Sistema LC/MS Q-TOF Agilent 6545

LAS RESPUESTAS QUE NECESITA: MEJORES, MÁS RÁPIDAS Y MÁS SENCILLAS

The Measure of Confidence

Agilent Technologies

RESPUESTAS MÁS RÁPIDAS MEJORA DE LAS MEDIDAS OBTENCIÓN MÁS SENCILLA DE RESULTADOS DE ALTAS PRESTACIONES

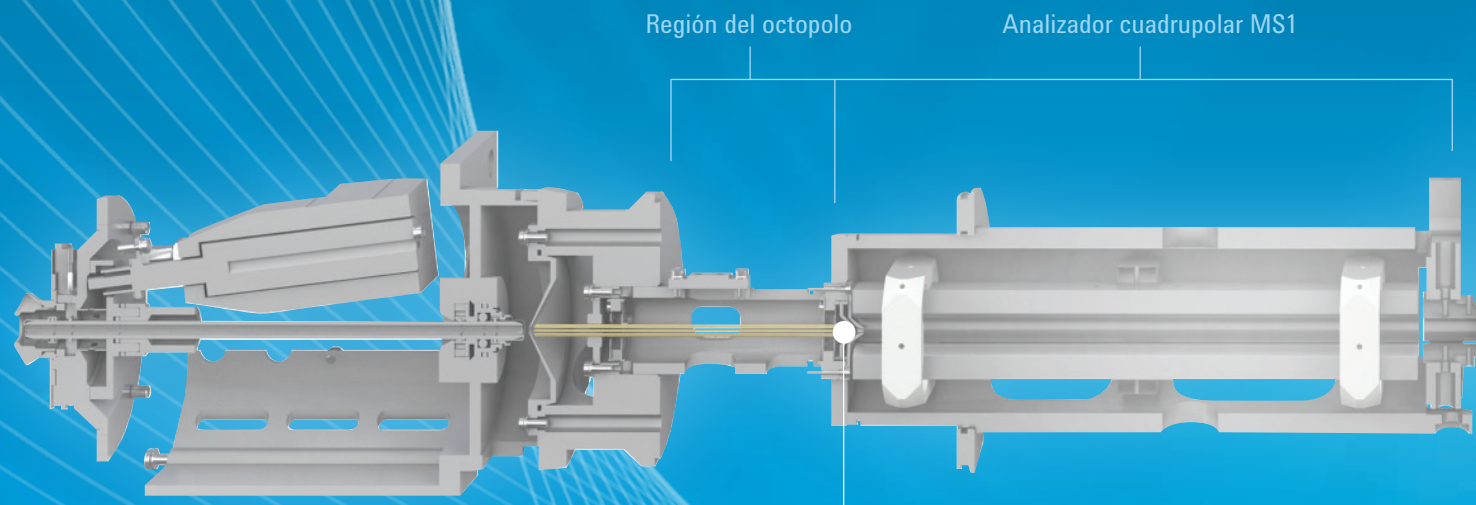
El nuevo sistema Q-TOF 6545 incorpora innovaciones de hardware y software que incrementan la calidad, lo que mejora notablemente la solidez del instrumento y las prestaciones globales.

El resultado: un nuevo sistema de referencia en cuanto a robustez y alta productividad y sensibilidad.

Entre las novedades del paquete de software MassHunter se incluyen herramientas avanzadas de extracción y procesamiento de datos que permiten extraer de manera rápida y precisa toda la información disponible sobre los compuestos presentes en las muestras (es decir, no solo conocer picos y puntos de datos sino obtener respuestas). El nuevo sistema Q-TOF 6545 está diseñado para conseguir que los análisis mediante espectrometría de masas (MS) resulten más rápidos, sencillos y productivos, independientemente del campo de trabajo: investigación farmacéutica, análisis de seguridad alimentaria, química forense y toxicología, análisis medioambiental, metabolómica o lipidómica.

Desafío	Solución ofrecida por el sistema Q-TOF Agilent 6545
Los compuestos a nivel de trazas que busca se cuantifican de forma imprecisa o no se detectan.	El nuevo modo de sintonización automática por nube de partículas incluye funciones de optimización más potentes que permiten obtener respuestas más fiables y mejorar notablemente la sensibilidad para los compuestos con moléculas de pequeño tamaño. Las bajas tensiones de la óptica de iones contribuyen a preservar los compuestos más sensibles.
Los análisis de muestras complejas requieren destreza e inversión de tiempo.	La sencilla optimización del instrumento permite obtener resultados precisos incluso a usuarios inexpertos; además, las mejoras de las herramientas analíticas incrementan la fiabilidad analítica y la productividad, lo que agiliza la obtención de respuestas.
Necesita realizar más tareas con menos recursos: desarrollo de un mayor número de métodos, gestión de cargas de trabajo mayores, etc.	Excepcional fiabilidad para operaciones de cribado rutinarias con la sensibilidad necesaria para identificar compuestos. Las bases de datos y bibliotecas PCDL de Agilent reducen el tiempo necesario para conseguir respuestas.

SIEMPRE A SU LADO EN EL MOMENTO DE LA VERDAD



Óptica de iones de dos lentes:
su mayor diámetro mejora la robustez.

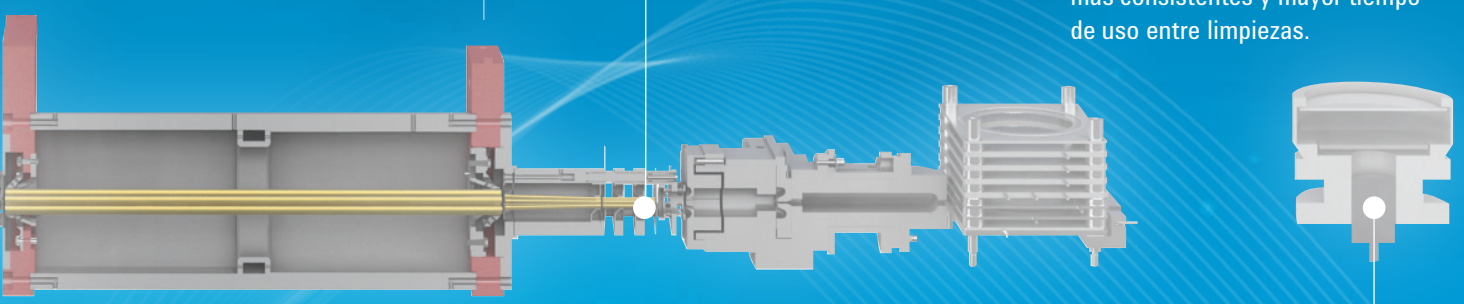
Nuevo diseño de las fuentes de alimentación de alta tensión (HV) y pulsos de alta tensión de Agilent, que mejoran la fiabilidad y la solidez.

Mayor solidez que los instrumentos de la anterior generación

Todas las mejoras que incorpora el sistema Q-TOF Agilent 6545 incrementan la resolución, aumentan la sensibilidad y generan una importante tercera ventaja: una solidez mayor que la de los instrumentos de la anterior generación.

Además de la óptica de alta energía, el sistema Agilent 6545 cuenta con mejoras adicionales en dos aspectos básicos que incrementan sensiblemente la robustez y la fiabilidad:

- Un detector de última generación que ofrece una vida útil mucho más prolongada y, a la vez, proporciona una alta sensibilidad y un amplio rango dinámico.
- Subsistemas electrónicos de última generación que mejoran notablemente la robustez de nuestros sistemas electrónicos de tiempo de vuelo (TOF) de alta velocidad.



Nueva óptica

La óptica de formación de haces de iones y la posición más ancha del separador hacen que la fiabilidad mejore más del doble: resultados más consistentes y mayor tiempo de uso entre limpiezas.

Nuevo detector mejorado de desplazamiento de ganancia que ofrece una vida útil hasta tres veces más duradera, lo que mejora la fiabilidad y reduce el coste de mantenimiento.

Atención máxima al detalle y al desarrollo de tecnologías

Compresión y modelado del haz de iones

La tecnología de compresión y modelado del haz de iones (IBCS) aporta una excelente sensibilidad y, al mismo tiempo, mantiene **la resolución de masas por encima de 45 K y la exactitud de masa por debajo de 1 ppm.** La mejora de los sistemas electrónicos y los algoritmos de software permiten adquirir datos a velocidades enormemente altas (de hasta 50 espectros/segundo).

Tecnología de focalización por gradiente térmico Agilent JetStream

Un pulverizador fabricado mediante micromecanizado de precisión rodea las gotas formadas mediante ionización por electrospray (ESI) con una capa de gas sobrecalentado para desolvatar y concentrar los iones cerca de la entrada del espectrómetro de masas y conseguir así un muestreo más eficaz.

Dispositivo separador automatizado

La mejora continua del diseño de la óptica de iones se traduce en unas **prestaciones sólidas para las aplicaciones cualitativas y cuantitativas combinadas más exigentes.**

Fuentes de alimentación del tubo de vuelo

Cada una de las tres fuentes de alimentación principales que controlan el tubo de vuelo se ha rediseñado para conseguir incrementar sensiblemente **la estabilidad, lo que redunda en beneficio de la exactitud de masa y la resolución de masa.**

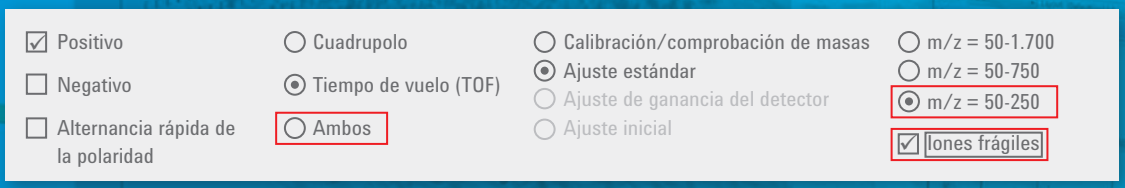
OPTIMIZACIÓN MÁS RÁPIDA: TECNOLOGÍA DE SINTONÍA AUTOMÁTICA CON OPTIMIZACIÓN POR NUBE DE PARTÍCULAS

Cualquier usuario puede obtener unos resultados excepcionales con mayor facilidad que nunca

¿Qué sucedería si sintonizar su instrumento fuera tan sencillo como utilizar la función de enfoque automático de una cámara? A la hora de desarrollar el nuevo sistema Agilent 6545, el equipo de desarrollo escuchó las demandas de los clientes, que deseaban una mayor sencillez de uso y una optimización automatizada. El sistema Q-TOF 6545 revoluciona este proceso gracias a la innovadora tecnología de sintonización automática que incorpora una función de optimización por nube de partículas (PSO).

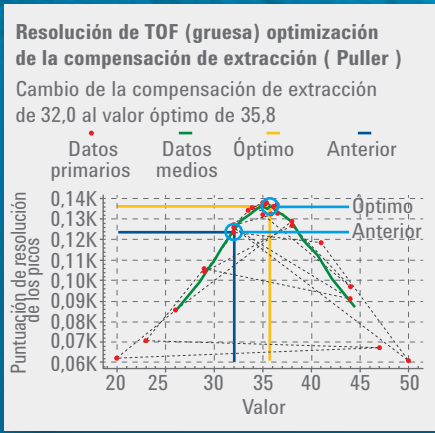
La sintonía automática por nube de partículas aporta las siguientes ventajas:

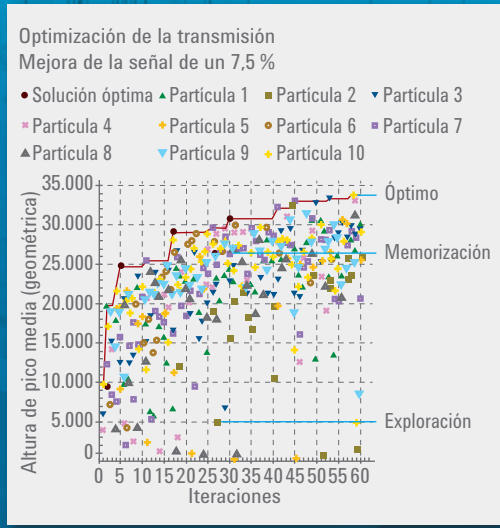
- Velocidad de sintonía automática mucho más rápida: cuatro veces superior a la de los instrumentos Q-TOF de la anterior generación.
- Opciones de optimización para moléculas pequeñas: mejoran automáticamente la sensibilidad y consiguen las mejores prestaciones para las moléculas pequeñas.



Optimización por nube de partículas (PSO)

La función PSO es un algoritmo de optimización multidimensional flexible y robusto que permite tanto **optimizar hasta 21 parámetros al mismo tiempo** (incluso cuando no existe señal inicial) como evitar caer en óptimos relativos. Es capaz de optimizar los elementos tomando como referencia una resolución objetivo, un nivel de fragmentación o una sensibilidad máxima, y todo ello con un sencillo botón de "inicio de sintonía". La nueva función de sintonía automática por nube de partículas simplifica la optimización de parámetros de varios instrumentos y posibilita aumentar la transmisión iónica y la velocidad, y reducir la pérdida de moléculas sensibles.



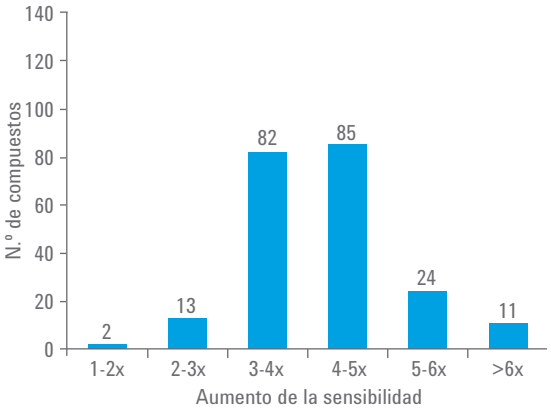


APLICACIÓN DE INTERÉS: ANÁLISIS DE ALIMENTOS Y DE AGUAS

Cribado e identificación de residuos de pesticidas con una velocidad y una sensibilidad inigualables

La exactitud sin igual de las medidas de masas y las relaciones isotópicas que ofrecen los sistemas LC/MS Q-TOF los convierte en la opción ideal para la detección e identificación de pesticidas. La excepcional sensibilidad de estos sistemas posibilita detectar y cuantificar compuestos a nivel de trazas, lo que permite a los laboratorios de análisis de alimentos adaptarse a los cambios de normativas e identificar de forma fiable los nuevos contaminantes emergentes.

El sistema Q-TOF 6545 ofrece una mayor sensibilidad para la detección de pesticidas en té negro con una concentración de 2 ppb´s

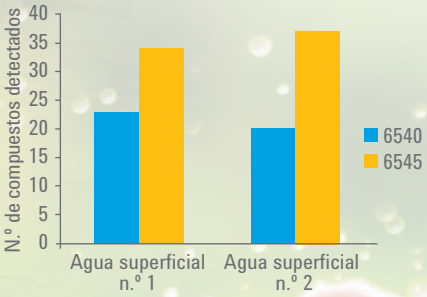


Se observó un aumento de sensibilidad de entre cuatro y cinco veces para más del 80 % de los compuestos detectados.

Contaminantes del agua

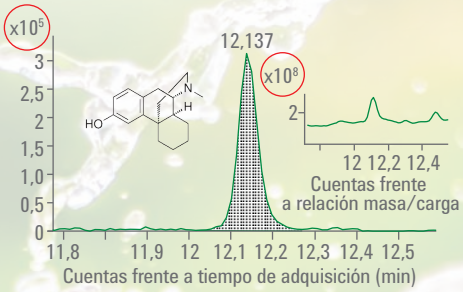
La extraordinaria y uniforme sensibilidad del sistema LC/MS Q-TOF 6545 lo convierte en el instrumento idóneo para detectar y cuantificar compuestos PPCP de interés y desconocidos.

Análisis de aguas superficiales: comparación entre los sistemas Agilent 6545 y 6540



El sistema 6545 detectó más contaminantes en las muestras de agua superficial en comparación con el sistema Q-TOF 6540.

Identificación de dextrorfano en agua superficial contaminada



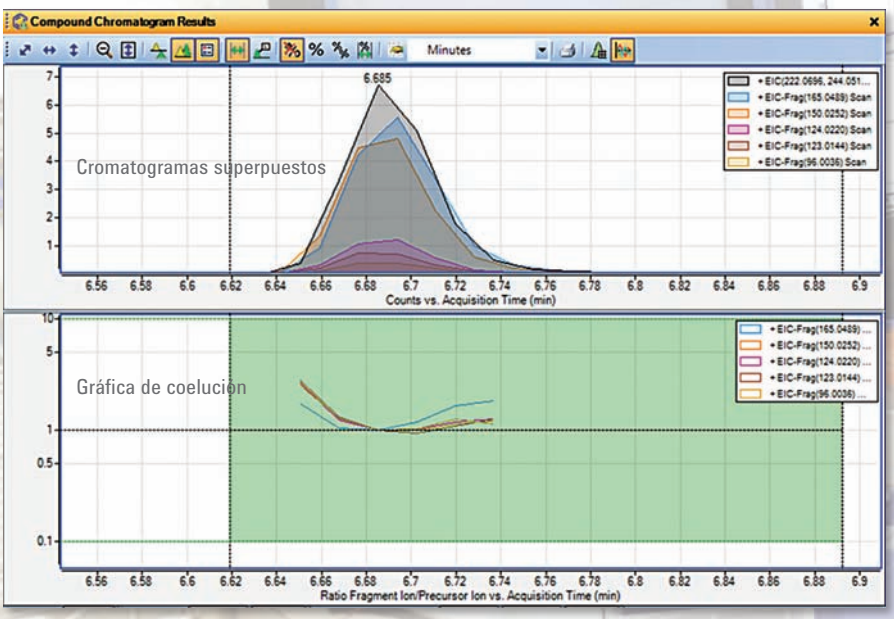
El algoritmo generador de fórmulas permite detectar el dextrorfano en presencia de una concentración de iones coeluyentes 1.000 veces mayor que la del analito.

ALL IONS POR MS/MS

Identificación y cuantificación con mayor confianza

El flujo de trabajo All Ions (todos los iones) por MS/MS es una solución excelente para el cribado en aplicaciones alimentarias, medioambientales, forenses y toxicológicas. Agilent pone a su disposición el flujo de trabajo All Ions por MS/MS, completamente desarrollado, para confirmar y cuantificar compuestos; este flujo de trabajo ofrece las siguientes ventajas:

- Configuración sencilla de métodos de adquisición de datos (incluso para barridos de multi-componentes).
  - Vínculos con los bancos de conocimiento de las bibliotecas PCDL (permite extraer propiedades de fragmentación por MS/MS para todos los compuestos en una pantalla).
  - Índice de coelución exclusivo de los fragmentos de iones de diagnóstico utilizados para verificar las coincidencias.
  - Incorporación de nuevos compuestos de interés a la biblioteca PCDL para ampliar continuamente el alcance del cribado con el tiempo.
  - Siempre se recoge un espectro completo de iones moleculares y sus principales fragmentos, por lo que los datos se pueden volver a analizar de forma retrospectiva al añadir nuevos compuestos de interés.
- Desarrollo rápido de métodos de cuantificación en el que se seleccionan automáticamente dos iones producto de alta calidad para cada compuesto.

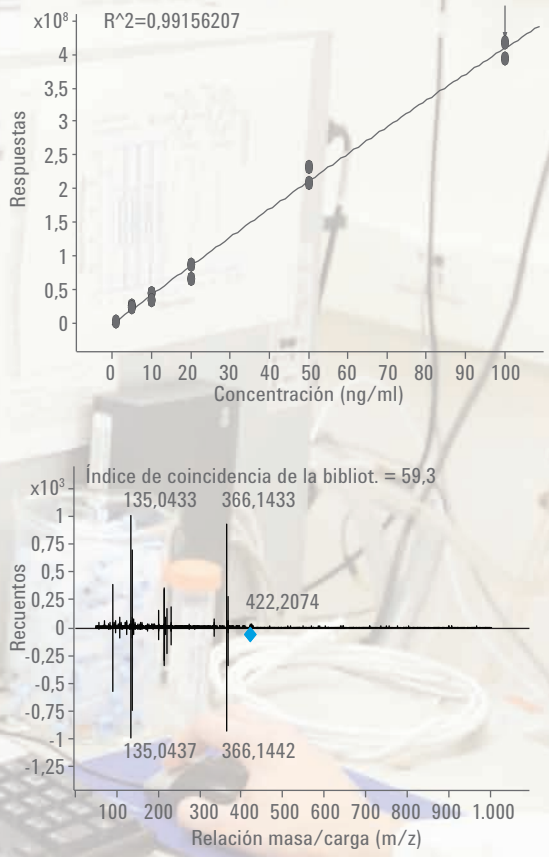


ANÁLISIS MS/MS ESPECÍFICO

Cuantificación, detección e identificación rápidas de compuestos mediante MS/MS dirigida, bases de datos y bibliotecas PCDL

El uso combinado del análisis MS/MS dirigido y la biblioteca PCDL de pesticidas permite cuantificar, identificar y confirmar rápidamente los contaminantes desconocidos de una muestra de té negro. El sistema Q-TOF 6545 da respuesta tanto a los requisitos cuantitativos de las aplicaciones de cribado como a los requisitos cualitativos de la identificación de compuestos, gracias a su identificación por masa exacta y a su coincidencia en bibliotecas PCDL para MS/MS.

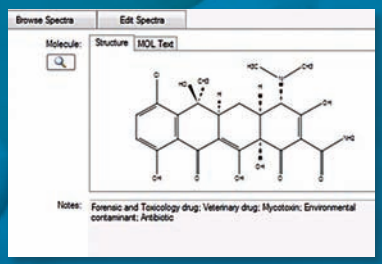
Cuantificación y confirmación estructural del dimetoato en una matriz de aguacate mediante análisis MS/MS específico



La curva de calibración representa concentraciones desde 1 ng/g hasta 100 ng/g en 6 niveles. La mayoría de los pesticidas pueden detectarse en concentraciones iguales o inferiores al límite residual máximo (MRL) de 10 ng/g en matrices complejas, mediante la comparación con los datos de la biblioteca y base de datos personal de compuestos (PCDL) de Agilent.

La nueva herramienta PCDL facilita la obtención de resultados precisos

Agilent mantiene un compromiso de apoyo para la obtención de resultados más precisos y de forma más sencilla en los laboratorios de investigación y regulados a través de la inversión en el desarrollo de bases de datos y bibliotecas y bases de datos personales de compuestos (PCDL). Un buen ejemplo es la **base de datos de micotoxinas**, de próxima aparición, que se ha desarrollado en colaboración con la Universidad de Recursos Naturales y Biociencia (BOKU) de Viena (Austria). Se añadieron cientos de micotoxinas a la base de datos y se obtuvieron espectros MS/MS de alta resolución para esos metabolitos de los hongos. La nueva biblioteca de micotoxinas ayudará a los científicos del sector alimentario a detectar y confirmar sin ambigüedades la presencia de cientos de contaminantes potencialmente nocivos sin necesidad de disponer de patrones físicos. Gracias a estos datos, los investigadores y los laboratorios gubernamentales pueden tomar decisiones fundamentadas acerca de qué patrones analíticos deben adquirir para realizar la cuantificación.



MAYOR EFICIENCIA Y CONFIANZA: UN TRABAJO EN EQUIPO

Sistema LC Agilent 1290 Infinity II

El sistema LC Agilent 1290 Infinity II incluye un novedoso multimuestreador y diversas configuraciones alternativas para la bomba; asimismo, ofrece ciclos de inyección más rápidos que le permitirán conseguir tanto unas prestaciones de separación y detección sin igual como datos de excepcional calidad. Puede obtener más información en: www.agilent.com/chem/1290.

Columnas Poroshell 120 y ZORBAX RRHD de Agilent

La gama Poroshell 120 ofrece prestaciones consistentes y fiables para las aplicaciones U/HPLC. Como punto de partida puede comenzar con una fase EC-C18, que ofrece unas prestaciones sin igual. Gracias a las 13 fases distintas existentes (incluida la fase Poroshell HPH), diseñadas para ofrecer unas prestaciones consistentes en condiciones de pH alto, puede adaptar sus métodos para conseguir una sensibilidad y una identificación de compuestos óptimas mediante análisis LC/MS. Puede obtener más información en: www.agilent.com/chem/poroshell120.

"El sistema Q-TOF aporta archivos de datos enriquecidos y de masa exacta, que posibilitan tanto extraer rangos de iones muy estrechos y eliminar el ruido prácticamente por completo como determinar la fórmula química de especies desconocidas. Ahora puedo realizar cuantificaciones mediante análisis MS o MS/MS con una linealidad y un rango dinámico adecuados; además, las herramientas de software me facilitan enormemente las búsquedas en las bases de datos y las bibliotecas. También puedo realizar búsquedas retrospectivas en datos antiguos en busca de nuevos compuestos aparecidos en publicaciones y medios científicos; para ello, tan solo tengo que añadirlos a mi base de datos de búsqueda."

RALPH HINDLE,
VOGON LABORATORY SERVICES, LTD.

SOFTWARE Y SERVICIOS DE APOYO PARA SU TRABAJO

Software Agilent MassHunter Workstation

El software Agilent MassHunter Workstation está diseñado para hacer que sus análisis de MS sean más rápidos, sencillos y productivos. Además de permitirle adquirir datos y controlar sus instrumentos LC/MS, GC/MS e ICP-MS de Agilent, el software incluye herramientas avanzadas de extracción y procesamiento de datos.

Las funciones de extracción de datos del software MassHunter Workstation se integran con la biblioteca y base de datos personal de compuestos (PCDL) de Agilent, de forma que posibilita utilizar bibliotecas de masa exacta para MS/MS y conseguir un cribado e identificación fiable de los compuestos de interés, además de aportar la flexibilidad de crear bibliotecas (PCDL) personalizables.

- Biblioteca PCDL para análisis de pesticidas.
- Biblioteca PCDL para metabolómica (METLIN).
- Biblioteca PCDL para química forense y toxicología (Broecker, Herre y Pragst).
- Biblioteca PCDL para micotoxinas/metabolitos de hongos.
- Biblioteca PCDL para fármacos de uso veterinario.

Software MassHunter

El software MassHunter ofrece un completo conjunto de herramientas que le ayudarán a cumplir todos los requisitos de las buenas prácticas de laboratorio y fabricación (GLP/GMP), y a garantizar la conformidad con la norma 21 CFR Parte 11. Agilent también ofrece un paquete completo de servicios de cualificación de la instalación y cualificación operacional que permite reducir el tiempo entre la instalación y el análisis de muestras críticas.

Software OpenLAB CDS

El software OpenLAB CDS le permite aumentar la eficiencia de su laboratorio gracias a la reducción del tiempo dedicado tanto a procesar y revisar datos como a elaborar informes. Con el software OpenLAB CDS puede crear informes con facilidad gracias a las potentes e intuitivas funciones de tipo “arrastrar y soltar”, así como procesar grandes conjuntos de datos hasta 40 veces más rápido. Puede utilizarse desde para un único instrumento hasta para una red para un laboratorio completo, con administración centralizada de los datos y la capacidad de trabajar desde el lugar que desee, con la garantía de conformidad respecto a los requisitos de la norma 21 CFR Parte 11 y del Anexo 11 de la UE.

Promesa de valor Agilent: 10 años de rendimiento garantizados

Además de productos en continuo desarrollo, Agilent le ofrece la única garantía de 10 años del sector. Agilent le garantiza al menos 10 años de utilización del instrumento desde la fecha de compra, o el abono del valor residual del sistema para adquirir un modelo actualizado.

Esta es nuestra manera de garantizarle una compra segura y proteger su inversión de cara al futuro.

Más información:
www.agilent.com/chem/6545_qtof

Tienda online:
www.agilent.com/chem/store

Encuentre un centro de atención al cliente de Agilent en su país:
www.agilent.com/chem/contactus

España:
901 11 68 90
customercare_spain@agilent.com

Europa:
info_agilent@agilent.com

Asia-Pacífico:
inquiry_lsca@agilent.com

Exclusivamente para su uso en investigación. La información, las descripciones y las especificaciones de esta publicación están sujetas a modificación sin previo aviso. Agilent Technologies no se responsabiliza de los errores contenidos en este documento ni de los daños incidentales o emergentes asociados al suministro, la interpretación o el uso de este material.

© Agilent Technologies, Inc. 2015
Impreso en EE. UU. el 13 de febrero de 2015
5991-5468ES

Agilent Technologies