

什么是“谱图准确度”？

质谱具有通过精确质量测定得到元素组成信息（分子式识别）的强大能力，所以它是化合物识别或确证的重要工具，这个简便、理想的分子式识别方法建立在每个分子式具有唯一质量数的基础上。质量准确度是离子的仪器测量值与理论值之间的偏差，通常用相对于测量质量数的 ppm 或绝对单位 mDa 表示（见图 1）。不幸的是，由于测量误差，单一的质量准确度很难提供唯一的分子式，特别是在较高的质量数时（大于 400 Da）。

离子的同位素峰簇谱形对于每个分子式也是唯一的，相对于仅测定单个同位素峰的位置及其精确质量，可得到更丰富的信息。同位素峰簇谱形由一些峰组成，基于它们的同位素丰度和质量数，具有唯一的相对峰强度和唯一的相对质量位置。谱图准确度是度量测量谱图（整个离子同位素峰簇谱形）与其理论谱图相似程度的工具，然而，由于测量谱图的线性轮廓图是未知的，所以谱图准确度的测量不足以得到唯一分子式（见图 2）。Cerno 的 MassWorks 软件通过校正峰的质量数位置，更重要的是将峰校正为可用数学方程表达的线性轮廓图，完美地解决了这个问题，可以特别准确地对比测量谱图和理论谱图，利用谱图准确度能够唯一识别未知离子的分子式（见图 3）

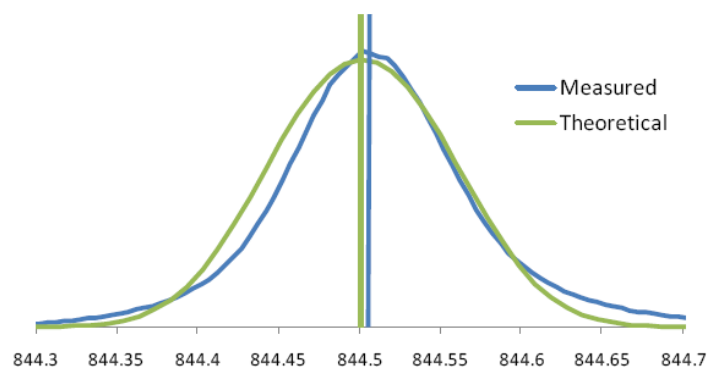


图 1. 质量准确度是测量给定离子的测量质量数与理论值的差值，质量数真值的不确定性常常限制了明确的分子式识别

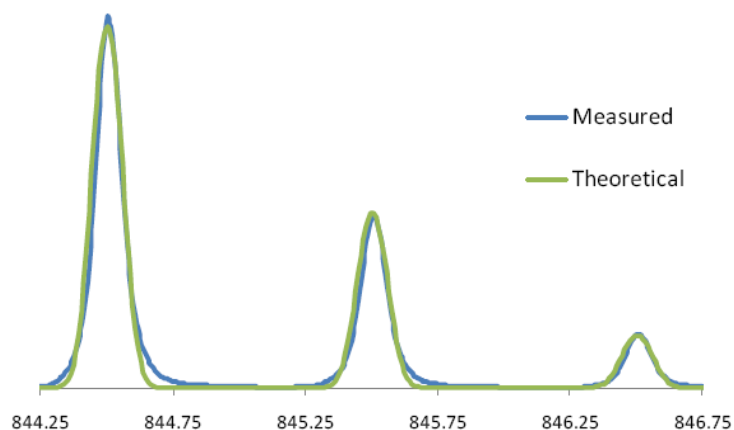


图 2. 谱图准确度是度量测量的同位素峰簇谱形（离子谱图）与理论的同位素峰簇谱形相似程度的工具，没有经过合适的线性轮廓校正，光谱准确度用于识别未知物的分子式大大受到限制

北京绿绵科技有限公司

北京市北四环西路 68 号左岸工社 806-807 室
(100080)
Tel: 010- 8267 6061/2/3/4/5/6/7
Fax: 010- 8267 6068

沈阳市和平区南一马路力创大厦 503 室
(110001)
Tel: 024- 2387 9100/2387 8588/2387 3099
Fax: 024- 2387 6558

杭州市天目山路 224 号中融城市花园 6 幢 2 单元 702 室 (310012)
Tel: 0571- 8765 8020/ 8717 8257
Fax: 0571- 8717 8257

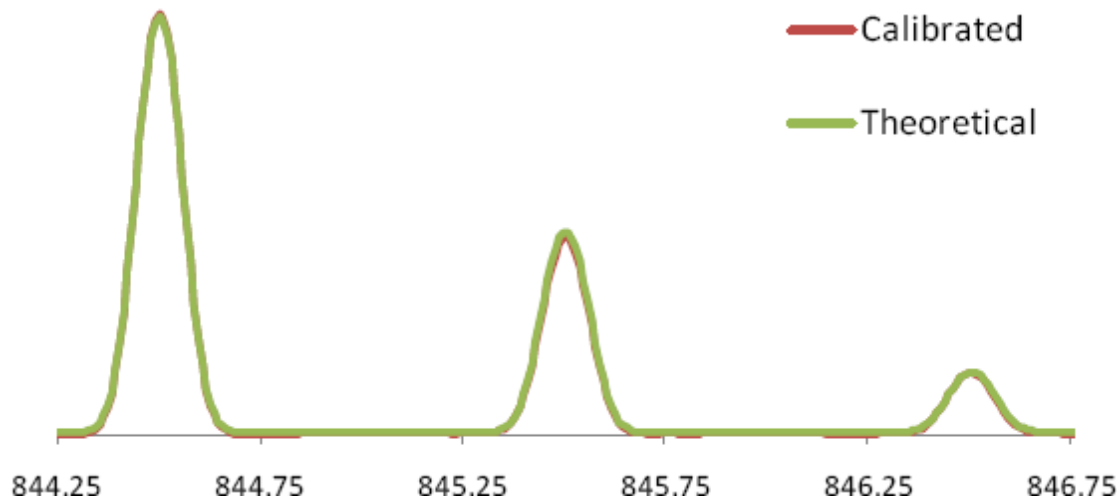


图3. MassWorks 软件将谱图校正为线性轮廓图, 也校正了质量轴位置, 利用谱图准确度可以高精度的对比校正后谱图和理论谱图, 谱图准确度可高达 99.9% 以上。对于高分辨仪器可以提高其分子式识别能力, 当结合 MassWorks 校正后得到的高质量准确度, 使其能够在单位分辨的 GC 和 LC/MS 的四极杆仪器上实现分子式识别。

北京绿绵科技有限公司

北京市北四环西路 68 号左岸工社 806-807 室
(100080)
Tel: 010- 8267 6061/2/3/4/5/6/7
Fax: 010- 8267 6068

沈阳市和平区南一马路力创大厦 503 室
(110001)
Tel: 024- 2387 9100/2387 8588/2387 3099
Fax: 024- 2387 6558

杭州市天目山路 224 号中融城市花园 6 幢 2 单元 702 室 (310012)
Tel: 0571- 8765 8020/ 8717 8257
Fax: 0571- 8717 8257