



Agilent LC/MSD 离子阱质谱系列

高性能液相色谱 / 离子阱
质谱联用仪



Agilent Technologies

高性能 LC/MSⁿ 前所未有的灵活性

Agilent 1100 系列液相色谱 / 离子阱多级质谱联用仪的功能和性能具有最宽范的技术选择。LC/MSD 离子阱解决方案具有 3 种性能规格、6 种离子源、专用软件和广泛的液相色谱技术选择, 因此能够应对各种分析挑战。

多级性能规格 适于各种应用

液相色谱/离子阱质谱仪系列包括3种型号: VL, SL 和 XCT。每种型号都基于同样可靠的技术平台, 而且每种型号都提供智能化、自动的与数据相关的 MS/MS 或 MSⁿ 分析。

体现分析效率和价值的 LC/MSD Trap VL

LC/MSD Trap VL 具有良好的灵敏度和优异的可靠性。当样品量不构成您分析的限制因素时, 它能体现高通量应用的优异价值。与电喷雾电离源, 大气压化学电离源及大气压光离子化源尤为匹配。

体现灵敏度而无其他损失的 LC/MSD Trap SL

LC/MSD Trap SL 是功能更强大、灵活性更好的仪器。它使用升级的离子光学系统及相应的改进实现了更高的灵敏度。它将快速极性切换与多信号数据采集能力相结合, 扩展了从单次运行所能采集的数据量。LC/MSD Trap SL 还提供 5 级自动和 11 级手动的 MS/MS。

性能最高的 LC/MSD Trap XCT

安捷伦最新离子阱, LC/MSD Trap XCT 为您提供最前沿的性能。其高容量离子阱使灵敏度得到显著提高。同时, 还保留了真正的 3 维离子阱所固有的分辨率和扫描速度。LC/MSD Trap XCT 具有分辨率和扫描速度的最佳组合, 包括新的 26,000 u/s 的超扫描模式, 大大优于单位质量的分辨率。它还提供专用的多肽扫描模式, 可改善低丰度蛋白质的分析。



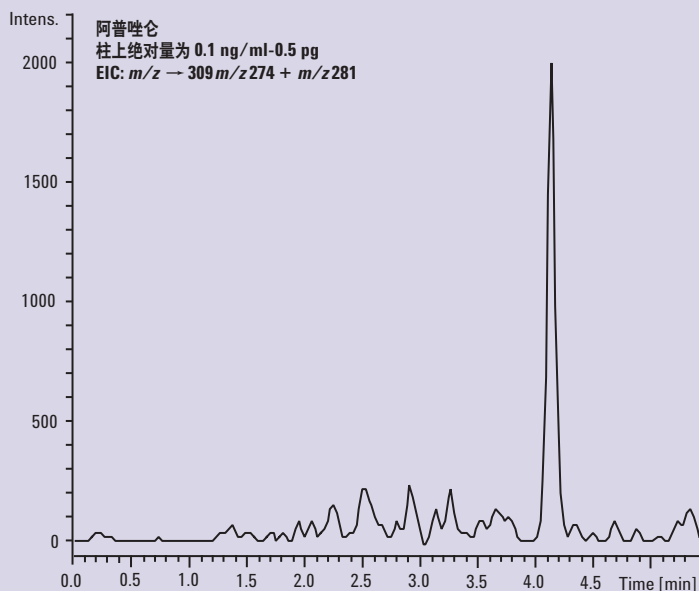
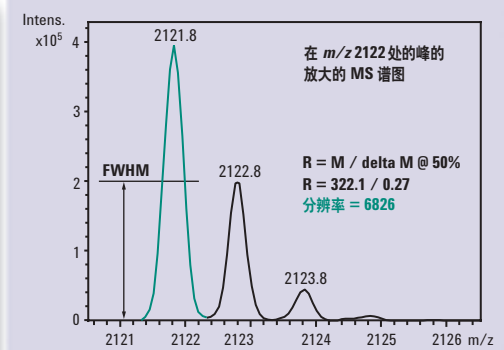
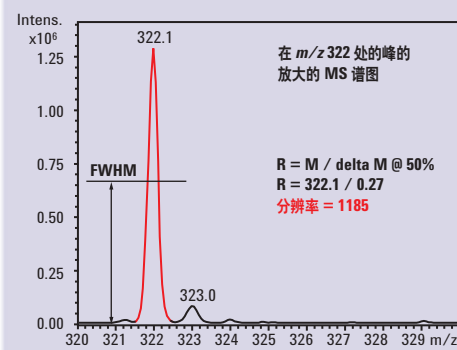
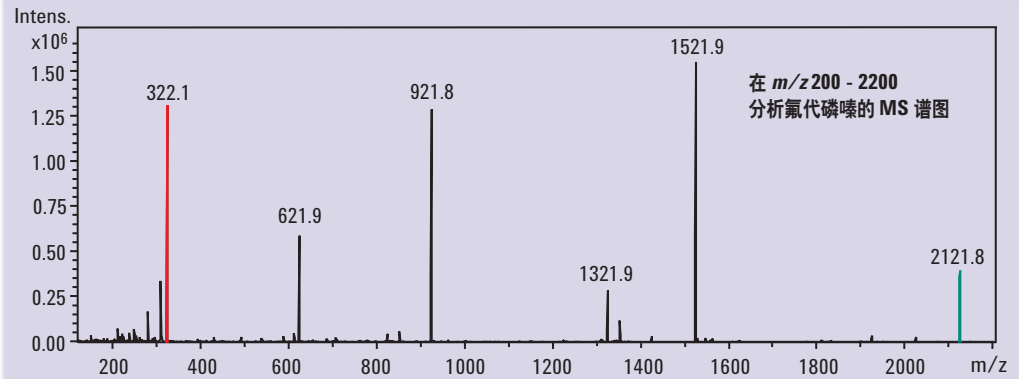
卓越的离子阱技术产生优异的性能

在离子阱系统中，质量数准确度、质量数分辨率和扫描速度极大地依赖于离子喷射的速度和时间。LC/MSD Trap的三维多极离子阱设计专

利技术获得了更高数量级的非线性谐振。该非线性谐振非常有效地将能量转换至离子，使之以从离子阱快速而精确地喷射。结果实现了质量范围、分辨率和扫描速度的最佳组合。

LC/MSD Trap的相锁定专利技术控制离子喷射的精确瞬间，使得扫描与扫描之间的重现性大大提高。结果或得了稳定的质量测量和优异的质量分辨率。

使用高容量三维离子阱的LC/MSD Trap XCT，您不用为分辨率而损失扫描速度。在 m/z 200 - 2200 m宽质量范围分析氟代磷嗪证明以很快的扫描速度8,100 u/s仍得到优异的分辨率。



每种型号的 LC/MSD Trap 都有无可比拟的灵敏度

LC/MSD 离子阱系列产品为您提供的性能选择范围很宽，从 LC/MSD Trap VL 的出色的可靠性到高容量 LC/MSD Trap XCT 的卓越灵敏度。采用纳流喷雾或 AP-MALDI 离子源，LC/MSD Trap XCT 能够鉴定含量在阿托摩尔 (10^{-18} 摩尔) 级的极具挑战性的样品，比如低丰度蛋白质。LC/MSD Trap 与离子源的结合几乎适合于各类应用和资金预算。

使用中等范围的配有标准电喷雾离子源的 LC/MSD Trap SL 进行全扫描 LC/MS/MS 分析

根据分析需求而变化的解决方案

用传统技术无法电离的微量蛋白质——复杂基质中的药物代谢产物——污染物，只有几微升或纳升。面对大量分析挑战，通用的LC/MS Trap具有各种解决方案。

广泛的电离技术选择

没有任何一种单一的离子化技术能够适合所有的样品。为达到最大的通用性，一台LC/MSⁿ系统要求有多种离子化选择。安捷伦公司提供前所未有的离子化选择范围，包括：

- 在标准流速或微升流速条件下的电喷雾电离 (ESI)
- 大气压化学电离 (APCI)
- 大气压光离子化 (APPI)
- 纳流电喷雾源
- 大气压基质辅助激光解吸离子源 (AP-MALDI)

卓越的离子源设计

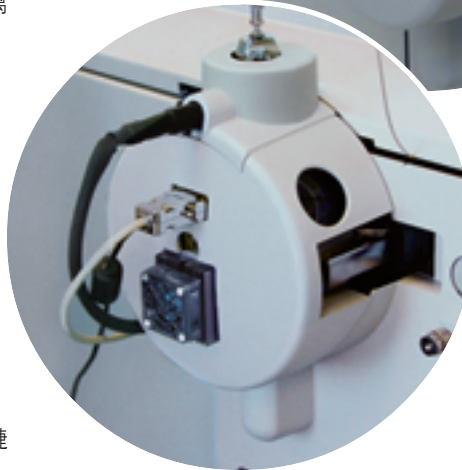
ESI, APCI, APPI和纳流喷雾离子源都包含安捷伦的垂直喷雾专利技术，该技术极少需要调节或不用调节，且保持了毛细管和离子光学系统的清洁。所有离子源还包括高容量干燥气系统，它通过减少溶剂簇和流动相添加剂改善了质谱图质量、灵敏度和重现性。同时，垂直喷雾和高容量干燥气使安捷伦的离子源能够耐受样品和流动相中更多的非挥发组。



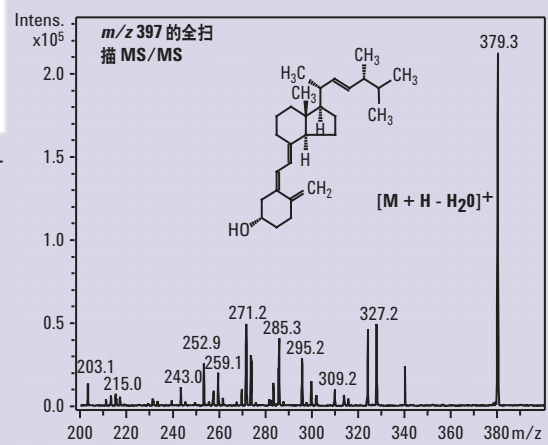
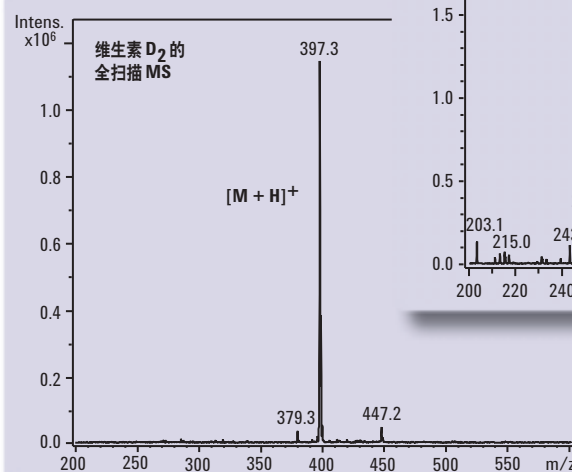
由于多电荷和低操作温度，ESI 特别适合分析生物大分子，也可以分析较小的极性分子



APCI 很适合分析各种极性和非极性的小分子化合物



来自 Syagen 科技公司的 PhotoMate APPI源是更成熟的LC/MS离子化技术的补充；可以对用ESI和APCI很难电离或根本不能电离的样品进行离子化



维生素D₂的APPI MS/MS分析，得到了高丰度的分子离子和清晰的结构信息

高线灵敏度的纳流电喷雾技术

安捷伦纳流喷雾离子源为在线 LC 分离提供了阿托(10^{-18})摩尔级的灵敏度, 比如, 分离蛋白水解的消解蛋白质。纳流喷雾源很少需要调节, 离子源是密封的, 当分析具有潜在毒性的生物样品时, 安全性得到提高。对于蛋白质组学应用, 纳流电喷雾源可以产生带两个电荷的多肽离子, 在 MS/MS 谱图中有更多的 b- 系列和 y- 系列离子。



纳流喷雾离子源提供了阿托(10^{-18})摩尔级的灵敏度, 且具有调节量最少和密封离子源的安全优势。

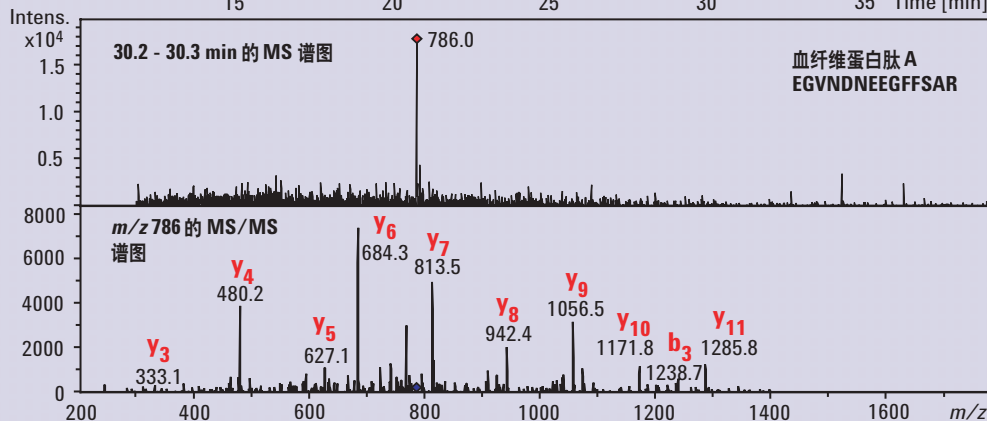
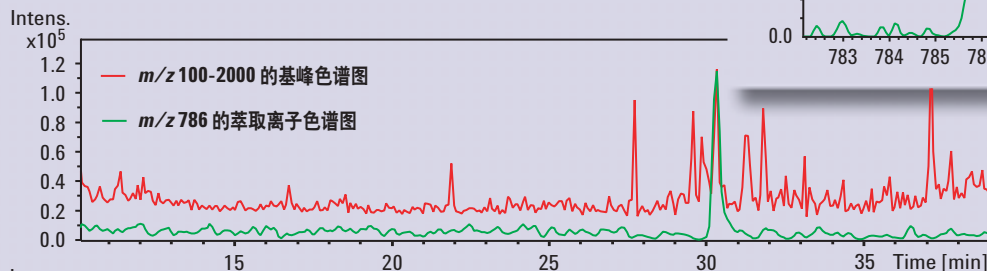
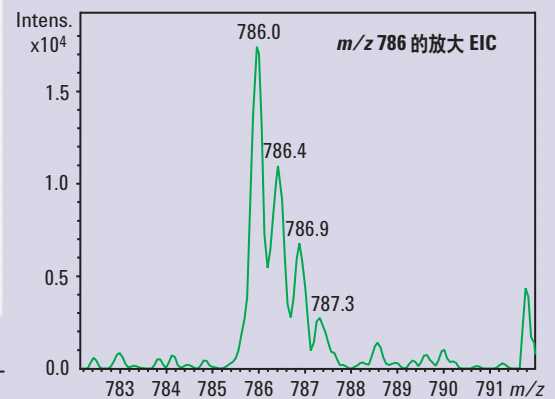


对于多肽消解物, AP-MALDI 离子源提供快速、简便的分析和优异的灵敏度

AP-MALDI 用于快速、阿托摩尔级的分析

对于不需要在线分离的样品, Agilent AP-MALDI 离子源提供快速、简便和超高灵敏的分析。对于阿托(10^{-18})摩尔级的多肽消解产物的分析, 能够得到清晰、可检索的 MS/MS 谱图。安捷伦强大的 Spectrum Mill MS 蛋白质组学数据分析平台与 LC/MSD Trap XCT 相结合, AP-MALDI 是快速分析 2D 凝胶斑点消解物的理想离子源。AP-MALDI 离子源还被证明可用于其他应用, 比如分析低分子量的聚合物。

m/z 786 的提取离子流图证明质谱具有清楚分离带双电荷离子的能力



用配有纳流喷雾源的 LC/MSD Trap XCT 对 100 阿托摩尔 (attomoles) 的血纤维蛋白肽 A 进行 LC/MS/MS 分析

智能化数据采集确保高质量数据

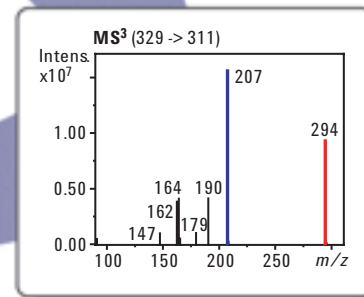
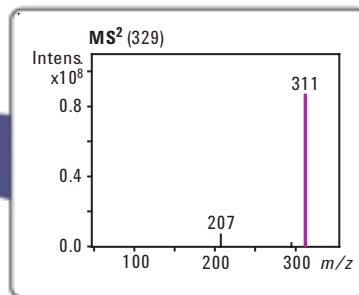
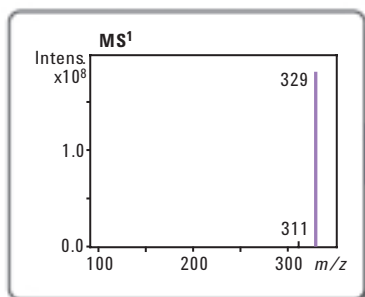
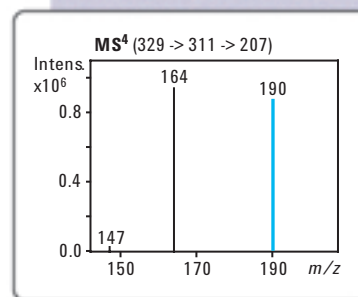
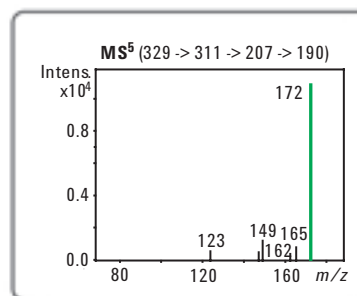
采集数据并不困难,但要智能化地从每次扫描中采集到最佳、信息量最大的数据却是一个挑战。LC/MSD Trap具有宽范围的智能化数据采集功能,从而优化从每个样品采集到的数据。

全自动进行相关数据采集

离子阱的优势之一是单次运行中收集多个级的MS数据的能力。LC/MSD Trap的综合软件包含有大量静态和动态数据相关采集特征,可以帮助您从每次分析中得到大量的有用数据。为简便起见,从一次分析中采集的所有MS/

MS数据都储存在单个文件中。LC/MSD Trap SL和XCT能够完成多达5级(MS⁵)全自动化的MS/MS相关数据采集。

治疗高血压的药物拉贝洛尔(labetalol)的离子树分析显示了自动化、相关数据采集的强大功能。采用MS³以上较高的母离子数量(number-of-precursors)设置,有助于确保采集到更多的相关数据。



相关数据采集特点

优点

丰度最高的母离子

增加可获取数据的特征的母离子数目。对共流出峰尤为有利¹。

同位素排除

避免从同位素中(C₁₃等)采集不必要的MS/MS数据

静态包含数据列表

即使在丰度很低的情况下,也可从目标离子中获取数据

静态排斥数据列表

避免从溶剂离子和其他背景组分中获取采集MS/MS数据

静态优先数据列表²

如果目标离子存在,确保数据是从目标离子采集而得,但是,如果目标离子不存在,则可以允许采集其它离子的数据。

优先价态离子选择

确保选择双电荷的多肽离子,以获得更高质量的MS/MS数据

主动排斥——重复计数

避免从同一离子采集数据多于用户设定的次数,以此增加采集特征数据的量

主动排斥——排斥时间

在用户设定的时间之后,从主动排斥数据清单中排除离子,以确保当这些离子在其它色谱峰中出现时,能再次被采集

绝对阈值

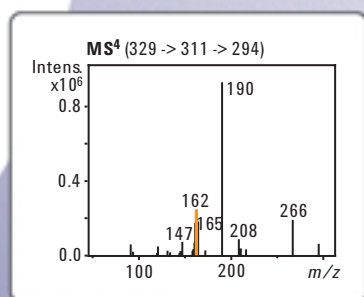
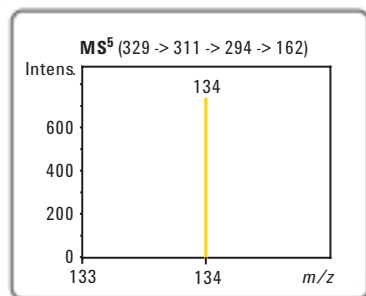
确保只从用户设定丰度的离子中采集数据¹

相对阈值

确保只从用户设定相对丰度的离子采集数据,但相对丰度设定是指相对于一次MS扫描中丰度最大丰度的离子¹

1. 在SL和XCT型号,可以分别设定MS>2;

2. 只有SL和XCT型号有此功能。



通过碰撞能量梯度变化得到更好的 MS/MS 数据

LC/MSD Trap 特有的 SmartFrag 自动编程碰撞诱导能量和可调的碎裂宽度 (AFW) 确保每个母离子都得到其最佳碎裂所要求的准确能量。结果生成更多的子离子，从较级数的 MS 中得到更多的结构信息。

自动 Smartfrag CID 电压梯度增加和可调的碎裂宽度 (AFW) 提供更丰富的 MS/MS 谱图，消除了耗时的 CID 电压达手动优化操作。

最大分辨率扫描

LC/MSD Trap 的相关数据的采集标准，LC/MSD Trap 可在每个被选择的离子周围的窄质量窗口进行最大分辨率扫描。结果为全世界最好的，从更独特的离子得到很高质量的数据。您可以使用最大分辨扫描模式进行 MS 和 MS/MS 分析。

多肽扫描模式更有利于鉴定蛋白质

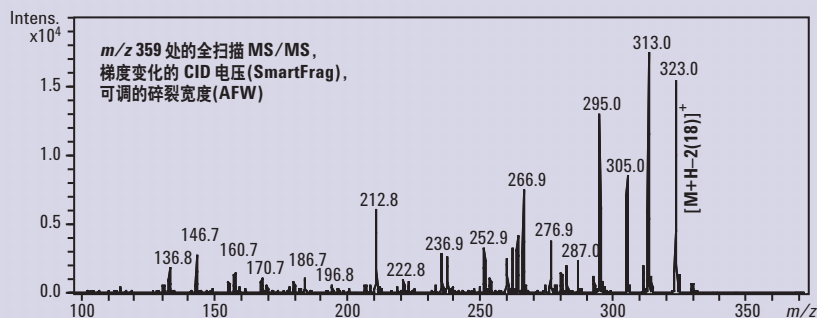
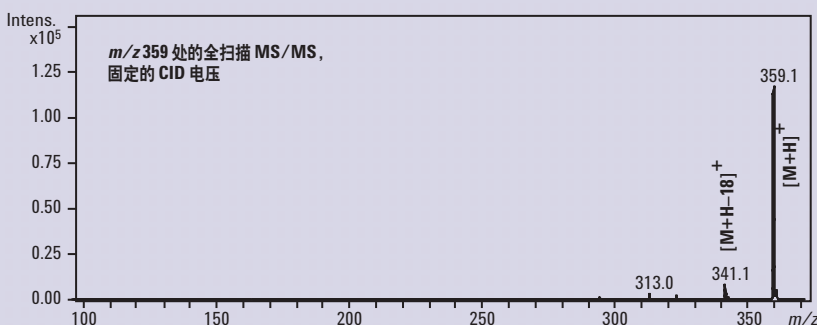
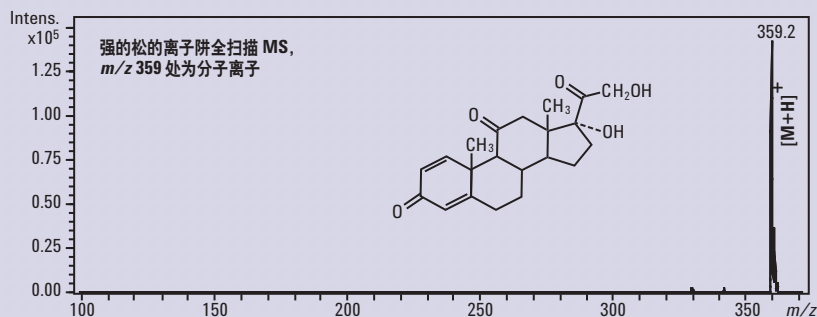
LC/MSD Trap XCT 的多肽扫描模式在 MS¹ 过程中使用较高分辨率增强扫描模式，可以准确地测定 +1, +2, 和 +3 价电荷状态的多肽离子，在 MS² 中为更快的超扫描模式，还可以缩短循环时间。其净结果是从复杂的多肽消解物得到更多的蛋白质鉴定。

快速极性切换提高样品分析通量

在一次分析中采集辅助正、负离子的能力可以节约您的宝贵时间和样品。LC/MSD Trap SL 和 XCT 的快速极性切换时间，意味着在一个峰上进行更多的扫描，从而获得更好的数据质量和灵敏度。

智能化参数设定使非专业人士也能得到专业结果

为简化操作，LC/MSD Trap 软件包含有“smart”模式。以一些简单的参数为基础，例如目标质荷比、化合物稳定性、相对于目标离子预期的离子分布等，该软件能够自动设定离子阱最佳参数。为了与 LC 方法完全匹配，您还可以全面、独立地控制离子源的参数。



一体化的图形软件工具可以获得最多的数据

高质量的数据是必需的,但不是足够的。将好的数据转化为有用的信息需要合适的软件工具。安捷伦提供各种强有力的软件工具,以帮助您将MSⁿ数据转变成问题的答案。

简化的数据结果导航

自动 MSⁿ 分析可以产生大量的多级 MS 数据。LC/MSD Trap 软件将一次分析中的全部数据都保存在一个文件中,达到了简化。通过一个熟悉的分等级树结构,可以方便地对您所需数据进行定位和导航。特殊的过滤器有助于您快速提取特定子集中的数据。

自动搜索化合物

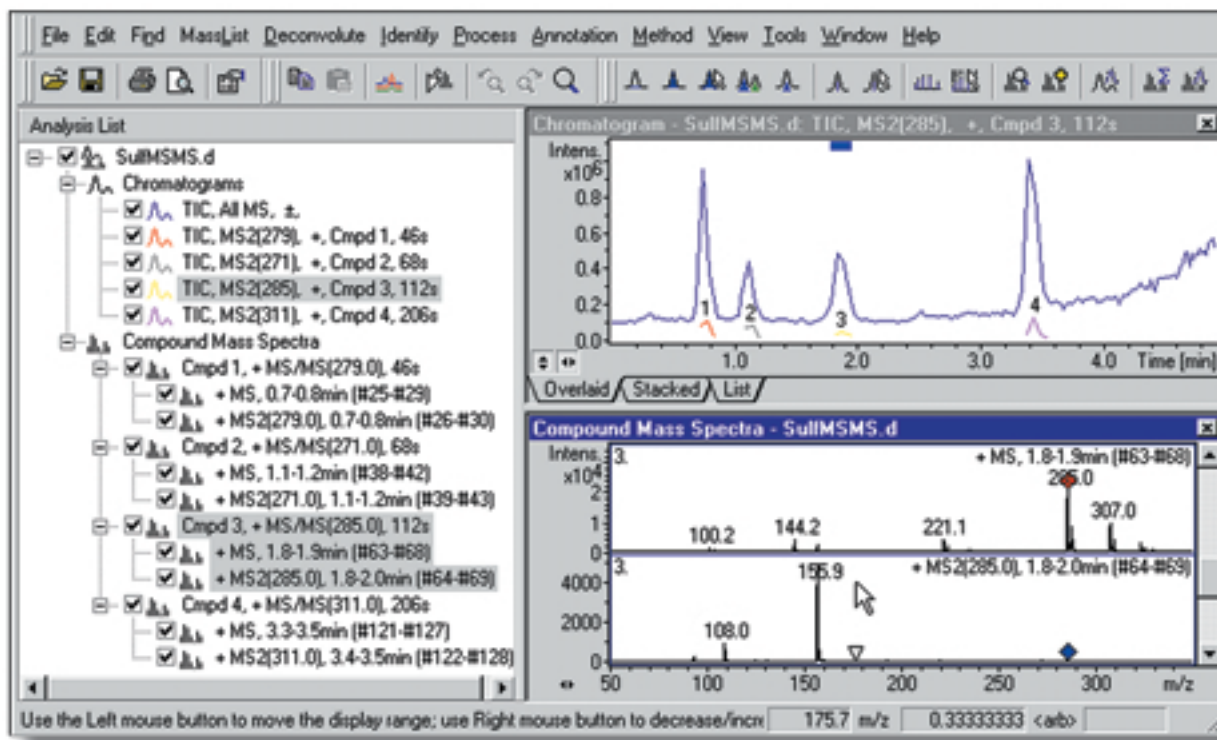
搜索化合物(Find Compounds)功能为复杂的 LC/MSⁿ 实验提供了强有力的基于化合物的数据检索和数据浏览。搜索化合物(Find Compounds)能够:

- 确定所有特定的 MSⁿ 实验数据
- 为每个特定的MS母离子生成化合物条目和MS²
- 总离子流色谱图
- 由化合物条目,准确提取、平均和分等级管理所有相关的 MS 和 MSⁿ 数据

在单级 MS 和手动 MSⁿ 实验中还有对所有积分的色谱峰自动生成平均质谱图的功能。

结果可以浏览、打印和为归档或进一步处理而保存。

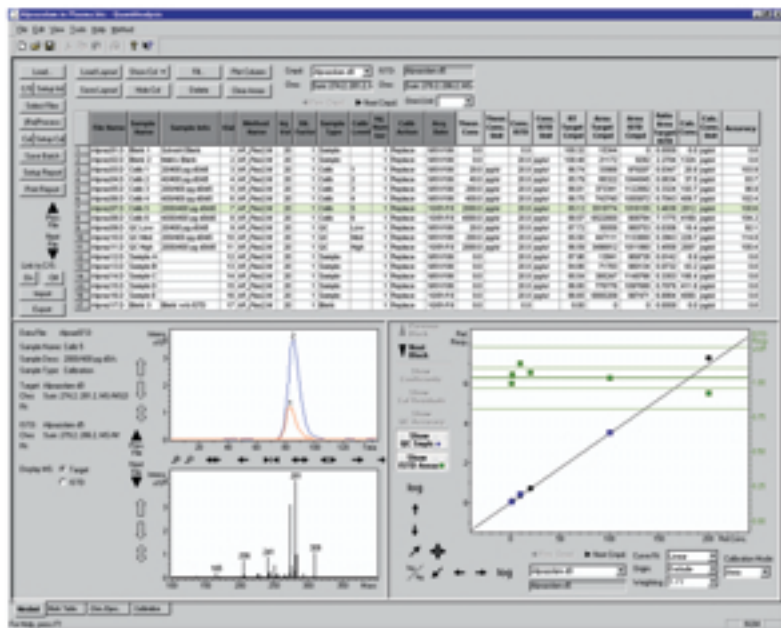
分等级的树结构使得容易准确找到您需要的数据



自动化化合物鉴定加速了分析,并提高了工作效率

更快更简便的定量分析

强大的定量分析(QuantAnalysis)软件使定量分析更快速更简便。该软件由三个简单的视图构成——工作表、色谱图/质谱图和校准曲线——这些均可以显示在单一窗口或标签中。工作表是一个单电子表格，您可以在其中设置定量和浏览结果。您可以对其进行自定义，以便只显示必要的数据，这些自定义的格式可以保存以备将来使用。所有三个视图都是动态连接的；其中一个视图发生了变化，就可以反映在另一个视图中。例如，为校准曲线选择不同的曲线拟合软件便可自动重新计算出浓度。



在定量分析(QuantAnalysis)软件中的工作表(上图)，色谱图/质谱图(左下图)和校准曲线(右下图)视图是动态连接的——在一个视图中进行的改变可以反映在另一个视图中

中性丢失分析

中性丢失分析是多个被分析物中鉴定常见结构元素的有力工具。离子阱 MS/MS 的一个固有优点就是全扫描，在采集数据后可以进行中性丢失分析；您不必事先预测中性丢失。LC/MSD

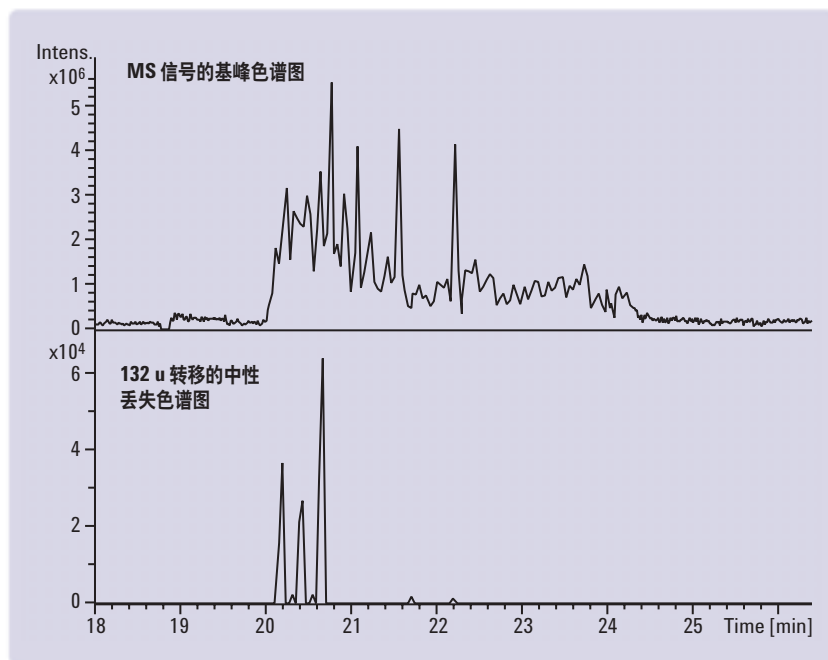
Trap 软件包含容易进行中性丢失分析的工具。其他 LC/MSD Trap 的功能，例如可编程碰撞能量，确保了最佳裂解效率，可以获得大量的子离子用于结构分析。

自定义报告编辑器

自定义报告编辑器使您更容易生成严格符合您的要求的报告格式。

用户设计的自动化

Visual Basic 脚本为用户设计自动化提供了几乎无限的机会。您的方法可以调用用户脚本。以使数据分析和报告自动化。这些脚本可以利用广泛的 MS 专用命令。

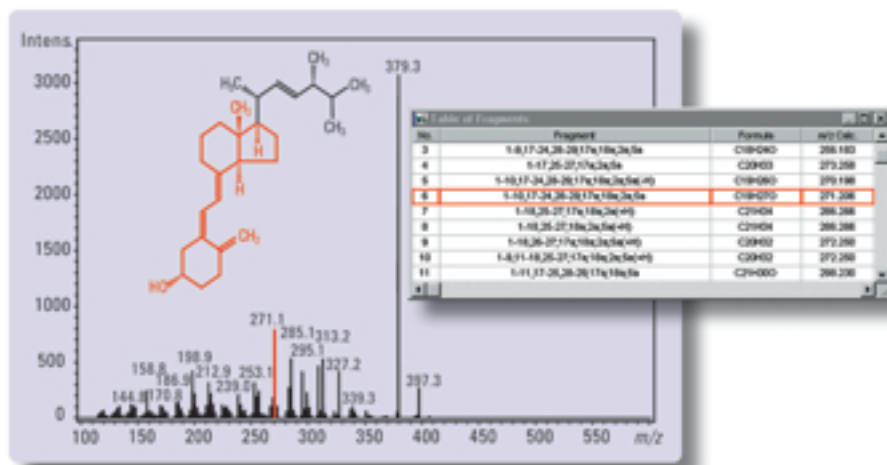


全扫描 MS 和中性丢失分析鉴定与阿拉伯糖发生 O-糖基化作用的花色素苷

从每个样品提取最多的信息

来自高级化学开发(Advanced Chemistry Development)的 ACD/SpecManager 软件帮助您从 MS 数据中提取最大量的信息。MS 处理器(MS Processor)模块具有以下高级功能, 比如:

- 组分检测算法(CODA)通过降低随机噪声和高背景简化了数据解析
- ChemSketch, 画化学结构式的行业标准工具
- 简化谱图加减的工具
- 保存处理过的色谱图和质谱图, 并生成报告的工 具
- 通过对比结构和 MS 谱图, 可以帮助进行 MS 解析的相关工具



结构与 MS 数据之间相关性的数据库。在这些相关性 (归属) 表中对未知质谱图进行检索。

谱图管理(SpecManager)软件还提供对交叉技术(包括 NMR, 质谱, 紫外 - 可见光谱和红外光谱技术)之间, 以及不同供货商平台之间多种谱图数据进行比较的支持。

高通量 MS 蛋白质组学数据分析

安捷伦的 Spectrum Mill MS 蛋白质组学数据分析平台是蛋白质组学中质谱数据分析的高级软件工具, 它使采用质谱进行高通量蛋白质组学实验更为容易。Spectrum Mill 分析平台为您提供:

- 智能化谱图提取和质量评估
- 数据库检索和 *De novo* 测序
- 自动的交互式结果认证
- 定量和半定量分析
- 实验之间的结果比较总结

这一开放式平台软件可以处理来自多种仪器类型和供货商的质谱数据。

智能化质谱图提取加快了蛋白质鉴定的速度

Spectrum Mill 蛋白质组学数据分析平台检索蛋白质数据库的速度和效率在很大程度上是由于质谱图的智能化提取和处理。通过在检索前鉴定和排除噪声谱图及质量差的谱图, 大大提高了检索速度。这还可以减少错误结果的数目。

蛋白质鉴定的多种选项增加了灵活性

Spectrum Mill MS 蛋白质组学数据分析平台为蛋白质鉴定和表征提供了多种选项, 包括:

- MS/MS 质谱图的 MS/MS 离子检索
- MS 谱图的多肽质量指纹图(PMF)

创新的 MS/MS 数据库检索算法采用了智能化平行处理, 可以在不创建巨大的索引文件的情况下提供快速处理。您可以使用鉴定模式来查找未修饰的多肽, 或采用同族关系模式寻找突变和修饰。

自动和手动匹配认证

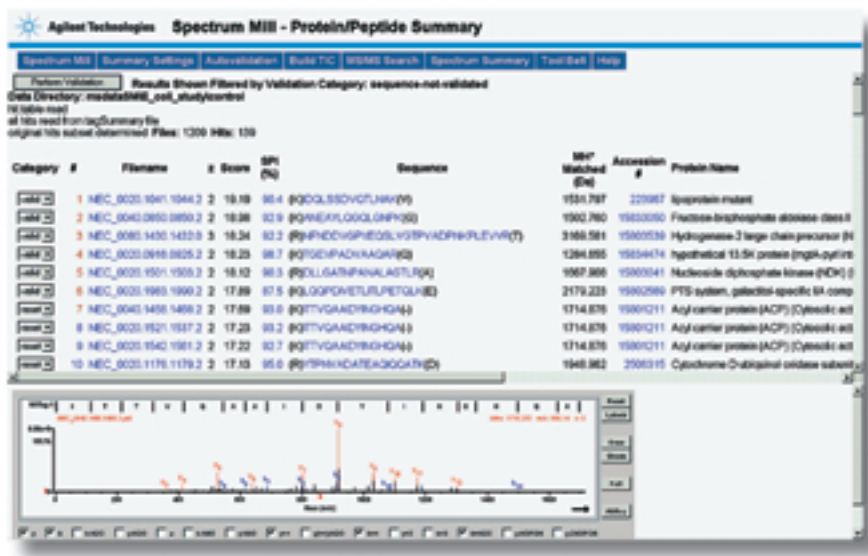
Spectrum Mill数据分析平台可以对总记分值和峰强度百分比记分值的匹配进行自动认证。您还可以交互式地浏览所提出的匹配、将它们与实际 MS/MS 谱图进行比较。其余未认证的谱图可使用改变的参数和数据库进行重新检索。

De novo 可以对在任何数据库中未检索到的多肽进行谱图解析

De novo 测序算法使用高级图论生成一个可能的多肽序列的排序表。它会摒弃不切实际的方案，并弥补了常见谱图解析困难，如噪声和不完全碎裂。

定量和定性信息

Spectrum Mill数据分析平台能够基于来自蛋白质的所有多肽组分的平均峰强度比较蛋白质的相对丰度。尽管只是半定量，但足以揭示相对丰度 2 到 5 倍的变化。如果您需要更精确的定量，Spectrum Mill 数据分析平台还支持 ICAT 分析。



交互式认证使得建议匹配与实际 MS/MS 谱图的比较更为容易

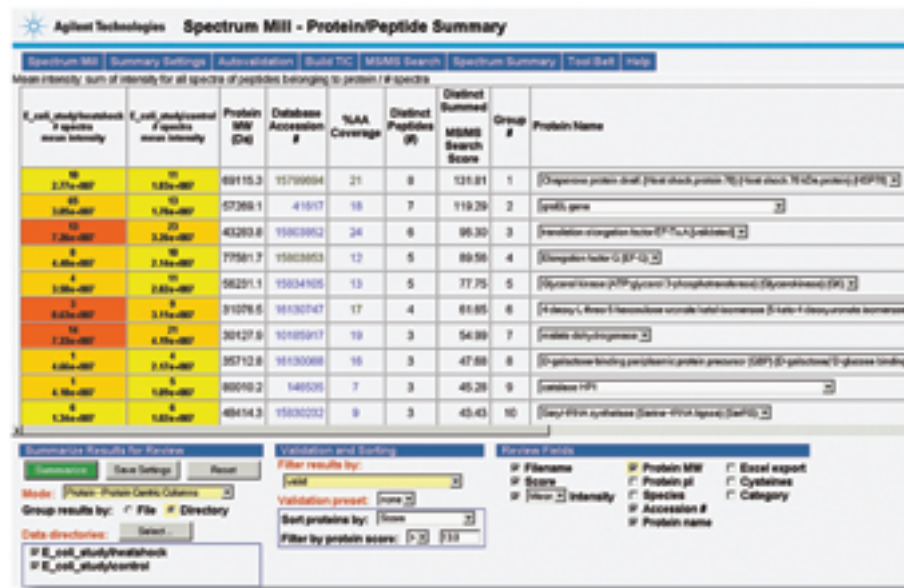
可以获取复杂的数据

即使您不是质谱专家，Spectrum Mill 数据分析平台也能以使您获取信息的方式总结并关联结果。显示的数据包括蛋白质鉴定、百分含量和相对丰度。可以比较不同实验之间大的数据组，并在蛋白质水平上总结结果。

与多家厂商数据的兼容性

我们提供加载软件模块，以使 Spectrum Mill MS 蛋白组学数据分析平台能够处理非安捷伦数据格式的数据：

- .RAW (Thermo Finnigan)
- .wiff (SCIEX LC/MS)
- .pkl (峰列表)和多谱图附加列表 .pkl (Waters/Micromass 等厂商)



蛋白质——蛋白质模式更容易比较多个样品的数据——包括颜色编码的相对丰度信息

性能指标

质量准确度 (所有型号)

在全扫描模式正常分辨率条件下校准标准质量范围内 ± 0.2 u，采用适当的校准，ICC 目标和离子统计，以及电子元件和离子源的热平衡。

质量轴稳定性 (所有型号)

在全扫描模式正常分辨率条件下标准质量范围，8 小时测得的校准值在 ± 0.2 u 之内，用 ICC 目标和离子统计，以及电子元件和离子源的热平衡，室温为 $21^{\circ}\text{C} \pm 3^{\circ}\text{C}$ 。

单一同位素母离子选择 (所有型号)

在标准质量范围 (m/z 50 - 2200) 可以进行单一同位素母离子选择，室温为 $21^{\circ}\text{C} \pm 3^{\circ}\text{C}$ 。

系统性能

	LC/MSD Trap VL&SL			LC/MSD Trap XCT	
	质量范围 (m/z)	分辨率 (FWHM)	扫描速度 (u/s)	分辨率 (FWHM)	扫描速度 (u/s)
标准	50-2200	≤ 0.60 u	13,000	≤ 0.60 u	26,000
增强	50-2200	≤ 0.45 u	5,500	≤ 0.35 u	8,100
最大	50-2200	≤ 0.30 u	1,650	≤ 0.25 u	800
扩展	200-4000	$\cong 3-4$	27,000	≤ 3 u	27,000

极性切换

VL $\cong 2$ 秒 SL $\cong 0.5$ 秒 XCT $\cong 0.5$ 秒

灵敏度

条件:

色谱柱 — ZORBAX 快速分离 SB-C18 2.1x30 mm 3.5 μm
流动相 — 25% 水 75% 甲醇，含 5 mM 乙酸胺
流速 — 400 $\mu\text{l}/\text{min}$
模式 — 全扫描 MS/MS
MS/MS — 质子化分子离子 (m/z 609) 转变为两个丰度最高的子离子的加和
子离子扫描范围 — m/z 175 - 650
质量范围 — 标准 (m/z 50 - 2200)
分辨率 — 标准 (0.6 u)

	含量	信噪比
VL	25 pg 利血平	$\geq 25:1$
SL	5 pg 利血平	$\geq 25:1$
XCT	1 pg 利血平	$\geq 50:1$

MS 级数

	自动	手动
VL	2 (MS/MS)	3
SL	5	11
XCT	5	11

如需详细信息

如需了解有关 Agilent 1100 系列 LC/MSD Trap 质谱仪系列产品的详细信息，请拨打免费电话：

800-820-3278 或与当地的安捷伦科技生命科学和化学分析部或授权的安捷伦科技代理商联系。

您也可访问我们的互联网网站：

www.agilent.com/chem

Agilent 1100 系列 LC/MSD Trap 质谱仪的设计和制造遵循 ISO 9001 质量管理体系的保证。

本出版物中的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技公司版权所有，2003
2003 年 10 月 31 日中国印刷
5988-3620CHCN



Agilent Technologies