

# 赛默飞世尔科技 TSQ Certis

## 技术白皮书

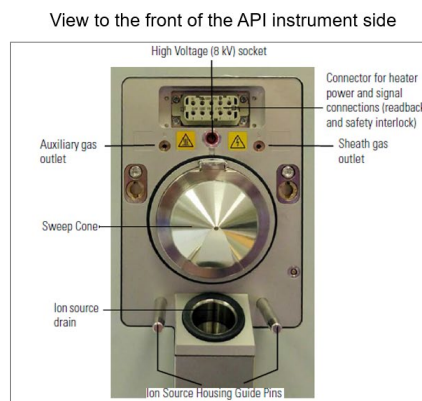
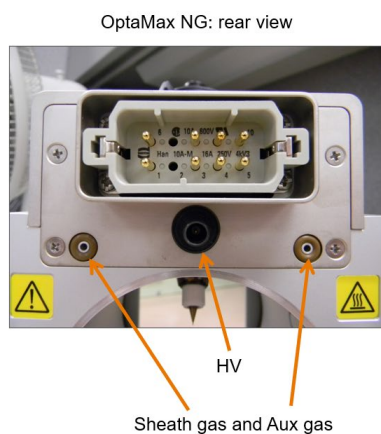
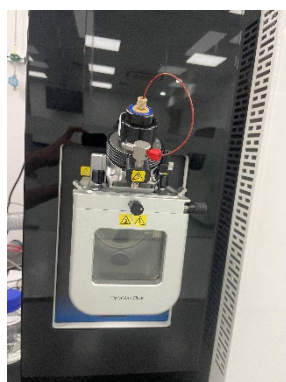
### 工作条件

1. 电源电压: 230V±10%, 50/60Hz, 16A; 环境温度: 15-27°C (最优: 18~21°C); 相对湿度: 20-80%。
2. 气体需求: 雾化气 N<sub>2</sub>: 纯 (99%纯度) N<sub>2</sub>, 碰撞气 Ar: 超高纯 Ar 或 N<sub>2</sub> (99.999%), 源区无需额外空气压缩机, 简化气体供应降低消耗。如采用同一种气体做为雾化气和碰撞气, 需由同一台气体发生器供气, 如采用氩气做为碰撞气, 需提供氩气专用管道和气瓶。

### 质谱部分技术性能

### 离子源

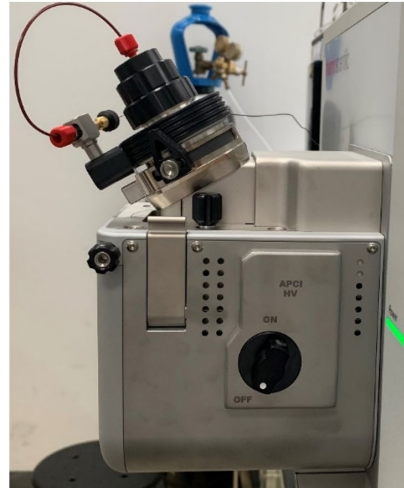
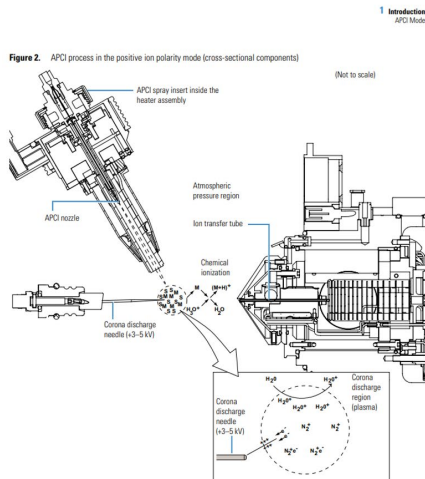
3. 离子源: 独立的可加热电喷雾离子源 (HESI 源) 和大气压化学电离源 (APCI 源), 全内置式气路电路接口设计, 离子源外部无任何气路电路管路连接, 安装离子源时即可实现气路电路连接, 自动识别, 实现零误操作 (需提供可显示全内置式气路电路接口设计的离子源实物图)。HESI 与 APCI 切换只需更换源探针组件, 电晕针旋钮式在线调节, 切换时间 < 1min;



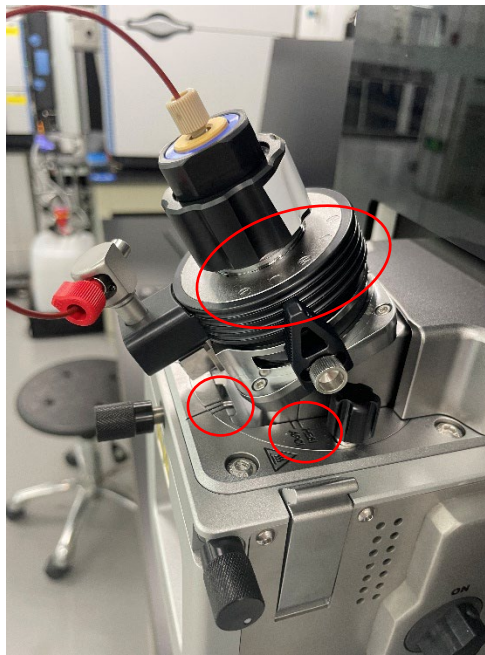
(全内置式气路电路接口设计, 离子源外部无任何气路电路管路连接, 安装离子源时即

可实现气路电路连接，自动识别，实现零误操作)

▲4. 离子源喷针采用 60 度最优喷雾设计，位置可根据不同需求进行前后/左右、上下三维调节，但在采集数据的时候可以把位置固定（锁死），源区氮气消耗少；（提供结构图证明）



离子源喷针采用 60 度最优喷雾设计



（上图为 TSQ Certis 离子源照片，离子源喷针采用 60 度最优喷雾设计，位置可根据不同需求进行前后/左右、上下三维调节，但在采集数据的时候可以把位置固定（锁死），显示了喷针前后“HESI/APCI 位”，左右，上下“L/M/H”三维可调，方便对喷雾条件进行优化）

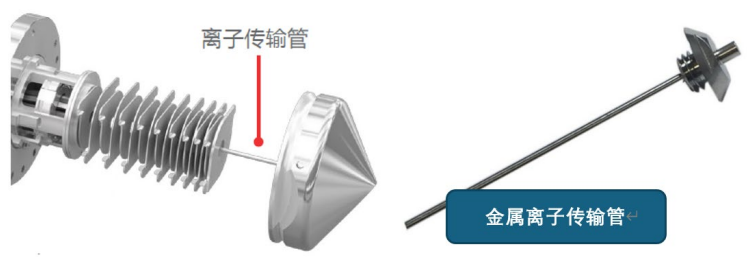
5. 内置多边形同轴主动排废口。排废管路为不锈钢材质，可实现离子源腔体高温自洁净；可拆卸的吹扫挡锥，非对称锥面设计，在高灵敏度的情况下确保长期耐用性；

- ▲6. 可加热 HESI 源，加热温度可达 650°C，不分流的情况下采用纯水作为溶剂，流速为 1μl-2000μl/min；APCI：加热温度可达 650°C，不分流的情况下采用纯水作为溶剂，流速为 50μl-2000μl/min；
- 7. 双槽位全自动注射泵实现质谱直接进样，自动调谐和校正，既可通过软件也可通过操作面板自动设置；



### 离子传输系统

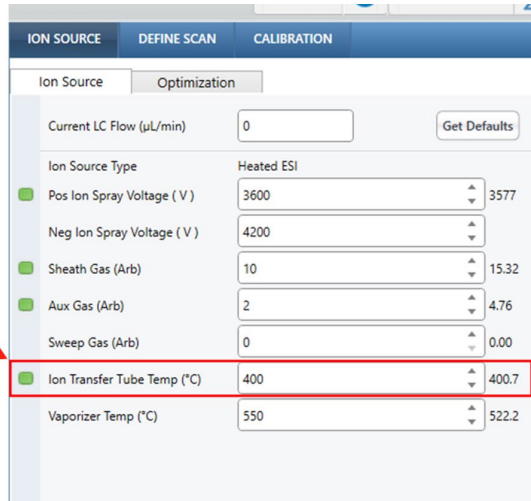
- ▲8. 离子传输系统必须配有可加热的金属材质离子传输管设计（提供实物图与结构设计图）；传输管将更多离子传输到真空系统；



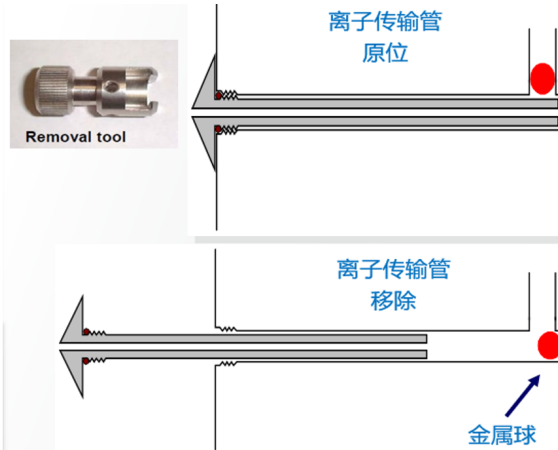
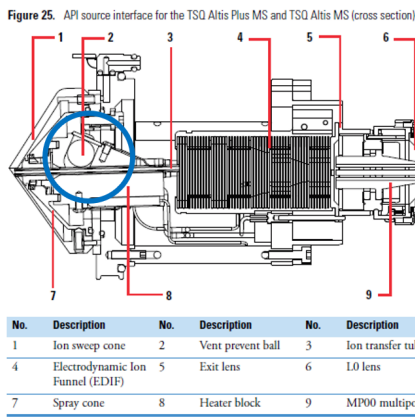
(赛默飞配备金属材质离子传输管) ←

- ▲9. 离子传输管金属材质，可独立加热，最高温度可达  $\geq 400^{\circ}\text{C}$ 。

离子传输管  
金属材质可  
独立加热，  
最高温度 $\geq 400^{\circ}\text{C}$

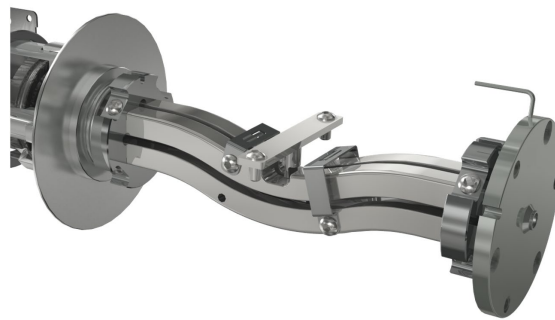


▲10. 具有真空隔断阀设计，离子传输管在移去、进行超声清洗维护时质谱系统不用卸真空；



(该截图为质谱真空隔断阀设计，离子传输管在移去、进行超声清洗维护时质谱系统不用卸真空的示意图)

11. 弯曲且带有中性挡杆的离子束导向装置：阻挡中性粒子和高速分子团；中性挡杆前端配置具有质量过滤功能的预四极杆；

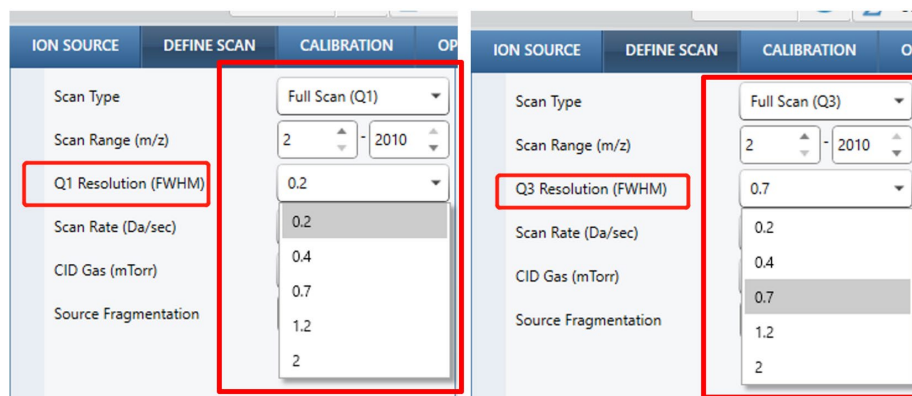


(图为 TSQ Certis 弯曲且带有中性挡杆的离子束导向装置的硬件结构照片)

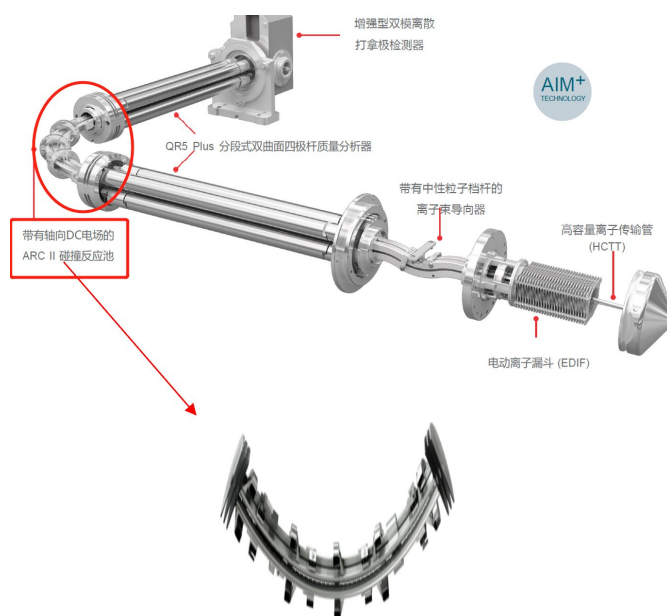
四极杆质量分析器

12. Q1 和 Q3 均采用分段式钨制双曲面四极杆，可在全质量范围内和不同分辨率下实现灵敏度（圆形四极杆及非纯金属材质不接受）；

▲13. 四极杆质量分析器保证达到  $\leq 0.2$  amu 分辨率；

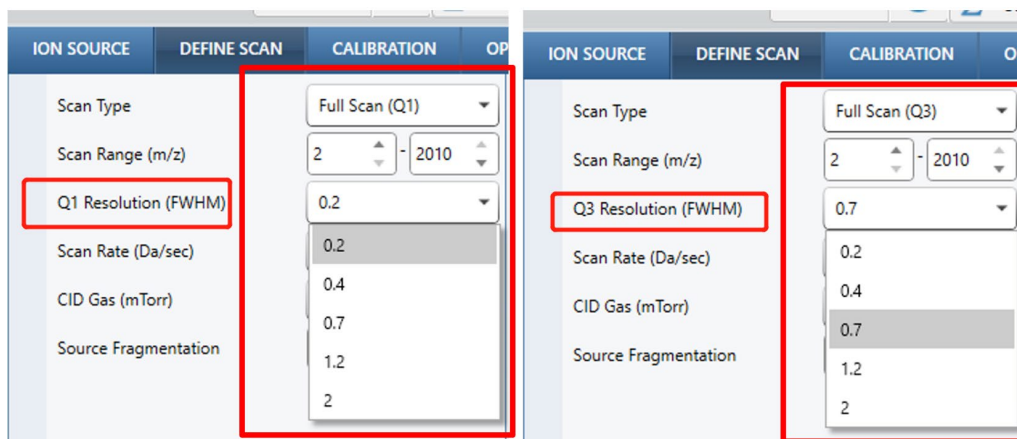


14. 加有轴向加速电场的新一代主动碰撞反应池设计，Dwell Time 低于 1ms 时，无灵敏度损失；（提供设计结构图证明）



（该图为 TSQ Certis 采用加有轴向加速电场的新一代主动碰撞反应池设计结构图）

▲15. 四极杆分辨率：Q1 和 Q3 在全质量范围，分辨率可到 0.2 amu，在只需在方法设定界面简单选择即可（提供软件截图），无需特殊调谐；



(四极杆质量分析器 Q1 和 Q3 均可通过软件设置分辨率 0.2 amu)

SRM Table										Q1 Resolution (FWHM)	Q3 Resolution (FWHM)
Compound	Retention Time (min)	RT Window (min)	Polarity	Precursor (m/z)	Product (m/z)	Collision Energy (V)	RF Lens (V)	Min Dwell Time (ms)			
1	Methamidophos	1.192	2.385	Positive	142.009	94.014	14.3	37	10.857	0.2	1.2
2	Methamidophos	1.192	2.385	Positive	142.009	109.889	15.66	37	10.857	0.2	1.2
3	Methamidophos	1.192	2.385	Positive	142.009	124.96	14.3	37	10.857	0.2	1.2
4	Methomyl	1.968	3.936	Positive	163.054	72.96	27.04	30	1.112	0.7	1.2
5	Methomyl	1.968	3.936	Positive	163.054	88	10.25	30	1.112	0.7	1.2
6	Methomyl	1.968	3.936	Positive	163.054	106	10.25	30	1.112	0.7	1.2
7	acephate	2	4	Positive	184.019	95.014	24.11	30	1.07	0.4	1.2
8	acephate	2	4	Positive	184.019	124.817	18.39	30	1.07	0.4	1.2
9	acephate	2	4	Positive	184.019	143	10.25	30	1.07	0.4	1.2
10	Dinotefuran	1.858	3.717	Positive	203.114	113.071	10.25	30	1.385	0.7	2
11	Dinotefuran	1.858	3.717	Positive	203.114	114.071	13.03	30	1.385	0.7	2
12	Dinotefuran	1.858	3.717	Positive	203.114	129.071	12.33	30	1.385	0.7	2
13	Aminocarb	1.792	3.583	Positive	209.128	122.071	38.57	38	1.689	0.7	0.7
14	Aminocarb	1.792	3.583	Positive	209.128	137.054	24.16	38	1.689	0.7	0.7
15	Aminocarb	1.792	3.583	Positive	209.128	152.111	14.15	38	1.689	0.7	0.7
16	Omethoate	1.784	3.569	Positive	214.03	124.929	21.78	37	1.689	1.2	1.2
17	Omethoate	1.784	3.569	Positive	214.03	155	15.71	37	1.689	1.2	1.2
18	Omethoate	1.784	3.569	Positive	214.03	182.942	10.25	37	1.689	1.2	1.2
19	Pymetrozine	1.829	3.658	Positive	218.104	78	39.38	63	1.488	0.2	0.2
20	Pymetrozine	1.829	3.658	Positive	218.104	79.014	40.49	63	1.488	0.2	0.2
21	Pymetrozine	1.829	3.658	Positive	218.104	105	20.47	63	1.488	0.2	0.2
22	Butoxycarboxim	1.878	3.757	Positive	223.075	45.889	10.25	40	1.14	0.7	0.4
23	Butoxycarboxim	1.878	3.757	Positive	223.075	106	25.72	40	1.14	0.7	0.4
24	Butoxycarboxim	1.878	3.757	Positive	223.075	166.125	15.56	40	1.14	0.7	0.4

(软件界面截图显示了一个方法中可对不同的化合物设置不同的 Q1 和 Q3 分辨率，均可达 0.2 amu，无需特殊调谐)

▲16. 质量数范围：2-2010 amu，质量数 ≥ 2010 amu，Q1 和 Q3 均可以达到；

ION SOURCE	DEFINE SCAN	CALIBRATION	OPTIMIZATION
Scan Type	Full Scan (Q1)		
Scan Range (m/z)	2 - 2010		
Q1 Resolution	Range: 2 - 2010	7	
Scan Rate (Da/sec)	1000		
CID Gas (mTorr)	0		
Source Fragmentation	30		

ION SOURCE	DEFINE SCAN	CALIBRATION	OPTIMIZATION
Scan Type	Full Scan (Q3)		
Scan Range (m/z)	2 - 2010		
Q3 Resolution	Range: 2 - 2010	0.7	
Scan Rate (Da/sec)	1000		
CID Gas (mTorr)	0		
Source Fragmentation	30		

▲17. 质量轴稳定性：≤ ± 0.1 amu/24 小时 (不同分辨率、不同扫描速率下、全质量数范围)；质量准确度：全质量轴范围 (2-2010Da) 内 ≤ 0.1 amu；SRM (或 MRM) 最小驻留时间：≤ 1ms；共轭双曲面四极杆扫描速度：≥ 20000amu/s；

18. 分辨率：扩展质荷比范围模式 (EMRS) 下在 m/z 622 时分辨率为 3110 FWHM (或 0.2 Da 或 FWHM)，并且可以通过自动调谐和校准在整个质量范围内从 0.2 到 2.0 Da 或 FWHM 进行调节。

▲19. 扫描速度：最大 900 SRMs/秒 (或 MRMs/秒)；

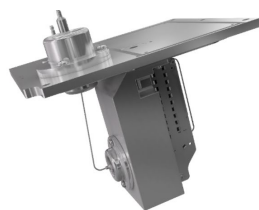
20. 一次分析最多可执行 30000 对 SRM 分析；

▲21. 正负离子切换速度：≤ 5 ms；

22. 扫描功能：全扫描(Full Scan, Q1 或 Q3)、选择离子扫描(SIM, Q1 或 Q3)、选择反应监测(SRM)、高选择性反应监测 (0.2 amu)、时间选择反应监测 (T-SRM) 子离子扫描(Product Ion Scan)、母离子扫描(Precursor Ion Scan)、中性丢失扫描(Neutral Loss Scan)、RER 反向能量归一化扫描；QED 即 SRM(MRM)自动触发二级子离子扫描功能、混合模式扫描。

## 检测器

▲23. 检测器: 双模式离散打拿极检测器 (脉冲计数模式, 离子通量低; 模拟模式, 离子通量高) 和动态线性范围 ( $10^6$ );



(该图为 TSQ Certis 检测器硬件结构图) ←

### 检测器

- 加大表面积的离散型打拿极检测器大大延长了检测器的使用寿命
- 双模检测器可实现脉冲计数 (离子通量低时) 和模拟检测 (离子通量高时) 两个模式的自动切换, 从而实现最佳的灵敏度
- 超过 6 个数量级的动态范围提供高可信度的定量

## 真空系统

24. 真空系统: 由 1 个分子涡轮泵 (三级差分) 和 2 个机械泵组成的 4 级差分真空系统, 四级差分抽真空, 真空可达到  $5 \cdot 10^{-6}$  Torr

**灵敏度: MS/MS 灵敏度**

▲25. ESI+: 1pg 利血平柱上进样,  $m/z$  609>195, 信噪比  $\geq 6,000,000: 1$ ; ESI-: 1pg 利氯霉素柱上进样,  $m/z$  321>152, 信噪比  $\geq 6,000,000: 1$ ; APCI: 1pg 利血平柱上进样,  $m/z$  609>195, 信噪比  $\geq 100,000: 1$ 。

### 高效液相色谱仪

▲26. 高压二元泵流量范围最大 8 mL/min, 增量为 1  $\mu$ L/min, 最大耐压 103 MPa (即 1034 bar 或 15,000 psi);

27. 流量准确度:  $\pm 0.1\%$ , 流量精度:  $< 0.05\%$  RSD;

▲28. 溶剂通道数: 2\*3 (即 6 通道), 提供软件截图, 溶剂脱气: 内置式, 6 通道;



软件截图证明：溶剂通道数：6 通道

29. 自动进样器最大耐压 103 MPa (1034 bar 或 15,000 psi) , 样品容量：可达 216 位 2ml 进样瓶；
30. 进样量范围：0.01-25  $\mu\text{L}$ ，最小步骤= 0.01  $\mu\text{L}$ 。进样线性： $r \geq 0.99999$ （咖啡因水溶液），进样周期时间： $\leq 8$  s；取决于可设置的进样参数，与样品位置无关；
31. 交叉污染： $\leq 0.0004\%$ ；
32. 柱温箱原理：帕尔贴结合空气循环模式、直热模式，双模式加热，温度范围：5-120 $^{\circ}\text{C}$ ，增量为 0.1 $^{\circ}\text{C}$ ；最大耐压 $\geq 150$  MPa；
33. 温度稳定性： $\pm 0.05$  K；温度准确度： $\pm 0.5$  K（最高 80 $^{\circ}\text{C}$ ）。

#### ▲34. 配置

质谱仪 1 套

超高效液相色谱仪 1 套

数据处理及输出设备 1 套

氮气发生器 1 套

不间断电源 1 套

色谱柱 1 套

泵油 2L1 套

35 $\mu\text{l}$  在线过滤器 1 套

质谱连接套件 1 套

校正液 1 套

样品瓶 2ml 500 个

数据处理终端 1 套：≥27 寸显示器，系统：不低于中文正版 Win10 专业系统（或同等性能操作系统），处理性能不低于 Intel® Core i9-14500（或同等性能 cpu）；硬盘≥1TB。

仪器验收时软件显示的型号与设备铭牌一致。提供 LC 和 MS/MS 的全自动控制；方法优化包括碰撞能量和子离子的自动优化，并可利用优化后的参数快速便捷地建立分析方法；方法编辑器具有全面的基于特定应用的方法模板库和直观的用户界面，可直接导入离线数据库中的化合物名称、MRM 或 SRM 离子对和碰撞能量等信息；工作站及软件具备数据采集、数据处理、定性定量分析、建立数据库、谱库检索等功能。