

# 全扫描分析性能

## Thermo Scientific Exactive GC 和 Thermo Scientific Q Exactive GC 质谱仪

Cristian Cojocariu<sup>1</sup>, Dominic Roberts<sup>1</sup> and Paul Silcock<sup>1</sup> Thermo Fisher Scientific, Runcorn, UK

### 目标

当采用全扫描数据采集模式时，Thermo Scientific™ Exactive™ GC Orbitrap™ GC-MS 系统和 Thermo Scientific™ Q Exactive™ GC Orbitrap™ GC-MS/MS 系统在设计上具有等效性能。本研究旨在采用全扫描数据采集模式测试 Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统的性能。我们对这两款质谱仪的一些关键分析参数进行了评估，如扫描速度、灵敏度、质量精确度、动态范围和线性范围。

### 实验

在所有实验中均使用 Thermo Scientific Q Exactive GC 组合型四极杆-Orbitrap 质谱仪和 Thermo Scientific Exactive GC 质谱仪。使用 Thermo Scientific™ TriPlus™ RSH™ 自动进样器执行进样操作，并使用 Thermo Scientific™ TRACE™ 1310 气相色谱仪和 Thermo Scientific™ TraceGOLD™ TG-5SiIMS 毛细管柱（30 m x 0.25 mm x 0.25 μm，部件号：26096-1425）对待测分析物进行色谱分离。在完全相同的质量范

围内使用全氟三丁胺对 Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统进行调谐和校正，使其质量精确度 < 1.0 ppm。默认电离模式为电子轰击电离 (EI) 并使用全扫描 60,000 分辨率 ( $m/z$  为 200 时的 FWHM) 操作质谱仪 (表 1)。使用来自 GC 柱流失峰的硅氧烷质量数对采集数据进行 lock mass 校正 (表 1)

### TRACE 1310 GC 系统参数

进样体积 (μl):	1.0
衬管	LinerGOLD™, 一端渐细 (部件号: 453A0344-UI)
进样口 (°C):	250
进样模块和模式:	不分流
载气, (mL/min):	氦气, 1.2

### 柱温箱温度程序:

温度 1 (°C):	40
保持时间 (min):	1.0
温度 2 (°C):	250
速率 (°C/min)	30
保持时间 (min):	0.0
温度 3 (°C):	150
速率 (°C/min)	30
温度 3 (°C):	320
速率 (°C/min)	2.0

表 1. 气相色谱质谱仪分析参数。

### 质谱仪参数

传输线 (°C):	280
电离类型:	电子电离
离子源 (°C):	230
电子能 (eV):	70
采集模式:	全扫描
质量范围 (Da):	50-450
质量分辨率 ( $m/z$ 200 时半宽高):	60k
	207.03235
Lock mass, 柱流失 ( $m/z$ ):	281.05114
	355.06993

## 扫描速度

当设置相同的质量分辨率时，Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统具有相同的扫描速度。如图 1 示例所示，在一段三秒

宽的峰中获得数量相等的数据点（ $m/z$  为 179.17923 的提取色谱图）。有关 Q Exactive GC 系统的其他信息先前已公布。<sup>1,2</sup>

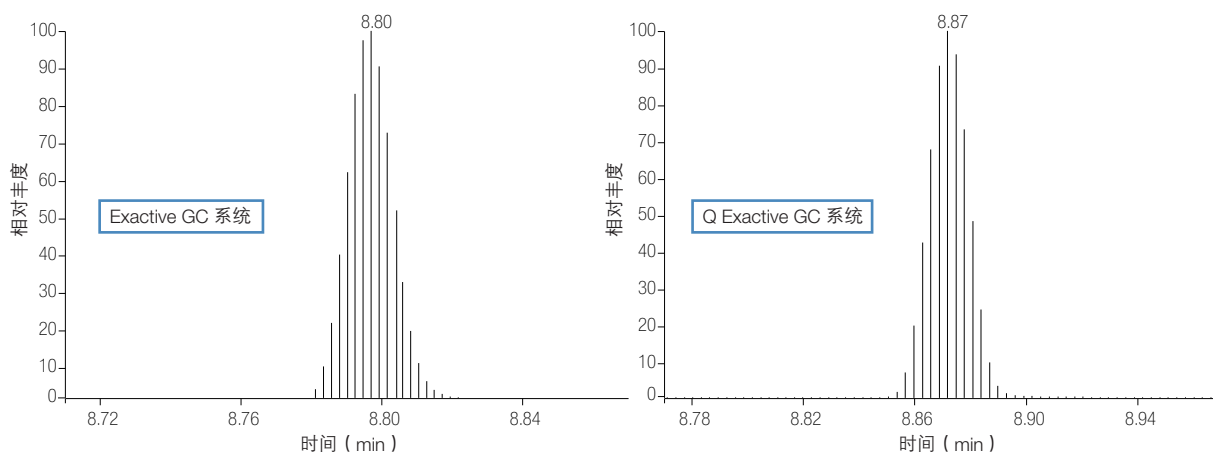


图 1. 在 Exactive GC 和 Q Exactive GC 系统上测量 2-丁基-5-己基八氢-1H-茚时所显示的相同扫描速度。两个质谱仪系统均在 60k 分辨率（ $m/z$  为 200 时的 FWHM）的全扫描模式下运行。

## 灵敏度

为测试两款质谱仪是否具有相近的灵敏度，将二氯甲烷中 8270 半挥发性 MegaMix<sup>®</sup> 工作溶液 (Restek) 稀释至 1 pg/ $\mu$ L（二氯甲烷中），使用 Exactive GC 和 Q Exactive GC 系统同时进行分析。在两个不同日期对该标准液进行 8 次重复进样。针对每款分析仪，计算这两天混合物中所选化学品的

仪器检出限 (IDL) 并在图 2 中报告平均值。为具有相应自由度，IDL 的计算考虑了 Student t 临界值（99% 置信度）。当仪器检出限在 0.04 ~ 0.17 pg/ $\mu$ L 时，两个系统均具有出色的灵敏度。该实验结果表明，Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统可检测到浓度相近的分析物。

化合物	RT (min)	Exactive GC 系统	Q Exactive GC 系统
硝基苯	5.53	0.11	0.10
异佛尔酮	5.75	0.06	0.10
4-硝基苯胺	7.44	0.06	0.10
萘嵌戊烷	7.93	0.05	0.07
二苯胺	8.55	0.04	0.09
六氯苯	9.01	0.06	0.13
菲	9.40	0.15	0.15
咪唑	9.61	0.07	0.08

图 2. 计算出的所选分析物的仪器检出限 (IDL, 表示为 pg on-column)。数据显示 1.0 pg on-column 8270 半挥发性溶剂标准液的 8 次重复进样。使用 Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统在两个不同日期获得两组测量值。所注释的误差线为从两组测量结果中计算出的标准偏差。此外，还注释了由两组测量值计算出的标准偏差。

## 线性动态范围

较宽的线性动态范围对于精确质量测量至关重要，尤其是在处理所分析样品含有复杂多变的化学背景的应用（不包括常规农药筛选、代谢组学）时，因为这些化学背景可能干扰待测分析物。为测试这两款质谱仪是否具有类似的线性动态范

围，对浓度上升（0.1 pg ~ 10,000 pg on-column）的 8270 半挥发性混合液进行重复进样。图 3 为从两款质谱仪获得的六氯乙烷的化合物线性示例，结果显示这两款仪器具有等效性能。

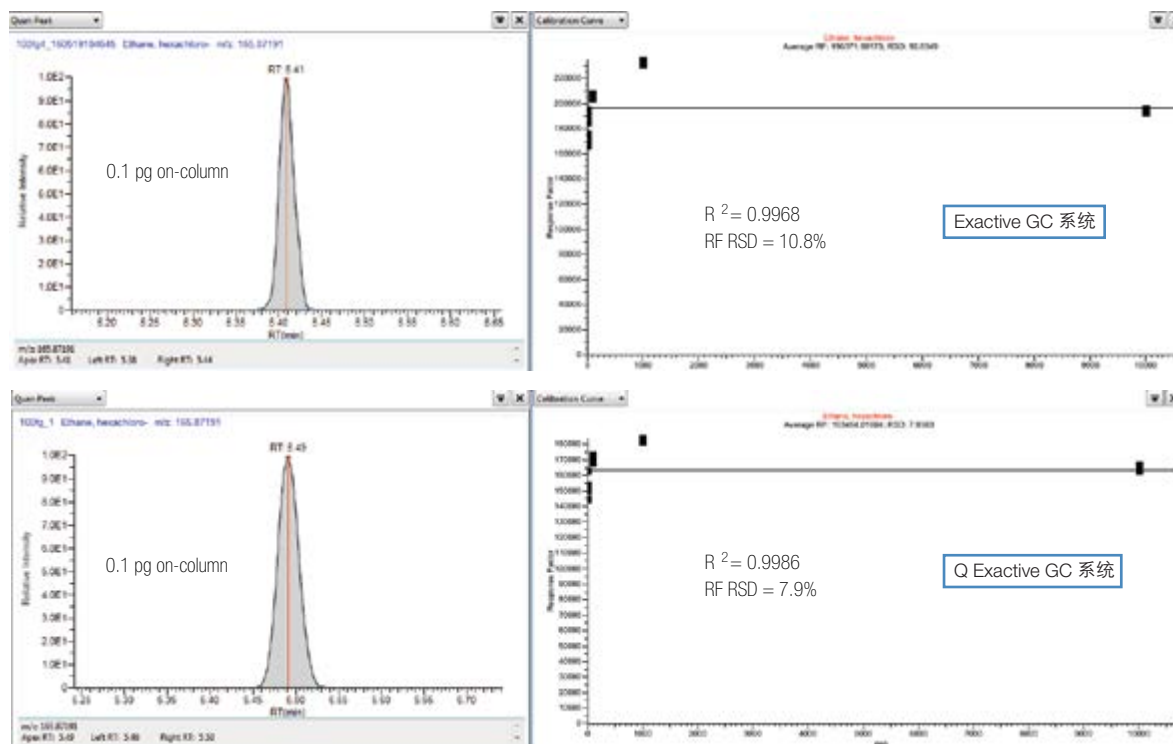


图 3. 通过使用进样超过六个数量级的六氯乙烷溶液标准液显示 Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统的线性动态范围。对应 0.1 pg on-column 六氯乙烷的提取离子色谱图 ( $m/z$  为 165.87191) 与在 0.1-10,000 pg on-column 的浓度范围内测定的决定系数 ( $R^2$ ) 和 %RSD 值一同显示。

此外，在表 2 所示六氯乙烷的不同浓度条件下，两款质谱仪均具有出色的峰面积重复性（3 次进样），表 2 显示在六个数量级的浓度范围内 %RSD 为 0.6-6.9%。

六氯乙烷浓度 (pg on-column)	Exactive GC 系统 %CV (n=3)	Q Exactive GC 系统 %CV (n=3)
10000	0.8	1.7
1000	0.6	0.6
100	0.9	1.6
10	1.4	1.2
1	0.8	2.1
0.1	6.9	3.6

表 2. 通过对不同柱上浓度的六氯乙烷溶剂标准液进行 3 次重复进样所计算出的 %CV。表中显示 Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统的数据。

## 始终保持 sub-ppm 级别的质量精确度(无论化合物浓度如何)

如下图所示六氯乙烷，两款质谱仪在不同化合物浓度下均可保持 sub-ppm 级别的质量精确度。在所有情况下，无论质荷比和浓度水平如何，Exactive GC 系统和 Q Exactive GC

系统均可获得 1ppm 以下的质量精确度。由于质量测量精确度不够会导致错误识别和某些重要化合物（如筛选实验中的农药）无法检出，所以始终保持 sub-ppm 级别的质量精确度非常重要。<sup>1</sup>

浓度	EGC	QEGC	EGC	QEGC	EGC	QEGC	EGC	QEGC	EGC	QEGC
ppb on-column	m/z	m/z	m/z	m/z	m/z	m/z	m/z	m/z	m/z	m/z
0.1	0.6	0.1	0.8	0.1	0.5	0.2	0.3	0.2	0.7	0.1
1	0.7	0.1	0.5	0.2	0.4	0.1	0.1	0.7	0.4	0.8
10	0.4	0.1	0.3	0.0	0.3	0.1	0.4	0.7	0.5	0.9
100	0.2	0.1	0.1	0.1	0.3	0.2	0.8	0.7	1.0	1.0
1000	0.8	0.4	0.5	0.2	0.4	0.1	0.7	0.4	0.9	0.7
10000	0.5	0.4	0.5	0.3	0.5	0.2	0.6	0.3	1.0	0.7
平均 $\Delta$ ppm	0.5	0.2	0.4	0.2	0.4	0.1	0.5	0.5	0.7	0.7

图 4. 使用 Exactive GC (EGC) 和 Q Exactive GC (QEGC) 系统针对超过 5 个数量级的几个六氯乙烷离子进行的相同质量精确度 ( $\Delta$  ppm) 测量。表中还显示每个离子的平均质量精确度 ( $\Delta$  ppm) 值。

## 结论

综上所述，本文所有实验数据均表明 Exactive GC 与 Q Exactive GC 质谱仪在采用全扫描数据采集模式时具有品质相当的卓越分析性能。

这两个系统具有相同且快速的扫描速度，可在较窄的色谱峰段获得足够数据点，进而精确获得峰面积并确保信号重现性。

由自测化合物的 IDL 可知，本次研究所用 Exactive GC 系统和 Q Exactive GC 系统具有相近的灵敏度。

如所选化合物所示，两个系统上的线性动态范围也相同，均扩展至六个数量级（0.1-10,000 pg on-column）。

无论化合物浓度如何，两个系统均可始终保持 sum-ppm 级别的质量精确度。

## 参考文献

1. The Power of High Resolution Accurate Mass Using Orbitrap Based GC-MS. Thermo Scientific White Paper 10456, May 2015. [Online] <https://tools.thermofisher.com/content/sfs/brochures/WP-10456-GC-MS-Orbitrap-High-Resolution-Accurate-Mass-WP10456-EN.pdf>.
2. Fast Screening, Identification, and Quantification of Pesticide Residues in Baby Food Using GC Orbitrap MS Technology. Application Note 10449. [Online]: <https://tools.thermofisher.com/content/sfs/brochures/AN-10449-GC-MS-Orbitrap-Pesticides-Baby-Food-AN10449-EN.pdf>



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