

KAPILLÁRIS ELEKTROFORÉZISSEL KAPCSOLT TÖMEGSPEKTROMETRIA (CE-MS)

Oktatási segédanyag Műszeres analitikai gyakorlathoz

Összeállította: Dr. Gáspár Attila

Felhasznált irodalom:

CE/MS Analysis – A primer, Agilent, 2009, Part number: G7100-90001,
maXis Series User Manual Revision 4, 2014, Part number: 8257874
wikipedia

Kapcsolódó műszeres analitikai gyakorlatok (BSc):

Kapilláris elektroforézis (<http://inorg.unideb.hu/oktatas/7/28>)

Gélelektroforézis (<http://inorg.unideb.hu/oktatas/6/73>)

Gázkromatográfia-tömegspektrometria (<http://inorg.unideb.hu/oktatas/7/21>)

DE Szervetlen és Analitikai Tanszék
2018

1. A módszer rövid áttekintése

A kapilláris elektroforézissel kapcsolt tömegspektrometria (CE-MS) egy olyan nagy teljesítőképességű analitikai módszer, melynél egy nagy elválasztási hatékonyságú szeparációs módszert (kapilláris elektroforézis (CE)) kapcsolnak össze on-line egy nagy érzékenységű, tömegszelektív detektorral (tömegspektrométer (MS)). A két analitikai rendszer összekapcsolása azért nem egyszerű (nehézkesebb, bonyolultabb, mint más elválasztástechnikai módszer (pl. HPLC, GC) esetén, mert a CE legfeljebb ~0.1 µL/perc áramlási sebességű folyadékáramot szolgáltat az MS felé, ugyanakkor az MS elektropray mintabevivő/ionizáló (ESI) egysége jóval nagyobb sebességű folyadékáramot kíván. További probléma, hogy a CE-nél 20-30 kV feszültséggel történik az elektroforetikus elválasztás, míg a CE kapilláris detektor felé eső végénél az ESI porlasztáshoz ugyancsak nagyfeszültségre (3-5 kV) van szükség. Mindez azt jelenti, hogy a CE és MS összekapcsolásánál össze kell hangolni a folyadék és elektromos rendszereket. Az összekapcsolásra már több lehetőséget is kidolgoztak és kereskedelmi forgalomban is elérhetőek CE-MS rendszerek, ugyanakkor a jövőben újabb fejlesztések várhatóak.

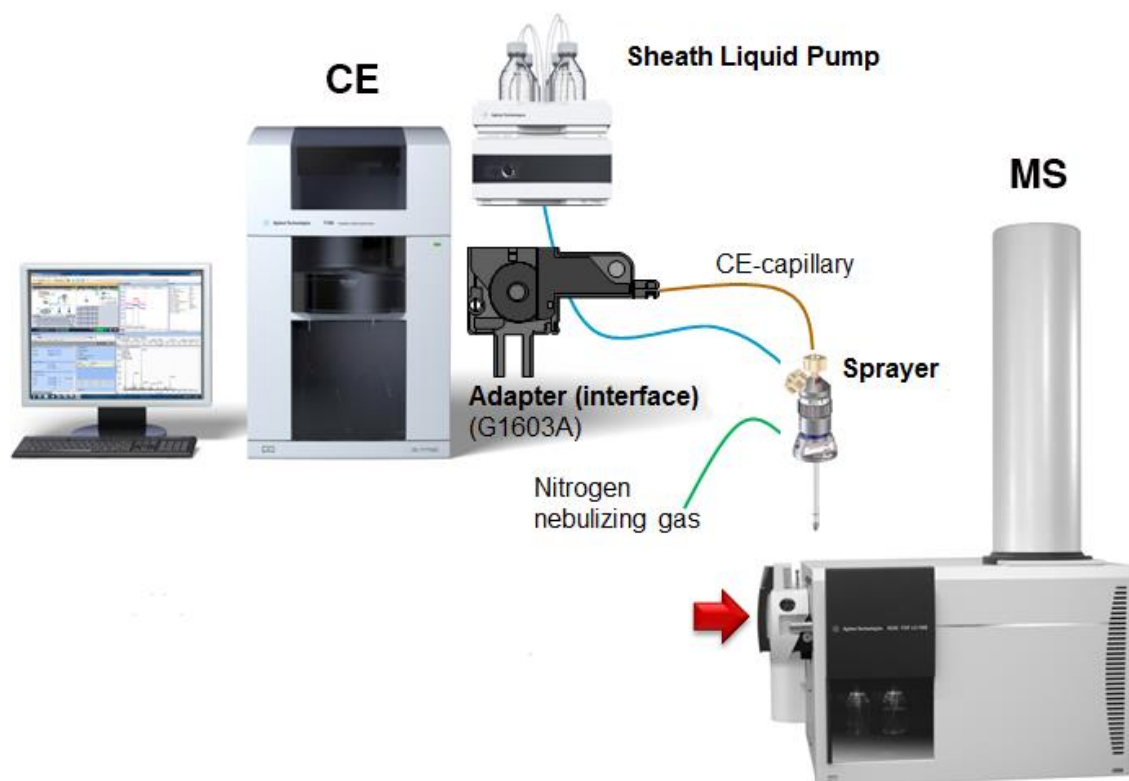
A CE-MS módszer nagyon sok területen alkalmazható, mivel a CE az egyik leguniverzálisabb elválasztástechnikai, az MS pedig a legnagyobb teljesítőképességű analitikai módszer. A CE emellett nagyon gazdaságos üzemeltetést tesz lehetővé az elválasztástechnika oldaláról tekintve.

Az elektroforézis/kapilláris elektroforézis és a tömegspektrometria elvének részletes ismertetése, megvalósításaik módja nem tárgya a gyakorlatnak, hiszen ezekről a témákról más kurzusokon (műszeres analitika előadás, gyakorlat) már volt szó, vagy részletesebb ismertetésükre későbbiekben kerül sor.

Az *elektroforetikus elválasztási módszerek* azon alapulnak, hogy elektromos térben az oldott anyagok különböző sebességgel vándorolnak. A kapilláris elektroforézisnél az elektroforézis egy vékony, általában 25-75 µm belső átmérőjű, puffer oldattal töltött kapillárisban történik. A kapilláris alkalmazásának számos előnye van, így például az, hogy a kapilláris nagy elektromos ellenállásánál fogva a rendkívül nagy térerő (100-500 V/cm) alkalmazását csekély hőfejlődés (Joule-hő) mellett teszi lehetővé. Ezenkívül a fejlődött hő a kapilláris nagy felület/térfogat aránya miatt jól eloszlik. A nagy elektromos térerő használata rövid mérési időt, valamint nagy elválasztási hatékonyságot és felbontást biztosít. Az elméleti tányérszám a kapillárison belüli elektroosztatikus áramlás dugószerű profiljának köszönhetően sok esetben meghaladja a 10^5 értéket. Az elektroosztatikus áramlás lehetővé teszi valamennyi oldott részecske egyidejű vizsgálatát, tekintet nélkül a részecske töltésére. A CE minimális mintamennyiséget (1-10 nl) igényel, könnyen automatizálható. A módszer egyik legnagyobb előnye a lehetséges alkalmazások rendkívül széles köre. Míg a kapilláris elektroforézist eleinte csak biológiai makromolekulák vizsgálatához használták, ma már használják aminosavak, királis vegyületek, vitaminok, peszticidek, szerves ionok, szerves savak, peptidok és fehérjék, szénhidrátok, oligonukleotidok és DNS részek, de még egész sejtek és vírusok elválasztásához és meghatározásához is.

A *tömegspektrometriás* vizsgálatok elve, hogy a mintából előállított gázhalmazállapotú ionok fajlagos tömegük (tömeg/töltés) alapján elválaszthatók és

fajlagos tömegük pontosan meghatározható. A tömegspektrométerben ionos vagy semleges részecskékből az ionforrásban gázhalmazállapotú ionokat állítunk elő. Az ionoptika biztosítja azt, hogy ezek az ionok lehetőleg azonos kinetikus energiával, egy nyalábban mozgatva bejussanak az analizátorba. A tömeganalizátor az ionokat elektromágneses terek segítségével tömeg/töltés arányuk szerint elválasztja. Az elválasztott ionok intenzitását a detektor méri, s így egy ionáram intenzitás - fajlagos tömeg függvénykapcsolathoz, a tömegspektrumhoz jutunk. A tömegspektrométer jelentős részében (pl. az elektropray ionforrást leszámítva) vákuum van. Az egyik gyakran használatos analizátor a repülési idő (time of flight, TOF) analizátor.

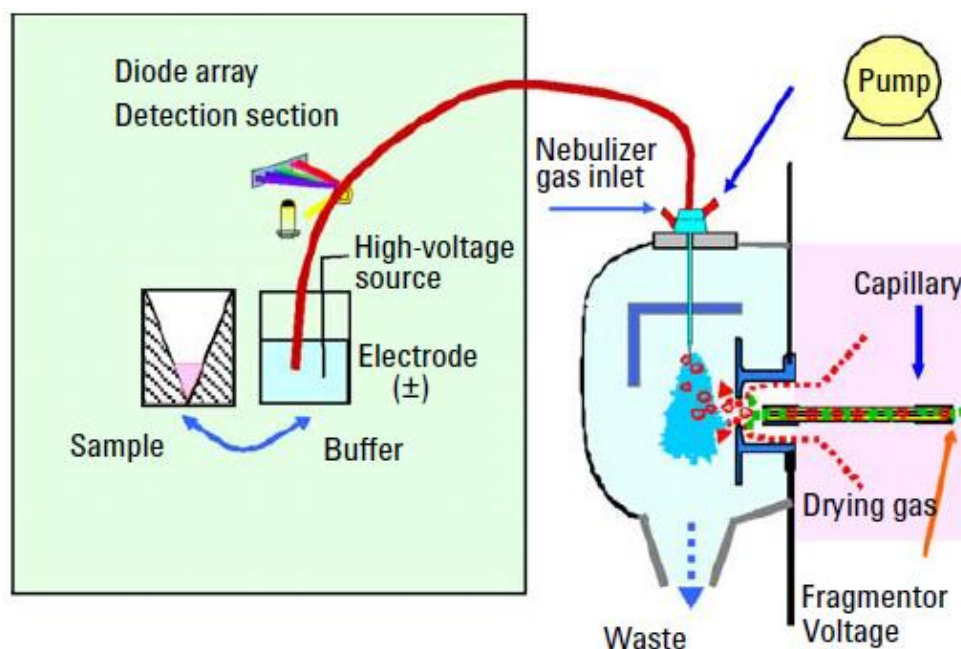


1. ábra CE-MS rendszer főbb részei

2. A CE és MS egységek összekapcsolása

A CE készülékben egy vékony, pufferoldattal töltött kvarckapilláris végei pufferoldatokba merülnek. A puffert tartalmazó edényekben található a nagyfeszültségű tápegység és a kapilláris közötti elektromos vezetést biztosító elektródok is. A minta bevitele a kapillárisba egy (általában az anódnál lévő) pufferes edénynek a mintát tároló edénnyel való kicserélésével és ezt követően külső nyomás vagy elektromos tér egyidejű alkalmazásával történik. A pufferes edény visszahelyezése után elektromos tér alkalmazása miatt a minta egyes komponensei elválnak. A komponensek optikai detektálása leggyakrabban a kapilláris másik vége

közelében, közvetlenül a kapilláris falán keresztül történik. MS detektálás alkalmazása esetén a CE kapilláris detektálási végét szükséges az MS mintabeviteli egységéhez kapcsolni, így az elváló komponenseket előbb a kapilláris falán keresztül UV fotometriás, majd a kapilláris végét elhagyó oldatot MS módszerrel lehet detektálni.



2. ábra A CE kapilláris kapcsolása az tömegspektrométer ESI mintabeviteli/ionizációs egységéhez

A tömegspektrometriában leggyakrabban használatos mintabeviteli/ionizációs technika az elektropray ionizáció (ESI). Az ESI technika a folyadékkromatográfiás (LC) módszerekkel együtt vált népszerűvé az elmúlt évtizedekben. A vizsgálandó nem-illékony, ionos vagy poláris vegyületet valamilyen viszonylag illékony, poláris oldószerben oldjuk. Az ESI módszer a könnyen protonálódó, bázikus csoportokat tartalmazó vegyületek (aminok, peptidek, fehérjék stb.) vizsgálatára különösen alkalmas. Az $M > 1000$ Da tartományban ESI körülmények között a többszörös protonálódás / deprotonálódás eredményeként többszörösen töltött ($[M+nH]^{n+}$, $[M-nH]^{n-}$) ionok is képződhetnek, ahol n az adott ion töltéseinek száma. Az apoláris vegyületek ESI-vel nem, vagy csak alig vizsgálhatóak.

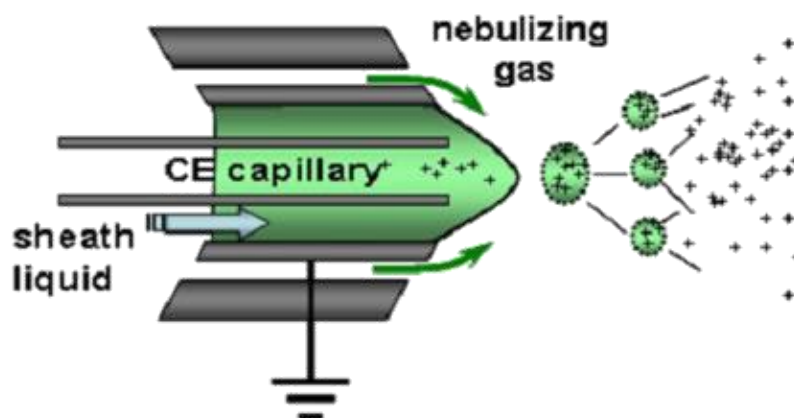
Az ESI-nél a mintaoldatot egy kapillárisban áramoltatják, melyre nagyfeszültséget kapcsolnak, emiatt az elektrosztatikus tér hatására a kapilláris végén lévő folyadék felszínén töltéstöbblet alakul ki, így a kapillárisból kilépő folyadék kicsúcsosodik és a csúcásárol töltéssel rendelkező folyadékcseppek szakadnak le. Az ESI technikánál ezt az ionspray technikát gyakran aerodinamikus porlasztással kombinálják: a fémkapillárisal koaxiálisan elhelyezkedő külső csőben egy inert porlasztógázt (pl. N_2) alkalmaznak a töltött aeroszol létrehozására. A párolgás során a cseppek mérete

folyamatosan csökken, viszont töltésük nem változik, így jelentősen megnövekszik a felületi töltéssűrűségük, instabillá válnak, végül kisebb cseppekre, majd ionokra szakadnak. A cseppek zsugorodását, a minta ionjainak deszolvatációját 150-300 °C-os szárítógáz (pl. N₂) alkalmazásával fokozzák.

A CE-nek az ESI-MS-hez való kapcsolásánál a legnagyobb nehézséget a CE által szolgáltatott rendkívül kis sebességű (legfeljebb ~0.1 µL/perc) folyadékáram jelenti, hiszen ahhoz, hogy stabil ESI aeroszol képződjön, legalább néhány µL/perc sebességre van szükség. (Abban az esetben, ha minimális az elektromotikus áramlás (savas pufferek használata esetén), inkább csak ionok áramlásáról lehet beszélni, és nem folyadékáramlásról). Emellett az összekapcsoláskor azt is meg kell akadályozni, hogy az ionforrás vákuumrendszere "kiszívja" az elektrolitot a kapillárisból. (1 bar nyomásesés 1 m hosszú 50 µm belső átmérőjű kapillárisban 1 cm/s lineáris áramlási sebességű folyadékáramot állít elő.) Az eredményül kapott parabolisztikus áramlási profil az elválasztás hatékonyságának jelentős csökkenéséhez vezetne. Ezért egy pótlólagos segédfolyadékáramot (make-up vagy sheath flow) vezetnek a kapillárishoz, hogy így biztosítsák az elektropray ionizációhoz szükséges, az EOF-nél körülbelül 50-szer nagyobb folyadékáram igényt. A CE kapilláris végét az ESI kapilláris belsejében annak végéig tolják, így kialakul egy elektrolitikus kapcsolat a CE kapillárisból érkező oldat és a segédfolyadékáram között. Az ESI porlasztófej (a segédfolyadékáram kapillárisának fala) fémből készül, így amikor erre a fémtestre kapcsoljuk a földelektródot, az egyszerre lesz a CE elválasztáshoz szükséges szeperációs feszültség és az ESI feszültség földpontja.

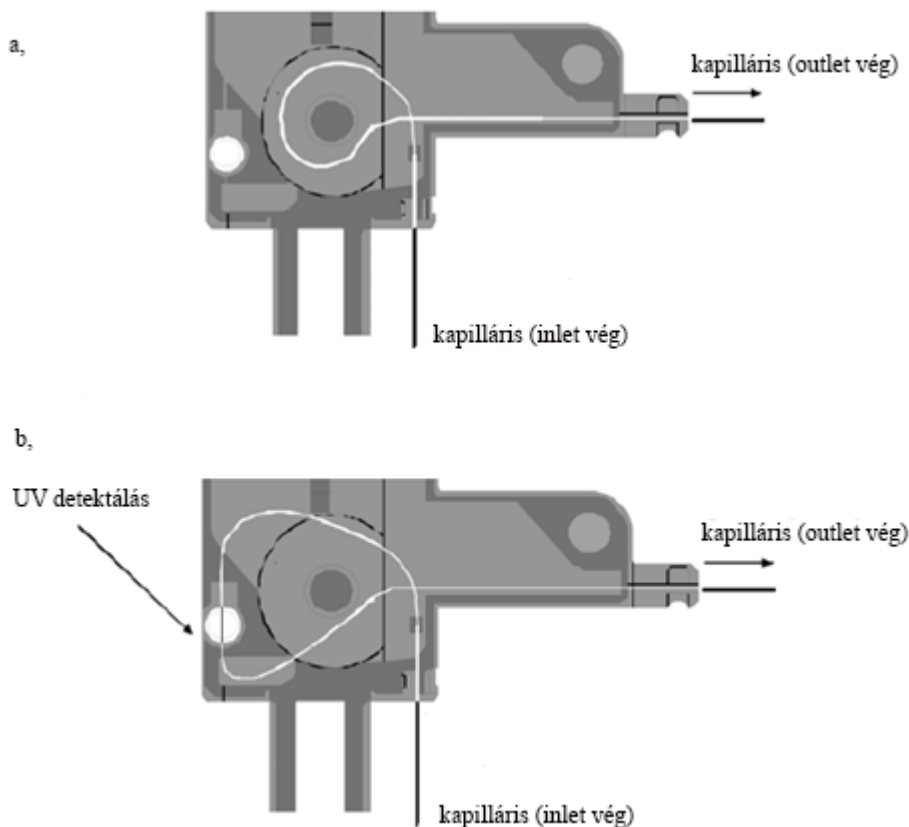
A leggyakrabban használatos segédfolyadékáramok:

- 50% metanol vagy izopropanol
- 5 mM ammónium-formiát vagy ammónium-acetát 50% metanolban
- 0.1-1% ecetsav vagy hangyasav 50% metanolban



3. ábra A CE kapilláris kapcsolása a tömegspektrométer ESI mintabeviteli/ionizációs egységéhez

A CE-MS rendszerekben használatos kvarc CE kapillárisok belső átmérője 50-75 μm , hossza 60-120 cm. Lehetőség van arra, hogy csak MS detektálást végezzünk, de általában egyidejű UV fotometriás és MS detektálást alkalmazunk. A kétféle detektálás megvalósításához a kapillárist kétféleképpen kell elhelyezni a tartókazettában.



4. ábra A CE kapilláris elhelyezése a kapillárstartó kazettában (a) MS detektálás, illetve (b) UV fotometriás és MS detektálás esetén. A kapilláris outlet vége az MS készülék ESI egységéhez csatlakozik.

1. táblázat CE-MS rendszer tipikus ESI paraméterei

Paraméter	Érték
segédfolyadékáram sebessége	2-10 $\mu\text{L}/\text{min}$
porlasztógáz nyomása	0.2-1 bar
szárítógáz sebessége	10 L/min
szárítógáz hőmérséklete	200-300°C
ESI feszültség	4 kV (poz), 3.5 kV (neg)

A CE elválasztóegységnek ESI-MS rendszerhez való kapcsolásnál egy másik probléma, hogy a CE különböző technikáinál (pl. zóna elektroforézis (CZE), micelláris elektrokinetikus kromatográfiás (MEKC), kapilláris gélelektroforézis (CGE), királis kapilláris elektroforézis (CCE)) általában olyan vizes pufferelektrolitokat használnak, melyek nem illékonyak (pl. borát, foszfát pufferek, SDS, CTAB detergensok) és ezért nem ESI-MS kompatibilisek. Ezek a vegyületek jelentősen növelik a zaj mértékét, sokszor drámaian rontva a kimutatási határt vagy eltömődést okozhatnak a kapilláris végében. A CE-MS rendszerekben a szeparációs kapillárisban használatos elektrolitok illékonyak kell, hogy legyenek. A leggyakoribb ilyen elektrolitok: hangyasav vagy ecetsav és ezek ammónium sói, ammónium hidroxid (ritkábban még trietilamin). Az elektrolitok optimális koncentrációja (ionerőssége) olyan, hogy az áramerősség ne legyen nagyobb ~50 μA -nél.

Egy CE-MS készülékkel történő mérés az alábbi, egymást követő lépésekből áll:

1. a kapilláris feltöltése, átmosása a pufferelektrolittal a kapilláris bemeneti vége (inlet) felől,
2. bemeneti (inlet) pufferedényke cseréje a mintát tartalmazó edénykével,
3. a minta bejuttatása a kapillárisba kis nyomás vagy feszültség alkalmazásával,
4. a bemeneti pufferedényke visszahelyezése,
5. feszültség alkalmazása az elválasztáshoz,
6. az elválasztás során előbb UV detektálás történik (kb. 40 cm-nyi szeparációs úthosszat követően), majd a kapilláris végén az MS detektálásra is sor kerül.

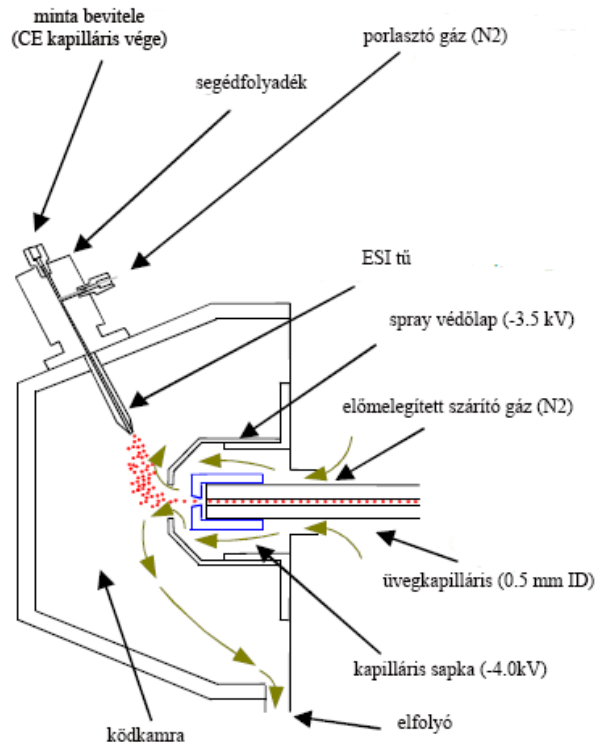
3. Q-TOF MS

Az egyik népszerű és gyakran alkalmazott tömegspektrométer a kvadrupól-repülési idő analizátorokkal felszerelt készülék mely MS és MS/MS üzemmódban is használható. Jelenleg a tömegspektrométerek e verzióját előszeretettel használják CE-hez. Az ionforrásban előállított ionok egy gyorsító feszültség (U) hatására elindulnak az analizátor felé. Töltéssel rendelkező részecskék elektrosztatikus térben a töltésükkel arányos kinetikus energiára tesznek szert. Amennyiben azonos töltésű (z) ionokról van szó, ezek az elektrosztatikus gyorsítást követően azonos kinetikus energiával rendelkeznek

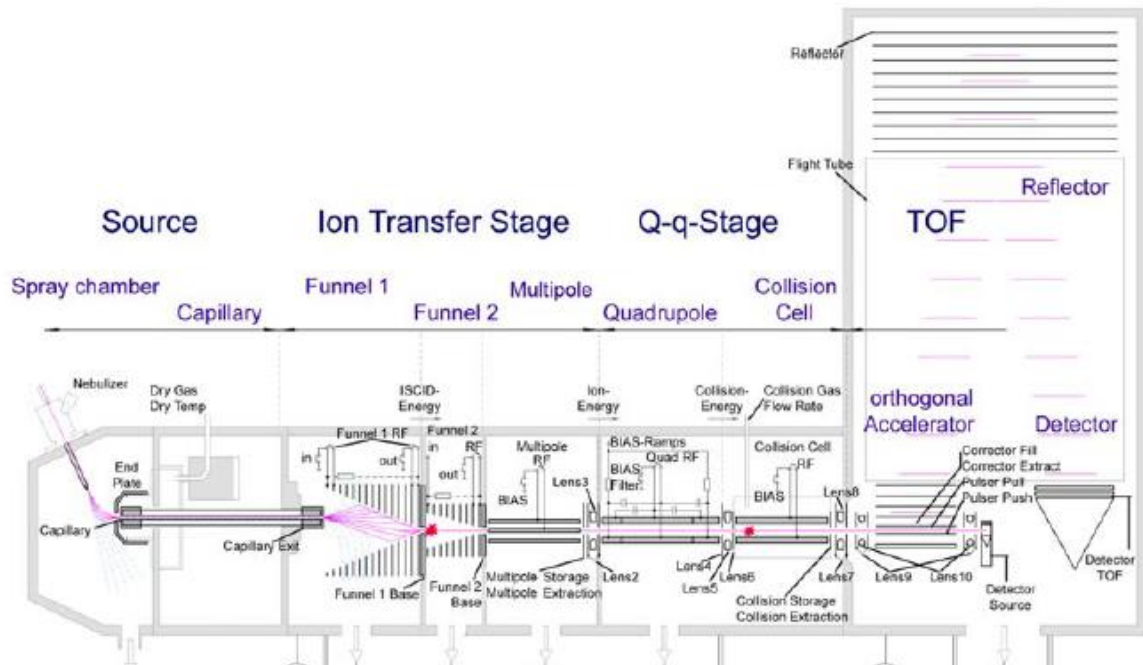
$$zU = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 = \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \dots = \frac{1}{2} m_n v_n^2$$

Amint az ionok belépnek az analizátorba, egy erőtermentes térrészbe, ún. repülési csőbe kerülnek, ahol kinetikus energiájuk már nem változik. Az azonos kinetikus energiával rendelkező, de különböző tömegű ionok különböző sebességgel repülnek, tehát a repülési csőben elkülönülnek, majd különböző időben érik el a detektort. A nagyobb tömegű ionok lassabbak, míg a kisebb tömegű ionok gyorsabbak. A repülési idő az adott ionforrás-detektor távolság (L) és gyorsító feszültség mellett csak a fajlagos tömegtől függ. A pontos tömegméréshez az szükséges, hogy az ionok egyszerre, impulzusszerűen lépjenek be a repülési csőbe, és repülési idejüket pontosan tudjuk mérni.

$$t = \frac{L}{v} = L \sqrt{\frac{m/z}{2U}}$$



5. ábra Tömegspektrométer elektro spray ionforrása



6. ábra Q-TOF tömegspektrométer felépítése (ionforrás, ionoptika, kvadrupól, ütközési cella, repülési idő analízátor (ortogonális gyorsító, reflektor, detektor))

4. A CE-MS elektroferogramok kiértékelése

Minden analitikai elválasztási folyamat célja, hogy választ tudjunk adni a következő kérdésekre:

1. Milyen összetevőkből áll a minta?
2. Milyen koncentrációban vannak jelen az összetevők a mintában?

Míg az első kérdés megválaszolásával a minőségi (kvalitatív) analízis foglalkozik, a második kérdésre a mennyiségi (kvantitatív) analízis ad választ.

Minőségi analízis

A CE-nél a minőségi analízis az elektroferogramon található csúcsok azonosítását jelenti. Ez egy adott csúcs migrációs idejének vagy mozgékonyságának egy ismert vegyület kísérletileg kapott megfelelő eredményeivel való összehasonlításával történhet. Ha ugyanazokat a migrációs időket, illetve mozgékonyági adatokat kapjuk, akkor lehet, hogy a két vegyület azonos. (A csúcsoknak a migrációs idejük alapján történő összehasonlítása állandó kísérleti körülményeket feltételez. A működési paraméterek (pl.: hőmérséklet, puffer pH, puffer ionerőssége, stb.) kis mértékű megváltozása is hatással lehet a részecskék mozgékonyására, és így megbízhatatlanná válhat a csúcs azonosítása.)

Gyakorlatilag teljes bizonyossággal akkor azonosíthatunk egy kérdéses csúcsot, ha MS módszerrel végezzük a detektálást. A mai modern MS készülékek 4 (vagy még több) tizedesjeggyel nagy pontosságú m/z érték meghatározását, izotópeloszlást, töltésszám meghatározást tesznek lehetővé. A nagy pontosságú molekulatömeg meghatározásából az ismeretlen komponens összegképlete is kinyerhető. Fragmentációt követően (MS/MS technikával) pedig szerkezeti információk is nyerhetők.

Mennyiségi analízis

Bár a tömegspektrumon az egyes csúcsok intenzitásai arányosak az adott komponens anyagmennyiségével, de mivel az adott pillanatban jelenlevő egyéb komponensek mennyiségei és ionizációs képességei is nagy hatással vannak egymásra, így egy MS spektrumból csak hozzávetőleges kvantitatív információk nyerhetők ki. Megbízható mennyiségi információkhoz csak akkor juthatunk, ha elválasztástechnikával kapcsoljuk az MS detektálást, azaz, ha a minta egyes komponenseit elválasztjuk, majd ezeket egymás után, (viszonylag) tiszta formában juttatjuk az MS detektorba. Ilyenkor a minta egy összetevőjének mennyiségét vagy koncentrációját az elektroferogram egy csúcsának magassága, vagy területe alapján kaphatjuk meg. Míg a csúcsmagasság közvetlenül leolvasható az elektroferogramról, a csúcsterület meghatározásához egy integráló egység (számítógépes szoftver) szükséges. Az anyag ismeretlen mennyisége vagy c_x koncentrációja az a_x csúcsterület és az ismert koncentrációjú standard minták $a_{1...n}$ csúcsterületeinek korrelációja alapján számolható ki. Ehhez két fő eljárás, a külső standard és a belső standard módszerek ismeretesek. Mindkét módszer széles körben használatos az analitikai kémiában.

5. A CE-MS főbb alkalmazási területei

A CE-MS-t a CE és a MS nagyfokú univerzalitása miatt szinte mindenféle komponens meghatározására használhatjuk: a legkisebb méretű ionoktól kezdve a nagy biológiai makromolekulákig (csak a kifejezetten apoláris komponensek elemzése nehézkes). A módszert gyakran alkalmazzák gyógyszeranalitikai, orvosdiagnosztikai és környezetanalitikai vizsgálatokhoz, kifejezetten jól használható peptidek, fehérjék, gyógyszervegyületek, cukrok meghatározásánál. A glikofehérjék például tipikusan azok a vegyületek, melyeket a hagyományos gélelektroforézis vagy folyadékromatográfiás módszerekkel viszonylag nehéz elemezni, ugyanakkor a CE (CZE) - MS itt előnyösen használható. Jelentős sikereket értek el a "peptid-térképek" CE-s felvételénél is. A "peptid-térkép" készítésénél a fehérjéket enzimekkel vagy vegyszerekkel kis peptidrészekre tördelik szét, majd a peptidek e keverékét elemzik. E vizsgálat megfelelő adatbázisok és szoftverek segítségével peptidek és fehérjék meghatározását (szekvenálását) is lehetővé teszi.

A *Függelékben* aminosavak CE-MS módszerrel történő minőségi és mennyiségi meghatározásának, illetve egy ismeretlen minta molekulatömege meghatározásának eredményei láthatók.

6. A gyakorlaton bemutatott CE-MS készülék paraméterei

maXIs II UHR q-TOF MS rendszer (Bruker):

ESI, kvadrupól – repülési idő analizátorok, ultranagy felbontású, pontos tömegmérésre és valós izotóparány meghatározásra alkalmas MS és MS/MS mérési módokban. Kettős ionfókuszálás (Apollo II dual ion funnel). Nagyteljesítményű hiperbolikus kvadrupól, kvadrupoláris ütközési cella egyenáramú gradienssel, hőmérséklet kompenzált TOF analizátor. 5G adat/s digitalizáló rendszer.

Nitrogéngáz generátor (32 L/min). Szünetmentes tápegység (2400 W).

Compass (Bruker) MS vezérlő és kiértékelő szoftver.

7100 kapilláris elektroforézis készülék (Agilent):

0 +/- 30 kV egyenáramú programozható tápegység

UV-látható diódasoros detektor (190–600 nm), hullámhossz felbontás: 1 nm

Válaszidő: 0.025-10 s

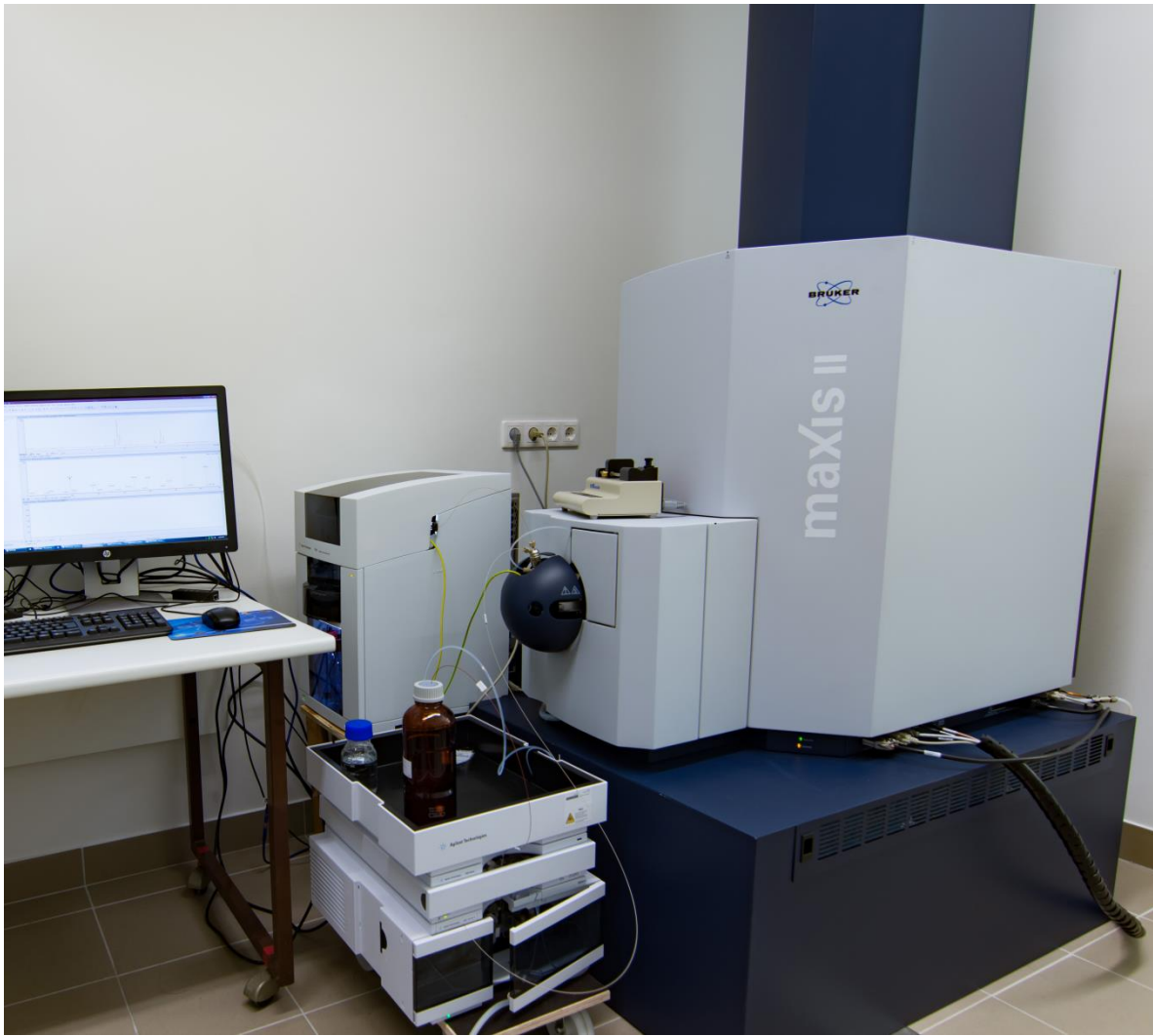
Nyomásrendszerek: 0 - +/-100 mbar és 0-1 bar

Hőmérséklet termosztált kapilláris kazetta, 50 férőhelyes automata mintaadagoló

Open Lab CDS Chemstation szoftver (Agilent) a CE készülék és az izokratikus pumpa vezérléséhez.

CE ESI-MS kapcsolóelem (Agilent)

1260 Infinity II izokratikus nagynyomású folyadékpumpa gázmentesítő egységgel (vacuum degasser) (Agilent).



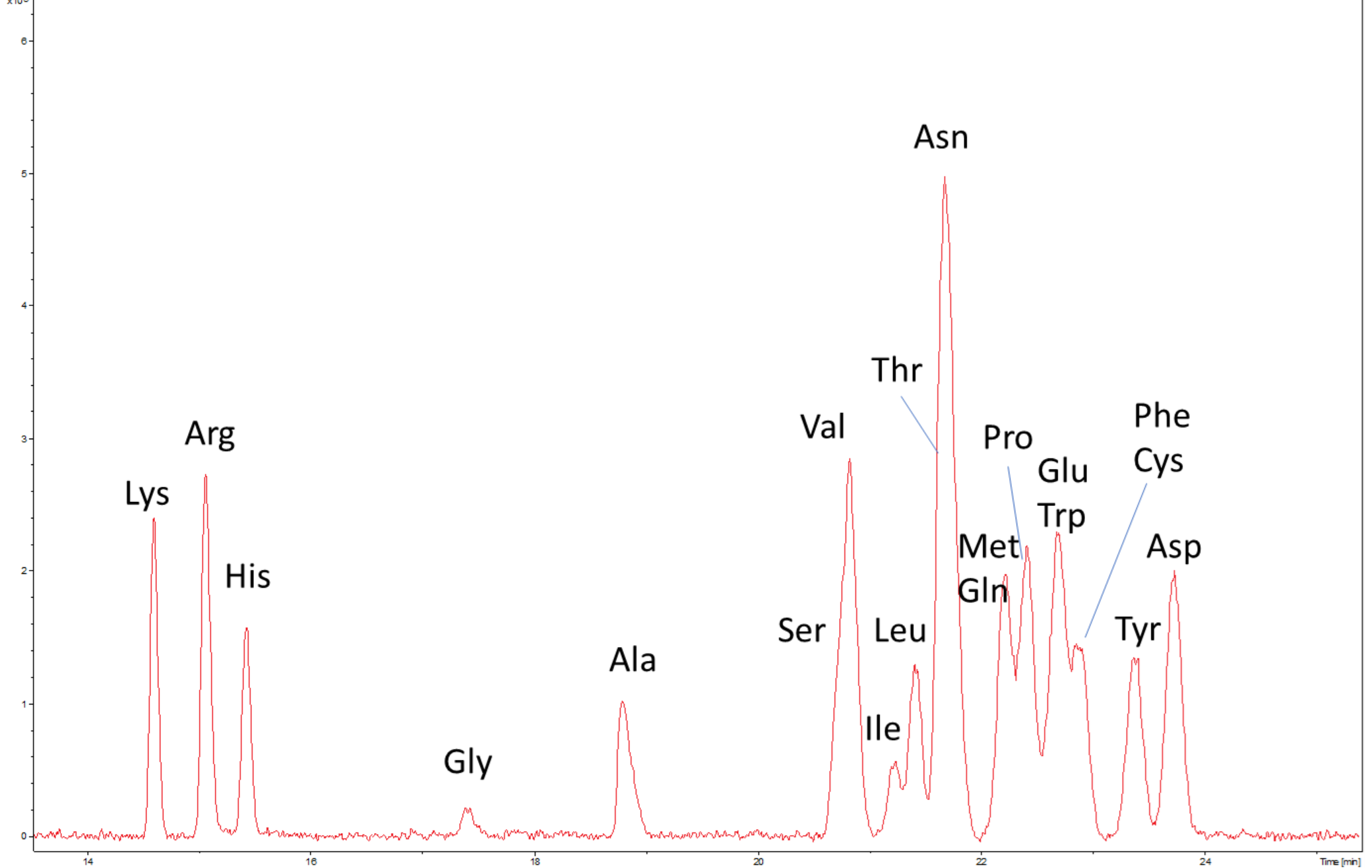
7. ábra CE-MS rendszer (DE Kémia Épület, D401 labor)

ELLENŐRZŐ KÉRDÉSEK

1. Ismertesse a CE és MS rendszerek összekapcsolásának nehézségeit, megoldási lehetőségeit.
2. Ismertesse a CE-MS rendszer felépítését, főbb egységeit és azok funkcióját.
3. Mik a CE-MS legfontosabb alkalmazási területei, mire használható?
4. Ismertesse az MS spektrumok és az elektroferogramok kiértékelésének fontosabb módszereit, elveit.

FÜGGELÉK

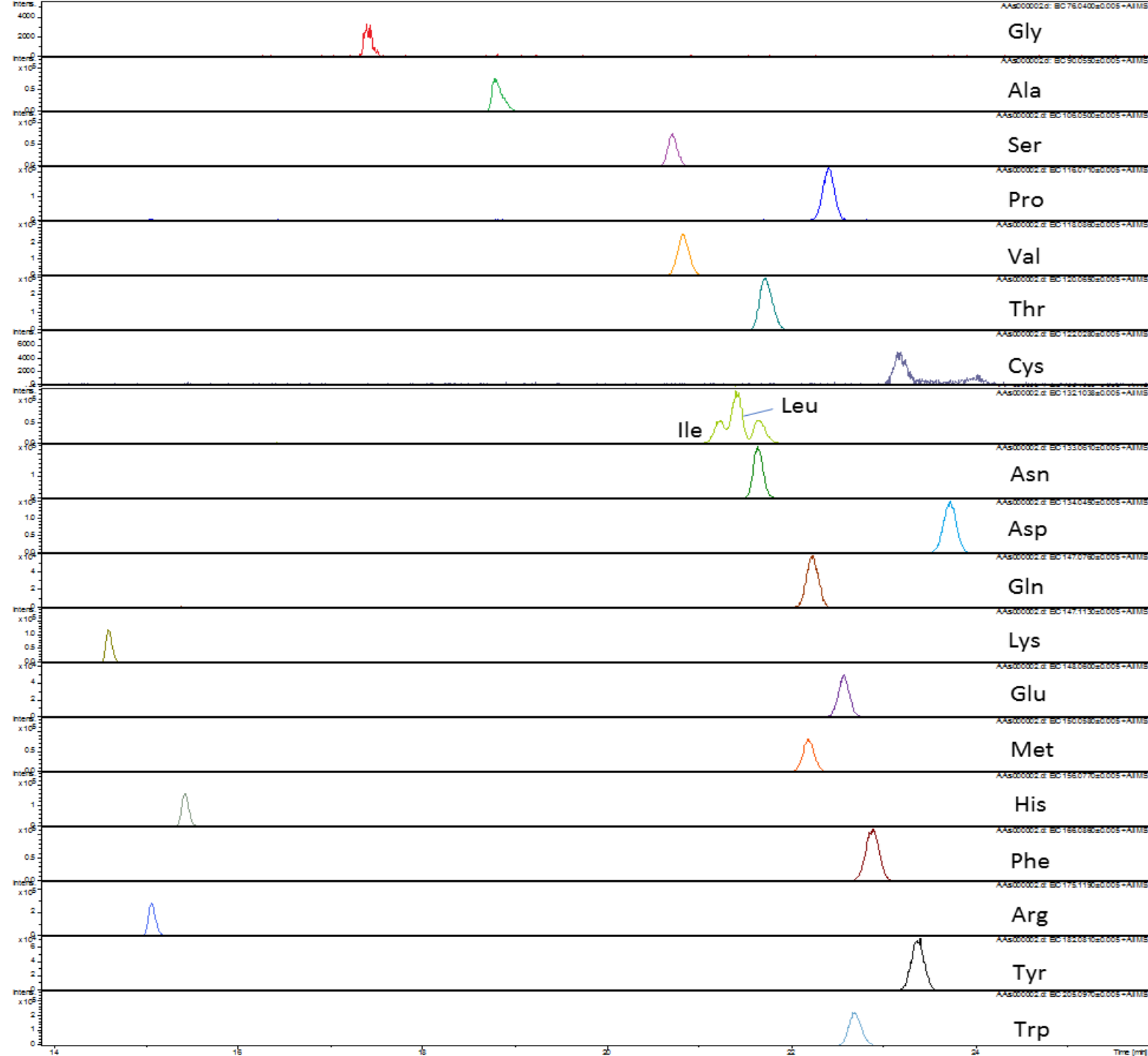
- Aminosavak minőségi és mennyiségi meghatározása CE-MS módszerrel, reálminta elemzések (9 oldal)
- Molekulatömeg meghatározás MS módszerrel (4 oldal)



20 aminosav elemzése CZE-MS módszerrel (Minta: 1 mM Gly, 1.5 mM Ala, 0.5 mM Ser, 0.5 mM Val, 1 mM Thr, 0.1 mM Cys, 0.1 mM Ile, 0.1 mM Leu, 0.5 mM Asn, 0.5 mM Asp, 0.1 mM Gln, 0.1 mM Lys, 0.1 mM Glu, 0.1 mM Met, 0.1 mM His, 0.1 mM Phe, 0.1 mM Arg, 0.1 mM Tyr, 0.5 mM Trp)

Extrahált ion elektroferogramok 20 aminosav
CZE-MS elemzése esetén

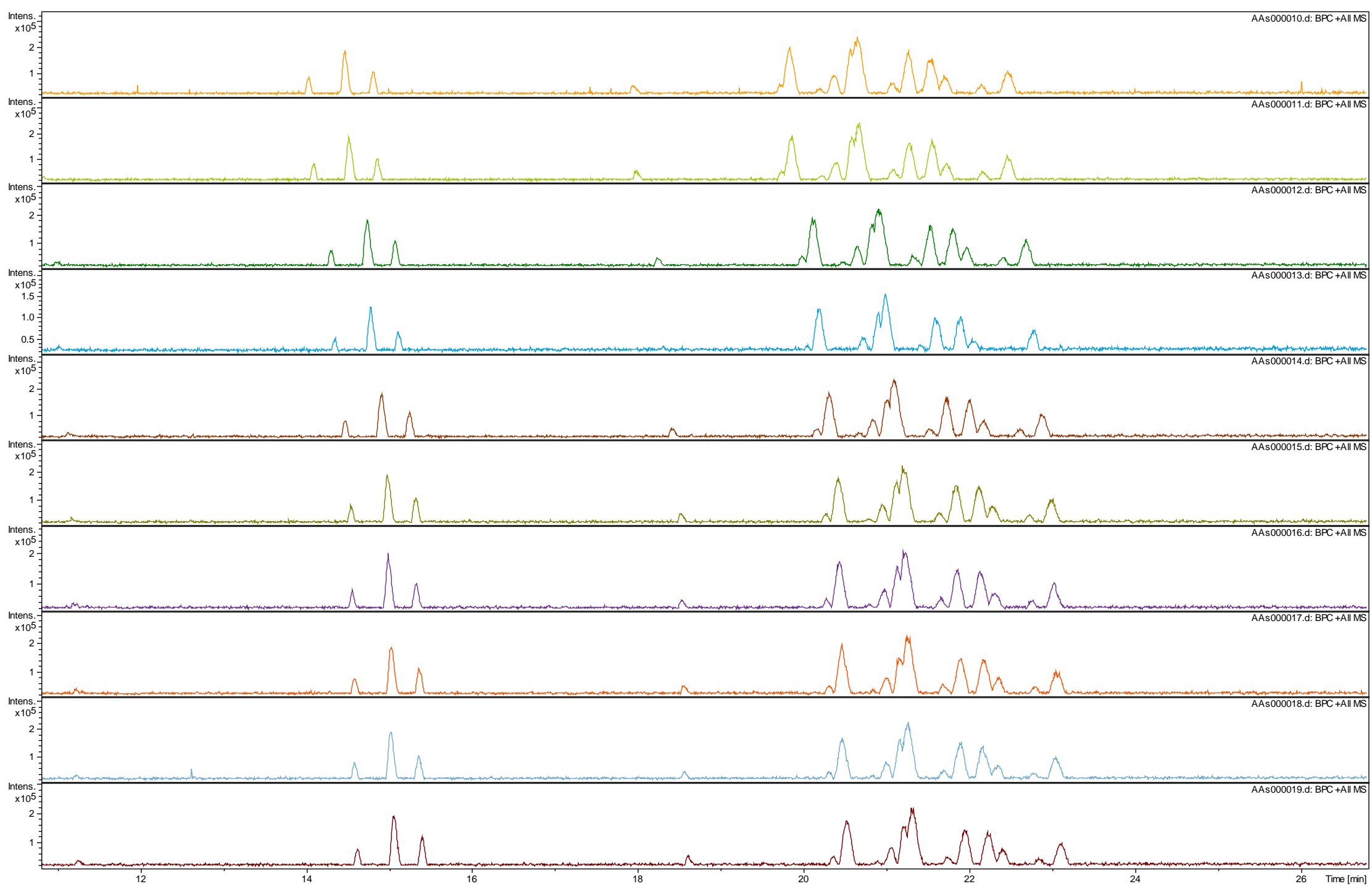
	LOD (3S/N), mM
Gly	0.0109
Ala	0.0055
Ser	0.0016
Pro	0.00045
Val	0.0019
Thr	0.0010
Cys	0.0293
Ile	0.0021
Leu	0.0013
Asn	0.0014
Asp	0.0050
Gln	0.0014
Lys	0.00045
Glu	0.0013
Met	0.0027
His	0.00034
Phe	0.00068
Arg	0.00062
Tyr	0.0044
Trp	0.0045



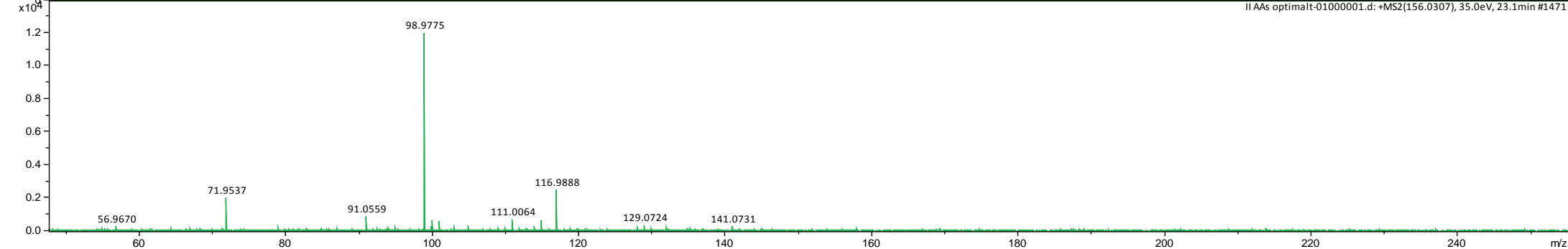
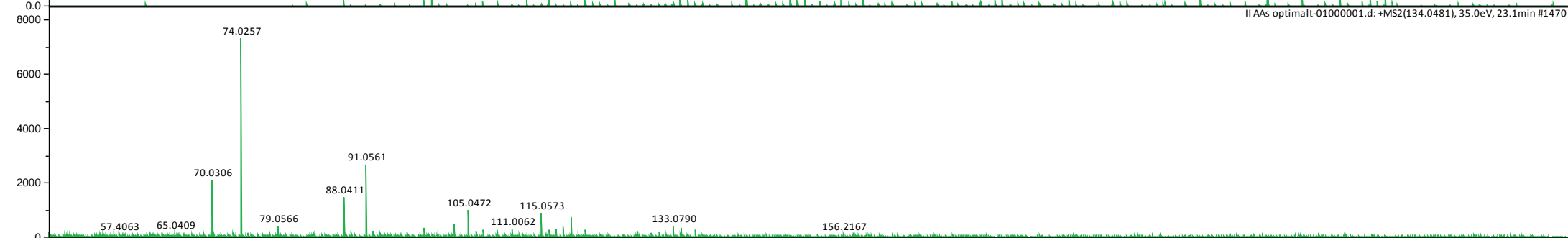
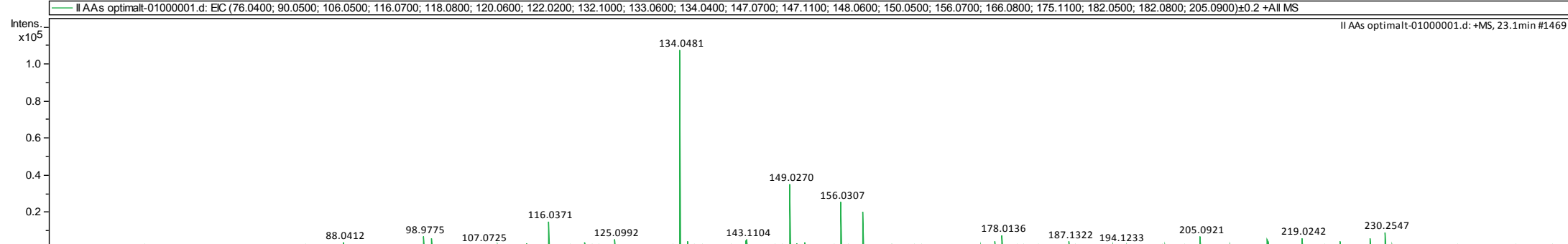
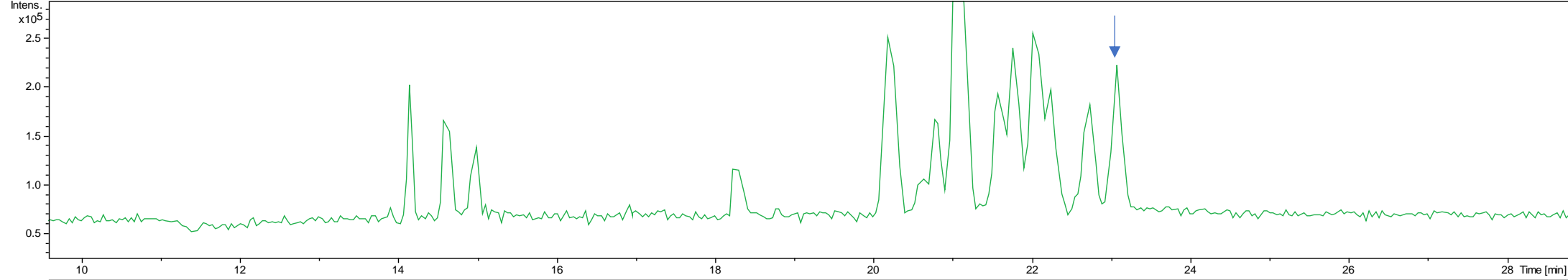


Aminosav keverék 1-30x hígításainak CZE-MS elemzése Minta (1x): Minta: 5 mM Gly, 8 mM Ala, 2.5 mM Ser, 2.5 mM Val, 5 mM Thr, 0.5 mM Cys, 0.5 mM Ile, 0.5 mM Leu, 2.5 mM Asn, 2.5 mM Asp, 0.5 mM Gln, 0.5 mM Lys, 0.5 mM Glu, 0.5 mM Met, 0.5 mM His, 0.5 mM Phe, 0.5 mM Arg, 0.5 mM Tyr, 2.5 mM Trp

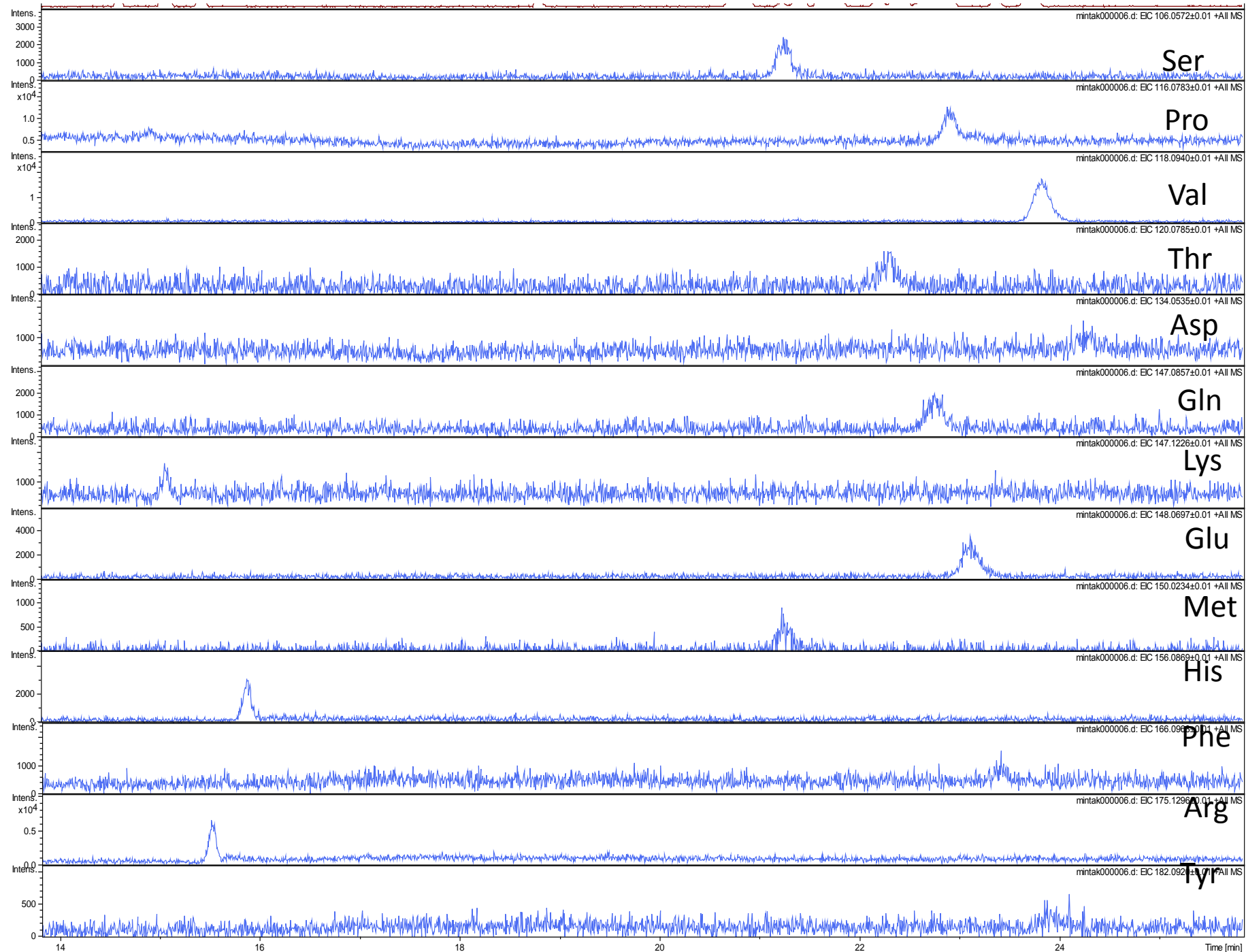
20 aminosavat
tartalmazó oldat 10
ismételt CZE-MS
elemzése belső
standard,
normalizálás nélkül



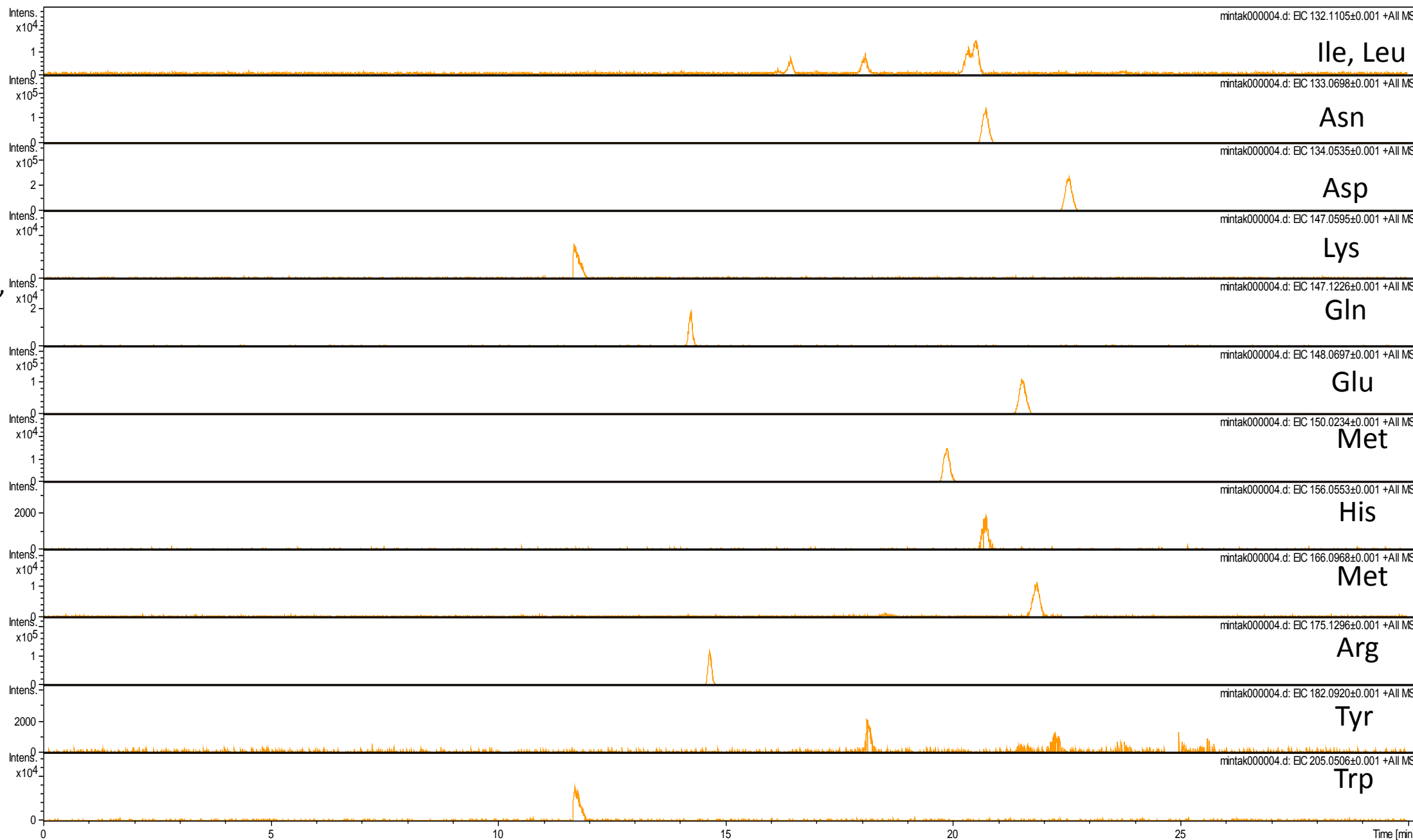
20 aminosavat
tartalmazó oldat CZE-
MS mérése során az
Asp csúcsára kapott
MS és MS/MS
spektrumok



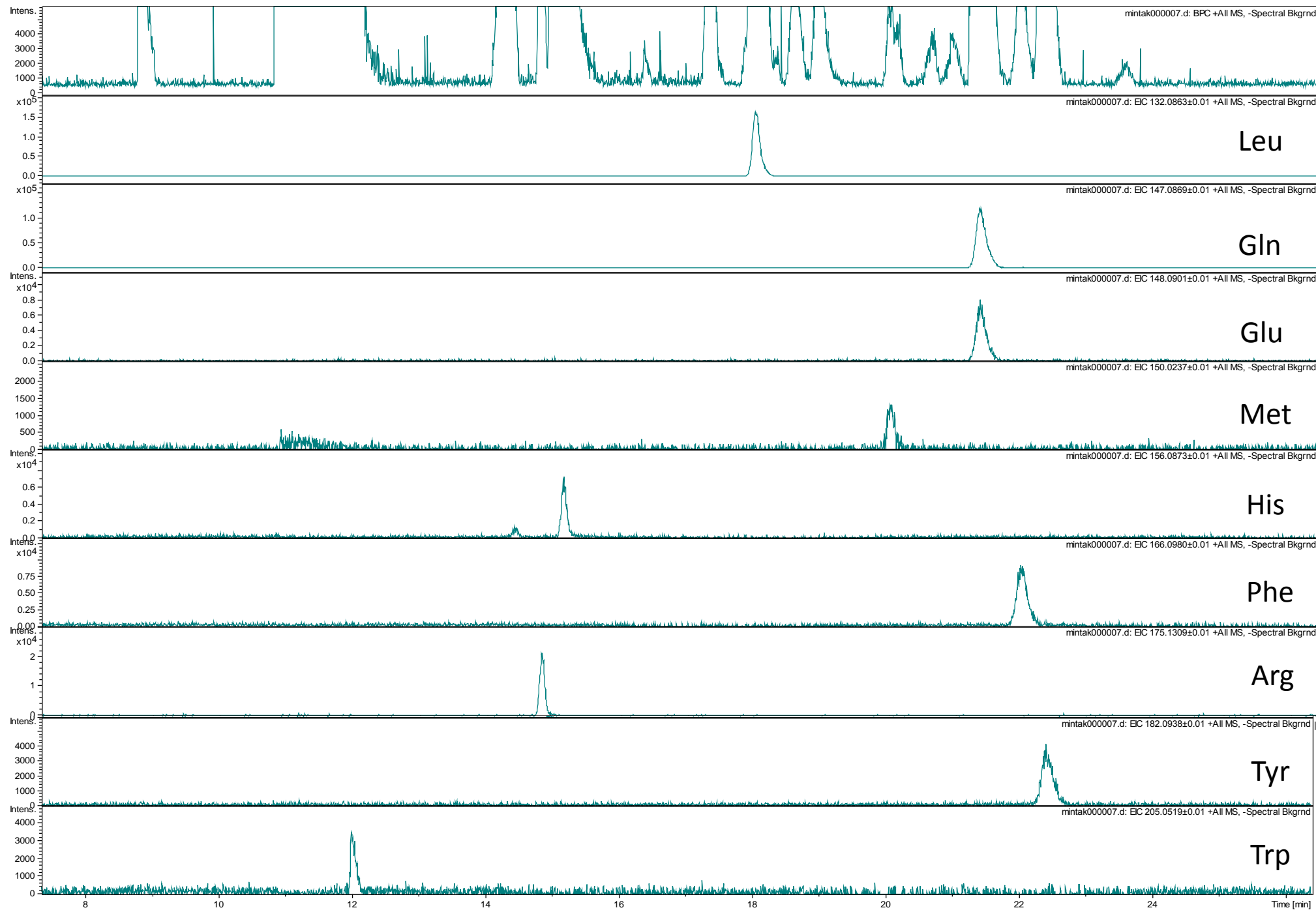
Humán könny minta
CZE-MS elemzése
(közvetlen injektálás, nincs
mintaelőkészítés)



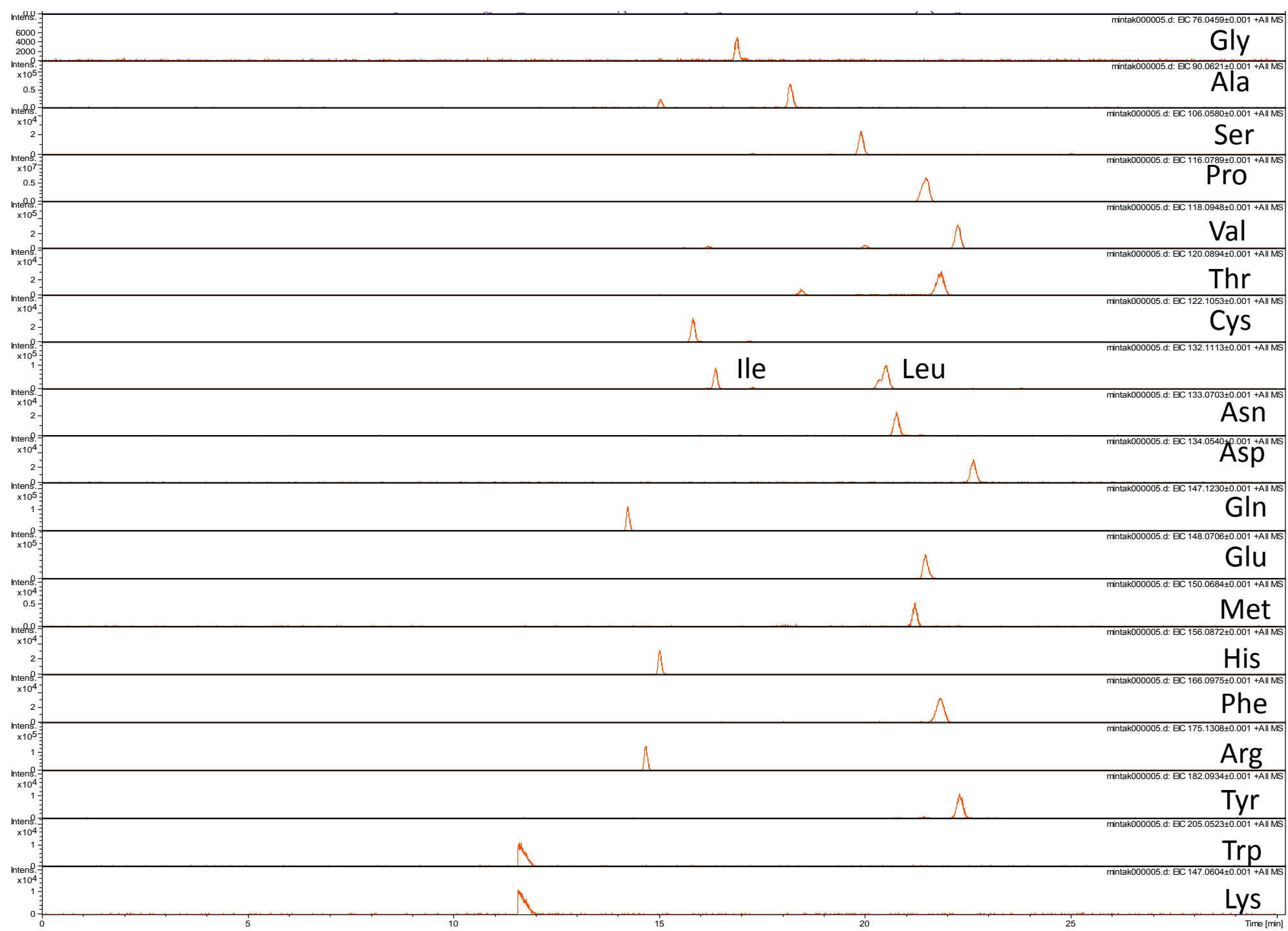
Kereskedelmi
citromlé minta
CZE-MS elemzése
(közvetlen injektálás,
nincs
mintaelőkészítés)



Kereskedelmi liquor
(agyvíz) minta
CZE-MS elemzése
(közvetlen injektálás,
nincs
mintaelőkészítés)



Bor minta
CZE-MS elemzése
(közvetlen injektálás,
nincs
mintaelőkészítés)



Display Report

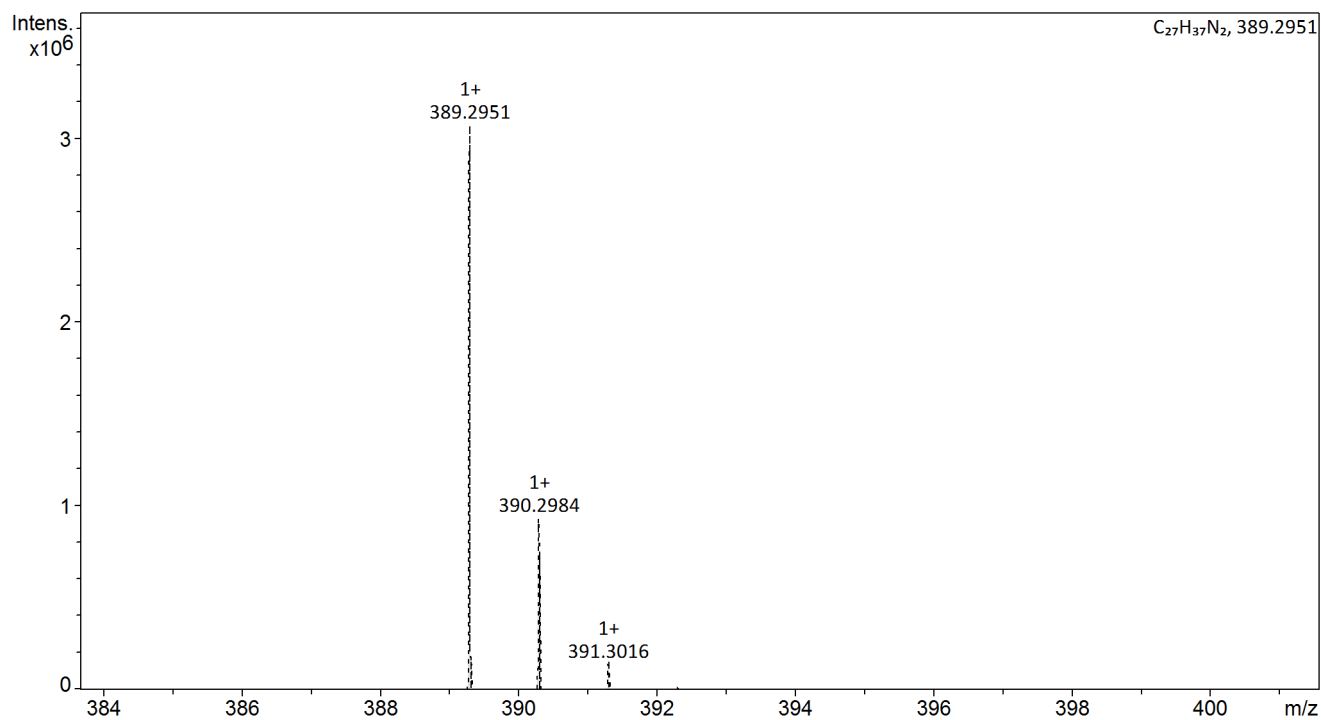
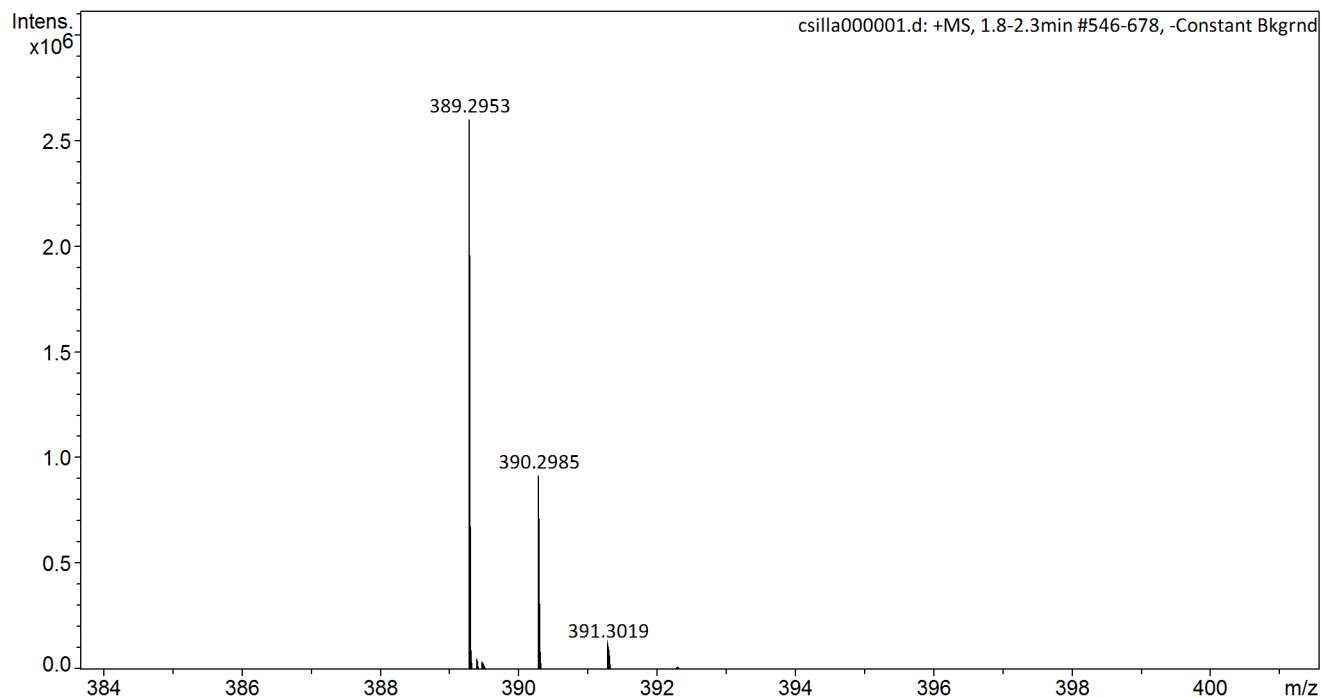
Analysis Info

Analysis Name D:\csilla000001.d
Method peptides_200-600.m
Sample Name
Comment

Acquisition Date 2018.03.19. 15:41:14
Operator Demo User
Instrument maXis II 1828979.22359

Acquisition Parameter

Source Type	ESI	Ion Polarity	Positive	Set Nebulizer	0.5 Bar
Focus	Active	Set Capillary	3500 V	Set Dry Heater	200 °C
Scan Begin	200 m/z	Set End Plate Offset	-500 V	Set Dry Gas	4.5 l/min
Scan End	900 m/z	Set Charging Voltage	2000 V	Set Divert Valve	Waste
		Set Corona	0 nA	Set APCI Heater	0 °C



Valószínűsíthető összegképlet(ek) megadása pontos móltömeg alapján

SmartFormula Manually

Lower formula:

Upper formula:

Note: for m < 2000 the elements C, H, N, and O are considered implicitly.

Adducts, pos. Collect adducts

Adducts, neg.

Measured m/z Tolerance: mDa Charge:

Meas. m/z	#	Ion Formula	m/z	err [ppm]	mSigma	# mSigma	Score	rdb	e— Conf	N-Rule
389.2951	1	C ₂₇ H ₃₇ N ₂	389.2951	0.0	0.0	1	100.00	11.0	even	ok

Automatically locate monoisotopic peak Maximum number of formulae

Check rings plus double bonds Minimum Maximum

Filter H/C element ratio Minimum H/C: Maximum H/C:

Estimate carbon number Generate immediately

Compass MolWeightToFormula

Min

Max

Measured m/z Tolerance [ppm] Charge

Check rings plus double bonds Min. Max.

Automatically locate monoisotopic peak Electron configuration

Minimum H/C ratio Maximum H/C ratio

Maximum number of formulas

#	Formula	m/z	err [ppm]	err [mDa]	dbl e
1	C ₂₇ H ₃₇ N ₂	389.29513	0.3	0.1	10.5

Abd. vs m/z plot showing peaks at 389.1, 390.298, 391.302, and 392.305.

Adott összegképletű molekula izotópeloszlása a tömegspektrumon

