

수질 오염물질의 스크리닝 방법의 단순화

The Measure of Confidence



애질런트 수질 스크리닝 LC/MS PCDL(Personal Compound Database and Library)

Accurate Mass를 통한 표적 및 의심되는 화합물의 정확한 스크리닝

새로운 규제의 제정과 PPCPs(pharmaceuticals and personal-care products)와 같은 신종 오염물질에 대한 관심의 증가로 인해 종합적인 수질 스크리닝 분석법에 대한 요구가 날로 높아지고 있습니다.

TOF 또는 Q-TOF LC/MS 기기와 애질런트의 새로운 수질 스크리닝 PCDL(Personal Compound Database and Library)을 조합함으로써 MS/MS 스펙트럼의 Accurate Mass를 이용한 신뢰성 높은 식별을 통해 1400종 이상의 수질 오염물질을 스크리닝할 수 있습니다.

All Ions MS/MS를 이용하여 사실상 화합물 수의 제한없이 전구체 이온(precursor ions)과 조각 이온(fragment ions)을 측정할 수 있어서, 오염물질이 추가되면 이전 결과를 소급 적용하여 분석 가능합니다. 이는 재실행 없이도 언제든 데이터를 재분석하거나 발굴하여 시료에서 새로 출현되는 오염물질을 조사할 수 있다는 의미입니다.

PCDL에는 시간을 줄이고 성능을 극대화하는 다음과 같은 구성 요소가 포함됩니다:

- 1400여 가지 화합물에 대한 큐레이트된 Accurate Mass 데이터베이스
- 화합물 등급, 규제 농도를 포함하는 검색 가능한 사용자 메모
- 500여 종 화합물의 중국어 이름 및 250여 종 화합물의 일본어 이름
- 800종 이상의 화합물에 대한 MS/MS 스펙트럼의 Accurate-mass
- 데이터 예제와 적응 연습 문제를 포함한 빠른 시작 안내서
- 상세한 LC/MS 분석법 정보를 포함한 응용 자료
- 최신 버전의 PCDL Manager 소프트웨어



Agilent Technologies

PCDL을 이용한 표적 및 의심되는 화합물의 스크리닝 워크플로

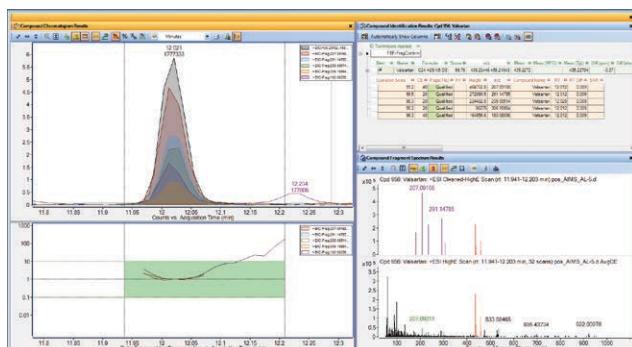
애질런트 수질 스크리닝 PCDL은 LC/TOF 및 Q-TOF 기기의 Accurate Mass 분석 능력과 함께 조합하여 다음과 같은 기능을 지원합니다:

- All Ions MS/MS를 이용하여 전체 스펙트럼(full-spectrum), 예상치 못한 오염물질에 대한 데이터를 수집하고 Accurate Mass, 머무름 시간, isotope pattern 및 fragment confirmation을 통해 화합물을 식별합니다.
- 표준물질 없이 수집한 스펙트럼과 라이브러리 스펙트럼의 예측적인 일치도(Presumptive Matching) 확인작업을 수행합니다.
- 보다 집중된 스크리닝 방법을 위해 맞춤형 PCDL을 생성합니다.

• MS 데이터와 “Find by Formula” 알고리즘으로 의심 목록을 제안한 다음, 오염물질 존재를 확인하고 표적 MS/MS 및 라이브러리 검색으로, 오인으로 검출된 물질을 제거합니다.

- “Molecular Feature Extraction”을 이용해 Auto MS/MS 실험으로부터 데이터를 발굴하고 제안된 화합물을 PCDL에서 검색합니다.
 - 사용자 자신의 고유 화합물 및 라이브러리 스펙트럼을 추가하여 분석에 맞는 PCDL을 생성합니다.
 - 재실행 할 필요 없이, 새로 PCDL에 추가된 화합물로 데이터의 소급적 분석(Retrospective analysis)을 실시합니다.
- 새로운 수질 스크리닝 PCDL은 심지어 대규모 실험실에서라도 화합물 확인과 데이터 발굴 작업을 더 쉽게 만들어 주어 화합물 수의 제한을 받지 않는 종합 스크리닝을 수행할 수 있습니다.

All Ions Software를 이용한 간편한 데이터 발굴 및 정확한 식별



Auto MS/MS와 라이브러리 매칭을 통한 화합물 식별



위:

Auto MS/MS 스펙트럼

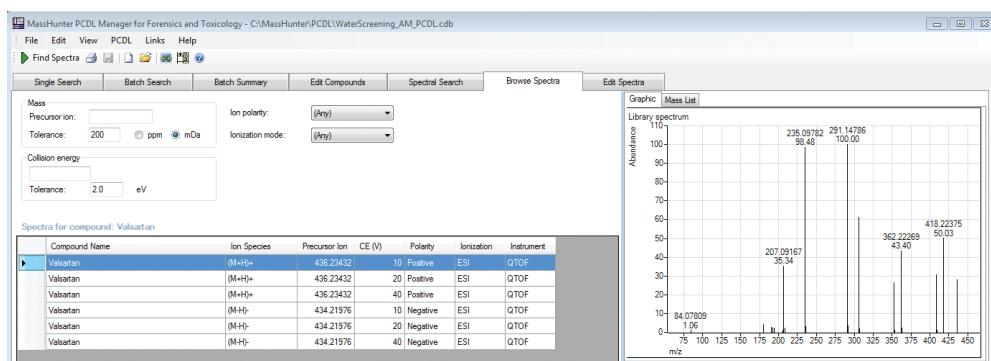
중간:

Mirror 스펙트럼

아래:

라이브러리 스펙트럼

PCDL Manager 소프트웨어를 이용한 데이터베이스와 라이브러리의 손쉬운 관리



수자원 보호 및 규제 기준 준수

애질런트 수질 스크리닝 PCDL은 세계적인 규제 기관에서 제정한 엄격한 요건을 충족하는데 도움을 드릴 수 있습니다. 다음 규제 및 목록에 지정된 것을 포함하여 1400종 이상의 화합물을 포함하고 있습니다.

EU 규제

EU WFD(water framework directive)의 우선 화합물

미국 규제

환경보호국(Environmental Protection Agency) 분석법 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 및 초안 CCL4

중국 규제 및 목록

- CN-EPA 스크리닝 목록
- CN-NY 분석법 193, 235, 265, 560
- CN-CDC 조사 목록
- CN-antibiotics 목록
- CN-GB 2763-2014

일본 규제 및 목록

- 일본 포지티브 목록(positive list)
- JDWQS

가용 등급 태그

PPCPs, 농약, 수의약품, 인체용 의약품, 극성 대사산물, 시아노톡신 및 상기 모든 규제 및 목록에 대한 등급 태그

최고의 데이터 품질을 보장하는 데이터베이스 및 라이브러리 큐레이션

각각의 큐레이트된 데이터베이스 항목에 포함되는 내용:

- 화합물 일반명
- 중성 분자의 정확한 질량
- IUPAC 이름
- 문자식
- 문자 구조
- 이온 유형(음이온, 양이온 또는 중성)
- CAS 번호/PubChem 링크(존재할 경우)
- ChemSpider ID 및 하이퍼링크(존재할 경우)

Accurate mass 스펙트럼 라이브러리 큐레이션:

- 이론적 정밀 질량으로 보정된 각 precursor ion 및 product ion 피크
- 10, 20 및 40eV 충돌 에너지에서 획득한 스펙트럼
- 해당하는 경우 양이온 및/또는 음이온 모드에서 측정된 스펙트럼
- 시그널 세기로 필터링되고 다음 항목에 대해 큐레이트된 스펙트럼:
 - 스펙트럼 노이즈
 - 화학적 불순물
 - 부정확하게 설정된 기기 파라미터

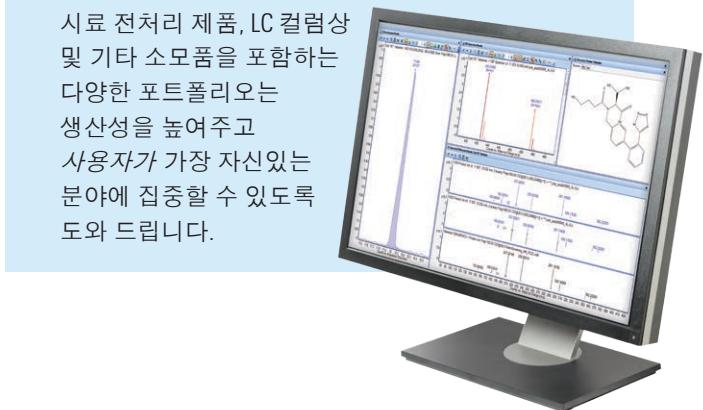
애질런트의 첨단 솔루션을 이용한 완벽한 수질 분석 워크플로

• **MassHunter 데이터 수집 및 분석 소프트웨어**를 이용하여 고품질 스크리닝 분석법을 신속하게 구현할 수 있고, 향후 요구에 맞게 수정할 수 있습니다. 또한 PCDL을 맞춤화할 수도 있습니다.

• **Agilent 1290 Infinity II LC 시스템**은 우수한 크로마토그래피 분리능을 제공하고 분석시간을 단축하여, 민감하고 재현 가능한 스크리닝 응용 작업에 필요한 고품질 데이터를 제공합니다. 그 외에도 Agilent Jet Stream 방식의 ESI 이온 소스는 신종 수질 오염물질에 대한 검출 한계를 크게 낮춰줍니다.

• **Agilent TOF 및 Q-TOF LC/MS 시스템**은 신뢰성 있는 MS 및 MS/MS 스펙트럼의 질량 정확도를 제공합니다. All Ions MS/MS 방식의 Full-scan 기능을 이용해 언제든지 모든 데이터에 접근할 수 있어서, 수 많은 의심되는 분석물과 미지 오염물질을 스크리닝할 수 있습니다.

• **최고 수준의 응용 컨설팅**과 시료 전처리 제품, LC 컬럼상 및 기타 소모품을 포함하는 다양한 포트폴리오는 생산성을 높여주고 사용자가 가장 자신있는 분야에 집중할 수 있도록 도와 드립니다.



주문 정보:

애질런트 수질 스크리닝 PCDL(Personal Compound Database and Library)(G6882CA)

다음은 필요하지만 수질 스크리닝 PCDL에 포함되지 않았습니다:

- Agilent 6200 시리즈 TOF 또는 6500 시리즈 Q-TOF LC/MS 시스템
- Agilent MassHunter 수집 소프트웨어 B.05(또는 그 이상) 및 Windows 7(64비트)
- Agilent MassHunter 정성 분석 소프트웨어 B.07(또는 그 이상)
- Agilent MassHunter 정량 분석 소프트웨어 B.07(또는 그 이상)

애질런트 수질 스크리닝 PCDL에 대한 자세한 내용은 www.agilent.com/chem/waterscreening을 참조하시기 바랍니다

실험실의 생산성을 높여드립니다

www.agilent.com/chem/contactus에서 애질런트 지역 사무소나 애질런트 공인 대리점에 대해 문의하시기 바랍니다

또는 **800-227-9770**

(미국 또는 캐나다)으로 문의하셔도 됩니다

이용 가능한 분석기 및 응용 키트에 대한 설명은

www.agilent.com/chem/ms를 참조하시기 바랍니다

애질런트 제품은 연구 용도로만 한정됩니다.
진단 용도로는 사용하실 수 없습니다.
이 간행물에 포함된 정보, 설명 및 제품사양은
시전 공지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
2016년 2월 2일 한국에서 발행
5991-6536KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 (우)04418
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부
고객지원센터 080-004-5090 www.agilent.co.kr

