



中华人民共和国国家计量技术规范

JJF 1930—2021

有机高分辨扇形磁场质谱仪校准规范


Calibration Specification for Organic High Resolution
Magnetic Sector Mass Spectrometers

2021-10-18 发布

2022-04-18 实施

国家市场监督管理总局 发布

**有机高分辨扇形磁场
质谱仪校准规范**
**Calibration Specification
for Organic High Resolution
Magnetic Sector Mass Spectrometers**



JJF 1930—2021

归口单位：全国物理化学计量技术委员会

主要起草单位：中国计量科学研究院

中国检验检疫科学研究院综合检测中心

参加起草单位：中国环境监测总站

本规范委托全国物理化学计量技术委员会负责解释

本规范主要起草人：

汤 桦（中国计量科学研究院）

陈大舟（中国计量科学研究院）

李 翔（中国检验检疫科学研究院综合检测中心）

参加起草人：

谢南南（中国检验检疫科学研究院综合检测中心）

邵明武（中国计量科学研究院）

于海斌（中国环境监测总站）

目 录

引言	(II)
1 范围	(1)
2 引用文件	(1)
3 术语和计量单位	(1)
3.1 质量分辨率	(1)
3.2 质荷比	(1)
3.3 选择离子检测	(1)
3.4 质量准确性	(1)
3.5 质量稳定性	(1)
3.6 信噪比	(1)
3.7 扫描速度	(1)
4 概述	(1)
5 计量特性	(2)
6 校准条件	(2)
6.1 实验室环境	(2)
6.2 测量标准及其他器具	(3)
6.3 试剂	(3)
7 校准项目和校准方法	(3)
7.1 质量范围	(3)
7.2 质量准确性	(3)
7.3 质量稳定性	(4)
7.4 质谱分辨率	(4)
7.5 信噪比	(4)
7.6 同位素丰度比重复性	(5)
7.7 保留时间重复性	(5)
8 校准结果表达	(5)
9 复校时间间隔	(6)
附录 A 校准原始记录格式	(7)
附录 B 校准证书内页格式	(9)
附录 C 信噪比不确定度评定示例	(11)
附录 D 全氟三丁胺 (FC43)主要离子的理论质荷比	(15)
附录 E 全氟煤油 (PFK)主要离子的理论质荷比	(16)

引 言

本规范依据 JJF 1071—2010《国家计量校准规范编写规则》、JJF 1001—2011《通用计量术语及定义》、JJF 1059.1—2012《测量不确定度评定与表示》编制。

本规范的制定主要参考了 GB/T 33864—2017《质谱仪通用规范》、GB/T 6041—2020《质谱分析方法通则》、JJF 1164—2018《气相色谱-质谱联用仪校准规范》、GB/T 32267—2015《分析仪器性能测定术语》等文件。

本规范为首次发布。

有机高分辨扇形磁场质谱仪校准规范

1 范围

本规范适用于有机高分辨扇形磁场质谱仪的校准。

2 引用文件

本规范引用了下列文件：

JJG 196—2006 常用玻璃量器检定规程

JJG 646—2006 移液器检定规程

GB/T 6041—2020 质谱分析方法通则

GB/T 32267—2015 分析仪器性能测定术语

GB/T 33864—2017 质谱仪通用规范

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

3 术语和计量单位

GB/T 32267—2015 界定的及以下术语和定义适用于本规范。

3.1 质量分辨率 mass resolution

质谱仪分辨两个相邻质谱峰的质量差的能力。当 M 是两个相邻峰的平均质量， ΔM 是相邻峰的质量差，相邻两个峰的峰谷为峰高的 10% 时，两峰所表示的质量的平均值与质量差的比值，即 $R = \frac{M}{\Delta M}$ 。

3.2 质荷比 mass charge ratio

离子的质量 (m) 与它所带电荷数 (z) 的比值，表示为 m/z 。

3.3 选择离子检测 selected ion monitoring (SIM)

只选择一个或多个特定质量的离子进行检测的过程。

3.4 质量准确性 mass accuracy

质谱仪对离子质量的测量值与理论值之间的偏差。

3.5 质量稳定性 mass stability

质谱仪以标准物标定的质量标尺，在一段时间内，对指定离子质量测量值的变化。

3.6 信噪比 signal-to-noise ratio

被测样品信号强度 S 与基线噪声强度 N 的比值，记为 β 。

3.7 扫描速度 scan speed

在单位时间内扫描（采集）离子质量数目的速度。

4 概述

有机高分辨扇形磁场质谱仪（以下简称质谱仪）的原理是样品分子在进入电离源被