

典型虚拟仿真实验教案

实验一 GC-MS 联用技术在中药活性成分分离分析中的应用

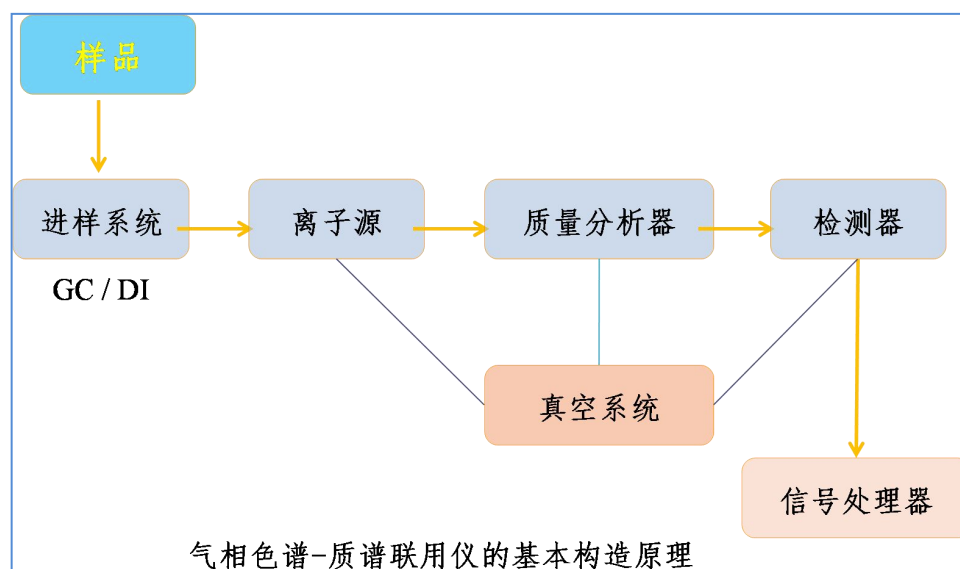
实验目的：

- (1) 了解气相色谱-质谱联用仪的基本构造，熟悉工作站软件的使用；
- (2) 了解运用 GC-MS 仪分析简单样品的基本过程。

基本原理：

气相色谱法是利用不同物质在固定相和流动相中的分配系数不同，使不同化合物从色谱柱流出的时间不同，达到分离化合物的目的。质谱法是利用带电粒子在磁场或电场中的运动规律，按其质荷比 (m/z) 实现分离分析，测定离子质量及强度分布。它可以给出化合物的分子量、元素组成、分子式和分子结构信息，具有定性专属性、灵敏度高、检测快速等特点。

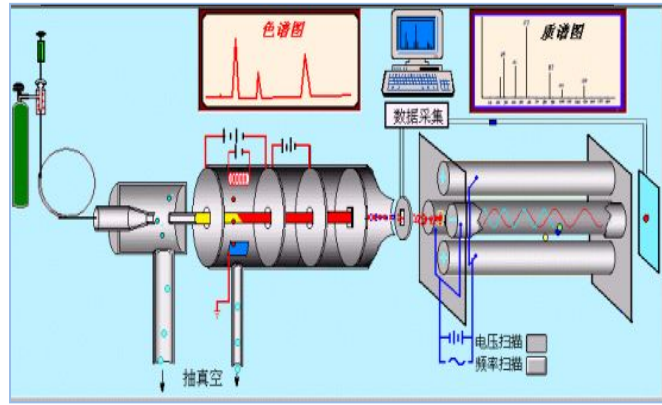
气相色谱-质谱联用仪兼备了色谱的高分离能力和质谱的强定性能力，可以把气相色谱理解为质谱的进样系统，把质谱理解为气相色谱的检测器。气相色谱-质谱联用仪的基本构成为：



本实验中待分析样品为中药材诃子的醇提液，各组成物质的混合样品经 GC 分离成一个一个单一组份，并进入离子源，在离子源样品分子被电离成离子，离子经过质量分析器之后即按 m/z 顺序排列成谱。经检测器检测后得到质谱，计算机采集并储存质谱，经过适当处理可得到样品的色谱图、质谱图等。

操作要求：

- 1、通过虚拟仿真软件了解气相色谱-质谱联用仪原理以及基本结构：



GC-MS 联用仪组成示意图

2、通过演示模拟诃子成分的分离分析过程，对气相色谱-质谱联用仪的使用操作做进一步的了解，从而熟悉气相色谱法与质谱的装置以及操作。



GC-MS 联用仪对中药成分的分离分析

3、通过仿真模拟三个未知成分的分离分析过程，来掌握气相色谱-质谱联用仪的基本使用，如参数的设置、进样、谱图的处理以及数据的保存。



GC-MS 联用仪虚拟仿真控制系统

使用操作数据记录与处理：

1、对得到的总离子流色谱图（TIC），在不同保留时间处双击鼠标右键得相

应的质谱图；

2、在质谱图中，双击鼠标右键，得到相应的匹配物质，根据匹配度可对各峰定性；

3、列出所有的物质，并结合其他知识确定各峰所对应的具体物质名称；

4、绘制样品的总离子流色谱图，给出色谱峰定性结果（含质谱检索结果、物质名称、保留时间）

5、完成下列表格，判断属于何种物质。

序号	保留时间	定性分析结果	分子结构式

思考题：

1、GC-MS 仪是如何得到总离子流色谱的？

2、质谱仪主要由那几个部分组成？最简单的气质联用仪由那几个部分组成？

3、使用气-质联用仪应该注意哪些关键环节的参数设定？