



# 中华人民共和国国家计量技术规范

JJF 1164—2018

---

## 气相色谱-质谱联用仪校准规范

Calibration Specification for Gas Chromatography-Mass Spectrometries

2018-12-25 发布

2019-03-25 实施

---

国家市场监督管理总局 发布

# 气相色谱-质谱联

## 用仪校准规范

Calibration Specification for Gas

Chromatography-Mass Spectrometries

---

JJF 1164—2018  
代替 JJF 1164—2006

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

广州计量检测技术研究院

参加起草单位：北京航天计量测试技术研究所

河南省计量科学研究院

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：**

邵明武（中国计量科学研究院）

何海红（中国计量科学研究院）

何欣（广州计量检测技术研究院）

**参加起草人：**

冯志军（北京航天计量测试技术研究所）

徐锐锋（中国计量科学研究院）

赵迎晨（河南省计量科学研究院）

# 目 录

|                                 |        |
|---------------------------------|--------|
| 引言 .....                        | ( II ) |
| 1 范围 .....                      | ( 1 )  |
| 2 引用文件 .....                    | ( 1 )  |
| 3 术语和计量单位 .....                 | ( 1 )  |
| 4 概述 .....                      | ( 2 )  |
| 5 计量特性 .....                    | ( 2 )  |
| 6 校准条件 .....                    | ( 3 )  |
| 6.1 实验室环境 .....                 | ( 3 )  |
| 6.2 测量标准和试剂 .....               | ( 3 )  |
| 7 校准项目和校准方法 .....               | ( 3 )  |
| 7.1 质量范围 .....                  | ( 3 )  |
| 7.2 质量分辨率 .....                 | ( 3 )  |
| 7.3 质量准确性 .....                 | ( 4 )  |
| 7.4 信噪比 .....                   | ( 5 )  |
| 7.5 峰面积重复性 .....                | ( 5 )  |
| 7.6 保留时间重复性 .....               | ( 6 )  |
| 7.7 气相色谱柱箱温度控制 .....            | ( 6 )  |
| 7.8 谱库检索 .....                  | ( 7 )  |
| 8 校准结果 .....                    | ( 7 )  |
| 9 复校时间间隔 .....                  | ( 7 )  |
| 附录 A 全氟三丁胺主要离子峰值 .....          | ( 8 )  |
| 附录 B 硬脂酸甲酯主要离子峰理论值 .....        | ( 10 ) |
| 附录 C GC-MS 校准原始记录格式 (供参考) ..... | ( 11 ) |
| 附录 D 校准证书内页格式 (供参考) .....       | ( 13 ) |
| 附录 E 信噪比的不确定度评定 .....           | ( 15 ) |

# 引 言

本规范参考 GB/T 32264—2015《气相色谱-单四极质谱仪性能测定方法》、GB/T 32267—2015《分析仪器性能测定术语》，对 JJF 1164—2006《台式气相色谱-质谱联用仪校准规范》进行修订。

与 JJF 1164—2006 相比，除编辑性修改外，主要技术内容变化如下：

——规范名称修改为“气相色谱-质谱联用仪校准规范”（见封面）；

——适用范围增加了三重四极杆、飞行时间和静电场轨道阱型气相色谱-质谱联用仪（见第 1 章）；

——对引用文件进行了调整（见第 2 章）；

——术语和计量单位，修改“分辨力”为“质量分辨率”，增加“质荷比”、“多反应监测”和“选择反应监测”等术语，原子质量单位改为用  $u$  表示（见第 3 章）；

——计量特性中“测量重复性”修改为“峰面积重复性”，增加“保留时间重复性”（见第 5 章中的表 1）；

——“标准物质”修改为“有证标准物质”，增加“八氟萘、六氯苯、硬脂酸甲酯混合溶液标准物质”（见 6.2 表 2）；

——在校准设备中，增加了容量瓶、移液器或移液管等校准设备（见 6.2.2 表 3）；

——计量特性中删除了“外观检查”；

——修订了“负化学电离源信噪比”的校准方法和计量特性指标（见 7.4 和第 5 章中的表 1）；

——校准方法中将“峰面积重复性”与“信噪比”采用相同的标准物质（见 7.4 和 7.5）。

本规范的历次版本发布情况：

——JJF 1164—2006。

# 气相色谱-质谱联用仪校准规范

## 1 范围

本规范适用于实验室使用的质量分析器为离子阱、单四极杆、三重四极杆、飞行时间和静电场轨道阱型气相色谱-质谱联用仪的校准。

## 2 引用文件

本规范引用了下列文件：

GB/T 32264—2015 气相色谱-单四极质谱仪性能测定方法

GB/T 32267—2015 分析仪器性能测定术语

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 原子质量单位 atomic mass unit [GB/T 32267—2015]

核素<sup>12</sup>C 的一个中性原子处于基态时静止质量的 1/12，记为  $u$ 。

### 3.2 质量分辨率 mass resolution [GB/T 32267—2015]

质谱仪分辨两个相邻质谱峰的质量差的能力，本规范以某离子峰峰高 50% 处的峰宽度（简称半峰宽）表示，记为  $W_{1/2}$ ，单位  $u$ 。

### 3.3 质荷比 mass charge ratio; $m/z$ [GB/T 32267—2015]

离子的质量 ( $m$ ) 与它所带电荷数 ( $z$ ) 的比值。

### 3.4 基线噪声 baseline noise

基线峰底与峰谷之间的宽度，单位计数。

### 3.5 信噪比 signal-to-noise ratio [GB/T 32267—2015]

被测样品信号强度  $S$  与基线噪声强度  $N$  的比值，记为  $\beta$ 。

### 3.6 质量色谱图 mass chromatogram [GB/T 32267—2015]

色质联用分析时，特定质量离子的强度随时间或扫描次数变化的曲线。

### 3.7 质量准确性 mass accuracy [GB/T 32267—2015]

质谱仪对离子质量的测量值与理论值之间的偏差。

### 3.8 多反应监测 multi-reactions monitoring; MRM [GB/T 32267—2015]

在串联质谱分析中，母离子经过诱导碰撞活化产生一系列子离子，选择多个母离子及其对应的特定子离子质量进行监测的过程。

### 3.9 选择反应监测 selected-reaction monitoring; SRM [GB/T 32267—2015]

在串联质谱分析中，母离子经过诱导碰撞活化产生一系列子离子，选择一个母离子及其产生的某一特定子离子质量进行监测的过程。