

LabSolutions GCMS 助力实验室分析智能化与高效化

GCMS-586

摘要： 本文介绍了 LabSolutions GCMS 软件结合气质联用仪在分析实验室智能化与高效分析方面的应用。LabSolutions GCMS 软件具有图形化的直观显示方式、多种智能化控制功能、浏览器多数据高效处理、个性化报告模板等特点，助力实验室分析工作变得更加智能与高效。

关键词： LabSolutions GCMS 气质联用仪 智能分析 高效处理

技术特点：

- ❖ LabSolutions GCMS 具有图形化显示、智能控制分析和分子泵待机等功能让实验室分析更加智能。
- ❖ 利用定量浏览器完成数据处理，多数据处理更便捷高效。

在食品、药品、环境、司法等分析实验室中，气质联用（GCMS）是一项成熟可靠的分析手段。实验人员需操作仪器对样品进行分析，对样品中多种目标组分的含量进行数据处理工作，并及时准确提交数据结果。

LabSolutions GCMS 是岛津新一代气质联用仪配套工作站。LabSolutions GCMS 引入了图形化的直观显示方式、多种智能控制功能、涡轮分子泵待机模式、SIM 采集模式分组自动等新功能。在数据处理方面，可实现对各组分单独设置参数，系统适应性自动计算、QC 检查，并可利用数据浏览器实现批量

数据多组分同时处理。并可选配 Peakintelligence AI 峰积分算法，无需调整积分参数，只需选择模型和算法即可获得与经验丰富的分析人员同样的自动积分结果。在报告模板方面，丰富的内置模板可供选择、可根据需求选择性输出色谱峰、并有更多内置参数供用户选择，满足不同行业的监管要求。

LabSolutions GCMS 软件通过智能化功能的引入、内置参数的丰富、多数据处理能力的优化、并引入 Peakintelligence 人工智能技术，助力现代分析实验室向智能化与高效化发展。

■ 适用机型

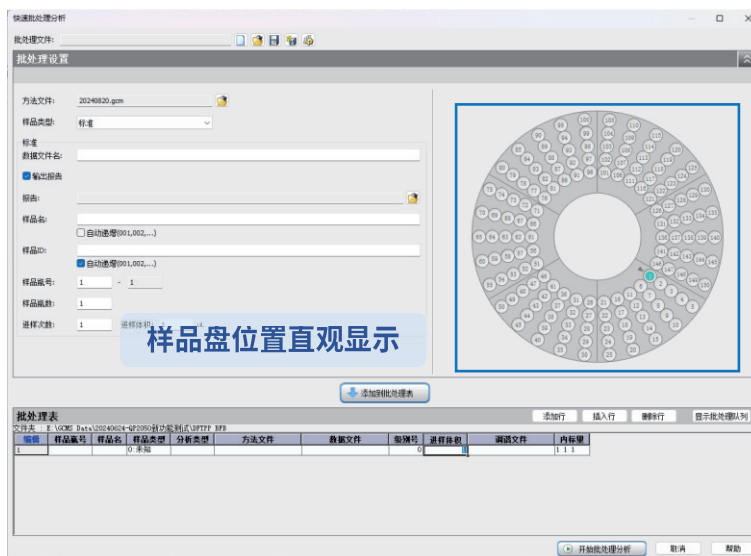
LabSolutions GCMS 可适配岛津全系列气质联用系统，如：GCMS-QP 系列：GCMS-QP2020 NX/QP2050/QP-2050 Entry 和 GCMS-TQ 系列：GCMS-TQ8040 NX/TQ-8050 NX。

■ LabSolutions GCMS 智能化应用

2.1 图形化显示方式



相较于 GCMS Solution 工作站，在 LabSolutions GCMS 中，仪器系统配置信息可选择图形化显示方式，直观了解仪器当前配置情况，并直接设置相关模块参数信息。

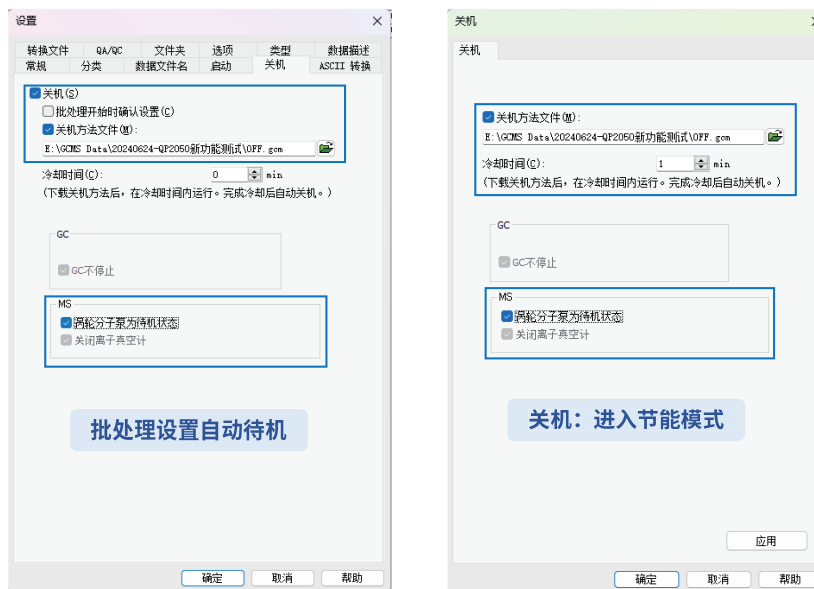


此外，在批处理分析设置中，亦以图形化方式显示样品盘位置信息，通过光标选择方式直接创建批处理文件，更直观便捷与高效。

2.2 自动启停与节能模式

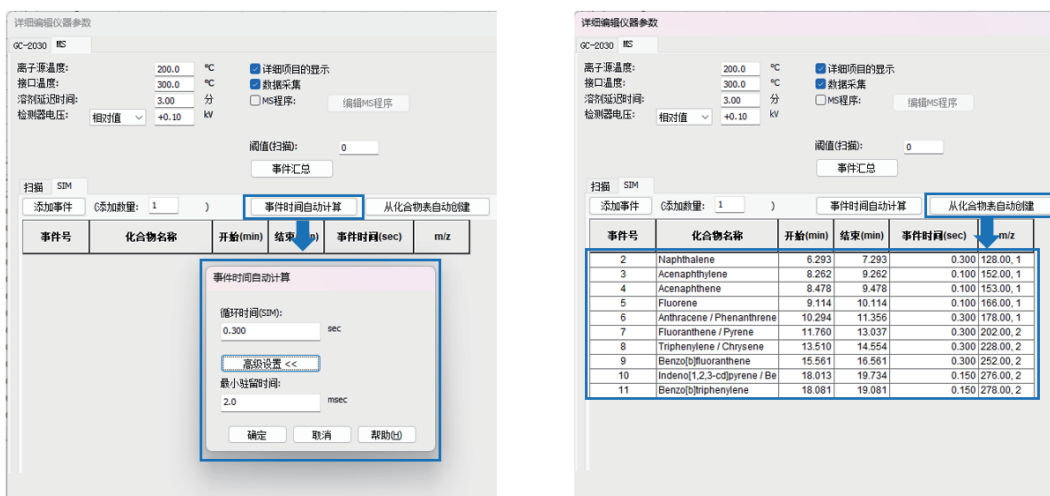
在 LabSolutions GCMS 中，保留了 GCMS Solution 软件中的节能模式 (ECO)，并在批处理设置中通过调用方法文件实现或在实时分析界面通过关机键进入节能模式。

此外，在温度与气体流量节能基础上，新增了涡轮分子泵待机状态，可在分析完成后自动将涡轮分子泵的转速降低至正常运行状态的 70%，关闭离子真空泵，实现延长涡轮分子泵和离子真空泵寿命的目的。



2.3 SIM 采集模式自动分组

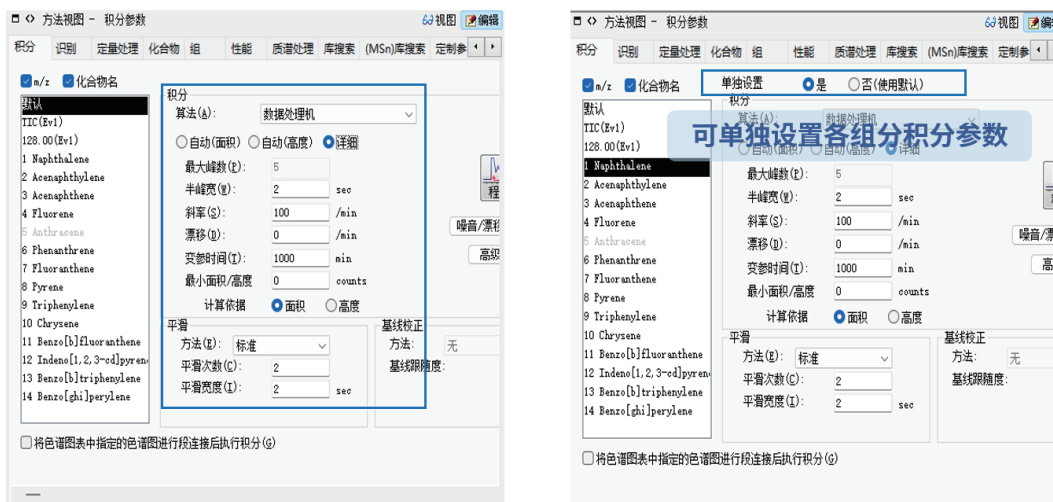
GCMS 分析中，选择离子 (SIM) 是定量分析的常用模式，在 SIM 方法设置中需根据各组分保留时间设置 MS 采集时间窗口，实现各目标离子驻留时间 (Dwell time) 最大化，从而提升分析灵敏度。



LabSolutions GCMS 中，在 SIM 模式下各组分实现自动分组的基础上，可设置方法生成的循环时间和各目标离子允许的最小驻留时间，充分提升多组分同时分析时的灵敏度。

■ LabSolutions GCMS 高效数据处理

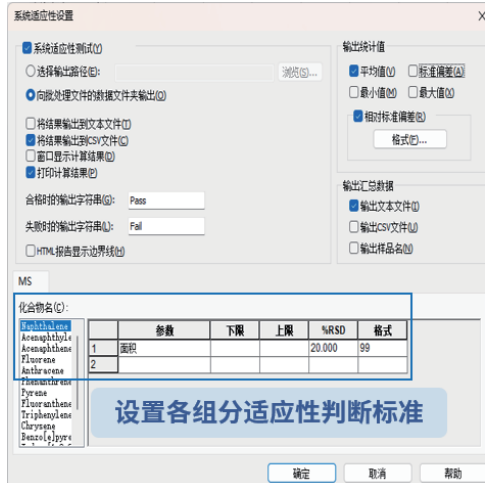
3.1 积分参数单独设置



LabSolutions GCMS 中，可对各组分的积分参数进行单独设置。依据各组分的出峰和灵敏度情况分别设置最优积分参数，避免多组分难以适用相同积分参数而需手动积分的情形。将积分参数保存于对应方法中，利用批处理再解析批量处理数据，实现批量数据高效分析处理，并减少手动积分操作以满足数据合规性要求。

3.2 系统适应性计算

LabSolutions GCMS 中，可利用软件计算系统适应性结果并输出结果文件，并在批处理文件中依据系统适应性计算结果启停批处理，以保证数据结果的合规性和分析高效性，减少无效数据的产生。



<标准>

ID#	化合物名	参数	下限	上限	%RSD
MS-1	Naphthalene	面积	-	-	20.000
MS-2	Acenaphthylene	面积	-	-	20.000
MS-3	Acenaphthene	面积	-	-	20.000

<评价> Pass

软件自动判断适应性结果

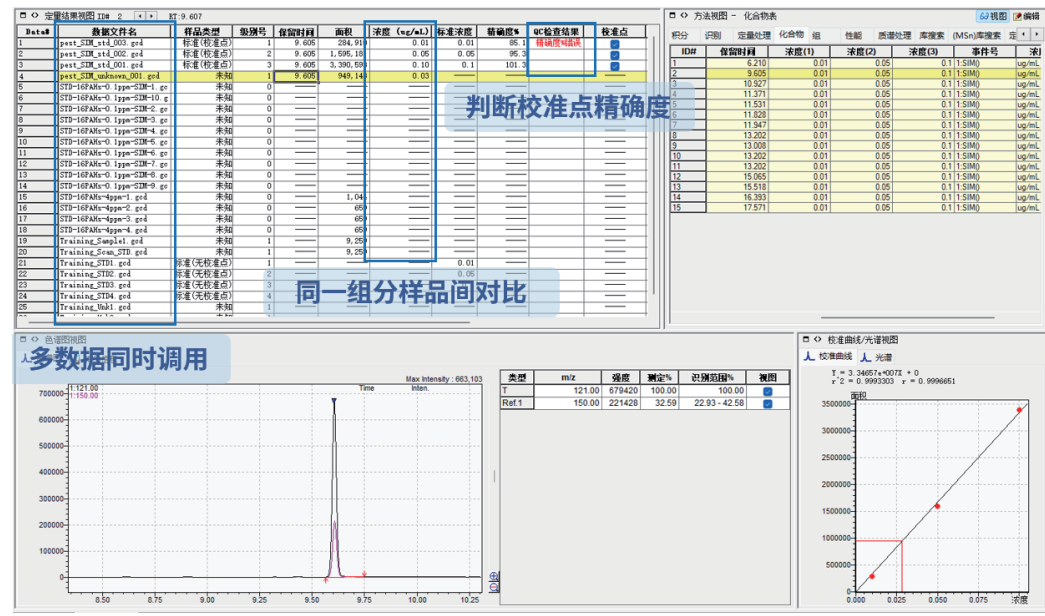
数据号	MS-1	MS-2	MS-3
1	1352910	1328885	826937
2	1460772	1435416	881396
3	1566722	1551360	944388
4	1645989	1636917	992447
5	1706776	1695294	1031793
6	1771422	1764356	1068485
平均值	1584099	1568705	957574
%RSD	9.898	10.457	9.579

再解析	样品名	样品ID	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	级别号	报告格式文件	系统适应性	错误
		0:未知	MIT	MIT	20240912-系统适应性.gon	TD-16FAHs-0.1ppm-SIM-1.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	异常	
		0:未知	MIT	MIT	20240912-系统适应性.gon	TD-16FAHs-0.1ppm-SIM-2.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	分析	
		0:未知	MIT	MIT	20240912-系统适应性.gon	TD-16FAHs-0.1ppm-SIM-3.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	分析	
		0:未知	MIT	MIT	20240912-系统适应性.gon	TD-16FAHs-0.1ppm-SIM-4.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	分析	
		0:未知	MIT	MIT	20240912-系统适应性.gon	TD-16FAHs-0.1ppm-SIM-5.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	分析	
		0:未知	MIT	MIT	20240912-系统适应性.gon	TD-16FAHs-0.1ppm-SIM-6.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	异常	
		0:未知	MIT	MIT	20240824-sim.gon	STD-1.ged	0	lut ions\System\DEFAULT.lsr	无	系统适应性失败

依据系统适应性结果启停批处理

3.3 LabSolutions 浏览器进行多数据处理

LabSolutions GCMS 中，可使用定量数据浏览器完成校准曲线建立和未知样品计算工作，多个数据文件可同时被浏览调用处理、各组分在不同数据中的含量亦可在同一界面中显示，方便直观。此外，可在方法参数中规定校准曲线点的准确度范围，如超出允许范围予以标记。



判断校准点精确度

ID#	保留时间	浓度(1)	浓度(2)	浓度(3)	事件号	谱
1	9.210	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
2	9.605	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
3	10.927	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
4	11.371	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
5	11.531	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
6	11.828	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
7	11.847	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
8	13.202	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
9	13.008	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
10	13.202	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
11	13.202	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
12	15.665	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
13	16.519	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
14	16.393	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL
15	17.571	0.01	0.05	0.1	1(SIM)	ug/mL

同一组样品间对比

多数据同时调用

校准曲线(先谱视图)

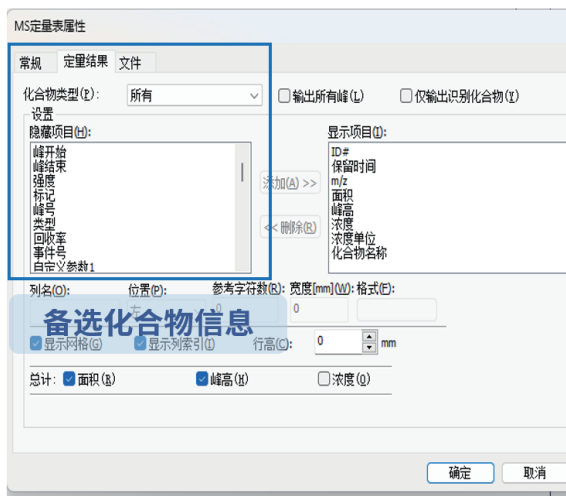
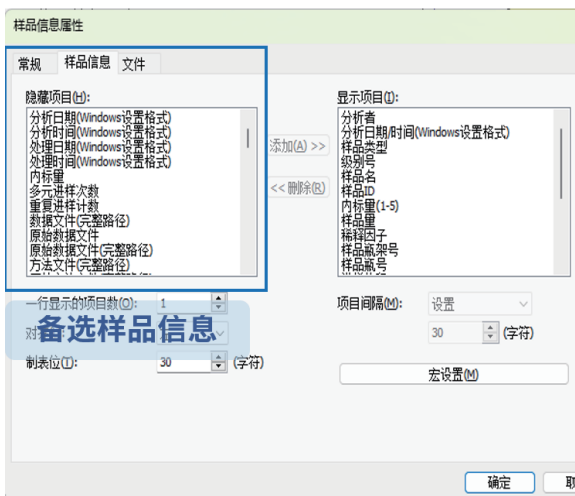
校准曲线 光谱

$$T = 3.34667 \times 10^{07} \times C + 0$$

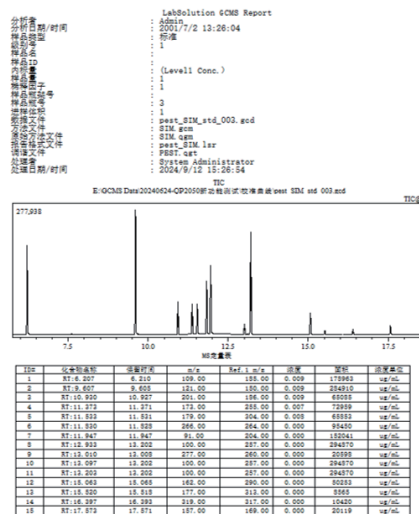
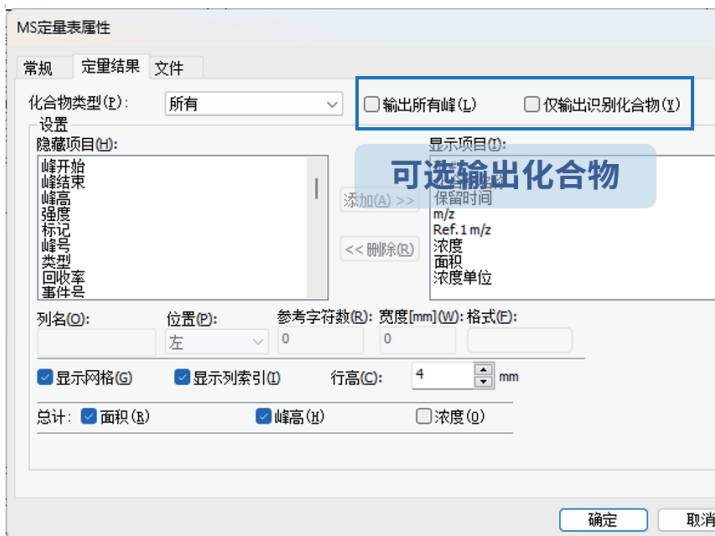
$$r^2 = 0.999303 \quad n = 0.999961$$

3.4 个性化报告模板

LabSolutions GCMS 数据报告中，软件配备定量报告、定性检索报告、校准曲线报告和信噪比报告等多种内置报告模板。针对样品和化合物常用信息，内置多项样品信息和化合物信息供选择，以满足不同行业需求。



在报告输出过程中，可选输出所有峰或仅输出识别化合物，满足结果需求，避免数据进行二次处理，提高处理效率。



结论

岛津全新气质联用仪工作站 LabSolutions GCMS 具有图形化显示，自动启停等智能化控制功能，并对数据处理能力进行了优化提升，极大提升多数据多组数据效率，并可选配 Peakintelligence AI 人工智能积分算法，内置多种报告模板参数信息满足不同行业需求，助力分析实验室向智能化与高效化发展。

岛津应用云

