

CIMA

团 体 标 准

T/CIMA 0120—202X

液相色谱-离子阱质谱联用仪性能评价方法

General rules for performance evaluation of liquid
chromatography-Ion Trap Mass Spectrometer

(征求意见稿)

202X-XX-XX 发布

202X-XX-XX 实施

中国仪器仪表行业协会 发布

前 言

本文件按照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规则起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别这些专利的责任。

本文件由常州磐诺仪器有限公司提出。

本文件由中国仪器仪表行业协会归口。

本文件起草单位：常州磐诺仪器有限公司、中国计量科学研究院、上海砺沐科学仪器有限公司、苏州依利特科技有限公司、宁波大学、广州禾信仪器股份有限公司、杭州谱育科技发展有限公司。

本文件主要起草人：

液相色谱-离子阱质谱联用仪性能评价方法

1 范围

本文件规定了液相色谱-离子阱质谱联用仪术语定义、性能要求、评价方法、评价报告。

本文件适用于配备电喷雾离子源（ESI）或大气压化学电离源（APCI）的单离子阱、多离子阱及四极杆串联离子阱质谱仪。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 6041—2020 质谱分析方法通则

GB/T 6682—2008 分析实验室用水规格和试验方法

GB/T 26792—2019 高效液相色谱仪

GB/T 32267—2015 分析仪器性能测定术语

GB/T 33864—2017 质谱仪通用规范

GB/T 35410—2017 液相色谱-串联四级质谱仪性能的测定方法

JJF 1317—2011 液相色谱-质谱联用仪校准规范

YY/T 1740.1—2021 医用质谱仪 第1部分：液相色谱-质谱联用仪

3 术语和定义

GB/T 6041—2020、GB/T 33864—2017 界定的及下列术语适用于本文件。

3.1

串级质谱分析级数 MS^n multi-stage tandem mass spectrometry

目标离子在质量分析器中的解离次数为 m ，串级质谱分析级数 n 为 $m+1$ 。

3.2

离子阱质量分析器 ion trap mass analyzer

一种将离子通过电磁场作用存储在预制有限空间内的质量分析器。

3.3

检出限 limit of detection

在信噪比不低于 3 时，可测定样品的最小量值。

4 技术要求

4.1 液相色谱流量准确性

流量设定值 0.5 mL/min 时，流量准确性应不超过±2%。流量设定值 1.0、2.0 mL/min 时，流量准确性应不超过±1%。流量设定值 5.0、10.0 mL/min 时，流量准确性应不超过±3%。

4.2 液相色谱流量稳定性

流量设定值 0.5 mL/min 时，流量稳定性应不大于 1.5%。流量设定值 1.0、2.0 mL/min 时，流量稳定性应不大于 1.0%。流量设定值 5.0、10.0 mL/min 时，流量稳定性应不大于 1.5%。

4.3 液相色谱进样准确性

液相色谱进样准确性需达到制造商声称的进样准确性。建议进样准确性应不超过±5%。

4.4 质量分辨率

质量分辨率应不大于 1 amu。

4.5 质量范围

质量分析器可测定的质荷比 m/z 范围需达到制造商声称的质量范围。质荷比 m/z 范围宜在 20~2000 之间。

4.6 质量稳定性

质量稳定性应不大于±0.2 amu/8h。

4.7 质量准确性

与理论质荷比的误差应不超过±0.5 amu。

4.8 扫描速度

仪器扫描速度应大于 1000 amu/s。

4.9 串联质谱分析级数 MS^n

注入适当浓度的利血平溶液，碎裂到 n 级 ($n \geq 2$)， n 级的响应最强子离子信噪比应大于 3。

4.10 信噪比

采集的离子信噪比需达到制造商声称的信噪比。

4.11 检出限

检出限需达到信噪比应不小于 3: 1

4.12 定量重复性

测定的连续重复性 RSD 应不大于 10%，日内重复性 RSD 应不大于 15%，日间重复性 RSD 应不大于 20%。

4.13 保留时间重复性

测定保留时间的 RSD 应不大于 1.5%

4.14 线性

在制造商声称的线性范围内,线性回归系数 r 应大于 0.990,建议线性范围应不小于 3 个数量级。

5 评价方法

5.1 工作条件

工作条件应该满足以下条件:

- a) 应清洁无尘,无易燃、易爆和强腐蚀性气体或试剂,排风良好。
- b) 室内温度: 15 °C~30 °C;相对湿度不大于 75%。
- c) 仪器工作台应平稳,周围无强烈机械振动和电磁干扰源。
- d) 电源电压 220 V \pm 22 V, 50 Hz \pm 1 Hz。
- e) 接地电阻 \leq 4 Ω 。

5.2 试剂和标准物质

除非另有规定,所有溶剂均为色谱级或质谱级。使用时根据仪器状况稀释至合适浓度。

- a) 利血平溶液标准物质, 1.0 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。
- b) 聚丙二醇(简称 PPG)450 溶液, 3.6 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。
- c) PPG1000 溶液, 3.6 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。
- d) PPG2000 溶液, 3.6 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 。
- e) 氯霉素, 99.7%。
- f) 甲醇、甲酸。
- g) 水, 一级水(参见 GB/T 6682—2008 《分析实验室用水规格和试验方法》)。
- h) 色谱柱: 参见附录 A。

i) 溶液稀释和配制方法参见附录 A。

5.3 性能指标的测定

5.3.1 实验准备

开机抽真空，直到真空正常，进行调谐，通过后参照附录 A 条件进行测定。

5.3.2 液相色谱流量准确性

用仪器专用管路连接输液泵的出口、入口，出口适当加一背压(8 MPa±2 MPa)，以纯水为流动相，将数字温度计探针插入流动相内，测量此时流动相的试验温度。设定合适流量，待输液泵运行稳定后，按表 1 分别设定流量，在流动相排出口用事先清洗并称重过的称量瓶收集流动相，同时用秒表计时，待达到表 1 规定的收集时间后停止收集流动相，并按下秒表停止计时。每个流量下各测试三次。按式(1)计算流量 F_m ，按式(2)计算流量准确性。

表 1 输液泵流量设定值及收集时间

流量设定值 F_s (mL/min)	收集流动相时间 (min)
0.5	10
1.0、2.0	5
5.0、10.0	5

$$F_m = (m_2 - m_1) / (\rho t) \dots \dots \dots (1)$$

$$S_s = (\bar{F}_m - F_s) / F_s \times 100\% \dots \dots \dots (2)$$

式中:

F_m —流量实测值，单位为毫升每分(mL/min)；

m_2 —称量瓶+纯水质量，单位为克(g)；

m_1 —称量瓶质量，单位为克(g)；

ρ —试验温度下纯水的密度，单位为克每毫升(g/mL)；

t —收集流动相的时间，单位为分(min)；

S_s —流量准确性；

\bar{F}_m —同一设定流量三次测量的平均值，单位为毫升每分(mL/min)；

F_s —流量设定值，单位为毫升每分(mL/min)。

注 1: 注 2: 流量的设定可根据输液泵流量范围而定，流量测量顺序可以任意选择。

5.3.3 液相色谱流量稳定性

测试方法同 5.3.2，按式(3)计算流量稳定性。

$$S_R = (F_{max} - F_{min})/\bar{F}_m \times 100\% \dots \dots \dots (3)$$

式中：

S_R —流量稳定性，%；

\bar{F}_m —同一设定流量三次测量的平均值，单位为毫升每分(mL/min)；

F_{max} —同一设定流量三次测量的最大值，单位为毫升每分(mL/min)；

F_{min} —同一设定流量三次测量的最小值，单位为毫升每分(mL/min)。

5.3.4 液相色谱进样准确性

以纯水为样品，加入事先清洗过的称量瓶中并称重，按照仪器进样范围设定高、中、低三种进样量（无损模式），待进样器运行稳定后开始进样，每次进样后对称量瓶进行称重。每种进样量下各测试三次，按式(4)计算进样量实测值 M_m ，按式(5)计算进样准确性。

$$M_m = M_2 - M_1 \dots \dots \dots (4)$$

$$W_S = (\bar{M}_m - S\rho)/S\rho \times 100\% \dots \dots \dots (5)$$

式中：

M_m —进样量实测值，单位为毫克(mg)；

M_2 —进样前称量瓶+纯水质量，单位为毫克(mg)；

M_1 —进样后称量瓶+纯水质量，单位为毫克(mg)；

ρ —试验温度下纯水的密度，单位为毫克每微升(mg/ μ L)；

W_S —进样准确性；

\bar{M}_m —同一设定进样量三次测量的平均值，单位为毫克 (mg) ；

S —进样量设定值，单位为微升 (μ L) 。

5.3.5 质量分辨率

使用 PPG 溶液进行调谐，直到调谐通过。采用利血平进样检测，得到半峰宽 FWHM，作为质量分辨率。

5.3.6 质量范围

在调谐或监测界面下，将质量数设在仪器可测范围，注入满足仪器分子量测量范围的 PPG 混合溶液，进行全质量范围扫描，记录满足制造商声称信噪比的特征离子，通常包括 m/z 59.05、175.13、616.46、906.67、1254.92、1545.13 等质谱峰。对于强度低的离子，可以采用局部扫描方式观察，用 $m/z: n_1 \sim n_2$ 表示。

注 1：可以采用仪器自带的调谐液，采用与 PPG 混合溶液相同的检测方法观察仪器可检测的最大质荷比数；

注 2： n_1 、 n_2 分别代表最低质荷比数和最高质荷比数。

5.3.7 质量稳定性

注入适当浓度(例如 1.2 µg/mL) 的 PPG450、PPG1000、PPG2000 混合溶液, 每隔 1 h 进一次样, 共 8 次以上。分别记录 m/z 59.05、175.13、616.46、906.67、1254.92、1545.13 等离子的测量值, 分别计算每个离子实际测量值极差, 取其中最大的一个作为稳定性测试结果。

注: 可根据用户对所选择仪器性能的要求以及仪器本身最大扫描范围, 选择分子量范围满足日常检测的调谐溶液, 考察低质量段、中间质量段或高质量段的稳定性。

5.3.8 质量准确性

注入适当浓度(例如 1.2 µg/mL) 的 PPG450、PPG1000、PPG2000 混合溶液 1 次。分别记录 m/z 59.05、175.13、616.46、906.67、1254.92、1545.13 等离子的测量值, 计算实测值与理论值(参见表 B.1) 之差, 取其中绝对值最大的一个作为测试结果。

注: 可根据用户对所选择仪器性能的要求以及仪器本身最大扫描范围, 选择分子量范围满足日常检测的调谐溶液, 考察低质量段、中间质量段或高质量段的准确性。

5.3.9 扫描速度

在不进样的条件下, 设定质量范围从 50~650 amu, 扫描速度设定到最大值, 连续扫描 5 min, 根据式(6)计算实测扫描速度。

$$V_{sp} = \frac{M_r \times N_s}{T_s} \dots\dots\dots (6)$$

V_{sp} —扫描速度, 单位为原子质量单位每秒 (amu/s);

M_r —扫描范围, 单位为原子质量单位 (amu);

N_s —扫描次数;

T_s —扫描时间, 单位为秒 (s)。

5.3.10 串联质谱分析级数 MSⁿ

使用 ESI+ 模式, 注入适当浓度的利血平溶液, 对利血平母离子进行二级串联分析 (MS²), 选择二级子离子 (如子离子碎片 448) 进行三级串联分析 (MS³), 选择三级子离子 (如子离子碎片 195) 进行四级串联分析 (MS⁴), 以此类推, 直至解离到 n 级, n 级的响应最强子离子信噪比应大于 3。

5.3.11 信噪比

分别在正负离子模式下采集三次, 以最大值作为信噪比测试结果。

5.3.11.1 ESI+

注入适当浓度的利血平溶液, 采用 MSⁿ 采集模式 (n≥2), 采集离子 609 → 448 或 397 或 195, 得到质量色谱图, 根据式(7)计算 S/N。

$$S/N = \frac{H_{m/z}}{H_{\text{噪声}}} \dots\dots\dots (7)$$

式中:

S/N——信噪比；

$H_{m/z}$ ——子离子 m/z 448 或 397 或 195 的峰高；

$H_{\text{噪声}}$ ——基线噪声，宜在利血平峰后的 0.5 min~1.0 min 范围内选择。

5.3.11.2 ESI-

注入适当浓度的氯霉素溶液，采用 MS^n 采集模式 ($n \geq 2$)，采集离子 (321→194 或 257)，得到质量色谱图，根据式(2)计算 S/N。

5.3.12 检出限

质谱仪按操作说明运行稳定后，使用利血平（正离子模式）或氯霉素（负离子模式）标准物质进行测试，调整进样量使得信噪比不低于 3:1，该最小量值为检出限。

5.3.13 定量重复性

5.3.13.1 连续重复性

注入适当浓度的利血平溶液或氯霉素溶液，连续进样六次。采用 MS^n 采集模式 ($n \geq 2$)，采集离子强度最大的子离子质量色谱图，按质量色谱峰进行面积积分，根据式(8)计算 RSD。

$$RSD = \sqrt{\frac{\sum(x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \times \frac{1}{\bar{x}} \times 100\% \dots\dots\dots(8)$$

式中：

RSD——相对标准偏差；

x_i ——利血平样品子离子或氯霉素样品子离子峰第 i 次测量峰面积；

\bar{x} ——利血平样品子离子或氯霉素样品子离子峰 n 次测量峰面积算术平均值；

i ——测量序号；

n ——测量次数。

5.3.13.2 日内重复性

注入适当浓度的利血平溶液，先连续进样 3 次作为第一组测试，然后每隔 4 h 连续进样 3 次，共测试 7 组，采用 MS^n 采集模式 ($n \geq 2$)，采集提取离子强度最大的子离子质量色谱图，按质量色谱峰进行面积积分，分别取每组 3 次进样所得平均值作为一次测量结果，根据式(8)计算 RSD，作为日内重复性。

5.3.13.3 日间重复性

注入适当浓度的利血平溶液，先连续进样 3 次作为第一组测试，然后每天每隔 4 h 测试 3 组，连续三天共测试 9 组，采用 MS^n 采集模式 ($n \geq 2$)，采集提取离子强度最大的子离子质量色谱图，按质量色谱峰进行面积积分，分别取每组 3 次进样所得平均值作为一次测量结果，根据式(8)计算

RSD，作为日间重复性。

5.3.14 保留时间重复性

根据 5.3.13.1 质量色谱图，记录 m/z 609→448 或 397 或 195 子离子色谱峰的保留时间，连续测量 6 次，按式(9)计算相应化合物的保留时间的相对标准偏差 RSD，作为保留时间重复性的结果。

$$RSD = \sqrt{\frac{\sum(t_j - \bar{t})^2}{m-1}} \times \frac{1}{\bar{t}} \times 100\% \dots \dots \dots (9)$$

式中：

t_j —第 j 次测量保留时间 (min)；

\bar{t} —6 次测量保留时间 (min) 的算术平均值；

j —测量序号；

m —测量次数。

5.3.15 线性

从低到高注入不同浓度的利血平溶液，计算测试浓度范围内，响应面积与利血平浓度间（应不少于 5 个浓度值）的线性相关系数 R 。使用的利血平溶液最低浓度应满足 10 倍信噪比要求。

注：一般采用 MS^n 采集模式 ($n \geq 2$)， m/z 可以设定为 448、397、195 三个离子，选择其中离子强度最大一个计算。

6. 测试报告

测试结束后，测试工作组应提交测试过程中所有的测试记录，填写附表 1 作为性能测试报告的附件。测试报告（附录 C）应对样机测试的全过程进行概述，并给出性能测试的结论。

附录 A
(资料性附录)
性能测试参数条件

A.1 色谱条件

参考 GB/T 35410-2017 附录 A

A.1.1 ESI+、APCI+ 流动相：甲醇：水=4:1(混合液中含甲酸 0.1%,体积比)。

A.1.2 ESI-流动相：甲醇：水=4:1(体积比)。

A.1.3 ESI+、ESI- 流动相流速：0.2 mL/min~0.8 mL/min，恒定流速。

A.1.4 APCI+ 流动相流速：0.4 mL/min~1.2 mL/min，恒定流速。

A.1.5 柱箱温度：设定为室温以上 5℃~10℃，有制冷功能的仪器可以根据仪器性能自行设定柱温。

A.1.6 进样器温度：根据仪器功能自行设定。

A.1.7 进样体积：5.0 μL。

A.1.8 进样方式：不分流进样。

A.1.9 色谱柱(只在测试 6.3.11、6.3.12、6.3.13、6.3.14 项目时使用),参考规格如下：

对于常规液相色谱仪：C₁₈ 柱，2.1×50 mm，3.5 μm 或性能相当的色谱柱；

对于超高压液相色谱仪：C₁₈ 柱，2.1×50 mm，1.7 μm 或性能相当的色谱柱。

A.1.10 其他要求如下所示：

a) 对于信噪比测试，要求保留时间控制在 0.5 min~1.5 min。

b) 质量准确性，可以采用流动注射、在不连接色谱柱的情况下自动或手动将样品注入质谱的方法进行测试。

A.2 质谱条件

参考 GB/T 35410-2017 附录 A

A.2.1 半峰宽 FWHM：≤1 amu。

A.2.2 扫描范围可参考以下数值设定：

利血平，m/z 604~614；

PPG450(设定 3 段范围),m/z 54~64、m/z 171~181、m/z 611~621；

PPG1000(设定 5 段范围),m/z 54~64、m/z 171~181、m/z 611~621、m/z 901~911、m/z 1251~1261；

PPG2000(设定 6 段范围),m/z 54~64、m/z 171~181、m/z 611~621、m/z 901~911、m/z 1251~1261、m/z 1541~1551。

A.2.3 离子源温度、离子源电压、大气压接口电压、雾化气流量、辅助气流量、碰撞能量、透镜参数等根据厂家推荐值和测定样品时的调谐值进行设定。

A.3 溶液配制和稀释

参考 GB/T 35410-2017 附录 A

适当浓度指根据仪器灵敏度状况，采用 100 μL 和 1000 μL 移液器、10 mL 和 100 mL 容量瓶，对标准物质或溶液进行必要的稀释，直到满足使用要求，制备和稀释步骤见表 A 3.1、表 A 3.2 和表 A 3.3。建议稀释时，每级母液取样量不少于 100 μL、称样量不小于 0.01 g，所使用的移液器与容量瓶需经过检定或校准。

表 A 3.1 利血平制备和稀释步骤

序号	样品与浓度	稀释步骤
A3.1.1	溶剂配置	75 mL 甲醇：25 mL 水混合溶剂，加入 100 μ L 甲酸。
A.3.1.2	100 μ g/ μ L,利血平溶液	吸取 1.0 μ g/mL 利血平溶液 1000 μ L 到 10 mL 容量瓶中，用溶剂定容到刻度。
A.3.1.3	10 μ g/ μ L,利血平溶液	吸取 1.0 μ g/mL 利血平溶液 100 μ L 到 10 mL 容量瓶中，用溶剂定容到刻度。

表 A 3.2 氯霉素制备和稀释步骤

序号	样品与浓度	稀释步骤
A3.2.1	溶剂配置	225 mL 甲醇：75 mL 水混合溶剂。
A3.2.2	100 μ g/mL,氯霉素溶液	称 0.01g 氯霉素固体样品到 100 mL 容量瓶中，然后用溶剂定容到刻度。
A3.2.3	1.0 μ g/mL,氯霉素溶液	吸取 1000 μ L 100 μ g/mL 氯霉素溶液到 100 mL 容量瓶中，用溶剂定容到刻度。
A3.2.4	100 μ g/ μ L,氯霉素溶液	吸取 1.0 μ g/mL 氯霉素溶液 1000 μ L 到 10mL 容量瓶中，用溶剂定容到刻度。
A3.2.5	10 μ g/ μ L,氯霉素溶液	吸取 1.0 μ g/mL 氯霉素溶液 100 μ L 到 10 mL 容量瓶中，用溶剂定容到刻度。

表 A 3.3 PPG 制备和稀释步骤

序号	样品与浓度	稀释步骤
A3.3.1	溶剂配置	225 mL 甲醇：75 mL 水混合溶剂，加入 100 μ L 甲酸与 0.046 g 乙酸铵。
A3.3.2	360 μ g/mL , PPG450、PPG1000、PPG 2000 溶液	分别称取 0.036 g PPG450、PPG 1000、PPG 2000 到三个 100 mL 容量瓶中，用溶剂定容到 100 mL。
A3.3.3	3.6 μ g/mL , PPG450、PPG1000、PPG 2000 溶液	分别吸取 360 μ g/mL 的 PPG450、PPG 1000、PPG 2000 溶液 100 μ L 到三个 10 mL 容量瓶中，用溶剂定容到刻度。
A3.3.4	1.2 μ g/mL , PPG450、PPG1000、PPG 2000 混合溶液	分别吸取 3.6 μ g/mL 的 PPG450、PPG 1000、PPG 2000 溶液 1000 μ L 到 10 mL 容量瓶中，混合均匀即可。

附 录 B
(资料性附录)

PPG450、PPG1000、PPG2000 离子理论值(ESI+) 见表 B.1。

表 B.1 离子理论值(ESI+)

1		2		3		4	
离子	理论值	离子	理论值	离子	理论值	离子	理论值
[A ₁ +NH ₄] ⁺	94.09	[A ₂₀ +NH ₄] ⁺	1196.88	[M ₁ +H] ⁺	59.05	[M ₂₀ +H] ⁺	1161.85
[A ₂ +NH ₄] ⁺	152.13	[A ₂₁ +NH ₄] ⁺	1254.92	[M ₂ +H] ⁺	117.09	[M ₂₁ +H] ⁺	1219.89
[A ₃ +NH ₄] ⁺	210.17	[A ₂₂ +NH ₄] ⁺	1312.97	[M ₃ +H] ⁺	175.13	[M ₂₂ +H] ⁺	1277.93
[A ₄ +NH ₄] ⁺	268.21	[A ₂₃ +NH ₄] ⁺	1371.01	[M ₄ +H] ⁺	233.18	[M ₂₃ +H] ⁺	1335.97
[A ₅ +NH ₄] ⁺	326.25	[A ₂₄ +NH ₄] ⁺	1429.05	[M ₅ +H] ⁺	291.22	[M ₂₄ +H] ⁺	1394.01
[A ₆ +NH ₄] ⁺	384.30	[A ₂₅ +NH ₄] ⁺	1487.09	[M ₆ +H] ⁺	349.26	[M ₂₅ +H] ⁺	1452.05
[A ₇ +NH ₄] ⁺	442.34	[A ₂₆ +NH ₄] ⁺	1545.13	[M ₇ +H] ⁺	407.30	[M ₂₆ +H] ⁺	1510.10
[A ₈ +NH ₄] ⁺	500.38	[A ₂₇ +NH ₄] ⁺	1603.18	[M ₈ +H] ⁺	465.34	[M ₂₇ +H] ⁺	1568.14
[A ₉ +NH ₄] ⁺	558.42	[A ₂₈ +NH ₄] ⁺	1661.22	[M ₉ +H] ⁺	523.38	[M ₂₈ +H] ⁺	1626.18
[A ₁₀ +NH ₄] ⁺	616.46	[A ₂₉ +NH ₄] ⁺	1719.26	[M ₁₀ +H] ⁺	581.43	[M ₂₉ +H] ⁺	1684.22
[A ₁₁ +NH ₄] ⁺	674.51	[A ₃₀ +NH ₄] ⁺	1777.30	[M ₁₁ +H] ⁺	639.47	[M ₃₀ +H] ⁺	1742.26
[A ₁₂ +NH ₄] ⁺	732.55	[A ₃₁ +NH ₄] ⁺	1835.34	[M ₁₂ +H] ⁺	697.51	[M ₃₁ +H] ⁺	1800.31
[A ₁₃ +NH ₄] ⁺	790.59	[A ₃₂ +NH ₄] ⁺	1893.38	[M ₁₃ +H] ⁺	755.55	[M ₃₂ +H] ⁺	1858.35
[A ₁₄ +NH ₄] ⁺	848.63	[A ₃₃ +NH ₄] ⁺	1951.43	[M ₁₄ +H] ⁺	813.59	[M ₃₃ +H] ⁺	1916.39
[A ₁₅ +NH ₄] ⁺	906.67	[A ₃₄ +NH ₄] ⁺	2009.47	[M ₁₅ +H] ⁺	871.64	[M ₃₄ +H] ⁺	1974.43
[A ₁₆ +NH ₄] ⁺	964.71	[A ₃₅ +NH ₄] ⁺	2067.51	[M ₁₆ +H] ⁺	929.68	[M ₃₅ +H] ⁺	2032.47
[A ₁₇ +NH ₄] ⁺	1022.76	[A ₃₆ +NH ₄] ⁺	2125.55	[M ₁₇ +H] ⁺	987.72	[M ₃₆ +H] ⁺	2090.51
[A ₁₈ +NH ₄] ⁺	1080.80	[A ₃₇ +NH ₄] ⁺	2183.59	[M ₁₈ +H] ⁺	1045.76	[M ₃₇ +H] ⁺	2148.56
[A ₁₉ +NH ₄] ⁺	1138.84	[A ₃₈ +NH ₄] ⁺	2241.64	[M ₁₉ +H] ⁺	1103.80	[M ₃₈ +H] ⁺	2206.60

注：M_n代表[OC3H6]_n；A_n代表H-M_n-OH_n从1到38。

XX 测试报告（宋体，加粗，三号）

1. 测试目的（一级标题，宋体，加粗，三号）

正文（宋体，小四号）

2. 测试样机介绍（一级标题，宋体，加粗，三号）

2.1 名称及型号（二级标题，宋体，加粗，四号）

2.2 尺寸及组成

3. 测试条件

3.1 测试环境

3.2 试剂和标准物质

3.3 测试设备

4. 性能指标测试

4.1 液相色谱流量准确性

4.1.1 测试方法（三级标题，宋体，加粗，小四号）

4.1.2 测试结果

.....

4.14 线性

5. 测试结论

附表 1 液相色谱-离子阱质谱联用仪功能性能测试记录表

产品名称:									
填写时间				年 月 日 时					
环境条件				温度:		相对湿度:			
测试样品:									
序号	测试项目		测试结果						
1	液相色谱流量准确性		设定值 (mL/min)	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	
			1						
			2						
			3						
			\bar{F}_m						
	流量准确性								
2	液相色谱流量稳定性		设定值 (mL/min)	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	
			\bar{F}_m						
			$F_{max} - F_{min}$						
			流量稳定性						
3	液相色谱进样准确性			高进样量		中进样量		低进样量	
			S (μL)						
			1						
			2						
			3						
			\bar{M}_m (mg)						
			进样准确性						
4	质量分辨率 (amu)								
5	质量范围 (amu)								
6	质量稳定性		理论值	59.05	175.13	616.46	906.67	1254.92	1545.13
			1						
			2						
			3						
			4						

		5							
		6							
		7							
		8							
		结果							
7	质量准确性	理论值	59.05	175.13	616.46	906.67	1254.92	1545.13	
		实测值							
		结果							
8	扫描速度	扫描次数 N_s							
		扫描时间 T_s							
		扫描速度 V_{sp}							
		扫描速度 V_{sp} :							
9	串联质谱分析级数 MS^n		MS^1	MS^2	MS^3	MS^4	MS^5		
		m/z							
			MS^6	MS^7	MS^8	MS^9	MS^{10}		
		m/z							
10	信噪比 (ESI+)	序号	1		2		3		
		$H_{m/z}$							
		$H_{\text{噪声}}$							
		信噪比							
		ESI+信噪比:							
	信噪比 (ESI-)	序号	1		2		3		
		$H_{m/z}$							
		$H_{\text{噪声}}$							
		信噪比							
		ESI-信噪比:							
11	检出限								
12	定量重复性-连续重复性	序号	1	2	3	4	5	6	
		峰面积							
		平均值:	RSD:						
	定量重复性-日内重复性		第一组	第二组	第三组	第四组	第五组	第六组	第七组
		1							
2									
3									
	平均值								

		RSD:									
	定量重复性-日间重复性		第一组	第二组	第三组	第四组	第五组	第六组	第七组	第八组	第九组
		1									
		2									
		3									
		平均值									
	RSD:										
13	保留时间重复性	序号	1	2	3	4	5	6			
		保留时间									
		平均值:					RSD:				
14	线性	样品浓度									
		峰面积									
		线性回归方程:									
		线性相关系数 R:									
签字											