

国家计量技术规范规程制修订

《傅立叶变换质谱仪校准规范》  
(修订报批稿)  
编写说明

中国医学科学院药物研究所

2021年11月

# 《傅立叶变换质谱仪校准规范》（修订稿）

## 编写说明

### 一、任务来源

根据国家市场监管总局 2021 年国家计量技术法规制定、修订及宣贯计划（市监计量发〔2021〕50 号）立项，由中国医学科学院药物研究所承担《傅立叶变换质谱仪校准规范》的修订工作。

### 二、规范修订的必要性

傅立叶变换质谱仪是大型高分辨质谱仪，具有质量准确、灵敏、分辨能力高的特点，目前国内外该仪器在生命科学领域、药物研发和制药领域、以及高等院校的分析检测实验室和研究机构中发挥着重要作用。目前国内该类型仪器在不同区域广泛分布，而且大部分在经过计量认证和认可的分析测试中心和实验室中使用，经常提供对外检测的数据，制定傅立叶变换质谱仪校准规范，目的是为该类新型的高端仪器的校准提供技术依据，使得从事该类仪器检测工作的各类分析测试中心和实验室，能够更好的为科研、社会、经济建设和发展提供客观、可比、有效的检测数据。根据原质检 2009 年国家计量技术法规计划（国质检量函〔2009〕393 号）立项，由全国生物计量技术委员会归口，中国医学科学院药物研究所为主起草单位承担制定工作。2015 年 9 月 15 日 JJF1531—2015《傅立叶变换质谱仪校准规范》（以下简称规范）发布实施，规范和统一了傅立叶变换质谱仪的校准标准，保障了这类仪器检测数据的可靠性和可比性。

该规范起草时计量特性确定的实验研究过程中使用了利血平、大

豆昔元和人参皂昔 Rb1 三种标准物质，这三种标准物质均为中国计量科学院发布的有证标准物质，相对分子质量从 254.24、608.67 到 1109.29，可覆盖质谱扫描范围。但是在 2015 年规范发布实施后，大豆昔元标准物质和人参皂昔 Rb1 标准物质的可及性出现问题，断货的现象时有发生，考虑到校准用标准物质的可及性和可溯源性，分子量接近以及结构类似的有证标准物质也可以使用，例如黄酮类分子量相近的槲皮素可替代大豆昔元，人参皂昔 Rg1 可替代人参皂昔 Rb1。规范中目前没有对 ESI 负模式的校准方法，但是仪器用户使用 ESI-模式检测的样品种类逐渐增加，对该类仪器 ESI 负模式的量值溯源需求很迫切。我们认为有必要对该规范进行修订，在修订过程中解决标准物质的可及性问题，增加槲皮素和人参皂昔 Rb1 类似结构的有证标准物质，增加 ESI 负模式的校准方法与使用的标准物质，使得该规范在实际校准工作中适用性更加好。

### 三、《傅立叶变换质谱仪校准规范》修订过程

- 1、2020 年 11 月，项目承担单位中国医学院药物研究所签订国家计量技术法规项目计划任务书。
- 2、2021 年 1 月至 2021 年 3 月，制定了修订内容的实验方案，与参与单位中国计量科学院的课题组成员进行了方案讨论，确定了修订内容的实验方案。
- 3、2021 年 3 月至 2023 年 1 月，开展修订内容的实验，在疫情允许的情况下，在中国医学科学院医药生物技术研究所、北京大学分析测试中心、赛默飞世尔北京实验室、中国肉类食品综合研究中心完成了实验测试。
- 4、2023 年 1 月至 2023 年 2 月，整理实验数据和实验报告，修订《傅立叶变

换质谱仪校准规范》，起草修订说明。

5、2023年2月20日，向全国生物计量技术委员会提交《傅立叶变换质谱仪校准规范》修订稿、修订编制说明、实验报告等材料，广泛征求了专家和仪器厂商的意见和建议。

#### 四、规范修订的主要内容

JJF1531—2015《傅立叶变换质谱仪校准规范》的基本框架内容不做修订，保持原来的11个部分包括引言、范围、引用文件、术语和计量单位、概述、计量特性、校准条件、校准项目和校准方法、校准结果表达、复校时间间隔和相应的附录。

计量特性指标不变，包括：示值误差、信噪比、分辨力、重复性和稳定性。

**修订的内容：**计量特性测定所用标准物质在原来的利血平、大豆昔元和人参皂昔 Rb1 三种标准物质基础之上，增加了槲皮素、人参皂昔 Rg1 和异丙醇水溶液中利血平标准物质，这三种标准物质均由中国计量科学院发布的有证标准物质，易于获得而且可以溯源。提高本规范使用时标准物质的可及性，解决标准物质断货问题，方便广大客户使用本规范。

#### 五、规范修订说明

JJF1531—2015《傅立叶变换质谱仪校准规范》的基本框架内容不做修订，保持原来的11个部分包括引言、范围、引用文件、术语和计量单位、概述、计量特性、校准条件、校准项目和校准方法、校准结果表达、复校时间间隔和相应的附录。计量特性指标不变，包括：示值误差、信噪比、分辨力、重复性和稳定性。

主要修订内容为新增加了可及性好的三种有证标准物质槲皮素、人参皂苷 Rg1 和异丙醇水溶液中利血平标准物质。具体修订内容如下：

序号	条款	原内容	修订内容
1	2.引用文件	JJF 1001-1998 通用计量术语及定义, JJF-1059-1999 测量不确定度评定与表示, GB/T 6041-1999 质谱分析方法通则	JJF 1001-2011 通用计量术语及定义, GB/T 27418-2017 测量不确定度评定与表示, GB/T 6041-2020 质谱分析方法通则
2	6.2 标准物质和试剂	示值误差、重复性和稳定性校准时选择三种国家有证标准物质大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 进行校准；	示值误差、重复性和稳定性校准时选择四种国家有证标准物质（大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1、氯霉素）进行校准；
3	7.1 示值误差	扫描范围为 $m/z$ 100-2000，通过流动注射方式以 $10 \mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 的混合标准物质溶液，记录大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 的准分子离子峰的实测质荷比，	正模式：扫描范围为 $m/z$ 100-2000 或者仪器的质荷比上线，通过流动注射方式以 $10 \mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 的混合标准物质溶液，记录大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 的准分子离子峰的实测质荷比。 负模式：扫描范围为 $m/z$ 100-2000 或者仪器的质荷比上线，通过流动注射方式以 $10 \mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析氯霉素标准物质溶液，记录氯霉素的准分子离子峰的实测质荷比，
4	7.3 分辨力	设定仪器扫描范围为 $m/z$ 607-611 时，	设定仪器扫描范围为 $m/z$ 607-611 或者仪器自动调整的最小扫描范围时，
5	7.4 重复性	通过流动注射方式以 $10 \mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 的混合标准物质溶液。连续测量 6 次大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 的准分子离子峰的实测质荷比，	正模式：通过流动注射方式以 $10 \mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 的混合标准物质溶液。连续测量 6 次大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 的准分子离子

					峰的实测质荷比， 负模式：通过流动注射方式以 10 $\mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析氯霉素标准物质溶液。连续测量 6 次氯霉素的准分子离子峰的实测质荷比，														
6	7.5 稳定性	通过流动注射方式以 10 $\mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 的混合标准物质溶液。连续测量 6 次大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 的准分子离子峰的实测质荷比，			通过流动注射方式以 10 $\mu\text{L}/\text{min}$ 流速注入分析大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 的混合标准物质溶液，记录大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 的准分子离子峰的实测质荷比，														
7	附录 A 标准物质溶液配制方法	以甲醇溶解并稀释成浓度为 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 和 100 $\text{ng}/\text{mL}$ 的溶液，			以甲醇溶解并稀释成浓度为 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 和 100 $\text{ng}/\text{mL}$ 的溶液（如使用异丙醇水溶液中利血平标准物质（浓度 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）），以甲醇稀释至 100 $\text{ng}/\text{mL}$ ），														
8	附录 A 标准物质溶液配制方法	示值误差、重复性、稳定性考察用混和标准物质溶液：准确称取适量大豆苷元、利血平和人参皂苷 Rb1 标准物质于同一量瓶中，以含 0.5%乙酸的甲醇溶解并稀释，制成大豆苷元浓度为 5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、利血平浓度为 0.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、人参皂苷 Rb1 浓度为 10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 的混合标准溶液。			正模式示值误差、重复性、稳定性考察用混和标准物质溶液：准确称取适量大豆苷元或者槲皮素、利血平和人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 标准物质于同一量瓶中，以含 0.5%乙酸的甲醇溶解并稀释，制成大豆苷元或者槲皮素浓度为 5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、利血平浓度为 0.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1 浓度为 10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 的混合标准溶液。  负模式示值误差、重复性标准物质溶液：配置 1.0 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 或 0.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 的氯霉素标准溶液。														
9	B.1 相对示值误差考察结果记录表	<table border="1"> <tr> <td>测量次数</td> <td>大豆苷元</td> <td>利血平</td> <td>人参皂苷 Rb1</td> </tr> </table>	测量次数	大豆苷元	利血平	人参皂苷 Rb1			<table border="1"> <tr> <td>ESI</td> <td colspan="3">正离子模式</td> <td>负离子模式</td> </tr> <tr> <td>测量次数</td> <td>大豆苷元或者槲皮素</td> <td>利血平</td> <td>人参皂苷 Rb1 或者人</td> <td>氯霉素</td> </tr> </table>	ESI	正离子模式			负离子模式	测量次数	大豆苷元或者槲皮素	利血平	人参皂苷 Rb1 或者人	氯霉素
测量次数	大豆苷元	利血平	人参皂苷 Rb1																
ESI	正离子模式			负离子模式															
测量次数	大豆苷元或者槲皮素	利血平	人参皂苷 Rb1 或者人	氯霉素															

						数			参皂苷 Rg1	
10	B.4 重复性 校准记录	测量次数	大豆苷 元	利血 平	人参皂 苷 Rb1	ESI	正离子模式			负离子 模式
			测量 次 数	大豆苷元 或者槲皮 素	利 血 平	人参皂 苷 Rb1 或者人 参皂苷 Rg1	氯霉素			
11	B.5 质量稳 定性考察记 录表	测量时间	大豆苷 元	利血 平	人参皂 苷 Rb1	测量时间	大豆苷 元或者 槲皮素	利血 平	人参皂 苷 Rb1 或者人 参皂苷 Rg1	

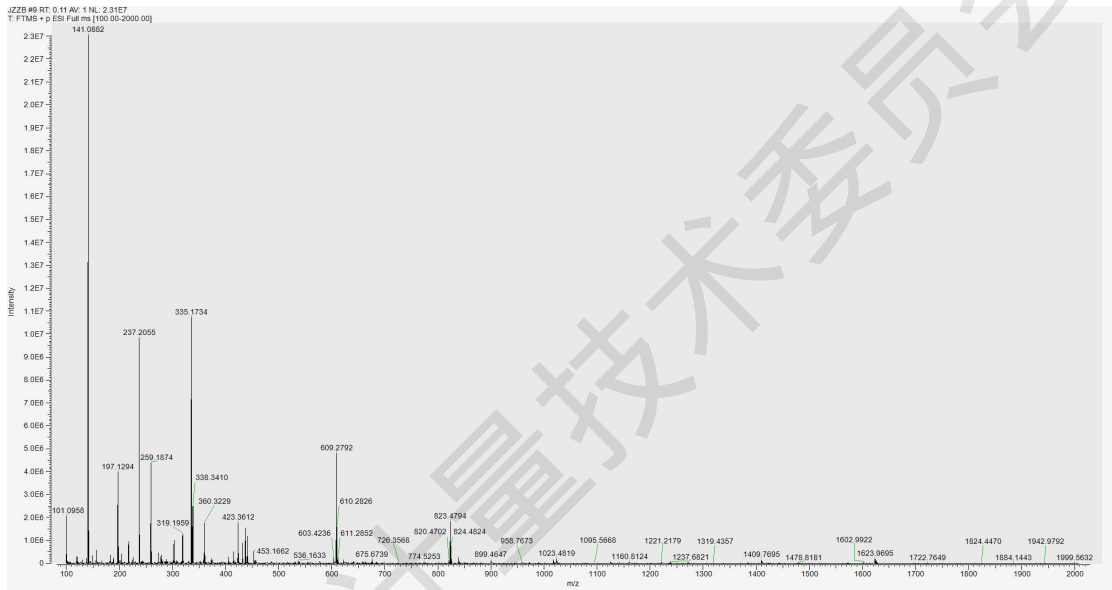
采用新增四种标准物质槲皮素、人参皂苷 Rg1 和异丙醇水溶液中利血平、氯霉素标准物质在 4 台傅立叶变换质谱仪上，进行计量特性：示值误差、信噪比、分辨力、重复性和稳定性考察实验，实验结果表明：槲皮素可以替代大豆苷元，异丙醇水溶液中利血平标准物质可以替代利血平纯标准物质，人参皂苷 Rg1 可以替代人参皂苷 Rb1，氯霉素可以满足仪器 ESI 负模式量值溯源需求。具体实验数据如下：

# ESI 正离子模式实验数据

中国医学科学院生物技术研究所 Thermo Orbitrap

## 实验结果

### 质量范围



### 分辨力宽范围扫描分辨力

标准物质	分辨力	平均值
利血平	53100	53533
	53500	
	54000	

### 窄范围扫描分辨力

标准物质	分辨力	平均值
利血平	N/A	N/A
	N/A	
	N/A	



## 信噪比

	信号强度	平均值
利血平	6152.11	2935.15
	2140.82	
	512.52	
噪声	58.30	172.48
	57.1	
	57.08	
信噪比	50.59	

## 示值误差

测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.04913	609.27095	823.47913
第二次	303.04843	609.27936	823.48059
第三次	303.05154	609.28204	823.48260
平均值	303.0497	609.2775	823.4808
相对示值误差	$-7.58951 \times 10^{-7}$	$-5.26851 \times 10^{-6}$	$-7.97427 \times 10^{-7}$

## 质量稳定性

质量稳定性考察（正离子模式）结果记录表

测量时间	大豆苷元或者槲皮素	利血平	人参皂苷 Rb1 或者人参皂苷 Rg1
0 h	303.04895	609.27863	823.47852
	303.04091	609.27881	823.47870

	303.04904	609.27893	823.47913
0h 测定的平均值	303.04630	609.27879	823.47878
2 h	303.04831	609.27826	823.47931
	303.04904	609.27899	823.47925
	303.04877	609.27844	823.47815
2 h 测定的平均值	303.04871	609.27856	823.47890
相对漂移 $\times 10^{-6}$	7.94	0.372	0.146

## 重复性

重复性考察（正离子模式）结果记录表

测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.04910	609.27899	823.47906
第二次	303.04849	609.27887	823.47925
第三次	303.04861	609.27802	823.47778
第四次	303.04910	609.27887	823.47876
第五次	303.04898	609.27863	823.47839
第六次	303.04898	609.27881	823.47882
平均值	303.0488767	609.2786983	823.4786767
相对标准偏差 (%)	$8.62673 \times 10^{-5}$	$5.78554 \times 10^{-5}$	$6.40127 \times 10^{-5}$

## 合成不确定度和扩展不确定度

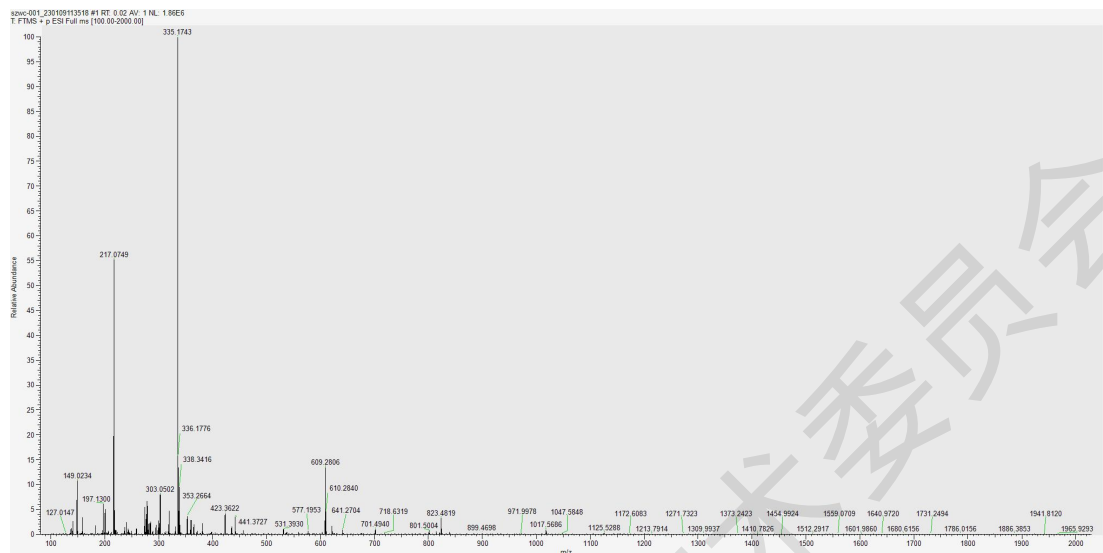
化合物	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
重复性不确定度	$1.07 \times 10^{-4}$	$1.44 \times 10^{-4}$	$2.15 \times 10^{-4}$
稳定性不确定度	$6.95 \times 10^{-4}$	$-6.54 \times 10^{-5}$	$3.46 \times 10^{-5}$
合成不确定度	$4.62 \times 10^{-4}$	$1.64 \times 10^{-3}$	$3.65 \times 10^{-4}$

扩展不确定度	$9.24 \times 10^{-4}$	$3.29 \times 10^{-3}$	$7.29 \times 10^{-4}$
--------	-----------------------	-----------------------	-----------------------

全国生物计量技术委员会

# 北京大学分析测试中心 Thermo LTQ Orbitrap 实验结果

## 质量范围



## 分辨力

### 宽范围扫描分辨力

标准物质	分辨力	平均值
利血平	108401	108534
	108701	
	108501	

### 窄范围扫描分辨力

标准物质	分辨力	平均值
利血平	N/A	N/A
	N/A	
	N/A	

## 信噪比

	信号强度	平均值
--	------	-----

利血平	205595.94	167113.153
	127511.64	
	168231.88	
噪声	261.07	224.59
	180.48	
	232.23	
信噪比	739.48	

## 示值误差

### 质量准确性示值误差考察（正离子模式）结果

测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.04883	609.27856	823.47925
第二次	303.04898	609.27863	823.47925
第三次	303.05017	609.28064	823.48193
平均值	303.0493267	609.2792767	823.4801433
相对示值误差	$1.88 \times 10^{-1}$	$4.59 \times 10^{-4}$	$-2.72 \times 10^{-1}$

## 质量稳定性

### 质量稳定性考察（正离子模式）结果记录表

测量时间	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
0 h	303.04895	609.28101	823.48236
	303.04974	609.28015	823.48108
	303.05145	609.28284	823.48450
0h 测定的平均值	303.04974	609.28020	823.48050
2 h	303.05200	609.28375	823.48590
	303.05151	609.28296	823.48468
	303.05194	609.28381	823.48621
2 h 测定的平均值	303.05182	609.28351	823.48560

相对漂移 $\times 10^{-6}$	6.85256	5.41075	6.20132
-----------------------	---------	---------	---------

## 重复性

重复性考察（正离子模式）结果记录表

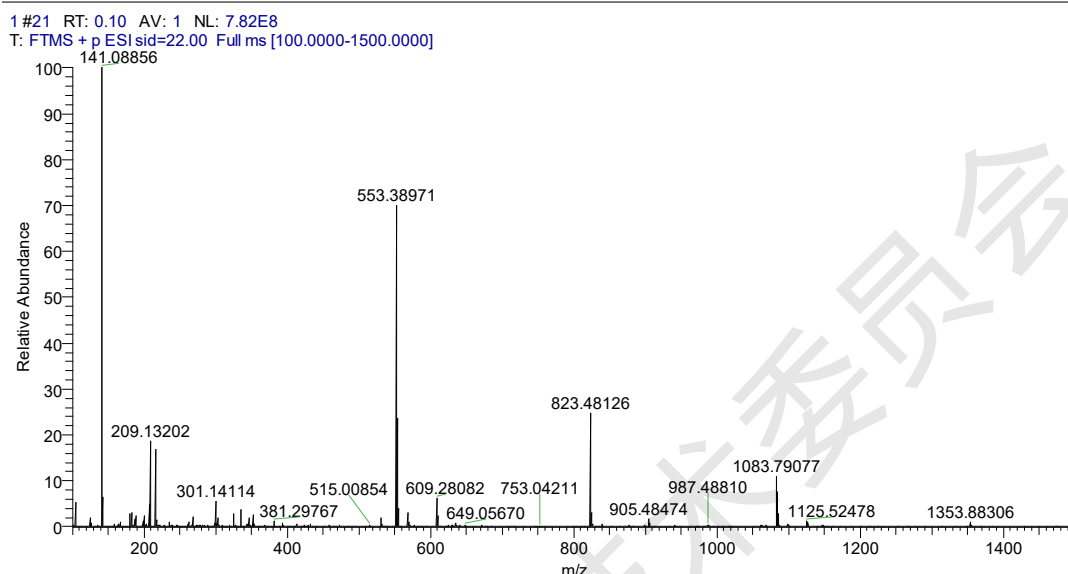
测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.04907	609.27881	823.47955
第二次	303.05078	609.28162	823.48303
第三次	303.05096	609.28204	823.48370
第四次	303.05145	609.28308	823.48511
第五次	303.05093	609.28210	823.48376
第六次	303.05133	609.28278	823.48444
平均值	303.0507533	609.2817383	823.483265
相对标准偏差 (%)	$4.47 \times 10^{-4}$	$3.79 \times 10^{-4}$	$3.65 \times 10^{-4}$

## 合成不确定度和扩展不确定度

化合物	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
重复性不确定度	$3.52 \times 10^{-4}$	$6.24 \times 10^{-4}$	$7.97 \times 10^{-4}$
稳定性不确定度	$5.11 \times 10^{-4}$	$5.41 \times 10^{-4}$	$8.52 \times 10^{-4}$
合成不确定度	$4.62 \times 10^{-4}$	$1.64 \times 10^{-3}$	$3.65 \times 10^{-4}$
扩展不确定度	$9.24 \times 10^{-4}$	$3.29 \times 10^{-3}$	$7.29 \times 10^{-4}$

# 北京 Thermo 公司 Orbitrap Exploris 240 实验结果

## 质量范围



## 分辨率

### 宽范围扫描分辨率

标准物质	分辨率	平均值
利血平	73306	73472
	73506	
	73606	

### 窄范围扫描分辨率

标准物质	分辨率	平均值
利血平	73106	73172
	73106	
	73306	

## 信噪比

	信号强度	平均值

利血平	3.99*10 <sup>7</sup>	3.61*10 <sup>7</sup>
	3.21*10 <sup>7</sup>	
	3.63*10 <sup>7</sup>	
噪声	49522.3	44535.32
	41364.63	
	42719.04	
信噪比	811	

## 示值误差

### 质量准确性示值误差考察（正离子模式）结果

测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.05005	609.28088	823.48132
第二次	303.04993	609.28070	823.48102
第三次	303.04990	609.28058	823.48090
平均值	303.04996	609.28072	823.48108
相对示值误差	1.88*10 <sup>-1</sup>	4.61*10 <sup>-4</sup>	-2.72*10 <sup>-1</sup>

## 质量稳定性

### 质量稳定性考察（正离子模式）结果

单位：Da

测量时间	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
0 h	303.04974	609.28027	823.48053
	303.04980	609.28027	823.48065
	303.04968	609.28009	823.48029
0h 测定的平均值	303.04974	609.28021	823.48049
2 h	303.04974	609.28027	823.48053
	303.04968	609.28015	823.48035



	303.04971	609.28015	823.48041
2 h 测定的平均值	303.04971	609.28019	823.48043
相对漂移 $\times 10^{-6}$	-0.09899365	-0.032825619	-0.072861471

## 重复性

重复性考察（正离子模式）结果记录表

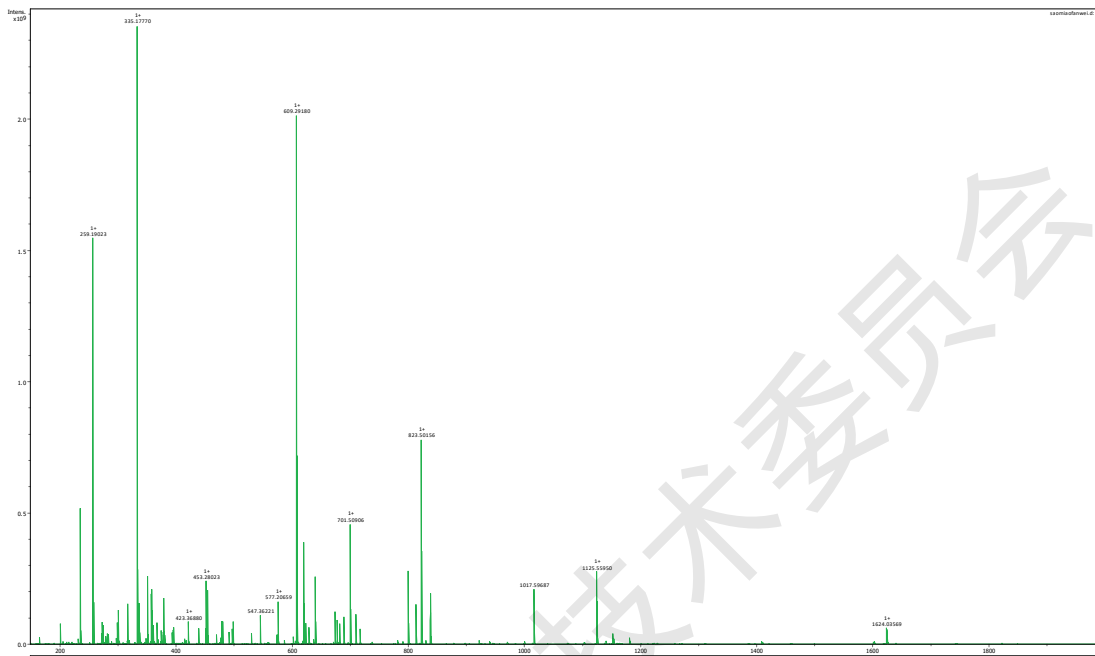
测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.04993	609.28052	823.48080
第二次	303.04993	609.28064	823.48096
第三次	303.04984	609.28040	823.48077
第四次	303.04980	609.28046	823.48077
第五次	303.04974	609.28015	823.48041
第六次	303.04974	609.28027	823.48053
平均值	303.04983	609.2804067	823.4807067
相对标准偏差 (%)	$4.03 \times 10^{-5}$	$4.08 \times 10^{-5}$	$3.44 \times 10^{-5}$

## 合成不确定度和扩展不确定度

化合物	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
重复性不确定度	$3.52136 \times 10^{-5}$	$7.18177 \times 10^{-5}$	$8.16769 \times 10^{-5}$
稳定性不确定度	$-8.66025 \times 10^{-6}$	$-5.7735 \times 10^{-6}$	$-1.73205 \times 10^{-5}$
合成不确定度	$4.62 \times 10^{-4}$	$1.64 \times 10^{-3}$	$3.65 \times 10^{-4}$
扩展不确定度	$9.24 \times 10^{-4}$	$3.29 \times 10^{-3}$	$7.29 \times 10^{-4}$

# 北京大学 SolariX-XR FT 质谱仪实验结果

## 质量范围



## 分辨力

### 宽范围扫描分辨力

标准物质	分辨力	平均值
利血平	485902	506259
	523074	
	509803	

### 窄范围扫描分辨力

标准物质	分辨力	平均值
利血平	105182	405518
	112184	
	999189	

## 信噪比

	信号强度	平均值

利血平	9.67*10 <sup>8</sup>	1.49*10 <sup>9</sup>
	1.08*10 <sup>9</sup>	
	2.44*10 <sup>9</sup>	
噪声	232,540.04	1.95*10 <sup>5</sup>
	268,826.05	
	84,821.99	
信噪比	1.23*10 <sup>4</sup>	

## 示值误差

### 质量准确性示值误差考察（正离子模式）结果

测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.05342	609.29182	823.50161
第二次	303.05343	609.29187	823.50178
第三次	303.05341	609.29179	823.50161
平均值	303.05342	609.2918267	823.5016667
相对示值误差	1.65*10 <sup>-4</sup>	4.79*10 <sup>-4</sup>	2.75*10 <sup>-4</sup>

## 质量稳定性

### 质量稳定性考察（正离子模式）结果

测量时间	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
0 h	303.05415	609.29374	823.50561
	303.05390	609.29299	823.50389
	303.05378	609.29270	823.50328
0h 测定的平均值	303.05394	609.29314	823.50426
2 h	303.05297	609.28955	823.49833
	303.05281	609.28857	823.49879

	303.05225	609.28692	823.49489
2 h 测定的平均值	303.05267	609.28834	823.49733
相对漂移 $\times 10^{-6}$	-7.01745	-15.81614	-22.66331

## 重复性

重复性考察（正离子模式）结果记录表

测量次数	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
第一次	303.05376	609.29271	823.50320
第二次	303.05359	609.29225	823.50246
第三次	303.05352	609.29202	823.50204
第四次	303.05351	609.29211	823.50205
第五次	303.05348	609.29197	823.50194
第六次	303.05345	609.29193	823.50182
平均值	303.0535517	609.29217	823.50225
相对标准偏差 (%)	$5.24 \times 10^{-5}$	$6.74 \times 10^{-5}$	$8.80 \times 10^{-5}$

## 合成不确定度和扩展不确定度

化合物	槲皮素	利血平	人参皂苷 Rg1
重复性不确定度	$4.59 \times 10^{-5}$	$1.19 \times 10^{-4}$	$2.09 \times 10^{-4}$
稳定性不确定度	$-3.66 \times 10^{-4}$	$-1.38 \times 10^{-3}$	$-2.00 \times 10^{-3}$
合成不确定度	$4.62 \times 10^{-4}$	$1.64 \times 10^{-3}$	$3.65 \times 10^{-4}$
扩展不确定度	$9.24 \times 10^{-4}$	$3.29 \times 10^{-3}$	$7.30 \times 10^{-4}$

中国肉类食品综合研究中心 Q EXACTIVE HF-X ESI 负离子模式—氯霉素实验数据

信噪比

	信号强度	平均值
氯霉素	318875049	317678267
	318785833	
	315373920	
噪声	500000	566666
	700000	
	700000	
信噪比	560	

示值误差

质量准确性示值误差考察（负离子模式）结果

测量次数	氯霉素
第一次	321.00558
第二次	321.00555
第三次	321.00558
平均值	321.00557
相对示值误差	0.00033%

重复性

重复性考察（负离子模式）结果记录表

测量次数	氯霉素素
------	------

第一次	321.00558
第二次	321.00555
第三次	321.00558
第四次	321.00565
第五次	321.00558
第六次	321.00565
平均值	321.00560
相对标准偏差 (%)	0.00013%

## 合成不确定度和扩展不确定度

化合物	氯霉素
重复性不确定度	0.0000033
分子量不确定度	0.00001
合成不确定度	0.00000025
扩展不确定度	0.0000005

《傅立叶变换质谱仪校准规范》规范修订起草小组

2023年2月21日