

Sistemi LC/MS Agilent Ion Trap Serie 6300
**LC/MSⁿ ad alte prestazioni
per la massima flessibilità**



Agilent Technologies

Flessibilità senza precedenti nella LC/MSⁿ ad alte prestazioni

Con quattro modelli, un'ampia scelta di sorgenti di ionizzazione, software specifici per le diverse applicazioni e una vasta selezione di tecnologie per LC, i sistemi LC/MS Agilent Ion Trap Serie 6300 possono essere adattati ai più diversi tipi di problemi analitici. Una tecnologia che può vantare la leggendaria affidabilità Agilent e ti assicura sempre il massimo delle prestazioni.

Prestazioni in grado di soddisfare le esigenze delle tue applicazioni e il tuo budget

C'è sempre un sistema LC/MS a trappola ionica Serie 6300 adatto alle tue esigenze, sia che tu stia ricercando peptidi a basse concentrazioni, metaboliti di farmaci in matrici complesse o residui di pesticidi in prodotti alimentari. Indipendentemente dal modello di trappola ionica Serie 6300 scelto, esso disporrà dell'acquisizione dei dati ad alta velocità per la massima compatibilità con la moderna cromatografia ad elevata risoluzione.

Ion Trap 6310: rende economica la MSⁿ ad alte prestazioni

Il modello 6310 è uno strumento di alta qualità con ottime sensibilità, flessibilità e affidabilità. Oltre a una veloce commutazione della polarità, offre la capacità di acquisizione data-dependent per aumentare la quantità di dati che è possibile ottenere in una singola analisi.

Ion Trap 6320: fornisce sensibilità, risoluzione di massa e velocità di scansione più elevate

L'alta capacità della trappola ionica del modello 6320 aumenta la sua sensibilità e le sue prestazioni. Il 6320 è in grado di eseguire scansioni a 26.000 u/s, con risoluzione migliore di un'unità ed è dotato di una modalità di scansione speciale per i peptidi, che consente di migliorare l'identificazione a bassa concentrazione di proteine.

Ion Trap 6330: offre la massima sensibilità per basse concentrazioni di analiti

Grazie a un nuovo rivelatore ad alta efficienza, il sistema 6330 Trap può essere considerato la trappola ionica più sensibile disponibile sul mercato. Raggiunge la massima sensibilità senza sacrificare la velocità di scansione e la risoluzione come accade con le trappole ioniche bidimensionali.

Ion Trap 6340 facilita la caratterizzazione di modifiche post traslazionali e l'identificazione delle proteine

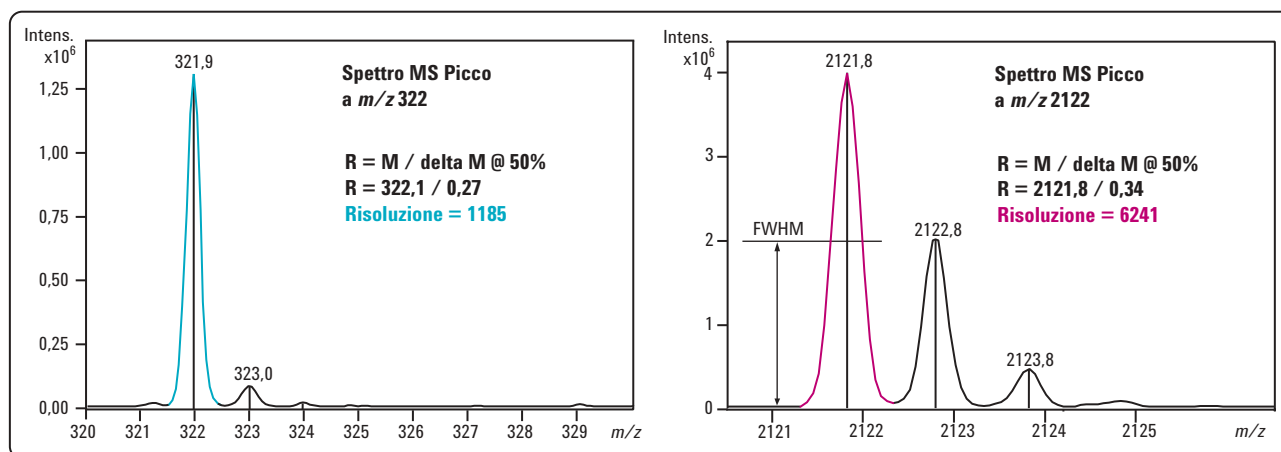
Il sistema 6340 aggiunge la dissociazione a trasferimento elettronico (ETD) alle ottime prestazioni del sistema 6330. L'ETD è una tecnica di frammentazione alternativa che fornisce un quadro più completo sia delle sequenze peptidiche che delle posizioni delle modificazioni chimiche.



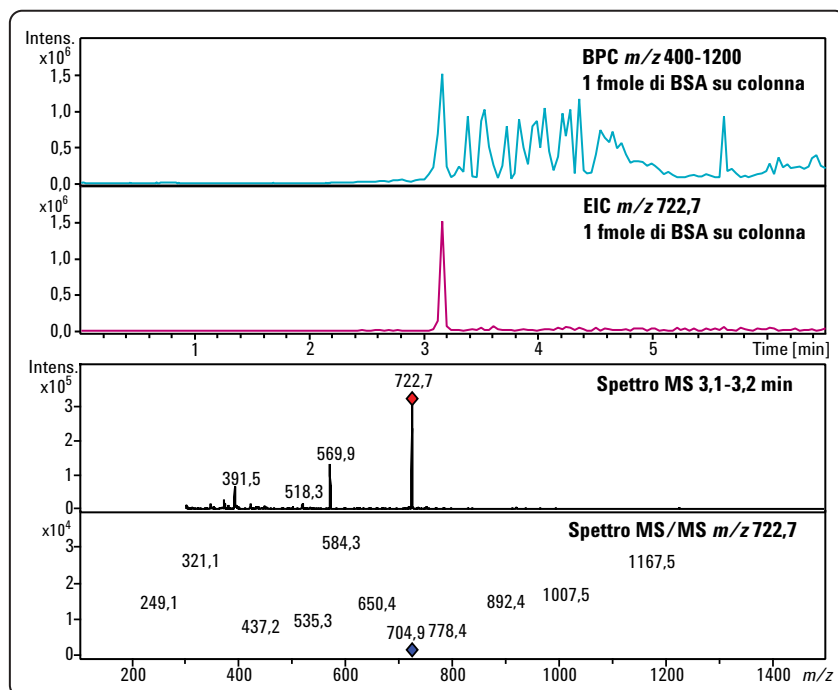
La tecnologia superiore della trappola ionica garantisce ottime prestazioni

Nelle trappole ioniche, l'accuratezza e la risoluzione di massa insieme alla velocità di scansione dipendono notevolmente dalla velocità e dalla tempistica di svuotamento della stessa. La trappola ionica tridimensionale

e multipolare utilizzata nei sistemi brevettati della Serie 6300 crea una risonanza non lineare di ordine più elevato. Questa risonanza non lineare trasferisce molto efficacemente l'energia agli ioni nella trappola, per una espulsione rapida e precisa. Il risultato è una combinazione superiore di intervallo di massa, risoluzione e velocità di scansione. Il blocco di fase



Con le trappole ioniche tridimensionali, non devi sacrificare la velocità di scansione per la risoluzione. Questa analisi di perfluorofosfazi in un ampio campo di massa da 200 a 2200 m/z , eseguita con un sistema 6320 Trap, dimostra una risoluzione eccellente a una velocità di scansione molto elevata, 8.100 u/s.



L'analisi di una femtomole di prodotti della digestione di BSA in colonna tramite 6330 Trap mostra una sensibilità eccezionale.

brevettato controlla con accuratezza l'uscita degli ioni, permettendo un'elevata riproducibilità da scansione a scansione e aumentando la qualità dei risultati.

Il modo migliore per aumentare la capacità e la sensibilità della trappola

La capacità della trappola ha un impatto diretto sulla sensibilità. Alcuni produttori hanno adottato la geometria bidimensionale della trappola ionica come modo più semplice per aumentare la capacità della trappola stessa. Tuttavia, l'impiego di trappole ioniche bidimensionali compromette altri importanti parametri operativi come la velocità di scansione e la risoluzione di massa. Inoltre, per una sensibilità ottimale, le trappole ioniche bidimensionali richiedono l'impiego di due rivelatori. Il doppio rivelatore può diminuire l'affidabilità e aumentare la necessità di manutenzione.

Agilent ha aumentato la capacità delle trappole ioniche tridimensionali della Serie 6300 ottimizzando accuratamente la geometria, i materiali, i processi produttivi e i parametri operativi dello strumento. Il risultato è una capacità elevata con i tipici vantaggi collegati alla velocità di scansione e alla risoluzione delle trappole ioniche tridimensionali.

La dissociazione a trasferimento elettronico ETD migliora la copertura delle sequenze peptidiche e la localizzazione di PTM

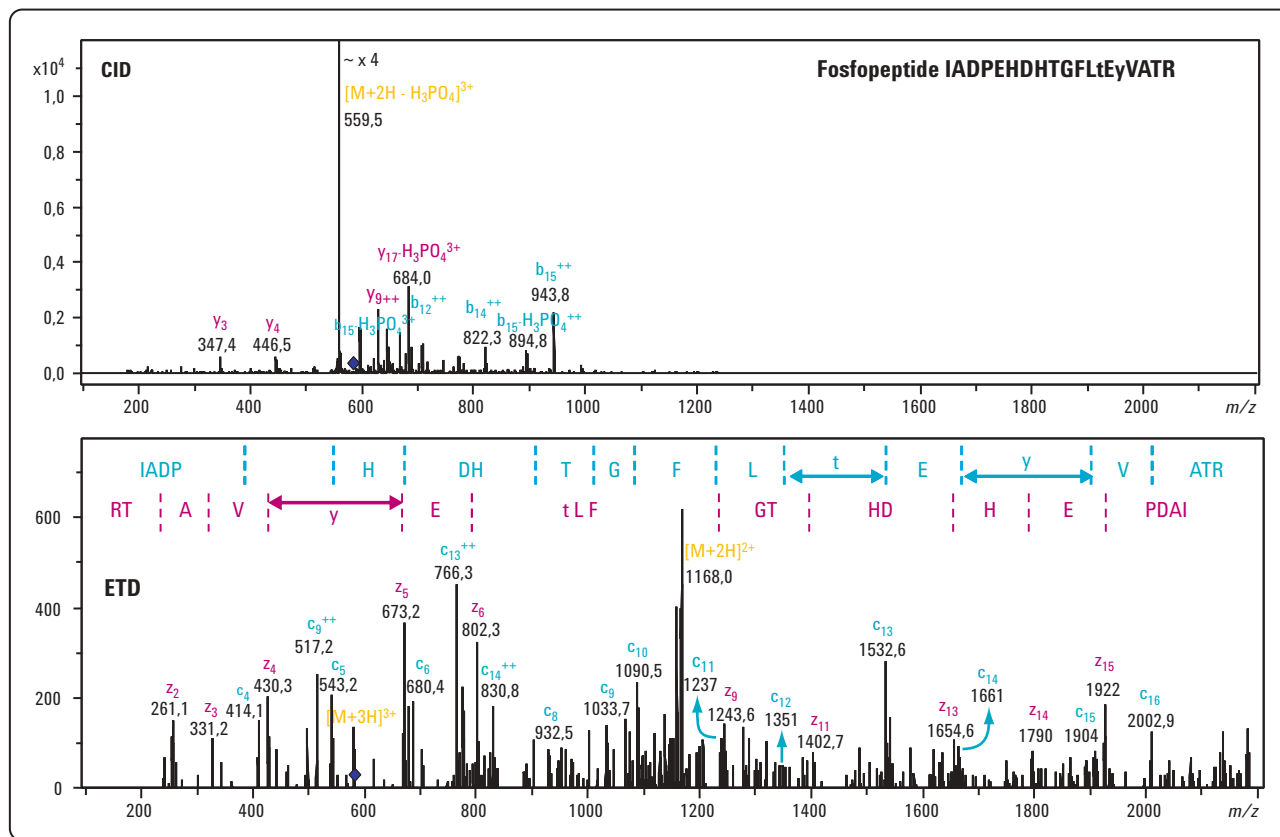
Il sistema LC/MS Agilent Ion Trap 6340 non è dotato solo della frammentazione CID standard, ma anche di un'altra tecnica chiamata dissociazione a trasferimento elettronico (ETD) che è in grado di potenziare l'analisi di peptidi. L'ETD produce principalmente ioni delle serie c- e z-. L'ETD normalmente fornisce una frammentazione più uniforme di un peptide rispetto alla CID e di conseguenza una maggiore copertura della sequenza. Questa maggiore copertura della sequenza migliora l'identificazione delle proteine, sia tramite la ricerca nei database che mediante la sequenziazione "de novo".

Inoltre, con l'ETD, le modificazioni post traslazionali come la fosforilazione o la glicosilazione, durante la frammentazione rimangono attaccate ai loro amminoacidi. Questo consente di determinare più facilmente la posizione specifica della modifica.

Il sistema 6340 acquisisce sia spettri CID o ETD, in base ai requisiti della tua applicazione. È inoltre in grado di passare alternativamente dalla frammentazione CID alla frammentazione ETD da una scansione all'altra, per fornire il quadro più completo possibile dell'identità della proteina e della precisa localizzazione delle modificazioni chimiche. È disponibile una modalità di acquisizione dei dati speciale in grado di effettuare il riaccumulo e l'ETD automaticamente quando vengono rilevate perdite di frammenti neutri specificate dall'utente.

Ulteriori alternative di frammentazione

La dissociazione a eccitazione veloce è una nuova modalità operativa della CID. Elimina il "cut off di un terzo" associato agli spettri CID della trappola ionica tradizionale. Questo consente l'intrappolamento degli ioni prodotto anche a bassi valori di massa necessari per applicazioni come marcamento isotopico iTRAQ. Agilent ha in programma l'introduzione nella Serie 6300 della dissociazione a eccitazione veloce nel corso del 2007.



Spettri MS/MS CID e ETD del fosfopeptide IADPEHDHTGFLtEyVATR da chinasi extracellulare segnale-dipendente ricombinante (ERK1). Lo spettro CID mostra una certa frammentazione, ma lo ione dominante proviene dalla perdita di acido fosforico. Lo spettro ETD mostra invece le serie c- e z- quasi complete. Nello spettro ETD, le posizioni delle fosforilazioni possono essere identificate direttamente dallo stesso.

Le diverse sorgenti ioniche espandono la versatilità della trappola

La versatilità dei sistemi LC/MS Agilent Ion Trap Serie 6300 è potenziata dall'ampia scelta di sorgenti ioniche all'avanguardia. Le sorgenti disponibili sono:

- Electrospray (ESI) con flusso standard, capillare (microlitri) e nanolitri
- Ionizzazione chimica a pressione atmosferica (APCI)



Sorgente di ionizzazione electrospray con nebulizzazione ortogonale e sistema di desolvatazione in controflusso a elevata capacità.



Sorgente MALDI con focalizzazione dinamica pulsata per sensibilità e robustezza senza paragoni

- Multimode con ESI e APCI simultanei
- Fotoionizzazione a pressione atmosferica (APPI)
- MALDI a pressione atmosferica con focalizzazione dinamica pulsata

Tutte le sorgenti LC/MS includono la tecnologia di nebulizzazione ortogonale brevettata da Agilent, che elimina la necessità di aggiustamento x, y e z e mantiene più puliti il capillare e l'ottica ionica. Inoltre tutte le sorgenti includono un sistema di desolvatazione in controflusso a elevata capacità che migliora la qualità, la sensibilità e la riproducibilità spettrale, riducendo i cluster di solvente e gli addotti con la fase mobile. La combinazione di spray ortogonale e gas di desolvatazione ad alta capacità rende le sorgenti ioniche Agilent altamente tolleranti nei confronti di componenti non volatili.



La sorgente multimode può raddoppiare la produttività

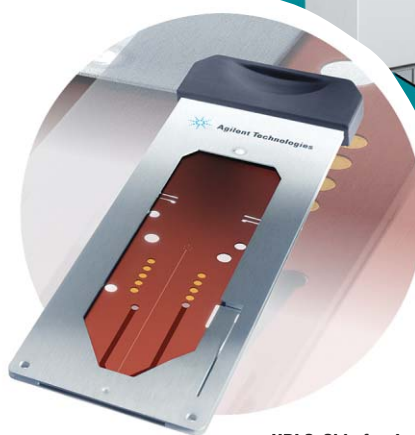
Separazioni a nanoflussi, semplici e riproducibili

I rivoluzionari sistemi HPLC-Chip Agilent integrano perfettamente l'arricchimento del campione e le colonne per la separazione di un sistema nano LC, con le complesse connessioni e il nebulizzatore utilizzati nella spettrometria di massa electrospray. Il risultato è un chip leggermente più grande di un vetrino da microscopio che fornisce una risoluzione cromatografica eccezionale e migliora la sensibilità dell'MS. I sistemi HPLC-Chip sono molto più affidabili e facili da utilizzare delle nanocolonne convenzionali. Questi dispositivi sono disponibili sia per applicazioni relative a molecole di grandi dimensioni che per applicazioni dedicate a molecole a basso peso molecolare.

L'interfaccia HPLC-Chip Cube MS incorpora in dimensioni ridotte, i meccanismi e gli elementi di una sorgente ionica electrospray normale. Automatizza la gestione, il posizionamento e le connessioni del chip, assicurando le massime prestazioni con il minimo sforzo.



L'interfaccia HPLC-Chip Cube MS massimizza sensibilità e accessibilità



HPLC-Chip fornisce prestazioni cromatografiche e facilità d'uso eccellenti

L'acquisizione intelligente dei dati assicura risultati di alta qualità

La capacità di acquisire livelli multipli di dati MS in una singola analisi è uno dei molteplici vantaggi della trappola ionica. La sfida non è semplicemente quella di raccogliere i dati, ma di farlo in maniera intelligente, acquisendo i dati migliori e più rappresentativi con ogni singola scansione. I sistemi LC/MS Ion Trap Serie 6300 presentano un'ampia scelta di funzioni di acquisizione per ottimizzare la raccolta dei dati di ogni campione.

Acquisizione data-dependent completamente automatica

Tutti gli strumenti LC/MS Ion Trap della Serie 6300, sono in grado di eseguire fino a 5 stadi (MS⁵) di acquisizione dei dati MS/MS, completamente automatica. Il sofisticato

software della Serie 6300 comprende un'ampia gamma di funzioni di acquisizione statica e dinamica che ti consentono di massimizzare la quantità di dati utili acquisiti. Per semplicità e convenienza, tutti i dati MS/MS raccolti durante un'analisi vengono memorizzati in un singolo file.

Funzione data-dependent	Vantaggio
N precursori più abbondanti*	Aumenta il numero degli ioni precursore da cui sono acquisiti i dati MS/MS. Particolarmente utile per i composti che coeluiscono.
Esclusione isotopica	Previene l'acquisizione di dati MS/MS dagli isotopi non necessari (¹³ C ecc.)
Elenco d'inclusione statica	Assicura che siano acquisiti i dati da ioni target anche se sono presenti a bassi livelli di concentrazione
Elenco d'esclusione statica	Elimina l'acquisizione dei dati MS/MS da ioni del solvente e da altri componenti presenti nel background
Elenco statico dei preferiti	Assicura che i dati siano acquisiti da ioni target, se presenti, ma consente l'acquisizione dei dati da altri ioni, se gli ioni target non sono presenti
Selezione dello stato di carica preferito	Assicura la selezione degli ioni di peptidi a doppia carica per una maggiore qualità dei dati MS/MS CID e degli ioni di peptidi con carica maggiore di due, per una qualità superiore dei dati MS/MS ETD
Esclusione attiva - ripetizione del conteggio	Aumenta la quantità dei dati specifici acquisiti, impedendo l'acquisizione di dati MS/MS provenienti dallo stesso ione per un numero di volte superiore a quello specificato dall'utente.
Esclusione attiva - tempo d'esclusione	Rimuove gli ioni dall'elenco di esclusione attiva dopo un numero di volte specificato dall'utente, per assicurare la riacquisizione se uno ione appare in più di un picco cromatografico
Soglia - assoluta*	Assicura che i dati siano acquisiti solo dagli ioni con un'abbondanza specificata dall'utente
Soglia - relativa*	Assicura che i dati siano acquisiti solo da ioni con un'abbondanza specificata dall'utente, relativa allo ione principale presente in una scansione MS
AutoMS ³ † dipendente dalla perdita di frammenti neutri	Migliora l'identificazione di PTM tramite l'esecuzione del MS ³ su N ioni prodotto con maggiore abbondanza che mostrino perdite di frammenti neutri dai loro precursori specificate dall'utente
Pseudo-MS ⁿ ‡ dipendente dalla perdita di frammenti neutri	Migliora l'identificazione dei PTM mediante la frammentazione degli ioni prodotto con maggiore abbondanza che corrispondono alle perdite di frammenti neutri specificate dall'utente dai loro precursori.
Stable isotope labeling experiments (SILE)†	Fornisce la rivelazione e frammentazione delle coppie SILE negli esperimenti di quantificazione delle proteine che coinvolgono ICAT, SILAC, ¹⁸ O/ ¹⁶ O, ICPL e altre strategie di marcatura isotopica
ETD‡ dipendente dalla perdita di frammenti neutri	Migliora la determinazione di siti di PTM mediante il riaccumulo del precursore e l'esecuzione della frammentazione ETD quando vengono rivelate perdite di frammenti neutri specificate dall'utente

* Può essere impostato separatamente per MS >2

† Disponibile solo sui modelli 6330 e 6340

‡ Disponibile solo sul modello 6340

Modalità con massima risoluzione per dati di qualità

Utilizzando i parametri di acquisizione data-dependent, le trappole ioniche della Serie 6300 sono in grado di eseguire scansioni alla massima risoluzione in una finestra di massa, attorno a ogni ione selezionato. Il risultato è veramente eccezionale: dati di qualità molto elevata – i picchi sono spesso risolti alla linea di base – da ioni ancora più specifici. Puoi utilizzare la modalità di massima risoluzione sia per le analisi MS che per le analisi MS/MS.

Modalità di scansione dei peptidi per una migliore identificazione delle proteine

La modalità di scansione dei peptidi utilizza la modalità con risoluzione potenziata durante l' MS^1 per una determinazione più accurata delle cariche +1, +2 e +3 degli ioni peptidici e utilizza la modalità ultrascan più veloce in MS^2 e oltre, per accorciare i tempi di ciclo. Il risultato finale è che potrai identificare più proteine in digeriti proteici complessi

Commutazione veloce della polarità per una maggiore produttività

La possibilità di acquisire dati complementari di ionizzazione positiva e negativa in una singola analisi ti può fare risparmiare tempo e campione. La commutazione veloce della polarità della Serie 6300 consente di acquisire un numero maggiore di scansioni durante un picco, per una migliore qualità e sensibilità.

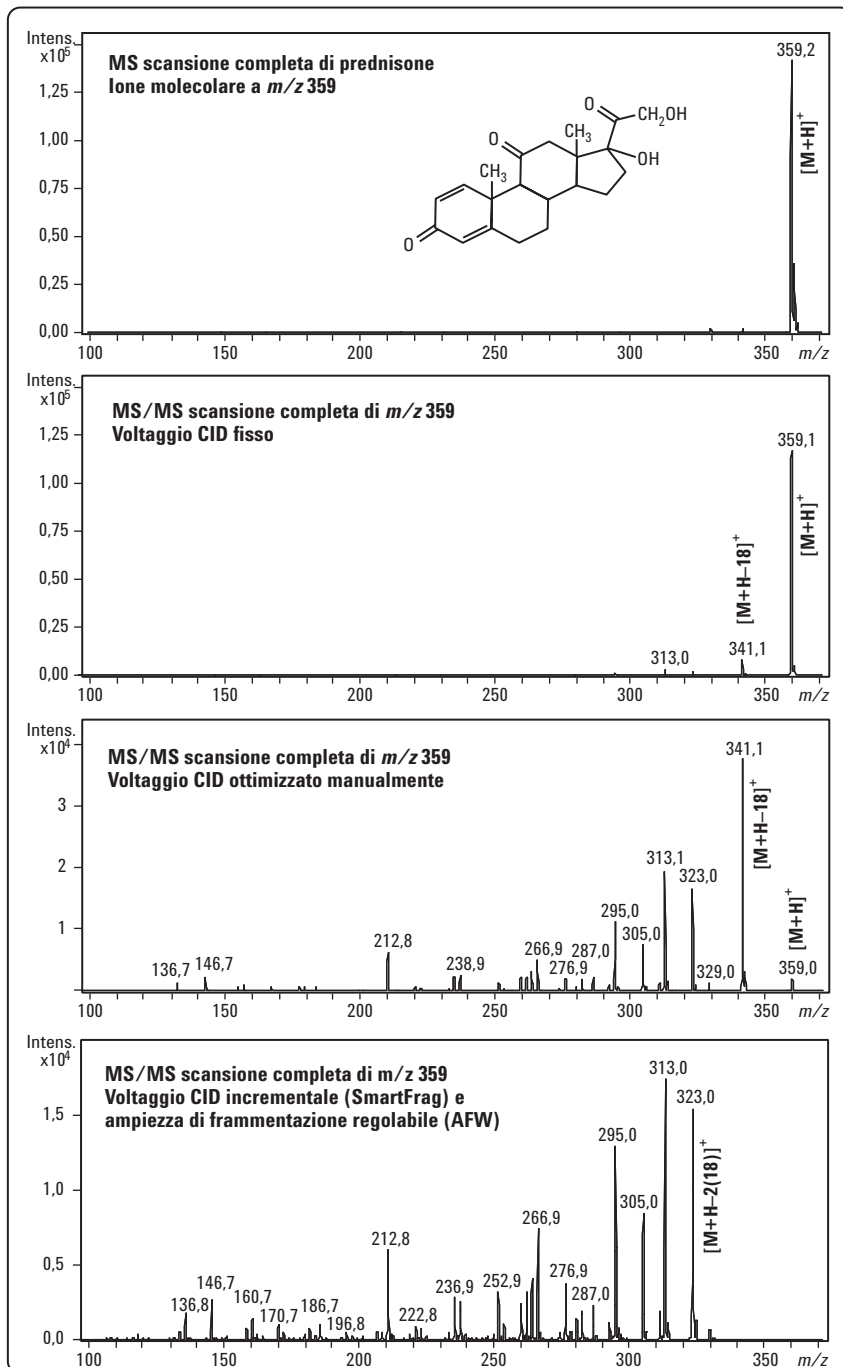
L'impostazione smart dei parametri fornisce eccellenti risultati anche a tecnici non esperti

Per semplificare le operazioni, il software della trappola ionica è dotato della modalità "smart". Basato su semplici informazioni, come la massa target, la stabilità del composto e la distribuzione ionica attesa e utilizzando un feedback automatico per la valutazione in tempo reale dei dati spettrali, il software è in grado di determinare istantaneamente le impostazioni ottimali della trappola ionica. Manterrai invece il controllo totale e indipendente sulle impostazioni della sorgente ionica, per la completa compatibilità con i metodi LC.

Dati MS/MS migliori tramite l'impostazione dell'energia di collisione SmartFrag

L'ottenimento della frammentazione CID ottimale richiede normalmente una ottimizzazione manuale lunga, tediosa e specifica per ogni campione. Il dispositivo di incremento dell'energia di collisione SmartFrag e l'ampiezza di frammentazione modificabile (AFW), assicurano che ogni ione precursore riceva automaticamente esattamente l'energia ottimale per la frammentazione. Il risultato è la generazione di una maggiore quantità di ioni e maggiori informazioni strutturali con minore sforzo.

Lo SmartFrag automatico per l'incremento del voltaggio della CID e l'ampiezza di frammentazione modificabile (AFW) forniscono spettri MS/MS più ricchi ed eliminano la necessità di effettuare le lunghe operazioni di ottimizzazione manuale del voltaggio della CID.



Strumenti software per ottenere il massimo dai tuoi dati

Prestazioni dello strumento sensibili e ripetibili e dati di alta qualità sono necessari, ma non sufficienti, per raggiungere i tuoi obiettivi analitici. Occorre avere a disposizione gli strumenti software adatti per trasformare dei buoni dati in informazioni utili. Agilent offre un'ampia gamma di potenti strumenti software per aiutarti a trasformare i tuoi dati MSⁿ in utili risposte.

Navigazione dei risultati semplificata

Le analisi MSⁿ automatiche possono generare enormi quantità di dati. Il software del sistema LC/MS Ion Trap Agilent Serie 6300 semplifica la navigazione memorizzando tutti i dati di un'analisi in un singolo file. Una comoda struttura gerarchica ad albero consente la facile navigazione e localizzazione delle informazioni di cui hai bisogno. Filtri speciali ti consentono di estrarre velocemente sottoinsiemi specifici di dati.

Ricerca automatica dei composti

Le funzioni Find Compounds forniscono un potente mezzo, basato sugli analiti di interesse, per la ricerca e la navigazione tra dati provenienti da esperimenti LC/MSⁿ complessi. Le funzioni Find Compounds sono in grado di

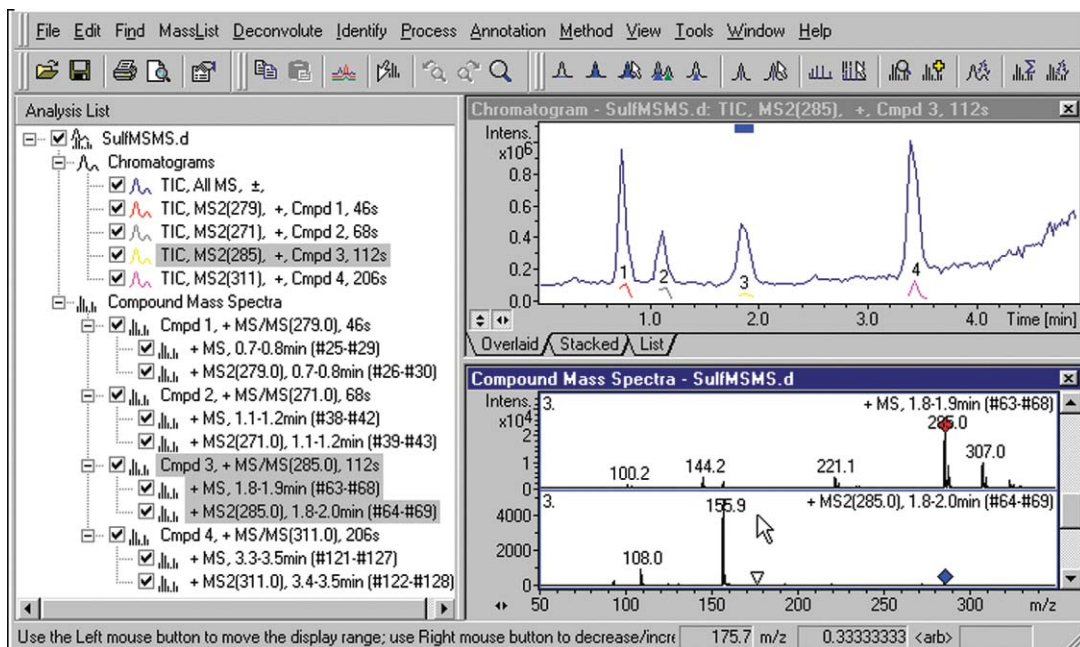
- Localizzare tutti gli specifici esperimenti MSⁿ
- Generare elenchi dei composti e cromatogrammi ionici totali MS² per ogni specifico ione precursore MS

- Estrarre, mediare e organizzare gerarchicamente tutti gli spettri MS e MSⁿ correlati

Sono disponibili anche funzioni per generare automaticamente spettri di massa mediati per tutti i picchi cromatografici integrati in esperimenti MS o MSⁿ manuale.

I risultati possono essere rielaborati, stampati e salvati per l'archiviazione o ulteriori analisi successive.

La struttura gerarchica ad albero rende più semplice trovare esattamente i dati ricercati

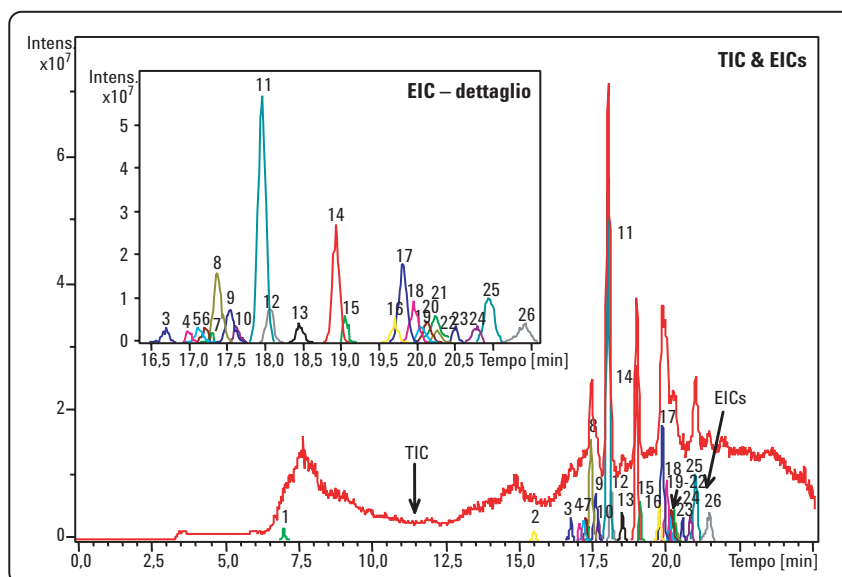


L'identificazione automatica del composto velocizza l'analisi e aumenta la produttività

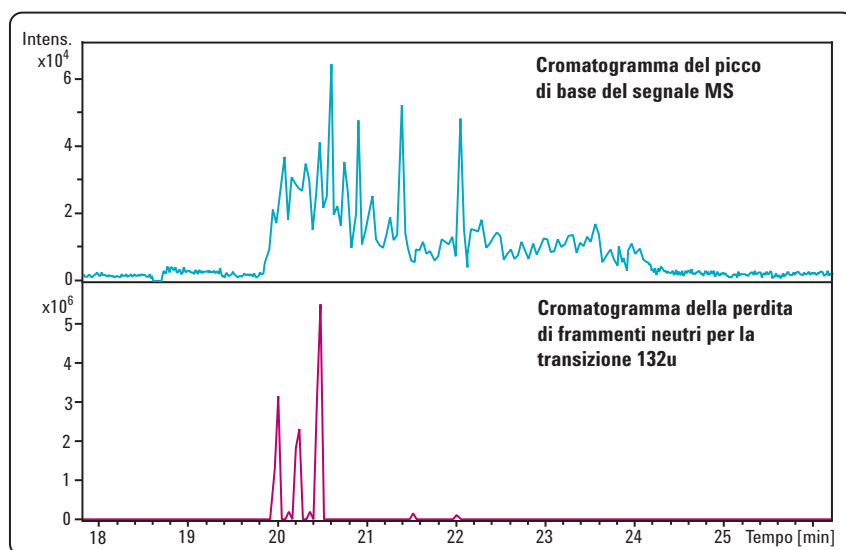
Il software Dissect automatizza l'identificazione dei componenti a più bassa concentrazione in campioni complessi

I componenti presenti a livello di tracce in campioni biologici sono difficili da rivelare nei cromatogrammi ionici totali (TIC) LC/MS perché le interferenze endogene producono significativi segnali di fondo. L'estrazione di segnali a livello di tracce, spesso richiede lunghe analisi dei dati e inoltre è complicata da coeluzioni, formazione di addotti e interferenze della matrice.

Il programma opzionale Dissect automatizza l'individuazione di componenti in tracce in dati complessi. Per prima cosa genera e integra i cromatogrammi ionici estratti (EIC) per ogni massa e decide – sulla base di simmetria, larghezza e altri fattori – quali sono i picchi cromatografici validi. Successivamente il programma applica criteri di fuzzy logic e altri, per eliminare le interferenze e raggruppa i picchi correlati provenienti dallo stesso composto. Infine, Dissect ottiene spettri di massa puliti per ogni composto.



Nell'analisi di un campione di fegato di topo, il software Dissect ha localizzato 26 metaboliti di un farmaco antagonista in meno di un minuto. I risultati possono essere confrontati con quelli ottenuti con un'ora di laboriosa identificazione manuale. Nonostante la presenza di molti composti coeluenti, lo spettro di massa ricostruito dal software Dissect è risultato pulito.



La scansione completa e la successiva analisi della perdita di frammenti neutri, consentono l'identificazione delle antocianine che sono state O-glicosilate con arabinosio.

L'analisi della perdita di frammenti neutri identifica gli elementi comuni a diversi analiti

L'analisi della perdita di frammenti neutri è un potente strumento per l'identificazione di elementi strutturali comuni in diversi analiti. Un vantaggio inerente alla trappola ionica MS/MS è costituito dai dati della scansione completa, che consentono di effettuare l'analisi della perdita di frammenti neutri successivamente all'acquisizione; non è necessario sapere anticipatamente le perdite di frammenti neutri. Il software del sistema LC/MS Ion Trap Agilent Serie 6300 contiene gli strumenti per effettuare con facilità l'analisi della perdita di frammenti neutri. Le funzioni correlate come l'incremento dell'energia di collisione, assicurano la frammentazione ottimale, in modo che ci siano notevoli quantità di ioni prodotto da analizzare.

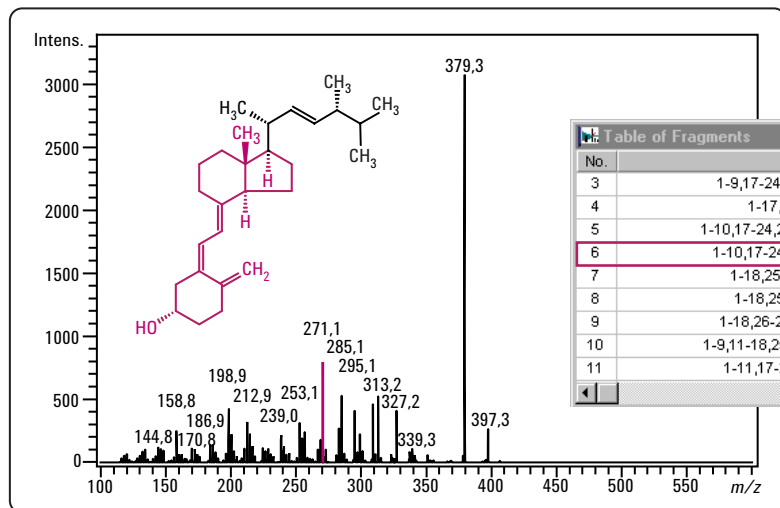
Quantificazione più semplice e veloce

Il potente software QuantAnalysis rende la quantificazione più semplice e veloce. Il software è costituito da tre pratiche videate – tabella di lavoro, cromatogramma/spettro e curva di calibrazione – che possono essere visualizzate in una singola finestra o a schermate sovrapposte. La tabella di lavoro è un foglio elettronico in cui puoi impostare la quantificazione e visualizzare i risultati. Può essere personalizzata in modo da visualizzare solo i dati essenziali e queste personalizzazioni possono essere salvate per usi futuri. Le tre videate sono collegate dinamicamente; una modifica effettuata in una pagina si riflette automaticamente sulle altre. Per esempio, selezionando una curva di taratura diversa per la curva di calibrazione, si provoca il ricalcolo automatico delle concentrazioni.

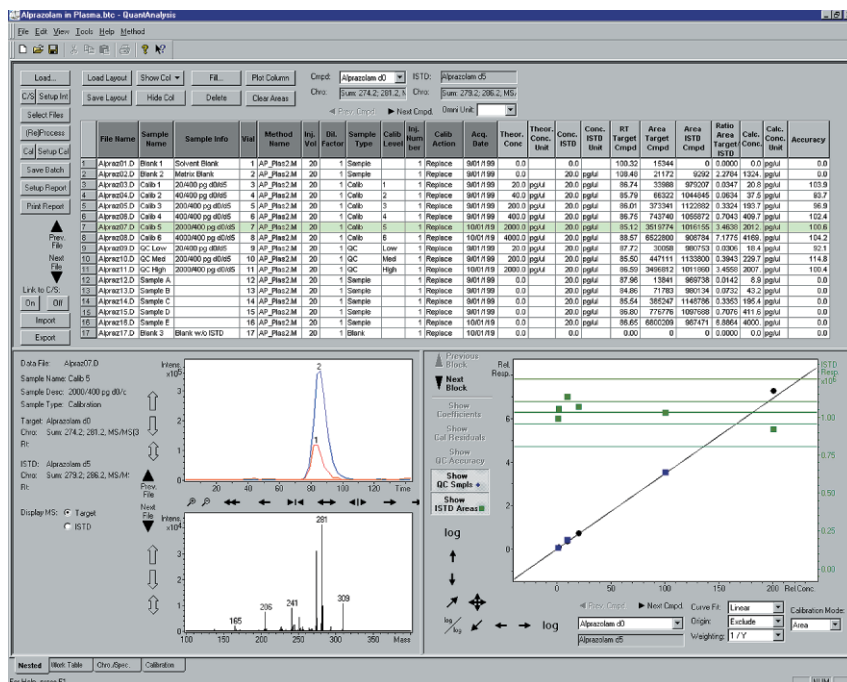
Estrazione del maggior numero di informazioni da ogni campione

Il software ACD/SpecManager, prodotto dalla Advanced Chemistry Development, è in grado di aiutarti nell'estrazione del massimo numero d'informazioni dai tuoi dati MS:

- Algoritmo di rivelazione degli analiti per ridurre il rumore di fondo
- ChemSketch, lo strumento di riferimento per il disegno delle strutture chimiche
- Strumenti per semplificare la somma e sottrazione di spettri
- Strumenti per memorizzare i cromatogrammi e gli spettri processati e generare report
- Strumenti di correlazione per fornire assistenza nell'interpretazione dei



Con il software ACD/SpecManager, puoi realizzare dei database di correlazione tra le strutture e i tuoi dati MS. Puoi confrontare queste tavole di correlazione con spettri sconosciuti.



La tabella di lavoro (in alto), il cromatogramma/spettro (in basso a sinistra) e la curva di calibrazione (in basso a destra) sono collegati dinamicamente tra loro – una modifica effettuata in una delle tabelle si riflette automaticamente sulle altre

- risultati MS mediante strutture di correlazione e spettri di massa
- Un collegamento diretto per trasferire facilmente gli spettri di massa dal software della trappola ionica al software ACD/SpecManager

Il software SpecManager fornisce anche supporto per l'integrazione dei dati multispettrali provenienti da piattaforme multi-tecnica o multi-vendor, che comprendono strumenti come NMR, MS, UV-Vis e IR.

Editor per report personalizzati

Un editor per report personalizzati consente di realizzare velocemente e con semplicità, i report nell'esatto formato grafico che desideri.

Automazione progettata dall'utente

Il linguaggio Visual Basic fornisce opportunità praticamente illimitate per l'automazione progettata dall'utente. Puoi fare in modo che i tuoi metodi richiama degli script per l'automazione dell'analisi dei dati e del reporting. Questi script possono contare su un'ampia gamma di comandi specifici per l'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

Il software Spectrum Mill facilita la proteomica ad alta produttività

Il software Spectrum Mill ti aiuta a identificare le proteine in base ai dati MS e MS/MS, tramite la ricerca in database o la sequenziazione *de novo*.

L'estrazione spettrale intelligente velocizza l'identificazione delle proteine

Il software Spectrum Mill identifica ed esclude gli spettri relativi al rumore e gli spettri di scarsa qualità prima di effettuare la ricerca nei database. In questo modo la velocità di ricerca viene notevolmente incrementata. Questo inoltre riduce il numero di falsi positivi.

Le numerose opzioni di ricerca per l'identificazione delle proteine permettono maggiore flessibilità

Il programma per la ricerca MS/MS comprende sia la modalità d'identificazione per i peptidi non modificati che la modalità per le modifiche PTI. Il programma per peptide mass fingerprinting (PMF) effettua un lavoro eccezionale nell'identificazione delle proteine dagli spettri di massa.

Supporto per dati ETD

Il software Spectrum Mill supporta sia gli spettri CID standard che gli spettri generati dall'ETD.

La validazione automatica e manuale dei risultati ne aumenta l'affidabilità

Il software Spectrum Mill valida velocemente e automaticamente i risultati. Puoi anche rielaborarli interattivamente e confrontarli con gli spettri MS/MS reali. Gli spettri non validati possono essere interpretati nuovamente utilizzando parametri o database alternativi.

Interpretazione spettrale de novo

L'algoritmo di sequenziazione *de novo* genera una lista in ordine di probabilità. Scarta le soluzioni non realistiche e compensa i tipici problemi spettrali come il rumore di fondo e la frammentazione incompleta.

Informazioni quantitative e qualitative

Il software Spectrum Mill determina automaticamente le differenze nell'abbondanza relativa delle proteine trovate. Inoltre supporta ICAT, iTRAQ, e altre tecnologie di marcatura isotopica.

Dati complessi resi accessibili

Il software Spectrum Mill riassume e mette in correlazione i risultati in modo da rendere accessibili le informazioni anche agli utenti non esperti della massa. Puoi confrontare grandi serie di dati provenienti da diversi esperimenti e riassumere i risultati a livello delle proteine.

Compatibilità con i dati provenienti da strumenti di diversi produttori

Sono disponibili moduli aggiuntivi che consentono al software Spectrum Mill di processare formati di dati non Agilent:

- .RAW (Thermo Finnigan)
- .wiff (SCIEX LC/MS)
- .pkl (Waters e altri)

MASCAT semplifica le ricerche nel database Mascot delle proteine

Per i ricercatori nel settore delle proteine, che hanno standardizzato il loro lavoro sul programma di ricerca del database Mascot, il software per la Serie 6300 mette a disposizione il programma MASCAT. MASCAT concatena il formato generico dei file Mascot (*.mgf), fornendo un modo per consolidare i risultati provenienti da analisi LC/MS/MS bidimensionali multiple, nella ricerca in un database speciale per le proteine.

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	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)RTGVGPGVPGEVEMVKGQPFVGPGR(Y)		899.39	2694.367	
6	CID	18.89	96.9	3.38e+006	(R)DLKPSNLLINTTCDLK(I)	C:Carbamidomethylation	923.44	1844.979	
7	CID	18.85	96.5	1.37e+006	(R)LKELIFQETAR(F)		674.38	1347.763	
8	CID	17.13	91.8	7.22e+006	(R)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHVR(K)		870.42	2608.214	
9	ETD	16.70	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)YTQLQYIGEGAYGMVSSAYDHVR(K)		912.49	2736.309	
14	CID	14.26	90.8	5.52e+005	(K)SDSKALDLLDR(M)		616.84	1232.648	

Il software Spectrum Mill semplifica e accelera l'identificazione delle proteine e la localizzazione delle modificazioni post traslazionali

Specifiche

Accuratezza di massa (Tutti i modelli)

$\pm 0,2$ u all'interno dell'intervallo di massa standard con risoluzione normale e in modalità di scansione completa.

Stabilità dell'asse di massa (Tutti i modelli)

Entro $\pm 0,2$ u del valore calibrato osservato per un periodo di oltre 8 ore, con intervallo di massa standard alla normale risoluzione e in modalità di scansione completa, con ICC appropriato.

Selezione del precursore monoisotopico (Tutti i modelli)

La selezione del precursore monoisotopico è possibile in tutto l'intervallo di massa (m/z 50 - 2200) alla temperatura ambiente di $21\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 3\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($70\text{ }^{\circ}\text{F} \pm 6\text{ }^{\circ}\text{F}$).

Intervallo di massa, risoluzione di massa e velocità di scansione

Intervallo di massa m/z	6310		6320, 6330, e 6340	
	Risoluzione FWHM (u)	Velocità di scansione (u/s)	Risoluzione FWHM (u)	Velocità di scansione (u/s)
50 - 2200	$\leq 0,6$	13.000	$\leq 0,6$	26.000
	$\leq 0,45$	5.500	$\leq 0,35$	8.100
	$\leq 0,35$	1.650	$\leq 0,25$	800
200 - 4000	$\approx 3 - 4$	27.000	≤ 3	27.000

Commutazione della polarità

Commutazione della polarità, da scansione a scansione, con 1 spettro positivo e 1 spettro negativo in circa 1 secondo per tutti i modelli

Sensibilità

Condizioni

Colonna - ZORBAX Rapid Resolution SB-C18 2,1x30 mm 3,5 micron
Fase mobile - 25% acqua 75% metanolo 5 mM ammonio acetato
Flusso - 400 $\mu\text{l}/\text{min}$
Modalità - MS/MS con scansione completa
MS/MS - transizione dello ione molecolare protonato (m/z 609) alla somma dei due prodotti di ionizzazione più abbondanti
Intervallo di scansione dei prodotti di ionizzazione - m/z 175 - 650
Intervallo di massa - standard (m/z 50 - 2200)
Risoluzione - standard (0,6 u)

	6310	6320	6330	6340
Quantità (reserpina - in colonna)	5 pg	1 pg	250 fg	250 fg
Rapporto segnale-rumore (MS/MS con scansione completa)	$\geq 50:1$	$\geq 50:1$	$\geq 50:1$	$\geq 50:1$

Per ulteriori informazioni

Per saperne di più:

www.agilent.com/chem/iontrap

Acquista online:

www.agilent.com/chem/store

Per trovare l'ufficio Agilent più vicino:

www.agilent.com/chem/contactus

Indirizzo e-mail

info_agilent@agilent.com

Il presente documento deve essere utilizzato esclusivamente per scopi di ricerca. Non utilizzare nelle procedure diagnostiche.

Le informazioni, descrizioni e specifiche presenti in questa pubblicazione possono variare senza preavviso.

Agilent Technologies non è responsabile per eventuali errori contenuti in questa pubblicazione, né per danni incidentali o conseguenti, collegati all'uso di quanto riportato.

© Agilent Technologies, Inc. 2006
Stampato negli USA, 11 Novembre, 2006
5989-5824ITE



Agilent Technologies