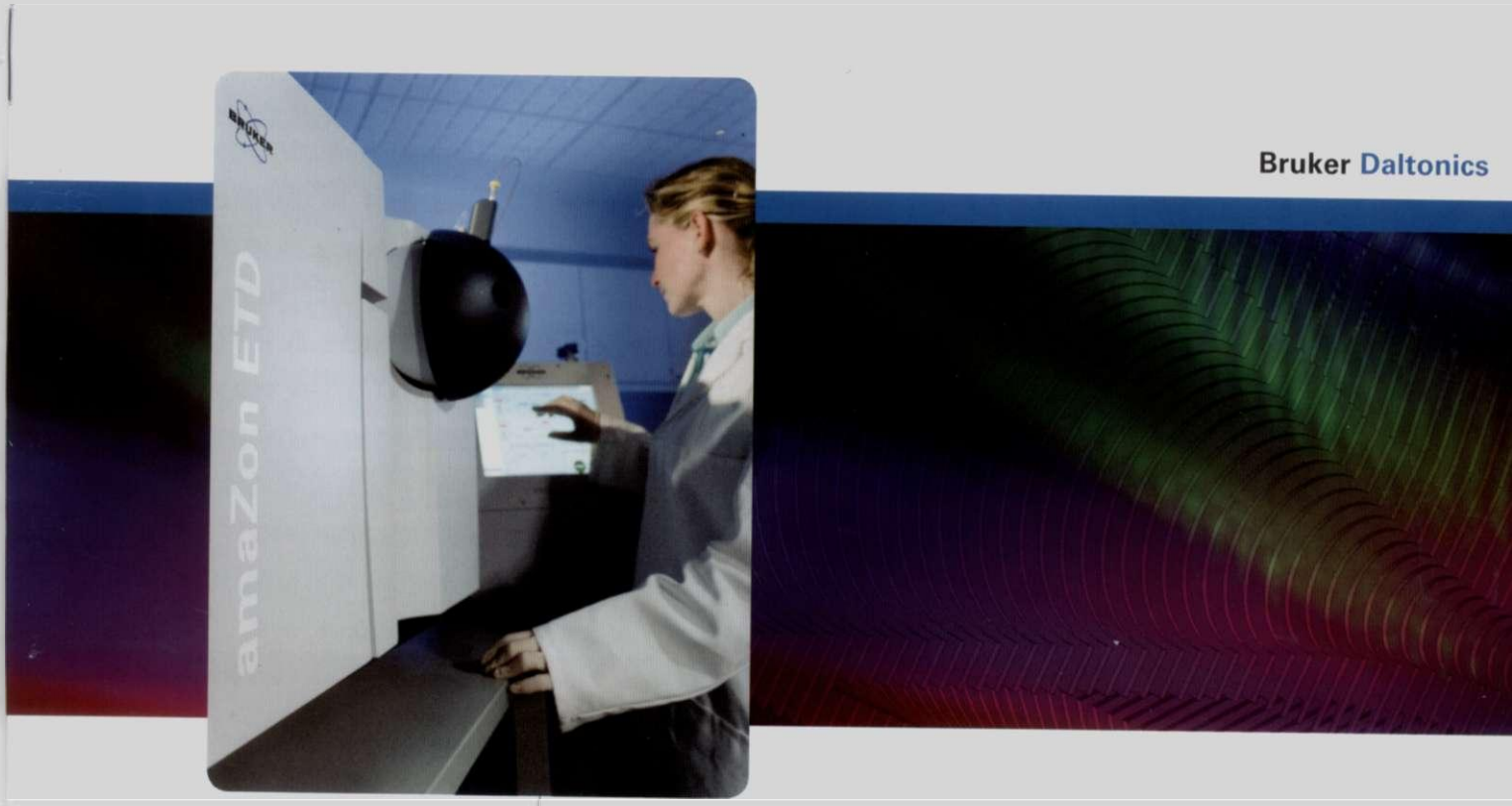
BRUKER



Bruker Daltonics

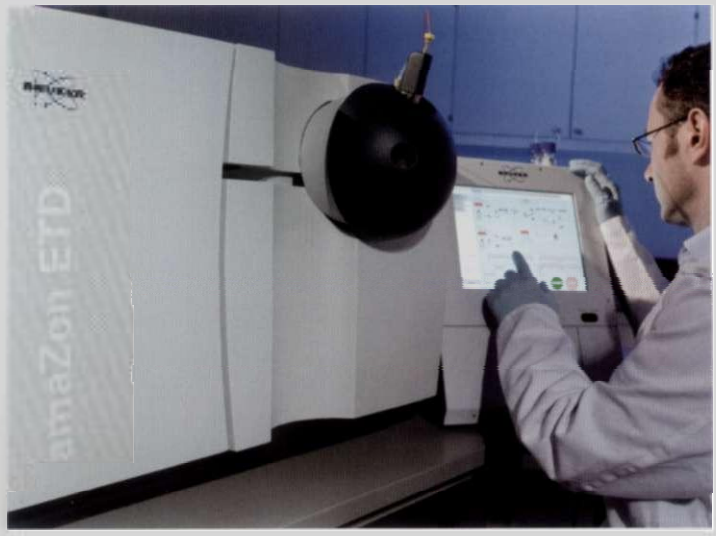
amaZon

- Новое поколение ионных ловушек

think forward

Ion-Trap MS

Высокотехнологичные инновации



Ионная ловушка amaZon – это совокупность наиболее успешных разработок фирмы Bruker Daltonics в области масс-спектрометрии. Компания Bruker занимает лидирующее положение в области создания ионных ловушек, включая сферические ионные ловушки высокой емкости со сверхбыстрым нелинейным выбросом ионов и ETD (диссоциация с переносом электрона). amaZon продолжает совершенствовать технологию ловушек для масс-спектрометрии, в первую очередь, за счет принципиальных инноваций и улучшения технических характеристик.

amaZon обеспечивает более высокое качество работы ионных ловушек, применяя целый набор новых технологий.
Огромный опыт работы компании Bruker с ионными ловушками позволил создать серию amaZon с улучшенными рабочими характеристиками:

- Ионная оптика на базе двойной воронки для непараллелльного переноса ионов, определяющая увеличение чувствительности более чем на порядок.
- Непревзойденная скорость сканирования, 52000 а.е.м./сек при ширине пика в 0,58 Да, позволяет применить скоростную UHPLC (жидкостная хроматография ультравысокого давления).
- Разрешающая способность до 20000 FWHM при полном сканировании в интервале от 50 до 3 000 m/z и скорости сканирования 4600 а.е.м./сек, что важно для интерпретации ETD PTR (реакция протонного переноса) спектров в реальном времени LCMS (комбинация жидкостной хроматографии и масс-спектрометрии).
- Новейшая ETD/PTR технология для высокоэффективной, сверхнадежной и сверхчувствительной фрагментации пептидов и белков.
- Изменение полярности без задержки – высокоскоростное переключение ионной полярности без потери чувствительности и времени. Скорость сбора данных при масс-спектроскопии с комбинированной полярностью выше 20 Гц идеальна для разделения методом UHPLC.
- Доступ к специальным библиотекам MS^n amaZon представляет собой уникальный спектрометр для многоцелевого MS/MS скрининга.

Серия приборов amaZon выпускается в двух вариантах:

amaZon ETD для протеомики
amaZon X для определения низкомолекулярных соединений.

Серия amaZon, спроектированная для скрининга и идентификации соединений в области протеомики и метаболомики, является самой прогрессивной в настоящее время.

… Применяйте наши достижения для эффективного решения Ваших задач

Новый качественный уровень в любых исследованиях.

Протеомика:
- Наиболее эффективное определение белковой последовательности.
- Однозначная характеристика посттрансляционных модификаций (PTM).
- „Top-Down" протеомика с самым эффективным перекрыванием белковых последовательностей.
- Полный информационный поиск и сохранение данных с помощью специализированной биоинформатики.

Идентификация и количественный анализ метаболитов:
- Высочайшая скорость необходимая для определения многокомпонентных трудноразделяемых образцов.
- Интуитивно понятное программное обеспечение для предсказания метаболитов, дифференцированная хроматографическая и статистическая обработка метаболических профилей.
- Достоверное количественное определение при высокой стабильности и максимальной чувствительности.

Скрининг:
- Целевое подтверждение на основе специальных библиотек MS/MS.
- Определение максимального количества целевых молекул с ультрабыстрым переключением полярности.
- Интуитивно понятные модули программного обеспечения для целевого анализа и количественного определения.
- Исключительно надежная рабочая конструкция.

Общая химия:
- Непревзойденная гибкость анализа для всех MS и MS^n режимов.
- Широкие возможности выбора источников ионизации при атмосферном давлении (API).
- Исключительная надежность.
- Открытый доступ к программным ресурсам через интернет.

Последние технологические достижения:

Новая запатентованная двойная ионная воронка с высокой пропускной способностью (слева) обеспечивает уникальную чувствительность в любом эксперименте. Быстро сканирующий детектор последнего поколения (справа) оптимизирован для максимальной скорости сбора данных и определения масс.

Полная характеристика белков на масс-спектрометре amaZon ETD

Высокая чувствительность и скорость для идентификации большего количества белков

Список пептидов, идентифицированных из 5 нг лизата клеток *E. Coli* с FDR 1,5%. 472 белка были найдены в базе данных Mascot (Macot Mudplit scoring, „require bold red", SwissProt 56.1, E. Coli, FDR 1.5%). В нижней части рисунка показаны пептиды, определенные в образце №6 и их последовательности. Внизу приведен MS/MS спектр одного из определенных пептидов.

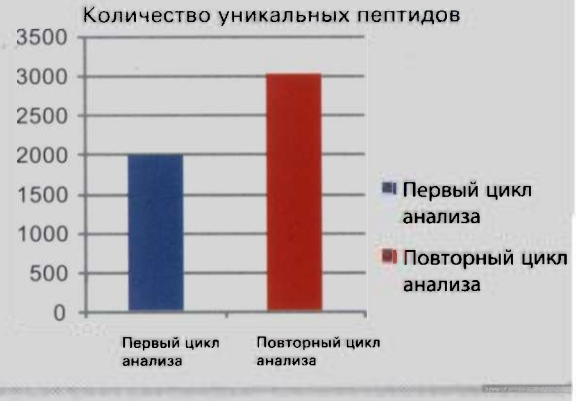
Увеличение числа определенных пептидов после повторного анализа. Все пептиды, определенные в первом цикле анализа, были внесены в исключающий список для того, чтобы определить пептиды с еще более низкой концентрацией в повторном цикле анализа.

Масс-спектрометр amaZon ETD сконструирован для проведения самых сложных анализов белков. amaZon ETD обеспечивает эффективную работу ионной ловушки с высокой скоростью сбора данных для максимального количества MS/MS спектров и ETD/PTR самого последнего поколения, а также чувствительности, которая на порядок выше, чем у обычной ионной ловушки.

Надежная идентификация белков в пробах с низким содержанием вещества

Высокая чувствительность и скорость MS/MS анализа amaZon ETD позволяет определить максимальное количество белков в сложных белковых смесях. Более 470 белков может быть достоверно определено (с FDR 1,5%) за один 90-минутный цикл LC-autoMS/MS пробы, содержащей только 5 нг лизата клеток *E. Coli*. Высокая чувствительность amaZon позволяет пользователю подвергать MS/MS анализу даже следовые количества пептидов. На этом примере показано, что приблизительно 2000 уникальных пептидов с достоверностью > 25 было определено на amaZon ETD за один цикл анализа 50 нг фрагментированного образца клеток *E. Coli*. Эти 2000 пептидов были исключены из дальнейшего анализа, и еще 1000 минорных пептидов было определено при повторном введении той же пробы.

Определение пептидов низкой концентрации



Новейшие достижения для анализа белков

Характеристика пост-трансляционных модификаций

Подробная характеристика белков комбинацией методов Bottom-up и Top-Down

ETD/PTR интактных белков

amaZon ETD, оборудованный ячейкой CID и современным модулем ETD/PTR, дает возможность анализа интактных белков методом Top-Down и их детального описания с помощью Bottom-up подхода. amaZon ETD обеспечивает ширину пика менее 0,1 единицы для многозарядных ионов при высокой скорости сканирования (4600 ед./сек), что позволяет получать высокоточные данные и достоверно идентифицировать белки. Широкий диапазон до 3000 m/z дает возможность идентифицировать максимальное количество белковых фрагментов, что приводит к наиболее полному определению белковой последовательности при помощи ионной ловушки.

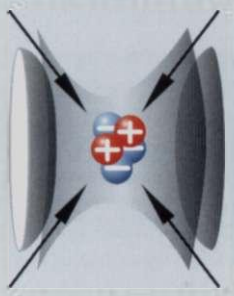
ETD анализ модифицированных пептидов

amaZon ETD определяет место любой белковой модификации. Даже многочисленные модификации белков и пептидов определяются одновременно.

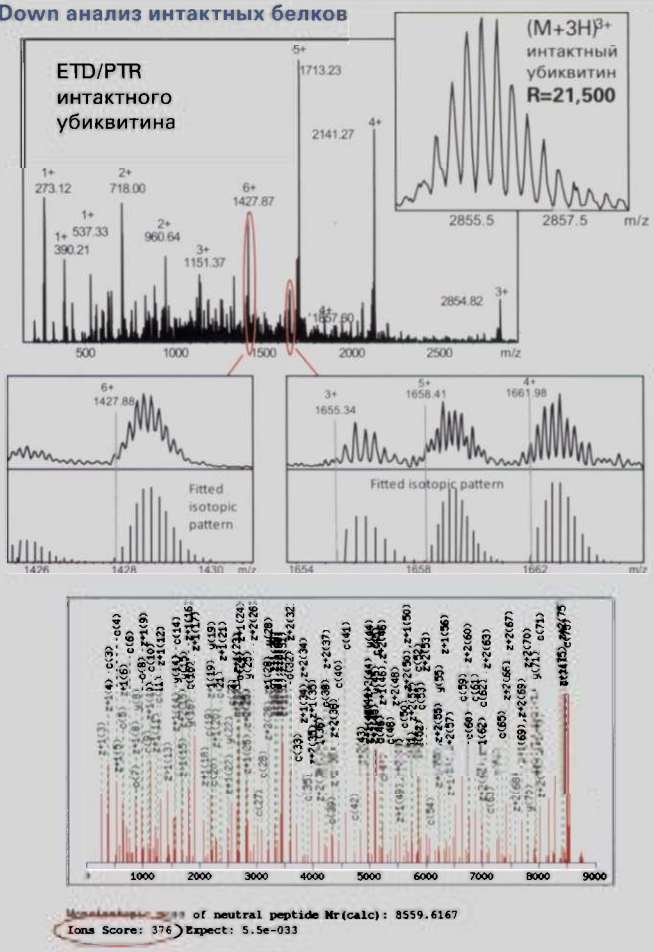
Идентификация интактного белка с высоким разрешением на amaZon. На вставке показано точное определение массы (R=21500) трехзарядного иона-предшественника интактного убиквитина (молекулярная масса 8565 Да). ETD/PTR в режиме максимального разрешения SNAP II™ определяет фрагментационные ионы с зарядом до 6+. Технология распознавания пиков (SNAPII™), запатентованная фирмой Bruker, надежно определяет массы моноизотопных фрагментов. Полная последовательность убиквитина определяется после деконволюции (см. ниже результат Mascot).

Сферические ионные ловушки лучше всего подходят для ETD/PTR

- Прямая диссоциация с помощью переноса электронов (ETD) как только анионы попадают в ловушку.
- Катионы и анионы сжаты в одном и том же сферическом объеме в центре ловушки. Максимальное взаимодействие между ионами дает высоко эффективную фрагментацию ETD.

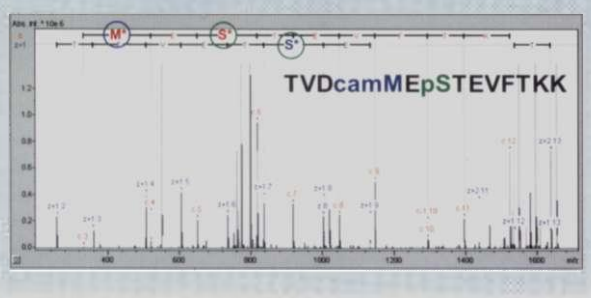


Top-Down анализ интактных белков



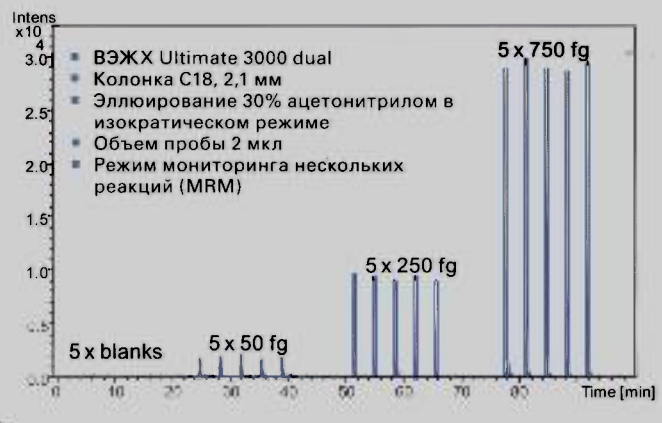
ETD-MS/MS спектр $(M + 3H)^{3+}$ пептида, полученного ферментативным гидролизом с последующей наножидкостной хроматографией в течение 11,8 мин. Карбамидометилирование метионина (M156), похожее на природное фосфорилирование по S158, было обнаружено.

Нецелевое определение белковых модификаций



Определение низкомолекулярных соединений на масс-спектрометре amaZon X

Несравненная чувствительность



Многократное инжектирование резерпина в количестве от 50 до 750 фемтограмм. Самое малое количество (50 фг) дает соотношение сигнал/шум около 40 : 1.

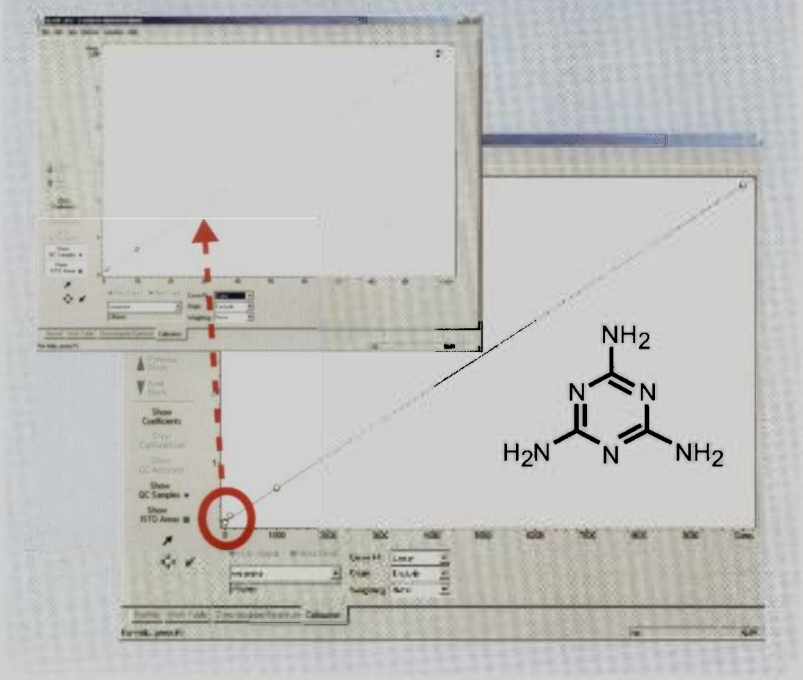
Исключительная чувствительность достигается с помощью новой технологии ионной воронки

amaZon X наиболее быстродействующий и наиболее чувствительный MS и MS^n спектрометр для подробнейшей характеристики новых химических веществ, метаболитов, продуктов синтеза и других небольших молекул. Сверхмалые количества образца можно анализировать с прекрасным соотношением сигнал/шум и отличной воспроизводимостью.

Высокий динамический диапазон при количественном анализе

amaZon X может анализировать пробы, концентрации которых различаются по меньшей мере на четыре порядка. Успешные измерения концентрации на amaZon X возможны даже при низком диапазоне ppb. Примером линейного динамического интервала прибора может служить анализ примесей в пищевых и фармацевтических продуктах.

Динамический диапазон в четыре порядка



Анализ меланина в динамическом интервале от 1 ppb до 10 ppm (колическтво образца отличается на четыре порядка). Время анализа составило 5 мин на жидкостном хроматографе Dionex ultimate 3000™ с использованием колонки Acclaim Mix-Mode Wax-1 (2,1x150 мм, 5 мкм) при 30°C в режиме HILIC (жидкостная хроматография гидрофильных взаимодействий). 10 мкл пробы было введено при скорости потока 300 мкл/мин. Прекрасная линейность результатов представлена на рисунке.

Высокая скорость

Высокая скорость сканирования с „нулевой задержкой" при изменении ионной полярности

Новое электронное исполнение и модифицированная система ионного переноса обеспечивают очень быстрое переключение полярности и высокую скорость сбора данных без потерь в скорости или чувствительности анализа. В режиме MS специальная частота импульсов 20 Гц достигается даже при переключении полярности. По меньшей мере три цикла полного ± MS и дополнительно MS/MS могут быть сделаны для типичных пиков UHPLC.

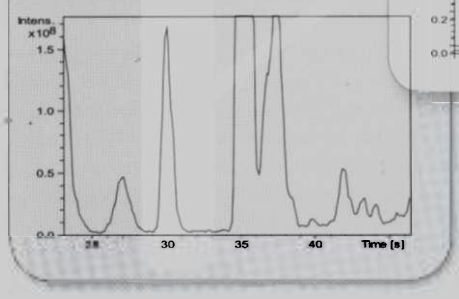
Специализированные компоненты программного обеспечения осуществляют эффективный информационный поиск данных для низкомолекулярных соединений.

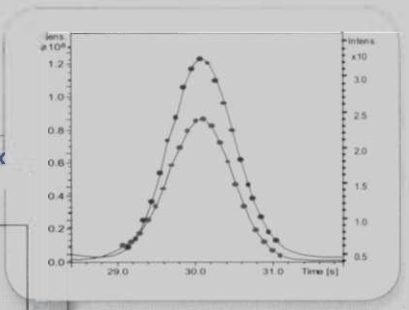
- Программное обеспечение Metabolite Tools™ для идентификации собственных и примесных метаболитов.
- ACD Labs MS Manager™ для расшифровки и классификации структур.
- Compass Security Pack для работы с регулируемым оборудованием Compass OA/QC: web-поддержка при использовании LCMS систем для рядовых пользователей.

Полностью автоматический и быстрый скрининг токсинов и наркотических веществ с поиском в MS/MS библиотеках

Серия ионных ловушек amaZon предоставляет всю необходимую информацию для MS^n скрининга. Вещества можно быстро и достоверно идентифицировать с помощью комбинации UHPLC и автоматического MS/MS с поиском в специальных библиотеках. С помощью модуля программного обеспечения Compass OA от Bruker возможно проводить типичные скрининговые эксперименты нажатием одной кнопки.

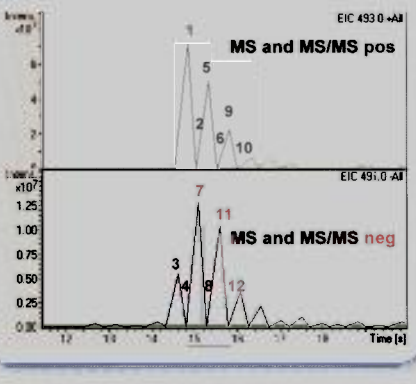
Высокая скорость сбора данных





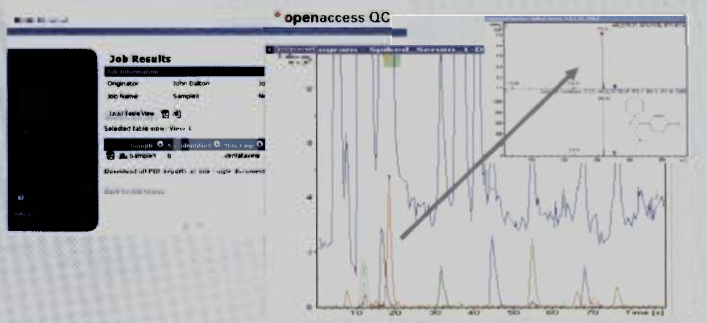
Увеличенное изображение выделенного пика демонстрирует высокую скорость сбора данных при MS анализе при 20 Гц (кривые с красными и синими точками относятся к MS спектрам положительных и отрицательных ионов, соответственно) даже в режиме изменения полярности.

Автоматическая идентификация веществ. Скрининг в среде Open Access с поиском в библиотеках



Хроматограммы выделенных ионов после UHPLC фармацевтических препаратов. Изображение одиного пика UHPLC увеличено (примерно 1 сек FWHM): MS в режиме регистрации положительных ионов и MS/MS (1 и 2) и последующие MS в режиме регистрации отрицательных ионов и MS/MS (3 и 4). Три из этих циклов получены в течение выхода узкого пика на UHPLC. В результате, получено всего 12 MS и MS/MS спектров.

Автоматическая идентификация соединений с помощью функции MS/MS библиотеки



8 Антидепрессантов были добавлены в плазму, которая была подвергнута разделению UHPLC в супербыстром градиенте в течение 1,5 мин. Был проведен MS/MS, и полученные MS/MS спектры анализировались при помощи собственных специализированных библиотек. Все 8 компонентов были успешно определены. На вставке показано, что экспериментальные данные совпадают с данными библиотеки данных MS/MS для соединения 1. Полный анализ можно осуществить нажатием одной кнопки в среде Open Access с использованием программного обеспечения Compass OA.