



➤ 全二维气相色谱-飞行时间质谱联用仪

GCxGC –TOFMS (iTOFMS-2G)

➤ 快速气相色谱-飞行时间质谱联用仪

Fast GC-TOFMS (iTOFMS-1G)



厦门质谱仪器仪表有限公司

2014 年 5 月 1 日

一、介绍

厦门质谱仪器仪表有限公司（简称厦门质谱公司）传承了厦门大学三十余年质谱技术的研究经验与成果，曾研发成功国内首台高分辨率电喷雾离子源飞行时间质谱仪，是国内一家专注于飞行时间质谱器技术研发与生产的新兴企业。

iTOFMS-G 系列是中国首款具有完全自主知识产权的商品化小型台式气相色谱-飞行时间质谱联用仪。它具有高分辨、高灵敏度和高采集速度的优异功能，实现了与全二维气相色谱/快速气相色谱的完美对接。iTOFMS-G 的诞生代表了国产质谱进军通用型高端质谱仪器迈出了重要一步。

- 全二维气相色谱-飞行时间质谱联用技术（Comprehensive Two-dimensional Gas Chromatography-Time of Flight Mass Spectrometry, GCxGC TOFMS）是近十年以来，国际上发展最迅猛的色谱联用技术之一，是色谱-质谱联用技术发展的一个最新趋势。相比于常规气质联用具有高通量、高分离度和高灵敏度等显著优势，是解决复杂体系中全组分和痕量组分分析的最佳方案，逐渐成为石油化工、香精香料、烟草酒业、食品安全、环境监测和中药鉴定等领域的必备分析仪器。



图 1 GCxGC-TOFMS (iTOFMS-2G) 的实物外观图

- 快速气相色谱-飞行时间质谱联用技术（Fast Gas Chromatography-Time of Flight

Mass Spectrometry, Fast GC-TOFMS) 是当今最具潜力的气质联用技术之一，并已经得到了广泛的实践证明。与常规气质联用相比，能够提高 3~6 倍的分析速度（在保证足够的分辨率的条件下，只需十分钟就能完成绝大多数中等或中等高度复杂混合物的分离与分析）。不仅极大地提高了工作效率，节约了时间成本，而且对色谱柱的要求低，显著减小了对仪器的污染，降低了维护和使用成本。



图 2 Fast GC-TOFMS (iTOFMS-1G) 的实物外观图

二、 应用领域

- ◇ 石油化工
- ◇ 香精香料
- ◇ 烟草及酒业
- ◇ 食品安全与环保
- ◇ 中药鉴定及药物代谢

三、 主要指标

- 质量数范围: 1~1200amu
- 离子源: 电子轰击离子源，双灯丝设计（带自动溶剂保护功能和软件自动切换）；最大电子发射电流 300uA，发射能量 0~200eV；离子源最高温度 300°C，传输

线最高温度 400 °C

- 质量分辨率: 2000~3000 ($M/z=502Th$)
- 检测灵敏度: 1pg/ μl OFN, $S/N>500$ (RMS); 0.1pg/ μl OFN, $S/N>50$ (RMS)
- 采集速度: 200spectra/s (推斥脉冲频率 15kHz)
- 采集卡: ADC(1.5/3GHz SPS, 带硬件累加)
- 质量轴稳定性: 小于 0.01amu (一周内)
- 线性范围: 10^4
- 真空系统: 双涡轮分子泵(350L/s+70L/s), 前级旋片式机械泵 (标配, 可选涡旋式干泵); 一个皮拉尼数字规 (前级) 和两个全量程复合高真空数字规

四、 仪器组成及主要特点

中国首款具有完全自主产权的商品化小型台式全二维气相色谱/快速气相色谱—电子轰击离子源飞行时间质谱联用仪 (GCxGC / Fast GC-TOFMS)。它具有高分辨、高灵敏度和高采集速度的特点。

1. 高性能的电子轰击源使全扫描灵敏度达到了四极杆质谱选择离子扫描的灵敏度完全满足痕量分析要求。
2. 采用离子正交引入式和二级反射镜设计的飞行时间分析器保证仪器的高分辨本领和高优秀的质量精度;
3. 采用带有硬件累加功能的超高速模数转换记录器 (1.5GHz/ 3GHz SPS), 是迄今同类产品中最快的。
4. 采用双涡轮分子泵+双全量程复合数字真空规设计, 可以实时监测每个部件的真空;
5. 完善、可靠的真空监控与电气保护系统;

6. 采用美国 Zoex 公司最新设计的 ZX-2 环形调制器（可采用无氮气电制冷系统，将仪器的使用成本降至最低）

五、 软件系统特点

- Fast GC-TOFMS 的软件系统由自主开发的 GCTOF Master1.0(仪器实时控制采集) 和 GCTOF Analysis(数据后处理与分析) 两套软件组成，其主要特点：
 1. 完全面向对象型的模块化开发，不仅功能丰富和强大，界面十分简洁直观高效；
 2. 采用优秀算法的自动调谐功能，能够使快速仪器达到最佳工作状态；
 3. 具有自动溶剂保护功能和组份过载保护功能，最大限度地保护灯丝和检测器；
 4. 创新的 TIC 图自动基线修正功能（SBC）和去背景技术，使分析更准确；
 5. 采用国内最新版本的 NIST 检索谱库，标准谱数量比 08 版增加 11%，并具有自建谱图功能；
 6. 多谱图的 RSD 和线性度自动计算功能，是用户快速了解仪器的重复性和稳定性状态；
 7. 多样化的定量分析方法，可以实现带校正因子的面积归一化、内标法和外标法，完成对样品的准确定量计算；
- GCxGC -TOFMS 的软件系统由 GCTOF Master2.0(仪器控制采集)和 GC Image (数据后处理与分析) 两套软件组成。GC Image 的主要特点：
 1. 具有图像批处理模板，自动基线校正、复杂峰解析功能（Deconvolution）、样品比较、生成报告、数据输出
 2. 自动峰识别功能，多个样品全组分比较
 3. 复杂峰解析功能（Deconvolution），将分析物与共流干扰物分离
 4. 具有结构化解析功能，针对被分析物按照种类系列区分，并可按照族类定量。无

需计算机语言就可以编辑，自行定义结构化分析程序

5. 彩色化设计，使定性分析达到最佳效果（内置 60 多种颜色，正确直观的显示色谱图中部门组分的微弱差异）
6. 多模式的可视化效果，所得结果可以显示不同角度的 3D 立体图，2D 平面俯瞰图及传统的一维图

六、应用实例

分析速度快 (Fast GC)

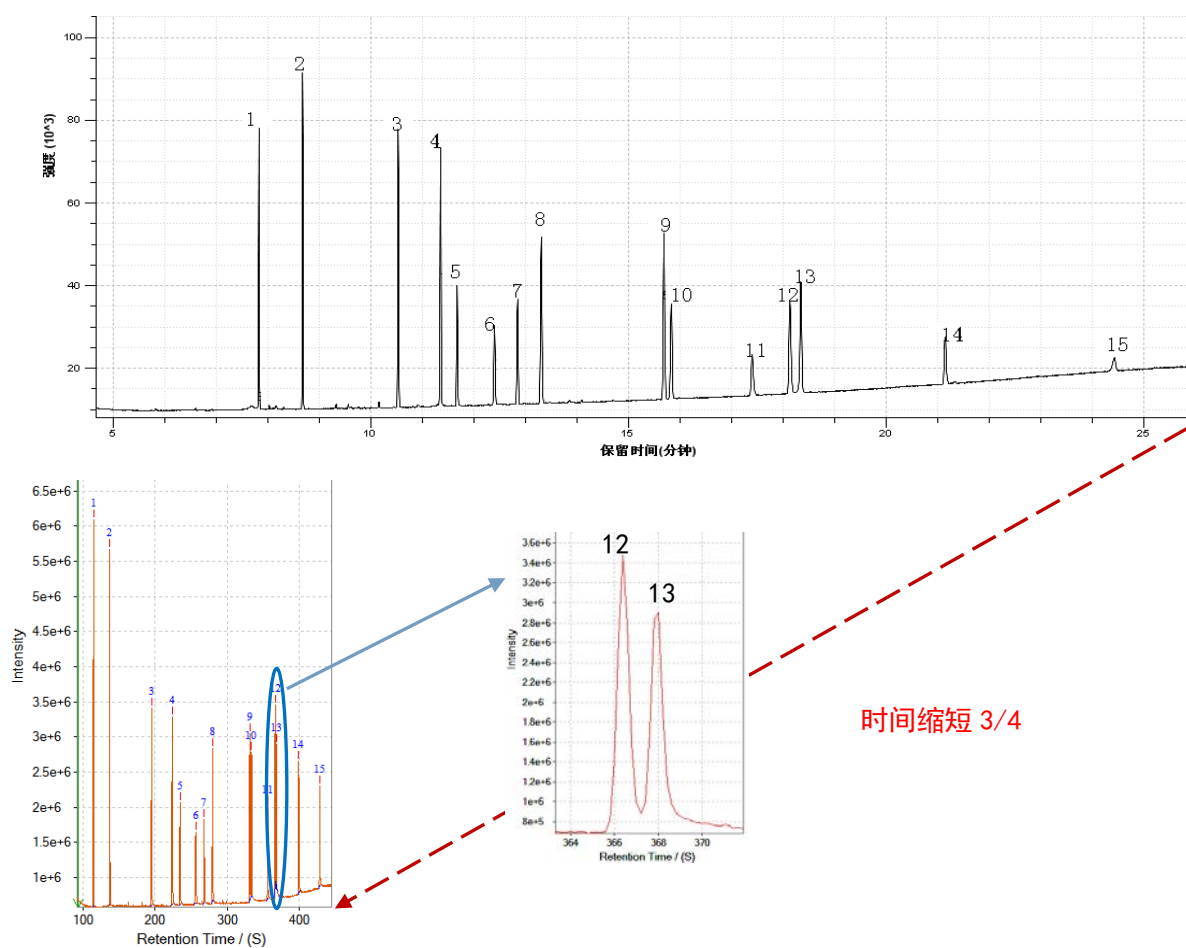


图 7 Fast GC 分析时间只有常规 GC 的 1/4

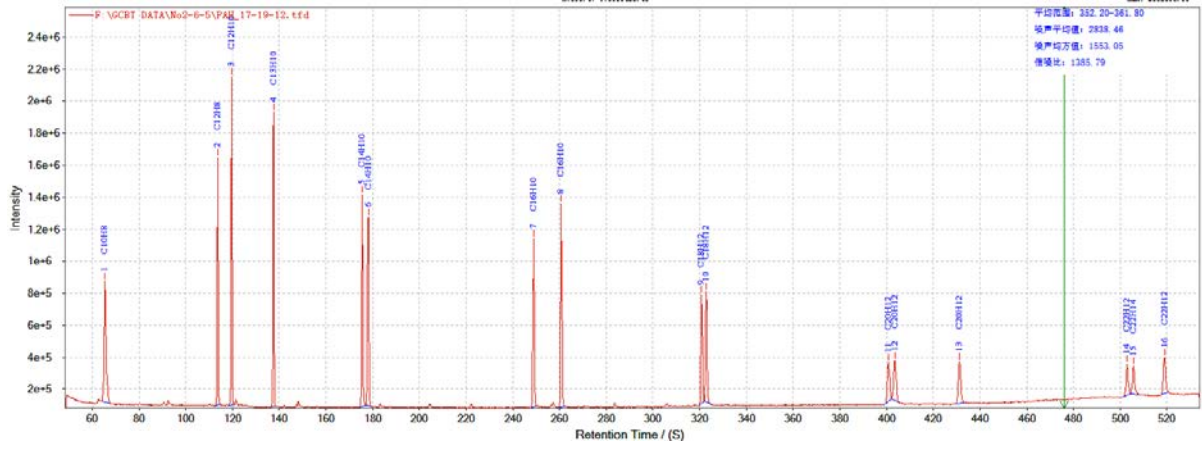


图 8. 16 种 PAHs 混合标样的原始 TIC 图(样品浓度 20ppb)

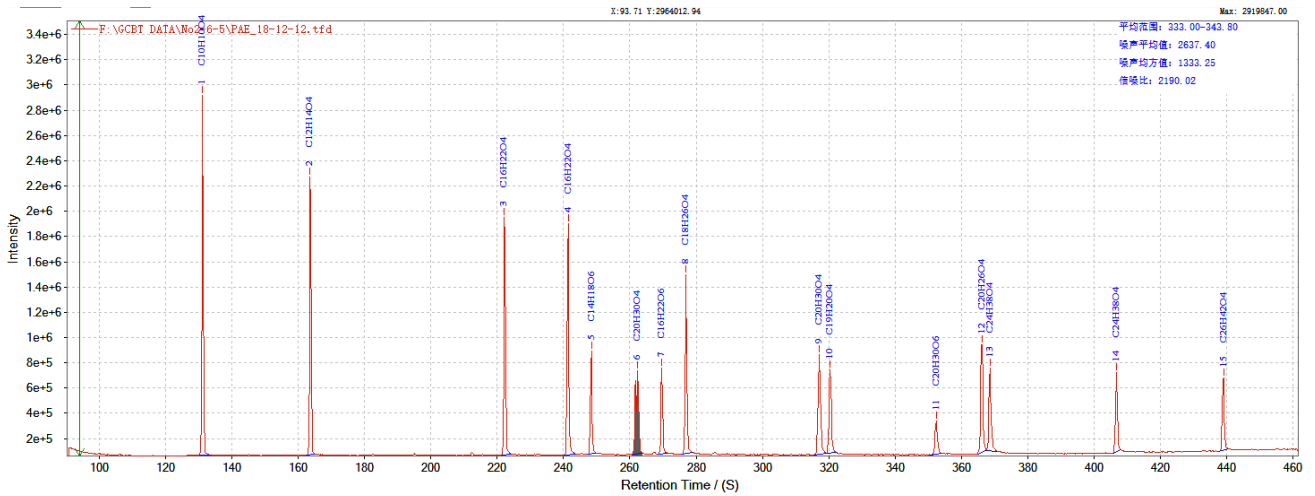


图 8. 15 种 PAEs 混合标样的原始 TIC 图(样品浓度 25ppb)

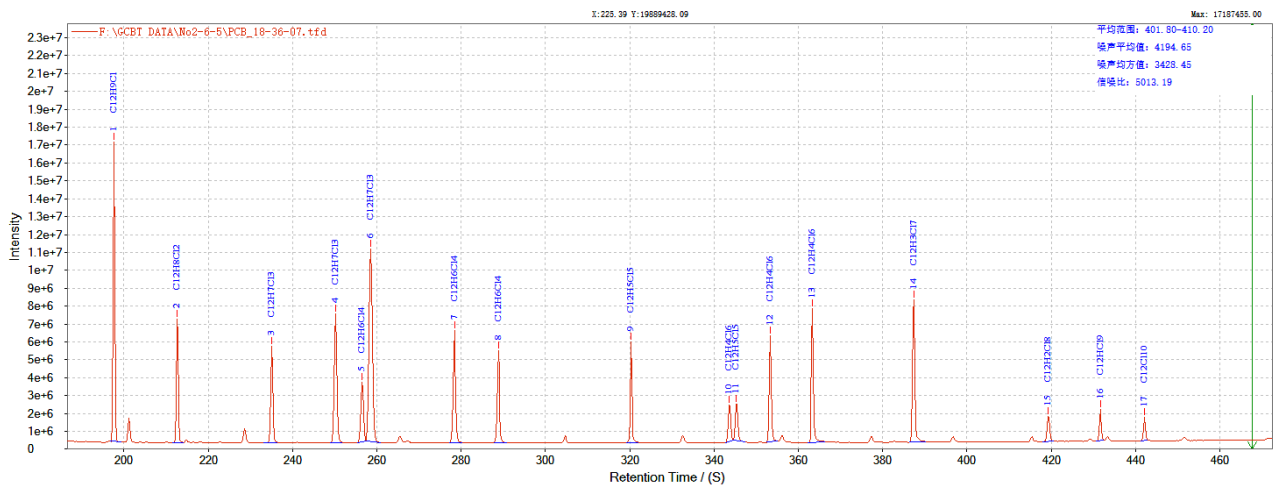


图 10. 18 种 PCBs 混合标样的原始 TIC 图(样品浓度 60~25ppb)

高分离度，高容量 (GCxGC)

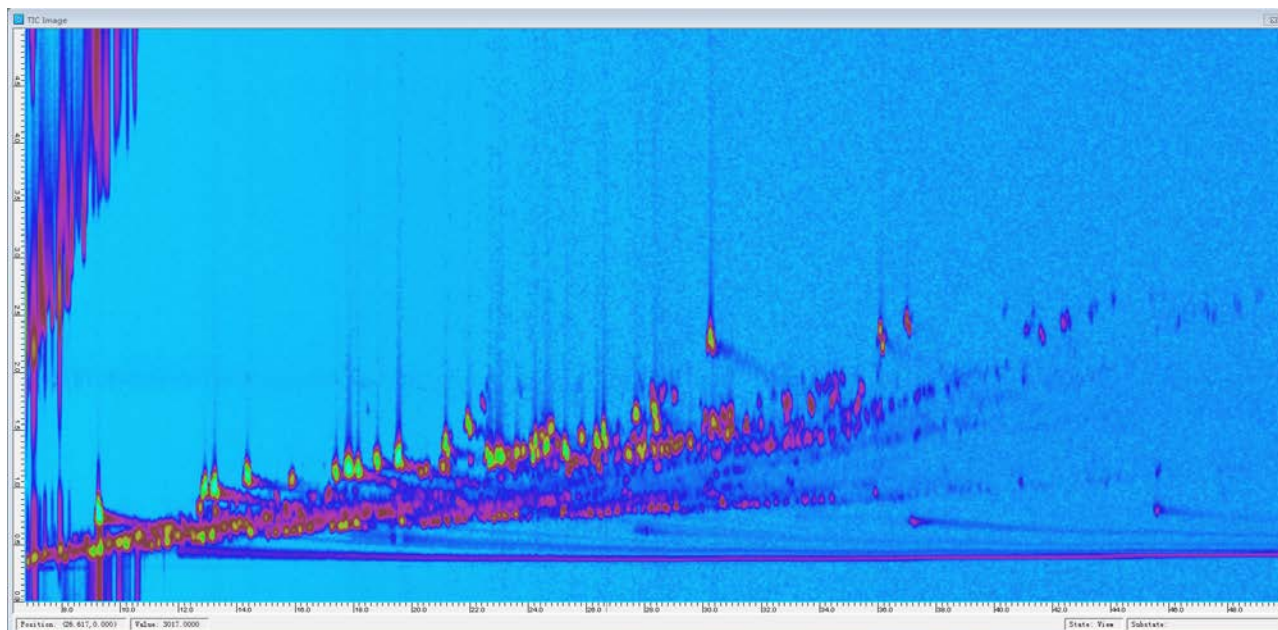


图 13 97#汽油实际样的检测