



Жидкостный тройной квадрупольный масс-спектрометр LCMS-8045



Тройной квадрупольный масс-спектрометр LCMS-8045 занимает среднее положение в линейке жидкостных масс-спектрометров UFMS: он обладает такими же показателями быстродействия, как LCMS-8050/8060, а благодаря использованию источника ионизации электроспреем (ESI) с нагреваемым газом, его чувствительность существенно увеличена по сравнению с младшими моделями. Максимальная скорость сканирования составляет 30 000 а.е.м./с, время переключения полярности ионизации 5 мс.

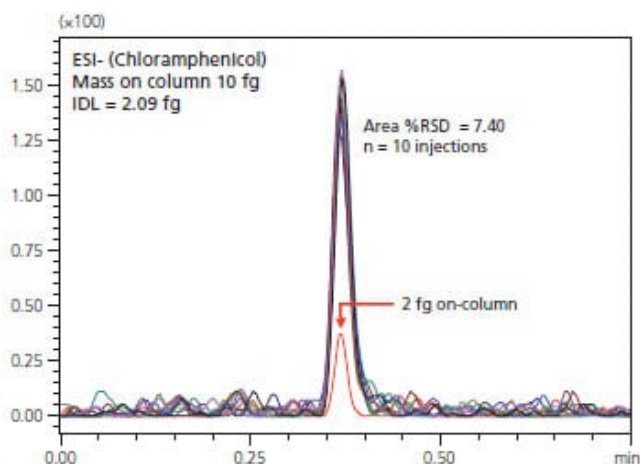
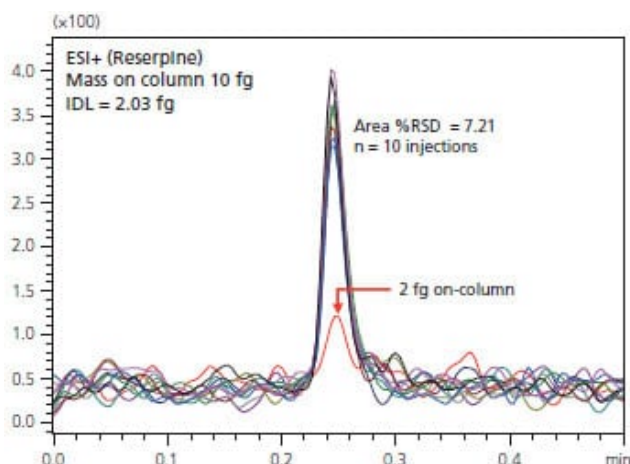
Оснащенный датчиком ESI с подогревом, LCMS-8045 обладает самой высокой чувствительностью в своем классе. Высокочувствительный нагреваемый источник ESI, нагретый капиллярный ввод образца, запатентованная оптика для переноса ионов, линия десольватации (DL) и осушающий газ способствуют десольватации и предотвращают загрязнение из-за проникновения капель жидкости в блок MS.

При разработке жидкостного трехквадрупольного хроматомасс-спектрометра LCMS-8045 особое внимание было уделено обеспечению долговременной стабильности работы прибора. Сочетание конструктивных особенностей LCMS-8045 обеспечивает его надежную работу. Конструкция источника ионизации и ионной оптики оптимизирована таким образом, чтобы максимально снизить любые возможные загрязнения. Это позволяет проводить анализ сотен и тысяч образцов со сложной матрицей, таких как экстракты из пищевых продуктов и биологических жидкостей без снижения чувствительности и затрат на профилактическое обслуживание прибора.

Отличные экономические показатели этой системы демонстрируются в области безопасности пищевых продуктов, анализа окружающей среды и других количественных анализов.

Пределы обнаружения прибора: IDL

IDL — это одна из мер чувствительности аналитического оборудования. Приведенные ниже хроматограммы показывают IDL для резерпина и хлорамфеникола, полученные с использованием ESI+ и ESI- соответственно. IDL для резерпина составляет 2,03 фемтограмма и 2,09 фемтограмма для хлорамфеникола.





Блок ионизации новой конструкции

Разработанный без кабелей или трубок, снять новый блок ионизации очень просто: отпустите рычаг одним касанием, чтобы открыть блок и вынуть его. Кроме того, для отсоединения игл, установленных в устройствах APCI и DUIS, не требуются никакие инструменты, что упрощает техническое обслуживание.

Простое обслуживание системы сокращает время простоя

Как и в случае с другими тройными четырехъядерными системами Shimadzu, обслуживание LCMS-8045 несложно. Замена линии десольватации (DL) и капилляра ESI выполняется быстро и легко. Кроме того, конструкция позволяет пользователям заменять DL, не нарушая вакуума, обеспечивая большее время безотказной работы и удобство использования.

Систему LSMS-8045 можно модернизировать до LCMS-8060.

Комплект обновления LCMS-8045 включает три ключевых компонента. После их установки трехквардрупольные жидкостные хроматомасс-спектрометры LCMS-8045/8050 обеспечивают производительность LCMS-8060. (Ячейка столкновения UFsweeper III дополнительно включена в комплект обновления LCMS-8045.)

- Улучшенная эффективность отбора проб ионов DL (линия десольватации)
- Улучшенный ионовод с расширенными возможностями фокусировки UF-Qarray
- Повышенная эффективность вакуума Роторный насос
- Улучшена эффективность CID UFsweeper III Collision Cell.

Разработка ионовода UF-Qarray с использованием технологий моделирования Shimadzu

Новый UF-Qarray был разработан для обеспечения максимальной чувствительности без ущерба для надежности или изменения минимального уровня шума, установленного в ранее запатентованном Shimadzu Qarray. Для оптимизации конструкции UF-Qarray был тщательно проведен ряд исследований с использованием двух платформ для моделирования поведения ионов при увеличении потока газа в области низкого вакуума.

Программное обеспечение FLUENT использовалось, чтобы определить, какая форма полюса будет максимизировать фокусировку ионов под потоками газа, создаваемыми улучшенной конфигурацией откачки.

Вторая технология, программное обеспечение для моделирования Optdesign, использовалась для анализа сложного поведения траекторий ионов при приложении напряжения к расширенному ионному облаку.

С использованием имитационных моделей FLUENT и Optdesign было разработано несколько прототипов для тестирования, что привело к окончательному дизайну геометрии опоры UF-Qarray. Эта конструкция выбрасывает частицы нейтрального газа, чтобы уменьшить шум и достичь большей фокусировки ионов, чем предыдущая конструкция Qarray.

Благодаря новой конструкции UF-Qarray улучшенной эффективности фокусировки ионов удалось достигнуть большей интенсивности сигнала и снижения шума. Эти новые технологии позволяют повысить чувствительность и надежность во всех режимах сбора данных.

Программное обеспечение LabSolutions LCMS и разнообразные пакеты методов

ПО LabSolutions LCMS имеет интуитивно понятный пользовательский интерфейс и предлагает новейшие функции, предназначенные для повышения производительности лаборатории и оптимизации рабочих процессов.

Для интенсификации работы аналитических лабораторий SHIMADZU комплектует свои тройные квадрупольные масс-спектрометры готовыми пакетами аналитических методик (Method Packages), которые представляют собой комплексное решение аналитической задачи, включая метод-файлы с условиями хроматографического разделения и работы масс-спектрометра в режимах MRM и MRM/Product ion Scan, калибровочные данные и библиотеки масс-спектров продуктов.

Готовые методики включают определение остаточных количеств пестицидов, ветеринарных препаратов, анализ качества воды, определение наркотиков и экспрес-токсикологический скрининг, определение первичных метаболитов, липидных медиаторов, профилирование клеточных культур, определение метаболических ферментов в дрожжах.

Заранее заданные условия разделения ВЭЖХ и параметры MRM позволяют начать анализ без долгих часов разработки метода, повышая эффективность лаборатории.



Программное обеспечение для многомерного анализа Traverse MS поддерживает MRM Data

ПО Traverse MS предназначено для высокоскоростной обработки данных MRM, полученных с помощью систем тройного квадрупольного LCMS Shimadzu в области целевой метаболомики. Используя несколько образцов и несколько компонентов, программное обеспечение может создавать графический и статистический анализ для анализа метаболических путей.

Функции

- Хроматограммы для нескольких компонентов из одного образца или из нескольких образцов могут отображаться рядом. Функция обеспечивает лучшую визуализацию данных, упрощая процесс идентификации пиков. Уникальные характеристики этого пользовательского интерфейса обеспечивают эффективный процесс идентификации пиков для нескольких компонентов.
- Алгоритм идентификации пиков, специально предназначенный для данных MRM, обрабатывает данные для нескольких образцов и нескольких компонентов с высокой скоростью. Алгоритм присваивает оценки пикам целевых компонентов на основе их сходства с заданными эталонными пиками.
- Графические значения площади (и отношения площадей) для нескольких образцов. После идентификации пиков в данных MRM программное обеспечение отображает значения площадей пиков для каждого компонента или значения соотношения площадей пиков для внутренних стандартных веществ. Разделив образцы на группы, можно нанести на график средние значения площади и значения стандартного отклонения для целевых компонентов для сравнения между несколькими группами. Такое графическое отображение всеобъемлющих аналитических данных позволяет пользователям более интуитивно понимать аналитические результаты.
- Статистический анализ на основе анализа главных компонентов и иерархического кластерного анализа. Данные MRM из нескольких образцов и нескольких компонентов можно анализировать с использованием методов статистического анализа, таких как анализ основных компонентов и иерархический кластерный анализ. Индивидуальный анализ больших объемов данных MRM может занять чрезвычайно много времени, но методы статистического анализа предоставляют пользователям наглядные и простые для понимания аналитические результаты.
- Поддерживает анализ метаболических путей. Чтобы понять метаболические колебания в биологических организмах, важно понять метаболические колебания, которые происходят на метаболических путях, связанных с целевыми компонентами. Это программное обеспечение включает основные метаболические карты для гликолитических систем, пентозофосфатов и путей синтеза аминокислот, которые можно загрузить для отображения репрезентативных метаболических путей. Путем связывания графических колебаний в каждом метаболите достигается анализ метаболических путей.

Отображение нескольких хроматограмм одновременно с помощью функции MRM Outlook

Функцию MRM Outlook можно использовать для подтверждения обнаруженных пиков и внесения необходимых исправлений путем сравнения хроматограмм всех образцов с эталонной хроматограммой для каждого метаболита. Традиционные методы требовали визуальной проверки каждой хроматограммы каждого образца по отдельности, что неэффективно. Однако алгоритм автоматической идентификации, специально предназначенный для данных MRM, и функция MRM Outlook значительно сокращают объем работы и повышают эффективность.

Создание графиков из матрицы данных

Data Matrix может классифицировать данные по «классам» и нормализовать данные на основе значений. Высоту и площадь каждого пика определяют по хроматограммам каждого целевого компонента. На основе этих значений программа отображает гистограммы среднего значения и стандартного отклонения значений высоты или площади для классов. Эти гистограммы позволяют пользователям легко просматривать данные.

Анализ метаболического пути

Программное обеспечение отображает репрезентативные метаболические пути, загружая шаблон файла метаболической карты или создавая новый файл метаболической карты. Графики соединений, созданные из матрицы данных, можно связать для создания метаболических путей, чтобы пользователи могли более подробно понять интересующие колебания составных метаболитов.



Технические характеристики ЖХ-МС / МС Shimadzu

	LCMS-8050	LCMS-8045	LCMS-8040
Функции	Первый масс-спектрометр, обеспечивающий скорость сканирования 30 000 об / с и время переключения полярности 5 мс. Он может похвастаться идеальным балансом хорошего качества данных, высокой пропускной способности и доступности для широкого спектра сложных и рутинных приложений.	Разработан специально для надежного сбора данных с лучшей в своем классе чувствительностью. Он выдерживает длительные периоды непрерывной работы в лабораториях, требующих достоверных данных.	Представлены новые UF-Lens™ и UFsweeper™ II, отличительные технологии, лежащие в основе быстрой передачи ионов и высокой чувствительности.
Диапазон масс	м/з от 2 до 2000	м/з от 2 до 2000	м/з от 2 до 2000
Разрешение	R < 0,7 и FWHM и регулируется до 0,5 и		
Скорость сканирования	Макс. 30 000 ед/сек (во всех режимах сканирования) (шаг 0,1 ед: 300 000 точек данных/сек)	Макс. 30 000 ед/сек (во всех режимах сканирования) (шаг 0,1 ед: 300 000 точек данных/сек)	Макс. 15 000 ед/сек (шаг 0,1 ед: 150 000 точек данных/сек)
Время переключения полярности положительных и отрицательных ионов	5 мс	5 мс	15 мс
Скорость перехода MRM	Макс. 555 каналов/сек	Макс. 555 каналов/сек	Макс. 555 каналов/сек
Совместимость с блоком ионизации	ESI	-	+
	APCI	+	+
	DUIS * 1)	+	+
	С подогревом-ESI	+	+
	ESI с подогревом и IonFocus	-	-
	Микро-ESI	+	+
	Зонд-ESI	+	+
Режим измерения	Q1 Сканирование / SIM	+	+
	Q3 Сканирование / SIM	+	+
	MRM	+	+
	Сканирование ионов-прекурсоров	+	+
	Ионное сканирование продукта	+	+
	Сканирование нейтральной потери	+	+
	Synchronized Survey Scan™ * 2)	+	+
Ячейка столкновения	UFsweeper III * 3)	UFsweeper II * 3)	UFsweeper II * 3)

*1) DUIS: Двойной ионный источник непрерывно выполняет как ионизацию электрораспылением (ESI), так и химическую ионизацию при атмосферном давлении (APCI).

*2) Синхронизированное обзорное сканирование: синхронизированное обзорное сканирование (SSS) автоматически выполняет сканирование ионов продукта всякий раз, когда превышает предварительно установленный порог сканирования.

*3) UFsweeper: UFsweeper - это уникальная технология, обеспечивающая беспрецедентную эффективность и скорость. UFsweeper ускоряет ионы из ячейки столкновения, образуя псевдопотенциальную поверхность.