



精确质量

MS 和 MS/MS

质量精确性的卓越性能



Agilent 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪(Q-TOF)

Our measure is your success.

产品 | 应用 | 软件 | 服务



Agilent Technologies

四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）的卓越性能

安捷伦科技 6520 四极杆 - 飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）重新定义了四极杆 - 飞行时间串联质谱（Q-TOF）的性能。在 6520 Q-TOF 上有许多创新，如 32 Gbit/秒的数据采集速率、高效离子光学系统、以及对温度稳定的 ADC 飞行时间电子系统等，从而使 6520 兼具质量精确性和分辨率、灵敏度，以及远远超过其它四极杆 - 飞行时间串联质谱（Q-TOF）系统和轨道阱质谱仪谱图的动态范围。针对药物杂质定性、内源性代谢物和蛋白质生物标志物等复杂样品，四极杆 - 飞行时间串联质谱（Q-TOF）提供了您所需要的轮廓普分析、鉴定、表征，甚至定量等各种功能。

强大的功能帮助您应对每个挑战

Agilent 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）为四极杆-飞行时间串联质谱的性能带来革命性：

- 质量精确度为 1-2 ppm MS 和 2-4 ppm MS/MS
- 提高了质量分辨率 - 特别是在低质量数，同时不会影响图谱采集速率
- 柱上灵敏度在高 fg 到低 pg 范围内(即阿托摩尔到几个飞摩尔)
- 图谱动态范围高达 5 个数量级
- 图谱采集速率高达每秒 10 张 MS/MS 图谱
- TOF 质量范围宽 m/z 25-20,000

与许多 Q-TOF 和轨道捕获系统不同的是，6520 具备上述指标并不是通过损失某些性能来提高其它性能。

软件将您的数据转化为答案

四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）配备强大的 MassHunter 工作站软件，包括先进的数据采集和数据分析功能：

- 最新的数据提取和数据挖掘功能
- 分子式确证和分子式生成
- 解卷积和精确的全蛋白质量测定
- 以样品为中心进行定量，并附带一些有用的功能，如批数据快速浏览

必要时，MassHunter 软件还可以配合高级的特殊应用软件包进行扩展，完成以下工作：

- 差异质量表达谱分析，以发现潜在的生物标志物
- 代谢物鉴定和代谢物数据库检索
- 通过数据库检索和 *de novo* 测序进行蛋白质鉴定

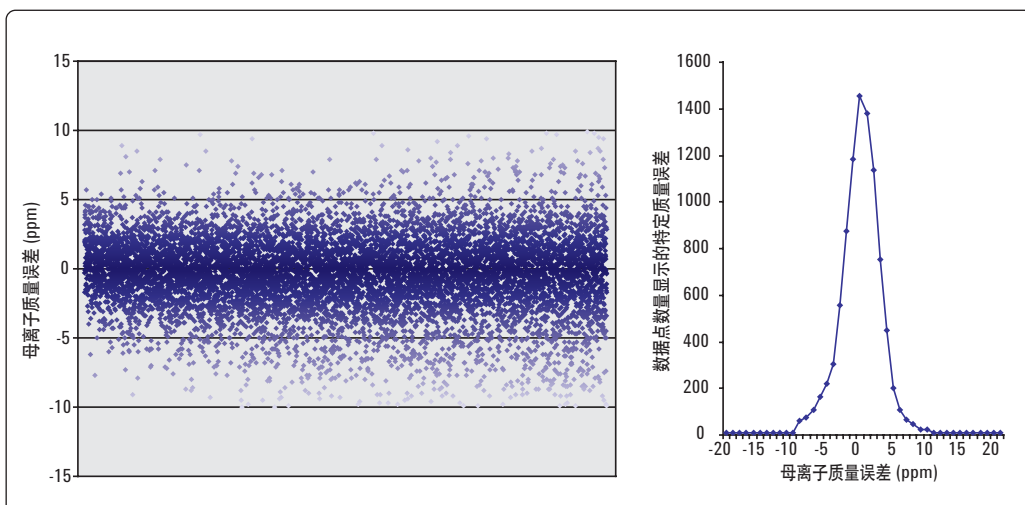
全面的解决方案确保您成功地进行液相色谱 / 质谱分析

安捷伦可为您提供全面的解决方案 - 从样品制备到数据分析 - 将您的样品转化为有价值的答案。

- 创新性的样品制备技术，如游离胶电泳和高丰度血浆蛋白的免疫亲和去除系统
- 行业领先的液相色谱系统，适用于各种流速和应用，还包括革命性的液相色谱-芯片 / 质谱技术
- 无与伦比的离子源选择：ESI、APCI、组合离子源、APPI 及 MALDI
- 服务和支持确保您的四极杆-飞行时间串联质谱（Q-TOF）系统总是处于最佳工作状态
- 技术力量雄厚的应用支持

精确质量测定，更好地鉴定未知化合物和获得更大的可信度

6520 为最高精确度的鉴定提供了无与伦比的四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 质量精确度-通常为 1-2 ppm MS 和 2-4 ppm MS/MS。即使面对最具挑战性的实际样品，它也能提供您所需要的质量精确度，为您的分析结果带来绝对的信心。



与轨道阱质谱不同，四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 可以从只有 2 秒

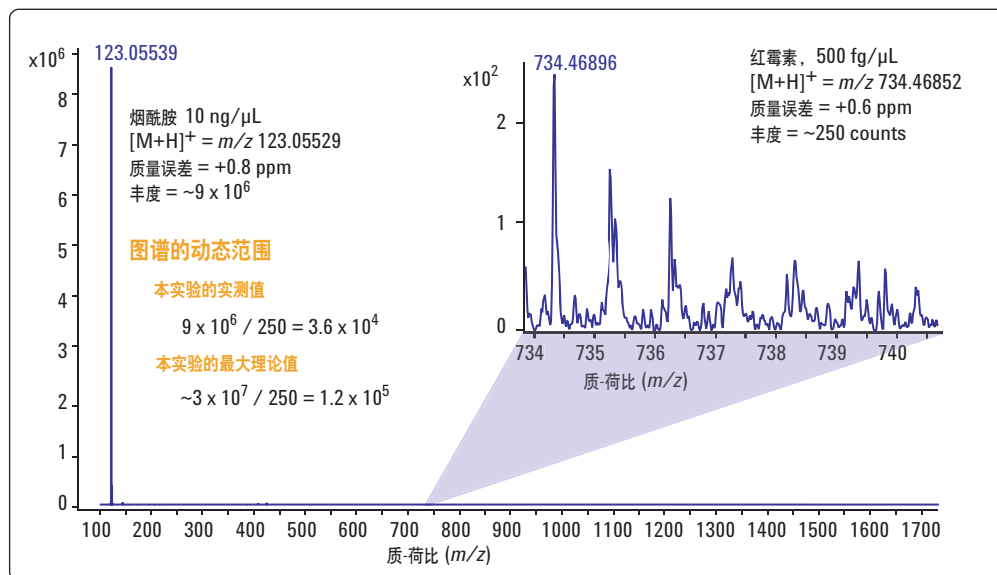
峰宽的峰上获得高质量的 MS MS/MS 图谱，而不会损失质量精确度。这种快速采集功能最大限度地减少或消除了复杂样品数据采集不足的问题。

大肠杆菌样品酶解产生数千个肽片段，其组成和浓度范围非常宽。在这种极具挑战的情况下，采用数据相关采集，用 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 得到了极高的质量精确度，与几千种真实存在的肽相匹配

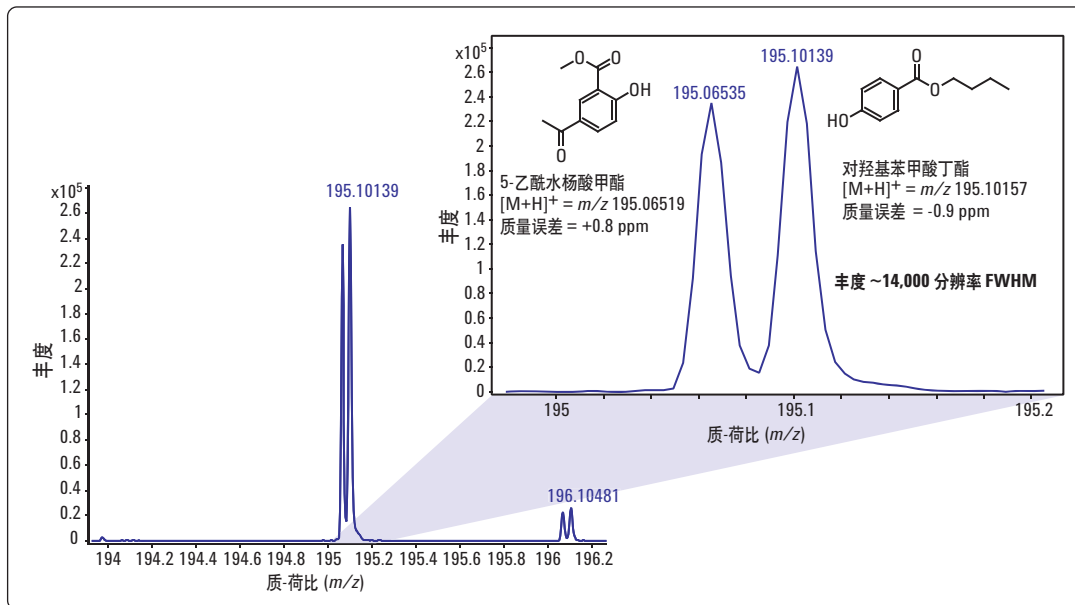
卓越的灵敏度和宽动态范围，可以发现痕量组分

灵敏度和动态范围在应用中都很重要，例如低浓度杂质或低丰度蛋白的鉴定。四极杆-飞行时间串联质谱 (Q-TOF) 在实际实验条件下，柱上灵敏度在高 fg 到低 pg (阿托摩尔到几个飞摩尔)。

同时，6520 的快速数据采集系统具有高达 5 个数量级的动态范围。有利于在较高丰度化合物存在下检测并鉴定低水平化合物。6520 能做到这一点，并不会像其它带 TDC 检测器的 TOF 仪器那样因光束衰减而造成灵敏度损失。动态范围超过了其它四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 和受离子阱电荷容量限制的轨道阱质谱仪。



对含不同浓度化合物的混合物进行分析，显示 6520 的动态范围超过 4 个数量级



6520 轻易地分辨两个质量数都为 195 u 的化合物，其精确质量差只有 0.03638 u

在不影响图谱采集速率的情况下分辨非常相近质量数的能力

6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 系统的特点之一，数据采集速率 32 Gbit/秒，明显提高了质量分辨率-尤其是对较低质量数的离子。6520 卓越的分辨能力减少了感兴趣的质量峰被样品或背景干扰离子掩盖的可能性。用 6520 可以区分具有相同标称质量的低分子量化合物。

与其他依赖于轨道捕获的仪器不同的是，6520 获得其卓越的质量分辨率是以不牺牲数据采集速率为前提的。可以每秒获取 20 张 MS 图谱，或每秒 10 张 MS/MS 图谱，更常见的是，获得许多 MS 和 MS/MS 图谱的组合。更快的图谱采集速率使 6520 可适用于需要进行高分离度快速色谱的高通量应用。

宽质量范围适合复杂蛋白质组样品的分析

6520 的 TOF 质量范围为 m/z 25-20,000，既可以检测低分子量化合物或碎片，又可以检测全蛋白。轨道阱质谱在该质量范围的两端都有局限。它们可能丢失对 *de novo* 测序和 PTM 分析非常关键的碎片数据。也很难测定大的完整蛋白质，如抗体。

帮助您更轻松找到答案的软件

6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 使用安捷伦 MassHunter 工作站软件, 其功能直观而强大, 可进行仪器控制、数据采集、定性和定量数据分析。MassHunter 软件包含独特的数据挖掘功能, 包括强大的分子特征提取和分子式生成运算, 提高了对复杂混合物中各化合物的鉴别水平。

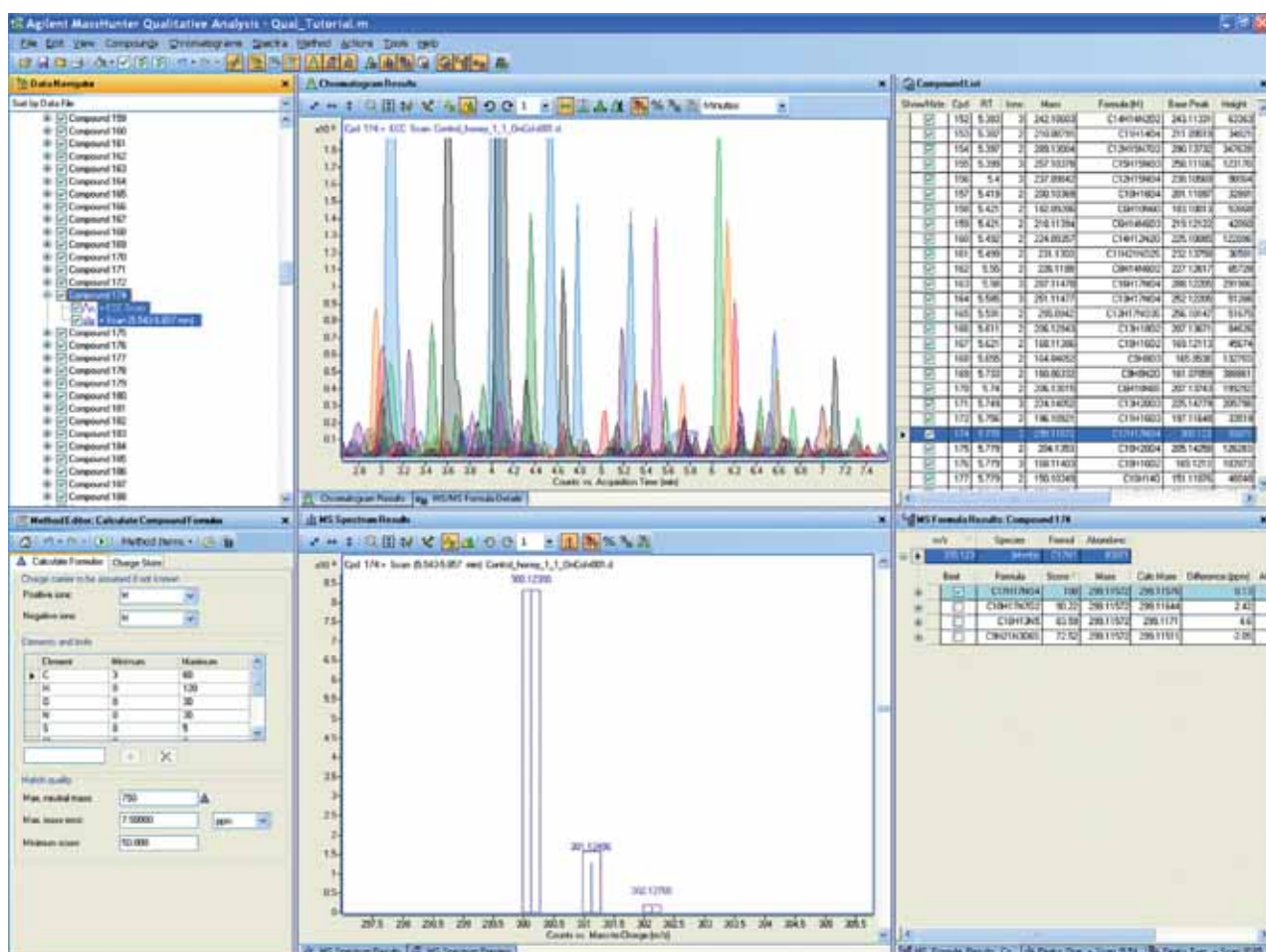
对于蛋白质分析, MassHunter 软件包含了针对多肽和蛋白进行优化的解卷积运算。

MassHunter 软件可通过选择以下特殊应用程序包进行增强:

- **MassHunter 表达谱分析软件** – 快速而轻松地统计出两个样品或两组样品之间的显著差异
- **MassHunter 代谢物鉴定软件** – 自动将原形药物与代谢物的 MS/MS 图谱相关联, 生成分值和彩色标记的结果
- **METLIN 个性化代谢物数据库软件** – 内含 15,000 个内源性代谢物的可检索数据库, 支持代谢组学检索

• **Spectrum Mill 蛋白质组学软件** – 通过数据库检索或 *de novo* 测序快速而准确地鉴定蛋白质, 包含 PTM 分析工具

• **GeneSpring MS 软件** – 提供全方位的强大工具, 进行大量样品的表达谱统计分析和相关数据挖掘



MassHunter 软件的分子特征提取和分子式生成功能简化了复杂样品的分析。对蜂蜜样品的分析表明, 该系统可找出几百种不同水平的组分, 并将数据集集中以利于浏览, 提出与实验数据相符合的可能分子式

更可靠地分析低分子量化合物

安捷伦 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 是分析较低分子量化合物的多功能平台。从代谢物表达谱到药物杂质分析, 从药物代谢物鉴定到目标定量, 精确质量 MS 和 MS/MS 图谱的特异性将为您提供让您有绝对信心的结果。

更快、更有信心地对代谢标志物进行表达谱分析和鉴定

LC/MS 与 GC/MS 方法一起, 可对内源性代谢物进行完整表达谱分析。四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 是一款非常通用的仪器, 既能进行代谢物轮廓分析, 也可以通过表达谱分析鉴定出可能的生物标志物。在代谢组学研究方面, 具有以下功能:

- 提供稳定、可重复的结果, 最大限度地减少了样品重复分析的次数
- 快速图谱采集和卓越的分子特征提取功能, 能发现更多的候选生物标志物
- 可选择数据比较和可视化的良好工具, GeneSpring MS 表达谱分析软件
- 可选择最完整的代谢物数据库, METLIN 个性化代谢物数据库
- 精确质量 MS 和 MS/MS 数据, 提高鉴定的可信度

无与伦比的重复性最大限度地减少了样品需要量

必须分析的样品数量取决于一个变量, 统计学表明其与自然和分析的变异性有关。安捷伦 LC/MS 系统无与伦比的重复性减少了分析变异性, 让您最大限度地减少代谢物表达谱分析过程中必须分析的样品数量。

快速图谱采集以适合更高样品通量并获得更好的数据质量

6520 每秒最多采集 10 张 MS/MS 图谱, 与高通量快速分离色谱相匹配, 并仍能采集到大量高质量数据。

分子特征提取增加了发现代谢物的数量

生物标志物的发现是从样品中尽可能找到更多代谢物开始的。MassHunter 软件独特的分子特征提取运算功能将在您的色谱图中发现化合物, 甚至那些与色谱峰不相关的化合物。

GeneSpring MS 提供了表达谱分析和可视化的良好工具

GeneSpring MS 软件是对多个样品和样品组数据进行表达谱分析的强大解决方案。包括统计分析、数据挖掘和可视化的全面工具。

METLIN 个性化代谢物数据库帮助代谢物鉴定

找到可能的代谢标志物以后, 必须对其进行鉴定。METLIN 个性化代谢物数据库是目前可用的最全面的代谢物数据库, 包含 15,000 多种内源性和外源性代谢物, 以及二肽和三肽。用精确质量 MS 数据检索 METLIN 数据库可以大大减少可能代谢物的数目。METLIN 数据库的拷贝是个性化的, 您可以安全地加入自己所有的化合物, 以便更好地进行检索。

精确质量 MS 和 MS/MS 图谱增加可信度

精确质量质谱母离子数据更有利于进行数据库检索, 精确质量 MS/MS 碎片数据帮助您从逻辑上确证或排除由数据库检索提供的潜在候选化合物。如果在数据库中没有发现潜在生物标志物, 由 6520 提供的精确质量 MS 和 MS/MS 图谱也将成为代谢物鉴定的重要数据。

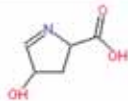
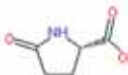
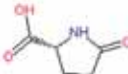
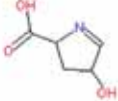
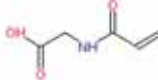
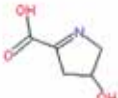
METLIN代谢物数据库

[首页](#) | [关于我们](#) | [代谢物](#) | [MS/MS](#) | [FTMS](#) | [LC/MS](#) | [帮助](#)

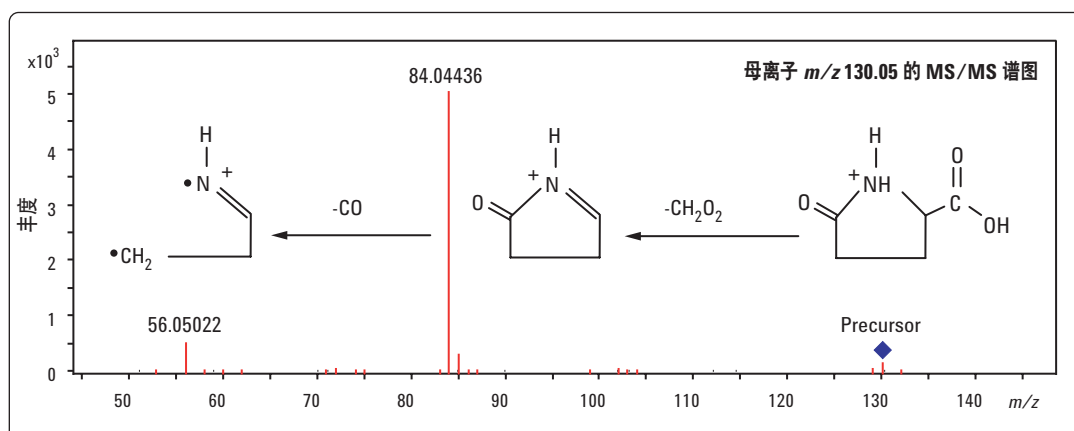
代谢物

(Metabolites 1-6 of 6)

[Change Query](#)

MID	质量数	名 称	分子式	CAS	KEGG	结 构
284	129.0426	1-Pyrroline-5-carboxylic acid, 3-hydroxy-	$C_5H_7NO_3$	22573-88-2		
3251	129.0426	Pyroglutamic acid	$C_5H_7NO_3$	98-79-3	C01879	
5769	129.0426	Pyrrolidonecarboxylic acid	$C_5H_7NO_3$			
6196	129.0426	Pyrroline hydroxycarboxylic acid	$C_5H_7NO_3$			
6343	129.0426	N-Acryloylglycine	$C_5H_7NO_3$			
6564	129.0426	1-Pyrroline-4-hydroxy-2-carboxylate	$C_5H_7NO_3$			

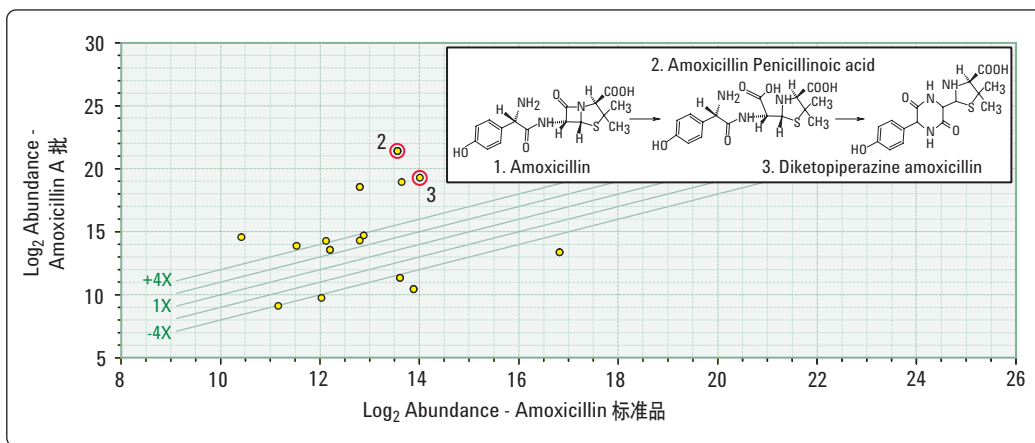
用精确质量数据检索 METLIN 个性化代谢物数据库可以显著减少可能代谢物的数目



从母离子 m/z 130.05E 的 MS/MS 图谱, 推断出与所提出的生物标志物结构相关联的 MS/MS 图谱, 成为代谢标志物鉴定的最后一步

杂质的表达谱分析、 鉴定和定量

如果您要寻找杂质，例如在稳定性研究中寻找降解产物，四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）将提供全功能解决方案。您可以在一台仪器上进行样品表达谱分析、对杂质进行定位并鉴定，甚至可以同时对主成分和杂质进行定量。



用 MassHunter 筛查软件比较 amoxicillin 和 amoxicillin 标准品，发现了两个杂质（降解产物），经实验鉴定为 amoxicillin penicillinoic acid (2) diketopiperazine amoxicillin (3)

- 快速数据采集与快速色谱相匹配，提高分析通量
- 分子特征提取找到更多化合物
- MassHunter 表达谱分析软件更轻松通过统计找出显著性差异
- 精确质量的 MS 和 MS/MS 图谱，让鉴定更轻松、更可信
- 轻松的相对或绝对定量

快速数据采集提高通量

Agilent 1200 系列高分离度快速液相色谱的快速、重现性好的色谱分离，加上 6520 的快速数据采集，缩短了样品分析时间，让您不必牺牲数据质量就能分析大量样品。独特的组合离子源，通过同时采集 ESI 和 APCI 图谱进一步提高效率。

MFE 在查找降解产物中发挥了良好作用

分子特征提取(MFE)不只是用于找到明显的色谱峰，还可以通过分析协变离子鉴定出样品中尽可能多的化合物-即使这些化合物被掩盖在共洗脱峰中。即使是在高浓度主成分化合物存在的情况下，靠 6520 的宽动态范围和灵敏度，您也可以找到低丰度杂质。

软件工具简化了筛查

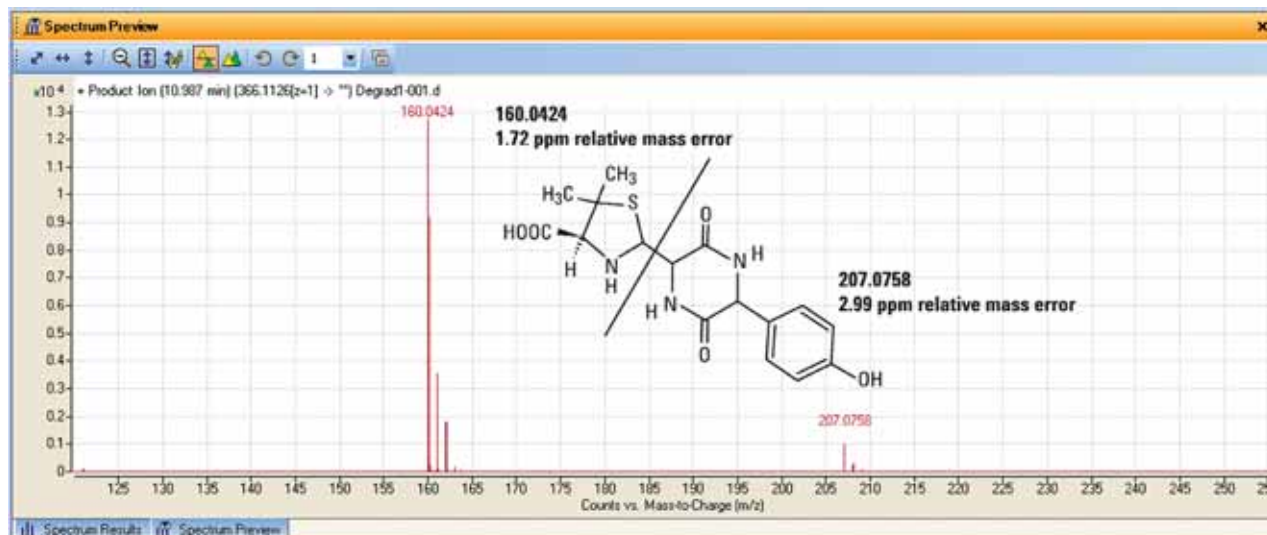
MassHunter 筛查软件为您提供了形象化工具，鉴别出样品之间有统计学意义的差异。它计算出丰度比值，清楚地鉴别出表达差异性。

精确质量 MS 和 MS/MS 数据得到明确的鉴定结果

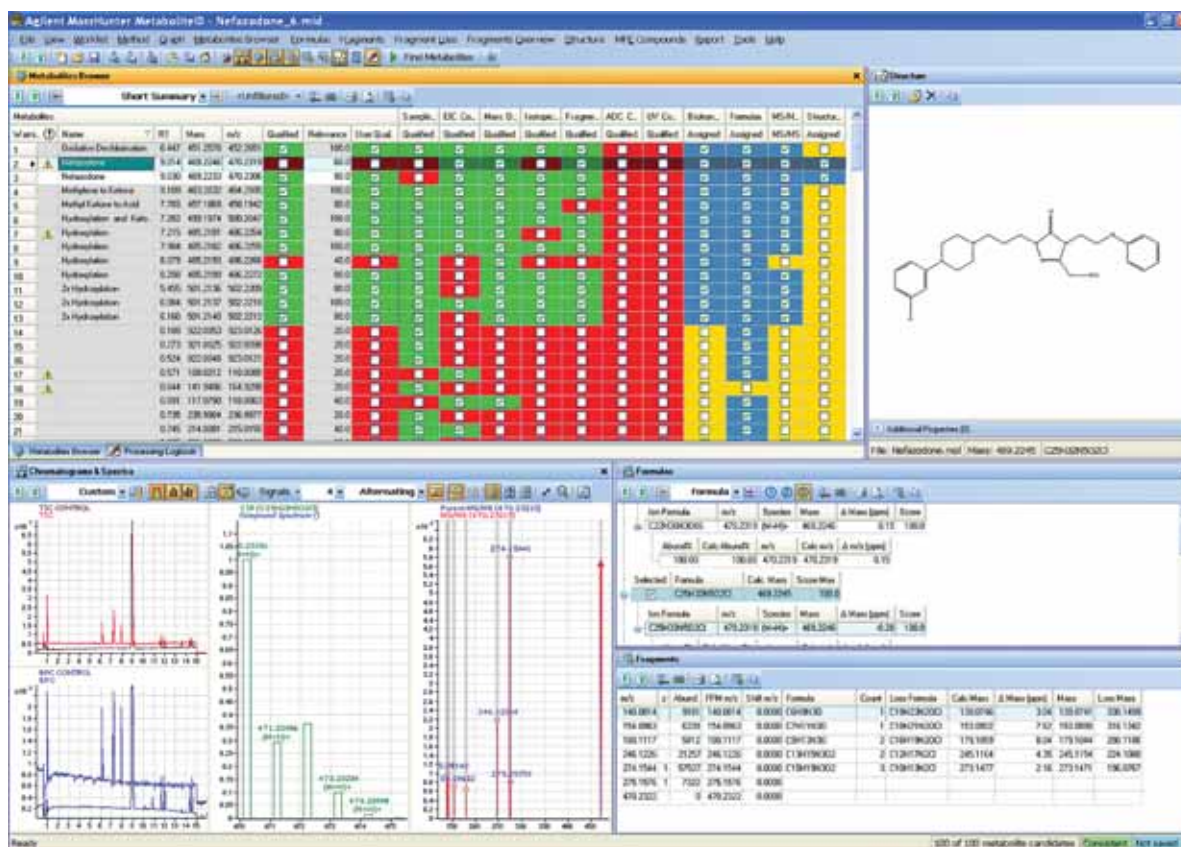
如果您需要鉴定杂质，安捷伦的分子式生成程序可以利用精确质量 MS/MS 图谱更多的特异性。

用软件直接定量使过程更简化

用 MassHunter 软件的定量功能可以直接对鉴定出的杂质进行相对或绝对定量。用该软件可以进行参数较少的积分、辅助曲线拟合，动态链接结果，并对批次结果进行快速浏览。



对杂质 3 的 MS/MS 图谱分析（母离子 m/z 366.1126）表明，产物离子在逻辑上符合 diketopiperazine amoxicillin 的结构



MassHunter 代谢物鉴定软件有助于进行高通量代谢物鉴定，包括自动偏移计算（Auto-Shift algorithm）等高级功能，其在计算最后得分时考虑了生物转化引起的可能质量偏移

先进的代谢物鉴定功能

外源性代谢物的高通量鉴定需要快速而可靠的 LC/MS 系统，并配置使任务简化的软件。6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）提供了检索级质谱的 MS 和 MS/MS 数据质量，其可靠性和使用简便性堪比单级四极杆或 TOF 仪器。而且，新的 MassHunter 代谢物检索软件大大简化了代谢物鉴定。

- 卓越的精确质量 MS 和 MS/MS 数据产生更好、更准确的鉴定结果
- 宽动态范围和无与伦比的四极杆-飞行时间串联质谱（Q-TOF）灵敏度有助于在高丰度化合物存在下发现低丰度代谢物
- 独特的分子特征提取算法在发现代谢物中发挥良好作用
- 代谢物鉴定软件提高了效率和通量

精确质量数据提高了代谢物的鉴定准确率

精确质量数据提高了鉴定正确率。6520 在不牺牲数据采集速率和灵敏度的条件下，获得精确质量 MS 和 MS/MS 数据。与代谢物鉴定中常用的快速、高通量色谱分离完全匹配。

依靠宽动态范围和卓越的灵敏度发现低丰度代谢物

带 TDC 检测器电子部件的 TOF 和四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF），通常全谱动态范围非常窄。很难或不可能在高丰度化合物存在的情况下发现低丰度化合物。而四极杆-飞行时间串联质谱仪（Q-TOF）使用的是 ADC 检测器电子部件和 32 Gbit/秒的数据采集系统，图谱动态范围可以达到 5 个数量级。

分子特征提取发现更多化合物

MassHunter 软件的分子特征提取（MFE）运算功能是对宽动态范围的补充。能够发现更多的代谢物。

用代谢物鉴定软件快速而轻松地发现代谢物

全新的代谢物鉴定软件采用著名的 Novatia 自动偏移运算方法，改善了代谢物的鉴定。该运算方法将原形药物与样品的 MS/MS 图谱相联系，生成一个相关性分值。在计算最终分值时考虑了由单个或多重生物转化引起的质量偏移。彩色标记的结果很容易浏览，您可以认可这些结果，也可以回去修改并调整过滤标准。结果可以 Excel 格式输出。

用全谱、精确质量数据进行目标定量

四极杆-飞行时间串联质谱 (Q-TOF) 最常用的功能是定性分析, 但其精确质量测量和 MS/MS 图谱的特异性也有助于定量应用。多用途的 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 可以轻松地以前鉴定出的代谢标志物及许多其它化合物进行定量。用 6520 定量的优势如下:

- 精确质量、全谱 MS 和 MS/MS 具有更高的特异性
- 目标列表确保 6520 从您的目标化合物中尽可能多地采集数据
- 保留时间窗改善了采集图谱的质量
- 强大且使用简便的定量软件

精确质量、全 MS 和 MS/MS 图谱的特异性

6520 具有获取全图谱、精确质量 MS 和 MS/MS 数据的功能, 将提高您目标定量的可信度。有了精确质量图谱, 您可以确定是对正确的化合物进行定量。

目标质量数列表避免了数据依赖

利用 6520 的目标质量列表, 无论目标离子是达到任意丰度阈值, 还是在 n 个最高丰度离子之中, 数据都将被采集。从而确保了从目标化合物中采集到尽可能多的数据。

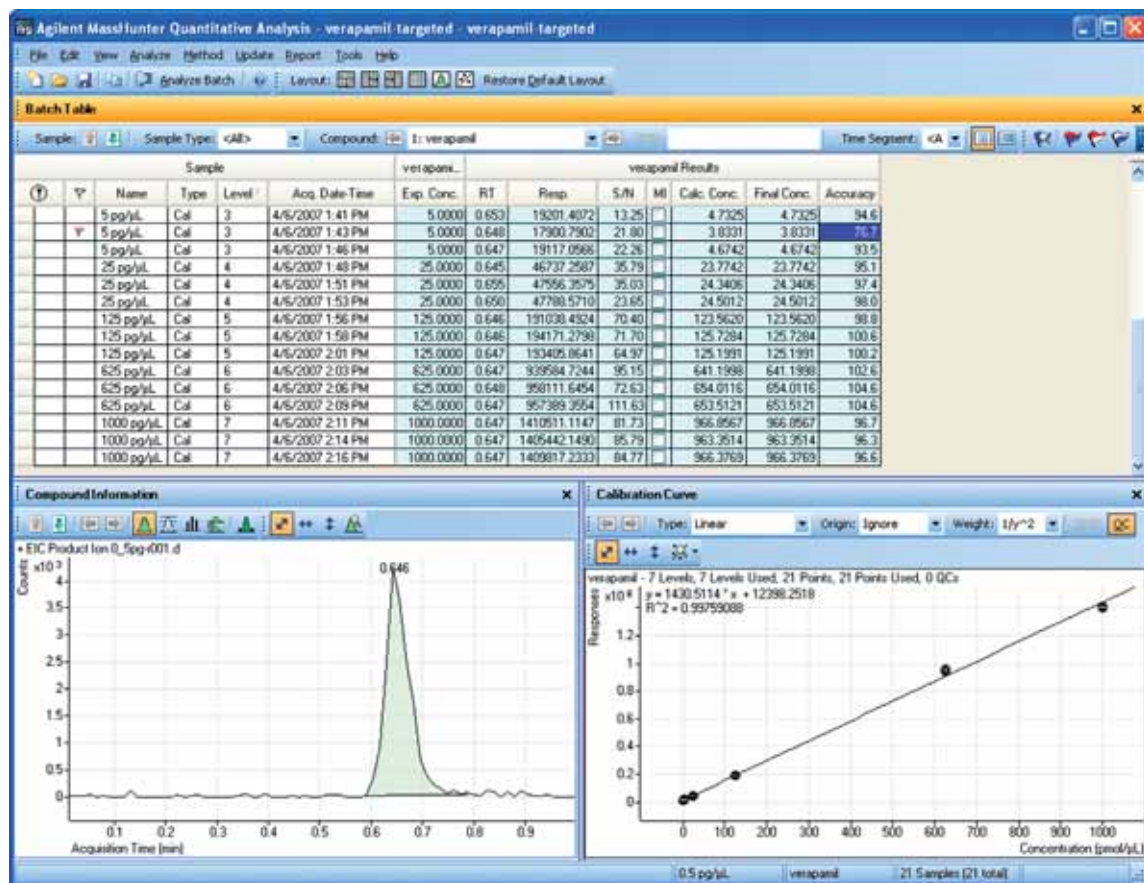
保留时间窗口提高了图谱质量

对每个目标离子都限定其保留时间窗口的功能, 最大限度地提高了 MS/MS 图谱的质量。在一定的时间范围内, 只集中于一个或几个离子, 使 6520 可以从目标离子中采集并平均更多的 MS/MS 图谱, 从而提高灵敏度和图谱质量。这一功能在对复杂样品中多个化合物进行定量时尤为有利。

使用简便的定量软件

MassHunter 定量软件包含各种有助于进行快速、准确定量的功能:

- 选择积分仪, 包括新的更少参数的积分仪
- 辅助曲线拟合
- 动态链接结果
- 用 outlier flagging 按批次快速浏览结果



MassHunter 软件的定量功能大大简化了定量, 用 MS 或 MS/MS 数据都可以进行目标定量

一台仪器完成生物大分子的表达谱分析、鉴定、表征和定量

四极杆飞行时间质谱和蛋白质鉴定有密切的关系。把精确质量测量和 MS/MS 图谱结合在一起将使鉴定更轻松、更可信。Agilent 6520 四极杆-飞行时间串联质谱 (Q-TOF) 系统能比任何一个其它鉴定方案做得更多，它可以让您完成对感兴趣的蛋白质从表达谱比较、发现，到鉴定、表征，直至定量确证的全过程。

发现更多的蛋白质生物标志物

蛋白质生物标志物的发现是一个面临许多分析挑战的复杂过程。6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 从以下方面应对这些挑战：

- 高灵敏度和宽全图谱动态范围的功能发现更多的生物标志物
- 发现更多独特化合物，并提供进行可信而有效比较的软件
- 用精确质量 MS 和 MS/MS 提供的结构信息，进行更明确的鉴定
- 系统-宽重复性，减少了假阳性数，最大限度地减少了需要重复分析的样品数量

更好的样品制备产生更好的分析结果

安捷伦多重亲和去除柱和 mRP-C18 高回收蛋白柱一起，去除了干扰的高丰度蛋白和盐，使具有无与伦比灵敏度和全谱动态范围的 6520 可以发现更多有意义的蛋白 — 甚至 ng/mL 浓度水平。

用分子特征提取功能发现更多候选生物标志物

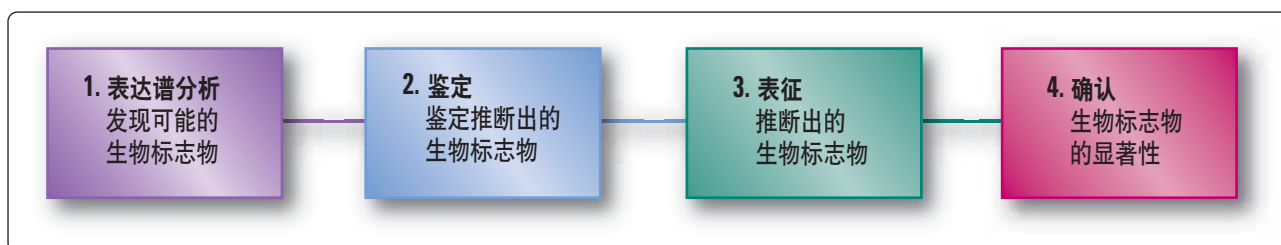
MassHunter 软件独特的分子特征提取运算功能帮助您发现更多潜在的生物标志物。通过在色谱图中寻找协变离子，发现那些色谱图中未分离的化合物。

更好地进行表达谱分析的软件工具

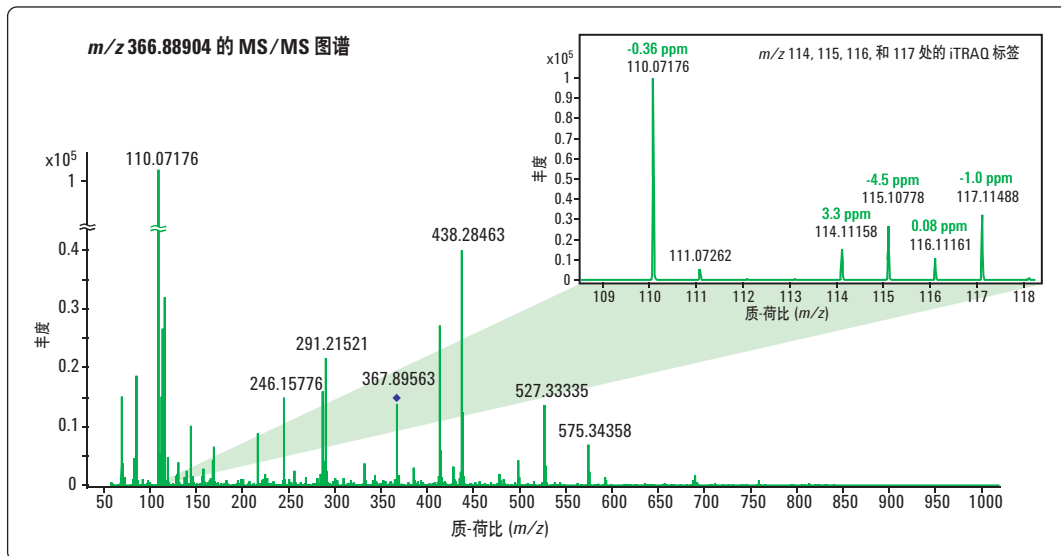
MassHunter 表达谱分析软件和 GeneSpring MS 软件包括比较两个样品 — 或几百个样品所需要的复杂的统计比较和可视化工具。

卓越的分析重复性减少了样品需要量

液相色谱-芯片分离和 6520 分析卓越的重复性，最大限度地减少了确定样品之间或组别之间的差异具有统计学意义所需要重复分析的样品数量。在同一台四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 上，既进行表达谱分析又进行鉴定，进一步减少了分析的变异性。



6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 在生物标志物发现流程中的每一个步骤都可以发挥重要作用



6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 与定量策略兼容, 如 iTRAQ, 可获得卓越的质量精确度和质量分辨率

标记蛋白的更快速、更精确定量分析

标记试剂, 如 iTRAQ、SILAC 和 ^{18}O , 广泛应用于蛋白质分析。配置液相色谱-芯片技术的 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 是蛋白质定量分析的理想平台。具有以下特点:

- 良好的稳定性、一致性和重复性
- 卓越的质量分辨率
- 最高的质量精确度
- 更快的分析
- 卓越的定性和定量软件
- 更简便的方法开发

良好的稳定性减小相对标准偏差, 提高了可信度

如果您的 LC/MS 在图谱之间和样品之间都能得到一致的结果, 将提高标签定量的价值。6520 中的 MS/MS 极为稳定, 离子比值非常一致。从而减小了 RSD 值, 或减少了获得可信结果所需要的样品量。

质量分辨率和精确度可区分标签和干扰离子

区分标签/多肽和干扰离子的能力, 对于获得精确丰度比值非常重要。四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 32 Gbit/秒数据采集系统的质量分辨率明显好于离子阱, 与轨道捕获仪器不同的是, 不用牺牲图谱采集速率而获得高分辨率。

最高的 MS/MS 质量精确度, 提高了鉴定的可信度

6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 碰撞室和离子光学系统的创新性设计, 让 MS 和 MS/MS 使用相同的参考质量校正。从而使 MS/MS 的质量精确度达到 2-4 ppm-大大降低了蛋白质谱库检索中的假阳性率。

更快速分离、更快速分析

安捷伦革命性的液相色谱-芯片/MS 技术提供了比常规纳流柱分辨率更高、重复性更好、速度更快的分离。无需牺牲色谱性能就能获得更大的分析通量。而且液相色谱-芯片消耗的样品更少, 因而让您有更多的样品用于鉴定或进一步分析。

Spectrum Mill 软件利用了 MS/MS 质量精确的优势

Spectrum Mill 软件利用了四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) MS/MS 质量精确的优势, 缩小了可能化合物的范围, 消除了假阳性结果。必要时用校正因子自动计算 iTRAQ 比值。

更简便的仪器设置和方法开发

6520 的大多数工作参数都有相当宽的范围。因此可以更快速、更方便地优化仪器和开发方法。也使您的方法更通用。

鉴定更低丰度蛋白的分析能力

6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 具备了您所需要的精确鉴定蛋白质的性能：

- MS 和 MS/MS 离子的精确质量测量，提高了数据库检索得分，减少了假阳性率
- 极高的 MS 和 MS/MS 灵敏度，可鉴定更低丰度的蛋白质
- 宽的全谱动态范围，在较高丰度组分存在的情况下，改善了低丰度组分的检测
- 数据相关采集从色谱峰中快速提取重要的 MS/MS 数据
- 快速数据库检索，假阳性结果较少

不牺牲灵敏度和采集速率的精确质量测量

轨道阱质谱仪和某些四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 有一些根本缺陷。要进行精确质量 MS/MS 测量，就不得降低数据采集速率和/或牺牲灵敏度。它们不能在与快速色谱相匹配的速度下采集到精确的质量数据。反之，6520 可以每秒采集 10 张精确质量的 MS/MS 图谱，其速度足以与快速分离、纳流色谱相匹配。

研究表明，用精确质量 MS 和 MS/MS 数据可以显著减少数据库检索中假阳性匹配的数量。当数据库没有找到蛋白，需要用 *de novo* 测序时，精确质量数据也有巨大优势。

极高的质量精确度加上实际样品的采集速率，6520 具有无与伦比的灵敏度和图谱动态范围，即使在普通的高丰度蛋白存在下也可以鉴定关键的低丰度蛋白。

蛋白质鉴定的综合软件

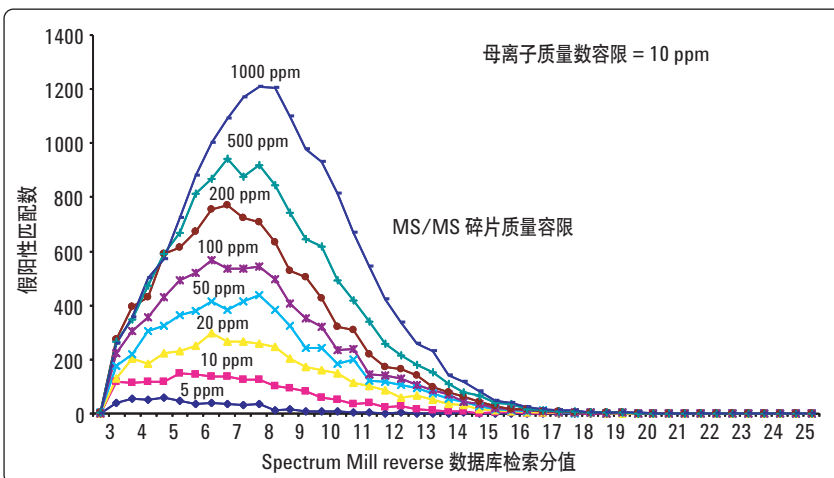
Agilent Spectrum Mill 软件利用精确质量 MS 和 MS/MS 数据，使蛋白质鉴定的可信度更高。用该软件可通过数据库检索或 *de novo* 测序鉴定蛋白质。Spectrum Mill 软件的特点如下：

- 智能化图谱提取，使数据库检索更快，并减少了假阳性数
- 针对未修饰和修饰肽的 MS/MS 检索模式
- 对已鉴定蛋白相对定量
- 支持 ICAT、iTRAQ 和稳定同位素标记技术

MASCOT 兼容性

如果您的实验室安装的是 MASCOT 蛋白数据库检索引擎，则无需更改。MassHunter 软件可以与 MASCOT 兼容的格式输出数据。

对大肠杆菌样品的分析显示如何利用精确质量 MS/MS 数据，用 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 大大降低了蛋白质数据库检索中的假阳性匹配率



更轻松地鉴定并表征翻译后修饰蛋白质

生物系统中有一些重要蛋白要发生翻译后修饰 (PTM)，如磷酸化或糖基化，这些蛋白的鉴定和表征更有挑战性。配置 Spectrum Mill 软件的 6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 已具备了成功鉴定和表征 PTM 所需的功能。

- 稳定的精确质量测量缩小了数据库检索窗口，减少了假阳性率
- 依靠无可匹敌的四极杆-飞行时间串联质谱 (Q-TOF) 灵敏度可以发现更多低丰度蛋白
- 快速、数据相关的 MS/MS 得到良好覆盖率，更精确的定位 PTM
- 特殊应用软件简化了处理过程，获得高质量的结果

精确质量数据降低了假阳性率

精确质量数据缩小了数据检索窗口，降低了假阳性蛋白鉴定数量。Spectrum Mill 软件利用了 6520 MS/MS 数据高质量精确度的优势，进一步提高了检索的准确性。

一种特别有效的方法是先检索未修饰蛋白，并保存结果，然后再检索其修饰基团。比整个数据库一次性检索的速度更快，假阳性率更低。

发现更多蛋白质所需要的灵敏度

修饰的蛋白更可能以较低丰度存在。6520 良好的动态范围和超强的灵敏度有助于在高丰度蛋白存在的情况下发现较低丰度的蛋白。

结合液相色谱-芯片/MS 技术，既提高了色谱分辨率，还可以进一步提高灵敏度。

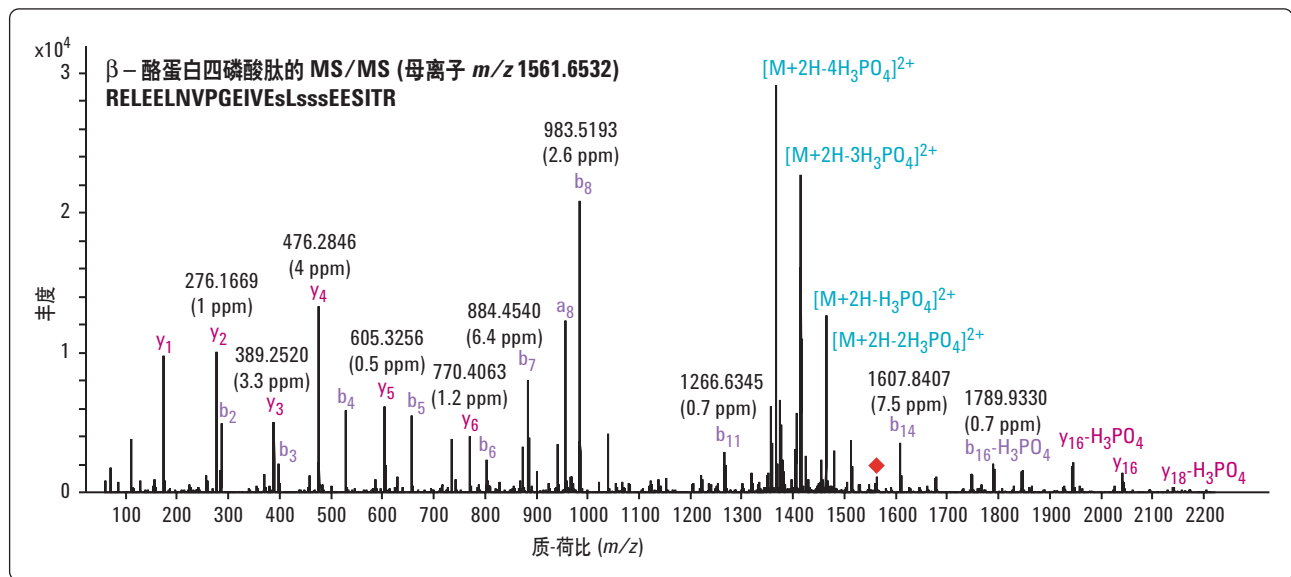
数据相关的 MS/MS 获得明确的鉴定结果

良好的序列覆盖率对鉴定和定位 PTM 非常重要。6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 的快速数据相关 MS/MS 对宽范围修饰及未修饰蛋白提供了良好的序列覆盖率。

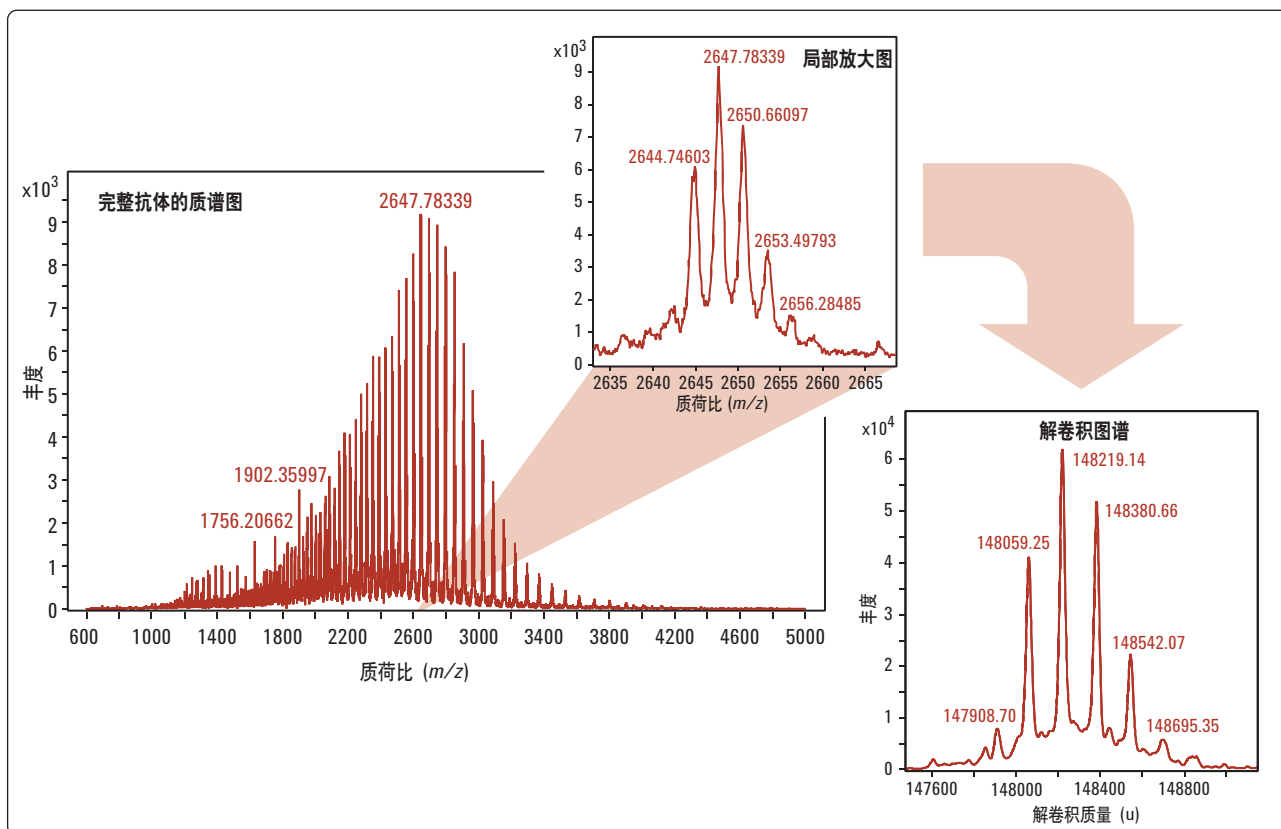
揭示 PTM 位置和成分的软件

正确的数据分析对 PTM 定位和鉴定非常重要。Spectrum Mill 软件可以解析数据库检索或 *de novo* 测序中常见的翻译后修饰。您也可以输入自己定义的修饰。Spectrum Mill 软件利用 6520 良好 MS/MS 质量精确度的优势，提高了数据库测序和 *de novo* 测序的准确性。

MassHunter 软件还能以与 MASCOT 蛋白质数据库检索引擎兼容的格式输出数据。



用四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF) 分析从牛奶中提取的 β 酪蛋白四磷酸肽，清楚地显示了磷酸盐的中性丢失，提示为四磷酸肽，也提供了有价值的序列信息



对一个完整抗体的分析表明 6520 具有卓越的质量精确度和分辨不同糖基化抗体的能力

重组抗体和其它蛋白质的 QA/QC 更加准确

翻译后修饰和化学降解可能严重影响抗体和其它重组蛋白的性质和功效。为了确保蛋白质活性和药物安全性，有效的质量保障和质量控制很有必要。必须确证成分的鉴定，并表征出任何变化。6520 四极杆-飞行时间串联质谱仪 (Q-TOF)，结合安捷伦卓越的样品处理和分离技术，成为蛋白质 QA/QC 的理想平台，其功能如下：

- 完整蛋白的精确分子量测定
- 更高的 LC 分离能力，从而改善了序列覆盖，更利于 PTM 表征
- 可提高覆盖率创新性分离选择

对全蛋白更精确的测定

全蛋白的精确分子量测定是 QA/QC 的重要步骤。6520 的高分辨率和质量精确度提高了准确测定蛋白质分子量的能力，显著提高了 QA/QC 测定的可信度。安捷伦 MassHunter 工作站软件用一种为整体蛋白 MS 数据特别优化的运算方法进行简便而有效的解卷积。

更好的 LC 分离改善了对修饰的确证

当您发现整体蛋白上有修饰时，可能需要通过裂解和再分析对修饰蛋白的性质进行确证。Agilent 1200 LC 系统卓越的色谱分离能力有利于提供全面表征 PTM 所需要的高序列覆盖率。6520 的快速 MS/MS 采集也能提高序列覆盖率。

创新性的分离选择

安捷伦在分离技术行业领先，让您在提高重组蛋白 QA/QC 中又多了一种选择。我们独特的 OFFGEL 电泳技术，根据等电点的变化分离糖基化和磷酸化蛋白。从而改善了后续 LC 分离，以及序列覆盖率。

服务与支持

安捷伦科技公司以其最好的服务和支持机构在生命科学和化学分析领域享有盛誉。我们完善的通讯技术和组织结构，确保我们能在 40 多个国家中发挥良好作用，所以，无论您在哪里，我们都能提供支持。而我们的全球化宏观视野丝毫不会影响对具体单位的快速响应。

如需更多资讯

如需了解更多信息：
www.agilent.com/chem/qtof

在线购买：
www.agilent.com/chem/store

查找您所在国家的安捷伦用户中心：
www.agilent.com/chem/contactus

中国
800-820-3278

亚太区
adinquiry_aplsca@agilent.com

仅用于研究。本文中涉及的信息、描述和规格，如有变更，恕不另行通告。

安捷伦对本资料中出现的错误，以及由于提供或使用本资料所造成的相关损失不承担责任。

© 安捷伦科技公司
2007 年 10 月 20 日中国印刷
5989-6826CHCN



Agilent Technologies