

# SIMPLIFIEZ LE « SCREENING » DES CONTAMINANTS DE L'EAU

The Measure of Confidence



**Bibliothèque et base de données personnelles de composés LC/MS Agilent de « screening » de l'eau**

## Recherchez des composés ciblés et suspects en toute confiance à l'aide de la masse exacte

Face à l'évolution de la réglementation et l'intérêt grandissant pour de nouveaux contaminants préoccupants, tels que les produits pharmaceutiques et de soins personnels (PPCP), la demande pour des méthodes de « screening » exhaustives de l'eau ne cesse de croître.

Vous pourrez rechercher et identifier d'une manière fiable, plus de 1 400 contaminants de l'eau, en utilisant les masses exactes, les spectres MS/MS, en associant la NOUVELLE bibliothèque et la base de données personnelles de composés aux instruments TOF ou Q-TOF couplés à la LC.

La PCDL présente également l'avantage de permettre l'analyse rétrospective car, grâce à l'acquisition All Ions MS/MS, les ions précurseurs et les fragments peuvent être mesurés pour un nombre presque illimité de composés. Cela signifie que vous pourrez ré-analyser ou exploiter vos données à tout moment, sans refaire l'analyse, pour rechercher de nouveaux contaminants dans vos échantillons.

## La PCDL inclut les composants suivants permettant d'économiser du temps et d'optimiser vos performances :

- Une base de données de masse exacte structurée contenant plus de 1 400 composés
- Des notes utilisateur consultables indiquant la classe de composé et la réglementation applicable
- Les noms chinois pour plus de 500 composés et les noms japonais pour plus de 250 composés
- Des spectres MS/MS de masse exacte pour plus de 1 000 composés
- Un guide de démarrage rapide avec des exemples de données et des exercices de familiarisation
- Une note d'application contenant des informations détaillées sur la méthode LC/MS
- La dernière version du logiciel PCDL Manager



**Agilent Technologies**

## Processus de recherche de composés ciblés et suspects avec la PCDL

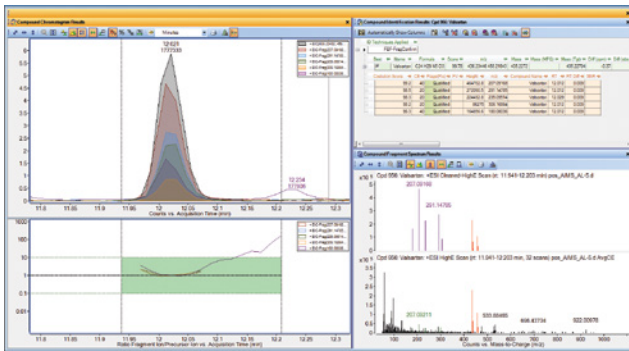
Grâce à la PCDL Agilent de « screening » de l'eau et aux performances de masse exacte des instruments LC/TOF et Q-TOF, vous pourrez :

- Acquérir des spectres complets, des données non ciblées en utilisant le mode All Ions MS/MS, et identifier les composés d'après leur masse exacte, temps de rétention, profils isotopiques et fragments.
- Trouver les correspondances présumées entre spectres acquis et spectres de la bibliothèque, sans recourir à des étalons
- Personnaliser votre PCDL pour un « screening » plus sélectif
- Dresser une liste de composés suspects basée sur les données MS et l'algorithme « Find by Formula », puis confirmer la présence des contaminants et éliminer les faux positifs par MS/MS ciblé et recherche dans la bibliothèque

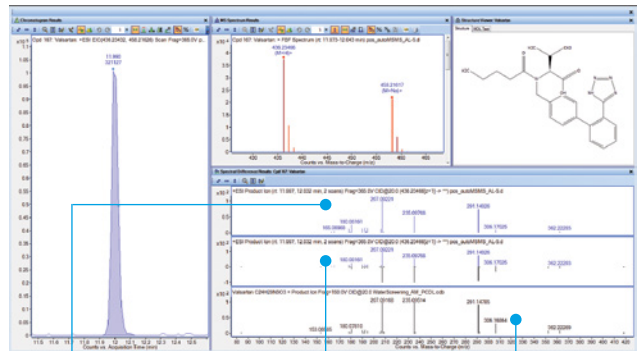
- Exploiter les données après injection en mode Auto MS/MS à l'aide de l'algorithme « Molecular Feature Extraction », et rechercher les composés proposés dans la PCDL
- Ajouter vos propres composés et spectres de bibliothèque, pour créer une PCDL spécifique adaptée à vos analyses
- Analyser rétrospectivement vos données lorsque de nouveaux composés sont ajoutés à la PCDL, sans devoir ré-analyser les échantillons

La NOUVELLE PCDL de « screening » de l'eau facilite la confirmation des composés et l'interprétation des données, même dans les laboratoires à forte activité, et permet un « screening » véritablement exhaustif d'un nombre illimité de composés.

### Interprétation des données aisée et identification non ambiguë avec le logiciel All Ions

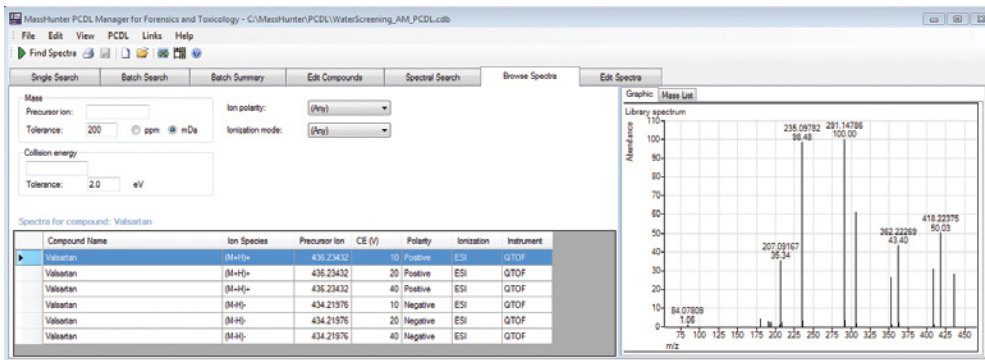


### Confirmation de composé par correspondance avec la bibliothèque des données « Auto MS/MS »



En haut : Spectre Auto MS/MS  
 Au centre : Spectre miroir  
 En bas : Spectre de la bibliothèque

### Le logiciel PCDL Manager permet une gestion facile de la base de données et de la bibliothèque



## Pour protéger l'alimentation en eau et respecter les normes réglementaires

La PCDL Agilent de « screening » de l'eau peut vous aider à respecter les exigences rigoureuses établies par les organismes de conformité internationaux. Elle comporte les données pour plus de 1 400 composés, dont ceux indiqués dans les réglementations et listes suivantes :

### Réglementation UE

Composés prioritaires cités dans la directive-cadre européenne sur l'eau

### Réglementation des États-Unis

Méthodes 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 et CCL4 (provisoire) de l'Agence de protection de l'environnement

### Réglementation et listes chinoises

- Liste de « screening » CN-EPA
- Méthodes CN-NY 193, 235, 265 et 560
- Liste de surveillance CN-CDC
- Liste d'antibiotiques CN
- CN-GB 2763-2014

### Réglementation et listes japonaises

- Méthode japonaise de la liste positive
- JDWQS

### Balises de classe disponibles

PPCP, pesticides, médicaments vétérinaires, médicaments à usage humain, métabolites polaires, cyanotoxines et balises de classe pour toutes les réglementations et listes citées ci-dessus

## L'organisation de la base de données et de la bibliothèque garantit une qualité des données exceptionnelle

### Chaque entrée structurée de la base de données inclut :

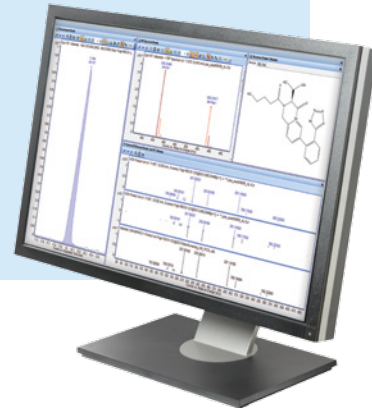
- Nom commun du composé
- Masse exacte de la molécule neutre
- Nom attribué par l'Union internationale de chimie pure et appliquée
- Formule moléculaire
- Structure moléculaire
- Type d'ion (anion, cation ou neutre)
- Numéro CAS/liens PubChem (le cas échéant)
- Identifiant ChemSpider et lien hypertexte (le cas échéant)

### Structuration de la bibliothèque de spectres de masse exacte :

- Chaque pic de précurseur et d'ion fils corrigé d'après la masse exacte théorique
- Acquisition des spectres à une énergie de collision de 10, 20 et 40 eV
- Spectres mesurés en mode ions positifs et/ou ions négatifs si possible
- Filtration des spectres selon l'intensité de signal et élimination :
  - du bruit du spectre
  - des impuretés chimiques
  - de paramètres d'instruments mal définis

## Améliorer vos méthodologies d'analyse de l'eau avec les solutions de pointe d'Agilent

- **Le logiciel d'acquisition et d'analyse des données MassHunter** permet une mise en œuvre rapide de méthodes de « screening » de haute qualité et de modifier ces méthodes lorsque vos besoins évoluent. Vous pouvez également personnaliser votre PCDL.
- **Le système LC Agilent 1290 Infinity II** offre une résolution chromatographique inégalée et des temps d'analyse plus courts, et vous fournit des données de haute qualité nécessaires pour des applications sensibles et reproductibles de « screening ». Qui plus est, avec la source d'ionisation électrospray Agilent Jet Stream, baissez considérablement les limites de détection pour les nouveaux contaminants dans l'eau.
- **Les systèmes LC/MS TOF et Q-TOF d'Agilent** offrent une précision en masse fiable en mode MS et MS/MS. Le spectre complet en mode « All Ions MS/MS » vous donne accès à toutes les données et vous permet de rechercher de nombreux analytes suspects et contaminants inconnus.
- **Une formation spécifique sur votre application**, ainsi qu'une large gamme de produits de préparation d'échantillons, de phases de colonnes de LC et d'autres consommables, augmentent votre productivité et vous permettent de vous focaliser pleinement sur vos réalisations.



## Informations pour commander :

### Bibliothèque et base de données personnelles de composés Agilent de « screening » de l'eau (G6882CA)

Pour utiliser la PCDL de « screening » de l'eau, les instruments et logiciels suivants sont nécessaires, mais non inclus :

- Systèmes Agilent LC/MS TOF série 6200 ou Q-TOF série 6500
- Logiciel d'acquisition MassHunter Agilent B.05 (ou supérieur) et Windows 7 (64-Bit)
- Logiciel d'analyse qualitative MassHunter Agilent B.07 Sp1 (ou supérieur)
- Logiciel d'analyse quantitative MassHunter Agilent B.07 (ou supérieur)

Pour en savoir plus sur la PCDL Agilent de « screening » de l'eau, consultez notre site [www.agilent.com/chem/waterscreening](http://www.agilent.com/chem/waterscreening)

## Augmentez rapidement la productivité de votre laboratoire.

Contactez votre représentant Agilent  
ou votre distributeur Agilent agréé sur  
[www.agilent.com/chem/contactus](http://www.agilent.com/chem/contactus)

Ou appelez le **0810 446 446**  
(France)

Rendez-vous sur [www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms)  
pour une description des analyseurs et kits d'application  
disponibles

Les produits Agilent sont réservés à la recherche.  
Ne pas utiliser dans les procédures de diagnostic.  
Les informations, descriptions et spécifications de cette publication peuvent  
être modifiées sans préavis.

© Agilent Technologies, Inc. 2016  
Publié aux États-Unis, le 2 février 2016  
5991-6536FR

