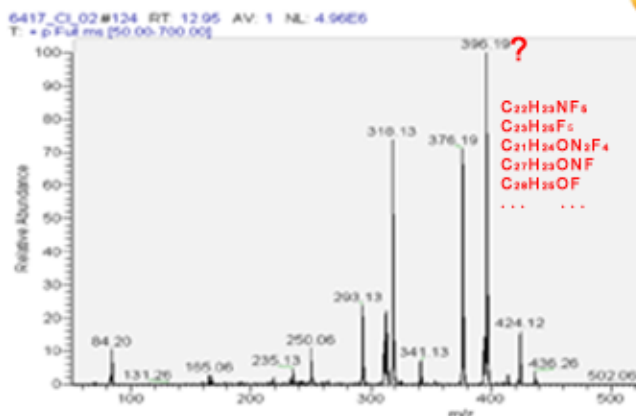




### 单位质量分辨与高分辨质谱的困惑???

单位质量分辨质谱因价格相对便宜、操作简便、灵敏度高等特点，逐渐成为一种常规的定量分析仪器。虽然，借助于谱库检索，并结合色谱分离的保留时间，也具有一定的定性能力，但其单位分辨的质量数，使其的定性能力大大受到限制。

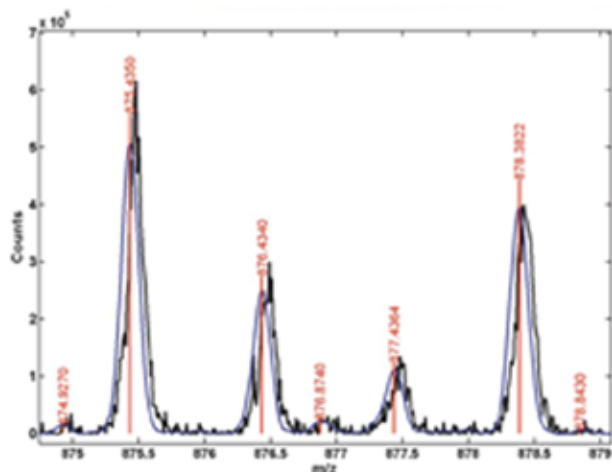
高分辨质谱，如TOF、FT-MS等，虽然具有ppm级的质量精度，但这个级别的质量精度对于未知物的分子式唯一识别也大大受到限制，特别是高质量端化合物。如，即使能够获得优于1ppm质量精度的FT-MS，测得未知物精确质量为477.2303 Da，对于通常的有机元素组成，C、H、N、O、S、Cl、P、F和Na，仍有569种可能的分子式需要根据经验及其它信息进一步选择。



MassWorks是方便使用的数据采集后处理软件包，它采用美国Cerno专利的MSIntegrity™校正技术，实现了质谱峰形的完美校正，提高了仪器的质量测量精度，并依靠校正的同位素轮廓，利用CLIPS或sCLIPS，在单位质量分辨或高分辨质谱上实现未知物的分子式识别。MassWorks可广泛应用于各供应商的质谱仪器。

### MassWorks的主要特点

- ◆ 提高单位质量分辨质谱的质量测量精度高达100倍
- ◆ 结合谱图准确度，单位质量分辨质谱实现分子式识别
- ◆ 不需标准物校正，大大提高高分辨质谱对未知物的唯一识别能力
- ◆ 有效过滤噪音，提高检测灵敏度
- ◆ 精确质量同位素轮廓提取，高选择性去除基质干扰，实现离子过滤



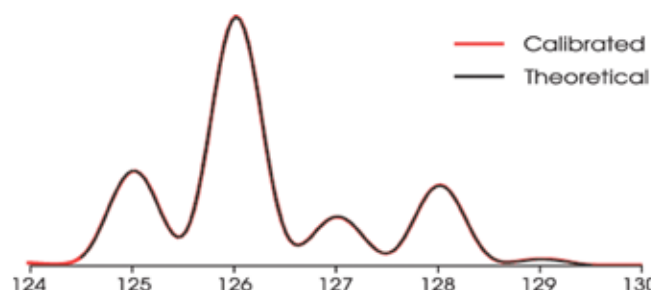
MassWorks可以极大地提高质量测定精度、信噪比、峰的对称性及定量分析结果。图为在Thermo TSQ Quantum串联四极杆质谱上获得的聚乙二醇谱图，黑色和蓝色分别为MassWorks校正前、后的结果。由MassWorks处理所得的聚乙二醇钠离子 ( $C_{36}H_{80}N_{12}O_{12}Na^+$ ) 的精确质量 (875.4350 Da) 与已知理论值 (875.4351 Da) 十分接近，质量精度为-0.11 ppm。

## 针对单位质量分辨质谱的解决方案

经过MassWorks峰形校正后，提高常规单位质量分辨GC/MS或LC/MS质量精度高达100倍，并结合同位素轮廓，利用CLIPS（校正的线形同位素轮廓搜索），在质量精度和谱图准确度的双重尺度下，实现常规单位质量分辨质谱对未知物的分子式识别。

CLIPS™  
sCLIPS™

4-氯甲苯在GC/MS测定后的MassWorks校正结果：

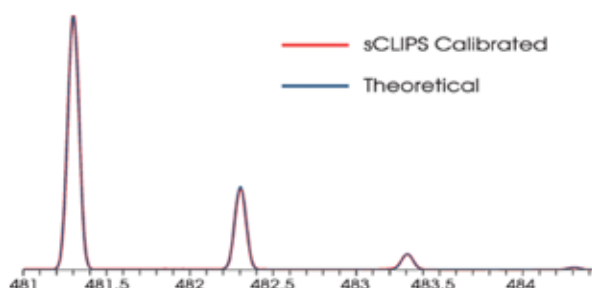


CLIPS搜索后4-氯甲苯 ( $C_7H_7Cl$ , 名义质量为126 Da) 的精确谱图叠加。MassWorks正确识别了这个化合物，谱图准确度为99.5%，质量精度为9 ppm，尽管在125 Da存在M-H的干扰离子，这也是GC/MS中的常见问题，但通过MassWorks的混合搜索工具，这个问题很容易解决。

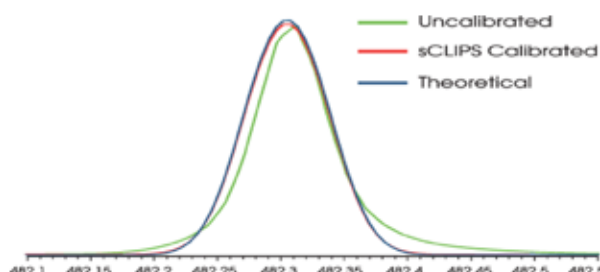
## 针对高分辨质谱的解决方案

对于高分辨质谱，不需要标准物校正，根据校正的同位素轮廓，利用MassWorks的sCLIPS（自校正线形同位素轮廓搜索）提高仪器的分子式唯一识别能力，增强未知物识别的置信度。另外，也缓解了高分辨质谱为追求精确质量测定，而频繁、耗时的校正工作。

图表为依米丁 (Emetine) 在TOF测定后的校正结果：



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）



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
$C_{29}H_{41}N_2O_4$	481.3066	4.93	10.25	99.25
$C_{30}H_{41}O_5$	481.2954	-6.30	-13.09	98.91
$C_{25}H_{37}N_8O_2$	481.3039	2.25	4.67	98.16
$C_{30}H_{37}N_6$	481.3080	6.27	13.03	97.31
$C_{31}H_{37}N_4O$	481.2967	-4.96	-10.31	96.97
$C_{24}H_{41}N_4O_6$	481.3026	0.91	1.89	96.28
$C_{28}H_{41}N_4OS$	481.3001	-1.59	-3.31	96.02
$C_{21}H_{33}N_{14}$	481.3013	-0.44	-0.91	95.94
$C_{27}H_{45}O_5S$	481.2988	-2.93	-6.09	95.73
$C_{23}H_{41}N_6O_3S$	481.2961	-5.62	-11.67	95.38
$C_{22}H_{41}N_8O_2S$	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

来自TOF仪器，并根据谱图准确度排列得到的依米丁 ( $C_{29}H_{41}N_2O_4^+$ ) 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，这个结果对于未经线形谱图校正是不可能实现的。同时注意到，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。

——MassWorks让质谱变得更好！

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

绿绵科技  
Lumiere Tech Ltd.

E-mail: info@lumtech.com.cn

Http://www.lumtech.com.cn