



Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200B

РЕШЕНИЕ СЛОЖНЕЙШИХ АНАЛИТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ АНАЛИЗА ЦЕЛЕВЫХ КОМПОНЕНТОВ И НЕИЗВЕСТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Agilent 7200B — расширение возможностей ведущего мирового квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200B предоставляет усовершенствованные возможности благодаря следующим особенностям:

- ▶ Ионизация электронным ударом (EI) и химическая ионизация (CI) во всех системах.
- ▶ Диапазон масс расширен вплоть до m/z 3000.
- ▶ Точность определения массы составляет менее 3 ppm (среднеквадратичное значение).
- ▶ Система быстрой обратной продувки для повышения функциональности ГХ.
- ▶ Новые функции программного обеспечения, а также инструменты библиотеки точных масс-спектров.
- ▶ Библиотека точных масс пестицидов для квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС.



Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС 7200B превосходит ГХ Agilent 7890B и демонстрирует еще большую разделяющую способность благодаря включенной в него системе быстрой обратной продувки. Такие усовершенствованные характеристики 7200B, как расширенный диапазон масс, особенно полезны для анализа соединений большой массы с помощью устройства ввода твердых образцов.



ГХ-МСД Agilent 5977E
Исключительное решение для рутинного анализа



ГХ-МСД Agilent 5977A
Отраслевой стандарт чувствительности, стабильности и достоверности спектрального анализа с помощью моноквадрупольных систем



ГХ-МСД Agilent 5975T LTM
Первый в мире портативный ГХ-МСД



Трехквадрупольный ГХ-МС Agilent 7000C
Проверенный выбор для современных стандартизованных методов



Трехквадрупольный ГХ-МС Agilent 7010
Новые стандарты характеристик ионизации электронным ударом

Лучший выбор для качественного и количественного анализа

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200B сочетает имеющиеся востребованные функциональные возможности наших флагманских систем для ГХ-МС вместе со следующими расширенными возможностями:

Высокое разрешение и точность определения массы

Высокая точность определения массы (около 1 ppm) в сочетании с разрешением, в 15–50 раз большим, чем у моноквадрупольного МС, дает возможность анализа целевых, нецелевых и неизвестных соединений с еще большей достоверностью.

Расширенный диапазон масс

Расширенный диапазон масс позволяет анализировать соединения с большой массой, что является преимуществом при использовании устройства ввода твердых образцов.

Низкие пределы обнаружения

Полный спектр с чувствительностью, большей, чем у квадрупольного МС, позволяет получать спектры масс при содержании вещества на колонке на уровне пикограмма для большинства соединений.

Не имеющая равных селективность в режиме МС-МС

Селективность обнаружения метода МС-МС с высоким разрешением значительно превосходит характеристики прочих анализаторов МС-МС. Более того, точные масс-спектры дочерних ионов помогают подтверждать целевые и нецелевые вещества, а также уточнять состав неизвестных соединений.

Простота обработки данных и точные результаты МС и МС-МС

Программное обеспечение Agilent MassHunter предоставляет ценные инструменты для идентификации, количественного определения и подтверждения.

- Обнаружение соединений в сложных образцах с помощью деконволюции, оптимизированной для режима ионизации электронным ударом (EI) или химической ионизации (CI).
- Сочетание результатов поиска по библиотеке и расчетных формул для молекулярных и фрагментных ионов упрощает идентификацию состава соединения.
- Mass Profiler Professional, программа, ориентированная на масс-спектрометрию, позволяет выполнять многовариантный статистический анализ в нескольких файлах данных.

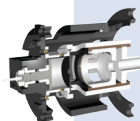
Точные данные масс позволяют качественно распознавать соединения и проводить количественные расчеты с максимальной достоверностью.

ПРОВЕРЕННАЯ ВРЕМЕНЕМ КОНСТРУКЦИЯ С ПЕРЕДОВЫМИ УСОВЕРШЕНСТВАМИ



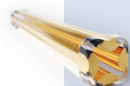
ГХ Agilent 7890B

ГХ Agilent 7890B обеспечивает оптимальную производительность системы при сочетании с масс-спектрометром.



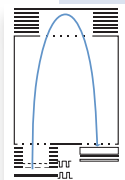
Высокочувствительный источник ионизации

Программируется до 350 °C для надежной совместимости со сложными матрицами.



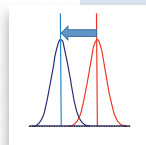
Горячий кварцевый монолитный квадруполь гиперболической формы

Допускает разогрев до 200 °C — без потери разрешения или чувствительности — с целью исключения загрязнения от высококипящих соединений.



Стабильная, высокоэффективная времяпролетная технология

Ортогональные времяпролетные технологии компании Agilent обеспечивают единообразие рабочих параметров для тысяч систем времяпролетных ВЭЖХ-МС, квадрупольно-времяпролетных ВЭЖХ-МС и квадрупольно-времяпролетных ГХ-МС.



Коррекция по внутреннему эталону массы (IRM)

При необходимости, в целях максимальной точности определения массы, в источник можно вводить внутренний эталон массы.

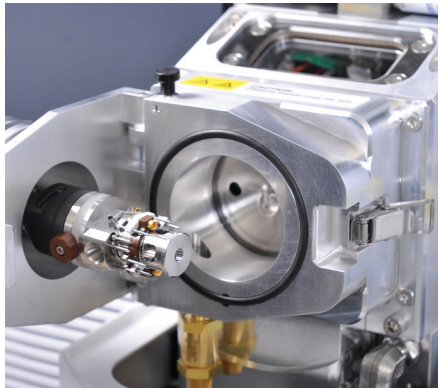


Съемный источник ионизации

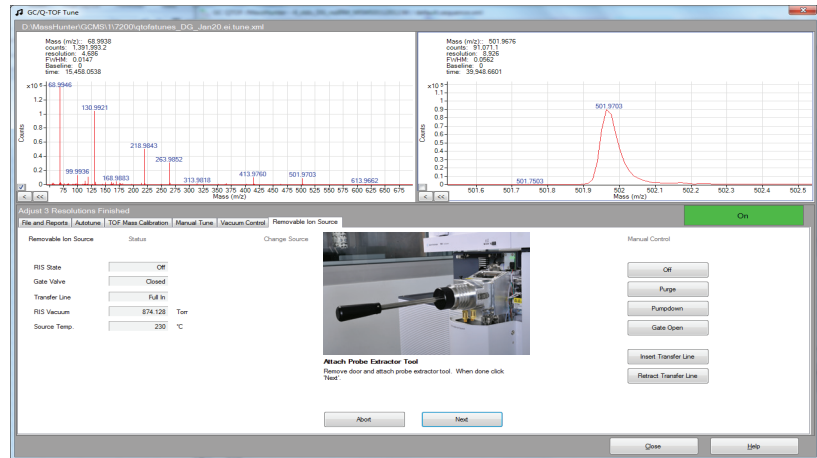
Компьютерное управление интерфейсом между ГХ и МС и запорным механизмом для изолирования МС обеспечивает несложную замену ионного источника в течение 30 минут.

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

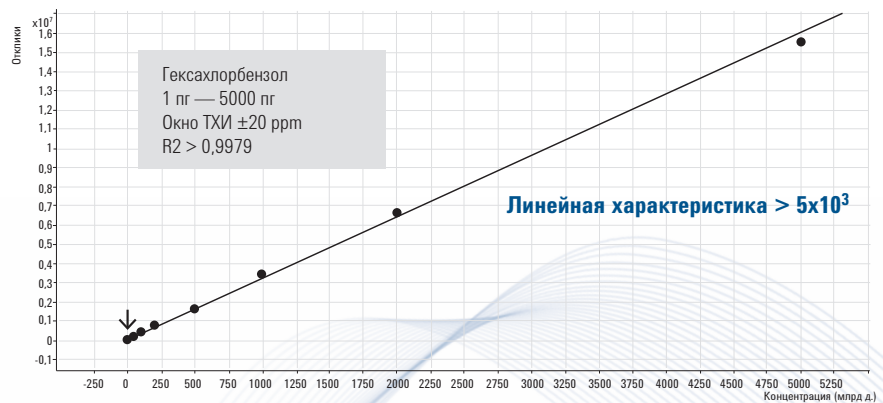
Результаты *доказывают*, что технология квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС делает исключительный качественный и количественный анализ *осуществимым* и простым



Удобные и понятные видео и программное обеспечение содержат инструкции для всех необходимых этапов процесса снятия и установки источника, позволяя проводить его правильно и безопасно.



Съемный источник ионизации позволяет проводить его замену целиком, включая отражающую линзу, ионную камеру, экстракционную линзу и двойной катод, в течение приблизительно 30 минут без сброса вакуума.



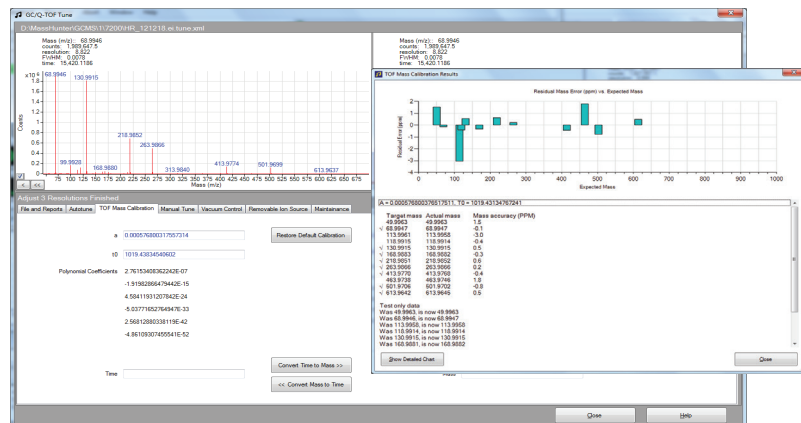
Аналогово-цифровой преобразователь (АЦП): Скорость сбора данных преобразователя, равная 4 ГГц, обеспечивает исключительную линейность в режиме высокого разрешения. Для еще более широкого линейного диапазона усилители с двойным коэффициентом передачи одновременно обрабатывают сигналы детектора каналов с низким и высоким коэффициентом усиления.

пг, на колонке	погрешность определения массы, ppb	
	2-формил-тиофен	2-ацетил-тиазол
1	-3,57	-0,79
2	-4,46	-0,79
5	-2,68	-0,79
10	-2,68	0,79
20	-2,68	0,00
50	-0,89	1,57
100	0,00	1,57
200	-1,79	1,57
500	2,68	1,57
1000	1,79	-1,57
Среднее значение	-1,43	0,31

Внутренний эталон массы (IRM) представляет собой патентованную систему, которая жестко привязывает ось массы для каждого сканирования к составу калибранта. IRM обеспечивает точность определения массы низкой концентрации в самых сложных хроматографических условиях.

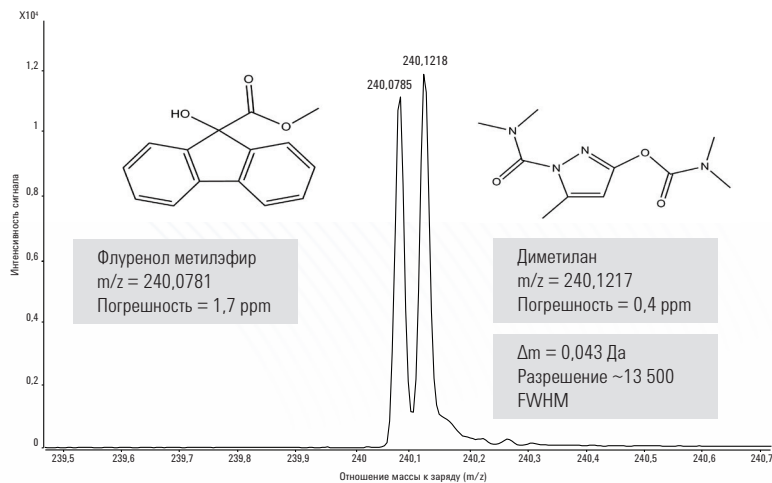
Высокое разрешение и точность определения массы позволяют выполнять анализ целевых, нецелевых и неизвестных соединений

Обладая высокой точностью определения массы (на уровне 1 ppm) и большой разрешающей способностью, квадрупольно-времяпролетный Agilent 7200B для ГХ помогает снизить неопределенность, минимизировать ложноположительные результаты, подтвердить результаты поиска по библиотекам, а также составить молекулярные формулы для неизвестных соединений.



Быстрая, понятная и удобная настройка

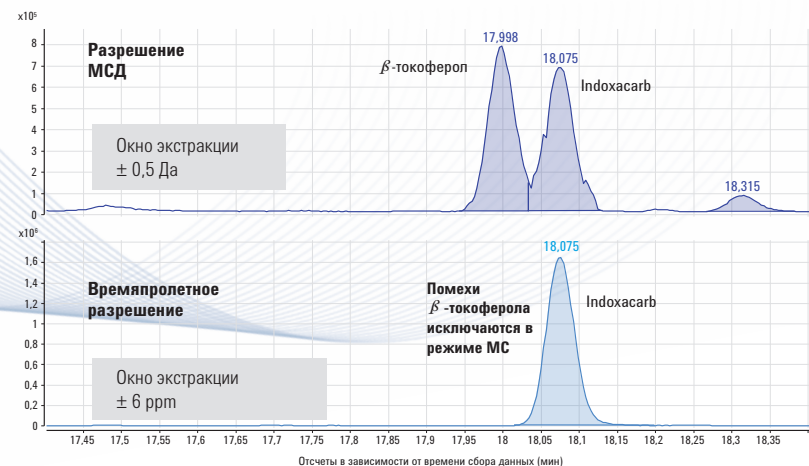
Наше автоматизированное программное обеспечение проведет вас через каждый шаг процесса настройки и калибровки массы для прецизионной работы с высоким разрешением и точным определением массы.



Исключительная разрешающая способность необходима для уверенной идентификации аналита

Разрешение 13 500 (FWHM) позволяет легко различать два соединения с номинальными массами 240 Да, точные массы которых отличаются только на 0,0436 Да.

Исключительная разрешающая способность обязательна для уверенной идентификации аналитов в сложных матрицах.



Точность определения массы позволяет эффективно устранить влияние матрицы

Использование окна экстракции шириной ± 6 ppm позволяет легко отделить фрагментный ион целевого аналита — индоксакарба (150,01195 Да) — от влияния мешающих ионов матрицы — β -токоферола (150,06839 Да). Это способствует достоверному количественному анализу.

Когда требуется большая селективность, MS-MS с точным определением массы может еще лучше разделить целевые аналиты и мешающие вещества матрицы.

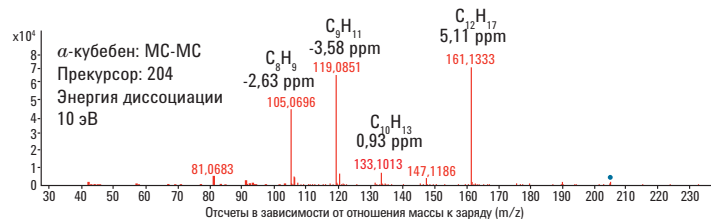
Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

Однозначная расшифровка структуры и подтверждение целевого вещества

Обнаружение искомого или неизвестного соединения может быть произведено с помощью различных методов.

- Проведение поиска по библиотеке спектров, снятых в режиме ионизации электронным ударом (EI)
- Определение молекулярного иона при химической ионизации в режиме регистрации положительных ионов
- Реализация режима МС-МС для выявления пути фрагментации — *эксклюзивный метод компании Agilent*
- Вычисление молекулярных формул для всех ионов на основании данных измерения точной массы

Для очень сложных разделений, таких как α -кубобен на примере справа, селективность МС-МС также создает упрощенный спектр, помогающий уточнить структуру.



Перечень совпадений после деконволюции спектров и библиотечного поиска

Хроматограмма полного ионного тока (TIC) и хроматограмма идентифицированных компонентов после обработки

TIC и хроматограммы выделенных ионов (SIM) α -линдана

Спектр α -линдана после деконволюции

Component RT	Is Primary Hit	Compound Name	Match Factor	CAS#	Formula
12.6787	<input checked="" type="checkbox"/>	5H-Tetrazol-5-amine	69.9	1000273-02-0	CH3N5
12.9386	<input checked="" type="checkbox"/>	Sulfite	51.2	3689-24-5	C8H20O5P2S2
13.0013	<input checked="" type="checkbox"/>	Sulfurous acid, pentyl undecyl es...	84.8	1000309-14-4	C16H34O3S
13.2311	<input checked="" type="checkbox"/>	alpha-Lindane	62.7	319-84-6	C8H8Cl6
13.4195	<input checked="" type="checkbox"/>	Hexane, 2,4,4-trimethyl-	54.3	16747-30-1	C9H20
13.7426	<input checked="" type="checkbox"/>	Anisole, 2,3,4,5,6-pentachloro-	53.7	1825-21-4	C7H3Cl5O
13.8088	<input checked="" type="checkbox"/>	Dimethoate	56.2	60-51-5	C5H12NO3PS2
14.1361	<input checked="" type="checkbox"/>	2-Propenoic acid, 2-methyl-, octyl...	68.4	2157-01-9	C12H22O2
14.3734	<input checked="" type="checkbox"/>	alpha-Lindane	65.0	319-84-6	C8H8Cl6
14.9363	<input checked="" type="checkbox"/>	alpha-Lindane	52.0	319-84-6	C8H8Cl6
15.0550	<input checked="" type="checkbox"/>	2,3-Dimethyl-5-(2,6,10-trimethylun...	66.3	165773-56-4	C20H36O
15.1762	<input checked="" type="checkbox"/>	3-Methylcatechol, diacetate	67.6	1000253-79-9	C11H12O4
15.3821	<input checked="" type="checkbox"/>	2-Propenoic acid, 2-methyl-, octyl...	64.8	2157-01-9	C12H22O2
15.6336	<input checked="" type="checkbox"/>	Diazone	50.9	333-41-5	C12H21N2O3PS
15.9195	<input checked="" type="checkbox"/>	3,5-diket-Butyl-4-hydroxyacetoph...	63.9	14035-33-7	C16H24O2
16.3135	<input checked="" type="checkbox"/>	3-Nonyne	64.2	20184-89-8	C9H16
16.7578	<input checked="" type="checkbox"/>	Cyclopentanemethanol, 3-methyl...	53.4	74783-20-7	C7H12O
17.3253	<input checked="" type="checkbox"/>	1,5-Heptadec-4-one, 3,3,6-trimet...	57.9	546-49-6	C18H34O
17.9993	<input checked="" type="checkbox"/>	Methanone, (3-amino-5-chloro-2-...	61.4	313400-50-9	C15H10ClNO2
18.5982	<input checked="" type="checkbox"/>	Ronnel	65.7	299-84-3	C8H8Cl3O3PS
18.9971	<input checked="" type="checkbox"/>	2,2-Dimethyl-propyl 2,2-dimethyl-p...	53.6	82360-14-3	C10H20O3S2
19.4124	<input checked="" type="checkbox"/>	Butane, 2-methoxy-2-methyl-	73.1	994-05-9	C6H14O
20.6552	<input checked="" type="checkbox"/>	N,N,O-Triacetylhydroxylamine	55.0	17720-63-7	C6H9NO4
24.4732	<input checked="" type="checkbox"/>	3-Amino-2,4-dimethylpentane	57.8	4083-57-2	C7H17N
24.8776	<input checked="" type="checkbox"/>	p,p'-DDE	62.2	72-85-9	C14H8Cl4
25.1149	<input checked="" type="checkbox"/>	Propanoic acid, 2-methyl-, anhydr...	75.2	97-72-3	C8H14O3
25.2403	<input checked="" type="checkbox"/>	2,2-Dimethyl-propyl 2,2-dimethyl-p...	54.1	78607-80-4	C10H20O3S2
25.7613	<input checked="" type="checkbox"/>	2,2-Dimethyl-propyl 2,2-dimethyl-p...	52.6	78607-80-4	C10H20O3S2
26.1256	<input checked="" type="checkbox"/>	Furan, 2-methoxy-	58.1	25414-22-6	C5H6O2
26.2806	<input checked="" type="checkbox"/>	4-Fluorobenzylamine, N,N-diunde...	52.5	1000310-48-8	C29H52FN
26.4086	<input checked="" type="checkbox"/>	1,2-Bis(2-chlorophenyl)-1,2-bis(3-...	72.4	1000137-94-8	C26H18Cl4
26.4422	<input checked="" type="checkbox"/>	trans-Nonachlor	59.0	39765-80-5	C10H5Cl9
26.8768	<input checked="" type="checkbox"/>	Heptane, 3,3,5-trimethyl-	65.4	7154-80-5	C10H22
27.0193	<input checked="" type="checkbox"/>	Sulprofos	69.0	35400-43-2	C12H19O2PS3
27.2829	<input checked="" type="checkbox"/>	Carbophenothion	54.3	786-19-6	C11H16O2O2PS3
27.8981	<input checked="" type="checkbox"/>	Oxalic acid, diisopentyl ester	57.4	1000309-72-7	C12H22O4

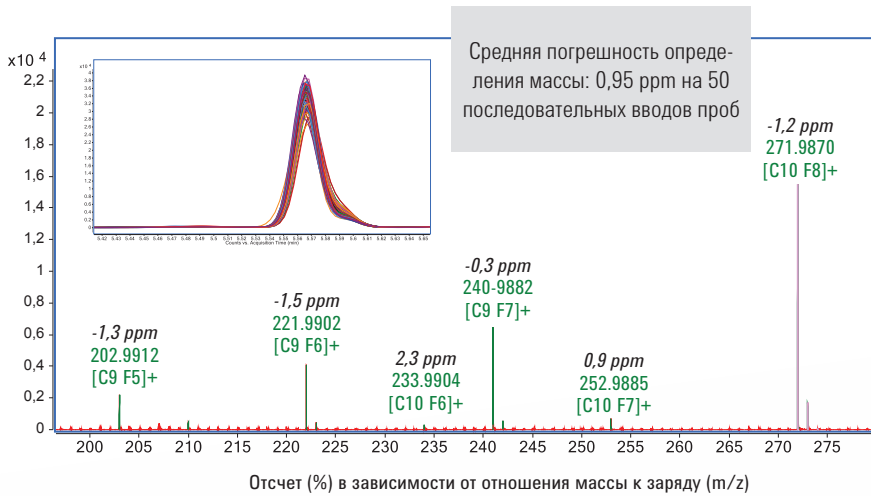
Высокоскоростной сбор данных спектров является еще одним важным преимуществом модели 7200. Скорость в 50 Гц позволяет эффективно определять значительное количество компонентов путем деконволюции с помощью инструмента MassHunter's Unknowns Analysis.

Новый квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС 7200В

Максимальное расширение аналитических возможностей

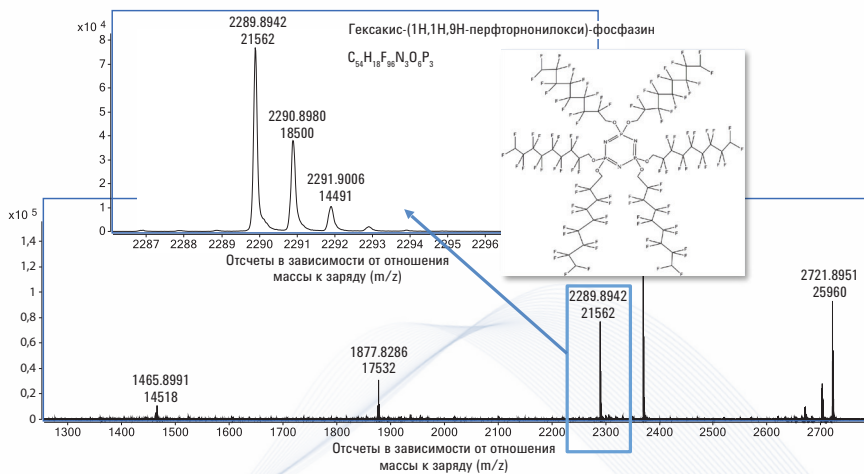
Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200В предоставляет новые возможности и усовершенствованные рабочие характеристики, в том числе повышенные стандарты точности массы (менее 3 ppm) и расширенный диапазон масс, которые особенно ценны в сочетании с использованием устройств ввода твердых образцов (TSP и DIP).

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent лучше всего подходит для решения самых сложных аналитических задач.



Превосходная и стабильная точность определения массы

В данном эксперименте октафторнафталин вводили последовательно (50 раз) в течение 5 часов. Наложение пиков (вставка) подтверждает стабильность квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС 7200В, а масс-спектр (внизу) демонстрирует превосходную точность определения массы. Средняя погрешность определения массы для 50 вводов пробы составила 0,95 ppm.



Расширенный диапазон масс

Анализ гексакис-(1H,1H,9H-перфторноилокси)-фосфазина с пиками, которые находятся за пределами m/z 2722. Верхнее значение демонстрирует соотношение массы к заряду (m/z), а нижнее — разрешение по массе.

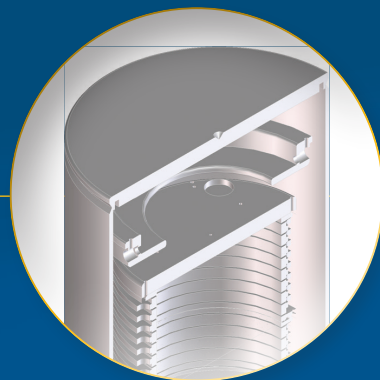
Выделенный пик m/z 2290, демонстрирующий пики изотопов, показан крупным планом во вставке.

Подробнее о последних усовершенствованиях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

ПРОВЕРЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СОЧЕТАНИИ С НОВЫМИ УНИКАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ

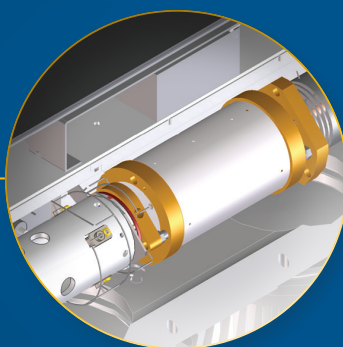
ДВУХСТУПЕНЧАТОЕ ИОННОЕ ЗЕРКАЛО

обеспечивает временную фокусировку второго порядка для высокого разрешения по массе.



ГЕКСАПОЛЬНАЯ ЯЧЕЙКА СОУДАРЕНИЙ

ускоряет ионы, позволяя быстрее создавать высококачественные спектры МС-МС без перекрестных помех.

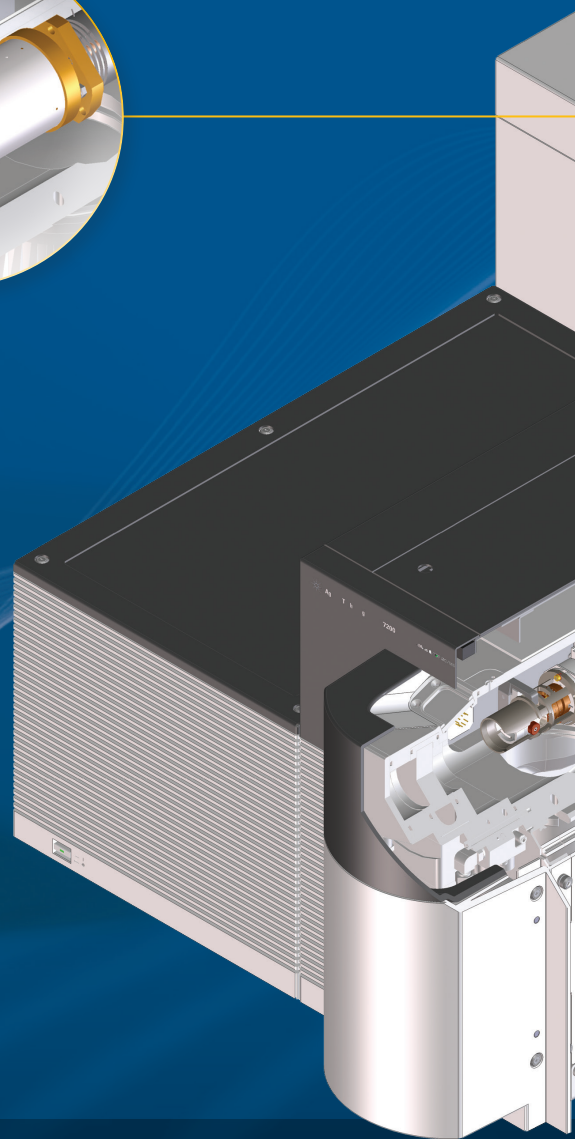
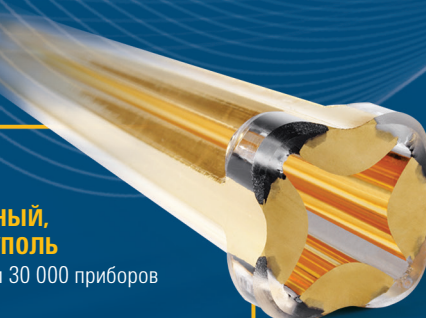


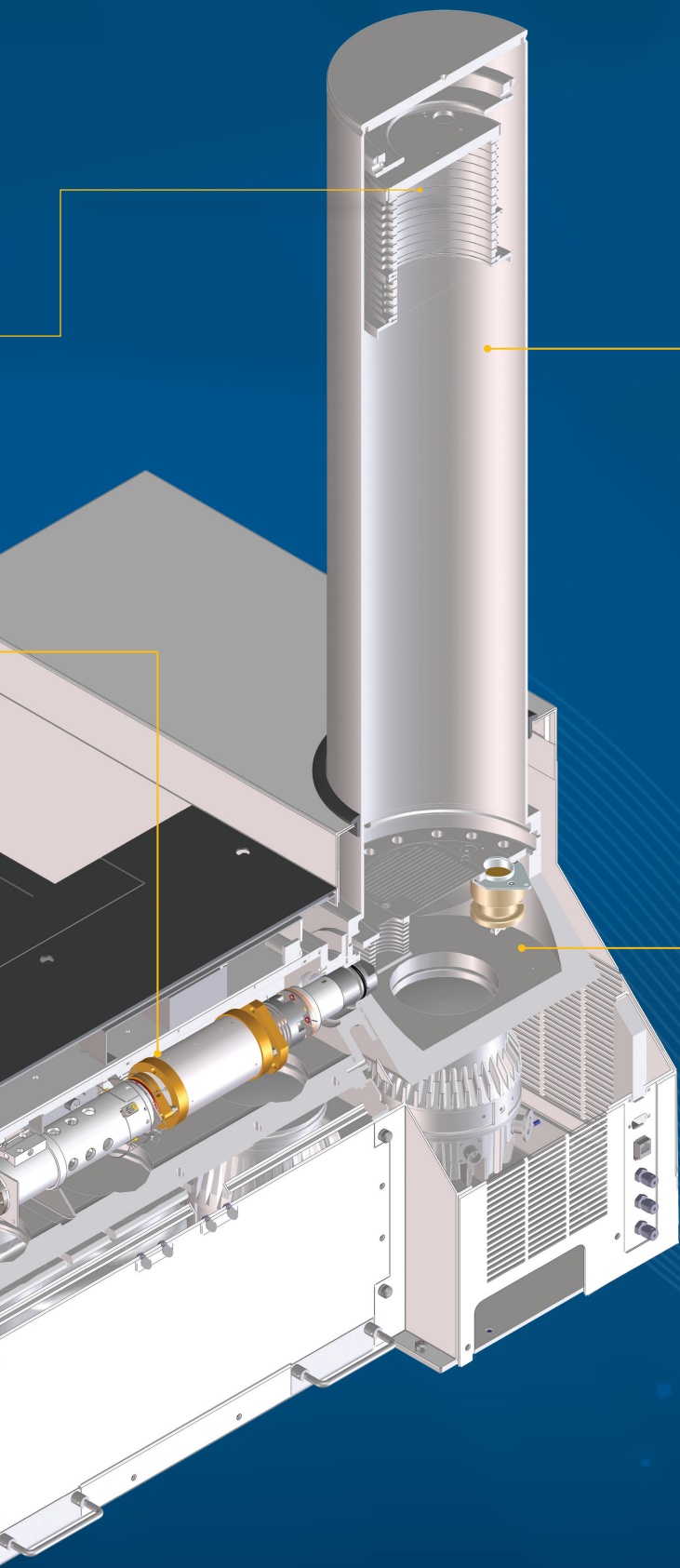
РАБОТАЮЩИЕ С ЧАСТОТОЙ 4 ГГц ЭЛЕКТРОННЫЕ АЦП

позволяют получать высокую скорость сбора данных (32 Гбит/с), обеспечивающую высокое разрешение, точность определения массы и чувствительность.

ГОРЯЧИЙ, МОНОЛИТНЫЙ, КВАРЦЕВЫЙ КВАДРУПОЛЬ

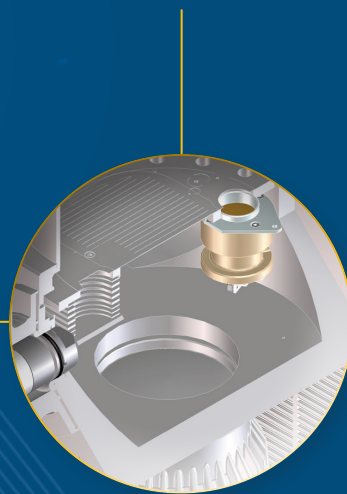
используется в более чем 30 000 приборов ГХ-МС от Agilent.





ПАТЕНТОВАННАЯ ИНВАРОВАЯ ПРОЛЕТНАЯ ТРУБКА,
герметизированная в оболочке с вакуумной изоляцией,
поддерживает постоянную точность определения массы
благодаря устранению температурного градиента.

ФЭУ С МИКРОКАНАЛЬНОЙ ПЛАСТИНОЙ
обеспечивает чувствительность обнаружения вплоть до
отдельного иона, великолепное временное разрешение
и широкий линейный диапазон.



ТРИ ТУРБОМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАСОСОВ,
включающие два насоса с делением потока и один
одноступенчатый насос для источника и квадрупольного
анализатора, создают оптимальный вакуум в каждой
функциональной части анализатора.

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте
agilent.com/chem/GCMS_QTOF

НАДЕЖНЫЙ СКРИНИНГ И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ТОКСИКАНТОВ В СЛОЖНЫХ МАТРИЦАХ

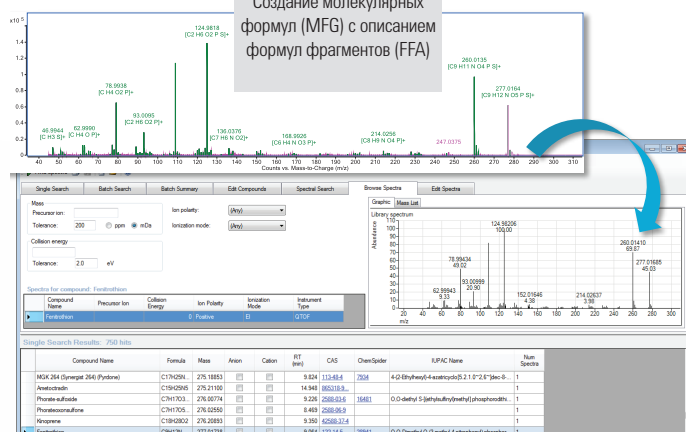
Обычные методы скрининга пестицидов для обнаружения нескольких целевых соединений основаны на трехкратной технологии. Однако возможности этих методов ограничены набором целевых соединений и не позволяют проводить ретроспективный анализ собранных данных.

Использование квадрупольно-времяпролетной (Q-TOF) технологии для скрининга пестицидов позволяет:

- выполнять скрининг практически неограниченного числа пестицидов в различных матрицах;
- возвращаться к данным в любой момент, без повторного анализа пробы, для исследования проб на предмет как целевых, так и нецелевых соединений;
- определять в пробах неизвестные соединения или появляющиеся токсиканты.

Более того, можно одновременно проводить надежную идентификацию пестицидов и выполнять скрининг практически неограниченного числа соединений благодаря сочетанию **библиотеки точных масс пестицидов для квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent и ПО MassHunter Qualitative Analysis.**

Создание молекулярных формул (MFG) с описанием формул фрагментов (FFA)



Программные средства, такие как создание молекулярных формул с описанием формул фрагментов, создающие спектры EI с точным определением массы и описанием формул, позволяют легко создавать библиотеки точных масс-спектров для квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС. Фрагменты, образованные после ионизации EI, автоматически преобразовываются в теоретические массы, и скорректированные спектры помещаются в персональную библиотеку точных масс (PCDL).

Таблица результатов по соединениям

Comp	Name	Label	Formula	m/z	Mass [Tgt]	Mass [Exp]	Diff [Tgt - Exp]	Score [Tgt]	RT	Flags
53	Fenbutathion	Comp 53 Fenbutathion	C10H18N2S	211.1378	211.1378	211.1378	-0.0000	96.84	9.94	Qualified
54	Oxadiazol	Comp 54 Oxadiazol	C14H18N2O4	276.1297	276.1297	276.1297	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
55	Hexaconazole	Comp 55 Hexaconazole	C18H20N4	276.1100	276.1100	276.1100	-0.0000	78.68	14.94	Qualified
57	Dodomerol	Comp 57 Dodomerol	C18H20N4O	281.2172	281.2172	281.2172	-0.0000	96.25	14.94	Qualified
58	Prothioconazole	Comp 58 Prothioconazole	C17H16N4S	276.1074	276.1074	276.1074	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
59	Prothioconazole	Comp 59 Prothioconazole	C17H16N4S	276.1056	276.1056	276.1056	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
60	Fenbutathion	Comp 60 Fenbutathion	C10H18N2S	211.1378	211.1378	211.1378	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
61	Hexaconazole	Comp 61 Hexaconazole	C18H20N4	276.1100	276.1100	276.1100	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
62	Hexaconazole	Comp 62 Hexaconazole	C18H20N4	276.1056	276.1056	276.1056	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
63	Prothioconazole	Comp 63 Prothioconazole	C17H16N4S	276.1074	276.1074	276.1074	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
64	Prothioconazole	Comp 64 Prothioconazole	C17H16N4S	276.1056	276.1056	276.1056	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
65	Cyproconazole	Comp 65 Cyproconazole	C19H20N4O	291.1138	291.1138	291.1138	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
66	Chlorobromaz	Comp 66 Chlorobromaz	C8H10BrClO2	261.9642	261.9642	261.9642	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
68	Etirimfos	Comp 68 Etirimfos	C10H18N2O4	276.1297	276.1297	276.1297	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
70	Triadimenol	Comp 70 Triadimenol	C14H18ClN2O2	283.0814	283.0814	283.0814	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
71	Prothioconazole	Comp 71 Prothioconazole	C17H16N4S	276.1074	276.1074	276.1074	-0.0000	14.23	14.94	Qualified
72	Prothioconazole	Comp 72 Prothioconazole	C17H16N4S	276.1056	276.1056	276.1056	-0.0000	14.23	14.94	Qualified

Наложение хроматограмм EIS для ионов соединения

Результаты совпадения моноизотопного состава

Результаты полного спектра: исходные и очищенные спектры

Редактор метода All Ions

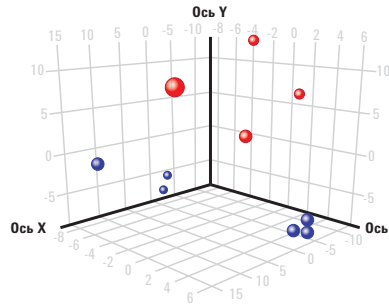
График создания

Упрощение скрининга целевых и неизвестных пестицидов благодаря ПО All Ions, которое позволяет настраивать метод в соответствии с конкретными задачами и требованиями. Также с помощью Compound Details View (Представление сведений о соединениях) можно быстро просмотреть результаты.

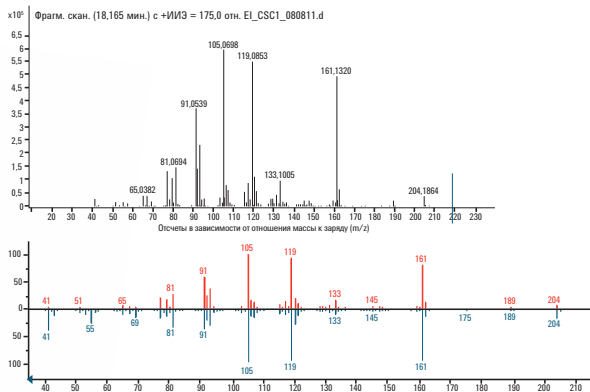
ПОСТРОЕНИЕ ПРОГНОСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРИ ОЦЕНКЕ ОЛИВКОВОГО МАСЛА ХОЛОДНОГО ОТЖИМА

При помощи программного обеспечения Mass Profile Professional (MPP), используя статистические приемы, можно провести сенсорный анализ для оценки качества анализируемого объекта достаточно сложного состава. Для предсказания результата проведения такого анализа в модели использовались пять специфических соединений.

Для подтверждения молекулярных ионов соединений, используемых в модели, в дополнение к спектральным данным ионизации в режиме EI были необходимы точные масс-спектры, полученные в режиме ионизации CSI.



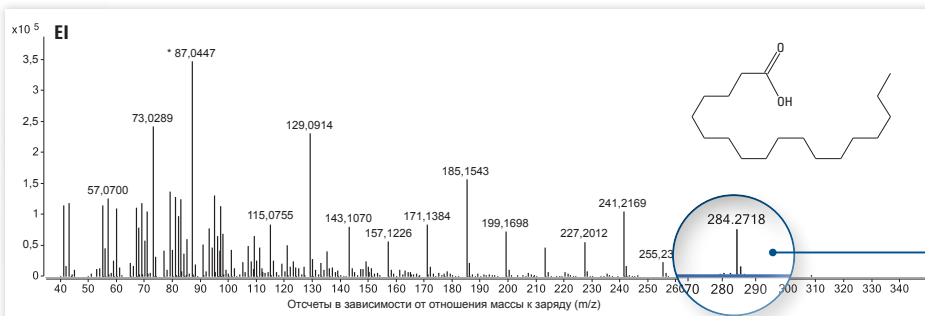
Анализ главных компонент (АГК) в MPP отображает кластеры данных. Синие пробы прошли сенсорный тест, в то время как красные — нет.



Identifier	Grade	Training	Predicted(Class Pre...	Confidence
PAC1-EI-1: Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
ESC2-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
ESC1-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
SAC1-EI-1: Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
RFC2-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
RSA2-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
CSC1-EI-1: Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
RSA1-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
EFC1-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
FSW2-EI-1: Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 создает спектры, которые можно найти в доступных коммерческих библиотеках спектров EI номинальных масс.

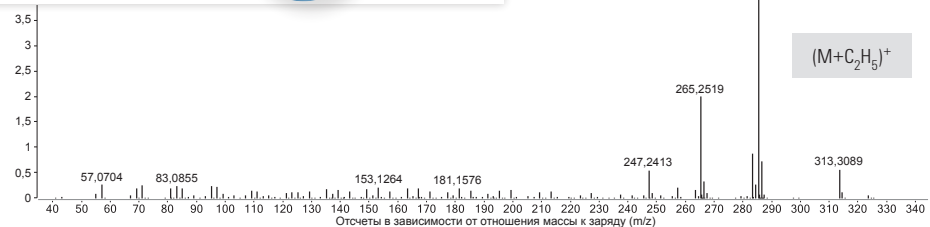
Прогностическая модель MPP точно предсказала результаты прохождения теста для всех проб. Не используемые для построения прогностической модели пробы указаны со значением обучающей переменной, обозначенным как «None».



Полученные в режиме CI с образованием положительных ионов спектральные данные обеспечивают дополнительную точную информацию о массах молекулярных ионов. Аддукт-ионы, образующиеся в результате взаимодействия аналита с газом-реагентом, можно легко обнаруживать, дополнительно облегчая подтверждение молекулярного иона.

Источник:

Характеризация оливкового масла с использованием квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent и программного обеспечения Mass Profiler Professional: № публикации 5991-0106EN



Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

АНАЛИЗ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИЗМЕНЕНИЙ КЛЕТОЧНОГО МЕТАБОЛИЗМА

Метаболомика является мощным инструментом для понимания метаболических изменений. При комплексных исследованиях в области метабомики важна чувствительность во всем спектре и точность определения массы квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС, а также его возможности МС-МС для уточнения структуры неизвестных метаболитов. Расширенный динамический диапазон квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200 позволяет точно и одновременно определять количество широкого спектра метаболитов, присутствующих в клетке.

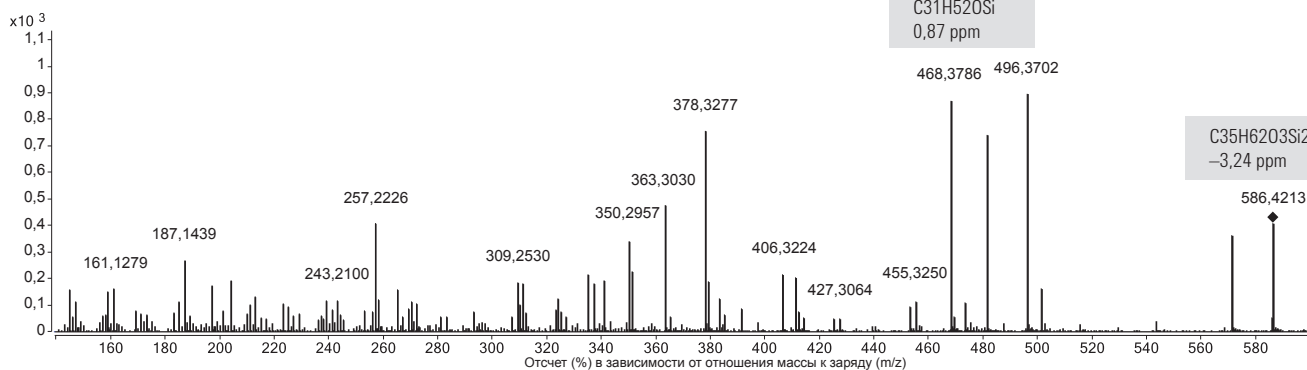
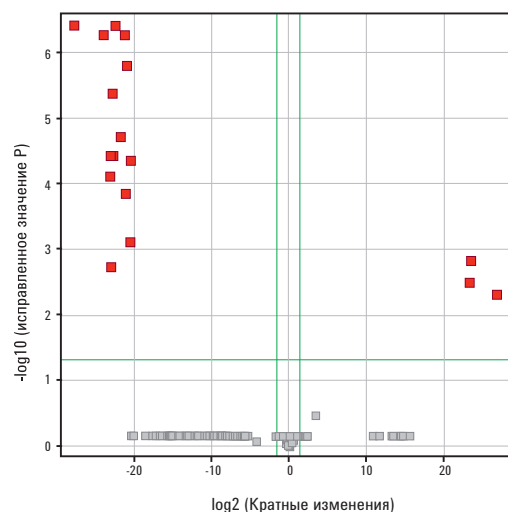
В одном простом эксперименте квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 обеспечил точные данные масс и высокую чувствительность в режиме полного сканирования, а также динамический диапазон, необходимый для выявления и количественной оценки всех интересующих промежуточных путей, и однозначно выявил этап происходящей в обработанной пробе биохимической реакции.

Пакет Mass Profiler Professional (MPP) использовался для статистической оценки данных. В анализ были включены фильтрация данных, коррекция базовой линии и проверка значимости. Программные инструменты визуализации также сыграли важную роль в интерпретации данных.

Метаболиты в обработанной пробе существенно изменились	Кратные изменения в обработанной пробе
Сквален	2,5 (снижается)
Ланостерин	1,7 (возрастает)
4,4-диметил-5 α -холесто-8,24-диен-3 β -ол	1,4 (возрастает)
4α-карбокси-4β-метил-5α-холесто-8,24-диен-3β-ол	360,8 (возрастает)
Зимостерин	2,9 (снижается)
Эргостерин	1,3 (снижается)

↓ Путь биосинтеза эргостерина

Анализ значимости, выполненный в пакете MPP, облегчает идентификацию метаболитов, которые изменяют свои уровни в различных условиях.



МС-МС с точным спектром масс дочерних ионов облегчает уточнение структуры неизвестных соединений.

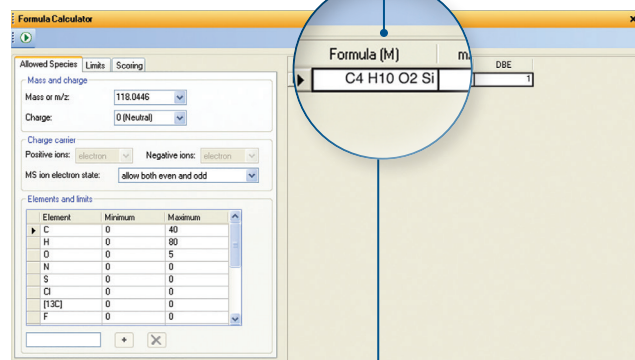
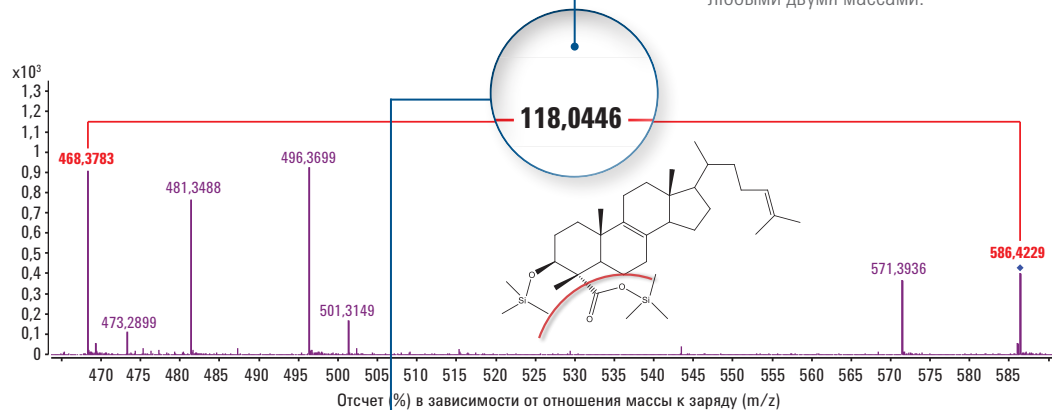
Подтверждение предполагаемой структуры метаболитов на основании точного спектра масс дочерних ионов

Исследования по метаболомике часто выявляют значительное число нецелевых и неизвестных метаболитов, которые потенциально могли бы играть критическую роль в биологической интерпретации данных. Таким образом, структура этих важных метаболитов должна быть подтверждена или уточнена.

Сочетание квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200 и ПО MassHunter Workstation является идеальным для такого типа исследований.

Окончательное уточнение структуры:

инструмент MassHunter Qual Workstation's Mass Caliper можно использовать для расчета значения нейтральной частицы между любыми двумя массами.



Программа MassHunter Qual для расчета качественно-количественного состава использует точные данные о массе квадрупольно-времяпролетного анализатора 7200 для определения всех фрагментных ионов (или выбросов нейтральных частиц) из спектра.

Благодарности:

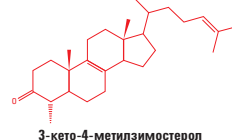
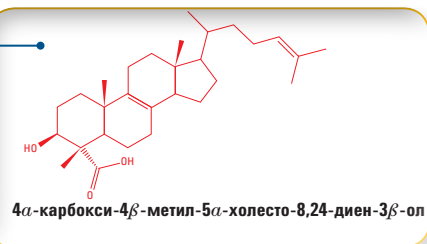
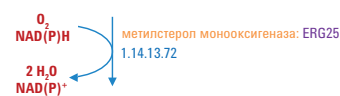
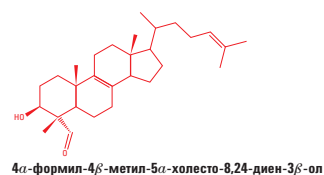
Это приложение основано на работе Манхонг Ву^{*1} (Manhong Wu), Роберта Сэнт-Онге^{*2} (Robert St. Onge), Сундари Суреш^{*2} (Sundari Suresh), Рональда Дэвиса^{*2} (Ronald Davis) и Гари Пельтца (Gary Peltz)^{*1}

^{*1} Отделение анестезии, школа медицины Стенфордского университета

^{*2} Центр биохимии генома Стенфордского университета

Источник:

Определение метаболитического профиля дрожжевых стеролов с применением квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200: № публикации 5991-0571EN



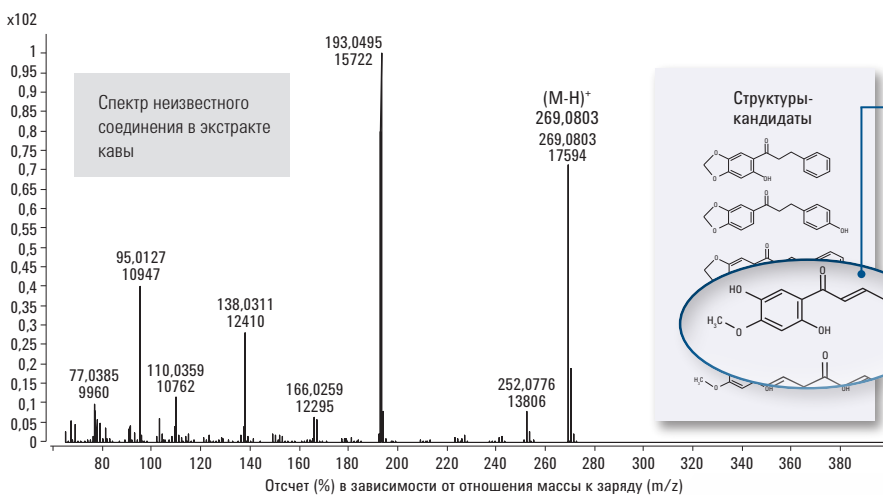
Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

СОЧЕТАНИЕ ТОЧНЫХ ДАННЫХ МАСС И СПЕКТРОВ МС-МС УТОЧНЯЕТ СТРУКТУРУ НЕИЗВЕСТНОГО СОЕДИНЕНИЯ

Растительные экстракты содержат большое количество соединений, которые должны быть определены. Однако библиотеки спектров EI не всегда содержат спектральные данные масс для целевых соединений. В этих случаях данные точных масс-спектров дочерних ионов, полученные

с помощью квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200, могут иметь неоценимое значение для установления связей между фрагментными ионами, что способствует корреляции структуры.

Идентификация неизвестных веществ в экстракте ковы



Из пяти перспективных структур только одна соответствует нейтральным частицам, определенным экспериментами МС-МС на нескольких родительских ионах.

Экспериментальные данные МС-МС

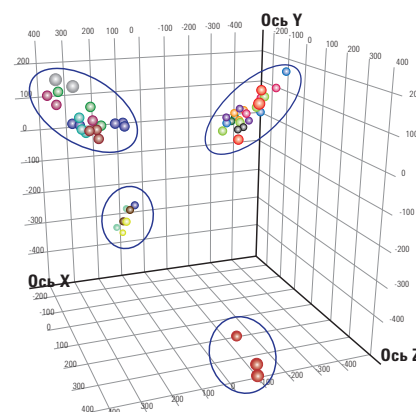
	<i>m/z</i> (экспериментально)	Формула	Погрешность (млн д.)	Индекс
(M-H) ⁺	269,0803	C ₁₆ H ₁₃ O ₄	-1,99	80,7
(M-C ₆ H ₅) ⁺	193,0494	C ₁₀ H ₉ O ₄	-0,18	96,7
(M-CH=CH-C ₆ H ₅) ⁺	167,0334	C ₈ H ₇ O ₄	-2,9	Не прим.
(M-CH ₂ =CH-C ₆ H ₅) ⁺	166,0259	C ₈ H ₆ O ₄	-0,96	Не прим.
-CO	138,0311	C ₇ H ₆ O ₃	-0,33	98,1
-CO	110,0359	C ₆ H ₆ O ₂	-3,01	Не прим.
-CH ₃	95,0127	C ₅ H ₃ O ₂	-0,59	99,5

Точные масс-спектры дочерних ионов помогают устранить любые неопределенности между различными нейтральными частицами, которые имеют одинаковую номинальную массу.

АНАЛИЗ ПРОИСХОЖДЕНИЯ ЗАПРЕЩЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Расследование преступлений в сфере наркоторговли, в том числе торговли героином, часто связано с выявление группы преступников, являющихся посредниками в незаконном обороте наркотиков в пределах какой-либо страны.

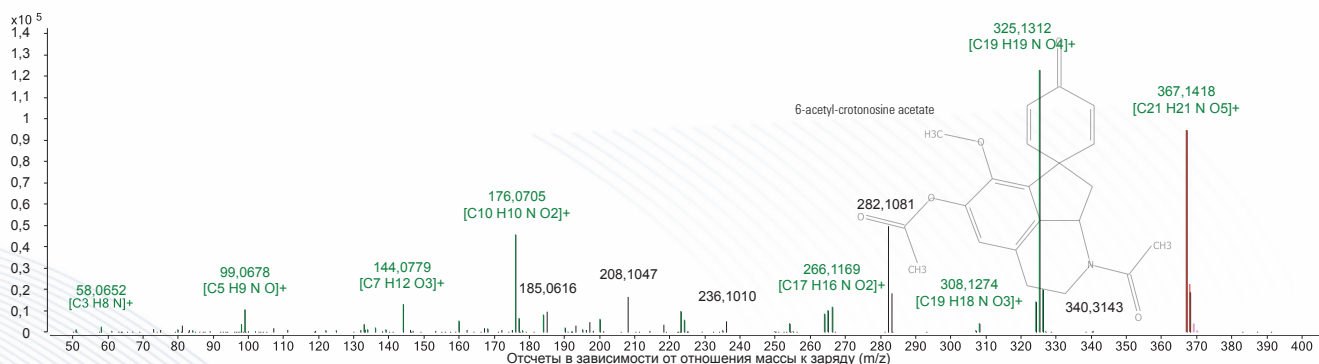
Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 может быть использован для выполнения сравнительного анализа запрещенных препаратов, что позволяет органам наркоконтроля определить общий источник происхождения. Точные данные масс также можно использовать для определения загрязняющих веществ, что облегчает определение происхождения наркотиков.



Инструменты пакета MPP, такие как Principal Component Analysis и Hierarchical Cluster Analysis, дают возможность визуализировать сходные параметры и формировать кластеры из отдельных групп.

	[1] (Прогностический показатель)	[2] (Прогностический показатель)	Точность
(Верно) [1]	11	1	91,667
(Верно) [2]	0	12	100,000
Общая точность			95,833

Классовые прогностические модели можно использовать для классификации проб неизвестных соединений.



Инструменты для описания спектра в программе MassHunter Qual позволяют быстро подтвердить предварительно идентифицированные соединения с применением точных данных масс.

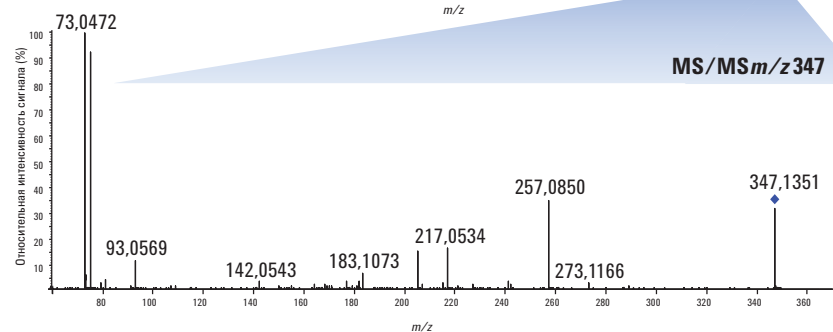
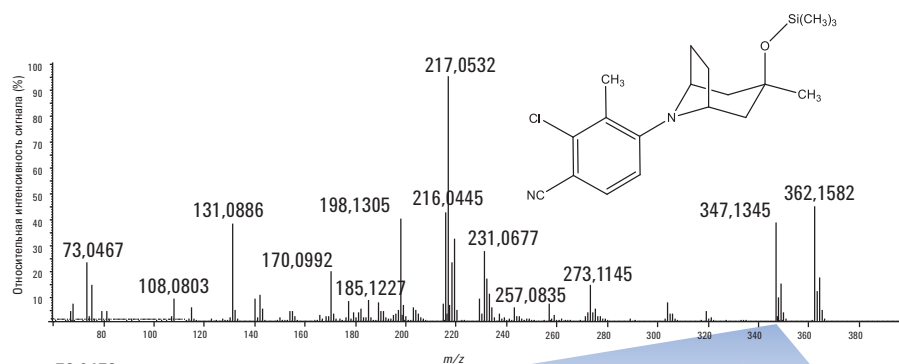
Источник:

Характеризация и классификация героина, содержащегося в изъятых партиях, с применением квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200: № публикации 5991-4369EN

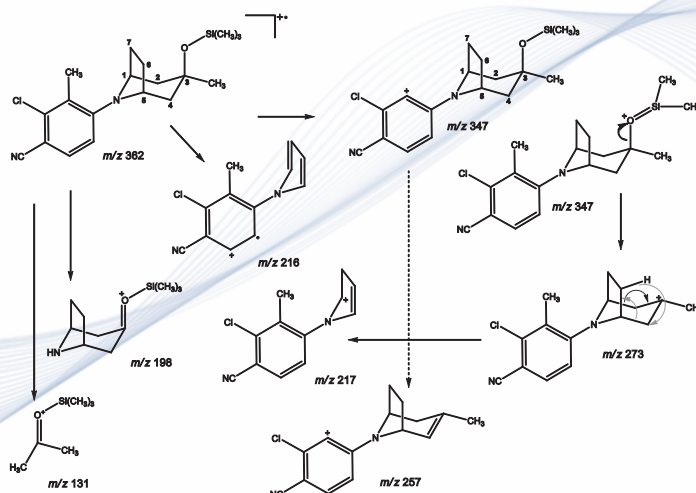
Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

ЗАЩИТА ЗДОРОВЬЯ СПОРТСМЕНОВ И ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДОСТОВЕРНОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ СОРЕВНОВАНИЙ

Для комплексного допинг-контроля необходимы как целевой, так и нецелевой подходы, включающие детальные исследования путей биотрансформации препаратов. Препараты, похожие по структуре (по метаболизму и строению), можно определить с помощью уточнения структуры характерных фрагментационных ионов.



Спектры дочерних ионов точной массы имеют исключительно важное значение при уточнении путей разложения препаратов в допинг-тестах.



Источник:

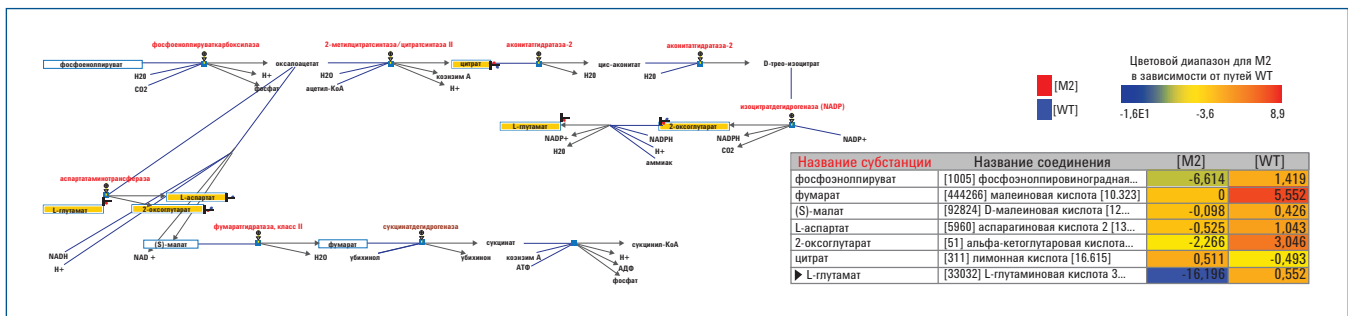
Тевис с соавт., Rapid Commun. Mass Spectrum. 2013 г., 27: 1173

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИЗМЕНЕНИЙ МЕТАБОЛИЗМА БАКТЕРИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОИЗВОДСТВЕ БИОТОПЛИВА

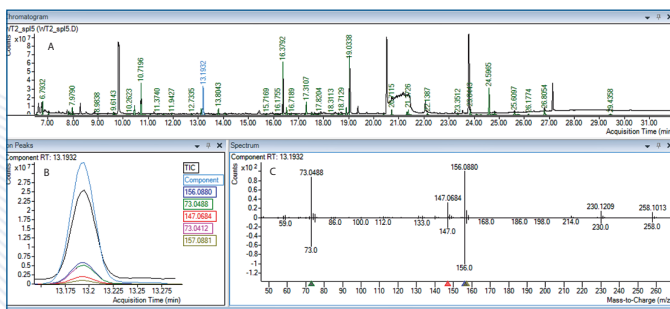
Проблема выброса CO₂, а также ограниченная доступность природного топлива, подтолкнули к созданию микроорганизмов, вырабатывающих альтернативные вещества. Фотосинтетические микроорганизмы, поглощающие CO₂, такие как цианобактерии, благодаря их способности использовать парниковые газы в качестве источника углерода и свет в качестве источника энергии, открывают новые горизонты в области получения топлива.

В оценке этих микроорганизмов ключевую роль играют метаболомные исследования. Они позволяют интерпретировать положительные влияние конкретных мутаций и определить потенциальные затруднения в биохимических путях, которые могут замедлить создание организмов — продуцентов биотоплива.

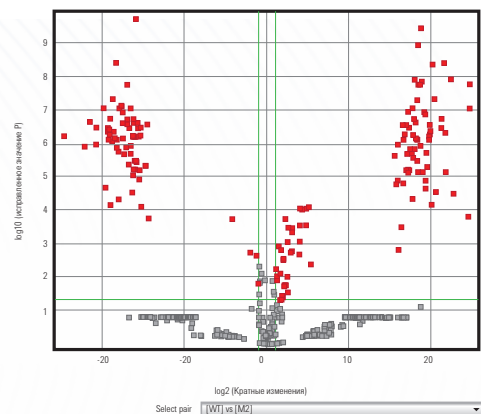
Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 хорошо подходит для анализа изменений в профилях метаболитов с целью дальнейшего подтверждения происхождения метаболитов с использованием точных масс.



Анализ путей MPP: картирование метаболомных различий между биохимическими путями.



Инструмент для анализа неизвестных соединений Unknowns Analysis может быть использован для быстрой деконволюции точных масс и поиска по библиотеке.



Пакет MPP предоставляет мощные инструменты для статистического анализа и визуализации, позволяющие эффективно идентифицировать метаболомные различия.

Источник:

Метаболомика поглощающих углерод мутировавших цианобактерий с помощью квадрупольно-времяпролетного анализатора для ГХ: № публикации 5991-3476EN

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

СТАБИЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РУТИННОГО АНАЛИЗА ОТ ЛУЧШИХ НА РЫНКЕ СИСТЕМ ДЛЯ ГХ-МС

Agilent предлагает широкий ассортимент систем ГХ-МС для повышения эффективности и производительности лаборатории.

- Высокочувствительные детекторы для проб любого типа
- Гибкие конфигурации, которые подходят для сложных измерений вне лаборатории и соответствуют межотраслевым требованиям
- Расширенные аналитические возможности
- Увеличенные пропускная способность и время непрерывной работы
- Различные варианты насосов — диффузионные насосы, стандартные турбонасосы и турбонасосы повышенной эффективности.
- Инертный источник ионизации для анализа следовых количеств веществ



ГХ-МСД Agilent 5977A

- Повышенная чувствительность благодаря новому источнику ионизации и протоколам настройки
- Новые интегрированные функции аппаратного и программного обеспечения упрощают рабочий процесс
- Доступна бюджетная система ГХ-МСД Agilent 5977E
- Портативный ГХ-МСД 5975T LTM обеспечивает неизменно высокую производительность как в лаборатории, так и за ее пределами.



Трехквадрупольный ГХ-МС Agilent 7000

- Чувствительность на уровне фемтограммов для рутинного анализа, а также превосходная селективность
- Скорость сбора данных до 500 MRM-переходов в секунду



Трехквадрупольный ГХ-МС Agilent 7010

- Сверхэффективная ионизация электронов
- Ускоренный анализ со сниженными пределами обнаружения

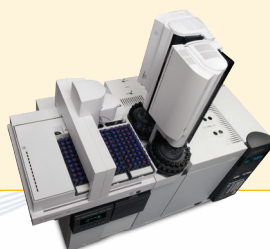


Анализаторы ГХ-МС Agilent

- Готовые к эксплуатации пакеты рабочих решений для более чем 60 основных приложений
- Предварительно настроены и испытаны на заводе-изготовителе с применением специализированных методов и тестовой смеси для проверки прибора

Широчайший ассортимент устройств для ввода пробы

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent отвечает всем требованиям по вводу образцов с помощью широкого набора устройств ввода жидких проб, равновесного пара, газообразных и даже твердых веществ.



Автоматический дозатор жидких образцов Agilent 7693A



Автосамплер PAL



Автоматический дозатор жидких образцов Agilent 7693



Устройство ввода твердых образцов

СТАБИЛЬНОСТЬ МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ ПИКОВ ПЛЮС МАКСИМАЛЬНАЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ ЛАБОРАТОРИИ

Мировой лидер в области хроматографии, компания Agilent обладает уникальной возможностью снабдить вас инновационными продуктами для подготовки проб, колонками для ГХ и инертными компонентами тракта, чтобы помочь вам решать самые сложные аналитические задачи.

Достижение точных и воспроизводимых результатов с меньшим количеством повторных проб

Только Agilent предлагает полную линейку продуктов для подготовки проб в соответствии с вашими задачами и приборами.

- **Полимерные сорбенты Agilent Bond Elut SPE** обеспечивают самые чистые экстракты и избирательно удаляют мешающие компоненты из сложных матриц. Самый широкий выбор на рынке — более 40 видов сорбентов более чем в 30 видах фасовки.
- **Лучшие на рынке наборы Agilent QuEChERS** — это экономически выгодный способ сделать подготовку проб быстрее, проще и надежнее.

Подробнее: agilent.com/chem/sampleprep

Надежная и стабильная инертность от устройства для ввода пробы к детектору

Инертные компоненты тракта Agilent обеспечивают инертность всех поверхностей, соприкасающихся с пробами, что позволяет снизить адсорбцию аналита и выполнять обнаружение на уровне миллиардных (ppb) и триллионных (ppt) долей в соответствии с требованиями современного анализа.

- **Колонки для ГХ Agilent J&W Ultra Inert** тестируются с применением самой сложной в отрасли тестовой смеси для обеспечения стабильной инертности и исключительно низкого уровня уноса неподвижной фазы.
- **Лайнеры Ultra Inert** обеспечивают надежность, воспроизводимость и инертность, как при использовании стекловолокна, так и без него.
- **Варианты испарителя с делением и без деления потока** обеспечивают дополнительную инертность пути прохождения пробы.
- **Позолоченные уплотнения Ultra Inert** дополнительно пассивированы *поверх* позолоты для еще большей инертности и лучшей герметичности.
- **Гибкие металлические обжимные ферулы UltiMetal Plus** совместимы с фитингами для CFT, обеспечивают высокую степень герметизации, для которой требуется меньшее количество оборотов при уплотнении.
- **Системы фильтрации для очистки газов** обеспечивают высочайшую чистоту газа, уменьшая загрязнение колонок и потерю чувствительности.
- **Детекторы для ГХ** обеспечивают высокий уровень селективности и чувствительности, требуемый для современных аналитических задач.

Подробнее: agilent.com/chem/inert



Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте agilent.com/chem/GCMS_QTOF

КВАДРУПОЛЬНО-ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ ГХ-МС AGILENT 7200

НАДЕЖНОЕ СТРУКТУРНОЕ ПОД- ТВЕРЖДЕНИЕ ЦЕЛЕВЫХ, НЕЦЕЛЕВЫХ И НЕИЗВЕСТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ



Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 представляет собой первый в мире квадрупольно-времяпролетный масс-спектрометр, специально предназначенный для ГХ-МС. Он сочетает проверенные технологии ГХ Agilent 7890В, трехквадрупольного ГХ-МС 7000В и квадрупольно-времяпролетного ВЭЖХ-МС 6500 с высоким разрешением. Преимущества:

- **Высокоточное определение данных масс:** Усилитель с двойным коэффициентом передачи и двойным аналогово-цифровым обнаружением записывает несколько событий в широких массовых и динамических диапазонах.
- **Скорость сбора данных 32 Гбит/с:** Работая с частотой 4 ГГц электронные АЦП улучшают разрешение, точность определения массы и чувствительность для проб с небольшим относительным содержанием.
- **Постоянная точность определения массы:** Наша патентованная пролетная трубка INVAR, помещенная в герметичную вакуумированную оболочку, стабилизирует калибровку массы в зависимости от температурных изменений.
- **Быстрое получение высококачественных спектров МС-МС:** Ускорение ионов происходит в уникальной гексапольной ячейке соударений.
- **Простое рутинное техническое обслуживание:** Замена съемного источника ионизации, линз и катода без сброса вакуума в массовом анализаторе.

Дополнительные сведения

Дополнительная информация:
agilent.com/chem/GCMS_QTOF

Россия
8 800 500 9227; +7 495 797 3900
agilentRU@agilent.com

Европа
info_agilent@agilent.com

Азиатско-Тихоокеанский регион
inquiry_lsca@agilent.com

В других странах обратитесь
к местному представителю или
местному уполномоченному
дистрибьютору Agilent:
agilent.com/chem/contactus



Информация может быть изменена без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2014.
Напечатано в США 20 августа 2014 г.
5990-8194RU

Услуги компании Agilent позволят вам уделять больше внимания своей работе



Независимо от того, возникает ли необходимость в техническом сопровождении одного прибора или оборудования различных поставщиков в нескольких лабораториях, программы обслуживания Agilent Advantage помогут быстро устранить любые проблемы, добиться бесперебойной работы и оптимизировать использование ресурсов. Ниже перечислены некоторые возможности поддержки и технического обслуживания.

- Профилактическое обслуживание на объекте заказчика, обеспечивающее стабильную работу оборудования
- Устранение неполадок и ремонт приборов Agilent и оборудования других производителей
- Удаленная диагностика и мониторинг для повышения производительности
- Услуги по обеспечению наиболее полного соответствия нормативным требованиям отрасли и обучающие курсы
- Привлечение экспертов для консультаций и обучения



Гарантия работоспособности Agilent

Компания Agilent гарантирует, что с момента приобретения прибор сохранит работоспособность в течение 10 лет. В противном случае компания дает скидку на приобретение более новой модели прибора в размере остаточной стоимости имеющегося.



Agilent Technologies