将前一个峰作为最终峰。在以下示例中，计算的面积用阴影表示。

在一个峰中末端峰处理的影响。

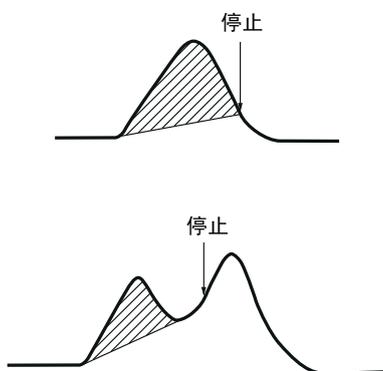


图 A.12 在一个峰中末端峰处理



A.1.8 使用时间程序的峰处理

时间程序可以用作方法的一部分以对几个色谱图重复相同的处理。时间程序可用作例行分析的峰处理方法。

除了以上所述的峰处理参数，时间程序还可用于在指定的时间范围内延迟峰处理、删除不必要的峰以及调整拖尾处理范围。在正常处理期间未作为拖尾处理的峰可以在时间程序中指定为拖尾。

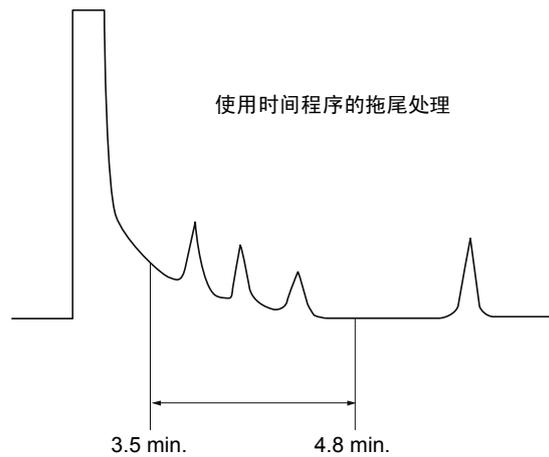


图 A.13 使用时间程序的峰处理



A.1.9 最小面积 / 高度

此参数对峰处理没有直接影响。在根据峰处理参数执行正常的峰处理后，可以利用最小面积 / 高度值来删除以下位置的峰：

- (1) 画出基线、注释和峰检测标记（显示并报告）
- (2) 峰报告
- (3) 质谱处理表
- (4) 定量（或校准）计算

A.1.10 平滑

对于噪声非常大或非常复杂的色谱图，或在正常的峰处理情况下无法正常进行峰检测的情形，应用移动平均可以对色谱图进行平滑处理。

平滑宽度：设置移动平均所需时间内的平均峰宽，以秒为单位。

平滑次数：如果一次移动平均平滑的影响不大，可以重复进行几次平滑。这样可增强移动平均操作的效果。



注

执行平滑时实际色谱图数据会根据移动平均改变。因此，实际色谱图会发生变化。只有在正常峰处理情况下无法处理时才可以考虑使用平滑。

A.2 质谱操作

本节中说明两个质谱编辑功能：平均和背景减除。这两个功能可以在各种情况下提取完整的质谱信息。

A.2.1 质谱背景修正（减除）

通过质谱测量获取的数据将包含与柱背景和残留气体有关的峰。高分离度可以通过毛细管柱获得，但某些峰无法完全分辨。在这些情况下，相邻组分的峰会与目标组分的峰交迭，从而使定性处理变得困难。通过对质谱应用背景减除，可以更准确地完成定性处理。

如下进行背景减除。首先，对于目标和背景两种质谱中出现的质量峰的所有质量取整，以获得整数质量。然后，减除目标和背景质谱中出现的相同整数质量的强度，并且将包含小数位的质量取整得到原始目标质谱中的质量。此时将忽略负值的结果强度。

A.2.2 质谱平均

如果在扫描模式下执行 MS 分析，质谱扫描将从低质量到高质量以线性执行。这将有利于高质量相对丰度或低质量相对丰度，具体取决于峰相对于采集扫描何时洗脱。

例如，在使用 0.5 秒的扫描和 10amu 到 700amu 的质量范围时，从分析质量 10 的强度到分析质量 700 的强度之间的时间是 0.5 秒。取决于峰的真正顶点流出准确时间和扫描的开始时间，质谱会有所不同。低质量强度与高质量强度的比率将根据分析的质谱与实际质谱有所不同。对整个质谱（包括峰顶点）进行平均可以获得更准确的质谱。



质谱平均的处理用于补偿色谱峰的前探侧和拖尾侧以及峰顶点上的相对峰度失真。可以对整个峰的扫描进行平均，或对领先侧和拖尾侧的相同数量扫描与峰顶点进行平均。这样可获得平均质谱，它可反映从离子源中转移到检测器的离子碎片的真实相对丰度。

如下执行质谱平均。首先，对整个质谱中出现的所有质量峰取整得到整数质量。然后，对整数质量的强度累加，除以用于平均的扫描次数。在平均后，包含最大强度的谱图扫描的精确质量赋给了整数质量。

A.2.3 在自动处理期间执行质谱操作和相似度检索

TIC 峰处理会根据在“定性参数”对话框中指定的峰积分和质谱处理参数自动执行。检测到的峰要相应地进行平均或背景减除，并且要对质谱进行编辑。结果保存在质谱处理表中，并且可以在“数据分析”窗口中选中。质谱可以从峰起点到峰终点或对峰顶点进行平均。从下拉列表中选择要减除的背景质谱，该下拉列表中包括了峰起点和终点质谱，或通过对任何所需时间间隔平均后获得的质谱。

对在质谱处理表中列出的已编辑过的质谱执行自动相似度检索。如果同时指定了定性峰处理和相似度检索，将首先执行峰处理，然后执行质谱编辑和相似度检索。如果只指定了相似度检索，则可以在“数据分析”窗口中对质谱处理表中编辑过的质谱自动执行相似度检索。

如果在“GCMS 实时分析”窗口中的“批处理表”中指定了相似度检索，则会同时执行相似度检索和样品分析。因为峰处理的结果与检测到的峰数量事先未知，所以处理速度会很慢。最好通过在“数据分析”窗口中用批处理表再处理获取的数据，以执行自动相似度检索。

A.3 相似度检索参数和功能

本节中说明在相似度检索期间计算谱图之间相似程度的方法；在大型谱库中加速检测的预检索参数；以及检索后参数。

保留时间用于从二维色谱图识别目标组分。首先，分析一个标准，然后将未知峰的保留时间与标准中目标峰的保留时间进行比较。这种识别方法并不是始终可靠的，因为其它峰可以与目标峰同时流出，特别是在复杂的样品中。

通过 GC/MS 分析获得的三维质谱数据，允许根据质谱信息利用相似度检索识别目标组分。对于相似度检索，可以使用根据标准质谱生成的专用谱库或由 NIST、Wiley 等提供的公用谱库。

A.3.1 相似度检索计算

相似度指数（相似程度）是对未知样品与谱库中记录质谱间差别的定量表述。将确定指定质量 (m/z) 的各个质谱峰强度的差别。当数值间的差别缩小时，相似程度增加。

相似度指数 (SI) 是根据以下方程式计算出来。

$$SI = \left(1 - \frac{\sum_{m/z} |I_u(m/z) - I_t(m/z)|}{\sum_{m/z} |I_u(m/z) + I_t(m/z)|} \right) \times 100$$

$I_u(m/z)$: 未知质谱 m/z 的相对质谱强度。

$I_t(m/z)$: 谱库中记录的质谱 m/z 的相对质谱强度。

SI 为 100 表示质谱相同，而 SI 为 0 表示质谱完全不同。



A.3.2 预检索功能

在公用谱库中记录的组分数量通常非常大，因此最好使用预检索缩小检索范围。预检索包括了对未知样品质谱与谱库中记录质谱的简单比较。如果质谱间有明显的差别，将在检索时排除谱库质谱。因此，此功能的作用类似于过滤器。

某些质量很常见，而其它质量则很少见。预检索功能建立在在众多质谱研究的基础上，可以确定哪些质量峰是由大多数类型的分子的碎片生成。根据所有质量的质量峰的频率指定数值。此信息和质量峰强度用于获得未知质谱最具特征的峰的质量。预检索可确定这些质量的离子是否存在于谱库中记录的质谱中。

有一些罕见质量的质谱峰。如果这些质量的峰高于特定强度，质谱峰将作为未知质谱的最具特征的峰。此信息用于创建根据相似度检索算法处理的组分列表。

A.3.3 相似度检索参数

在实际检索中使用了三个参数：最小相似度、检索深度和命中数。

如上所述，相似度指数以定量方式描述了谱库中记录质谱与未知组分质谱的差别。因为具有很低相似度的组分无关紧要，因此具有低于特定值的相似度指数的谱库组分将从检索结果中排除。

“检索深度”设置每个检索的范围。检索深度为 1 限制只对最具特征和第二最具特征的质谱峰进行研究。检索深度为 2 将对最具特征的质谱峰和第二及第三最具特征的质谱峰进行研究。随着检索深度的增加，在研究期间要考虑的数据量也会随着对记录的谱库质谱的相似度计算而增加。预检索的效用类似于过滤器的过滤作用；结果造成需要更长时间才能完成的更大检索范围。

通常，检索深度设置为 1 已足够。但是，如果计算的相似度指数非常低，或在对含有较高杂质含量的质谱进行谱库检索时，则有必要提高检索深度。

通过具有最大计算相似度的质谱获得的命中数会按顺序在“相似度检索结果”窗口中显示。



A.3.4 检索后处理功能

当对未知组分的分子量或碳原子数量非常清楚时，可以执行检索后处理操作。例如，如果知道组分的分子量，将只根据分子量范围内的组分生成命中数列表。

用于检索后处理的参数有：分子量、化合物名称、分子式、类标志、保留指数和基峰。检索后处理可以结合使用这六个参数执行。

保留指数

峰保留时间的绝对值会根据分析条件而改变。因此，可以通过使特定组分保留时间与标准峰保留时间成比例的方法统一表述特定组分的流出顺序。该比例叫作保留指数 (I_x)，可以由以下公式计算得出。

恒温分析：

$$I_x = \frac{\log\{(t_x - t_m)/(t_n - t_m)\}}{\log\{(t_{n+1} - t_m)/(t_n - t_m)\}} \times 100 + (n \times 100)$$

程序升温分析：

$$I_x = \frac{(t_x - t_n)}{(t_{n+1} - t_n)}$$

其中：

t_x: 要分析的组分的保留时间

t_n: 碳数为 n 在被检化合物前洗脱的正构烷烃峰的保留时间

t_{n+1}: 碳数为 n+1 在被检化合物后洗脱的正构烷烃峰的保留时间

t_m: 甲烷保留时间

A.4 峰的认识、定量计算和校准

有三个与定量直接相关的定量处理功能：峰识别、定量和校准。本节中说明这三种功能和分配给每个组分的 ID 号。

A.4.1 ID 号

必须为每个组分指定识别、校准和定量参数以便执行由 GC 分离的组分的定量。ID 号是分配给每个组分的号码，便于单独指定以上所列的参数。

尽管 ID 号无需遵守峰的流出顺序，但这样做会使对组分信息的操作更加容易。

A.4.2 峰识别

在根据组分表处理峰时，峰识别用于确定哪些峰是目标峰。这可根据峰保留时间和目标离子与参考离子的强度比率来确定。如果均符合识别条件，峰将被识别成目标组分。

1. 根据保留时间识别

(1) 绝对保留时间方法

目标峰根据标准保留时间及其时间窗口或时间段（之前在“组分表”中输入）来识别。根据以下条件公式使用实际组分保留时间并执行识别。

$$\left| \frac{\text{目标峰}}{\text{标准保留时间}} - \frac{\text{目标峰}}{\text{实际保留时间}} \right| < \text{目标峰保留时间窗口或时间段}$$



注

如果有许多峰符合识别条件，则最接近标准保留时间的峰将被识别为目标组分。



(2) 相对保留时间方法

利用相对保留时间方法，可以在为每个峰修正保留时间偏差后执行识别。首先，通过绝对保留时间方法识别指定的参考峰；然后通过以下条件公式识别目标峰。

$$\left| \left(\frac{\text{要识别峰的标准保留时间}}{\text{参考峰的标准保留时间}} - \frac{\text{要识别峰的实际保留时间}}{\text{参考峰的实际保留时间}} \right) \right| < \left(\frac{\text{要识别峰的保留时间窗口或时间段}}{\text{参考峰的实际保留时间}} \right)$$

实际的目标峰保留时间可通过计算基于参考峰保留时间偏差的比率进行修正。修正的保留时间用于识别。

由于使用了 TIC，质量无法用于识别组分。此方法在有几个峰共流出时最有效。参考峰必须是不共流出的独特峰。

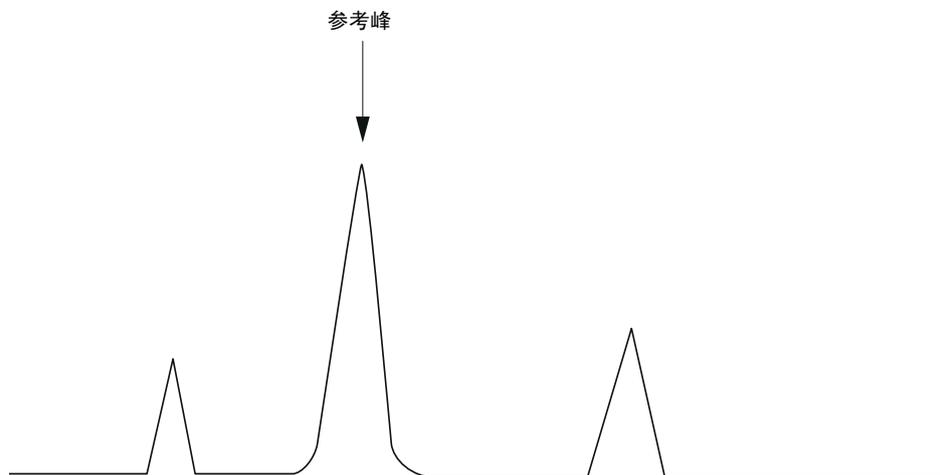


图 A.14 相对保留时间方法



(3) 多重参考相对保留时间方法

对于毛细管程序升温 GC 分析，保留时间偏差通常与保留时间不成比例。通过选择多重参考峰，可以改善对较大保留时间偏差的保留时间修正。峰将被分类到多个区域，并且为每个区域指定参考峰。每个区域中的峰将根据该区域的参考峰识别。

在第一个参考峰之前流出的峰，可通过只使用第一个参考峰的简单相对保留时间来识别。随后的峰可利用修正的保留时间来识别，修正的保留时间是建立在之前和之后的参考峰保留时间偏差的基础上。请参考以下公式。

$$\text{根据保留时间修正的目标峰} = \frac{t - t_1}{t_2 - t_1} \times (T_2 - T_1) + T_1$$

其中：

- t: 目标峰的实际保留时间
- t₁: 参考峰 1 的实际保留时间
- t₂: 参考峰 2 的实际保留时间
- T₁: 参考峰 1 的预计保留时间
- T₂: 参考峰 2 的预计保留时间

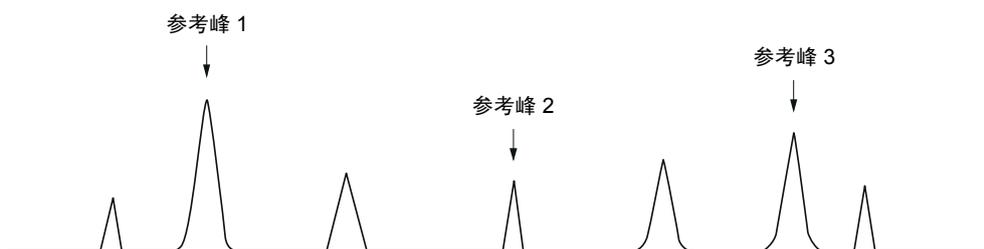


图 A.15 多重参考相对保留时间方法



(4) 窗口方法

保留时间窗口方法为峰指定一个特定的保留时间间隔。此窗口随保留时间增加，如下图中所示。例如，对于 GC 恒温分析，通常有必要随时间增加保留时间窗口。此方法的缺点是为每个组分指定的时间间隔可以与其它组分的窗口交迭。

$$\text{保留时间窗口 (分钟)} = \frac{\text{标准保留时间 (分钟)} \times \text{时间窗口 (\%)} }{100} \times 0.02$$

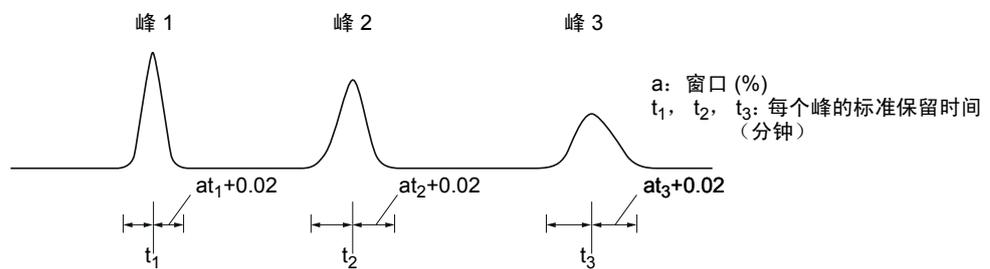


图 A.16 窗口方法

(5) 时间段方法

时间带方法使用针对每个峰的特定保留时间段。此方法的优点是可以为每个峰指定最佳保留时间段。此方法会很耗时，因为它必须对每个峰进行设置。

在程序升温 GC 分析中，峰宽不随时间变化时使用此时间段方法非常有用。

$$\text{允许的时间间隔 (分钟)} = \text{时间段 (分钟)}$$

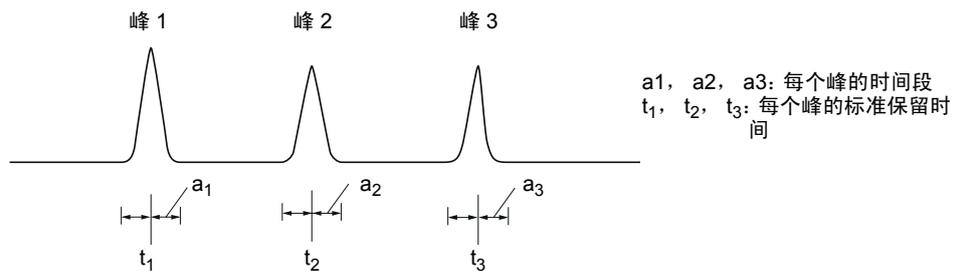


图 A.17 时间段方法



2. 通过离子强度比率识别

在质谱分析中只要分析条件恒定，每个离子碎片的相对强度实际上是不变的，对每个目标组分的值是一个特定。

在分析中，将同时对无数的离子进行分析，并且确定他们的强度比率（峰面积比或高度比），进行组分识别。利用离子强度比率和保留时间可以准确地识别峰。这可避免对具有相似保留时间的杂质错误识别。

对于定量分析，除目标离子外，最多可以指定五个参考离子。在保留时间识别后，将通过确定面积或高度比是否在指定范围内来重新检查组分是否被准确识别。

参考离子强度将根据占目标离子强度的百分比来指定。

绝对误差和相对误差范围

参考离子质谱的确认可以是绝对或相对的。绝对误差根据目标离子的强度指定比率，而不管参考离子的强度。相对误差是根据参考离子的强度指定比率。

绝对误差通常已足够，但如果参考离子的强度非常小，并且该离子对峰的识别非常重要，通过使用相对误差可以提高识别的准确性。

绝对误差范围 (%): $R_i \pm R_w$

相对误差范围 (%): $R_i \pm R_i \cdot R_w/100$

R_i : 与目标离子的参考强度比率 (%)

R_w : 误差范围 (%)



3. 利用谱图匹配进行识别

如果在组分表中记录了标准质谱，将对检测到的峰的质谱进行相似度计算，并且如果相似值超过设置的最小相似值，组分将被识别为目标组分。

4. 分组

通过对具有相似特征的化合物例如异构体或同系物进行分组，根据组确定浓度叫作“分组”。

此软件在“定量参数”中提供了两种可选的分组方法，如下所述。

(1) 组校准

在与组校准有关的分组中，将对已经分组的峰面积和峰高度进行累加，针对每个组画出校准曲线，并且将每个组作为一个整体进行定量计算。

组面积 / 高度如下计算。

组面积 / 高度 = 组中所有组分的总和

(2) 浓度总和

在与浓度总和有关的分组中，将对每个组分画出校准曲线，并且在每个组分进行定量计算后，组中组分的浓度总和将作为组的浓度。



A.4.3 定量计算方法

可以通过六种不同的方法定量。

面积归一化

对检测到的峰面积或高度进行累加，并且将根据总数值确定各个峰面积或高度的百分比。

$$\text{浓度 (\%)} = \frac{A_i}{\sum A_i} \times 100$$

修正的面积归一化

此方法使用外标校准曲线法对各个峰进行定量。对定量值进行累加，并且根据总数值确定各个组分的定量值百分比。

$$\text{浓度 (\%)} = \frac{(A_i - F2_i)/(F1_i)}{\sum \left\{ \frac{(A_i - F2_i)}{F1_i} \right\}} \times 100$$

内标

为每个标准和样品添加内标组分。然后创建校准曲线，明确相对于内标峰的标准目标峰相对灵敏度和质量比。然后将这个校准曲线应用于未知峰的面积比或高度比来计算目标组分的定量值。这个方法考虑了分析条件的变化。

$$\text{浓度} = \frac{A_i/(A_{IS} - F2_i)}{F1_i} \times \frac{W_{IS}}{W_{spl}} \times DF$$



外标（绝对校准曲线方法）

此方法通过根据标准中组分的绝对质量或浓度与其峰面积或高度之间的关系创建校准曲线，从而确定目标组分的浓度。未知样品在相同条件下分析，然后校准曲线应用于未知峰的面积或高度。未知样品的分析条件必须与标准品的分析条件完全相同。由于方法精度依赖于样品的进样体积，因此进样量要一致。

$$\text{浓度} = \frac{A_i - F2_i}{F1_i} \times \frac{DF}{W_{spl}}$$

带比例因子的修正面积归一化

此方法用总面积或高度作为比例因子（稀释倍数）值计算峰的浓度，而非总值为 100。

$$\text{浓度} = \frac{(A_i - F2_i)/(F1_i)}{\sum \left\{ \frac{(A_i - F2_i)}{F1_i} \right\}} \times SF$$

其中：

A_i : 峰面积（高度）

$F1_i$: 斜率修正因子

$F2_i$: 常量（截距）

W_{spl} : 样品数量

W_{IS} : 内标量

DF: 稀释倍数

SF: 比例因子（使用稀释倍数值）

标准加入法

基质效应指计算目标组分的浓度时共存的组分可能产生的偏差。标准添加方法通过在相同量的样品中加入不同浓度的已知测试组分并计算样品浓度，可以解决此问题。这可以通过准备几瓶样品来完成：一瓶未添加，其它瓶添加不同的标准浓度。经过分析后，在水平轴上用添加的标准量创建校准曲线，垂直轴上是峰面积或峰高。利用此校准曲线执行样品定量。



A.4.4 校准

通过分析已知的标准浓度，可以创建样品曲线并用于定量。

校准曲线的横轴表示组分量（使用内标时与内标的比率）。纵轴表示面积或高度（使用内标时与内标的比率）。将画出线性或点对点曲线。

如果需要，可以让校准曲线通过原点（平均 RF 曲线除外，此曲线必须通过原点）。

校准曲线可以分成四类。

线性

最多可分析 64 个不同标准的浓度，并且将通过最小二乘法计算线性校准曲线。

如果只有一个校准级别，将通过一个点和原点建立直线。

如果有两个或更多校准级别，并且曲线不通过原点，将通过这两个点建立一条线性校准曲线。

在其它情况下，将利用最小二乘法画出线性曲线。

每个点最多可由 10 个单次分析的平均得到。

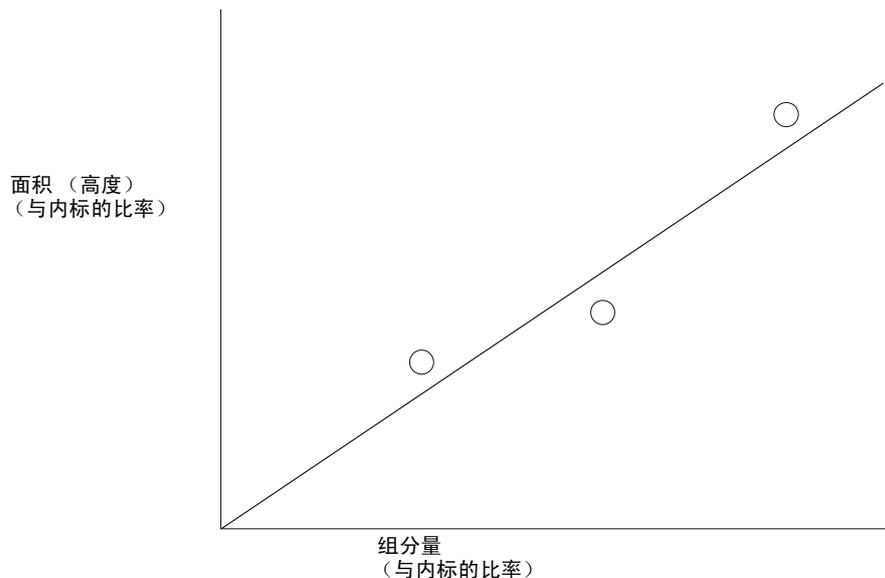


图 A.18 线性校准曲线



二次方 / 立方

最多将分析 64 个不同的标准浓度，并且将根据最小二乘方法画出二阶（二次方）或三阶（立方）曲线。

对于二次方曲线，将需要三个或更多的校准点。如果有两个或更少的点时，曲线将被作为线性计算。

对于立方曲线，将需要四个或更多的校准点。有三个点时曲线被作为二次方程计算，两个或更少的点时曲线被作为线性计算。

每个点表示最多 10 个单次分析的平均。

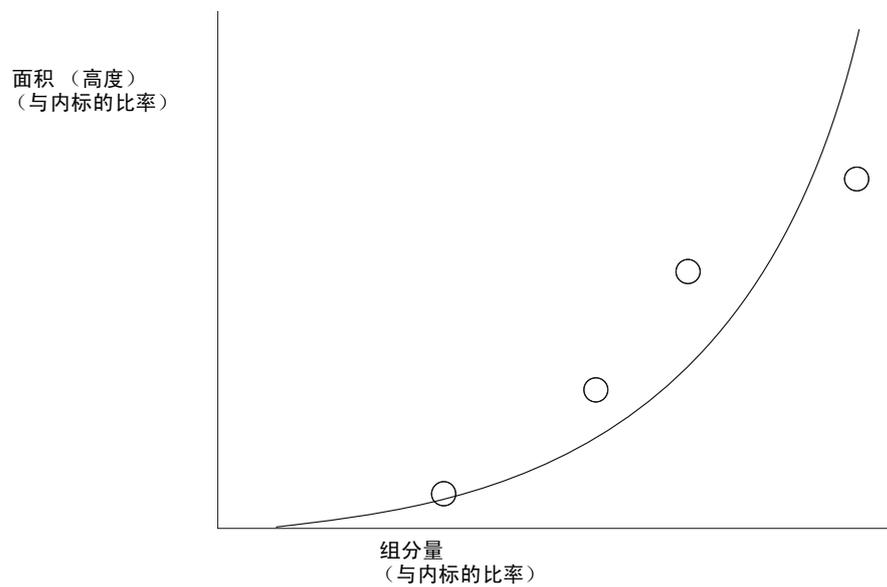


图 A.19 二次方 / 立方校准曲线



点对点

最多将分析 64 个不同的标准浓度，并且创建点对点校准曲线。用点对点法校准曲线时，定量表中不显示曲线拟合常数，并且无法输入任何内容。

如果只有一个校准级别，将通过该点和原点画出一条直线。

如果有两个或多个校准级别，将画出点对点曲线；起始线必须通过原点。

每个点表示最多 10 个单次分析的平均。

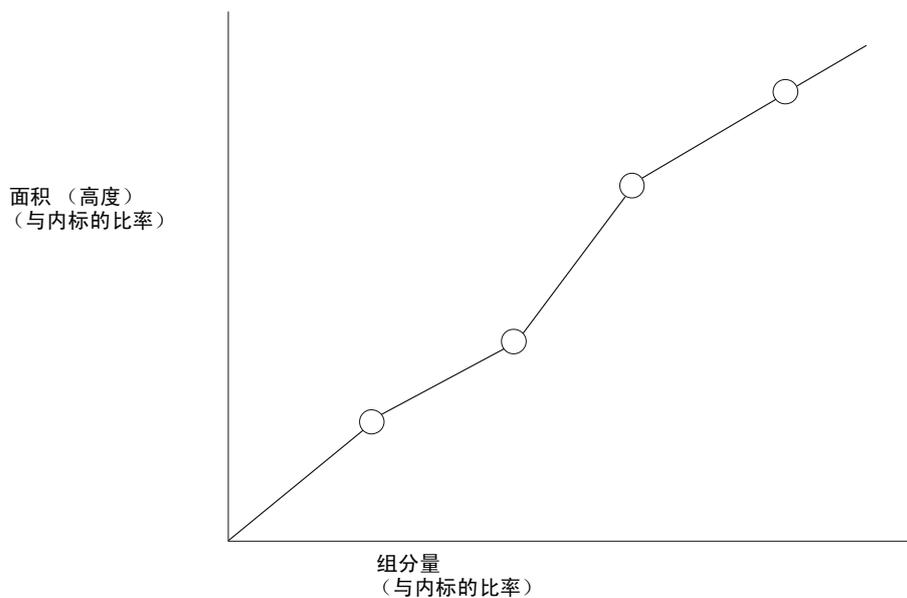


图 A.20 点对点校准曲线



注

只有在确定点对点校准曲线后，校准曲线常数才不会在校准曲线窗口中显示。而且，校准曲线常数无法输入。



平均 RF

将对最多 64 个具有不同浓度的标准进行分析。首先，对通过每个点和原点的线性曲线进行计算。然后，对这些线的斜率系数进行简单的平均。结果的校准曲线必须通过原点。

如果只有一个校准级别，将通过该点和原点画出一条曲线。

每个点表示最多 10 个单次分析的平均。

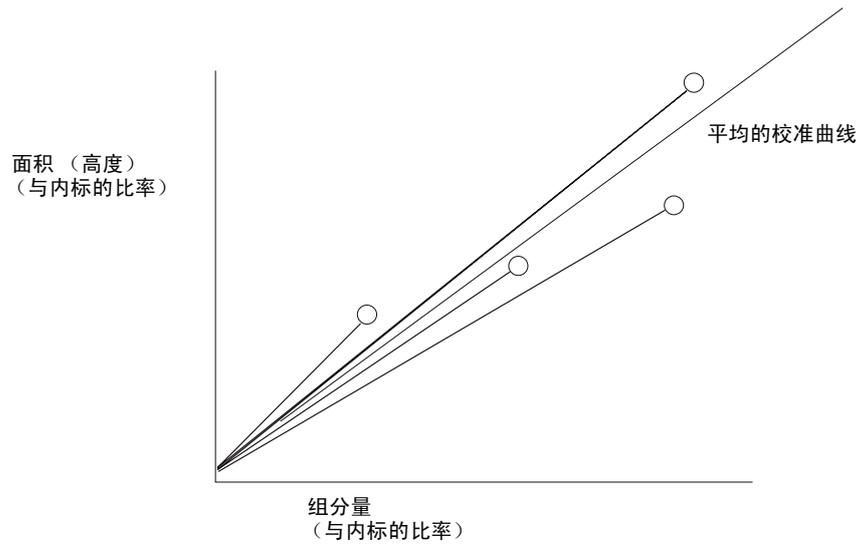


图 A.21 平均 RF 校准曲线

A.5 故障处理

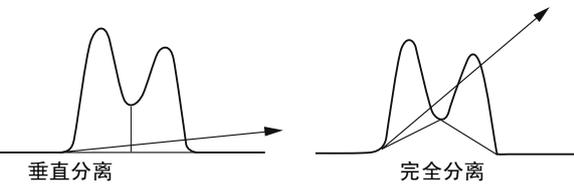
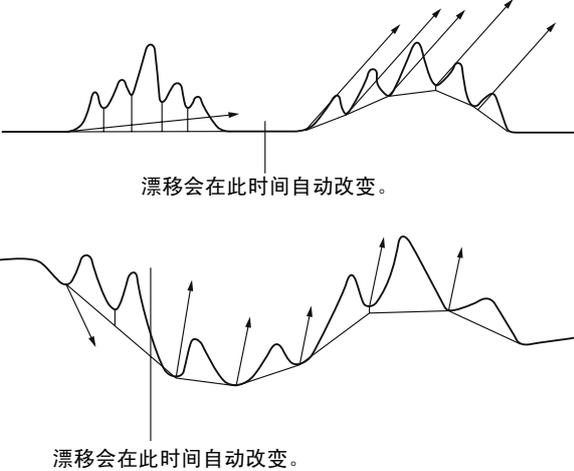
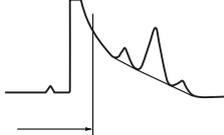
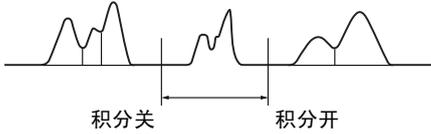
本节中说明峰处理和峰识别问题的解决方案。

A.5.1 峰处理

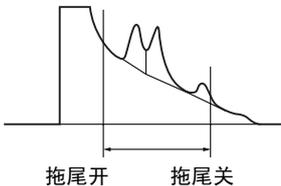
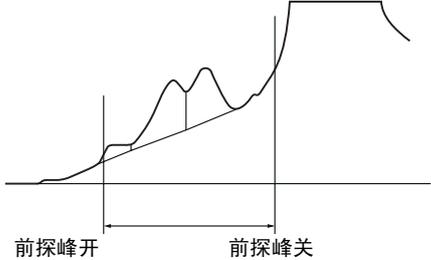
如果未使用峰处理参数方法正确执行峰处理，请根据此表更改峰处理参数设置。可能要必要使用峰时间程序更改特定组分的峰处理参数（例如，当各个组分的信噪比不同时）。

#	问题	参数	解决方案
1	未检测到最窄峰	峰宽 斜率	将峰宽设置为最窄峰半高峰处的宽度。 将斜率降低 1/2，以便增加峰检测的灵敏度。
2	两个或多个峰被检测成一个峰。	峰宽 斜率	将峰宽设置为最窄峰半高峰处的宽度。 将斜率降低 1/2，以便增加峰检测的灵敏度。
3	未检测到在基线开始漂移后流出的峰。	T.DBL	将 T.DBL 设置为使峰宽加倍所需的时间。对于程序升温的 GC 分析，将 T.DBL 设置为较大的值（数据采集结束时）以禁用 T.DBL。
4	检测不到后期流出的宽峰，或在峰流出期间积分终止。	斜率 T.DBL	将斜率降低 1/2，以便增加峰检测的灵敏度。 将 T.DBL 设置为使峰宽加倍所需的时间，不是 0（自动）。
5	未检测到大峰后出现的小峰。	T.DBL	将 T.DBL 设置为使峰宽加倍所需的时间，不是 0（自动）。 将小峰用作参考以选择 T.DBL 值。
6	将较大的基线起伏检测成峰。	斜率	通过按 2 倍、4 倍... 的比率逐渐提高斜率以降低检测灵敏度，直到检测不到基线起伏。根据下图确定色谱图中的斜率值。 
7	计算的基线不一致或基线不稳定。	漂移	1) 如果无法对同一色谱图中的相同峰进行可靠处理，请禁用自动漂移处理。参见问题 8。 2) 如果无法对几个样品中出现的峰进行可靠的峰处理，或如果基线需要计算一致性，请参见问题 8。



#	问题	参数	解决方案
8	基线需要单独计算。	漂移	<p>1) 如下所示设置漂移值。</p>  <p>2) 使用时间程序在不同的时间执行垂直分离或完全分离。</p> 
9	无需对某些峰进行积分。	使用积分关 / 关延迟积分	<p>1) 要删除数据采集开始时出现的不必要的峰（如溶剂峰），请使用时间程序从 0.1 分钟起延迟积分，直到一段时间后出现峰顶点。</p>  <p>2) 时间程序也可以用于在分析期间延迟积分。</p> 



#	问题	参数	解决方案
10	需要对尾部的峰进行拖尾处理 (拖尾处理不会自动执行, 拖尾峰也不会正确出现)。	拖尾开 / 关 / 自动	使用时间程序。设置拖尾, 使尾部的峰谷和峰顶点与尾部的峰一样正确处理。  注: 在执行拖尾处理时, 也必须对主峰积分。不要使用锁定命令对主峰禁用峰处理。
11	峰不会自动进行拖尾处理。	拖尾	使用如上的时间程序, 并且该程序被划分成拖尾开、拖尾关和拖尾自动区域。
12	需要对前伸峰上的较小峰进行前探 (前伸) 处理。	前探 (前伸)	使用时间程序。设置前探开和前探关参数, 以包括在前伸区中的峰以后出现的峰顶点和峰谷。 



注

在未使用自动处理时设置 T.DBL

T.DBL 应该设置成使峰宽大小比原始峰宽大小增加一倍所需的时间。在色谱图上很难确定此时间，按照以下示例计算此时间。



图 A.22 确定 T.DBL 值

- (1) 用起始的最尖峰半高峰处的峰宽作为峰宽设置（正常设置）。在此示例中使用了 2 秒。
- (2) 测量保留时间和最后一个小峰在半高峰处的峰宽。

在此示例中使用了 20 分钟的保留时间和 30 秒的半峰宽。

增大一倍所需的时间 = 2 秒 / 30 秒 × 20 分钟 × 2 = 2.7 分钟。

通用公式：

$$\text{T.DBL} = \frac{\text{第一个峰在半高峰处的峰宽}}{\text{最后一个峰在半高峰处的峰宽}} \times \text{最后一个峰的保留时间} \times 2$$



A.5.2 峰识别

如果未识别目标峰，或如果未正确识别峰，对定量参数进行以下更改或在组分表中更改这些设置。

#	问题	参数	解决方案
1	未识别峰或未正确识别。	保留时间	确保组分表中包含该峰的正确参数。
		窗口	保留时间窗口是否正确？通常设置为约 3 - 5 %。
		时间段	保留时间段是否正确？通常设置为约是峰的半峰宽。
2	识别为错误峰。	最小面积 / 高度	增加最小峰面积 / 高度以排除小峰。
		锁定开 / 关	在时间程序中延迟峰积分（锁定开 / 关）以排除不必要的峰。
		窗口	缩小窗口。
		时间段	缩小时间段。
3	保留时间波动并且导致无法正常识别。	窗口	增大窗口。
		时间段	增大时间段。
4	保留时间漂移导致识别一个或多个峰，或错误地识别峰	相对保留时间方法	在出现保留时间漂移时，使用相对保留时间方法进行识别。选择与其它峰分离的一个大峰作为参考峰。或者，对于复杂的色谱图，多重参考相对保留时间方法使用最多八个参考峰来进行正确的峰识别。

B.1 设置 PDF 输出

当 GCMSsolution 与 Adobe® Acrobat®（一种创建、管理和编辑 PDF 文档的工具）结合使用时，它能够以 PDF (Portable Document Format) 格式输出报告。当使用 CLASS-Agent 时，GCMSsolution 也提供例如输出报告至打印机，将打印图像转换成 PDF 文件，然后发送至 CLASS-Agen 的输出功能。

B.1.1 准备 PDF 输出

在 PDF 输出功能可以使用之前必须安装下列产品。

- Adobe® Acrobat®（版本 5 或更新）

要安装此软件，请遵循在 Acrobat® 安装光盘插入光驱后屏幕自动出现的指令进行标准安装。



注

此软件包不包括 Adobe® Acrobat®，必须单独购买。Adobe® Acrobat Reader™ 包括在 GCMSsolution 安装盘中，仅用于读取 PDF 电子文件。不包括创建 PDF 文件的功能。



注

要使用此软件的 PDF 输出功能，需要安装 Acrobat® Distiller®。
如果使用 Acrobat PDF Writer™，PDF 文件输出可能会失败。

- CLASS-Agent

要使用 CLASS-Agent 制作 PDF 格式的档案，请根据 CLASS-Agent 安装手册进行安装。



B.1.2 安装 PostScript 打印机驱动程序

本章节中的图例是在 Windows 2000 中显示的。其操作与使用 Windows XP 时相似。

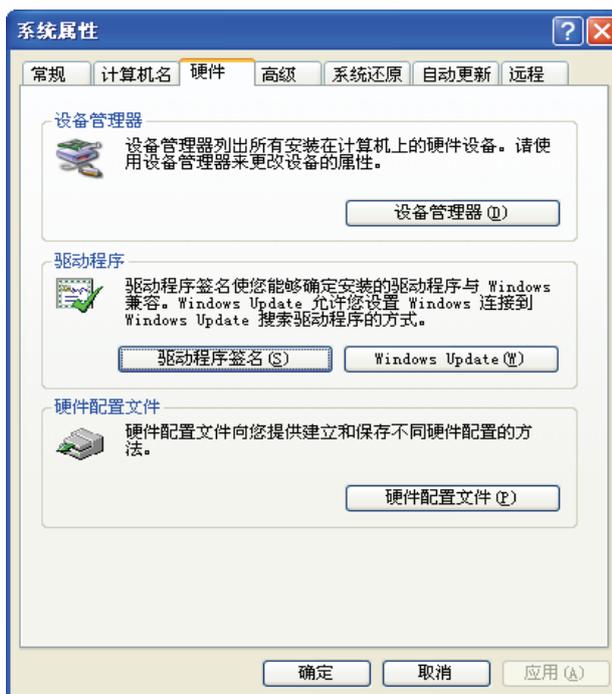
准备安装

1. 在 Windows 中依次选择开始 - 设置和控制面板。在控制面板中选择系统以显示“系统属性”。

在 Windows XP 中，依次选择开始和控制面板。在性能与维护中选择系统以显示“系统属性”。

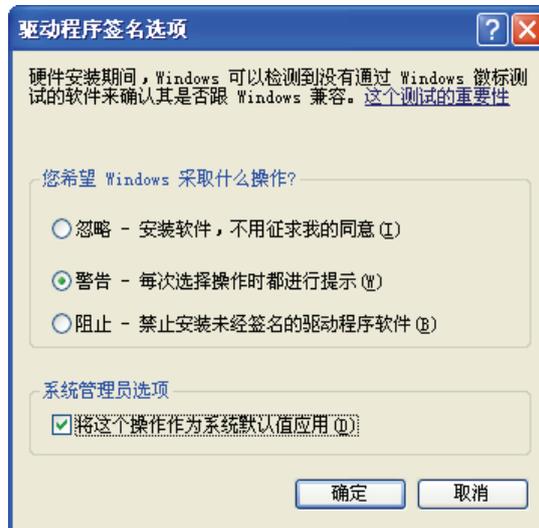


2. 在“系统属性”窗口中选择“硬件”标签，然后单击驱动程序签名按钮。





3. 在“驱动程序签名选项”窗口中的文件签名确认区中取消勾选“阻止”。



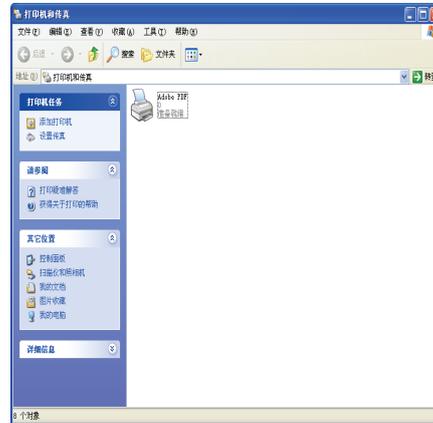
安装 PostScript 打印机驱动程序（适合于 Adobe[®] Acrobat[®] 6.0）

1. 在 Windows 中依次选择开始 - 设置和打印机。
在 Windows XP 中，依次选择开始和打印机和传真。

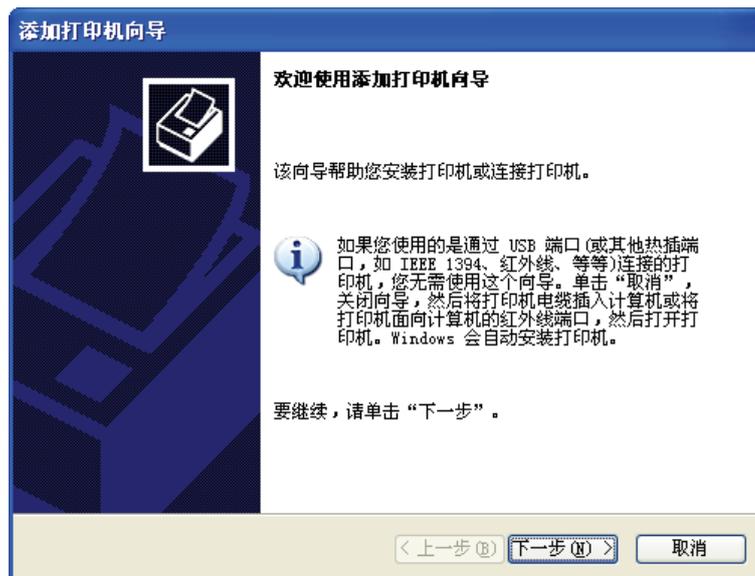




2. 在“打印机”窗口中双击“添加打印机”以启动“添加打印机向导”。
在 Windows XP 中，单击**打印机任务**中的“添加打印机”以启动“添加打印机向导”。

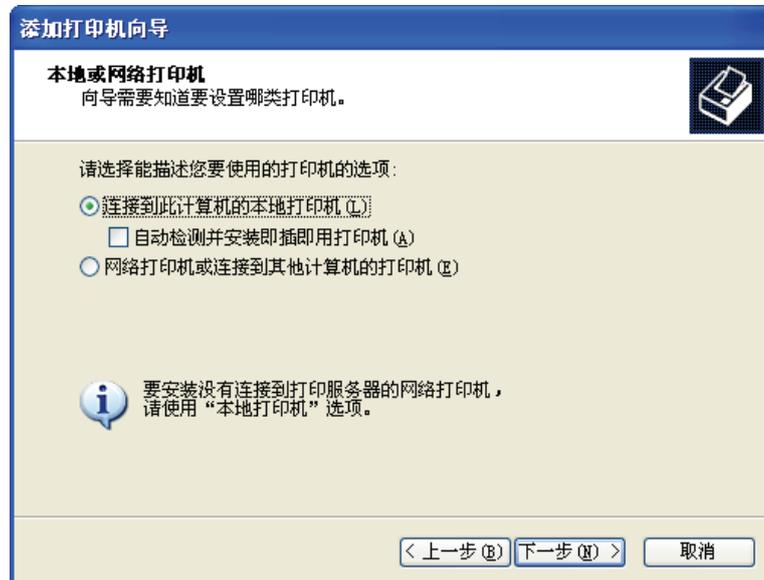


3. 单击“欢迎使用添加打印机向导”窗口中的下一步按钮。





4. 选择“本地或网络打印机”窗口中的“本地打印机”。不要选择“自动检测并安装即插即用打印机”选项。然后单击**下一步**按钮。



5. 选择“选择打印机端口”窗口中的“使用以下端口”并指定“FILE: (打印到文件)”端口。设置完成后，单击**下一步**按钮以继续执行“添加打印机向导”。

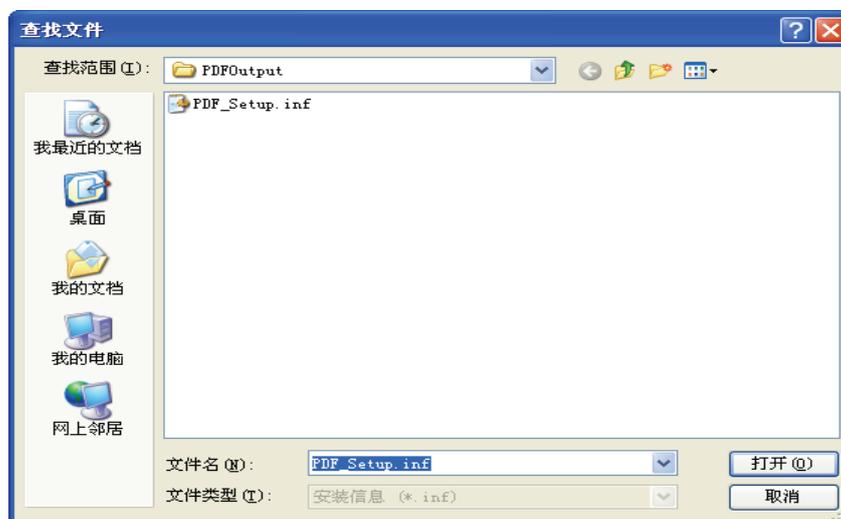
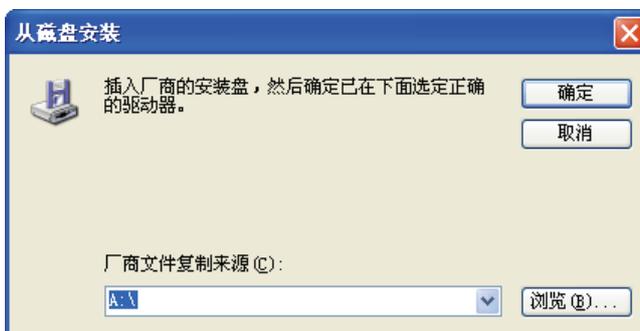




6. 单击“添加打印机向导”窗口中的**从磁盘安装**按钮，显示“从磁盘安装”窗口。



7. 单击“从磁盘安装”窗口中的**浏览**按钮，选择 GCMSsolution 安装盘上“\ENGLISH\PDFOutput”文件夹中的“PDF_Setup.inf”，然后单击**打开**按钮。





8. 检查“从磁盘安装”窗口中的“PDF_Setup.inf”路径是否正确，然后单击**确定**按钮。



9. “添加打印机向导”窗口列出可选择的打印机。从列表中选择“LabSolutions PDF Printer”，然后单击**下一步**按钮。如果列表中未包括所需的打印机，仍可单击**下一步**按钮。



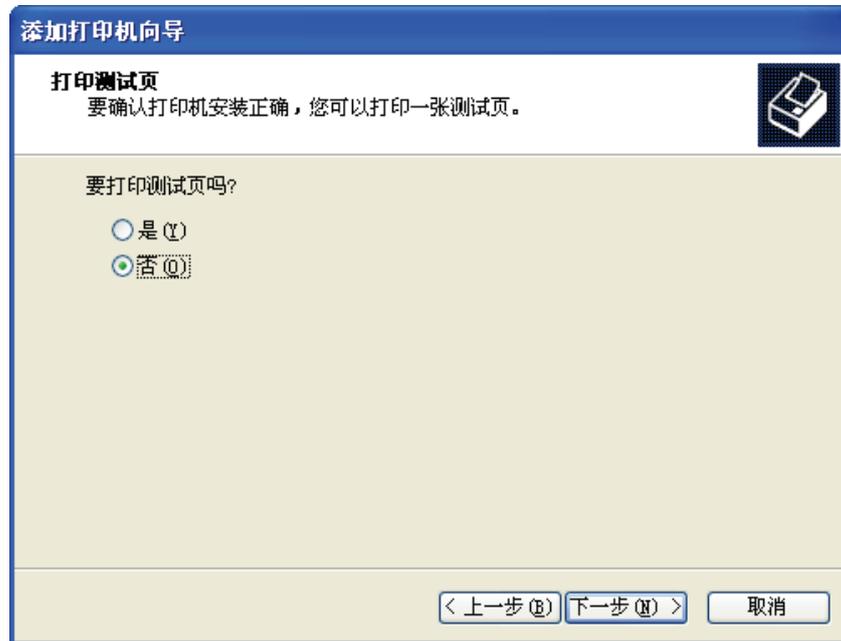


- 10.** 检查步骤 9 中选择的打印机名称是否已在“命名打印机”窗口中正确输入。必要时可在此窗口中编辑打印机名称。为“是否把当前窗口的打印机作为默认打印机？”选项选择“否”。然后单击**下一步**按钮。

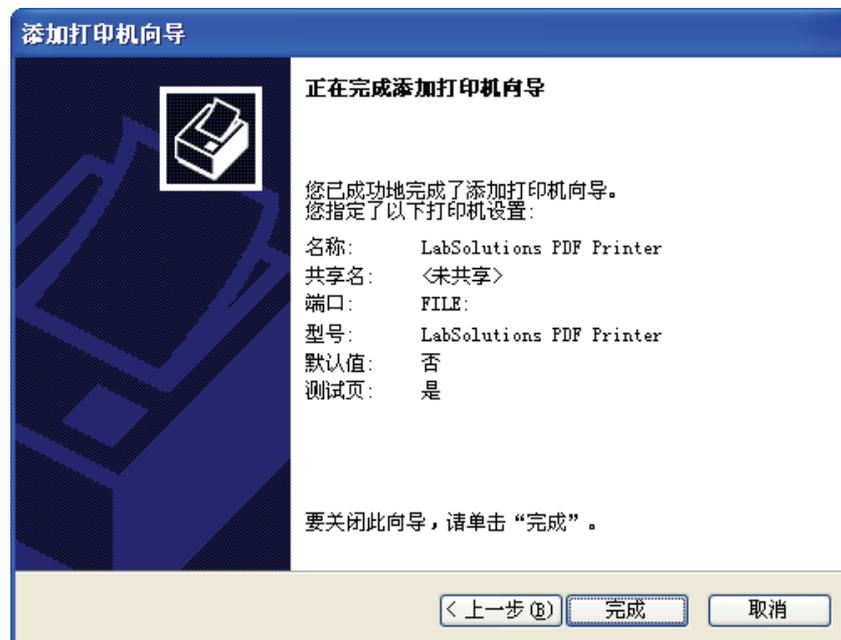




11. 在“打印测试页”窗口中选择“否”，然后单击下一步按钮。

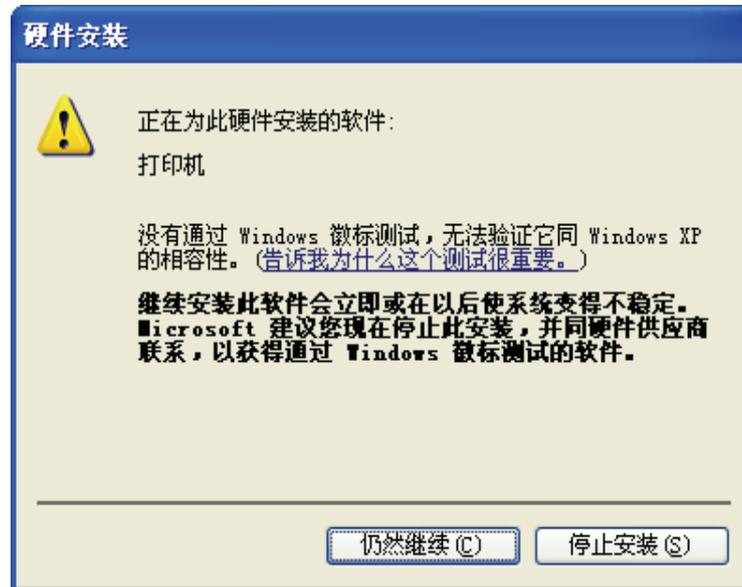


12. 单击完成按钮以退出此向导。



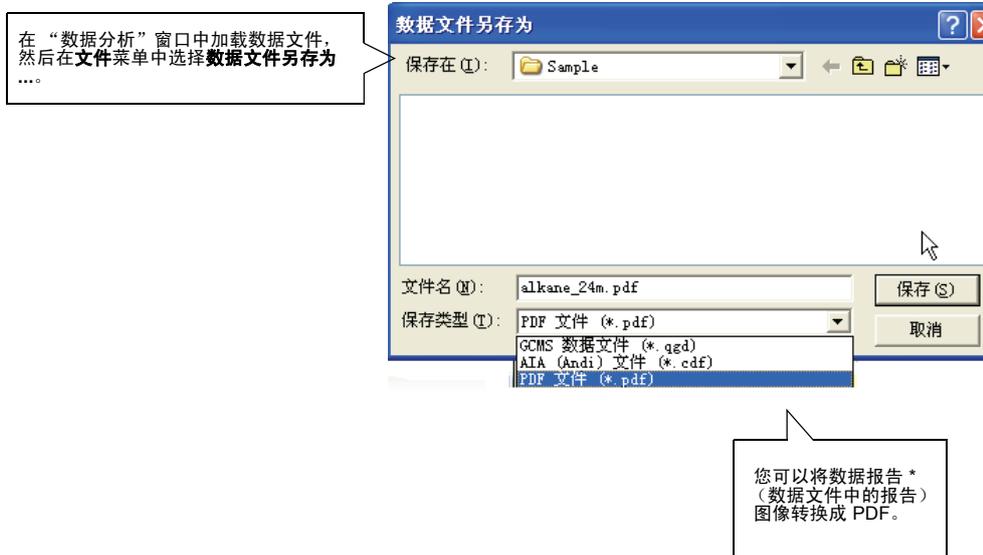


13. 单击**完成**按钮后，可能出现以下警告消息。在此情况下，单击**仍然继续**按钮。安装将成功完成。





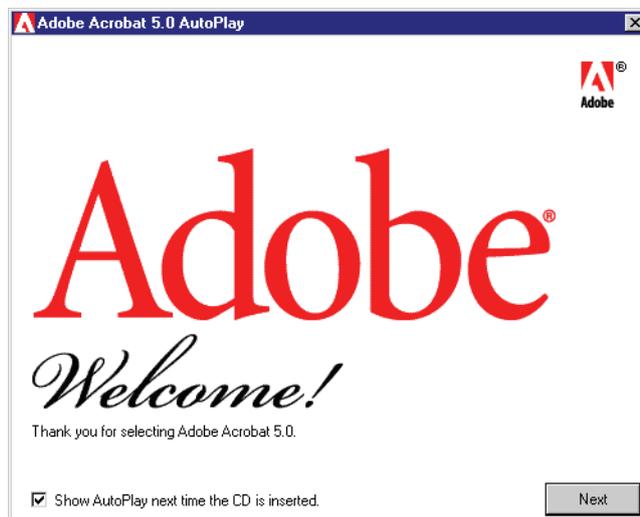
14. 安装完成后，显示 GCMS 后处理屏幕，可在其中查看 PDF 输出设置是否有效。



* 如果将没有记录报告格式的数据转换为 PDF 后保存，将会创建空白的 PDF 文件。

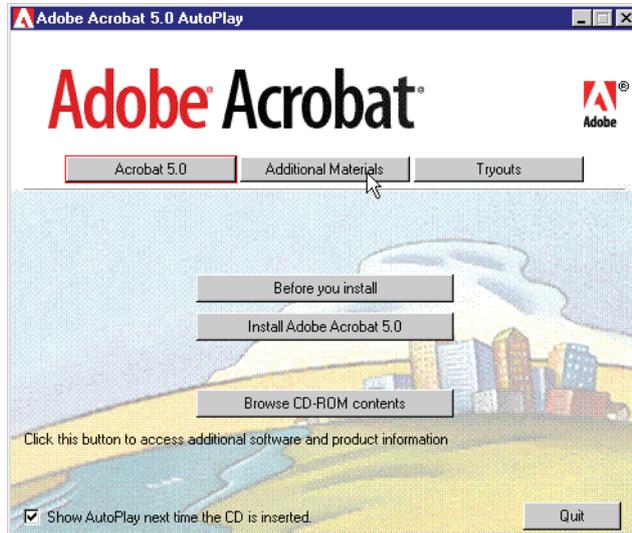
安装 PostScript 打印机驱动程序（适合于 Adobe® Acrobat® 5.0）

1. 在光驱中插入 Acrobat® 产品的光盘时将自动打开一个窗口，在其中单击下一步按钮以继续下一步。

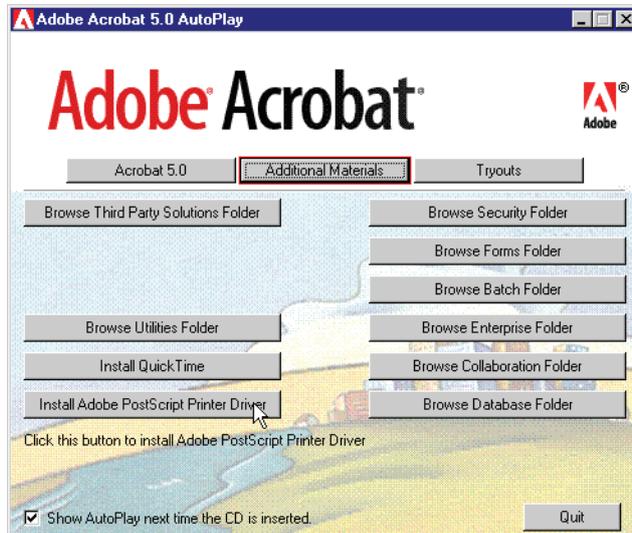




2. 在显示的窗口中，选择 **Additional Material** 按钮。将显示与附加内容有关的按钮列表。

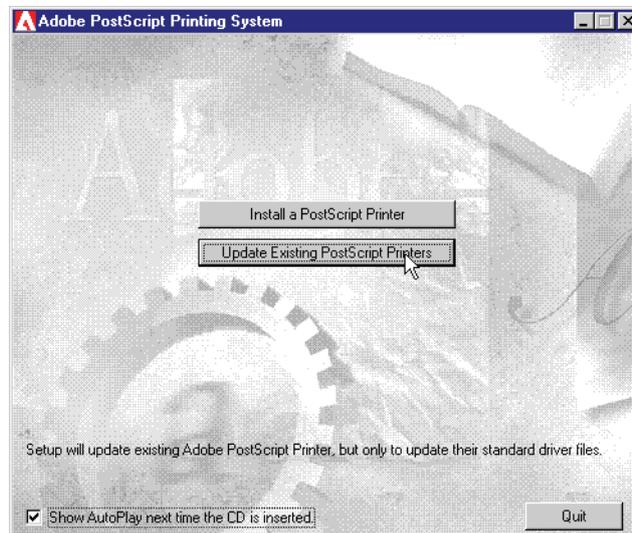


从显示的按钮中，选择 **Install Adobe PostScript Driver** 按钮，然后指定用于 PDF 输出的 postscript 打印机。

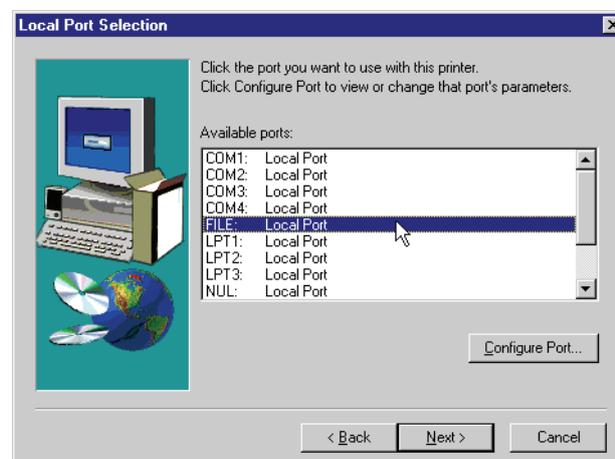




3. 单击 **Update Existing PostScript Printers** 按钮。按照每一个窗口的默认值的信息进行操作直到“Local Port Selection”窗口显示。

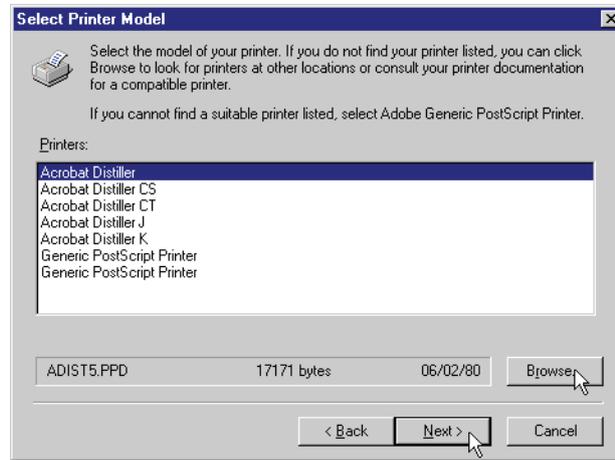


4. 在“Local Port Selection”窗口中，选择 FILE: 端口。单击“Next”按钮。“Select Printer Model”窗口显示。

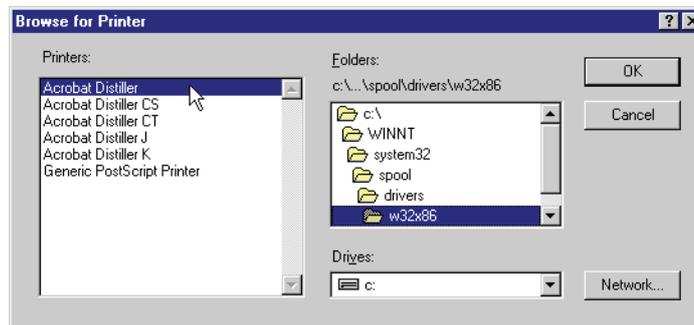




5. 单击 “Select Printer Model” 窗口中的 **Browse...** 按钮以显示 “Browse for Printer” 窗口。



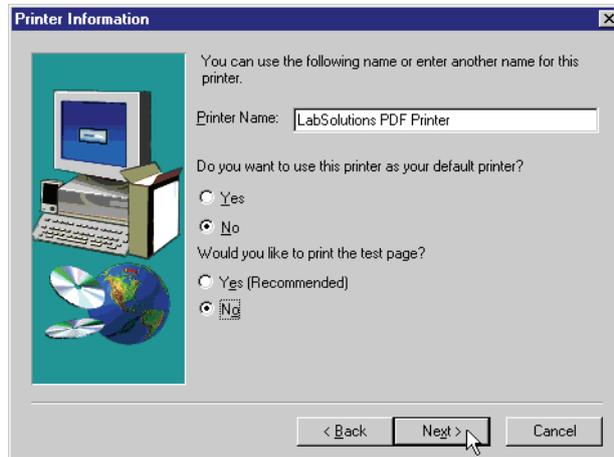
将驱动器 / 文件夹更改为 “C:\WINNT\system32\spool\drivers\w32x86”。现在从列表中选择打印机时 “Acrobat Distiller” 可用。选择它，然后单击 **OK** 按钮。



可以返回 “Select Printer Model” 窗口。选择 “Acrobat Distiller” 后，单击 **Next** 按钮按照默认值继续，直到出现 “Printer Information” 窗口。



- 在“Printer Information”窗口中，指定打印机名称。输入“LabSolutions PDF Printer”。现在设置完成。按照每一个窗口中显示的信息继续操作，完成打印机驱动程序的安装。“PDF”前后必须留出空白区。



- 安装完成后，显示 GCMS 后处理屏幕，可在其中查看 PDF 输出设置是否有效。

在“数据分析”窗口中加载数据文件，然后在文件菜单中选择数据文件另存为....



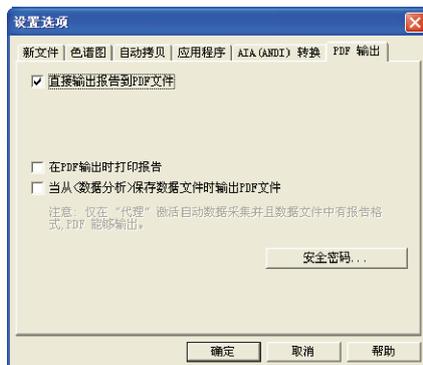
您可以将数据报告 * (数据文件中的报告) 图像转换成 PDF。

如果将没有记录报告格式的数据文件转换为 PDF 后保存，将会创建空白的 PDF 文件。



B.1.3 [PDF Export] 标签

此标签用于指定 PDF 输出设置。



1. 选择工具 > 选项命令。
2. 在“PDF 输出”标签中指定有关 PDF 输出的参数。

参数	描述
直接输出报告到 PDF 文件	<p>选择此选项后，报告的输出格式将更改为 PDF。</p> <p>注： 以下文档信息包含在输出文件中：</p> <p>标题： 原始文件的文件名。</p> <p>主题： 应用程序的名称，该应用程序用于输出 PDF 文件（Data Acquisition、Batch Analysis、Batch Postrun 或 Report Generator）</p> <p>作者： 在输出 PDF 文件时登录的用户名。</p> <p>同时包括一些未显示的其它信息，如样品信息。</p>
正常速度模式 (Acrobat Distiller®)	<p>选择此选项后，Acrobat® Distiller® 将用于输出 PDF 文件。</p> <p>注： 如果已为管理员帐户分配了密码，Acrobat 标准安全功能将该密码用作主密码，将 PDF 文件的“改变文件”安全设置设置为“不允许”。其它安全设置将根据 Acrobat® Distiller® 中指定的设置应用。</p>



参数	描述
高速模式 (Acrobat PDF Writer™)	选择此选项后，Acrobat® PDFWriter™ 将用于输出 PDF 文件。在使用 Acrobat Ver.6 时，“高速模式”不可用。如果选择此模式，可能无法成功输出 PDF 文件。 注： 与“正常速度模式”不同，将不向 PDF 文件应用任何安全设置。
在 PDF 输出时打印报告	在选择此选项时，如果报告输出格式设置为 PDF 文件，报告将在输出 PDF 时输出到打印机。
当从 < 数据分析 > 保存数据文件时输出 PDF 文件	如果选择此选项，当在“数据分析”窗口中保存数据文件时将输出 PDF 文件。 注： 只有当保存的数据文件包含报告格式且 CLASS-Agent 程序设定为自动收集数据文件时，此设置才有效。



本页空白。

C.1 性能

附录 C 技术指标

质量范围	m/z 1.5 - 1090	
分辨率	R=2M (FWHM)	
EI 扫描灵敏度	S/N>160/1 (RMS), 对于 1pg m/z 272 的八氟萘分子离子	
	色谱柱	Rtx-5ms 30 m \times 0.25 mm I.D., 0.25 μ m
	扫描范围	m/z200 - 300
	间隔 (事件时间)	0.5 秒
EI SIM 灵敏度	S/N>160/1 (RMS), 对于 100fg m/z 272 的八氟萘分子离子	
	色谱柱	Rtx-5ms 30 m \times 0.25 mm I.D., 0.25 μ m
	间隔 (事件时间)	0.2 秒
最高扫描速度	10000 u/sec (单次扫描) 对于扫描范围 m/z 60 - 660 (600 u) 以 0.1 秒的间隔扫描时的最高扫描速度	

C.2 附录 C 技术指标

C.2 硬件

气相色谱仪	型号	GC-2010
	柱箱温度	最高 450 °C
	线性温度升温速度（使用 100, 115 V AC 的电源电压）	40 °C/min, 最高可达 200 °C 15 °C/min, 最高可达 350 °C 7 °C/min, 最高可达 450 °C
	线性温度升温速度（使用 230 V AC 的电源电压）（大功率电炉）	70 °C/min, 最高可达 200 °C 50 °C/min, 最高可达 300 °C 30 °C/min, 最高可达 400 °C
	进样口温度	最高 450 °C
GC/MS 接口	类型	毛细管柱直接接口
	温度	室温 - 350 °C
离子源	离子化类型	EI
	温度	温度控制: 100 - 300 °C
	灯丝	双灯丝（自动交换）
	电子电压设置范围	10 - 200 V
	电子电流设置范围	5 - 250 μ A
分析部分	带预杆的圆柱四级杆	
检测器	带转换倍增器电极的次级电子倍增器	
真空系统	主泵	差动真空系统 离子源端: 179 L/sec 杆 / 检测器端: 185 L/sec
	初级泵	30 L/min (60 Hz) 泵油机械泵

C.3 附录 C 技术指标

C.3 工作站

C.3.1 计算机

计算机	CPU	Pentium III (600 MHz) 或更高
	内存	256 MB 或更大
	硬盘	3 GB 或更大
	操作系统	Windows 2000 SP1 或更高版本
		Internet Explorer 3.02 或更高版本
显示器	15 英寸 LCD 或 17 英寸 CRT, 分辨率为 1024 × 768 或更高	
打印机	激光打印机, A4	

* 计算机可能会升级, 恕不另行通知。

C.3.2 软件

分析	分析条件	GC 测量条件, MS 测量和数据处理参数将同时保存到方法文件中。
	MS 测量模式	扫描, SIM (64 通道 × 128 组)
	GC 检测器	FID, FPD, FTD, ECD, TCD
	连续分析	使用批处理连续自动运行
仪器控制	启动 / 停止真空系统	
	GCMS 系统自动和手动调谐	
	GCMS 系统检查	
数据处理	数据分析	色谱 / 质谱绘图
		色谱 / 质谱比较
		质谱背景扣除和平均
		色谱图面积计算
		柱效计算
	谱库检索	检索模式: 相似度索引, 索引检索
		最多可以同时检索 5 个谱库
		分子式显示
	个人谱库编辑	



数据处理	定量处理	可识别的最大峰数：1000
		识别方法：绝对保留时间 / 相对保留时间方法，时间段 / 时间窗口方法，参考离子（最多 5 个），质量模式与注册的质谱比对
		定量计算：使用比例因子修正的面积归一化，内标，绝对校准，标准添加，面积百分比
		校准曲线：线性（最小二乘方法，平均系数方法），点对点，平方，立方 加权 ($1/C$, $1/C^2$, $1/A$, $1/A^2$)
		校准点：最大 64 点（每个点多达 10 次测量的平均）
	校准曲线修正	
	组处理	
	报告生成	色谱图，质谱，峰报告，相似度检索结果，定量计算结果，校准曲线等。
		格式编辑
	批处理	数据处理，报告生成连续自动处理
	数据转换	ANDI (AIA) 转换，定量结果 ASCII 转换，报告影像 PDF 输出
系统	数据管理器	文件备份和各种文件类型的删除
	QA/QC	精度管理，质量管理，回收率，质谱检查等
	安全性	按照用户名和密码指定用户，并确定授权级别。
	审查追踪	在每次保存方法文件时保存更改（必要时还保存更改的原因）。

C.4 附录 C 技术指标

C.4 安装要求

电源	频率	50/60 Hz
	对于 GC	单相交流电 100, 115 V 1800 VA
		单相交流电 230 V 2600 VA (对于大功率电炉)
	对于 MS	单相交流电 100 - 240 V 1000 VA
	电压波动	操作电源电压波动范围 $\pm 10\%$
		规定电源电压波动范围 $\pm 5\%$
* 应该为该设备使用备有断路器的专用电源。不要与其它设备共用电源。		
* 针对电压波动问题, 该设备专门设计为可在 $\pm 10\%$ 的电压范围内 (包括因高频噪声引起的波动) 工作, 但建议使电压波动范围保持在 $\pm 5\%$ 以内 (包括噪声), 以确保获得最优功效。电流频率波动应该保持在 ± 0.5 Hz 以内。		
* 还需要为计算机、显示器和打印机提供电源。		
环境要求	接地	100 Ω 或更低
	温度	在 18 到 28 $^{\circ}\text{C}$ 的范围内保持恒温
	湿度	40 到 70 %RH (无冷凝)
* 必须安装排气管。 排气泵必须连接排气管, 以免油雾和注入的溶液和样品直接进入气室。否则, 应安装以下所示的油雾过滤器。注射的溶剂和样品通过油雾过滤器直接进入气室。(P/N 042-00124-31, 油雾过滤器 EMF3)		
* 同时应注意避免灰尘、振动、空间噪声和腐蚀性气体。		



C.4.1 安装示例

安装示例（尺寸将根据使用的计算机和打印机的不同而有所不同。）

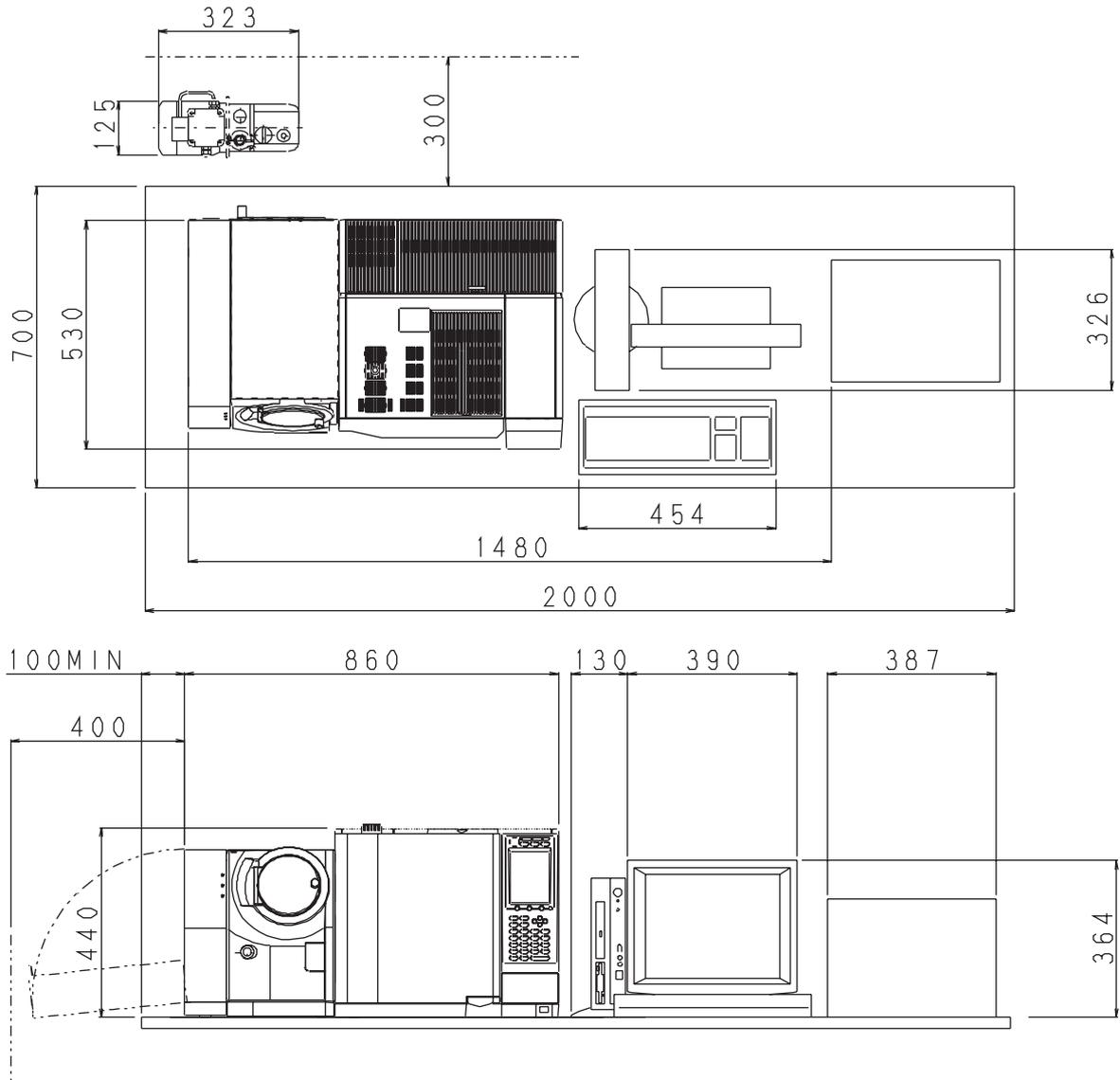


图 C.1 安装示例

管和连接线的长度如下。

MS 机械泵	真空管	1.5 m（近似值）
	排气管	4 m（近似值）
	电源线	1.5 m（近似值）
PC-MS	连接线	2 m（近似值）

D.1

消耗性部件列表

本节中提供标准 GCMS-QP2010 Plus 配置的消耗性部件列表和维护部件列表。选购设备的部件在提供的用户手册中说明。GC 组件 (GC-2010) 的大部分消耗性部件和维护部件在列表中显示, 有关更多详情, 请参阅单独提供的 GC-2010 用户手册 (221-40406)。如果对此列表中的部件有任何疑问, 请联系岛津公司技术支持部门。

设备名	部件号	部件名	备注
GC	221-35507-02	隔垫组件, (LB-2), 50/PKT	
	036-11203-84	O 型环, 4D P5, 5/PKT	用于玻璃衬管附件
	221-41444-01	玻璃衬管, SPL-2010	用于分流进样
	221-48335-01	玻璃衬管, SLESS/WBI	用于不分流进样
	221-48600	去活石英棉, 2G	
	221-48876-03	去活玻璃衬管, SLESS	5/PKT
	221-49065-91	AU 垫圈 5/PKT	1PC 221-48990
	221-34121-93	分子筛过滤器, /SPL-14	用于清除载气杂质
	221-42559-92	过滤器组件 (分流)	分流路径
	221-42559-92	过滤器组件 (吹扫)	隔垫吹扫流路
	201-35183	垫圈, AL, 柱填充, 100PC	用于流路连接
	221-48974	垫片 1.5	隔垫下的垫片
	直接接口	670-15003-03	金属环, GVF/004, 10/PKT
670-15003-04		金属环, GVF/005, 10/PKT	用于口径 0.32 mm 的毛细管柱
670-15003-07		金属环, GVF/008, 10/PKT	用于口径 0.53 mm 的毛细管柱
670-11009		螺母, SSNE16/012, 5 PCS	
离子源	225-10340-91	灯丝	
	225-17669-01	离子盒	
	225-17659-91	推斥极组件	
	225-10371	推斥极	仅推斥极
	225-17697-91	离子盒 (热处理)	
	225-17698-91	推斥极 (热处理)	
	225-01068	绝缘子	
校准气体	225-09493-03	标准样品, PFTBA (5 g)	
	225-09493-01	标准样品, TRIS (0.5 g)	
	225-09493-05	Tris (perfluorononyl)-S-triazene (1 g)	用于 m/z 1066 校准
真空	017-30163-11	机械泵油 ULTRAGRADE15 1 L	
夹具, 工具	085-35124-03	砂布, 超精细, 20/PKT	
	225-10194-91	夹具, IS	
	225-11657-08	用于柱连接的夹具 (用于 I/F)	
	225-11657-09	用于柱连接的夹具 (用于 INJ)	

D.2

维护部件列表

设备名	部件号	部件名	备注
GC	221-46260-92	PCB KEY 组件, GC2010	
	078-12146-01	LCD, LM32019P	
	221-46470-02	按键橡皮擦 1, GC2010	
	221-46471-02	按键橡皮擦 2, GC2010	
	221-43695-91	PT 传感器组件, 17A+	
	221-43696-91	触点热电耦, V2	
直接接口	225-10547	绝缘子, I/F	
	018-23651	胶带	
	036-11251	O 型环, 4D P50	
	225-10549-91	加热器区块组件	用于 100 V ñ 115 V (包括加热器和 Pt 传感器)
	225-10549-92	加热器区块组件	用于 220 V ñ 240 V (包括加热器和 Pt 传感器)
离子源	200-44394	陶制, 绝缘子, A24-251-1	
	225-17652-91	加热器区块组件	
	225-10436-91	PT 组件, IS	
	018-17301	箔, AL 250 ×10MT	
	225-17651-91	IS 组件	镜头、磁体和加热器设备
	225-17670-91	杯, I/F A 组件	
	022-27031	螺钉, SST HEXSOCKET M2 ∞ 3	用于接口杯
	034-01602-31	弹簧, SUS UR8-10	
	225-10434-91	连接线组件, F1(S)	
	225-10434-92	连接线组件, F2(S)	
	225-10434-93	连接线组件, F1(L)	
	225-10434-94	连接线组件, F2(L)	
	225-10434-95	连接线组件, L1	



设备名	部件号	部件名	备注
检测器	225-10463-91	EM (H) 组件	检测器整体
	225-09340-11	EM, AF620	检测器；仅次级电子倍增器
	225-10466-91	SIG 连接线组件, DET	
	225-10466-92	镜头连接线组件, DET	
	225-10466-93	HV 连接线组件, DET	
	225-10466-94	CDD 连接线组件, DET	
	036-11271	O 型环, 4D P105	
	225-10464-91	FEEDTHROUGH 组件, CDD	
	225-09148-92	FEEDTHROUGH	
	036-11218	O 型环, 4D P18	
	MS 过滤器	225-01132	PIN/QP-5000
225-10407-91		连接线组件, MS 过滤器	
225-10408-91		短连接线 1, 预杆	
225-10408-92		短连接线 2, 预杆	
036-11266		O 型环, 4D P90	
225-09148-92		FEEDTHROUGH	
036-11218		O 型环, 4D P18	用于 feed-through
225-01373		短弹簧	
225-10390-01		端子板 (预装)	
225-11659		预杆	
225-10401		绝缘子	用于预杆
225-10402		螺丝 (预装)	用于预杆
225-10403		轴环	用于预杆
校准 气体系统		225-10179-91	阀组件, SI
	225-01559-91	毛细管柱组件	
	035-62971-05	套管组件, T-100SET	
	225-04257-91	玻璃瓶, 5 PCS	
	036-11203	O 型环, 4D P5	



设备名	部件号	部件名	备注	
真空系统	225-09490-01	离子真空计		
	200-47686-02	PB-1 派蓝尼真空管灯丝		
	225-09588-02	TMP, EXT200/200H GCMS	TMP 主机 (分流)	
	225-09588-03	EXDC160	TMP 控制器 (分流)	
	225-09517-01	RP E2M1.5 (100-120)	无连接线	
	225-09517-02	RP E2M1.5 (220-240)	无连接线	
	225-11446-91	连接线, MS-RP	RP 连接线	
	221-09895-09	标签, AC 220 240 V	连接线标签	
	221-09895-10	标签, AC 100,115 V	连接线标签	
	210-13532-71	标签, RP1	连接线标签	
	204-30020	软管喷嘴, 16KF-18	用于 RP	
	035-06004-51	中心环, KF10/16SNRCR	用于 RP	
	035-02415-01	固定环, 10/16KF		
	016-31697-03	软管, PVC CHEMIFLEX 19X26		
	037-61024	软管固定夹, HB-1-28		
	017-30290-11	润滑油 BARRIERTA IS/V		
	225-17811	直线接头, KF25-#15		
	035-06004-24	中心环, KF25SVCR		
	035-02415-02	固定环, 20/25KF		
	035-02411-22	中心环, 32040-PAZV		
	036-11271	O 型环, 4D P105		
	225-10125	FEEDTHROUGH 12P		
	036-11243	O 型环, 4D P40		
	225-03540-93	阀泄漏组件		
	035-06004-21	中心环, KF10SVCR	用于泄漏阀	
	036-11203	O 型环, 4D P5		
	主电源	225-17775-91	主电源组件	
		074-80422-01	电源, LEA50F-5	
		074-80422-51	电源, LEA50F-24	
		074-80424-01	电源, LEA150F-24	
074-80435-38		电源, ZWS240PAF24/J		
225-11360-91		PCB 组件, LED-A		
225-11350-91		PCB 组件, 泵 CTRL-A		
225-10333-91		风扇组件电源		
HV PCB	225-11195-91	HV PCB 组件		
RF PS	225-11075-92	RF PS 组件		
	225-11060-91	PCB 组件, RF DIFF-A		
	225-10296-91	风扇组件		
主 CTRL	225-11130-91	PCB 组件, 主 CTRL-A		



设备名	部件号	部件名	备注
CPU PCB	225-11000-91	PCB 组件, CPU-A	
IS CTRL	225-11225-92	IS CTRL-A 组件	
直流电源	225-11250-91	直流电源 -A	
IG CTRL	225-11280-91	PCB 组件, IG CTRL-A	
预放大器	225-11030-91	PCB 组件, 预放大器 -A	
连接线	071-60814-05	电缆, KP-4819D+KS-31A	用于 220 V ñ 240 V
	071-60816-12	电缆, UC-975-N01	用于 100 V ñ 115 V
	225-19050	IEEE1394 连接线	
	088-52848-21	IEEE1394 连接线 (4.5 m)	
	225-19051	RS232C 电缆	

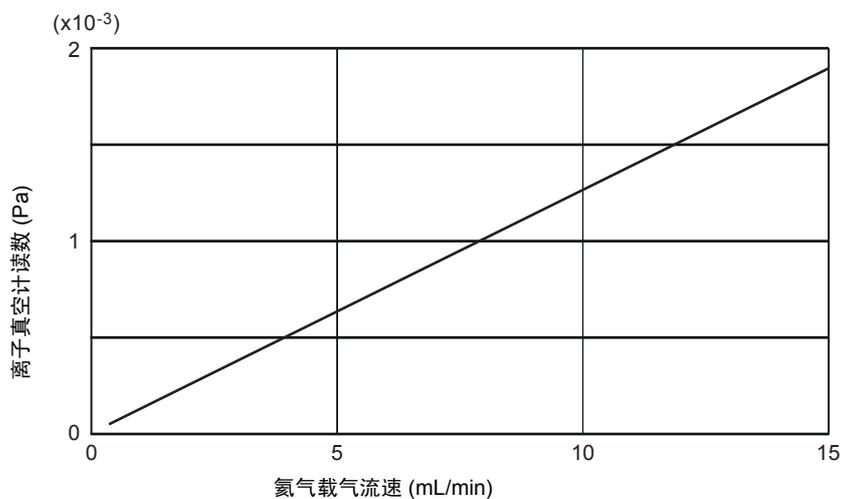


本页空白。

E.1 真空特性

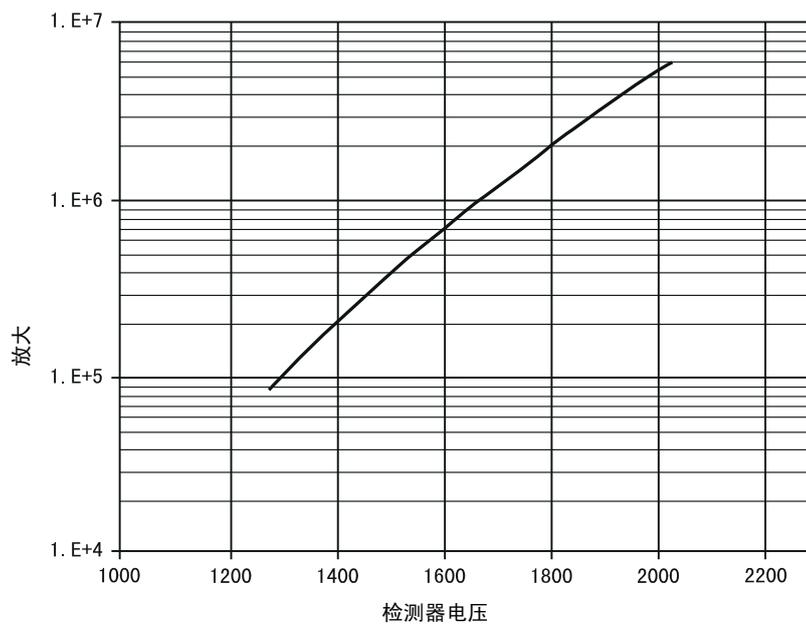
下图显示真空与载气流速的依赖关系。根据离子化间隔，可以观察到大约 $\pm 20\%$ 的真空变化。从真空组件出气可能影响真空，特别是以低流速出气或在开始抽真空后的短时间内监控真空。数据采集的最高柱流速可能是 15 mL/min。如果柱的内径是 0.53 mm，请使用大于 25 m 的柱长度。

载气流速和真空程度



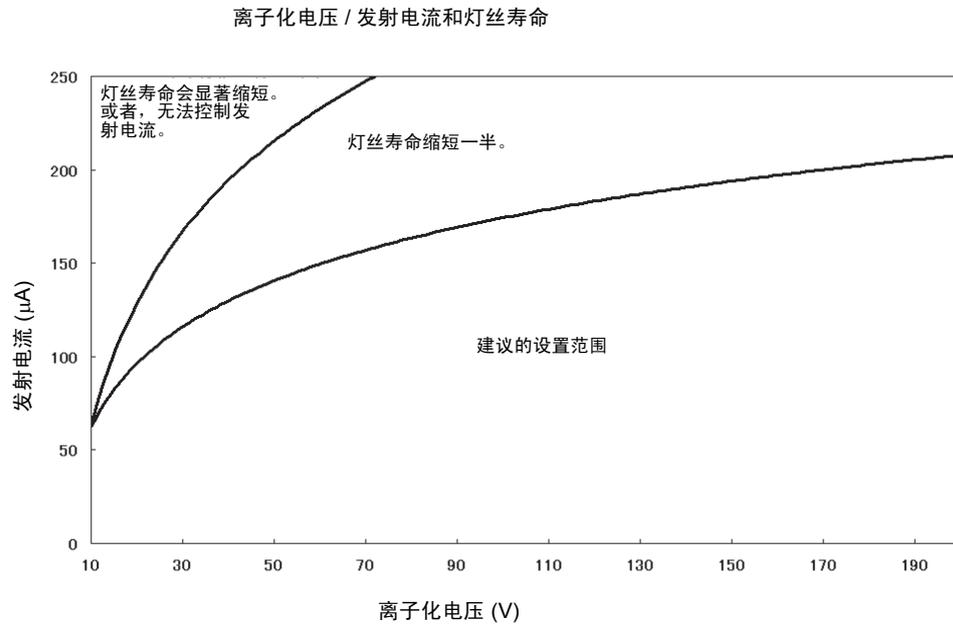
E.2 检测器放大倍数

下图中显示的特性图表示平均值。根据不同的检测器可能会略有变化。



E.3 离子化电压 / 发射电流和灯丝寿命

离子化电压和发射电流可以改变；但是，参数设置可能会影响灯丝的寿命。在改变这些参数时请参阅下图。





本页空白。

F.1 缩写

附录 F GCMS 术语词汇表

AMU	Atomic Mass Unit (原子质量单位)
AOC	Automatic Operation Controller (自动操作控制器)
CPU	Central Processing Unit (中央处理单元)
CRT	Cathode-Ray Tube (阴极射线管)
EI	Electron Impact Ionization (电子轰击电离)
eV	Electron Volts (电子电压)
GC	Gas Chromatograph (气相色谱)
GC/MS	Gas Chromatograph / Mass Spectrometer (气相色谱 / 质谱仪)
I/F	Interface (接口)
IS, ISTD	Internal Standard (内标)
MC	Mass Chromatogram (质量色谱图), 即根据 MS 分析所绘制的图形
MS	Mass Spectrometer (质谱仪), 即本仪器
m/z	质荷比
NIST	National Institute of Standards and Technology (美国国家标准局)
OS	Operating System (操作系统)
PC	Personal Computer (个人计算机)
PFTBA	Perfluorotributylamine (全氟三丁胺)
RF	Radio Frequency (射频)
RP	Rotary Pump (机械泵)
SIM	Selected Ion Monitoring (选择离子监测)
S/N	Signal-to-Noise ratio (信噪比)
SP/SPL	Split / Splitless (分流 / 不分流)
TIC	Total Ion Chromatogram (总离子色谱图)
TMP	Turbomolecular Pump (涡轮分子泵)

F.2 附录 F GCMS 术语词汇表

F.2 词汇表

A

Absolute retention time method 绝对保留时间方法

这是用于识别峰的一种方法。如果峰在允许的保留时间段或时间窗口（根据预先设定的预计保留时间）内，则峰被识别。这种广泛应用的方法不需要参考峰。如果峰满足以下关系，则可使用绝对保留时间方法识别。

$$\left(\text{参考峰的预计保留时间} \right) - \left(\text{目标峰的实际保留时间} \right) < \left(\text{目标峰的允许保留时间窗口/时间段} \right)$$

另请参阅：时间窗口方法，时间段方法

AMU（原子质量单位）

这是用于测量原子质量的单位，根据碳 12 质量的 1/12 定义。一个碳 12 原子的准确质量是 12 u。氢的原子质量是 1.007825。

AOC

指配合 GC 系统使用的一种自动进样器。AOC 将样品连续注入 GC 进样口。进样过程可靠且自动完成。

Area Normalization 面积归一化

参见归一化方法。

Autotuning 自动调谐

自动调谐程序用于优化离子透镜的性能。引入 PFTBA 校准气体和离子源透镜电压，将自动调整 RF 参数和分析仪电压。用户可以根据分辨率调整、质量校准和灵敏度调整（目标质量和质量模式）编辑调谐条件。最终调谐结果将打印出来并保存成调谐文件。

Average RF method 平均 RF 方法

这是用于定量的校准曲线拟合类型。将对最多 64 个具有不同浓度的标准进行分析。首先，对通过每个点和原点的线性曲线进行计算。然后，确定这些曲线的简单平均斜率。得到的校准曲线必须通过原点。如果只有一个校准级别，将通过该点和原点画出一条曲线。每个点表示最多 10 个单次分析的平均。



B

Background subtraction 背景扣除

采集的数据中包含一定程度的背景噪声。背景扣除过程可从指定的测量质谱（通常是峰顶附近的质谱）扣除背景质谱（通常是色谱图基线处的质谱），从而生成单个质谱。这是在定性分析前执行。

Band identification method 时间段方法

参见时间段方法。

Base peak 基峰

在质谱中，各个离子的相对强度通常是通过将具有最高强度的峰作为“标准”或“基准”峰来确定的。

Batch processing 批处理

- (1) 批处理表中的每行包含该样品的进样和分析参数。在对样品进行连续分析后，将自动执行数据处理和报告打印。
- (2) 在仪器脱机的情况下，也可以对以前采集的数据执行再处理。

Blank nut 空螺母

这是用于密封流路（如载气或分流 / 吹扫流路）的 GC 配件。有时也叫作盖螺母。

C

Calibration curve 校准曲线

这是显示组分浓度与在分析该组分时所获得的实际面积或高度之间的关系的曲线。在 GCMSsolution 软件中，横轴代表组分的浓度，纵轴代表分析样品时所获得的面积或高度。得到的曲线用于对未知样品进行定量。

Capillary column 毛细管柱

毛细管柱由石英玻璃毛细管制造；内表面用化学键合固定液体相涂覆，并且用聚酰胺树脂涂覆外表面以防破裂。毛细管柱分离注入 GC 进样口的样品组分。除使用 DI（选件）注入的样品以外，毛细管柱可以分离所有样品。

在其标准配置中，GCMS-QP2010 Plus 可以接受内径小于 0.32 mm 的毛细管柱。GCMS-QP2010 Plus 的最大载气流速为 15 mL/min，可以将 0.53 mm 的毛细管柱直接连接到 MS。



CI (Chemical Ionization, 化学电离)

这是一种电离方法，其中的反应气与样品分子发生反应以生成离子。与 EI 相比，生成的峰较少，但因为它是“软”电离方法（具有复杂的电离机制），因此它的优势在于可以获得通过 EI 无法分析的组分的分子量信息。

当用于检测负离子时，此方法叫作负离子化学电离 (NCI)。

Channel 通道

参见组。

Chromatogram 色谱图

这是通过检测从色谱中流出的组分时所获得的图形输出（绘图）。

Condensation 冷凝

水滴凝结并粘附在仪器的表面和内部。因为冷凝会损坏仪器，因此在安装时要特别小心。

Compound Finder 组分查找器

查看目标组分是否在样品基体中。因为它利用质谱相似度，因此目标组分标准谱图必须记录在化合物表里。

Consumable parts 消耗部件

指在使用 GCMS-QP2010 Plus 期间会损耗的部件，例如，GC 进样口或离子源灯丝。保证这些部件的充足供应。

Conversion Dynode 转换打拿极

转换打拿极位于检测器的入口。一种高压电极，它可以根据极性，有效地将正离子转换成电子或将负离子转换成正离子。它可提高灵敏度，特别是在大质量范围内，并且可以加强对负离子的检测功能。它在 GCMS-QP2010 Plus 中用作检测器。

Corrected area normalization method 修正的面积归一化方法

此方法根据外标和校准曲线定量每个峰，然后添加定量值并根据此总值确定各个组分的定量值百分比。参阅附录 A “峰处理和质谱操作”，第 269 页以了解更多信息。

Corrected area normalization with scale factor method 用比例因子修正的面积归一化方法

此方法用总面积（高度）作为比例因子（稀释倍数）计算峰的浓度，总值为 100（浓度用总值百分比表示）。参阅附录 A “峰处理和质谱操作”，第 269 页以了解更多信息。



D

Database 数据库

参见谱库。

Deflector 偏转器

参见离轴偏转器。

Detector 检测器

此部件将测量的样品特性转换成电子信号。样品被离子化并且穿过离子源盒。离子被四极杆按质量分离，然后由检测器转换成电子信号。GCMS-QP2010 Plus 使用配备转换打拿极的电子倍增器。

DI (Direct Sample Introduction, 直接样品进样)

用 DI 探头将样品直接插入 MS。探头被加热至使样品蒸发，不是通过 GC 柱分离。

E

EI (Electron Impact Ionization, 电子轰击电离)

此方法常用于从样品分子中获得离子。灯丝中的电子被加速至 70eV 并直接进入离子室，在离子室中它们与其中的样品分子发生碰撞。因为这是一种“硬”离子化方法，所以分子是裂开的并且生成碎片。可以通过碎片获得分子信息，并且质谱数据库使谱库检索成为可能。这是一种可频繁使用并且可靠的定性和定量分析方法。

Electron Volts 电子电压 (eV)

这是用于将电子离子化成分子或原子的能量。

Emission current 发射电流

当灯丝通过大电流时，灯丝变热。比加热电流更大的电流会通过热发射而释放电子。此发射电流与加热电流（约 75 mA）相比要小很多，并且通过电子方式控制以使其电流保持恒定。绝大多数电子从离子源盒向阱或收集器电极移动。收集器电流始终小于发射电流。

Evacuation rate 排空速度

用于表示真空泵的排空能力。

Event 事件

为事件设置收集模式。

最多可以为每个组设置两个事件。为事件 1 的采集模式设置为扫描，而事件 2 的采集模式设置为 SIM。

如果两个事件都已设置，则 SIM 表（MS 参数）中连续两行的开始和结束时间应该分别设置为相同的值。



Event Time 事件时间

这是针对各个事件的采集间隔时间。如果只为组设置了一个事件，则事件时间与采集间隔时间相同。如果为组设置了两个事件，则扫描模式和 SIM 模式的事件时间总和将成为该组的采集间隔时间。

External standard method 外标方法 (absolute calibration curve method 绝对校准曲线方法)

此定量方法通过创建表示标准组分绝对质量或浓度与其峰面积或高度的关系的曲线，计算目标组分的浓度。未知样品在相同条件下分析，然后校准曲线应用于未知样品的峰面积或高度。对于这个方法，未知样品的分析条件必须和标准品一致。进样体积必须一致，由于方法精度依赖于样品的进样体积。参阅附录 A “峰处理和质谱操作”，第 269 页以了解更多信息。

F

Feed-through 馈通

电子信号输入端子，输入时不会影响 MS 的真空性能。

Filament 灯丝

灯丝用铼制造。连接到离子源盒，它会产生离子化样品所需的电子束。提供有两个灯丝，因此如果一旦其中一个灯丝发生故障，操作员可以更换使用另一个。

File 文件

在计算机术语中，将数据汇编成一个单位处理叫作文件。在 GCMSsolution 软件中，数据、调谐条件、方法、批处理计划是、报告格式和谱库都编译成文件，并且用以下扩展名保存。

数据文件 (*.QGD)

调谐文件 (*.QGT)

方法文件 (*.QGM)

批处理计划文件 (*.QGB)

报告格式文件 (*.QGR)

谱库文件 (*.QGT)

格式 (报告格式)

在 GCMSsolution 软件中，可以打印各种类型的报告，包括方法、数据处理结果或谱库检索结果。格式指这些项目的自定义布局。

G

GC pressure parameters GC 压力参数

压力参数在分析的各个阶段精确控制载气流经 GC 柱时的压力。

**GC temperature parameters GC 温度参数**

温度参数在分析的各个阶段精确控柱箱的温度。也可以指定进样口和接口温度。

Ground 接地

为了确保安全操作，请在操作期间将 GCMS-QP2010 Plus 正确接地连接。

Group (channel) 组 (通道)

包括在 SIM 分析的时间间隔内要测量的离子质量。对于存在的每种组分通常使用不同的组。

单次分析可以按照时间段分组。时间段被称作组或通道。最多可以有 128 个组；可以为每个组设置多达 64 种质量（离子）。因此，最多可以监测 128 64 或 8,192 种质量（离子）。

I**Index search 索引检索**

此检索方法在指定的谱库文件中根据指定的检索索引，或用于过滤检索到信息的条件列表提取信息。

Interface 接口

参见传输流路接口。

Internal standard method 内标方法

为每个标准和样品添加内标组分。首先创建校正曲线，明确相对于内标峰的标准目标峰相对灵敏度和质量数比。然后通过应用这个校准曲线到未知样品峰的面积比或高度比以计算目标组分的浓度。此方法在分析条件发生变化时使用。

Ionization 离子化

这是将一个或多个电子从分子或原子中分离出来并转换成正离子的过程。在 GCMS-QP2010 Plus 中，用柱分离注入的样品，随后通过离子源进行电离反应。尽管 EI 用作标准离子化方法，但 CI 和 NCI 离子化可以作为另一种离子化方法。

Ion source 离子源

此元件电离从柱流出组分。它由离子源和透镜 1 组成。

Ion source box 离子源盒

离子源盒包括离子源和透镜组。它用于电离样品分子并将些离子引导至四极杆。



L

Lens stack 透镜组

透镜 2、透镜 3 和透镜 4 组成透镜组，可高效地提取离子源生成的离子并对其加速，然后将这些离子引导至四极杆。

Level 级别

可以在 GCMSsolution 软件中为校准曲线最多指定 64 个校准点。将级别 1 到 64 分配给其中每个校准点。每个级别可以通过计算最多 10 次重复进样的平均值来确定。

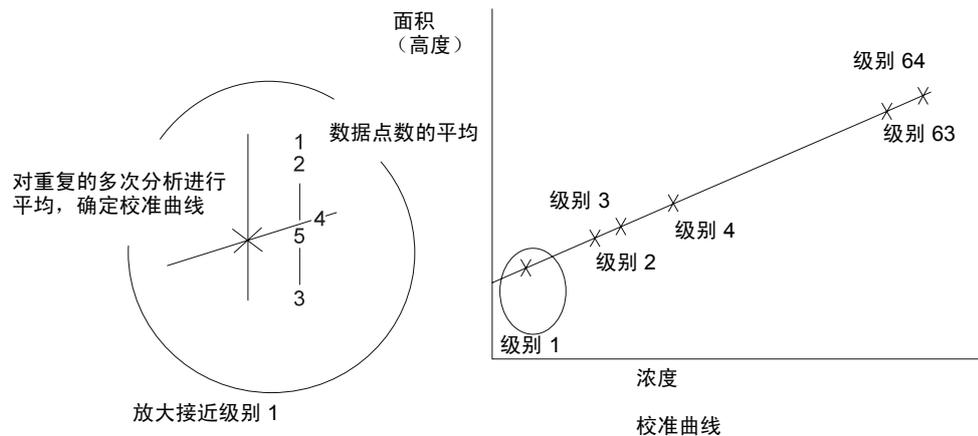


图 F.1 校准级别

Library (library file) 谱库 (谱库文件)

这是用于相似度检索的质谱数据的汇编。谱库文件包括公用谱库文件 (如 NIST 数据库)，和个人用户可以创建的专用的个人谱库文件。在执行相似度检索时，可以从指定的谱库文件中寻找相似的质谱。

Library search (similarity search) 谱库检索 (相似度检索)

未知组分的质谱与谱库文件 (数据库) 中的质谱比较；列出谱库文件中最相似的质谱。此外，可以根据特定检索索引 (索引检索) 从谱库文件中选择质谱。

Linear 线性

这是用于定量的校准曲线拟合类型。最多可分析 64 个不同标准的浓度，并且将通过最小二乘法计算线性校准曲线。如果只有一个校准级别，将通过一个点和原点建立直线。如果有两个或更多校准级别，并且曲线不通过原点，将通过这两个点建立一条线性校准曲线。在其它情况下，将利用最小二乘法画出线性曲线。每个点表示最多 10 个单次分析的平均。



M

Main rod 主杆

参见四极杆。

Maintenance parts 维护部件

这些部件是确保 GCMS-QP2010 安全和最佳操作所必需的。这些部件无需经常更换，但在其性能降低时应该更换。

Mass number 质量数

指质谱内离子的原子质量单位整数。质量分析仪测量离子的准确质量，但质量数指最接近该准确质量的整数。

Mass calibration 质量校准

利用校准标准（如 PFTBA），可以采集到质谱。在扫描 PFTBA 质谱期间，检测已知峰的准确时间与质量峰的准确质量匹配。在单次质谱扫描期间，约 20 个 PFTBA 的准确质量值与检测的准确时间匹配。因为质量分析仪只能在质谱扫描期间测量时间，所以它使用质量校准来识别与检测到质量峰时所需时间对应的质量。

Mass pattern adjustment 质量模式调整

在 GCMS-QP2010 Plus 中，可以用调谐应用程序将质量模式调整为任何模式（强度比率）。

质量模式指调整质谱（原始数据）的过程，质谱是通过将磁场质谱仪的质量模式作为标准而由四极质谱仪采集到的。否则，用四极质谱仪采集到的模式将与用磁场质谱仪采集到的模式有所不同，即使质谱（原始数据）相同。用磁场质谱仪采集到的质量模式用作标准模式，因为采集到的数据量庞大并且长时间使用。

Mass spectrum 质谱

指离子强度按照其 m/z 顺序显示的条形图。

Megabore column 大内径厚膜毛细管柱

直径为 0.5 - 0.53 mm 的毛细管柱的名称。

Method 方法

指用于控制 MS 和 GC 设备进行数据采集和数据处理的参数的汇编。方法被保存成方法文件。使用方法的益处如下所示。

- (1) 在分析与以往分析过的样品相似的样品时，可以利用以前建立的方法进行分析，而无需重设不同的参数。
- (2) 通过使用批处理表，可以利用不同的方法对自动进样器中的各个样品进行自动分析。
- (3) 由于分析参数与数据处理参数可以保存成单个文件，所以简化了数据管理。



Method file 方法文件

这是用于保存已经在“分析”窗口或方法建立模式中建立的方法的文件。该文件具有 .qgm 扩展名。

Molecular formula 分子式

这是显示分子中原子的实际数量与类型的化学公式，但不是化学结构。

Molecular ion 分子离子

分子离子由失去一个电子的分子形成，未破坏任何分子内化学键连接。因为许多组分有同位素原子，所以纯组分的分子量与分子离子峰的 m/z 值被定义为在质谱中具有最大 m/z 时出现的最高丰度同位素峰。对于苯，它有 m/z 79 和 m/z 80 峰，但分子离子被认为质量数 78。

Multiple reference relative retention time method 多重参考相对保留时间方法

在出现较大的保留时间漂移时，可以通过选择多重参考峰来改善时间保留修正。在此方法中，峰可以被分类成多个区域。为每个区域指定参考峰，并且该区域内的峰将根据各个区域的参考峰识别。

另请参阅相对保留时间方法。

m/z (质荷比)

离子质量除以电荷数而得的数值。

N

Narrow bore capillary column 小口径毛细管柱

这是表示内径为 0.2 - 0.25 mm 的毛细管柱的通用术语。这是 GCMS-QP2010 Plus 中采用的标准柱。

NCI (Negative ion Chemical Ionization, 负离子化学电离)

参见 CI (Chemical Ionization, 化学电离)

Needle valve 针阀

这是可以对每分钟流量进行调控的阀。

NIST

这是美国国家标准局的简写。

Normalization method 归一化方法 (Area normalization 面积归一化)

对检测到的峰面积或高度累加，并且将根据总数值确定各个峰面积或高度的百分比。另请参阅修正的面积归一化方法。



O

Off-axis deflector 离轴偏转器

偏转器电极产生负电荷，帮助将离子引导到检测器。相对于四极的中心轴，它是偏离中心的。

O 型环

这是安装在某些连接界面（例如，门与分析室间的接触面）间的橡胶环。O 型环可密封两个表面，并防止真空泄漏。

OS (Operating System, 操作系统)

此基础软件程序可有效地管理计算机整体操作和资源。所有 GCMS-QP2010 Plus 软件都在 MS-Windows 2000（一种操作系统）下操作。

P

Peak profile 峰轮廓

这是指显示在“峰监测”窗口中的质谱的原始峰。在扫描分析中，质谱是通过处理此原始峰而获得的。

Peak report 峰报告

在 GCMSsolution 软件中，峰处理结果和分析数据的定量结果可以编辑和显示，并且可以打印出来。此编辑过的表格叫作峰报告。

PFTBA

这是全氟三丁胺的简写。在分析质量高达 700 的离子时，PFTBA 通常是用于质量分析的一种调谐标准。它在执行分辨率调整、灵敏度调整（质量模式或目标质量）以及质量校准时使用。

分子式： $(C_4F_9)_3N$

Point-to-point calibration curve 点对点校准曲线

这是用于定量的校准曲线拟合类型。最多将分析 64 个不同的标准浓度，并且创建点对点校准曲线。在指定点对点法曲线拟合时，定量表中不显示曲线拟合常数，并且无法输入任何内容。如果只有一个校准级别，将通过该点和原点画出一条直线。如果有两个或多个校准级别，将画出点对点曲线；起始线必须通过原点。每个点表示最多 10 个单次分析的平均。

Pre-amp 预放大器

预放大器可放大次级电子倍增器的输出电流。

Pre-rod 预杆

参见四极杆。

Private library 个人谱库

参见谱库。



Pt 传感器

铂用于制造温度传感器，因为其电阻随温度变化。例如，Pt 传感器用于控制传输流路界面温度。

Purge vent 排气口

这是 GC-2010 吹扫流路的载气出口。为此出口连接一个气泡流量计以检查吹扫流速。

Q

Quadratic/cubic 二次方 / 立方

这是用于定量的校准曲线拟合类型。最多将分析 64 个不同的标准浓度，并且将根据最小二乘法画出二阶（二次方）或三阶（立方）曲线。对于二次方曲线，将需要三条或更多的校准曲线。对于立方曲线拟合，将需要四个或更多的校准点。有三个点时曲线被作为二次方程计算，两个或更少的点时曲线被作为线性计算。每个点表示最多 10 个单次分析的平均。

Quadrupole mass filter 四极质量过滤器

通过向四极杆施加 RF 振幅和 DC 电压可以形成电磁场，创建只允许指定质量的离子通过的质量过滤器。

Quadrupole mass spectrometer 四极杆质谱仪

如下图所示，由离子源、四极杆和检测器组成。当离子通过四极时，它们被按照质量分离。

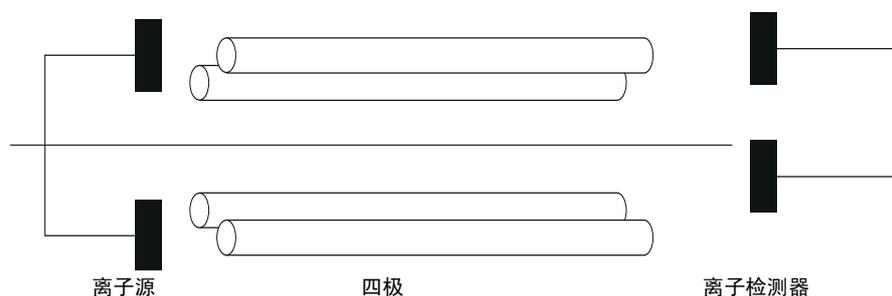


图 F.2 四极质谱仪图解

Quadrupole rods 四极杆

四个四极杆成对操作形成双曲线电磁场。同时对主杆施加 RF 和 DC 电压。

GCMS-QP2010 Plus 还使用预杆，只对预杆施加 RF 电压。这将保持主四极杆干净并提高离子传输速度。

Quantitation 定量处理

这是指确定样品中组分的浓度或组分的浓度比率的过程。可以通过几种计算方法在 GCMSsolution 软件中执行定量处理。



R

Reference 参考

参见类型（在方法中选择的类型）。

Reference ion 参考离子

参考离子强度比率可以与组分识别的保留时间一起使用。最多可以指定 5 个参考离子以与组分质谱中的基峰比较。对于要识别的组分，每个参考离子必须在要与目标离子比较的相对强度的指定范围内。

Relative retention time method 相对保留时间方法

在此方法中，将在对每个峰修正保留时间偏差后执行识别。首先，通过绝对保留时间方法识别指定的参考峰；然后通过相对保留时间识别目标峰。特别是实际的目标峰保留时间可通过计算基于参考峰保留时间漂移的比率进行修正。

另请参阅多重参考相对保留时间方法。

Repeller Electrode 排斥极电极

强迫离子离开离子源盒的电极。

Resolution 分辨率

分辨率表示两个相邻峰被分离的程度。分辨率调整指调整质量峰的峰宽。由四极 MS 执行分析时的分辨率通过以下公式显示。

$$R = \frac{W}{\Delta W} \times \frac{M}{\Delta M}$$

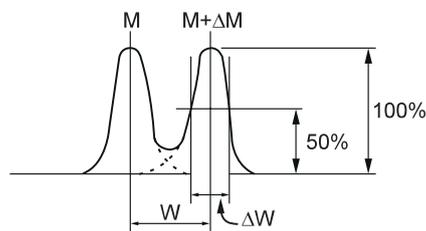
R: 分辨率

M: 测量的峰质量

ΔM : 测量峰与相邻峰之间的质量差

W: 测量峰与相邻峰之间的间隔

ΔW : 测量的峰宽



对于四极 MS，使用以下表达式。



$$\frac{W}{\Delta W} \times \frac{1}{\Delta M} \times M$$

如果上述表达式等于 2，则随后的峰高度倍数可以表达为：

$$\frac{W}{\Delta W} \times \frac{1}{\Delta M} = 2M$$

RF power supply RF 电源

这是产生应用于四极的高频电压和直流电压的电源。

Rotary pump 机械泵

还叫作旋片式真空泵。它可产生 10^{-3} Torr 的真空，并用作涡轮分子泵的初级泵。在 GCMS-QP2010 Plus 中，标准配置为使用一个机械泵，但如果添加 DI 或 CI 单元，则需要增加机械泵。

另请参阅排放速度。

S

Sample type 样品类型

（在批处理表和样品登录中设置）

样品根据分析目标按照类型归类，如下所示：

未知： 未知含量和浓度的样品。浓度根据之前采集到的校准曲线计算。

标准： 注入已知浓度的标准溶液；用于创建校准曲线。同时也选择向校准曲线中添加点的方式。

初始化校准曲线：

方法中所有原有校准曲线信息被清除。通常，这是在批处理表中为第一个标准所选择的信息。

添加校准级别：

通过级别号栏指定的级别产生校准点。如果此级别已经有一个点，则该值将与原有结果进行平均。

**替换校准级别:**

以通过级别号栏指定的级别产生校准点。如果此级别已经有一个点，则将删除原有结果并产生一个新点。

控制: 标准溶液或 QA/QC 样品在数据文件的属性部分被指定为控制样品。处理方法与未知样品相同。

未添加: 未添加 / 已添加对中的未添加未知样品。

已添加: 已添加已知标准量的未知样品。添加量的回收百分率通过未添加的样品计算，未添加的样品在添加的样品之前进行分析。

标准 (ISTD 回收率): 在 QA/QC 功能要求计算 ISTD % 回收率时使用。

Savitzky-Golay 方法

用于平滑的数字过滤器使用最小二乘方法。与移动平均方法相比，它可轻松传送高频信号元件，但具有较差的防噪性能。

Scan 扫描

这是通过不断更改一个方向施加于四极的响应因子电压或直流电压，以分析质谱的过程。

此更改间隔时间叫作事件时间，并且更改速度叫作扫描速度。如果以 0.1 秒的事件时间扫描质量范围 10 到 610，扫描速度将是 6,000 AMU/ 秒。

Scan speed 扫描速度

参见扫描。

Search index 检索索引

指用于执行索引检索的一个或多个条件。在 GCMSsolution 软件中，分子量、分子式、类别、保留时间、基峰和组分可以用作检索索引。

Sensitivity adjustment 灵敏度调整

包括调整离子源电压、RF 参数和检测器电压，以获得在自动调谐中“编辑调谐条件”对话框中选择的特定 PFTBA 质量峰的最佳强度和峰形状。

Septum purge 隔垫吹扫

这是一种位于进样口中隔垫下面流路，利用载气吹扫进样口的污物并减小或消除较大的拖尾溶剂峰。

Silica capillary 石英毛细管

一种毛细管柱，熔融石英用聚酰胺树脂涂覆作为固定相。另请参阅毛细管柱。用作控制 PFTBA 调谐标准进入量的阻尼管。



SIM (Selected Ion Monitoring, 选择性离子监测)

此方法只能用于检测特定质量。与使用 MC 相同，可以为每个质量获得色谱图。要检测的离子在分析前指定。由于检测到的离子数量有限，检测灵敏度极高，因此能够测量组分的微微克量。

Similarity search 相似度检索

参见谱库检索。

Solvent flush method 溶剂冲洗方法

在此进样方法中，样品、空气和溶剂将依次注入，方法是将他们按照相反的顺序吸入注射器，如下图中所示。样品的溶剂冲洗注射可以使用 AOC 自动进样器按照各种方法执行。

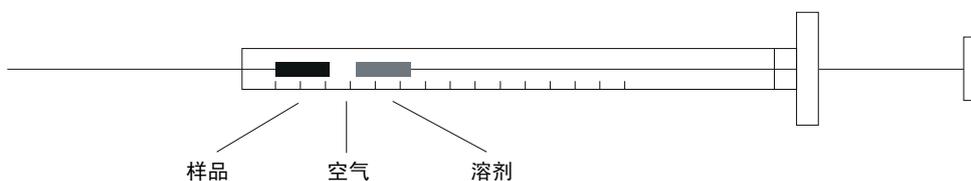


图 F.3 溶剂冲洗方法

Split injection 分流进样

这是在样品浓度比较高时，在毛细管色谱中主要使用的进样技术。将样品注入进样口，然后分别进入两个流路。一个流路通往分析柱，另一个通往排出口。

Splitless injection 不分流进样

这是在样品浓度比较低时，在毛细管色谱中主要使用的进样技术。将样品注入热的分流 / 不分流进样口，溶剂将被蒸汽化，但分析物不会蒸汽化。少量的溶剂流入相对较冷的柱并再凝结。分析物组分在柱头部的再凝结溶剂中收集。经过一段时间后（采样时间），分流口打开并将过多的溶剂蒸汽吹扫出进样口。温度程序开始在柱箱中运行。

Split vent 分流口

这是分流流路的载气出口。为此出口连接一个气泡流量计以检查分流流速。

Standard Addition 标准添加

样品中的共存组分有时会影响目标组分的浓度结果。这叫作基质效应。此校准曲线方法作为一种补充方法，用于向相同数量的样品添加不同等级的已知标准，并计算此样品的浓度。换句话说，可以分析未添加标准的样品和添加了不同等级标准的相同样品。水平轴上校准曲线用标准添加量来创建，垂直轴是峰面积或峰高，并进行定量。



T

Target 目标

参见类型（为方法选择的类型）。

Temperature control zones 温度控制区域 (heated zones 加热区域)

这些是具有温度控制的系统元件。

TIC (Total Ion Chromatogram, 总离子色谱图)

TIC 表示特定时间的离子强度总和。TIC 与使用 FID (Flame Ionization Detector, 火焰离子化检测器) 检测器检测到的色谱图类似。

TIME BAND method 时间带方法

此方法用于利用特定保留时间段来识别各个组件。

允许的保留时间带 = +/- 时间带 (分钟)

如果预计的保留时间是 5.0 分钟, 保留时间带是 0.5 分钟, 则允许的保留时间带是 5.0 分钟 +/- 0.5 分钟, 或从 4.5 分钟到 5.5 分钟。此方法的优点是可以为每个峰指定最佳保留时间带。此方法在设置时会很耗时, 因为它必须对每个峰进行设置。

在程序升温 GC 分析中, 峰宽不随时间变化时使用此时间段方法非常有用。

TIME WINDOW method 时间窗口方法

这是为所有峰指定占保留时间百分比的特定保留时间带的方法。此窗口随保留时间增大。

允许时间窗口 = +/- (预计的保留时间 (分钟) x 时间窗口 (%))

如果预计的保留时间是 5.0 分钟, 时间窗口是 10 %, 则允许的时间窗口是 5.0 分钟 +/- 10 % 的 5.0 分钟, 或从 4.5 分钟到 5.5 分钟。此方法设置简单, 但缺点是每个组分的窗口中会与其他组分的窗口交迭。

此方法用于分析峰宽随时间增大的位置, 同时用于同位素分析。

Transfer line interface 传输流路接口

此元件用于连接毛细管柱和 MS 离子源。



Triazine 三嗪

tris(perfluoroheptyl)-S-triazine 的缩写。在对 1000 或更小质量的离子执行质量校准或灵敏度调整时使用。Triazine 在市面上有售。

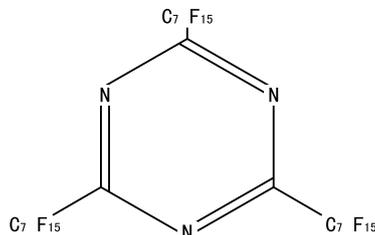


图 F.4 Triazine 分子式

Type 类型 (Type selected in Method 在方法中选择的类型)

在执行识别和定量时，标准组分将根据使用方式被归类到以下类型中。

目标： 这是定量目标的组分。

内标： 这是向所有标准和样品添加的已知浓度组分，目的是对样品中的其它组分进行定量。也叫作 IS。

参考： 这是向所有标准和样品添加的已知组分，目的是识别样品中的其它组分。参考峰的预计保留时间和实际保留时间用于对任何保留时间偏差进行相关修正。最多可以指定 8 个参考组分。

内标和参考： 内标组分也可以用作保留时间修正的参考。

查找： 在使用组分查找器时选择此选项。

Tuning 调谐

调谐是优化 MS 的过程。执行 MS 调谐的目的是：

- (1) 确认仪器状态良好，并且追踪所有故障原因。
- (2) 确定最佳操作参数。

调整类型包括质量校准、分辨率（峰宽）调整和强度调整。通过指定目标质量或相对强度调整（质量模式调整），可以通过灵敏度调整执行强度调整。



Turbomolecular pump 涡轮分子泵

此真空泵可使真空室中的离子源和分析仪保持高真空。气体分子与移动的转子叶片发生碰撞，将气体分子引导至特定方向。如果气体分子经常与其它气体分子碰撞而不是转子，则泵停止。因此，涡轮泵必须使用另一种类型的泵背抽，通常是机械泵。

另请参阅排放速度。

V

Version upgrade 版本升级

指软件改进。通常，当版本升级时，将指定一个新的版本号。

通过在 GCMSsolution 软件的“帮助”菜单中选择“关于 GCMSsolution”命令，可以查看该软件的当前版本号。

Vespel ferrule 聚胺酯垫圈

指用于密封毛细管柱界面的聚酰胺树脂垫圈。

W

Wide bore capillary column 大口径毛细管柱

内径为 0.32 mm 的毛细管柱的名称。可用于标准 GCMS-QP2010 Plus 配置。

Window identification method 窗口识别方法

参见时间窗口方法。



本页空白

索引

A

Adjustment	
Mass Pattern	347
Sensitivity	353
Adobe Acrobat	305
Adobe Acrobat Distiller	305
Adobe Acrobat PDF Writer	305
Adobe Acrobat Reader	305
Area Normalization	348
ASCII 转换标签	179
Autotuning	340
安全操作	iii
安装	
磁盘	234
DAO	243
GCMSsolution2	234
计算机接口卡	247
计算机接口卡驱动程序	248
MS 驱动程序	252
软件	234
示例	328
Windows	234
现场注意事项	v
要求	327
注意事项	vi
安装前	234
安装色谱柱吊架	18

B

Base Peak	341
版本升级	357
半峰宽值, 确定	272
帮助, GCMS	65, 66
帮助, 使用	65
保存为模板对话框	80
保存文件	63
报告	
窗口	163
打印	171
打印出的	132
打印出的调谐	57
打印图像	132, 160
定制	133, 160, 163
峰	349
工具栏	164
报告窗口	163
报告格式	
创建	163, 167
报告格式文件	60, 167, 170, 344
打开	171
使用	171
保护功能, 真空系统	268
保留时间方法	
多重参考相对	290, 348

绝对	288, 340, 351
相对	289, 351
保留指数	287
背景处理	113
背景减除	341
背景修正, 质谱	283
倍增器, 转换	342
泵油, 更换	222
泵, 机械	6, 24, 46, 222, 324, 328, 339, 352
泵, 涡轮分子	357
必要的材料	221
变量	169
表	
结果	151
批处理	175, 180, 186, 189, 190
系统检查	53
组分	136, 141, 147, 154, 158
组分表	138
标签, 警告	xii
标准	166, 295, 329, 352, 353
批处理表向导	181
添加	295, 354
外部	294, 295, 344, 345
标准附件	7
标准样品, 批处理表向导	183
不分流进样	354
部件	
更换	ii
维护	329, 330, 347
消耗性	329, 342
部件编号	7
部件名称	7
补救措施	261
布局视图	163, 168
布局文件	211
不在担保之列的项目	i
步骤	
泵油更换	222
定量分析	139
定性分析	110
压力密封载气	229

C

Calibration	
Level	346
Mass	347
Calibration Level	346
Calibration, Mass	347
Capillary Column	
Wide Bore	357
Capillary, Silica	353
Chromatogram	342
CLASS-Agent	305
Column	

Megabore	347
Wide Bore	357
Consumable Parts	342
Control Zones, Temperature	355
Conversion Dynode	342
菜单, 弹出式	187
菜单栏	85, 109, 136, 137
菜单命令	133
菜单, 右键单击	187
采集	
窗口	83, 84
概述	86
流程	87
数据	83, 86, 105, 109, 110, 139
自动	173, 175
参考	351
参考峰	289, 290, 351
参考离子	351
参数	
定量	153, 157
定性	118
方法建立	88
峰	119
GC	91
GC 温度	345
GC 压力	344
格式	142
进样器	103
MS	95
如果“扫描”和“SIM”都被选中。	99
扫描	98
相似度检索	285, 286
选择性离子监测	98
仪器	12, 91, 95
操作	
一般	60
质谱	269, 283
自动	284
操作流程图, 软件	9, 10
操作问题和补救措施	261
操作系统	349
操作注意事项	X
差减结果相似度检索	130, 156
拆卸离子源箱	217, 219
拆卸排斥极电极	219
处理	125
背景	113
峰	269, 300
峰积分	269
结束峰	280
批	125, 127, 189, 341
时间	280
使用时间程序	281
拖尾	276
相似度检索	284
质谱操作	284
重叠流出峰	276
自动偏差	274
创建	
报告格式	163
批处理表	175, 189
校准曲线	147
新项目	62
组分表	139
窗口	
报告	163
采集方法建立	83, 84
定量数据分析	138, 149
定性数据分析	109
方法建立	83
后处理分析	135
批处理表	175, 189
数据采集	84
数据分析	135
相似度检索结果	129, 154
校准曲线	136
窗口方法	291
窗口识别方法	357
垂直分离	276
词汇表	339, 340
磁盘, 安装	234
错误	
分析	267
GCMSsolution2 软件启动	262
MS 灯丝打开	264
软件启动	262
真空系统启动	263
真空系统自动启动	263
自动调谐	265
自动调谐分析	265
D	
DAO 安装	243
Deflector	343
Detector	343
打开报告格式文件	171
打开方法文件对话框	63
打开和保存文件	63
大口径毛细管柱	357
大内径厚膜毛细管柱	347
Dynode, Conversion	342
打印报告	171
打印出的报告	132
打印出的调谐报告	57
打印结果	132, 160
打印图像报告	132, 160
打印图像预览	160
待机	105
担保, 例外项目	i
弹出式菜单	187
单次运行设置	102
单位, 原子质量	340
单元格	201
单元格排列	203
导入数据	171

登录对话框	23, 29, 36
灯丝	46, 214, 215, 264, 268, 324, 329, 344
错误	264
更换	214, 215
点对点校准曲线	298, 349
电离, 化学	342
电流, 发射	343
电压, 电子	343
电源	vi
电源要求	vi
电源, 电	vi
电源, RF	50, 268, 352
电源, RF 电源	50, 268, 352
电子电压	343
电子碰撞	339, 343
吊架, 安装色谱柱	18
调谐	41, 52, 54, 164, 344, 356
报告	57
结果	56
条件	55
文件	52, 60, 103, 344
系统检查	41
调谐信息对话框	54
调整	
灵敏度	353
质量模式	347
注意事项	xi
调整分辨率	55
顶部进样口组件	228
定量	
参数	153, 157
分析	135, 139, 140
计算	139, 288, 294
结果	139
结果模板	161
视图	138
数据分析窗口	138, 149
定量参数对话框	146
定量处理	350
定量结果视图	193
定量浏览器	193
定量, 执行	149
定性	
参数	118
分析	110
数据分析窗口	109
定制报告	133, 160
定制报告, 生成	163
对话框	
保存为模板	80
打开方法文件	63
打印	171
登录	23, 29, 36
调谐信息	54
定量参数	146
峰积分时间程序	122
GC 程序	94
高级真空控制	223
加载方法	150

另存为	170
MS 程序	100
设置	176, 190
设置选项	81
属性	168
添加用户	71
添加组	74
系统管理	70
系统检查	42, 44
系统检查结果	52
系统配置	39
项目选择	62
新文件	81, 161
选择基线	116
选择数据文件	103, 104, 190
样品登录	102
页面设置	167
用户属性	72
真空控制	25, 38, 223
重置消耗品	46
转换事件日志	76
自动调谐	56
多重参考相对保留时间方法	290, 348
多重组分分析	2

E

Event Time	344
二次方 / 立方校准曲线	297, 350

F

Feed-through	344
Filament	344
File	344
Library	346
Method	348
Formula, Molecular	348
发射电流	343
发现的主题列表	66
反射器	
离轴	349
方法	347
窗口	291, 357
定量计算	294
多重参考相对保留时间	290, 348
归一化	348
建立	83, 84, 86, 110, 139
建立参数	88
建立窗口	83
建立, 采集窗口	84
绝对保留时间	288, 340, 351
平均 RF	340

溶剂冲洗	354
Savitzky-Golay	353
时间段	291, 341, 355
文件	60, 88, 173, 344, 348
相对保留时间	289, 351
分辨率	351
分割峰	126
分离	217
分离, 垂直	276
分流进样	354
分流口	354
分析	86
定量	135
定性	110
多重组分	2
后处理	135, 173, 174, 189
连续	173
实时	88, 173
实时, GC/MS	23, 29, 36
执行	188, 191
自动	173, 175
自动, 后处理	174, 189
分析步骤, 定量	139
分析步骤, 定性	110
分析处理, 定量	140
分析窗口	
定量	138, 149
定性	109
后处理	135
分析错误	267
分析错误, 自动调谐	265
分析未知峰	157
分析系统, GC/MS	3
分子离子	348
分子式	348
分子式, 分子	348
峰	
报告	349
参考	290, 351
处理	269, 280, 300
处理时间	280
基	341
积分	111, 116, 118, 119, 125, 142
积分参数	118, 119
积分, 时间程序	122
积分, 手动	116
积分, 自动	118
检测与斜率	273
轮廓	349
使用时间程序的处理	281
手动积分选择	116
未知	157
识别	288, 304
重叠流出	275, 276
峰积分时间程序对话框	122
峰宽	120, 123, 165, 270, 272, 300
风扇, 清洁	225
浮动面板	166
附件, 标准	7

G

GC

参数	91
程序对话框	94
高级系统检查	48
基本知识	12
检查	41
检查项目	48
维护项目	45
温度参数	345
压力参数	344
仪器参数	91
载气泄漏检查	226
GC/MS	2, 3, 232, 339
分析系统	3
实时分析	23
GC/MS 实时分析	29, 36
GCMS 帮助	65, 66
GCMS-QP2010 Plus	1
GCMS-QP2010 Plus 后视图	3
GCMS-QP2010 Plus 离子源	5
GCMS-QP2010 Plus 正视图	3
GCMSsolution2	
安装	234
软件启动错误	262
卸载	240
概述	
保护功能	268
定量分析	135
定性分析	109
GCMS-QP2010 Plus	1
连续分析	173
数据采集	83, 86, 109
系统检查	41
杆, 四极	350
高级 GC 标签, 系统检查	48
高级 MS 标签, 系统检查	45, 49, 51
高级真空控制对话框	223
高灵敏度	2
高压气注意事项	ix
高质量范围	2
隔垫吹扫	353
格式, 创建报告	163, 167
格式参数	142
格式文件	
报告	60, 167, 170
更改批处理表的列	187
更换	
灯丝	214, 215
色谱柱	30
更换部件	ii
更换机械泵油	222
更换色谱柱	31
工具栏	85, 109, 136, 137
工具栏, 报告	164
功能	
保护	268
检索后	287

软件	8
相似度检索	285
预检索	286
真空系统保护	268
工作站	325
故障处理	261, 300
关闭仪器	26
关闭与启动	14
关闭真空系统	30
关闭, 日常	27
管理文件	60
管理员, H/W	68
管理, 系统	67, 70
规格	323
归一化	
方法	348
面积	294, 340
修正的面积	294, 295, 342
过滤器, 四极质量	350

H

H/W 管理员	68
号, ID	288
后处理分析	135, 173, 189
窗口	135
连续	191
自动	174, 189
后视图, GCMS-QP2010 Plus	3
化学电离	342
环境措施	xvii
环境, 周围	vii
汇总报告	196
汇总表 (浓度)	164
汇总表 (组分)	164

J

基本知识, GC	12
级别, 校准	346
ID 号	288
积分	
参数	119, 269
峰	111, 116, 118, 119, 122, 125, 142
手动	116
自动	118
基峰	341
Injection	
Splitless	354
Interface	345
Internal Standard	345
Ion Source	345

Ion Source Box	345
Ionization	345
计算, 定量	139
计算机	325
计算机接口卡	247
计算机接口卡驱动程序	248
计算, 定量	288, 294
计算, 显示结果	114
计算, 相似度检索	285
基线	50, 116, 117, 118, 270, 300
基线, 指定一条新的	118
机械泵	6, 24, 46, 222, 324, 328, 339, 352
更换泵油	222
加载方法对话框	150
检测器	46, 268, 324, 331, 343
检测, 峰	273
检查	
GC	41, 48
MS	41, 50
系统	41, 42
载气泄漏	226
真空泄漏	230
自动调谐后	51
检查泄漏	226
减除, 背景	341
简介	xviii, 11
建立	
方法	83, 84, 88, 139
建立, 方法	83
建立, 方法	86, 88, 110, 139
监视器, 仪器	84, 85, 107
检索	
谱库	164, 325, 346
相似度	111, 128, 139, 153, 154, 285, 286, 346
执行	284
自动	284
检索后功能	287
检验定量结果	139
接地	345
结果	
打印	132, 160
调谐	56
检验	139
确认	149
相似度检索	132
结果表	151
结果窗口	
相似度检索	129, 154
组分表	154
接口	345
接口卡	
安装	247
安装驱动程序	248
接口, 传输流路	355
结束峰处理	280
紧凑	2
进样	
不分流	354
方式	90

分流	354
口	x, 12, 15, 228
口, 连接色谱柱	18, 31
直接	343
进样器参数	103
警告标签	xii
聚胺酯压环	19, 31, 357
聚焦栏	201
聚焦销钉按钮	201
绝对保留时间方法	288, 340, 351
绝对误差范围	292

K

开始	105
开始行标签	177
可选值	40
可用的 GC/MS 模块	40
空螺母	341
控制范围	92
控制区域, 温度	355
口, 分流	354
口, 进样	x, 12, 15, 228
口, 排气	350

L

LED 指示灯错误指示	261
Lens Stack	346
Levels, Calibration	346
Library File	346
Library Search	346
Linear	346
冷凝	342
利用	
用于真空检查的石油醚	233
用于真空泄漏检查的峰监测	231
利用 T.DBL 改变峰宽	278
利用 T.Dbl 改变, 斜率和峰宽	278
利用峰监测检查真空泄漏	231
利用石油醚检查真空	233
利用石油醚, 检查真空	233
离轴反射器	349
离子化	345
离子源	5, 46, 216, 324, 345
离子源箱	345
拆卸	217, 219
清洁	216, 221
图解	214, 217
重新组装	219
离子源, GCMS-QP2010 Plus	5
离子, 参考	351

离子, 分子	348
连接	
将色谱柱连接至 MS	20, 33
将色谱柱连接至进样口	18, 31
连续分析	173
连续分析, 执行	188
连续后处理分析, 执行	191
灵敏度调整	353
灵敏度, 高	2
流程图, 软件操作	9, 10
浏览文件	199
流量设置范围	92
流路图解	226
轮廓, 峰	349
螺母, 空	341

M

m/z	348
Maintenance Parts	347
Mass Calibration	347
Mass Number	347
Mass Pattern Adjustment	347
Mass Spectrum	347
Megabore Column	347
Method	
File	348
MIC	116
Molecular Formula	348
MS	
安装驱动程序	252
参数	95
灯丝打开错误	264
检查	41, 50
LED 指示灯错误状态	261
连接色谱柱	20, 33
启动	22
维护项目	46
MS 程序对话框	100
MS 真空泄漏检查	230
毛细管柱	341
大口径	357
大内径厚膜	347
连接至 MS	33
连接至进样口	18, 31
小口径	348
毛细管, 石英	353
密封面, 前门	231
面板, 浮动	166
面积 / 高度, 最小	282
面积归一化	294, 340
面积归一化, 修正的	294, 295, 342
命令	170
命令, 菜单	133
模板	80, 161

目标 355

谱库文件 60, 155, 344, 346

N

NCI 348
NIST 348
Number, Mass 347
内标 294, 345, 356

O

O 型环 349

P

Parts
 Consumable 342
 Maintenance 347
PDF 输出 305
Peak
 Base 341
 Report 349
PFTBA 349
PostScript 打印机驱动程序 306
Pt 传感器 350
Purge Vent 350
排放速度 343
排气口 350
配置, 系统 39
批处理 125, 127, 341
批处理表 186, 189, 190
 创建 175, 189
 窗口 175, 189
 更改列 187
 向导 - 标准样品 (1) 181
 向导 - 标准样品 (2) 183
 向导 - 初始画面 180
 向导 - 未知样品 (1) 184
 向导 - 未知样品 (2) 185
批处理文件 60
偏差处理, 自动 274
偏转器 343
漂移 120
平滑 121, 271, 282, 353
平均 RF 299
 方法 340
 校准曲线 299
平均, 质谱 113, 283
谱库检索 164, 325, 346

Q

气
 入口, 载气 14
 载 226
 注意事项, 高压 ix
启动 MS 22
启动错误
 软件 262
 真空系统 263
启动仪器 14
启动与关闭, 仪器 14
启动, 日常 27, 29
气体
 要求 13
 预防措施, 高压 ix
 载气 viii, ix, 13, 14
Quantitation 350
期限 i
气相
 色谱 v, 1, 3, 339
气相, 色谱 339
前门与密封面 231
清洁
 风扇 225
 离子源箱和推斥极电极 216, 221
驱动程序
 计算机接口卡, 安装 248
 MS, 安装 252
曲线
 创建校准 147
 点对点校准 298, 349
 二次方 / 立方校准 297, 350
 线性校准 296
 校准 160, 164, 296, 341, 346, 349
区域, 温度控制 355
权限, 指定的 68
确定 T.DBL 279, 303
确定半峰宽值 272
确认 197
确认结果 149

R

Report
 Peak 349
Resolution 351
日常关闭 27
日常启动 27, 29
溶剂冲洗方法 354
如果“扫描”和“SIM”都被选中。

参数	99
入口, 载气	14
软件	325
安装	234
操作流程	9, 10
概述	8
功能	8
启动错误	262

S

Savitzky-Golay 方法	353
Search	
Library	346
Similarity	346
Sensitivity Adjustment	353
Septum Purge	353
Silica Capillary	353
Similarity Search	346
Source, Ion	345
Spectrum	
Mass	347
Splitless Injection	354
Standard	
External	345
扫描	
参数	98
速度	353
色谱图	342
视图	109, 110, 124, 136, 137, 138
总离子	116, 339, 355
色谱图 / 质谱视图	84, 85
色谱图单元格	201
色谱图和质谱	132
色谱图视图	193
色谱仪, 气相	324
色谱柱	164
吊架	18
更换	30, 31
连接至 MS	20, 33
连接至进样口	18, 31
色谱, 气相	iii, v, 1, 3, 12, 339
设置范围, 流量	92
设置选项对话框	81
设置, 单次运行	102
生成定制报告	163
事件	343
时间程序	281
峰处理	281
峰积分	122
时间段方法	291, 341, 355
事件时间	344
示例, 安装	328
实时分析	23, 29, 36, 88, 173
视图	
布局	163, 168

色谱图	109, 124, 136
色谱图 / 质谱	84, 85
校准表	137
校准曲线	137, 148
仪器方法	84
质谱	109, 128
组分表	137
视图, 质谱	136
石英毛细管	353
使用	
帮助	65
报告格式文件	171
手册	xviii
手册, 使用	xviii
手动积分	116
数据	
分析	106, 325
数据, 导入	171
数据采集	83, 84, 86, 105, 110, 139, 173
窗口	84
概述	86
流程	87
自动	173, 175
数据分析	106, 110, 325
窗口	135
定量	138, 149
定性	109
自动	173, 175
数据库	343
数据类型	195
数据浏览器	61, 109, 136, 147, 149, 163, 201
数据文件名标签	178
数据文件树	137
输入, 顺序	187
属性对话框	168
属性, 组	75
数, 质量	347
顺序输入	187
四极	2, 350, 351
四极质量过滤器	350
四极质谱仪	350
速度, 排放	343
缩写	339
索引	
检索	345, 353
索引检索	345, 353

T

T.DBL	120, 124, 271, 278, 300, 303
改变斜率和峰宽	278
确定	279, 303
Temperature Control Zones	355
Triazine	356
Triazine (三嗪)	356
Tuning	356

特性	2
添加用户对话框	71
添加组对话框	74
条件, 调谐	55
条款	i
停止	106
统计	196
透镜组	346
图解	
离子源箱	214, 217
流路	226
四极质谱仪	350
排斥极电极	217
拆卸	219
清洁	216, 221
重新组装	219
退出 GCMSsolution	26
拖尾处理	276

W

Vent, Purge	350
Wide Bore Capillary Column	357
Windows 安装	234
外标	295, 344
维护	213
维护部件	329, 330, 347
维护项目, GC	45
维护项目, MS	46
维护注意事项	xi
未知	
峰, 分析	157
批处理表向导	184
样品注射	139
未知样品, 批处理表向导	185
温度参数, GC	345
温度控制区域	355
文件	344
报告格式	60, 166, 167, 170, 344
打开和保存	63
调谐	52, 54, 60, 103, 344
方法	60, 88, 173, 344, 348
管理	60
批处理	60
谱库	60, 155, 344, 346
使用报告格式	171
文件夹标签	178
问题和补救措施	261
涡轮分子泵	357
误差范围	292

X

系统	
操作	349
真空	26, 38, 263, 268, 324
系统管理	67, 70
系统管理对话框	70
系统检查	41, 42
表	53
调谐	41
GC 高级参数标签	45, 49, 51
高级 GC 标签	48
系统检查对话框	42, 44
系统检查结果对话框	52
系统配置	39
系统配置对话框	39
系统, GC/MS	3
显示质谱	112
显示质谱计算结果	114
显示, 质谱	112
线性	296, 346
线性校准曲线	296
相对保留时间方法	289, 351
相对保留时间方法, 多重参考	290, 348
相对误差范围	292
项目选择对话框	62
项目, 创建新	62
相似度检索	111, 130, 131, 139, 153, 155, 285, 286, 346
报告选择	133
参数	286
功能	285
计算	285
结果	132
结果窗口	129, 154
所显质谱	128
执行	284
自动	284
组分表	154
消耗性部件	329, 342
小口径毛细管柱	348
校准	164, 288, 296, 346
表视图	137
级别	346
质量	347
校准级别	346
校准曲线	160, 164, 197, 296, 341, 346, 349
创建	147
窗口	136
点对点	298, 349
二次方 / 立方	297, 350
平均 RF	299
视图	137, 148
线性	296
信息	137
校准视图	193
校准, 质量	347
泄漏	
检查	226

利用峰监测检查真空	231
载气检查	226
真空检查	230
斜率	119, 123, 270, 272, 300
峰检测	273
利用 T.DBL 改变峰宽	278
斜率, 峰检测	273
卸载 GCMSsolution2	240
新文件对话框	81, 161
信息, 校准曲线	137
信息, 保证	i
新项目, 创建	62
性能	323
修正的面积归一化	294, 342
修正面积归一化	295
修正, 背景	283
选择基线对话框	116
选择数据文件对话框	103, 104, 190
选择性离子监测	2, 339, 354
参数	98

Y

压环	
聚胺酯	19, 31, 357
压力参数, GC	344
压力密封载气	229
样品	
类型	352
注册	86
注射	110, 139
样品 ID 列, 自动填写	187
样品登录对话框	102
要求	
安装	327
电源	vi
气体	13
页眉 / 页脚	169
页面设置对话框	167
一般操作	60
移动检测点	125
仪器	
参数	12, 55, 91, 95
方法视图	84
关闭	26
监视器	84, 85, 107
启动	14
转交	xi
应急处理	xvi
应急, 处理	xvi
硬件	324
用户对话框, 添加	71
用户属性对话框	72
用户、组和权限等级	67
右键单击弹出菜单	187
预防措施	

高压气	ix
预放大器	349
预检索功能	286
原子质量单位	340
源, 离子	5, 46, 216, 324, 345

Z

Zones, Temperature Control	355
载气	viii, ix, 13, 14, 226
GC 泄漏检查	226
入口	14
压力密封	229
在失败时运行自动调谐	41
真空泵维护	222
真空控制对话框	25, 38, 223
真空启动完成	25
真空系统	26, 38, 263, 268, 324
保护功能	268
关闭	30
关闭完成	26
启动错误	263
启动完成	38
自动启动错误	263
真空泄漏检查, MS	230
针芯阀	348
正视图, GCMS-QP2010 Plus	3
识别, 峰	288, 304
指定的权限	68
指定谱库质谱	131, 156
指定一条新的基线	118
直观操作	2
直接进入	343
质量单位	340
质量过滤器, 四极	350
质量模式调整	347
质量数	347
质量校准	347
质谱	283, 292, 347
背景修正	283
操作	269, 283, 284
操作, 执行	284
操作, 自动处理	284
平均	113, 283
色谱图	132
视图	109, 128, 136
显示	112
显示结果	114
相似度检索	128
质量	283, 292, 347
自动操作	284
质谱单元格	201
质谱图	142
质谱仪	v, 1, 3, 4, 339
图解	350
质量	v, 1, 3, 4, 339

质谱仪, 四极质量	350	视图	137
质谱仪, 质量	339	向导	141
指数, 保留	287	相似度检索结果	154
执行		组分查找器	342
定量	149	组分名称	3
连续分析	188	组属性	75
连续后处理分析	191	最小面积 / 高度	282
相似度检索	284	“打印”对话框	171
质谱操作	284	“另存为”对话框	170
重叠流出峰	275, 276	“设置”对话框	176, 190
重新组装离子源箱	219		
重新组装排斥极电极	219		
重置项目	47		
重置消耗品对话框	46		
周围环境	vii		
柱			
大口径	357		
毛细管	341		
小口径	348		
注射			
未知	139		
样品	86, 110		
助手栏	85		
注意事项	213		
安全操作	iii		
安装	vi		
安装现场	v		
操作	x		
调整	xi		
检查	xi		
维护	xi		
传感器, Pt	350		
转换倍增器	342		
转换标签, ASCII	179		
转换事件日志对话框	76		
转交仪器	xi		
传输流路接口	355		
状态指示, LED 指示灯	261		
自动			
处理, 相似度检索	284		
处理, 质谱操作	284		
峰积分	118		
后处理分析	174, 189		
偏差处理	274		
数据采集	173, 175		
数据分析	173, 175		
自动调谐	56, 340		
错误	265		
对话框	56		
检查	51		
在失败时运行	41		
自动进样器	89, 340		
自动启动错误, 真空系统	263		
自动填写样品 ID 列	187		
总离子色谱图	116, 339, 355		
组	158, 164, 293, 345		
组分表	136, 147, 158		
创建	139		
定量参数	153, 157		

