Ion Trap LC/MS-Systeme der Agilent Serie 6300

Flexible Hochleistungs-LC/MS^n

Agilent Technologies

Hervorragende Flexibilität für die Hochleistungs-LC/MS^n

Mit vier Leistungsstufen, einer vielseitigen Auswahl an Ionisierungen, applikationsspezifischer Software und einem umfangreichen Angebot an LC-Technologie eignen sich die Ion Trap LC/MS-Systeme der Agilent Serie 6300 für nahezu alle Analysen. Die bewährte Technologie sorgt in Verbindung mit der hervorragenden Zuverlässigkeit von Agilent dafür, dass Sie die Leistung erhalten, die Sie brauchen. Jederzeit.

Leistungsstufen, die zu Ihren Applikationen und Ihrem Budget passen

Unabhängig davon, ob Sie nach Proteinen im Spurenbereich, Wirkstoffmetaboliten in komplexen Matrizen oder Pestizidrückständen in Lebensmittelprodukten suchen - es gibt ein Ion Trap LC/MS-System der Serie 6300, das Ihren Anforderungen gerecht wird. Alle Ion Trap Systeme der Serie 6300 zeichnen sich durch ultraschnelle Datenerfassung mit niedrigem Overhead aus und sind problemlos mit moderner hoch auflösender Chromatographie kompatibel.

6310 macht Hochleistungs-MS^n wirtschaftlich

Das Modell 6310 ist ein hochwertiges System mit hervorragender Empfindlichkeit, Flexibilität und Zuverlässigkeit. Es kombiniert schnellen Polaritätenwechsel mit datenabhängigen Akquisitionsfunktionen und vergrößert so die Menge an Daten, die Sie in einem Durchgang erfassen können.

Das Modell 6320 bietet besonders hohe Empfindlichkeit, Massenauflösung und Analysengeschwindigkeit

Dank ihrer hohen Kapazität erhöht die Ion Trap des Modells 6320 die Empfindlichkeit und die Gesamtleistung des Systems. Das Modell 6320 scannt bei 26.000 u/s mit einer Auflösung im Sub-Einheitenbereich und verfügt über einen speziellen Peptid-Scanmodus zur besseren Identifizierung von Proteinen im Spurenbereich.

Das Modell 6330 bietet höchste Empfindlichkeit für Analyte im Spurenbereich

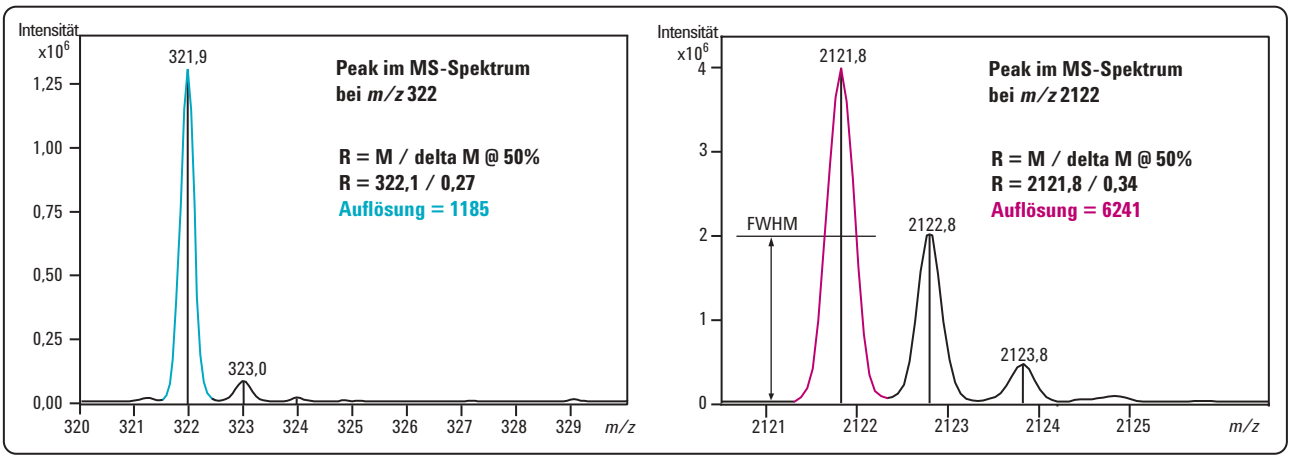
Dank eines neuen, hoch effizienten Detektors ist die Ion Trap 6330 die vielleicht empfindlichste Ionenfalle, die derzeit für Applikationen in der Praxis erhältlich ist. Sie erreicht maximale Empfindlichkeit ohne Einbußen in Bezug auf Scangeschwindigkeit und Auflösung, wie sie bei zweidimensionalen Ion Trap Systemen die Regel sind.

Der 6340 verbessert die PTM - Charakterisierung und die Protein identifizierung

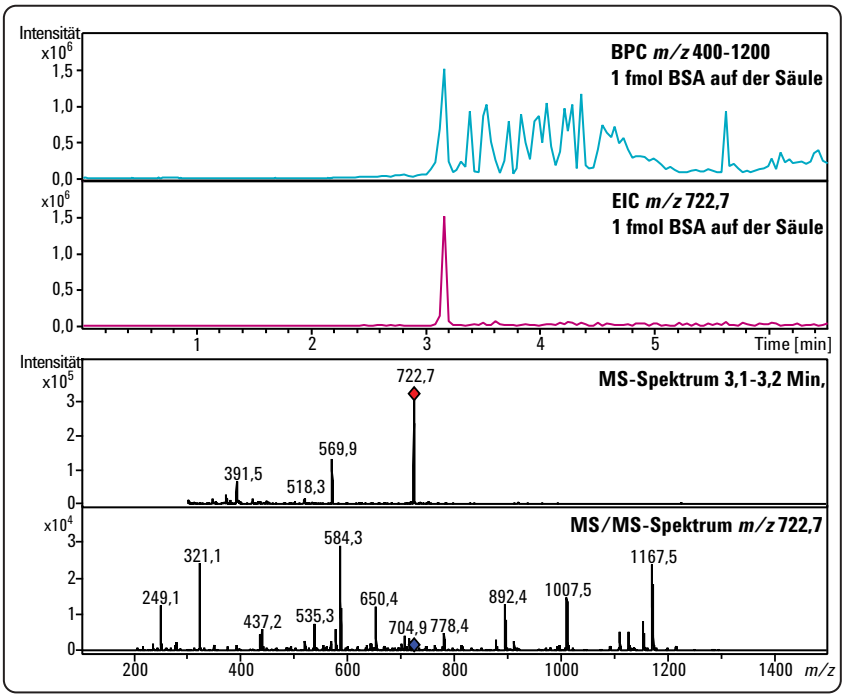
Das Modell 6340 startet mit der hervorragenden Leistung des 6330 und ergänzt diese durch Elektronentransferdissoziation (ETD). ETD ist eine alternative Fragmentierungstechnik, die sowohl von Peptidsequenzen als auch von Positionen chemischer Modifikationen ein genaueres Bild vermittelt.

Ausgezeichnete Ionenfallentechnologie für bestmögliche Leistung

Bei Ion Trap Systemen hängen Massengenauigkeit, Massenauflösung und Analysengeschwindigkeit erheblich von der Geschwindigkeit und dem Timing des Ionenausstoßes ab. Die in den Systemen der Serie 6300 verwendete patentierte, dreidimensionale Multipol-Ionenfalle erzeugt eine nicht-lineare Resonanz höherer Ordnung. Diese nicht-lineare Resonanz bewirkt eine besonders effiziente Energieübertragung auf die Ionen für schnellen präzisen Ausstoß aus der Falle. Das Ergebnis ist eine einmalige Kombination von Massenbereich, Massenauflösung und Analysengeschwindigkeit. Das patentierte Phase Locking kontrolliert das Timing des Ionenausstoßes auf das Genaueste und ermöglicht so eine hohe Reproduzierbarkeit der Analysen sowie ausgesprochen zuverlässige Ergebnisse.



Mit dreidimensionalen Ion Trap Systemen müssen Sie keine Kompromisse bei der Analysengeschwindigkeit mehr eingehen, um eine bessere Auflösung zu erhalten. Diese Analyse von Perfluorphosphozinen über einen breiten Massenbereich mit *m/z* 200 - 2200 unter Verwendung einer 6320 Trap zeigt hervorragende Auflösung bei einer sehr schnellen Analysengeschwindigkeit von 8.100 u/s.



Die Analyse von 1 Femtomol BSA-Säulenverdau mit der 6330-Ion Trap demonstriert unübertroffene Empfindlichkeit.

Eine bessere Möglichkeit zur Erhöhung der Kapazität und Empfindlichkeit der Ion Trap

Die Kapazität einer Trap hat direkten Einfluss auf die Empfindlichkeit. Einige Hersteller verwenden eine zweidimensionale Geometrie ihrer Ion Trap als einfache Möglichkeit zur Erhöhung der Kapazität. Allerdings beeinträchtigen zweidimensionale Ion Trap Systeme andere wichtige Betriebsparameter, wie beispielsweise die Analysengeschwindigkeit und die Massenauflösung. Für optimale Empfindlichkeit sind außerdem zwei Detektoren erforderlich. Ein duales Detektorsystem wiederum reduziert unter Umständen die Zuverlässigkeit und erhöht den Wartungsbedarf.

Agilent ist es gelungen, die Kapazität der dreidimensionalen Ion Trap Systeme der Serie 6300 durch sorgfältige Anpassung der Systemgeometrie, des Materials, der Fertigungspräzision und der Betriebsparameter zu erhöhen. Das Ergebnis ist eine hohe Kapazität mit den bei Analysenschnelligkeit und Auflösung dreidimensionaler Ion Trap Systeme gewohnten Vorteilen.

Elektronentransferdissoziation verbessert die Peptidsequenzabdeckung und die Position von PTMs

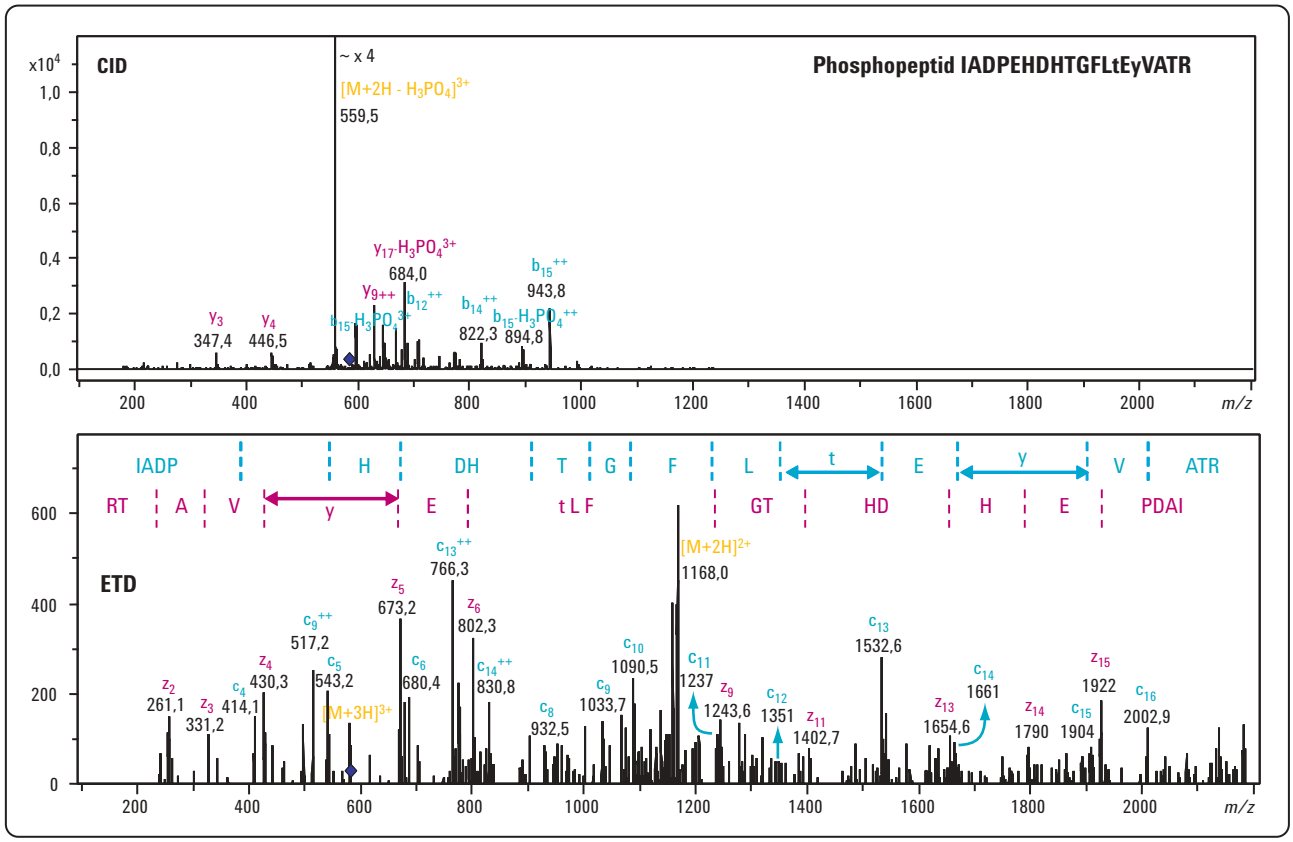
Die Agilent 6340 Ion Trap LC/MS verfügt nicht nur über CID-Standardfragmentierung, sondern außerdem über eine alternative Form der Fragmentierung, die so genannte Elektronentransferdissoziation (ETD), mit der Proteom-Analysen deutlich verbessert werden. ETD produziert überwiegend Ionen der c- und z-Serie. ETD erreicht eine gleichmäßigere Fragmentierung einer Peptidsequenz als CID und daher eine bessere Sequenzabdeckung. Dies erleichtert die Proteinidentifizierung durch Datenbankvergleiche oder *de novo*-Sequenzierung.

Außerdem bleiben posttranslationale Modifikationen, wie beispielsweise Phosphorylierung oder Glykosylierung, bei der ETD-Fragmentierung in der Regel an der jeweiligen Aminosäure. Dadurch lässt sich die spezifische Position der Modifikation einfacher bestimmen.

Je nach den Anforderungen Ihrer Applikation kann das 6340-System CID-Spektren oder ETD-Spektren erfassen. Beim 6340 lassen sich CID- oder ETD-Fragmentierung bei jeder Analyse frei wählen, sodass Sie ein umfassendes Bild von der Proteinidentität und der präzisen Position chemischer Modifikationen erhalten. Das System verfügt ferner über einen speziellen datenabhängigen Erfassungsmodus zur Aktivierung einer Reakkumulation und einer ETD-Fragmentierung, sofern anwenderspezifische neutrale Verluste festgestellt werden.

Mehr Möglichkeiten der Fragmentierung

Die schnelle Anregungsdissoziation ist ein neuer CID-Betriebsmodus. Er beseitigt den "1/3-Cutoff" der CID-Spektren klassischer Ionenfallen. Dadurch wird das Trapping von Produktionen geringer Masse möglich, wie es für Applikationen wie z. B. die iTRAQ-Isotopenmarkierung benötigt wird. Die Systeme der Agilent Serie 6300 werden voraussichtlich ab 2007 über schnelle Anregungsdissoziation verfügen.



CID- und ETD MS/MS-Spektren des Phosphopeptids IADPEHDHTGFLtEyVATR der rekombinanten extrazellulären signalregulierten Kinase (ERK1). Das CID-Spektrum zeigt ein gewisses Maß an Fragmentierung, wobei das dominante Ion jedoch aus dem Verlust der Phosphorsäure stammt. Das ETD-Spektrum weist eine nahezu vollständige c- und z-Serie auf. Im ETD-Spektrum lassen sich die Phosphorylierungsstellen direkt aus dem Spektrum identifizieren.

Mehr Vielseitigkeit durch eine große Auswahl an Ionenquellen

Die Vielseitigkeit der Ion Trap LC/MS - Systeme der Agilent Serie 6300 wird durch eine große Auswahl an branchenführenden Ionenquellen noch erhöht. Verfügbare Quellen umfassen:

- Elektrospray (ESI) bei Standard-, Kapillar- (Mikroliter) und Nanoliter-Flussraten
- Chemische Ionisierung unter Atmosphärendruck (APCI)
- Multimodus mit echter simultaner ESI und APCI
- Photoionisierung unter Atmosphärendruck (APCI)
- MALDI unter Atmosphärendruck mit gepulster dynamischer Fokussierung

Alle LC/MS-Quellen sind mit der patentierten orthogonalen Agilent Sprühtechnik ausgestattet, die Justierungen überflüssig macht und die Kapillare sowie die Ionenoptik sauberer hält. Alle Quellen verfügen außerdem über ein Gegenstrom-Trocknungsgassystem mit hoher Kapazität, das die Qualität der Spektren, die Empfindlichkeit und die Reproduzierbarkeit erhöht, indem Lösungsmittelcluster und Addukte der mobilen Phase reduziert werden. Insgesamt sind die Agilent Ionenquellen dank der orthogonalen Sprühtechnik und dem Trocknungsgas mit hoher Kapazität nicht-flüchtigen Komponenten gegenüber hoch tolerant.

Zuverlässige Elektrospray-Quelle mit orthogonaler Spraytechnik und Gegenstrom-Trocknungsgas mit hoher Kapazität

Multimodus-Quellen können den Durchsatz verdoppeln.

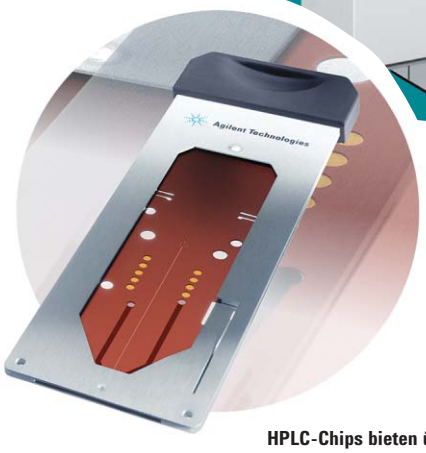
MALDI-Quelle mit gepulster dynamischer Fokussierung für mehr Empfindlichkeit und Übereinstimmung

Einfache, reproduzierbare Nanoflow-Trennungen

Agilents revolutionäre HPLC-Chips lassen sich nahtlos in die Probenanreicherungs- und -Trennsäulen eines Nanoflow-LC-Systems mit den bei der Elektrospray-Massenspektrometrie verwendeten aufwändigen Kapillarverbindungen und der Sprayer-Nadel integrieren. Das Ergebnis ist ein Chip, der nur geringfügig größer ist als ein Objektträger, ausgezeichnete chromatographische Auflösung liefert und die MS-Empfindlichkeit erhöht. HPLC-Chips sind deutlich zuverlässiger und anwenderfreundlicher als herkömmliche Nanosäulen. HPLC-Chips sind sowohl für hochmolekulare als auch für niedermolekulare Applikationen erhältlich.

Das HPLC-Chip Cube MS Interface verfügt über eine Chip-Einzugsmechanik und Elemente einer Elektrospray-Ionenquelle. Es ermöglicht eine vollständig automatische Handhabung und Positionierung sowie den automatischen Anschluss des Chips zur Sicherstellung einer hervorragenden Leistungsfähigkeit bei minimalem Aufwand.

Das HPLC-Chip Cube MS Interface maximiert Empfindlichkeit und Komfort.



HPLC-Chips bieten überragende Chromatographieleistung bei einfacher Anwendung.

Intelligente Datenerfassung gewährleistet hohe Datenqualität

Die Möglichkeit zur Erfassung von MS-Daten auf mehreren Ebenen in einer einzigen Analyse ist einer der vielen Vorteile einer Ion Trap. Die Herausforderung besteht aber nicht nur in der Datenerfassung, sondern in der intelligenten Datenerfassung, bei der die besten und informativsten Daten aus jeder Analyse gezogen werden. Die Ion Trap LC/MS-Systeme der Serie 6300 verfügen über eine große Bandbreite an intelligenten Datenerfassungsfunktionen zur Optimierung aller aus einer Probe gewonnenen Daten.

Vollautomatische datenabhängige Akquisition

Alle Ion Trap LC/MS-Systeme der Serie 6300 können bis zu 5 Stufen (MS^5) einer vollautomatischen datenabhängigen MS/MS-Analyse durchführen. Die ausgeklügelte Software der Serie 6300 verfügt über eine Vielzahl an statischen und aktiven datenabhängigen Akquisitionsfunktionen, mit denen Sie die Menge der relevanten erfassten Daten maximieren können. Für einen einfachen und schnellen Zugriff werden alle in einer Analyse erfassten MS/MS-Daten in einer Datei gespeichert.

Datenabhängige Funktion	Vorteil
N häufigste Vorstufen*	Erhöht die Anzahl der einmaligen Vorstufenionen, aus denen Daten erfasst werden. Besonders nützlich bei co-eluierenden Verbindungen.
Isotopenausschluss	Verhindert die Erfassung überflüssiger MS/MS-Daten von Isotopen (^{13}C etc.)
Statische Einschlussliste bei Vorhandensein im Spurenbereich	Sorgt dafür, dass Daten von Target-Ionen erfasst werden
Statische Ausschlussliste	Eliminiert die Akquisition von MS/MS-Daten von Lösungsmittelionen und sonstigen bekannten Untergrund-Verbindungen
Statische Bevorzugungsliste	Gewährleistet die Datenerfassung von ggf. vorhandenen Target-Ionen, erlaubt aber auch die Erfassung von Daten anderer Ionen, falls keine Target-Ionen vorhanden sind
Bevorzugte Auswahl nach Ladungszustand	Gewährleistet die Auswahl doppelt geladener Peptidionen für CID MS/MS-Daten höherer Qualität oder mehr als doppelt geladener Peptidionen für ETD MS/MS-Daten höherer Qualität
Aktiver Ausschluss - Count-Wiederholungen	Erhöht den Umfang an einmalig erfassten Daten, indem verhindert wird, dass MS/MS-Daten desselben Ions mit einer größeren Häufigkeit als vom Anwender definiert erfasst werden
Aktiver Ausschluss - Ausschlusszeit	Entfernt Ionen aus der aktiven Ausschlussliste nach einer vom Anwender festgelegten Zeit zur Sicherstellung eine Reakquisition, falls ein Ion in mehr als einem Chromatographie-Peak vorkommt
Schwellenwert - absolut*	Stellt sicher, dass Daten nur von Ionen einer vom Anwender festgelegten Häufigkeit erfasst werden
Schwellenwert - relativ*	Stellt sicher, dass Daten nur von Ionen einer vom Anwender festgelegten Häufigkeit relativ zum häufigsten Ion in einem MS-Scan erfasst werden
Neutral-Loss-abhängige AutoMS^3 †	Verbessert die Identifikation von PTMs mittels Durchführung einer MS^3 der N häufigsten Produktionen mit vom Anwender festgelegtem Neutralverlust gegenüber ihren Vorstufen
Neutral-Loss-abhängige Pseudo-MS^n †	Verbessert die Identifikation von PTMs mittels Fragmentierung der N häufigsten Produktionen, die zu vom Anwender festgelegten Neutralverlusten gegenüber ihren Vorstufen korrespondieren
Stabile Isotope Labeling Experiments (SILE)†	Für Nachweis und Fragmentierung von SILE-Paaren in Proteinquantifizierungsexperimenten mit ICAT, SILAC, $^{16}O/^{18}O$, ICPL und anderen Strategien zur Isotopmarkierung
Neutral-Loss-abhängige ETD‡	Verbessert die Bestimmung der Position von PTMs durch Reakkumulation der Vorstufe und Durchführung einer ETD-Fragmentierung, wenn anwenderdefinierte Neutralverluste festgestellt werden

** Lässt sich für MS >2 separat einstellen*

† *Nur bei den Modellen 6330 und 6340 erhältlich*

‡ *Nur bei Modell 6340 erhältlich*

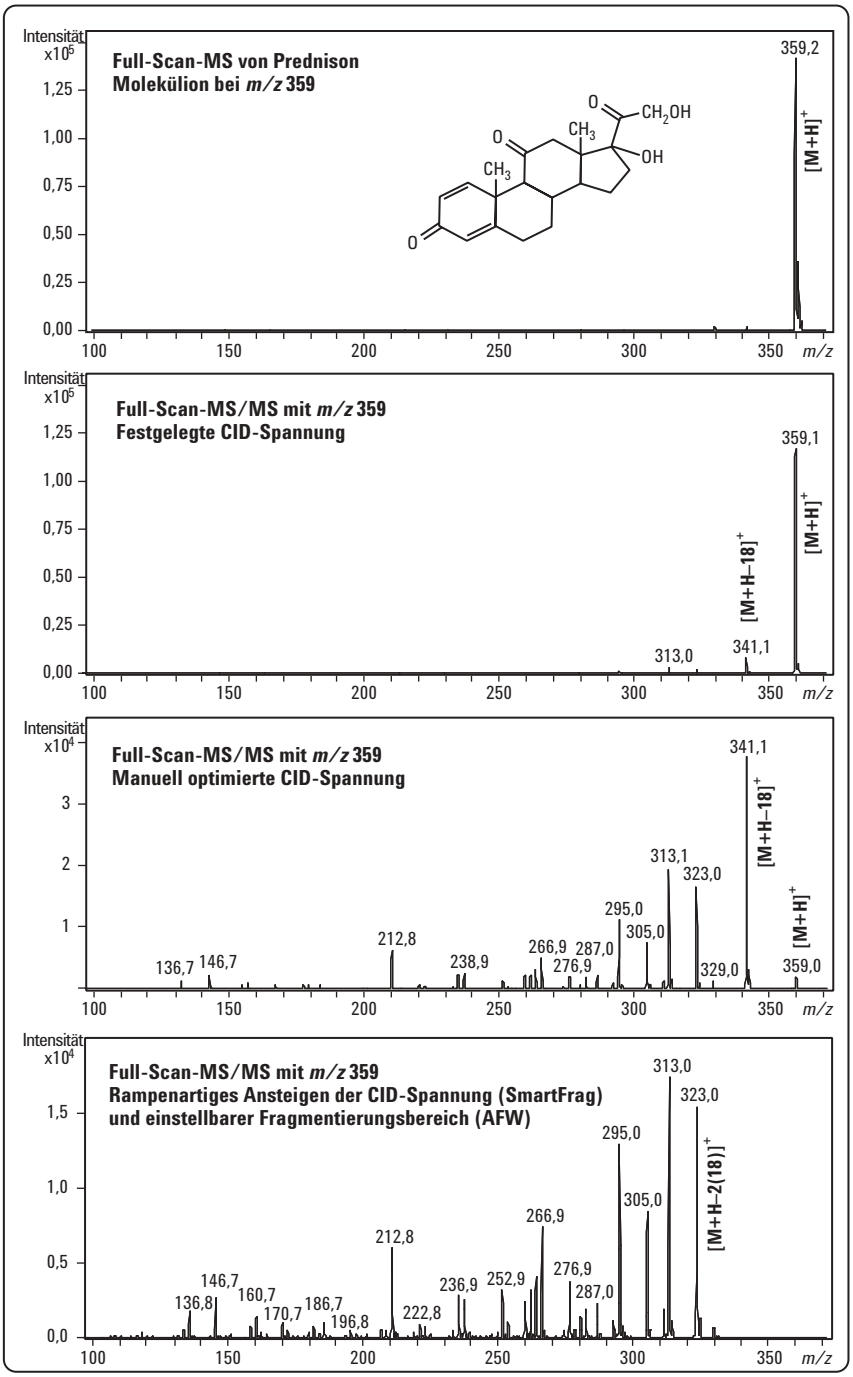
Maximale Auflösung für einmalige, aussagekräftige Daten

Anhand von datenabhängigen Akquisitionskriterien sind die Modelle der Serie 6300 in der Lage, in einem schmalen Massenfenster in der Umgebung jedes selektierten Ions mit maximaler Auflösung zu analysieren. Dadurch erhalten Sie ein optimales Ergebnis: sehr hohe Datenqualität von mehr einzelnen Ionen, wobei die Peaks häufig basislinienaufgelöst sind.

Der Betriebsmodus mit maximaler Auflösung lässt sich für MS- als auch für MS/MS-Analysen verwenden.

Peptid-Scanmodus für bessere Proteinidentifizierung

Der Peptid-Scanmodus arbeitet während MS^1 mit höherer Auflösung und erreicht so eine genauere Erkennung der Ladungsstufen +1, +2 und +3 von Peptidionen. Bei MS^2 und anschließenden Durchgängen wird der schnellere Ultrascan-Modus eingesetzt, um die Zyklusdauer zu verkürzen. Dadurch identifizieren Sie mehr Proteine in komplexen Peptidverdaus.



Schneller Polaritätenwechsel für höheren Durchsatz

Die Möglichkeit zur Erfassung komplementärer Daten zu positiver und negativer Ionisierung in einem einzigen Durchlauf kann kostbare Zeit und Probenmengen sparen. Der schnelle Polaritätenwechsel bei den Modellen der Serie 6300 erlaubt mehr Scans im Verlauf eines Peaks für bessere Datenqualität und höhere Empfindlichkeit.

Durch intelligente Parametereinstellungen erhalten auch Nicht-Profis Profi-Ergebnisse

Zur Vereinfachung des Betriebs verfügt die Software der Ion Trap Systeme über einen "intelligenten" Modus. Ausgehend von einfachen Informationen wie Target-Masse, Stabilität der Verbindung und erwarteter Ionenverteilung und über eine Rückmelde-Schleife zur Evaluierung von Spektraldaten in Echtzeit kann die Software automatisch die optimalen Einstellungen der Ion Trap festlegen. Dennoch behalten Sie die komplette unabhängige Kontrolle über alle Einstellungen der Ionenquelle für vollständige Kompatibilität mit LC-Verfahren.

Bessere MS/MS-Daten durch Ansteigen der SmartFrag Kollisionsenergie

Einer optimalen CID-Fragmentierung geht in der Regel eine mühsame und probenspezifische manuelle Optimierung voraus. Ein spezielles Ansteigen der SmartFrag-Kollisionsenergie und der einstellbare Fragmentierungsbereich (AFW) gewährleisten, dass jedes Vorstufen-Ion automatisch genau die Energie erhält, die es für eine optimale Fragmentierung benötigt. Dadurch werden mehr Produktionen erzeugt, und Sie erhalten mehr Strukturinformationen bei weniger Aufwand.

Automatisiertes Ansteigen der SmartFrag CID-Spannung und ein einstellbarer Fragmentierungsbereich (AFW) bieten detailliertere MS/MS-Spektren und machen eine zeitaufwändige manuelle Optimierung der CID-Spannung überflüssig.

Software-Tools holen alles aus Ihren Daten

Empfindliche, kontinuierliche Geräteleistung und hohe Datenqualität sind notwendig, jedoch nicht ausreichend, um Ihre Analysenziele zu erreichen. Um hochwertige Daten in nützliche Informationen zu verwandeln, bedarf es der richtigen Software-Tools. Agilent verfügt über ein großes Angebot an funktionsstarken Software-Tools, um Ihre MS^n-Daten in aussagekräftige Antworten umzuwandeln.

Vereinfachte Ergebnisnavigation

Automatisierte MS^n-Analysen können enorme Mengen an MS-Daten aller Art produzieren. Die Ion Trap LC/MS-Software der Serie 6300 vereinfacht diesen Vorgang, indem sie alle Daten aus einem Lauf in einer einzigen Datei speichert. Eine vertraute hierarchische Baumstruktur vereinfacht die Navigation und die Auffindung genau der Daten, die Sie benötigen. Spezielle Filter helfen Ihnen, schnell bestimmte untergeordnete Datensätze zu finden.

Automatisches Auffinden von Verbindungen

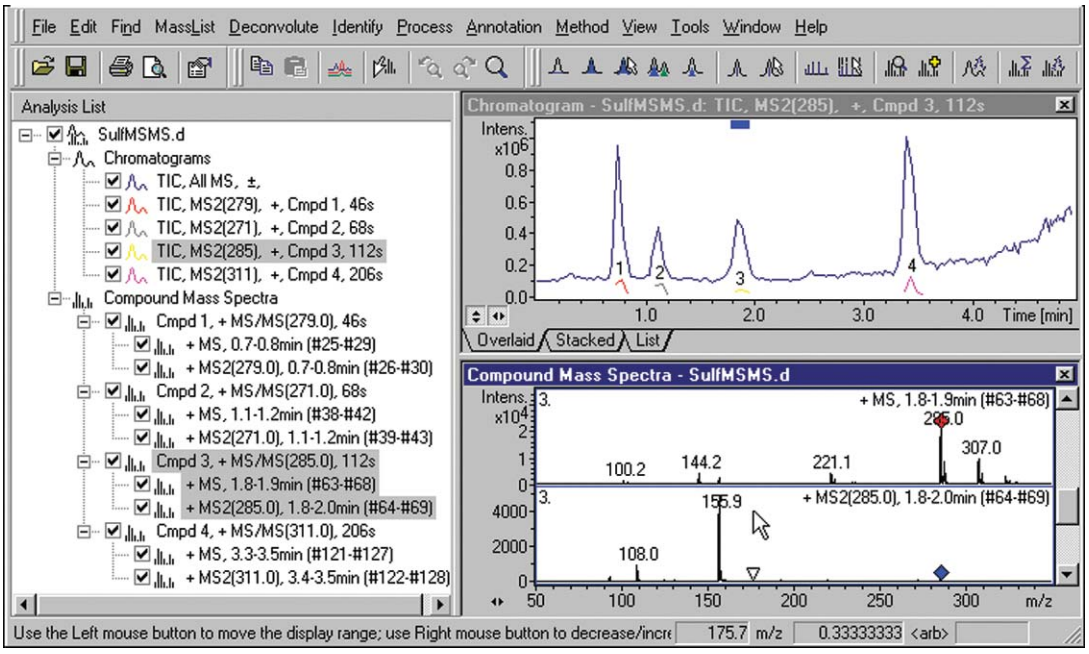
Die "Find Compounds"-Einstellungen verfügen über eine leistungsstarke verbindungsbasierte Datensuch- und -Darstellungsfunktion für komplexe LC/MS^n-Experimente. "Find Compounds" ermöglicht die

- Lokalisierung aller einmaligen MS^n-Experimente
- Erstellung von Verbindungseinträgen und von MS^2-Totalionen-Chromatogrammen für jedes einzelne MS-Vorstufen-Ion
- Extraktion, Berechnung des Mittelwerts und hierarchische Organisation aller verwandten MS- und MS^n-Spektren nach Verbindungseintrag

Außerdem können für alle integrierten Chromatographie-Peaks in Nur-MS- oder manuellen MS^n-Experimenten automatisch gemittelte Massenspektren erstellt werden.

Die Ergebnisse sind abrufbar und können gedruckt und zur Archivierung oder Weiterverarbeitung gespeichert werden.

Die hierarchische Baumstruktur macht es einfach, gewünschte Daten zu finden.

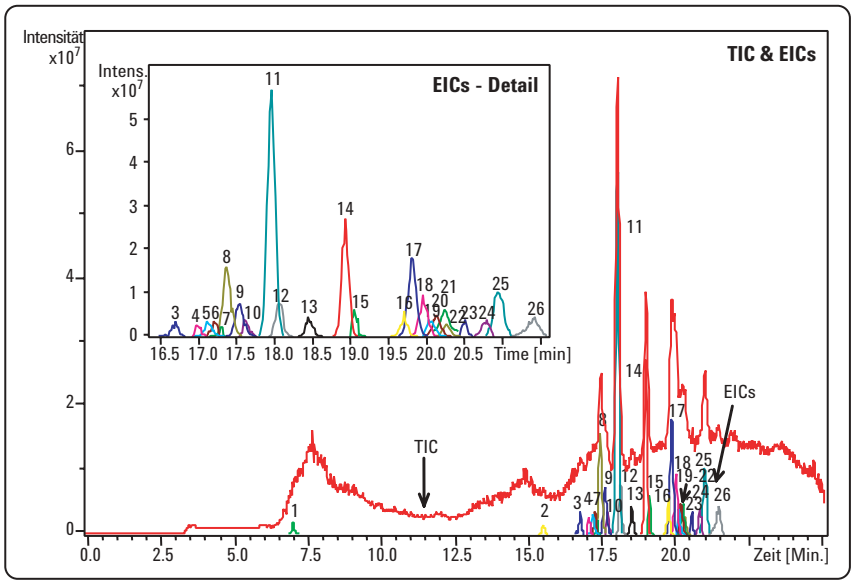


Die automatische Identifizierung von Verbindungen beschleunigt die Analyse und erhöht die Produktivität.

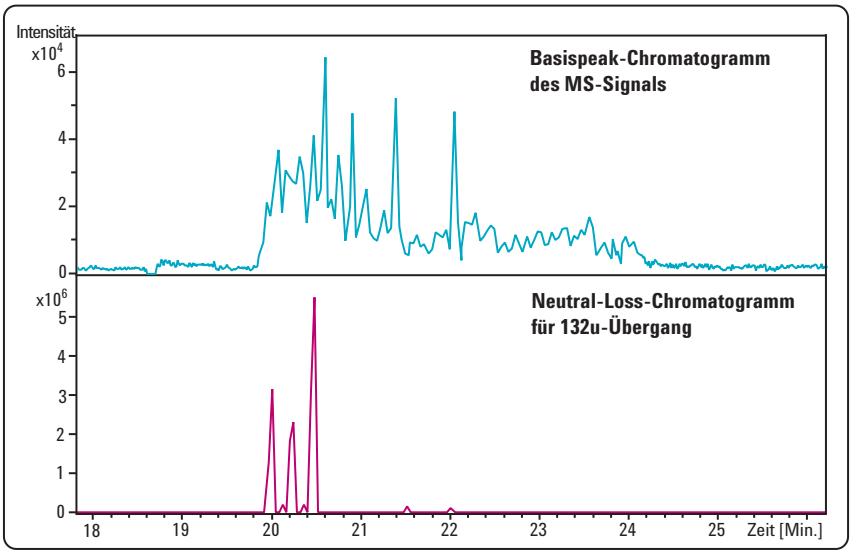
"Dissect" automatisiert die Identifizierung von Verbindungsspuren in komplexen Proben

Verbindungen, die in biologischen Proben nur im Spurenbereich vorhanden sind, sind bei LC/MS-Totalionen-Chromatogrammen (TICs) schwierig nachzuweisen, da endogene Interferenzen erhebliche Untergrundsignale hervorrufen. Die Extraktion von Signalen im Spurenbereich erfordert häufig eine zeitaufwändige Datenanalyse und wird durch überlappende Elutionen, die Bildung von Addukten und Matrixinterferenzen erschwert.

Das optionale Programm "Dissect" automatisiert die Lokalisierung von Spurenverbindungen in komplexen Nur-MS-Daten. Es erstellt und integriert zunächst extrahierte Ionenchromatogramme (EICs) für jede Masse und entscheidet dann –ausgehend von Symmetrie, Breite und anderen Faktoren–, –bei welchen es sich um gültige Chromatographie-Peaks handelt. Anschließend wendet das Programm Fuzzy-Logik und eine Reihe von Kriterien an, um Rauschspitzen und gruppenbedingte Peaks derselben Verbindung zu eliminieren. Am Ende erhält Dissect saubere Massenspektren für jede Verbindung.



Bei einer Analyse von Rattenleber lokalisierte die Dissect-Software 26 Metabolite eines Wirkstoffantagonisten in weniger als einer Minute. Die Ergebnisse waren denen, die nach einer Stunde aufwändiger manueller Identifizierung erhalten wurden, überlegen. Trotz des Vorhandenseins vieler co-eluierender Verbindungen waren die von der Dissect-Software rekonstruierten Massenspektren relativ sauber.



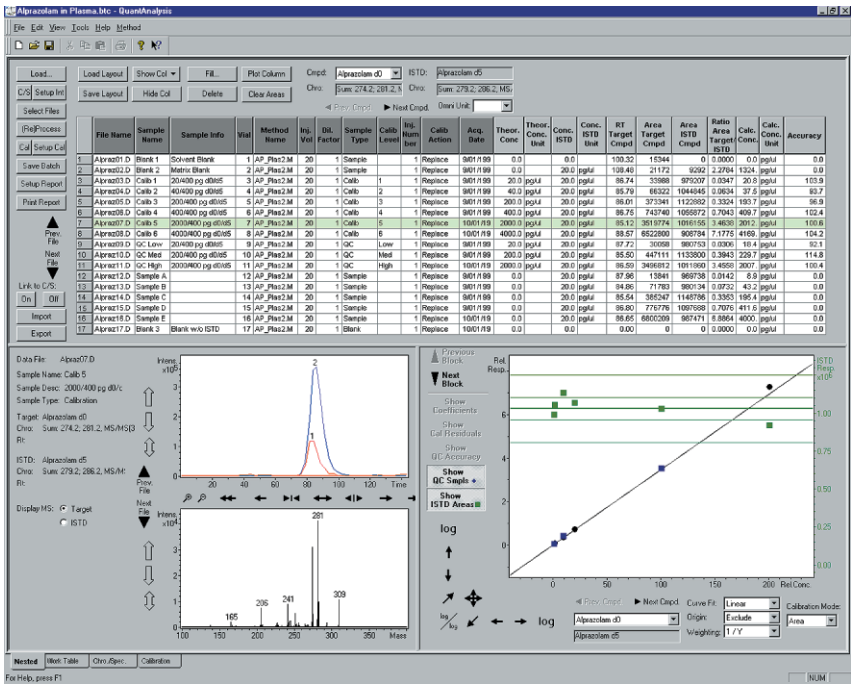
Full-Scan-MS und anschließende Neutral-Loss-Analyse identifizieren mit Arabinose O-glycosylierte Anthocyanine

Neutral-Loss-Analyse identifiziert gemeinsame Elemente in multiplen Analyten

Die Neutral-Loss-Analyse ist ein leistungsstarkes Tool zur Identifizierung gemeinsamer Strukturelemente in multiplen Analyten. Eine Ionenfallen MS/MS birgt den Vorteil von Full-Scan-Daten, mit denen nach der Akquisition eine Neutral-Loss-Analyse durchgeführt werden kann; es besteht also nicht die Notwendigkeit, Neutralverluste im Voraus zu berechnen. Die Ion Trap LC/MS-Software der Serie 6300 verfügt über Tools, die eine Neutral-Loss-Analyse vereinfachen. Damit verbundene Funktionen wie das rampenartige Ansteigen der SmartFrag-Kollisionsenergie gewährleisten eine optimale Fragmentierung; so gibt es genügend Produktionen für die Analyse.

Schnellere, einfachere Quantifizierung

Mit der leistungsstarken QuantAnalysis-Software werden Quantifizierungen schneller und einfacher. Die Software besteht aus drei einfachen Ansichten– Arbeitstabelle, Chromatogramm/Spektrum sowie Kalibrierungskurve–, die in einem einzigen Fenster oder als Registerkarten angezeigt werden können. Die Arbeitstabelle besteht aus einem einzelnen Arbeitsblatt, in dem Sie die Quantifizierung festlegen und die Ergebnisse anzeigen. Es lässt sich so einstellen, dass nur wesentliche Daten angezeigt werden. Dieses anwenderdefinierte Layout lässt sich für spätere Anwendungen speichern. Alle drei Ansichten sind dynamisch verknüpft; Änderungen in einer Ansicht spiegeln sich in den anderen beiden Ansichten wider. Beispielsweise führt die Auswahl einer anderen Kurvenanpassung für die Kalibrierungskurve automatisch zu einer Neuberechnung der Konzentrationen.



Arbeitstabelle (oben), Chromatogramm/Spektrum (unten links) und Kalibrierungskurve (unten rechts) sind dynamisch verknüpft: Jede Änderung in einer Ansicht spiegelt sich automatisch in den anderen Ansichten wider.

Extrahieren Sie die maximale Information aus jeder Probe

Die ACD/SpecManager-Software von Advanced Chemistry Development kann Ihnen helfen, maximale Information aus Ihren MS-Daten zu extrahieren:

- Verbindungserkennungsalgorithmus zur Verringerung von zufallsbedingtem Rauschen und Untergrundsignalen
- ChemSketch, der Branchenstandard zum Zeichnen chemischer Strukturen
- Tools zur Vereinfachung der Addition und Subtraktion von Spektren
- Tools zur Speicherung verarbeiteter Chromatogramme und Spektren sowie zur Reporterstellung
- Korrelations-Tools als Ergänzung zur MS-Interpretation durch Korrelierung von Strukturen und MS-Spektren
- Direkte Verknüpfung für den problemlosen Übertrag von Massenspektren von der Ion Trap-Software zum ACD/SpecManager

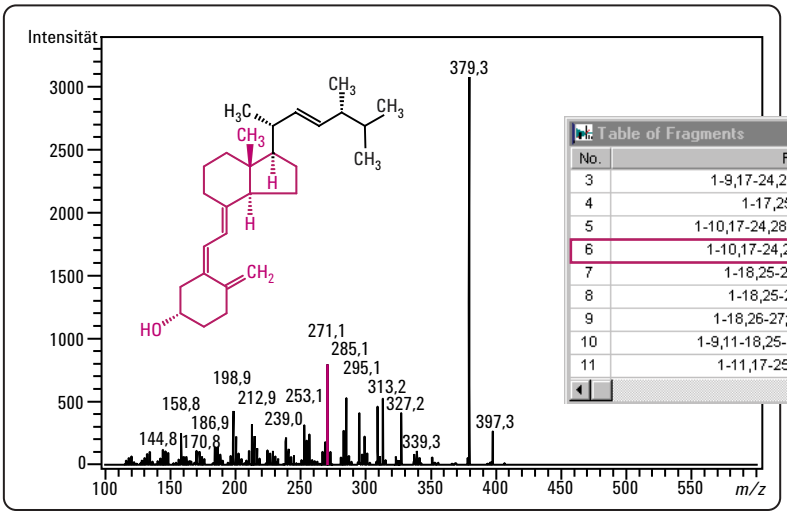
Die SpecManager-Software unterstützt außerdem technikübergreifende und plattformübergreifende multispektrale Datenintegration, einschließlich NMR, MS, UV-Vis und IR.

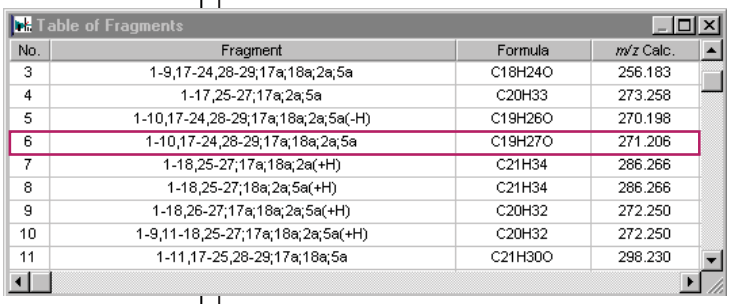
Editor für anwenderdefinierte Reports

Ein Editor für anwenderdefinierte Reports vereinfacht und beschleunigt die Erstellung von Reports in genau dem Format, das Sie brauchen.

Anwenderspezifische Automatisierung

Die Programmierung auf der Basis von Visual Basic bietet fast unbegrenzte Möglichkeiten für die anwenderspezifische Automatisierung. Ihre Verfahren können anwenderspezifische Skripts abrufen, um die Datenanalyse und Reporterstellung zu automatisieren. Diese Skripts können eine Reihe gängiger, MS-spezifischer Befehle erkennen.





No.	Fragment	Formula	m/z Calc.
3	1-9,17-24,28-29;17a;18a;2a;5a	C18H24O	256.183
4	1-17,25-27;17a;2a;5a	C20H33	273.258
5	1-10,17-24,28-29;17a;18a;2a;5a(-H)	C19H26O	270.198
6	1-10,17-24,28-29;17a;18a;2a;5a	C19H27O	271.206
7	1-18,25-27;17a;18a;2a(+H)	C21H34	286.266
8	1-18,25-27;18a;2a;5a(+H)	C21H34	286.266
9	1-18,26-27;17a;18a;2a;5a(+H)	C20H32	272.250
10	1-9,11-18,25-27;17a;18a;2a;5a(+H)	C20H32	272.250
11	1-11,17-25,28-29;17a;18a;5a	C21H30O	298.230

Mit der ACD/SpecManager-Software können Sie Datenbanken mit Korrelationen zwischen Strukturen und Ihren MS-Daten aufbauen. Diese Korrelationstabellen lassen sich mit unbekannten Spektren vergleichen.

Spectrum Mill-Software vereinfacht Proteom-Analysen mit hohem Durchsatz

Mit der Spectrum Mill-Software können Sie Proteine aus MS- und MS/MS-Daten durch Datenbankvergleich oder *de novo*-Sequenzierung identifizieren.

Intelligente Spektrenextraktion beschleunigt die Proteinidentifizierung

Die Spectrum Mill-Software identifiziert Rauschspektren und Spektren minderer Qualität vor dem Datenbankvergleich und schließt sie aus, sodass die Suchgeschwindigkeit enorm beschleunigt wird. So verringert sich auch die Zahl der falschpositiven Ergebnisse.

Multiple Suchoptionen zur Proteinidentifizierung für ein Plus an Flexibilität

Das MS/MS-Suchprogramm verfügt sowohl über einen Identitätsmodus für nicht-modifizierte Peptide als auch über einen variablen Modus für Modifikationen. Das Programm Peptid Mass Fingerprinting (PMF) eignet sich hervorragend zur Identifizierung von Proteinen aus MS-Spektren.

Unterstützung für ETD-Daten

Die Spectrum Mill-Software unterstützt sowohl CID-Standardspektren als auch ETD-Spektren.

Automatische und manuelle Validierung von Übereinstimmungen für mehr Zuverlässigkeit

Die Spectrum Mill-Software validiert Treffer schnell und automatisch. Sie haben darüber hinaus die Möglichkeit, Treffervorschläge interaktiv zu prüfen und sie mit den tatsächlichen MS/MS-Spektren zu vergleichen. Nicht validierte Spektren können mit anderen Parametern oder Datenbanken erneut durchsucht werden.

De novo-Spektreninterpretation

Der *de novo*-Sequenzier-Algorithmus erstellt eine abgestufte Liste möglicher Peptidsequenzen. Er verwirft unrealistische Lösungen und kompensiert gängige Probleme bei Spektren wie beispielsweise Rauschen und unvollständige Fragmentierung.

Quantitative und qualitative Informationen

Die Spectrum Mill-Software führt eine automatische Bestimmung von Unterschieden der relativen Häufigkeit der gefunden Proteine durch. Sie unterstützt ferner ICAT, iTRAQ and andere Technologien zur Markierung stabiler Isotopen.

Komplexe Daten einfach abrufbar

Die Spectrum Mill-Software erstellt Übersichten und Korrelationen von Ergebnissen so, dass selbst Anwender, die wenig Erfahrung in der Auswertung von MS-Daten haben, die Informationen problemlos abrufen und nutzen können. Sie können große Datensätze zwischen mehreren Experimenten vergleichen und die Ergebnisse auf Proteinebene zusammenfassen.

Kompatibilität mit Daten verschiedenster Anbieter

Es sind Zusatzmodule erhältlich, mit denen die Spectrum Mill-Software auch Datenformate anderer Anbieter verarbeiten kann:

- .RAW (Thermo Finnigan)
- .wiff (SCIEX LC/MS)
- .pkl (Waters und andere)

MASCAT vereinfacht Mascot -Proteindatenbanksuchen

Die Software für die Modelle der Serie 6300 verfügt über das Programm MASCAT für Proteinforscher, die das Mascot-Datenbanksuchprogramm als Standard verwenden. MASCAT verknüpft Dateien im generischen Mascot-Format (*.mgf) und ermöglicht so die Konsolidierung von Ergebnissen aus mehreren zweidimensionalen LC/MS/MS-Analysen in einer einzigen Proteindatenbanksuche.

Run #	Run Name	Group (#)	Spectra (#)	Distinct Peptides (#)	Distinct Summed MS/MS Search Score	% AA Coverage	Mean Peptide Spectral Intensity	Database Accession #	Protein Name
1	ERK_CIDETD_45MIN	1	39	20	289.22	53	1.84e+006	P27361	Mitogen-activated protein kinase 3 (EC 2.7.1.-) (E

#	Frag Mode	Score	SPI (%)	Spectrum Intensity	Sequence	Modifications	m/z Measured (Da)	MH+ Matched (Da)
1	ETD	27.71	88.7	4.39e+005	(R)IADPEHDHTGFLtEyVATR(W)	t:Phosphorylated T y:Phosphorylated Y	584.24	2172.036
2	ETD	25.14	89.5	5.10e+005	(R)LKELIFQETAR(F)		450.04	1347.763
3	ETD	23.68	82.6	4.86e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		411.98	1232.648
4	CID	21.70	97.0	5.65e+005	(R)DVYIVQDLMETDLYK(L)		923.03	1844.899
5	CID	18.94	93.1	1.68e+006	(R)RTEGVGPGVPGEVEMVKGQPFDVGPR(Y)		899.39	2694.367
6	CID	18.89	96.9	3.38e+006	(R)DLKPSNLLINTTCDLK(I)	C:Carbamidomethylation	923.44	1844.979
7	CID	18.85	96.5	1.37e+006	(R)LKELIFQETAR(F)		674.38	1347.763
8	CID	17.13	91.8	7.22e+006	(R)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHVR(K)		870.42	2608.214
9	ETD	16.70	65.2	1.37e+006	(R)LKELIFQETAR(F)		674.38	1347.763
10	CID	15.57	91.5	4.86e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		411.98	1232.648
11	CID	14.94	93.2	2.40e+006	(K)ELIFQETAR(F)		554.01	1106.584
12	CID	14.90	85.0	1.06e+006	(R)DLKPSNLLINTTCDLK(I)	C:Carbamidomethylation	923.07	1844.979
13	CID	14.70	87.0	3.68e+005	(R)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHVRK(T)		912.49	2736.309
14	CID	14.26	90.8	5.52e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		616.84	1232.648

Die Spectrum Mill-Software vereinfacht und beschleunigt die Identifizierung von Proteinen und Lage posttranslationaler Modifikationen

Spezifikationen

Massengenauigkeit (alle)

± 0,2 u im kalibrierten Standardmassenbereich bei normaler Auflösung im Full-Scan-Modus, bei sachgemäßer Kalibrierung, ICC-Target- und Ionenstatistik und thermischem Gleichgewicht zwischen Elektronik und Ionenquelle

Massenachsenstabilität (alle)

Innerhalb von ± 0,2 u des beobachteten kalibrierten Wertes über 8 Stunden in einem Standardmassenbereich bei normaler Auflösung im Full-Scan-Modus, bei richtiger ICC-Target- und Ionenstatistik und thermischem Gleichgewicht zwischen Elektronik und Ionenquelle und einer Umgebungstemperatur von 21°C ± 3°C

Monoisotope Vorstufenauswahl (alle)

Monoisotope Vorstufenauswahl ist im gesamten Standardmassenbereich (*m/z* 50 - 2200) bei einer Umgebungstemperatur von 21°C ± 3°C möglich.

Massenbereich, Massenauflösung und Analysengeschwindigkeit

	6310		6320, 6330 und 6340	
Massenbereich *m/z*	Auflösung FWHM (u)	Analysenge-schwindigkeit (u/s)	Auflösung FWHM (u)	Analysenge-schwindigkeit (u/s)
50 - 2200	≤ 0,6	13.000	≤ 0,6	26.000
	≤ 0,45	5.500	≤ 0,35	8.100
	≤ 0,35	1.650	≤ 0,25	800
200 - 4000	≅ 3 - 4	27.000	≤ 3	27.000

Polaritätenwechsel

Polaritätenwechsel bei jedem Scan mit 1 positivem Spektrum und 1 negativen Spektrum bei allen Modellen in etwa 1 Sekunde

Empfindlichkeit

Bedingungen

Säule - ZORBAX Rapid Resolution SB-C18 2,1x30 mm 3,5 Mikron
Mobile Phase - 25 % Wasser 75 % Methanol 5 mM Ammoniumacetat
Flussrate - 400 µl/min
Modus - Full-Scan-MS/MS
MS/MS - Übergang des protonierten Molekülions (*m/z* 609) zur Summe der beiden häufigsten Produktionen
Produktionen-Scanbereich - *m/z* 175 - 650
Massenbereich - Standard (*m/z* 50 - 2200)
Auflösung - Standard (0,6 u)

	6310	6320	6330	6340
Menge (Reserpin - auf der Säule)	5 pg	1 pg	250 fg	250 fg
Signal/Rausch-Verhältnis (Full-Scan-MS/MS)	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1

Weitere Informationen

erhalten Sie im Internet unter:
www.agilent.com/chem/iontrap

Online-Shop:
www.agilent.com/chem/store

Agilent-Kundenkontaktcenter:
www.agilent.com/chem/contactus

Europa
info_agilent@agilent.com

Dieses Produkt ist ausschließlich für den Gebrauch in der Forschung bestimmt. Es darf nicht in der Diagnostik eingesetzt werden.

Änderungen vorbehalten.

Alle Rechte vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2006
Gedruckt in den Niederlanden, 11. November 2006
5989-5824DEE

Agilent Technologies