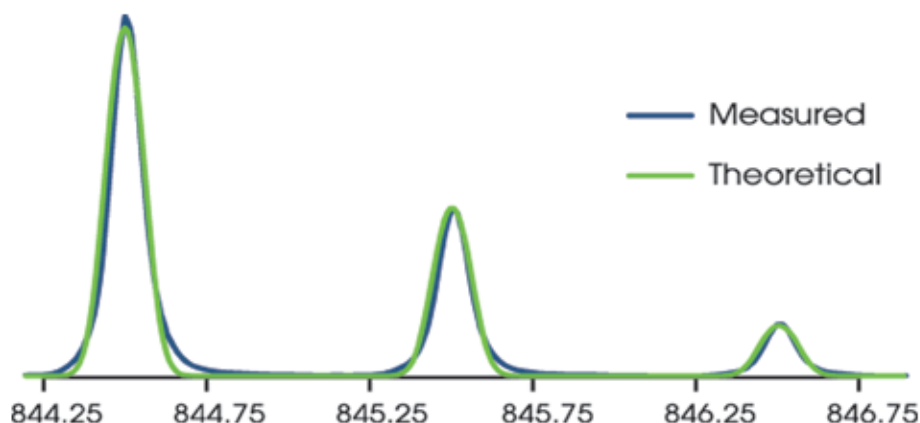


高分辨和单位质量分辨质谱的解决方案

基于MassWorks质谱数据处理软件的成功获奖，Cerno自豪地宣布了其最新突破，将MassWorks软件应用能力扩展到任何质谱。无论您使用的是单位质量分辨的四极杆GC/MS或LC/MS系统，还是从TOF到FT-MS的高分辨质谱，MassWorks能够帮助您提高分子式识别能力，也能帮助您在现有仪器上容易得到更高质量精度、更好重现性数据。MassWorks是容易使用的采集后处理软件包，它采用Cerno专利的MSIntegrity校正技术，可以直接对目前大部

分质谱采集的数据进行处理。用您现有的质谱系统进行简单数据采集，然后利用MassWorks打开这些数据，进行处理就可以得到测定结果。除了直接读取主要质谱供应商的原始数据，MassWorks也可直接输入通过软件剪切和粘贴输出的ASCII数据或直接输出的ASCII文件，因此MassWorks事实上可以处理任何厂家和型号的质谱数据。

提高未知物分子式识别的确认能力



NEW!

对于高分辨质谱，如TOF、OrbiTrap或FT-MS，不需要标准物校正，在仅通过质量精度得到众多可能分子式的待选列表中，可以大大提高未知物分子式的唯一识别能力！

对于四极杆型LC/MS或GC/MS，得到高于100倍以上的质量精度，在传统质谱系统上实现分子式的识别。

MassWorks通过改善重复性、信噪比和质谱峰检测，可以提高任何质谱数据的质量。

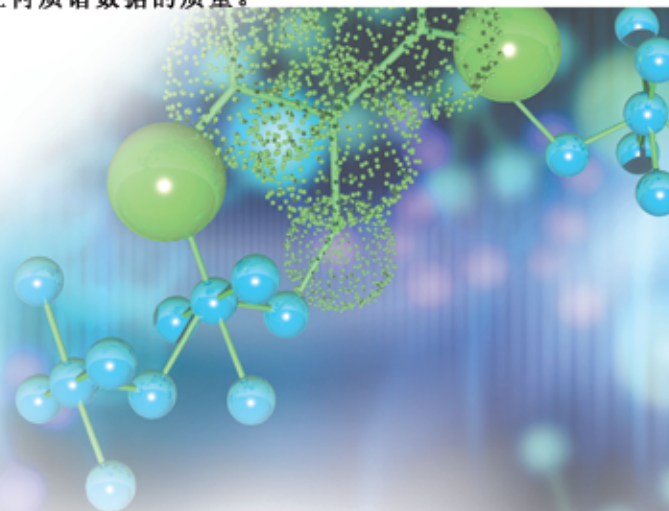
MassWorks™

谱图准确度是计量测定同位素轮廓图（离子谱图）与理论离子谱图相似程度的工具，未经合适的线形峰形校正，谱图准确度值用于区别相近的分子式大大受到限制。

从质量精度到谱图准确度

质量精度是仪器检测一个离子理论质量的测量误差，常常表示为相对理论值的ppm或mDa表示。不幸的是，由于在给定的测量误差范围内存在一些可能的分子式，仅凭质量精度很难提供唯一的分子式，特别是在高质量端（400 Da以上），如即使是质量精确为1ppm的FT-ICR，测得的477.2303 Da

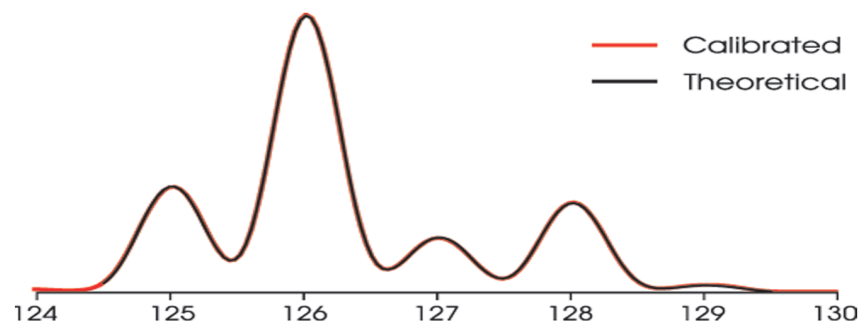
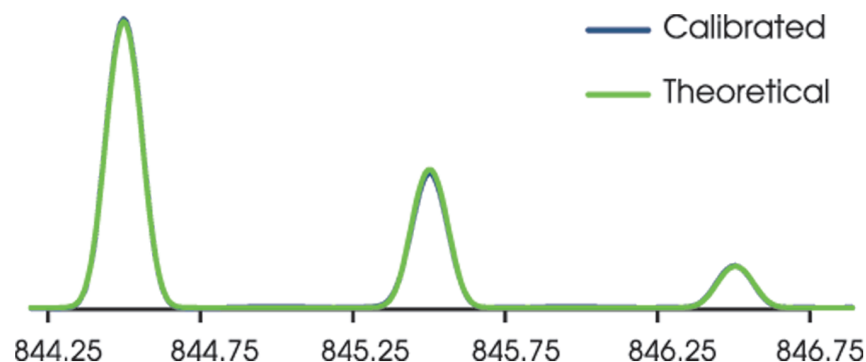
对于通常的有机元素组成C、H、N、O、S、Cl、P、F和Na，仍有569种可能的分子式。谱图准确度是计量测量谱图（整个离子同位素轮廓）与理论谱图相似程度的工具。然而，目前大部分质谱缺乏峰形校正技术，测量谱图的线形峰形不能用数学表达，且依赖于



依赖于仪器/质谱调谐，所以，未经峰形校正的谱图准确度值对于提供唯一分子式通常是不够的。**Cerno**的**MassWorks**软件完美地解决了这个问题，不仅准确地校正了质谱峰质量轴位置，而且也将质谱的线形峰形校正为可用数学表达的函数，这就允许非常准确地对比校正谱图和理论谱图，谱图准确度值能够唯一识别未知离子的分子式，这个专利的分子式识别方式，用于低分辨质谱叫做**CLIPS**（校正的线形同位素轮廓搜索），在高分辨质谱上叫做**sCLIPS**（自校正的线形同位素轮廓搜索）。



MassWorks软件校正了谱图的线形峰形，可以高度准确地对比校正谱图与理论谱图，谱图准确度能够高于**99.9%**以上，这大大提供了高分辨质谱的分子式识别能力。当结合**MassWorks**校正后提高的质量精度，在单位质量分辨的**GC/MS**和**LC/MS**也可以实现分子式识别。



CLIPS搜索后4-氯甲苯 (C_7H_7Cl 的名义质量数为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，这在**GC/MS**中也是常见的问题，但通过**MassWorks**的混合搜索工具，这个问题很容易解决。

对于高质量精度仪器

对于高分辨的仪器，不需要标准物校正，利用**sCLIPS**提高分子式识别的准确程度。

应用于TOF、QTOF、高分辨四极杆型、Orbi-Trap或FT-MS仪器

sCLIPS搜索操作简单、方便，而且不需要校正物，这也避免了为得到高质量精度，频繁而耗时地校正工作，这不但节约您的时间、提高样品分析通量，而且也改善了您的分析结果。在**MassWorks**上简单地直接打开数据文件，或从仪器供应商软件中剪切和粘贴，在单同位素峰标记处点击并发送到**sCLIPS**，校正自动运行并返回搜索结果。

对于单位质量分辨四极杆仪器

在单位质量分辨单级和三重四极杆**GC/MS**或**LC/MS**上，得到精确质量并利用**CLIPS**实现分子式识别。

应用于单级和三重四极杆GC/MS或LC/MS仪器

在传统质谱系统上，大大提高质量精度和谱图准确度，实现了分子式识别。利用已知校正化合物和**MassWorks**专利的**MSIntegrity**校正技术，常常可以得到**5-10mDa**的质量精度，结合通过**MassWorks**线形谱图校正得到的谱图准确度，实现确信的分子式识别。



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

E-mail: info@lumtech.com.cn

[Http://www.lumtech.com.cn](http://www.lumtech.com.cn)