

Systèmes CPL/SM à trappe d'ions Agilent série 6300
CPL/SMⁿ souple hautes performances



Agilent Technologies

Souplesse sans précédent de la CPL/SMⁿ hautes performances

Avec quatre niveaux de performances, une large gamme de choix d'ionisation, un logiciel spécifique de l'application et une vaste sélection de technologies de CPL, les systèmes CPL/SM à trappe d'ions Agilent série 6300 s'adaptent à la plupart des types d'analyse. Une technologie éprouvée alliée à la fiabilité légendaire d'Agilent vous garantit à tout moment les performances dont vous avez besoin.

Des niveaux de performances correspondant à vos applications et à votre budget

Que vous recherchiez des protéines de faible abondance, des métabolites de médicaments dans des matrices complexes ou des résidus de pesticides dans des produits alimentaires, il existe un système CPL/SM à trappe d'ions série 6300 adapté à vos attentes. En outre, quelle que soit la trappe d'ions série 6300 que vous choisissiez, elle comprendra une acquisition des données à grande vitesse et à faible coût pour une compatibilité avec la chromatographie moderne haute résolution.

La série 6310 rend la SMⁿ hautes performances économique

La série 6310 est une valeur sûre, dotée de caractéristiques exceptionnelles de sensibilité, de souplesse et de fiabilité. Elle associe un changement de polarité rapide à des capacités d'acquisition dépendantes des données pour augmenter la quantité de données que vous pouvez acquérir en une seule analyse.

La série 6320 offre une sensibilité, une résolution de masse et une vitesse de balayage supérieures

La trappe d'ions grande capacité de la série 6320 augmente la sensibilité et les performances à tous les niveaux. La série 6320 a une vitesse de balayage de 26 000 u/s avec une résolution supérieure à l'unité, et propose un mode " spécial peptides " pour améliorer l'identification des protéines de faible abondance.

La série 6330 offre une sensibilité exceptionnelle aux analytes de faible abondance

Grâce à un nouveau détecteur haute résolution, la trappe 6330 est probablement la trappe d'ions la plus sensible disponible pour les applications réelles. Elle atteint une sensibilité maximale sans altérer la vitesse de balayage ni la résolution comme les trappes d'ions en deux dimensions.

La série 6340 améliore la caractérisation PTM et l'identification des protéines

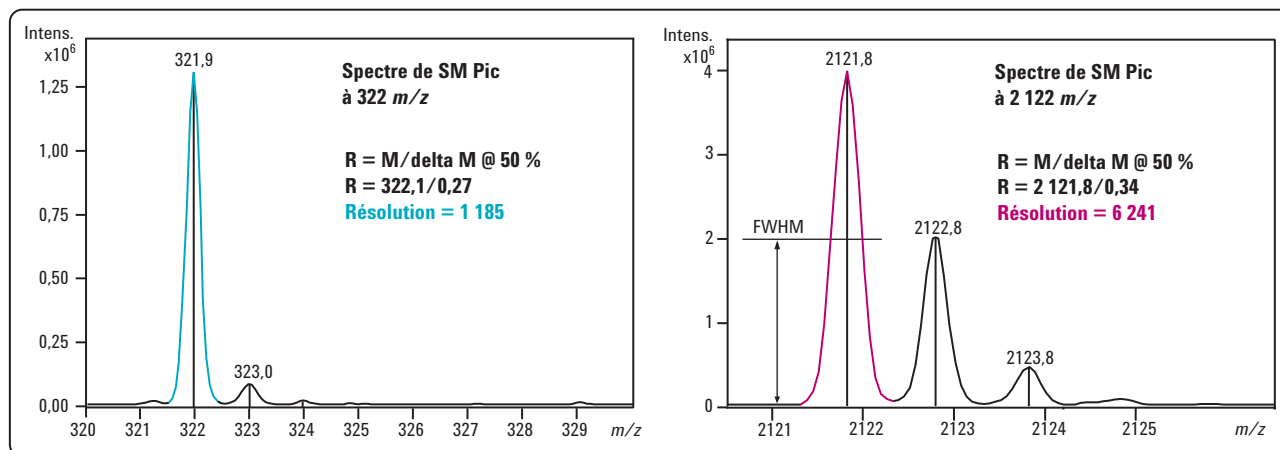
La série 6340 offre les performances exceptionnelles de la série 6330 et permet en outre des dissociations induites par transfert d'électrons (ETD). Les ETD constituent une autre technique de fragmentation fournissant une image plus complète des séquences peptidiques et des emplacements des modifications chimiques.



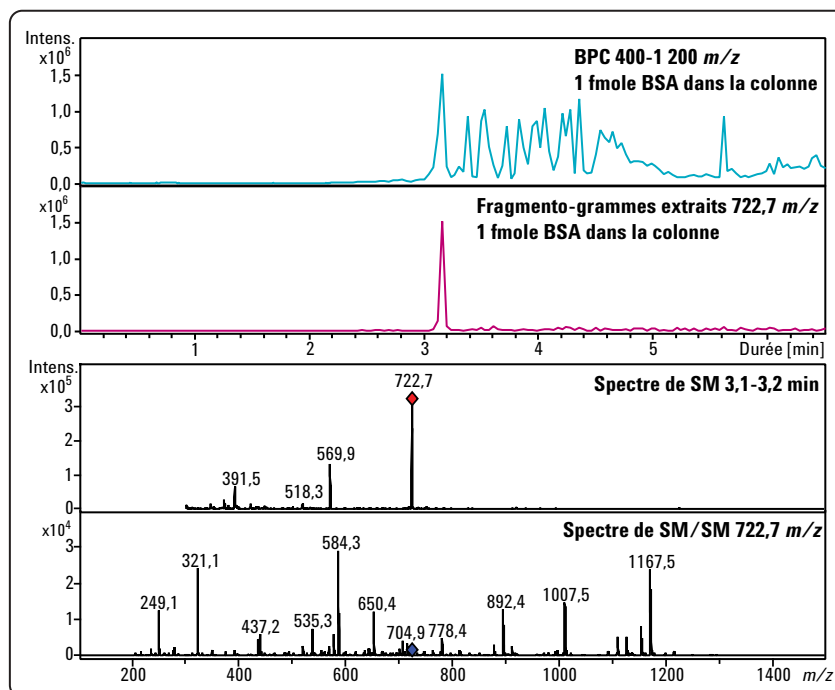
Une technologie de trappe d'ions avancée pour des performances optimales

Dans les trappes d'ions, la précision de masse, la résolution de masse et la vitesse de balayage dépendent considérablement de la vitesse et du débit d'éjection des ions. La trappe d'ions multipolaire tridimensionnelle brevetée utilisée dans la série 6300 crée une résonance non

linéaire supérieure. Cette résonance non linéaire transfère très efficacement de l'énergie aux ions pour une éjection rapide et précise depuis la trappe. Vous obtenez ainsi une association supérieure de gamme de masse, de résolution de masse et de vitesse de balayage. Le verrouillage de phase breveté contrôle avec précision le débit d'éjection des ions, entraînant une reproductibilité élevée entre balayages et augmentant la fiabilité de vos résultats.



Avec les trappes d'ions tridimensionnelles, vous n'avez pas besoin de sacrifier la vitesse de balayage pour la résolution. Cette analyse de perfluorophosphozines sur une large gamme de masse 200 - 2 200 m/z, réalisée avec une trappe 6320, démontre une excellente résolution à une vitesse de balayage de 8 100 u/s.



Une analyse d'une femtomole de digestion de BSA dans une colonne par la trappe 6330 montre une sensibilité exceptionnelle

Une manière plus efficace d'augmenter la capacité et la sensibilité de la trappe

La capacité de la trappe a un impact direct sur la sensibilité. Certains fabricants ont choisi une géométrie de trappe d'ions en deux dimensions comme moyen simple d'augmenter la capacité de la trappe. Toutefois, les trappes d'ions en deux dimensions compromettent d'autres paramètres de fonctionnement importants, tels que la vitesse de balayage et la résolution de masse. Elles nécessitent également deux détecteurs pour une sensibilité optimale. Les détecteurs doubles peuvent diminuer la fiabilité et augmenter les exigences de maintenance.

Agilent a augmenté la capacité des trappes d'ions tridimensionnelles de la série 6300 grâce à un réglage minutieux de la géométrie du dispositif, aux matériaux, à la fabrication de précision et aux paramètres de fonctionnement définis. La capacité obtenue est élevée et offre les avantages de vitesse de balayage et de résolution inhérents aux trappes d'ions tridimensionnelles.

Les dissociations induites par transfert d'électrons améliorent la couverture des séquences peptidiques et l'emplacement des PTM

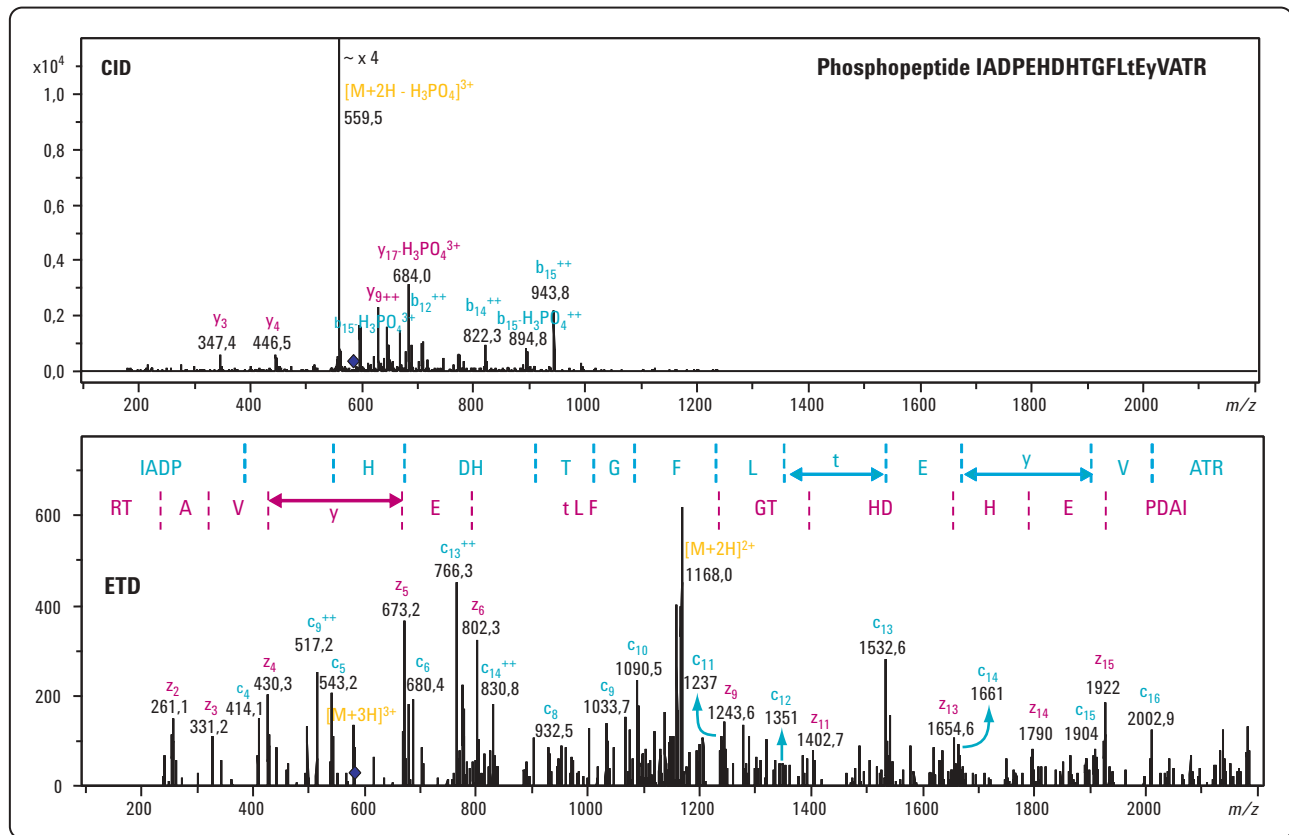
La CPL/SM à trappe d'ions Agilent 6340 propose non seulement la fragmentation CID standard, mais aussi une autre forme de fragmentation appelée "dissociations induites par transfert d'électrons" (ETD), capable d'améliorer les analyses protéomiques. Les ETD produisent essentiellement des ions de séries c et z. Les ETD fournissent généralement une fragmentation plus régulière sur un peptide que la CID, d'où une couverture de séquences supérieure. Cette plus grande couverture de séquences améliore l'identification des protéines par une recherche dans une base de données ou un séquençage *de novo*.

En outre, avec les ETD, les modifications post-traductionnelles, telles que la phosphorylation ou la glycosylation, restent généralement fixées à l'acide aminé durant la fragmentation. Ceci permet de déterminer plus facilement l'emplacement spécifique de la modification.

La série 6340 peut acquérir des spectres CID ou ETD, selon les besoins de votre application. La série 6340 peut également passer d'une fragmentation CID à une fragmentation ETD d'un balayage à un autre, pour l'image la plus complète possible de l'identité des protéines et des emplacements précis des modifications chimiques. Un mode spécial d'acquisition dépendant des données est disponible pour déclencher une nouvelle accumulation et des ETD en cas de pertes de neutres spécifiées par l'utilisateur.

Davantage de solutions de fragmentation

La dissociation par excitation rapide est un nouveau mode de fonctionnement CID. Il élimine la "coupure 1/3" associée aux spectres CID traditionnels de trappe d'ions. Ceci permet de piéger les ions de produit de masse faible nécessaires pour les applications telles que l'étiquetage d'isotopes iTRAQ. Agilent prévoit d'introduire la dissociation par excitation rapide dans la série 6300 en 2007.



Spectres CID et ETD SM/SM du phosphopeptide IADPEHDHTGFLtEyVATR de la protéine ERK humaine recombinante (ERK 1). Le spectre CID montre une certaine fragmentation, mais l'ion dominant provient de la perte d'acide phosphorique. Le spectre ETD montre des séries c et z presque complètes. Dans le spectre ETD, les emplacements des phosphorylations peuvent être identifiés directement à partir du spectre.

Les choix de sources d'ions augmentent la polyvalence de la trappe d'ions

La polyvalence des systèmes de CPL/SM à trappe d'ions Agilent série 6300 est améliorée par le grand choix possible parmi les meilleures sources d'ions du secteur. Voici les sources disponibles :

- L'ionisation par électronébulisation (ESI) à nanodébit et débit capillaire (microlitre) standard
- L'ionisation chimique à pression atmosphérique (APCI)



Source d'ionisation électrospray fiable avec nébulisation orthogonale et gaz de dessiccation à contre-courant haute capacité



Source MALDI avec focalisation dynamique pulsée pour une sensibilité et une cohérence améliorées

- Le multimode avec ESI et APCI simultanées
- La photo-ionisation à pression atmosphérique (APPI)
- MALDI à pression atmosphérique avec focalisation dynamique pulsée

Toutes les sources CPL/SM comprennent la technologie de nébulisation orthogonale brevetée Agilent qui élimine les réglages et favorise la propreté du capillaire et de l'optique ionique. Toutes les sources comprennent également un système à gaz de dessiccation à contre-courant haute capacité qui améliore la sensibilité, la reproductibilité et la qualité du spectre, en réduisant les agrégats de solvant et les ions adduits de phase mobile. La nébulisation orthogonale et le gaz de dessiccation haute capacité apportent aux sources d'ions Agilent une haute tolérance aux composants non volatils.



Une source multimodale peut doubler le débit

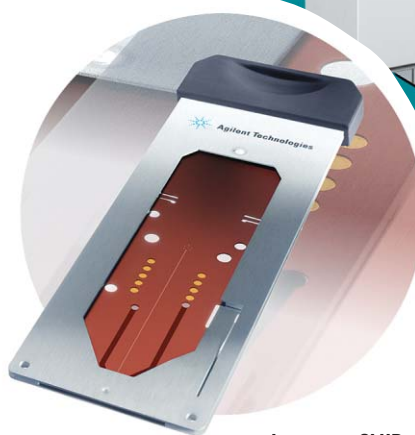
Séparations à nanodébit faciles et reproductibles

Les puces-CLHP révolutionnaires d'Agilent intègrent de manière homogène l'enrichissement des échantillons et les colonnes de séparation d'un système CPL à nanodébit avec les raccords complexes et le nébuliseur utilisés en spectrométrie de masse à électro-nébulisation. La puce obtenue est légèrement plus grande qu'une lame porte-objet de microscope, qui fournit une résolution chromatographique exceptionnelle et améliore la sensibilité SM. Les puces-CLHP sont beaucoup plus fiables et faciles à utiliser que les nanocolonnes classiques. Les puces-CLHP sont disponibles pour les applications à grandes et petites molécules.

L'interface puce-CLHP Cube MS comprend des mécanismes de manipulation des puces et les éléments d'une source d'ions à électro-nébulisation. Elle automatise complètement la manipulation, le positionnement et les raccordements des puces pour garantir des performances maximales avec un effort minimal.



L'interface puce-CLHP Cube MS augmente la sensibilité et la commodité



Les puces-CLHP fournissent des performances chromatographiques exceptionnelles et sont faciles à utiliser

L'acquisition intelligente des données garantit leur qualité

La capacité de rassembler plusieurs niveaux de données SM dans une seule analyse est l'un des nombreux avantages d'une trappe d'ions. Cependant, le défi ne consiste pas simplement à acquérir des données, mais également à le faire intelligemment, en acquérant les meilleures de chaque balayage, celles qui sont les plus instructives. Les systèmes de CPL/SM à trappe d'ions série 6300 offrent un grand choix de fonctionnalités d'acquisition de données intelligentes pour optimiser les données recueillies à partir de chaque échantillon.

Acquisition dépendante des données, entièrement automatisée

Tous les instruments de CPL/SM à trappe d'ions série 6300 peuvent effectuer jusqu'à 5 étapes (SM⁵) de SM/SM dépendante

des données, entièrement automatisée. Le logiciel sophistiqué de la série 6300 comprend un grand choix de fonctionnalités d'acquisition dépendantes des données statiques et actives qui vous aident à augmenter la quantité de données utiles acquises.

Pour plus de simplicité et de commodité, toutes les données SM/SM acquises à partir d'une analyse sont stockées dans un seul fichier.

Fonctionnalité dépendante des données **Avantage**

Les N précurseurs les plus abondants*	Augmente le nombre d'ions précurseurs uniques à partir desquels les données sont acquises. Particulièrement utile pour les composés coéluant.
Exclusion isotopique	Évite l'acquisition de données SM/SM inutiles à partir des isotopes (¹³ C, etc.)
Liste d'inclusion statique	Garantit que les données sont acquises à partir des ions cibles, même s'ils sont peu abondants
Liste d'exclusion statique	Élimine l'acquisition de données SM/SM à partir d'ions de solvant et d'autres composants de bruit de fond connus
Liste préférentielle statique	Garantit que les données sont acquises à partir des ions cibles, s'ils sont présents, mais permet l'acquisition de données à partir d'autres ions en l'absence d'ions cibles
Sélection d'état de charge préférentielle	Garantit une sélection des ions peptidiques doublement chargés pour des données CID SM/SM de meilleure qualité ou des ions peptidiques de charge supérieure pour des données ETD SM/SM de meilleure qualité
Exclusion active - calcul répété	Augmente la quantité de données uniques acquises en empêchant l'acquisition de données SM/SM à partir du même ion plus du nombre de fois spécifié par l'utilisateur
Exclusion active - temps d'exclusion	Supprime des ions de la liste d'exclusion active après un délai spécifié par l'utilisateur pour garantir une nouvelle acquisition si un ion apparaît dans plusieurs pics chromatographiques
Seuil - absolu*	Garantit que les données sont acquises uniquement à partir d'ions d'abondance spécifiée par l'utilisateur
Seuil - relatif*	Garantit que les données sont acquises uniquement à partir d'ions d'abondance spécifiée par l'utilisateur par rapport à l'ion le plus abondant dans un balayage SM
AutoMS ³ dépendant des pertes de neutres [†]	Améliore l'identification des PTM en effectuant une SM ³ sur les N ions de produit les plus abondants montrant les pertes de neutres spécifiées par l'utilisateur à partir de leurs précurseurs
Pseudo-MS ^N dépendant des pertes de neutres [†]	Améliore l'identification des PTM en fragmentant les N ions de produit les plus abondants correspondant aux pertes de neutres spécifiées par l'utilisateur à partir de leurs précurseurs
Expériences d'étiquetage d'isotopes (SILE) [†]	Fournit une détection et une fragmentation de paires SILE dans des expériences de stables quantification de protéines impliquant des stratégies ICAT, SILAC, ¹⁶ O/ ¹⁸ O, ICPL et d'autres stratégies d'étiquetage isotopique
ETD dépendante des pertes de neutres [‡]	Améliore la détermination de site des PTM en accumulant de nouveau le précurseur et en effectuant une fragmentation ETD lorsque des pertes de neutres spécifiées par l'utilisateur sont détectées

* Peut être définie séparément pour une SM >2

† Disponible uniquement avec les modèles 6330 et 6340

‡ Disponible uniquement avec le modèle 6340

Mode de résolution maximale pour des données uniques de qualité

Utilisant des critères d'acquisition dépendants des données, les trappes d'ions série 6300 peuvent effectuer un balayage de résolution maximale sur une fenêtre de masse étroite autour de chaque ion sélectionné. Les avantages sont nombreux : données de très haute qualité - les pics ont souvent une résolution correspondant à la ligne de base - à partir d'ions uniques

plus nombreux. Vous pouvez utiliser le mode de résolution maximale pour les analyses SM et SM/SM.

Mode " spécial peptides " pour une meilleure identification des protéines

Le mode " spécial peptides " utilise le mode de balayage amélioré de résolution supérieure durant la SM¹ pour une détermination plus précise des états de charge +1, +2 et +3 des ions peptidiques. Il utilise le mode de

balayage ultra-rapide en SM² et au-delà pour raccourcir les temps de cycle. Au final, vous identifiez plus de protéines dans des digestions protéiques complexes.

Changement de polarité rapide pour un débit accru

La capacité de rassembler des données d'ionisation positives et négatives complémentaires dans une seule analyse vous fait économiser un temps précieux et des échantillons. Le changement de polarité rapide de la série 6300 vous permet de rassembler plus de balayages sur un pic, pour une meilleure qualité et une plus grande sensibilité des données.

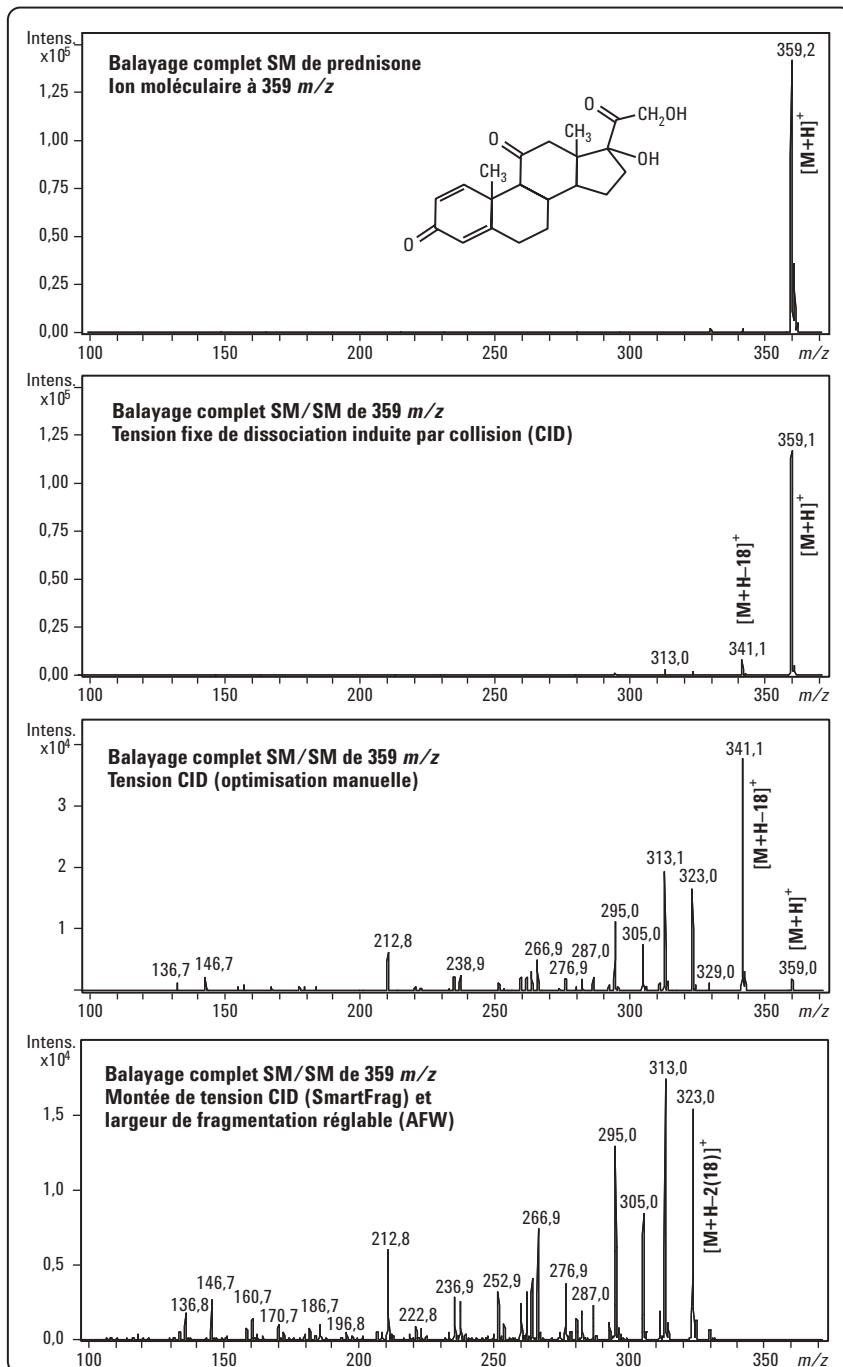
Des paramètres intelligents fournissent des résultats précis pour des non-spécialistes

Pour simplifier le fonctionnement, le logiciel de la trappe d'ions comprend un mode " intelligent ". À partir d'informations simples telles que la masse cible, la stabilité des composés et la distribution des ions prévue, et en utilisant une boucle de rétroaction d'évaluation de données spectrales en temps réel, le logiciel peut déterminer automatiquement les paramètres optimaux de la trappe d'ions. Vous avez toujours un contrôle indépendant total sur les paramètres de sources d'ions pour une compatibilité complète avec les méthodes de CPL.

De meilleures données SM/SM grâce à la montée d'énergie de collision

L'obtention d'une fragmentation CID optimale passe généralement par une optimisation manuelle fastidieuse propre à l'échantillon. La montée d'énergie de collision unique SmartFrag et la largeur de fragmentation réglable (AFW) garantissent que chaque ion précurseur reçoit exactement l'énergie dont il a besoin pour une fragmentation optimale - et de manière automatique. Ce processus génère un plus grand nombre d'ions de produit et plus d'informations structurales avec moins d'efforts.

La montée de tension CID SmartFrag automatisée et la largeur de fragmentation réglable (AFW) fournissent des spectres SM/SM plus riches et éliminent le besoin d'optimisation manuelle de la tension CID, consommatrice de temps



Les outils logiciels tirent le meilleur parti de vos données

Des performances d'instrument sensibles et reproductibles et des données de haute qualité sont nécessaires, mais pas suffisantes, pour atteindre vos objectifs d'analyse. Il faut utiliser les bons outils logiciels pour transformer des données de qualité en informations exploitables. Agilent offre un grand choix d'utilitaires puissants pour vous aider à transformer vos données SMⁿ en réponses.

Navigation simplifiée dans les résultats

Les analyses SMⁿ automatisées peuvent générer de très grandes quantités de données SM multigénérationnelles. Le logiciel de CPL/SM à trappe d'ions série 6300 simplifie ce processus en stockant toutes les données d'une analyse dans un fichier unique. Une arborescence familière contribue à une navigation simplifiée et au repérage précis des données dont vous avez besoin. Des filtres spéciaux vous aident à extraire rapidement des sous-ensembles spécifiques de données.

Recherche automatique de composés

Les fonctions Find Compounds (Trouver les composés) fournissent de puissants outils d'extraction et de navigation des données basées sur les composés, pour les expériences de CPL/SMⁿ complexes. Les fonctions Find Compounds (Trouver les composés) permettront de

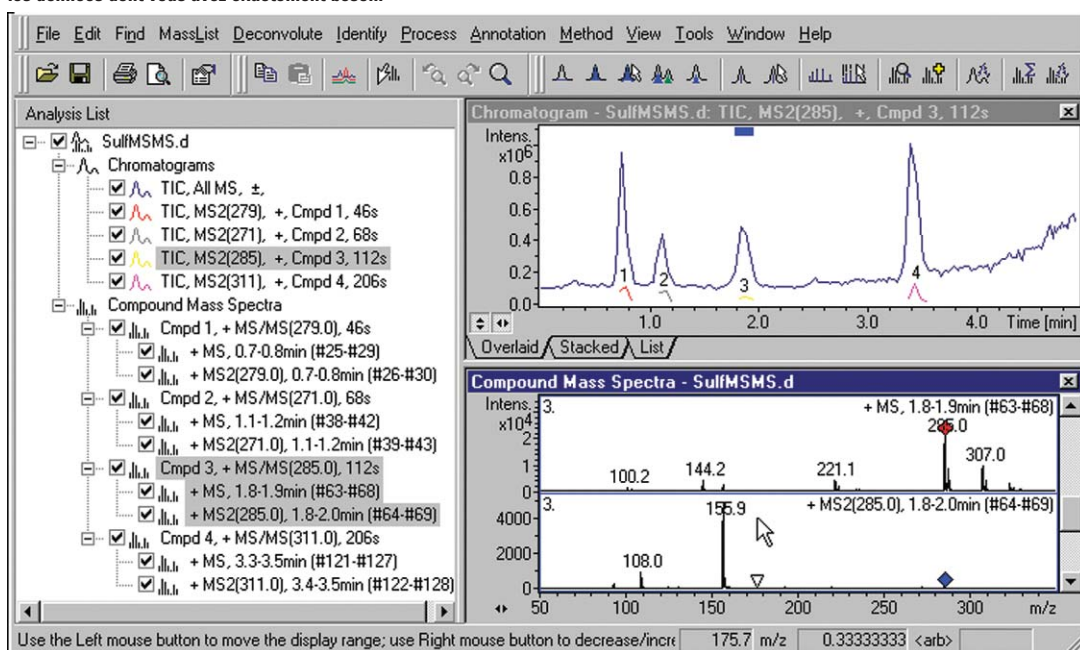
- Repérer toutes les expériences SMⁿ uniques
- Générer des entrées de composés et des chromatogrammes d'ions totaux SM² pour chaque ion précurseur SM unique

- Extraire et organiser hiérarchiquement tous les spectres SM et SMⁿ associés par entrée de composé, et en faire la moyenne

Des fonctions sont également disponibles pour générer automatiquement une moyenne de spectres de masse pour tous les pics chromatographiques intégrés dans des expériences SM uniquement ou SMⁿ manuelles.

Les résultats peuvent être évalués, imprimés et enregistrés pour un archivage ou un nouveau traitement.

Une arborescence vous permet de trouver facilement les données dont vous avez exactement besoin

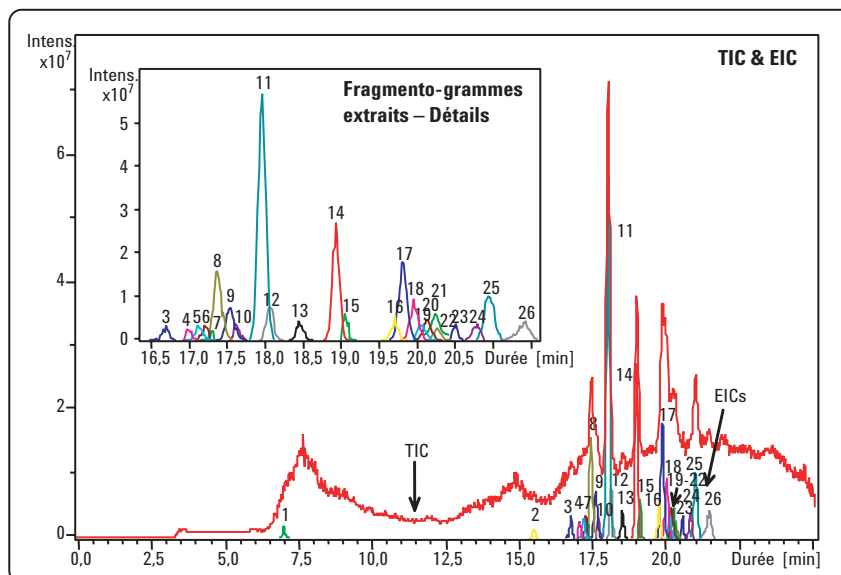


Une identification automatisée des composés accélère les analyses et accroît la productivité

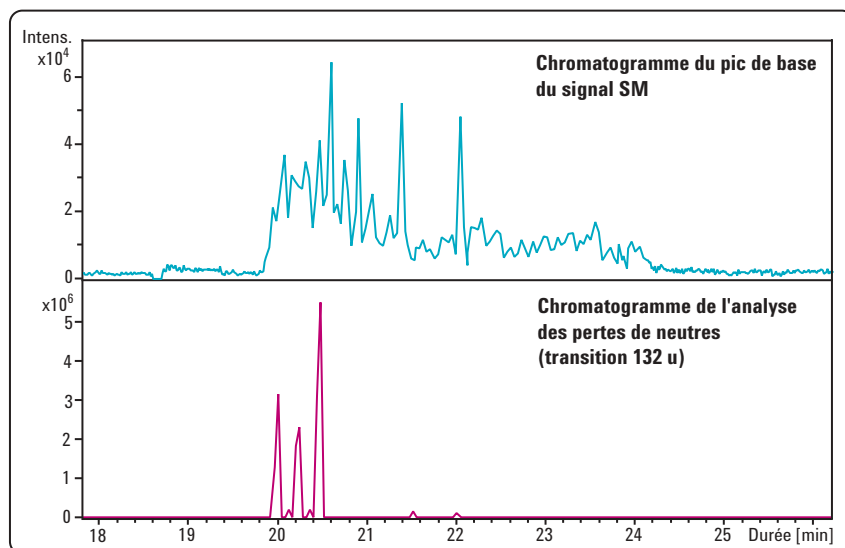
Le programme Dissect automatise l'identification des composants mineurs dans des échantillons complexes

Les composants à l'état de traces dans les échantillons biologiques sont difficiles à détecter dans les chromatogrammes d'ions totaux (TIC) de CPL/SM car des interférences endogènes produisent d'importants bruits de fond. L'extraction de signaux à l'état de traces requiert souvent une analyse de données consommatrice de temps, et est compliquée par les éluions successives, la formation d'ions adduits et les interférences de matrice.

Le programme Dissect facultatif automatise le repérage de composants mineurs dans des données complexes SM uniquement. Il génère d'abord et intègre des fragmentogrammes extraits (EIC) pour chaque masse, et décide - selon la symétrie, la largeur et d'autres facteurs - quels sont les pics chromatographiques valides. Le programme applique ensuite une logique floue et plusieurs critères pour éliminer les pointes de bruit et les pics associés au groupe provenant du même composé. Enfin, le programme Dissect obtient des spectres de masse propres pour chaque composé.



Lors de l'analyse d'un foie de rat, le logiciel Dissect a repéré 26 métabolites d'un médicament antagoniste en moins d'une minute. Les résultats soutiennent la comparaison avec ceux obtenus en une heure d'identification manuelle fastidieuse. Bien qu'il y ait eu de nombreux composés coéluants, les spectres de masse reconstruits par le logiciel Dissect étaient relativement purs.



La SM à balayage complet et l'analyse des pertes de neutres postérieure identifient les anthocyanines O-glycosylées avec de l'arabinose

L'analyse des pertes de neutres identifie les éléments communs de plusieurs analytes

L'analyse des pertes de neutres est un outil puissant d'identification des éléments structuraux communs de plusieurs analytes. Les données de balayage complet constituent un avantage propre à la SM/SM à trappe d'ions. Elles vous permettent d'effectuer une analyse des pertes de neutres après acquisition. Vous n'avez pas besoin de prévoir les pertes de neutres. Le logiciel de CPL/SM à trappe d'ions série 6300 comprend des outils visant à faciliter l'analyse des pertes de neutres. Des fonctionnalités associées, telles que la montée d'énergie de collision, garantissent une fragmentation optimale de sorte à obtenir de nombreux ions de produit à analyser.

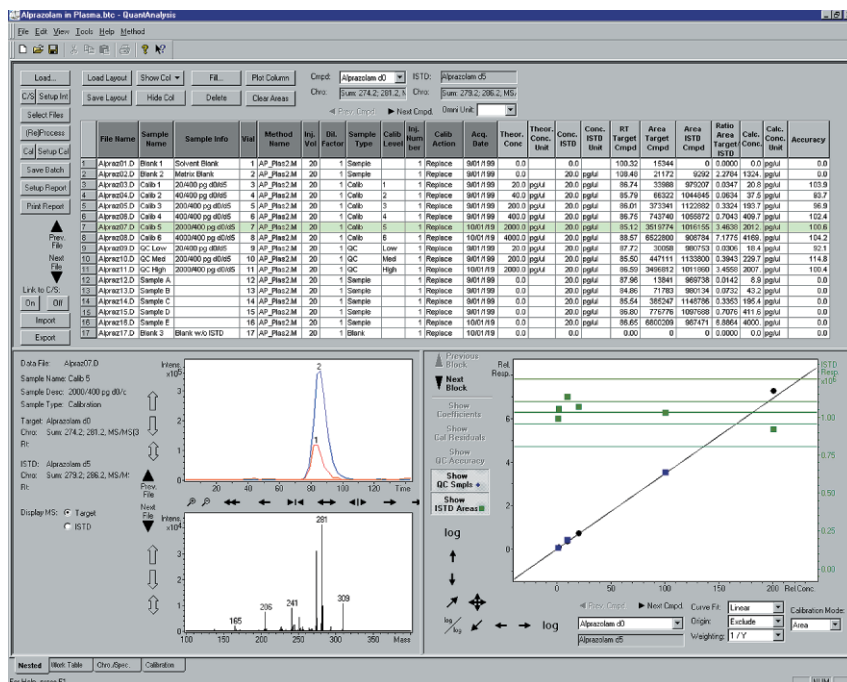
Quantification plus rapide et plus facile

Le puissant logiciel QuantAnalysis rend la quantification plus rapide et plus facile. Le logiciel se compose de trois vues simples (tableau de travail, chromatogramme/spectre et courbe d'étalonnage) pouvant être affichées dans une seule fenêtre ou dans des onglets. Le tableau de travail est constitué d'une feuille de calcul dans laquelle vous configurez la quantification et visualisez les résultats. Vous pouvez le personnaliser pour n'afficher que les données essentielles, et enregistrer ces mises en page personnalisées pour les utiliser ultérieurement. Les trois vues sont liées de manière dynamique, c'est-à-dire que toute modification apportée à l'une d'elles est répercutée dans les autres. Par exemple, la sélection d'une régression différente pour la courbe d'étalonnage recalcule automatiquement les concentrations.

Extraction du maximum d'informations de chaque échantillon

Le logiciel ACD/SpecManager, disponible via Advanced Chemistry Development, peut vous aider à extraire le maximum d'informations de vos données SM :

- Algorithme de détection des composants pour réduire le bruit aléatoire et le bruit de fond
- ChemSketch, l'outil standard de l'industrie pour représenter des structures chimiques
- Outils pour simplifier l'ajout et le retrait de spectres
- Outils pour stocker des chromatogrammes et des spectres traités, et générer des rapports



Le tableau de travail (en haut), le chromatogramme/spectre (en bas à gauche) et la courbe d'étalonnage (en bas à droite) sont liés de manière dynamique. Toute modification d'une vue se répercute automatiquement dans les autres.

- Outils de corrélation pour faciliter l'interprétation SM en mettant en corrélation les structures et les spectres SM
- Un lien direct pour un transfert facile des spectres de masse du logiciel de la trappe d'ions à ACD/SpecManager

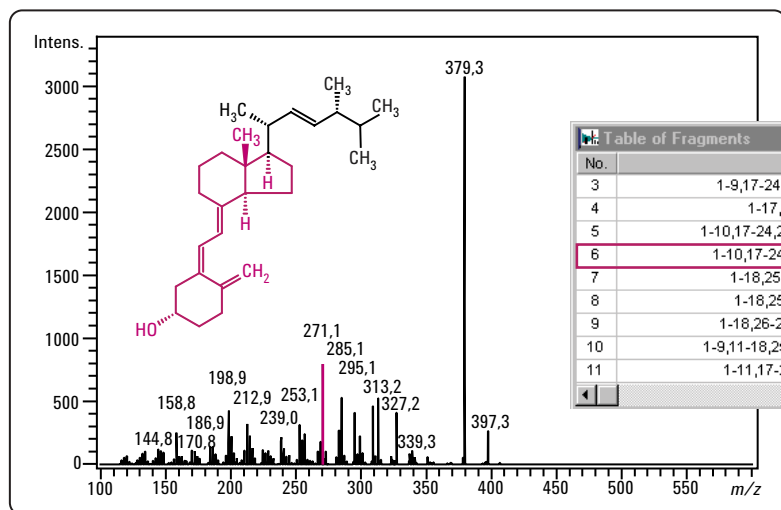
Le logiciel SpecManager fournit également un support en matière de techniques croisées, ainsi qu'une plate-forme inter-fournisseurs, une intégration de données multispectrales comprenant la RMN, la SM, l'UV-visible et l'IR.

Éditeur de rapports personnalisé

Un éditeur de rapports personnalisé accélère et facilite la création de rapports au format souhaité.

Automatisation utilisateur

L'écriture de scripts Visual Basic offre des possibilités quasiment illimitées d'automatisation conçue par l'utilisateur. Vos méthodes peuvent appeler des scripts personnalisés pour automatiser l'analyse des données et la génération de rapports. Ces scripts peuvent tirer profit d'une large gamme de commandes propres à la SM.



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

Avec le logiciel ACD/SpecManager, vous pouvez construire des bases de données de corrélations entre les structures et vos données SM. Faites des recherches dans ces tableaux de corrélations par rapport aux spectres inconnus.

Le logiciel Spectrum Mill facilite la protéomique à grand débit

Le logiciel Spectrum Mill vous aide à identifier des protéines à partir de données SM et SM/SM par une recherche dans une base de données ou un séquençage *de novo*.

Une extraction spectrale intelligente accélère l'identification des protéines

Le logiciel Spectrum Mill identifie et exclut les spectres de bruit et les spectres de mauvaise qualité avant la recherche dans la base de données, ce qui accroît considérablement la vitesse de recherche. Cela réduit également le nombre de faux positifs.

Plusieurs options de recherche pour l'identification des protéines augmentent la flexibilité

Le programme de recherche SM/SM comprend le mode identité pour les peptides non modifiés et le mode variable pour les modifications.

Le programme de cartographie peptidique (PMF) réalise un excellent travail d'identification de protéines à partir de spectres SM.

Prise en charge des données ETD

Le logiciel Spectrum Mill prend en charge les spectres CID standard et les spectres générés par ETD.

La validation automatique et manuelle de correspondances augmente le degré de confiance

Le logiciel Spectrum Mill valide les correspondances rapidement et automatiquement. Vous pouvez également passer en revue de manière interactive les correspondances proposées, en les comparant aux spectres SM/SM réels. Les spectres non validés peuvent faire l'objet de nouvelles recherches à l'aide d'autres paramètres ou bases de données.

Interprétation spectrale de novo

L'algorithme de séquençage *de novo* génère une liste classée de séquences peptidiques potentielles. Il écarte les solutions irréalistes et compense les difficultés spectrales courantes, telles que le bruit et la fragmentation incomplète.

Informations quantitatives et qualitatives

Le logiciel Spectrum Mill détermine automatiquement les différences d'abondances relatives des protéines trouvées. Il prend également en charge ICAT, iTRAQ et d'autres technologies d'étiquetage d'isotopes stables.

Accessibilité des données complexes

Le logiciel Spectrum Mill résume et met en corrélation les résultats de manière à rendre les informations accessibles même pour

des utilisateurs de SM non experts. Vous pouvez comparer d'importants ensembles de données à travers plusieurs expériences et résumer les résultats au niveau des protéines.

Compatibilité avec des données provenant de plusieurs fournisseurs

Des modules complémentaires sont disponibles et permettent au logiciel Spectrum Mill de traiter des formats de données non-Agilent :

- .RAW (Thermo Finnigan)
- .wiff (SCIEX CPL/SM)
- .pkl (Waters et autres)

MASCAT simplifie les recherches de protéines Mascot

Le logiciel de la série 6300 inclut le programme MASCAT à l'intention des chercheurs qui utilisent habituellement le programme de recherche de protéines Mascot. MASCAT concatène les fichiers au format générique Mascot (*.mgf), fournissant ainsi un moyen de synthétiser les résultats à partir de plusieurs analyses CPL/SM/SM en deux dimensions en une seule recherche de protéines.

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)IADPEHDTGFLIEYVATR(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	92.6	4.86e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		411.98	1232.648	
4	CID	21.70	97.0	5.65e+005	(R)DVYVQDLMTDLYK(L)		923.03	1844.899	
5	CID	18.94	93.1	1.68e+006	(R)RTGVGPGVPGEVEMVKGPFDVGPR(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)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHYR(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)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHYR(K)		912.49	2736.309	
14	CID	14.26	90.8	5.52e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		616.84	1232.648	

Le logiciel Spectrum Mill simplifie et accélère l'identification des protéines et le repérage des modifications post-traductionnelles

Spécifications

Précision de masse (Tout)

± 0,2 u dans la gamme de masse standard étalonnée à une résolution normale en mode balayage complet, avec un étalonnage et des statistiques de cible et d'ions ICC appropriés, et un équilibre thermique des circuits électroniques et de la source d'ions.

Stabilité de l'axe des masses (Tout)

± 0,2 u de la valeur étalonnée observée sur 8 heures dans une gamme de masse standard à une résolution normale en mode balayage complet, avec des statistiques de cible et d'ions ICC appropriées, et un équilibre thermique des circuits électroniques et de la source d'ions et une température ambiante de 21 °C ± 3 °C (70 °F ± 6 °F).

Sélection de précurseurs monoisotopiques (Tout)

La sélection de précurseurs monoisotopiques est possible sur toute la gamme de masse standard (50 - 2 200 *m/z*) à une température ambiante de 21 °C ± 3 °C (70 °F ± 6 °F).

Gamme de masse, résolution de masse et vitesse de balayage

Gamme de masse <i>m/z</i>	6310		6320, 6330 et 6340	
	Résolution LMH (u)	Vitesse de balayage (u/s)	Résolution LMH (u)	Vitesse de balayage (u/s)
50 - 2 200	≤ 0,6	13 000	≤ 0,6	26 000
	≤ 0,45	5 500	≤ 0,35	8 100
	≤ 0,35	1 650	≤ 0,25	800
200 - 4 000	≅ 3 - 4	27 000	≤ 3	27 000

Changement de polarité

Changement de polarité entre balayages avec 1 spectre positif et 1 spectre négatif en approximativement 1 seconde pour tous les modèles

Sensibilité

Conditions

Colonne à résolution rapide ZORBAX SB-C18 2,1 x 30 mm 3,5 µm
Phase mobile - 25 % d'eau 75 % de méthanol 5 mM d'acétate d'ammonium
Débit - 400 µl/min
Mode - balayage complet SM/SM
SM/SM - transition de l'ion moléculaire protoné (609 *m/z*) vers la somme des deux ions de produit les plus abondants
Gamme de balayage des ions de produit - 175 - 650 *m/z*
Gamme de masse - standard (50 - 2 200 *m/z*)
Résolution - standard (0,6 u)

	6310	6320	6330	6340
Quantité (réserpine - dans la colonne)	5 pg	1 pg	250 fg	250 fg
Rapport signal sur bruit (balayage complet SM/SM)	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1	≥ 50:1

Pour plus d'informations...

Pour en savoir plus :

www.agilent.com/chem/iontrap

Achetez en ligne :

www.agilent.com/chem/store

Trouvez un centre d'assistance Agilent dans votre pays :

www.agilent.com/chem/contactus

États-Unis et Canada

1-800-227-9770

agilent-inquiries@agilent.com

Europe

info_agilent@agilent.com

Asie-Pacifique

adinquiry_aplsc@agilent.com

Utilisation uniquement en recherche. Ne pas utiliser dans des méthodes de diagnostic.

Les informations, les descriptions et les spécifications publiées ici peuvent être modifiées sans préavis.

Agilent Technologies décline toute responsabilité pour les erreurs éventuelles du présent document ainsi que pour les dommages fortuits ou consécutifs à la fourniture, l'utilisation ou la performance de ce dernier.

© Agilent Technologies, Inc. 2006
Imprimé aux Pays-Bas le 11 novembre 2006
5989-5824FR



Agilent Technologies