

绿绵科技通讯

——MassWorks专刊

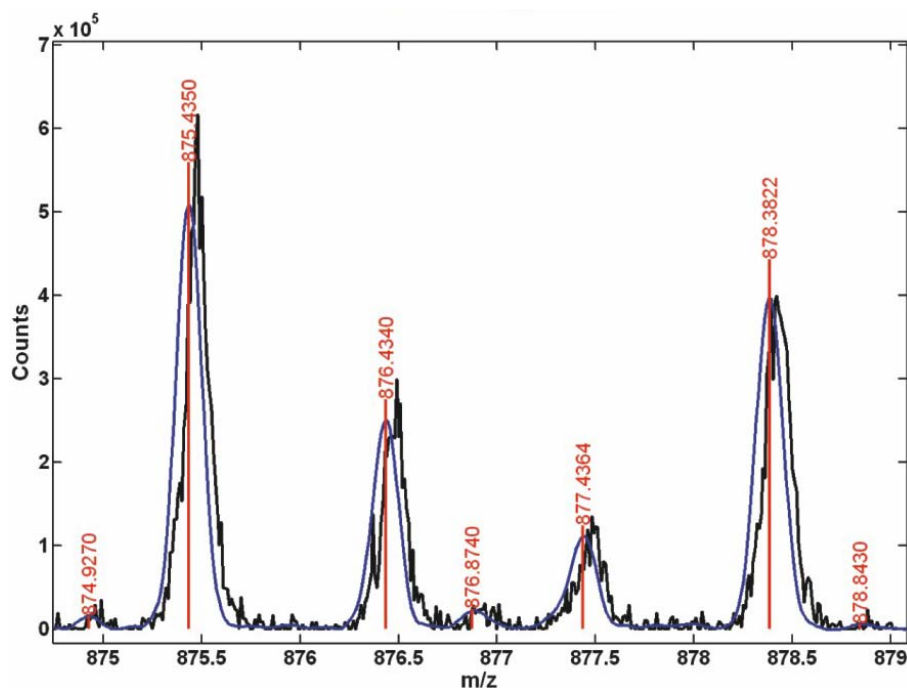
目录

MassWorks介绍。	1
应用实例一：化合物的碎片离子识别。	2
应用实例二：多环芳烃的分子式识别。	3
应用实例三：药物的分子式识别。	4
应用实例四：不需校正标样的分子式识别。	5
发表文献：在单四极杆质谱上实现精确质量测定。	6
发表文献：一种新软件方法用于单位分辨质谱仪上药物相对分子质量的准确测定。	7

MassWorks是一个采用美国 Cerno Bioscience公司MSIntegrity™专利技术的数据后处理软件包。它最显著特点：打破了只有高分辨质谱才能实现精确质量测定的神话，让广大质谱用户在常规的、单位质量分辨的质谱上对化合物进行高精度的质量测定，并结合MassWorks校正得到的同位素峰簇的谱图形状，利用CLIPS用于未知物的分子式识别。

MassWorks软件可广泛用于各家质谱供应商的质谱产品。

- 提高质量测定准确度高达100倍
- 有效过滤噪音达3倍
- 校正同位素峰簇的谱图形状
- 精确质量数和同位素峰簇谱图准确度双重尺度用于化合物识别
- AMPXIC实现高选择性的离子过滤



黑色和蓝色分别为MassWorks校正前后的结果，MassWorks计算所得的聚乙二醇的钠离子 ($C_{36}H_{60}N_{12}O_{12}Na^+$) 的精确质量 (875.4350 Da) 与理论值 (875.4351 Da) 十分接近，质量准确度为-0.11 ppm。

——数据来自Thermo TSQ Quantum串联四极杆质谱

应用实例一：化合物的碎片离子识别

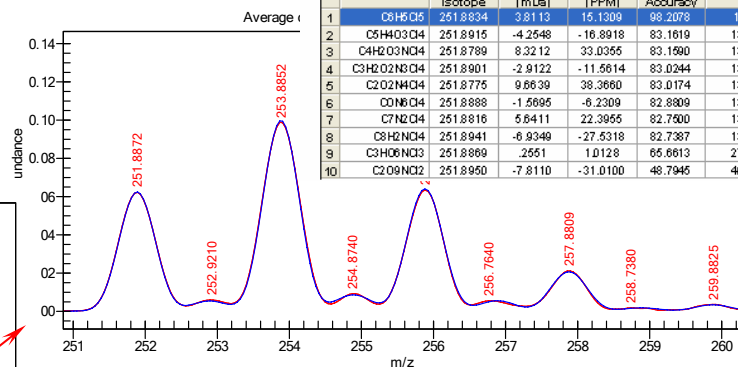
仪器：Agilent 6890N-5975 GC-MSD

样品：六六六 (C₆H₆Cl₆, MW 288)

校正标样：PFTBA (内标校正)

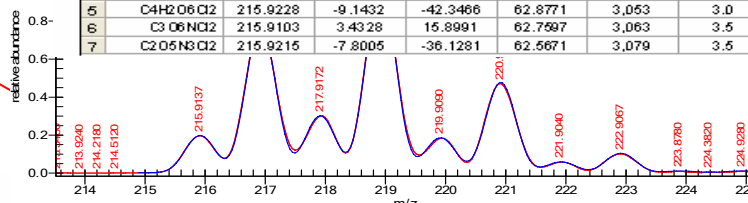
CLIPS Search Results

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy	RMSE	DBE
1	C ₆ H ₅ Cl ₅	251.8834	3.8113	15.1309	98.2078	14	2.0
2	C ₅ H ₄ O ₃ Cl ₄	251.8915	-4.2548	-16.8918	83.1619	133	2.0
3	C ₄ H ₂ O ₃ NCI ₄	251.8789	8.3212	33.0355	83.1990	133	2.5
4	C ₃ H ₂ O ₂ NCI ₄	251.8901	-2.9122	-11.5614	83.0244	135	2.5
5	C ₂ O ₂ NCI ₄	251.8775	9.6639	38.3660	83.0174	135	3.0
6	Cl ₂ NCI ₄	251.8888	-1.5695	-6.2309	82.8809	136	3.0
7	C ₇ H ₂ Cl ₄	251.8816	5.6411	22.3955	82.7500	137	7.0
8	C ₆ H ₂ NCI ₄	251.8941	-6.9349	-27.5318	82.7387	137	6.5
9	C ₃ HO ₆ NCI ₃	251.8869	.2551	1.0128	65.6613	272	2.5
10	C ₂ O ₆ NCI ₂	251.8950	-7.8110	-31.0100	48.7946	406	2.5



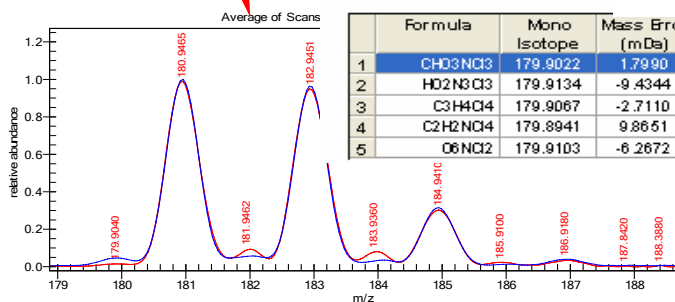
CLIPS Search Results

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy	RMSE	DBE
1	C ₆ H ₄ Cl ₄	215.9067	6.9890	32.3696	97.8055	181	3.0
2	C ₈ H ₄ NCI ₃	215.9175	-3.7572	-17.4012	81.8047	1,497	7.5
3	C ₅ H ₃ O ₃ Cl ₃	215.9148	-1.0771	-4.9885	81.6667	1,508	3.0
4	C ₃ HO ₂ NCI ₃	215.9134	.2656	1.2300	81.3135	1,537	3.5
5	C ₄ H ₂ O ₆ Cl ₂	215.9228	-9.1432	-42.3466	62.8771	3,053	3.0
6	C ₃ O ₆ NCI ₂	215.9103	3.4328	15.8991	62.7597	3,063	3.5
7	C ₂ O ₅ NCI ₂	215.9215	-7.8005	-36.1281	62.5671	3,079	3.5



CLIPS Search Results

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy	RMSE	DBE
1	CH ₃ NCI ₃	179.9022	1.7990	9.9996	95.2060	403	.5
2	HO ₂ NCI ₃	179.9134	-9.4344	-52.4414	94.8789	431	.5
3	C ₃ H ₄ Cl ₄	179.9067	-2.7110	-15.0690	79.8758	1,694	.0
4	C ₂ H ₂ NCI ₄	179.8941	9.8651	54.8353	79.8081	1,699	.5
5	O ₆ NCI ₂	179.9103	-6.2672	-34.8361	77.9139	1,859	.5



红色为校正后的同位素峰簇谱图，蓝色为理论谱图

* 数据来源于某疾病与预防控制中心

结论:

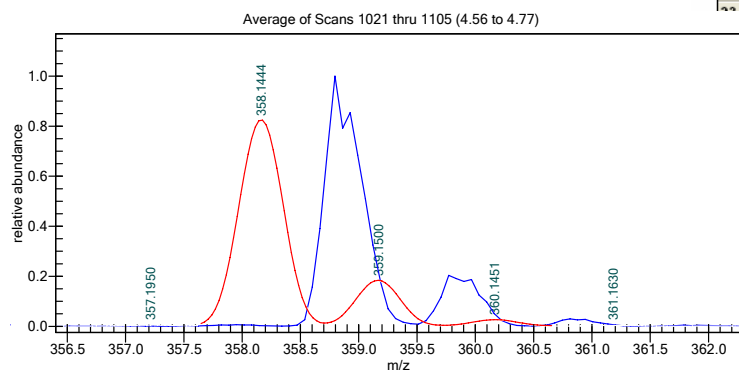
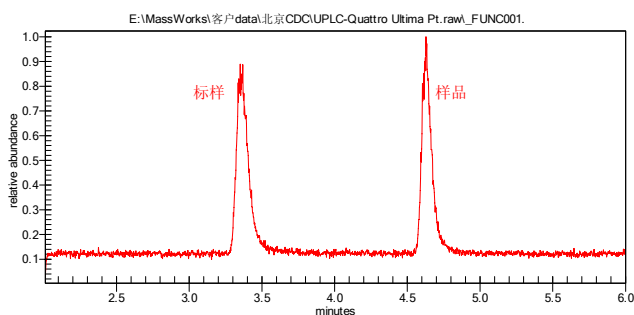
- MassWorks校正后，得到了六六六各碎片离子的精确质量数
- MassWorks校正后，碎片离子的同位素峰簇谱图与理论谱图实现完美匹配
- 利用CLIPS搜索工具实现了六六六三个碎片离子分子式识别，三个碎片离子均排在待选列表中的第一位
- 谱图准确度是优于精确质量数的更重要分子式识别工具
- CLIPS的去干扰能力，可消除待测碎片离子的加氢或去氢碎片离子对其测定的干扰

应用实例三：药物的分子式识别

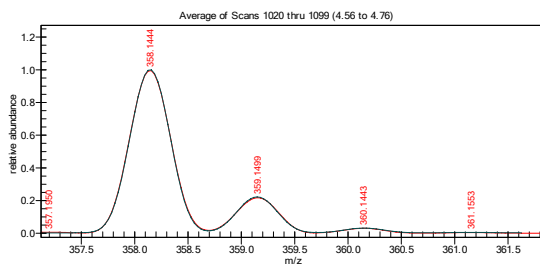
仪器：Waters UPLC-Quattro Ultima PT
 校正标样：麻保沙星（内标法）
 样品：达氟沙星（Danofloxacin, C₁₉H₂₀FN₃O₃）

CLIPS Search Results

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy	RMSE	DBE
1	C ₁₉ H ₂₁ O ₃ N ₃ F	358.1567	-12.2948	-34.3290	98.9502	91,901	10.5
2	C ₂₀ H ₂₁ O ₄ NF	358.1455	-1.0614	-2.9635	98.7710	107,589	10.5
3	C ₁₉ H ₂₀ O ₆ N	358.1291	15.3376	42.8252	98.7092	113,000	10.5
4	C ₁₈ H ₂₀ O ₅ N ₃	358.1403	4.1042	11.4597	98.7001	113,799	10.5
5	C ₁₇ H ₁₇ O ₃ N ₅ F	358.1315	12.8574	35.8999	98.6198	120,823	11.5
6	C ₁₇ H ₂₀ O ₄ N ₅	358.1515	-7.1292	-19.9058	98.6002	122,542	10.5
7	C ₂₀ H ₁₆ O ₂ N ₅	358.1304	14.0002	39.0910	97.9777	177,038	15.5
8	C ₂₁ H ₁₇ N ₅ F	358.1468	-2.3988	-6.6978	97.1670	248,005	15.5
9	C ₂₂ H ₁₇ O ₃ N ₃ F	358.1356	8.8346	24.6678	96.8806	273,082	15.5
10	C ₂₂ H ₂₀ O ₂ N ₃	358.1556	-11.1519	-31.1380	96.8293	277,573	14.5
11	C ₁₆ H ₂₁ O ₇ NF	358.1302	14.1948	39.6342	96.6929	289,513	6.5
12	C ₁₆ H ₂₄ O ₈ N	358.1502	-5.7918	-16.1716	96.6743	291,144	5.5
13	C ₂₃ H ₂₀ O ₃ N	358.1443	.0815	.2275	96.5195	304,692	14.5
14	C ₁₅ H ₂₁ O ₆ N ₃ F	358.1414	2.9614	8.2687	96.4584	310,040	6.5
15	C ₁₅ H ₂₄ O ₇ N ₃	358.1614	-17.0251	-47.5371	96.4523	310,580	5.5
16	C ₁₄ H ₂₁ O ₅ N ₅ F	358.1527	-8.2720	-23.0969	96.2078	331,982	6.5
17	C ₂₄ H ₂₁ O ₁ NF	358.1607	-16.3175	-45.5612	95.6791	378,266	14.5
18	C ₁₄ H ₂₀ O ₈ N ₃	358.1250	19.3604	54.0574	95.5288	391,425	6.5
19	C ₁₃ H ₂₀ O ₇ N ₅	358.1363	8.1270	22.6919	95.2834	412,903	6.5
20	C ₂₅ H ₁₆ N ₃	358.1344	9.9775	27.8588	94.2340	504,775	19.5
21	C ₁₃ H ₂₅ O ₉ NF	358.1513	-6.9346	-19.3626	94.0829	518,001	1.5
22	C ₁₂ H ₂₅ O ₈ N ₃ F	358.1626	-18.1680	-50.7281	93.8308	540,069	1.5
***	C ₁₂ H ₂₄ O ₁₁ N	358.1349	9.4644	26.4262	93.1331	601,149	1.5
	C ₂₇ H ₂₀ N	358.1596	-15.1746	-42.3702	93.0031	612,531	18.5
	C ₁₂ H ₂₄ O ₁₀ N ₃	358.1462	-1.7690	-4.9394	92.8861	622,769	1.5
	C ₁₁ H ₂₁ O ₉ N ₃ F	358.1262	18.2175	50.8664	92.8861	622,772	2.5
	C ₁₀ H ₂₄ O ₉ N ₅	358.1574	-13.0024	-36.3049	92.6328	644,948	1.5
	C ₁₀ H ₂₁ O ₈ N ₅ F	358.1374	6.9841	19.5009	92.6280	645,368	2.5



蓝色和红色分别为校正前和校正后的同位素峰簇谱图



红色为校正后的同位素峰簇谱图，绿色为C₁₉H₂₁FN₃O₃⁺的理论谱图

结论：

- 标样和待测药物实现有效的色谱分离
- MassWorks校正后利用CLIPS对待测药物的分子式进行识别
- 校正后的同位素峰簇的谱图形状与理论谱图具有很好的匹配

应用实例四：不需标样的分子式识别

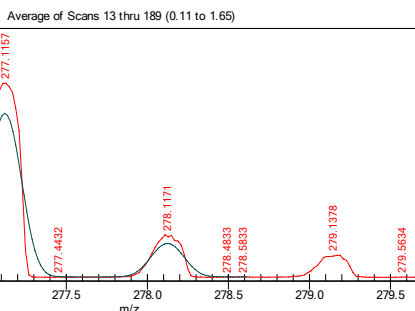
仪器：TSQ Quantum (Q3设定为0.1 Da)

校正标样：不需要校正标样

样品：苏丹红1号 (C₁₆H₁₂N₂O) 和苏丹红2号 (C₁₈H₁₆N₂O)

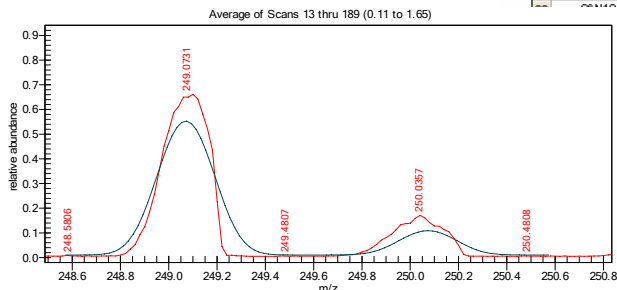
sCLIPS Search Results

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy	RMSE	DBE
1	C19O2H17	277.1229	-7.1548	-25.8188	99.2652	2.276	11.5
2	C18N2OH17	277.1341	-18.3882	-66.3556	98.9926	3.120	11.5
3	C17NH17	277.1453	-29.6216	-106.8924	98.6852	4.073	11.5
4	C18O3H13	277.0865	29.2307	105.4820	98		
5	C17N2O2H13	277.0977	17.9973	64.9452	98		
6	C16NH4OH13	277.1089	6.7639	24.4084	97		
7	C15N6H13	277.1202	-4.4694	-16.1285	97		
8	C16O4H21	277.1440	-28.2842	-102.0663	96		
9	C13N8H9	277.0950	20.6827	74.6355	96		
10	C15O5H17	277.1076	8.1013	29.2345	96		
11	C14N2O4H17	277.1188	-3.1320	-11.3023	96		
12	C13H4O3H17	277.1301	-14.3654	-51.8391	96		
13	C12N6O2H17	277.1413	-25.5988	-92.3759	96		
14	C12H4O4H13	277.0937	22.0201	79.4617	96		
15	C11N8O3H13	277.1049	10.7887	38.8248	96		
16	C10N8O2H13	277.1161	-4.467	-1.6120	96		
17	C9N10O1H13	277.1274	-11.6801	-42.1488	92		
18	C12O7H21	277.1287	-13.0280	-47.0130	92		
19	C8N12H13	277.1386	-22.9135	-82.6856	92		
20	C11N2O6H21	277.1400	-24.2614	-87.5498	92		
21	C8N10O2H9	277.0910	24.7054	89.1520	91		
22	C11O8H17	277.0923	23.3575	84.2878	91		
23	C7N12O2H9	277.1022	13.4720	48.6152	91		
24	C10N2O7H17	277.1036	12.1241	43.7510	91.5348	26.221	3.5
25	C9N14H9	277.1135	2.2386	8.0784	91.3100	26.917	9.5
26	C9H4O6H17	277.1148	8907	3.2142	91.1965	27.269	3.5
27	C8N8O5H17	277.1260	-10.3427	-37.3226	90.8594	28.316	3.5
28	C7N8O4H17	277.1373	-21.5761	-77.8594	90.5204	29.363	3.5
29	C4N16H5	277.0883	27.3908	98.8423	90.0049	30.960	10.5
30	C7N6O6H13	277.0897	26.0428	93.9781	89.8929	31.207	4.5
31	C6N8O5H13	277.1009	14.8094	53.4413	89.5960	32.351	4.5
32	C5N10O4H13	277.1121	3.5760	12.9045	89.2193	33.393	4.5
33	C8O10H21	277.1135	2.2281	8.0403	89.1063	33.743	-1.5
34	C4N12O3H13	277.1234	-7.6573	-27.6323	88.8829	34.435	4.5
35	C7N2O9H21	277.1247	-9.0053	-32.4665	88.7707	34.783	-1.5
36	C3N14O2H13	277.1346	-18.8907	-68.1691	88.5499	35.476	4.5
37	C6N4O8H21	277.1359	-20.2387	-73.0333	88.4353	35.822	-1.5
38	C3N12O4H9	277.0870	28.7282	103.6685	87.9246	37.404	5.5
39	C6N2O10H17	277.0883	27.3802	98.8043	87.8130	37.750	-5
40	C2N14O3H9	277.0882	17.4648	63.1317	87.5988	38.441	5.5
41	C5N4O9H17	277.0896	16.1468	58.2675	87.4789	38.784	-5
42	CN16O2H9	277.1094	6.2614	22.5948	87.2555	39.476	5.5



sCLIPS Search Results

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy	RMSE	DBE
1	C20H9	249.0704	2.6747	10.7387	93.3543	14.476	16.5
2	C18N2H5	249.0453	27.8268	111.7215	92.7441	15.805	17.5
3	C17O2H13	249.0916	-18.4547	-74.0934	91.8290	17.799	11.5
4	C16N2OH13	249.1028	-29.6881	-119.1941	91.6186	18.257	11.5
5	C16O3H9	249.0552	17.9308	71.9903	91.1611	19.253	12.5
6	C15N2O2H9	249.0664	6.6975	26.8895	90.9317	19.753	12.5
7	C14N4OH9	249.0776	-4.5359	-18.2112	90.6962	20.266	12.5
8	C13N6H9	249.0889	-15.7693	-63.3120	90.4651	20.791	12.5
9	C12N8OH5	249.0525	20.6162	82.7716	89.6988	22.437	13.5
10	C11N8H5	249.0637	9.3828	37.6709	89.4422	22.998	13.5
11	C13O5H13	249.0763	-3.1985	-12.8417	89.0225	23.912	7.5
12	C12N2O4H13	249.0875	-14.4319	-57.9425	88.7987	24.488	7.5
13	C11N4O3H13	249.0988	-25.6653	-103.0433	88.4918	25.068	7.5
14	C11N2O5H9	249.0511	21.8536	88.1412	87.9549	26.237	8.5
15	C10N4O4H9	249.0624	10.7202	43.0404	87.6814	26.833	8.5
16	C9N6O3H9	249.0736	-5.132	-2.0604	87.4056	27.434	8.5
17	C8N8O2H9	249.0848	-11.7486	-47.1612	87.1277	28.039	8.5
18	C7N10OH9	249.0961	-22.9900	-92.2619	86.8460	28.649	8.5
19	C10O7H17	249.0974	-24.3279	-97.6737	86.6967	28.878	2.5
20	C7N8O3H5	249.0485	24.6389	98.9225	86.2948	29.853	9.5
21	C6N10O2H5	249.0597	13.4055	53.8217	86.0113	30.471	9.5
22	C9O8H13	249.0610	12.0576	48.4099	85.8625	30.795	3.5
23	C5N12OH5	249.0709	2.1722	8.7210	85.7265	31.092	9.5
24	C8N2O7H13	249.0723	8.242	3.3091	85.5787	31.414	3.5
25	C4N14H5	249.0822	-9.0612	-36.3798	85.4404	31.715	9.5
26	C7N4O6H13	249.0835	-10.4092	-41.7916	85.2936	32.035	3.5
27	C6N6O5H13	249.0947	-21.6426	-86.8924	85.0074	32.658	3.5
28	C3N14OH9	249.0458	27.3243	109.7038	84.5920	33.653	10.5
29	C10O7H17	249.0471	25.9763	104.2920	84.4476	33.877	4.5
1	C14O5H17	249.0570	16.0909	64.6031	84.3030	34.192	10.5
2	249.0584	14.7429	59.1912	84.1594	34.505	4.5	
3	249.0696	3.5096	14.0905	83.8706	35.134	4.5	
4	249.0808	-7.7238	-31.0103	83.5810	35.765	4.5	
7	249.0822	-9.0718	-36.4221	83.4388	36.075	-1.5	
8	249.0921	-18.9572	-76.1111	83.2909	36.297	4.5	
7	249.0934	-20.3052	-81.5229	83.1497	36.705	-1.5	
5	249.0444	28.6617	115.0734	82.7283	37.822	5.5	
1	249.0458	27.3243	109.7038	82.5920	38.037	5	



* 数据来源于某出入境检验检疫局

结论:

- 利用TSQ Quantum的高选择功能, 实现了同位素峰簇M、M+1和M+2的基线分离
- 不需要标样校正, 利用sCLIPS实现了未知物的分子式识别

发表文献例一：

在单四极杆质谱上实现精确质量测定

-- 发表于 *Chromatography*, Vol. 27No. 3 (2006)

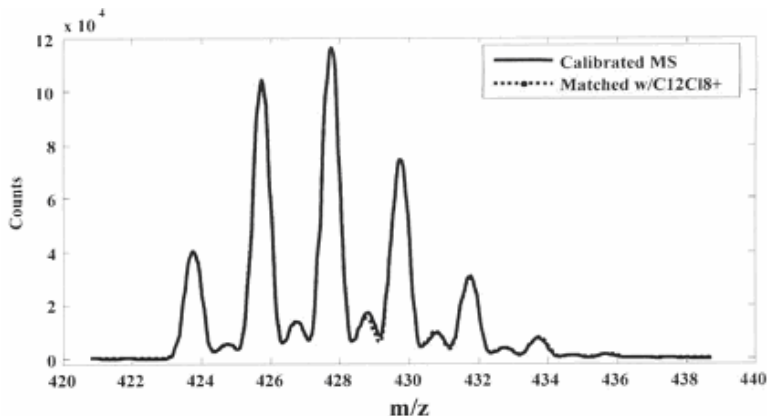
摘要

大家普遍接受在类似单四极杆这样单位质量分辨的质谱仪器上，质荷比仅仅能准确测到0.1-0.5 Da，只能利用大致的质量来定性分析。这里介绍了一种新颖的质谱校正技术——MassWorks™中的MSIntegrity™工具，它不仅校正质量轴，同时对质谱峰形函数进行校正。通过这种全面的质谱校正，即便是在单位质量分辨的质谱上也能得到0.00x Da高质量精度，使得在常规的质谱仪器上通过色谱分离对未知离子或未知离子碎片进行元素结构分析成为可能。再通过一种独特的通过同位素分布信息提高元素组成分析精度的方法，CLIPS™，使得这种鉴定的能力得到大大的提高。

样品信息

PFTBA校正标样和17种有机氯杀虫剂混合标样（1ng/ul），也含有约50ng/ul PCB 209（decachlorobiphenyl, C₁₂O₁₀）

本文介绍了在Agilent 5973N MSD上应用这种精确质量数方法对杀虫剂的有效分子离子和碎片离子鉴定分析，大大提高常规的分析能力，这在缺乏串联质谱和高分辨能力的单四极杆质谱系统，完成进一步的确证分析工作。



上图为在424 Da附近的离子碎片，校正得到的单一同位素的精确质量为423.7428 Da，通过设定C、H、N、O和Cl这几个可能的元素组成进行CLIPS搜索，结果C₁₂Cl₈⁺（准确的质量数为423.7503Da）以-7.5 mDa的质量偏差排在候选者中的17位。然而当把整个同位素谱图准确度引入到CLIPS匹配，C₁₂Cl₈⁺变成匹配最高的候选者，并且已验证这正是这个碎片唯一正确的结构，尽管质量检测误差稍微大一点，可见谱图准确度相对于质量准确度是更有效的化合物识别工具。

Chromatography, Vol. 27 No. 3 (2006)

Technical Review

Accurate Mass Measurement on Real Chromatographic Time Scale with a Single Quadrupole Mass Spectrometer

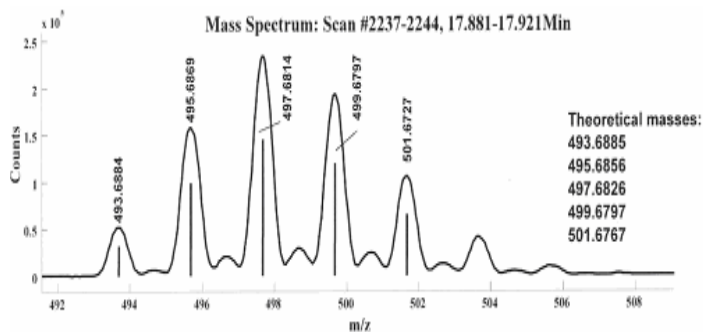
Yongdong Wang^{1*} and Harry Prest²

¹Cerno Bioscience, Danbury, CT 06810, USA

²Agilent Technologies, Santa Clara, CA 95051, USA

Abstract

On a unit mass resolution mass spectrometer such as a single quadrupole MS, it has been widely accepted that the mass (m/z) is measured to 0.1–0.5 Da accuracy, allowing for only rough mass confirmation for qualitative analysis. A novel mass spectral calibration, MSIntegrity™ implemented in MassWorks™, is introduced to comprehensively calibrate not only the mass axis but also the real peak shape function. With this comprehensive mass spectral calibration, a high level of mass accuracy on the level of 0.00 x achieved even at unit mass resolution on a true chromatographic time scale, which will now enable the elemental composition det



PCB 209校正后的同位素谱图与它的五个最强的同位素质量数与理论值的对比

发表文献例二:

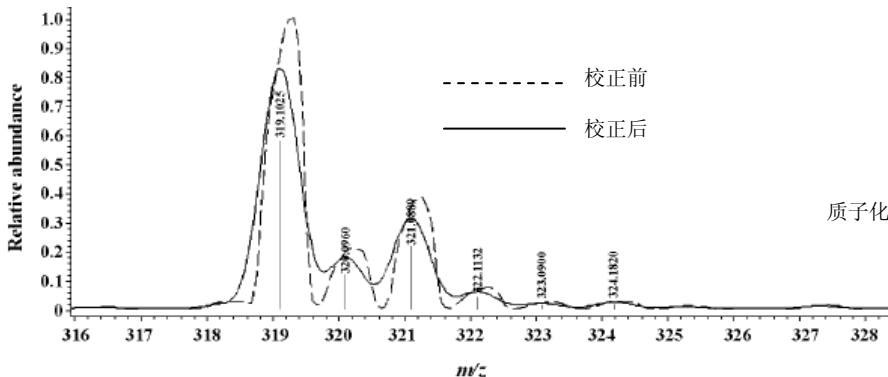
一种新软件方法用于单位分辨质谱仪上药物相对分子质量的准确测定

-- 发表于 *药学报 Acta Pharmaceutica Sinica* 2007, 42 (10) : 1112 - 1114

多数药物为小分子有机化合物,测量准确相对分子质量可推测其分子式组成,进一步确定该化合物的不饱和度,因而准确相对分子质量测量是药物定性分析的重要技术。目前可以用于准确相对分子质量测量的仪器有扇形场质谱仪、傅立叶变换-离子回旋共振(FT-ICR)质谱仪、飞行时间(TOF)质谱仪和Orbitrap质谱仪。其中,FT-ICR是目前分辨率最高的质谱仪,分辨率超过 1×10^6 ,测量结果的质量误差在 1×10^{-6} 内。但是这些高分辨质谱仪价格昂贵,使准确相对分子质量的测量和应用受到限制。自然界中很多元素(如药物中经常含有的C、H、O和N等)都具有同位素,每种同位素在自然界的丰度为一个固定值,质谱图中同位素峰M+1、M+2等的相对丰度可用于准确相对分子质量校正计算。近来美国Cerno Bioscience公司利用同位素规律开发出一种软件(MassWorks)方法校正计算准确相对分子质量,并将该方法应用于药物代谢产物鉴定工作中。该软件通过建立校正函数方程,并将同位素效应、仪器噪音过滤、峰形补偿纳入函数方程中,经过计算校正profile模式质谱图并获得准确相对分子质量值。

仪器

美国Thermo Finnigan公司TSQ Quantum Ultra型液相色谱-串联质谱联用仪,配有电喷雾电离源(ESI)以及Xcalibur 1.4数据处理系统和直接进样用注射泵。美国Cerno Bioscience公司MassWorks™质谱分析软件。



质子化氯丙嗪 (M + 1) 校正前、后的全扫描质谱图

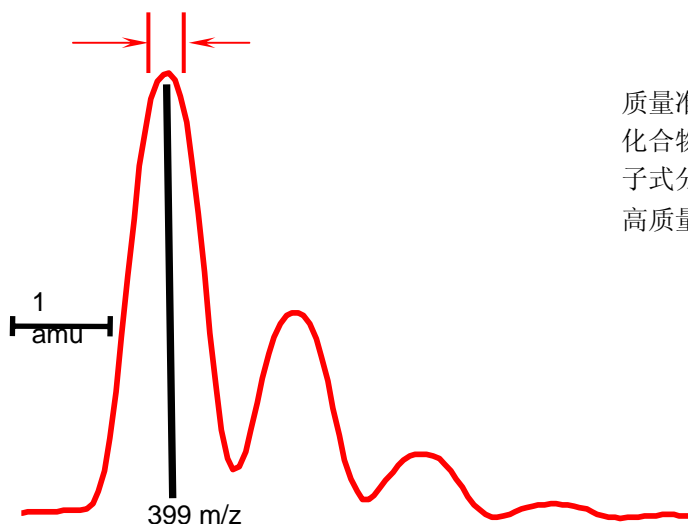
本文尝试利用该软件方法,在单位分辨质谱仪上测量多种药物的准确相对分子质量。对20种相对分子质量135~810之间的药物分子计算结果误差在理论值的 $(-22.4 \sim 36.1) \times 10^{-6}$ 之间,其中60%的药物测量结果误差在 $\pm 5 \times 10^{-6}$ 以内,90%的药物测量结果误差在 $\pm 10 \times 10^{-6}$ 以内。说明这种新软件方法能适用于在单位分辨质谱仪上测量药物的准确相对分子质量。

· 1112 · *药学报 Acta Pharmaceutica Sinica* 2007, 42(10): 1112 - 1114
· 研究简报 ·
一种新软件方法用于单位分辨质谱仪上药物相对分子质量的准确测定
刘可¹, 马彬¹, 王永东², 陈笑艳¹, 钟大放^{1*}
(1. 中国科学院上海药物研究所, 上海 201203; 2. Cerno Bioscience, Danbury, CT 06810, USA)
关键词: 准确相对分子质量; 同位素; 单位分辨质谱仪
中图分类号: R917 文献标识码: A 文章编号: 0513 - 4870(2007)10 - 1112 - 03
A new software method for accurate mass measurements of drugs on unit mass resolution mass spectrometer

20种药物的精确质量测定结果

Drug	Measured ion formula	Theoretical mass	Measured mass	Mass error ($\times 10^{-6}$)
Fosfomycin	C ₃ H ₆ O ₄ P	137.0004	136.9973	-22.4
Salicylic acid	C ₇ H ₅ O ₃	137.0239	137.0251	8.6
Acetaminophen	C ₈ H ₁₀ NO ₂	152.0712	152.0709	-2.1
Fudosteine	C ₆ H ₁₂ NO ₂ S	180.0694	180.0698	2.2
Thioctic acid	C ₈ H ₁₃ O ₂ S ₂	205.0357	205.0431	36.1
Matrine	C ₁₅ H ₂₅ N ₂ O	249.1967	249.1978	4.5
Diphenhydramine	C ₁₇ H ₂₃ NO	256.1701	256.1688	-5.2
Ondansetron	C ₁₈ H ₂₀ N ₃ O	294.1606	294.1593	-4.4
Zolpidem	C ₁₉ H ₂₃ N ₃ O	308.1763	308.1752	-3.7
Oseltamivir	C ₁₆ H ₂₉ N ₂ O ₄	313.2127	313.2098	-9.4
Chlorpromazine	C ₁₇ H ₂₀ ClN ₂ S	319.1036	319.1025	-3.3
Ifenprodil	C ₂₁ H ₂₈ NO ₂	326.2120	326.2140	6.2
Finasteride	C ₂₃ H ₃₇ N ₂ O ₂	373.2855	373.2861	1.6
Lonitidine	C ₂₂ H ₃₄ ClN ₂ O ₂	383.1526	383.1529	0.8
Betamethasone	C ₂₂ H ₃₀ FO ₅	393.2077	393.2115	9.6
Simvastatin	C ₂₅ H ₃₈ O ₅	419.2797	419.2828	7.4
Valsartan	C ₂₄ H ₃₀ N ₅ O ₃	436.2349	436.2343	-1.3
Aripiprazole	C ₂₃ H ₂₈ Cl ₂ N ₃ O ₂	448.1559	448.1576	3.7
Sildenafil	C ₂₂ H ₃₁ N ₆ O ₄ S	475.2127	475.2126	-0.2
Docetaxel	C ₄₃ H ₅₄ NO ₁₄	808.3544	808.3547	0.4

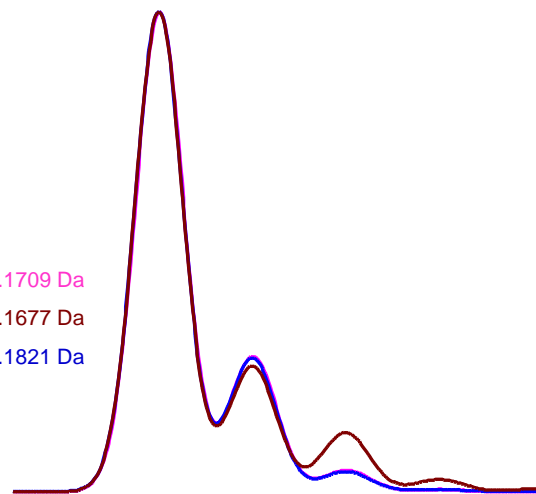
谱图准确度是化合物分子式识别的最重要度量尺度



质量准确度从200 ppm、50 ppm、10 ppm到2 ppm时，如果化合物由C、H、O、N和S五种元素组成，该化合物可能的分子式分别有1868、497、102到20个待选，所以高分辨质谱的高质量准确度也并不能唯一确定未知物的分子式。

任何化合物的不同元素组成均有其特异的同位素谱图，所以同位素谱图可作为未知物分子式唯一识别的可靠工具。如C₂₅H₂₃N₂O₃与C₂₁H₂₇S₂N₄的质量数仅相差3 mDa，普通的高分辨质谱很难区分这两个化合物，但它们的同位素谱图缺具有较大的差异，主要原因是C₂₁H₂₇S₂N₄中具有S元素，其同位素丰度明显不同于元素O，所以我们均能看出谱图的明显差异；但如果同化合物C₂₄H₂₃N₄O₂比较，由于元素组成相似，所以我们肉眼很难区别，这时我们的MassWorks谱图准确度识别工具就可以有效对其进行区分。

C ₂₅ H ₂₃ N ₂ O ₃	399.1709 Da
C ₂₁ H ₂₇ S ₂ N ₄	399.1677 Da
C ₂₄ H ₂₃ N ₄ O ₂	399.1821 Da



所以，**谱图准确度相对精确质量数**，是化合物分子式识别的更有效工具。

请垂询：绿绵科技有限公司

仅供内部交流使用
版权归绿绵科技有限公司所有