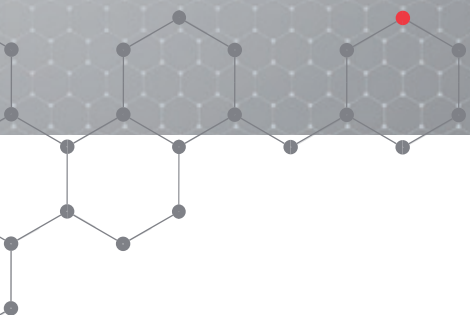


Orbitrap ID-X 三合一 质谱仪

转化小分子鉴定和表征



小分子分析的一次飞跃

采集并解析质谱图以表征和鉴定未知小分子化合物是一项艰巨的任务。样品复杂、背景干扰、化合物结构多样以及缺乏强大的数据处理工具，均使分析方法设置和数据解析变得愈加困难。若要克服这些瓶颈，需要在数据采集和计算工具上取得突破。

Thermo Scientific™ Orbitrap ID-X™ Tribrid™ 质谱仪配置新型自动 AcquireX 智能数据采集工作流程，包括智能 MSⁿ 和多种质谱数据处理工具的各种表征功能，帮助您更快更可靠地提取有意义的数



通过智能技术 – 打破从采集到分析的瓶颈

使用智能自动和简化的质谱处理、解析和识别软件突破今天的小分子分析，采集复杂样品中的更多低丰度分析物

- **专注科学，而非仪器设置**

Thermo Scientific™ 三合一™ 质谱仪架构、内置方法编辑器模板和即用型实验参数的独特组合，使您无需深厚的专业知识或过多的时间精力即可分析复杂样品。方法模板简单易用，支持各种小分子分析应用。高分辨精确质量数（HRAM）与离子阱质量分析器结合进行数据采集，并使用碰撞诱导解离（CID）或高能碰撞解离（HCD）技术进行 MSⁿ 裂解。

- **收集更有意义的的数据，而不仅仅是更多数据**

化合物识别所使用的 MS 和 MSⁿ 数据采集方法受目标化合物与背景和 / 或样品基质相对丰度的限制。占空比经常浪费在背景响应上。手动去除背景并为相关峰创建纳入 / 排除列表费时过多。AcquireX 是智能自动化的突破产品，可自动为 MSⁿ 数据采集生成纳入 / 排除列表，从而提高了分析效率，为您找到更多化合物的可区分碎片。

- **满足数据分析所要求的速度、简便性和灵活性**

Orbitrap ID-X Tribrid 质谱仪采集高品质 MSⁿ 数据，减少了化合物识别的瓶颈问题。采用谱库检索、MSⁿ 质谱树注释、in silico 裂解技术和母离子指纹图谱，可靠地识别已知和未知化合物并解析未知化合物的结构。如今，显著加快了对小分子的高确定性鉴定和表征。

- **通过高品质 MSⁿ 数据揭开未知化合物注释的神秘面纱**

通过新型质谱预测工具和处理程序，可靠地识别已知的未知物，并解析未知的未知物结构。全新的数据处理方法通过自定义库检索、in silico 碎片建模和母离子指纹识别功能，将未知母离子的高品质 MSⁿ 数据与化合物结构关联起来。

基于成熟的三合一架构

Orbitrap ID-X 三合一质谱仪基于成熟可靠的三合一架构，结合了优质的四极杆，离子阱和 HRAM Thermo Scientific™ Orbitrap™ 质量分析器技术，为每次样品运行采集最丰富的 MSⁿ 数据信息。双重裂解技术 -CID 和 HCD- 可用于 MSⁿ 的任意阶段，随后在离子阱或超高分辨率 Orbitrap 质量分析器中进行质量分析。

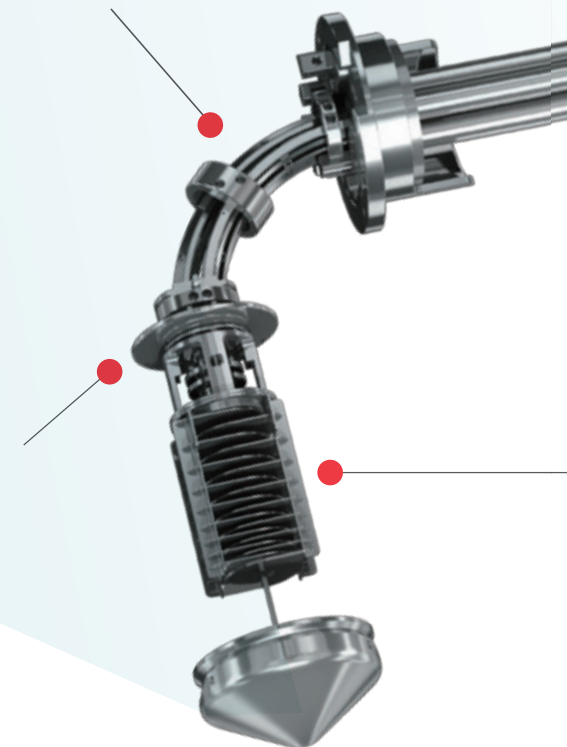


主动离子束传输组件

防止中性粒子和高速簇离子进入质量数分离四极杆

可选组件 EASY-IC 离子源

生成内部校正离子，进行实时质量数校正



超高场 Orbitrap 质量分析器

提供高达 500,000 FWHM 的分辨率
和高达 30 Hz 的 MSⁿ 扫描速率

双压线性离子阱

提供高达 40 Hz 的 MSⁿ 扫描速率和灵敏的 CID 和 HCD 碎片离子质量分析

多级离子通道

启用并行分析；在 MS_n 任意阶段允许进行 HCD 裂解

四极杆质量数过滤器

使用高达 0.4 amu 的分辨率选择母离子；得到 50 至 2000 *m/z* 的高离子传输率

S-Lens

优化到质谱仪的离子传输，同时最大限度地减少源内裂解



专注您的研究，而非仪器设置

方法编辑器界面直观、友好，并含预设的优化方法模板，适用于各种分析应用。

The screenshot displays the 'Method Editor' software interface. At the top, there are tabs for 'Global Parameters', 'Scan Parameters', and 'Summary'. Below this is a 'Method Timeline' section with a duration of 120 minutes. The main area shows a list of system templates on the left, including 'Extractables & Lipidables', 'Impurity', 'Library builder', 'Lipidomics', 'Metabolites', and 'Metabonomics'. A central panel lists various acquisition and identification methods, such as 'AcquireX Exclusion-Inclusion reference', 'AcquireX Identification - MS2 HCD-CID', 'AcquireX Identification - MS2', 'AcquireX Identification - MS3', 'Identification - MS2', 'Identification - MS3', 'MS1 profiling', 'Structure specific MS4 (monosaccharide loss)', 'Structure specific neutral loss dependent MS3', and 'Structure specific product ion dependent MS3'. A red circle highlights the 'Metabonomics' category and another red circle highlights the 'MS1 profiling' method. To the right, a detailed flowchart illustrates the MS/MS workflow, starting with 'MS OT' (0.6 sec), followed by 'Intensity', 'Dynamic Exclusion', and 'Targeted Mass Exclusion'. The workflow then branches into two paths: one for 'Targeted Mass' (1 SCANS) leading to 'ddMS² OT HCD', 'Precursor Selection Range', 'Intensity', 'Precursor Ion Exclusion', and 'ddMS² IT CID'; and another for 'ddMS² OT HCD' (2 SCANS) leading to 'Precursor Selection Range', 'Intensity', 'Precursor Ion Exclusion', and 'ddMS² IT CID'. A third path for '3 SCANS' is also shown.

通过成熟的方法模板，轻松为各种分析应用运行高级实验

即用型模板含预定义仪器参数，可生成高品质数据，无论分析物化学结构如何。

匹配实验设计与挑战性样品

AcquireX 智能数据采集的三种模式可快速分析多个样品，或详细解析重复进样的样品。在每种模式下，化合物可区分碎片谱图数量均增加，从而用于样品和研究表征。

- 去除背景

提高了单次重复分析或批次分析中未知化合物的 MSⁿ 采样效率。

- 排除和组分纳入

通过各种离子树实验增加了化合物鉴定和结构解析的广度和深度。

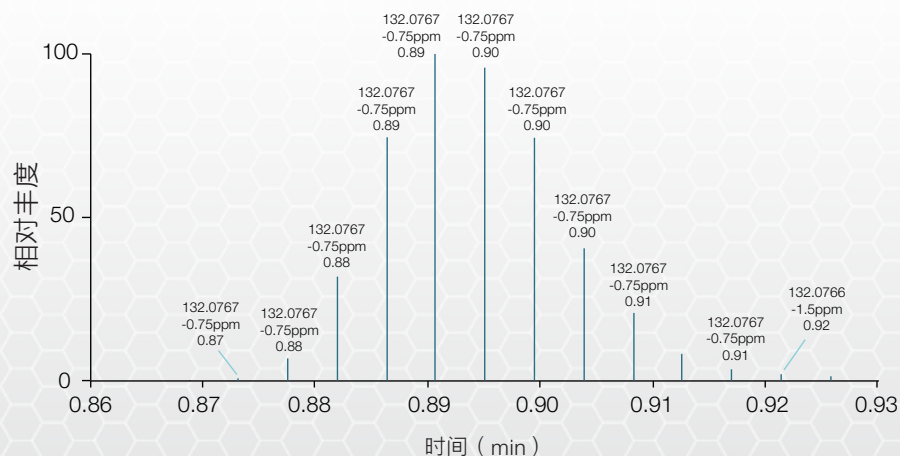
- 深度扫描（纳入和排除）

使用全自动复杂数据采集功能进行深入表征，实现样品全面解析。

MS 内部校正增加了置信度

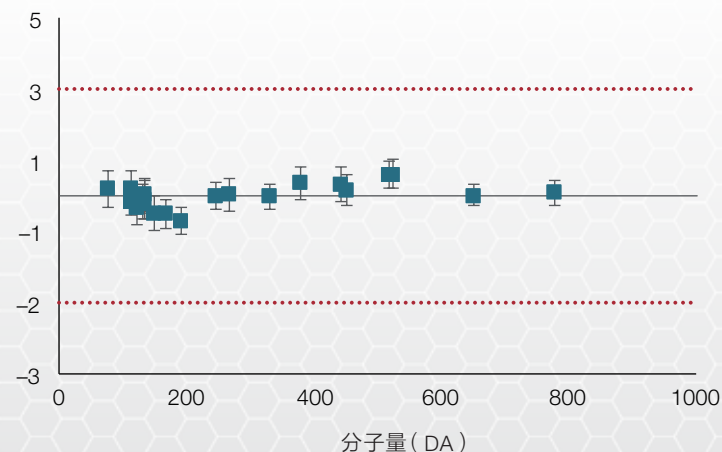
Orbitrap ID-X 三合一质谱仪的仪器校正程序确保在小分子分析质量数范围内获得较高的质量数测量精度，不管 MSⁿ 裂解水平如何。从而在更长的分析周期内提高了样品中低 m/z 离子结构解析的置信度。

出色的扫描间质量数测量精度



采用 Orbitrap ID-X 三合一质谱对肌酸（理论 m/z 为 132.0768）进行 LC-MS 分析。

前所未有的运行间质量数测量精度

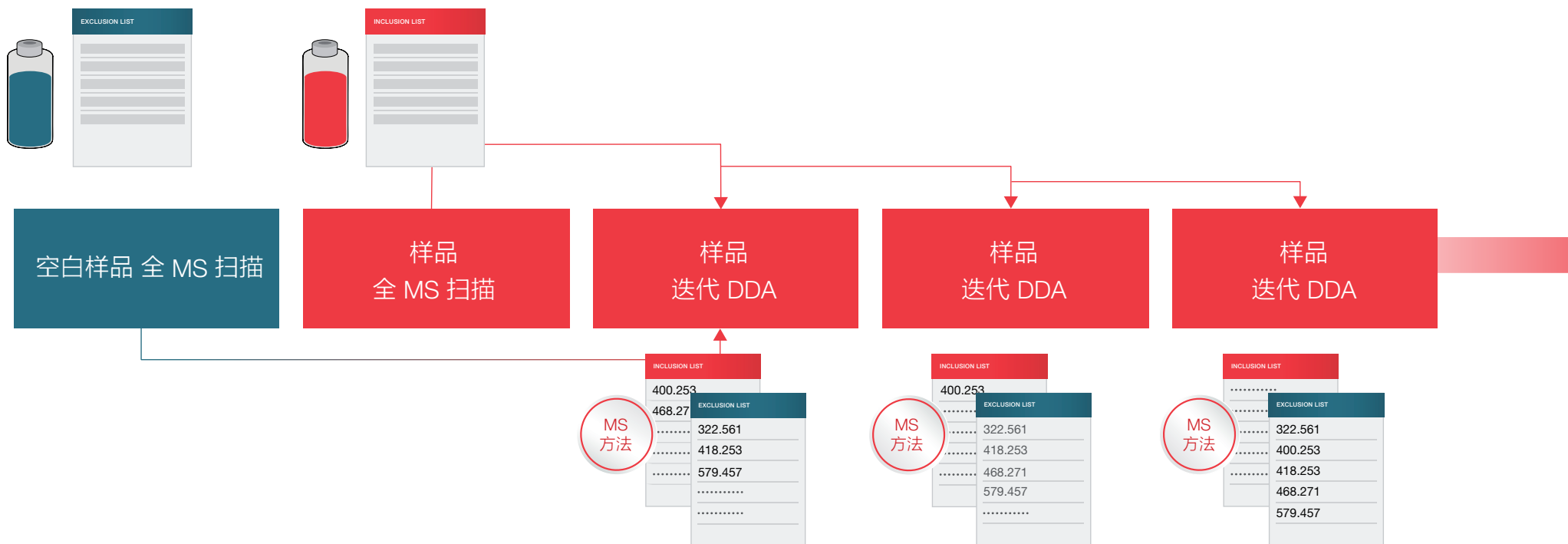


72 小时内，24 个小分子标准品重复 LC-MS 分析的累积质量数测量精度。

收集更有意义的的数据，而不仅仅是更多数据

智能 AcquireX 显著减少了手动实验设置步骤，且不需要更多的解析专业知识，有效提高了采集数据的效率。

ACQUIRE X

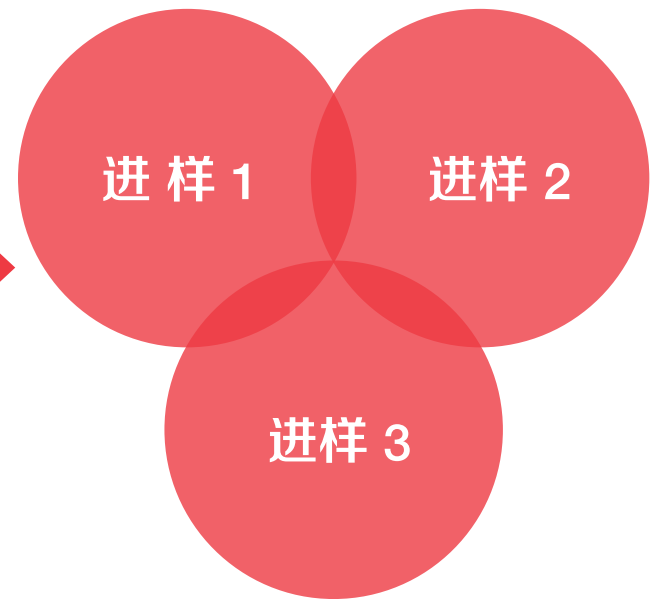
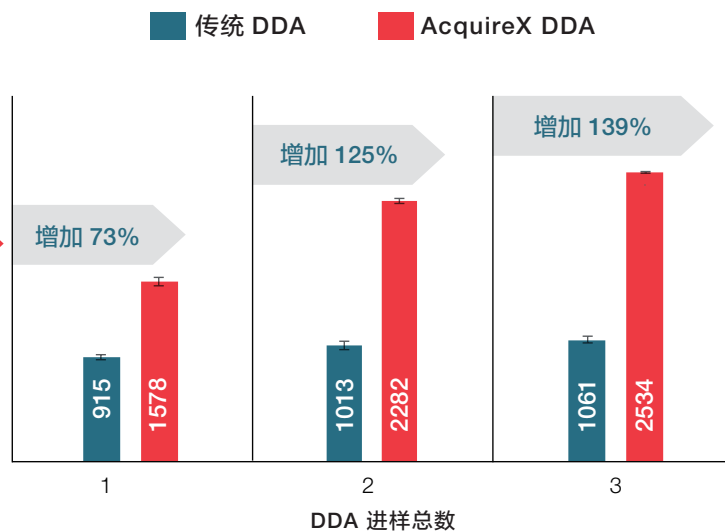


AcquireX 数据采集的三种模式允许多样品快速分析或通过重复进样深入分析样品。对空白样品和代表性样品进行初步分析时，可自动创建纳入 / 排除列表，用于直接进行 DDA 样品分析。每次重复进样均得到更多化合物的可区分碎片谱图，用于样品和研究表征。



裂解更多独特的未知化合物

获得更多易于区分的碎片



检测多达 140% 真正与实验有关的独特未知化合物，即使丰度较低，如 NIST SRM 1950 血浆提取物样品的三次重复进样实验所示。

AcquireX 智能数据采集方法可采集更多化合物的可区分子离子谱图。每次迭代和后续进样过程中，去除用于裂解的相同化合物，尽可能减少冗余。

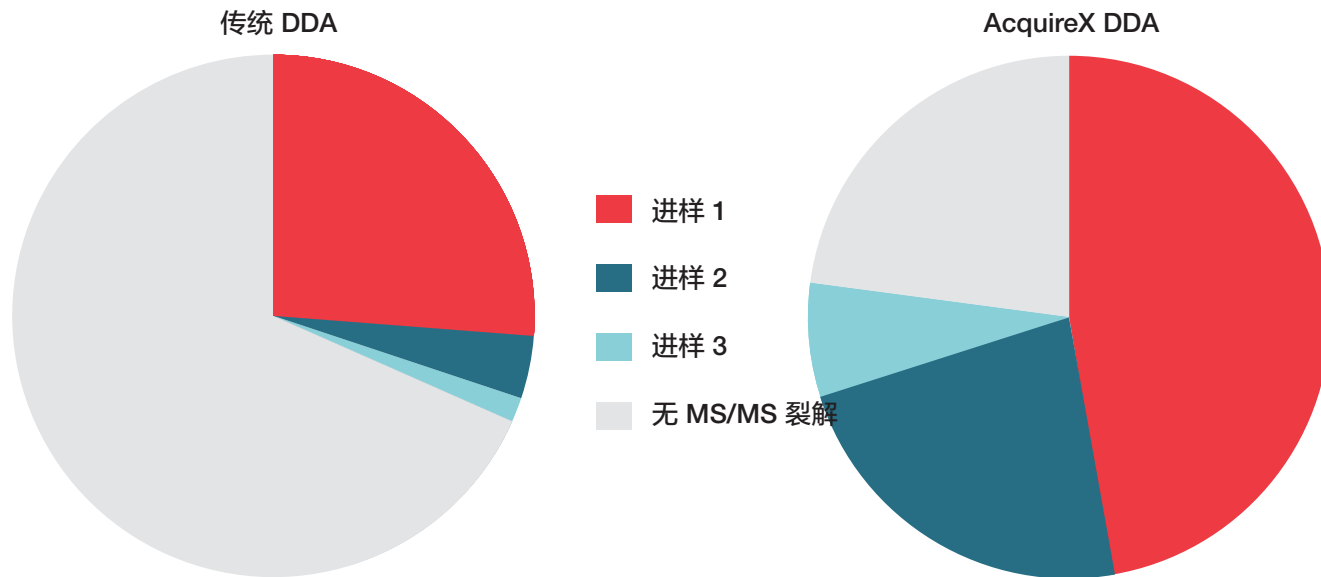
突破传统非靶向代谢组学

增加代谢物组覆盖率和未知化合物识别的置信度。

代谢物组注释不足限制了非靶向代谢组学研究的生物学解析。Orbitrap ID-X 质谱仪提供了一种常规全面分析代谢组覆盖率的简化方法，相对质谱库来说，可提供更可靠的化合物注释，或对未知代谢物进行 de novo 结构解析。强大的 HRAM Orbitrap 质量分析器技术与 AcquireX 智能采集 MSⁿ 质谱重新改变了代谢组学的分析方式。

高分析效率

采集碎片谱图的化合物数量



每次重复进样后，Orbitrap ID-X 三合一质谱仪可自动更新纳入 / 排除列表，从而改善了母离子分析。AcquireX 方法获取数据通知，通过连续进样采集 MSⁿ 数据，解析更多独特的样品组分。与传统 DDA 相比，AcquireX 可采集人血浆中 (NIST SRM1950) 一倍以上独特化合物的碎片谱图，从而得到更高的代谢组覆盖率。

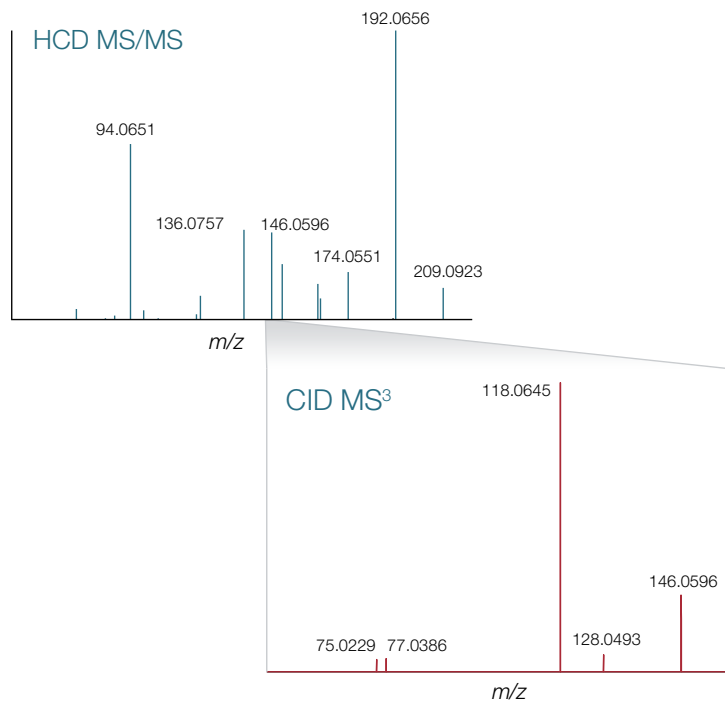
“可靠的代谢物识别功能仍然是非靶向代谢组学工作流程中的一个挑战性步骤，其采集的数据用于推导检测到的所有代谢物结构。使用 MS 或 MS/MS 数据、已建立的 UHPLC/MS 分析方法，通过代谢组学数据库和质谱库检索工作流程，已在推断注释代谢物方面取得了进展。

Orbitrap ID-X Tribrid MS 通过多种解离技术提供补充信息，并提供强大的 MSⁿ 数据，以推断结构信息并增加代谢物注释的置信度。如今，我们可通过内置的智能数据采集 AcquireX 收集更多的信息数据，而不仅仅是更多数据，我们可以尽可能获得更高的代谢组覆盖率，并提高使用智能 DDA 方法识别未知化合物的置信度。”

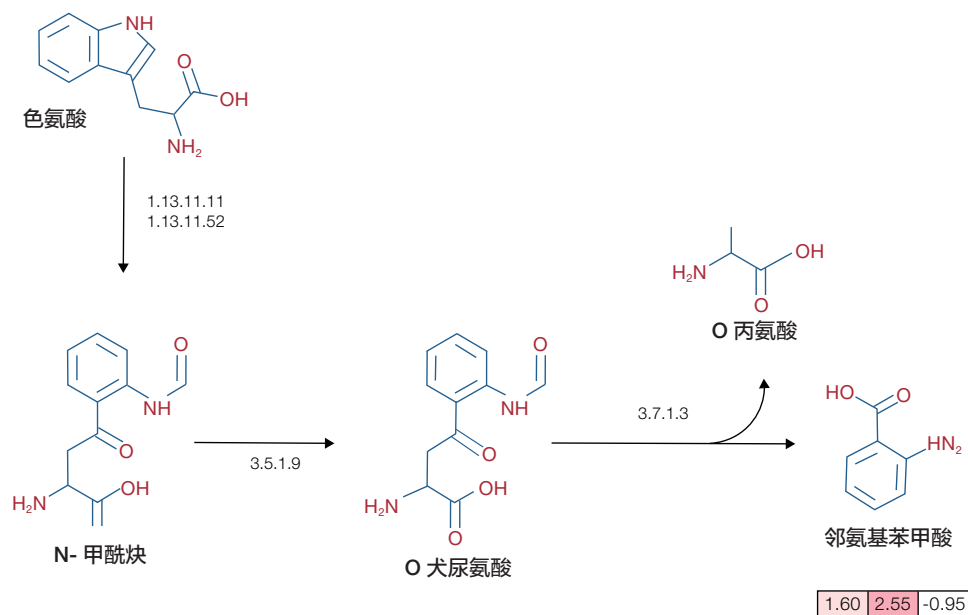
-Warwick Dunn, PhD, Phenome Center Birmingham, 分析和临床代谢组学教授，
英国伯明翰大学生物科学与代谢与系统研究所

更高品质

犬尿氨酸代谢物的补充 MSⁿ 裂解



克罗恩病研究中识别出的代谢物中间体犬尿氨酸



Orbitrap ID-X 三合一质谱仪可进行 MSⁿ 裂解，且可灵活选择 HCD 和 CID 互补技术，增加了生成更多化合物类型的信息丰富的子离子谱图的可能性。在本例中，代谢物犬尿氨酸的裂解展示了 HCD 和 CID 的互补性。

更多高品质质谱图的注释可提高代谢组覆盖率，得到更全面的途径注释和对结果的功能性解析。对色氨酸降解途径中的代谢物进行可靠注释有助于检测健康供体和克罗恩病患者供体中邻氨基苯甲酸含量的变化。

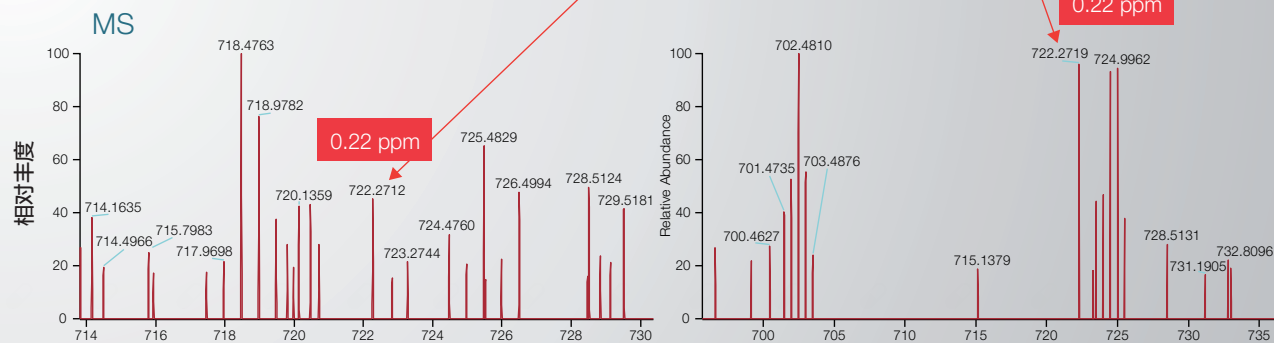
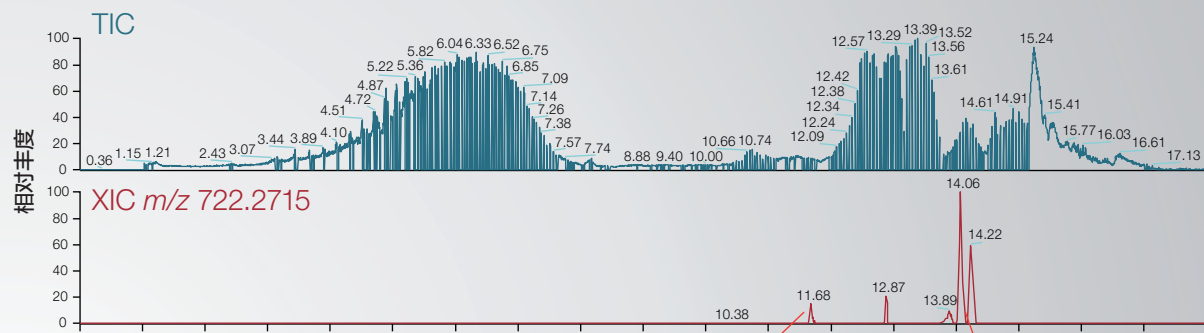
随时获取丰富信息

鉴定和表征小分子药物的结构。

在药物研究和开发中，小分子表征在活性药物成分（API）杂质和代谢物识别、降解分析以及萃取物和浸出物分析中起着关键作用。高分辨质谱（HRMS）是这些应用的关键工具。Orbitrap ID-X 三合一质谱仪将 HRMS 提升至新水平。AcquireX 智能数据采集通过自动背景扣除功能消除了复杂的基质干扰，确保采集低丰度分析物并显著提高识别水平。丰富的 MSⁿ 碎片信息提供了化合物的深入结构信息，并有助于高度可靠地识别未知或非预期化合物。

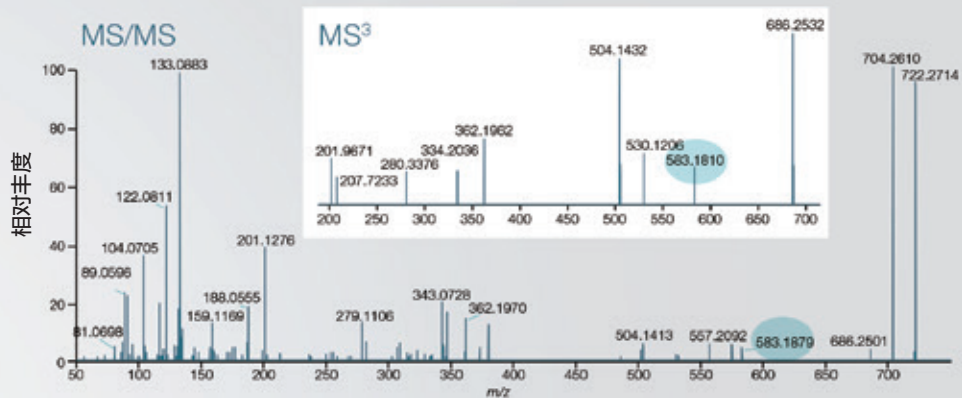
Orbitrap ID-X 三合一质谱仪结合强大的质谱库和数据处理软件，为小分子结构分析提供了终极解决方案，显著提高了药物杂质和代谢物识别、萃取物和浸出物分析以及其他相关分析的准确度、分析能力和整体分析效率。

使用 AcquireX 数据采集进行杂质分析

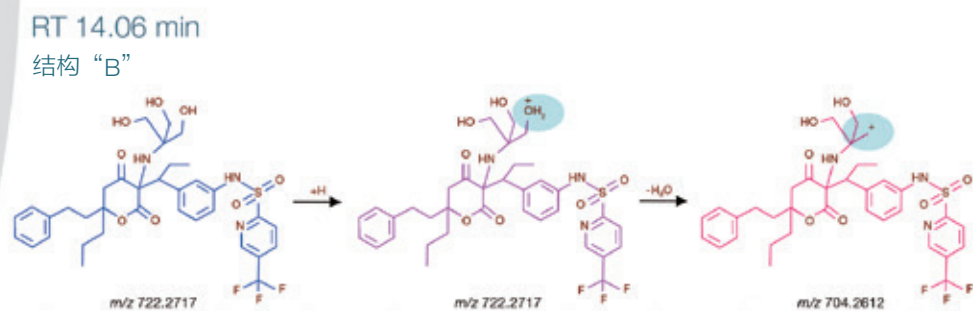
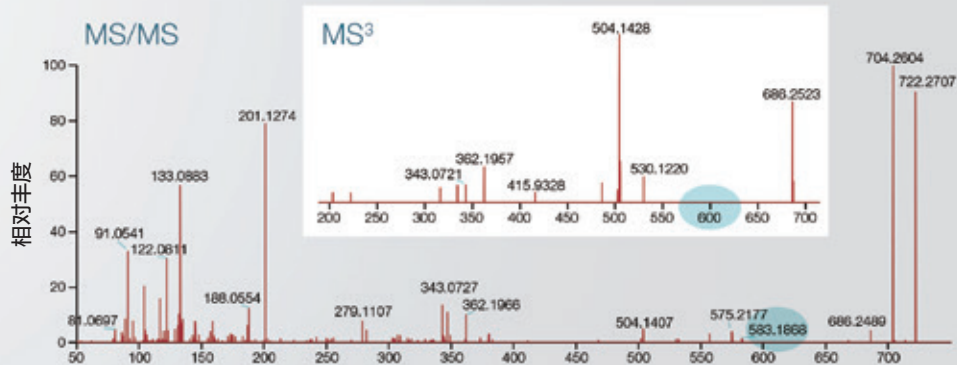
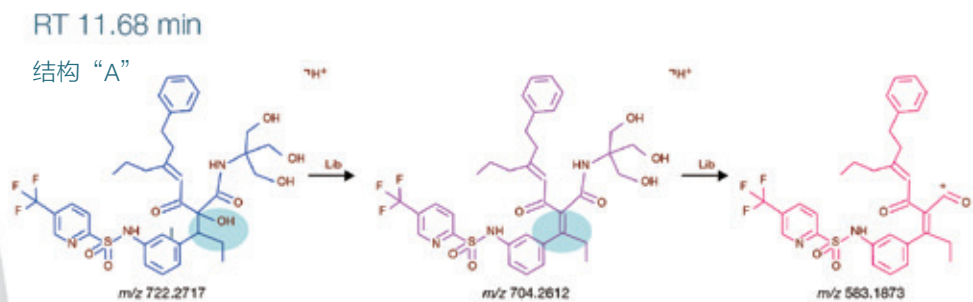


对赋形剂样品进行分析，并分析测定背景母离子。将背景母离子自动合并至排除列表并导入至优化方法中。排除列表显著减少了 DDA 方法分析中目标化合物的数量，从而更高效地采集 MS/MS 和 MS³ 数据。突出显示的保留时间指示了两种异构杂质测得的洗脱时间。

MS³ 质谱分析可用于区分杂质结构



含 in silico 解离机制的重叠离子树谱，用于推导杂质结构



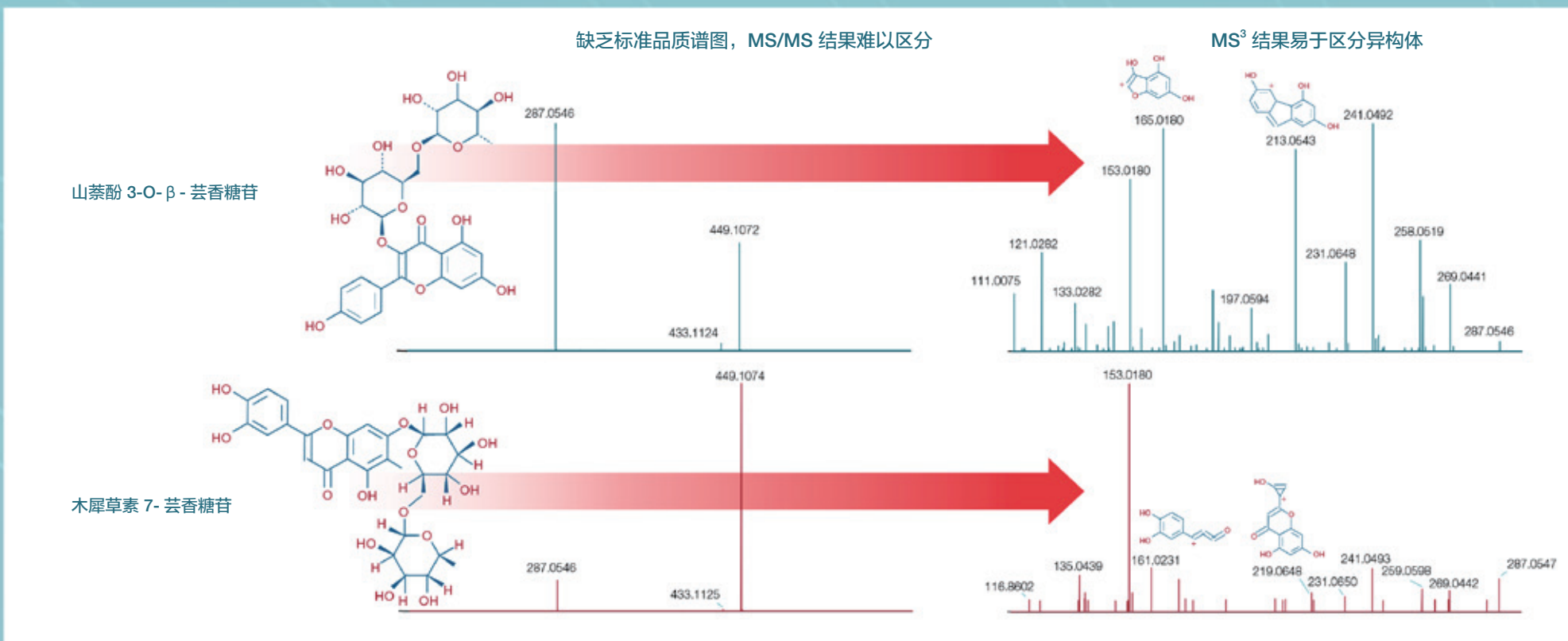
11.68 和 14.06 分钟保留时间上采集得到的 HRAM MS/MS 和 MS³ 质谱图。相比而言，MS/MS 质谱图呈现出复杂但保守的裂解形式，降低了推导母离子结构的置信度，母离子结构可导致不同的洗脱曲线。具体来说，*m/z* 722 母离子在 *m/z* 704 和 583 处检测到 MS/MS 子离子，但是当 *m/z* 704 处的 MS/MS 子离子被分离裂解时，只有在 11.1 分钟处洗脱的结构具有 MS³ 子离子 (*m/z* 583)，这表明其为不同的母离子结构。

使用 Thermo Scientific™ Mass Frontier™ 8.0 软件中的碎片和机制工具评估可能的母离子和子离子结构。对两个可能结构的裂解途径进行了评估，以预测 *m/z* 583.1873 子离子形成的裂解过程。结构 A 为直接裂解途径，证实了 *m/z* 704 裂解形成 *m/z* 583 子离子。结构 B 预测 *m/z* 583.1873 碎片可能来自 *m/z* 601 MS/MS 子离子而不是 *m/z* 704 子离子。

使用高品质 MSⁿ 数据揭开未知化合物的神秘面纱

通过优质的 MSⁿ 数据和选择性质谱预测工具，克服未知化合物识别所面临的挑战。

Orbitrap ID-X 三合一质谱仪生成的高品质 MSⁿ 数据结合了母离子指纹识别和子结构分析功能，有助于识别未知化合物。MSⁿ 可提供更多相关离子碎片信息，有助于识别异构体，并可用于未知化合物的结构注释。在 Mass Frontier 8.0 软件中针对 mzCloud 质谱库执行 MSⁿ 树 / 子树检索，通过匹配部分 MSⁿ 质谱树数据识别未知化合物中存在的子结构。使用 mzLogic 和 / 或 FISh 分数对部分匹配进行排序，推导最佳候选化合物。



两种黄酮异构体的对比 MS/MS 质谱图，其中唯一的结构差异与糖苷配基亚结构有关。向糖苷配基亚结构中添加两个糖环可获得类似的 MS/MS 质谱图，因此，影响正确识别化合物结构，尽管母离子和 MS/MS 子离子的质量数误差低。由中性丢失触发的 MS³ 采集和随后获得的分析结果清楚地解析了两种异构化合物。

以速度、简便性和灵活性满足数据分析要求

使用 Compound Discoverer 软件克服进行小分子全扫描数据分析和解析所面临的挑战。

Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 软件从丰富的小分子 HRAM 数据信息中有效提取高置信度信息。它可作为一个集线器，无缝连接到高效可靠分析大量 HRAM 数据所需的工具。

利用 MSⁿ 数据查找最佳候选结构



mzCloud™ 质谱库

利用业界领先的在线质谱碎片库，更有效地对检索进行排序



mzLogic 算法

快速自动化的逻辑分析排除了上千个候选化合物，并减少了数小时的工作量



Mass Frontier 质谱解析软件

支持 MSⁿ 质谱离子树检索和自定义库功能



Thermo Fisher Cloud

从世界上任何地方远程安全地监控您的系统，访问您的数据和系统。利用随时随地的自动电子邮件通知功能实时监控仪器。将数据存储在安全帐户中，并与同事及合作者共享。

技术支持：保持仪器最佳性能

帮助您保持仪器以最佳性能运行是我们的目标。无论您是寻找仪器手册还是备件，或者想要提交维修请求或检查保修或服务合同的状态，我们都能为您提供支持选项。

保护您的投资：无与伦比的实验室服务

Unity™ 实验室服务为集成实验室服务、支持和供应管理提供单一来源。我们的个性化服务和世界一流服务专家的灵活性和经验可有效满足您的业务需求。我们提供完整的服务和支持解决方案包，旨在帮助您提高分析效率，降低持有成本，并确保整个实验室的分析性能 - 从仪器和设备采集到处置。



赛默飞
官方微信



赛默飞色谱
和质谱中国

热线 800 810 5118
电话 400 650 5118
www.thermofisher.com

ThermoFisher
S C I E N T I F I C