

ICS 71.040.40  
G 04



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 6041—2002

---

## 质谱分析方法通则

General rules for mass spectrometric analysis

2002-09-24 发布

2003-04-01 实施

---

中华人民共和国  
国家质量监督检验检疫总局 发布

## 目 次

前言 .....	Ⅲ
1 范围 .....	1
2 术语 .....	1
3 概要 .....	2
4 仪器 .....	2
5 评价仪器的一般规定 .....	3
6 仪器的性能测试 .....	4
7 定量方法 .....	5

## 前 言

本标准是等效采用日本工业标准 JIS K 0118:1979(1989)《质谱分析方法通则》对 GB/T 6041—1985《化工产品用质谱分析方法通则》进行的修订。

本标准与 JIS K 0118:1979(1989)的主要差异是:在标准的适用范围上不只限于对气体和蒸汽样品的测定以及不只限于使用电子电离源的电离方法,在离子源中增加了化学电离源、表面电离源等。增加了直接进样和色/质联用进样方式。增加了术语部分及计算机控制和数据处理系统一节。

本标准对 GB/T 6041—1985 的主要修订内容为:为反映当前质谱发展的新技术,以附注的方式增加了其他离子化方式及质量分析器;增加了计算机控制和数据处理系统;增加了仪器安装条件;在术语部分,增加了定量分析常用的“总离子流图”、“信噪比”等。

本标准自实施之日起,代替 GB/T 6041—1985。

本标准由原国家石油和化学工业局提出。

本标准由全国化学标准化技术委员会有机分会归口。

本标准起草单位:中国石油化工股份有限公司北京化工研究院。

本标准主要起草人:张颖、赵梅君。

本标准于 1985 年 5 月首次发布。

本标准委托全国化学标准化技术委员会有机分会负责解释。

## 1 范围

本标准规定了用质谱仪进行物质定量分析的一般方法。

## 2 术语

本标准采用下列定义。

### 2.1 本底 background

在与分析样品相同的条件下,不送入样品时所产生的质谱。

### 2.2 灵敏度 sensitivity

在规定的条件下,对于某个质谱峰,仪器对单位样品所产生的响应值。

### 2.3 分辨能力 resolution

在给定的样品条件下,仪器对相邻的两个质谱峰的区分能力。相邻等高的两个质谱峰,其峰谷不大于峰高的10%时,就定义为可以区分。两个峰的分辨能力 $R$ 的表示法是当峰谷为峰高的10%时,两峰所表示的质量的平均值与质量差的比值。当描述所用的质谱峰的质荷比时,列出对应的分辨能力数据是适宜的,因为不同的仪器,其分辨本领随质荷比的不同而有变化。

### 2.4 干扰 interference

在混合样品中测定一个组分的浓度时,妨碍准确度的因素。

### 2.5 检验用混合物 test mixture

已知组成的混合物,其组成与待测样品相近,通常是由纯物质配制而成。

### 2.6 仪器校准样品 samples for checking instruments

为检验仪器的灵敏度和操作条件,常取规定的纯物质的质谱作为一种判断依据。这种纯物质叫做仪器校准样品。

### 2.7 选择离子检测 selected ion monitoring

选择离子检测技术是混合物进行定量分析的一种常用方法。选择能够表征该成分的一个质谱峰进行检测,称为单离子检测(SID),选择多个质谱峰进行检测,称为多离子检测(MID)。这种方法的灵敏度,高于全谱扫描方法,多用于痕量成分的测定。

注:通过数据处理从全谱中选出特定离子的质谱峰进行检测也是常用的方法,叫做选择离子检索(selected ion retrieval),也叫质量碎片法或质量色谱法,它的灵敏度和选择离子检测相比约低2~3个数量级。

### 2.8 总离子流色谱图 total ion chromatogram

未经质量分离的各种质荷比离子所产生的总电流强度与时间相对应的关系图。

### 2.9 信噪比 signal to noise ratio

在质谱分析中,信号强度与噪声强度的比值。