

## 自建谱库

1 单击助手栏的【谱库编辑器】。

2单击【文件】菜单栏中的【创建个人谱库】。

文件( <u>F</u> )	视图(型)	命中列表( <u>H</u> )	目标组分(
创建个人谱库( <u>A</u> )			
打开谱库(0)		Ctrl+O	
关闭谱库( <u>C</u> )			

3 输入创建的谱库名称,并保存。

选择文件		? 🔀
保存在 (L):	🗀 Library	
MISTO8		
文件名 (M): 保存类型 (T):	自建农药库 GCMS 谱库文件 (*.lib)	【保存 (S) ▼ 取消

4单击助手栏【定性】,打开要创建谱库的Scan数据文件。

5 双击目标峰,并扣除背景,它的质谱在画面上显示。(参照定性部分)

6单击【定性】菜单栏中的【注册当前质谱到谱库】。





## 岛津企业管理(中国)有限公司 -分析中心

Shimadzu (China) Co., LTD. - Analytical Applications Center



7选择新创建的谱库名称,打开。

选择着库			? 🛛
查找范围( <u>I</u> ):	🔁 Library	- + 1	) 💣 🎟 -
₩ NIST08 ₩ NIST08s ₩ 自建农药库	1		
文件名(M):	自建农药库		打开(0)
文件类型 (I):		•	

8 输入组分信息,单击【确认】,完成第一个化合物的注册。

编辑组分信。	<u>e</u>
CAS号: 一化合物名称	298 - 02 - 02 「 在检索结果里忽略
	甲拌磷
组分分子	C7H1702PS3 保留指数 0
分子量:	260. 38
分类标记:	氨基酸 ▲   金属 ▲   愛水理分/一物 ▲   脂肪酸和油脂 ▲   近れ 所列組分 ●   欄环芳房 ●
	确认 取消 帮助(2)

9按同样方法注册其余化合物。

自建的谱库可以和商用标准谱库如NIST谱库一样用于未知化合物的相似度检索,只需将自建谱库 在方法文件的定性参数中设置好即可。如下所示:





Shimadzu (China) Co., LTD. – Analytical Applications Center

岛津企业管理(中国)有限公司 -分析中心