

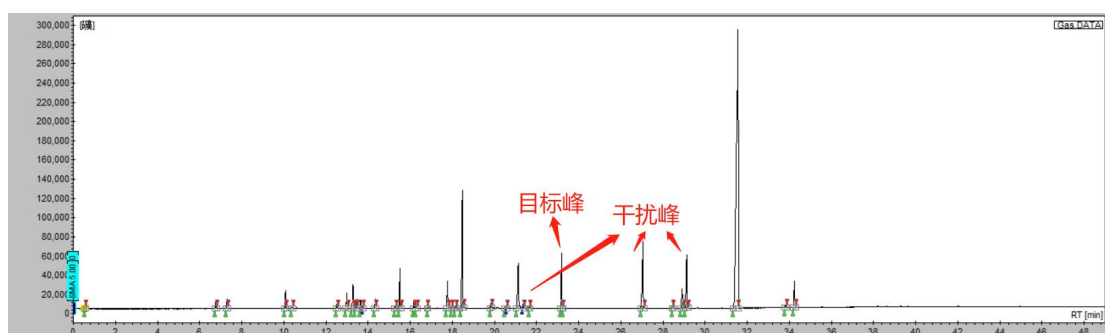
如何在 Compass CDS 中设置保留指数功能？

提起保留指数 (Retention Index, 简称 RI), 可能有些小伙伴会疑惑: 这是什么参数呀?

那什么是保留指数呢? 简单来说, 就是我们关注的目标化合物所对应图谱峰前后相邻的正构烷烃的相对保留时间。

细心的小伙伴可能发现了保留指数其实就是表示相对保留时间, 那为什么我们不直接用每次测样的保留时间而非要引入一个相对保留时间的概念呢?

其实答案很简单, 在我们进行色谱分析的过程中, 很多时候要经过“漫长”的前处理过程, 最后上机检测的样品是我们经过尽可能的提高提取率降低杂质干扰后的待测样品, 此时图谱上除了我们关注的化合物之外还经常会有许多杂质干扰峰 (如下图), 那为了明确哪个是我们的目标峰常常会用标准品来定性。



但即使是同一类化合物, 因为每次样品基质的前处理手法和检测条件可能会有差异, 往往会造成目标峰的保留时间不一样, 因此只看每张图谱上的绝对的保留时间对目标物的定性来说是没有多大的参考意义的。

现实的检测中我们往往会关注很多目标化合物, 所以每次都用标品来对

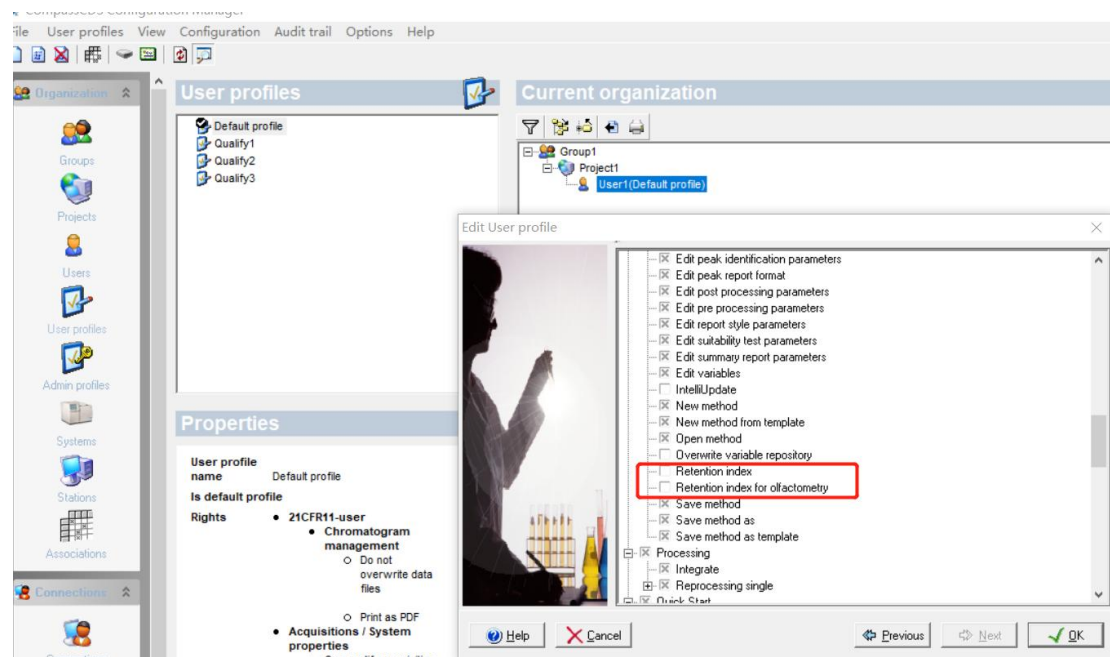
每个峰进行定性实在太过奢侈（某些土豪实验室可以无视购买标准品的费用，但每次定性也很浪费时间）。

此时引入保留指数就起到了很大的作用。在 GC-MS 分析中，我们通过用标品来鉴定了某化合物，再加上同一次进样中加入正构烷烃的标准品，就知道了该化合物的名称-保留时间-标准谱图，再把保留时间通过保留指数计算公式计算出该物质的保留指数。通过收集大量的化合物信息，就能建立起一个包含代谢物名称-保留指数-标准图谱的数据库，如 GC-MS 中用的比较广泛的 NIST 数据库。

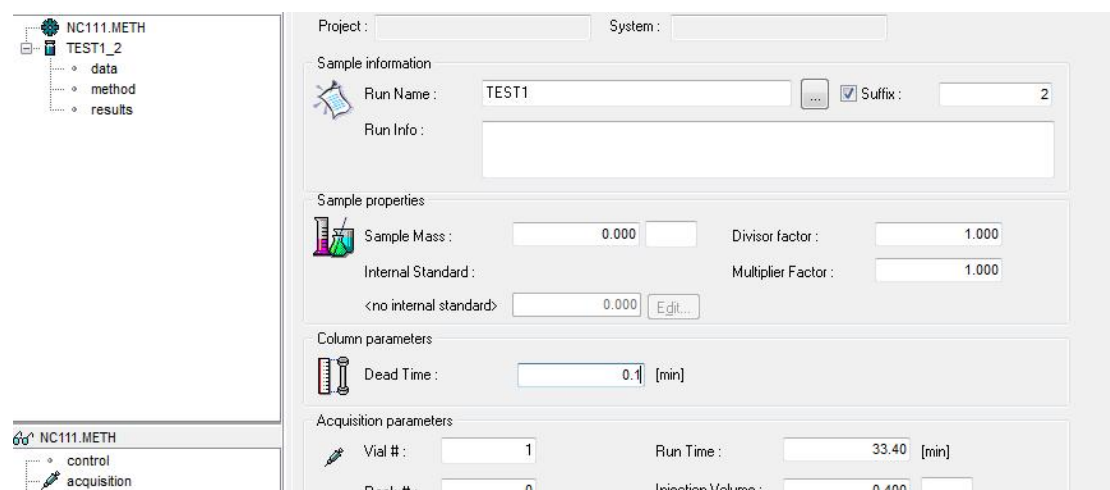
这个概念保留指数的概念同样可以引入到色谱分析中来。在进行色谱分析的过程中，可以添加一定数量的正构烷烃，能够覆盖你目标化合物的出峰时间的起始与终点就好。在一起配套的软件里面导入你加入的正构烷烃标品的保留时间信息，在利用数据库鉴定化合物的时候，软件会自动给出数据库中的保留指数（RI）和样品中的保留（RI）指数。这样即使你的样品峰的保留时间出现了漂移，但数据库与样品两个的 RI 是基本一致的，这样就可以轻松的对漂移的化合物进行定性了。

说了这么多，肯定有小伙伴们迫不及待的想知道 Compass CDS 有没有这个保留指数的功能了。我们怎么会让您失望呢，跟着下面的步骤来对 Compass CDS 设置保留指数操作吧！

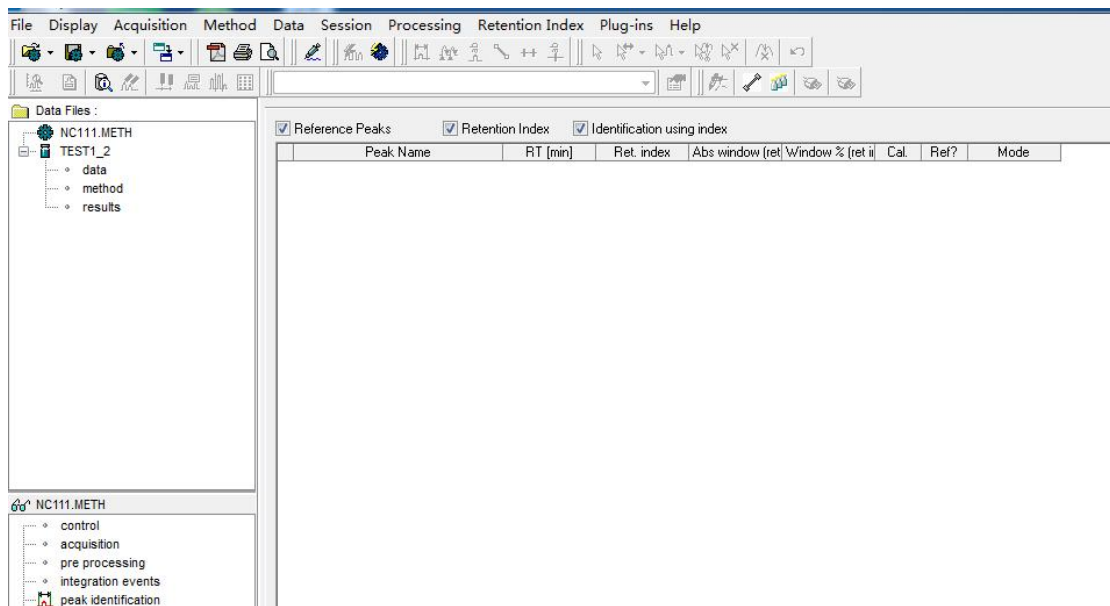
1、配置中要选择此功能，按照下图的设置把保留指数功能启用



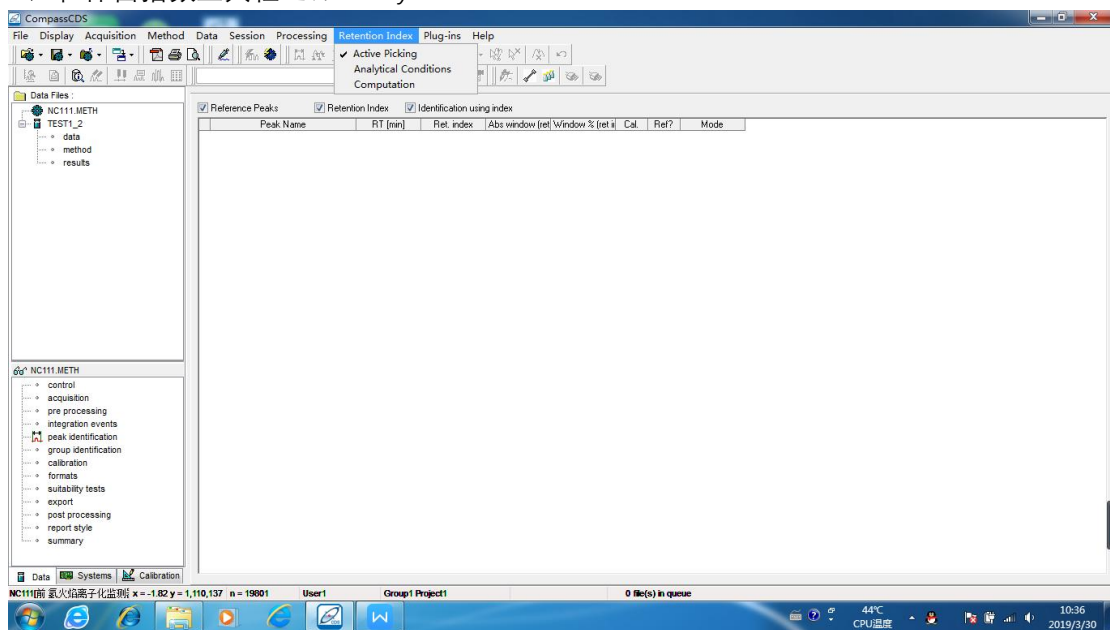
2、在工作站中打开所用的分析方法，填写死体积时间



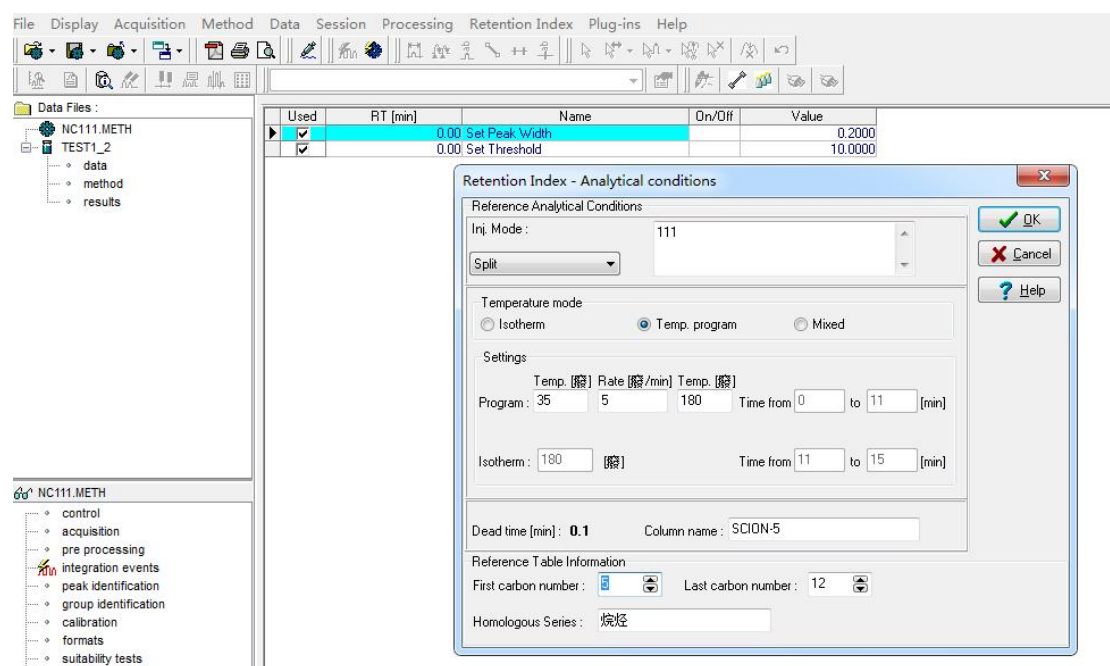
3、在峰定性中选择保留指数、保留指数定性



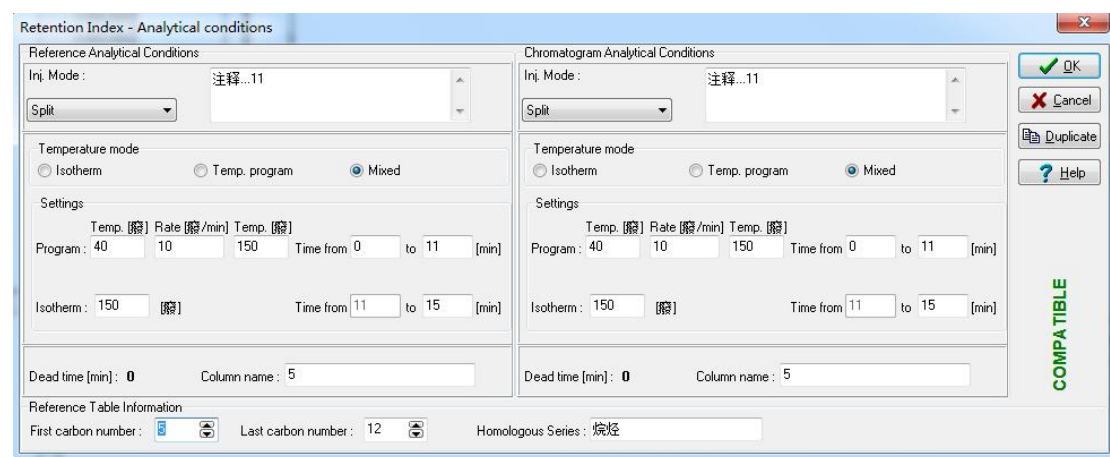
4、在保留指数工具栏选择 Analytical Conditions



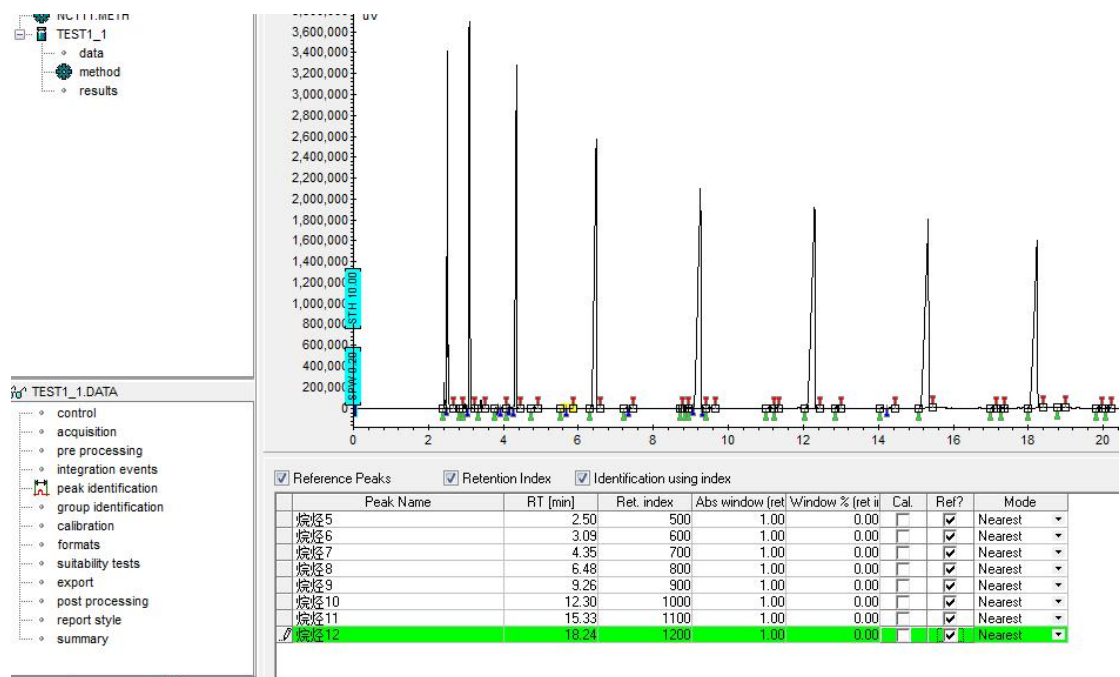
5、填写完整 Analytical Conditions，保存方法



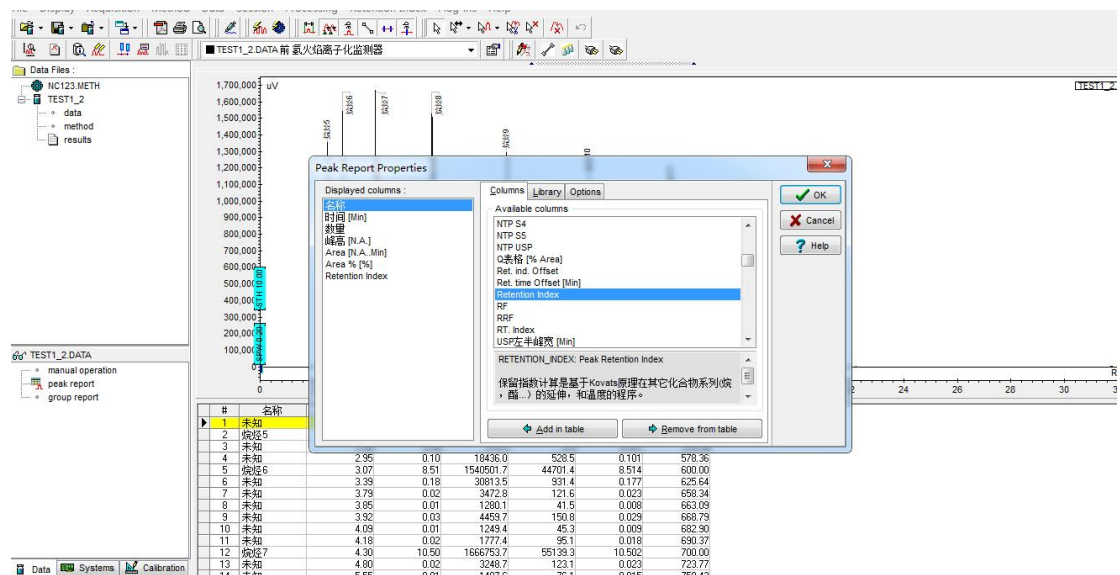
6、打开数据，参考条件和运行条件保持一致



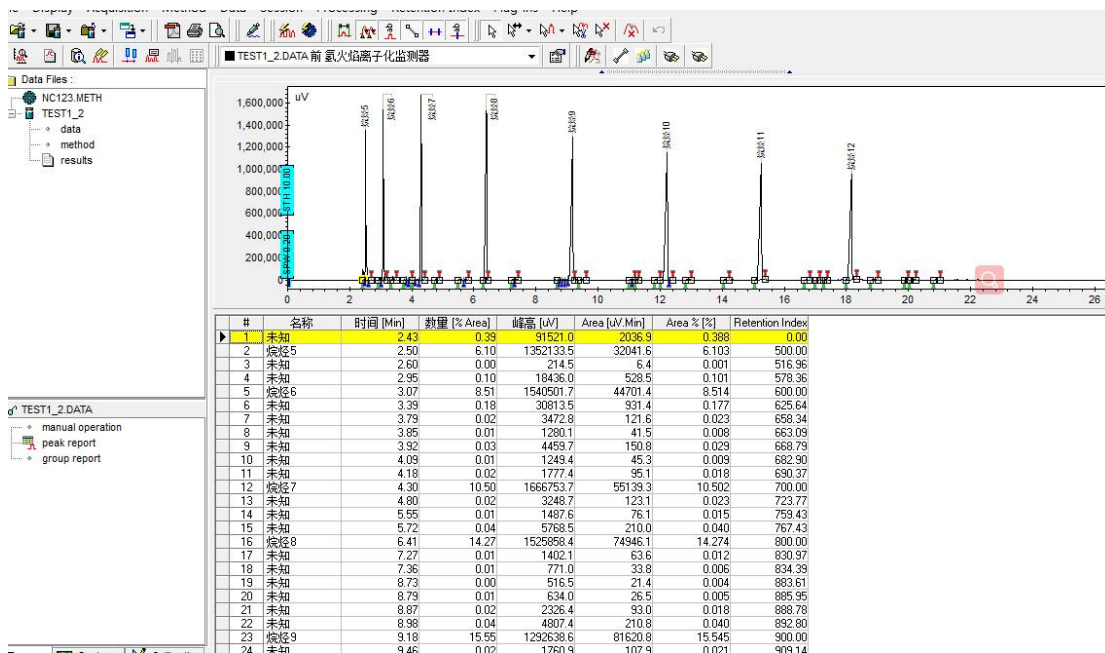
7、在数据峰定性中设置如下,再 F5 键:



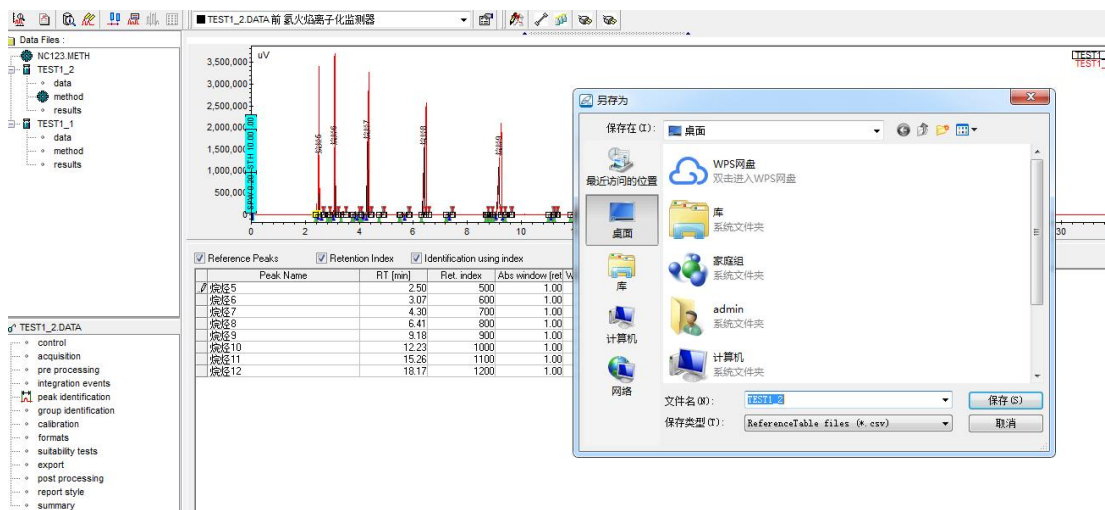
8、在数据结果中，选择上保留指数



9、查看数据结果



10、 可以导出保留指数相关模板，保存方法即可



根据步骤是不是已经开启了我们 Compass CDS 的保留指数功能呢？

以后再也不用担心因为切柱子或者改了分析条件后目标峰的漂移了，赶

快分享给还不知道的小伙伴吧！