

用于 MassWorks 的质谱数据采集

用于 MassWorks 的质谱数据采集

由于 MassWorks 对质谱数据在质荷比和峰型函数上进行全面校正，所以要求质谱扫描数据尽可能是没有经过处理的，具体要求如下：

1. 离子阈值: 设为零, 或允许设定的最低值
2. 应该关掉质谱或色谱范畴的过滤 (如色谱过滤器), 或将参数设定为最低值, 以便保证数据流没有经过任何处理, 例如:
 - a. 在采用 Box-car 平滑时, 设定窗口尺寸为 1
 - b. 当采用 Savitzky-Golay 过滤时, 设定多项式级数小于平滑窗口内数据点的数目
3. 质谱扫描数据应该设定为连续或轮廓采集模式, 以保证质谱峰有足够的 datapoints。典型情况下, 对应于单一同位素峰的半峰高峰宽需要至少有 5 个 datapoints, 例如, 半峰高峰宽为 0.50Da 的单位质量质谱, 采样间隔最佳为 0.10Da
4. 质谱常规分析得到的典型质心图数据, 不适用 MassWorks 软件处理, 因为通过质心处理后大部分的重要信息已经丢失
5. 在某些系统中, 由于检测器或相关电路原因, 在高浓度时质谱响应可能饱和, 这样的数据用于 MassWorks 校正时, 会产生系统误差。在这种情况下使用更低的浓度样品和色谱峰的上升或下降部分的质谱数据

校正数据采集

有两种类型的校正数据采集方式

1. 涵盖感兴趣质量范围的一组已知离子的外标校正。对于气质联用系统, 可利用内置的校正混合标样, 如全氟三丁胺, 重复采集 5-10 分钟的质谱扫描数据。质谱扫描参数, 如质量范围、扫描速率、每次扫描后的停留时间等, 应该和气质联用或液质联用的分析样品时的参数一样, 质谱调谐等其它参数也应该和气质联用或液质联用运行时一样; 液质联用系统, 可以使用聚丙烯酰胺或药物混合物利用连续注射或样品环方式进样来采集校正质谱数据。5-10 倍的样品环进样方式优于连续注射方式, 因为样品中同时含有流动相。Cerno 研究表明, 下面的几种药物混合物在小分子校正应用中表现良好的性能:

化合物名称	精确质量数 (m/z)
红霉素	734.4685
利血平	609.2806
酪氨酸-酪氨酸-酪氨酸	508.2084
洛哌丁胺	477.2309
特非那定	472.3216
丁螺环酮	386.2556
异丙嗪	285.1425
乙酰氨基酚	152.0712

introducing...

MassWorks™

2006 Pittcon 获得创新新产品大奖

2. 一个或几个已知离子的内标校正。内标物可以通过柱后注射/双喷方式引入系统，或者在药物代谢研究中，母药做为唯一的校正离子

内标和外标校正方式可以任意选择，但如果要求更高的质量准确度，选择内标校正更理想的选择，这样可以尽量减小质谱系统波动的影响。

气质联用或液质联用数据采集

在相同的仪器调谐和质谱扫描条件下，设定为没有或最小数据处理的轮廓数据采集模式（参考前面的用于 MassWorks 的数据采集）用于样品质谱数据扫描。

需要注意的是，质量标准偏差与离子信号的平方根成反比，因此，更大的离子信号强度对提高质量准确度是有利的。

cerno
BIOSCIENCE

 **绿绵科技**
Lumiere Tech Ltd.

绿绵科技有限公司

北京市海淀区北四环西路68号左岸工社806室（100080）

电话：010-82676061/2/3/4/5

传真：010-82676068

沈阳市和平区南一马路109号力创大厦503室（110001）

电话：024-23879100/23878588

传真：024-23876558

邮件：info@lumtech.com.cn

http://www.lumtech.com.cn