

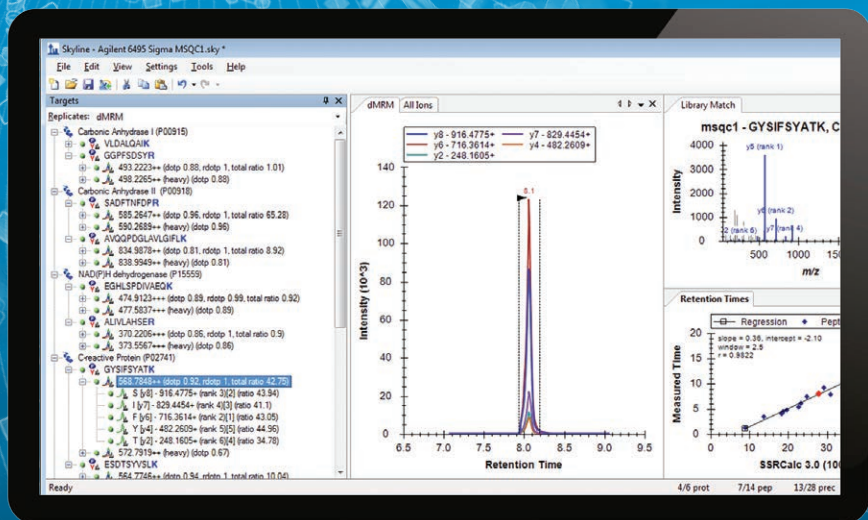


由华盛顿大学 MacCoss 团队开发的

SKYLINE 靶向蛋白质组学软件

采用安捷伦解决方案发现新通路

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

为您的研究选择合适的工具

在靶向蛋白质分析和定量中，使用合适的工具将对整个进程大有帮助。带有合适软件的合适仪器会大大加速您的研究进程，使您的工作更轻松。例如，安捷伦液质联用仪与由西雅图华盛顿大学 MacCoss 团队开发出的 Skyline 软件的组合。

得益于前沿实验室的努力，Skyline 已成为一款应用广泛、业界权威的免费 Windows 客户端应用程序。它还可以与安捷伦仪器和软件实现非常完美的集成。

定制化功能

Skyline 软件专为蛋白质组学研究而设计。软件界面能够让所有蛋白质组学的研究人员体验到从蛋白质到多肽，再到 MRM 离子对这一简洁直观的过程。

我们相信您会喜欢这种风格。因为安捷伦也是如此！

作为 Skyline 的长期支持者，安捷伦已经与 MacCoss 实验室的科学家建立了密切的关系，这使得安捷伦仪器可以使用定制的软件功能。我们共同在 Skyline 中创建了实用程序，从而实现了这款开源软件与安捷伦自动化软件之间的连接。

无缝集成

安捷伦已经开发出一款名为安捷伦 Automation 的独特软件，它能够帮助您简化 MRM 方法开发，提高工作效率。安捷伦 Automation 将安捷伦三重四极杆系统与 Skyline 连接起来，能够创建全面优化、根据保留时间安排的 MRM 方法，而且完全无需用户干预。

两款程序的简介

突出定量满足以蛋白质为中心的研究：

MassHunter

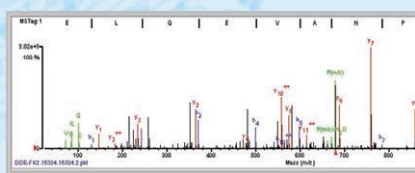
- 常规定量分析
- 用于检测异常值的标示和可视化实用工具
- 将 tMRM 谱图与谱库数据匹配，以确认多肽

Skyline

- 以蛋白质为中心的架构
- 用于数据审查的有效可视化工具
- 有价值多肽的 MRM 预测
- 用于预测保留时间和谱图匹配的强大工具
- 根据用户反馈不断改进

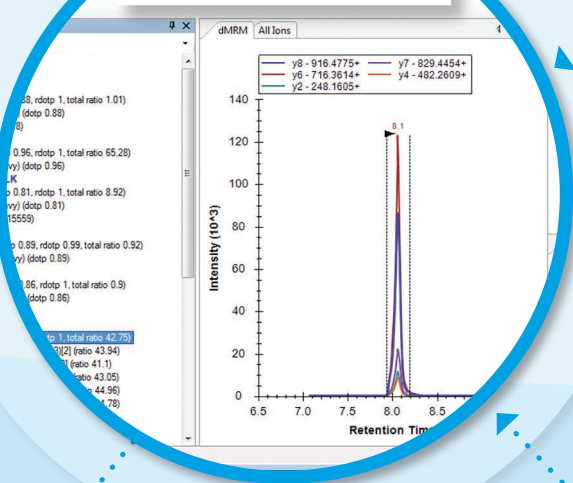
Skyline 为多肽分析方法开发和以蛋白质为中心的数据审查提供了一个良好环境。MassHunter Quant 软件是多肽常规绝对定量分析的理想选择。

Skyline 与安捷伦产品的连通性



Spectrum Mill

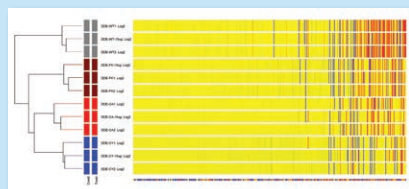
SKYLINE 软件



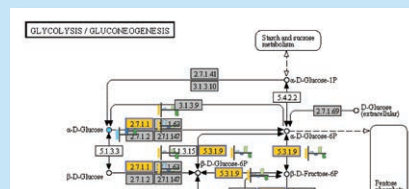
安捷伦 Q-TOF 系统



安捷伦三重四极杆系统



Mass Profile Professional

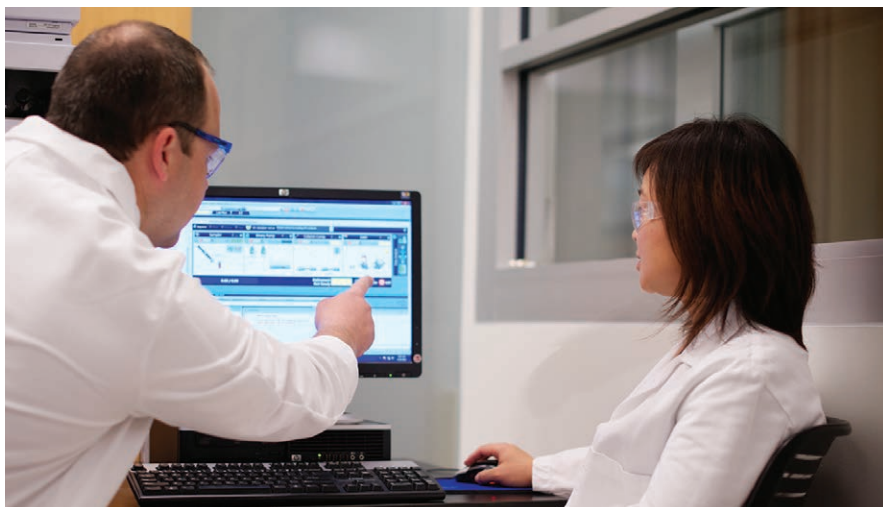


Pathway Architect

突破常规 MRM 的极限

科学家通常采用三重四极杆质谱对已知蛋白质进行定量分析。但是随着样品复杂性的增加，获取所需定量离子和定性离子信号的能力达到了多反应监测 (MRM) 的实际极限。

因此，蛋白质组学研究人员不时在安捷伦仪器和 Skyline 软件的协助下试图采用多种不同途径解决这个问题。



两种模式

Skyline 能够支持安捷伦开发出的两种模式，旨在突破三重四极杆系统中常规 MRM 分析的极限：

第一种是动态 MRM 采集，即只有在多肽被洗脱出时才会采集 MRM 离子对信号。这就可使您从容应对大量多肽分析的同时，对窄峰实现准确定量。相对于时间分段法来说，动态 MRM 在任意时间点所监

测的离子对数目都会显著减少，因此可以获得更理想的结果，从而大大缩短 MS 扫描循环时间，同时延长驻留时间。

第二种是触发式 MRM 采集，它添加了数据依赖型逻辑以测定附加离子对，从而实现多肽的确证。触发式 MRM 比常规数据依赖型 MS/MS 扫描更快速、更灵敏，可以产生 MassHunter Quant 用于进行谱库匹配的伪 MS/MS 谱图。

自动优化

安捷伦的 Skyline 自动化工具可自动进行重要的方法开发和优化步骤，使方法的新建过程大大得到简化。Skyline 与 MassHunter 的联合使用可以提供一个简便的解决方案：您只需将样品放入样品瓶并设置好参数，其余步骤都可以交给软件完成。当您几小时后回来，仪器方法即可准备好用于样品分析。

需要更换色谱柱或方法时，在复杂方法中调整保留时间可能会非常耗时。MassHunter 中的保留时间校准工具专为轻松调整方法而设计，让您可以从容应对保留时间的变化。Skyline 同样具备 iRT 功能，可以保存并预测多肽的保留时间。

将安捷伦 MassHunter 和 Skyline 软件结合使用，能够使您的多肽定量分析更快速、更简便和更高效。

使用安捷伦 Automation 工具在三个简单步骤中自动运行 MRM 分析

1 确定 RT

- 创建 Skyline 文档
- 添加蛋白质/多肽
- 输出 MRM 方法
- 运行 MRM 分析

2 优化 CE

- 导入 MRM 结果
- 导出 CE 优化方法
- 运行 CE 优化方法

3 创建最终方法

- 导入 CE 优化结果
- 导出动态 MRM 的最终方法
- 运行最终方法



安捷伦 Automation 工具允许用户选择 MRM 方法开发的步骤和参数。

将数据转化为答案

三重四极杆质谱仪是少量蛋白质靶向、定量蛋白质组学分析的理想仪器。另一方面，如果您希望监测大量蛋白质，则可以选择 Q-TOF 质谱仪作为靶向 MS/MS 蛋白质组学的分析仪器。靶向 MS/MS 蛋白质组学以数据非依赖型模式收集多肽 MS/MS 谱图。它将采集到的谱图与多肽 MS/MS 谱库进行对比，以鉴定特定目标蛋白质中的多肽。

灵活的数据采集能力

Skyline 和 MassHunter 均支持数据非依赖型分析，包括通过隔离及分裂一系列窄质量范围来帮助您降低分析复杂性的宽带隔离。此外，安捷伦的数据非依赖型分析还包括全离子 MS/MS。全离子 MS/MS 不使用四极杆分离以及碰撞池中带有两种或两种以上碰撞能量的碎片离子。由于安捷伦 Q-TOF 可以实现非常准确的质量测量，有助于准确的谱图数据挖掘和数据匹配，因此以上两种方法均非常有效。而且，Skyline 可以使用公共与个人创建的多肽 MS/MS 谱库，例如由安捷伦的 Spectrum Mill 软件生成的谱库。

Skyline 在安捷伦 TOF 和 Q-TOF 仪器中还可支持数据依赖型采集的 MS1 全扫描过滤。在这种情形下，利用 MS1 数据进行特定目标多肽的定量分析，同时使用 MS/MS 谱库来鉴定多肽。

安捷伦 Q-TOF 是一款功能十分强大的仪器，可用于发现蛋白质组学和靶向 MS/MS 蛋白质组学分析。虽然 MRM 模式的三重四极杆质谱具有高灵敏度，但 Q-TOF 具有的鉴定和定量功能对您的实验室可能更重要。在靶向定量模式下运行时，Skyline 软件专门设计用于对 Q-TOF 数据进行无缝处理。

深入理解

不管您用哪种方法，得到数据仅仅是第一步。当您需要将数据转化为答案时，安捷伦 Mass Profiler Professional (MPP) 软件可以进行复杂蛋白质实验的多变量分析，精准定位与生物学差异有关的关键蛋白质。Skyline 软件可以将安捷伦仪器结果轻松导出到 MPP 中。由于 Skyline 以蛋白质为中心，因此可以利用导出结果包含的蛋白质标识号，在 MPP Pathway Architect 模块的生物学通路中实现蛋白质的可视化。

Skyline 支持所有不同的安捷伦 Q-TOF 数据采集模式

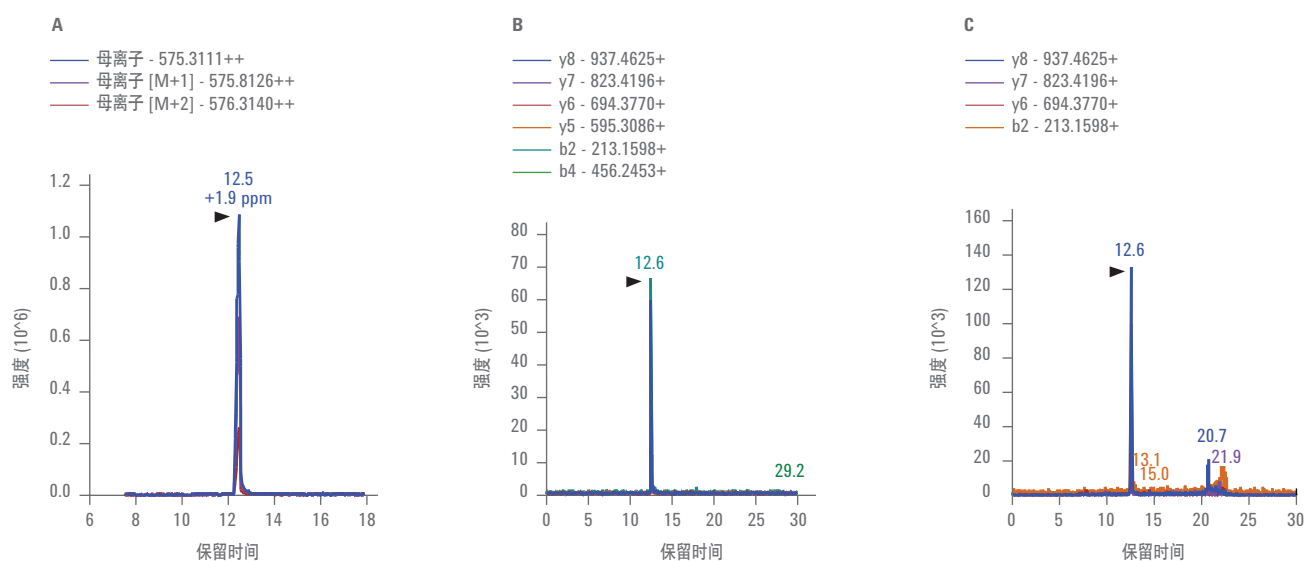
数据依赖型 MS1 全扫描过滤



宽带隔离



全离子 MS/MS



某个多肽的 Skyline 数据处理结果，依据 A) 带有 MS1 全扫描过滤的数据依赖型结果；B) 使用宽带隔离的数据非依赖型分析，以及 C) 使用安捷伦全离子 MS/MS 数据非依赖型分析

更多信息请访问

www.metabolomics-lab.com

查找当地的安捷伦客户服务中心，请访问

agilent.com/chem/contactus

安捷伦客户服务中心：

免费专线：800-820-3278

联系我们：

customer-cn@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/quote

仅限研究使用。不可用作诊断方法。

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2014

2014 年 10 月 22 日，中国印制

5991-5248CHCN



Agilent Technologies