

Bruker Daltonics



micrOTOF-Q II

- Качество и надежность результатов

think forward

ESI-Qq-TOF

Преимущество: максимальная достоверность результатов



Вам необходима максимальная надежность Ваших результатов?

Новый ESI-Qq-TOF масс-спектрометр компании Bruker Daltonics microTOF-Q II™ создан на основе последних технологических достижений, которые обеспечивают максимальную достоверность Ваших данных в области метаболомики или протеомики, а также для идентификации малых молекул.



Используемые одновременно, три информационных измерения обеспечивают максимальную надежность Ваших аналитических решений:

- измеряйте точные массы.
- идентифицируйте с помощью точных изотопных распределений (TIP).
- выигрывайте от сочетания возможности определения точных масс и TIP также при анализе фрагментов в режиме MS/MS.

Высокая точность определения масс, химические знания и алгоритм SmartFormula3D™ значительно сокращают число возможных молекулярных формул при генерировании списка кандидатов, что позволяет существенно повысить достоверность определения элементного состава данного хроматографического пика.

Уникальная надежность результатов на уровне точности sub-ppm доступна при определении формул в фармацевтическом анализе примесей, скрининге пестицидов, а также токсикологическом и допинг-анализе.

● Уникальность³ – узнайте больше, теперь это возможно!

Еще никогда это не было так просто:
уникальные возможности теперь
реализованы в современном настольном
приборе.

чувствительность

Получите максимальную возможную
чувствительность при использовании
ионного источника нового поколения
Apollo II™ с «ионной воронкой», значительно
повышающей эффективность трансмиссии
ионов.

точность

С прибором microTOF-Q II Вы получите
точность 1–2 ppm во всем чрезвычайно
широком динамическом диапазоне
(5 порядков).

разрешение

Превосходная разрешающая способность:
разрешение выше 17,500 – 20,000 (FWHM)!

анализ фрагментов

Используя уникальный квадрупольный
фильтр масс и квадрупольную ячейку
соударений для накопления родительских
и фрагментных ионов, масс-спектрометр
microTOF-Q II существенно расширяет
аналитические возможности прибора
microTOF, за счет анализа фрагментов
молекул. Это добавляет третий уровень
достоверности к предыдущим двум –
определению точной массы и анализу
точных изотопных распределений с
алгоритмом SmartFormula3D™.

Удобная, высокостабильная, одноэтапная
калибровка для автоматического
вывода данных обеспечивает простоту
использования прибора и его
преимущество перед всеми другими
ESI-Qq-TOF приборами.



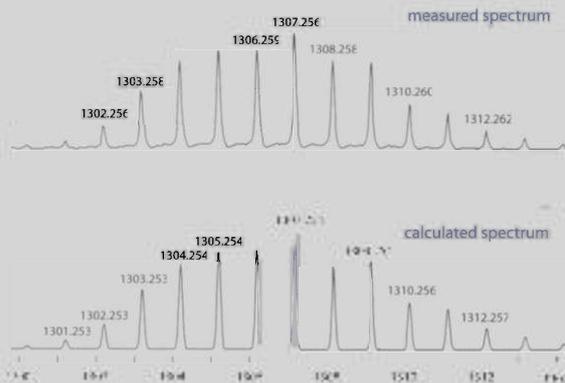
Получите гарантированно высокую
точность одновременно в MS и MS/MS
режимах, независимо от того, в каком
режиме – MS или MS/MS – Вы проводили
калибровку.

Таким образом, от надежного определения
химической формулы Вы находитесь на
расстоянии трех щелчков мышью.

**Получите новые возможности при
одновременном использовании всех
достоинств нашего прибора!**

Беспрецедентная надежность

Анализ изотопных распределений



MS анализ комплекса палладия с $C_{61}H_{65}N_4O_{15}Pd_2$ в синтетической химии. Изотопные распределения экспериментального и расчетного спектра (SmartFormula) практически совпадают, что приводит к повышению достоверности результатов структурного анализа.

Точность в органической химии

Регистрация точных масс и запатентованный алгоритм сравнения точных изотопных распределений SmartFormula3D™ от Bruker Daltonics обеспечивают беспрецедентную надежность результатов при идентификации неизвестных соединений.

Благодаря чрезвычайно широкому динамическому диапазону, по всей шкале масс достигается высокая точность измерения – что приводит к однозначному определению молекулярных формул.

Одной точности определения масс не достаточно: используйте изотопные распределения для более надежной идентификации

После генерирования списка возможных формул, экспериментальное изотопное распределение сравнивается с теоретическим – и определяется статистический фактор совпадения — SmartFormula™.

Способность micrOTOF-Q II регистрировать точные изотопные распределения приводит к сокращению списка из 50 возможных формул в пределах окна 2–5 ppm до одной единственной верной формулы при помощи SmartFormula3D™.

ISCID-MS/MS анализ комплекса палладия в синтетической химии.

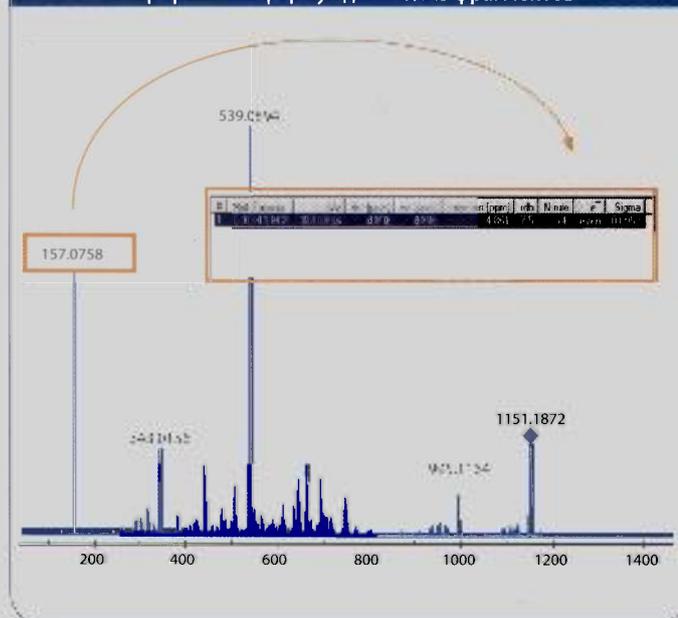
Фрагмент с m/z 157.0758 определен с ошибкой < 5 ppm, и сгенерирована формула при помощи SmartFormula3D.

Родительский ион обладал m/z 1307, см. выше.

При использовании прибора micrOTOF-Q II массы во всем динамическом диапазоне могут быть зарегистрированы с высокой точностью.

SmartFormula3D™: сочетание точной массы и точного изотопного распределения (TIP) при использовании прибора micrOTOF-Q II. Только единственная верная из 15 возможных формул выбрана при помощи SmartFormula3D.

Генерирование формул для MS/MS фрагментов



SmartFormula3D приводит к определению корректной формулы

#	Mol. Formula	m/z	err [ppm]	Sigma Rank
1	C 23 H 28 N 3 O 7	458.1922	1.2	1
2	C 20 H 20 N 13 O	458.1908	1.8	2
3	C 24 H 24 N 7 O 3	458.1935	4.1	3
4	C 21 H 33 N 8 P	458.1938	4.8	4
5	C 19 H 24 N 9 O 5	458.1895	4.7	5
6	C 19 H 34 N 5 O 2 P 2 S	458.1903	2.9	6
7	C 27 H 30 N 3 P 2	458.1909	1.5	7
8	C 18 H 25 N 11 O 2 P	458.1925	1.8	8
9	C 25 H 33 N 3 P 5	458.1913	0.7	9
10	C 27 H 28 N 3 O 2 S	458.1897	4.3	10
11	C 18 H 33 N 7 O P 5 2	458.1920	0.8	11
12	C 20 H 28 N 9 S 2	458.1904	2.8	12
13	C 24 H 32 N 3 O 2 S	458.1930	3.1	13
14	C 32 H 28 N 5			
15	C 35 H 24 N			

SmartFormula	m/z calc	err [ppm]	mSig
<input checked="" type="checkbox"/> C 23 H 28 N 3 O 7	458.1922	1.2	

SmartFormula
первичный список

SmartFormula
финальный список

● Точная масса, SmartFormula и MS/MS

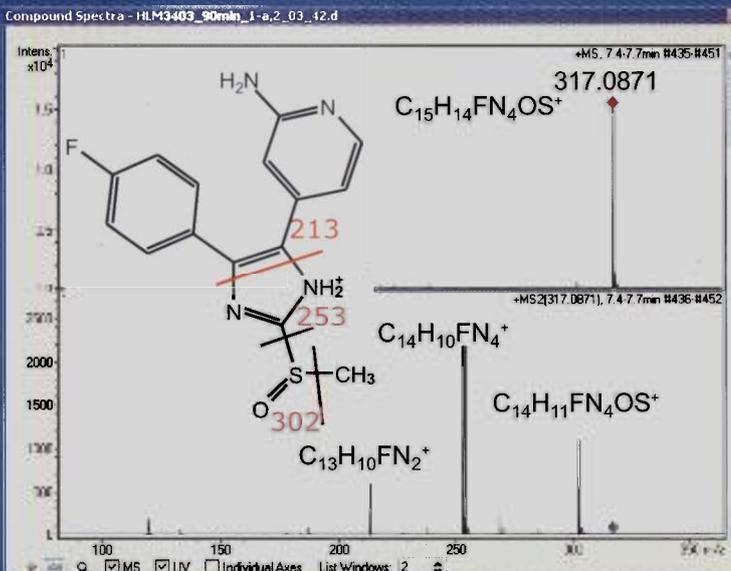
Повышение эффективности исследований в метаболомике

Одной из задач метаболомики является получение профилей метаболитов и поиск биомаркеров. При этом необходимо оценить, насколько профиль отражает ситуацию с физиологической точки зрения.

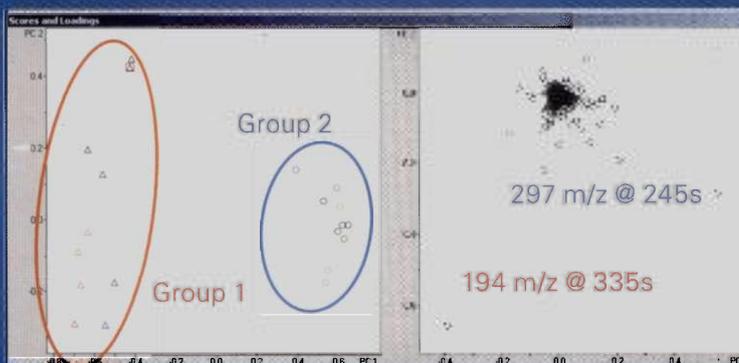
Определяйте биомаркеры с использованием точных масс, T1P и анализа фрагментов для оценки состояния больного организма, эффективности воздействия лекарств или для мониторинга токсического отклика.

Специальные средства для распознавания профиля и идентификации метаболитов в режиме MS и MS/MS дополняют пакет решений для исследований в области метаболомики.

Идентификация фрагментов метаболитов и статистический анализ



Автоматизированные эксперименты по MS²-фрагментации метаболита с m/z 317 и установление факта отщепления метильной группы от молекулы повышают достоверность идентификации с помощью анализа фрагментов.

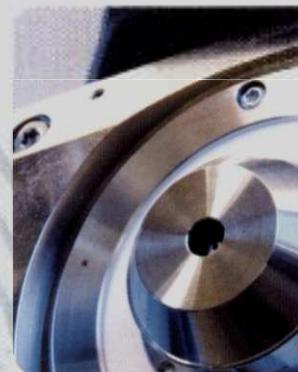


Четкое разделение групп в анализе PCA: график, полученный для образцов мочи крыс, получавших различную пищу (с любезного разрешения Organon).

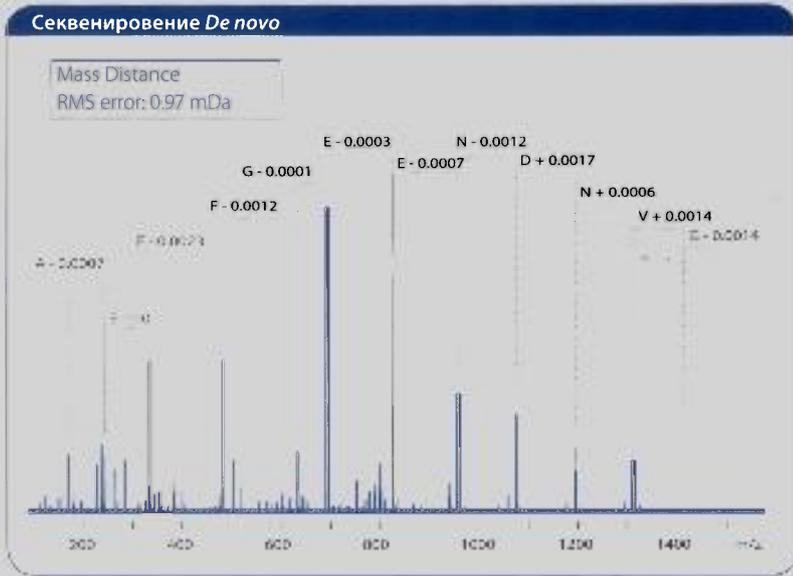
Сверхчувствительный источник с ионной «воронкой»

Новый современный ESI ионный источник типа «воронка» Apollo II™ обеспечивает поступление в анализатор в 10 раз большего числа ионов – повышая чувствительность на порядок. Это приводит к еще большей эффективности анализа в таких областях применений, как детальные исследования структуры

малораспространенных модификаций белков, посттрансляционных модификаций или натуральных продуктов! Все ионы собираются радиальным радиочастотным полем и направляются в выход из первой «воронки». Для второй «воронки» можно выбрать энергию CID для оптимальной постановки эксперимента.



Детальный анализ



Машина для *de novo* секвенирования

Масс-спектрометр micrOTOF-Q II является идеальным прибором, обеспечивающим выдающуюся точность даже при низких массах, что важно для успешного *de novo* секвенирования белков.

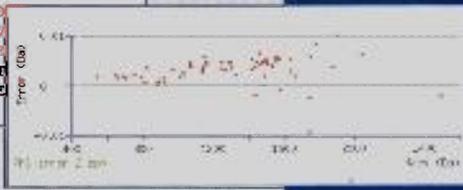
MS/MS спектр GluFib $m/z = 785.8$.
Исключительная точность приводит к превосходным результатам *de novo* секвенирования.

Точность определения масс

Matched peptides shown in Bold Red

1	MK	WT	FISLL	LL	SS	AYS	SRG	V	FR	DT	H	K	SE	IA	HR	FD	LD	GE	EH	FG	LV	LIA		
51	PS	Q	L	Q	C	P	F	DE	H	V	K	L	V	N	E	L	TE	FA	R	T	C	V	AD	
101	V	A	S	L	R	E	T	Y	G	D	M	A	C	C	E	K	Q	E	P	E	R	N	E	C
151	K	A	D	E	K	F	W	G	K	Y	L	E	I	A	R	R	H	P	Y	F	A	P	E	L
201	L	L	P	K	I	E	T	M	R	E	K	V	L	A	S	S	A	R	Q	R	L	R	C	A
251	F	V	E	V	T	R	L	V	T	D	L	T	R	V	H	K	E	C	C	H	G	L	L	E
301	C	C	D	K	P	L	L	E	R	S	H	C	I	A	E	V	E	R	T	A	I	P	E	N
351	G	S	F	L	E	Y	S	R	R	H	P	E	Y	A	V	S	V	L	L	R	L	A	K	E
401	K	H	L	V	D	E	P	Q	N	L	I	R	Q	N	C	D	Q	F	E	K	L	G	B	
451	R	S	L	G	K	V	G	T	R	C	C	T	R	P	E	S	E	R	M	P	C	T	E	
501	T	E	S	L	V	N	R	R	P	C	F	S	A	L	T	P	D	E	T	Y	V	P	K	
551	A	L	V	E	L	L	K	H	K	P	K	A	T	E	R	Q	L	K	T	V	M	E	N	
601	S	T	Q	I	A	L	A																	

1



Retention Time (min)	Mass (Da)	Abundance	Label
12.5	785.8	High	1
12.5	785.8	High	2
12.5	785.8	High	3
12.5	785.8	High	4
12.5	785.8	High	5
12.5	785.8	High	6
12.5	785.8	High	7
12.5	785.8	High	8
12.5	785.8	High	9
12.5	785.8	High	10
12.5	785.8	High	11
12.5	785.8	High	12
12.5	785.8	High	13
12.5	785.8	High	14
12.5	785.8	High	15
12.5	785.8	High	16
12.5	785.8	High	17
12.5	785.8	High	18
12.5	785.8	High	19
12.5	785.8	High	20
12.5	785.8	High	21
12.5	785.8	High	22
12.5	785.8	High	23
12.5	785.8	High	24
12.5	785.8	High	25
12.5	785.8	High	26
12.5	785.8	High	27
12.5	785.8	High	28
12.5	785.8	High	29
12.5	785.8	High	30
12.5	785.8	High	31
12.5	785.8	High	32
12.5	785.8	High	33
12.5	785.8	High	34
12.5	785.8	High	35
12.5	785.8	High	36
12.5	785.8	High	37
12.5	785.8	High	38
12.5	785.8	High	39
12.5	785.8	High	40
12.5	785.8	High	41
12.5	785.8	High	42
12.5	785.8	High	43
12.5	785.8	High	44
12.5	785.8	High	45
12.5	785.8	High	46
12.5	785.8	High	47
12.5	785.8	High	48
12.5	785.8	High	49
12.5	785.8	High	50

2

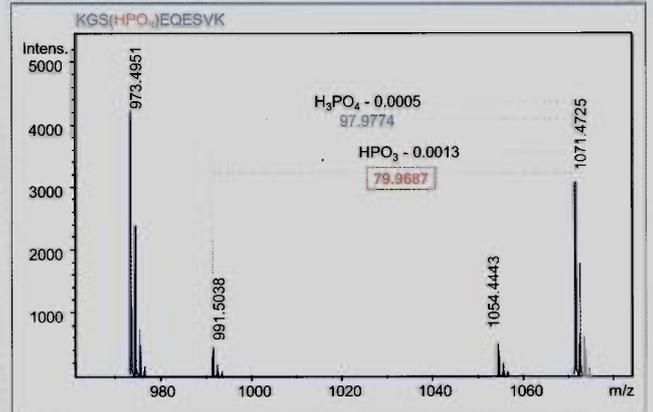
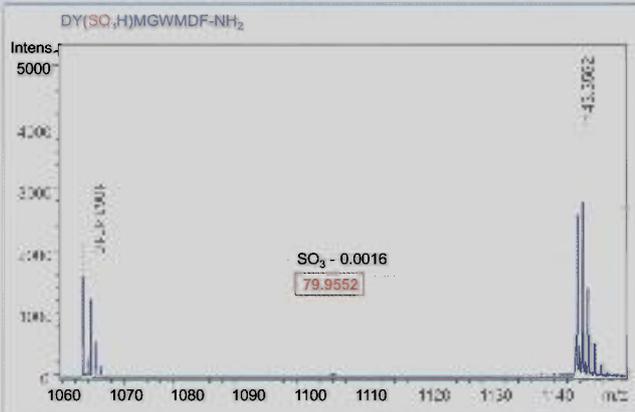
Идентификация в широком динамическом диапазоне

Высокая точность определения масс доступна как для пептидов, **1** так и для фрагментов, **2** что приводит к высочайшей надежности данных, получаемых при проведении исследований в области протеомики.

50 фемоль BCA на колонке Waters UPLC™ были проанализированы с погрешностью 2 ppm (1). Даже фрагменты можно надежно определять (2) с погрешностью 3 ppm (20 фемоль BCA) с использованием одной внешней калибровки.

● Применения в протеомике

Измерение точных масс для изучения посттрансляционных модификаций



Сульфатация? Фосфорилирование? Установите разницу!

Ключом к лучшему пониманию протеома является знание о посттрансляционных модификациях. На масс-спектрометре micrOTOF-Q II возможны детальные исследования структуры молекулы — даже при минимальных различиях масс.

Узнайте о возможности проводить количественный анализ

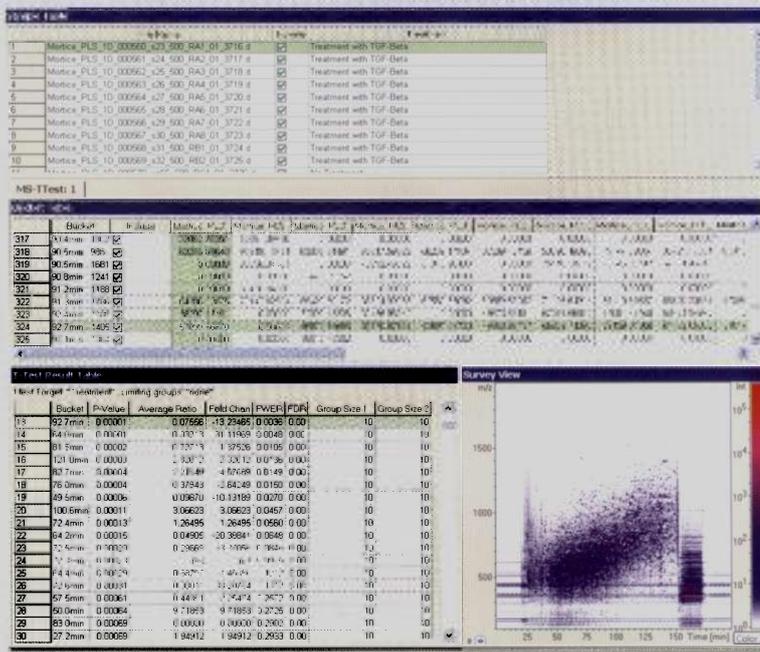
Технология введения меток стабильных изотопов iTRAQ™ и недавно разработанная технология ICPL™ позволяют быстро, легко и удобно проводить количественные

исследования в протеомике. Благодаря дизайну ESI источника типа «воронка» достигается превосходная чувствительность, в сочетании с высочайшей достоверностью Ваших данных благодаря определению точных изотопных распределений (TIP™).

Высокие чувствительность, точность и разрешение во всем диапазоне масс — это ключевые особенности, которые вносит данный прибор вместе с ProteinScape 2 в интегрированное решение для количественных измерений от Bruker Daltonics. Это решение — WARP-LC, система, обеспечивающая автоматизацию от хроматографии до количественного анализа.

Различение сульфатации и фосфорилирования при использовании возможности измерения точных масс масс-спектрометром micrOTOF-Q II.

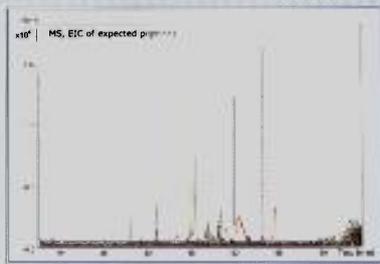
Количественные измерения без использования меток с ProteomeQuant™



С программным решением ProteomeQuant™ для количественного изучения белков без использования меток дифференциальный протеомный анализ соответствующих биомаркеров становится легко выполнимым

Чувствительность, динамический диапазон и разрешение

MS/MS идентификация 100 амоль БСА



Анализ 100 амоль гидролизата БСА на колонке. БСА точно идентифицирован по пятипептидам. Слева представлены хромаграммы по выделенным ионам для идентифицированных пептидов.

Чувствительность

Высочайшая чувствительность продемонстрирована на примере анализа 100 амоль гидролизата БСА. Даже для такого малого количества образца возможна достоверная идентификация пептидов.

Динамический диапазон

Динамический диапазон более 5 порядков — превосходная стабильность масс без утомительных перекалибровок является ключевым параметром, обеспечивающим успешность скрининга и MS-анализов, а также возможность одновременного детектирования высоко- и низкоинтенсивных сигналов соединений.

Разрешение

И малые молекулы, и целые белки можно определять с превосходным разрешением. Изотопное разрешение достигается даже для спектров многозарядных ионов после их деконволюции. Экспериментальный масс-спектр совпадает с теоретическим.

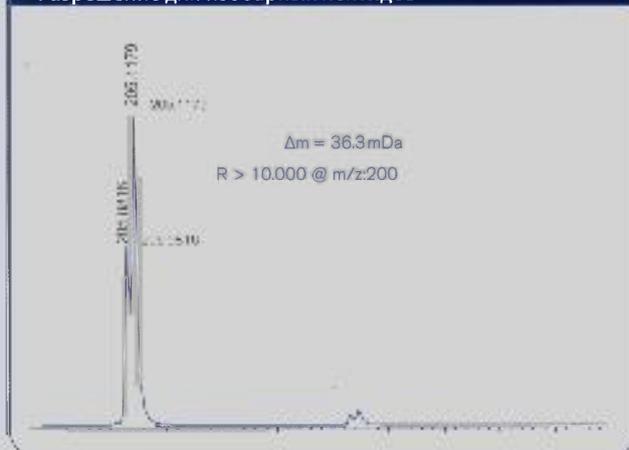
Различение изобарных дипептидов.

$C_7H_{13}N_2O_5$ (AD) MW = 205.0819

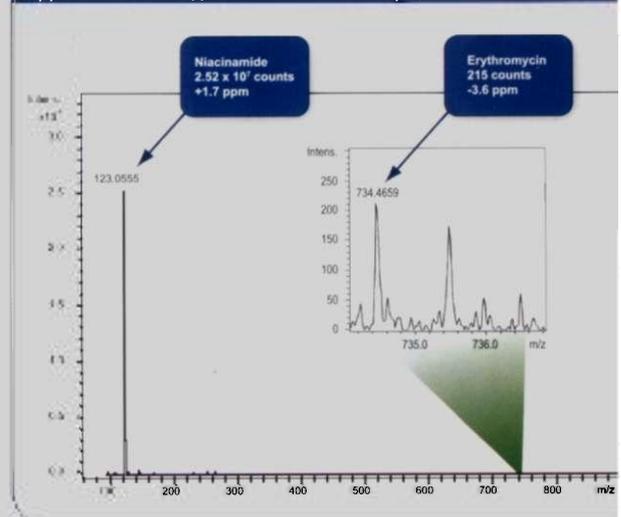
$C_8H_{17}N_2O_4$ (SV) MW = 205.1183 различие в MW = 0.0364 Da.

Для разделения дипептидов при m/z 200 достигается разрешение > 10,000.

Разрешение для изобарных пептидов



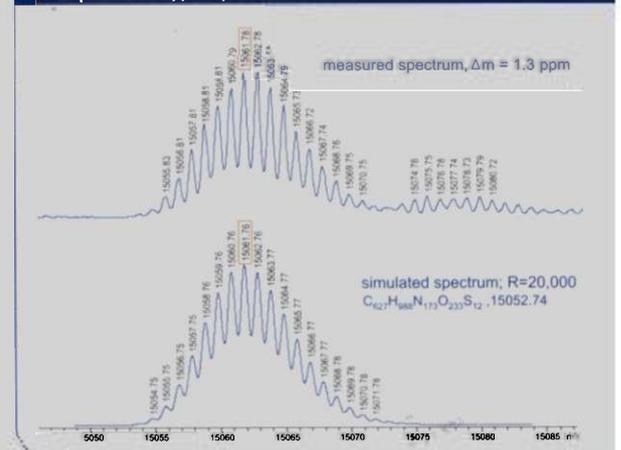
Динамический диапазон более 5 порядков



Экспериментально измеренный динамический диапазон порядка демонстрирует исключительные возможности microTOF-Q II.

Рибонуклеаза В. Спектр целого белка, полученный на microTOF-Q II. Различие экспериментальной и расчетной массы составляет лишь 1.3 ppm. Достигается разрешение 20,000 при измерении ширины пика на его полувысоте.

Разрешение для целых белков



● Дополнительные возможности

Генерирование химических формул

Compass OpenAccess™ обеспечивает широкому кругу пользователей доступ к автоматизированной LC/MS системе для определения химических формул, подтверждения молекулярных формул и общих LC/MS измерений.

Эта специализированная программа поддерживает различные возможности LC/MS, в том числе для химиков с различным уровнем опыта и квалификации в инструментальном анализе.

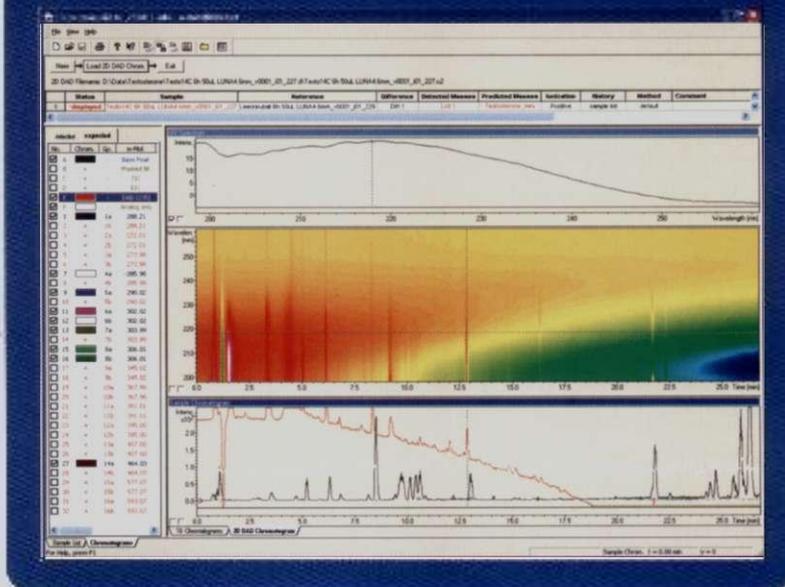
Metabolic Profiler™

Это приложение создано для того, чтобы Вы могли анализировать профили метаболитов, которые отражают изменения физиологического состояния организма. Программу можно использовать в фармацевтических и клинических исследованиях, а также в исследованиях продуктов питания.

Идентификация метаболитов

Предсказание и детектирование метаболитов и малых молекул осуществляется с помощью Metabolite-Tools™, позволяя проводить детальную оценку образцов на основании использования сложного алгоритма детектирования eXpose™ и возможности определения точных масс на micrOTOF-Q II. Программа MetaboliteTools предсказывает возможные метаболиты лекарства заданной структуры и извлекает необходимую информацию о существующих метаболитах из данных LC-MS.

Пользовательский интерфейс Metabolite ID



Скрининг в протеомике и глубокий анализ

Извлеките максимум информации из полученных масс-спектров. ProteinScrape с WARP-LC™ и BioTools™ являются уникальными программами для масс-спектрометрического анализа протеома и отдельных белков. Средства визуализации для контроля анализа, такие, как LC-SurveyViewer или диаграммы для количественных измерений, сопровождаются средствами идентификации белков, средствами поддержки *de novo* секвенирования и поиска посттрансляционных модификаций. Программное решение ProteomeQuant™ для количественного изучения белков без использования меток, позволяет проводить дифференциальный протеомный анализ соответствующих.

Унифицированное программное окружение

Унифицированная для всех наших приборов программная среда Compass™ объединяет управление прибором, сбор данных, обработку и интерпретацию — ускоряя Ваши исследования и повышая их продуктивность.

Соответствие нормативам

Compass Security Pack™ обеспечивает все необходимые функции для работы в соответствии с постановлениями FDA и EU (21CFR часть 11/Annex 11):

- электронные подписи
- журнал событий
- управление пользователями
- история результатов
- защита системы во время остановок.

Sample ID		Project	ICPL MS/OTOF-Q	
ICPL MS/OTOF-Q		ICPL MS/OTOF-Q		
ICPL Light		ICPL Light		
1		1		
ICPL MSMS_1-E4_01_70.d		ICPL MSMS_1-E4_01_70.d		
esquire_AVW_SILE (Jan 13, 2006 10:02)		esquire_AVW_SILE (Jan 13, 2006 10:02)		
Accession	Protein	MW (kDa)	Score	No. Peptides
gi229552	Protein X	1.2	100	1
gi26566240	Protein Y	1.5	80	1
gi7789842	Protein Z	1.8	60	1

Технические характеристики

Выдающееся качество

Улучшенная технология micrOTOF-Q II

- Лучшее в мире сочетание точности, разрешения и чувствительности – вне всяких компромиссов
- SmartFormula3D™, уникальное сочетание точных масс и точных изотопных распределений (TIP™)
- Широкий динамический диапазон для регистрации сверхстабильных точных масс
- Высококачественная Q-часть
- Основание 640 x 949 x 1320 мм, вес 160 кг

Опции источника

- Электроспрейный ионный источник Apollo II типа «воронка»
- APCI – источник химической ионизации при атмосферном давлении
- ESI/APCI – многофункциональный источник
- APPI – источник фотоионизации при атмосферном давлении
- Источник Online / Offline NanoElectrospray
- Сочетание CE/MS с заземленной ESI иглой

Аналитические характеристики

- Диапазон масс 20 – 40,000 m/z
- Точность в режимах MS и MS/MS 1-2 ppm при внутренней калибровке, 5 ppm при внешней калибровке
- Разрешение в режимах MS и MS/MS 17,500 (FWHM), 20,000 на ВЭЖХ-скоростях
- Система температурной компенсации
- Скорость регистрации (частота дискретизации 2ГГц) 20 Гц (при записи на диск хроматограмм и спектров)

Программный комплект Compass

Интегрированный контроль LC-MS/MS экспериментов и обработка данных

- Модуль генерирования формул с использованием алгоритма SmartFormula
- Программы BioTools™ / RapiDeNovo™ для интерпретации данных о белках
- MetaboliteTools™ для идентификации метаболитов
- База данных ProteinScape™ для управления проектами в протеомике
- TargetAnalysis™ для многоцелевого скрининга
- Compass OpenAccess™ для генерирования химических формул из данных LC/MS

micrOTOF-Q II входит в системные решения Bruker Daltonics:

- Metabolic Profiler™: идеальное средство для метаболических исследований
- PROTEINEER™: комплект для протеомики на основе 2D гелей и MS/MS
- ProteomeQuant™: комплект для протеомики на основе LC-MS/MS
- LC-NMR/micrOTOF-Q II: комплексное решение с использованием ЯМР

micrOTOF-Q II, SmartFormula3D, SmartFormula, TIP, Apollo II, Compass, Compass Open Access, Compass Security Pack, Metabolic Profiler, MetaboliteTools, eXpose, WARP-LC, BioTools, RapiDeNovo, PROTEINEER и PROTEINEER-LC являются торговыми марками корпорации Bruker Daltonics. ICPL торговая марка TopLab GmbH. ITRAQ торговая марка Applied Biosystems. ICAT является торговой маркой Университета Вашингтона. MASCOT зарегистрированная торговая марка Matrix Science Ltd.



СПЕКТРОЛАБ
Спектроскопия: AAS, AES, ICP, UV-VIS, IR, FTIR.
С Cl Hg N O S H анализаторы.
Ремонт и расходные материалы.

Авторизованный дистрибьютор
analytikjenaAG в Беларуси
и странах СНГ

ЗАО «Спектролаб»
220050, г. Минск, ул. Свердлова, 26
тел.: +375 17 3284806
факс: +375 17 2104066
моб. +375 29 6130183
E-mail: vz@spectrolab.by

www.bruker.ru

• Bruker Daltonik GmbH

Бремен - Германия
Тел. +49 (421) 2205-0
Факс +49 (421) 2205-103
sales@bdal.de

ООО «Брукер»

г. Москва, Ленинский проспект, д. 47
Тел. +7 (495) 502-9006
Факс +7 (495) 502-9007
ms@bruker.ru