

SEMPLIFICA LO SCREENING DEI CONTAMINANTI NELLE ACQUE

The Measure of Confidence



Database e libreria personale di composti LC/MS Agilent per lo screening delle acque

Effettua screening affidabili delle sostanze target e sospette usando la massa accurata

La domanda di metodi completi per lo screening delle acque è in continua crescita, sospinta dai nuovi regolamenti e dal crescente interesse per i nuovi contaminanti che destano preoccupazione, come i prodotti farmaceutici e per la cura della persona (PPCP).

Utilizzando spettri MS/MS in massa accurata, grazie alla combinazione di strumenti LC/MS TOF o Q-TOF con il NUOVO database e libreria personale di composti (PCDL) Agilent per lo screening delle acque, è possibile effettuare lo screening di oltre 1.200 contaminanti nelle acque con una grande affidabilità di identificazione.

L'analisi retrospettiva è un vantaggio aggiuntivo, visto che l'acquisizione MS/MS All Ions permette di misurare gli ioni precursori e i frammenti di un numero praticamente illimitato di composti. Questo comporta la possibilità di rianalizzare o estrarre i dati in qualsiasi momento, senza ripetere le analisi, per valutare la presenza di nuovi contaminanti emergenti all'interno dei campioni.

PCDL comprende i seguenti componenti, che permettono di risparmiare tempo e ottimizzare le prestazioni:

- Database in massa accurata contenente oltre 1.200 composti e relative note.
- Note utente consultabili tramite ricerca, che riportano la classe del composto e le etichette di regolamentazione, nonché i nomi cinesi di oltre 400 composti.
- Spettri MS/MS in massa accurata per più di 800 composti.
- Guida di avvio rapido con esempi di dati ed esercizi per la familiarizzazione.
- Nota applicativa con informazioni dettagliate sul metodo LC/MS.
- Versione più recente del software PCDL Manager.



Agilent Technologies

Flusso di lavoro per lo screening di sostanze target e sospette con PCDL

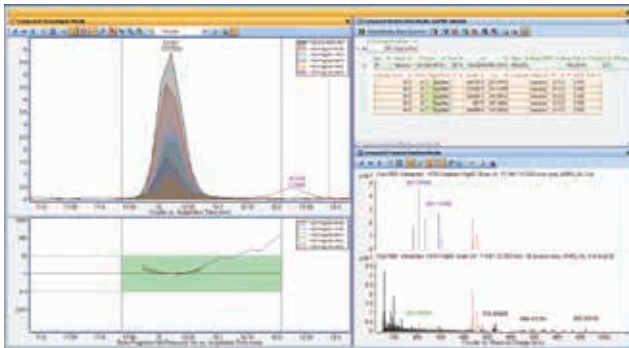
PCDL Agilent per lo screening delle acque, combinato con le capacità di massa accurata degli strumenti LC/TOF e Q-TOF, permette di:

- Acquisire dati non target, relativi agli spettri completi, utilizzando la tecnica MS/MS All Ions e identificare i composti tramite la massa accurata, il tempo di ritenzione, il pattern isotopico e la conferma dei frammenti.
- Confrontare gli spettri acquisiti e gli spettri della libreria sulla base della corrispondenza presunta, senza necessità di fare ricorso a standard.
- Creare un PCDL personalizzato per un approccio allo screening più mirato.
- Proporre un elenco di sostanze sospette con i dati MS e l'algoritmo "Find by Formula", quindi confermare la presenza del contaminante ed eliminare i falsi positivi tramite MS/MS target e ricerca in libreria.

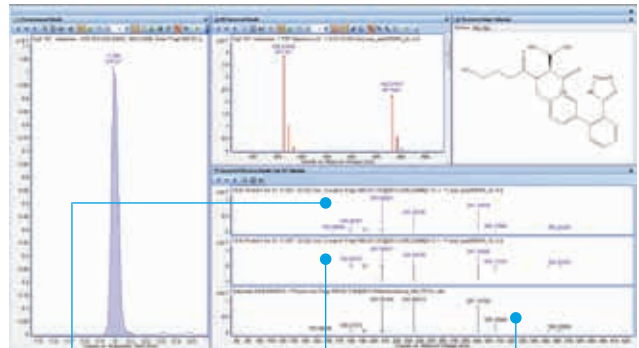
- Estrarre dati dagli esperimenti di spettrometria MS/MS automatizzata usando l'opzione "Molecular Feature Extraction", e confrontare i composti proposti con PCDL.
- Aggiungere spettri personalizzati di composti e della libreria per creare PCDL specifici per le proprie analisi.
- Effettuare analisi retrospettive dei dati con composti appena aggiunti a PCDL senza necessità di ripetere le analisi dei campioni.

Il NUOVO PCDL per lo screening delle acque facilita, anche per laboratori con alto carico di lavoro, la conferma dei composti e la ricerca dei dati, permettendo uno screening veramente completo di un numero illimitato di composti.

Semplice ricerca dei dati e identificazione sicura con il software All Ions



Conferma i composti tramite il confronto con la libreria, usando l'analisi MS/MS automatizzata

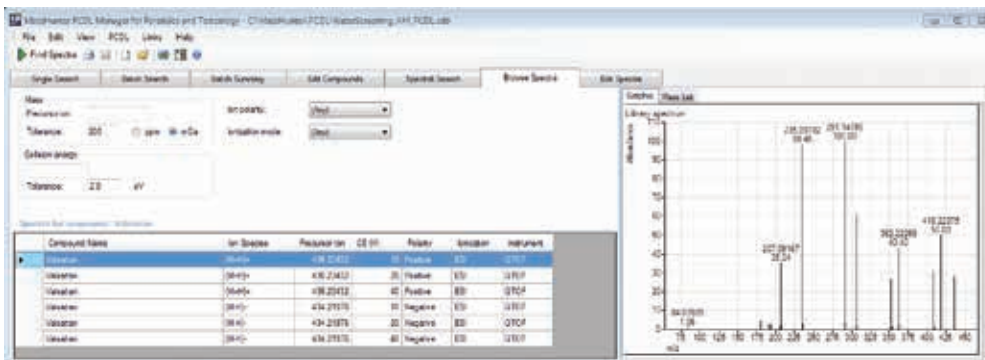


In alto:
Spettro MS/MS
automatizzato

Al centro:
Spettro speculare

In basso:
Spettro della libreria

Il software PCDL Manager permette una facile gestione del database e della libreria



Proteggi le risorse idriche e rispetta gli standard normativi

PCDL Agilent per lo screening delle acque può aiutarti a soddisfare i rigidi requisiti normativi stabiliti dalle agenzie di controllo a livello globale. Comprende oltre 1.200 composti, inclusi quelli specificati dai seguenti regolamenti ed elenchi:

Regolamenti UE

Composti prioritari della direttiva quadro sulle acque dell'Unione europea

Regolamenti USA

Draft CCL4 e metodi 521, 535, 539, 1694, 1698, 1699 dell'Agenzia per la protezione ambientale (EPA)

Regolamenti ed elenchi cinesi

- elenco di screening dell'EPA cinese
- metodi 193, 235, 265, 560 dell'NY cinese
- elenco di controllo del CDC cinese
- elenco cinese degli antibiotici

Regolamenti ed elenchi giapponesi

- elenco positivo giapponese
- JDWQS

Etichette di classificazione disponibili

PPCP, pesticidi, farmaci veterinari, farmaci per uso umano, metaboliti polari, cianotossine ed etichette di classificazione per tutti i regolamenti ed elenchi menzionati sopra

La cura del database e della libreria garantisce la massima qualità dei dati

Ogni voce "curata" del database include:

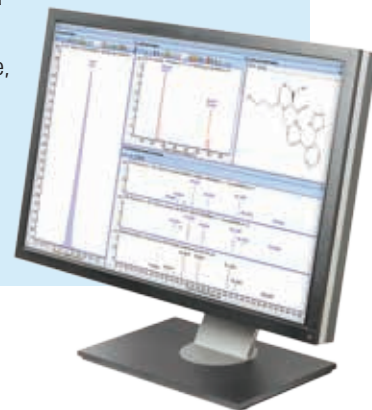
- nome comune del composto
- massa accurata della molecola neutra
- nome IUPAC
- formula molecolare
- struttura molecolare
- tipo di ione (anione, catione o neutro)
- numero CAS/link a PubChem (se esistente)
- ID ChemSpider e relativo link (se esistente)

Cura della libreria di spettri in massa accurata:

- tutti i picchi degli ioni precursore e prodotto corretti per la massa accurata teorica
- spettri acquisiti con una energia di collisione di 10, 20 e 40 eV
- spettri misurati in ionizzazione positiva e/o negativa, laddove possibile
- spettri filtrati per intensità del segnale e corretti per:
 - rumore spettrale
 - impurezze chimiche
 - parametri strumentali impostati in maniera errata

Completa il tuo flusso di lavoro dell'analisi delle acque con le soluzioni all'avanguardia di Agilent

- **Il software di acquisizione ed analisi dei dati MassHunter** ti permette di implementare rapidamente metodi di screening di alta qualità, modificabili in modo da soddisfare le tue esigenze future. Puoi anche personalizzare il tuo PCDL.
- **Il sistema LC Agilent 1290 Infinity II** offre una risoluzione cromatografica impareggiabile e tempi di analisi ridotti, producendo i dati di qualità elevata necessari per applicazioni di screening sensibili e riproducibili. Inoltre, la sorgente ionica elettrospray Jet Stream di Agilent riduce drasticamente i limiti di rivelazione in acqua per i contaminanti emergenti.
- **I sistemi LC/MS TOF e Q-TOF di Agilent** garantiscono un'accuratezza di massa di grande affidabilità per le analisi MS e MS/MS. La capacità di scansione completa della tecnologia MS/MS All Ions permette di accedere a tutti i dati in qualsiasi momento, rendendo possibile lo screening di una grande varietà di analiti sospetti e contaminanti incogniti.
- **Il migliore servizio di consulenza sull'applicazione del settore**, associato a una vasta scelta di prodotti per la preparazione del campione, fasi per colonne LC e altri prodotti di consumo migliora la produttività e ti aiuta a concentrarti su quello che sai fare meglio.



Informazioni per gli ordini:

Database e libreria personale di composti (PCDL) Agilent per lo screening delle acque (G6882CA)

Per il PCDL per lo screening delle acque sono richiesti i seguenti elementi (non inclusi):

- Sistemi LC/MS TOF serie 6200 o Q-TOF serie 6500 Agilent
- Software di acquisizione MassHunter Agilent B.05 (o superiore) e Windows 7 (64-Bit)
- Software di analisi qualitativa MassHunter Agilent B.07 (o superiore)
- Software di analisi quantitativa MassHunter Agilent B.07 (o superiore)

Per maggiori informazioni su PCDL Agilent per lo screening delle acque, visita il sito

www.agilent.com/chem/waterscreening

Fai entrare il tuo laboratorio nella corsia preferenziale della produttività.

Contatta il rappresentante Agilent della tua zona o il rivenditore autorizzato Agilent alla pagina www.agilent.com/chem/contactus

In alternativa, chiama il numero verde per l'Italia **800 012 575**

Visita il sito www.agilent.com/chem/ms per una descrizione degli analizzatori e dei kit applicativi disponibili

I prodotti Agilent sono utilizzabili unicamente a scopo di ricerca.
Non utilizzabili per procedure diagnostiche.
Le informazioni, le descrizioni e le specifiche fornite possono variare senza preavviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2015
Pubblicato negli Stati Uniti, 17 dicembre 2015
5991-65361TE

