

Identificación, cuantificación y simplificación: una visión global.

Sistema GC/Q-TOF Agilent 7250



¿Preparado para obtener aún más?

Conocer qué componentes contiene una muestra y en qué concentraciones, le ayudará a sacar las conclusiones y a realizar los avances de los que depende su organización.

El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 todo en uno, junto con el completo software Agilent MassHunter, le proporciona respuestas oportunas y fiables en sus aplicaciones de GC/MS más complejas. Es un instrumento de excepcional calidad para dar respuesta a cualquier desafío de identificación, cuantificación o exploración asociado a la GC/MS:

- realización de estudios de metabolómica avanzados
- cribado de pesticidas en matrices complejas
- identificación de compuestos en distintas matrices
- Análisis de niveles de contaminantes en materias primas de procesos químicos.

El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250, diseñado para conseguir un excelente rendimiento y mejorar la robustez de las pruebas de laboratorio, le proporciona lo que su organización necesita: resultados excelentes en todo momento.



Fiabilidad extraordinaria, tanto para flujos de trabajo de cribado de rutina como para realizar descubrimientos revolucionarios

El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 le ofrece más:

- Detección de alta sensibilidad
- Cuantificación precisa
- Capacidad de explorar
- Espectros simplificados
- Datos reproducibles
- Intervalo dinámico

Para que tenga que preocuparse menos por:

- La normativa futura
- La incertidumbre de los resultados
- Las especies verdaderamente desconocidas
- El tiempo de interpretación de los datos
- La ambigüedad en las réplicas
- Los falsos negativos y los falsos positivos

Los crecientes desafíos analíticos demandan nuevos métodos y planteamientos innovadores

Desde hace más de 40 años, las innovaciones de Agilent ayudan a diversos laboratorios a satisfacer la demanda de análisis cada vez más detallados. El sistema 7250 es nuestro sistema GC/Q-TOF más avanzado, y está diseñado para ofrecer un rendimiento y una robustez de las pruebas de laboratorio excepcionales.



¿Necesita una identificación más segura?

«Los instrumentos de Agilent son muy útiles para nuestro laboratorio por tres motivos: son fiables, precisos y fáciles de usar».

– **Dr. Mike Thurman**

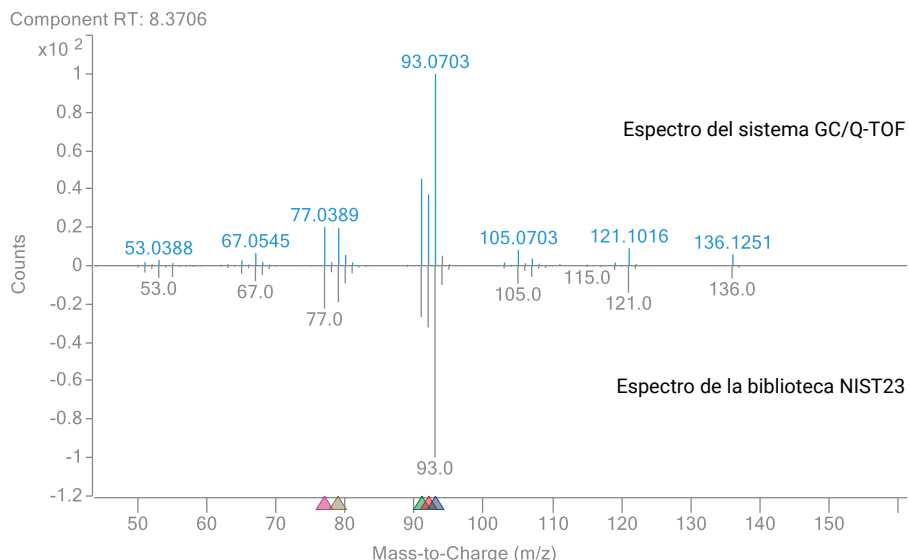
Centro de Espectrometría de Masas Aplicada a Análisis Medioambientales, Universidad de Colorado

No tener una visión global puede acarrear graves implicaciones para sus actividades de investigación, desarrollo y control de calidad. La destreza analítica del sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 y del software MassHunter le ofrecen una capacidad de identificación de compuestos inigualable.

- **Conozca sus compuestos.** Los espectros sin distorsiones, con calidad de biblioteca, le permiten una identificación fiable de los compuestos mediante su comparación con bibliotecas comerciales.
- **Confirme las fórmulas.** La fidelidad isotópica mejora la seguridad a la hora de asignar fórmulas moleculares.
- **Detecte trazas de analitos.** Garantice un amplio intervalo dinámico dentro del espectro aunque exista una coelución abundante.
- **Identifique estructuras.** Las medidas de alta resolución mediante MS/MS y el espectro de iones producto con masa exacta pueden proporcionar información sobre la estructura, mejorar la selectividad y evitar las interferencias de la matriz.

Confianza en los aciertos de la biblioteca gracias a la fidelidad espectral y la masa exacta

Podrá identificar fácilmente compuestos mediante búsquedas en bibliotecas comerciales de espectros. El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 respalda la calidad de cientos de miles de espectros de las bibliotecas de compuestos, la mayoría de los cuales se obtuvieron con nuestros sistemas de GC/MS Agilent de cuadrupolo. Los perfiles de fragmentación EI fieles a las bibliotecas, junto con la información de la masa exacta, convierten al sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 en una plataforma ideal para la identificación de compuestos mediante bibliotecas EI.



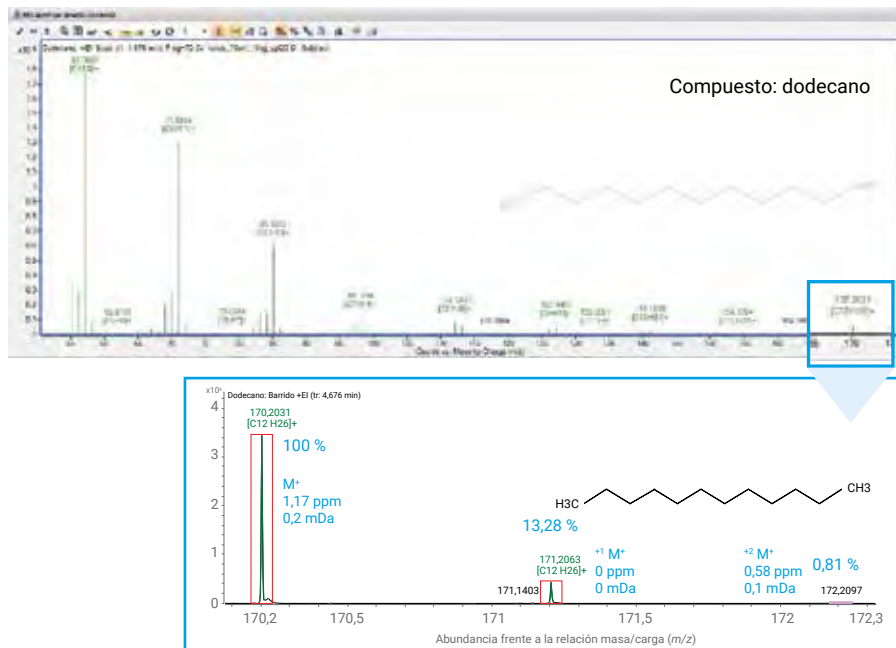
α -Pino en suelo. Puntuación de coincidencia de la biblioteca: 95,8

Component RT	Compound Name	Match Factor	Best Hit	Formula	Component RI	Library RI	Delta RI
8.3706	(1R)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]	95.8	<input checked="" type="checkbox"/>	C ₁₀ H ₁₆	932	932	0

Fidelidad isotópica

La fiabilidad de la identificación de compuestos precisa algo más que una buena exactitud de masa. También es necesario considerar las características independientes del compuesto, como la coincidencia de patrón isotópico.

Puede imaginar fácilmente la fidelidad isotópica gracias al análisis cualitativo de MassHunter. Este le permite identificar compuestos basándose en características complementarias a las determinaciones de la masa con exactitud. El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 ofrece una fidelidad isotópica excelente incluso para isótopos a nivel de trazas, tal como puede observarse en este espectro del dodecano con un grupo de picos de iones moleculares (M^+) de baja abundancia.

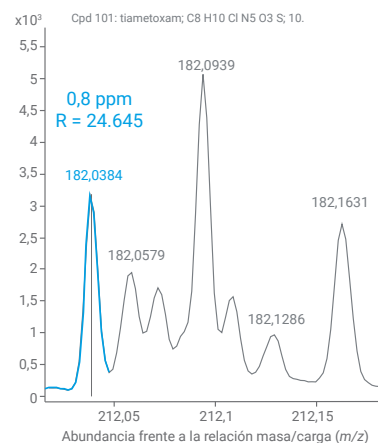
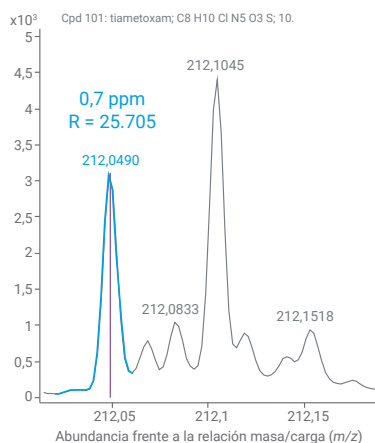


Alta resolución y exactitud de masa para pesticidas

Es necesario disponer de una alta resolución para poder separar los analitos de las interferencias. Sin embargo, al analizar en matrices complejas componentes a nivel de trazas, también deben mantenerse otras características de rendimiento, como un amplio intervalo dinámico y una alta sensibilidad.

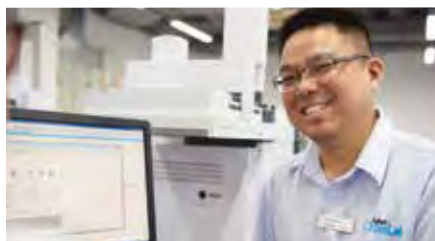
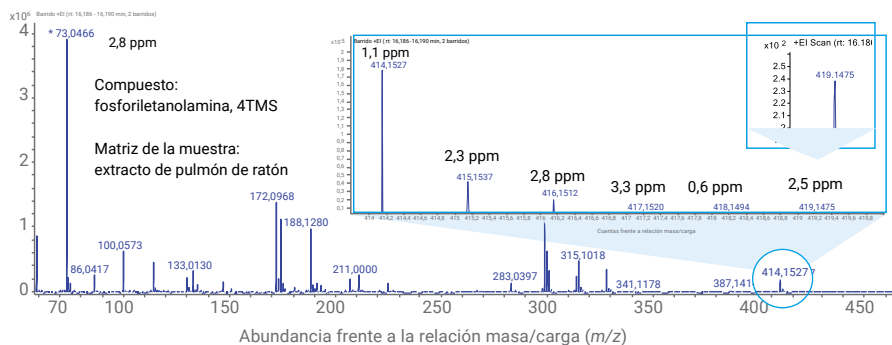
El ejemplo que se muestra es uno de esos casos: el análisis de tiامتoxam, un insecticida con una concentración de 5 partes por billón en aguacate, una matriz compleja con importante ruido de fondo. Incluso en esas condiciones, los picos de masa característicos aparecen separados del ruido de fondo con una exactitud de masa que cumple los requisitos de las directrices de la UE SANTE/11945/2015.

Además, este nivel de prestaciones analíticas espectrales puede conseguirse independientemente de la velocidad de adquisición o del rango de masas.



Amplio intervalo dinámico en matrices complejas

El amplio intervalo dinámico dentro del espectro posibilita una detección fiable de analitos a nivel de trazas en presencia de mucho ruido de fondo o especies coeluyentes. Normalmente, el sistema 7250 ofrece cuatro órdenes de magnitud para el intervalo dinámico dentro del espectro, incluso en matrices complejas. Este ejemplo muestra un rango >16.000:1 para la fosforiletanolamina (4TMS) en una muestra biológica compleja de extracto de pulmón de ratón.

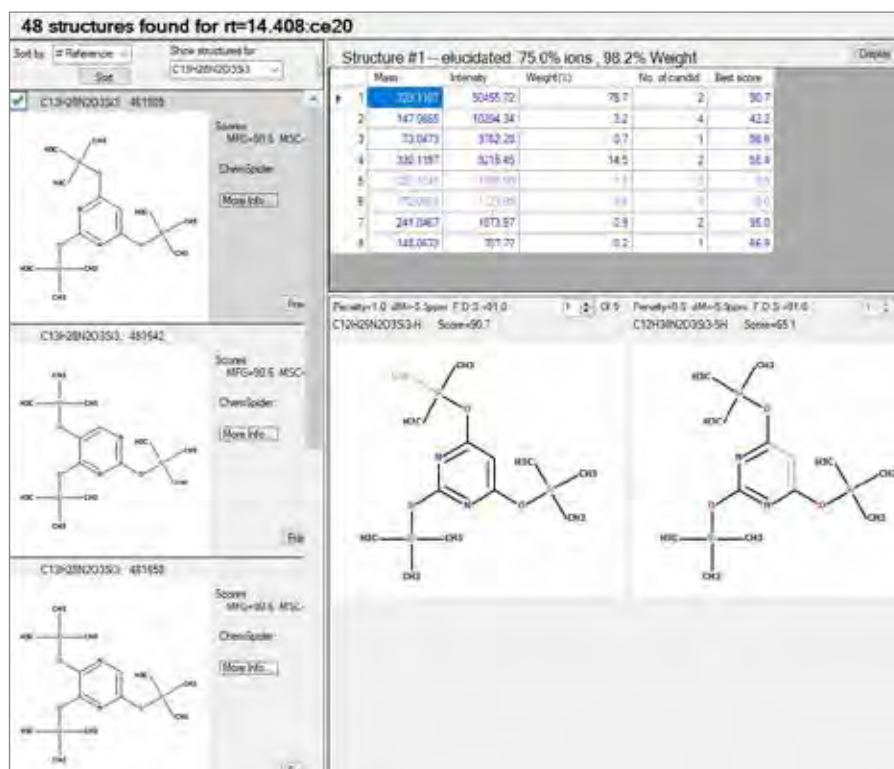
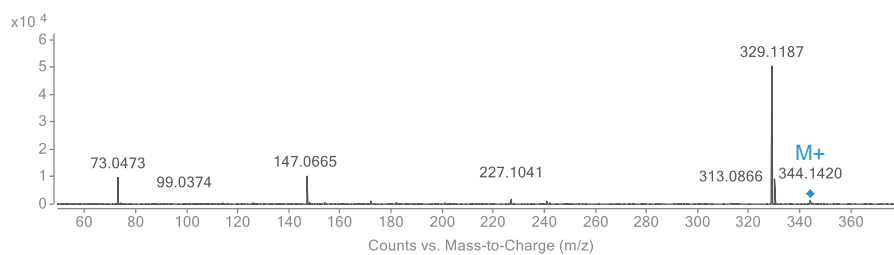


La promesa de valor Agilent

Le garantizamos al menos 10 años de uso del instrumento desde la fecha de compra. De lo contrario, le abonaremos el valor residual del sistema a la hora de adquirir un modelo mejorado.

Elucidación de estructuras químicas y con mayor detalle

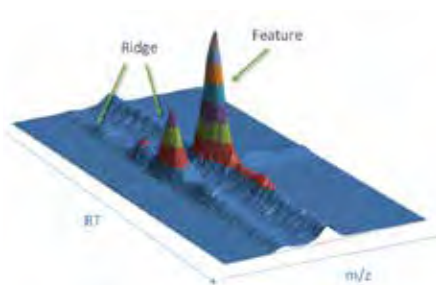
El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 es el único sistema TOF de masa exacta con capacidades MS/MS. Con el uso de los espectros de iones producto generados por MS/MS a partir de un posible ion molecular, el software Molecular Structure Correlator puede proponer posibilidades y probabilidades en relación con la estructura de los compuestos a partir de los datos de los fragmentos.



Permite analizar los compuestos con identidades o estructuras desconocidas para acotar el intervalo de posibilidades.



¿Busca mejores respuestas cuantitativas y cualitativas?



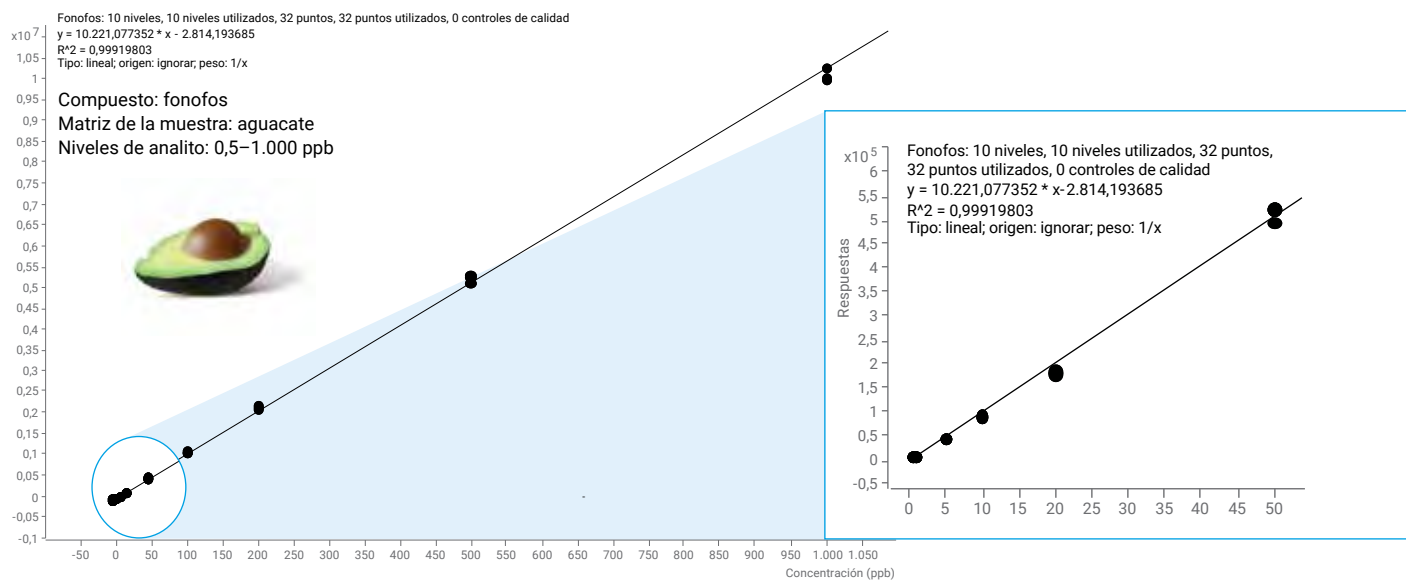
El algoritmo SureMass de Agilent MassHunter para detectar características químicas está diseñado específicamente para datos de perfil MS de alta resolución.

La cuantificación selectiva y la adquisición no selectiva constituyen una potente combinación. El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 ofrece una precisión cuantitativa sin igual con una resolución simultánea de masas elevada y un intervalo dinámico amplio. Además, la electrónica de última generación permite una amplia linealidad y respuestas consistentes incluso para trazas de analitos en matrices complejas.

SureMass, un exclusivo algoritmo de procesamiento de señales optimizado para datos de masa exacta de alta resolución, aumenta aún más el intervalo dinámico lineal. También ayuda a conseguir una exactitud de masa superior al tiempo que proporciona una alta velocidad y sensibilidad de deconvolución cromatográfica para análisis no selectivos.

Cuantificación precisa en una matriz compleja

El amplio rango dinámico lineal proporciona resultados cuantitativos precisos para concentraciones variadas. Los factores de respuesta se mantienen incluso para concentraciones bajas en muestras complejas, como se muestra en esta curva de calibración para fonofos en concentraciones entre 0,5 y 1.000 partes por billón en una matriz de aguacate.



Identificación de compuestos más sencilla con técnicas alternativas de ionización de baja energía

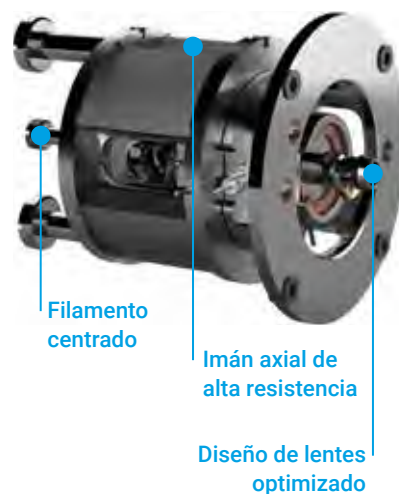
Con el sistema 7250, el único sistema GC/Q-TOF de alta resolución del mundo, podrá aplicar flujos de trabajo que hasta ahora resultaban poco prácticos o sencillamente imposibles. Este sistema permite crear espectros simplificados que no dependen de técnicas especiales y al mismo tiempo conserva la aplicabilidad universal de la ionización por impacto electrónico (EI).

La fuente de EI de baja energía 7250 se basa en la fuente de alta eficiencia (HES) probada en los sistemas de GC/MSD Agilent 5977 y de GC/TQ Agilent 7010. Está optimizada para el funcionamiento en EI de baja energía pero, aun así, ofrece unos resultados excelentes con una ionización convencional a 70 eV. Además, las modificaciones realizadas en el diseño de HES amplifican la sensibilidad analítica de la ionización por impacto electrónico de baja energía para conseguir un cambio de paradigma en la ionización de baja energía para GC/MS.

Combinadas con fuentes de ionización química intercambiables que permiten tanto PCI como NCI, las opciones de ionización de baja energía del sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 simplifican sus análisis más complejos.

- **Identifique con confianza.** Obtenga información sobre iones moleculares para la elucidación estructural posterior.
- **Extienda sus límites.** Ionice a través de las clases de analitos mientras evita las importantes pérdidas de sensibilidad analítica comunes con otras técnicas de ionización de baja energía.
- **Mejore la eficiencia.** Aproveche el rendimiento comprobado de la tecnología de fuente de iones del líder mundial en el campo de la GC/MS.

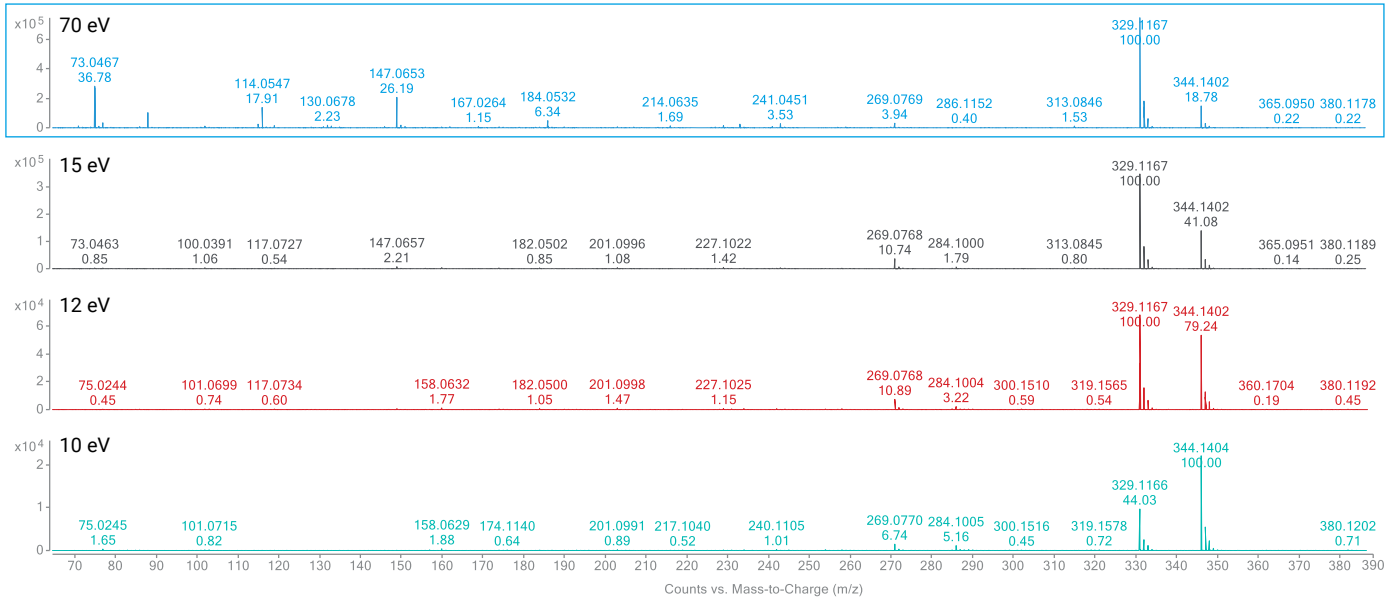
La fuente 7250 de EI de baja energía



Identificación de los metabolitos en las matrices más complejas

La reducción de la energía de ionización de la fuente crea un desplazamiento del espectro hacia el ion molecular. En este caso, una menor energía del electrón corresponde a una mayor abundancia relativa del ion molecular de este compuesto desconocido.

Identificación del ion molecular mediante baja energía del electrón



Protección de su reputación y la de sus clientes con la resolución de problemas reales

Los productores y consumidores de alimentos se enfrentan a amenazas tales como la adulteración alimentaria y el etiquetado fraudulento. Además, el comercio internacional, las exigentes normativas y la creciente concienciación pública impulsan la necesidad de realizar análisis alimentarios más frecuentes y detallados.

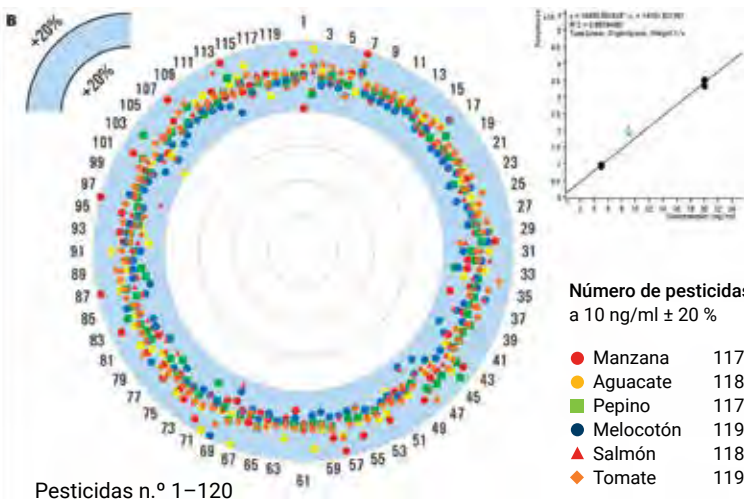
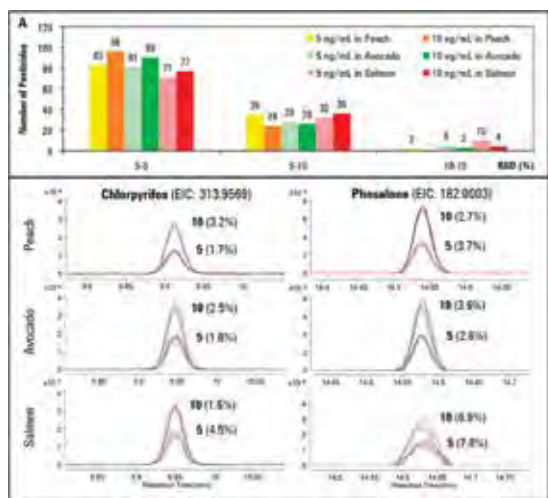
El sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 le ayudará a superar estos retos con una única plataforma optimizada. Los usos típicos del sistema GC/Q-TOF en el análisis alimentario incluyen:

- Cribado de compuestos sospechosos con cuantificación selectiva basada en el PCDL de pesticidas de masa exacta
- Cribado no selectivo mediante deconvolución SureMass y amplias bibliotecas de EI de masas unitarias como NIST
- Clasificación de alimentos para detectar fraudes



La importancia de la matriz

La adquisición no selectiva y las bibliotecas de espectros de masa exacta le permiten el cribado completo de pesticidas en matrices alimentarias.



120 pesticidas marcados en tres matrices alimentarias diferentes, incluidos el aguacate y el salmón. Los valores de reproducibilidad (% DER) para las concentraciones de marcado de 5 y 10 ng/ml confirman un rendimiento analítico excelente. También se muestran dos ejemplos de réplicas de iones característicos detectados.

Exactitud cuantitativa a 10 ng/ml. Se muestra una comparación rápida con los límites residuales máximos (MRL) para seis matrices alimentarias de distinta complejidad. Incluso en el caso de matrices complejas, como el aguacate y el salmón, la precisión cuantitativa cumple los requisitos de las directrices de la UE SANTE/11813/2017 para más del 97 % de las parejas pesticida-alimento analizadas.

Fácil reconocimiento de falsos positivos mediante el flujo de trabajo de cribado de compuestos sospechosos mediante GC/Q-TOF

Evalúe fácilmente lotes de muestras grandes para cientos de compuestos de interés y sospechosos con un único método de análisis. El software MassHunter proporciona mediciones cuantitativas simultáneas de los compuestos de interés. También le permite seleccionar bibliotecas espectrales de alta resolución para compuestos sospechosos sin referencia de calibración.

Cribado simultáneo de compuestos de interés y sospechosos utilizando una herramienta de análisis de datos



«El sistema de GC/MS Q-TOF nos permitió confirmar los resultados positivos, pero también evitar los falsos positivos».

– Dr. Peter Furst,
Departamento de Servicios Analíticos Centrales, Instituto de Análisis Químicos y Veterinarios de Münsterland-Emscher-Lippe

La capacidad de diferenciar los resultados verdaderos de las identificaciones falsas, incluso cuando no se analiza un patrón para compararlo, refleja la alta resolución y el rendimiento de masa exacta del sistema GC/Q-TOF Agilent 7250.

Cribado de contaminantes conocidos e identificación de compuestos desconocidos

Todos los días surgen nuevas preguntas acerca del impacto de la actividad humana sobre el medio ambiente y del impacto del medio ambiente sobre nosotros. Las revolucionarias mejoras tecnológicas del sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 se han diseñado para obtener estas respuestas útiles de forma sencilla y eficiente.

El uso de técnicas de MS de alta resolución (HRMS) de masa exacta para caracterizar contaminantes conocidos y desconocidos está ganando popularidad. Para lograr una alta sensibilidad, junto con un alcance ampliado del análisis, el sistema 7250 puede utilizarse en flujos de trabajo completos que incluyen:

- Cuantificación selectiva
- Cribado de compuestos sospechosos
- Cribado no selectivo de contaminantes

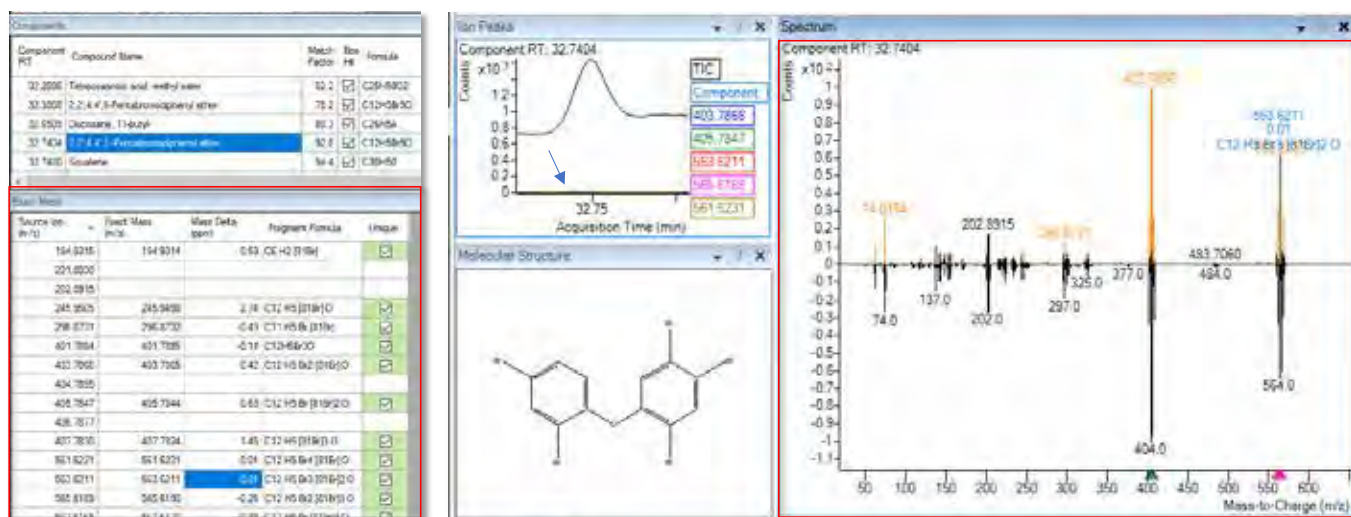
Además, el procesamiento retrospectivo le permite medir una vez y analizar repetidamente con datos de espectros completos, que podrá utilizar para detectar nuevos compuestos de interés en el futuro.



Fiabilidad de la identificación

El software MassHunter Unknowns Analysis, que utiliza la función SureMass de procesamiento de señales y la herramienta ExactMass, le ofrece una eficacia y una sensibilidad superiores a las técnicas de deconvolución convencionales. Incluso permite extraer e identificar componentes minoritarios en presencia de una señal dominante de ruido de fondo.

La función ExactMass anota los iones con fórmulas de fragmentos, lo que le permite identificar con seguridad los compuestos aunque se utilicen bibliotecas MS con espectros de masas nominales de sistemas de MS cuadrupolares.



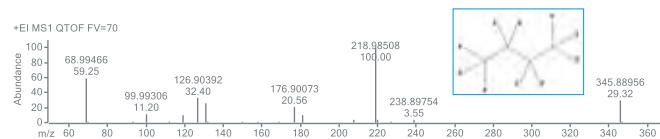
La herramienta ExactMass (rectángulos rojos) ayuda a proporcionar una confirmación adicional de los aciertos de la biblioteca de masa unitaria basada en la masa exacta. Los iones compuestos representativos se resaltan en el diagrama de espejo cuando m/z corresponde a la fórmula encontrada en la biblioteca. La flecha azul señala el componente deconvolucionado en la matriz del suelo.

Biblioteca de masa exacta para el análisis de PFAS en muestras medioambientales

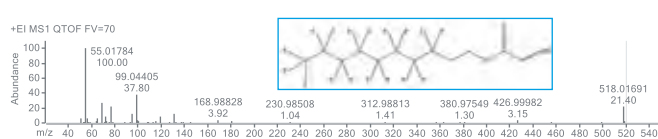
El desarrollo de bibliotecas de masa exacta en aplicaciones medioambientales es clave para ampliar el alcance de los compuestos controlados y permitir una detección fiable de compuestos de interés/sospechosos. También brinda la oportunidad de utilizar un enfoque de cribado de compuestos sospechosos que ofrece una mayor sensibilidad y flexibilidad en comparación con el cribado no selectivo.

Ejemplos de diferentes clases de compuestos PFAS de la PCDL PFAS

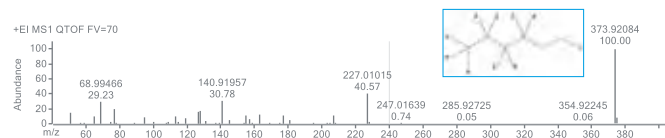
Nonafluoro-1-yodobutano (PFBI)



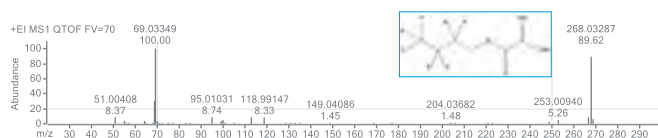
Acrilato de fluorotelómero 8:2 (FTAC 8:2)



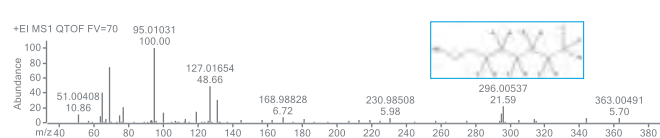
1,1,1,2,2,3,3,4,4-Nonafluoro-6-yodohexano (FTI 6:2)



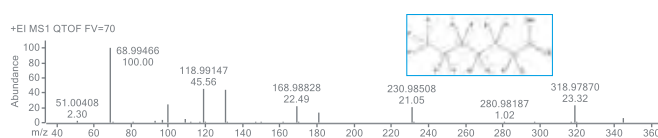
Metacrilato de 2,2,3,3,4,4,4-heptafluorobutilo (FTMAC 3:1)



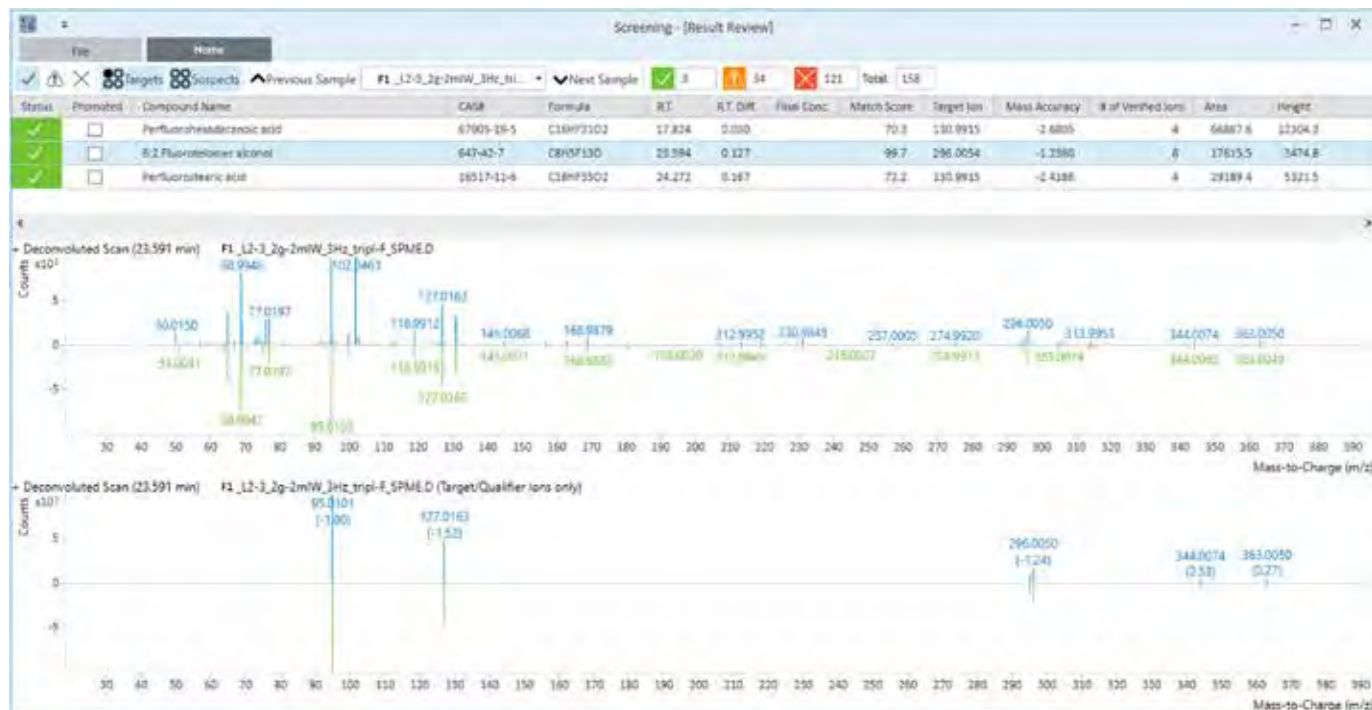
Alcohol fluorotelómero 6:2 (FTOH 6:2)



Ácido perfluorooctanoico (PFOA)



Alcohol fluorotelómero detectado en el suelo mediante cribado con GC/Q-TOF y PCDL PFAS



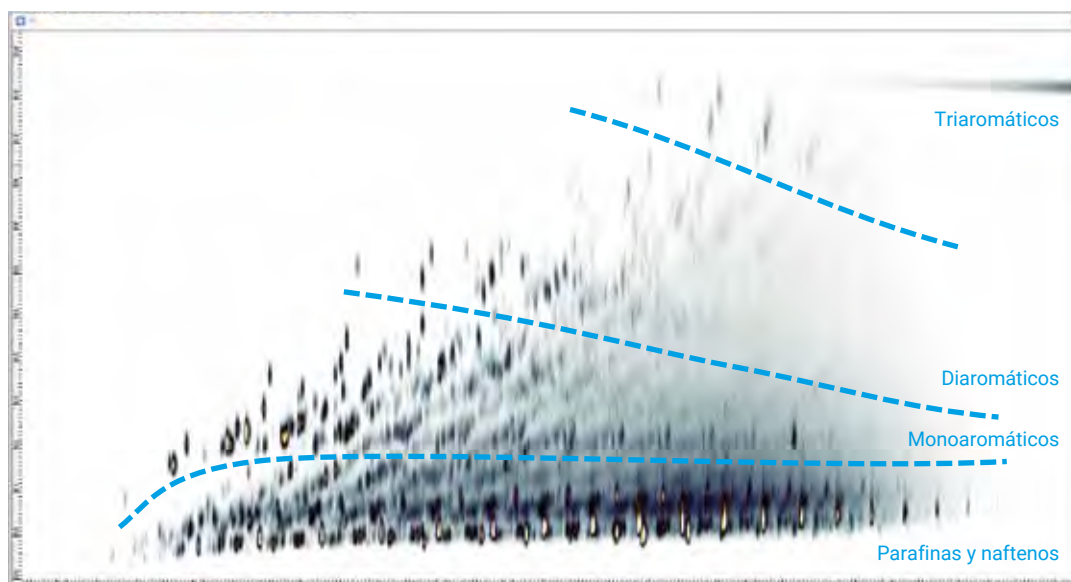
Potencie su productividad y garantice la calidad del producto

La caracterización del contenido de una muestra compleja no es una tarea sencilla. Requiere conocimientos, información y potentes capacidades analíticas que se encuentran en el sistema GC/Q-TOF Agilent 7250. Estas capacidades incluyen las medidas de masa exacta de alta resolución, opciones de ionización por impacto electrónico de baja energía e ionización química, rápida adquisición espectral con compatibilidad plena con el análisis GC x GC y elevada sensibilidad de las medidas mediante MS/MS.

- La elevada velocidad de adquisición de hasta 50 Hz y un poder de resolución independiente de la velocidad le permite caracterizar picos cromatográficos estrechos o picos ultraestrechos obtenidos mediante GC 2D.
- La simplificación espectral le permite deducir iones moleculares, por lo que puede aprovechar las opciones de ionización de la GC/MS de baja energía.
- La combinación de los espectros de iones producto con masa exacta de alta resolución con el potente software Molecular Structure Correlator permite conocer las estructuras químicas.

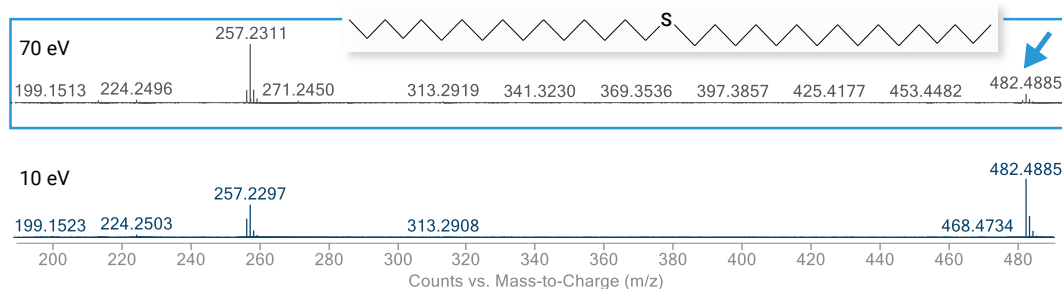


Parafinas y naftenos



Esta figura muestra cómo el modulador de flujo inverso de Agilent ayuda a obtener resultados fiables. El gráfico completo de la GC 2D ilustra la separación precisa de los componentes del diésel.

Sulfuro de hexadecilo: C₃₂H₆₆S



Reduzca la complejidad espectral con una revolucionaria fuente de ionización por impacto electrónico de baja energía que mantiene en gran medida la sensibilidad analítica al tiempo que permite una inclinación espectral hacia los iones moleculares.

Avance en el estudio de la biología de sistemas

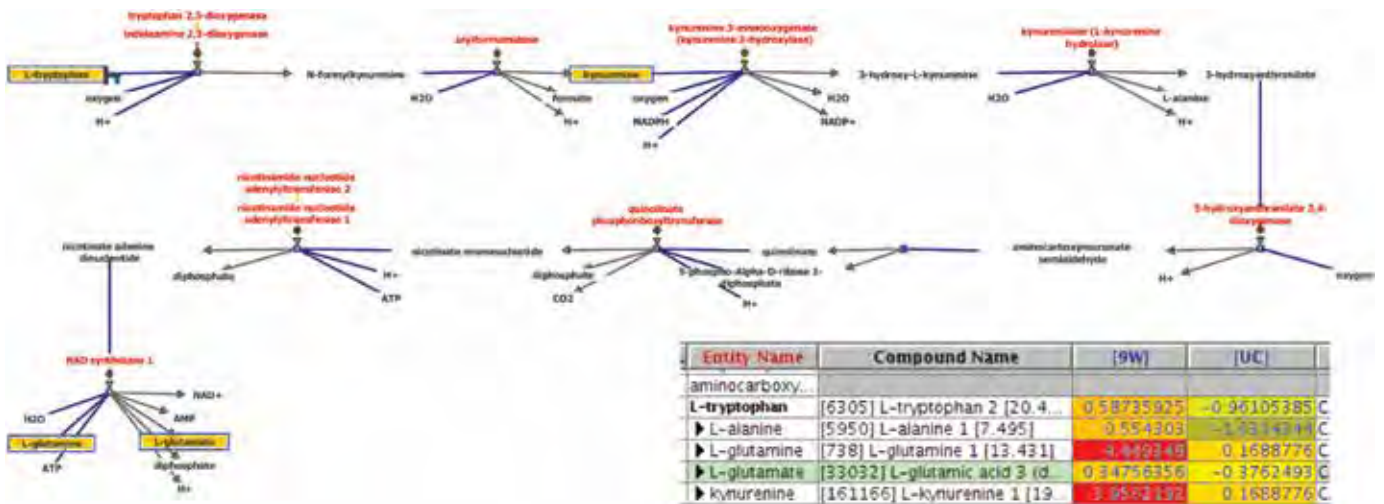
Cada día surgen nuevos conocimientos sobre la salud humana, el diagnóstico y la comprensión de las enfermedades. La investigación que promueve estos avances requiere un diseño y una ejecución minuciosos de los experimentos. Haga avanzar su investigación con los datos de alta resolución producidos por el sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 y su software. Juntos, le permiten identificar más compuestos en matrices biológicas y revelar tendencias ocultas.



Un flujo de trabajo de metabolómica centrado en las trayectorias

Los estudios metabolómicos complejos se benefician de la alta sensibilidad analítica de los espectros completos y la exactitud de masa del sistema GC/Q-TOF Agilent 7250, así como de la capacidad de MS/MS para posibilitar la elucidación estructural de metabolitos desconocidos. El intervalo dinámico ampliado del sistema permite una cuantificación precisa y simultánea de los metabolitos presentes en una célula.

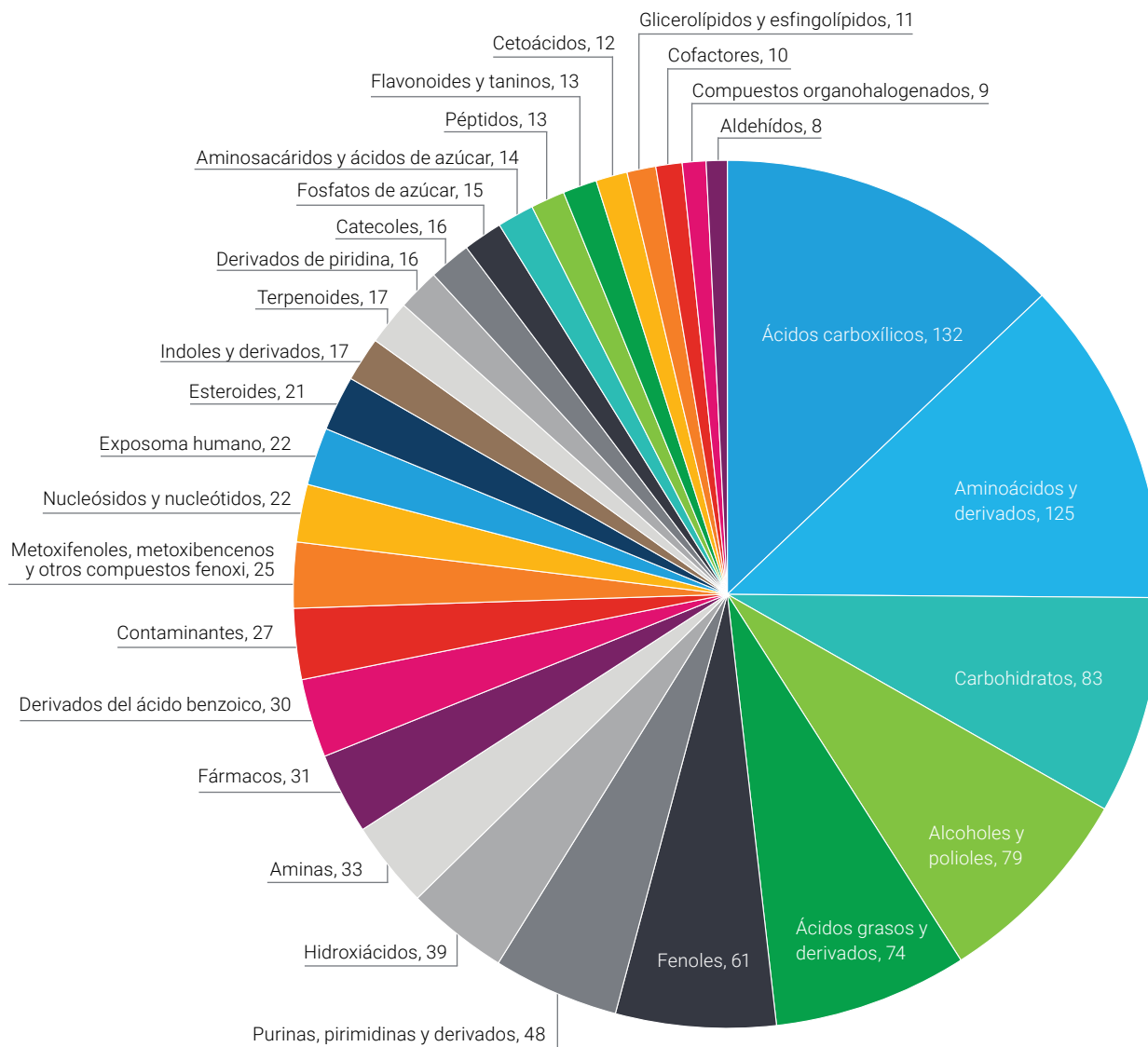
Pathway Architect, disponible con el software Mass Profiler Professional, aporta un contexto biológico a los datos espectrales de masas. Con Pathway Architect, puede tomar resultados de experimentos «ómicos» únicos o múltiples y representarlos para obtener trayectorias biológicas canónicas. También puede analizar, visualizar e interpretar la información de la trayectoria. Este flujo de trabajo centrado en las trayectorias acelera su ruta desde el descubrimiento y la comprensión hasta la validación, y le permite planificar y ejecutar eficazmente su próxima serie de experimentos.



Ejemplo de resultados de Pathway Architect: Biosíntesis de NAD

Identificación ágil de metabolitos con una biblioteca espectral y una base de datos de metabolómica de masa exacta

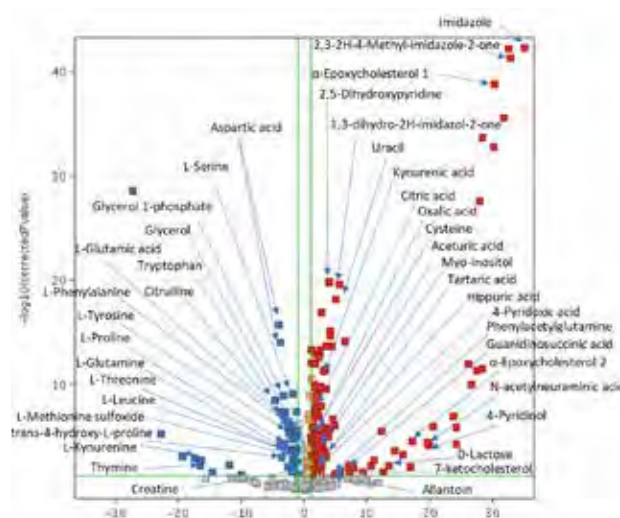
La nueva base de datos y biblioteca personal de compuestos (PCDL) de metabolómica GC/Q-TOF de Agilent es una biblioteca espectral de alta resolución con más de 900 compuestos. Representa una amplia clase de metabolitos.



Encuentre las respuestas que busca

El software Mass Profiler Professional transforma datos complejos en resultados claros

El análisis diferencial entre grupos de muestras pone de relieve los aspectos estadísticos significativos a la hora de realizar estudios comparativos. En este ejemplo identificamos diferencias entre metabolitos de individuos sanos y e personas con insuficiencia cardíaca. Para facilitar la visualización, los resultados se muestran en forma de análisis de variación de abundancia en un gráfico de volcán.



«El sistema de MS Q-TOF de alta resolución, en combinación con el software Mass Profiler, nos ha permitido estudiar los distintos componentes de la matriz que coeluyen con los pesticidas de interés».

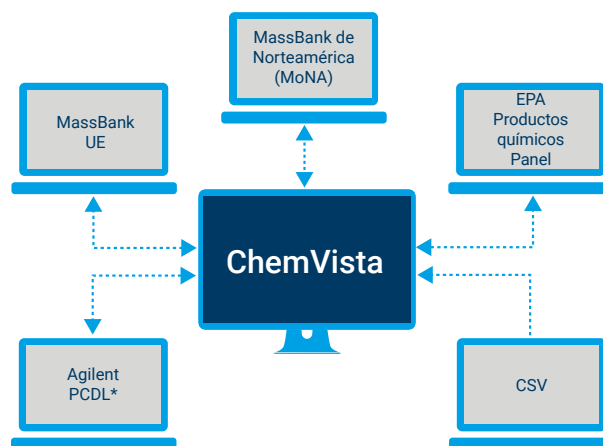
– Dra. Carmen Ferrer,
Departamento de Química Analítica, Universidad de Almería

El software Agilent ChemVista incluye amplias y completas bibliotecas integradas

Agilent ChemVista es una aplicación de software independiente que gestiona las bibliotecas espectrales creadas por espectrometría de masas LC/Q-TOF y GC/Q-TOF. Integra los detalles del compuesto, el tiempo de retención y la información espectral de múltiples fuentes, lo que le permite:

- Acceder a múltiples bases de datos públicas y bibliotecas conservadas.
- Organizar, gestionar, editar o crear espectros.
- Facilitar los flujos de trabajo de identificación dentro de las aplicaciones de análisis de datos MassHunter y más allá.
- Identificar compuestos con mayor confianza.

Además, ChemVista incluye un amplio contenido precargado de bibliotecas y bases de datos.



*Bases de datos y bibliotecas de compuestos personales conservadas



CrossLab es una herramienta de Agilent que integra servicios, consumibles y gestión de los recursos del laboratorio para, entre otras cosas, mejorar su eficiencia, agilizar las operaciones, aumentar el tiempo de actividad de los instrumentos y desarrollar las capacidades de los usuarios. Como empresa líder del sector, nuestros servicios se encargan de que sus instrumentos siempre funcionen con el rendimiento óptimo e incluyen la actualización tecnológica, la consultoría de aplicaciones, la reparación, el mantenimiento preventivo, la verificación de conformidad y la formación.

Agilent CrossLab es compatible con los instrumentos de Agilent y ciertos instrumentos de otras marcas. Ofrece soporte de consultoría para los procesos de definición de flujos de trabajo, análisis de laboratorio, conformidad, gestión de inventarios y gestión de activos, incluidos servicios de traslados.

Obtenga más información acerca de Agilent CrossLab y consulte ejemplos de cómo nuestros conocimientos pueden ayudarle a mejorar sus resultados.

Para obtener más información, visite:

www.agilent.com/chem/gcms-qtof

Encuentre un centro de atención al cliente de Agilent en su país:

www.agilent.com/chem/contactus

España

901 11 68 90

customercare_spain@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

Asia-Pacífico

inquiry_lsca@agilent.com

Solo para uso en investigación. No usar en procedimientos de diagnóstico.

Esta información está sujeta a cambios sin previo aviso.

RA45442.6111111

© Agilent Technologies, Inc. 2024
Publicado en EE. UU., 5 de junio de 2024
5991-8109ES

