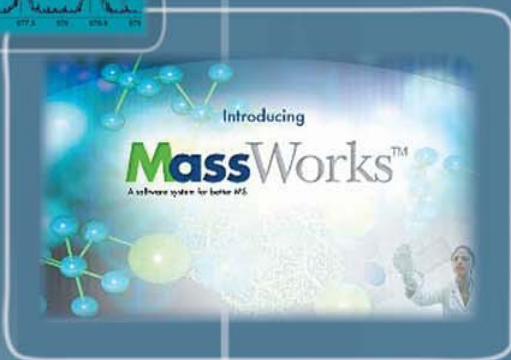
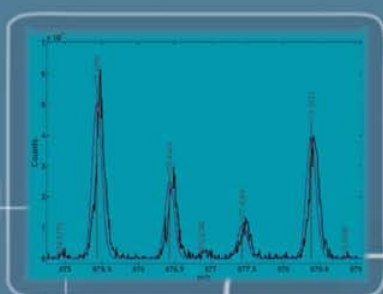




绿绵科技  
Lumiere Tech Ltd.

# MassWorks精确质量数测定 及分子式识别系统



# MassWorks™ 每一台质谱都值得拥有

## 专家的体会

“MassWorks是一个非常有效的分子式识别工具，对我们从事的天然产物未知物鉴别工作很有帮助，尤其对共流出物的化合物识别，起到关键的作用，弥补了NIST谱库的不足。对低分辨的气质以及高分辨的液质，可以大大提高化合物分子式的确认准确度。”

甘肃省出入境检验检疫局检验检疫技术中心——周国主任



是什么让众多的一线实验人员对该系统有如此之高的评价？  
是什么能够及时有效协助实验室解决纷繁复杂的定性问题？  
是什么用最少的花费大大提升了您实验室各种质谱的档次？

## 为什么选择MassWorks

全球最权威美国Pittcon会议唯一获奖软件产品

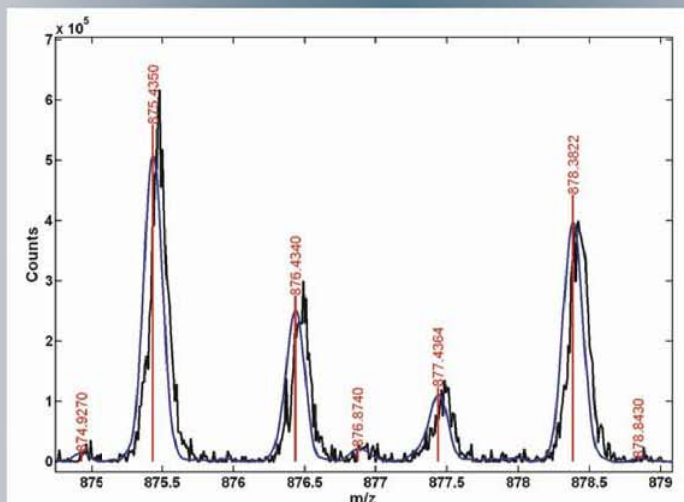
让低分辨质谱实现高分辨的功能

实验室所有质谱均可共享使用该软件

有效评价仪器状态并确保试验结果的可靠性

即使拥有高分辨质谱也可应用该软件实现分子式的进一步确证

## MassWorks能够带来什么



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<sub>36</sub>H<sub>60</sub>N<sub>12</sub>O<sub>12</sub>Na<sup>+</sup>)的精确质量(875.4350Da)与已知理论值(875.4351Da)十分接近，质量精度为-0.11ppm。

提高单位质量分辨质谱的质量测定精度高达100倍

结合谱图准确度实现单位质量分辨质谱分子式识别

无需标准物校正并实现对未知物的唯一识别能力

能够有效的过滤噪音并大大提高检测灵敏度

精确质量同位素轮廓提取并高选择性去除基质干扰

基线无偏差处理并对质谱谱线作自动无偏差排列

# MassWorks™ 每一台质谱都值得拥有



## 单位分辨质谱的困惑

单位质量分辨质谱因价格相对便宜，操作简便，灵明度高等特点，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，但由于其单位分辨的质量数，使其定性能力大大受到限制。



## 高分辨质谱的困惑

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



## 实际工作中遇到的困惑

- 气质联用中NIST谱库匹配率低，准确性没有把握
- 气质联用中NIST谱库色谱分不开，无法作匹配
- 由于同系物的存在，其在NIST谱库中匹配率相似
- 大量的未知物NIST谱库中没有收录
- NIST谱库无法用于CI源的检索
- 液质联用中没有统一的谱库
- 高分辨质谱需要维护的时间及费用高昂



## 定性给我们带来的挑战

- 高含量半未知或全未知非法添加物如何有效的筛查
- 天然产物中大量未知物，新化合物在缺乏标准品时如何准确的定性
- 含量相对较低，半未知，组成与主成分类似的药物杂质或代谢物鉴定是否可靠
- 食品安全分析中阳性结果确证手段是否可信
- 目标化合物如何实现精确质量数和分子式的测定



## 您的定性可靠么？

面对如此众多的挑战，我们应该怎么办？

## 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的质量精度高达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。

### 自校正线形同位素轮廓搜索技术

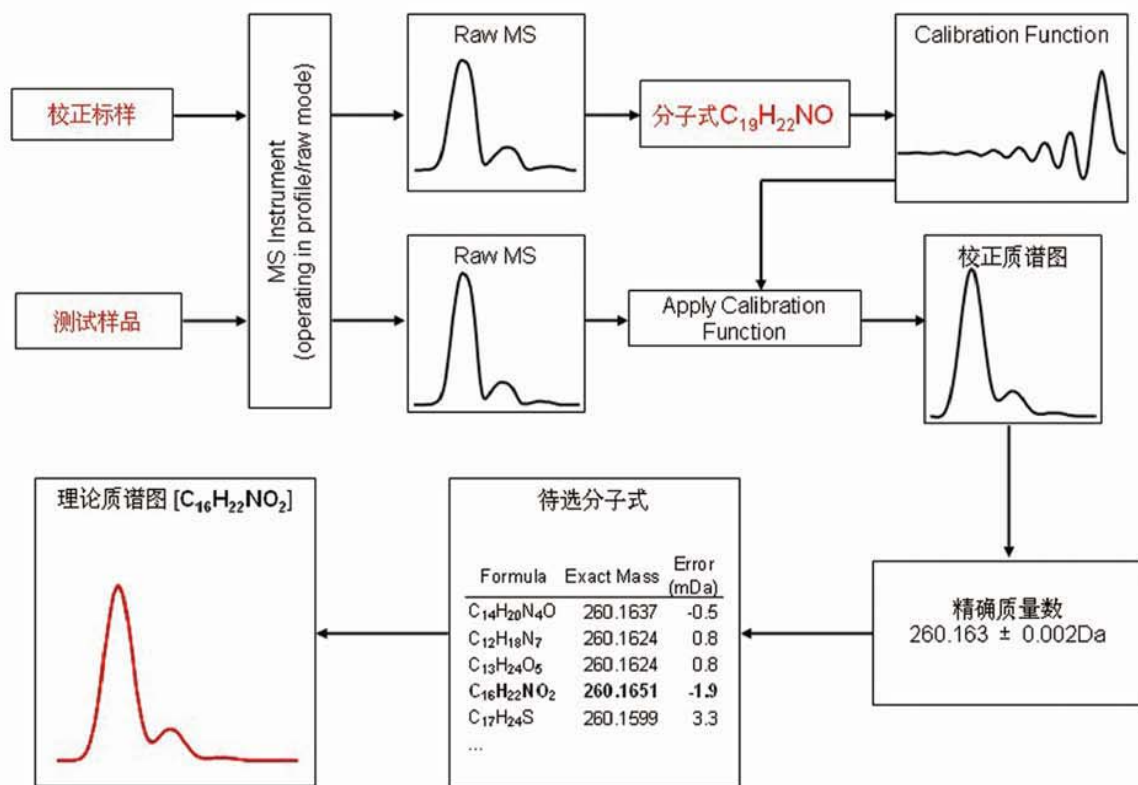


校正的线形同位素轮廓搜索技术

## 针对高分辨质谱的解决方案

针对高分辨质谱，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。

## MassWorks工作流程图



## 利用MassWorks发表的文獻

1. The Concept of Spectral Accuracy for MS —Analytical Chemistry
2. Identification of new minor metabolites of penicillin G in human serum by multiple-stage tandem mass spectrometry —Rapid Commun. Mass Spectrom. 2011, 25, 25-32
3. 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
4. Application of Multivariate Curve Resolution Method in the Quantitative Monitoring Transformation of Salvanolic Acid A Using Online UV Spectroscopy and Mass Spectroscopy —II&EC Research
5. 高效液相色谱-单四级杆质谱仪结合同位素峰形校正检索技术快速确定头孢呋辛水溶液降解杂质 —药物分析杂志
6. 中国苦水玫瑰精油中部分天然产物的质谱分析与元素组成的确定 —检验检疫学刊
7. 精确质量数在单四级杆质谱定性分析农药中的应用 —高等学校化学学报
8. 使用MassWorks快速筛查药品中非法添加物 —质谱学报

———更多文章请联系绿绵科技市场部

## 北京绿绵科技有限公司

北京总部 (100080)

北京市北四环西路68号左岸工社806-807室

电话: 010-8267 6061/2/3/4/5/6/7

传真: 010-8267 6068

杭州技术中心 (310012)

杭州市华星路嘉绿青苑5栋3单元201室

电话: 0571-8890 2371/2372/2395

传真: 0571-8717 8257

E-mail: info@lumtech.com.cn

Http://www.lumtech.com.cn

上海办事处 (200235)

上海市徐汇区82号光大会展中心E座2601、2603室

电话: 021-6432 0661

传真: 021-6432 0670

西安办事处 (710054)

西安市碑林区友谊东路81号天伦盛世大厦2号楼905室

电话: 029-8523 6958

传真: 029-8523 6958-802

河南办事处 (250000)

河南省郑州市花园路39号郑州国贸中心2-2-606室

电话: 0371-87095687

传真: 0371-65713275