

# 超高分辨质谱仪技术白皮书

## 1. 主要用途

用于食品中农兽残，环境污染物，非法添加药物、营养成分等快速筛查确证以及定量检测分析工作。用于蛋白质组学：蛋白质组学研究中的蛋白质鉴定、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. 特殊资质要求

无

## 3. 主要技术参数

### 3.1 液相色谱部分

★3.1.1 配置 2 套独立的液相色谱系统，一套适用于农兽药和生物毒素分析小分子物质高效液相色谱系统；一套适用于大分子多肽和蛋白质的定量分析纳升液相色谱系统。两套系统能实现自动切换；每套液相色谱系统包括独立的系统输液单元、自动进样器、柱温箱、真空脱气机及流动相瓶及托盘管路系统等。纳升液相色谱系统、超高效液相色谱系统、高分辨质谱系统和离子源均为同一生产厂商（赛默飞）的配套设备。

★3.1.2 系统输液单元 2 套：第一套超高效液相和第二套纳升液相均为超高压二元高压泵梯度系统。

▲3.1.3 输液泵系统：第一套超高效液相的每个泵能独立选择 3 个流路之一，第二套纳升液相的每个泵能独立选择 1 个流路之一。

第一套超高效液相的每个泵能独立选择 3 个流路，两个泵（即二元泵）可选择 6 个溶剂流路



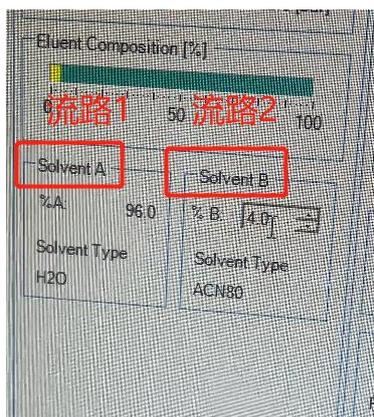
(该图来自 Q Exactive Plus 软件截图，证明超高效液相的每个泵能独立选择 3 个流路之一)  
第二套纳升液相的每个泵能独立选择 1 个流路之一

### 泵溶剂通道

2 个（每个泵块一个）：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



(该图来自 Q Exactive Plus 软件截图，证明纳升液相的每个泵能独立选择 1 个流路之一)

★3.1.4 超高效液相色谱流量范围：0.001 ~ 8 mL/min (最低流速 ≤ 0.001 mL/min, 最高流速 ≥ 8 mL/min), 增量为 1 μL/min; 纳升液相色谱流量范围：1 nL/min ~ 100 μL/min, (最低流速 ≤ 1 nL/min, 最高流速 ≥ 100 μL/min), 增量为 1 nL/min。

超高效液相色谱流量范围：

产品规格				
	二元泵 H	二元泵 F	二元泵 C	等度泵 C
工作原理	并联双柱塞泵，具有独立的柱塞驱动和可变冲程体积		串联双柱塞泵	
流量范围 (可设定) (settable)	0.001-5 mL/min, 增量为 1 μL/min	0.001-8 mL/min, 增量为 1 μL/min	0.001-10 mL/min, 增量为 1 μL/min	

纳升液相色谱流量范围：

参数规格

Vanquish Neo UHPLC 系统— 二元泵 N, 自动进样器 NT, 溶剂架, Vanquish 用户界面(VUI), 系统基座和抽屉, 随机附件包	
可设定流速范围	1 nL/min-100 μL/min, 1 nL 增量

▲3.1.5 超高效液相色谱最大耐压：103MPa; 纳升液相色谱最大耐压：150Mpa

超高效液相色谱最大耐压：103MPa

产品规格				
	二元泵 H	二元泵 F	二元泵 C	等度泵 C
工作原理	并联双柱塞泵，具有独立的柱塞驱动和可变冲程体积		串联双柱塞泵	
流量范围 (可设定) (settable)	0.001-5 mL/min, 增量为 1 μL/min	0.001-8 mL/min, 增量为 1 μL/min	0.001-10 mL/min, 增量为 1 μL/min	
压力范围	5-151 MPa, (50-1517 bar, 700-22,000 psi)	2-103 MPa (20-1034 bar, 290-15,000 psi) 流速高于 5 mL/min 时，压力范围会线性下降至 80 MPa (800 bar, 11,600 psi)	2-70 MPa (20-700 bar, 290 - 10100 psi) 流速高于 5 mL/min 时，压力范围会线性下降至 30 MPa (300 bar, 4350 psi)	

纳升液相色谱最大耐压：150Mpa

## 参数规格

<b>Vanquish Neo UHPLC 系统</b>	
二元泵 N, 自动进样器 NT, 溶剂架, Vanquish 用户界面(VUI), 系统基座和抽屉, 随机附件包	
可设定流速范围	1 nL/min–100 µL/min, 1 nL 增量
建议流速范围	100 nL/min–100 µL/min
压力范围	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)	

### ▲3.1.6 超高效液相色谱流量精度 : $\leq 0.05\%$ RSD

产品规格				
	二元泵 H	二元泵 F	二元泵 C	等度泵 C
工作原理	并联双柱塞泵, 具有独立的柱塞驱动和可变冲程体积		串联双柱塞泵	
流量范围 (可设定) (settable)	0.001–5 mL/min, 增量为 1 µL/min	0.001–8 mL/min, 增量为 1 µL/min	0.001–10 mL/min, 增量为 1 µL/min	
压力范围	5–151 MPa, (50–1517 bar, 700–22,000 psi)	2–103 MPa (20–1034 bar, 290–15,000 psi) 流速高于 5 mL/min 时, 压力范围会线性下降至 80 MPa (800 bar, 11,600 psi)	2–70 MPa (20–700 bar, 290 - 10100 psi) 流速高于 5 mL/min 时, 压力范围会线性下降至 30 MPa (300 bar, 4350 psi)	
压缩性补偿	全自动, 与流动相组成无关			
流量准确度	$\pm 0.1\%$			
流量精度	$< 0.05\%$ RSD 或 $< 0.01$ min SD, 以较大者为准			

3.1.7 超高效液相色谱流量准确度:  $\leq \pm 0.1\%$

3.1.8 超高效液相色谱溶剂通道数和在线真空脱气溶剂数量: 6 通道; 纳升液相色谱溶剂通道数和在线真空脱气溶剂数量: 2 通道

3.1.9 超高效液相色谱流量混合精确度:  $\leq 0.15\%$  RSD

3.1.10 柱温箱控温范围 (每一套液相系统):  $4 \sim 40^\circ\text{C}$  (最低温度  $\leq 4^\circ\text{C}$ , 最高温度  $\geq 40^\circ\text{C}$ ); 控温精度:  $\leq 0.5^\circ\text{C}$

3.1.11 进样量范围  $0.01 \sim 25 \mu\text{L}$  (最低进样量  $\leq 0.01 \mu\text{L}$ , 最高进样量  $\geq 25 \mu\text{L}$ ), 最小步进为  $0.01 \mu\text{L}$

3.1.12 样品盘: 216 位, 满足 1.5mL 和 2mL 进样瓶需求

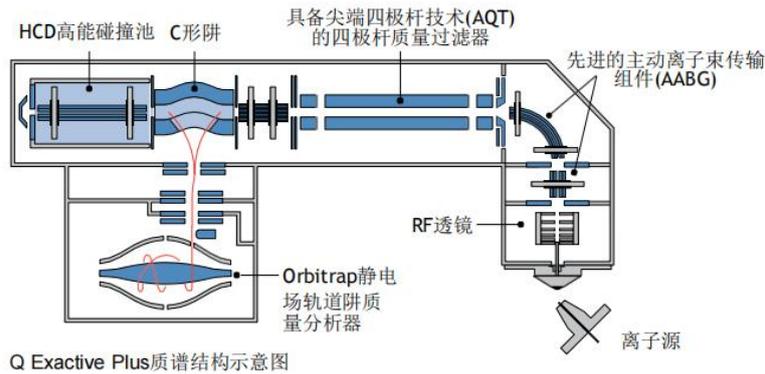
3.1.14 进样量准确度:  $\leq 0.5\%$  (以进样量为  $10 \mu\text{L}$  的纯水)

3.1.15 进样线性:  $r > 0.99999$  (以咖啡因水溶液)

3.1.16 自动进样器可实现样品进样温度控制, 其温度控制范围:  $5 \sim 40^\circ\text{C}$  (最低温度  $\leq 5^\circ\text{C}$ , 最高温度  $\geq 40^\circ\text{C}$ ); 自动进样器温度稳定性:  $\leq 1^\circ\text{C}$

## 3.2 高分辨质谱系统

★3.2.1 质谱类型: 高分辨率质谱仪, 采用二级质量分析器串联结构, 采用四极杆与静电场轨道阱串联。可一次进样同时采集高分辨一级 MS、二级 MS/MS



Q Exactive Plus质谱结构示意图

运行模式

- 具有高分辨率精确质量检测的全扫描，一次进样同时采集高分辨一级MS、二级MS/MS
- 具有高分辨率精确质量检测的选择离子检测(SIM)
- 改进筛选和定量可信度的平行反应监测(PRM)
- 具有高分辨率精确质量检测的HCD全离子碎裂(AIF)
- 所有离子的源内裂解
- 色谱时间维度的正/负极性切换，正负离子切换速度：小于1秒（即每秒可获得正负离子谱图各一张），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 $\leq 3\text{ppm}$ ；即用0.5ppb氯霉素和0.5ppb克伦特罗混合溶液作为测试液，蠕动泵连续进样2小时，正负快速扫描同时监测氯霉素和克伦特罗分子离子峰，两者质量偏差小于3ppm



3.2.2 离子源：独立的可加热电喷雾离子源（ESI 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

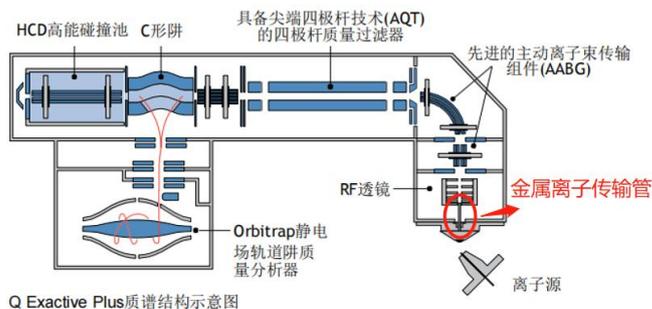
3.2.3 喷针采用 60 度喷雾设计，前后，左右，上下可调，正对废液出口。雾化后，废产物直接进入废液出口，确保离子源腔体洁净

3.2.4 具有雾化和辅助雾化气，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

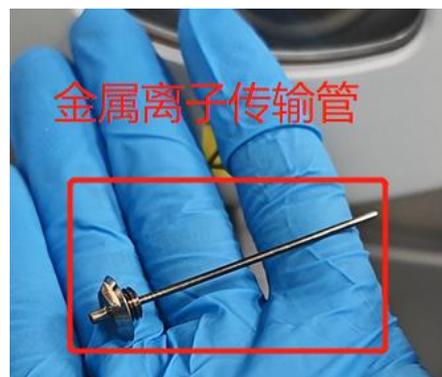
3.2.5 配备 ESI 离子源，ESI 源可容纳流量： $\geq 1\text{mL}/\text{min}$ （以纯水作溶剂，不分流方式）

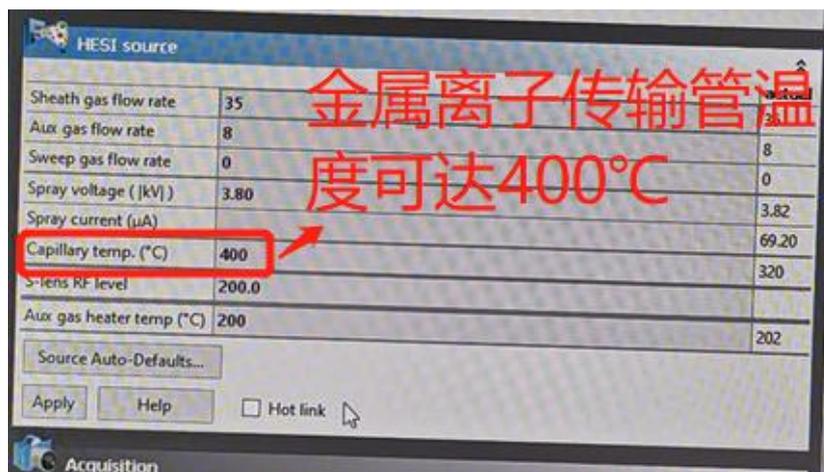
3.2.6 ESI 离子源加热温度：600°C

▲3.2.7 离子传输系统：采用金属离子传输管设计，以保护分子涡轮泵，减少真空负担。离子传输管能独立加热并实现控温，最高温度 400°C



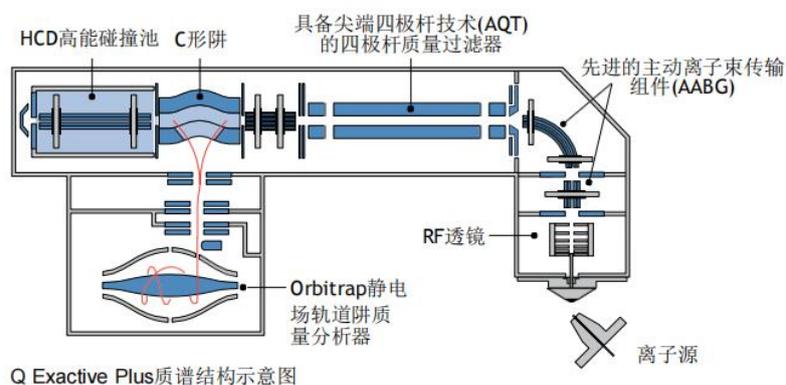
Q Exactive Plus质谱结构示意图





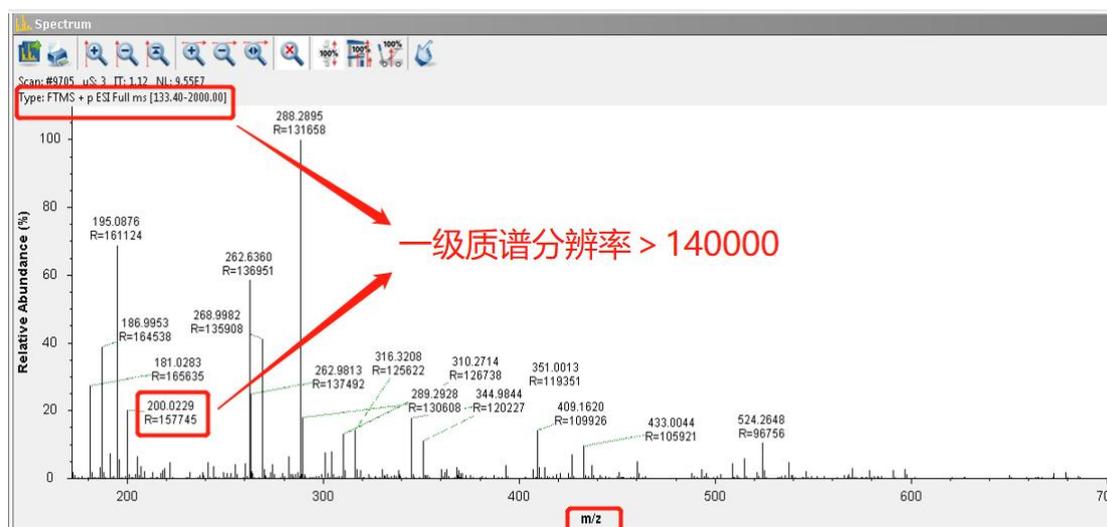
3.2.8 具有真空隔断阀设计，在移去、清洗离子传输部件时，不需破坏真空，待机时不需要消耗氮气

★3.2.9 质量分析器：采用四极杆与静电场轨道阱串联的组合



3.2.10 质量范围：50 ~ 6000 m/z (最低质荷比 ≤ 50 m/z, 最高质荷比 ≥ 6000 m/z)

★3.2.11 仪器最高分辨率：≥ 140,000 FWHM (m/z ≤ 200), 且可分 4 档次可调

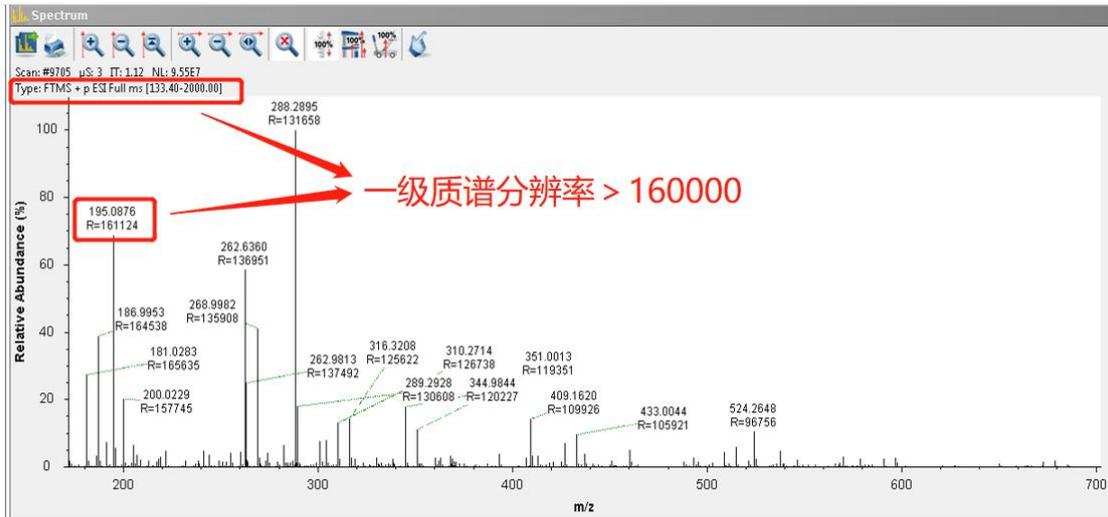


(该图来自 Q Exactive Plus 软件截图，显示 R > 140000 FWHM @ m/z ≤ 200)



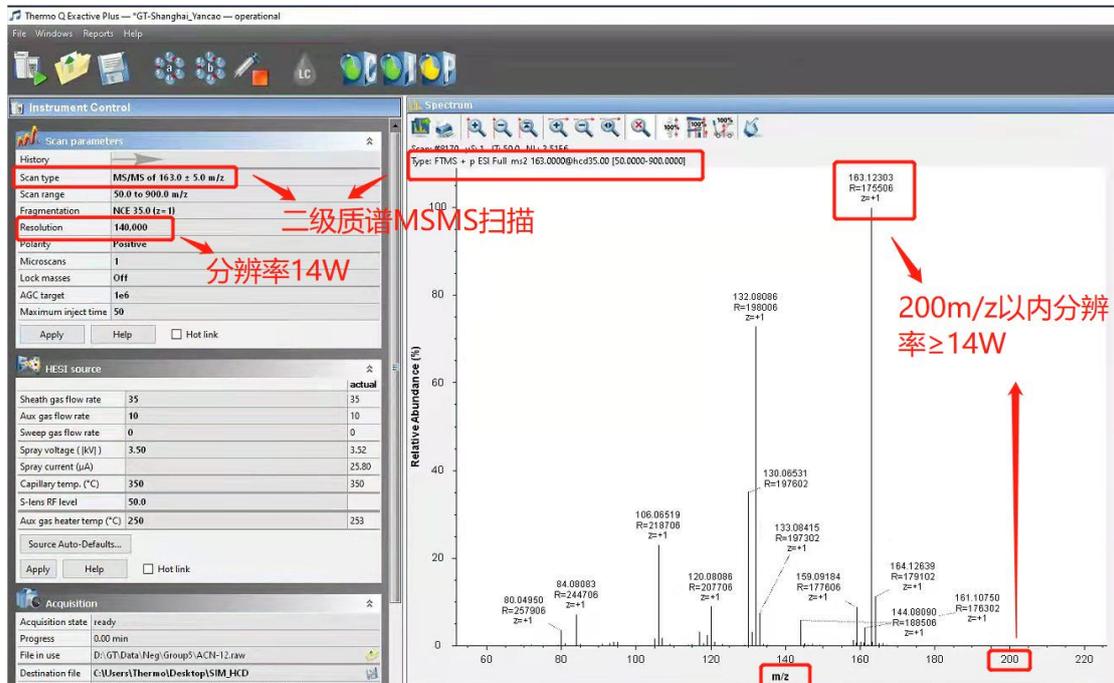
(该图来自 Q Exactive Plus 软件截图，显示分辨率四档可调)

▲3.2.12 一级质谱分辨率可达到 140,000 FWHM 档位 (次) ( $m/z \leq 200$ )



(该图来自 Q Exactive Plus 软件截图，显示  $R \geq 140000$  FWHM@ $m/z \leq 200$ )

▲3.2.13 二级质谱分辨率可达到 140,000 FWHM 档位 (次) ( $m/z \leq 200$ )



(该图来自 Q Exactive Plus 软件截图，显示  $R \geq 140000$  FWHM@ $m/z \leq 200$ )

3.2.14 前级四极杆母离子选择：前级四极杆为金属钼共轭双曲面四极杆，高分辨母离子选择 $\leq 0.4\text{Da}$

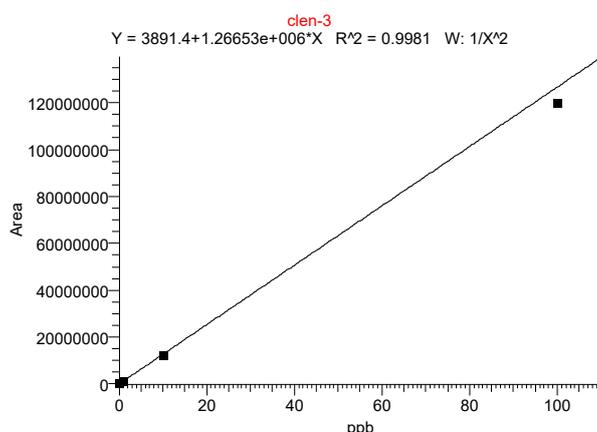
▲3.2.15 线性范围：分辨率设定为不小于 70000 FWHM 时，以克伦特罗为目标物，线性范围 $\geq 10^5$

标准品：克伦特罗（粉末），用纯甲醇溶解为 1000ppm 储备液，20:80 水/甲醇溶剂稀释为 1ppt~100ppb 浓度范围内待用。

化合物	分子式	电离模式	M/Z
克伦特罗	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	M+H <sup>+</sup>	277.08689

### 克伦特罗线性范围

配制 1ppt、10 ppt、100 ppt、1 ppb、10 ppb、100 ppb 6 个浓度点做标准曲线，线性相关系数为 0.9930，各标准点到标准曲线偏差均小于 10%，线性范围达到 e5



	File Name	Sample Type	Area	Specified Amount	Calculated Amount	% Diff	Level	Units	RT
1	clen-1ppt-2	Standard	5162	0.001	0.001	0.34	1	ppb	2.95
2	CLEN-10PPT1	Standard	16054	0.010	0.010	-3.97	2	ppb	2.99
3	CLEN-100PPT	Standard	137294	0.100	0.105	5.33	3	ppb	3.00
4	CLEN-1-0PPB	Standard	1327481	1.000	1.045	4.51	4	ppb	2.99
5	CLEN-10PPB	Standard	12536282	10.000	9.895	-1.05	5	ppb	3.00
6	CLEN-100PPB-1	Standard	120122146	100.000	94.841	-5.16	6	ppb	3.00

★3.2.16 高分辨质谱采集速率：最高 12Hz；分辨率 $\geq 70000$  FWHM 时，不少于 3 张/秒

### 性能特点

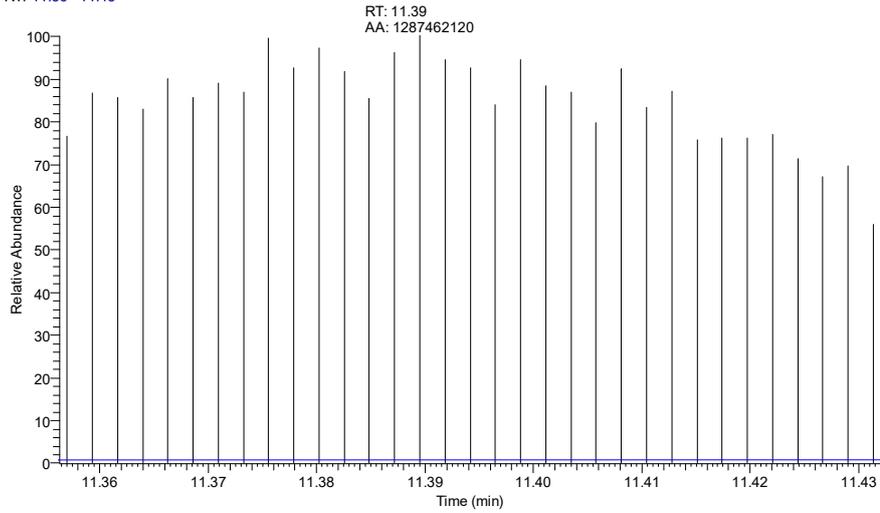
分辨率 140,000 @  $m/z$  200

选配 280,000 @  $m/z$  200

质量范围 50 - 6,000  $m/z$

采集速度\* 最高可达 12 Hz, 分辨率 $\geq 70000$ 时，不少于 3 张/秒

RT: 11.36 - 11.43

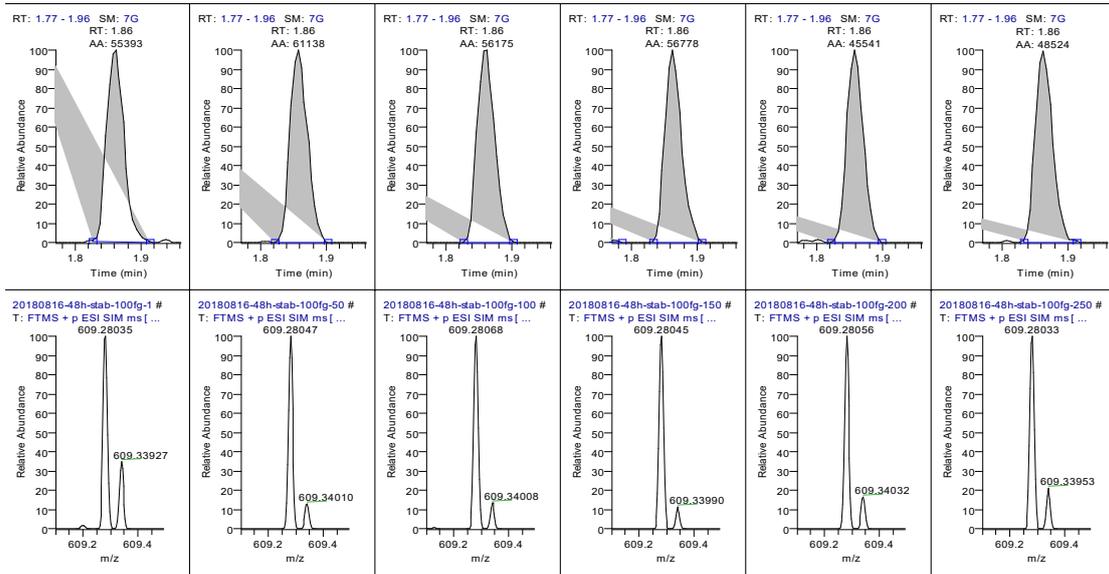


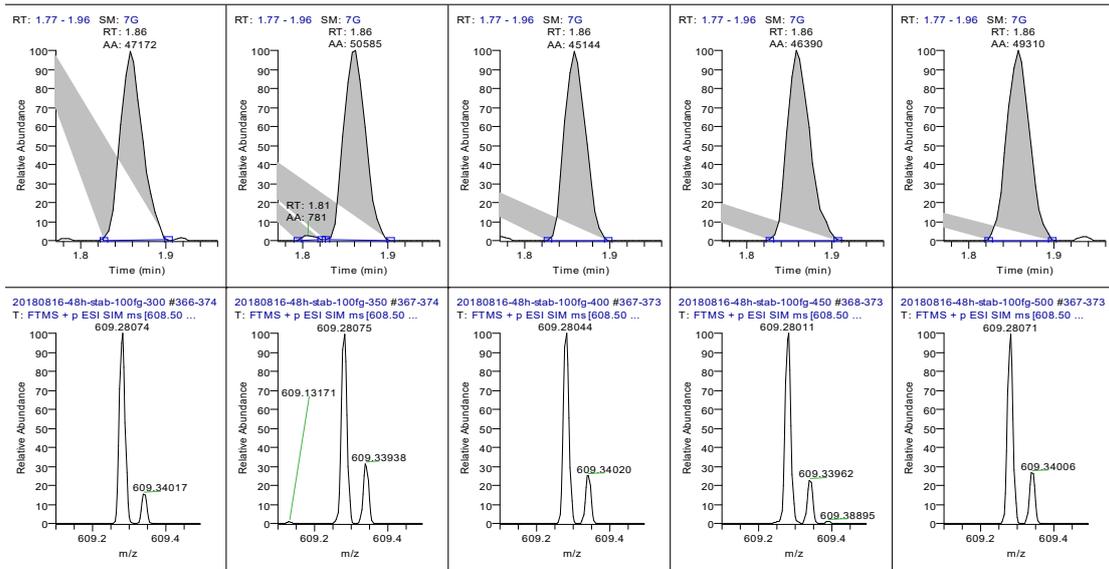
(该图为 Q Exactive Plus 测试数据: 分辨率 $\geq 70000$  FWHM 时, FullIMS 质谱扫描速率为:  
( $5/(11.39-11.38)*60=8.3\text{Hz}>3\text{Hz}$ , 即不少于 3 张/秒)

★3.2.17 质量轴稳定性: 设备校正一次后, 连续 24 小时内不再校正质量轴, 重复进样 100fg 利血平, 609 质量精确度 $\leq 3\text{ppm}$

C:\Users\...20180816-48h-stab-100fg-1

08/17/18 16:32:39





时间	0h	5h	10h	15h	20h	25h
实测值	609.28035	609.28047	609.28068	609.28045	609.28056	609.28033
质量偏差	-0.508797	-0.311843	0.0328256	-0.344669	-0.164128	-0.541622
时间	30h	35h	40h	45h	50h	
实测值	609.28074	609.28075	609.28044	609.28011	609.28071	
质量偏差	0.1313024	0.1477152	-0.361082	-0.902704	0.082064	

(该图来自 Q Exactive Plus 实验测试数据, 140000 分辨率下 FullMS 模式(m/z606.5-611.5) 连续测试 48h 以上)

★3.2.18 正负离子切换速度: 小于 1 秒 (即每秒可获得正负离子谱图各一张), 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 ≤3ppm; 即用 0.5ppb 氯霉素和 0.5ppb 克伦特罗混合溶液作为测试液, 蠕动泵连续进样 2 小时, 正负快速扫描同时监测氯霉素和克伦特罗分子离子峰, 两者质量偏差小于 3ppm

### 运行模式

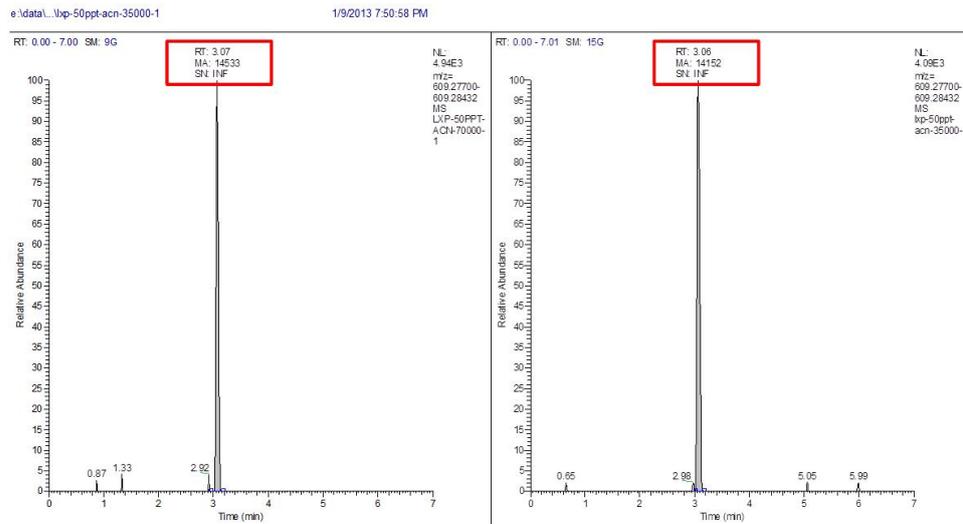
- 具有高分辨率精确质量检测的全扫描，一次进样同时采集高分辨一级MS、二级MS/MS
- 具有高分辨率精确质量检测的选择离子检测(SIM)
- 改进筛选和定量可信度的平行反应监测(PRM)
- 具有高分辨率精确质量检测的HCD全离子碎裂(AIF)
- 所有离子的源内裂解
- 色谱时间维度的正/负离子切换，正负离子切换速度：小于1秒（即每秒可获得正负离子谱图各一张），在进行快速正负切换模式下连续运行2小时，质量轴的稳定性 $\leq 3\text{ppm}$ ；即用0.5ppb氯霉素和0.5ppb克伦特罗混合溶液作为测试液，蠕动泵连续进样2小时，正负快速扫描同时监测氯霉素和克伦特罗分子离子峰，两者质量偏差小于 $3\text{ppm}$



3.2.19 MS/MS 灵敏度：50 fg 丁螺环酮，柱上 S/N  $\geq 100:1$

3.2.20 选择离子扫描 SIM 灵敏度：30 fg 丁螺环酮，柱上 S/N  $\geq 100:1$

▲3.2.21 提高仪器分辨率时，采用利血平标品 100fg 进样，ESI+ 模式下，分辨率分别为 35000FWHM 和 70000FWHM 时，其他仪器参数维持不变的前提下，主峰的信号强度值相差不超过 8%



分辨率	70000 分辨率	35000 分辨率	面积差
峰面积	14533	14152	2.7%

（该图来自 Q Exactive Plus 实验测试数据，证明了不同分辨率下仪器灵敏度的一致性）

3.2.22 扫描工作方式：具备高分辨全扫描 MS 和 MS/MS,选择离子扫描,全离子碰撞碎裂扫描,正负离子切换扫描，数据依赖离子扫描，数据非依赖扫描，平行反应监测离子扫描

★3.2.23 检测器：采用 FT 无损检测器

### 运行模式

- 具有高分辨率精确质量检测的全扫描，一次进样同时采集高分辨一级MS、二级MS/MS
- 具有高分辨率精确质量检测的选择离子检测(SIM)
- 改进筛选和定量可信度的平行反应监测(PRM)
- 具有高分辨率精确质量检测的HCD全离子碎裂(AIF)
- 所有离子的源内裂解
- 色谱时间维度的正/负离子切换，正负离子切换速度：小于1秒（即每秒可获得正负离子谱图各一张），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 $\leq 3\text{ppm}$ ；即用0.5ppb氯霉素和0.5ppb克伦特罗混合溶液作为测试液，蠕动泵连续进样2小时，正负快速扫描同时监测氯霉素和克伦特罗分子离子峰，两者质量偏差小于3ppm

• FT无损检测器



### ▲3.2.24 高分辨质谱系统、离子源与纳升液相色谱系统、超高效液相色谱系统、均为同一生产厂商的配套设备

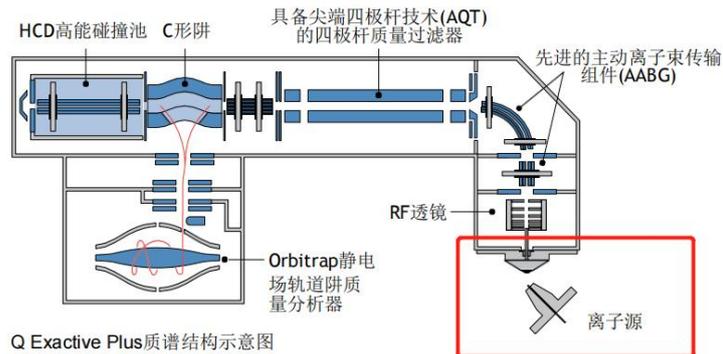


仅供研究使用，不可用于诊断。

Thermo Scientific™ Q Exactive™ Plus台式LC-MS/MS将高性能四极杆的前体离子选择与高分辨率准确质量(HR/AM) Orbitrap™ 检测器结合，提供高性能和强大的功能性。它将Quantification™能力提升到新的水平，使得在一台仪器的单次分析中完成表征、量化和确认成为可能。

基于Q Exactive的技术升级最大程度提高了大分子和小分子应用的性能和可靠性。先进的四极杆技术优化了母离子的选择和传输，改善了最复杂基质中低丰度离子的定量水平。成熟的平行反应检测和数据非依赖采集提供高重现性的定量结果和全面定性的信心。选配的完整蛋白质模式通过成熟的离子束控制和简单的碰撞压力调整增强了对完整蛋白质分析的能力，选配的280,000分辨率确保自上而下分析和脂质组学研究中卓越的结果可信度。

**Thermo**  
SCIENTIFIC



LC-MS

## Vanquish Neo UHPLC System

纳流、毛细流和微升流速液相色谱的新标准

### 超越发现

Thermo Scientific™ Vanquish™ Neo UHPLC 系统是一体化的纳流、毛细流和微升流速液相色谱系统，无论从有限样品量的发现研究到高通量大样本队列验证，均可用于高灵敏度的 LC-MS 工作流程。

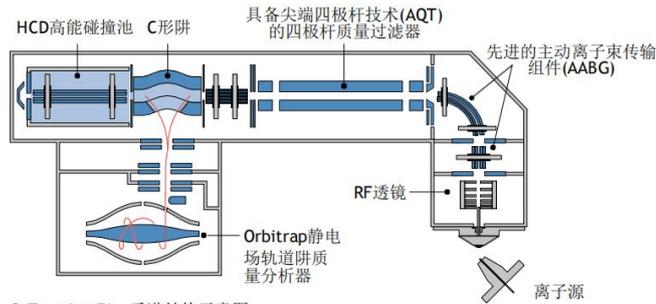
- Thermo Scientific™ ProFlow™ XR 泵技术可在高达 1500 bar 的压力下稳定运行，流量范围从 1 nL/min 到 100  $\mu$ L/min
- 整个流量范围的主动流量控制可确保长梯度和超短运行时间的出色保留时间精度
- 瓶底检测技术可以从有限的样品量进样、自动多次清洗流体进样将系统残留降低到可以忽略不计的水平



▲3.2.25 质谱可升级加装附件实现完整蛋白模式和分辨率 280000( $m/z \leq 200$ )，满足更高分辨率应用要求，提供证明材料。

## 四极杆质量过滤器

- 先进的四极杆技术(AQT) 采用分段式 Thermo Scientific® HyperQuad® 质量过滤器提供增强的离子传输能量和卓越的离子隔离窗口
- 母离子隔离宽度可变范围为0.4 Da到全质量范围



Q Exactive Plus质谱结构示意图

## 选配

- Thermo Scientific® EASY-Spray™ 离子源通过即插即用的方式提供先进技术和稳定性
- Thermo Scientific Nanospray Flex离子源提供极佳的纳升喷雾灵活性，具有出色的喷雾稳定性和效率，适用于最广泛的纳流色谱柱
- ESI探针兼容<1 μL/min至1 mL/min的液体流速，无需分流
- APCI离子源兼容50 μL/min至2 mL/min的液体流速，无需分流
- 高流速和低流速分析均使用金属喷针系统
- 质谱可升级加装附件实现完整蛋白模式和分辨率280000 ( $m/z \leq 200$ )

## 3.3 工作站及软件处理系统

★3.3.1 工作站 2套：其中仪器配套工作站 1套、数据处理工作站 1套，数据图谱输出系统 1套

3.3.2 色谱质谱数据处理软件系统：配备色谱质谱数据分析软件，具备同位素模式匹配、精确质量计算、精确二级碎片结构推断

3.3.3 独立定量分析软件：配备独立定量分析软件，可进行大规模批处理数据。内置高分辨定量分析即插即用食品安全数据库。

3.3.4 数据库及解析软件：配备未知物鉴定数据库以及化合物的谱图结构解析软件，可支持 ESI, APCI 等离子源不同的裂解机理，可以通过化学智能的谱图注释、先进的裂解预测以及谱图和裂解机理知识管理来进行可靠的结构解析，除含有理论经典裂解方式产生的碎片信息外，含有 12 万条以上的真实质谱裂解数据库信息。（此项作为验收指标）。

3.3.5 大分子结构分析软件：配备用于“组学”领域的非标记差异表达分析软件：可有效的半定量分析不同状态下（例如，疾病状态，药物刺激，或其它扰动状态）差异表达的蛋白，代谢物及其它化合物分子的相对含量。可同时应用于大分子蛋白质组学及小分子如食品安全分析等诸多领域，对不同样本间的有效物质进行差异表达分析，从而发现一些潜在的生物标志物。

## ★4.主要配置

超高压液相色谱系统：超高压液相色谱仪 1套：包括二元高压泵、在线真空脱气机、216 位可控温自动进样器、柱温箱、溶剂托盘、溶剂瓶及管路等配件。

纳升液相色谱系统：纳升液相色谱系统系统 1套：包括二元高压泵、在线真空脱气机、216 位可控温自动进样器、柱温箱、溶剂托盘、溶剂瓶及管路等配件。

高分辨质谱仪主机：静电场轨道阱高分辨质谱仪（包括 ESI 离子源 1套、纳流离子源 1套、FT 检测器 1套等配套设备），其他包括机械泵及真空系统、注射泵及六通阀各 1个。

仪器控制软件：配套控制软件系统 1套：原厂仪器控制和数据处理系统软件，且该系统软件要求完全控制质谱主机及液相色谱系统。

数据处理软件：配套数据处理软件各 1套：质谱定量及筛查分析软件 1套；未知物鉴定软件 1套；蛋白质组学软件\*1套；脂质组学软件 1套。

工具包：色谱和高分辨质谱配套消耗品备件包和仪器维修专用工具包各 1 套，样品瓶 500 个，机械泵油 2L，连接管线 2 套，液相进样针 1 个，液相进样针座 1 个。

色谱柱：C18，2.1×100mm×2.6μm，2 根；蛋白分析色谱柱 2 根；均要求带配套色谱保护柱和连接头。

高纯氮气发生器：配备与本设备配套的高纯氮气发生器 1 套，要求为一体机，流量≥30 L/h；纯度≥99.9%

UPS 不间断电源：原厂设备的标准配备品牌，功率 10KVA，断电后能供电 2 小时以上。  
数据采集及分析系统：仪器配套工作站 1 台，数据处理工作站 1 台。两台工作站性能参数均优于：6 核心 12 线程、单核主频 4.4GHz 的 CPU，16GB 内存，3TG 硬盘，DVD 刻录机，3T 移动硬盘，兼容仪器软件的正版操作系统，23 寸显示器；自动双面彩色激光打印机 1 台。