

## Orbitrap Exploris 120 四极杆静电场轨道阱

### 超高分辨质谱仪技术白皮书

#### 一. 应用范围

主要应用于代谢物鉴定、研究与疾病有关的标记物和代谢组学、脂质组学、新药研发，药物杂质鉴定、天然产物结构分析、空间代谢组学等领域。实现完全未知有机物准确性及高灵敏度定量分析。

#### 二. 设备型号: Orbitrap Exploris 120 四极杆静电场轨道阱超高分辨质谱仪技术参数

##### 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)
- 1.3 相对湿度: 20-80%
- 1.4 气体需求: 源区氮气 (>99%), 最大消耗量不大于 20L/min; 高纯氮 (>99.999%), 用于二级质谱碰撞气和 Easy-IC。

##### 2. 高分辨质谱部分:

###### 2.1 离子源:

\*2.1.1 独立的可加热电喷雾离子源 (ESI 源), 集成式气路和电路设计, 安装离子源时即可实现气路和电路自动连接识别, 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, 上下三位可调。底部设计有废液出口, 雾化后废产物直接进入废液出口, 确保离子源腔体洁净, 保证离子源耐用性;

2.1.3 具有雾化气、辅助雾化气和吹扫气设计, 进一步提高雾化效率和喷雾稳定性且具有良好的抗污染能力;

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-1,000µl/min;

2.1.5 具有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 具有 Easy-IC 自动内标校正源, 无需外接校正液可实现自动实时校正质量轴;

2.1.9 配备 DESI 成像离子源;

2.1.10 成像离子源空间分辨率≤10µm;

2.1.11 配备离子迁移谱元件

###### 2.2 离子传输系统

\*2.2.1 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 具有真空隔断阀设计，在移去、安装离子传输管时，无需破坏真空，操作快速便捷，不影响实验进程；

2.2.3 离子传输可加热，最高温度 $\geq 400$  °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 离子传输系统具有进行性间隔叠加环式离子透镜设计，能够捕获并有效聚焦离子流，同时尽量避免源内裂解。电极之间变化的间距可实现更好的泵送效率和系统耐用性；

\*2.2.5 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，可以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，提高灵敏度和仪器耐用性；

2.2.6 分段式双曲面四极杆，分辨率可到 0.4Da；隔离窗口宽度从 0.4 Da-1200 Da 范围内可调；

\*2.2.7 多极杆离子碰撞室，能够高效捕集离子并对离子进行碎裂，两种碰撞能量模式（NCE 和 CE）可选；

### **2.3 质量分析器：**

\*2.3.1 仪器分辨率：120,000 ( $m/z \leq 200$ )； $\geq 4$  档可调

2.3.2 专利技术的静电场轨道阱质量分析器，采用四极杆和高分辨质量分析器组成（四极杆分辨率 $\leq 0.4$  Da），质量范围 40-3,000  $m/z$

2.3.3 质谱采集速率：最高 22Hz；分辨率 120,000 FWHM 时，不低于 3 Hz；

\*2.3.4 正负扫描模式切换速度：分辨率 60,000 FWHM 条件下，正负切换时间不超过 0.7 s（相同扫描模式相邻两个扫描点的间隔不超过 0.7 s），正负扫描模式的扫描速度均可达到 1.4Hz；

\*2.3.5 在进行快速正负切换模式下连续运行 2 小时，质量轴的稳定性 $\leq 3$ ppm；即用 1 ng/mL 氯霉素和利血平混合溶液作为测试液，蠕动泵连续进样 2 小时，快速正负切换扫描同时监测氯霉素和利血平分子离子峰，两者质量偏差均不超过 3ppm；

#### 2.3.6 灵敏度

2.3.6.1 MS/MS 灵敏度：200 fg 利血平进样，S/N 100:1；

2.3.6.2 SIM 灵敏度：柱上 50 fg 利血平进样，S/N $\geq 150$ :1；

\*2.3.6.3 提高仪器分辨率时，设备的灵敏度基本保持不降低；采用利血平标品 100fg 进样，ESI+模式下，分辨率分别为 60,000 和 120,000 时，其他仪器参数维持不变的前提下，利血平分子离子峰的峰面积值相差不超过 10%；

#### 2.3.7 扫描模式

2.3.7.1 高分辨全扫描 MS 和 MS/MS

2.3.7.2 高分辨选择离子扫描

2.3.7.3 高分辨全子离子碰撞碎裂扫描 AIF

2.3.7.4 高分辨正负离子切换扫描

2.3.7.5 高分辨数据依赖子离子扫描

2.3.7.6 高分辨数据独立扫描 DIA

2.3.7.7 靶向 MS/MS 扫描

\*2.3.8 检测器：无损检测器；质谱如果采用微通道板（MCP）或电子倍增器等消耗型检测器，需额外提供相应备用检测器至少 10 个。

2.3.9 质量轴稳定性：外标校正一次后，连续 $\geq 48$  小时不再校正质量轴，在 120000 分辨率下 100fg 利血平，母粒子 609 质量精度 $\leq 3$ ppm；

### 3. 超高效液相色谱仪（二元梯度超高压快速泵、自动进样器、柱温箱、紫外检测器）

3.1 二元梯度超高压快速泵参数

3.1.1 操作原理 串联双柱塞

3.1.2 流速范围 0.001-8 mL/min，增量为 1  $\mu$ L/min

3.1.3 压力范围 2-103 MPa，（20 - 1034 bar, 290 - 15,000 psi ），压力上限 $\geq 15,000$  psi

3.1.4 流量准确度 $\pm 0.1\%$

3.1.5 流量精度 $< 0.05\%$  RSD 或  $< 0.01$  min SD，以较大者为准

3.1.6 例准确度满量程的  $\pm 0.2\%$

3.1.7 比例精度 $< 0.15\%$  SD

3.1.8 溶剂通道数 2\*3

3.1.9 溶剂脱气内置式，6 通道

3.1.10 梯度泵延迟体积： $\leq 25$   $\mu$ L

3.2 自动进样器参数

3.2.1 操作原理分流进样，具有泄漏传感器，有样品盘和样品自动识别功能，全程监控与记录仪器状态；

3.2.2 压力范围 2-103 MPa，（20 - 1034 bar, 290 - 15,000 psi ），压力上限 $\geq 15,000$  psi

3.2.3 进样体积范围：0.01~100  $\mu$ L，步长 $\leq 0.01$   $\mu$ L

3.2.4 进样量准确度通常对 10  $\mu$ L 水为  $\pm 0.5\%$

3.2.5 进样量精度 对 1  $\mu$ L（咖啡因水溶液）， $< 0.25\%$  峰面积 RSD

3.2.6 进样线性  $r > 0.99999$ （咖啡因水溶液）

3.2.7 进样周期时间 $< 8$  s；取决于可设置的进样参数，与样品位置无关

3.2.8 残留（UV）使用咖啡因时  $< 0.0004\%$ （典型）

3.2.9 洗针液（外部） 1 种溶剂，连续浸没清洗

3.2.10 自动进样器控温：4~40  $^{\circ}$ C

3.2.11 样品温度准确度  $-2^{\circ}$ C /  $+4^{\circ}$ C

3.2.12 样品温度稳定性  $\pm 1^{\circ}$ C

3.2.13 样品盘和容量: 2 mL 样品位 216 个

3.3 柱温箱参数

3.3.1 操作原理静止空气和强制空气, 柱温箱配有气漏、温度在线检测

3.3.2 控温范围 5~120 °C, 增量为 0.1°C

3.3.3 温度稳定性  $\pm 0.05^{\circ}\text{C}$

3.3.4 温度精确度  $\pm 0.5^{\circ}\text{C}$

3.3.5 耐压范围 5-151 MPa, (50-1517 bar, 700-22,000 psi)

#### 4. 数据处理系统

4.1 主机 CPU: 8 核以上处理器;

4.2 内存  $\geq 32\text{GB}$ ;

4.3 硬盘:固态硬盘  $\geq 512\text{Gb}$ ; 机械硬盘  $\geq 4\text{TB}$ ;

4.4 仪器控制和数据处理系统软件: 具备代谢组学数据全流程分析功能, 能实现样本间差异蛋白筛选、直接关联代谢物 MS 及 MSMS 数据库与谱库鉴定等分析需求。