

SCREENING AUF VERUNREINIGUNGEN IN WASSER LEICHT GEMACHT

The Measure of Confidence



Agilent LC/MS Personal Compound Database and Library (PCDL) für Wasser-Screening

Zuverlässiges Screening auf Zielsubstanzen und mutmaßliche Verbindungen durch Messung der akkuraten Masse

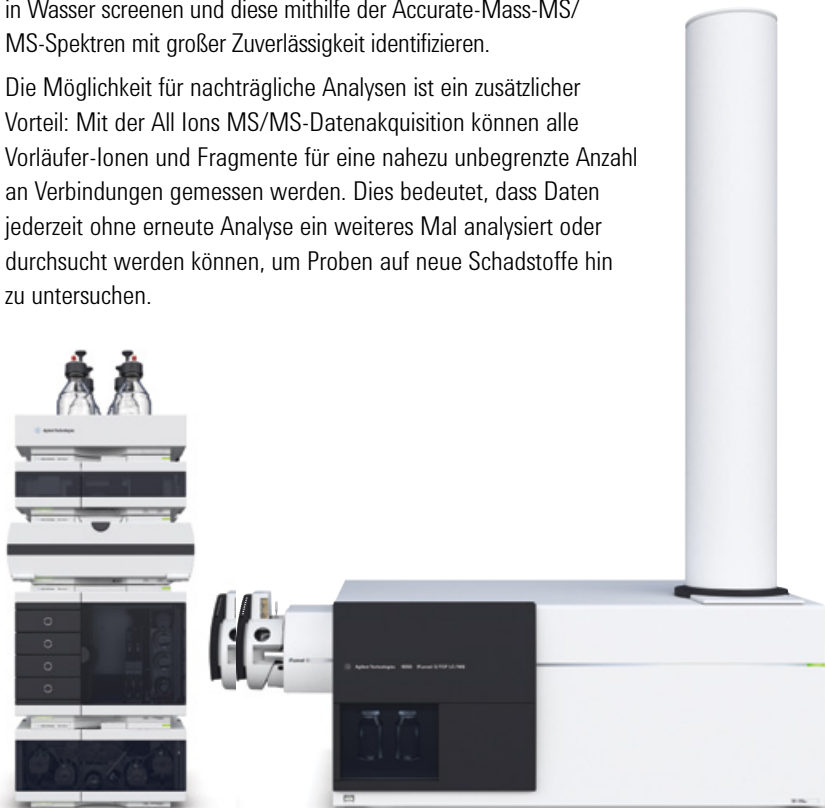
Der Bedarf nach umfassenden Wasser-Screening-Methoden wächst immer weiter, da neue Bestimmungen in Kraft treten und ein immer größeres Interesse an neu auftretenden Verunreinigungen, z. B. durch Pharmazeutika und Körperpflegeprodukte (PPCP), besteht.

Durch die Kombination von TOF- oder Q-TOF-LC/MS-Geräten mit der NEUEN Agilent Personal Compound Database and Library (PCDL) für Wasser-Screening können Sie auf mehr als 1400 Verunreinigungen in Wasser screenen und diese mithilfe der Accurate-Mass-MS/MS-Spektren mit großer Zuverlässigkeit identifizieren.

Die Möglichkeit für nachträgliche Analysen ist ein zusätzlicher Vorteil: Mit der All Ions MS/MS-Datenakquisition können alle Vorläufer-Ionen und Fragmente für eine nahezu unbegrenzte Anzahl an Verbindungen gemessen werden. Dies bedeutet, dass Daten jederzeit ohne erneute Analyse ein weiteres Mal analysiert oder durchsucht werden können, um Proben auf neue Schadstoffe hin zu untersuchen.

Die folgenden in der PCDL enthaltenen Komponenten sparen Zeit und optimieren die Leistung:

- kuratierte Accurate-Mass-Datenbank mit mehr als 1400 Verbindungen
- durchsuchbare Benutzeranmerkungen, die Markierungen zur Verbindungsklasse und zu Richtlinien enthalten
- chinesische Bezeichnungen für mehr als 500 Verbindungen und japanische Bezeichnungen für mehr als 250 Verbindungen
- Accurate-Mass-MS/MS-Spektren für mehr als 1000 Verbindungen
- Kurzanleitung mit Datenbeispielen und Einweisungsübungen
- Application Note mit detaillierten Informationen zu LC/MS-Methoden
- neueste Version der PCDL Manager Software



Agilent Technologies

Arbeitsabläufe für das Screening auf Zielsubstanzen und mutmaßliche Verbindungen mit der PCDL

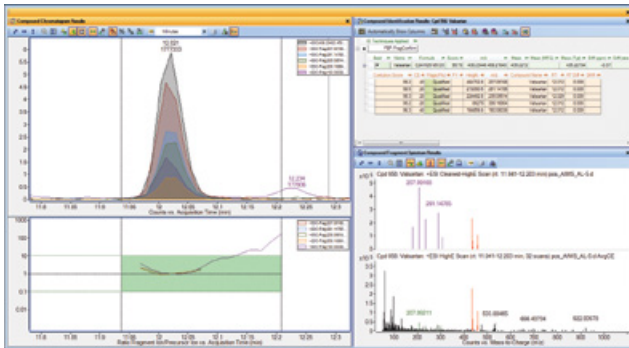
Mit der Agilent PCDL für Wasser-Screening in Kombination mit den Messfunktionen der akkuraten Masse der LC/TOF- und Q-TOF-Geräte können Sie:

- nicht-zielspezifische Daten der Gesamtspektren mittels All Ions MS/MS aufnehmen und durch akkurate Masse, Retentionszeit, Isotopenmuster und Fragmentbestätigung Verbindungen identifizieren
- mutmaßliche Übereinstimmungen der aufgenommenen Spektren mit Bibliotheksspektren ermitteln – Bezug von Standards ist nicht erforderlich
- eine benutzerspezifische PCDL für ein gezielteres Screening erstellen
- eine Liste der mutmaßlichen Verbindungen mit MS-Daten und dem „Find by Formula“-Algorithmus vorschlagen, anschließend das Vorhandensein einer Kontamination bestätigen und falschpositive Verbindungen mit gezielten MS/MS-Experimenten und Bibliothekssuche eliminieren

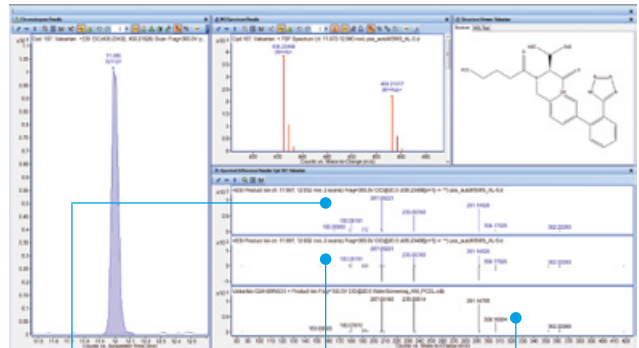
- Daten von Auto MS/MS-Experimenten mittels „Molecular Feature Extraction“ durchsuchen und nach vorgeschlagenen Verbindungen im Abgleich mit der PCDL suchen
- eigene Verbindungen und Bibliotheksspektren hinzufügen, um für Ihre Analysen spezifische PCDL zu erstellen
- nachträgliche Analyse der Daten für neu zur PCDL hinzugefügte Verbindungen ohne eine Wiederholungsanalyse der Proben durchführen

Die NEUE PCDL für Wasser-Screening macht die Bestätigung von Verbindungen und das Data-Mining einfacher – auch für Labors mit hohem Probendurchsatz. Sie können ein umfassendes Screening auf eine unbegrenzte Anzahl von Verbindungen durchführen.

Einfaches Data-Mining und eindeutige Identifizierung mit der All Ions Software



Bestätigung von Verbindungen durch Übereinstimmung mit der Bibliothek mittels Auto MS/MS



Oben:

Auto MS/MS-Spektrum

Mitte:

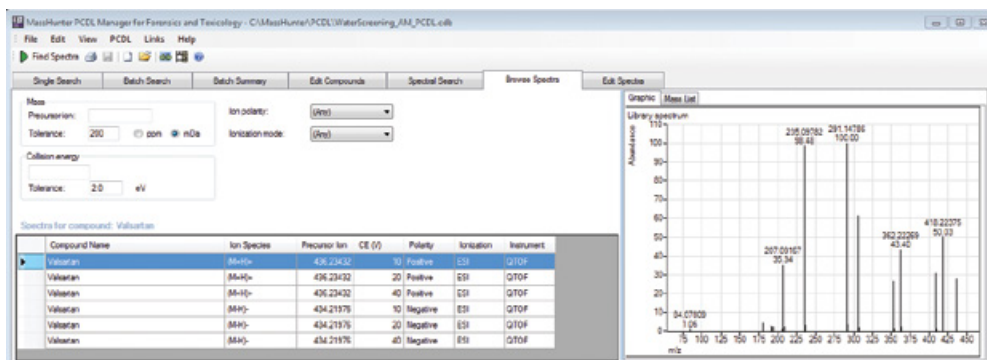
Beide Spektren

gespiegelt

Unten:

Bibliotheksspektrum

Die PCDL Manager Software gestaltet die Verwaltung der Datenbank und Bibliothek einfach



Schutz der Wasserversorgung und Einhaltung gesetzlicher Standards

Die Agilent PCDL für Wasser-Screening unterstützt Sie dabei, die weltweit strengen Anforderungen der Aufsichtsbehörden zu erfüllen. Sie enthält mehr als 1400 Verbindungen, einschließlich der in den folgenden Richtlinien und Listen angegebenen:

EU-Verordnungen

Prioritäre Verbindungen der EU-Wasserrahmenrichtlinie

US-Richtlinien

Methoden 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 und Entwurf CCL4 der Environmental Protection Agency

Chinesische Richtlinien und Listen

- CN-EPA Screening-Liste
- CN-NY Methoden 193, 235, 265, 560
- CN-CDC Erhebungsliste
- CN-Antibiotikaliste
- CN-GB 2763-2014

Japanische Richtlinien und Listen

- Japanische Positivliste
- JDWQS

Verfügbare Klassenmarkierungen

PPCP, Pestizide, Veterinär-Arzneimittel, Human-Arzneimittel, polare Metaboliten, Cyanotoxine und Klassenmarkierungen für alle oben aufgeführten Richtlinien und Listen

Kuratierung der Datenbank und Bibliothek stellt höchste Datenqualität sicher

Jeder kuratierte Datenbankeintrag enthält:

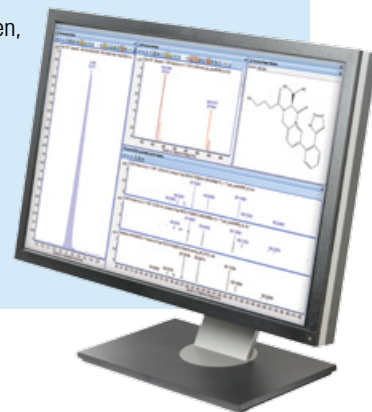
- Trivialname der Verbindung
- Akkurate Masse des Neutralmoleküls
- IUPAC-Bezeichnung
- Molekularformel
- Molekularstruktur
- Ionentyp (Anion, Kation oder neutral)
- CAS-Nummer/PubChem-Link (falls vorhanden)
- ChemSpider-ID und Hyperlink (falls vorhanden)

Kuratierung der Massenspektren-Bibliothek mit akkuraten Massen

- jeder Vorläufer- und Produkt-Ionen-Peak wird auf die theoretische akkurate Masse korrigiert
- mit einer Kollisionsenergie von 10, 20 und 40 eV aufgenommene Spektren
- im positiven und/oder negativen Ionen-Modus aufgenommene Spektren (falls zutreffend)
- Spektren werden nach Signalintensität gefiltert und kuratiert für:
 - Rauschen des Spektrums
 - Chemische Verunreinigungen
 - Falsch eingestellte Geräteparameter

Ergänzen Sie Ihre Arbeitsabläufe in der Wasseranalytik mit richtungsweisenden Lösungen von Agilent

- Mit der **MassHunter Software zur Datenakquisition- und -analyse** können Sie hochwertige Screening-Methoden einführen und diese an Ihre künftigen Anforderungen anpassen. Sie können zudem die PCDL an Ihre Bedürfnisse anpassen.
- **Das Agilent 1290 Infinity II LC-System** bietet unübertroffene chromatographische Auflösung und kürzere Analysendauer und liefert die qualitativ hochwertigen Daten, die Sie für empfindliche und reproduzierbare Screening-Applikationen benötigen. Darüber hinaus ermöglicht die Agilent Jet Stream Elektrospray-Ionenquelle deutlich niedrigere Nachweisgrenzen für neue Schadstoffe in Wasser.
- **Agilent TOF- und Q-TOF-LC/MS-Systeme** liefern verlässliche MS- und MS/MS-Massengenauigkeit. Mit der Full-Scan-Funktion der All Ions MS/MS-Spektren erhalten Sie ständigen Zugang zu allen Daten, sodass Sie auf eine große Anzahl von mutmaßlichen Analyten und unbekanntem Verunreinigungen screenen können.
- **Erstklassige Applikationsberatung** und ein großes Portfolio an Probenvorbereitungsprodukten, stationären Phasen für LC-Säulen und anderen Verbrauchsmaterialien erhöhen die Produktivität. Konzentrieren Sie sich auf das, was *Sie* am besten können.



Bestellinformationen:

Agilent LC/MS Personal Compound Database and Library (PCDL) für Wasser-Screening (G6882CA)

Die folgenden Voraussetzungen sind erforderlich, jedoch nicht im Umfang der PCDL für Wasser-Screening enthalten:

- Agilent TOF-LC/MS-System der Serie 6200 oder Q-TOF-LC/MS-System der Serie 6500
- Agilent MassHunter Datenakquisitionsoftware B.05 (oder höher) und Windows 7 (64-Bit)
- Agilent MassHunter Qualitative Analysis-Software B.07 Sp1 (oder höher)
- Agilent MassHunter Quantitative Analysis-Software B.07 (oder höher)

Weitere Informationen über die Agilent PCDL für Wasser-Screening erhalten Sie im Internet unter

www.agilent.com/chem/waterscreening

Mit Ihrem Labor bei der Produktivität auf die Überholspur.

Nehmen Sie bitte Kontakt zu Ihrem Agilent Vertreter vor Ort oder Ihrem autorisierten Agilent Vertriebspartner auf unter www.agilent.com/chem/contactus

Oder rufen Sie uns an unter **0800-603 1000**
(in Deutschland)

Unter www.agilent.com/chem/ms
finden Sie eine Beschreibung der erhältlichen
Analysesysteme und Applikationskits

Agilent Produkte sind nur für Forschungszwecke vorgesehen.
Nicht für Diagnoseverfahren geeignet.
Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Veröffentlicht in den USA, 2. Februar 2016
5991-6536DEE

