

Agilent 6560 Ion Mobility Q-TOF LC/MS-System

EINE NEUE DIMENSION FÜR IHRE FORSCHUNG

The Measure of Confidence



 **Agilent Technologies**

AGILENT 6560 ION MOBILITY Q-TOF LC/MS-SYSTEM

DAMIT IHNEN NICHTS MEHR ENTGEHT

Mehr Details als je zuvor

Ob es bei Ihren Forschungsprojekten um die Charakterisierung kleiner Moleküle oder Proteine, den umfassenderen Nachweis von Metaboliten oder die Gewährleistung der Lebensmittelsicherheit geht, das Agilent 6560 Ion Mobility Q-TOF LC/MS-System zeigt Details mit bisher unerreichter Auflösung.

Die unübertroffene Selektivität und Empfindlichkeit des 6560 erlaubt den Nachweis, die Identifizierung und die Charakterisierung von Komponenten in Ihren komplexesten Proben.





Was dieses innovative Gerät leistet:

- **Klare Trennung** von Molekülen nach Größe, Form und Ladung.
- **Darstellung von Strukturänderungen** eines bestimmten Moleküls, die sein Wirkverhalten direkt beeinflussen.
- **Charakterisierung einer Vielzahl von Analyten** – ob Proteine, Metaboliten, Lipide oder Kohlenhydrate.
- **Untersuchung der Arzneimittelbindung und deren Einfluss auf die Molekülkonformation**, die den Unterschied zwischen Aktivität und Wirkungslosigkeit ausmachen kann.

Dies sind die Forschungsziele, die sich Wissenschaftler mit dem Agilent 6560 Ion Mobility Q-TOF LC/MS-System bereits gesetzt haben.

SICHTBAR EMPFINDLICHER

Trennung nicht aufgelöster Analyten

Erin Baker, eine führende Spezialistin auf dem Gebiet der Ionenmobilität und Sitzungsleiterin bei vielen ASMS-Workshops über Ionenmobilität, arbeitet zusammen mit Agilent an einem bahnbrechenden neuen System, das die Ionenmobilitätsspektrometrie mit der Flüssigchromatographie und der Massenspektrometrie vereint.

Die Ergebnisse sind, gelinde gesagt, eindrucksvoll.

„Oft ist genau das, was man nicht weiß, letzten Endes am wichtigsten“, so Dr. Baker. **„Mit diesem System erhalten Sie Informationen über praktisch jede Komponente Ihrer Probe.“**

Wenn ein Molekül dasselbe Verhältnis von Masse zu Ladung wie ein anderes aufweist und nur in sehr niedriger Konzentration vorliegt, ist es unter Umständen schwierig, oder sogar unmöglich, es mit anderen Techniken nachzuweisen.

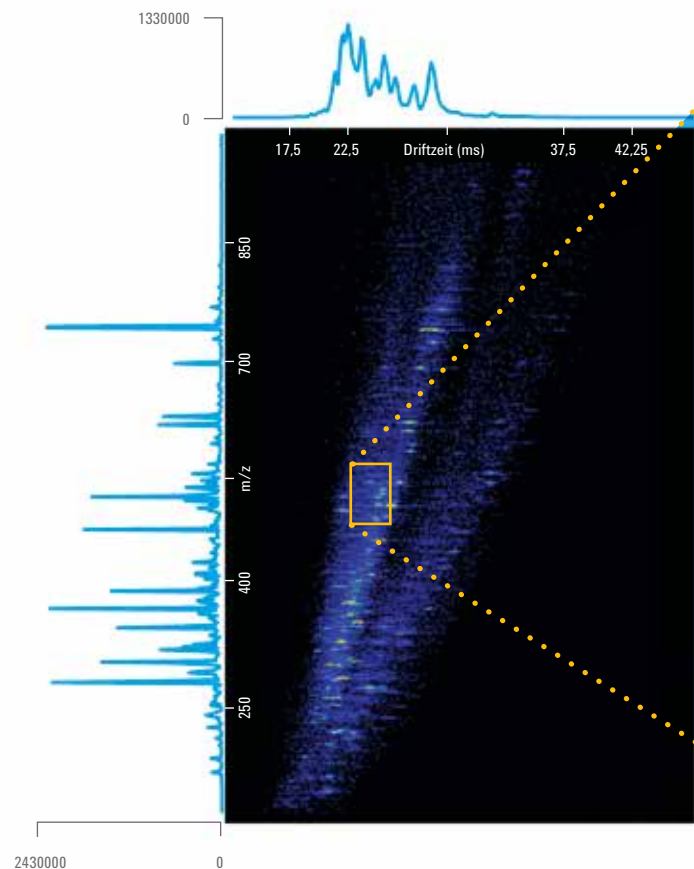
„Mithilfe der Ionenmobilitätsspektrometrie können wir geringste Mengen von Molekülen aufspüren“, betont Dr. Baker. **„Betrug die Nachweisgrenze bisher ng/ml, liegt sie nun im hohen pg/ml-Bereich.“**

Wenn Sie nach niedrig konzentrierten Peptiden suchen, die Forscher wie Dr. Baker als Nadel im Heuhaufen bezeichnen würden, ist Empfindlichkeit von größter Bedeutung.

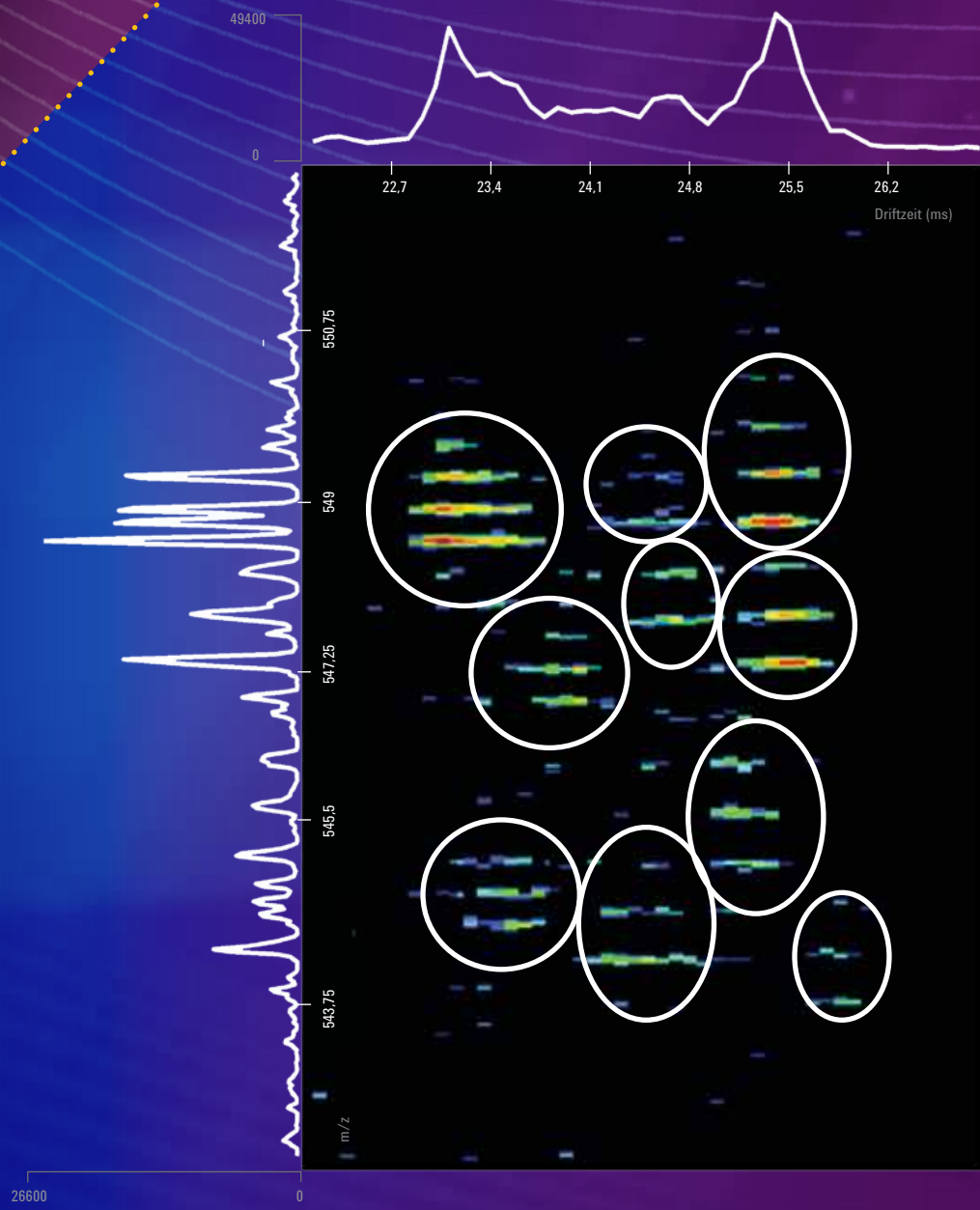
Bei einer Reihe von Krankheiten kann die Form eines bestimmten Proteins der entscheidende Faktor sein.

Ein Massenspektrometer gibt Aufschluss über die Identität vorhandener Proteine, nicht aber über ihre Form. **„Anhand der Ionenmobilität können wir entscheiden, ob das Protein gefaltet, gestreckt oder fehlgebildet ist“,** so Dr. Baker. **„Dabei handelt es sich um entscheidende Informationen.“**

Mit diesem neuen Gerät von Agilent erhalten Sie sehr schnell eine Vielzahl detaillierter Informationen.



Die Abbildung, in der das m/z -Verhältnis gegen die Drift aufgetragen ist, zeigt die Trennung tryptischer Peptide in der Blutprobe einer Maus, die mit 20 Referenzpeptiden angereichert wurde. Nach 15-minütiger Auftrennung der Probe durch LC erfolgte eine Analyse mithilfe der IM Q-TOF. In der Vergrößerung ist ein Ausschnitt der 3D-Auftragung mit 10 identifizierten Peptiden dargestellt.



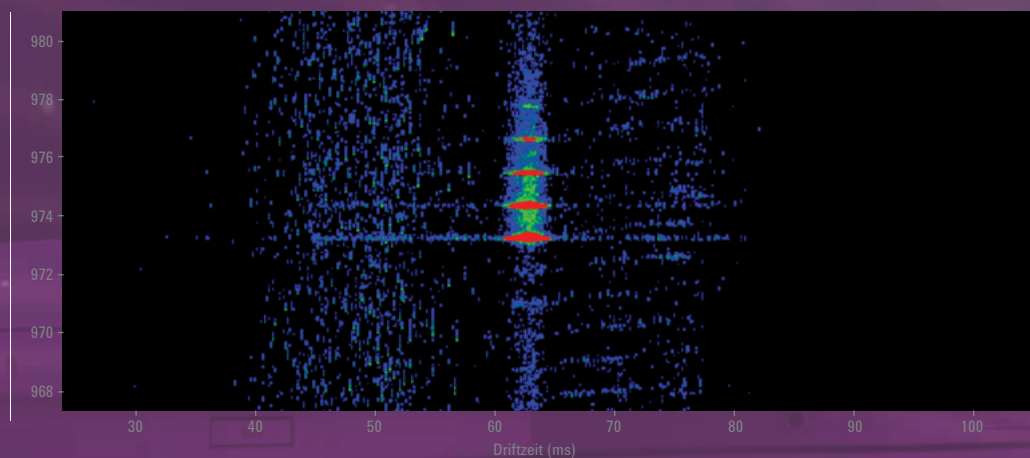
'DIESES GERÄT FUNKTIONIERT'

Präzision eröffnet neue Möglichkeiten

„Dieses Gerät gibt uns die Chance, Fragen zu beantworten, die wir so bisher vielleicht noch gar nicht stellen konnten.“

So beurteilt Dr. Alfred Yergey, Emeritus der National Institutes of Health in Bethesda, Maryland, USA, das Agilent 6560 Ion Mobility Q-TOF LC/MS-System.

„Dieses Werkzeug ermöglicht es uns, völlig neue Arten von Experimenten zu planen“, sagt Dr. Yergey. **„Einfach gesagt bietet es uns die Möglichkeit, die Gasphasen-Ionenchemie in einer Form zu nutzen, die vor der Existenz dieses Geräts nicht vorstellbar war.“**



Das 6560 ist das erste kommerzielle Gerät, das Forscher in die Lage versetzt, auf wirklich einfache und effektive Weise grundlegende Fragen zur Struktur, Funktion und Wirkung komplexer biologischer Systeme zu untersuchen.

Ein Großteil von Dr. Yergeys Enthusiasmus erklärt sich durch die Genauigkeit des Systems.

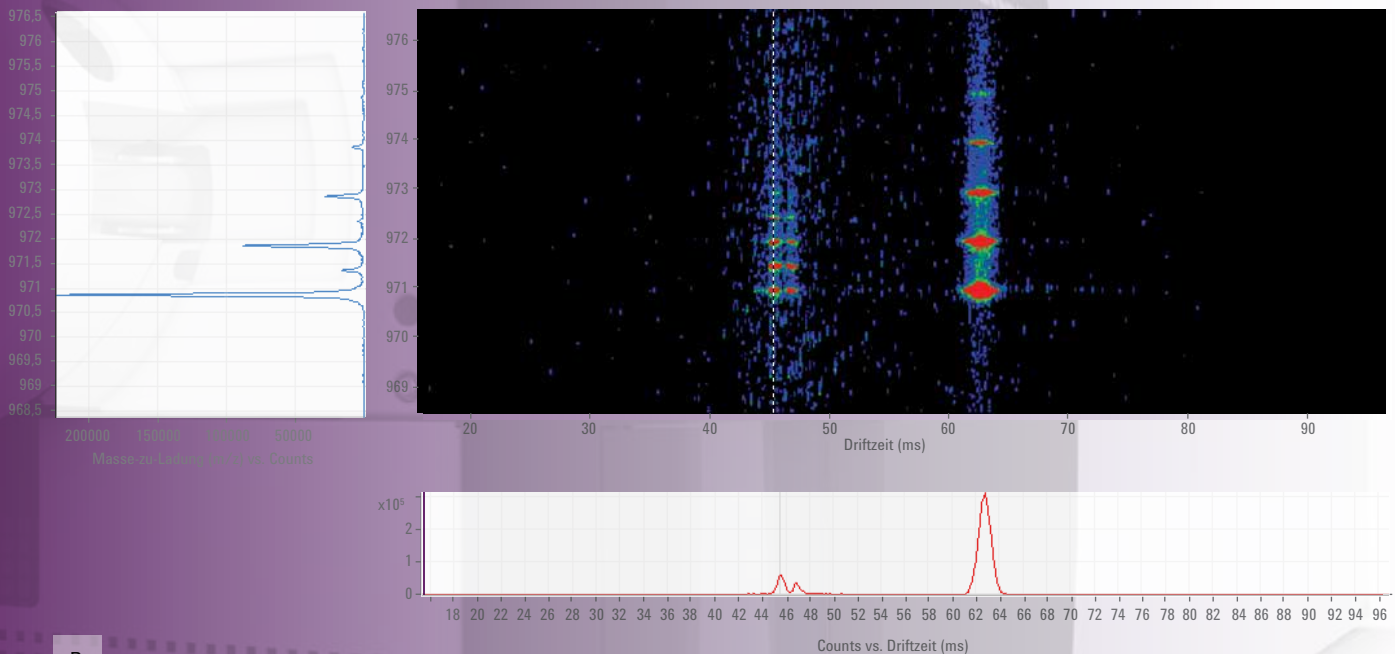
„Bei der Berechnung eines Kollisionsquerschnitts mit diesem Gerät erhält man tatsächlich einen zuverlässigen Zahlenwert (collisional cross section - CCS)“, so seine Begründung.

Beim Einsatz anderer kommerzieller Systeme müssen die Ergebnisse mithilfe bekannter, der wissenschaftlichen Literatur entnommener Werte für ähnliche Verbindungen als Vergleichsstandard kalibriert werden. Das ist ein großer Nachteil, wenn man es mit Molekülen zu tun hat, für die es noch keinen etablierten Wert gibt.

„Die Ergebnisse, die man mit diesem Gerät erhält, können aus ersten Prinzipien abgeleitet werden“, erläutert Dr. Yergey. **„Das Gerät funktioniert genau so, wie es im Lichte der langen Geschichte der Gasphasen-Ionenchemie zu erwarten war.“**

Die Abbildung zeigt Daten zur Drift von Cyclodextrin in Stickstoff sowohl in positiv geladenem, protoniertem, als auch negativ geladenem, nicht protoniertem Zustand. Die CCS-Berechnung im positiven und negativen Modus ergab Werte mit einer Genauigkeit von 2 %.

A) Ein gut aufgelöster Drift-Peak im positiven Modus. B) Zwei verschiedene Peaks (das einfach geladene Monomer sowie das zweifach geladene Dimer) im negativen Modus. Der Peak mit der geringeren Intensität ist zweigeteilt, was möglicherweise darauf hinweist, dass die Dimere in zwei unterschiedlichen Konformationen vorliegen.



B

„PAN-OMIK“-WERKZEUG FÜR ENTDECKER

Suche nach dem Unbekannten

Das Agilent 6560 Ion Mobility Q-TOF LC/MS stellt für Biologen, die verstehen möchten, wie Gene, Proteine und Metaboliten als Gesamtsystem funktionieren, einen immensen Fortschritt dar.

Fragen Sie Dr. John McLean. Er ist der Leiter des Labors für Strukturelle Massenspektrometrie an der Vanderbilt-Universität in Nashville, Tennessee, USA, in dem Experimente für Biologen, Immunologen, Pathologen und andere Wissenschaftler durchgeführt werden.

„Das wirkliche Problem bei der Systembiologie besteht darin, dass Millionen von Experimenten erforderlich sind, um kleine Objekte, kleine Netzwerke unterscheiden zu können“, sagt Dr. McLean. **„Bei der Proteomik muss man stundenlang warten, bevor sich Änderungen der Proteinexpression bemerkbar machen. Andererseits spiegelt die Metabolomik biologische Antworten, die als aussagekräftiger Indikator biologischer Veränderungen dienen können, rasch wider. Will man z. B. Krankheitszustände verstehen, muss man in der Lage sein, sich die Moleküle, die unter den jeweiligen Bedingungen zusammen exprimiert werden, anzusehen.“**

Und genau das ist die Stärke des 6560.

„Wir brechen das Paradigma, das Proteom oder das Genom oder, in der Tat, alle einzelnen „Ome“ separat zu untersuchen, und verschaffen uns stattdessen das, was wir als eine ungezielte, unvoreingenommene Übersicht über das molekulare Inventar betrachten“, führt er aus. **„Dazu verwenden wir die Ionenmobilitätsspektrometrie in Kombination mit der Massenspektrometrie.“**

Dr. McLean und sein Team an der Vanderbilt-Universität verfügen über ein tiefgehendes Verständnis für das Zusammenwirken dieser Technologien. Sie haben sich über Jahre eigene Systeme gebaut, um die nötige Auflösung zu erreichen, die ein wichtiger Faktor bei der Trennung von Molekülen unterschiedlicher Substanzklassen ist.

„Unserer Erfahrung nach ist eine Auflösung von mehr als 20 erforderlich, um eine Trennung chemischer Klassen im Konformationsraum erreichen zu können. Mit der Agilent Plattform haben wir in einigen Fällen eine Auflösung von 80 erreicht“, berichtet er. **„Damit können wir die Feinstruktur der Molekülklassenverteilung auflösen und eine noch zuverlässigere Zuordnung innerhalb von Molekülklassen vornehmen, z. B. um Unterklassen von Molekülen wie Sphingolipide und Glycerophospholipide voneinander zu unterscheiden.“**

Durch die höhere Empfindlichkeit und die bessere Auflösung lassen sich in komplexen Gemischen deutlich mehr Komponenten nachweisen.

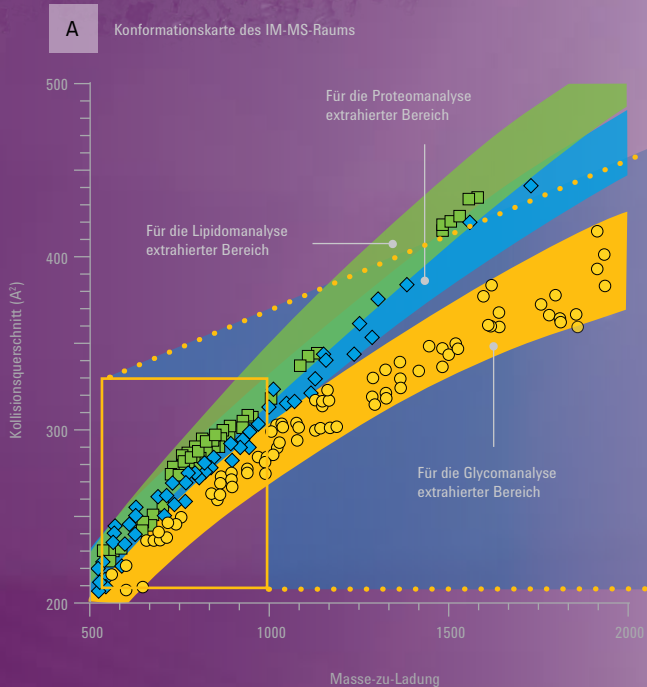
Dr. McLean merkt an, dass andere Forscher über die „pan-omische“ Kapazität dieser Technologie oft erstaunt sind.

„Dies wird in der Biologie für großes Aufsehen sorgen“, meint er.

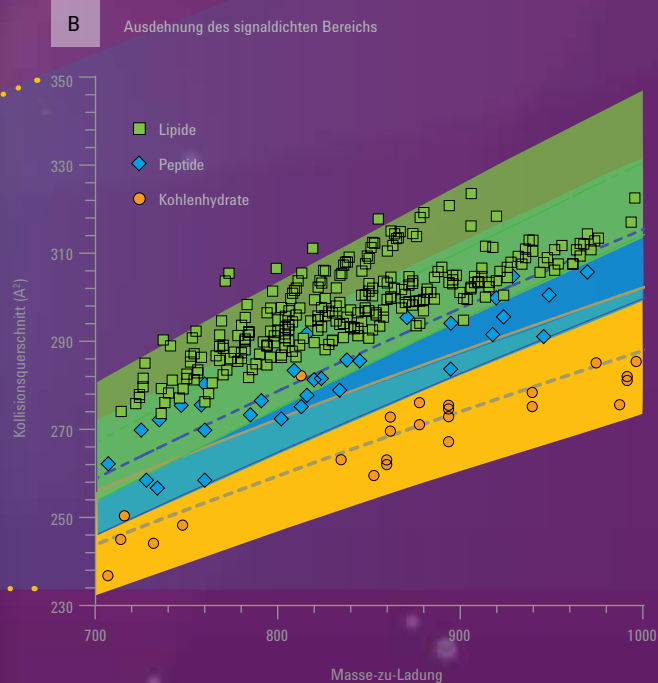
* May, J.C., Goodwin, C.R., Lareau, N.M., Leaprot, K.L., Morris, C.B., Kurulugama, R.T., Mordehai, A., Klein, C., Barry, W., Darland, E., Overney, G., Imatani, K., Stafford, G.C. Fjeldsted, J.C., McLean, J.A. Anal Chem 2014, (Feb 18, 2014; 2107-2116) Conformational Ordering of Biomolecules in the Gas-Phase: Nitrogen Collision Cross-Sections Measured on a Prototype High Resolution Drift Tube Ion Mobility-Mass Spectrometer.



„PAN-OMISCHES“ MAPPING EMPIRISCHER DATEN



A) Eine komplexe Probe, die aus einer Mischung von Lipiden, Peptiden und Kohlenhydraten bestand, wurde direkt in das Gerät infundiert und in einer 2-D IM Q-TOF-Analyse nach Kollisionsquerschnitt und m/z aufgetrennt. Karten des Konformationsraums erlauben die Auflösung komplexer Gemische nach unterschiedlichen biomolekularen Klassen ohne aufwendige Probenvorbereitung.*



B) Vergrößerung eines Ausschnitts mit hoher Signaldichte. Die Unterscheidung der Signale einzelner Ionen nach dem m/z -Verhältnis allein ist schwierig, die zusätzliche Auftrennung durch IM Q-TOF basierend auf der Struktur bietet jedoch die Möglichkeit, die erhaltenen Daten chemischen Klassen zuzuordnen.*

CHARAKTERISIERUNG VON BIOTHERAPEUTIKA

Effektive Untersuchung der Proteinkonformation

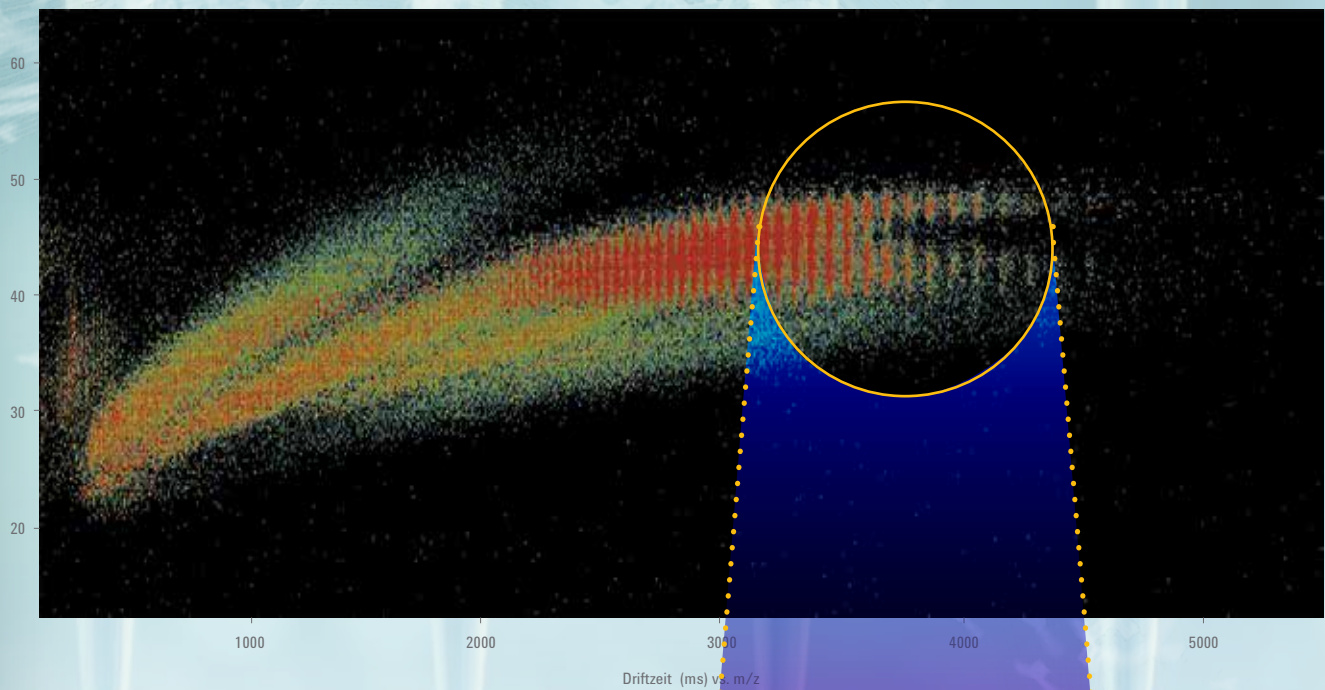
Biotherapeutische Arzneimittel auf der Grundlage von Antikörpern gehören zu den erfolgreichsten und am schnellsten wachsenden neuen Therapieoptionen bei Krebs und anderen Krankheiten. Wissenschaftler haben jedoch nachgewiesen, dass die Proteinstruktur erheblichen Einfluss auf die Wirkung dieser Arzneimittel haben kann. Was dies für die kostengünstigeren Biosimilars bedeutet, liegt auf der Hand: Um wirksam zu sein, müssen sie eine Struktur aufweisen, die der eines patentierten Biotherapeutikums möglichst ähnlich ist.

Dank dreidimensionaler Trennung lassen sich mit dem Agilent 6560 Ion Mobility Q-TOF LC/MS-System deutlich mehr molekulare Details aufklären als mit jedem anderen System.

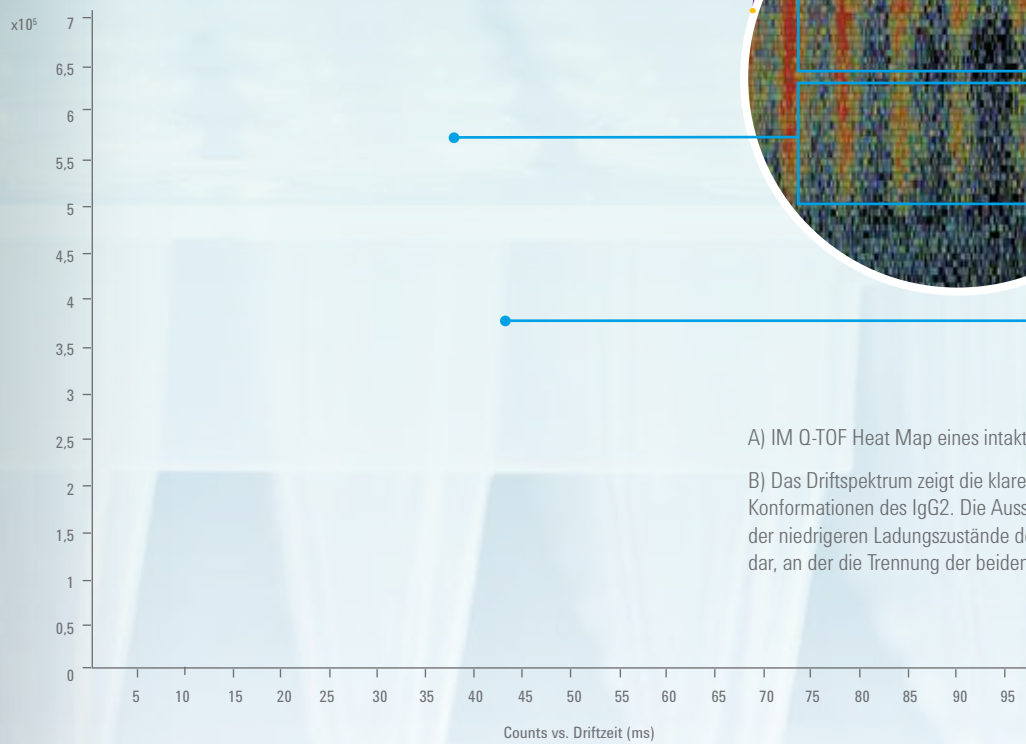
Die Ionenmobilitätsspektrometrie hat sich als effektives Werkzeug für die Untersuchung von Unterschieden in der Proteinkonformation (Faltung, fehlerhafte Disulfidbrücken) erwiesen, die mit herkömmlichen LC/MS-Techniken so nicht möglich ist. Die Ionenmobilitätsspektrometrie-Q-TOF bietet zusätzliche Selektivität bei der Trennung von Glycoproteinen und Isomeren. Daher lässt sich mit dem 6560 schnell klären, ob eine Isoform vorhanden ist, und zwar durch Vergleich der jeweiligen Driftzeiten und Kollisionsquerschnitte, die für jedes Molekül charakteristisch sind.

Stellen Sie sich vor, Sie können bestimmte Aspekte im Zusammenhang mit Proteinen, wie z. B. Antikörper-Arzneimittel-Konjugate und Antikörper-Arzneimittel-Verhältnisse, gründlicher untersuchen oder verschiedene Arzneimittelkonjugationsstellen, die ähnliche Arzneimittel-Antikörper-Verhältnisse aufweisen, genauer lokalisieren. Diese spannenden Möglichkeiten bietet das Agilent 6560 mit Trennung nach Ionenmobilität – Voraussetzungen für die Entwicklung effektiverer Biotherapeutika.

A



B



A) IM Q-TOF Heat Map eines intakten IgG2.

B) Das Driftspektrum zeigt die klare Trennung von zwei verschiedenen Konformationen des IgG2. Die Ausschnittvergrößerung stellt die Heat Map der niedrigeren Ladungszustände des IgG2 mit 35 bis 45 positiven Ladungen dar, an der die Trennung der beiden Isomere deutlich wird.

AGILENTS EINZIGARTIGES DESIGN

Gestützt auf bahnbrechende Technologie

Warum die ganze Begeisterung über eine Trenntechnik, die seit mehr als 100 Jahren bekannt ist? Weil erst jetzt dank einer Reihe jüngster Innovationen ihr volles Potenzial genutzt werden kann.

Die Einführung der modernen IonFunnel-Technologie in Kombination mit Driftröhren mit linearem elektrischem Feld, für die Dr. Richard Smith den Weg bereitet hat, ermöglicht einen mehr als 50fachen Gewinn an Empfindlichkeit bei der mit hochauflösender Massenspektrometrie gekoppelten Ionenmobilitätsspektrometrie.

Im innovativen 6560 wurde diese Technologie weiter entwickelt als jemals zuvor bei einem Gerät mit IonFunnel-Design allein. Jedes Segment der dynamischen Trichtereinheit, die einen vorderen Trichter zur Probenanreicherung, eine Ionenfalle, eine Driftröhre und einen hinteren Trichter zur Fokussierung umfasst, ist darauf ausgelegt, die Ionentransmission von der Quelle zum hochauflösenden Q-TOF-Massenanalysator zu verbessern.

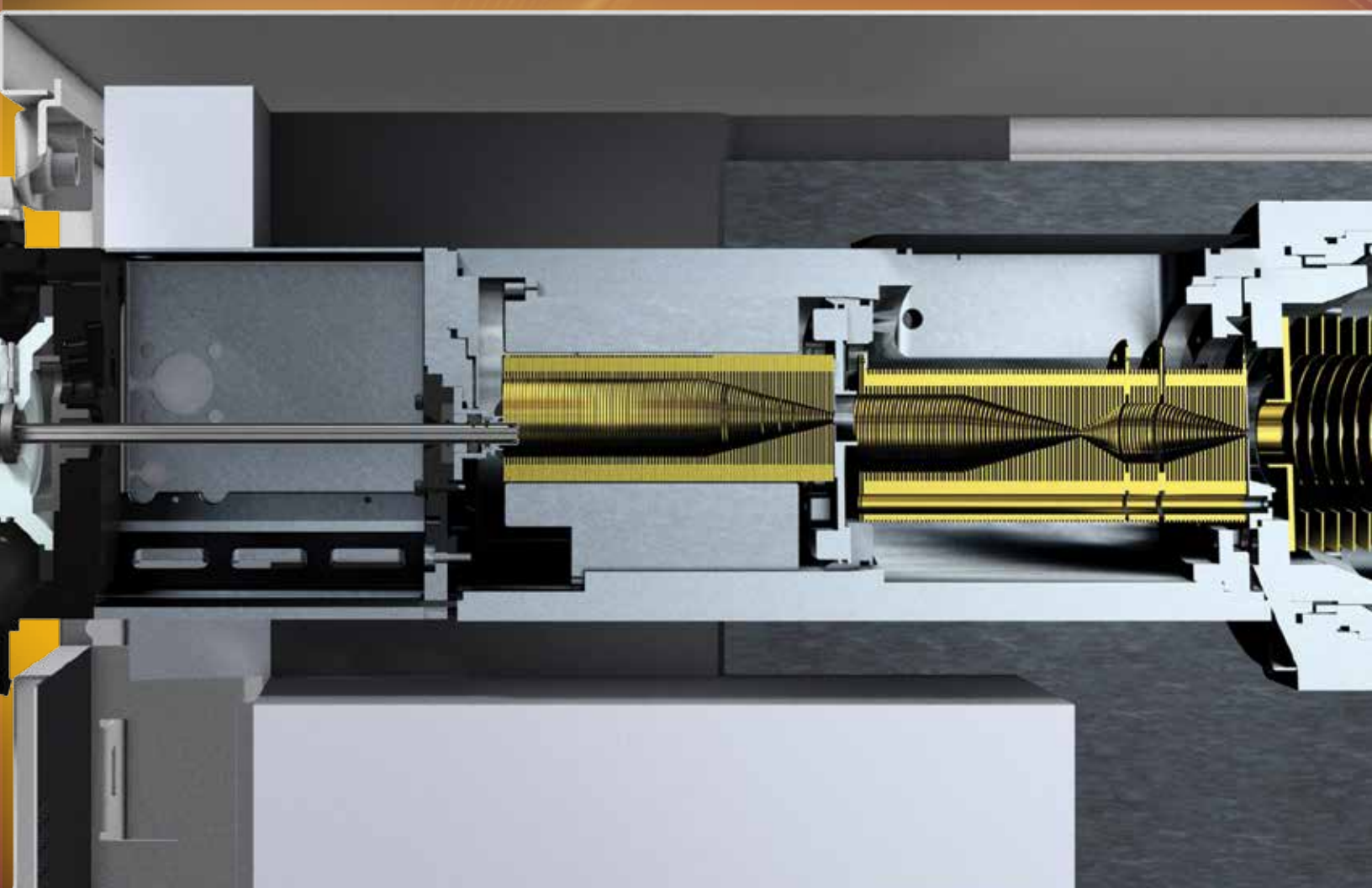


„Die IonFunnel-Technologie ist vielleicht die bedeutendste MS-Entwicklung seit der Einführung des API. Sie stellt einen grundlegenden Durchbruch im Hinblick auf Empfindlichkeit und Nachweisgrenze dar. Mit ihr lassen sich Leistungen erzielen, die die Möglichkeiten herkömmlicher Massenspektrometer bei weitem übertreffen.“

DR. RICHARD SMITH, ERFINDER DES IONFUNNELS

Lange Zeit wurden bei der Ionenmobilitätspektrometrie Geräte mit gleichförmigem Feld eingesetzt, doch ein Nachteil dieser frühen Versuchsanordnungen zu Forschungszwecken, in denen auf die Verwendung elektrodynamischer IonFunnel verzichtet wurde, war ein hoher Verlust von Ionen (> 99,9 %). Agilents IonFunnel-Design zeichnet sich dadurch aus, dass in sämtlichen Abschnitten des optischen Pfades durch sorgfältige Fokussierung in jedem Segment des elektrodynamischen Trichters Ionen konserviert werden. Aufgrund dieses Designs ergibt sich im Vergleich zum hochauflösenden Agilent 6550 Q-TOF LC/MS-Einzelgerät ein nur zweifacher Ionenverlust.

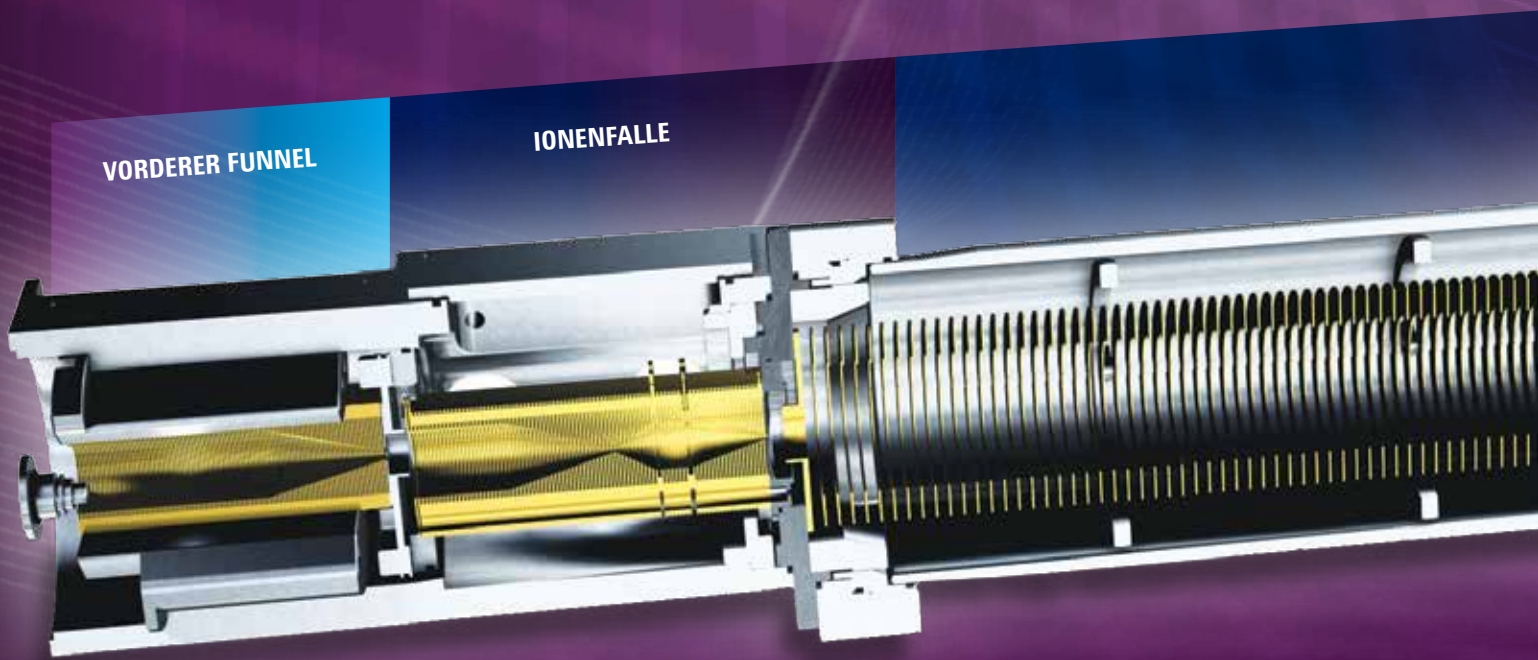
Darüber hinaus bietet die iFunnel-Technologie von Agilent einen weitaus höheren Grad an Robustheit als andere Dual-Funnel-Designs, der sich aus der Kombination einer vollkommen orthogonalen Orientierung des Elektrosprays mit Agilents Jet-Stream-Ionisierungstechnologie erklärt. So wird die Transmission ungeladener Spezies und Ionencluster auf ein Minimum begrenzt und damit das Hintergrundrauschen reduziert.



DAS AGILENT 6560

Trennung nach Ionenmobilität

Nun können Sie die Vorteile aller drei Trenndimensionen mit einem System nutzen. Im 6560 sind die Leistungsfähigkeit der HPLC-Geräte der Serie 1200 Infinity, eines Ionenmobilitätsspektrometers und eines hochauflösenden Accurate-Mass Q-TOF-Systems vereint. Dies ermöglicht Ihnen, Ihre Forschungskapazitäten problemlos zu erweitern.



AUFLÖSUNG VON STRUKTURISOMEREN

- Mühelose Untersuchung der Molekülstruktur und Konformation von Peptiden und Proteinen mithilfe hochauflösender Trennung nach Ionenmobilität.
- Direkte Bestimmung der Molekülgröße (anhand des Kollisionsquerschnitts) ohne Referenzstandards oder Kalibrierungstabellen.

HÖHERE PEAKKAPAZITÄT

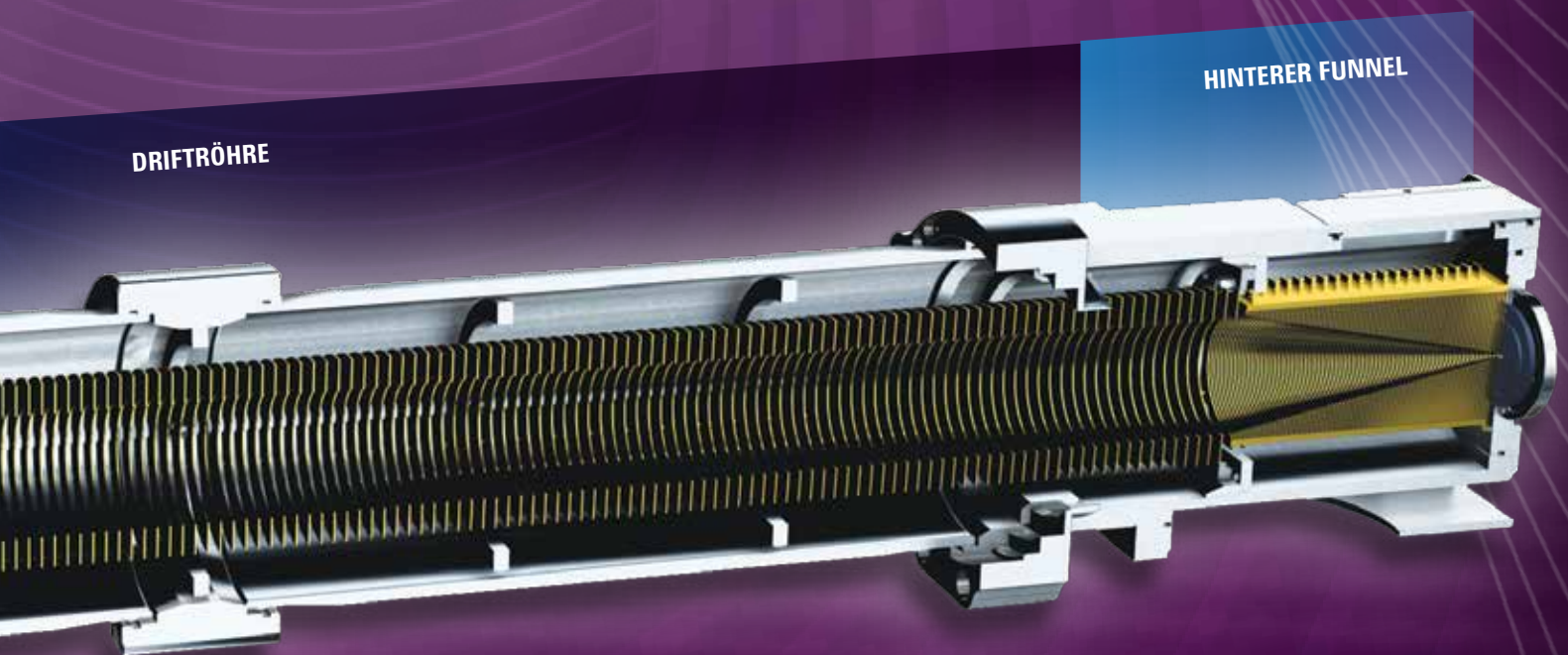
- Effektive Auflösung einzelner Komponenten komplexer Gemische mit der kombinierten Leistungsfähigkeit von UHPLC, Ionenmobilitätsspektrometrie und Massenspektrometrie.
- Optimale Trennung nach Ionenmobilität mit der Doppelgitter-Trapping-Technologie.

NACHWEIS UND BESTÄTIGUNG VON NEBENKOMPONENTEN

- Problemloser Nachweis von Analyten in niedrigen Femtogramm-Mengen in komplexen Matrices mithilfe der elektrodynamischen Funnel-Technologie.
- Zuverlässiger Nachweis von Verbindungen durch All Ions MS/MS.

ERHALTUNG DER PROTEINKONFORMATION

- Einfache Untersuchung der Strukturen von Peptiden und Proteinen in der Gasphase.
- Wirksame Begrenzung von Wärmeeffekten auf die Molekülkonformation.



PEAKKAPAZITÄT IN NIE DAGEWESENER HÖHE

Nutzen Sie drei Dimensionen der Trennung

Die Kombination der orthogonalen Trenntechniken der Flüssigchromatographie, der Massenspektrometrie und der Ionenmobilitätsspektrometrie steigert die Peakkapazität insgesamt enorm und ermöglicht eine effektivere Charakterisierung unterschiedlichster Moleküle. Die vollständige Trennung von mehreren Komponenten durch Flüssigchromatographie allein ist für eine eingehende Analyse komplexer Gemische u. U. nicht präzise genug. Sogar eine anschließende Untersuchung durch hochauflösende Massenspektrometrie reicht eventuell nicht aus, um isobare Verbindungen zu trennen und zu identifizieren. Daher steigert die zusätzliche Trennung anhand der Ionenmobilität in der Gasphase, die dieses System ermöglicht, die Peakkapazität der Analyse erheblich. Einfach gesagt können Sie nun eine größere Anzahl von Verbindungen/Komponenten auflösen und nachweisen als je zuvor.

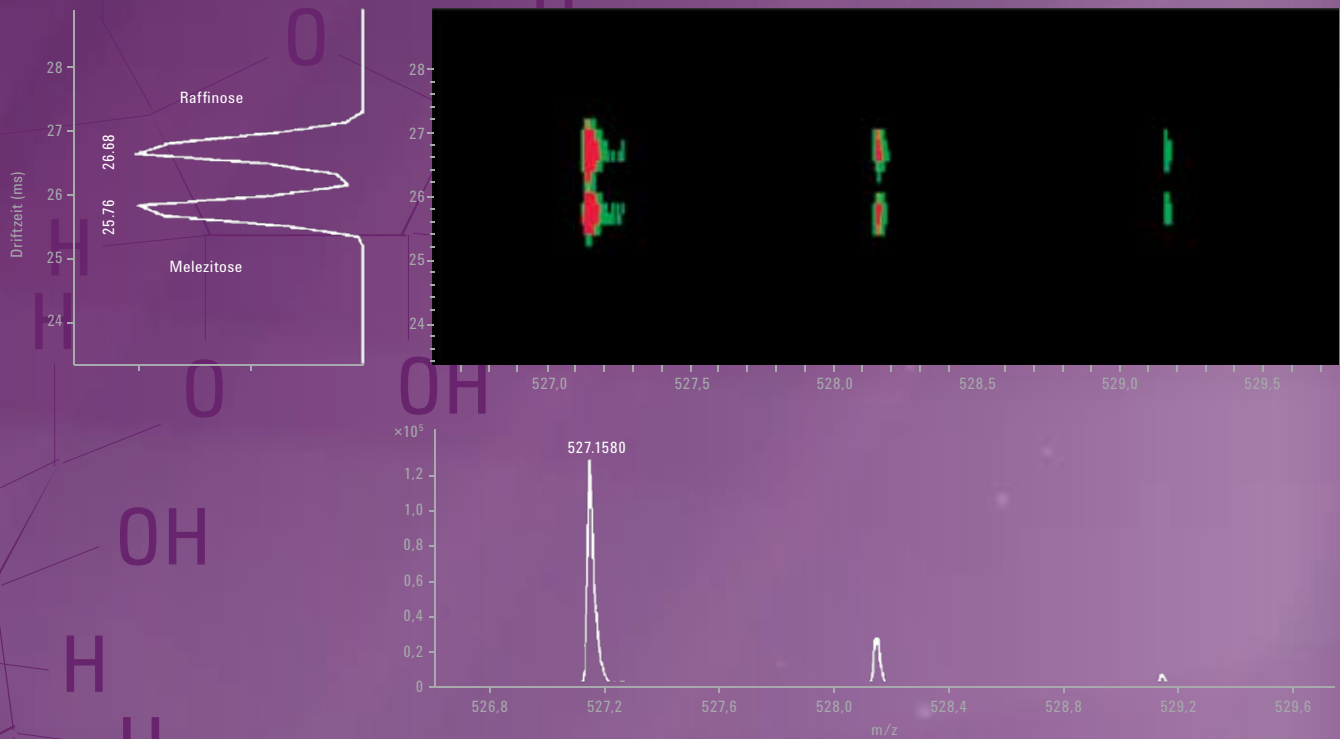
AUF DIE AUFLÖSUNG KOMMT ES AN

Die Ionenmobilitätsspektrometrie erweitert ihre LC/MS-Analysen um eine zusätzliche orthogonale Trenndimension. Die Trennung nach Ionenmobilität ermöglicht das Entfernen des Hintergrundrauschens in der Gasphase und senkt die Nachweisgrenze für niedrig konzentrierte Komponenten in komplexen Proben.

SELEKTIVITÄT SPIELT EINE ROLLE

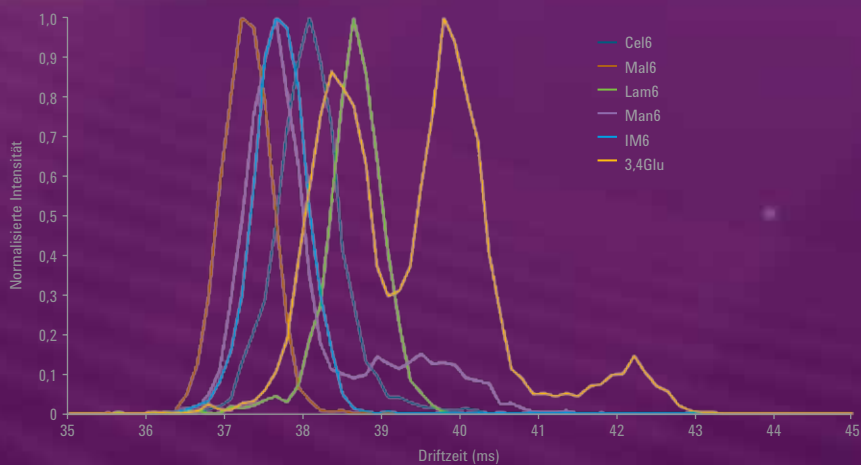
Eine zusätzliche Dimension der Selektivität ist bei der Trennung von Strukturisomeren, verschiedenen Konformationen von Biomolekülen oder von unterschiedlichen Ladungszuständen entscheidend. Bei der Driftrohre des 6560 resultiert die höhere Selektivität aus den unterschiedlichen Ionentransitzeiten im elektrischen Feld innerhalb der Driftzelle. Die Größe, Form und Ladung eines Ions bestimmen seine Transitzeit.

A



Trennung isobarer Trisaccharide mittels IM Q-TOF: Eine 1:1-Mischung von Melezitose und Raffinose wurde mithilfe einer Spritzenpumpe infundiert. Diese beiden Kohlenhydrate können in der Ionenmobilitäts-Driftzelle basisliniengetreunt und mit dem Q-TOF-Massenspektrometer als Natriumaddukte nachgewiesen werden. Die Trennleistung auf der Grundlage der Ionenmobilität beträgt bei dieser Trennung 60.

B

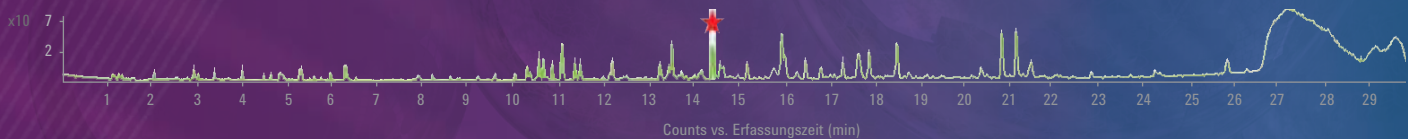


Trennung von permethylierten Oligosacchariden durch IM Q-TOF. Diese Oligosaccharidproben wurden separat infundiert und als Natriumaddukte durch IM Q-TOF analysiert. Die isobaren Hexosen zeigen verschiedene Driftverteilungen, die auf strukturelle Unterschiede hinweisen. Die Trennung nach Ionenmobilität ist eine wertvolle Technik, die zur Auflösung von isobaren Verbindungen mit verschiedenen Strukturen eingesetzt werden kann.

ALLE IONEN (ALL ION) – JEDERZEIT

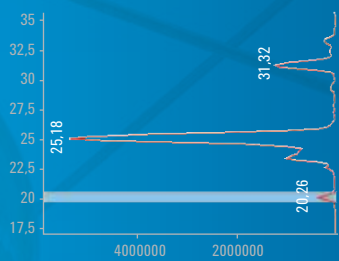
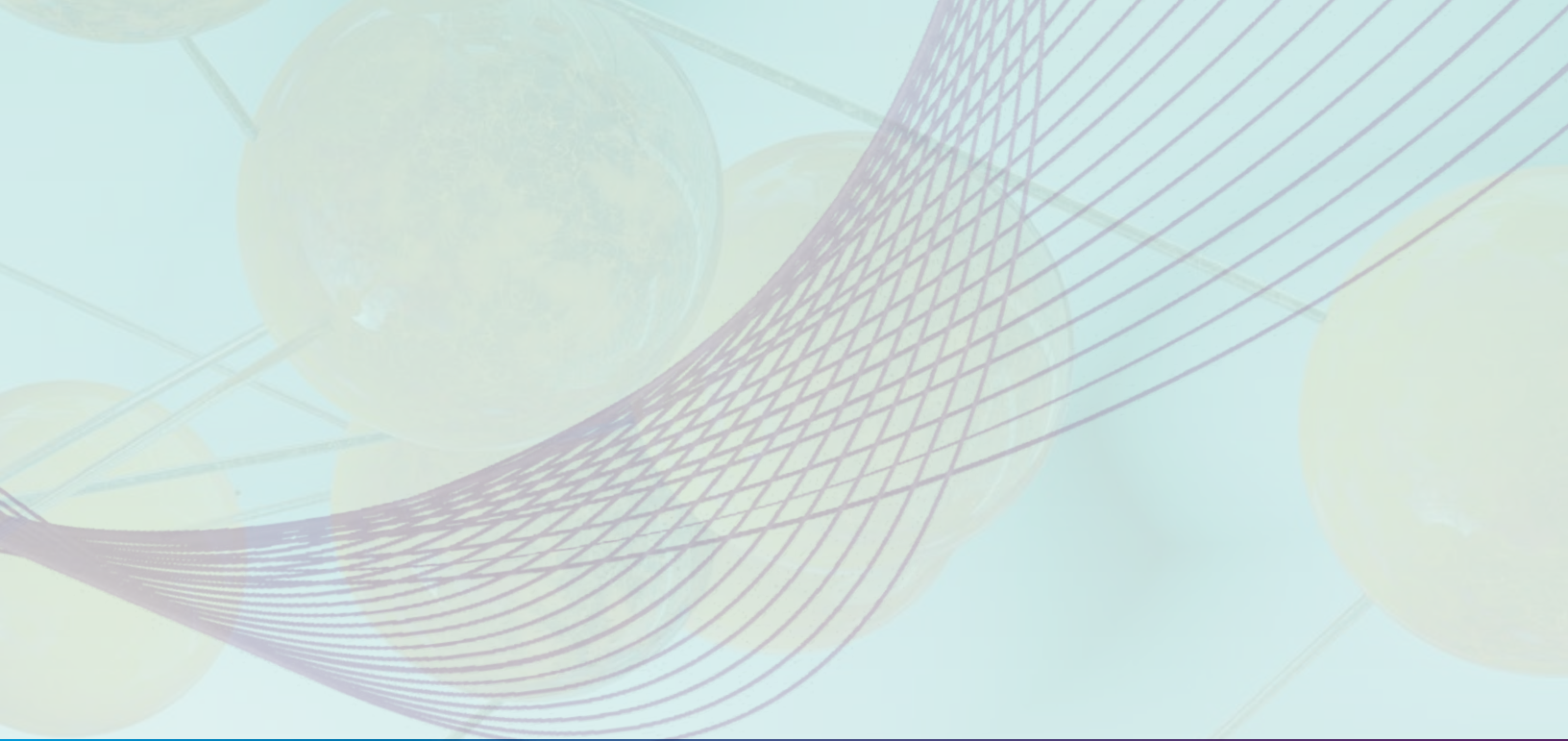
Rascher Nachweis von Substanzen in niedrigen Konzentrationen

Die Agilent All Ions MS/MS-Technik steht bei Agilents hochauflösenden Q-TOF LC/MS-Geräten zur Verfügung. In Kombination mit Agilents exklusiver und umfassender Personal Compound Database and Libraries (PCDL) bietet diese hochmoderne Technik einzigartige Möglichkeiten für das Screening nach Verbindungen in komplexen Gemischen – mit zuverlässigen Ergebnissen.

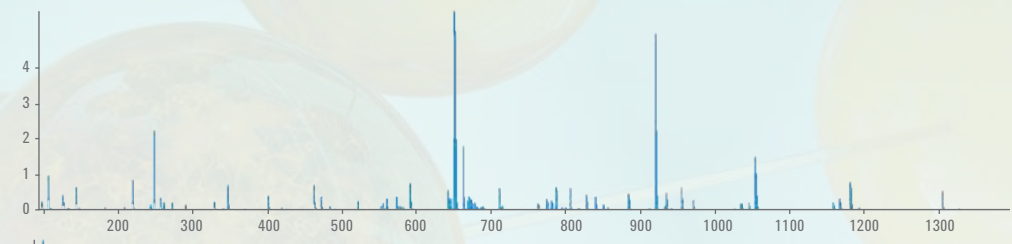


Bei herkömmlichen datenabhängigen MS/MS-Experimenten werden Peaks von Substanzen in niedriger Konzentration häufig übersehen. Bei Experimenten mit All Ions MS/MS werden alle Ionen aus der Ionenquelle zur Fragmentierung in die Kollisionzelle geleitet. Anschließend werden von der Datenanalyse-Software mithilfe der MS/MS-Spektren aus der PCDL zuverlässig die in der Probe vorhandenen Verbindungen extrahiert.

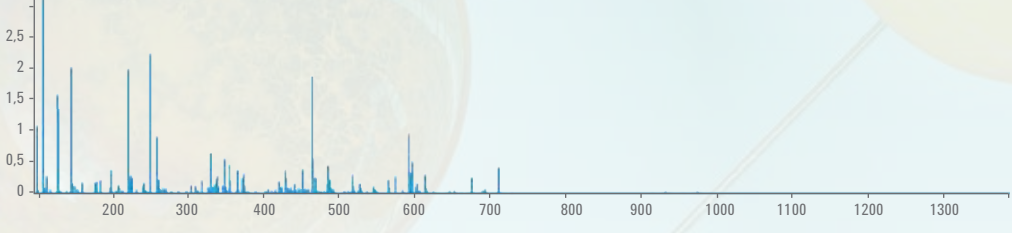
Agilent All Ions MS/MS ist zusammen mit der Ionenmobilitätsspektrometrie besonders leistungsfähig, denn die Ionendriftzeit steuert eine zusätzliche Trenndimension bei, mit der die Komplexität der Probe weiter reduziert und der Nachweis von Substanzen in niedrigen Konzentrationen verbessert werden kann. Der Vorteil: weniger Unsicherheit bei der Identifizierung von Verbindungen und niedrigere Nachweisgrenzen für Spurensubstanzen.



A



B



Agilent All Ions MS/MS wurde zur Identifizierung von niedrig konzentrierten Peptiden in einer komplexen Serum Mischung eingesetzt. Der gekennzeichnete Peak aus der LC-Trennung enthielt sechs bis sieben Peptidkomponenten, die, wie die oben dargestellte Heat Map für die Driftzeit zeigt, aufgelöst wurden. Mit LC und MS allein konnten sie weder nachgewiesen noch identifiziert werden. A) Fragmentationsspektrum des gekennzeichneten Peaks bei 30 V. B) Fragmentationsspektrum des nach Drift getrennten dreifach geladenen Peptids HLVDEPQNLIK bei 20,26 ms.

DEN UNTERSCHIED WERDEN SIE BEMERKEN

Trennung von Molekülen nach Größe und Form

Der Wert für den Kollisionsquerschnitt (CCS), ein Maß für die Größe und Form von Verbindungen, ist bei der Charakterisierung von Polymeren, Proteinen, Peptiden, Lipiden, Biopharmazeutika und vielen anderen Molekülen von Nutzen. Bei diesen Untersuchungen kann mithilfe des CCS-Wertes häufig zwischen verschiedenen Formen von Isomeren oder strukturell ähnlichen Molekülen oder Komplexen unterschieden werden.

Die CCS-Werte werden aus Ionenmobilitätsmessungen abgeleitet und können dank des einzigartigen Agilent Designs in der Driftröhre mit linearem Feld direkt berechnet werden.

Mit dem Agilent 6560 können Sie CCS-Werte routinemäßig auf weniger als 2 % genau bestimmen. Die Driftröhre mit linearem Feld ermöglicht eine ausgezeichnete Kontrolle der experimentellen Parameter (Druck, Temperatur, elektrisches Feld), die das System während des Mobilitätsexperiments aufrechterhält.



Analyt		Masse [Da]	CCS Agilent IM-MS ¹ [Å ²]	CCS Literatur ² [Å ²]	Differenz in Prozent
Tetrapropylammonium	TAA3	186,36	144,1 ± 0,7	143,80	0,22 %
Tetrabutylammonium	TAA4	242,46	166,6 ± 0,9	166,00	0,36 %
Tetrapentylammonium	TAA5	298,57	190,1 ± 1,0	190,10	0,02 %
Tetrahexylammonium	TAA6	354,68	213,5 ± 1,0	214,00	0,23 %
Tetraheptylammonium	TAA7	410,78	236,4 ± 0,4	236,80	0,17 %
Tetraoctylammonium	TAA8	466,54	256,6 ± 0,7	258,30	0,64 %
Tetradecylammonium	TAA10	579,11	293,5 ± 0,7	-	-
Tetradodecylammonium	TAA12	691,32	319,0 ± 0,9	-	-
Tetrahexadecylammonium	TAA16	915,04	361,5 ± 0,9	-	-
Tetraoctadecylammonium	TAA18	1027,16	379,0 ± 1,7	-	-

1. May, J.C., Goodwin, C.R., Lareau, N.M., Leaptrot, K.L., Morris, C.B., Kurulugama, R.T., Mordehai, A., Klein, C., Barry, W., Darland, E., Overney, G., Imatani, K., Stafford, G.C., Fjeldsted, J.C., McLean, J.A. *Anal Chem* 2014, (Feb 18, 2014; 2107-2116) Conformational Ordering of Biomolecules in the Gas-Phase: Nitrogen Collision Cross-Sections Measured on a Prototype High Resolution Drift Tube Ion Mobility-Mass Spectrometer.

2. Campuzano, I., Bush, M. F., Robinson, C. V., Beaumont, C., Richardson, K., Kim, H., Kim, H. I. *Anal Chem* 2012, 84(2) 1026-33. Structural Characterization of Drug-like Compounds by Ion Mobility Mass Spectrometry.



DARSTELLUNG DER DATEN

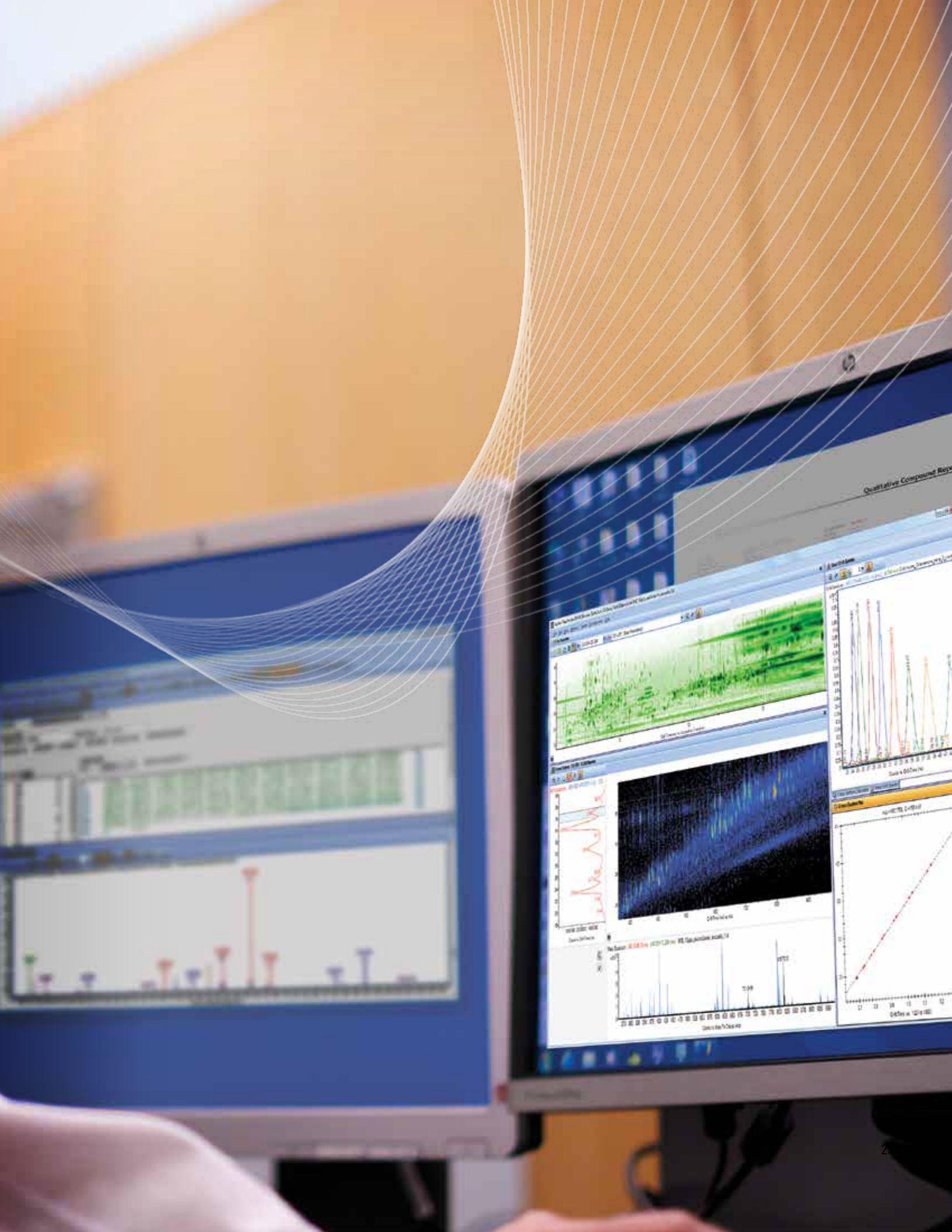
Die MassHunter-Software verschafft Ihnen den Durchblick

Um den analytischen Nutzen dieses Systems zu maximieren, bietet Agilent eine verbesserte MassHunter-Software zur Darstellung der Ionenmobilitätsdaten an. Mit dieser Software können Sie Daten zur Mobilität und Masse analysieren und auf einfache Weise präzise Kollisionsquerschnitte berechnen.

DIE EINFACHSTE UND SCHNELLSTE ART, IHRE DATEN ZU VERSTEHEN

Die besonderen Stärken der Agilent MassHunter-Software:

- **Diagramme in hoher Qualität** Klare Anzeige (und Präsentation) Ihrer Daten.
- **Intuitive, interaktive, verlinkte Navigation** Einfache Interpretation der wichtigen Details.
- **Simultane Betrachtung aller drei Trenddimensionen** Verständliche, im Kontext dargestellte Ansichten Ihrer Daten, die die Darstellung des mehrdimensionalen Raums erleichtern.
- **Einfache Datenfilterung in jeder bzw. allen Dimensionen** Reduzierte Komplexität bei der interaktiven Betrachtung und der automatisierten Verarbeitung.
- **Dynamische Datenanzeige** Vergleichen von Daten innerhalb der gesamten Datendatei oder zwischen verschiedenen Datendateien.
- **Einfache, direkte Berechnung von Werten für den Kollisionsquerschnitt** Keine Notwendigkeit einer verbindungsklassenspezifischen Kalibrierung.



Weitere Infos unter

www.agilent.com/chem/imq-tof

Einen Vertreter von Agilent kontaktieren

agilent.com/chem/quote

USA und Kanada

+1-800-227-9770

agilent_inquiries@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

Asien/Pazifik

inquiry_lsca@agilent.com

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2014
Gedruckt in den USA, 23. Mai 2014
5991-3640DEE



Agilent Technologies