



北京欧倍尔软件技术开发有限公司
BeiJing Oubeier Software Tecnology Development Co.,Ltd

编号: XXX-XXX-XX

气相色谱-质谱联用仪的使用虚拟仿真 V1.0

软件说明书

北京欧倍尔软件技术开发有限公司

2017 年 09 月

地址: 北京海淀区清河永泰园甲 1 号建金商厦 420-423 室 邮编: 100085

E-mail: bjobe@163.com 电话: 010-82830966 网址: www.bjobe.com



目 录

第一章 软件简介.....	1
1.1 概述.....	1
1.2 软件特色.....	1
第二章 软件安装.....	2
第三章 软件操作说明.....	2
3.1 软件启动.....	2
3.2 软件操作.....	3
3.2.1 功能介绍.....	4
3.2.2 界面介绍.....	5
3.2.3 模式介绍.....	5
3.3 实验操作—冠心苏合丸中冰片的定量分析.....	6
3.3.1 标样配制.....	6
3.3.2 启动仪器.....	7
3.3.3 样品测定.....	9
3.3.4 数据分析.....	18
3.3.5 实验结束--->关机.....	27
第四章 注意事项.....	27
4.1 软件运行注意事项及常见问题.....	27
4.1.1 软件运行注意事项.....	27
4.1.2 其中容易被杀毒软件阻止的程序.....	28
4.2 安装过程中常见问题.....	28
4.2.1 控件注册失败.....	28

第一章 软件简介

1.1 概述

本软件是基础化学学科教育信息化建设项目，旨在为本科院校化工相关专业的学生提供一个三维的、高仿真度的、高交互操作的、全程参与式的、可提供实时信息反馈与操作指导的、虚拟的基础化学模拟操作平台，使学生通过在本平台上的操作练习，进一步熟悉专业基础知识、了解化学实验室实际实验环境、培训基本动手能力，为进行实际实验奠定良好基础。

本平台采用虚拟现实技术，依据实验室实际布局搭建模型，按实际实验过程完成交互，完整再现了化工原理实验室的实验操作过程及实验中管路内流体的流动效果。每个实验操作配有评分系统，提示实验操作的正确操作及实验过程中的注意事项，3D 操作画面具有很强的环境真实感、操作灵活性和独立自主性，学生可查看到实验仪器的各个部分，解决了实际实验过程中的某些盲点，为学生提供了一个自主发挥的实验舞台，特别有利于调动学生动脑思考，培养学生的动手能力，同时也增强了学习的趣味性。

该平台为学生提供了一个自主发挥的平台，也为实验“互动式”预习、“翻转课堂”等新型教育方式转化到基础化学实验中来提供了一条新思路、新方法及新手段，必将对促进本科化学实验教育教学的改革与发展起到积极的促进作用。

1.2 软件特色

本软件的特色主要有以下几个方面：

（1）虚拟现实技术

利用电脑模拟产生一个三维空间的虚拟世界，构建高度仿真的虚拟实验环境和实验对象，提供使用者关于视觉、听觉、触觉等感官的模拟，让使用者如同身历其境一般，可以及时、没有限制地 360° 旋转观察三维空间内的事物，界面友好，互动操作，形式活泼。

（2）自主学习内容丰富

知识点讲解，包含实验目的、实验原理、实验操作过程中的注意事项；

（3）实验数据能自由记录及处理

地址：北京海淀区清河永泰园甲 1 号建金商厦 420-423 室 邮编：100085

E-mail: bjobe@163.com 电话：010-82830966 网址：www.bjobe.com

记录数据及数据处理功能，学员操作仿真软件过程中，能把实验中产生的数据记录下来并能对数据进行处理，生成对应的图表等。

(4) 智能操作指导

具体的操作流程，系统能够模拟试验操作中的每个步骤，并加以文字或语言说明和解释；

(5) 评分系统

系统给出操作提示，操作正确时得分，错误时扣分，每个步骤扣分最多只扣 3 次。

(6) 实用性强，具有较大的可推广应用价值和前景

本套软件由计算机程序设计人员、虚拟现实技术人员、具有实际经验的一线工程技术人员、专业教师合作完成，贴近实际，过程规范，特别适合基础化学实验教育使用，具有较大的可推广应用价值和前景。

第二章 软件安装

参考说明书：[DPSP 运行平台说明书 V1.0](#)



第三章 软件操作说明

3.1 软件启动

完成安装后就可以运行虚拟仿真软件了，双击桌面快捷方式，在弹出的启动窗口(图-1)中选择“气相-质谱联用仪”，培训项目列表显示“苯系物未知样的定性分析”、“苯、甲苯、苯甲酸的定量分析”，选择一个项目，点击“启动”按钮。

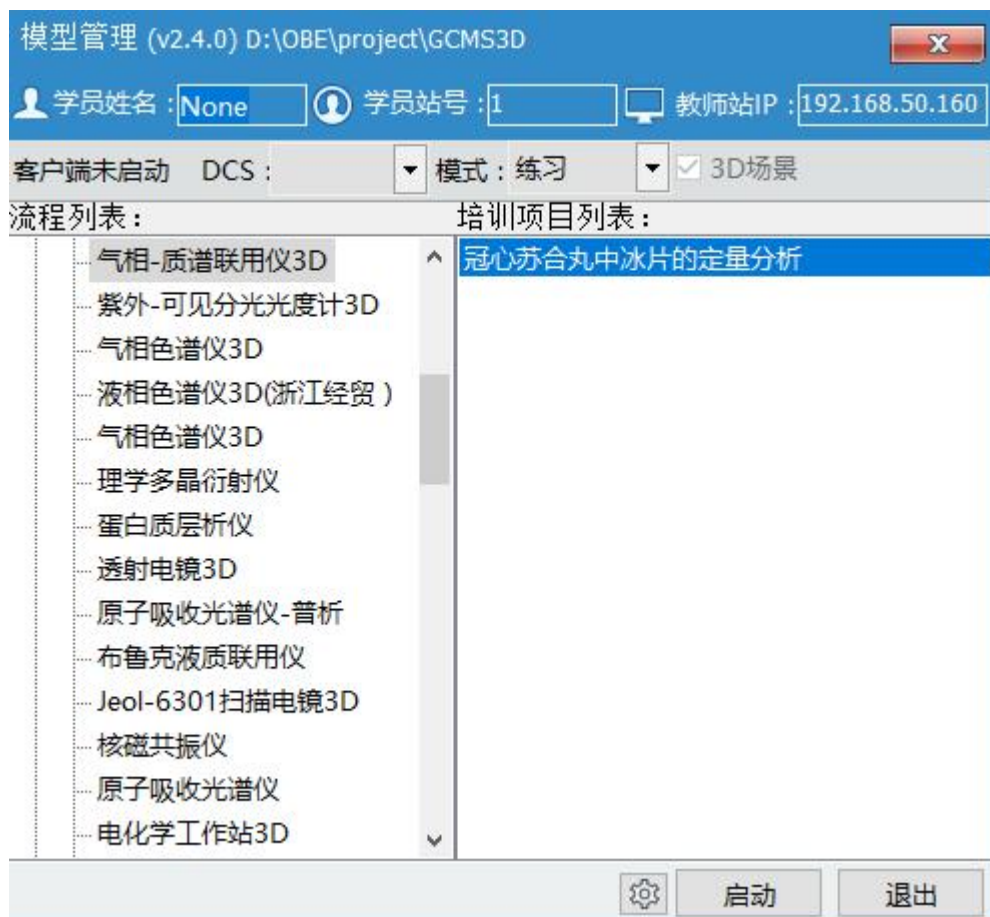


图-1

3.2 软件操作

启动软件后，出现仿真软件加载页面(图-2)，软件加载完成后进入仿真实验操作界面(图-3)，在该界面可实现虚拟仿真软件的所有操作。

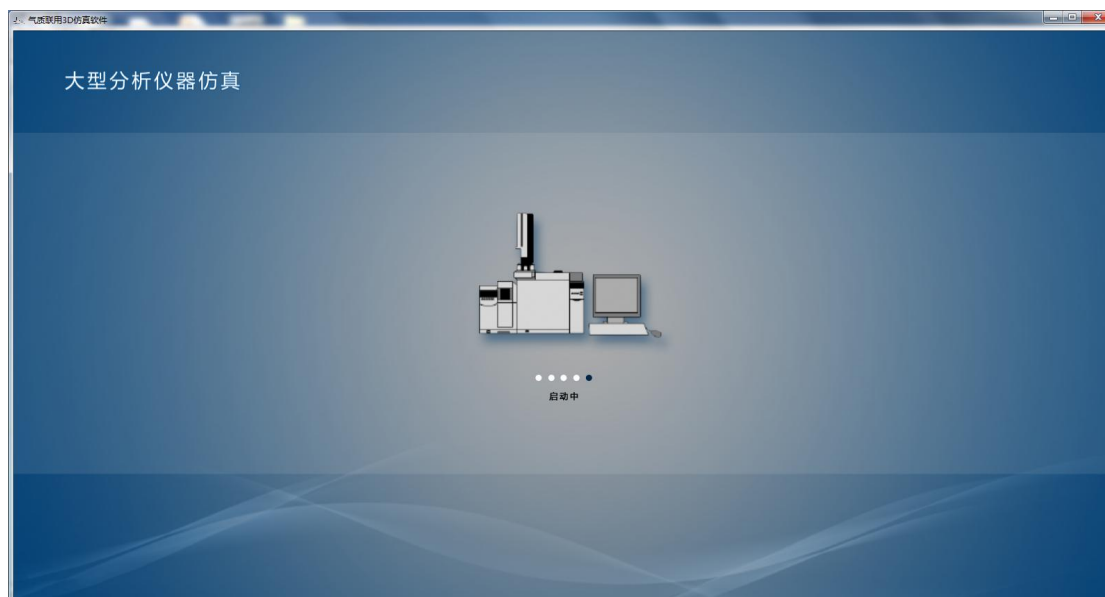


图-2

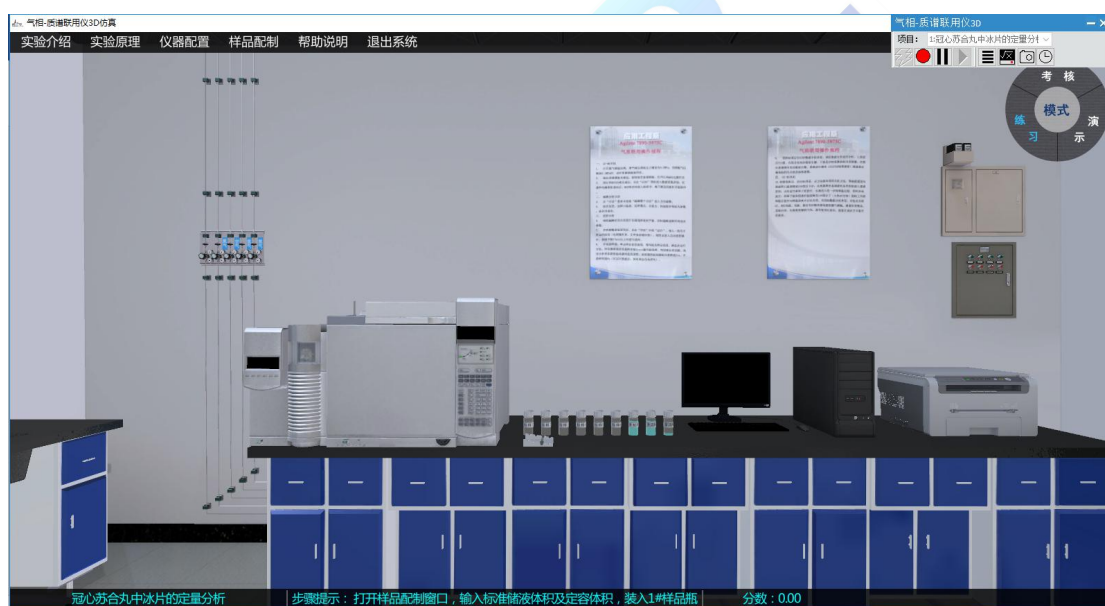


图-3

3.2.1 功能介绍

❖ 角度控制: W--前, S--后, A--左, D--右、鼠标右键--视角旋转(图-4)。

视角高度: Q—抬高视角, E—降低视角。

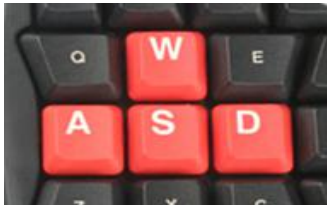


图-4

❖ 当鼠标放在某位置时指针变为手型表示可对该部分可进行操作。

3.2.2 界面介绍

进入界面后，界面上方为菜单功能条(图-5)，右上方为工具条(图-6)。



图-5

【实验介绍】：介绍实验的基本情况，如实验内容、操作规程、理论知识和安全知识等。

【实验原理】：介绍仪器的工作原理。

【样品配制】：对实验所用标准样品进行配制。

【退出】：点击退出实验。



图-6

表-1 工具条图标说明

图标	说明	图标	说明	图标	说明	图标	说明
	运行选中项目		暂停当前运行项目		状态说明		保存快门
	停止当前运行项目		恢复暂停项目		参数监控		模型速率

3.2.3 模式介绍

本仿真软件为学生提供了三种学习模式，分别是练习、考核和演示模式。界面右上角模

式框中显示的为当前的模式。

练习：该模式针对的对象为初学者。相应的步骤有步骤提示，学生只有正确的完成当前步骤的操作，才会出现下一步操作的提示。

考核：学生使用练习模式后，教师可通过考核模式对学生的学习效果进行检测，该模式下无步骤提示，完成相应的步骤得到相应的分值，可作为教师评定的标准，。

演示：练习模式时，学生可以通过界面右上角的模式框切换至演示模式。该模式为学生展示了一个完整的操作视频，停止后，按下键盘上的 Esc 返回至练习模式。

3.3 实验操作—冠心苏合丸中冰片的定量分析

3.3.1 标样配制

① 点击主界面菜单栏中的样品配制标签（图-7），弹出样品配制窗口（图-8）。在样品配制窗口中输入标准储液的体积和定容体积，配制不同浓度的标准样（具体配制的标样浓度以教师教案为准）。



图-7



The image shows a window titled '标样的制备' (Preparation of Standard Samples) with a table for data entry and a note at the bottom.

编号	冰片体积 /mL	定容体积 /mL	冰片浓度 /mg/ml	操作	
1				装样	清空
2				装样	清空
3				装样	清空
4				装样	清空
5				装样	清空
6				装样	清空

注：冰片标准储备液的浓度为10mg/mL,定容溶剂为乙酸乙酯。

图-8

② 例如，在编号为1的一栏中输入标准储液的体积为1，定容体积为10后，列表会

自动计算出标样中冰片的浓度并显示在表中（图-9）。点击“装样”命令后，实验台上编号为1的样品瓶中装入标样（图-10）；点击“清空”命令可取消该标样的配制，桌面上1号样品瓶中的标样以及列表中的数据都被清空。

标样的制备					
编号	冰片体积/mL	定容体积/mL	冰片浓度/mg/ml	操作	
1	1	10	1.000	装样	清空
2				装样	清空
3				装样	清空
4				装样	清空
5				装样	清空
6				装样	清空

注：冰片标准储备液的浓度为10mg/mL，定容溶剂为乙酸乙酯。

图-9



图-10

3.3.2 启动仪器


3.3.2.1 配置仪器、开气体

配置仪器：



点击“仪器配置”：选择“进样方式”--->“手动进样（后进样口）”；

选择“色谱柱连接方式”--->“后进样口+检测器”；

① 鼠标指向氦气管路总压阀门 ，鼠标指针变为手型，左键单击，总压阀一侧弹出压力调节窗口（图-11）。点击窗口中的+、-对管路总压阀的开度进行调节，其中点击+

表示加大总压阀开度，管路阀门逆时针旋转；点击一表示减小总压阀开度，管路阀门顺时针旋转。



图-11


② 打开氮气管路总压阀后，通过调节减压阀对管路的输出压力进行控制。鼠标指向减压阀，鼠标指针变为手型，左键单击，弹出压力调节窗口（图-12）。点击窗口中的+、一对减压阀的开度进行调节，控制氮气出口压力为 0.5MPa。其中点击+表示加大减压阀开度，减压阀顺时针旋转；点击一表示减小总压阀开度，减压阀逆时针旋转。



图-12

3.3.2.2 开仪器

① 鼠标指向气相色谱—质谱仪电源，指针变为手型，点击分别打开气相色谱仪和质谱仪，此时仪器显示屏变亮（图-13）

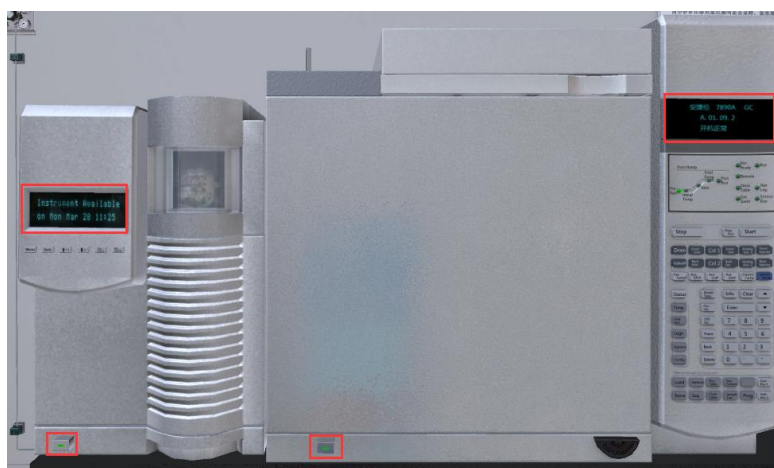


图-13

② 左键单击电脑主机电源，打开电脑。单击电脑桌面上的工作站图标（图-14），启动工作站软件，弹出工作站窗口（图-15）。



图-14



图-15

3.3.3 样品测定

3.3.3.1 运行工作站

① 编辑完整方法：在工作站窗口“方法”菜单下选择“编辑整个方法”命令，进入方法设置界面（图-16）。



图-16

选中“方法信息”，点击“确定”，弹出方法信息窗口（图-17）

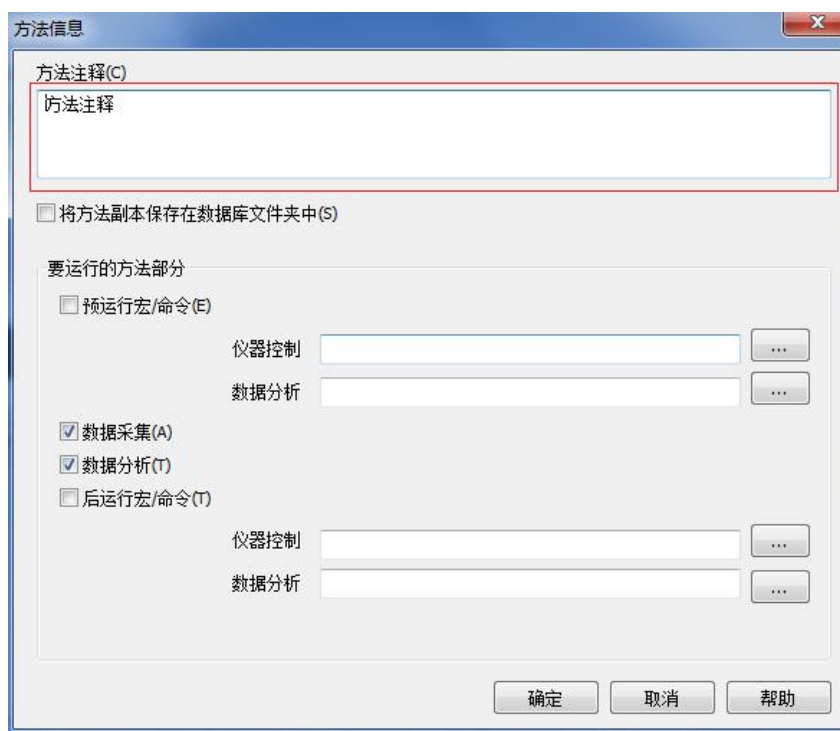


图-17

在该窗口中填入关于该方法的注释（也可不填），点击“确定”。

② 进样方式选择：在弹出的窗口中选择进样方式为“手动”（图-18），点击“确定”，进入下一画面。



图-18

- ③ 编辑 GC 参数：在 GC 参数窗口中编辑进样口、柱箱和色谱柱等参数（图-19）

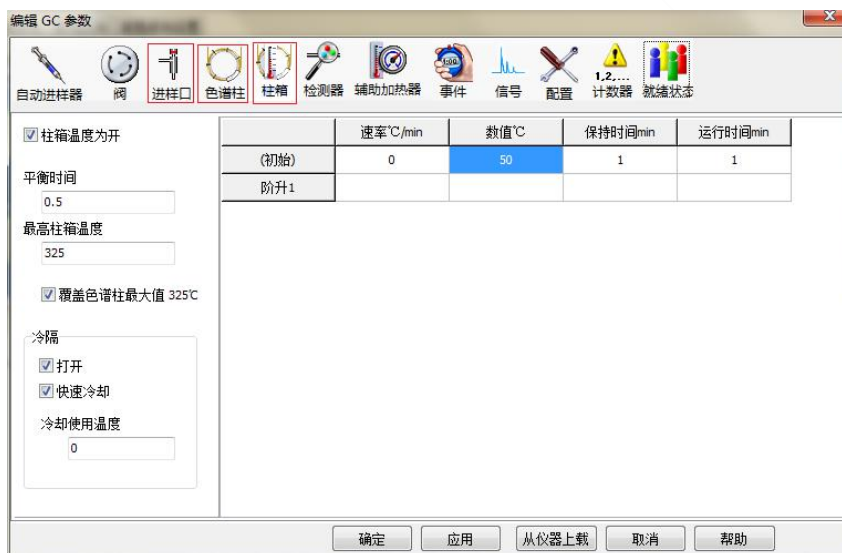


图-19


如：点击  图标，进入柱温参数设定画面。选中“柱箱温度为开”，在空白表框中输入升温速率、数值和保持时间等数值（具体数值见教师教案），点击“应用”。图-20 为一程序升温的例子：



图-20




 点击  图标，进入进样口设定画面（图-21），在该页面中可对进样模式、分流比等参数进行设置，点击“应用”。



图-21

保存方法：所有参数设置完毕后，点击“确定”，在弹出的窗口中填入溶剂延迟时间并选择采集模式和绘图类型。本实验中采用的溶剂延迟为 3.00 分钟，采集模式为选择离子检测，绘图类型为单离子图（图-22）。



图-22

点击“SIM 参数 (F)”，弹出下图（图-23），在窗口中添加要扫描的目标离子峰的质量（以老师教案为准），点击“确定”。

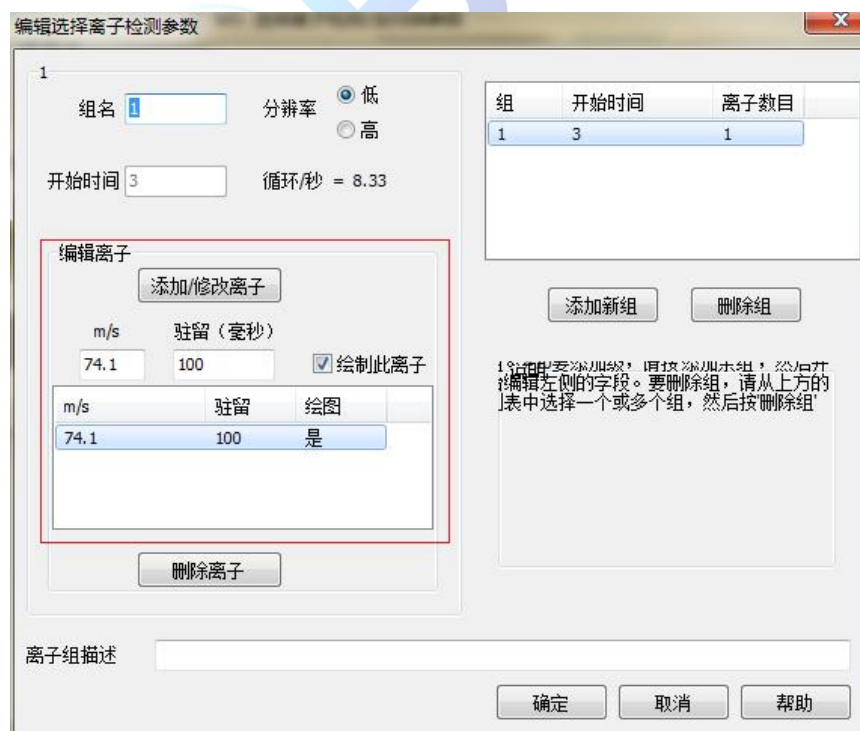



图-23

点击“确定”，在方法保存窗口中输入方法文件名，如 GCMS001.M（图-24），点击“确

定”，保存方法成功。



图-24

④ 样品信息设置：回到工作站主界面，点击  图标，弹出样品信息设置窗口（图-25）。

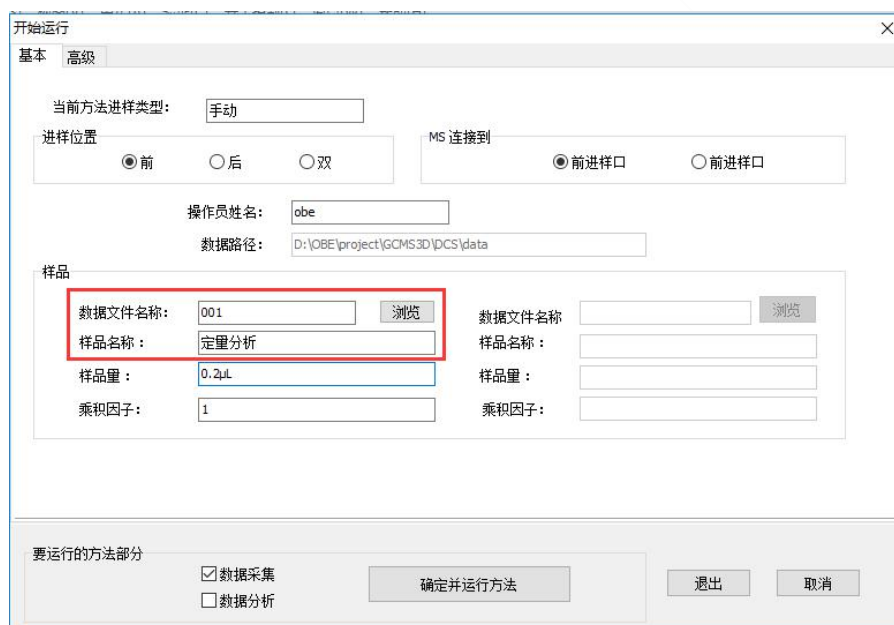


图-25

在该窗口中，填写数据文件名称和样品名称。图-25 的填写方式表示本实验中第一个样品的数据文件名称为 001.D，样品名称为定量分析，填写完成后点击“确定并运行方法”。

⑤ 运行方法：点击仪器面上的准备运行按钮（图-26），等待仪器准备就绪（图-27）。



图-26

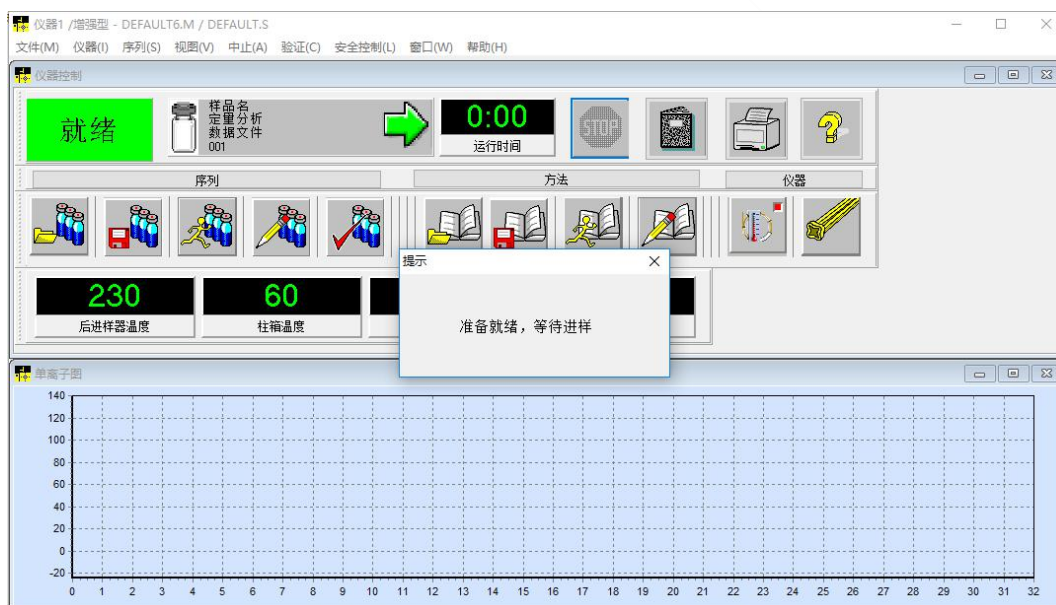


图-27

3.3.3.2 进样分析

① 鼠标指向标样 1 的样品瓶后，鼠标指针变为手型。右键单击，弹出“打开瓶盖”的操作提示（图-28），单击该命令，标样 1 的瓶盖逆时针旋转几圈后放置在桌面上；同样的方法一次打开洗液瓶的盖子，打开废液瓶的盖子（图-29）。



图-28



图-29

② 洗液洗针：将鼠标指向洗液瓶，指针变为手型，右键单击，弹出“洗液洗针”的操作提示。地址：北京海淀区清河永泰园甲 1 号建金商厦 420-423 室 邮编：100085

作提示（图-30），单击该命令，执行洗液洗针的操作（图-31），重复洗针数次。

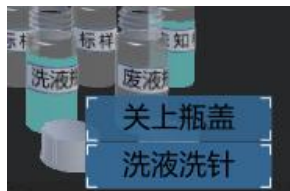


图-30

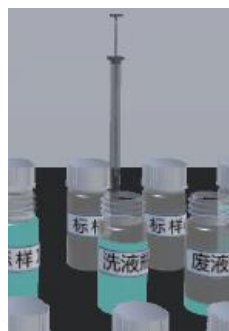


图-31

③ 标样 1 洗针：将鼠标指向标样 1，指针变为手型，右键单击，弹出“标样 1 洗针”的操作提示（图-32），单击该命令，执行标样 1 洗针的操作，重复洗针数次（图-33）。



图-32

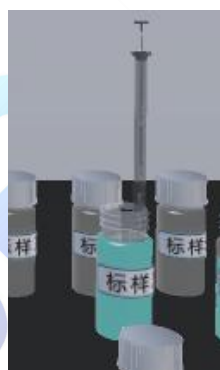


图-33

④ 进样：鼠标移至色谱仪右边的进样针，右键点击进样针弹出“标样 1 取样”的操作提示（图-34），单击该命令，执行取标样 1 的操作，取完样后，进样针移至色谱仪进样口处，等待进样。



图-34

⑤ 右键单击色谱仪进样口处的进样针，弹出“进样”的操作提示，单击该命令，进样针针杆推下，完成进样并放回至针架，随后单击仪器面板上的开始按钮进行测定（图-35），工作站画面中有图谱出现（图-36）。



图-35

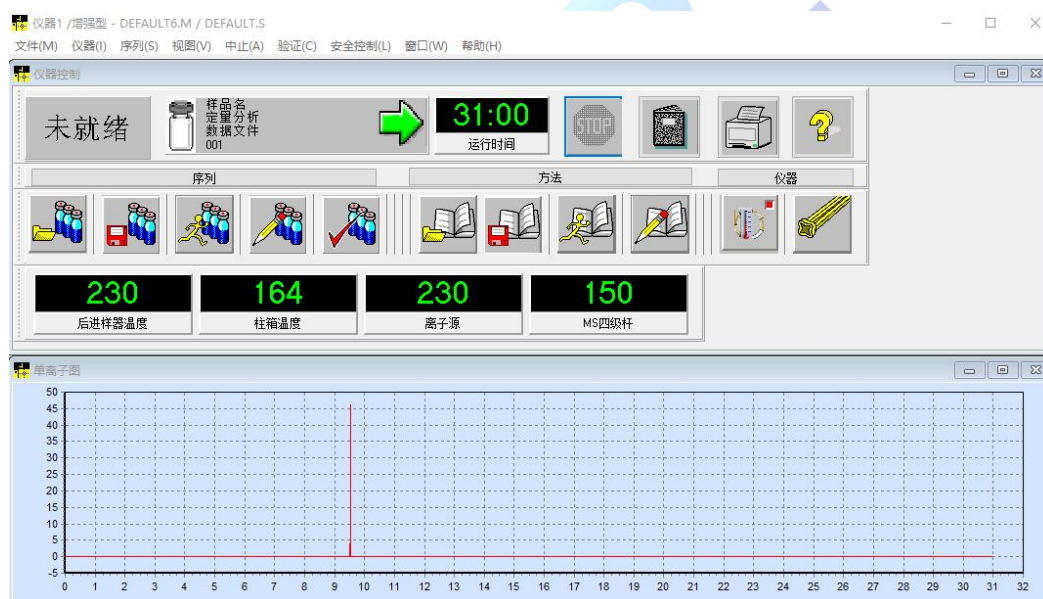


图-36

依次对标样和未知样进行测定。

注：每次测定时都需要对样品信息进行更改，否则上一次测定的数据将被覆盖，例如测完标样 1 后，测定标样 2 时可将计数器内的内容改为 002（图-37），然后点击确定并运行方法；则保存的文件名为 002.D。

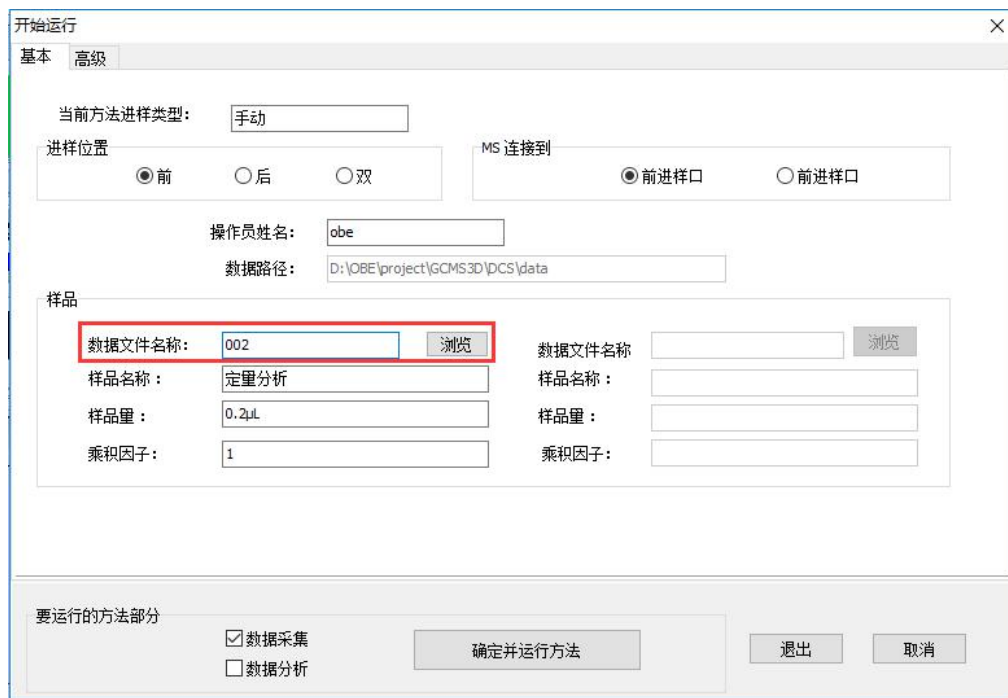


图-37

3.3.4 数据分析

① 调用谱图：从工作站窗口中的“视图”菜单下选择“数据分析（脱机）”命令，弹出数据分析窗口（图-38）。

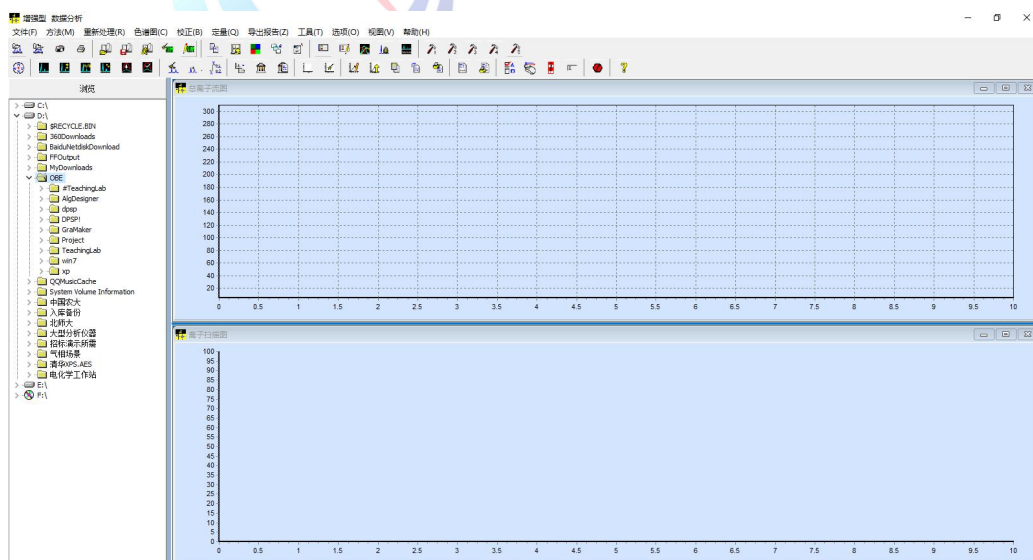


图-38

从图-38 的“文件”菜单下选择“调用数据文件”命令，在弹出的窗口中选择要调用的文件（图-39），例如，标样 1 保存的文件名为 001.D，那么选中该文件后，点击“确定”，

工作站中显示标样 1 的谱图（图-40）；右键双击峰位置处，出现对应的质谱图（图-41）。

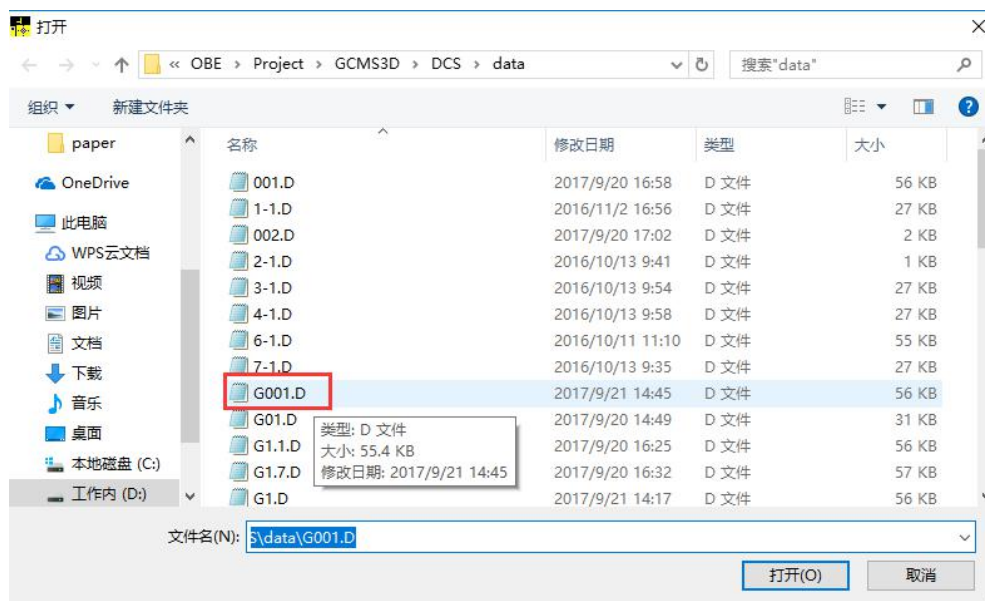


图-39

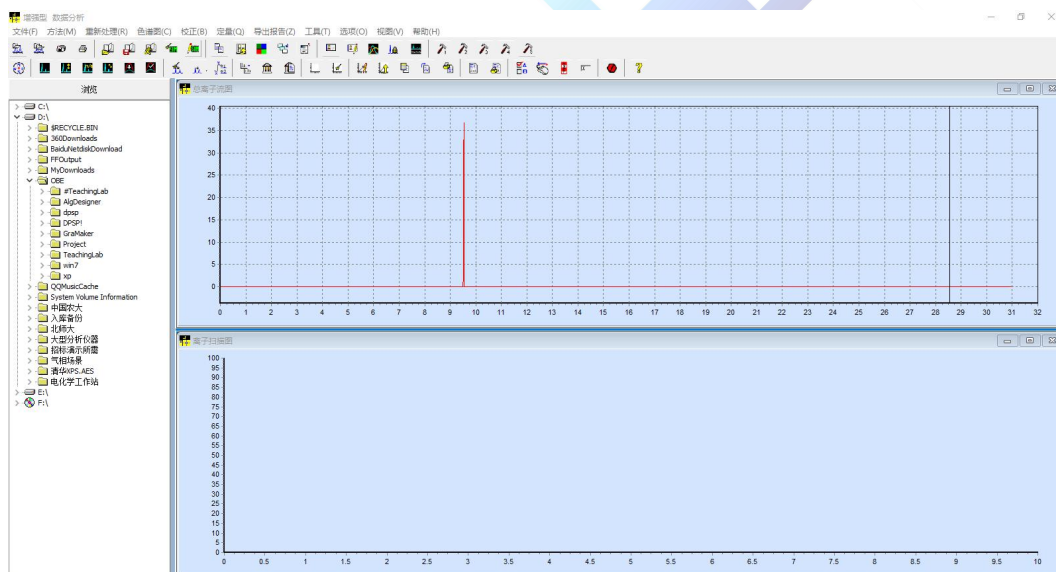


图-40

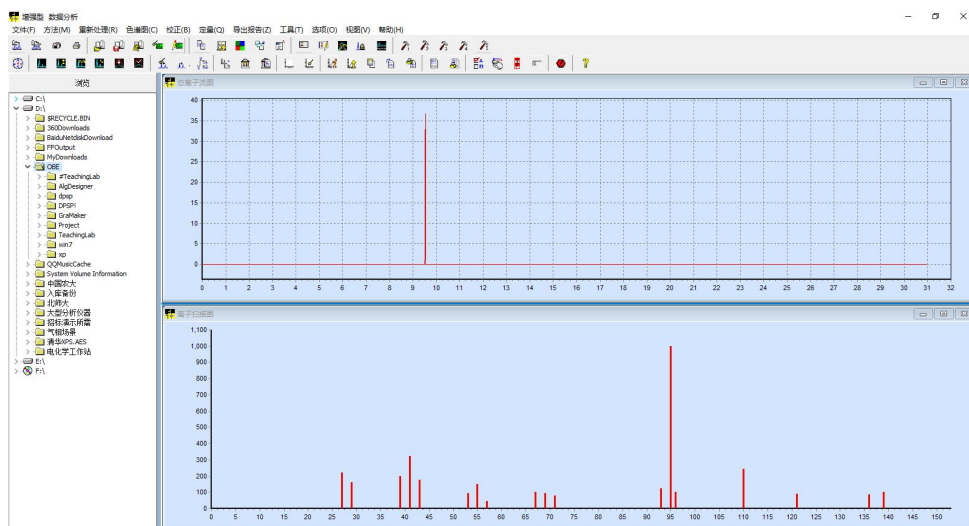


图-41

② 建立一级校正：从“校正”菜单下选择“设置定量”命令，弹出定量设置窗口（图-42）。

图-42

在图-60 所示窗口中填入校正标题（如 GCMS_ESTD）和浓度单位（mg）。点击“确定”，弹出窗口（图-43）。

图-43

选择“用户指定的”，点击“相加”，弹出输入窗口，在该窗口中填入“冰片”（图-44），点击“确定”



图-44

点击确定后，弹出提示窗口（图-45）。



图-45

单击“是”，弹出更新校正窗口（图-46）。在该窗口中填入化合物的浓度和新级别，例如，所调用谱图为标样 1 的谱图，那么该处填入的浓度即为标样 1 的浓度，新级别处填 1。

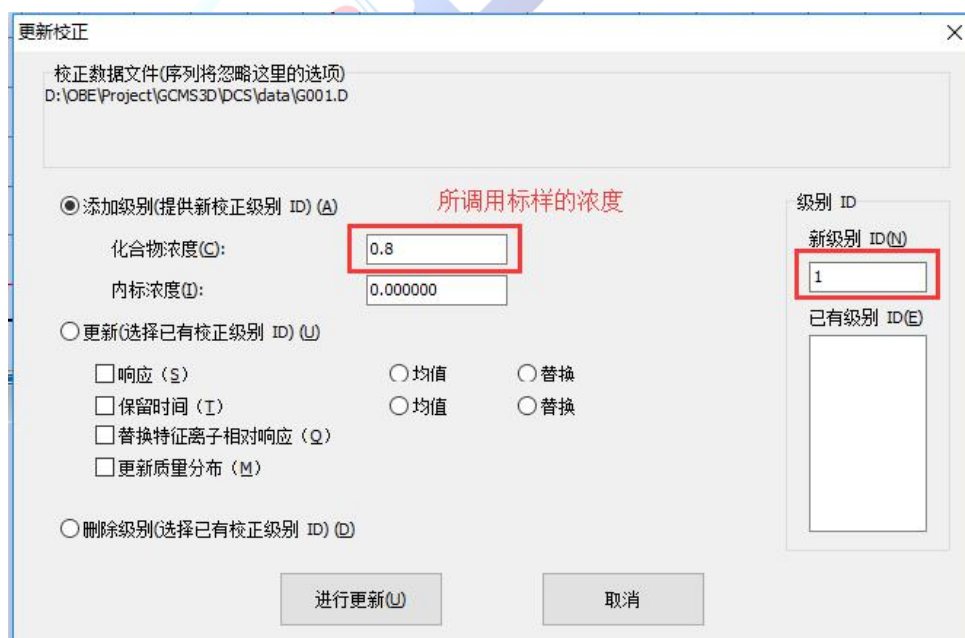


图-46

单击“进行更新”，弹出窗口（图-47），可以看到右下角出现了校正点。

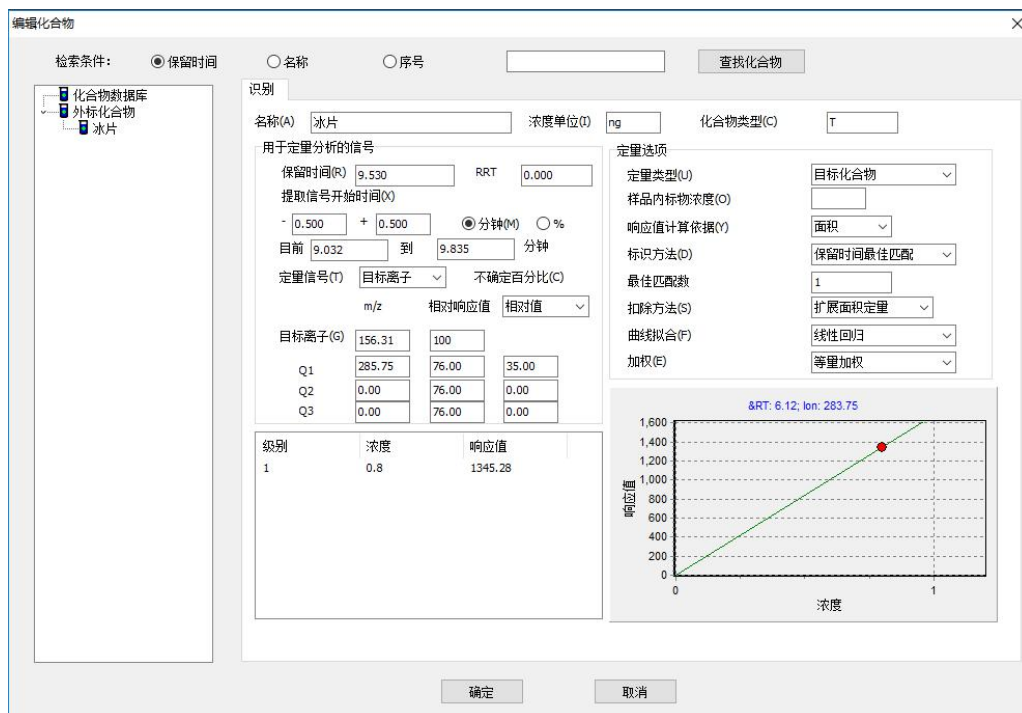


图-47

点击“确定”，弹出询问是否保存修改，点击“确定”。

③ 建立二级校正：

重复调用谱图的方法，调用标样 2 的谱图。

从“校正”菜单下选择“更新”命令，弹出更新选项窗口（图-48）。



图-48

选择“更新一个级别”，点击“确定”。在弹出的提示窗口中，单击“是”，进行定量。

在更新校正窗口中化合物浓度处输入标样 2 的浓度，在新级别处输入 2（图-49）。

更新校正

校正数据文件(序列将忽略这里的选项)
D:\OBE\Project\GCMS3D\DCS\data\G002.D

☒ 添加级别(提供新校正级别 ID) (A)

化合物浓度(C):

内标浓度(I):

☐ 更新(选择已有校正级别 ID) (U)

☐ 响应 (S) ☐ 均值 ☐ 替换
☐ 保留时间 (T) ☐ 均值 ☐ 替换
☐ 替换特征离子相对响应 (Q)
☐ 更新质量分布 (M)

☐ 删除级别(选择已有校正级别 ID) (D)

级别 ID

新级别 ID(N)

已有级别 ID(E)

1

进行更新(U) 取消

图-49

点击“进行更新”后，在弹出的窗口中可以看到第二个校正点（图-50），点击“确定”，并保存当前修改。

编辑化合物

检索条件: ☒ 保留时间 ☐ 名称 ☐ 序号 查找化合物

☒ 化合物数据库
☒ 外标化合物
☒ 冰片

识别

名称(A) 冰片 浓度单位(I) ng 化合物类型(C) T

用于定量分析的信号

保留时间(R) 9.530 RRT 0.000

提取信号开始时间(X)

- 0.500 + 0.500 ☒ 分钟(M) ☐ %

目前 9.421 到 9.784 分钟

定量信号(T) 目标离子 不确定百分比(C)

m/z 相对响应值 相对值

目标离子(C)

Q1	285.75	75.00	35.00
Q2	0.00	75.00	0.00
Q3	0.00	75.00	0.00

定量选项

定量类型(U) 目标化合物

样品内标物浓度(O)

响应值计算依据(Y) 面积

标识方法(D) 保留时间最佳匹配

最佳匹配数 1

扣除方法(S) 扩展面积定量

曲线拟合(F) 线性回归

加权(E) 等量加权

级别	浓度	响应值
1	0.8	1345.28
2	1.6	2690.56

浓度: 0 1 2
 响应值: 0 500 1,000 1,500 2,000 2,500 3,000

线性回归方程: $y = 1670.35x$
 R-squared: 0.9999

确定 取消

图-50

④ 建立三级校正:

重复调用谱图的方法，调用标样 3 的谱图。

从“校正”菜单下选择“更新”命令，弹出更新选项窗口（图-51）。



图-51

选择“更新一个级别”，点击“确定”。在弹出的提示窗口中，单击“是”，进行定量。在更新校正窗口中化合物浓度处输入标样 3 的浓度，在新级别处输入（图-52）。



图-52

点击“进行更新”后，在弹出的窗口中可以看到第三个校正点（图-53），点击“确定”，保存当前修改。

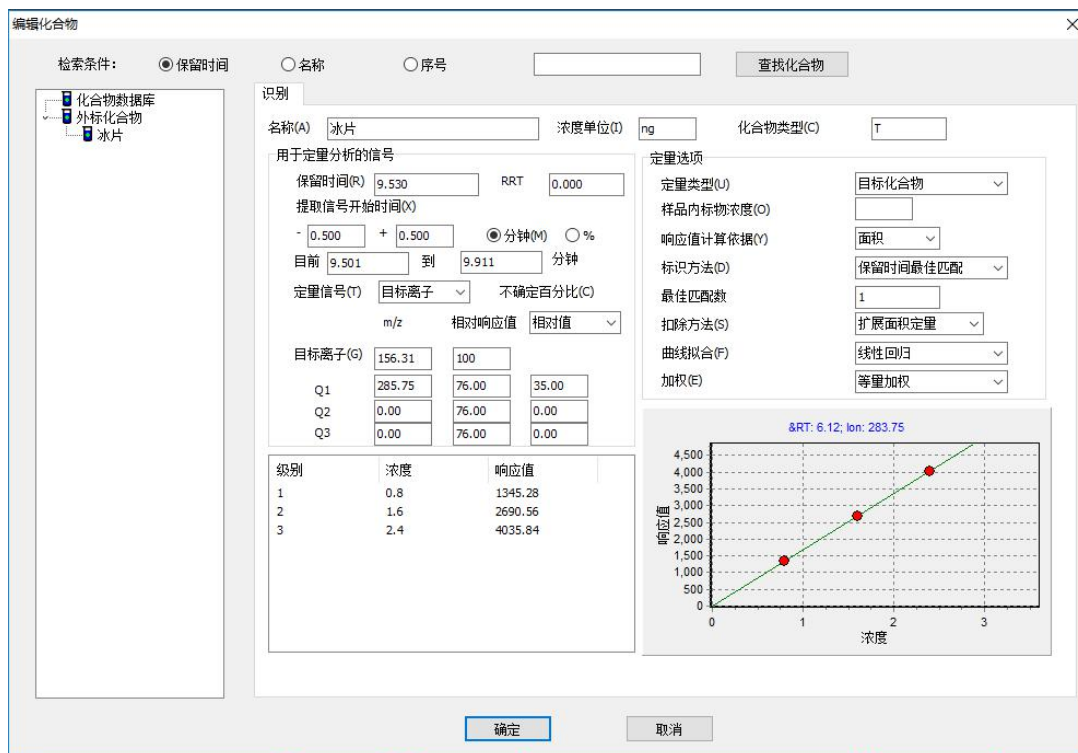


图-53

- ⑤ 如若还有第 4、5 个校正点，重复上述建立等级校正的方法即可。
- ⑥ 保存校正方法：建立完校正曲线后，在“方法”菜单下选择“保存方法”命令（图-54），在弹出的方法另存为窗口中填入方法名称（图-55），点击“确定”。

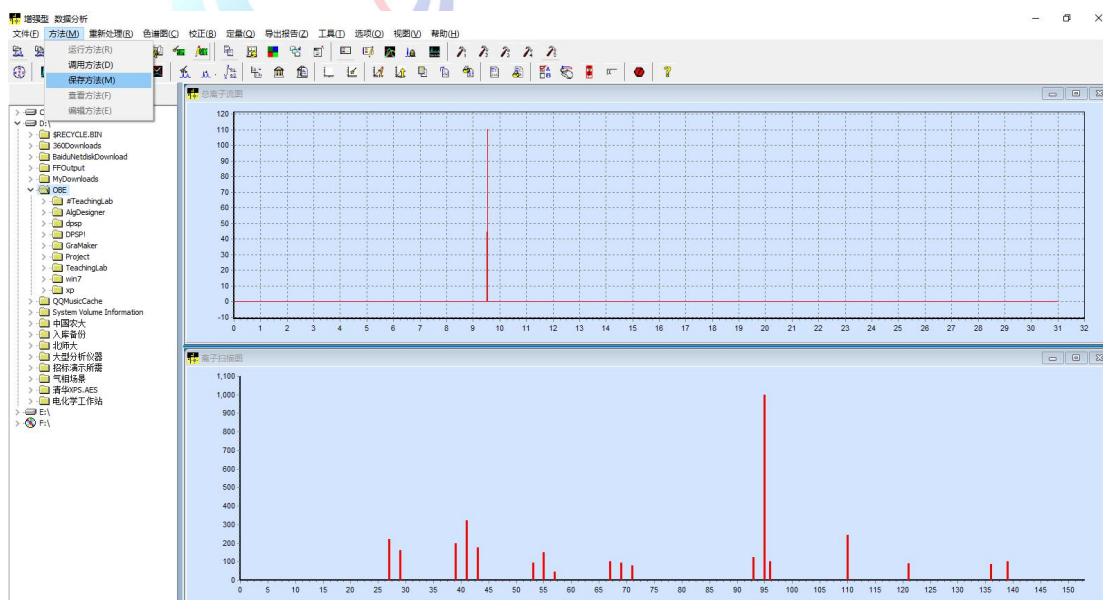


图-54

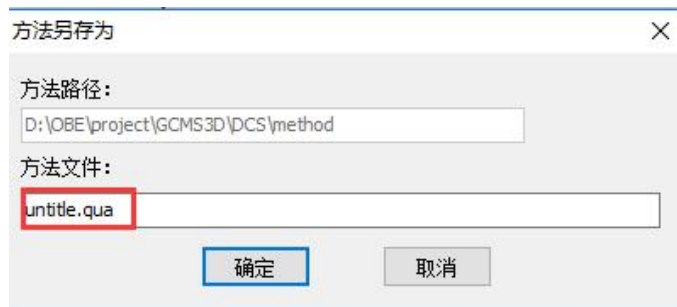


图-55

⑦ 未知物定量：重复调用谱图的方法，调用未知样的谱图（图-56）。

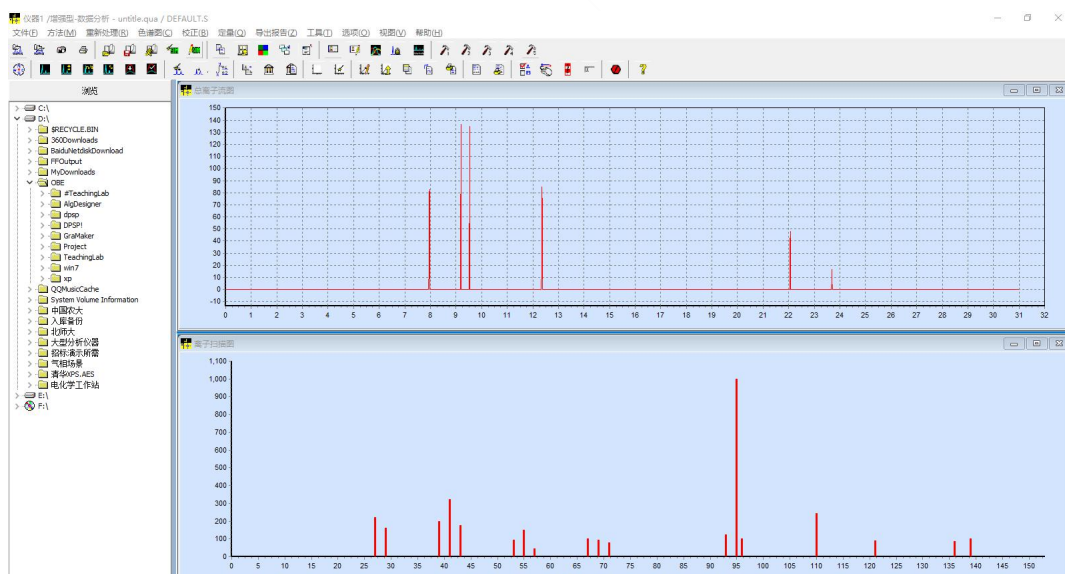


图-56

从“定量”菜单下选择“计算”命令，弹出未知样的定量分析报告（图-57）

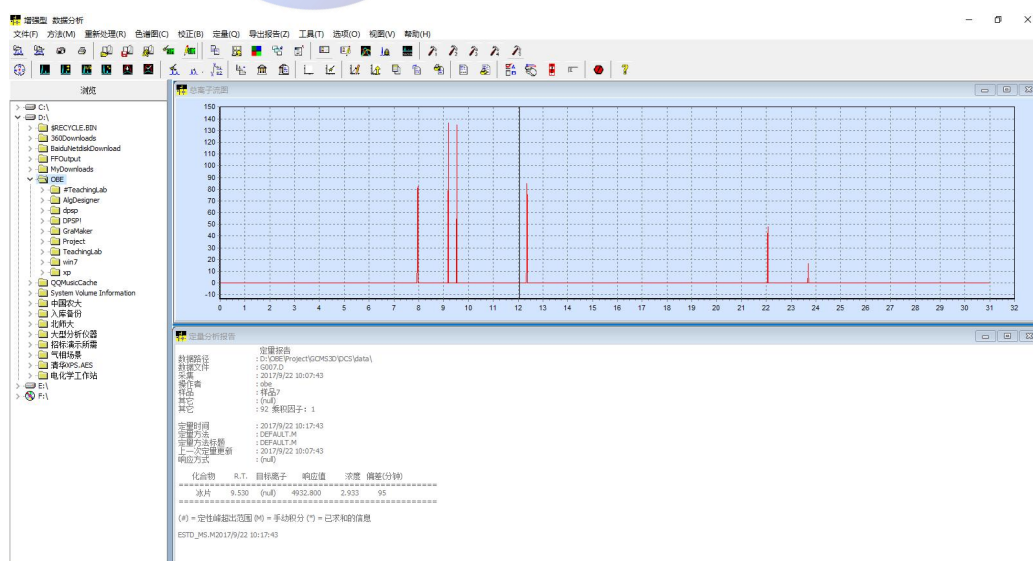


图-57

地址：北京海淀区清河永泰园甲1号建金商厦420-423室 邮编：100085

26

E-mail: bjobe@163.com 电话：010-82830966 网址：www.bjobe.com

3.3.5 实验结束--->关机


- 1、工作站中点击“方法”--->“调用方法”，选择 OFFMS.M 方法，调用质谱关机方法；
- 2、工作站中点击“方法”--->“编辑整个方法”，在 SSL-后进样口，将进样口的温度设置为 50 度，点击“应用”，然后点击“确定”。
- 3、待质谱仪温度降到 50 度左右，关闭质谱电源；
- 4、待进样口温度以及柱箱温度降到 50 度左右，关闭气相电源；
- 5、关闭工作站，关闭电脑电源；
- 6、关闭氦气减压阀、关闭氦气总阀；
- 7、实验结束，实验室回复原位。

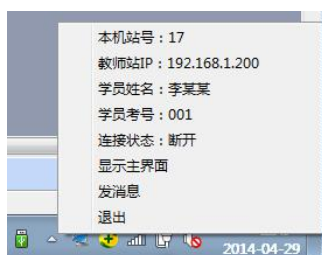
第四章 注意事项

4.1 软件运行注意事项及常见问题

4.1.1 软件运行注意事项

- 1、修改学生机的站号、教师站 IP 地址等信息。

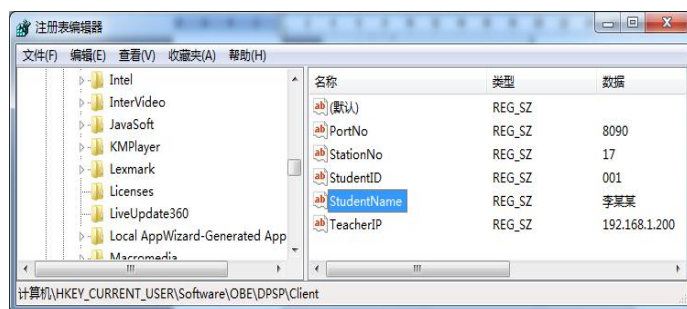
(1) 鼠标右键点击屏幕右下角托盘区图标，在弹出菜单中选择“显示主界面”（如下图所示）。



(2) 在该界面中可修改教师站 IP 和本机站号。



(3) 也可在注册表中，修改上列信息，操作界面如下。



StationNo:本站站号

StudentID:学号

StudentName:学员姓名

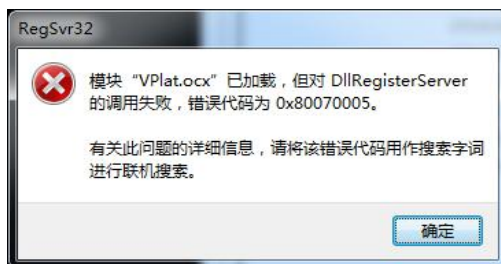
TeacherIP:教师站 IP

4.1.2 其中容易被杀毒软件阻止的程序

- | | |
|--------------------|---------------------|
| (1) ModelMange.exe | (5) Gus.exe |
| (2) StaClient.exe | (6) ConApp.dll |
| (3) ScoreRun.exe | (7) TeachingLab.exe |
| (4) Vgserver.exe | (8) MA.exe |

4.2 安装过程中常见问题

4.2.1 控件注册失败



现象 1 图

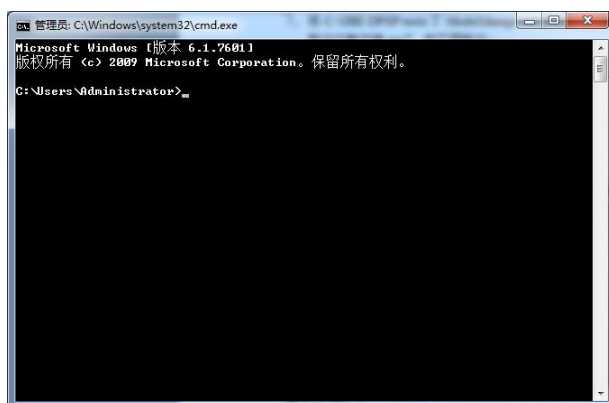


现象 2 图

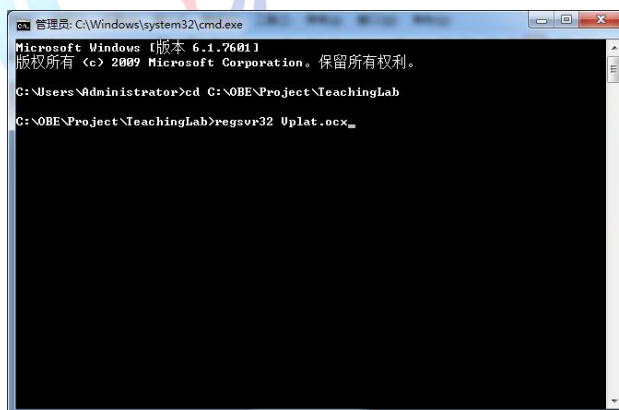
出现以上现象时，按如下步骤解决：

点击“开始->所有程序->附件”，右键选择“命令提示符”以管理员身份运行。

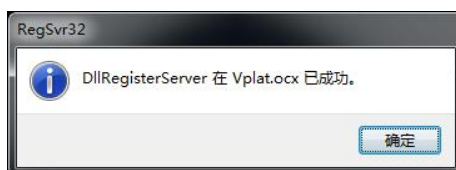
弹出如下界面



在上图所示界面中输入 `cd C:\OBETRAIN\Project\TeachingLab` 然后回车，再输入 `regsvr32 Vplat.ocx` 然后回车（如下图所示，注意 C:\OBETRAIN 为实际安装路径）。



如果注册成功，则弹出如下对话框。

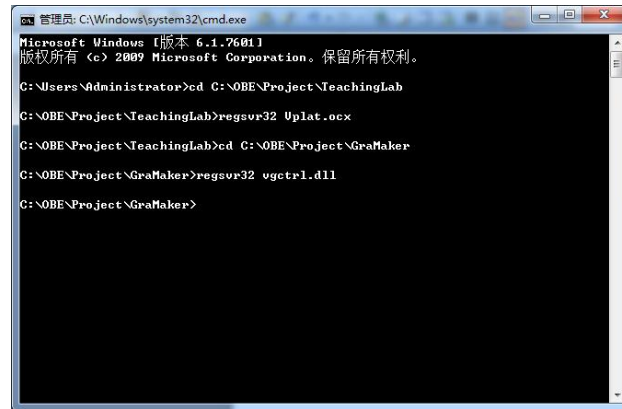


在命令提示符界面中输入 `cd C:\OBETRAIN\Project\GraMaker` 然后回车，再输入 `regsvr32 vgctrl.dll` 然后回车（如下图所示 注意 C:\OBETRAIN 为实际安装路径）。

地址：北京海淀区清河永泰园甲 1 号建金商厦 420-423 室 邮编：100085

29

E-mail: bjobe@163.com 电话：010-82830966 网址：www.bjobe.com



如果注册成功，则弹出如下对话框。

