

Agilent 6300系列离子阱液/质联用系统

高灵活性，高性能的
液相色谱/多级质谱系统



Agilent Technologies

高性能的液相色谱/多级质谱系统具有出色的灵活性

6300系列离子阱质谱仪具有四种规格，它们可以配置广泛的离子源，各种应用软件和液相色谱系统。Agilent 6300系列离子阱液/质联用系统可以应对各种分析挑战。以被证明的可靠性帮助分析工作者在任何时候都能获得高质量的结果。

各种规格可以满足您的应用领域和资金预算要求

不管您是要分析低丰度蛋白质，复杂样品中药物代谢物，还是食品中农药残留化合物，6300系列离子阱质谱都已可以满足分析要求。任何一个规格的离子阱质谱，它都有快速采集功能和与目前使用的高分离度色谱兼容的数据采集功能。

6310型离子阱质谱是一种实现N级质谱分析的高性价比的质谱

6310具有出色的灵敏度、灵活性和可靠性但是价格更加合理。它可以进行极性快速切换，数据相关采集模式，因此在一次分析中可以获得更多的数据信息。

6320型离子阱质谱 – 更高的灵敏度、质谱分辨率和扫描速度

6320离子阱质谱是大容量离子阱，因此可以大大提高灵敏度和综合性能。6320离子阱质谱在优于单位质量数分辨率的条件下，其扫描速度可以达到26000 u/s，而且其肽扫描功能可以提高低丰度蛋白质的鉴定效率。

6330型离子阱质谱 – 最高灵敏度，用于分析低丰度样品

由于新型高效的检测器设计，6330离子阱质谱是目前业界最灵敏的离子阱质谱之一。它在不损失扫描速度和分辨率的条件下，可以获得最高的灵敏度，而与二维离子阱相当。

6340型离子阱质谱 – 大大提高后转移修饰蛋白质分析结果的质量

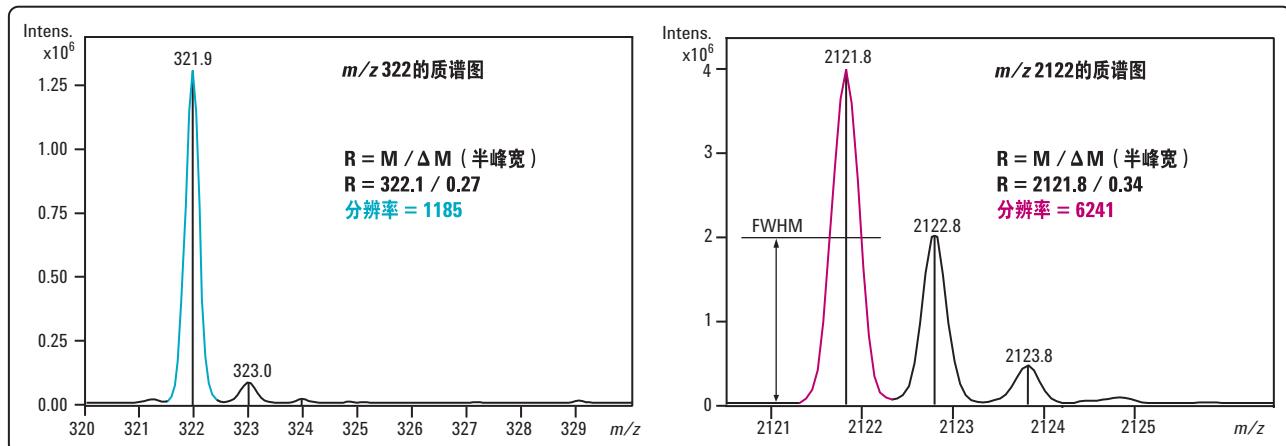
6340型离子阱质谱是在6330质谱上加上电子迁移裂解(ETD)功能。电子迁移裂解(ETD)是另一种离子碎裂技术，它可以提供肽的氨基酸序列和化学修饰位点的全部信息。



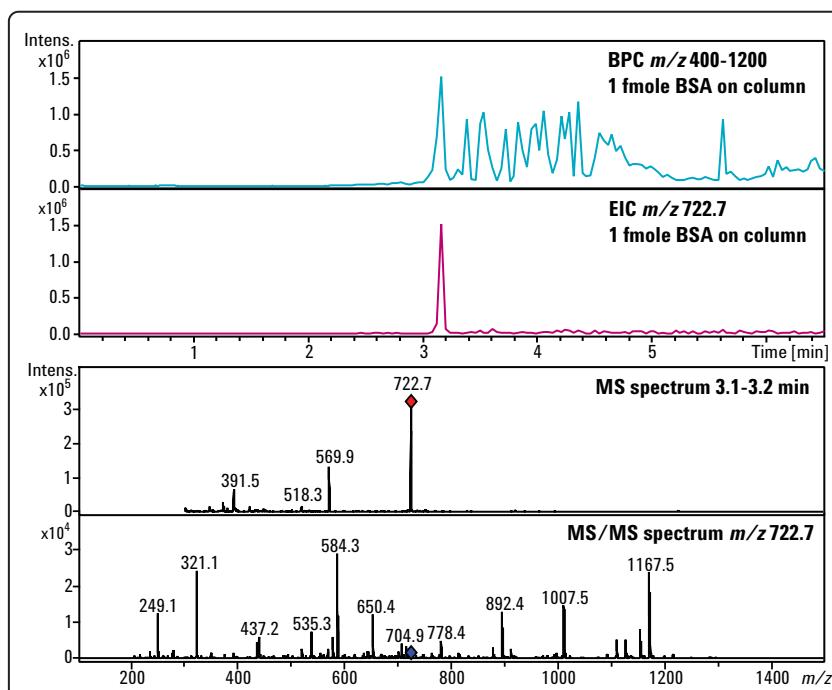
出色的离子阱技术带来出色的性能

对于离子阱质谱，质量精度，分辨率和扫描速度主要取决于离子喷射的速度和时间。专利设计的三维多极离子阱是非线性谐振扫描阱。这种扫描方式能够更加有效地把能量快速准确地传输给离子。其结果是更宽的质量范围，更高

的分辨率及更快的扫描速度。专利的相锁定技术可以精确地控制离子的喷射时间，因此可以产生高重复性的扫描质谱图，最后使得分析结果更加可靠。



对于三维离子阱质谱，无需为提高分辨率而损失扫描速度。在扫描范围200-2200 amu内利用6320型离子阱质谱分析全氟磷酸盐标样，从结果看出，在8100 u/s的扫描速度下，可以得到出色的分辨率



提高离子阱的容量和分析灵敏度的最佳方法

离子阱的容量直接影响分析灵敏度。一些厂商采取了二维离子阱设计来提高离子阱的容量。但是二维离子阱会相应损失分辨率和扫描速度。一般来讲，二维阱还需要双检测器以获得最佳灵敏度。双检测器会降低仪器的可靠性以及增加维护成本。

安捷伦是通过准确设计离子阱的几何结构、精确加工及优化操作参数来提高6300系列三维离子阱质谱的离子容量的。

6330离子阱质谱分析1 fmol牛血清蛋白酶解产物，显示了其出色的灵敏度

电子迁移裂解(ETD)提高肽序列检测的覆盖率和转移修饰位点的准确性

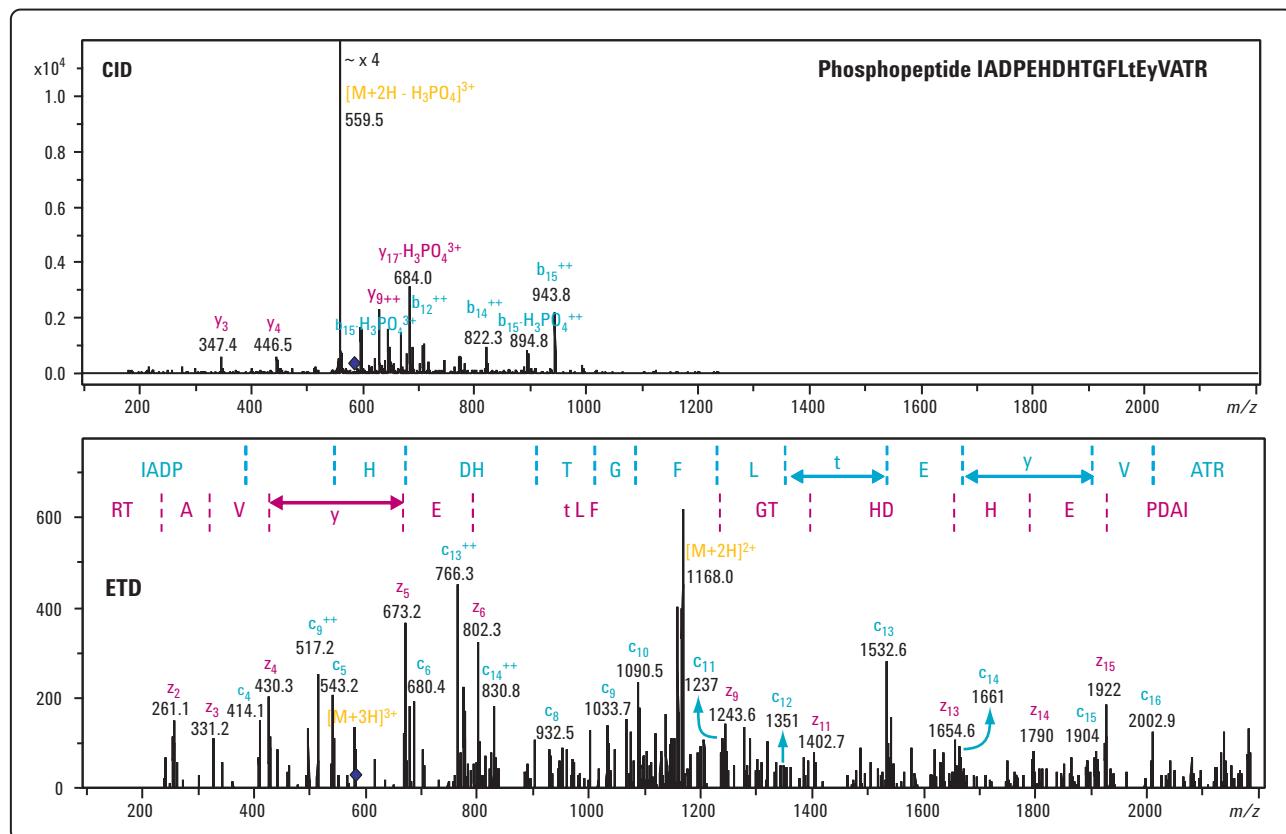
Agilent 6340型离子阱质谱不仅具有标准的碰撞诱导解离(CID)，而且还具有被称之为电子迁移裂解(ETD)的功能，它可以提高蛋白组分析结果质量。电子迁移裂解(ETD)主要产生c-和z-系列的离子。与CID相比，电子迁移裂解(ETD)一般会产生更多的裂解碎片，因此可以获得更多的序列碎片。不管是通过数据库检索还是再测序，更高序列覆盖率将有助于蛋白质的鉴定。

而且，利用电子迁移裂解，后转移修饰如磷酸化或是糖基化在裂解时是连接在某个氨基酸上的。这样更容易地将修饰位点鉴定出来。

6340型离子阱可以根据您的需要采集碰撞诱导解离(CID)和电子迁移裂解(ETD)质谱图。6340型离子阱质谱还可以交互式采集CID和ETD的质谱图，这样可以最大限度地获得蛋白的信息和化学修饰位点的准确位置。另外，它还具有特殊的数据采集模式，它可以根据您指定的中性丢失分子来采集电子迁移裂解(ETD)质谱图。

更多的裂解模式

快速激发裂解是全新的碰撞诱导裂解模式。它消除了传统的“三分之一效应”。这使得离子阱可以采集低质荷比的离子，这些离子对于iTRAQ同位素标记的应用至关重要。安捷伦将在2007年在6300系列离子阱上推出快速激发裂解功能。



来自重组人外来信号调节激酶的磷酸化肽段IADPEHDHTGFLtEyVATR的CID和ETD的质谱/质谱图。CID质谱图显示了一些碎片，但是主要是来自丢失磷酸的片段。ETD则显示了几乎完整的c-和z-系列的离子。在ETD的二级质谱图中，磷酸化的位点可以直接从质谱图读出来。

多种离子源选择扩展了离子阱质谱的适用范围

Agilent 6300系列离子阱质谱可以连接多种行业领先的离子源。其中包括：

- 电喷雾(ESI) – 标准流速, 微流速及纳流电喷雾
- 大气压化学电离源(APCI)

- 真正实现ESI和APCI同时采集的组合离子源
- 大气压光电离源(APPI)
- 脉冲动态聚焦大气压基质辅助激光解析离子源(AP-MALDI)

液/质离子源都包括安捷伦专利技术的直角喷雾接口避免了位置优化及保证毛细管和离子光学更加干净。所有的离子源包括高热容量反吹干燥气系统大大减少溶剂簇和流动相附加物，从而提高了质谱图的质量、灵敏度和重复性。直角喷雾和高热容量干燥气使得安捷伦的离子源可以耐不挥发性缓冲盐体系。



可靠的电喷雾离子源
离子源具有直角喷雾接口和高热容量、反吹干燥气



组合离子源使效率提高了3倍



脉冲动态聚焦基质辅助激光解析离子源提高了质谱图的灵敏度和重复性

容易而高重复性的纳流分离技术

具有突破性的安捷伦液相色谱 – 芯片技术将样品富集, 纳流分离及纳流电喷雾器集成于一体。其结果是芯片可以获得出色的色谱分离性能和更高的灵敏度。液相色谱 – 芯片比传统的纳流液相更加可靠和容易使用。它可以适用于大分子和小分子的分析。

液相色谱 – 芯片 / 质谱接口将纳流分离和纳流电喷雾集成于一体, 因此大大提高了分析性能。



液相色谱 – 芯片 / 质谱接口大大提高了灵敏度, 使用非常方便



液相色谱 – 芯片技术可获得出色的色谱分离性能且易于使用

智能化数据采集确保高质量的数据

一次分析获得多级质谱的数据的功能是离子阱诸多优点的一种。但是困难在于，质谱不仅是要采集数据，而且要高度智能化以保证每一次扫描都能采集到最好，最有信息的数据。6300系列离子阱液质具有许多智能化的数据采集模式，这样可以保证对每一个样品都可以得到最佳的数据。

全自动，数据相关采集

6300系列离子阱质谱在与液相色谱联用时全自动采集最高达5级的多级质谱。6300系列质谱软件包括静态和动态数据采集功能可以使您

获得最多的质谱信息。为了方便和简单，所有的MS/MS数据都存于一个数据文件中。

数据相关采集	优点
N个最强母离子选择*	增加特征母离子的数量，对共流出峰很有帮助
同位素排除	防止来自 ¹³ C同位素离子被选择进行MS/MS分析
静态包括列表	保证被选择母离子进行质谱分析，即使其响应很低
静态排除列表	将溶剂离子和已经背景离子排除在MS/MS之外
静态优先离子选择	确保被选择的离子进行质谱分析，若存在就优先分析，若目标离子不存在，就分析其它的离子
优先价态离子选择	保证二价肽段离子被选择进行CID MS/MS分析，或者是大于二价的离子被选择进行ETD MS/MS分析
动态排除 - 重复计数	对于超过指定次数的同一目标离子，避免其被选择进行MS/MS分析
动态排除 - 排除时间	在用户指定的时间之后，将目标离子从排除列表去除，在此时间内采集其它特征离子
门槛值 - 绝对值*	只有离子超过设定的门槛值时，才进行MS/MS
门槛值 - 相对值*	只有某个离子超过与最强离子比值的门槛值时，才进行MS/MS
中性丢失相关数据采集 - 自动三级质谱(AutoMS ³)†	提高后转移修饰分析，当母离子丢失某个设定的中性分析基团时，就被选择进行MS ³ 质谱分析
中性丢失相关数据采集 - MS ⁿ †	提高后转移修饰分析，当母离子丢失某个设定的中性分析基团时，就被选择进行质谱分析
稳定性同位素标记实验(SILE)†	在蛋白质定量分析时，获得SILE对的检测和碎片，如ICAT, SILAC, ¹⁶ O/ ¹⁸ O, ICPL和其它同位素标记实验
中性丢失相关采集ETD ‡	当某个离子丢失指定的中性分子时，就被选择进行ETD分析，这样可提高修饰位点的准确度

* MS>2时分别设置

† 只有6330和6340型具有该项功能

‡ 只有6340型具有该项功能

最大分辨率采集模式 – 用于特征离子的分析

使用数据相关性采集模式，6300系列离子阱质谱可以在以母离子为中心的窄质量范围内进行最大分辨率扫描。这个结果是业界最好的：高质量的数据，质谱峰都是基线分离。您可以用最大分辨率扫描模式进行 MS 和 MS/MS 分析。

肽扫描模式用于蛋白质的鉴定

肽扫描模式在MS1使用增强型扫描模式，这样可以准确测定+1, +2和+3价肽离子，在MS/MS分析中，采用超快扫描模式。结果是在复杂肽混合物中可以鉴定更多的蛋白质。

快速极性切换用于高通量分析

在一次分析中采集正和负离子数据可以大大提高分析通量。

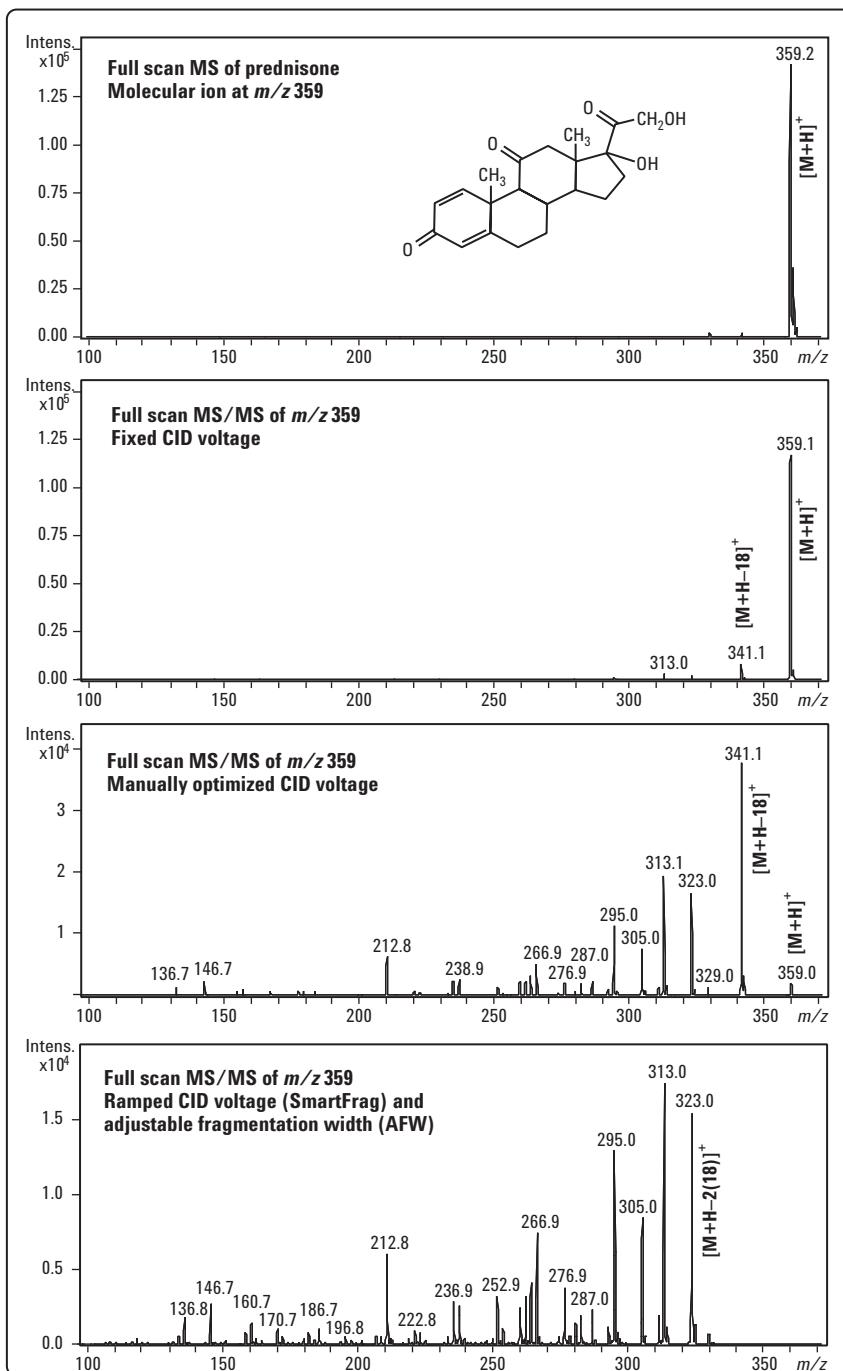
高分析通量。6300系列离子阱质谱的快速极性切换可以在一个色谱峰上可以采集更多的数据，因此可以得到更高的灵敏度和更高质量的质谱数据。

智能化参数设定对非专业操作者也能设定合理的质谱参数

为了简化操作，离子阱软件具有“智能化”模式。基于目标离子，化合物稳定性和离子分布以及时谱图评价反馈系统，软件可以自动设定最佳的质谱参数。您仍然可以独立控制离子源的参数，以与液相色谱的方法兼容。

碰撞能量扫描可以得到更好的MS/MS数据

要得到最优化的碰撞诱导解离碎片质谱一般需要精细的，以样品为导向的手动优化。Agilent 6300系列的离子阱质谱独特的“SmartFrag”功能和可调节碰撞带宽(AFW)功能保证每一个母离子都可以得到最佳断裂所需的准确能量—而且是自动的。其结果是获得更多的碎片和更多的结构信息。



自动“SmartFrag”和可调节碰撞解离带宽可以获得更丰富的MS/MS信息，而无需费时的手动碰撞诱导解离电压优化。

软件工具包将数据处理效率最大化

高灵敏度，可靠的仪器和高质量的数据是必要的，但是这对于您的最后分析目标并不够。应该有专业的软件将数据转化成有用的信息。安捷伦提供功能强大的专业软件帮助您将MSⁿ的数据变成答案。

直观的数据结果浏览器

自动MSⁿ分析可以生成大量多层次的质谱数据。6300系列离子阱质谱软件可以对一个文件中的所有数据分类。浏览树结构有利于数据的浏览和定位您需要数据的准确位置。特别设计的数据过滤器帮助您快速提取数据文件。

自动发现色谱峰

发现化合物功能是一种功能强大的数据提取和浏览功能，用于复杂的LC/MSⁿ的实验。发现化合物将：

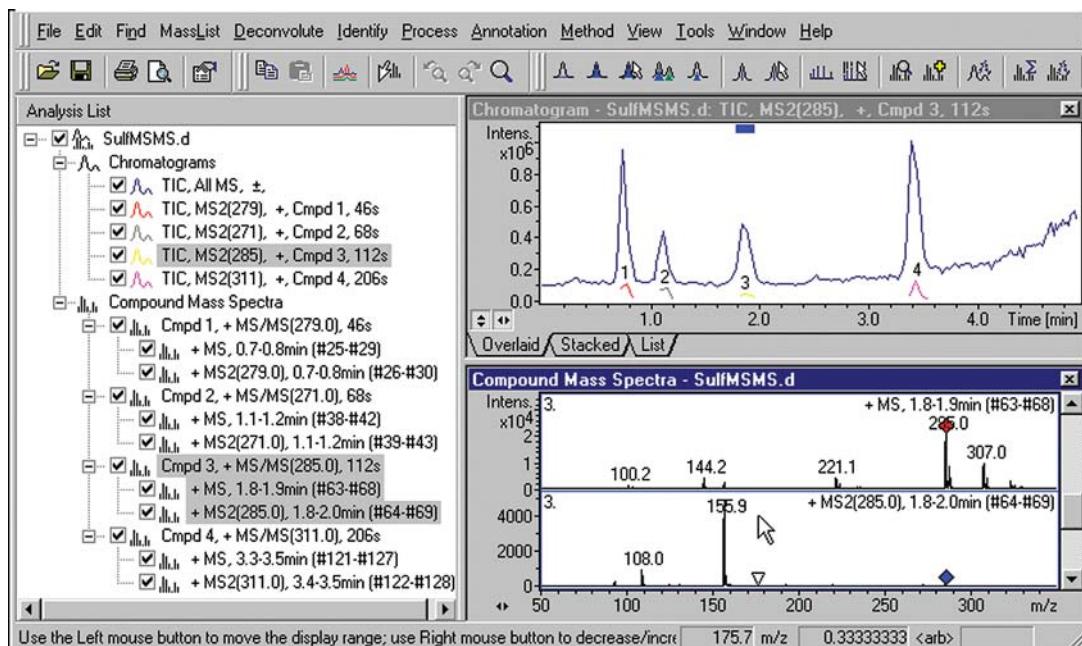
- 确定所有的MSⁿ实验数据
- 生成每个峰和每一个母离子的二级质谱的总离子流图

- 提取，平均和层次管理所有的MS和MSⁿ的质谱图

软件还可以对所有被积分的一级质谱的色谱峰平均谱图或者是进行手动MSⁿ处理。

分析结果可以被浏览，打印和存储以用于存档或者进一步处理。

分层树式结构易于查找您需要的数据

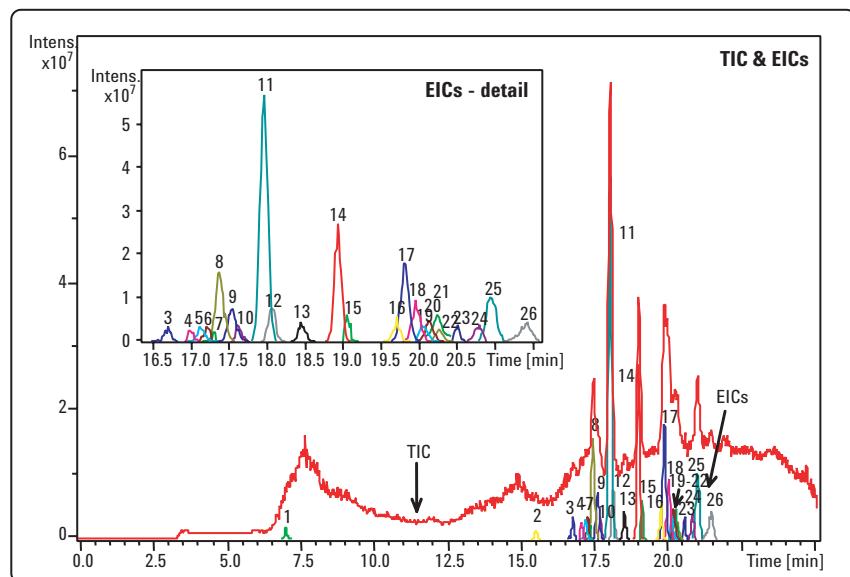


自动化合物识别功能加速分析，提高效率

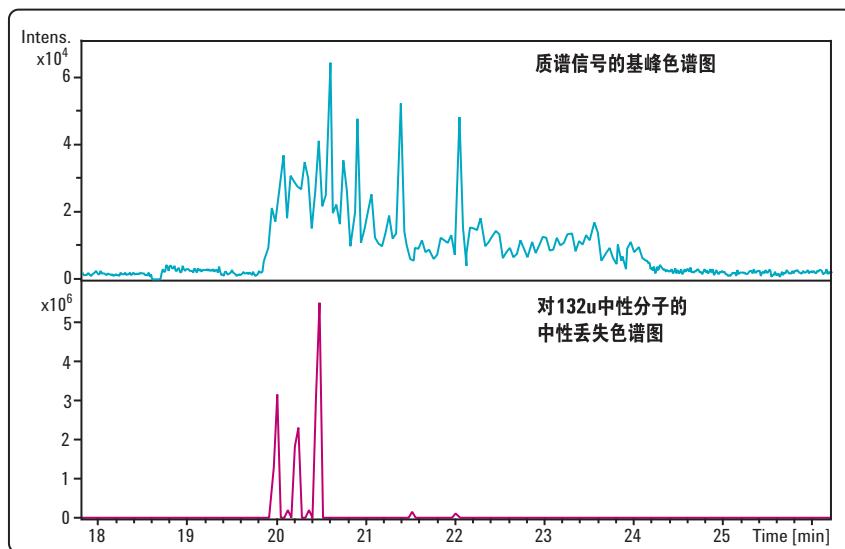
Dissect功能可以在复杂样品谱图中自动鉴定微量组分

对于生物样品的液-质分析中，微量组分是很难被检测的，因为外来干扰带来很高的背景。微量组分提取是个非常耗时的工作，而且常常因为共流出，附加离子和基质干扰使得谱图更加复杂。

Dissect功能可以提取自动复杂样品分析的一级质谱的总离子流图中微量组分。它首先产生每个质量数的提取离子流图，然后根据峰的几何形状，宽度和其它因素，来确认是否是信号峰。它采用模糊逻辑计算和多参数来去除噪音和来自同一化合物的色谱峰。最后，经过Dissect处理之后，可以得到每个化合物的质谱图。



对于老鼠肝脏样品，Dissect软件在一分钟内鉴定出拮抗药的26种代谢物。而用传统的方法需要几个小时。尽管有许多流出峰，再建的谱图还是非常纯



含阿拉伯糖的基团的花青素的MS和中性丢失分析结果

中性丢失分析可以鉴定出多个组分的共有基团

中性丢失分析是鉴别共有基团的有力工具。离子阱质谱的MS/MS分析是一种全扫描分析，它可以在数据分析中将中性丢失基团提取出来。您无需提前预计中性丢失分子。6300系列离子阱质谱软件都可以方便进行中性丢失分析。相关的如碰撞能量扫描可以确保最优化的裂解，以致获得更多的碎片离子。

定量分析软件包实现快速的定量分析

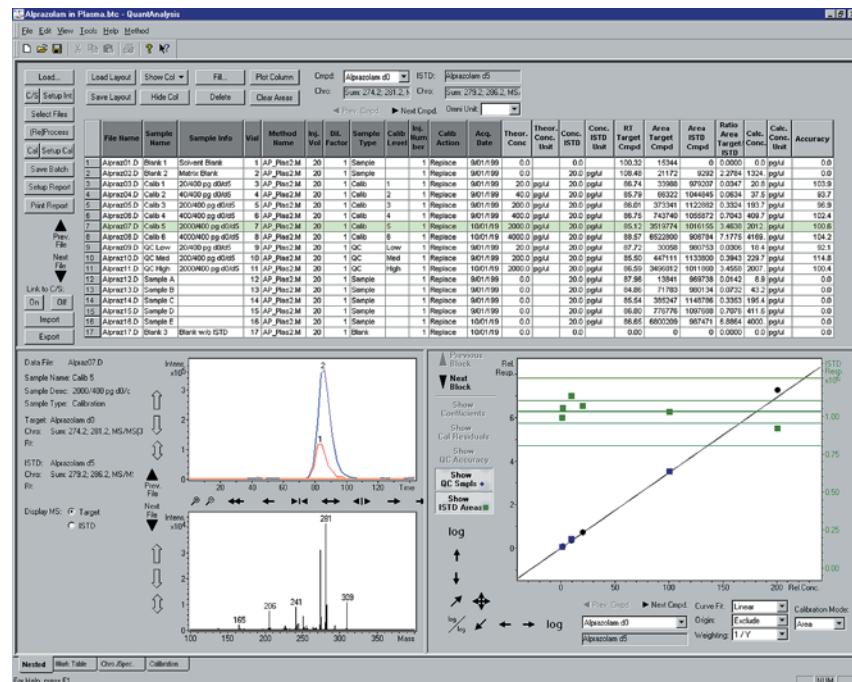
功能强大的定量分析软件包使得定量分析更加快速而方便。软件由三个部分组成 – 工作表，色谱/质谱图和校正曲线，三个部分都在显示在一个窗口中。工作表是一个可以设定定量和浏览分析结果数据表格。您还可以定制只显示必要的数据，而且模版可以储存。所有三个部分都是动态链接的。例如，要是选择新的校正曲线拟合模式，所有的定量将会重新计算。

从每一个样品中提取更多的信息

ACD/SpecManager软件可以帮助您从质谱数据获取更多的信息：

- 组分检测计算法降低随机噪音和背景
- ChemSketch，工业标准软件工具，用于化合物的结构画图
- 质谱图的添加和删减
- 储存已经处理好的色谱图、质谱图和生成报告
- 相关计算工具协助将质谱和化合物结构关联，来进行质谱图的解析
- 可以直接从离子阱质谱软件将数据倒入 ACD/SpecManager

SpecManager软件也可以支持各种技术平台的数据以及多种厂家的仪器数据，多种信号数



工作表（上部）、色谱/质谱图（左下方）和校正曲线（右下方）是动态链接的——即改变一个部分将自动影响其它部分

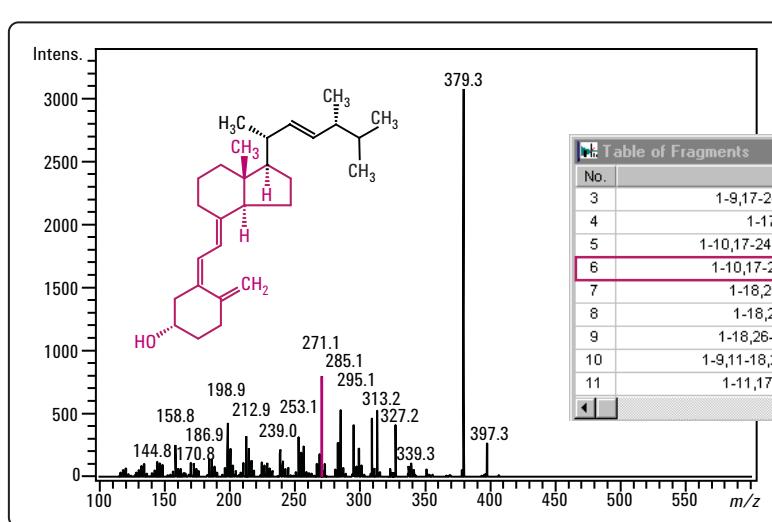
据，如核磁共振、质谱、紫外–可见光和红外光谱数据。

用户定制报告编辑器

用户报告编辑器使您更加方便快速地生成报告，以及按您的需要格式输出。

用户设计的自动化运行程序

Visual Basic Scripting可以为用户提供强大的运行功能。利用VB将数据和报告完全自动化处理。这些Visual Basic Scripting具有广泛质谱特性的优点。



用ACD/SpecManager软件，可以建立化合物结构和您的MS数据相关的数据库。可以对照未知谱图检索这些相关计算表

Spectrum Mill软件高通量处理蛋白质数据

通过数据库检索或是再测序，Spectrum Mill软件帮助您从质谱和MS/MS数据中鉴定蛋白质。

智能化谱图提取加快蛋白质的鉴定

在进行数据库检索之前，Spectrum Mill软件可以先判别数据，去除噪音和质量不好的谱图，因此检索的速度将大大加快。

多种检索选项用于蛋白质的鉴定，从而提高了灵活性

MS/MS检索程序包括用于未修饰肽的鉴别模式和用于修饰的可变模式。肽质量指纹谱(PMF)是从一级质谱图中鉴定蛋白质。

支持电子迁移裂解(ETD)数据

Spectrum Mill软件支持碰撞诱导解离(CID)和电子迁移裂解(ETD)产生的数据。

自动和手动匹配确认以提高可信度

Spectrum Mill快速而自动确认匹配结果。您可以交互式浏览预计的匹配结果，与真正的MS/MS进行比较。非确认的谱图可以用其它参数或数据库进行再检索。

再测序谱图解析(*De Novo*)

再测序计算按得分级数将可能的肽序列排列。它去除不合实际结果和解决了因噪音和不完全裂解带来的复杂而难解析谱图的困难。

提供定量和定性分析的信息

Spectrum Mill可以根据发现蛋白质的相对丰度发现差异。它也可以支持iTRAQ, ICAT和其它的稳定同位素标记技术的实验。

处理复杂数据更加方便

Spectrum Mill可以用通用的方式将分析结果归纳及关联。您可以将来自多个实验的大量数据进行比较，从而归纳出在蛋白质水平上的结果。

可以兼容来自不同厂商系统上的数据

附加模块可以使您处理来自非安捷伦系统上的数据：

- .RAW (热电菲尼根)
- .Wiff (SCIEX LC/MS)
- .pk1 (Waters及其它)

MASCAT简化了Mascot蛋白数据库检索的方式

对于正在使用标准的Mascot数据库检索程序的用户，6300系列离子阱软件含有MASCAT的程序。这个程序将Mascot格式的数据连在一起，这样可以把来自多个二维LC/MS/MS分析的数据结果整合到一个文件进行数据库检索。

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	98.7	4.39e+005	(R)ADPPEHDHTGFLIEyVATR(W)		t:Phosphorylated T y:Phosphorylated Y	584.24	2172.036
2	ETD	25.14	99.5	5.10e+005	(R)LKELFQETAR(F)			450.04	1347.763
3	ETD	23.68	92.6	4.86e+005	(K)SDSKALDLDR(M)			411.98	1232.648
4	CID	21.70	97.0	5.65e+005	(R)DVIVQQLMETDLYK(L)			923.03	1844.899
5	CID	18.94	93.1	1.68e+006	(R)RTEGVVGPGVPGEVEMVKQQPDFVGPR(Y)			899.39	2694.387
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)LKELFQETAR(F)			674.38	1347.763
8	CID	17.13	91.8	7.22e+008	(R)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHVR(K)			870.42	2608.214
9	ETD	16.70	95.2	1.37e+006	(R)LKELFQETAR(F)			674.38	1347.763
10	CID	15.57	91.5	4.86e+005	(K)SDSKALDLDR(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	97.0	3.68e+005	(R)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHVRK(T)			912.49	2736.309
14	CID	14.26	90.8	5.52e+005	(K)SDSKALDLDR(M)			616.84	1232.648

Spectrum Mill软件简化了加快鉴定蛋白质和后转移修饰位点

性能指标

质量精确度（所有型号）

±0.2 u (在全质量范围内, 全扫描模式, 单位质量分辨率的条件下)。

质量轴稳定性（所有型号）

±0.2 u/8小时 (在单位质量分辨率条件下, 室温21°C ± 3°C)。

单一同位素的母离子选择

在全质量范围内, (m/z 50-2200), 可以进行单一同位素的母离子选择, 室温21°C ± 3°C。

扫描范围, 质量分辨率和扫描速度

扫描范围 <i>m/z</i>	6310		6320, 6330和6340	
	分辨率 半峰宽(u)	扫描速度 (u/s)	分辨率 半峰宽(u)	扫描速度 (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

极性切换

可以按每一次扫描进行切换, 大约每秒采集一个正离子和一个负离子谱图。

灵敏度

分析条件

色谱柱: ZORBAX快速分离柱, SB-C18 2.1 x 30 mm, 3.5 um

流动相: 25%的水, 75%甲醇的5 mM甲酸胺

流速: 0.4 ml/min

采集模式: 全扫描MS/MS

MS/MS- 将母离子(m/z 609)产生的两个丰度最高的两个离子加和

子离子扫描范围: m/z 175 – 650

质量范围: 标准范围(m/z 50 – 2200)

分辨率-标准(0.6 u)

	6310	6320	6330	6340
定量 (利血平, 柱上进样量)	5 pg	1 pg	250 fg	250 fg
信噪比 (全扫描 MS/MS)	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1

欲了解更多

请访问:

www.agilent.com/chem.iontrap

购买在线:

www.agilent.com/chem/store

联系安捷伦的客户服务中心:

www.agilent.com/chem/contactus

安捷伦科技有限公司生命科学与化学
分析部客户服务中心免费专线:

800-820-3278

版权所有。未经书面许可, 不得擅自复制, 改编或翻译, 符合版权法者除外。

本材料中的信息、说明和指标, 如有变更, 恕不另行通知。

安捷伦对本材料中的错误或与设备、性能或本品的使用有关的意外伤害或由此造成的损坏不负任何责任。

© 安捷伦科技公司, 2006

2007年3月中国印刷

5989-5824CHCN