

効率的な水質汚染物質スクリーニングを実現



Agilent ウォータースクリーニング LC/MS パーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL)

精密質量を利用した確実なスクリーニング

包括的な水質スクリーニング分析メソッドに対する需要の高まりが続いています。新しい規制の策定、そして医薬品やパーソナルケア製品 (PPCP) への混入という新たな懸念に対する関心への高まりが、この傾向をさらに加速させています。

新しい Agilent ウォータースクリーニング PCDL を TOF または Q-TOF 液体クロマトグラフィー / 質量分析法機器と組み合わせると、精密質量 MS/MS スペクトルを使用して、1,400 種類以上の水質汚染物質を高い信頼度でスクリーニングおよび同定できます。

利点としてデータ再解析によるレトロスペクティブ分析がありますが、これは All Ions MS/MS 取り込みによりプリカーサーイオン、そして化合物フラグメントを実質的に数量的制限なしで測定できるためです。つまり、新規汚染物質を調査するため、サンプルの再処理なしで、測定済みデータの再分析やデータマイニングをいつでも実施できるのです。



PCDL には時間節約とパフォーマンス最大化をもたらす以下のコンポーネントが含まれています。

- 化合物 1,400 種類以上の精密質量データベース
- 化合物分類と規制タグを含む検索可能なユーザーノート
- 日本語名の化合物 250 種類、中国語名の化合物 500 種類
- 化合物 1,000 種類以上の精密質量 MS/MS スペクトル
- データサンプルとファミリーライゼーションエクササイズ付のクイックスタートガイド
- 詳細な液体クロマトグラフィー / 質量分析法情報を記した技術資料
- 最新版 PCDL Manager ソフトウェア



Agilent Technologies

PCDL によるターゲットおよび疑わしい汚染物質のスクリーニングワークフロー

Agilent ウォータースクリーニング PCDL を LC/TOF および Q-TOF 機器の精密質量分析機能と組み合わせると、以下が実行できます。

- All Ions MS/MS を利用したフルスペクトル、ノンターゲットデータの取り込み、精密質量、リテンションタイム、同位体パターン、フラグメント確認を通じた化合物の特定
- 測定スペクトルとライブラリスペクトルのマッチング
- ターゲットを絞り込んだスクリーニング手法に合わせたカスタム PCDL の作成
- MS データおよび「Find by Formula」アルゴリズムで疑わしい汚染物質のリスト化、汚染物質の有無を確認し、ターゲット MS/MS およびライブラリ検索で偽陰性を除去

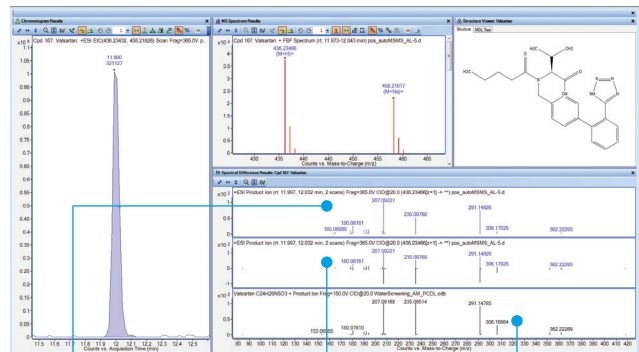
- 「分子特性抽出 (MFE)」を利用した Auto MS/MS 実験から取得したマイニングデータ、およびパーソナル化合物データベースライブラリによる混合物の検索
- お客様の分析に合わせたパーソナル化合物データベースライブラリを作成
- 新たにパーソナル化合物データベースライブラリに追加された化合物をレトロスペクティブ分析で検索

新しいウォータースクリーニング PCDL は、処理量の高いラボであっても化合物確認とデータマイニングを容易にし、化合物数に制限のない包括的なスクリーニングを実現します。

All Ions ソフトウェアを利用した簡単なデータマイニングおよび明確な同定

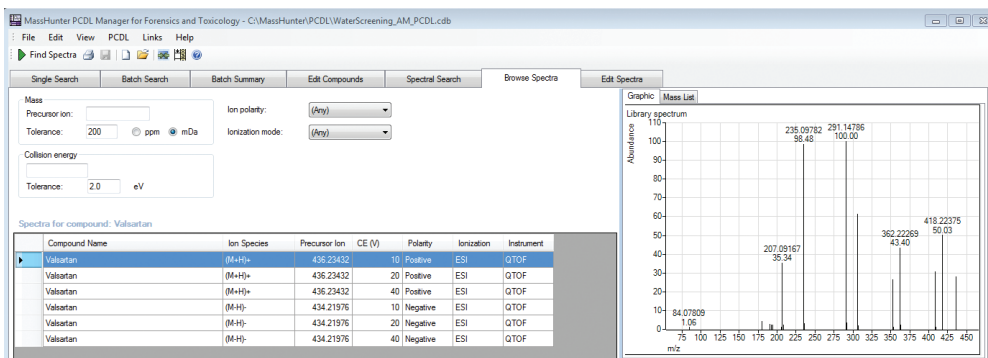


Auto MS/MS を利用したライブラリ照合による化合物確認



上: 自動 MS/MS スペクトル 中: ミラースペクトル 下: ライブラリスペクトル

PCDL Manager ソフトウェアで簡単なデータベースおよびライブラリ管理



水資源を保護し法令順守の標準を遵守

Agilent ウォータースクリーニング PCDL は各国の規制機関が求める厳しい要求事項を満たすサポートができます。以下の規制およびリストにて特定された化合物を含む 1,400 種類以上の化合物を含んでいます。

EU 規制

EU 水フレームワーク指令の優先化合物

U.S. 規制

環境保護機関メソッド 521、535、539、1694、1698、1699、ドラフト CCL4

中国規制およびリスト

- CN-EPA スクリーニングリスト
- CN-NY メソッド 193、235、265、560
- CN-CDC 調査リスト
- CN-抗生物質リスト
- CN-GB 2763-2014

日本国内規制およびリスト

- ポジティブリスト (農薬等)
- 水道水質基準

利用できる分類タグ

PPCP、農薬、動物用医薬品、ヒト医薬品、極性代謝物、シアノキシン、上記すべての規制およびリスト向けの分類タグ

データベースおよびライブラリの管理で最高のデータ品質を保証

各管理データベースエントリーには以下が含まれます

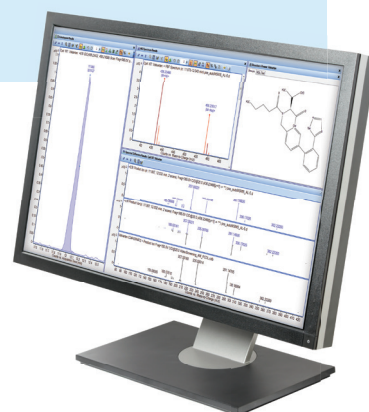
- 化合物一般名
- 精密質量
- IUPAC 名
- 分子式
- 分子の構造
- イオンの種類 (アニオン、陽イオン、中性)
- CAS 番号/PubChem リンク (ある場合)
- ChemSpider ID およびハイパーリンク (ある場合)

精密な MS ライブラリ管理

- 各プリカーサとプロダクトイオンピークを理論上の精密質量に修正
- 10、20、40 eV コリジョンエネルギーで要求されるスペクトル
- ポジティブ/ネガティブイオンモードで測定されるスペクトル (該当する場合)
- スペクトルをシグナル強度に合わせてフィルタ、および以下に合わせて管理
 - スペクトルノイズ
 - 不純物
 - 不適切な機器パラメータ設定

水質分析ワークフローをサポートするアジレントの最先端ソリューション

- **MassHunter Data Acquisition および Analysis ソフトウェア**と組み合わせて利用することで、高品質のスクリーニングメソッドをすばやく開発・利用できます。メソッドは将来的なニーズに合わせて変更や充実させることができます。お客様の PCDL をカスタマイズすることもできます。
- **The Agilent 1290 Infinity II LC system** は高性能なクロマトグラフィー分離能と高速分析を可能にし、高感度かつ再現性あるスクリーニングアプリケーションに必要な高品質データを届けます。さらに、Agilent Jet Stream エレクトロスプレーイオン源は水中の新規汚染物質の検出限界を大幅に引き下げます。
- **Agilent TOF および Q-TOF LC/MS システム**は信頼性ある MS および MS/MS 質量精度を提供します。All Ions MS/MS フルスキャン機能であらゆるタイミングですべてのデータへのアクセスが可能です。この結果、スクリーニングで求められる網羅的な検出が実施できます。
- **最高クラスのアプリケーションコンサルティング**
豊富なサンプル前処理製品群、LC カラム固定相、その他消耗品により生産性向上をもたらし、お客様をサポートします。



製品情報:

Agilent ウォータースクリーニングパーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) (G6882CA)

ウォータースクリーニングには、PCDL (G6882CA) の他に以下の製品を利用しています。

- Agilent 6200 シリーズ TOF または 6500 シリーズ Q-TOF LC/MS システム
- Agilent MassHunter Acquisition ソフトウェア B.05 以上および Windows 7 64 ビット版
- Agilent MassHunter Qualitative Analysis ソフトウェア B.07 以上
- Agilent MassHunter Qualitative Analysis ソフトウェア B.07 以上

Agilent ウォータースクリーニング PCDL の詳細については、www.agilent.com/chem/jp をご覧ください。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本資料掲載の製品は、すべて研究用です。
本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。
アジレントは、本文書に誤りが発見された場合、また、本文書の使用により付随的
または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2017.

Published in Japan, April 26, 2017

(based on April 12, 2016 EN version)

5991-6536.JAJP



Agilent Technologies