

thermoscientific



超越传统的高分辨GCMS 系统  
将带给您更卓越的分析体验

Thermo Scientific Exactive GC  
Orbitrap GC-MS系统

**ThermoFisher**  
SCIENTIFIC

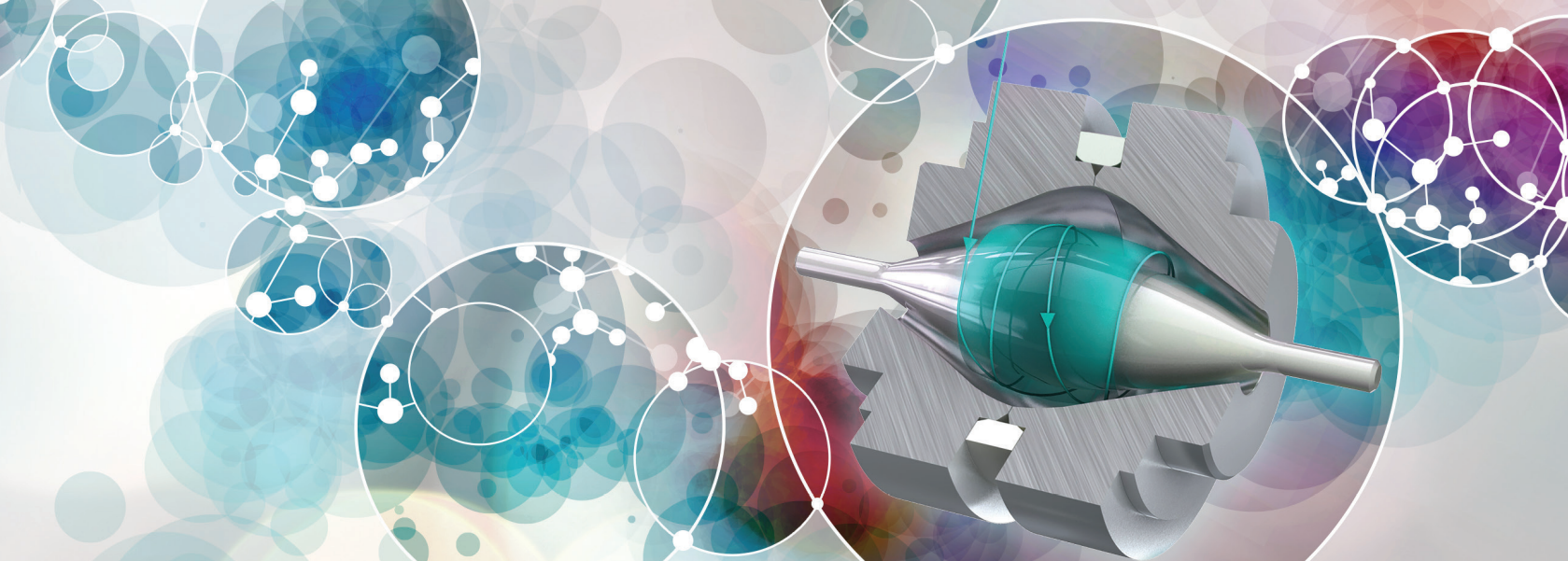


## 定义常规GC-MS分析的新边界

迄今为止，屡获殊荣的Orbitrap™ GC-MS技术可通过使用高分辨率精确质量 (HRAM) 分析来帮助研究人员实现新的分析能力的突破，同时更加广泛和深入的获得更多的样品信息。Thermo Scientific™ Exactive™ GC Orbitrap™ GC-MS系统的面市首次将技术优势引入常规分析中。该系统可帮助在食品安全、环境、工业、法医学和反兴奋剂领域工作的科学家们提高分析能力，进而改变工作流程，从而将实验分析能力提升到更高水平。

Exactive GC系统是一款易于使用的专业GC-MS，无论面对的是靶向和非靶向分析，均提供无与伦比的高灵敏度、适用于实验室常规分析，使用这样的分析工作流程，可获得高置信度的定量结果。这一切只有依靠Orbitrap技术提供的卓越的分辨力、质量精确度、线性动态范围及灵敏度与Thermo Scientific™ TraceFinder™ 软件所提供的智能化数据处理工作流程的结合得以实现。





“这无疑是一种巨大的进步。”

荷兰食品安全研究所  
天然毒素和农药部  
Hans Mol. 博士



“GC Orbitrap技术将高分辨率GC-MS  
的性能推向新高度。”

捷克共和国布拉格  
食品安全和食品鉴别机构  
Jana Hajšlová 教授



“有机会寻找尚未发现的未知物质确  
实是MS的一大进步。”

西班牙巴塞罗那  
西班牙国家科学研究委员会  
环境分析  
Esteban Abad Holgado 博士



“我相信，在化合物筛选应用中，一  
个全景高分辨率精确质量质谱是一次  
巨大的跃迁。”

Thermo Fisher Scientific  
生命科学质谱部  
研究主管  
Alexander Makarov 博士

# 适用于靶向筛选和定量的极限性能

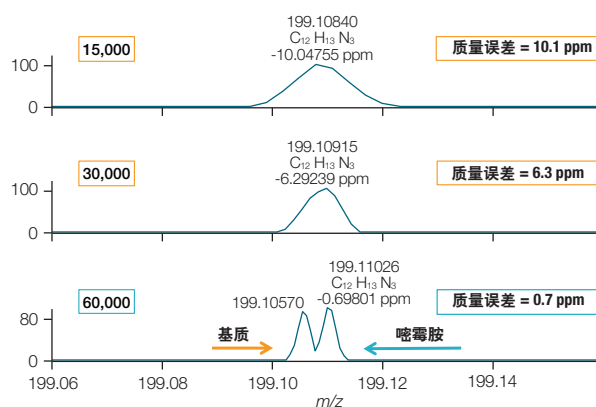
高选择性全扫描分析为常规测试带来新的可能：分析方法设置简便、应用范围广泛、全自动数据处理和高效的数据回顾性分析。Exactive GC 系统不仅具有 GC 三重四极杆 MS 的定量能力，还具备只有 Orbitrap GC-MS 技术才能提供的全扫描高分辨率、精确质量 (HRAM) 性能，这些技术将彻底改变您的工作流程。

## 适用于高效筛选工作流程的高置信度低含量水平检测

Exactive GC 系统提供常规全扫描操作，可选分辨率为 15k、30k 或 60k ( $m/z$  200 时)，其质量精确度低于 1 ppm，全扫描灵敏度低至兆分之一。该功能推动了高效宽范围的筛选方法在食品安全、环境、反兴奋剂及其它需要在复杂基质中检测超痕量水平的应用中的发展。

在农药检测中，我可以安全地检测到极低水平。

- Jana Hajšlová



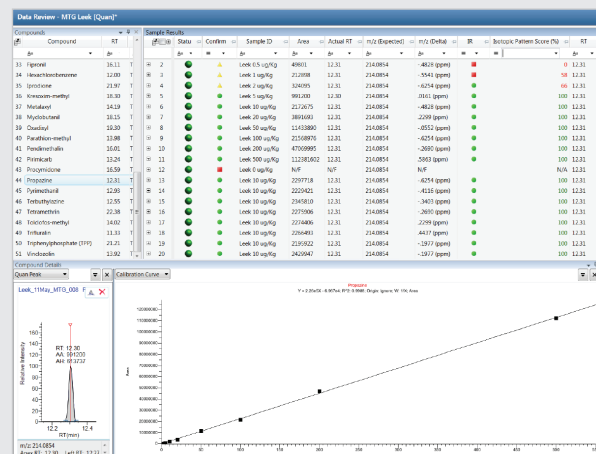
分辨力在 15K、30K 和 60K 分辨率下非葱中 10  $\mu\text{g}/\text{kg}$  啉霉胺质量精确度的影响。要从基质干扰中分离啉霉胺，以达到与监管指令相符的质量精确度 (<5ppm)，60K 的分辨率才能达到要求。

## 定量能力比其他 HRAM GC-MS 系统更胜一筹

即使在使用非靶向全扫描数据采集模式时，Exactive GC 系统也能提供与 GC 三重四极杆仪器选择反应监控 (SRM) 模式提供相同的定量能力。即使在复杂基质中，亦具有极低的灵敏度 (<ppb)、准确的定量、良好的质量精度以及宽的线性范围 (>6 个数量级)。使用 Orbitrap GC-MS 技术能让您的 GC-MS 的性能达到前所未有的水平。

这一技术为基于 GC 的农残分析提供了一种更简单、更高效、更全面的方法。

- Hans Mol

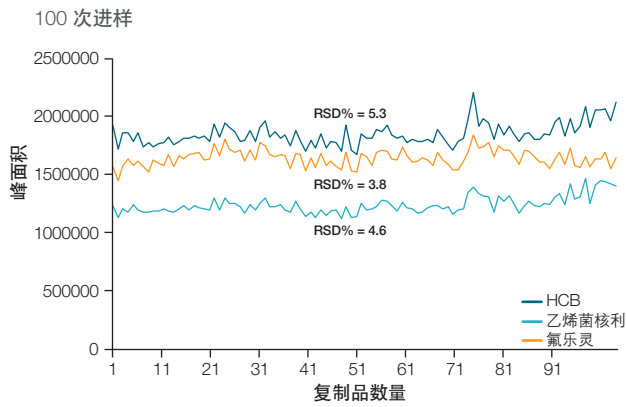


TraceFinder 软件使用 Exactive GC 系统采集的数据，同时结合化合物检测、鉴定和定量，实现常规痕量农药分析，以确保符合法规指令要求。此外，该软件还可结合灵活的报告工具模板为检测到的化合物执行自定义、自动标记的功能。

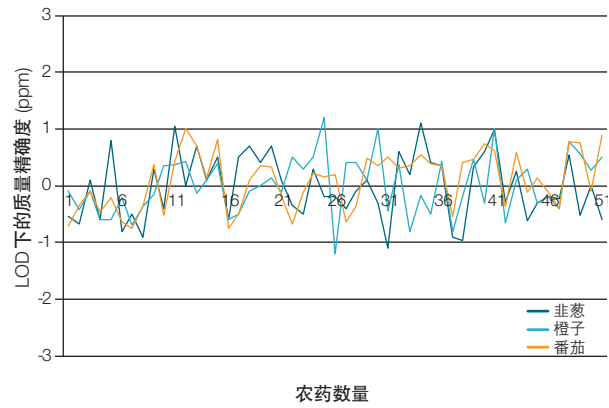
# 检测

# 鉴定

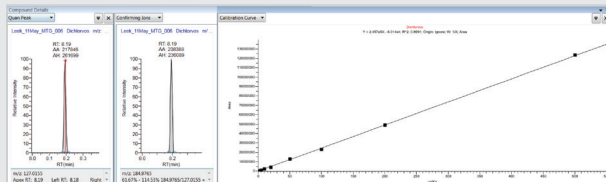
# 定量



添加浓度为 10 $\mu$ g/Kg浓度水平的农药后的番茄提取物的 100 次重复进样。结果表明，在 66小时的连续运行中均保持良好的灵敏度和稳定性。



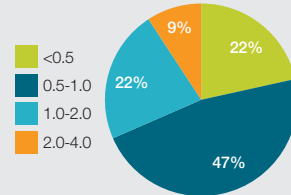
韭葱、橙子和番茄基质中 51 种农药，在最大残留限量 (0.5-5  $\mu$ g/Kg) 下的质量精确度。一致的低质量误差可为阳性鉴定提供充分的自信。



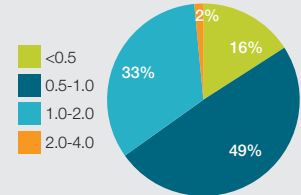
与敌敌畏的校正曲线 (0.5-500  $\mu$ g/Kg) 相匹配的韭葱基质的 TraceFinder软件视图，包括 1  $\mu$ g/Kg 下的提取定量离子和定性离子。数据在  $m/z$  200 下使用 60K 分辨率采集。

## GC Orbitrap 与 GC-MS/MS

GC Orbitrap



GC-MS/MS

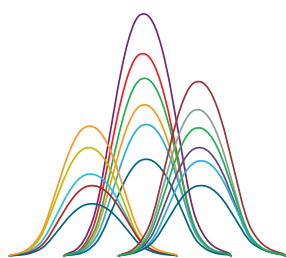


使用GC Orbitrap系统 ( $m/z$  200 时60K分辨率下全扫描) 和GC-MS/MS系统 (SRM) 通过快速GC分离测定混合蔬菜基质中150种农药的仪器检出限 (IDL)。\*

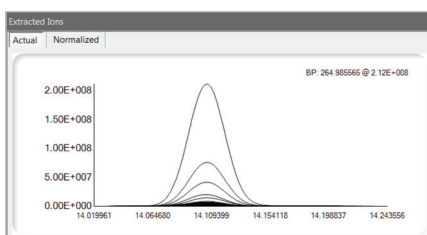
\* Q Exactive GC系统采集的数据。Exactive GC系统在相同条件下操作时具有同等性能。请参阅Exactive GC规范单书 (PS10506) 和Exactive GC技术指南 (TN10511)。



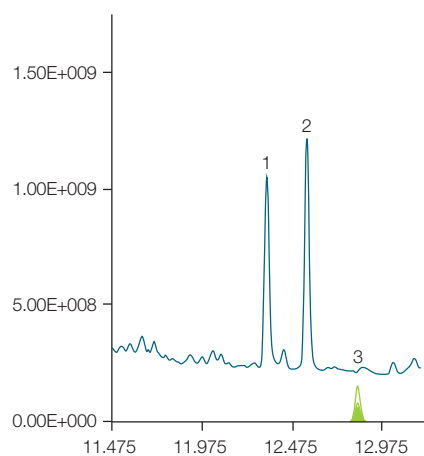
## 检测和提纯



即使在最复杂样品中，Exactive GC 系统在全扫描下的兆分之一灵敏度、宽动态范围以及 HRAM 也可实现高容量组分的检测。专门设计的算法可执行谱图去卷积，为每种检测到的组分生成相对干净的质谱图。

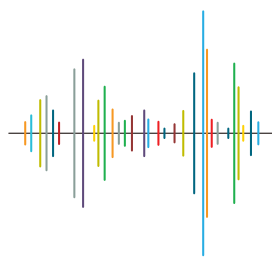


精确质量去卷积可提取成百上千种组分并提供白兰地样品的全面信息。提取所显示的峰丛，并执行库检索，以鉴定该化合物。

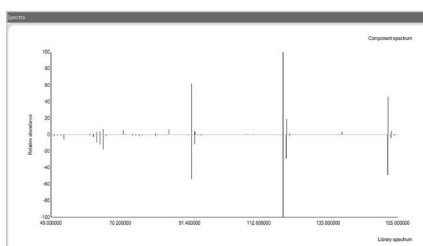


精确质量下得去卷积功能分别提取高浓度和痕量级组分，提取样品的干净质谱图和全面信息。图中显示 TIC 中的主峰 (1-2) 和绿色部分的微量组分 (3)。

## 生成候选化合物

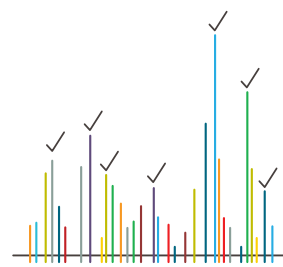


随后对照谱库筛选提纯质谱，根据阈值及库匹配分值生成候选化合物。



7.8 min 处峰的组分质谱图可在库中检索并与 NIST 2014 谱库中的多个候选化合物匹配。

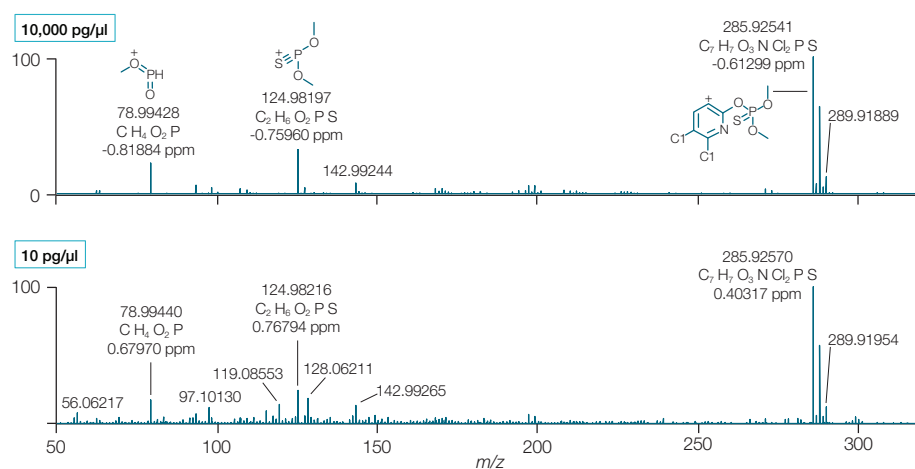
## 筛选和鉴定



高分辨过滤因子 (HRF) 算法基于质谱中每个离子的元素组成使用精确质量信息排除不大可能成为候选化合物的化合物。该算法可为检测到的组分执行高置信度的鉴定。

Score	Matched Compound	Formula	CAS	SI	HRF Score
96.8	Benzoic acid, 2-(1-methylpropyloxy-, methyl ester	C12H16O3		854	99.2793
96.8	Benzoic acid, 2-(isopropoxy-, methyl ester	C11H14O3		852	99.2793
95.8	Benzoic acid, 2-(2-methylpropyloxy-, methyl ester	C12H16O3		806	99.2793
95.4	Benzoic acid, 2-(2-methylbutyloxy-, methyl ester	C13H18O3		785	99.2793
95.3	Aspirin methyl ester	C18H19O4	580-02-9	867	94.9006
95.1	Benzoic acid, 2-butoxy-, methyl ester	C12H16O3	5446-96-8	770	99.2793
95	Benzoic acid, 2-(3-methylbutyloxy-, methyl ester	C13H18O3		764	99.2793
94.8	Benzoic acid, 2-(pentyloxy-, methyl ester	C13H18O3	21018-10-0	753	99.2793

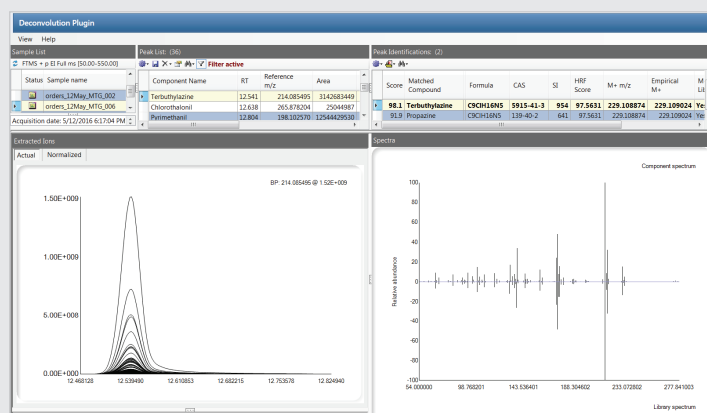
根据搜索结果和 HRF 对推荐的候选化合物清单进行筛选，快速进行高置信度鉴定。在本例中，根据搜索结果和 HRF 挑选出 35 个候选化合物，暂时鉴定化合物为苯甲酸甲酯。



使用 Thermo Scientific™ Mass Frontier™ 软件通过碎片分配分别对 10,000 和 10 pg/μl 甲基毒死砒的全扫描数据进行分析。无论是低浓度还是高浓度，在整个质量范围内保持良好的匹配和低于 1 ppm 的质量精确度。

# 智能化非靶向筛选

以非靶向方式执行自动化合物鉴定曾经就像天边的星星，而现如今，Exactive GC系统和TraceFinder软件让这一梦想成为了现实。Exactive GC系统的高灵敏度、高选择性和宽动态范围可在GC-MS分析实验中达到前所未有的组分覆盖范围，而后者通过自动化软件工作流程进行数据的智能化采集，最终确定样品中的组分。数据判读不再需要数周时间，令实验室释放了全新的无限可能。



## 可调分析范围

TraceFinder 软件可使用多个谱库进行自动化合物鉴定，这些资源既可以是单位质量分辨质谱图也可以是高分辨质量质谱图；既可以在内部开发的现有谱库又可以从商品化的谱库（如 NIST 或 Wiley 或正式版 Orbitrap GC-MS 库）。您可轻松调整非靶向分析的方向和范围；缩小范围，更多地限定条件，使用更多的谱库或子库；扩大谱库范围，使用更大的谱库或谱库之间的组合。

# 将GC与Orbitrap技术结合起来

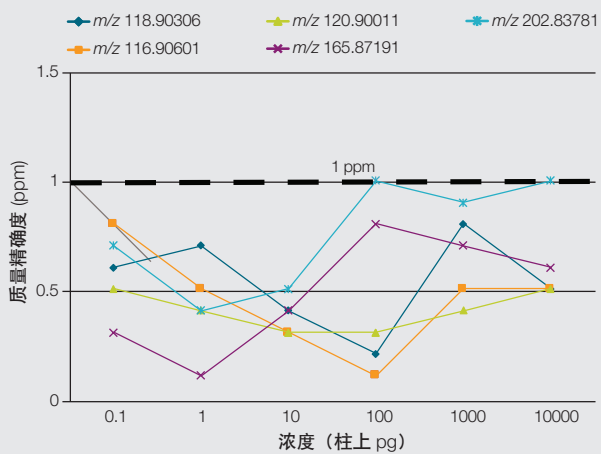
## C-TRAP

用于精确控制进入曲线线性阱的离子数量，的，通过自动增益控制功能 (AGC) 在宽的浓度范围内提供卓越的质谱动态范围并确保优异的HRAM性能。

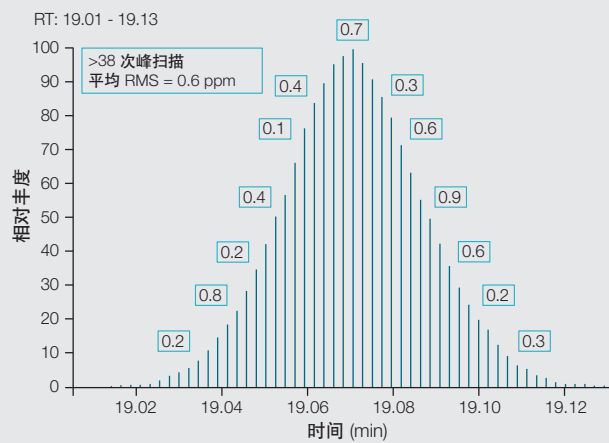


## ORBITRAP 质量分析仪

在  $m/z$  200 下达到 60,000 FWHM 的高分辨力，在高速采集速率下提供 sub-ppm 级别的质量精确度，实现无与伦比的质谱品质。



在六个数量级上六氯乙烷离子的质量精确度（柱上 0.1 ~ 10,000 pg）< 1 ppm。在痕量级和高浓度水平始终维持高品质质量数测定值。



韭葱中添加浓度为 10  $\mu\text{g}/\text{Kg}$  的乙酯杀螨醇 ( $m/z$  251.0025  $\pm$  5 ppm 质量窗口) 提取离子色谱图，显示超过 38 次扫描/峰（峰宽 6 s）。数据在 60K FWHM 分辨力下以全扫描模式获得。每次单独扫描均获得优异的精确定质量 (ppm)（每第三次扫描标记一次）。峰上的平均 RMS 质量差异为 0.6 ppm。



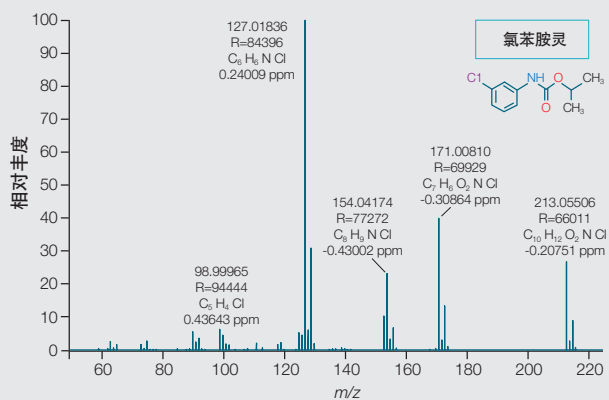
## BENT FLATAPOLE

实现最低噪音和最高稳健性。



## Thermo Scientific™ ExtractaBrite™ 离子源

Thermo Scientific™ ISQ™ 和 TSQ™ 8000 系列 GC-MS 系统在常规应用中具有坚固耐用的电子轰击电离 (EI) 和化学电离 (CI) 性能。无需泄真空便可完全拆卸和安装离子源，便于维护或切换至化学电离 (CI)；还可使用独特的离子源插件，无需放真空便可轻松更换 GC 色谱柱。



60K ( $m/z$  200 时FWHM) 下氯苯胺灵数据的采集。



操作和软件处理非常简单。

– Jana Hajšlová

# 超越传统

开启气相色谱新纪元。我们提供专利的用户可即时更换的进样器和检测器模块，让您根据需求定制 Thermo Scientific™ TRACE™ 1310 气相色谱。仅需从 GC 顶部拆下三个螺丝，即可轻松更换模块。整个过程无需专业服务帮助，耗时不到五分钟。对于关心预算的实验室来说，有了该模块化设计，便可在当前购买的GC基础上，日后根据新的应用和通量需求进行功能扩展。

## 即时连接进样器

### 即时连接SSL

Thermo Scientific™ 即时连接SSL（分流/不分流）进样器拥有优化的温控技术，以避免分流和不分流模式下的样品歧视，实现最宽范围内分析物的精确进样。冷柱头进样可确保最大限度降低隔垫热应力，减少柱流失，延长隔垫寿命。此外，还可同时实现反吹功能。

### 即时连接-PTV

Thermo Scientific™ 即时连接PTV（程序升温气化）进样器将冷柱头“无歧视”性能与蒸汽化进样器的稳健性相结合。快速升温 and 冷却集于一体，加上惰化进样室以及大体积进样功能，使其成为复杂基质和热敏化合物痕量分析的不二之选。此外，还可同时实现反吹功能。

### 即时连接氦气节省模块

专利的分流/不分流氦气节省模块将氦气送至毛细管柱，同时将氮气用于所有其它进样流程，包括隔垫清洗、分流和样品蒸发，这样可大大减少氦气消耗，成为一种独特的解决方案，减少氦气的更换频率。

## 即时连接检测器

### 即时连接-FID

Thermo Scientific™ 即时连接-FID（火焰离子化检测器）在快速采集速率下，提供最高的灵敏度和宽的动态范围，非常适合快速GC应用。

### 即时连接-TCD

全新设计的微体积 Thermo Scientific™ 即时连接-TCD（热导检测器）可用于多种毛细管柱和填充柱应用。由于本身卓越的热稳定性和快速响应能力，这款无损检测器能提供超高灵敏度，是应用最广泛的检测器。

### 即时连接-ECD

全新 Thermo Scientific™ 即时连接-ECD（电子捕获检测器）专为复杂样品的痕量分析而优化，其微型化单元配备一个可拆卸带吹扫的净化阳极，确保达到最高灵敏度和应对基质效应的稳健性。

### 即时连接-NPD

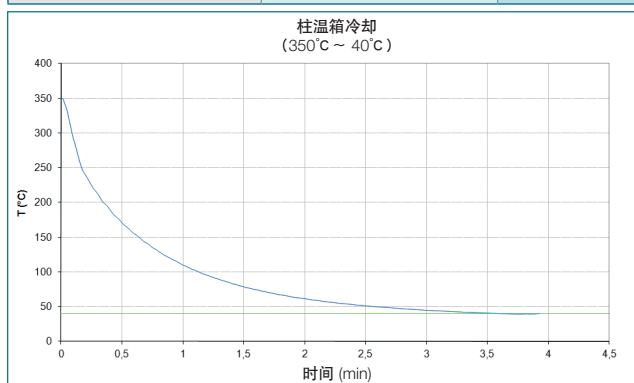
基于 Thermo Scientific™ 氮磷检测器 (NPD) 久经验证的高灵敏度，这款全新的即时连接-NPD带来了非凡的灵活性，采用多个专业离子源对特定组分进行测定。

### 即时连接-FPD

Thermo Scientific™ 即时连接-FPD（火焰光度检测器）为最苛刻的硫、磷、锡测定提供超高灵敏度和响应稳定性。宽泛的工作温度和双波长功能进一步扩展其适用范围。

### 预热时间 从关闭状态到准备就绪 (分)

柱温箱温度 50 °C 进样器和检测器温度 250 °C	TRACE 1300 系列 GC 系统	标准 GC 系统
	3.5	10.2



TRACE 1300 系列GC系统可快速达到近似环境温度。

快速柱温循环和优异的可重复的保留时间性能可实现高精度、高产出的数据。该类数据对于大批量统计 (如生物学或技术复制的“-组学”研究) 尤其重要。



## 卓越的保留时间稳定性

通过使用新颖独特的IEC (集成电子控制) 模块, 即使在最复杂的GC和GC-MS应用中, 亦可达到优异的保留时间稳定性。该稳定性确保在整个压力工作范围内具有行业领先的0.001psi 控制能力。这些小型气体控制装置通过在每个进样器或检测器模块中集成结构紧凑、功能齐全的内置设备, 将严格控制的压力或气流输送至色谱柱和检测器中。可轻松通过软件或仪器面板设置恒定或上升压力和气流, 同时电子控制可保持每次运行期间保留时间、准确度和精密度的稳定性。如果要进一步提高分析性能, IEC模块还支持进样器和所安装色谱柱的自动泄漏检查以及色谱柱评估程序。

## 自动采样 “棋先一招”

作为 Exactive GC系统的“完美搭档”, Thermo Scientific™ TriPlus™ RSH自动进样器采用自动化样品处理程序, 将自动化功能从液体、顶空及固相微萃取 (SPME) 进样扩展至高级样品处理循环, 可提高结果精度和重现性, 同时让您的实验室在系统无人值守操作和样品处理灵活方面占据独特优势。

- 自动化样品和标准品制备流程, 如稀释、加内标和衍生。
- 小体积样品的高精度进样, 最大程度增加使用微量样品进行分析的机会。
- 自动化工具切换。

烃类	平均 RT Min.	标准偏差 Min.	烃类	平均 RT Min.	标准偏差 Min
C12	4.6200	0.0003	<b>C28</b>	12.4725	0.0005
C14	6.0192	0.0004	<b>C30</b>	13.1348	0.0006
C16	7.2268	0.0005	<b>C32</b>	13.7557	0.0006
C18	8.3051	0.0005	<b>C34</b>	14.3395	0.0007
C20	9.2825	0.0006	<b>C36</b>	14.8908	0.0005
C22	10.1767	0.0006	<b>C38</b>	15.4118	0.0007
C24	10.9997	0.0004	<b>C40</b>	15.9063	0.0006
C26	11.7629	0.0005			

连续运行10次正构烷烃混合物的保留时间稳定性。保留时间标准偏差始终 ≤ 1/1000分钟。

1 μL 不分流进样	甲苯中 40 ppm C20
样品瓶中体积 (μL)	峰面积
50	81244277
40	80268993
30	82088809
20	82095395
10	84436788
5	84312030
RSD%	2.0

TriPlus RSH自动进样器为微量样品 (样品瓶中低至5μl) 提供卓越的重复性。这一性能尤其适用于痕量分析、放射性样品或需要昂贵内部标准品的样品。





## Thermo Scientific 色谱柱和耗材

通过与先进的高效Thermo Scientific产品配合使用，发挥Exactive GC系统的最佳性能。我们丰富多样的耗材和配件可为使用者提供适用于环境、食品安全、毒理学、临床研究、石化、制药以及通用分析行业的特定的应用解决方案。

- Thermo Scientific™ TraceGOLD™ 色谱柱——低流失、高重现性
- 耗材均在 Thermo Scientific™ TRACE™ 1300系列GC系统上进行测试和认证
- Thermo Scientific自动进样器系统所用样品瓶具有品质保证
- Thermo Scientific™ GFM Pro气体流量计和Thermo Scientific™ GLD Pro漏气检测器适于系统安装和维护
- 衍生化试剂和衍生级溶剂

详情请访问：[thermofisher.com/chromexpert](http://thermofisher.com/chromexpert)



Orbitrap 组  
学俱乐部



赛默飞小分子质  
谱应用技术群

赛默飞世尔科技（中国）有限公司

[www.thermofisher.com](http://www.thermofisher.com)

**全国服务热线：800 810 5118**  
**400 650 5118（支持手机用户）**

**ThermoFisher**  
SCIENTIFIC