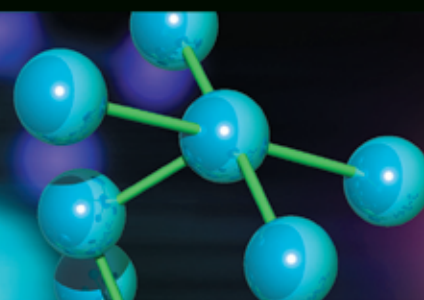


引入...

MassWorks™

sCLIPS™



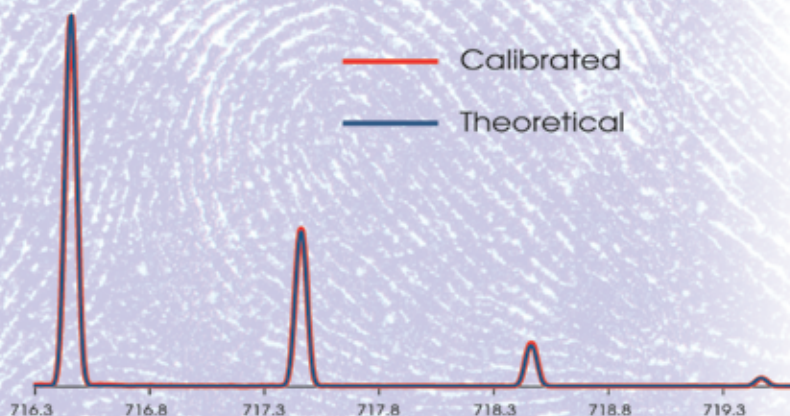
提高高分辨质谱的 分子式识别能力

- ✓ 不需标准物，通过线形校正得到精确同位素模型
- ✓ 对比理论谱图，校正后谱图可达99.9%以上的谱图准确度
- ✓ 避免了频繁的精确定质量校正工作
- ✓ 可用于TOF、OrbiTrap、FT-ICR、高分辨四极杆型和扇型磁场等仪器

大大提高高分辨质谱 分子式识别能力的革命性软件

sCLIPS (自校正线形同位素轮廓搜索) 是全新、专利的质谱校正方法，可以大大提供任何高分辨质谱分子式识别的置信度。即使对于高达1,000,000的强大分辨能力的FT-ICR-MS，虽然可达到次ppm级的质量精度，但对于完全未知物的分子式唯一识别也几乎是不可能的，特别当离子的质量数大于400 Da时。例如，质量精度为1 ppm，测得离子的质量数为477.2303 Da，对于通常的有机元素组成C、H、N、O、S、Cl、P、F和Na，仍有569种可能的分子式。而利用同位素分布提供的有用附加信息，可以可靠地测量同位素分布的微小差别(小于1%)，因此可以区分相似的分子式待选物。

即使是1 ppm的质量精度也提供几十到上百种待选分子式。
--谱图准确度能告诉您这里面哪个是正确的分子式。



sCLIPS™

sCLIPS从2 ppm质量精度的FT-ICR的100种可能分子式中提供了唯一的分子式识别

Formula	Mono Isotope	Mass Error (ppm)	Spectral Accuracy
C ₃₇ H ₆₆ NO ₁₂	716.4585	1.68	98.81
C ₃₆ H ₆₃ N ₅ O ₈ Na	716.4574	0.19	98.45
C ₃₄ H ₅₈ N ₁₁ O ₆	716.4572	-0.20	98.03
C ₃₅ H ₅₄ N ₁₅ O ₂	716.4585	1.66	97.71
C ₃₃ H ₅₅ N ₁₅ O ₂ Na	716.4561	-1.69	97.41
C ₃₅ H ₆₇ NO ₁₂ Na	716.4561	-1.68	97.06
C ₂₆ H ₅₅ N ₂₁ SNa	716.4568	-0.74	95.14

*** Over 100 formulas with C, H, N, O, S, Na at 2ppm

MassWorks软件的sCLIPS通过将质谱的线形校正为可用数学表达的函数，完美地解决了这个问题，可以利用谱图准确度值，非常精确地对比校正谱图与理论谱图，实现未知离子分子式的唯一识别。sCLIPS充分利用了未知离子的单同位素峰与其它同位素峰很好分离的特点，不需要使用内标或外标，直接得到测量的峰形函数，通过MassWorks产生单同位素峰的线形校正函数，并将其应用到离子的整个同位素轮廓。这个线形校正谱图，能够可视和定量地与用相同的线形函数计算得到的理论谱图进行比较。得到的谱图准确度值提供了准确和强大的计量工具，能从精确质量得到的长长可能分子式列表中得到唯一正确的分子式。

如何应用sCLIPS到测试数据

执行sCLIPS搜索非常快速、简单

- 利用MS数据系统简单采集数据，MassWorks直接读取原始MS数据，或将软件剪切和粘贴输出得到的ASCII文件直接输入到MassWorks软件中。
- 点击未知离子的单同位素，从下来菜单中选择“sCLIPS”
- 设定搜索元素、质量误差，然后点击“Search”

这就是整个过程。在几秒钟内，完成线形校正，产生基于质量误差的分子式列表、搜索并根据谱图准确度排序，然后显示全部排序后的sCLIPS报告。也能浏览不同谱图准确度的待选分子式并检查，报告也能够通过Windows剪切板打印或输出。

sCLIPS提供的其它优点

由于未知化合物提供了近似理想的线形校正物，sCLIPS不需要测量校正物，而实现快速、简单进行。对于得到高质量精度，可以避免频繁、耗时的校正需要，为您节约更多时间，提高样品分析通量，也改善了分析结果。

谱图准确度、与理论谱图的对比和叠加功能，可以帮助您很容易识别干扰的存在，或不合适的仪器条件，这些都可能导致昂贵的、耗时的、窘迫的，有时设置是危险的分子式错误识别。sCLIPS也能在存在已知离子干扰或来自如M-H、M或M+H共存物的普通碎片干扰的情况下，通过强大的混合物搜索工具，实现准确的分子式识别，这点对于单独的精确质量测定是无法实现的。

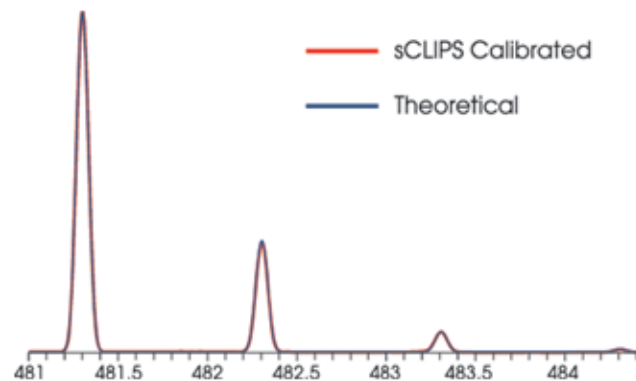


图1. 依米丁的sCLIPS结果（正确化合物的sCLIPS校正谱图与理论谱图的叠加）

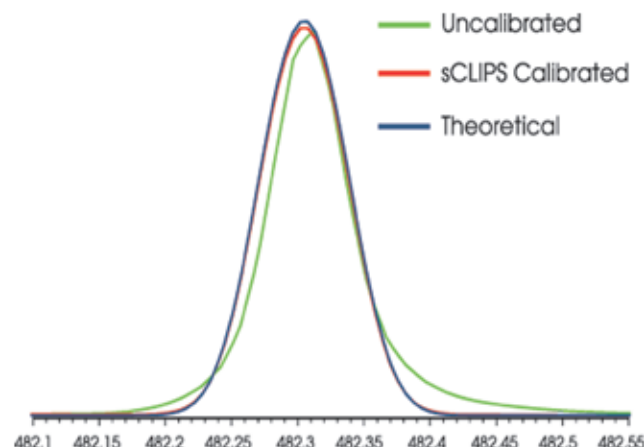


图2. M+1峰的放大视图（未校正谱图与高谱图准确度值的校正谱图具有很大的谱图差异）

Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (ppm)	Spectral Accuracy
C ₂₉ H ₄₁ N ₂ O ₄	481.3066	4.93	10.25	99.25
C ₃₀ H ₄₁ O ₅	481.2954	-6.30	-13.09	98.91
C ₂₅ H ₃₇ N ₈ O ₂	481.3039	2.25	4.67	98.16
C ₃₀ H ₃₇ N ₆	481.3080	6.27	13.03	97.31
C ₃₁ H ₃₇ N ₄ O	481.2967	-4.96	-10.31	96.97
C ₂₄ H ₄₁ N ₄ O ₆	481.3026	0.91	1.89	96.28
C ₂₈ H ₄₁ N ₄ OS	481.3001	-1.59	-3.31	96.02
C ₂₁ H ₃₃ N ₁₄	481.3013	-0.44	-0.91	95.94
C ₂₇ H ₄₅ O ₅ S	481.2988	-2.93	-6.09	95.73
C ₂₃ H ₄₁ N ₆ O ₃ S	481.2961	-5.62	-11.67	95.38
C ₂₂ H ₄₁ N ₈ O ₂ S	481.3073	5.62	11.67	95.29
C ₂₃ H ₄₅ O ₁₀	481.3013	-0.43	-0.89	94.18
C ₂₀ H ₃₇ N ₁₀ O ₄	481.2999	-1.78	-3.69	94.06
C ₁₈ H ₃₇ N ₁₄ S	481.3046	2.93	6.09	93.84

表1. 来自TOF仪器，并根据谱图准确度排列得到的依米丁（C₂₉H₄₁N₂O₄⁺）的搜索列表（利用C、H、N、O和S元素搜索得到的179个分子式）。表明MassWorks的sCLIPS很容易识别小到千分之几的谱图差异，这对于未经适当线形谱图校正是不可能的。也应该注意到，仪器尽管没有很好的校正，谱图准确度在质量精度超过10 ppm时，也很容易实现正确的分子式识别。

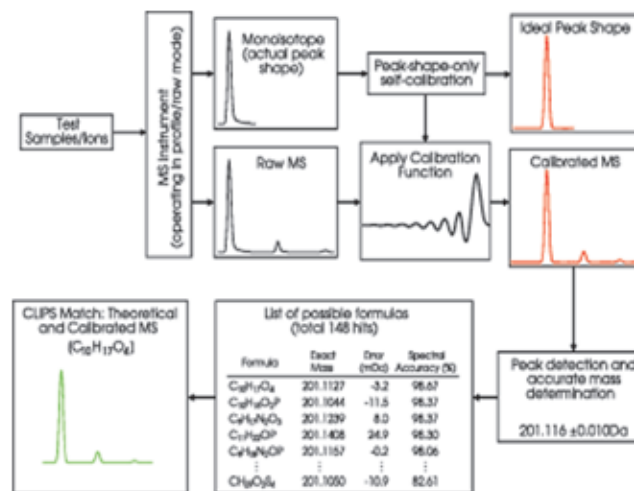


图3. sCLIPS校正和分子式测定的流程图（整个过程在MassWorks软件中一次操作自动运行）

北京市海淀区北四环西路68号左岸工社806-807室（100080）

电话：010-8267 6061/62/63/64/65/66/67

传真：010-8267 6068

沈阳市和平区南一马路109号力创大厦503室（110001）

电话：024-2387 9100/2387 8588/2387 3099

传真：024-2387 6558