

LECO's Pegasus[®] HT TOFMS

Высокопроизводительный Времяпролетный Масс-Спектрометр



Решение Ваших самых сложных задач

Pegasus HT TOFMS компании LECO объединяет в себе времяпролетный масс-спектрометр (TOFMS) с программным пакетом ChromaTOF[®], представляя собой революционную высокопроизводительную ГХ-МС систему с функциями ускоренного хроматографического разделения сложных образцов, автоматического нахождения пиков, а также разделения накладывающихся пиков с помощью модуля True Signal Deconvolution[™]. Ни одна другая система не сравнится с Pegasus TOFMS в скорости, точности и надежности.

Пакет ChromaTOF

- Платформа на базе Windows[®]
- Высокоскоростной процессор
- Большой объем памяти для хранения данных
- Возможности удаленной диагностики

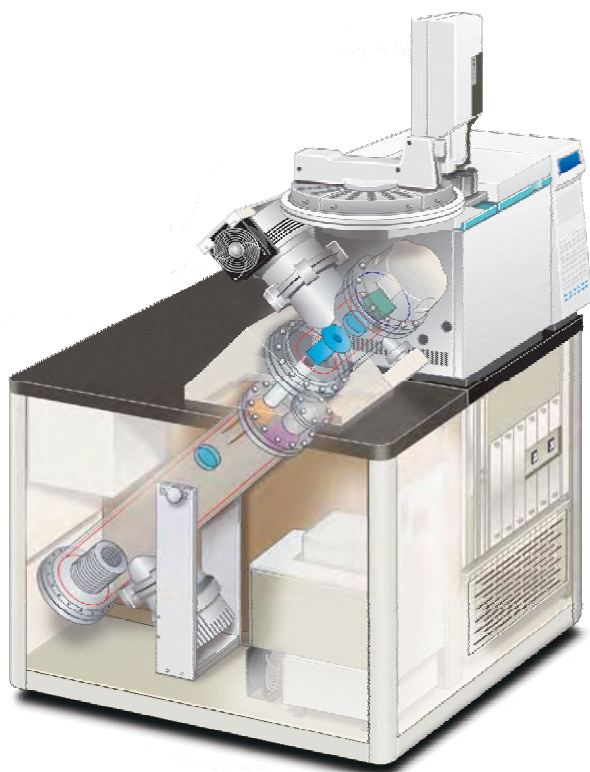
Pegasus HT TOFMS

- Самая высокая скорость сбора данных (500 Гц)
- Отслеживание динамического сигнала
- Практически незагрязняемый ионный источник
- Проверенная временем надежность

U.S. patents include no. 4,472,631, no. 4,490,806, and no. 5,175,430. • Other patents pending.



Преимущества LECO TOFMS



Характеристика

Преимущество

Непрерывный сбор данных со скоростью до 500 спектров в секунду (500 Гц) в полном диапазоне масс

Возможность детектировать даже самые узкие пики при разделении ГС и ГСхГС
Запись полных масс-спектров (по всему диапазону масс) для успешной работы модуля True Signal Deconvolution
Точная идентификация неизвестных и целевых аналитов в сложных образцах

Высокая чувствительность по всему диапазону масс

Закор 2 пг гексахлорбензола обеспечивает отношение сигнал/шум ≥ 10 на масс-хроматограмме по току m/z 284
За один анализ достигается результат, который в других ГХ-МС системах требует нескольких закоров

Линейность динамического диапазона не менее 4 порядков

Количественный и качественный анализ компонентов реального образца с различным содержанием в матрице

Уникальный незагрязняемый ионный источник

Отсутствуют временные затраты, связанные в чистой ионной источнике
Проверенная надежность
Высокая производительность

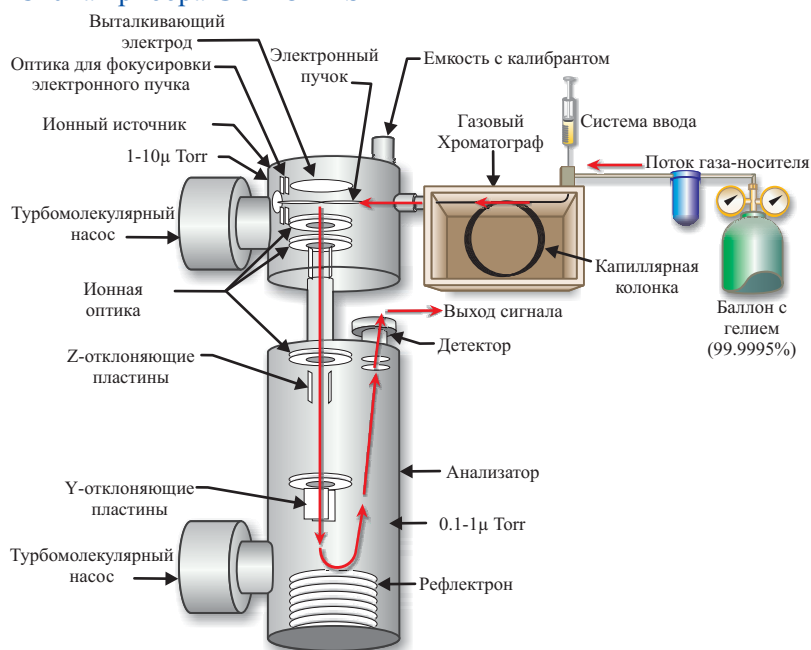
Программное обеспечение ChromaTOF

Автоматическое нахождение пиков и их деконволюция для быстрой и простой интерпретации данных. Очищенные масс-спектры для достоверного библиотечного поиска
Задаваемая пользователем форма отчетов
Спецпакет отчетов "Окружающая среда"
Функция сравнения образцов для легкого и экспрессного установления их качественных различий

Интегрированная в ChromaTOF система контроля

Хроматограф (ГС или LC) Agilent
Возможна стыковка с различными системами подготовки и ввода образца (LEAP, Gerstel и Agilent)
Совместимость с различными детекторами (FID, ECD, SCD)
Дистанционное управление, стыковка с прочим оборудованием
Полная автоматизация системы для максимальной производительности

Схема прибора GC-TOFMS



Техника быстрой ГХ-МС

В каждой лаборатории известно, что время - деньги, а увеличение производительности - единственный способ увеличить прибыль. Прибор LECO совмещает в себе уникальный МС-детектор (500 Гц) с запатентованными алгоритмами сбора и обработки данных, что позволяет достичь скорости и разрешения, необходимых для записи быстрых хроматограмм и разделения даже самых сложных образцов. Ни одна другая компания в мире не производит для Вас приборов, в которых соединены обе этих технологий.

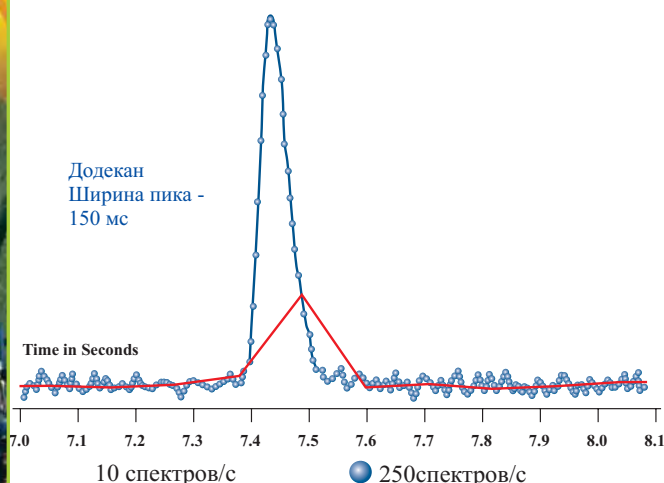
- Увеличенная производительность за счет уменьшения времени анализа каждого образца
- Меньшая деградация образца
- Легкость в создании метода анализа
- Отсутствие статистической дискриминации, характерной для сканирующих анализаторов
- Автоматическое нахождение и разделение пиков модулем True Signal Deconvolution™

Самый быстрый в мире масс-спектрометр

До 500 полных масс-спектров в секунду (500 Гц)

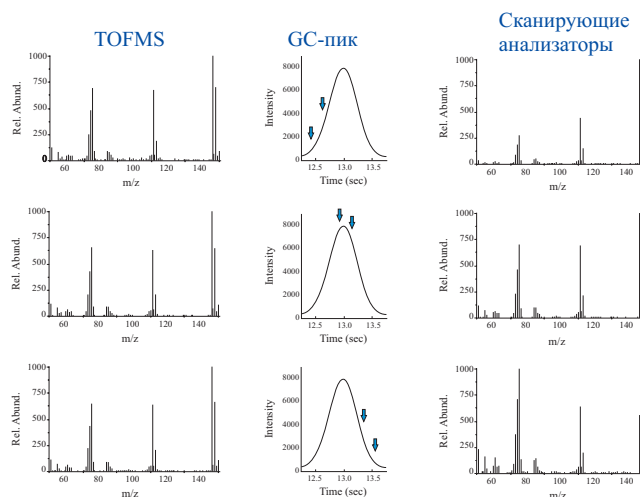
В соответствии с научными данными, необходимы как минимум 10 точек в течение времени элюирования полностью разрешенного хроматографического пика для его надежной идентификации. В то же время для автоматического нахождения и деконволюции пиков (True Signal Deconvolution™), а также надежного количественного обсчета индивидуальных пиков сложного образца, требуется 18-20 точек (масс-спектров вдоль GC-пика). Таким образом, Pegasus TOFMS - единственный из MS-детекторов, способный регистрировать более 50 полных масс-спектров в секунду, что делает его идеальным анализатором для Рутинного GC-анализа, Высокоскоростной GC, а также Двумерной газовой хроматографии GCxGC ("Comprehensive"). Определяемая пользователем скорость сбора данных вплоть до 500 Гц позволяет получать при помощи Pegasus TOFMS необходимую плотность данных для идентификации даже самых узких GC-пиков.

Скорость записи MS-данных



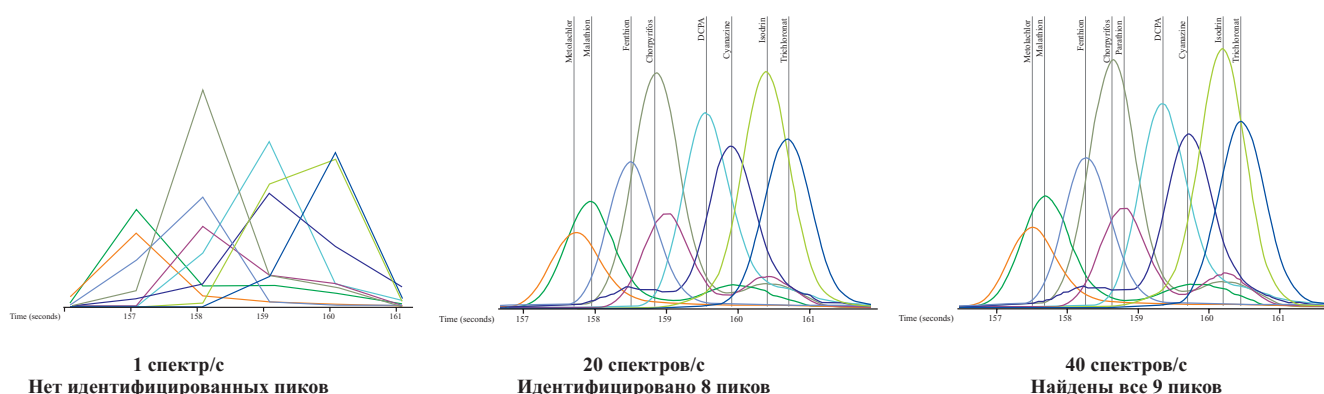
Скорость 250 спектров в секунду необходима для корректной идентификации представленного на рисунке пика додекана. Типичная для других приборов скорость записи 10 масс-спектров в секунду искажает как форму пика, так и его площадь и положение максимума.

Стабильность масс-спектра



Одна из характерных особенностей TOFMS - полное отсутствие зависимости вида масс-спектра от концентрации вещества. При использовании сканирующих анализаторов концентрация вещества вдоль GC-пика (и, соответственно, в ионном источнике) изменяется в течение одного скана. Это приводит к искажению масс-спектров, которые имеют разный вид в разных точках GC-пика. Если изменение концентрации значительно в течение каждого скана, деконволюция (разделение) пиков при их значительном наложении становится невозможной. TOFMS такого ограничения не имеет и регистрирует неискаженные масс-спектры вдоль всего пика.

Влияние скорости записи масс-спектров на возможность Автоматического нахождения пиков

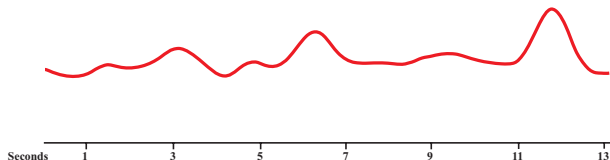


В данном примере возможность сбора данных со скоростью выше 20 спектров/с (20 Гц) необходима для автоматической идентификации и деконволюции пиков 9 пестицидов в анализируемой смеси.

Acquisition Speed without Spectral Continuity=Limited Deconvolution
Spectral Continuity without Acquisition Speed=Limited Deconvolution
Acquisition Speed and Spectral Continuity=True Signal Deconvolution™!

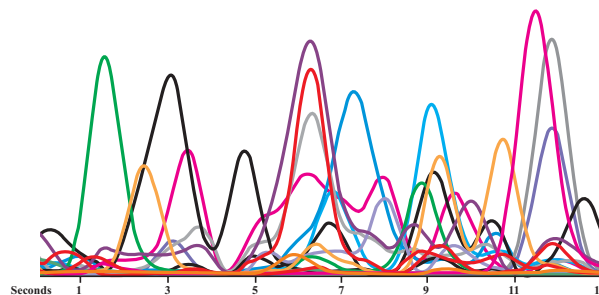
Автоматическое нахождение пиков и их деконволюция

Автоматическое нахождение пиков



Визуально можно обнаружить 8 пиков на данном 13-секундном интервале хроматограммы, построенной по полному ионному току (TIC).

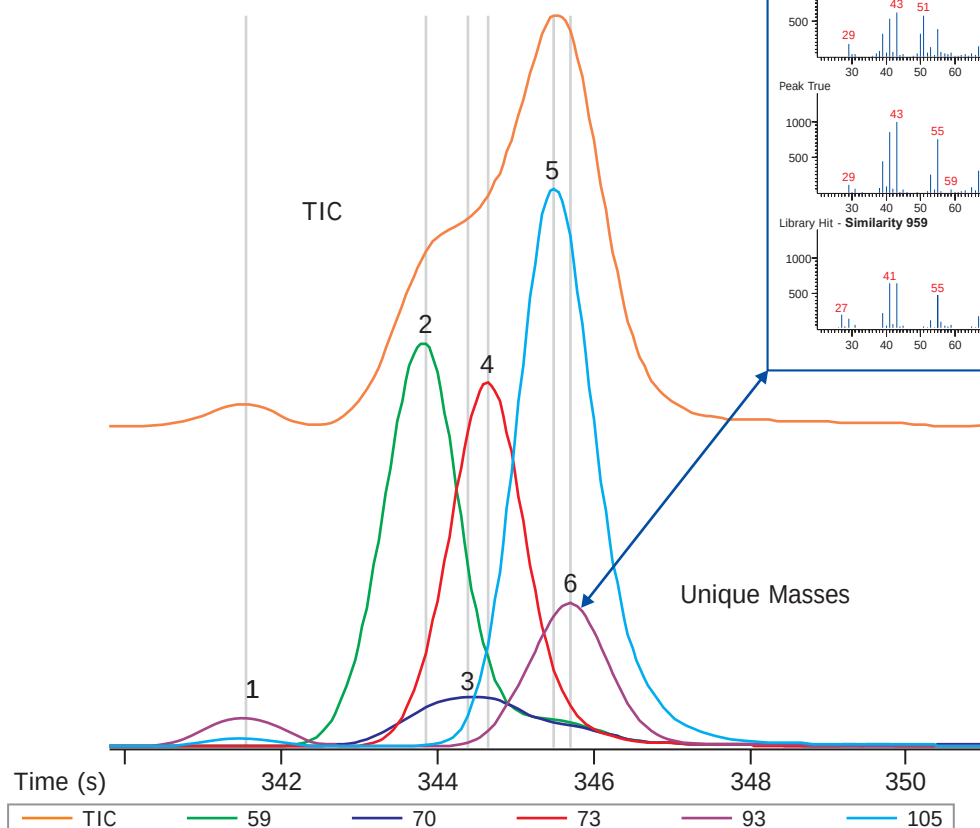
Детектирование следовых количеств аналита - весьма непростая задача. Как правило, аналитику приходится работать с хроматограммой, построенной по полному ионному току (TIC), отслеживая незначительные флуктуации базовой линии. Чем более сложным является образец, тем проще “пропустить” неизвестный аналит на фоне сигнала матрицы или базовой линии.



Алгоритм нахождения пиков автоматически идентифицирует 21 пик на том же 13-секундном интервале хроматограммы.

Алгоритм нахождения пиков (Peak Find algorithm) автоматически воспроизводит пики на хроматограмме в соответствии с заданными величинами ширины пика и порога отношения сигнал/шум. Коэлюируемые аналиты, пики, скрытые под базовой линией, и даже минорные пики, скрытые сигналом матрицы, автоматически детектируются и отображаются в отчете.

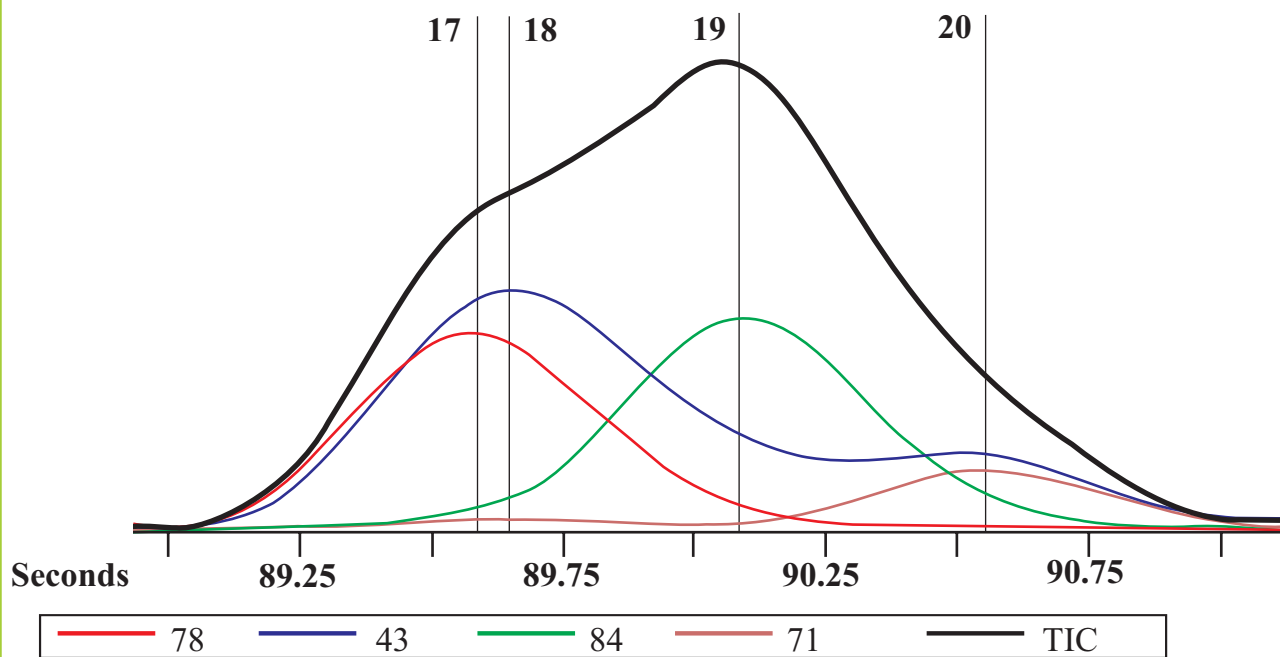
Алгоритм деконволюции “True Signal Deconvolution™ (TSD)”



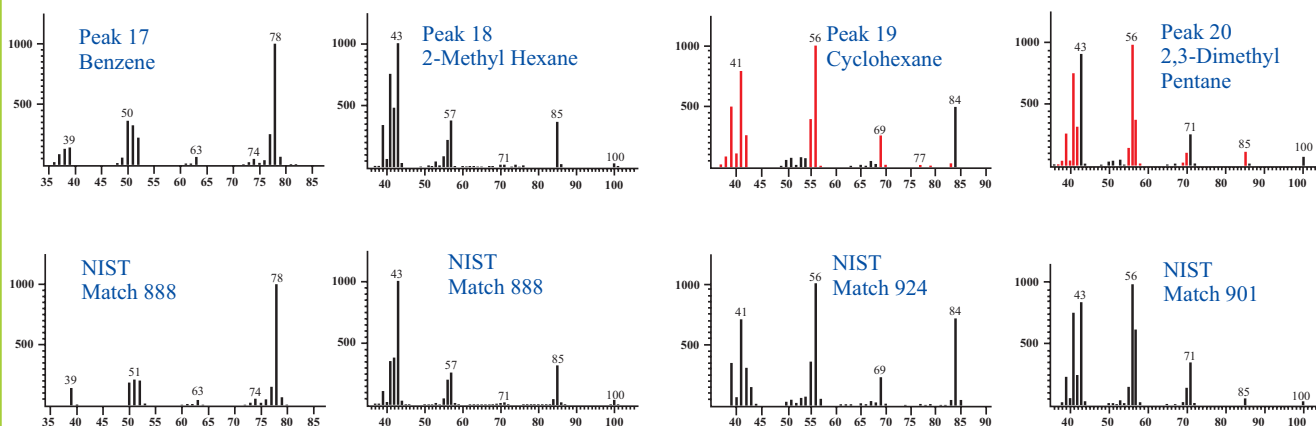
Полный масс-спектр Линалоола (пик 6) автоматически реконструируется за счет деконволюции пика линалоола от пиков 5 других совместно элюируемых компонентов жидкого мыла для рук, проанализированного методом термодесорбции. Деконволюированный (реконструированный) масс-спектр (B) сопоставляется затем с библиотечными масс-спектрами NIST (C) для более корректной идентификации. Никакое другое программное обеспечение для GC-MS не обеспечивает преимуществ TSD и автоматического нахождения пиков, поставляемых в единой оболочке.

Алгоритм деконволюции True Signal Deconvolution™ (TSD™)

После обработки хроматограммы встроенным алгоритмом нахождения пиков (Peak Find algorithm), из масс-спектра каждого обнаруженного пика автоматически вычитается фоновый сигнал, пики матрицы и масс-спектры накладывающихся компонентов. Это достигается за счет функции True Signal Deconvolution™. Даже те ионы, которые одновременно присутствуют в масс-спектрах каждого из накладывающихся пиков, безошибочно распределяются между анализатами, корректно реконструируя полный масс-спектр. Полученный “очищенный” масс-спектр далее можно использовать для идентификации компонента как за счет библиотечного поиска (в том числе созданных пользователем баз данных), так и путем интерпретации масс-спектральных данных.



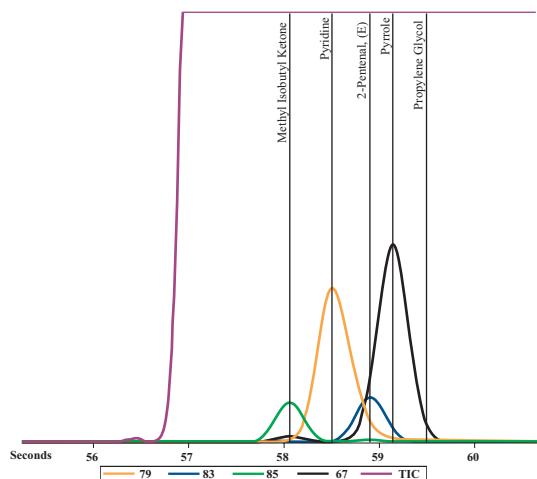
Алгоритм автоматического нахождения пиков детектирует 4 совместно элюируемых компонента на данном 2-секундном отрезке хроматограммы (TIC) лигроина.



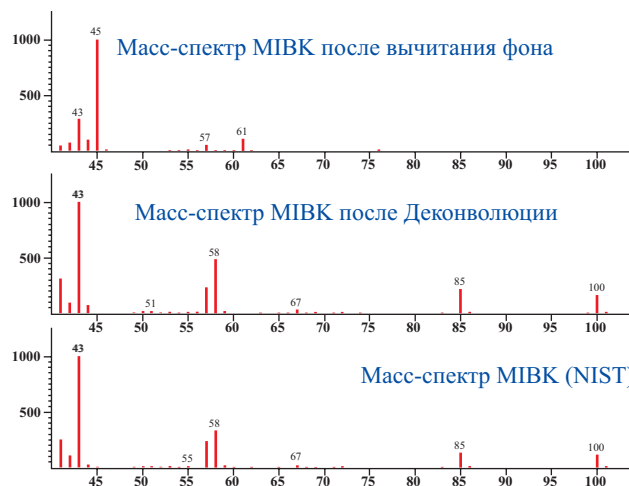
В результате работы алгоритма True Signal Deconvolution™, несмотря на разницу во времена удерживания пиков 17 и 18 всего в 0.07 секунды, эти пики отдельно регистрируются и происходит их идентификация при сравнении с библиотекой. Пики 19 и 20 также безошибочно идентифицируются, несмотря на множество m/z, одинаковых для масс-спектров обоих компонентов (отмечены красным цветом).

Мешающее влияние матрицы

Алгоритмы автоматического нахождения пиков и деконволюции также успешно работают при детектировании следовых количеств аналита, скрытых фоновым сигналом матрицы. Программное обеспечение ChromaTOF позволяет обнаружить аналиты, не детектируемые другими GC-MS системами. Pegasus способен корректно зафиксировать и идентифицировать аналит, полностью скрываемый матрицей, даже при соотношении матрица:вещество 400000:1. Когда стоит вопрос о полном качественном анализе образца, только использование ChromaTOF может дать действительно правильный ответ.



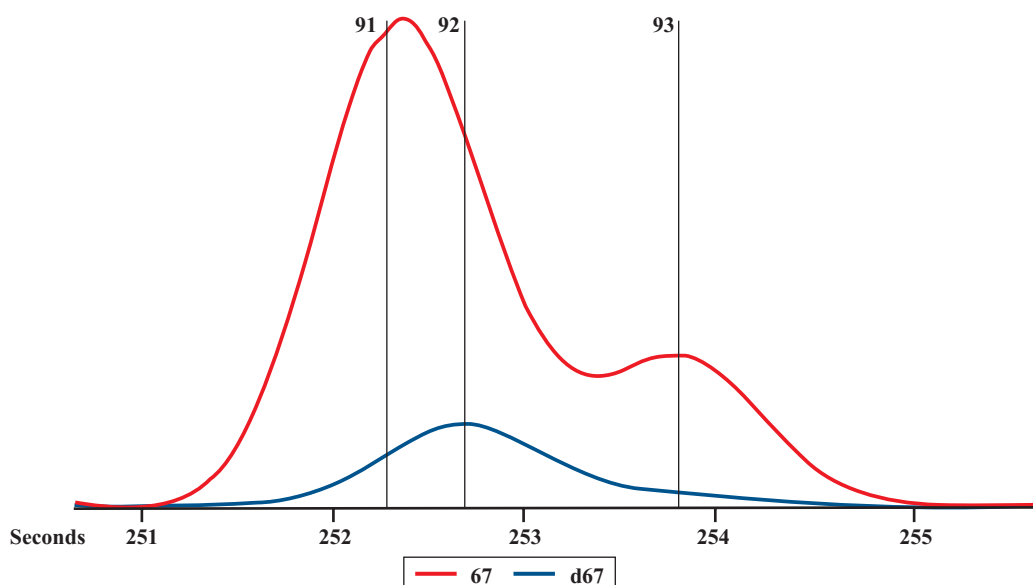
Небольшие пики неизвестных аналитов автоматически детектируются под очень интенсивным матричным сигналом.



Матрица маскирует наличие метилизобутилкетона (MIBK) при использовании традиционной функции вычитания фона. Напротив, использование функции автоматического нахождения пика и алгоритма деконволюции TSD позволяет надежно обнаружить и идентифицировать пик MIBK.

Деконволюция пиков, скрытых сигналами матрицы

Перекрытие с матрицей может искажать форму пика на масс-хроматограммах, выстроенных по характерным ионам целевого аналита и используемых для количественного обсчета. Данный факт снижает точность количественного анализа. Применение специальных техник, таких как перекалибровка по другому иону или изменение параметров хроматографического разделения с целью устранить наложение пиков, а также изменение пробоподготовки, сопряжено со снижением точности анализа и весьма затратно по времени. Алгоритм True Signal Deconvolution™ программного пакета ChromaTOF безошибочно распределяет суммарный сигнал накладываются пиков между аналитами. Этот же алгоритм позволяет “убрать” мешающее влияние матрицы и отображать лишь те ионы, которые присущи аналиту. При этом повышаются надежность и точность анализа без дополнительных усилий.

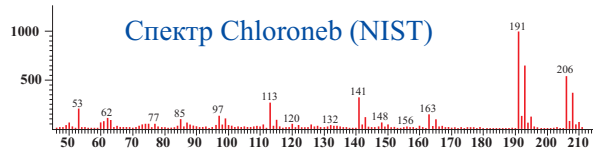
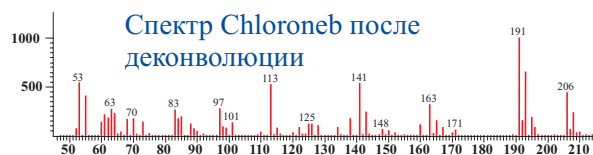
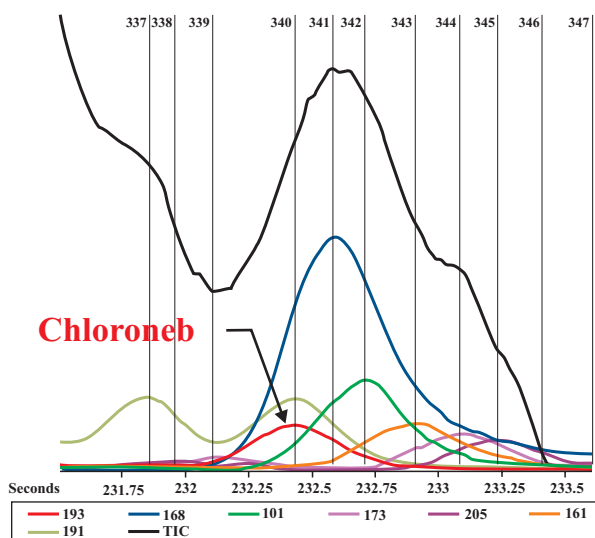


Целевой аналит (пик с маркером 92) количественно обсчитывался по масс-хроматограмме, построенной по m/z 67 (красный). Однако накладываются пики матрицы 91 и 93 также содержат m/z 67 в своих масс-спектрах. Алгоритм TSD™ четко распределяет суммарный сигнал между аналитами, отображая только часть сигнала с m/z 67, обусловленную присутствием аналита с номером пика 92 (синий).

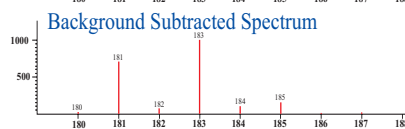
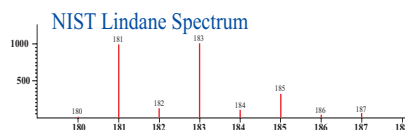
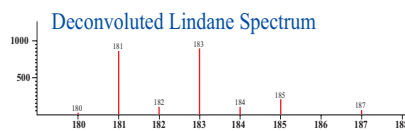
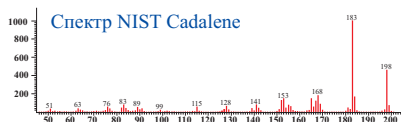
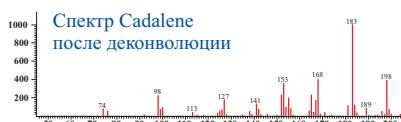
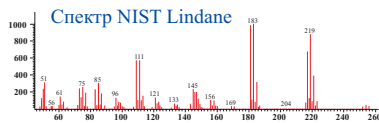
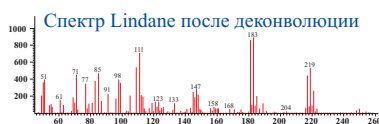
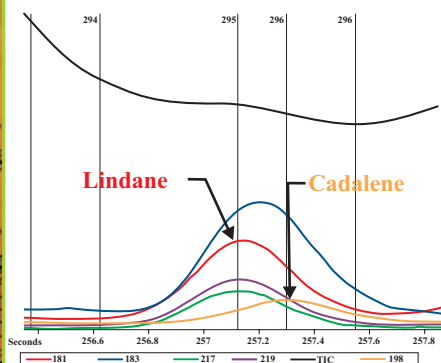
Надежное определение аналита

Точное определение аналита - важнейший этап надежного количественного анализа. Программные алгоритмы Peak Find и True Signal Deconvolution™ компании LECO безошибочно локализируют аналит и все накладываются на него компоненты, что позволяет получить очищенный от матричных и фоновых сигналов масс-спектр. При этом риск получения как ложноположительного, так и ложноотрицательного результатов сведен к минимуму.

Мониторинг заданных ионов (SIM), используемый другими GC-MS системами, также помогает справиться с наложением матрицы. Однако, техника SIM обуславливает потерю значительной части масс-спектральной информации, необходимой для надежной идентификации аналита. Было показано, что SIM значительно менее точен при определении компонента, чем алгоритм деконволюции. Кроме того, SIM обеспечивает повышение чувствительности определения только целевых, заданных аналитов, в то время как Pegasus и алгоритм True Signal Deconvolution™ обеспечивают высокую чувствительность при определении всех компонентов образца.



Пик пестицида Chloroneb (красный) зарегистрирован под очень интенсивным сигналом матрицы (хроматограмма слева). Спектр Chloroneb после деконволюции (верхний) практически совпадает с библиотечным масс-спектром (NIST, посередине), что позволяет безошибочно идентифицировать этот аналит. Простое вычитание фона не обеспечивает надежной масс-спектральной идентификации данного пестицида (нижний спектр). Без деконволюции, скорее всего, был бы сделан вывод об отсутствии Chloroneb в образце.



Lindane и Cadalene зарегистрированы в виде коэлюируемых аналитов под фоновым сигналом хроматограммы (по TIC).

Как Lindane (вверху), так и Cadalene (внизу) надежно идентифицированы в результате сравнения с библиотекой.

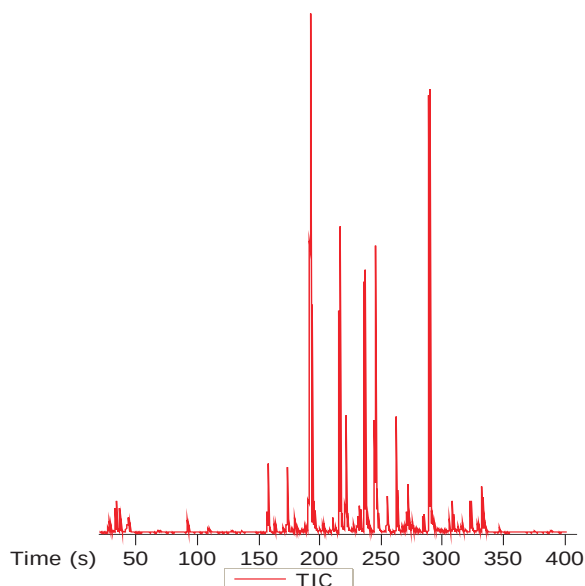
При использовании SIM соотношение пиков с m/z 181 и 183 является решающим для достоверной идентификации. В спектре Lindane после деконволюции данное отношение составляет 96.6%, как и в библиотечном спектре NIST. Простое вычитание фона, напротив, приводит к ошибочной величине 70.5%, что связано с увеличением интенсивности сигнала с m/z 183 за счет перекрытия с пиком Cadalene, имеющим близкое время удерживания.

Оптимизация производительности

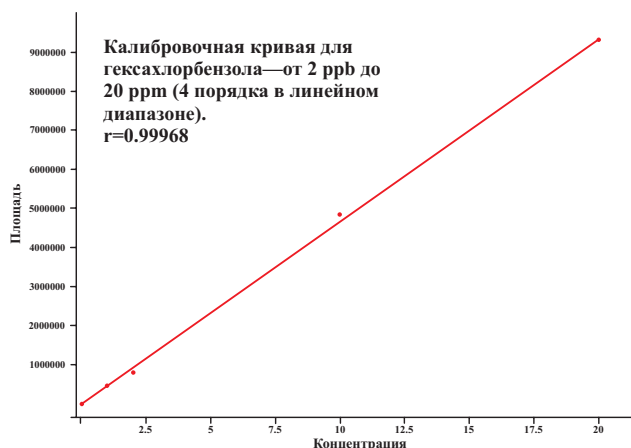
Чтобы добиться максимальной производительности, все этапы выбранного метода анализа должны работать системно, в оптимальном режиме. Системы Pegasus HT TOFMS обладают высочайшей лабораторной производительностью, предлагая пользователю набор легких в управлении функций, позволяющих автоматизировать анализ на всех его этапах.

- Полная автоматизация пробоподготовки благодаря интегрированным в программный пакет ChromaTOF функциям управления опциями LEAP и Gerstel.
- Высокопроизводительный GC-MS с устанавливаемой опцией низкотемпературного ввода образца в колонку
- Специальная система отчетов “окружающая среда”

Запатентованные фирмой LECO алгоритмы Automated Peak Find и True Signal Deconvolution™, встроенные в программное обеспечение ChromaTOF, - основа для автоматизированного качественного анализа и характеристики реального химического состава анализируемого образца.



Анализ эфирного масла проведен за 400 секунд. Идентифицировано более 100 компонентов.

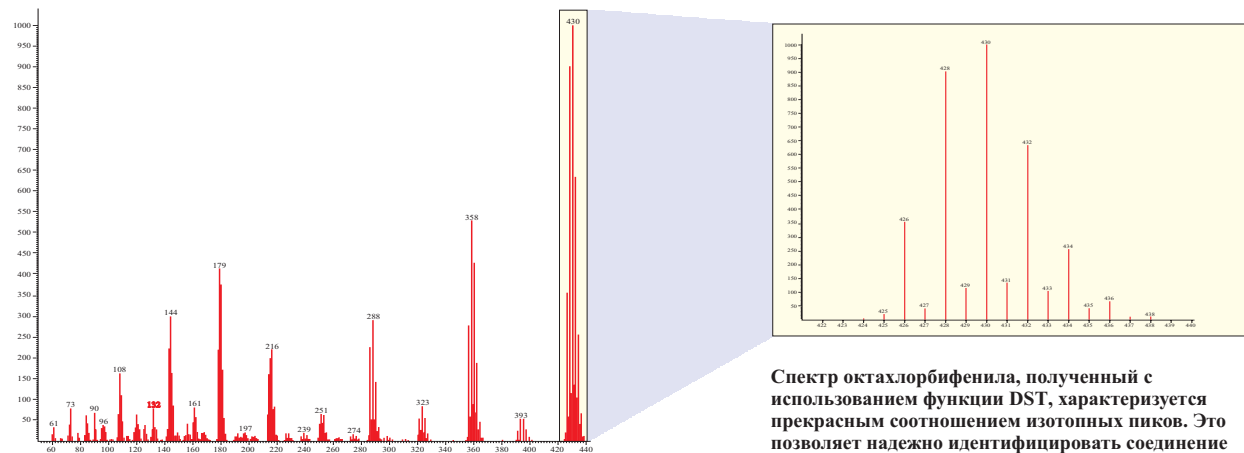


Динамический диапазон

Pegasus TOFMS обеспечивает величину линейности динамического диапазона до 4 и более порядков. Данный диапазон может быть дополнительно расширен при использовании алгоритма Extended Range Calibration, встроенного в ChromaTOF. Избавляя от необходимости разбавления и повторного анализа высококонцентрированных образцов, алгоритм Extended Range Calibration снижает затраты времени на анализ. Алгоритм работает с концентрациями, покрывающими емкость любой капиллярной колонки для GC.

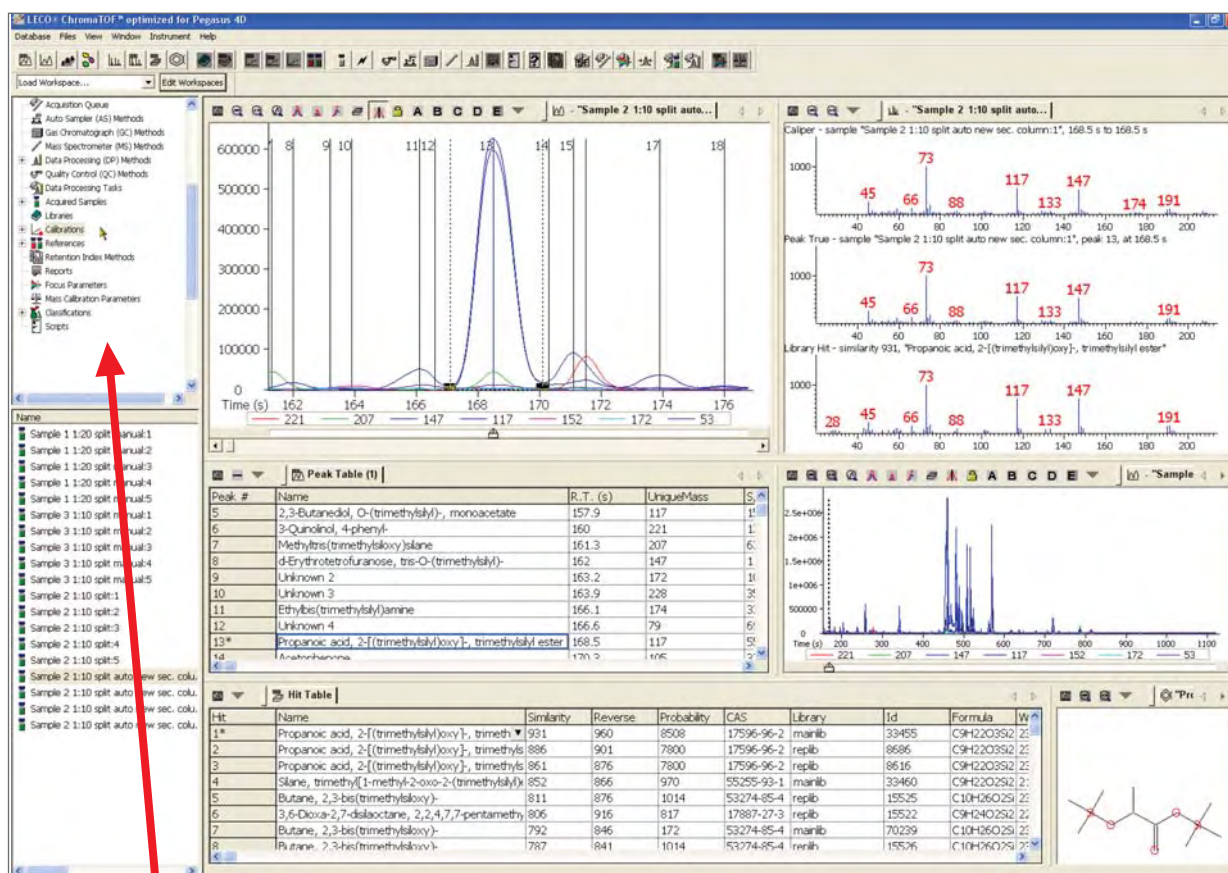
Отслеживание динамического сигнала

Запатентованная LECO система отслеживания динамического сигнала (Dynamic Signal Tracking, DST) обеспечивает качество масс-спектральных данных и оптимальное разрешение MS-детектора, автоматически корректируя минимальные отклонения времени пролета ионов. Такая корректировка позволяет получать четкие картины изотопного расщепления, увеличивает динамический диапазон и обеспечивает стабильность работ всей системы.



Спектр октахлорбифенила, полученный с использованием функции DST, характеризуется прекрасным соотношением изотопных пиков. Это позволяет надежно идентифицировать соединение как путем интерпретации масс-спектра, так и при сравнении полученного спектра с библиотечным.

Программное обеспечение ChromaTOF®



Программное обеспечение ChromaTOF

Программный пакет ChromaTOF специально разработан для самой эффективной работы Вашей лаборатории. “Дружественный” интерфейс ChromaTOF содержит самые прогрессивные разработки для эффективного качественного и количественного анализа, объединенные в единую, легкую в управлении систему обработки данных.

- Алгоритмы **True Signal Deconvolution™**, **Automated Peak Find**, и **Extended Range Calibration**
- **Полуколичественный анализ** неоткалиброванных компонентов
- Функция **Сравнения** позволяет быстро и легко сопоставлять образцы и выявлять качественные различия в них
- Автоматическая юстировка в рамках определяемого пользователем метода Quality Control
- Интегрированная система контроля за системами подготовки и ввода образца (различные опции LEAP, Gerstel, Agilent)
- Система отчетов “Окружающая Среда” (опция)
- Настраиваемый пользовательский интерфейс
- Возможность автоматического экспорта данных в форматы PDF, CSV, ANDI MS, NETCDF или Raw

Надежность системы

К настоящему моменту ни одному из пользователей Pegasus не нужно было чистить ионный источник своего прибора. Этот беспрецедентный факт - один из примеров надежности и высочайшей износостойчивости системы Pegasus HT TOFMS. В случае возникновения каких-либо неисправностей встроенная в пакет ChromaTOF функция “System Log” автоматически записывает все изменения, происходящие с масс-спектрометром, что значительно облегчает процесс устранения неисправностей. Полученные таким образом данные легко могут быть проанализированы сервис-инженерами LECO. Дополнительный источник поддержки пользователя - программа Remote Diagnostics. —SmartLine®—

LECO—Передовые Технологии в Разделении

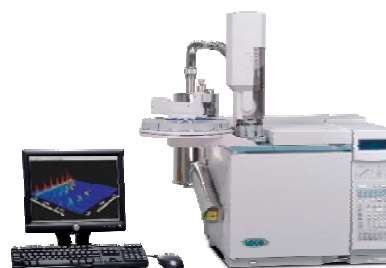


Pegasus 4D GCxGC-TOFMS

- Pegasus, обладающий скоростью сбора данных до 500 спектров/с, - самая быстрая GC-MS система для самой высокой производительности
- Программное обеспечение ChromaTOF ставит на новый уровень процесс характеристики Ваших образцов
- Непревзойденное хроматографическое разрешение благодаря пионерской разработке - двумерной газовой хроматографии GCxGC

GCxGC

- Улучшенное разделение сложных образцов
- Простое в использовании программное обеспечение ChromaTOF
- Функция классификации (Classification) облегчает идентификацию аналита
- Возможна стыковка с различными детекторами: пламенно-ионизационным (FID), детектором с электронным захватом (ECD), хемилюминисцентным детектором серы (SCD).



Исследовательский центр



Глобальный центр поддержки



Методическая лаборатория

Обеспечение Качества и Услуг по Поддержке Пользователей

Приборы LECO обладают высокой точностью, быстродействием и простотой в управлении. LECO является международной компанией с более чем 25 филиалами по всему миру. Наша глобальная сеть продаж и поддержки пользователей создает максимальные удобства клиентам. Гарантия качества наших приборов закреплена сертификатом ISO-9001:2000. Наше оборудование проходит тщательную проверку и соответствует нормам качества и безопасности, одобренным Советом Европы.

Официальное представительство корпорации LECO в Украине - Частное Предприятие “ЛЕКО УКРАИНА”

г. Киев, ул. Полевая, 24д, офис 117. тел./факс: +38 (044) 494-17-20/21 info_ua@leco.com

www.ua.leco-europe.com