

# УПРОЩЕННЫЙ СКРИНИНГ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ВОДЕ

The Measure of Confidence



Персональная база данных и библиотека соединений для скрининга воды методом ЖХ-МС от Agilent

## Надежное выполнение направленного скрининга и скрининга предполагаемых примесей на основании точных масс

В последнее время продолжает увеличиваться потребность в методах исчерпывающего скрининга воды, вызванная принятием новых нормативных актов и растущей обеспокоенностью по поводу таких приобретающих значение загрязняющих веществ, как фармацевтические препараты и продукты личной гигиены.

Системы ЖХ-МС с времяпролетным или тандемным квадрупольно-времяпролетным масс-спектрометром в сочетании с новой персональной базой данных и библиотекой соединений для скрининга воды от Agilent (PCDL) обеспечивают скрининг более чем 1 400 загрязнителей в воде с надежной идентификацией на основании данных тандемной масс-спектрометрии (МС-МС) с точным определением масс.

Дополнительным преимуществом является возможность выполнения ретроспективного анализа. Сбор данных по методике «All Ions MS/MS» позволяет проводить определение ионов-предшественников и фрагментных ионов для практически неограниченного количества соединений. Это означает, что в любой момент времени можно провести новый анализ полученных данных, в том числе с привлечением баз и библиотек, чтобы исследовать пробы на предмет присутствия новых приобретающих значимость загрязнителей без повторного приборного анализа.



## Персональная база данных PCDL включает следующие компоненты, позволяющие экономить время и повышать качество работы:

- Редактируемая экспертами база данных точных масс для более чем 1 400 соединений
- Система пользовательских записей с возможностью поиска, содержащих метки классов соединений и нормативных актов
- Китайские названия более чем 500 соединений и японские названия более чем 250 соединений
- Спектры МС-МС с точно определенными массами для более чем 1 000 соединений
- Краткое руководство с примерами данных и ознакомительными упражнениями
- Методическая информация с подробными сведениями о методиках ЖХ-МС
- Последняя версия программного обеспечения PCDL Manager



**Agilent Technologies**

## Рабочие процессы направленного скрининга и скрининга предполагаемых примесей с использованием персональной базы данных PCDL

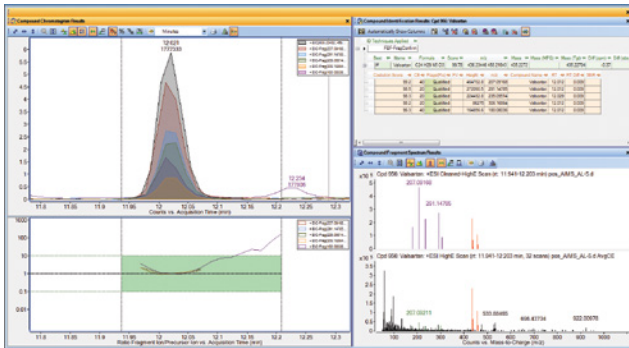
Преимущества совместного применения персональной базы данных и библиотеки для скрининга воды от Agilent (PCDL) и систем ЖХ-МС с времяпролетными и tandemными квадрупольно-времяпролетными масс-спектрометрами, предоставляющими возможность точного определения масс:

- Ненаправленный сбор данных во всем масс-спектральном диапазоне с использованием режима «All Ions MS/MS» и идентификация соединений по точной массе, времени удерживания, изотопному распределению и на основании сопоставления спектров фрагментных ионов
- Выполнение предварительного сопоставления полученного спектра с библиотечными спектрами без необходимости в поиске стандартов
- Создание пользовательской персональной базы данных PCDL для более направленного скрининга
- Создание перечня предполагаемых веществ с использованием данных МС и алгоритма поиска по формуле, последующее подтверждение присутствия загрязнителя и исключение ложноположительных результатов посредством направленного анализа методом МС-МС и поиска по библиотеке

- Интеллектуальный анализ результатов экспериментов в режиме «Auto MS/MS» с использованием алгоритма выделения совокупностей данных для отдельных соединений “Molecular Feature Extraction” и поиск предполагаемых соединений по персональной базе данных PCDL
- Создание пользовательских баз данных PCDL для конкретных аналитических нужд путем добавления собственных уникальных соединений и библиотечных спектров
- Выполнение ретроспективного анализа данных по соединениям, недавно добавленным в персональную базу данных PCDL, без необходимости повторного приборного анализа

Новая персональная база данных PCDL для скрининга воды упрощает идентификацию соединения и анализ данных — даже для лабораторий с большим проботоком — и позволяет выполнять по-настоящему исчерпывающий скрининг неограниченного количества соединений.

### Простота интеллектуального анализа данных и однозначная идентификация с помощью ПО All Ions

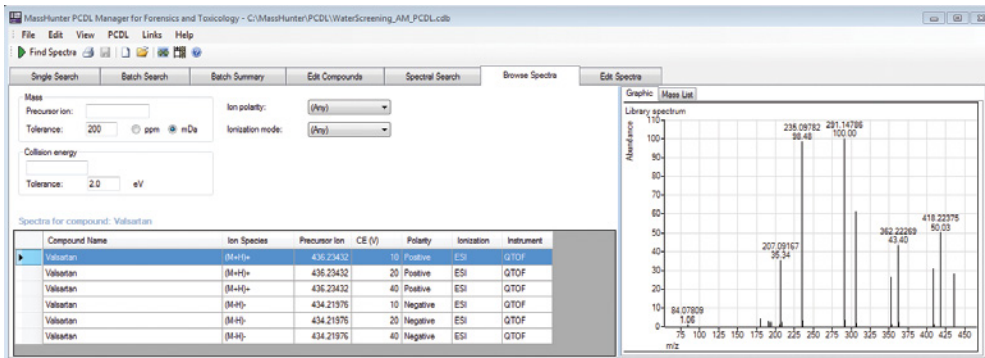


### Подтверждение соединения по совпадениям с данными библиотеки с помощью экспериментов в режиме «Auto MS/MS»



**Вверху** — спектр в режиме «Auto MS/MS»  
**Посередине** — зеркальный спектр «эксперимент/данные библиотеки»  
**Внизу** — библиотечный спектр

### Управляющее программное обеспечение PCDL Manager обеспечивает простое управление базой данных и библиотекой



## Защита систем водоснабжения и обеспечение соответствия стандартам

Персональная база данных PCDL для скрининга воды от Agilent обеспечивает соответствие строгим требованиям международных организаций по стандартизации. Она включает более 1 400 соединений, в том числе и указанные в следующих стандартах и перечнях:

### Стандарты ЕС

Вещества, требующие первоочередных мер согласно Рамочной директиве ЕС по водной среде

### Стандарты США

Методики 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 и предварительный список потенциальных загрязняющих веществ Draft CCL4 Агентства по охране окружающей среды США (EPA)

### Китайские стандарты и перечни

- перечень скрининга CN-EPA
- методики 193, 235, 265, 560 CN-NY
- обзорный перечень CN-CDC
- перечень антибиотиков CN
- перечень CN-GB 2763-2014

### Японские стандарты и перечни

- разрешенные к применению в Японии
- JDWQS

### Доступные метки классов

фармацевтические препараты и продукты личной гигиены, пестициды, ветеринарные препараты, лекарственные средства, полярные метаболиты, цианотоксины, а также метки классов для всех стандартов и перечней, приведенных выше

## Регулярное редактирование экспертами базы данных и библиотеки обеспечивает высочайшее качество данных

### Элементы каждой редактируемой экспертами записи в базе данных:

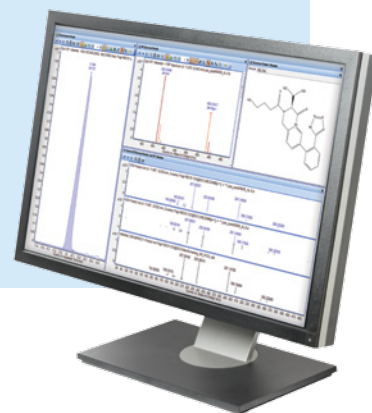
- Тривиальное название соединения
- Точная масса нейтральной молекулы
- Название по ИЮПАК
- Молекулярная формула
- Молекулярная структура
- Тип иона (анион, катион или нейтральная молекула)
- Номер CAS или ссылка на базу данных PubChem (при наличии)
- Идентификационный номер в базе данных ChemSpider с гиперссылкой (при наличии)

### Редактируемая экспертами библиотека масс-спектров с точно определенными массами:

- Все пики ионов-предшественников и дочерних ионов скорректированы к теоретически рассчитанным точным массам
- Спектры получены при энергии соударений 10, 20 и 40 эВ
- Спектры измеряются в режиме регистрации положительных и (или) отрицательных ионов (если применимо)
- Спектры фильтруются по интенсивности сигнала и отбираются с учетом следующих особенностей:
  - Спектральный шум
  - Химические примеси
  - Неправильно заданные параметры оборудования

## Комплексный анализ воды с передовыми решениями от Agilent

- **Программное обеспечение MassHunter для сбора и обработки данных** позволяет быстро внедрить высокоэффективные методики скрининга, которые можно модифицировать в соответствии с возникающими потребностями. Также имеется возможность пользовательской настройки ваших персональных баз данных PCDL.
- **Система ВЭЖХ Agilent 1290 Infinity II** обеспечивает непревзойденное хроматографическое разрешение, ускорение анализа и получение высококачественных данных, необходимых для чувствительного и воспроизводимого скрининга. Кроме того, ионный источник для ионизации распылением в электрическом поле с технологией термоградиентной фокусировки Agilent Jet Stream существенно снижает пределы обнаружения приобретающих значимость загрязнителей, присутствующих в воде.
- **Системы ЖХ-МС от Agilent с времяпролетными и tandemными квадрупольно-времяпролетными масс-спектрометрами** обеспечивают точность определения массы в обычных и tandemных масс-спектральных измерениях. Возможность полного сканирования в режиме «All Ions MS/MS» предоставляет неограниченный доступ ко всем данным в любое время, что позволяет выполнять скрининг большого количества предполагаемых аналитов и неизвестных загрязнителей.
- **Лучшие в своем классе консультации по различным применениям** в сочетании с обширным ассортиментом продукции для пробоподготовки, привитых фаз для колонок для ЖХ и других расходных компонентов повышают производительность и позволяют сосредоточиться на работе.



## Сведения о порядке заказа

### Персональная база данных и библиотека для скрининга воды от Agilent (G6882CA)

Необходимы следующие компоненты, не включенные в состав персональной библиотеки для скрининга воды:

- Система ЖХ-МС Agilent 6200 с времяпролетным масс-спектрометром или система ЖХ-МС Agilent 6500 с tandemным квадрупольно-времяпролетным масс-спектрометром
- Программное обеспечение для сбора данных Agilent MassHunter Acquisition версии B.05 (или выше) и 64-разрядная Windows 7
- Программное обеспечение для качественного анализа Agilent MassHunter Qualitative Analysis версии B.07 Sp1 (или выше)
- Программное обеспечение для количественного анализа Agilent MassHunter Quantitative Analysis версии B.07 (или выше)

Подробнее о персональной базе данных и библиотеке для скрининга воды от Agilent (PCDL) можно узнать на сайте [www.agilent.com/chem/waterscreening](http://www.agilent.com/chem/waterscreening)

## Скоростной и высокопроизводительный анализ в вашей лаборатории.

Свяжитесь с региональным представителем Agilent или уполномоченным дистрибьютором Agilent:  
[www.agilent.com/chem/contactus](http://www.agilent.com/chem/contactus)

Телефон: **+7 495 664 73 00**  
(Российская Федерация)

Описание доступных специализированных анализаторов и вспомогательных наборов для различных применений:  
[www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms)

Продукция Agilent предназначена только для исследовательских целей.  
Не для использования в диагностических процедурах.  
Информация, описания и спецификации в настоящем документе могут быть изменены без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2016  
Издано в США 2 февраля 2016 г.  
5991-6536RU

