



岛津
SHIMADZU

使用保留指数检索分析玫瑰精油中的未知成分

No.GCMS-018

摘要： 使用气相色谱-质谱联用法，采用EI源，使用保留指数检索对玫瑰精油中的未知成分进行定性分析。

玫瑰精油的成分很复杂，主要成分为： β -香茅醇、反式-香叶醇、 β -苯乙醇、7-辛烯酸乙酯、乙酸香叶酯、金合欢醇等。由于玫瑰花品种的不同，所含成分及含量也会有区别，使得玫瑰精油的香气有着微妙的差异。目前很多分析方法使用气质联用仪对未知成分进行定性分析，使用一般的谱库对未知化合物进行检索，会得到很多相似度接近化合物的结果，很难判断哪个是目标化合物。为了解决这一难题，使用带有保留指数的谱库对未知化合物进行相似度检索，可以进一步缩小检索结果的范围，使检索结果的判断更加准确。分别普通谱库检索与带保留指数谱库检索，对两种检索结果做了对比。

关键词： GCMS 玫瑰精油 保留指数谱库

分离检测条件

Column : RTX-5ms 30m x 0.25mm x 0.25 μ m

Column Flow: 1.69mL/min

Inj Temp. : 250 $^{\circ}$ C

Ion source Temp: 200 $^{\circ}$ C

Interface Temp.: 250 $^{\circ}$ C

Injection Vol. : 1 μ l

Injection Mode: Split

Split ratio: 1:200

Flow Control: Linear Velocity 47.2ml/min

Column Temp: 50 $^{\circ}$ C(1min)20 $^{\circ}$ C/min 140 $^{\circ}$ C

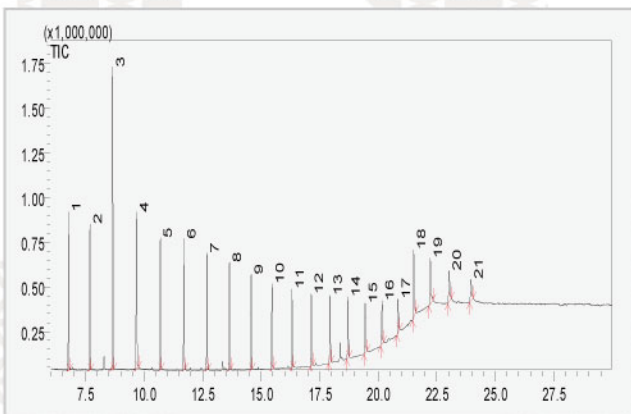
10 $^{\circ}$ C/min 300 $^{\circ}$ C (20min)

Model: Scan 50-500 (m/z)

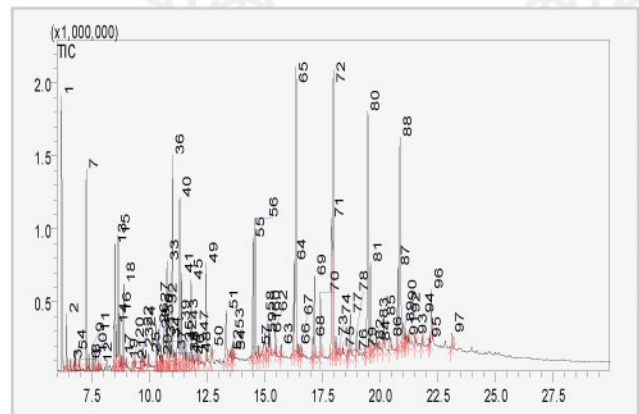
实验部分：

首先用带有C13-C33的正构烷烃标准样品按照样品分析条件进样，得到保留时间，确定保留指数。

按照分析条件进行进样，得到总离子流图。

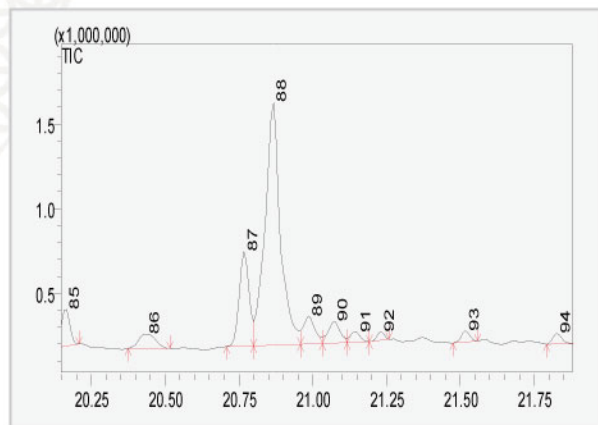


图一 C13-C33正构烷烃标准样品

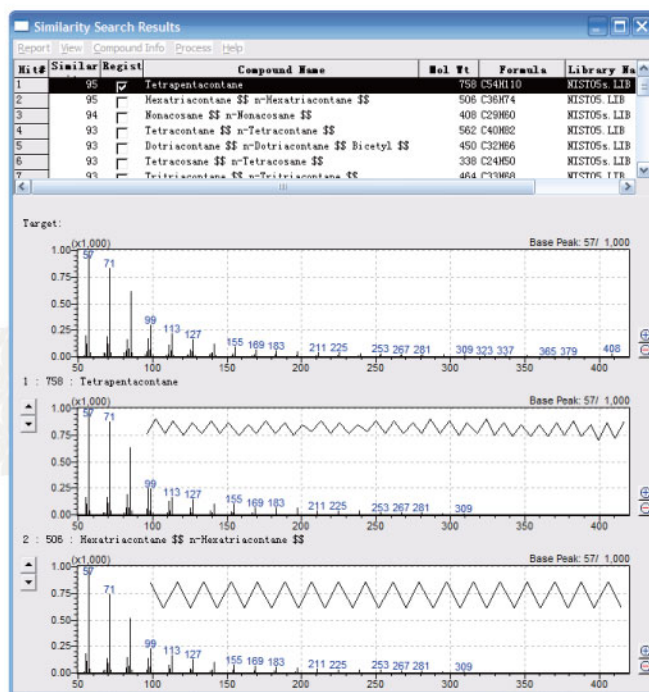


图二 玫瑰精油样品总离子流图

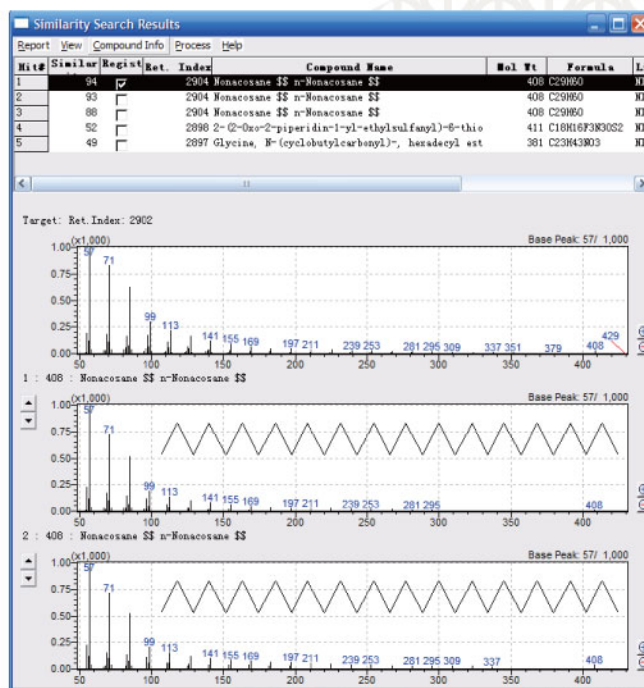
分别使用两种谱库检索方式，对玫瑰精油的成分进行检索，得到以下对比结果。



图三 以88号化合物为例，进行谱库检索比较



图四 未使用保留指数检索结果



图五 使用保留指数检索结果

结论

从以上两种检索方式比较来看，未使用保留指数检索的结果，有多种化合物的相似度非常接近，无法准确对未知化合物定性。而使用保留指数检索的结果，根据化合物在色谱柱上的保留指数，缩小了未知化合物检索的范围，提高了检索的准确性，而且节省了定性分析的时间。