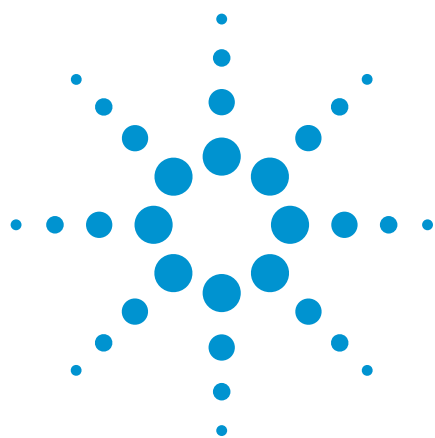




# Agilent SureMass

## 技术概述

### 摘要

过去，GC/MS 全谱数据依赖于传统的手动分析或解卷积算法，对可能发生色谱共流出的复杂混合物中的化学组分进行提取和鉴定。现有解卷积算法能够在苛刻的色谱条件下测定痕量组分。然而，这些算法通常针对标称分辨率扫描质谱仪技术（例如四极杆 MS）进行优化，而且可能无法使高分辨率全谱质量分析仪（如飞行时间 (TOF) 质谱仪）获得最佳结果。本技术概述讨论了一种用于化学组分检测的新型信号处理算法 (SureMass)，专为安捷伦 TOF 类质谱系统的高分辨率质谱分析数据而设计，适用于 7200 系列 GC/Q-TOF 平台。



**Agilent Technologies**

## 前言

基于提取离子色谱图 (EIC) 保留时间和洗脱曲线匹配的经典解卷积技术对于 GC/MS 用户来说仍然不失为一种极其强大的工具 (图 1)。这些信号处理技术非常适用于处理由扫描模式的气相色谱/四极杆质谱仪 (GC/MSD) 生成的质谱数据。在许多拥有 GC/MSD 系统的实验室中, 此类解卷积工具是常用工具。

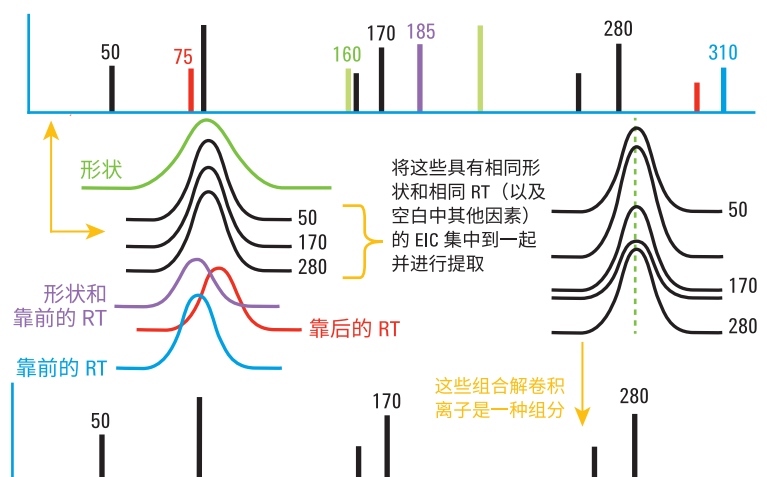


图 1. 基于时间和曲线的解卷积

尽管这种成熟的解卷积技术具有强大的分析能力, 但其设计和优化的初衷是主要针对标称质量扫描仪器 (如 GC/MSD) 得到的数据。随着科技的不断提升, 该传统方法无法做到对高分辨率精确质量仪器 (如 Agilent 7200 系列 GC/Q-TOF 系统) 的数据价值进行充分挖掘。在对复杂的数据类型进行近似处理时, 处理速度、组分检测能力和重复测定重现性都会受到影响。色谱详细信息的丰富性以及来自高分辨率精确质量数据测试的各种谱图信息限制了基于 EIC 的组分检测性能。为更好地利用 GC/Q-TOF 生成的高分辨率精确质量数据, 安捷伦开发出一种用于特征检测和解卷积的新型信号处理算法。

Agilent SureMass 是一种新型化学特征检测算法，专门用于处理高分辨率质谱分析数据，例如由 7200 系列 GC/Q-TOF 系统生成的数据。这种先进的技术能够以连续的三维阵列（保留时间、 $m/z$  和丰度）而非以一组 EIC 来处理全谱高分辨率 TOF MS 分析数据。SureMass 基于持续的三维质谱脊线的概念及相关化学特征，旨在适应可能在色谱时间尺度上发生变化的质谱检测特性。这是该算法的一个重要方面，正如传统（标称质量）解卷积算法结合了与扫描质谱仪相关的质谱偏移的丰度校正一样，SureMass 具有适应质谱测量特性（ $m/z$  值、强度）随实验条件变化而改变的能力。通过在设计信号处理算法中考虑实际的仪器性能特性，与之前可用的技术相比，可获得改善的分析结果。

TOF MS 的性能特性对采集的数据具有确定的影响。从三个维度查看整个 TOF 数据文件时，这种影响变得很明显。沿着持续脊线信号的顶点可以看到化学特征。这些脊线沿时间域存在，并在组分洗脱过程中向上延伸形成特征。脊线来源于低强度化学信号。显然，这些脊线在  $m/z$  域中并不一定呈静态。由于实验条件在整个数据采集过程中发生变化，因此测得的  $m/z$  值可能具有可追踪的变化。SureMass 能够按照这些可追踪的模式提取脊线。

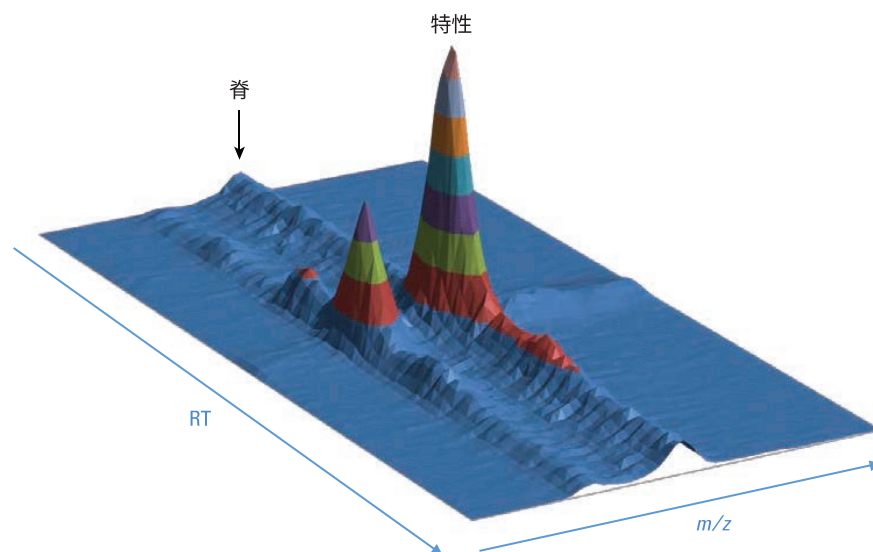


图 2. Agilent SureMass 三维信号处理

## 提取 SureMass 色谱图 (ESM)

质谱脊线的动态特性还适用于它们的相关化学特征。为充分利用这一特性，SureMass 通过在其洗脱曲线中结合质量分配的变化，来执行化学特征的可变信号提取。通过这种方式，可以生成提取 SureMass 色谱图或 ESM。ESM 对应于确定的可变脊线及其相关化学特征。它不一定像使用 EIC 进行传统的解卷积那样采用静态质量范围提取。ESM 是一种从三维信号中提取的检出化学特征的二维色谱图示。

ESM 中分配的  $m/z$  被计算为由信号处理表征为低于经验确定丰度阈值贡献光谱的  $m/z$  值的丰度加权平均值。该谱图最大程度减小了由实验条件变化引起的  $m/z$  分配差异，且无论色谱复杂性和信号强度如何，均可提高  $m/z$  准确度。

## 线性动态范围

除能够准确提取化学组分信号之外，SureMass 可以在实验条件遮蔽真实的峰丰度等情况下内推信号强度。GC/MS 分析通常采用 5-20 Hz 的谱图采集速率。选用的实际速率将取决于色谱峰宽，通常选择为使整个色谱峰上存在约 10 至 20 个数据点的速率，以实现准确表征。该采集速率在峰值上升沿和下降沿产生数据点，其具有足够高的频率，能够在峰洗脱曲线的这些部分建立峰曲线，即使这些区段之间的真实峰丰度被遮蔽时也不例外。然后，采用经验得到的共流出峰模型对这些上升和下降区段进行拟合，即使在极端的色谱丰度下也可提供完整的色谱峰曲线和强度表征结果。当经验条件导致 ESM 信号超出预定的丰度水平时，SureMass 将采用这项技术。因此，与传统信号提取技术相比，这项技术扩展了分析的线性动态范围。利用 SureMass 通常能够使线性动态范围扩展一个数量级以上。通过改善谱库匹配，这种增强功能可提升定量准确度并提高鉴定可靠性。

## 灵敏度和精密度

传统的解卷积技术用于在存在显著的复杂背景情况下检测并提取低强度信号。SureMass 通过遵循通常被标准 EIC 提取遮蔽的低丰度水平脊洗脱曲线，进一步提高了对高分辨率数据的解卷积能力。这些低强度脊线及相关特征提取使痕量组分获得了更高的灵敏度。此外，与传统 EIC 相比，利用该方法获得的 ESM 信号噪音较少，可得到更清晰的提取色谱图。在较低的信号强度下，这一信号质量水平提高了重复进样的重现性（峰面积/峰高 %RSD）。

## 处理时间

SureMass 相对于传统信号处理技术的另一项进步在于大大减少了所需的计算时间。通过将丰富的质谱和色谱数据提取至检出脊线和特征中包含的相关信息，使用 SureMass 处理数据文件的效率比标称质量解卷积算法高得多。对于同等的分析，处理速度能够比早期技术加快 100 倍左右。由于 SureMass 可用作采集后技术，因此可以使用该算法对之前采集的 GC/Q-TOF 数据集进行分析。

## 结论

借助其创新的信号处理技术，Agilent SureMass 能够在更宽的动态范围内以更高的灵敏度和准确度以及更高的重现性检测并提取组分特征，且处理时间短于以前可用于 Agilent 7200 系列 GC/Q-TOF 的所有技术。利用这种新的功能，由 GC/Q-TOF 产生的信息丰富的高分辨率质谱分析数据的分析价值可以在定量、定性和检索工作流程中达到前所未有的水平。对于 7200 系列 GC/Q-TOF 用户，SureMass 可用于 Agilent MassHunter 定量分析软件 B.08.00 和未知物分析软件 B.08.00 中，作为各种应用程序中简单的数据分析方法参数。

查找当地的安捷伦客户中心：

**[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)**

免费专线：

**800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)**

联系我们：

**[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)**

在线询价：

**[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)**

**[www.agilent.com](http://www.agilent.com)**

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本资料中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2017

2017 年 5 月 1 日，中国出版

5991-8048CHCN



**Agilent Technologies**