

SIMPLIFIQUE O SCREENING DE CONTAMINANTES NA ÁGUA

The Measure of Confidence



Banco de Dados e Bibliotecas de Compostos Pessoais de LC/MS da Agilent para screening na água

Execute com confiança o screening de alvos e suspeitos usando massa exata

A demanda por métodos abrangentes de screening na água continua aumentando, impulsionada por novas normas e pelo crescente interesse em contaminantes de preocupação emergente, tais como os produtos farmacêuticos e para cuidados pessoais (PPCPs).

Você pode examinar mais de 1.400 contaminantes na água com alta confiabilidade na identificação utilizando espectro MS/MS de massa exata, combinando instrumentos LC/MS TOF ou Q-TOF com o novo Banco de Dados e Bibliotecas de Compostos Pessoais (PCDL) para screening na água da Agilent.

A análise retrospectiva é um benefício adicional, já que a aquisição All Ions MS/MS permite medir íons precursores e fragmentos para um número virtualmente ilimitado de compostos. Isso significa que você pode reanalisar os dados a qualquer momento (sem reexecuções) para investigar novos contaminantes emergentes em amostras.

A PCDL inclui os seguintes componentes que economizam tempo e aumentam o desempenho:

- Banco de dados selecionado de massa exata com mais de 1.400 compostos
- Observações de usuário pesquisáveis, contendo rótulos de classe e normas de compostos
- Nomes em chinês para mais de 500 compostos e em japonês para mais de 250 compostos
- Espectro MS/MS de massa exata para mais de 1.000 compostos
- Guia de início rápido com exemplos de dados e exercícios de familiarização
- Nota de aplicação com informações detalhadas do método LC/MS
- Versão mais recente do software PCDL Manager



Agilent Technologies

Fluxos de trabalho de screening de alvos e suspeitos com a PCDL

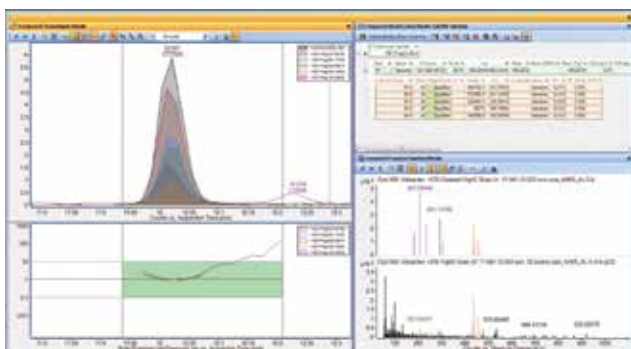
A PCDL Agilent para screening na água, combinada aos recursos de massa exata dos instrumentos LC/TOF e Q-TOF, permite que você:

- Adquirir dados de espectro total e não direcionados utilizando All Ions MS/MS e identifique compostos através de massa exata, tempo de retenção, padrão de isótopo e confirmação de fragmento
- Execute correspondência presumida do espectro adquirido com o espectro da biblioteca, sem a necessidade de padrões de fonte
- Crie uma PCDL personalizada para uma abordagem mais focada de screening
- Proponha uma lista de suspeitos com dados de MS e com o algoritmo "Encontrar por fórmula", depois confirme a presença do contaminante e elimine falsos positivos com MS/MS alvo e pesquisa na biblioteca

- Trabalhe com dados de experimentos automáticos de MS/MS utilizando a "extração de característica molecular" e pesquise compostos propostos contra a PCDL
- Adicione seus próprios compostos exclusivos e espectros de biblioteca para criar PCDLs específicas para a sua análise
- Efetue análise retrospectiva de dados com compostos recentemente adicionados à PCDL, sem a necessidade de reexecução de amostras

A NOVA PCDL de screening na água torna fácil a confirmação de compostos e o data mining, mesmo em laboratórios com alto volume, para executar um screening verdadeiramente abrangente de um número ilimitado de compostos.

Data mining fácil e identificação sem ambiguidades utilizando o software All Ions



Obtenha confirmação de compostos através da correspondência de biblioteca utilizando MS/MS automático

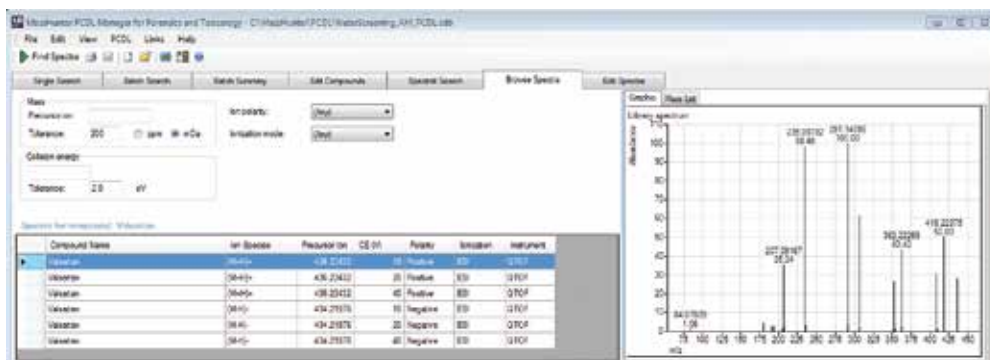


Topo:
Espectro MS/MS
automático

Meio:
Espectro
em espelho

Base:
Espectro
da biblioteca

O software PCDL Manager proporciona o fácil gerenciamento do banco de dados e da biblioteca



Proteja nossas fontes de água e esteja em conformidade com os padrões regulatórios

A PCDL de screening na água da Agilent pode ajudar você a atender os rígidos requisitos estabelecidos pelas agências globais de conformidade. Ela inclui mais de 1.400 compostos, inclusive aqueles especificados pelas seguintes normas e listas:

Normas da UE Compostos prioritários da diretiva de estrutura de água da UE

Normas dos EUA

Métodos 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 e o esboço CCL4 da Agência de Proteção Ambiental

Normas e listas chinesas

- Lista de screening CN-EPA
- Métodos 193, 235, 265 e 560 da CN-NY
- Lista de vigilância CN-CDC
- Lista de antibióticos CN
- CN-GB 2763-2014

Normas e listas japonesas

- Lista de positivos do Japão
- JDWQS

Rótulos de classe disponíveis

PPCPs, pesticidas, drogas veterinárias, medicamentos humanos, metabólitos polares, cianotoxinas e rótulos de classe para todas as normas e listas acima

A curadoria do banco de dados e da biblioteca assegura a mais alta qualidade de dados

Cada entrada do banco de dados curado inclui:

- Nome comum do composto
- Massa exata da molécula neutra
- Nome da IUPAC
- Fórmula molecular
- Estrutura molecular
- Tipo de íon (ânion, cátion ou neutro)
- Número CAS/link PubChem (se existir)
- ID e hyperlink ChemSpider (se existir)

Curadoria da biblioteca de espectro de massas exatas:

- Pico de cada precursor e íon produto corrigidos para a massa exata teórica
- Espectros adquiridos com energia de colisão de 10, 20 e 40eV
- Espectros medidos em modo de íon positivo e/ou negativo, onde aplicável
- Os espectros são filtrados por intensidade de sinal e selecionados por:
 - Ruído do espectro
 - Impurezas químicas
 - Parâmetros do instrumento ajustados incorretamente

Conclua seu fluxo de trabalho de análise da água com as soluções de ponta da Agilent

- **O software MassHunter de aquisição e análise de dados** permite que você implemente rapidamente métodos de screening de alta qualidade que podem ser modificados para atender suas futuras necessidades. Também é possível personalizar sua PCDL.
- **O sistema LC Agilent 1290 Infinity II** proporciona maior resolução cromatográfica e tempos de análise reduzidos, fornecendo os dados de alta qualidade que você precisa em aplicações de screening sensíveis e reproduzíveis. Além disso, a fonte de íons eletrospray Agilent Jet Stream reduz significativamente os limites de detecção para contaminantes emergentes em água.
- **Os sistemas LC/MS TOF e Q-TOF Agilent** oferecem exatidão de massa MS e MS/MS confiável. A capacidade total de varredura do All Ions MS/MS permite que você acesse todos os dados, sempre, de modo que possa examinar grandes números de analitos suspeitos e contaminantes desconhecidos.
- **Consultoria de aplicação** além de um grande portfólio de produtos para o preparo de amostras, fases de coluna de LC e outros consumíveis aumentam a produtividade e ajudam *você* a focar no que faz melhor.



Informações sobre pedidos:

Banco de dados e Bibliotecas de Compostos Pessoais Agilent para screening na água (G6882CA)

Os seguintes itens são necessários, mas não estão incluídos com a PCDL para screening na água:

- Sistemas LC/MS TOF Agilent 6200 Series ou Q-TOF 6500 Series
- Software de aquisição Agilent MassHunter B.05 (ou superior) e Windows 7 (64 bits)
- Software de análise qualitativa Agilent MassHunter B.07 (ou superior)
- Software de análise quantitativa Agilent MassHunter B.07 (ou superior)

Para obter mais informações sobre a PCDL Agilent para screening na água, acesse

www.agilent.com/chem/waterscreening

Coloque o seu laboratório nos trilhos da produtividade.

Entre em contato com seu representante local Agilent ou com o distribuidor autorizado Agilent em www.agilent.com/chem/contactus

Ou ligue para **0800-728-1405**
(no Brasil)

Acesse www.agilent.com/chem/ms para obter uma descrição dos Analisadores e Kits de aplicação disponíveis

Os produtos Agilent são exclusivos para pesquisas. Não devem ser usados em procedimentos de diagnóstico. As informações, descrições e especificações presentes nesta publicação estão sujeitas a mudanças sem aviso prévio.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Publicado nos EUA, 2 de fevereiro de 2016
5991-6536PTBR

