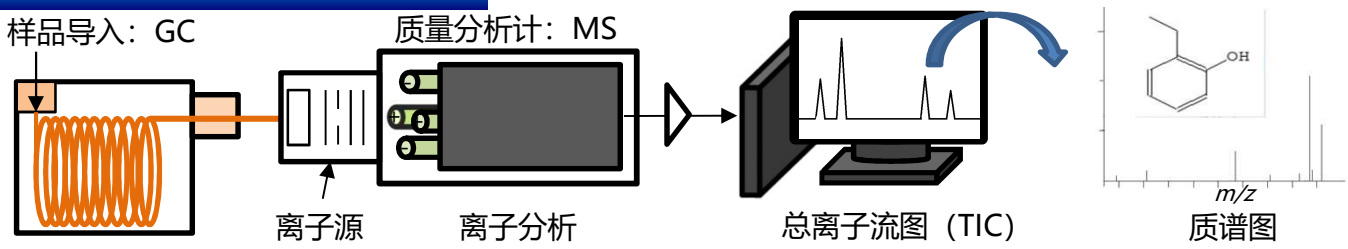
GC/MS定性未知化合物

GC/MS（Gas chromatography/Mass spectrometry)是气相色谱和质谱联用的分析手法。在GC中将试样中各个成分分离，在MS中电离，按不同的质荷比(m/z)分离并被检测和记录。可以分离和定性挥发性和半挥发性有机化合物。

装置组成



样品分离 → 离子化 → 根据质荷比分离测定 → 根据得到的质谱图进行定性

分离方法

根据化合物的性质，选择极性或者非极性的色谱柱。可以得到分离度高，峰形对称的色谱图。

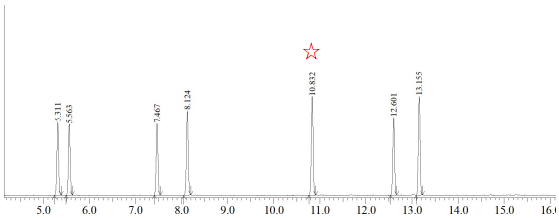
非极性：100%聚二甲基硅氧烷
弱极性：5%二苯基1%乙烯基(94%)二甲基聚硅氧烷
强极性：聚乙二醇

离子化方法

电子轰击电离(Electron Impact Ionization)
气化的样品分子被高能电子束轰击（电离能通常为70ev），样品分子释放电子变成正离子自由基，过剩的能量使得自由基中的共价键断裂，得到质谱图，该质谱图与化合物的构造有关，根据质谱图可以进行定性分析。

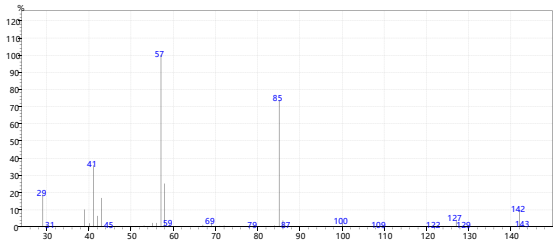
测定例

总离子流图（TIC）

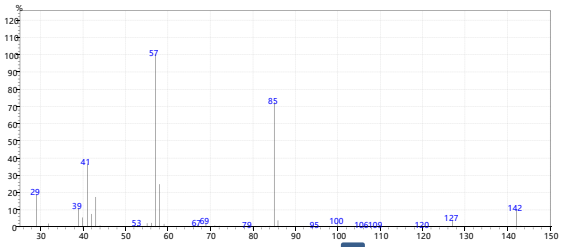


图中☆ 标记的峰，用GC/MS定性。（离子化方法:EI)

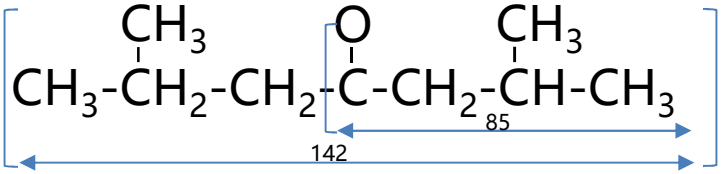
样品峰的EI质谱图



NIST谱库中匹配色谱图



根据谱库匹配结果，特征峰一致，推断化合物为以下构造。



分子量：142
定性结果：二异丁基酮

其他如气体分析，定量分析等也可以实施