

Orbitrap Astral 四极杆静电场轨道阱非对称轨道无损检测器 超高分辨质谱仪技术白皮书

一. 应用范围

1. 适用于蛋白质组学: 蛋白质组学研究中的单细胞蛋白质组学、蛋白质鉴定、翻译后修饰、生物大分子相互作用、多肽和蛋白质的定量分析。
2. 适用于新药研发, 药物杂质鉴定、代谢物鉴定、研究与疾病有关的标记物和代谢组学、脂质组学、小分子和生物大分子的相互作用、天然产物结构分析等领域。

二. 设备名称: Orbitrap Astral 超高分辨质谱仪

1. 工作条件

- 1.1 电源: 230V±10%, AC(交流), 50/60Hz
- 1.2 环境温度: 18-27°C (最优: 18~21°C, 最大温度波动为 0.5 °C/10 min)
- 1.3 相对湿度: 20-80%, 且无冷凝和无腐蚀性环境
- 1.4 气体需求: 高纯氮气, 最大消耗量不大于 20 L/min

2. 质谱部分:

2.1 离子源部分

- 2.1.1 同时提供 ESI 离子源和纳升级 Nano 离子源, 集成式气路电路设计, 安装离子源时即可实现气路电路连接, 自动识别, 无需进行额外操作;
- 2.1.2 喷针采用 60 度喷雾设计, 前后, 左右, 上下可调, 正对废液出口。雾化后, 废弃物直接进入废液出口, 确保离子源腔体洁净;
- 2.1.3 具有雾化气和辅助雾化气, 进一步提高雾化效率和稳定性, 具有强的雾化效果抗污染能力;
- 2.1.4 可加热 ESI 源, 离子源加热温度最高可达 550°C, 不分流的情况下采用纯水作为溶剂, 流速为 1µl-1000µl/min, 可选配 APCI 源, 流速为 50µl-1000µl/min;
- 2.1.5 全自动注射泵实现质谱直接进样, 自动调谐和校正, 可通过软件自动切换模式;
- 2.1.6 质谱配置软件具备实时监控并反馈喷雾稳定性功能;
- 2.1.7 离子源腔体具有观察窗口, 可以直接观察喷雾效果以及离子源腔体洁净程度;
- 2.1.8 配备离子迁移谱元件

2.2 离子传输系统

- *2.2.1 离子传输系统必须配有离子传输管设计, 保护分子涡轮泵, 减少真空负担;

2.2.2 大口径高容量离子传输管(HCTT)，确保更多离子进入质谱系统，得到更好的信号响应；

2.2.3 离子传输可加热，最高温度 $\geq 400^{\circ}\text{C}$ ，进一步提高去溶剂效果和确保离子传输系统抗污染能力；

*2.2.4 具有真空隔断阀设计，在移去、清洗离子传输部件时，不需破坏真空，待机时不需要消耗氮气；

2.2.5 电动离子漏斗(EDIF)：有效捕获离子并聚焦，提高传输效率，减少离子损失，独立一体化设计，采用不锈钢材质，拆卸清洗方便；

*2.2.6 带轴向场和过滤作用的双弯曲几何设计的主动离子束传输组件：阻挡中性粒子和高速分子团，保持离子传输通道的干净，减少噪音，提高灵敏度；

2.3 质量分析器采用四极杆、超高分辨质量分析器和高分辨高速扫描质量分析器组成；

质量分析器部分 Orbitrap：

2.3.1 Orbitrap 质量范围 40-6000 m/z；

*2.3.2 分辨率：最大 480000 ($m/z \leq 200$)； ≥ 4 档可调；

2.3.3 双曲面分段四极杆，分辨率 $\leq 0.4 \text{ Da}$ ；可选择隔离窗口宽度 0.4 Da-1200 Da，MS/MS 母离子选择质量范围 40-2500 m/z；

2.3.4 谱内动态范围： $> 5,000$ ；

2.3.5 Orbitrap 采集速率：最高 40 Hz (分辨率设置为 7500 @ m/z 200)；

*2.3.6 质量准确度：外标法 $\leq 3 \text{ ppm RMS}$ ；内标法 $\leq 1 \text{ ppm RMS}$ ；

2.3.7 灵敏度

2.3.7.1 MS/MS 灵敏度：柱上 50 fg 利血平进样，S/N 100:1；

2.3.7.2 选择离子扫描 SIM 灵敏度：柱上 50 fg 利血平进样，S/N 150:1；

2.3.8 质量轴稳定性：外标校正一次后，连续 ≥ 24 小时不再校正质量轴，在 120000 分辨率下 100fg 利血平，母离子 609 质量精度 $\leq 3 \text{ ppm}$ ；

2.3.9 扫描模式

2.3.9.1 高分辨全扫描 MS 和 MS/MS；

2.3.9.2 高分辨选择离子扫描；

2.3.9.3 高分辨数据依赖离子扫描；

2.3.9.4 高分辨数据独立扫描 (DIA)；

2.3.9.5 高分辨平行反应监测离子扫描；

2.3.9.6 靶向 MS/MS 扫描；

*2.3.10 检测器: FT 无损检测；

2.4 质量分析器部分 Astral：

2.4.1 Astral 质量范围: 40-6000 m/z;

*2.4.2 分辨率: 在 524 m/z 下可达 80,000 FWHM;

2.4.3 采集速度: MS/MS 采集速度最高达 200 Hz, 最大离子注入时间设置为 3 ms;

2.4.4 质量精度: 使用 FlexMix 校正液测量, 外标校正 24 小时内 <5 ppm RMS;

2.4.5 动态范围: 单张 Astral 质谱谱图内>1,000。

2.4.6 蛋白鉴定深度: HeLa 细胞一次进样 2 ug, 蛋白鉴定数≥12000 个;

2.4.7 蛋白鉴定灵敏度: HeLa 细胞一次进样 250 pg, 蛋白鉴定数≥5300 个;

2.5 FAIMS Pro Duo 接口 (高场非对称波形离子迁移谱)

能去除干扰物的同时提高目标物的传输效率, 提高分析选择性, 兼容 100 nL/min 至 1 mL/min 的流动相流速;

3. 纳升超高效液相色谱仪

3.1 纳流泵 (Binary Pump N, 二元泵 N)

3.1.1 泵型及工作原理: 带主动流量控制的高压二元梯度泵;

3.1.2 压力上限: 150 MPa, (1500 bar, 21,750 psi); (注意:可用的总柱压取决于流动相粘度和流速 (参见手册))

3.1.3 可设定流速范围: 1 nL/min - 100 µL/min, 1 nL 增量;

3.1.4 建议流速范围: 100 nL/min - 100 µL/min;

3.1.5 泵溶剂通道: 2 个 (每个泵一个); 预校准: 100% 乙腈、100% 水、80/20 乙腈/水 (% v/v)、90/10 甲醇/水 (% v/v); (注意: 有指导的定制溶剂校准程序可用于校准其他溶剂)

3.1.6 泵对系统梯度的延迟体积: <25 nL;

3.1.7 生物兼容性: 兼容;

3.1.8 梯度延迟体积: <0.5 µL

3.1.9 pH 耐受范围: 2-10

3.1.10 用户界面 (Vanquish 系统控制器和 Vanquish 显示器): 系统监控; 直接系统控制; 在系统中诊断和故障排除; 远程访问选项 (取决于现场 IT 基础设施);

3.1.11 安全特性: 内置泄漏检测和安全泄漏处理: 超压监测、温度监测;

3.1.12 环境操作条件: 温度 5 - 35 ° C; 20-80% 相对湿度 (非冷凝); 最大限度海拔 2000 m;

3.2 自动进样器 (Split Sampler NT)

3.2.1 进样体积范围: 标配: 0.01 - 25 µL, min 步长 0.01 µL ;

3.2.2 自动进样器控温: 4 - 40 ° C

3.2.3 样品盘温度稳定性: ±1 ° C;

3.2.4 样品盘和容量：1.5ml 或 2ml 样品瓶 216 个；可支持 96 孔板和 384 孔板；

3.2.5 自动进样器的工作原理：Split-loop injection；

3.2.6 自动进样器溶液：4 个洗针液：内外针洗，强弱各一；

3.2.7 瓶底检测技术：有，带有样品瓶底部检测和推荐样品瓶，可以吸取 3 μ L 中的 2.5 μ L；

3.2.9 SmartInject 技术：有，带主动压力监测；

3.2.10 进样方式：带 loop 环内联的直接进样；

4. 数据处理系统

4.1 主机 CPU：8 核以上处理器；

4.2 内存 \geq 32GB；

4.3 硬盘:固态硬盘 \geq 512Gb；机械硬盘 \geq 4TB；

4.4 软件：具备数据采集、数据处理、定性定量分析、建立数据库、谱库检索功能