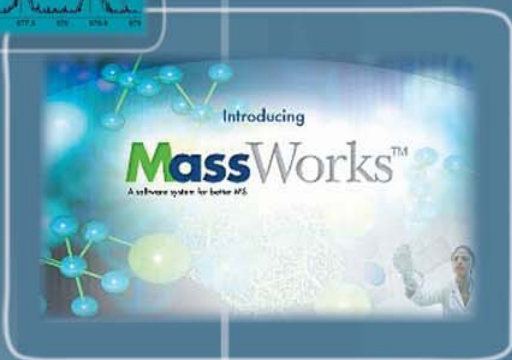
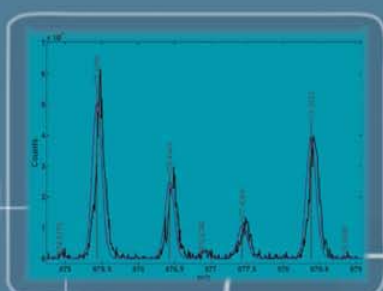




绿绵科技
Lumiere Tech Ltd.

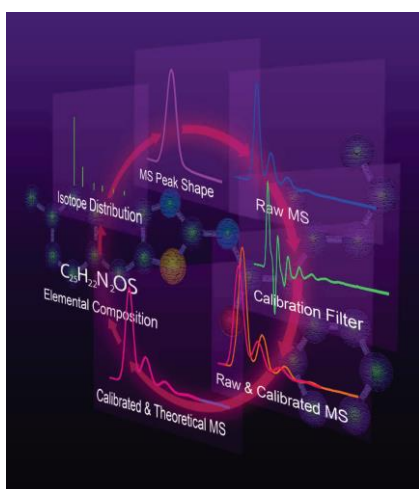
MassWorks精确质量数测定 及分子式识别系统



MassWorks™ 是采用美国 Cerno Bioscience 公司 MSIntegrity™ 专利技术的质谱数据后处理软件包。

MassWorks 其创新的质量数及同位素峰形校正算法实现了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准确度的质量测定，并结合同位素峰形的谱图准确度完美的解决化合物分子的鉴别问题。

MassWorks™ 获 PittCon 2006 年新产品铜奖



MassWorks 应用领域

- 非法物添加的筛查
- 天然产物中未知物的鉴定
- 药物中杂质或代谢物的鉴定
- 检测中阳性结果的确证
- 目标物精确质量及元素测定
- 突发、应急目标物的鉴定
- 环境污染物的分析
- 有机合成化合物的鉴定
- 同位素标记和生物修饰的分析
- 等离子质谱中干扰定性定量分析

特点

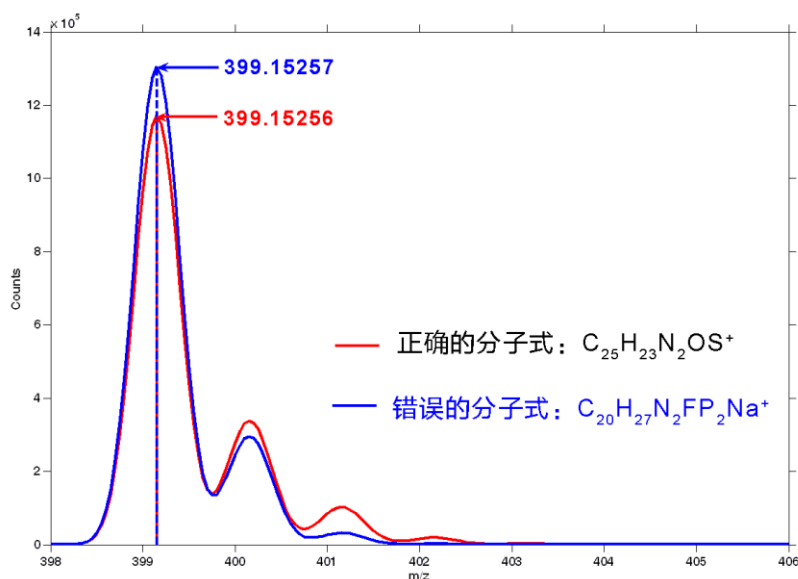
- 四极杆 GC 或 LC/MS 上测定准确分子量 (精确至 0.005 Da)
- 提升所有质谱系统的谱图准确度 (高达 99.9%)
- 四极杆质谱上元素组成的准确测定
- 高分辨质谱上过滤 95-99% 的假阳性分子式
- 高分辨率质谱上同位素分布的准确分析
- 难分离混合物的准确分析，例如同位素标记和生物修饰

适用所有质谱平台

MassWorks 可以处理任一质谱平台的数据，无论您使用的是单位质量的四极杆 GC/MS 或 LC/MS 系统，还是从 TOF 到 FT-MS 的高分辨质谱，MassWorks 都能帮助您提高分子式定性能力，也能帮助您在现有仪器上容易得到更高质量准确度、更好重现性数据。

谱图准确度

谱图准确度是度量测量的同位素峰簇谱形（离子谱图）与理论的离子谱图相似程度的工具，没有经过合适的线性轮廓校正，谱图准确度用于识别未知物的分子式大大受到限制。MassWorks 软件将谱图校正为线性轮廓图，也校正了质量轴位置，利用谱图准确度可以高精度地对比较正后谱图和理论谱图，谱图准确度可高达 99.9% 以上。



谱图准确度和质量准确度的区别：

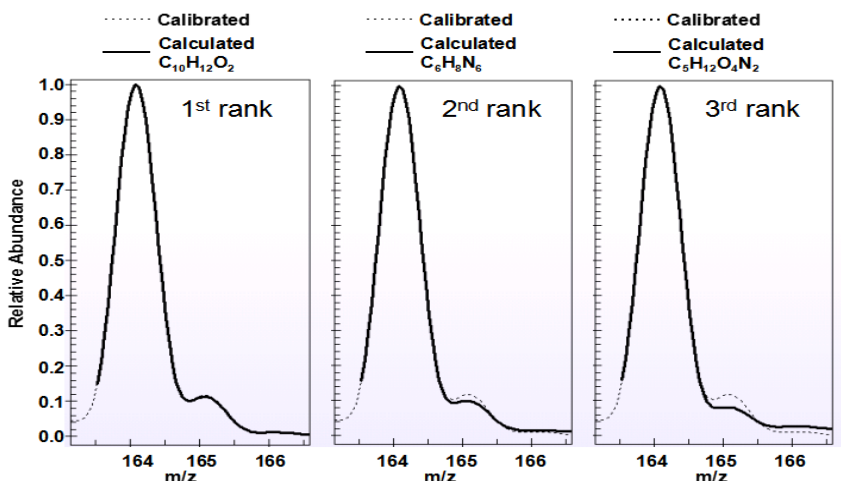
图中红色是按照谱图准确度搜索谱图匹配最好的、正确的分子式结果；而蓝色是错误的分子式，即使它的质量准确度非常高，但谱图准确度却不高。

“质谱谱图准确度”用途和好处

- 1) 用低分辨四级杆质谱确定未知化合物元素组成
- 2) 复杂质谱的分析：化合物离子的定性、定量分析
- 3) 质谱仪问题诊断：检测器有线性范围的问题，或质谱图干扰峰的出现
- 4) 高分辨质谱上，进一步减少鉴定未知物的假阳性

针对单位质量分辨率 GC/MS 或 LC/MS 仪器

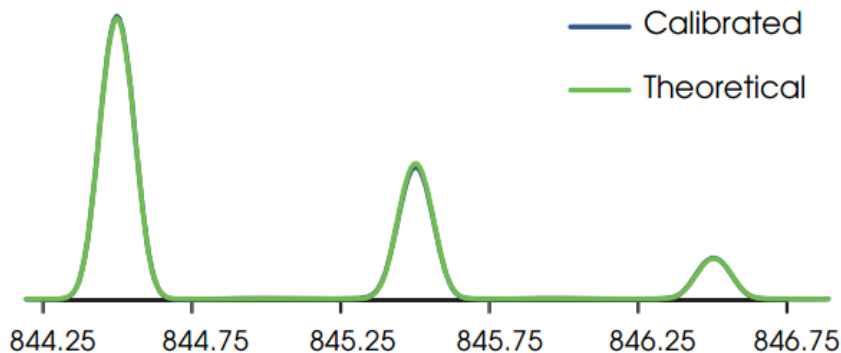
经过 MassWorks 峰形矫正后，提高常规单位质量分辨 GC/MS 或 LC/MS 的质量精度高达 100 倍，并结合同位素峰形轮廓，利用 CLIPS（校正的线性同位素轮廓搜索），在质量精度和谱图准确度双重尺度下实现常规单位质量分辨质谱对未知物的分子式识别。



图为在 Agilent 5975 GC/MS 单四极杆质谱上获得的乙酸苯乙酯的母离子 ($C_{10}H_{12}O_2$) 的质谱图，虚线为校正后的谱图，实线为理论谱图，质量偏差为 2.1 mDa，CLIPS 校正检索后的谱图准确度为 99.6%，借助高谱图准确度准确地地区别了正确分子式与不正确的分子式，并将正确的结果显示在第一位，降低了分子式识别的难度和可信度。

针对高分辨 TOF/Obitrap/FT-MS 仪器

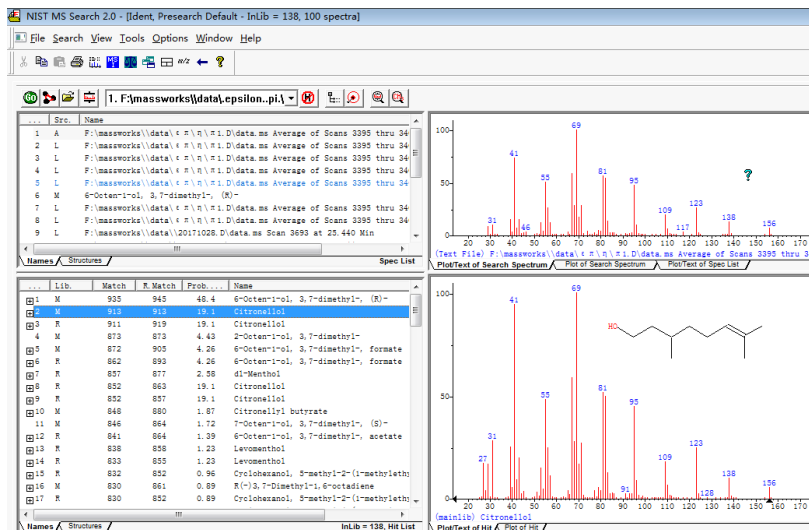
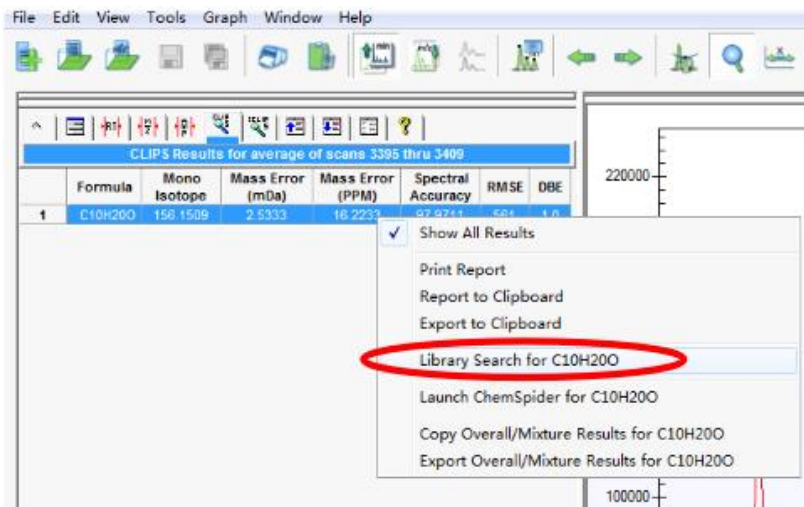
针对高分辨质谱，不需要标准物校正，利用 MassWorks 的 sCLIPS（校正的线性同位素轮廓搜索）提高分子式识别的准确度，增强未知物识别的可信度。也避免了为得到高质量精度，频繁而耗时地校正工作。



NIST Library & ChemSpider 检索

在最新的 V5.0 版本中，MassWorks 集成了 NIST 谱库和 ChemSpider 检索功能，可一键式地对 MassWorks 得出的待选分子式进行 NIST 或 ChemSpider 检索，进一步获得分子式可能的结构以及分子属性。

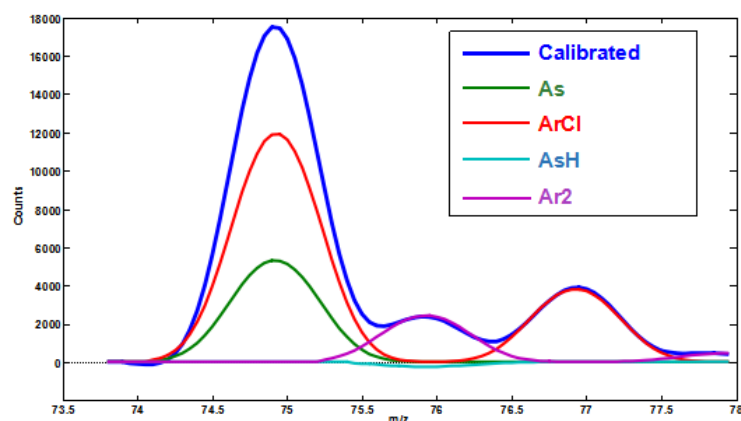
MassWorks 中的 NIST 检索模式，除了传统的“离子碎片指纹”检索，还可基于测定的准确分子量或已获得分子式检索，最大限度地过滤错误的待选检索结果。



图在 MassWorks 中对待选分子式直接启动 NIST 谱库检索。MassWorks 测定的质量误差为 2.53mDa，CLIPS 结果显示分子式为 C₁₀H₂₀O，NIST 检索该分子式结构，得出的结果为香茅醇（CAS: 106-22-9）

ICP-MS：多元素干扰的定性与定量分析

电感耦合等离子质谱存在普遍的干扰问题会直接影响定性及定量分析。由于大多数干扰发生在 ICP-MS 中，并且可以用化学公式表示，因此可以通过 MassWorks 的 Minxture Search 解卷积运算很容易地对混合物中的成分进行准确的鉴定和定量分析。



这是一个典型的元素干扰实例，MassWorks 的分析结果表明，在 m/z 75 处，ArCl 占主导，含量的比例为 95%，而 As 和 Ar_2 含量分别占 3.5% 和 1.5%。

利用 MassWorks 发表在美国分析化学等杂志上的文章

Yongdong Wang and Ming Gu. The Concept of Spectral Accuracy for MS. Anal. Chem.2010,82,7055–7062

Emmanuel Eysseric, Killian Barry, Francis Beaudry, Magali Houde, Christian Gagnon, and Pedro A. Segura. Application of Spectral Accuracy to Improve the Identification of Organic Compounds in Environmental Analysis. Anal. Chem., 2017, 89 (18), pp 9805–9813

Erik T. Jansson, Yin-Hung Lai, Juan G. Santiago, and Richard N. Zare. Rapid Hydrogen–Deuterium Exchange in Liquid Droplets. J. Am. Chem. Soc., 2017, 139 (20), pp 6851–6854

Wei Zhou, Yaheng Zhang, Hongliang Xu, Ming Gu. Determination of elemental composition of volatile organic compounds from Chinese rose oil by spectral accuracy and mass accuracy. Rapid Commun. Mass Spectrom. 2011, 25, 3097–3102

Ho HP, Lee RJ, Chen CY, Wang SR, Li ZG, Lee MR. Identification of new minor metabolites of penicillin G in human serum by multiple-stage tandem mass spectrometry. Rapid Commun Mass Spectrom. 2011 Jan 15;25(1):25-32

更多文章联系绿绵科技市场部 marketing@lumtech.com.cn