# PEGASUS® BT4D GCxGC-TOFMS

全二维气相色谱-飞行时间质谱联用仪



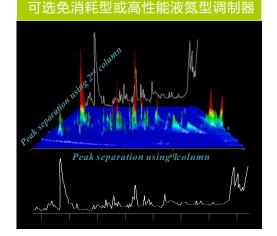


作为全二维气相色谱商业化产品的先驱,我们将 GCxGC 与 Pegasus 高通量飞行时间质谱和ChromaTOF® 软件集成,提供给您全新的四维分析能力来对样品进行更全面准确的解析。

- 1D)第一维色谱分离
- 2D)第二维色谱分离
- 3D) Pegasus TOFMS的质谱数据
- 4D) ChromaTOF<sup>®®</sup>有的保真解卷积 (True Signal Deconvolution®)

自2003年、2012年获Pittcon金奖以来,Pegaus系列质谱历经7代升级,性能稳定功能强大。同时获奖最佳软件ChromaTOF软件已升级至5.X,代表了行业应用发展的最前沿水平。GCxGC气相模块市场绝对占有率,公认为最稳定可靠的全二维气相设计,成为业界数据交流的统

专利no. US4472631、US4490806、USS175430、US5367162、US5712480、IT1167562、WO9220435、WO8304326、WO9500236、EP540720、CA1225155,等百余项专利。



高可靠性无故障免维护! 98%市占率

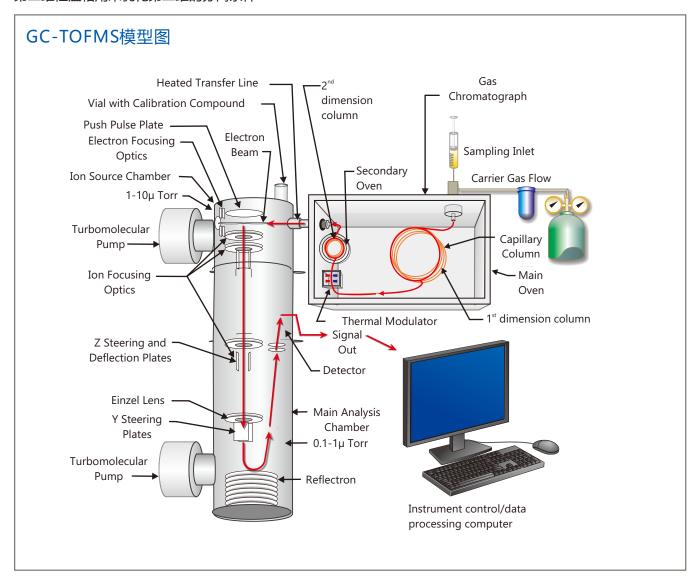
## 复杂样品的GCxGC分析

### 什么是GCxGC?

全二维气相色谱最大限度的实现了对复杂样品的准确分析和表征。相对于中心切割 (GC+GC), GCxGC使所有的第一维流出物全部经过第二维色谱柱进行正交分离, 从而大大提高了对样品的全组份分离度。中心切割技术只能在某一相对狭窄, 预先检测确定给出的时间段内进行低效二次分离。成百上千次中心切割分离效果可能只相当于LECO公司GCxGC的一次进样, 而且灵敏度远不及GCxGC。

GCxGC为样品分析增加了第二维的色谱分离,通过使用正交的分离固定相(如非极性-极性)在同一次分析过程中完成快速的两次分离。两维的分离机理大大扩展了色谱平面积——极大的提高了峰容量。

LECO的GCxGC热调制器是增加色谱峰容量和提高分辨率的关键所在。调制器置于两维色谱柱之间,两级四喷口调制器包括两个独立的冷捕集区,第一级调制器周期性冷聚焦第一维色谱柱的流出物,之后再由第二级调制器二次聚焦后脉冲放射入第二维色谱柱进行二维分离,两级调制器协调运作保证所有一维馏份在进入热源前都被正确的聚焦。第二维柱温箱用来优化第二维的分离条件。



第二维炉箱和调制器独立供电,封闭设计,可快速程序升温,冷喷热喷时间可设,调制周期可程序变化。安装方便,调制周期软件设置,无需手工控制柱长。LECO的ChromaTOF<sup>®</sup>一体化软件集成控制仪器、信号采集、数据处理。

# 复杂样品的GCxGC分析

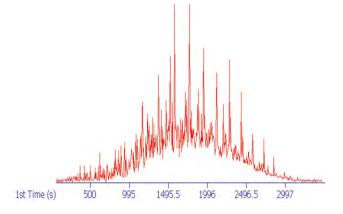
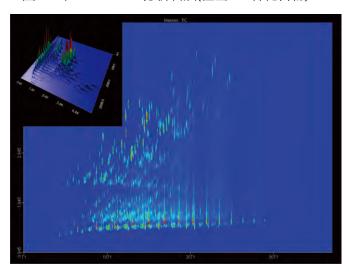


图2.一维GC-TOFMS分析石油(检出678种化合物)



GCxGC-TOFMS分析石油(检出12460种化合物)

### GCxGC的优势

传统的GC-MS技术无法满足我们对复杂样品(如图中的石油样品)的分析需求。

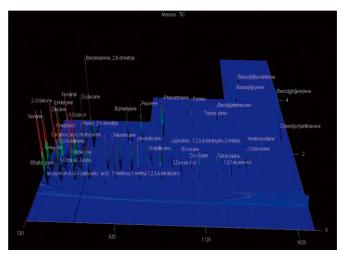
LECO的高通量飞行时间质谱为全二维气相色谱技术 提供了性能卓越的质谱检测器,这一结合是分析复杂 体系的完美解决方案。Pegasus 4D的高精确 (High-Definition) 样品解析能力,搭配 ChromaTOF 软件 强大数据处理功能,使任何实验室对最具挑战性样品 的定性定量分析都变的游刃有余。

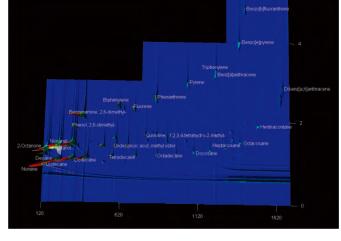
左图是GC-MS和GCxGC-TOFMS分析石油样品色谱图。可以看出样品的复杂程度。如果没有LECO质谱强大的解析能力,对如此复杂体系的精确表征几乎是不可能的。

- 谱图采集速率可以达到500全扫描谱图/秒(500Hz) Pegasus是唯一的可以和多维色谱联用的质谱检测器
- 调制器冷聚焦提高了10倍以上的检测灵敏度
- ●保真解卷积 True Signal Deconvolution®——世界上没有任何质谱厂商能在Deconvolution上与LECO相提并论
- 自动峰识别
- 宽的动态线性范围 (4-5个数量级以上)
- 免维护离子源
- 稳定耐用的两级四喷口热调制器
- 第二维柱温箱提高选择灵敏度

### 可变调制周期程序

按照 GCxGC 分析的重要原则,最优化一维柱分离的色谱分辨率,就要求二维调制周期尽可能的短。这就要求以第二维上最后流出化合物的保留时间设为调制周期。ChromaTOF可以梯度变化调制周期。这种革命性的功能可以为复杂组份提供令人惊叹的分离效果。





使用程序变化调制周期分析样品的效果图。

## 全世界最快的质谱

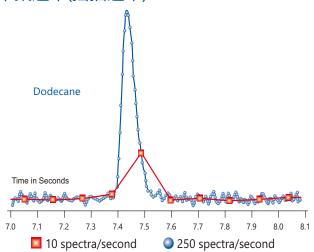
### 每秒500张全扫描谱图 (35000Hz)

科学界的共识认为最小需要采集10个数据点才能对一个单一纯净色谱峰进行正确的定义。

然而对于复杂样品来说,最小需要采集18-20个点的数据才能进行自动峰识别 (Automated Peak Finding) 及保真解卷积 (True Signal Deconvolution®), 以得到正确的峰定义及准确的定量。Pegasus TOFMS是进行常规GC分析、高速GC 及全二维气相色谱的理想选择。

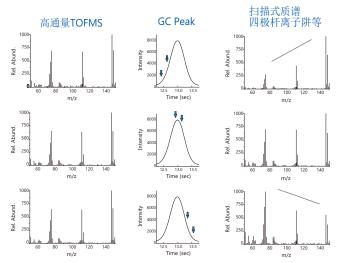
通过自定义最高可达500Hz的采集速率,Pegasus TOF能提供足够的数据密度来对最窄的色谱峰进行精确的表征。

### 采集速率(扫描速率)



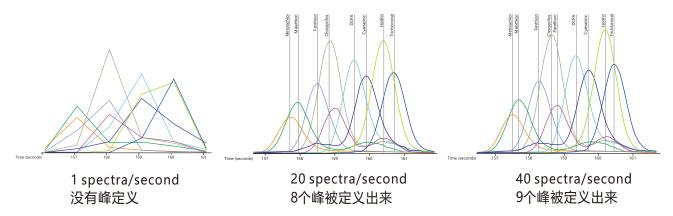
250张全扫描谱图/秒的扫描速率可以对色谱峰采集18-20个数据点信息。10张全扫描谱图(其它四级杆、离子阱、低通量TOF等质谱)只能歪曲峰形、峰高及峰顶点位置。

### 谱图连续性



飞行时间质谱与生俱来的优势是没有离子浓度歧视。因为进入离子源的色谱峰浓度不断变化,扫描式质谱在每一次扫描中,每一个质量单位的丰度是随时间变化着的(spectra skew)。如果色谱峰浓度变化剧烈,则对于未知峰的解卷积是不可靠的。TOFMS没有此局限性,对整个色谱峰任何一点都可以得到无倾斜的质谱图。

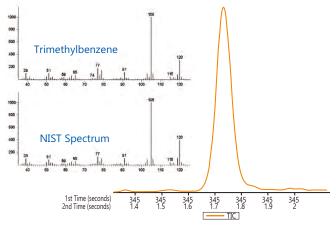
### 采集速率对于自动峰识别的作用



在这个样品中,需要高于40张全扫描谱图/秒的采集速率才能进行自动的解卷积(Automated peak identification and deconvolution)并鉴定出9个农残组份。

有采集速率 + 没有谱图连续性 = 有限的解卷积 有谱图连续性 + 没有采集速率 = 有限的解卷积 高采集速率 + 连续性谱图 = 保真解卷积! (True Signal Deconvolution)

# 高通量TOF的必要性



在200张谱图/秒扫描速率下,150毫秒宽三甲苯的全二维峰被精确定义。

### TOFMS——全二维色谱的必配检测器

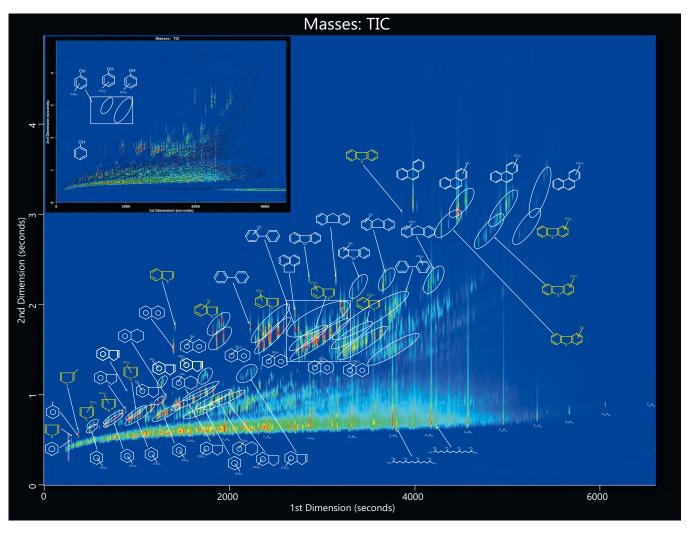
从第一维色谱柱流出的馏份在进入第二维色谱柱之前经调制器聚焦,其展宽显著变窄。由此产生的色谱峰宽范围为50到200毫秒(左图)。如此窄的峰宽就要求检测系统至少有200Hz或者更高的扫描频率来保证记录完整的色谱峰形。

只有 Pegasus TOFMS,连续的全谱采集频率达到500Hz,才能符合任何GCxGC分离的要求,收集足够充分的质谱数据。

图5可以看出,在如此高采集速率下,Pegasus TOFMS谱图采集质量非常好。

### TOFMS的定性优势

Pegasus TOFMS有机结合GCxGC的强大分离能力,其定性优势无可比拟。下图中我们可以看出,GCxGC正交分离得出的结构化谱图中,相似化学性质的某类分析物呈现特征性谱带,按族分布。以此化学结构特征作为依据, Pegasus TOFMS可以实现更精确的单个化合物的定性。



由GCxGC提供的结构化色谱图中,不同族类化合物呈特征性谱带出现。再结合TOFMS的大数据处理能力进行质谱过滤筛查,大大简化了对复杂性柴油样品的解析。

## BT4D GCxGC-TOF的优势

## 用GCxGC-TOFMS改变你的分析视界

### 定性能力

高分离度GCxGC极大提升了您样品的可定性峰数

### 定量能力

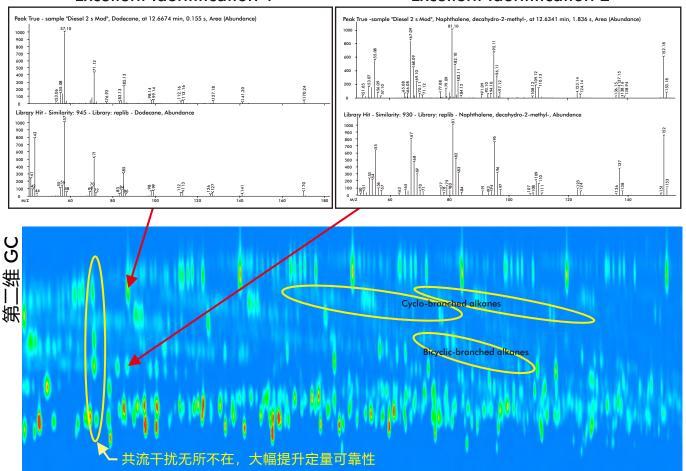
高灵敏度、宽动态范围和解卷积提供您达到更低的检测限及更准确结果

BT4D 全自动定性定量,同样一针进样,提供海量人工智能数据。不但获得更大量有效数据,同时大大提高了您实验室产出和效率。

# 一针进样,全组份自动预测、定性、定量

#### **Excellent Identification 1**

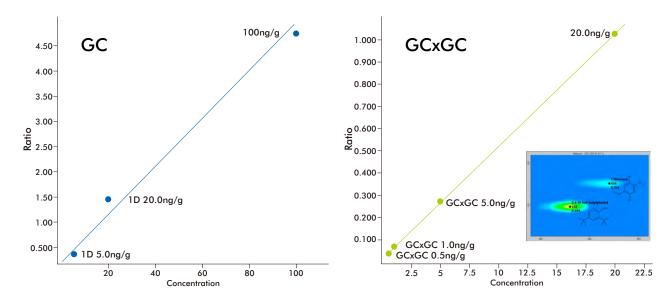
### **Excellent Identification 2**



# BT4D GCxGC-TOFMS的优势

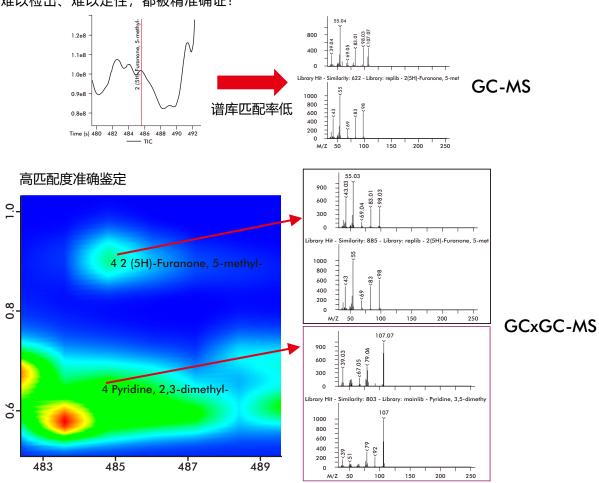
# Pegasus BT4D定量分析

GCxGC可以大幅提高色谱分离度,把目标物从背景基质干扰中分离出来。如下图所示,氯甲氧苯的一维GC和全二维GCxGC定量标准曲线相比较可见:GCxGC的高分离度,大大提高了定量氯甲氧苯的灵敏度、线性及定量准确度。



# Pegasus BT4D定性分析

曾经的难以检出、难以定性,都被精准确证!



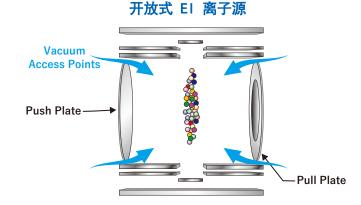
# BT4D GCxGC-TOFMS 的优势

Pegasus BT4D结合了新的紧致的气相质谱硬件以及功能强大的 ChromaTOF® 软件,让您在常规检测中获得更高的仪器性能,更完整和全面的数据。推荐的应用领域:农残、代谢组学、食品、环境、石化、质检和科研等。

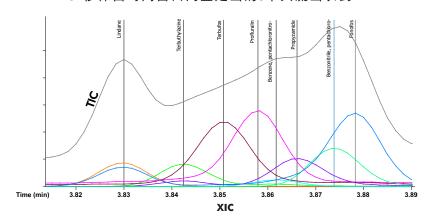
### StayClean™ 专利免清洗离子源

开放式离子源让您摆脱因离子源清洗\*导致的停机维护。这意味着您可以同样的时间运行更多的样品。

\*即使在 3,000 针污泥进样后,离子源也无需清洗。

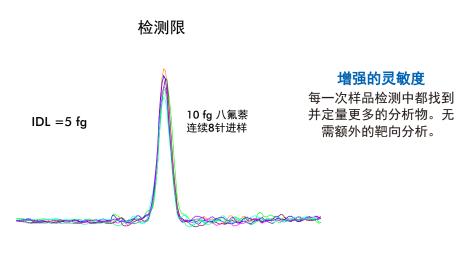


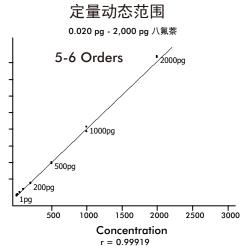
5 秒保留时间窗口内鉴定出的8个共流出农药



#### NonTarget Deconvolution™ (NTD™)

自动解卷积技术可有效解析共流出峰和基质 干扰。

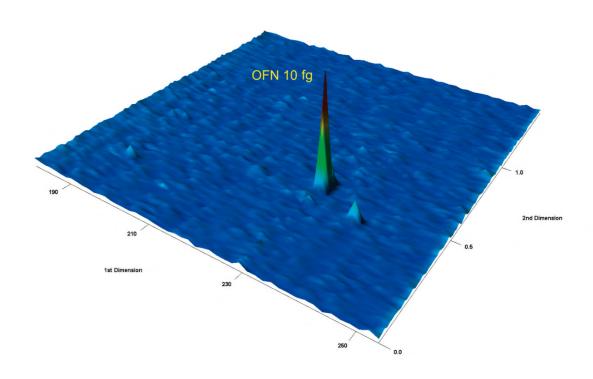




# BT4D GCxGC-TOFMS的优势

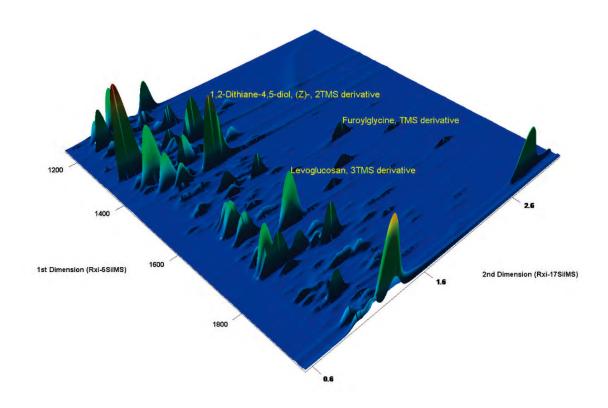
## 优异灵敏度

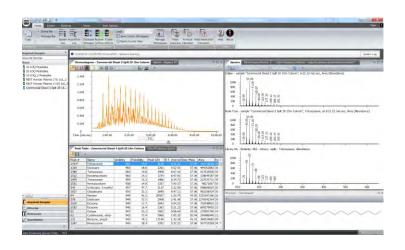
全质量范围全采集,无选择性高灵敏度,看见您所不曾见!



# 非靶向分析,鉴定更多,结果更有信心!

吸烟人群尿液的 Pegasus BT 4D全二维分析,客户重点关注个别代谢物如下。



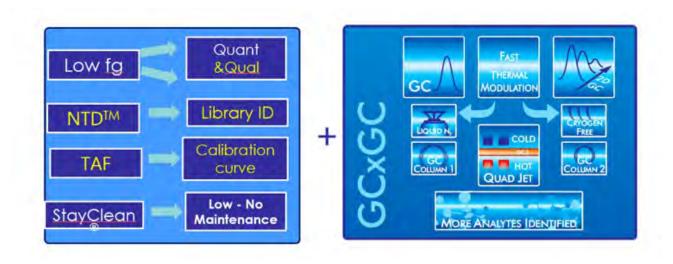


- 业内领先的软件技术帮助您发现和定量更多的分析物。专利的解卷积算法提供干净、高质量的质谱图。
- 全扫描完整地记录了样品中的所有质谱信息,方便您将来重复挖掘。
- 一如既往地继承了Pegasus品牌的 稳定性和可靠性。



获得更好的色谱质谱数据仅仅是完整分析解决方案的一部分。更重要的是我们该如何利用所有的数据。 LECO有一个解决方案─我们独家的 ChromaTOF软件可以无缝高效地处理您的数据,去除分析物鉴定、 定量和报告中的不靠谱猜测。

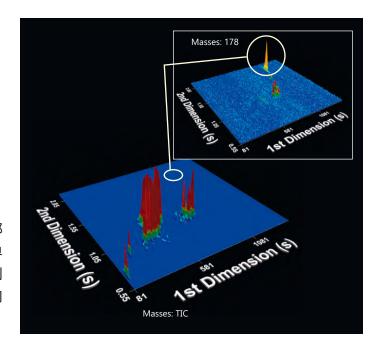
- □ 峰表同步解卷积后的谱库搜索结果,方便您核查和对比
- □ 过滤功能可以轻松地提取您感兴趣的部分,且方便被保存并应用到其他任何数据
- □ 易于配置的软件界面。您可以自定义风格来审阅数据
- □ 数据库功能包含了关于您的项目的所有信息,包括样品信息、元数据、数据、方法学和报告
- □ 自动化批量样品采集;进样器、气相和质谱方法管理及高度自动化的数据处理
- □ 定量功能允许查看色谱图和积分区域,以及校正曲线和结果
- □ 谱库功能可管理商业质谱库如 NIST 或 Wiley, 也可以创建您自己的质谱库
- □ Reference 功能轻松比对两个样品间的异同
- □ 诊断界面可以查询详细的仪器运行参数、真空度和离子源参数,并提供了快速采集自检功能

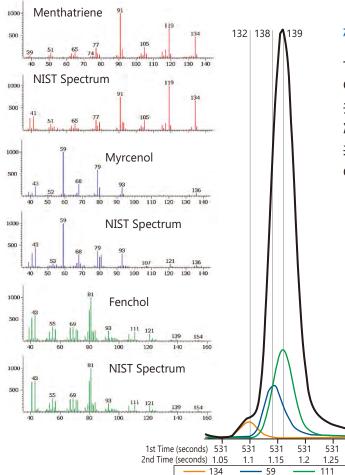


### ChromaTOF-自动GCxGC数据处理

LECO独有的 ChromaTOF 软件不仅集成控制整台仪器及周边设备,而且提供独一无二的全自动GCxGC-TOFMS 数据处理功能。简单的预设一个数据处理方法,就可得到完整的样品数据报告,包括样品的广谱定性结果和指定目标化合物的定量数据。

右图白柠檬油的TIC全扫描谱图中,在灰色的部分没有色谱峰出现。然而,当在Pegasus上单独显示Unique mass 178的时候,我们可以看到一个痕量化合物。为了看到Citrapene峰,我们必须能找出在基线以下的峰——只有Chroma-TOF软件可以全自动的帮您找出答案。





### 样品的定性

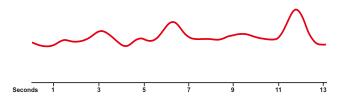
一个好的软件包会大大减少分析样品所花费的时间。 ChromaTOF 会自动找出整个色谱图中的所有的峰, 并对它们——进行解卷积 (Deconvolution),得到干净的质谱图。隐藏在基线以下的峰,及被其他化合物 共流干扰的峰都会被自动检出。和其他软件包相比较, ChromaTOF的优势让人无法回拒。

- 自动峰识别 (Auotomated Peak Finding)
- 未知物解卷积 (Non-Target Deconvolution, NTD) 生成无干扰信号的纯净质谱图
- 样品比较 (Reference Compare) 功能自动比较样 品间组份差异,相对参照样品给出未知样品的成份 差别。
- •目标物定量功能(Target Analyte Finding,TAF), 优化了定量功能,优于传统四极杆等质谱定量能力。
- •计量学统计比较功能,多组样品的群间群内差异性比较,适用于主成分分析、偏最小二乘法等统计学数据处理方法。

质谱过滤筛查功能,精确分类分族,精确查找某类目标化合物。

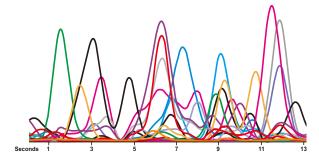
在0.3秒的一段第二维色谱图中,三个共流出物被自动峰识别 (Automated Peak Find) 检出。

# 自动峰识别和保真解卷积®



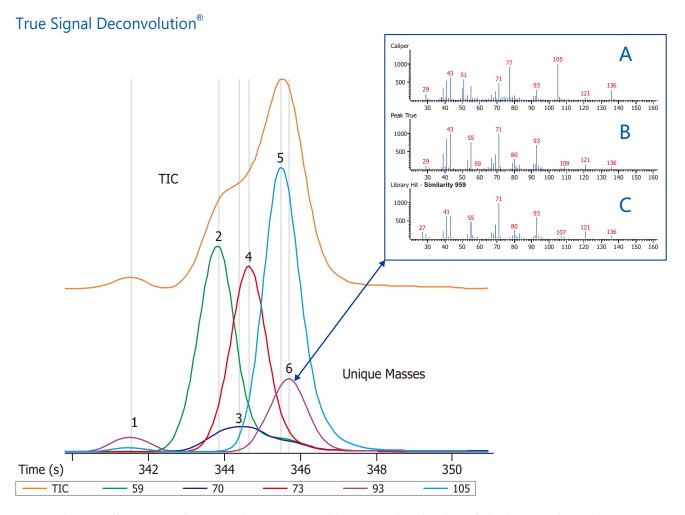
13秒的TIC谱图中可见到8个色谱峰。

检测痕量未知物是非常困难的。通常情况下,化学分析师需要在全离子流图中认真辨认细微的基线偏移。如果样品成份越复杂,TIC中背景信号干扰越严重,就会导致大量未知化合物信息丢失在背景中。



自动峰识别算法在13秒谱图中自动找出所有的21 个化合物。

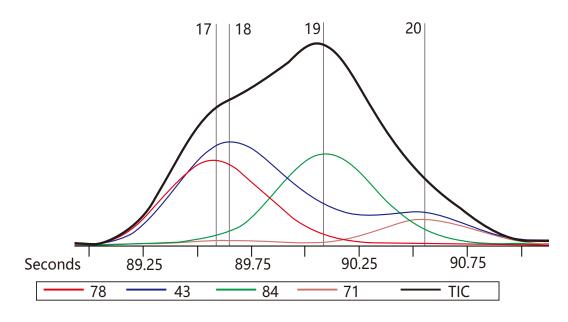
只要设定好色谱峰宽及信噪比阈值, 峰查询算法会自 动识别并标定所有符合条件的色谱峰。共流遮蔽化合 物、TIC基线下的峰、大背景干扰下的小峰都会被自 动检测出, 并形成峰表报告。



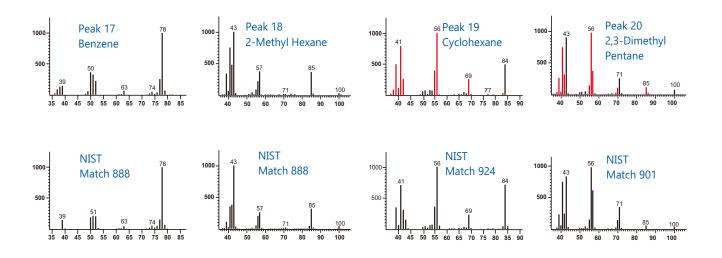
在商品洗手液的热脱附分析中,里那醇(Linalool)被从其它5种共流干扰峰中自动解析出来。解卷积后的质谱图 (B) 自动与NIST谱图 (C) 比对,大大提高了谱库匹配率,化合物鉴定更加准确。没有其它GC-MS厂商能提供给您如此功能强大的解卷积及自动峰识别功能。

### True Signal Deconvolution®

自动峰识别检出所有化合物峰之后,每一个分析物都被保真解卷积,去除掉系统背景、基质背景、共流物背景的干扰,最终给出干净的质谱图。既使是共流化合物中共有的离子信号也可以被精确的按比例分配,从而得到完整纯净的质谱图。这一去卷积化的质谱图就可以用来进行谱图解析或库检索(多库共检、用户自建库),从而进行化合物鉴定。



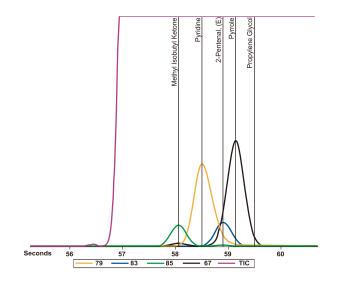
自动峰识别在石脑油烃TIC中2秒片段内查出4个分析物共流出。



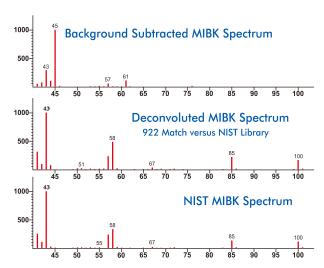
在保真解卷积化后,保留时间仅相差0.07秒的17号和18号峰的质谱图可以通过谱库比对精确的被自动鉴定出来。19号峰和20号峰既使大部分离子信息是共有的(见质谱图红色部分)也能被轻松鉴定出来。

### 未知化合物的基质遮蔽

自动峰识别和保真解卷积同样擅长在高背景基质干扰下挖掘痕量分析物。ChromaTOF能展现其它GC-MS系统不能检测出的分析物。Pegasus可以在400,000倍浓度基质背景下自动找出并精确鉴定未知痕量化合物。当您需要样品全指纹信息时,ChromaTOF能给出独一无二的最佳结果。



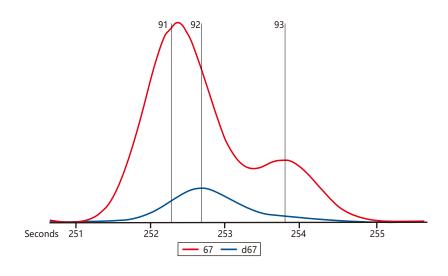
在大背景干扰下,小的未知分析物可以被自 动检出。



当使用传统的手工背景扣除方法不能展现MIBK真身时,自动峰识别和保真解卷积精确的检测和定性MIBK峰。

### 基质遮蔽峰的解卷积

基质干扰会歪曲目标分析物选择定量离子的峰形,影响积分面积的精确定量。我们一般采取的对策比如:垂直线 (Perpendicular drops)、优化分离条件去除干扰、重新选择校正离子、修改样品制备步骤去除干扰,这样不但 牺牲精确性而且费时费力。而ChromaTOF软件的保真解卷积算法能对共流化合物的共享离子进行精确的按比例 分配。这一算法同样能够去除干扰只显示目标分析物的离子信息。不用任何辅助措施就大大提高了定量准确性 和精确性。

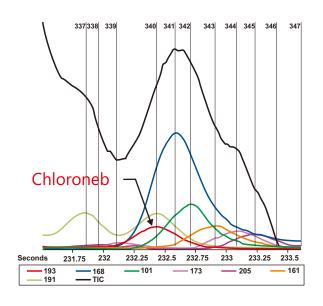


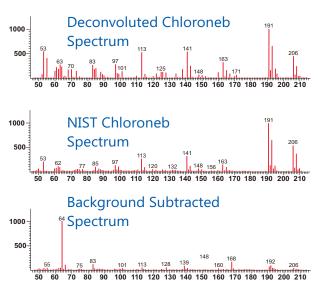
目标分析物92号峰用m/z 67(红色)来校正。但是基质干扰峰91号和93号的质谱图都含有m/z 67离子信息。保真解卷积(TSD)能精确的按比例分配共享离子,只显示92号峰(蓝色)供献的m/z 67离子强度。

### 未知化合物的基质遮蔽

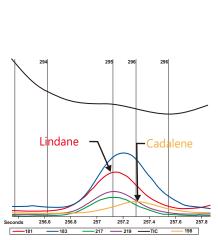
准确定性是定量分析的基础。LECO的自动峰识别和保真解卷积算法准确锁定目标物,去除共流物干扰,提供给您没有基质干扰的质谱图。有效避免了假阴性和假阳性结果。

其它质谱采用的选择离子扫描 (SIM) 是用来解决基质复杂性问题的。但SIM丢失了大量的质谱信息 (这些信息对准确定性非常重要),而且其定性能力被证明是远不如解卷积。SIM只是提高了对目标选择离子的灵敏度,而Pegasus结合True Signal Deconvolution®,带来的是对样品中所有离子信息的高灵敏度。

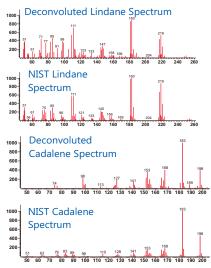




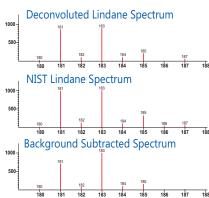
左图表示地茂散 (Chloroneb) 隐藏在相当大的基质背景下。去卷积解析后的质谱图(上)与NIST谱图(中)高度匹配。而通过背景扣除法得到的质谱图(下)则信息缺失。如果没有解卷积(TSD),我们可能就会认为样品中没有地茂散。



林丹(Lindane)和卡达烯(Cadalene) 在TIC基线背景以下,但仍可被自动 检出。



林丹和卡达烯通过谱图比对被精确鉴定。



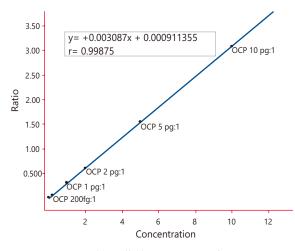
在SIM分析中, 181和183的离子比例是精确定性的重要依据。解卷积后的林丹质谱图(上)与 NIST 标准谱图的相似度在96.6%。背景扣除法(下)得出错误的离子峰比例70.5%, 这是因为没有能扣除掉共流物-卡达烯产生的183离子干扰。

### GCxGC自动定量分析

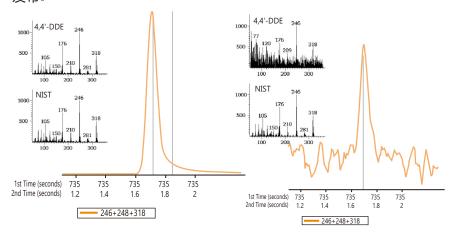
LECO的ChromaTOF软件提供了对GCxGC-TOFMS数据的完全自动定量分析

- •校正曲线校准点数目无限
- •内标数目无限
- •校正曲线动态范围大
- 个别点的权重因子
- 扩展校正线性范围 (Extended range Calibrations)
- •保留指数跟踪 (Retention Index Probes) 离子比率

大量可选的电子报告格式和输出功能,方便定量结果的 发布。



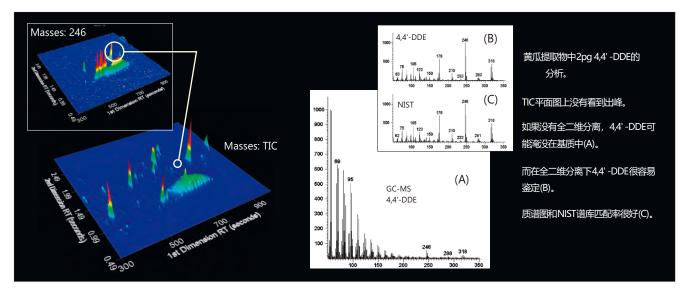
4,4'-DDE校正曲线, 2pg/uL到10pg/uL。



### 分析物校正

上图是有机氯农药降解物4,4'-DDE在GCxGC-TOFMS上的标准曲线。柱上浓度范围从2 fg到 10pg,完全满足食品基质中农药的分析要求。左图为高浓度和低浓度的246提取离子图,同时给出0.2 pg/µL和1000 pg/µL标准品的质谱图做比较。

10pg (左) 和10fg (右) 4,4'-DDE标准品谱图。



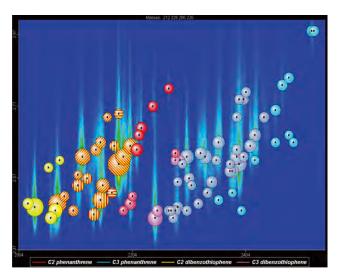
### 样品定量

痕量化合物的定量经常因基质的干扰而被复杂化。上图, 黄瓜提取物的基质部分在色谱表面图中很清晰的被隔离出来。GCxGC独有的解析能力成功的将4,4′-DDE与复杂的基质峰群相分离, 实现了对4,4′-DDE更真实直观的定性和准确的定量。

### 引领GCxGC数据处理前沿方向

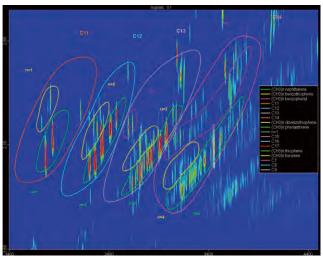
LECO在GCxGC数据处理领域的开拓性成就使其软件包功能异常强大,ChromaTOF<sup>®</sup>代表了GCxGC前沿的数据处理水平。即使是要求十分苛刻的样品,也可以被轻松解析。大大夯实了分析结果,提高了实验室的效能。

- 用户自定义分族归类——基于分析物在色谱平面上相似性的峰区域划分
- 气泡图——峰强度通过圆径表现
- 质谱图筛查过滤功能增强质谱数据挖掘能力



气泡图直观的显示出峰归类和峰强度。

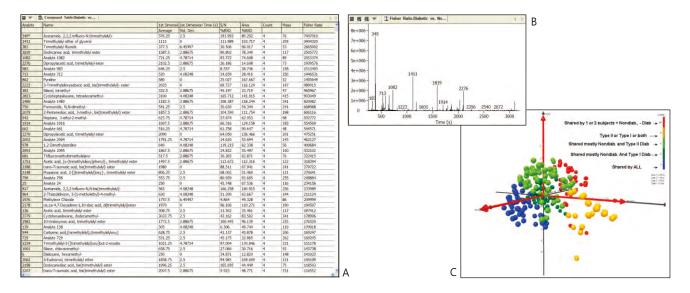
- •客户自定义报告格式
- 样品比较功能
- 内建高级数据挖掘功能表单
- 化学计量学统计比较功能
- · 数据输出接口兼容性高,利于二级数据分析软件输入



在复杂的石油样品中,用户通过族类划分来自定义的含硫和不含硫化合物区域,Script可自动找出样品中所有含硫化合物

### 计量学统计比较

Chroma TOF兼容多款统计比较功能软件为您提供了化学计量学统计分析的先进工具。它可以对多组样品中每一样品的全组份进行峰匹配,提供统计评价数据,自动计算 Fisher 比率以体现类内及类间差异性。此功能对组学研究方法(如代谢组学) 极其有用。



Statistical Compare可以对样本中所有组份进行全比较(A),计算出Fiser Ratio(B),数据可以导出制为PCA图(C),格式兼容Miner3D、SIMCA、MetLab等程序。

## 生命科学及化学分析解决方案

全世界,每一天,LECO质谱持续挑战当今世界最复杂的样品。不论您的样品来源于食品、石油、化工、环境、质检以及生命科学(代谢组学),我们都有完整成熟的解决方案祝您成功!



我们 Simply GCxGC 工具帮助您从菜鸟到专家,一步一步最优化 GCxGC 峰容量。详见 https://www.leco.com/simply-gcxgc

### 质量和服务承诺



技术研发中心



客户演示和应用中心

专注分析仪器80年的力可公司一直享有精确、快速和简便易用的声誉,拥有25家子公司。全球销售和服务网络,专注于提高服务质量和用户满意度。我们承诺产品质量高于 ISO-9001:2008 标准。我们遵守 CE质量和安全规范。所有仪器均在一致性测试中心通过品保质控。

### 培训课程

LECO提供的专业仪器培训课程能帮助您快速系统地熟悉仪器,发挥仪器的最佳性能。典型的培训课程将系统全面地讲述仪器的运行原理、仪器方法开发、系统优化和维护保养。课程也将包含许多高级的软件功能使用,如定量功能、质谱库创建、报告模板、用户自定义选项和一维二维色谱条件优化。培训课程也提供了网络教学模式。另外,课程也允许学员去我们的其他用户那学习 GC-TOFMS, GCxGC和 GCxGC-TOFMS 等仪器。您可以在我们位于密西根州圣约瑟市的工厂参加课程,或者无论您在哪,只需要一根网线和电脑,您就可以参加我们的在线培训课程。详情请见www.leco.com/support。



"每一个人都很博学(才华横溢,如果我可以这么说),且乐于去帮助我们解决任何问题。 我感觉非常惊喜,并惊叹于LECO提供的高水平培训。"

—— LECO 培训课程学员

### 力可中国质谱部

地址:上海市淮海中路283号香港广场南座2508室,200021

电话: 021-64729955 传真: 021-64723700

部门负责人:\_\_13761500751, gary\_zhang@leco.com

维护报修: fiona\_zheng@leco.com 售后备件: maggie\_pan@leco.com 物流查询: roger\_zhang@leco.com

