

SIMPLIFIQUE SU CRIBADO DE CONTAMINANTES DEL AGUA

The Measure of Confidence



Biblioteca y base de datos personal de compuestos para cribado de contaminantes del agua mediante LC/MS de Agilent

Realice con confianza tanto el cribado de compuestos diana como aquellos que son sospechosos, gracias al uso de la masa exacta

La demanda de completos métodos de cribado de contaminantes del agua es cada vez mayor, debido a las nuevas normativas y al creciente interés en contaminantes como los productos farmacéuticos y de higiene personal (PPCP).

Podrá detectar más de 1.400 contaminantes en agua con una identificación de enorme fiabilidad mediante el uso de espectros MS/MS de masa exacta, combinando los instrumentos de LC/MS TOF o cuadrupolo TOF con la NUEVA biblioteca y base de datos personal de compuestos (PCDL) para cribado de contaminantes del agua de Agilent.

El análisis retrospectivo es una ventaja añadida, pues la adquisición en modo All Ions (todos los iones) por MS/MS permite medir iones precursores y fragmentos para un número de compuestos virtualmente ilimitado. De este modo, podrá reanalizar o extraer los datos en cualquier momento (sin repetir el análisis) para investigar la presencia de contaminantes emergentes en las muestras.

La PCDL incluye los siguientes componentes, que ahorran tiempo y maximizan el rendimiento:

- base de datos verificada de masa exacta con más de 1.400 compuestos,
- notas de búsqueda para el usuario, con clase de compuesto y etiquetas de normativa, incluyendo los nombres,
- en idioma chino de más de 500 compuestos y en japonés de más de 250 compuestos,
- espectros MS/MS de masa exacta de más de 1.000 compuestos,
- guía de inicio rápido con ejemplos de datos y ejercicios de familiarización,
- nota de aplicación con información detallada de métodos para LC/MS,
- la versión más reciente del software PCDL Manager.



Agilent Technologies

Flujos de trabajo de cribado de compuestos diana y sospechosos con PCDL

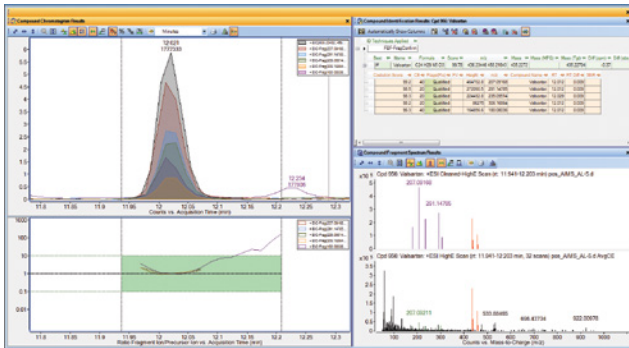
La PCDL de cribado de contaminantes del agua de Agilent, en combinación con las capacidades de masa exacta de los instrumentos de LC/TOF y Q-TOF, permite:

- obtener datos inespecíficos y de espectro completo usando el modo All Ions (todos los iones) por MS/MS e identificar los compuestos mediante masa exacta, tiempo de retención, patrón isotópico y confirmación de fragmentos,
- realizar una coincidencia presuntiva de los espectros obtenidos con la biblioteca de espectros, sin necesidad de obtener estándares,
- crear una PCDL personalizada para realizar un cribado más centrado en los productos de interés,
- proponer una lista de sospechosos con datos de MS y el algoritmo "Find by Formula" y, posteriormente, confirmar la presencia de contaminantes y eliminar falsos positivos con un análisis MS/MS específico y una búsqueda en biblioteca,

- extraer datos procedentes de experimentos de MS/MS automatizados utilizando la "Extracción de características moleculares" y comparar los compuestos propuestos con la PCDL,
- añadir sus propios compuestos y espectros de biblioteca exclusivos para crear PCDL específicas para sus análisis,
- realizar un análisis retrospectivo de datos con nuevos compuestos añadidos a la PCDL, sin necesidad de repetir los análisis de las muestras.

La NUEVA PCDL para cribado de contaminantes del agua facilita la confirmación de compuestos y la extracción de datos, incluso para laboratorios con un elevado número de análisis, para que pueda realizar un cribado verdaderamente completo de un número ilimitado de compuestos.

Sencilla extracción de datos e identificación sin ambigüedades con el software All Ions



Confirme los compuestos mediante coincidencia de bibliotecas usando MS/MS automatizado

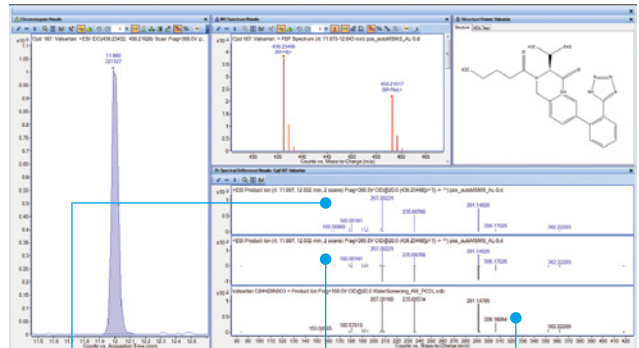
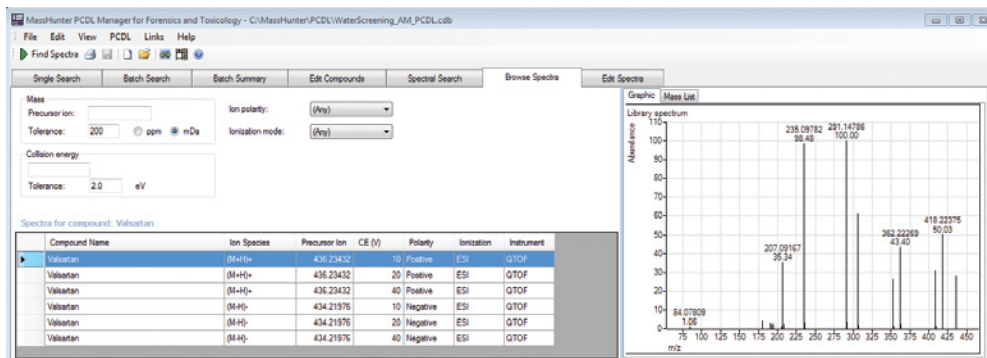


Imagen superior:
Espectro MS/MS
automatizado

Imagen central:
Espectro especular

Imagen inferior:
Espectro de biblioteca

El software PCDL Manager proporciona una sencilla gestión de la base de datos y la biblioteca



Proteja nuestro suministro de agua y cumpla con los estándares en entornos regulados

La PCDL de cribado de contaminantes del agua de Agilent puede ayudarle a cumplir los exigentes requisitos establecidos por las agencias internacionales de conformidad. Incluye más de 1.400 compuestos, como los especificados por las siguientes normativas y listas:

Normativas de la UE

Compuestos prioritarios según la directiva marco del agua de la UE

Normativas de EE.UU.

Métodos 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 y borrador CCL4 de la Agencia de Protección del Medio Ambiente (EPA)

Normativas y listas de China

- Lista de cribado CN-EPA
- Métodos CN-NY 193, 235, 265, 560
- Lista de estudio CN-CDC
- Lista de antibióticos CN
- CN-GB 2763-2014

Normativas y listas de Japón

- Lista positiva japonesa
- JDWQS

Etiquetas de clase disponibles

PPCP, pesticidas, fármacos de uso veterinario, fármacos de uso humano, metabolitos polares, cianotoxinas y etiquetas de clase para todas las normativas y listas anteriores

La verificación de la base de datos y la biblioteca garantiza la máxima calidad de los datos

Cada entrada verificada de la base de datos incluye:

- nombre común del compuesto
- masa exacta de la molécula neutra
- nombre IUPAC
- fórmula molecular
- estructura molecular
- tipo de ión (anión, catión o neutro)
- número CAS/enlace PubChem (si existe)
- id. ChemSpider e hipervínculo (si existe)

Verificación en la biblioteca de espectros de masa exacta:

- cada pico de precursor e ión producto corregido según la masa exacta teórica
- espectros adquiridos con una energía de colisión de 10, 20 y 40 eV
- espectros medidos en modo de ión positivo y negativo donde corresponda
- los espectros se filtran según la intensidad de la señal y se verifican con respecto a:
 - ruido espectral
 - impurezas químicas
 - parámetros instrumentales mal ajustados

Complete su flujo de trabajo en análisis de agua con soluciones de última generación de Agilent

• El software MassHunter de adquisición y análisis de datos

permite implementar rápidamente métodos de cribado de alta calidad, que podrá modificar para satisfacer sus necesidades futuras. También puede personalizar su PCDL.

• El sistema Agilent 1290 Infinity II LC

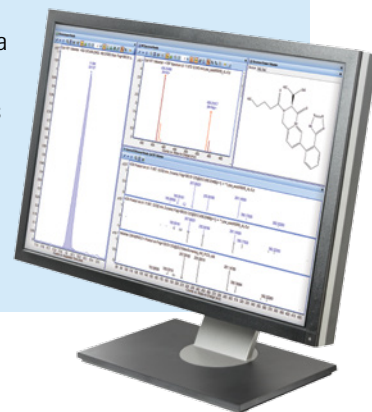
proporciona una resolución cromatográfica sin igual y reducidos tiempos de análisis, con los que obtendrá los datos de alta calidad que necesita para unas aplicaciones de cribado sensibles y reproducibles. Además, la fuente de iones de electrospray con focalización del gradiente térmico (Jet Stream) de Agilent reduce drásticamente los límites de detección para los contaminantes emergentes en agua.

• Los sistemas LC/MS TOF y Q-TOF

proporcionan exactitud de masa MS y MS/MS fiable. Gracias a la capacidad de barrido completo del modo All Ions (todos los iones) por MS/MS, podrá acceder a todos los datos en todo momento, de modo que podrá realizar un cribado de un gran número de analitos sospechosos y contaminantes desconocidos.

• La mejor consultoría de aplicaciones de su categoría,

junto con una gran gama de productos para la preparación de muestras, fases de columnas LC y otros consumibles, le ayudarán a aumentar su productividad y a focalizar en aquello que usted mejor hace.



Información sobre pedidos:

Biblioteca y base de datos personal de compuestos para cribado de contaminantes del agua de Agilent (G6882CA)

Los siguientes elementos resultan necesarios pero no se incluyen con la PCDL para cribado de contaminantes del agua:

- Sistemas LC/MS TOF Agilent Serie 6200 o Q-TOF Agilent Serie 6500,
- Software de adquisición de datos Agilent MassHunter versión B.05 (o posterior) y Windows 7 (de 64 bits),
- Software de análisis cualitativo Agilent MassHunter versión B.07 Sp1 (o posterior),
- Software de análisis cuantitativo Agilent MassHunter versión B.07 (o posterior).

Para obtener más información acerca del PCDL para cribado de contaminantes del agua de Agilent, visite

www.agilent.com/chem/waterscreening

Gestione su laboratorio con la máxima productividad.

Para buscar un representante local o un distribuidor autorizado de Agilent, visite

www.agilent.com/chem/contactus

También puede llamar al teléfono **901 11 68 90**
(España)

En la página web www.agilent.com/chem/ms puede encontrar una descripción de los analizadores y kits de aplicaciones disponibles

Los productos Agilent están destinados solamente a la investigación.
Prohibido su uso en procedimientos diagnósticos.
La información, las descripciones y las especificaciones de este documento están sujetas a cambios sin previo aviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Publicado en EE. UU. el 2 de febrero de 2016
5991-6536ES

