

Sistemas LC/MS por Trampa de Iones Agilent Serie 6300

LC/MSⁿ flexible de alto rendimiento



Agilent Technologies

Flexibilidad inigualable en LC/MSⁿ de alto rendimiento

Con sus cuatro niveles de rendimiento, diferentes opciones de ionización, software específico y una amplia variedad de elementos de tecnología LC, los sistemas LC/MS por trampa de iones Agilent Serie 6300 pueden ajustarse a una enorme gama de desafíos en el campo de los análisis. La tecnología de Agilent, mundialmente conocida por su demostrada fiabilidad, garantiza que el usuario conseguirá en todo momento el rendimiento que necesita.

Niveles de rendimiento que se ajustan a sus aplicaciones y a su presupuesto

Tanto si busca proteínas en baja abundancia, metabolitos de fármacos en matrices complejas o residuos de pesticidas en productos alimentarios, disponemos de un sistema LC/MS por trampa de iones Serie 6300 que se ajusta a sus necesidades. Cualquiera de nuestros sistemas por trampa de iones Serie 6300 incluye adquisición de datos de alta velocidad y baja sobrecarga para permitir su total compatibilidad con las soluciones de cromatografía de alta resolución más modernas.

6310 convierte los sistemas de MSⁿ de alto rendimiento en una opción económica

El 6310 es una solución sumamente sensible, flexible y fiable con una estupenda relación calidad-precio. Combina una gran rapidez en el cambio de polaridad con capacidades de adquisición dependiente de datos gracias a lo cual aumenta la cantidad de datos que se pueden adquirir en un solo análisis.

El 6320 ofrece una mayor sensibilidad, resolución de masa y velocidad de barrido

La trampa de iones de alta capacidad del 6320 aumenta la sensibilidad y el rendimiento general. El 6320 puede realizar barridos de hasta 26.000 u/s con una resolución mejor que la unidad y ofrece un modo de barrido especial para péptidos que mejora la identificación de proteínas en baja abundancia.

El 6330 ofrece el nivel de sensibilidad más avanzado para analitos en baja abundancia

Gracias a un nuevo detector de alta eficacia, la trampa de iones del 6330 es la más sensible del mercado para aplicaciones del mundo real. Permite obtener la máxima sensibilidad sin sacrificar la velocidad de barrido ni la resolución que necesitan las trampas de iones bidimensionales.

El 6340 mejora la caracterización de PTM y la identificación de proteínas

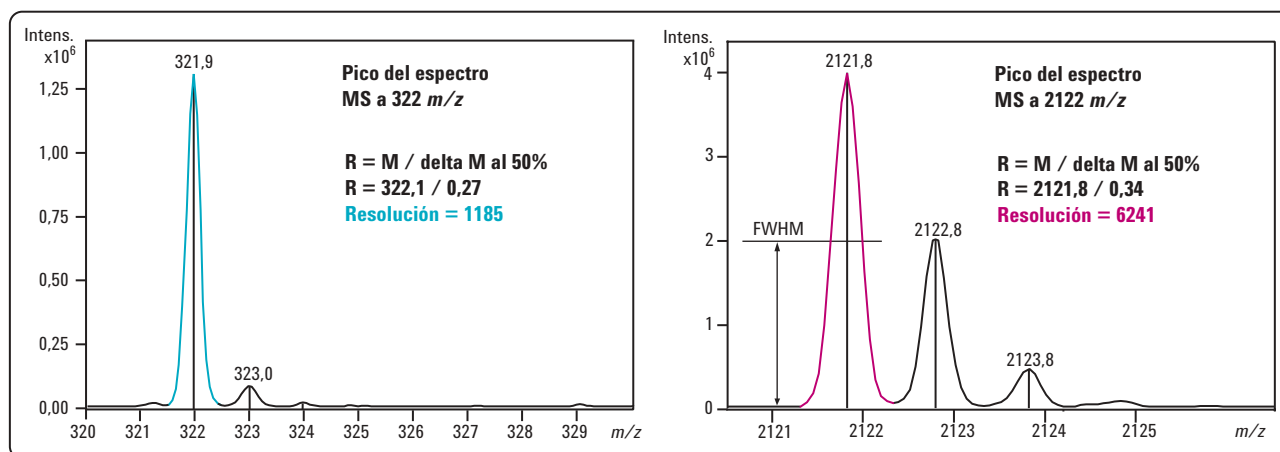
Partiendo del magnífico rendimiento del 6330, el 6340 añade un sistema de disociación por transferencia de electrones (ETD). La ETD es una técnica alternativa de fragmentación que permite obtener una imagen más completa tanto de las secuencias de péptidos como de la localización de las modificaciones químicas.



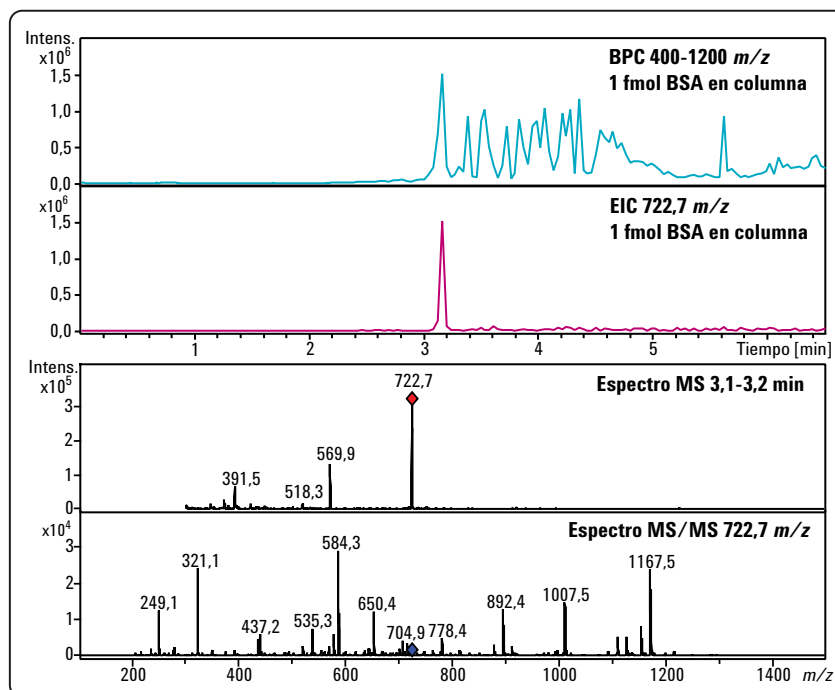
Tecnología de trampa de iones más avanzada para obtener un rendimiento superior

En las trampas de iones, tanto la precisión y resolución de la masa, como la velocidad de barrido dependen en gran medida de la velocidad y sincronización de la expulsión de iones. La trampa de iones tridimensional y multipolar (patentada) que se utiliza en los

aparatos Serie 6300 crea una resonancia no lineal de orden superior. Dicha resonancia no lineal transfiere energía a los iones de forma muy eficaz para que la expulsión de la trampa se realice de forma rápida y precisa. El resultado es una magnífica combinación de rango y resolución de masas y velocidad de barrido. El sistema patentado de bloqueo de fase permite controlar de forma precisa el momento



Con las trampas de iones tridimensionales, no tendrá que sacrificar la velocidad de barrido para obtener una mayor resolución. Este análisis de perfluorofosfocinas, realizado en un rango de masas amplio (200 - 2200 m/z) con una trampa 6320, muestra una excelente resolución a una velocidad de barrido muy rápida (8.100 u/s).



El análisis de 1 femtomol de digesta de albúmina sérica bovina (BSA) en columna usando la trampa 6330 muestra una sensibilidad sorprendente

en que se expulsan los iones, con lo que se consigue una elevada reproducibilidad entre barridos y se aumenta la confianza en los resultados.

Una manera mejor de aumentar la capacidad y sensibilidad de las trampas

La capacidad de la trampa tiene un impacto directo sobre la sensibilidad. Algunos fabricantes han adoptado una geometría bidimensional de trampas de iones como remedio fácil para aumentar la capacidad de la trampa. Sin embargo, las trampas de iones bidimensionales ponen en peligro otros parámetros de funcionamiento importantes, como la velocidad de barrido o la resolución de masa; además, obligan a utilizar dos detectores para obtener una sensibilidad óptima. Los detectores duales pueden reducir la fiabilidad y aumentar los gastos de mantenimiento.

En la Serie 6300, Agilent ha aumentado la capacidad de las trampas de iones tridimensionales ajustando cuidadosamente la geometría y los materiales del aparato, su fabricación y sus parámetros de funcionamiento. El resultado es una alta capacidad con las ventajas inherentes de velocidad de barrido y resolución de las trampas de iones tridimensionales.

La disociación por transferencia de electrones mejora la cobertura de las secuencias de péptidos y la localización de PTM

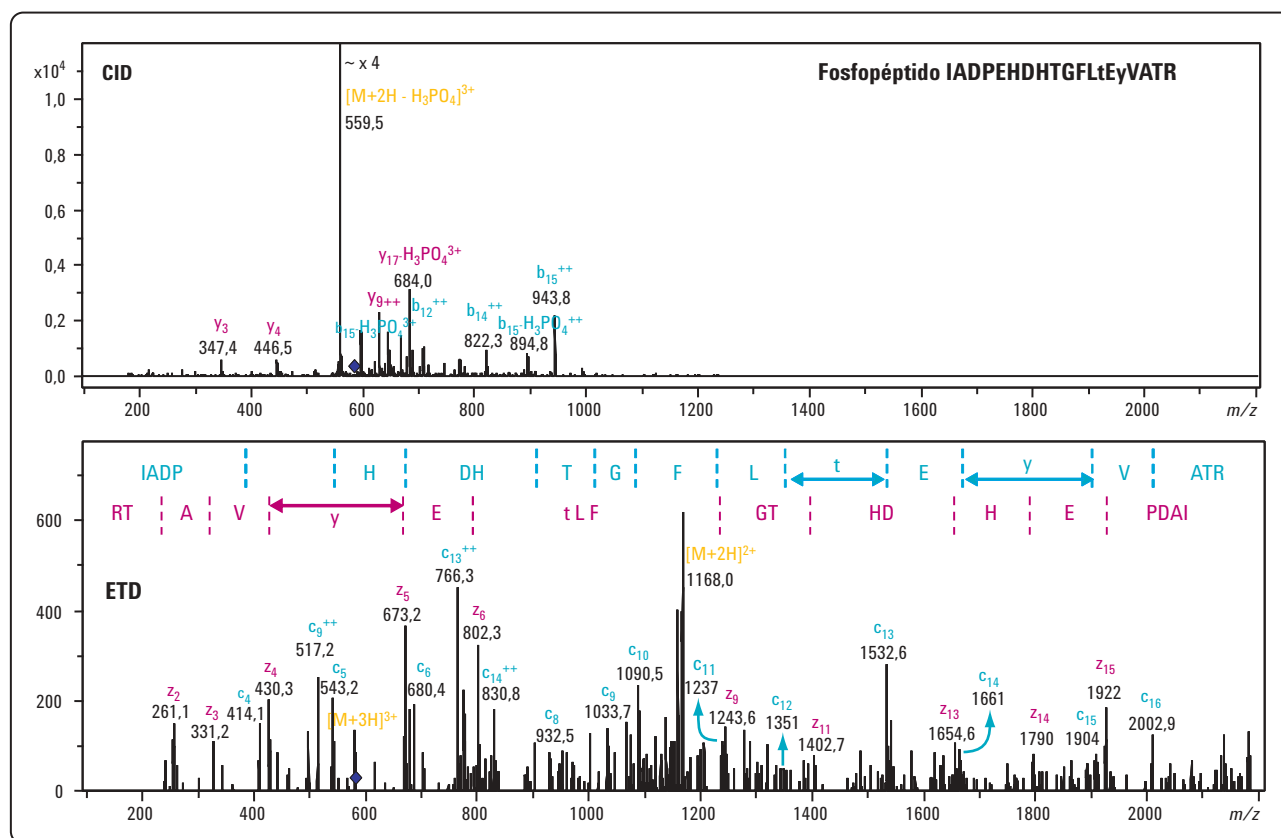
El sistema LC/MS por trampa de iones Agilent Serie 6340 incorpora no sólo fragmentación por CID estándar, sino también una forma alternativa de fragmentación llamada disociación por transferencia de electrones (ETD), que puede mejorar los análisis de proteómica. La ETD produce principalmente iones de serie c y z, y suele ofrecer una fragmentación más uniforme que la CID en los péptidos y, por tanto, también una mayor cobertura de secuencias. Esta mayor cobertura de secuencias, a su vez, mejora la identificación de las proteínas buscando en una base de datos o empezando el secuenciado *desde cero*.

Además, con la ETD, las modificaciones postraduccionales como la fosforilación o la glicosilación suelen quedarse unidas al aminoácido durante la fragmentación. De esta manera, se puede determinar con más facilidad dónde está ubicada la modificación.

El 6340 puede adquirir espectros por CID o ETD, en función de las necesidades de su aplicación. El 6340 puede alternar también entre fragmentación por CID y ETD entre un barrido y otro para obtener una imagen lo más completa posible tanto de la identidad de las proteínas como de la localización precisa de las modificaciones químicas. Asimismo, dispone de un modo especial de adquisición de datos para activar la reacumulación y la ETD al detectar pérdidas de moléculas neutras especificadas por el usuario.

Más alternativas de fragmentación

La disociación de excitación rápida es un nuevo modo de funcionamiento en CID. Elimina el típico "1/3 de corte" asociado a los tradicionales espectros por CID de trampa de iones. De esta manera, pueden aprisionarse iones producto de poca masa necesarios para aplicaciones como el marcado de isótopos iTRAQ. Agilent tiene previsto incluir la disociación de excitación rápida en la Serie 6300 en 2007.



Espectros de MS/MS por CID y ETD de los fosfopéptidos IADPEHDHTGFLtEyVATR procedentes de quinasa humana recombinante regulada por señales extracelulares (ERK1). El espectro por CID muestra una ligera fragmentación, pero el ión dominante proviene de la pérdida de ácido fosfórico. El espectro por ETD muestra una serie c y z casi completa. En el espectro por ETD, la ubicación de las fosforilaciones puede identificarse directamente desde el espectro.

Amplia gama de Fuentes de Ionización: más versatilidad para las trampas de iones

La versatilidad de los sistemas LC/MS por trampa de iones Agilent Serie 6300 es aún mayor gracias a la amplia variedad de fuentes de ionización (todas ellas entre las más destacadas del sector). Cabe destacar las siguientes:

- Electrospray (ESI) de flujos estándar, capilar (microlitros) y nanolitros
- Ionización Química a Presión Atmosférica (APCI)



Fuente Electrospray más fiable gracias a la nebulización ortogonal y al gas de secado de alta capacidad para contraflujo



Fuente MALDI con enfoque dinámico pulsado para mejorar la sensibilidad y uniformidad

- Multimodo con ESI y APCI simultáneas
- Fotoionización a Presión Atmosférica (APPI)
- MALDI a Presión Atmosférica con enfoque dinámico pulsado

Todas las fuentes de LC/MS incorporan la tecnología de nebulización ortogonal patentada por Agilent, que evita la necesidad de realizar ajustes y permite que el capilar y la óptica de iones se mantengan más limpios. Todas las fuentes incorporan, además, un sistema de gas de secado a contraflujo de alta capacidad que mejora la calidad, sensibilidad y reproducibilidad espectral reduciendo los grupos de disolvente y los aductos de la fase móvil. Al actuar de forma conjunta, la nebulización ortogonal y el gas de secado de alta capacidad hacen que las fuentes de iones de Agilent sean altamente tolerantes a componentes no volátiles.



Fuente Multimodo que permite doblar la capacidad de procesamiento

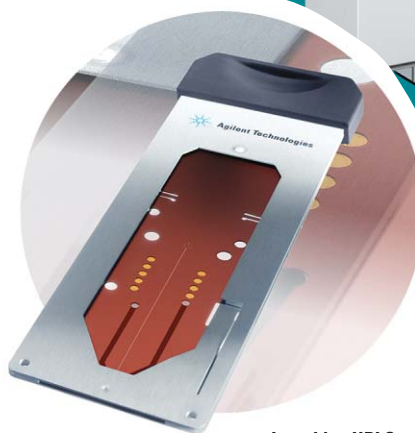
Separaciones de nanoflujo sencillas y reproducibles

La revolucionaria tecnología HPLC-Chips de Agilent integra perfectamente el enriquecimiento de la muestra y las columnas de separación de un sistema LC de nanoflujo con las complejas conexiones y la punta del nebulizador que se utiliza en la espectrometría de masas con electrospray. El resultado es un chip apenas más grande que una lámina de microscopio pero que ofrece una excepcional resolución cromatográfica y mejora la sensibilidad del MS. Los chips HPLC son mucho más fiables y fáciles de usar que las nanocolumnas convencionales. Los chips HPLC están disponibles tanto para aplicaciones de moléculas grandes como de moléculas pequeñas.

La interfaz HPLC-Chip Cube MS incorpora los mecanismos necesarios para el manejo del chip y los elementos de una fuente electrospray. La gestión, colocación y conexiones del chip están completamente automatizadas para alcanzar el máximo rendimiento con el mínimo esfuerzo.



La interfaz HPLC-Chip Cube MS ofrece la máxima sensibilidad y facilidad de uso



Los chips HPLC son muy fáciles de utilizar y ofrecen un excelente rendimiento cromatográfico

Adquisición inteligente de datos que asegura datos de alta calidad

La posibilidad de recopilar varios niveles de datos de MS en un solo análisis es una de las muchas ventajas que ofrecen las trampas de iones. Sin embargo, el reto no es sólo adquirir datos, sino hacerlo de forma inteligente, recopilando los datos mejores y más informativos en cada barrido. El sistema LC/MS por trampa de iones Serie 6300 incluye diversas funciones de adquisición inteligente de datos para optimizar los datos adquiridos de cada muestra.

Adquisición dependiente de datos y totalmente automatizada

Todos los sistemas LC/MS por trampa de iones Serie 6300 pueden realizar hasta 5 etapas (MS⁵) de MS/MS dependiente

de datos y totalmente automatizada. El avanzado software de la Serie 6300 incluye diversas opciones de adquisición dependiente de datos (tanto estática como activa) que le ayudarán a sacar el máximo partido de los datos útiles adquiridos. Para ofrecer

una mayor facilidad de uso, todos los datos de MS/MS adquiridos en un análisis se almacenan en un solo archivo.

Adquisición dependiente de datos Ventaja

Mayor número de precursores*	Aumenta el número de iones precursores únicos de los que se obtienen los datos. Especialmente útil para compuestos coeluyentes.
Exclusión de isótopos	Evita la adquisición de datos MS/MS innecesarios provenientes de isótopos (¹³ C, etc.).
Lista de inclusión de estáticos	Garantiza la adquisición de datos a partir de iones objetivo, incluso si están presentes en baja abundancia.
Lista de exclusión de estáticos	Elimina la adquisición de datos MS/MS procedentes de iones del disolvente y de otros componentes de fondo conocidos.
Lista de estáticos preferidos	Garantiza la adquisición de datos a partir de iones objetivo (en caso de que los haya) y permite la adquisición de datos a partir de otros iones si no hay iones objetivo.
Selección de estado de carga preferido	Garantiza la selección de iones de péptidos con doble carga para obtener datos MS/MS por CID de mayor calidad, o bien iones de péptidos con carga superior al doble para obtener datos MS/MS por ETD de mayor calidad.
Exclusión activa (repetir recuento)	Aumenta la cantidad de datos representativos adquiridos previniendo la adquisición de datos MS/MS del mismo ión más veces de las especificadas por el usuario.
Exclusión activa (exclusión de tiempo)	Elimina los iones que figuren en la lista de exclusión activa tras un periodo de tiempo especificado por el usuario para así garantizar la readquisición de datos si un ión aparece en más de un pico cromatográfico.
Umbral absoluto*	Garantiza que sólo se adquieren datos de iones con un nivel de abundancia especificado por el usuario.
Umbral relativo*	Garantiza que sólo se adquieren datos de iones con un nivel de abundancia especificado por el usuario y relativo al ión más abundante en un barrido MS.
AutoMS dependiente de pérdidas de moléculas neutras ^{3†}	Mejora la identificación de las PTM realizando un MS ³ en los N iones producto más abundantes que muestren el nivel de pérdidas de moléculas neutras de sus precursores especificadas por el usuario.
Pseudo-MS ⁿ dependiente de pérdidas de moléculas neutras [†]	Mejora la identificación de las PTM fragmentando los N iones de producto más abundantes que se correspondan con el nivel de pérdidas de moléculas neutras de sus precursores especificadas por el usuario.
Experimentos de etiquetado de isótopos estables (SILE) [†]	Permite detectar parejas SILE y fragmentarlas en experimentos de cuantificación de proteínas con diferentes estrategias de etiquetado isotópico (ICAT, SILAC, ¹⁶ O/ ¹⁸ O, ICPL y otras).
ETD dependiente de pérdidas de moléculas neutras [‡]	Mejora la capacidad de ubicación de las PTM reaccumulando el precursor y efectuando una fragmentación ETD al detectar el nivel de pérdidas de moléculas neutras especificado por el usuario.

* Puede especificarse por separado para MS >2

† Disponible sólo en los modelos 6330 y 6340

‡ Disponible sólo en el modelo 6340

Modo de máxima resolución: datos únicos y de calidad

Las trampas de iones de la Serie 6300 utilizan criterios de adquisición dependientes de datos, por lo que pueden realizar barridos con la máxima resolución en una reducida ventana de masas en torno a cada ión seleccionado. En consecuencia, se obtiene el mejor resultado posible: datos de altísima calidad –picos resueltos hasta la línea de base– a partir de más iones únicos. Puede utilizar el modo de máxima resolución en análisis de MS y MS/MS.

Modo de exploración de péptidos: mejor identificación de proteínas

En el modo de exploración de péptidos se utiliza una mayor resolución durante la MS¹ para así determinar con mayor precisión los estados de carga +1, +2 y +3 de los iones de péptidos. Además, se utiliza un modo de barrido ultrarápido en MS² y etapas posteriores para reducir los tiempos de ciclo. Como resultado, podrá identificar más proteínas en análisis complejos de digestas de péptidos.

Gran rapidez en el cambio de polaridad para aumentar la capacidad de procesamiento

Al poder recopilar datos complementarios sobre ionización positiva y negativa en un solo análisis, ahorrará tiempo y muestras. Gracias a su rapidez en el cambio de polaridad, la Serie 6300 le permitirá recopilar más barridos en cada pico y mejorar la sensibilidad y la calidad de los datos.

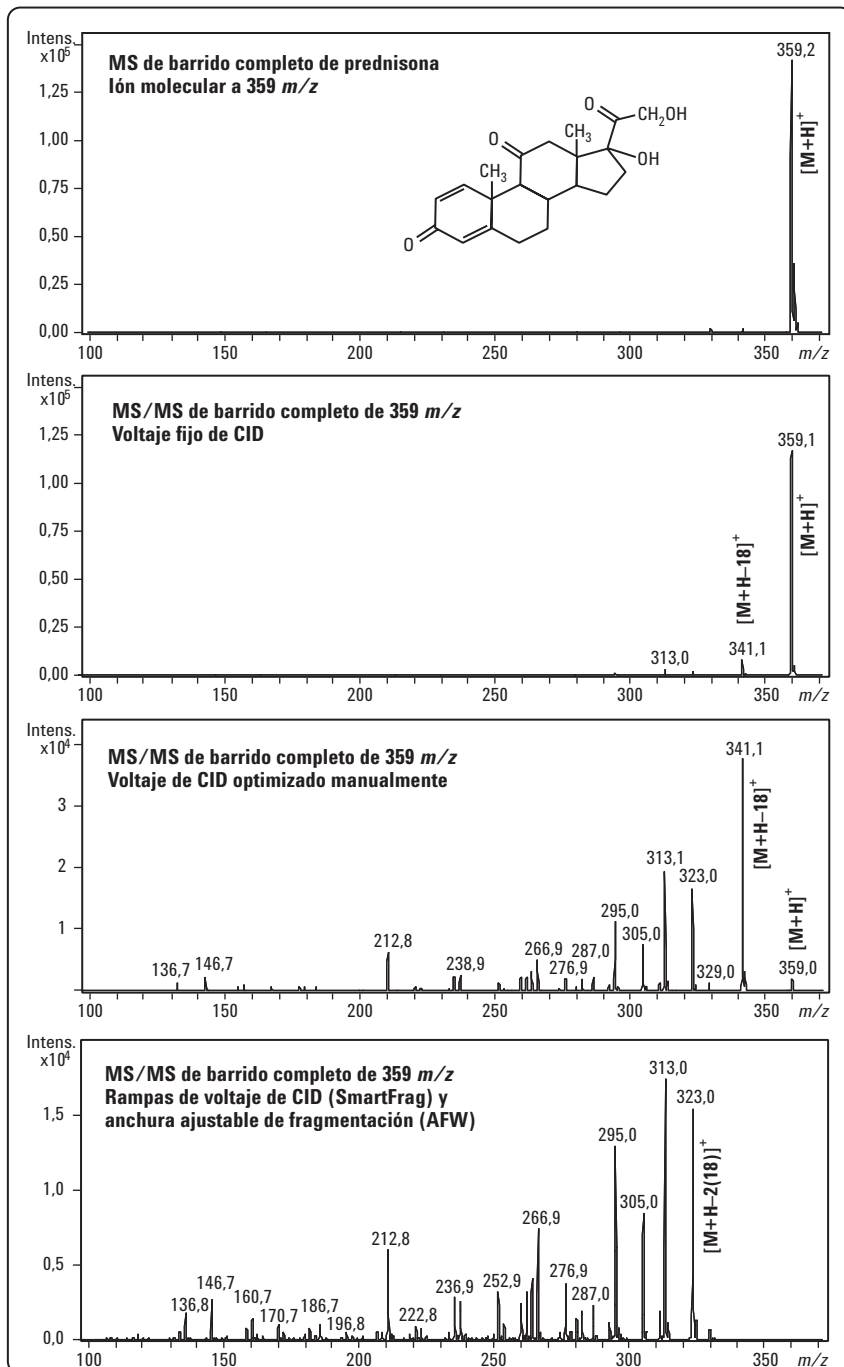
Configuración inteligente de parámetros: resultados de experto para los no expertos

A fin de hacer que el funcionamiento sea más sencillo, el software de trampa de iones incluye un modo “inteligente”. Basándose en datos sencillos (como la masa objetivo, la estabilidad del compuesto y la distribución de iones esperada) y utilizando un mecanismo de retroalimentación que evalúa los datos espectrales en tiempo real, el software puede determinar automáticamente la configuración óptima para la trampa de iones. El usuario seguirá teniendo un control total e independiente de los parámetros de la fuente de iones para conseguir una total compatibilidad con los métodos de LC.

Mejores datos de MS/MS gracias al uso de rampas para energía de colisión

Para conseguir un nivel óptimo de fragmentación por CID, a menudo hace falta cumplir con un tedioso proceso de optimización manual específico para cada muestra. La exclusiva tecnología SmartFrag de rampas para energía de colisión, junto con la anchura de fragmentación ajustable (AFW), garantizan que cada ión precursor reciba exactamente la energía que necesita para optimizar la fragmentación automáticamente. El resultado es una mayor generación de iones producto y más información estructural con menos esfuerzo.

El uso de rampas de voltaje con tecnología CID SmartFrag automatizada y la anchura de fragmentación ajustable (AFW) ofrecen unos espectros de MS/MS más ricos y acaban con la necesidad de perder tiempo optimizando el voltaje de la CID de forma manual.



Herramientas de software con las que sacará el máximo partido a sus datos

Tener un instrumento sensible, de alto rendimiento y que ofrezca resultados reproducibles y datos de alta calidad es necesario pero no suficiente para conseguir sus objetivos analíticos. Para convertir unos buenos datos en información útil hace falta contar con las herramientas de software adecuadas. Agilent ofrece una amplia variedad de potentes herramientas de software para ayudarle a convertir su datos de MSⁿ en respuestas.

Navegación por los resultados simplificada

El análisis de MSⁿ automatizado puede generar una enorme cantidad de datos de MS multigeneracionales. El software de LC/MS de trampa de iones Serie 6300 simplifica este proceso almacenando todos los datos de un análisis en un solo archivo. Gracias a la estructura jerárquica en forma de árbol, la navegación le resultará más fácil y encontrará siempre los datos que necesita. Los filtros especiales le ayudarán a extraer más rápidamente subconjuntos específicos de datos.

Encontrar compuestos automáticamente

Las funciones de búsqueda de compuestos son una potente herramienta para buscar y consultar datos sobre compuestos en experimentos complejos de LC/MSⁿ. Con la función de búsqueda compuestos podrá:

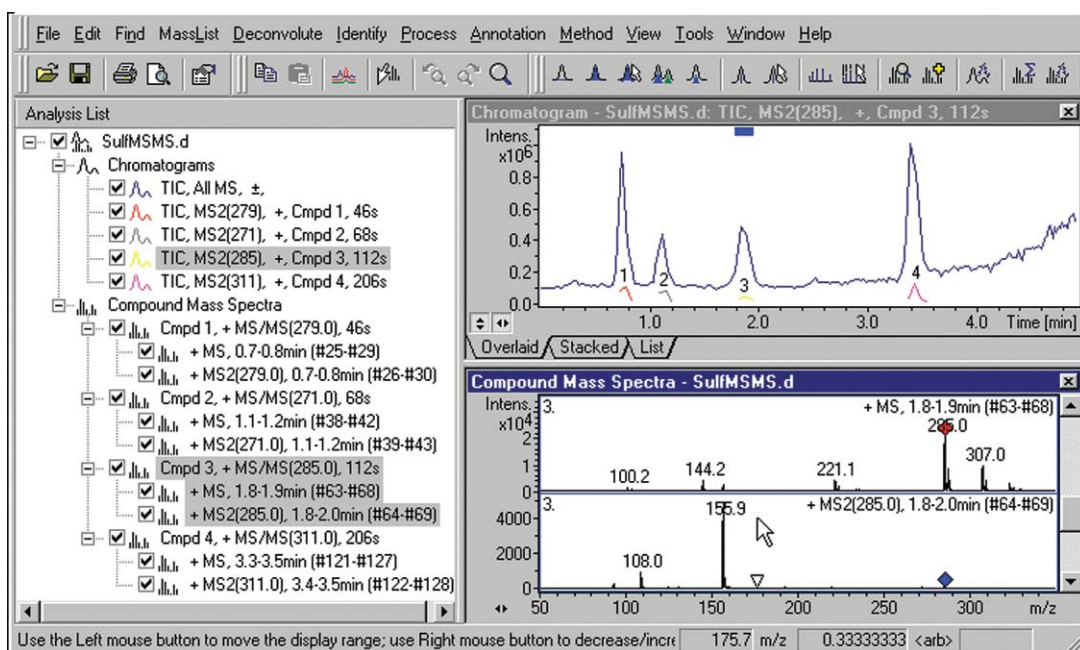
- Encontrar todos los experimentos únicos de MSⁿ
- Generar entradas de compuestos y cromatogramas de iones totales MS² para cada ión precursor único de MS

- Extraer, promediar y organizar jerárquicamente todos los espectros de MS y MSⁿ relacionados por entrada de compuesto

También hay funciones para generar automáticamente espectros de masa promediados para todos los picos cromatográficos integrados en experimentos de MS o MSⁿ manuales.

Además, puede revisar, imprimir y guardar los resultados para archivarlos o procesarlos posteriormente.

La estructura jerárquica en árbol hace que sea más fácil encontrar exactamente los datos que necesita

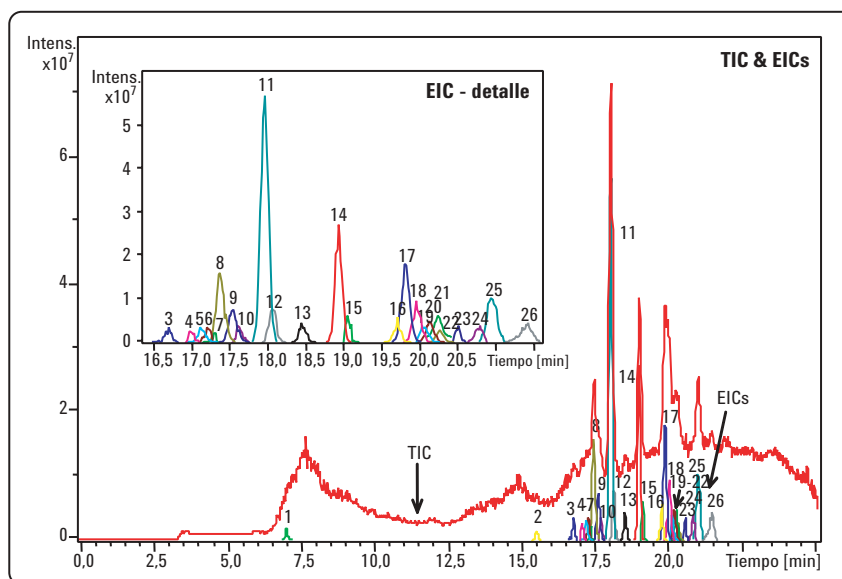


La identificación automática de compuestos acelera los análisis y aumenta la productividad

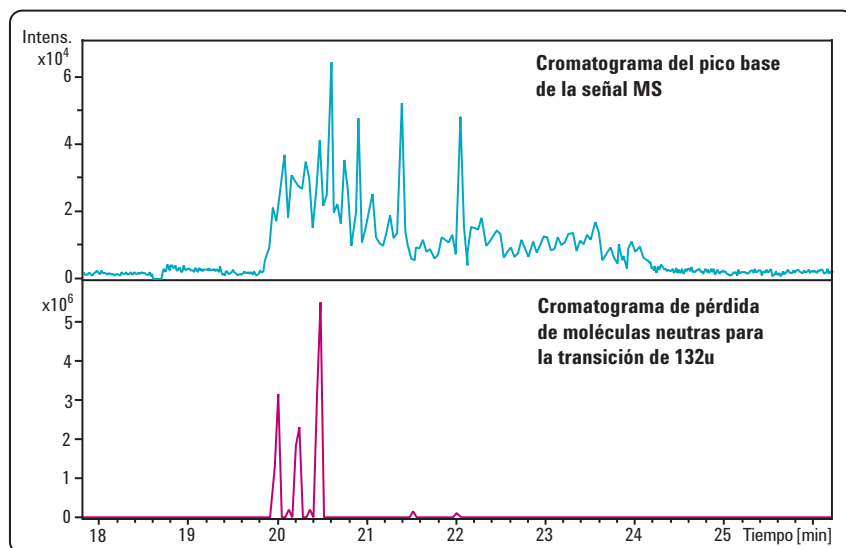
Software Dissect para identificar automáticamente componentes menores en muestras complejas

Si una muestra biológica presenta componentes a nivel de trazas, resulta difícil detectarlos en los cromatogramas de iones totales (TIC) de LC/MS, ya que las interferencias endógenas producen señales de fondo significativas. Para extraer señales a nivel de trazas, suele hacer falta realizar análisis de datos largos y complicados con eluciones que se solapan, formación de aductos e interferencias en las matrices.

El programa Dissect (opcional) localiza automáticamente componentes menores en muestras complejas de datos sólo de MS. Primero genera e integra los cromatogramas de iones extraídos (EIC) de cada masa y luego decide, basándose en factores como la simetría y la amplitud, qué picos cromatográficos son válidos. A continuación, el programa aplica una técnica de lógica difusa y varios criterios para eliminar picos fantasmas de ruido y picos relacionados con el grupo procedentes del mismo compuesto. Por último, el programa Dissect obtiene espectros de masa limpios para cada compuesto.



En el análisis del hígado de una rata, el software Dissect localizó 26 metabolitos de un fármaco antagonista en menos de un minuto. Este resultado supuso una notable mejora al compararlo con una hora de tediosa identificación manual. Aunque había numerosos compuestos coeluyentes, los espectros de masa reconstruidos por el software Dissect resultaron ser relativamente puros.



El barrido completo MS y el subsiguiente análisis de pérdidas de moléculas neutras permiten identificar antocianinas O-glicosiladas con arabinosa

El análisis de pérdidas de moléculas neutras identifica elementos comunes a varios analitos

El análisis de pérdidas de moléculas neutras es una potente herramienta para identificar elementos estructurales comunes a varios analitos. Una ventaja inherente a las MS/MS de trampa de iones es que los datos de barrido completo permiten realizar análisis de pérdidas de moléculas neutras tras la adquisición. No hace falta pronosticar las pérdidas de moléculas neutras con antelación. El software de LC/MS por trampa de iones Serie 6300 incluye herramientas para facilitar los análisis de pérdidas de moléculas neutras. Las funciones relacionadas, como las rampas para energía de colisión, garantizan una fragmentación óptima para que haya suficientes iones producto para analizar.

Cuantificación más rápida y sencilla

El potente software QuantAnalysis facilita y acelera los trabajos de cuantificación. El software consta de tres sencillas vistas (tabla de trabajo, cromatograma/espectro y curva de calibración), que pueden mostrarse en una misma ventana o en fichas. La tabla de trabajo es una única hoja de cálculo donde se configura la cuantificación y se ven los resultados. Puede personalizarse el entorno para que muestre sólo los datos esenciales y luego guardar ese diseño personalizado para utilizarlo en el futuro. Las tres vistas tienen vínculos dinámicos entre sí, de manera que los cambios que realice en una se reflejarán también en las otras. Por ejemplo, al seleccionar un tipo de curva diferente para la curva de calibración, se recalcularán automáticamente las concentraciones.

Extraiga el máximo de información de cada muestra

El software ACD/SpecManager de Advanced Chemistry Development puede ayudarle a extraer el máximo de información de sus datos de MS:

- Algoritmo de detección de componentes para reducir el ruido aleatorio y de fondo
- ChemSketch, herramienta estándar en el sector para dibujar estructuras químicas
- Herramientas que simplifican la suma y resta de espectros
- Herramientas para almacenar cromatogramas y espectros procesados y para generar informes
- Herramientas de correlación que ayudan en la interpretación de MS mediante la correlación de estructuras y espectros MS
- Vínculo directo para transferir espectros de masa más fácilmente desde el software de trampa de iones al ACD/SpecManager

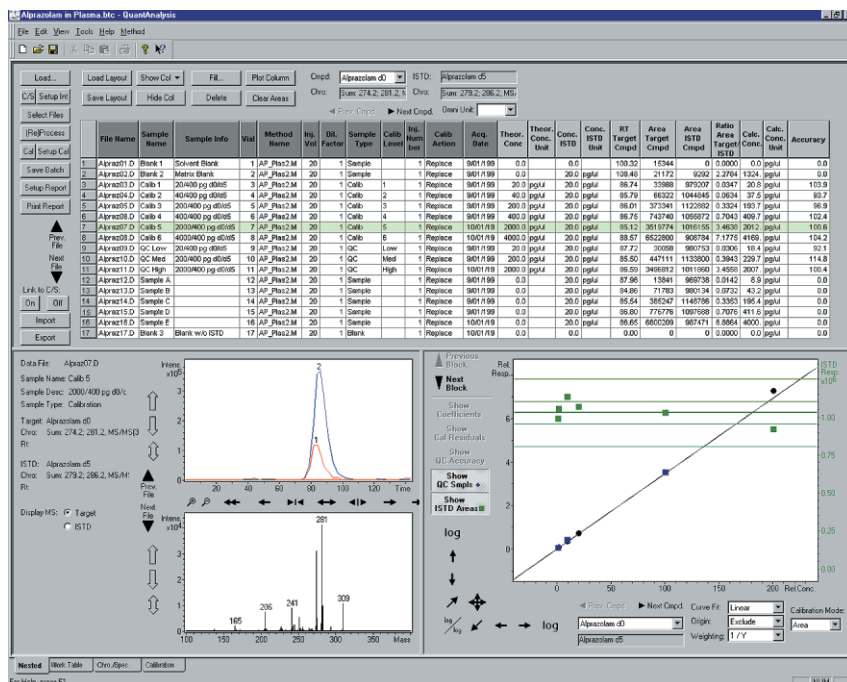


Tabla de trabajo (parte superior), cromatograma/espectro (parte inferior izquierda) y curva de calibración (parte inferior derecha). Las tres vistas están vinculadas dinámicamente (cualquier cambio en una se reflejará automáticamente en las otras).

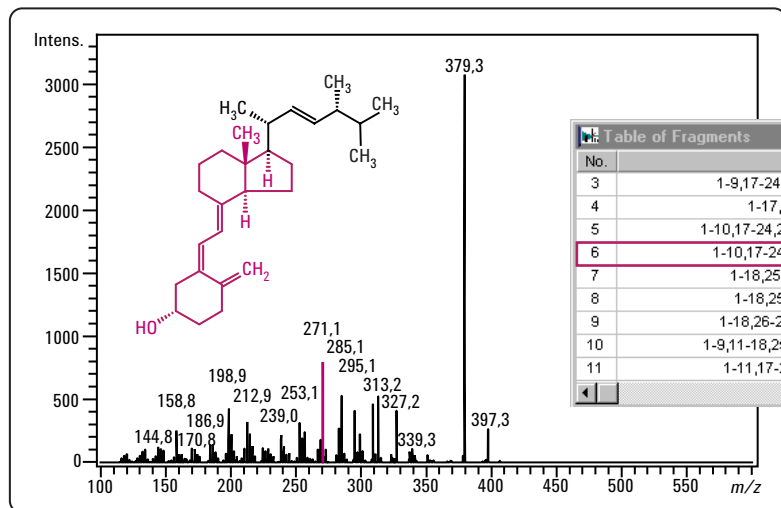
El software SpecManager también es compatible con técnicas cruzadas, con plataformas de otros fabricantes y con integración de datos multiespectral (NMR, MS, UV-Vis e IR).

Editor de informes personalizados

El editor de informes personalizados hace que resulte más rápido y más fácil crear informes exactamente en el formato que el usuario necesita.

Automatización diseñada por el usuario

La programación con Visual Basic abre posibilidades casi ilimitadas para que el usuario diseñe sus propias estrategias de automatización. Puede utilizar sus archivos de comandos personalizados para automatizar el análisis de datos y la generación de informes. Esos archivos le permitirán sacar un gran partido a la amplia variedad de comandos específicos de MS.



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

Con el software ACD/SpecManager, podrá crear bases de datos de correlaciones entre las estructuras y sus datos de MS. También podrá realizar búsquedas en estas tablas de correlación y compararlas con los espectros desconocidos.

Con el software Spectrum Mill, los trabajos proteómicos de gran volumen resultan más fáciles

El software Spectrum Mill le ayuda a identificar proteínas en datos de MS y MS/MS mediante búsquedas en bases de datos o secuenciado *desde cero*.

Extracción espectral inteligente para acelerar la identificación de proteínas

El software Spectrum Mill identifica y excluye los espectros con ruido y de poca calidad antes de realizar búsquedas en bases de datos. De esta manera, la velocidad de la búsqueda se acelera notablemente y se reduce el número de falsos positivos.

Múltiples opciones de búsqueda para la identificación de proteínas que aportan más flexibilidad

El programa de búsqueda de MS/MS incluye un modo de identidad para péptidos no modificados y un modo variable para modificaciones.

El programa de huella de masa de péptidos (PMF) tiene una eficacia impresionante a la hora de identificar proteínas en espectros de MS.

Compatible con datos de ETD

El software Spectrum Mill es compatible tanto con espectros CID estándar como con espectros generados por ETD.

Validación automática y manual de coincidencias: mayor confianza

El software Spectrum Mill valida las coincidencias rápida y automáticamente; además, permite revisar de forma interactiva las coincidencias propuestas y compararlas con los espectros de MS/MS. También permite realizar una nueva búsqueda en los espectros no validados utilizando bases de datos o parámetros alternativos.

Interpretación espectral desde cero

El algoritmo de secuenciado *desde cero* genera una lista con la clasificación de posibles secuencias de péptidos. Descarta las soluciones no realistas y compensa las dificultades espectrales más habituales, como el ruido y la fragmentación incompleta.

Información cuantitativa y cualitativa

El software Spectrum Mill determina automáticamente las diferencias de abundancia relativa en las proteínas detectadas. Además, es compatible con ICAT, iTRAQ y otras tecnologías de etiquetado de isótopos estables.

Los datos complejos ahora son más accesibles

El software Spectrum Mill resume y correlaciona los resultados con métodos mediante los cuales la información resulta accesible hasta para los usuarios de MS menos expertos. Puede comparar grandes

conjuntos de datos procedentes de varios experimentos y resumir los resultados a nivel de proteínas.

Compatibilidad con datos de diferentes fabricantes

Ofrecemos módulos y complementos que permiten utilizar el software Spectrum Mill para procesar datos en formatos diferentes a los de Agilent:

- .RAW (Thermo Finnigan)
- .wiff (SCIEX LC/MS)
- .pkl (Waters y otros)

MASCAT simplifica las búsquedas en bases de datos de proteínas Mascot

Aquellos investigadores que se ocupen del estudio de las proteínas y estén acostumbrados a trabajar de forma estándar con programas de búsqueda en bases de datos Mascot, el software de la Serie 6300 incluye el programa MASCAT. MASCAT concatena archivos de formato genérico de Mascot (*.mgf) y sirve como medio para consolidar resultados procedentes de distintos análisis bidimensionales de LC/MS/MS en una sola búsqueda de proteínas en bases de datos.

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	P27381	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)IADPEHDTGFLIEVATR(V)	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)DVYVQDLMETDLYK(L)		923.03	1844.899	
5	CID	18.94	93.1	1.68e+006	(R)RTGVGPGVPGVEVMVKGQPFQVGR(V)		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)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHR(K)		870.42	2608.214	
9	ETD	16.70	85.2	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)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHR(K)		912.49	2736.309	
14	CID	14.26	90.8	5.52e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		616.84	1232.648	

El software Spectrum Mill simplifica y acelera la identificación de proteínas y la localización de las modificaciones postraduccionales.

Especificaciones

Precisión de masa (todos)

± 0,2 u dentro del rango de masas calibrado estándar con resolución normal y en modo de barrido completo, con calibración adecuada, objetivo ICC y estadísticas sobre iones y equilibrio térmico de la electrónica y de la fuente de iones.

Estabilidad del eje de masas (todos)

± 0,2 u del valor calibrado observado a lo largo de 8 horas en rango de masas estándar y resolución normal en modo de barrido completo, con objetivo ICC y estadísticas sobre iones adecuadas, equilibrio térmico de la electrónica y de la fuente de iones y a temperatura ambiente de 21 °C ± 3 °C (70 °F ± 6 °F).

Selección de precursores monoisotópicos (todos)

La selección de precursores monoisotópicos es posible a lo largo de todo el rango de masas estándar (m/z 50 - 2200) a temperatura ambiente de 21 °C ± 3 °C (70 °F ± 6 °F).

Rango de masas, resolución de masa y velocidad de barrido

Rango de masas m/z	6310		6320, 6330 y 6340	
	Resolución FWHM (u)	Velocidad de barrido (u/s)	Resolución FWHM (u)	Velocidad de barrido (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

Cambio de polaridad

Cambio de polaridad entre barrido y barrido con 1 espectro positivo y 1 espectro negativo en aproximadamente 1 segundo para todos los modelos

Sensibilidad

Condiciones

Columna: resolución rápida ZORBAX SB-C18 2,1 x 30 mm 3,5 micras
Fase móvil: 25% agua 75% metanol 5 mM acetato amónico
Velocidad de flujo: 400 µL/min
Modo: MS/MS con barrido completo
MS/MS: transición del ión molecular protonado (m/z 609) a la suma de los dos iones producto más abundantes
Rango de barrido para el ión producto: m/z 175 - 650
Rango de masas: estándar (m/z 50 - 2200)
Resolución: estándar (0,6 u)

	6310	6320	6330	6340
Cantidad (reserpina - en columna)	5 pg	1 pg	250 fg	250 fg
Relación señal/ruido (MS/MS modo barrido completo)	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1

Para obtener más información

Más información en:

www.agilent.com/chem/iontrap

Comprar en línea:

www.agilent.com/chem/store

Busque un centro de atención al cliente de Agilent en su país:

www.agilent.com/chem/contactus

EE.UU. y Canadá

1-800-227-9770

agilent-inquiries@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

Asia Pacífico

adinquiry_aplsc@agilent.com

Este dispositivo está diseñado únicamente para investigación. No debe utilizarse para diagnósticos.

La información, las descripciones y las especificaciones de esta publicación están sujetas a cambios sin previo aviso.

Agilent Technologies declina cualquier responsabilidad en relación con errores contenidos en este documento o por cualquier tipo de daños indirectos o emergentes derivados del uso, suministro o rendimiento de este material.

© Agilent Technologies, Inc. 2006
Impreso en Holanda 11 de noviembre de 2006
5989-5824ES



Agilent Technologies