

# Identificar. Quantificar. Simplificar. Tenha uma visão completa

Sistema Agilent 7250 GC/Q-TOF



# Pronto para conseguir mais?

Descobrir o que está em sua amostra, e em que níveis, ajuda a tirar conclusões e a fazer descobertas das quais sua organização depende.

O sistema tudo-em-um GC/Q-TOF Agilent 7250, com o abrangente software Agilent MassHunter, fornece respostas rápidas e confiáveis para suas aplicações de GC/MS mais desafiadoras. É o principal instrumento para os mais difíceis desafios de identificação, quantificação e exploração em GC/MS:

- Realização de estudos complexos de metabolômica.
- Varredura de pesticidas em matrizes desafiadoras.
- Identificação de compostos em matrizes diversas.
- Testes dos níveis de contaminantes em matéria-prima química.

Projetado para desempenho real e construído para proporcionar robustez no laboratório, o sistema GC/Q-TOF 7250 oferece o que sua organização precisa: resultados consistentemente excelentes.



## Confiança absoluta para fluxos de trabalho de varredura de rotina e descobertas únicas

### O GC/Q-TOF 7250 oferece:

- Detecção sensível
- Quantificação precisa
- Poder para explorar
- Espectros simplificados
- Dados reprodutíveis
- Faixa dinâmica

### Para que você se preocupe menos com:

- Regulamentação futura
- Resultados incertos
- Verdadeiras incógnitas
- Tempo de interpretação de dados
- Replicação de ambiguidades
- Falsos negativos e falsos positivos

## Desafios analíticos em evolução exigem novos métodos e novas abordagens

Por mais de 40 anos, as inovações da Agilent ajudaram diversos laboratórios a atender à demanda por análises cada vez mais detalhadas. O 7250 é o nosso GC/Q-TOF mais avançado e foi projetado para oferecer desempenho excepcional e robustez no laboratório.



## Precisa de identificação mais confiante?

*"Os instrumentos da Agilent são muito úteis em nosso laboratório por três motivos: são confiáveis, precisos e fáceis de usar."*

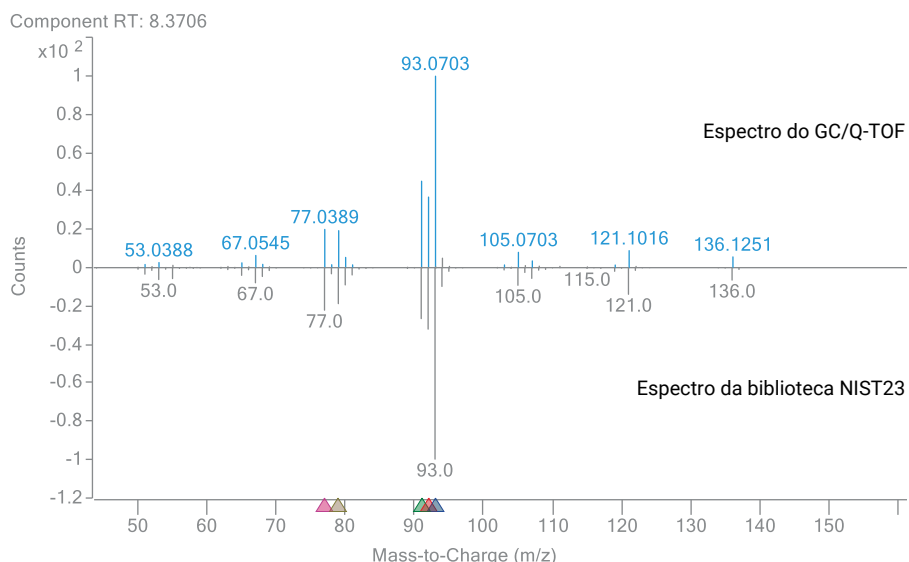
– **Mike Thurman, PhD**  
Centro de Espectrometria de  
Massas Ambiental, Universidade do  
Colorado

Não ver o quadro Inteiro pode ter sérias implicações para sua pesquisa, desenvolvimento e controle de qualidade. A capacidade analítica do sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 e do software MassHunter oferece a você habilidades incomparáveis de identificação de compostos.

- **Conheça seus compostos.** Os espectros sem distorção com qualidade de biblioteca permitem que você identifique com segurança compostos com relação a bibliotecas comerciais.
- **Confirme fórmulas.** A fidelidade isotópica fornece uma maior certeza ao atribuir fórmulas moleculares.
- **Detecte analitos a nível de traço.** Garanta um intervalo dinâmico dentro do espectro, mesmo com coeluição abundante.
- **Elucide estruturas.** Medições de MS/MS com espectros de íon produto de massa exata e de alta resolução podem fornecer informações estruturais, aumentar a seletividade e evitar interferências da matriz.

## Confiança nos resultados da biblioteca devido à fidelidade espectral e à massa exata

Você pode identificar facilmente compostos fazendo uma pesquisa espectral com relação a bibliotecas disponíveis comercialmente. O sistema GC/Q-TOF 7250 suporta a qualidade de centenas de milhares de espectros de bibliotecas de compostos, tendo sido a maioria dos quais gerada pelos sistemas GC/MS quadrupolo da Agilent. Os padrões de fragmentação de EI fiéis à biblioteca, juntamente com informações de massa exata, tornam o sistema GC/Q-TOF 7250 uma plataforma ideal para a identificação de compostos usando bibliotecas de EI.



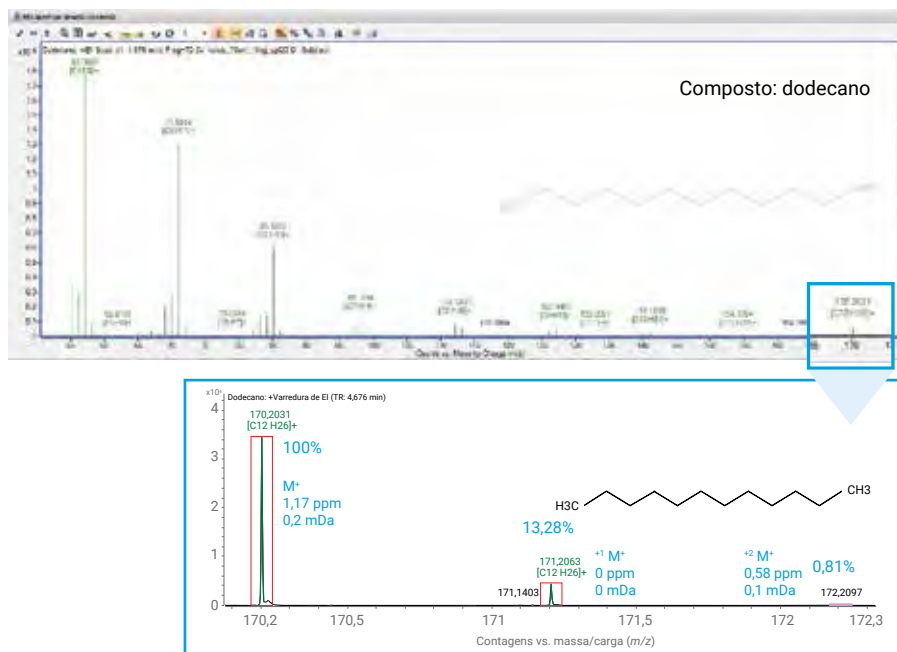
$\alpha$ -Pino em solo. Pontuação de correspondência da biblioteca: 95,8

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"/>	C10H16	932	932	0

## Fidelidade isotópica

A identificação confiável de compostos exige mais do que uma boa exatidão de massa. Também requer que você considere características independentes dos compostos, como a correspondência de padrão isotópico.

Você pode facilmente visualizar a fidelidade isotópica por meio do software de análise qualitativa MassHunter. Ele permite que você identifique compostos com base em características complementares para medição de massa exata. O sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 mostra excelente fidelidade isotópica, mesmo para isótopos a nível de traço, como mostrado neste espectro de dodecano com um M+ conjunto de picos de baixa abundância.

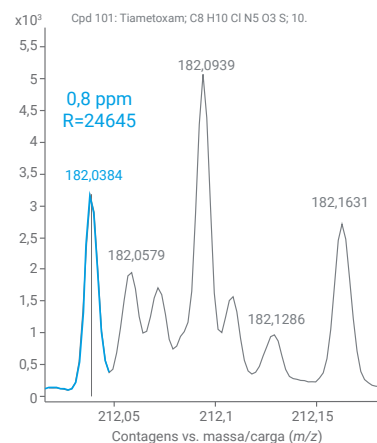
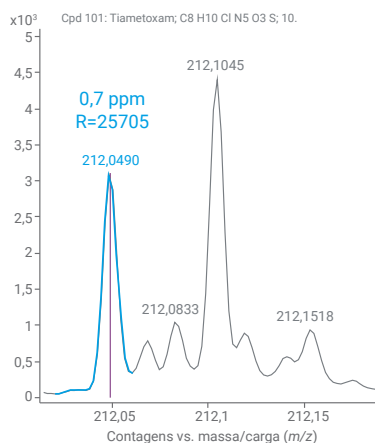


## Alta resolução e exatidão de massa para pesticidas

Para separar os analitos das interferências, uma alta resolução é necessária. No entanto, ao analisar matrizes complexas para componentes a nível de traço, outras características de desempenho — como ampla faixa dinâmica e alta sensibilidade — também devem ser mantidas.

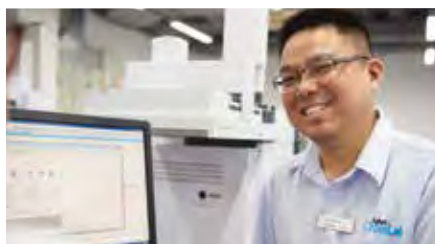
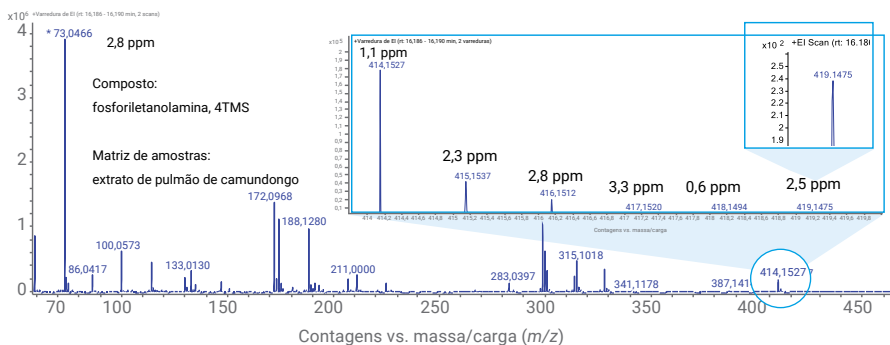
O exemplo mostrado aqui representa um cenário como esse: analisar o inseticida Tiametoxam a 5 ppb em abacate, uma matriz complexa com fundo significativo. Mesmo sob essas condições, os picos de massa característicos são separados do fundo com exatidão de massa que está em conformidade com as diretrizes SANTE/11945/2015 da União Europeia.

Além disso, esse nível de desempenho espectral é alcançado independentemente da velocidade de aquisição ou da faixa de massa.



## Ampla faixa dinâmica em uma matriz complexa

Um amplo intervalo dinâmico dentro do espectro permite que você detecte com segurança analitos a nível de traço na presença de fundo abundante ou outros coeluentes. O 7250 normalmente fornece quatro ordens de magnitude de intervalo dinâmico dentro do espectro, mesmo em matrizes pesadas. Este exemplo exibe uma faixa de 16.000+ :1 para fosforiletanolamina (4TMS) em uma amostra biológica complexa de extrato de pulmão de camundongo.

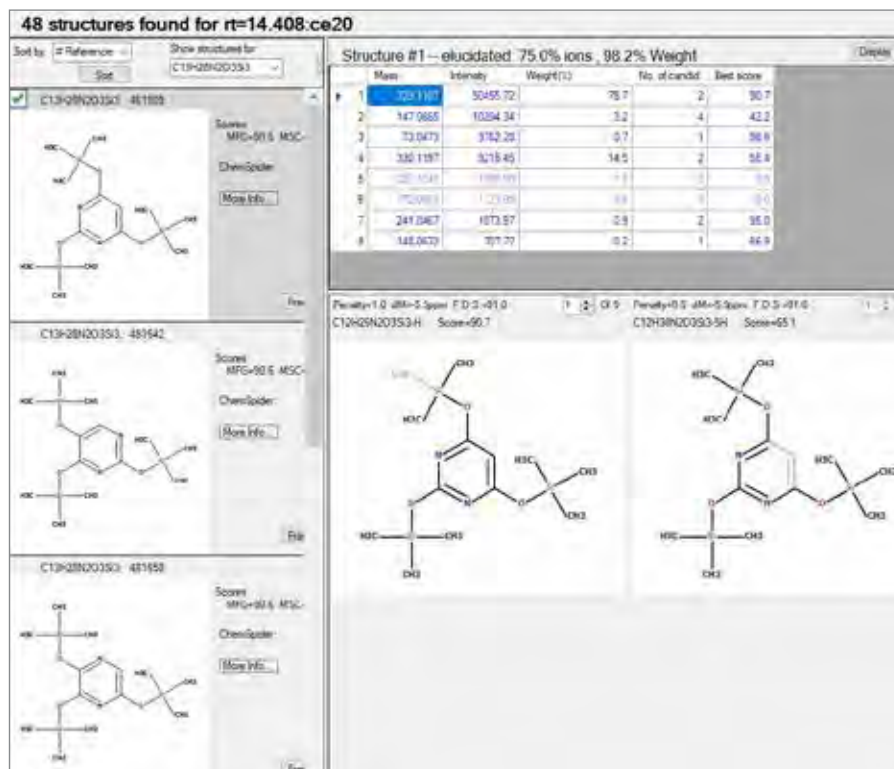
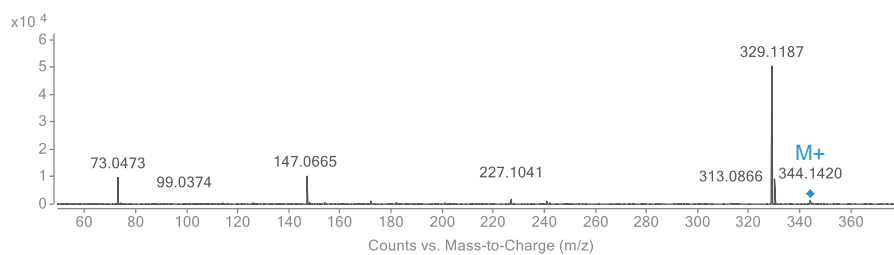


## Promessa de valor da Agilent

Garantimos, pelo menos, 10 anos de uso do instrumento a partir da data de aquisição. Caso contrário, ofereceremos um crédito do valor residual do sistema em relação a um modelo atualizado.

## Elucidar estruturas químicas e revelar maiores detalhes

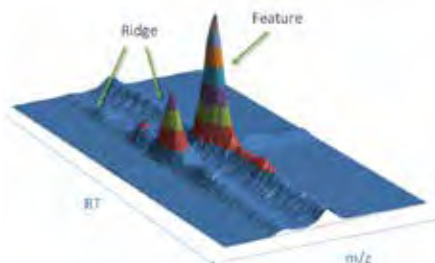
O GC/Q-TOF 7250 é o único sistema de massa exata por tempo de voo com recursos de MS/MS. Usando os espectros de íon produto de MS/MS gerados a partir de um íon molecular putativo, o Molecular Structure Correlator pode propor possibilidades de estrutura de composto e probabilidades com base em dados de fragmentos.



Compostos com identidades ou estruturas desconhecidas podem ser interrogados para restringir o leque de possibilidades.



# Procurando por melhores respostas quantitativas e qualitativas?



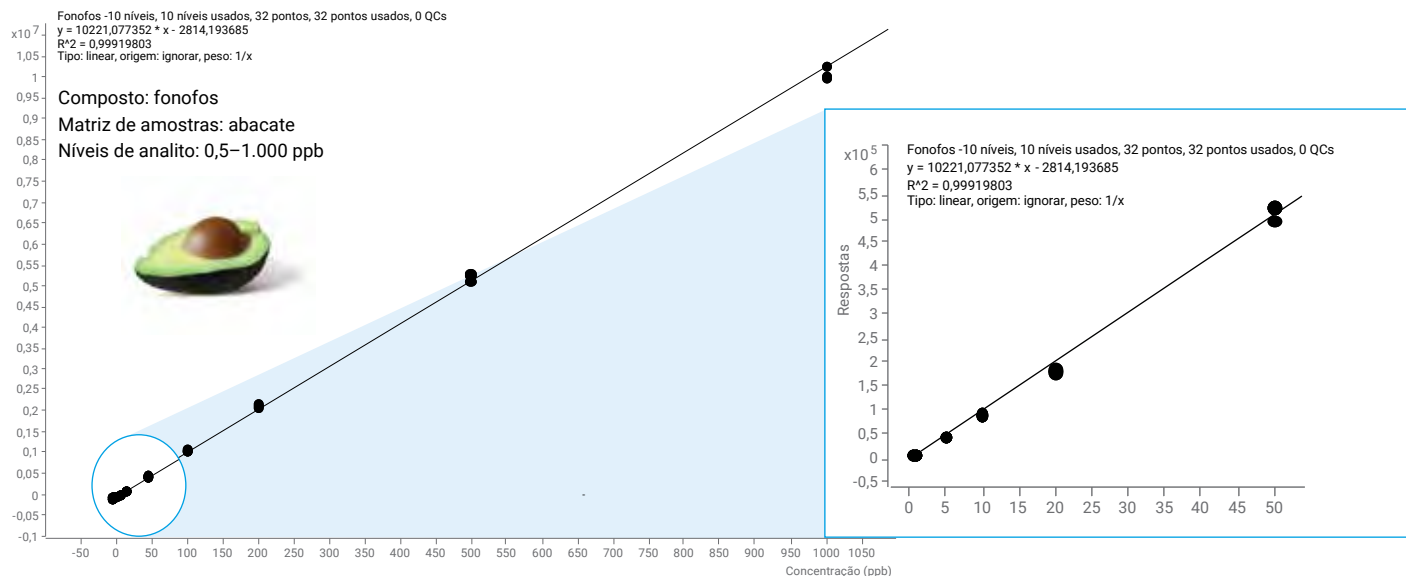
O algoritmo SureMass do Agilent MassHunter para detectar recursos químicos foi projetado especificamente para dados de perfil MS de alta resolução.

A quantificação direcionada com uma aquisição sem alvo é uma combinação poderosa. O sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 oferece exatidão quantitativa incomparável com alta resolução de massas e ampla faixa dinâmica simultâneas. Além disso, os componentes eletrônicos de última geração permitem ampla linearidade e respostas consistentes, mesmo para analitos a nível de traço em matrizes complexas.

O SureMass, um algoritmo exclusivo de processamento de sinais otimizado para dados de massa exata e de alta resolução, aumenta ainda mais a faixa dinâmica linear. Ele também ajuda a alcançar uma exatidão de massa superior e, ao mesmo tempo, oferece alta velocidade e sensibilidade de deconvolução cromatográfica para análises não direcionadas.

## Quantificação precisa em uma matriz complexa

Uma ampla faixa linear dinâmica traz precisão quantitativa em várias concentrações. Os fatores de resposta são mantidos mesmo em baixas concentrações em amostras complexas, como mostrado nesta curva de calibração de fonofós de 0,5 a 1.000 ppb em matriz de abacate.



# Facilite a identificação de compostos com técnicas alternativas de ionização suave

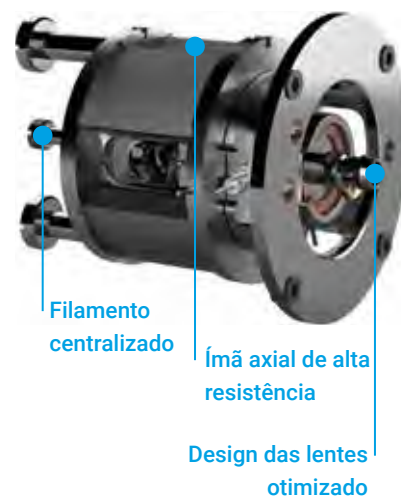
Habilite fluxos de trabalho antes impraticáveis ou impossíveis com o 7250, o único GC/Q-TOF de alta resolução do mundo. Ele permite que você crie espectros simplificados sem depender de técnicas especiais, enquanto mantém a aplicabilidade universal da ionização por elétrons (EI).

A fonte de EI do 7250 com capacidade de baixa energia é baseada na comprovada fonte de alta eficiência (HES) nos sistemas GC/MSD 5977 e GC/TQ 7010 da Agilent. Ela foi otimizada para operação de EI de baixa energia, mas ainda funciona com a ionização convencional de 70 eV. Além disso, as modificações do design da HES amplificam a sensibilidade analítica da EI de baixa energia para uma mudança de paradigma na ionização suave de GC/MS.

Combinadas com fontes de ionização química intercambiáveis que permitem PCI e NCI, as opções de ionização suave do sistema GC/Q-TOF 7250 simplificam suas análises mais desafiadoras.

- **Identifique com confiança.** Obtenha informações sobre íons moleculares para elucidação estrutural final.
- **Expanda seus limites.** Ionize em todas as classes de analitos, evitando grandes perdas de sensibilidade analítica comuns a outras técnicas de ionização suave.
- **Melhore a eficiência.** Aproveite o desempenho comprovado da tecnologia de fonte de íons do líder global em GC/MS.

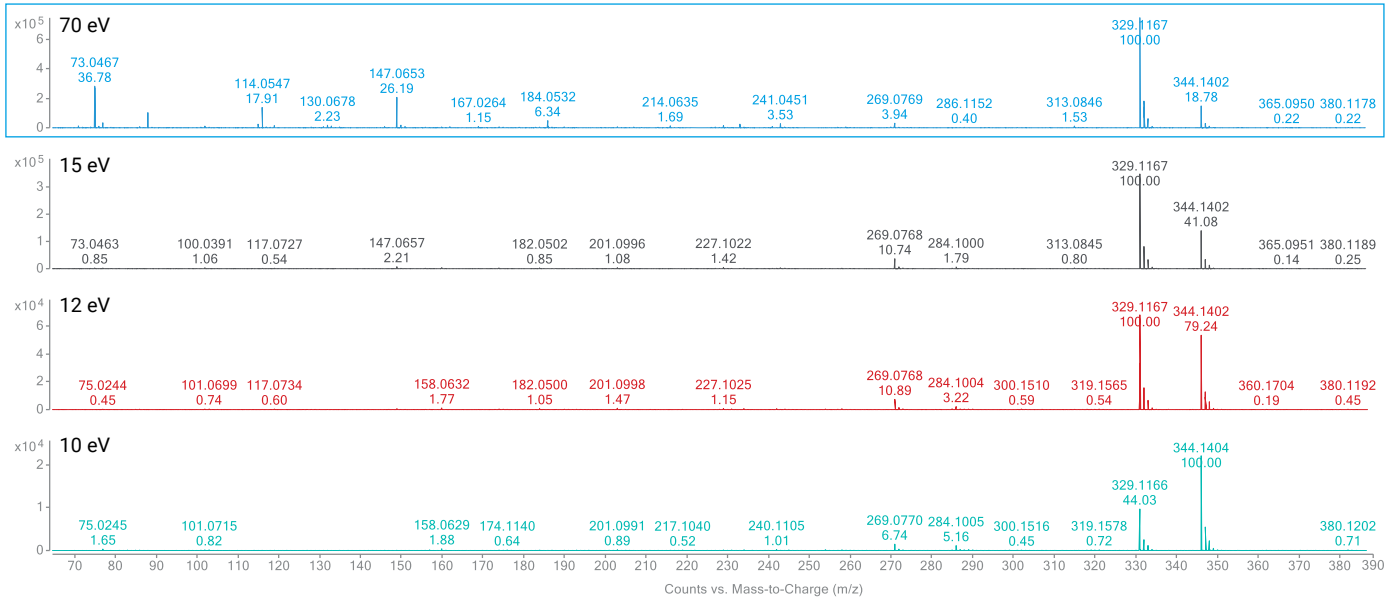
A fonte de EI de baixa energia do 7250



## Superando os desafios da identificação de metabólitos em matrizes complexas

Diminuir a energia de ionização da fonte cria uma inclinação espectral em direção ao íon molecular. Aqui, a energia de elétrons mais baixa corresponde a uma abundância relativa mais alta para o íon molecular desse composto desconhecido.

### Identificação do íon molecular usando energia de elétron baixa



# Proteja os clientes e sua reputação resolvendo os desafios reais

Os produtores e consumidores de alimentos enfrentam ameaças de adulteração e rotulação fraudulenta. Além disso, o comércio global, normas rigorosas e a maior consciência do público estão levando à necessidade de mais e melhores testes de alimentos.

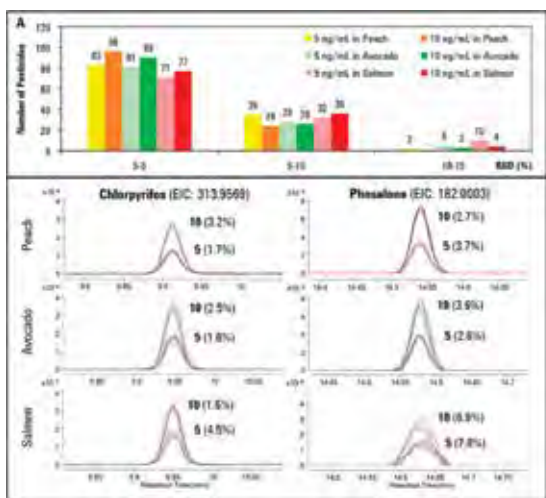
O sistema GC/Q-TOF 7250 ajuda você a enfrentar esses desafios com uma única plataforma otimizada. Os usos típicos do GC/Q-TOF em testes de alimentos incluem:

- Varredura de compostos suspeitos com quantificação de alvos com base no PCDL de pesticidas de massa exata
- Varredura não direcionada usando a deconvolução do SureMass e extensas bibliotecas de EI de unidade de massa, como a NIST
- Classificação de alimentos para detecção de fraudes

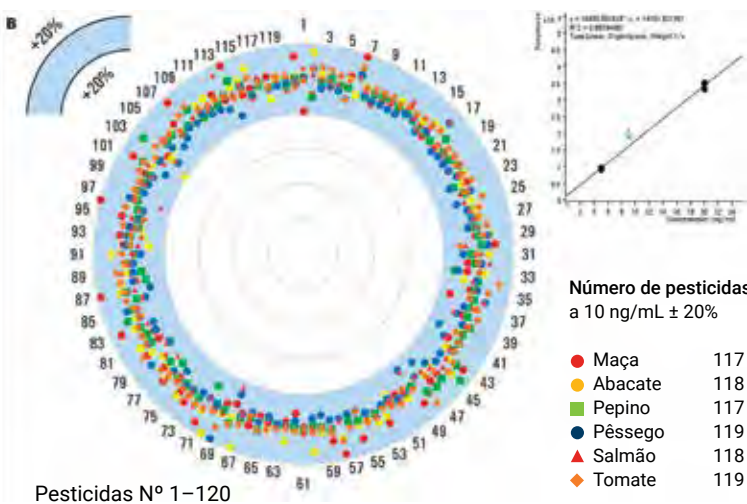


## A importância da matriz

A aquisição não direcionada e as bibliotecas espectrais de exatidão de massa permitem uma varredura extensa dos pesticidas em matrizes de alimentos.



120 pesticidas com adição em três matrizes de alimentos diferentes, incluindo abacate e salmão. Os valores de repetibilidade (% de DPR) para níveis de adição de 5 ng/mL e 10 ng/mL confirmam um excelente desempenho analítico. Dois exemplos de replicatas de íons característicos detectados também são mostrados.

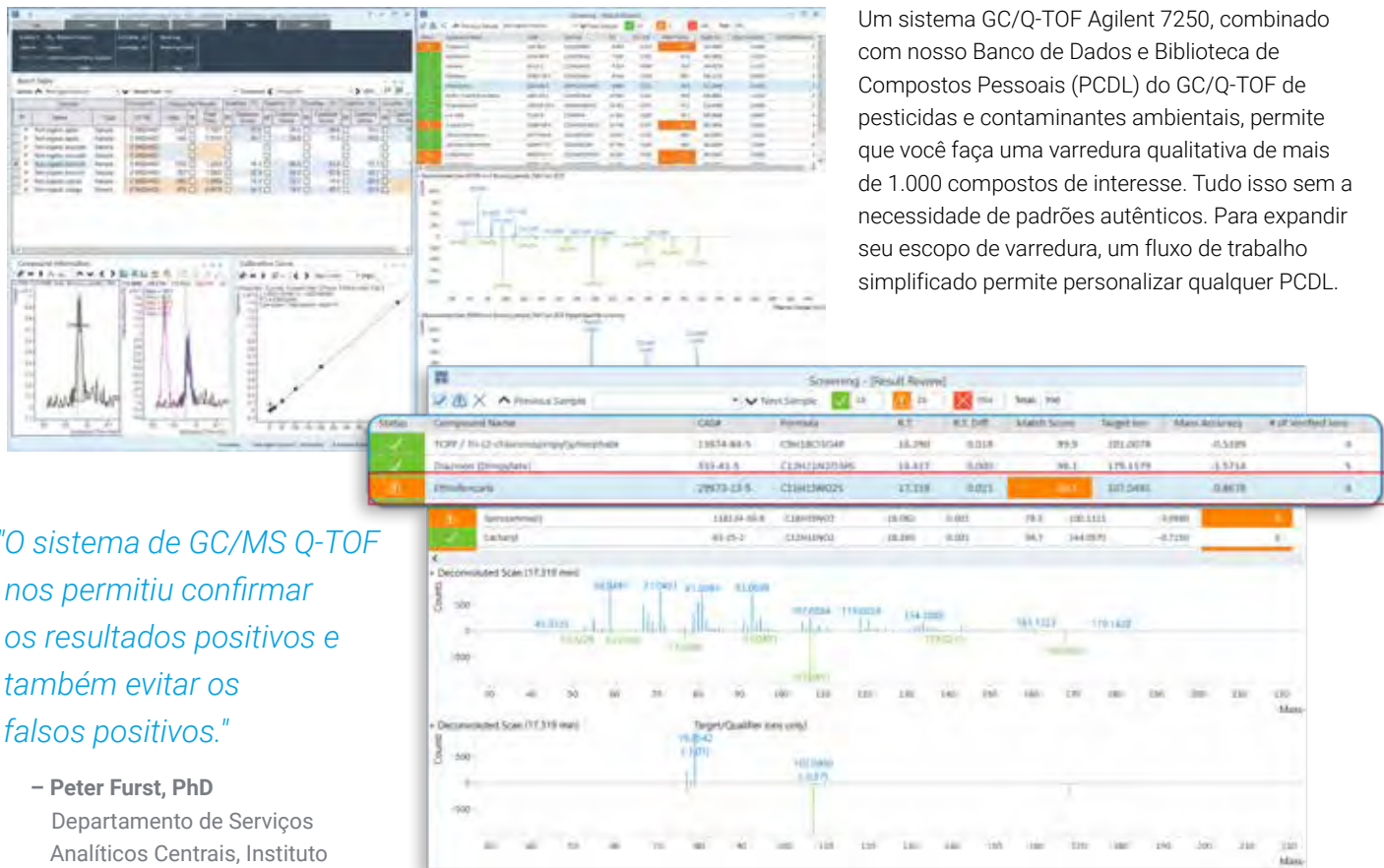


Precisão quantitativa a 10 ng/mL. Uma comparação rápida com os limites máximos de resíduos (MRLs) é mostrada para seis matrizes de alimentos de complexidade variável. Mesmo para matrizes complexas como abacate e salmão, a precisão quantitativa está em conformidade com as diretrizes SANTE/11813/2017 da UE para mais de 97% dos pares de pesticidas/alimentos testados.

## Reconhecimento fácil de falsos positivos usando o fluxo de trabalho de varredura de compostos suspeitos por GC/Q-TOF

Avale facilmente grandes lotes de amostras para centenas de compostos-alvo e suspeitos com um único método de análise. O software MassHunter fornece medição quantitativa simultânea para compostos-alvo. Ele também permite a verificação com relação a bibliotecas espectrais de alta resolução para compostos suspeitos sem referência de calibração.

Execute a varredura simultânea de compostos-alvo e suspeitos usando apenas uma ferramenta de análise de dados.



Um sistema GC/Q-TOF Agilent 7250, combinado com nosso Banco de Dados e Biblioteca de Compostos Pessoais (PCDL) do GC/Q-TOF de pesticidas e contaminantes ambientais, permite que você faça uma varredura qualitativa de mais de 1.000 compostos de interesse. Tudo isso sem a necessidade de padrões autênticos. Para expandir seu escopo de varredura, um fluxo de trabalho simplificado permite personalizar qualquer PCDL.

*"O sistema de GC/MS Q-TOF nos permitiu confirmar os resultados positivos e também evitar os falsos positivos."*

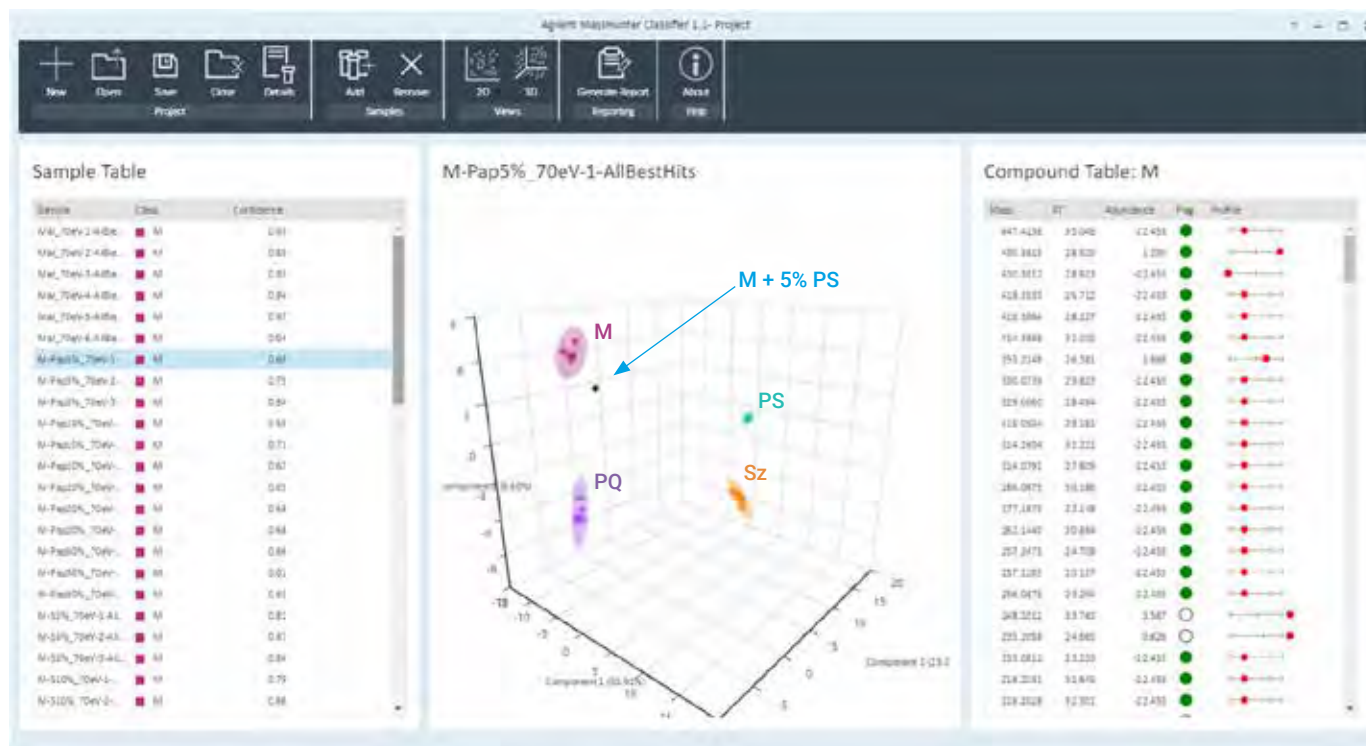
– Peter Furst, PhD  
Departamento de Serviços Analíticos Centrais, Instituto Analítico de Química e Veterinária, Münsterland-Emscher-Lippe

A capacidade de diferenciar correspondências verdadeiras de identificações falsas, mesmo quando não há um padrão para comparação, reflete a alta resolução e o desempenho de massa exata do sistema GC/Q-TOF 7250.

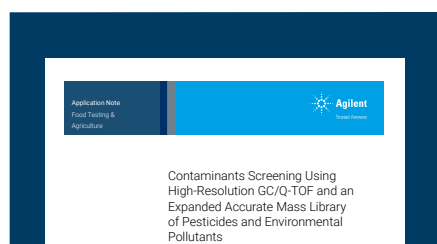
## Confirmação da autenticidade de alimentos e detecção de fraudes

A fraude em alimentos é um negócio em rápido crescimento e evolução. O tempo de voo (TOF), combinado com uma abordagem não direcionada, é um método em rápido crescimento para detectar fraudes e adulterações de alimentos. Para otimizar a caracterização de alimentos com GC/Q-TOF de alta resolução, use o software Agilent Mass Profiler Professional (MPP) para criar um modelo de classificação e o software Agilent MassHunter Classifier para detectar fraudes.

As ferramentas de visualização do software MassHunter Classifier incluem listas de compostos e gráficos tridimensionais de PCA



Os dados de GC/Q-TOF de alta resolução e massa exata, bem como o software de análise diferencial, permitem a varredura de rotina de amostras alimentares para classificação e detecção de fraudes alimentares.



### Deseja ver como o Q-TOF protege contra falsos positivos?

Leia sobre um fluxo de trabalho otimizado para varredura e quantificação de pesticidas e contaminantes ambientais em extratos de morango usando GC/Q-TOF de alta resolução e uma biblioteca de exatidão de massa. [Baixe a nota de aplicação](#)

# Varredura de contaminantes conhecidos e identificação de desconhecidos

Todos os dias surgem novas questões sobre o impacto da humanidade no meio ambiente e sobre o impacto do meio ambiente em nós. Os aprimoramentos tecnológicos revolucionários do sistema GC/Q-TOF Agilent 7250 foram projetados para fornecer respostas significativas com facilidade e eficiência.

O uso de técnicas de MS de alta resolução (HRMS) e massa exata para caracterizar poluentes conhecidos e desconhecidos está ganhando popularidade. Para alcançar uma alta sensibilidade, juntamente com um escopo de análise expandido, o 7250 pode ser usado em fluxos de trabalho abrangentes que incluem:

- Quantificação de alvo
- Varredura de compostos suspeitos
- Varredura não direcionada de contaminantes

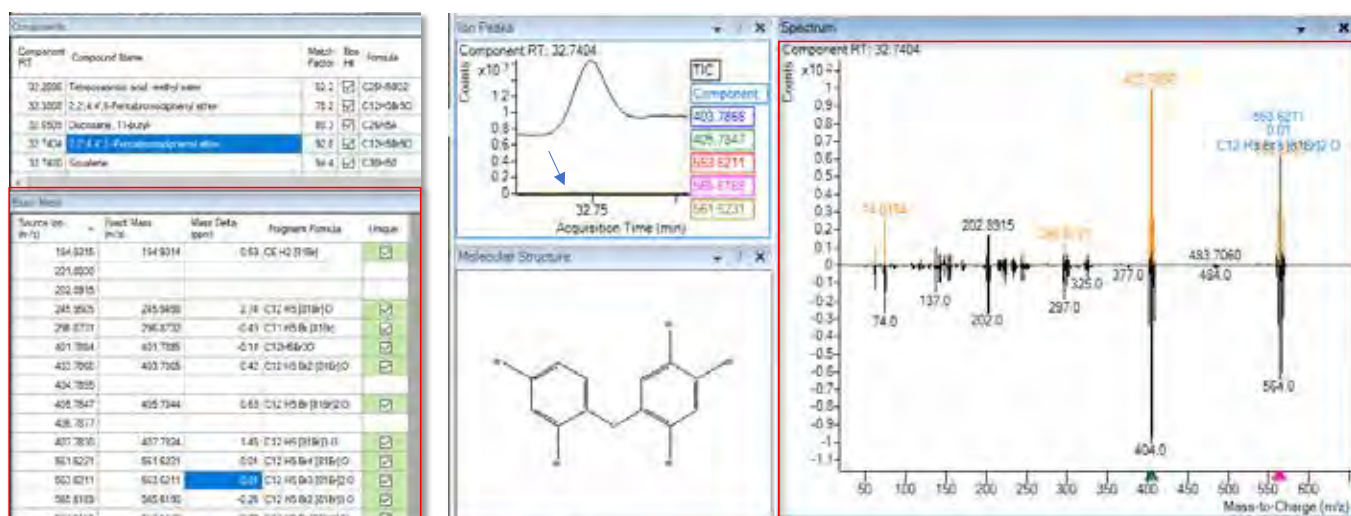
Além disso, o processamento retrospectivo permite medir uma vez e processar repetidamente dados de espectro completo que você pode verificar para futuros alvos emergentes.



## Tenha certeza em sua identificação

O software de análise de desconhecidos MassHunter, usando o processamento de sinal SureMass e a ferramenta ExactMass, oferece eficiência e sensibilidade além das técnicas convencionais de deconvolução. Mesmo os componentes menores são extraídos com precisão e identificados na presença de um sinal de background dominante.

O recurso ExactMass anota os íons com fórmulas de fragmentos, permitindo que você identifique compostos com confiança, mesmo ao usar bibliotecas MS com espectros de massa nominal de sistemas MS quadrupolo.



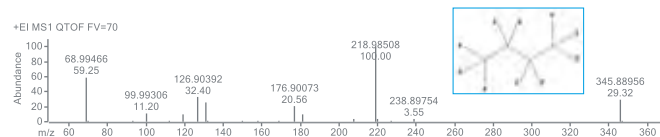
A ferramenta ExactMass (retângulos vermelhos) ajuda a fornecer confirmação adicional das correspondências da biblioteca de unidade de massa com base na massa exata. Os íons compostos representativos são destacados no plot espelhado quando  $m/z$  corresponde à fórmula da biblioteca. A seta azul indica o componente deconvolvido na matriz do solo.

## Biblioteca de exatidão de massa para análise de PFAS em amostras ambientais

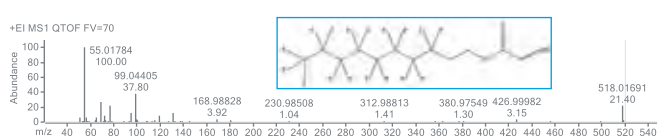
O desenvolvimento de bibliotecas de exatidão de massa em aplicações ambientais é fundamental para expandir o escopo dos compostos monitorados e permitir a detecção segura de alvos/suspeitos. Ele também oferece a oportunidade de usar uma abordagem de varredura de compostos suspeitos que oferece maior sensibilidade e flexibilidade em comparação com a varredura não direcionada.

Exemplos de diferentes classes de compostos PFAS da PCDL de PFAS

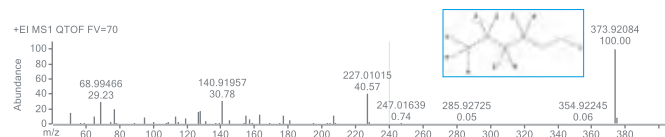
### Nonafluoro-1-iodobutano (PFBI)



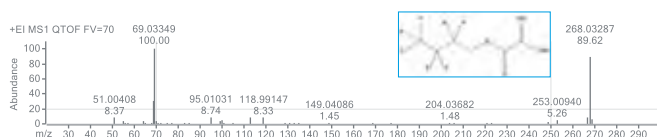
### 8:2 Acrilato de fluorotelômero (8:2 FTAC)



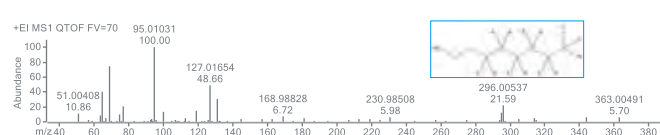
### 1,1,1,2,2,3,3,4,4-Nonafluoro-6-iodohexano (6:2 FTI)



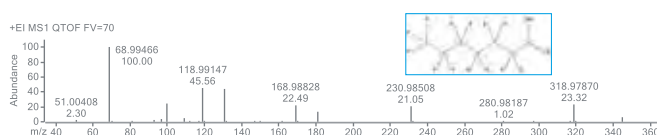
### 2,2,3,3,4,4,4-Heptafluorobutil metacrilato (3:1 FTMAC)



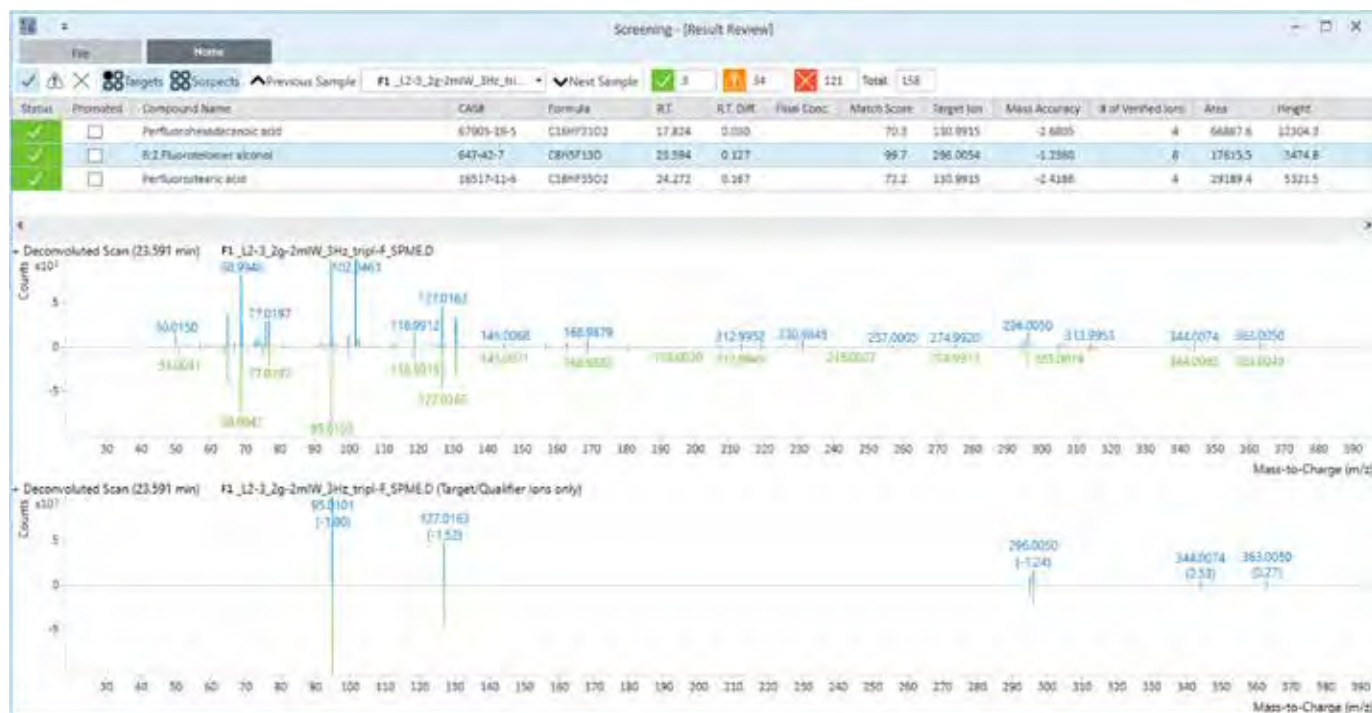
### 6:2 Álcool fluorotelômero (6:2 FTOH)



### Ácido perfluoroheptanoico (PFHpA)



Álcool fluorotelômero detectado no solo usando a varredura do GC/Q-TOF e a PCDL de PFAS



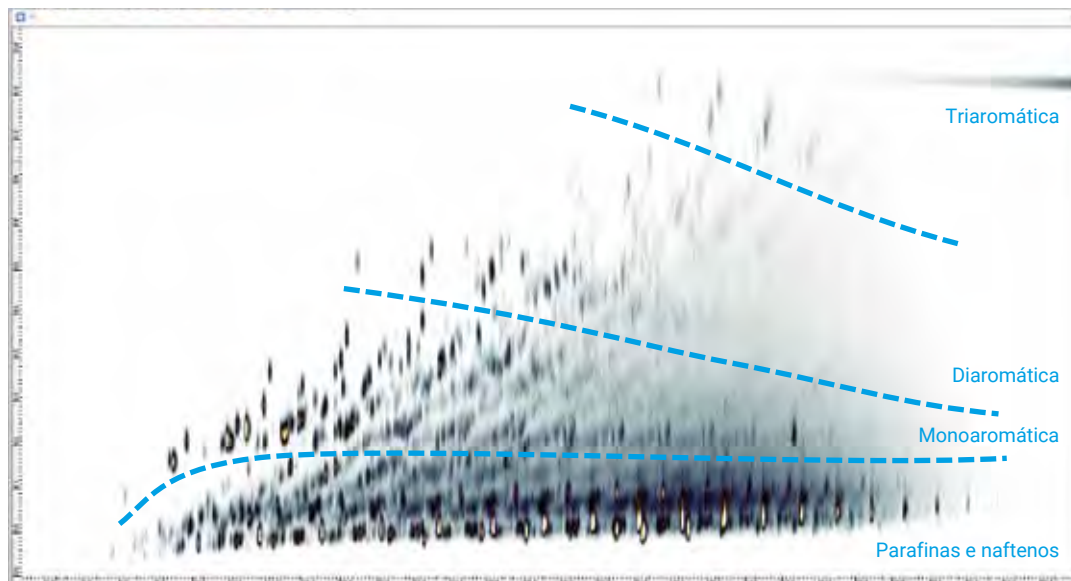
# Aumente sua produtividade e garanta a qualidade do produto

Caracterizar o que está em uma amostra complexa não é uma tarefa simples. É preciso conhecimento, percepção e as poderosas capacidades analíticas encontrados no sistema GC/Q-TOF Agilent 7250. Esses recursos incluem medições de massa exata de alta resolução, opções de ionização química e ionização por elétrons de baixa energia, aquisição espectral rápida para compatibilidade abrangente com GC x GC e medições de MS/MS altamente sensíveis.

- As taxas de aquisição rápida de até 50 Hz e poder de resolução independente da velocidade permitem caracterizar picos cromatográficos estreitos ou picos de GC 2D ultraestritos.
- A simplificação espectral permite a dedução de íons moleculares, para que você possa aproveitar as opções de ionização suave do GC/MS.
- Os espectros de íon produto de massa exata e alta resolução, combinados com o poderoso software de Correlação de Estrutura Molecular, fornecem informações sobre estruturas químicas.

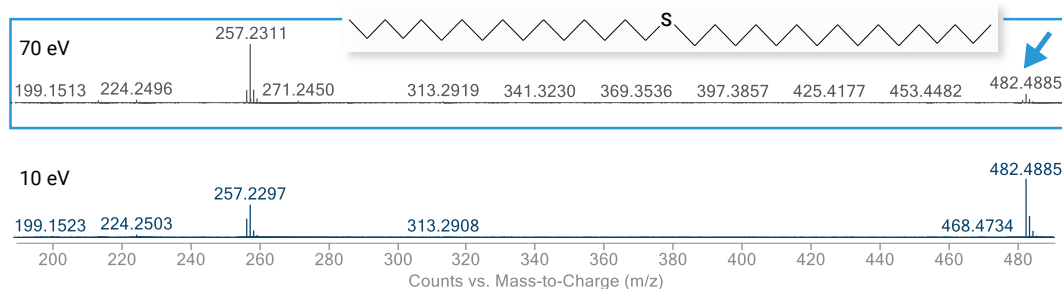


## Parafinas e naftenos



Esta figura mostra como o modulador de fluxo reverso da Agilent ajuda a obter resultados confiáveis. O abrangente gráfico de GC 2D ilustra a separação exata dos constituintes do diesel.

## Sulfeto de hexadecil: C<sub>32</sub>H<sub>66</sub>S



Reduza a complexidade espectral com a revolucionária fonte de ionização por elétrons de baixa energia que mantém a sensibilidade analítica e permite uma inclinação espectral em direção ao íon molecular.

# Avance seu estudo de biologia de sistemas

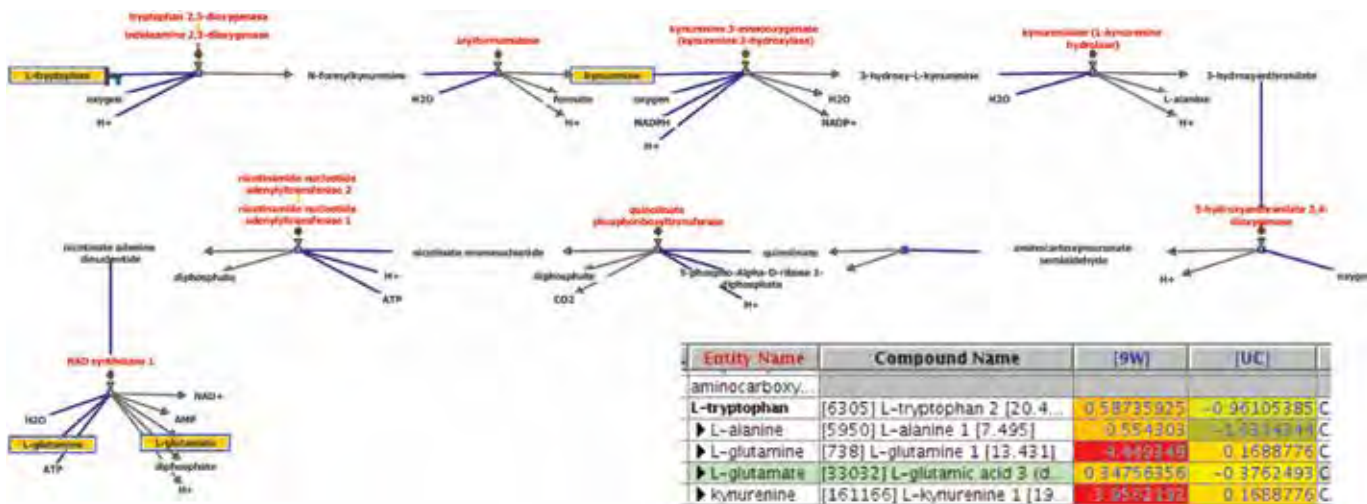
Diariamente temos novas percepções sobre a saúde humana, o diagnóstico e a compreensão de doenças. A pesquisa que impulsiona esses avanços requer um planejamento experimental e uma execução minuciosos. Avance em sua pesquisa com dados de alta resolução produzidos pelo software e sistema GC/Q-TOF Agilent 7250. Juntos, eles permitem que você identifique mais compostos em matrizes biológicas e revele tendências ocultas.



## Um fluxo de metabolômica centrado na trajetória

Estudos metabolômicos complexos se beneficiam da sensibilidade analítica e exatidão de massa de espectro completo do sistema GC/Q-TOF Agilent 7250, bem como da sua capacidade MS/MS de elucidar estruturalmente metabólitos desconhecidos. A faixa dinâmica estendida do sistema permite a quantificação precisa e simultânea de metabólitos presentes em uma célula.

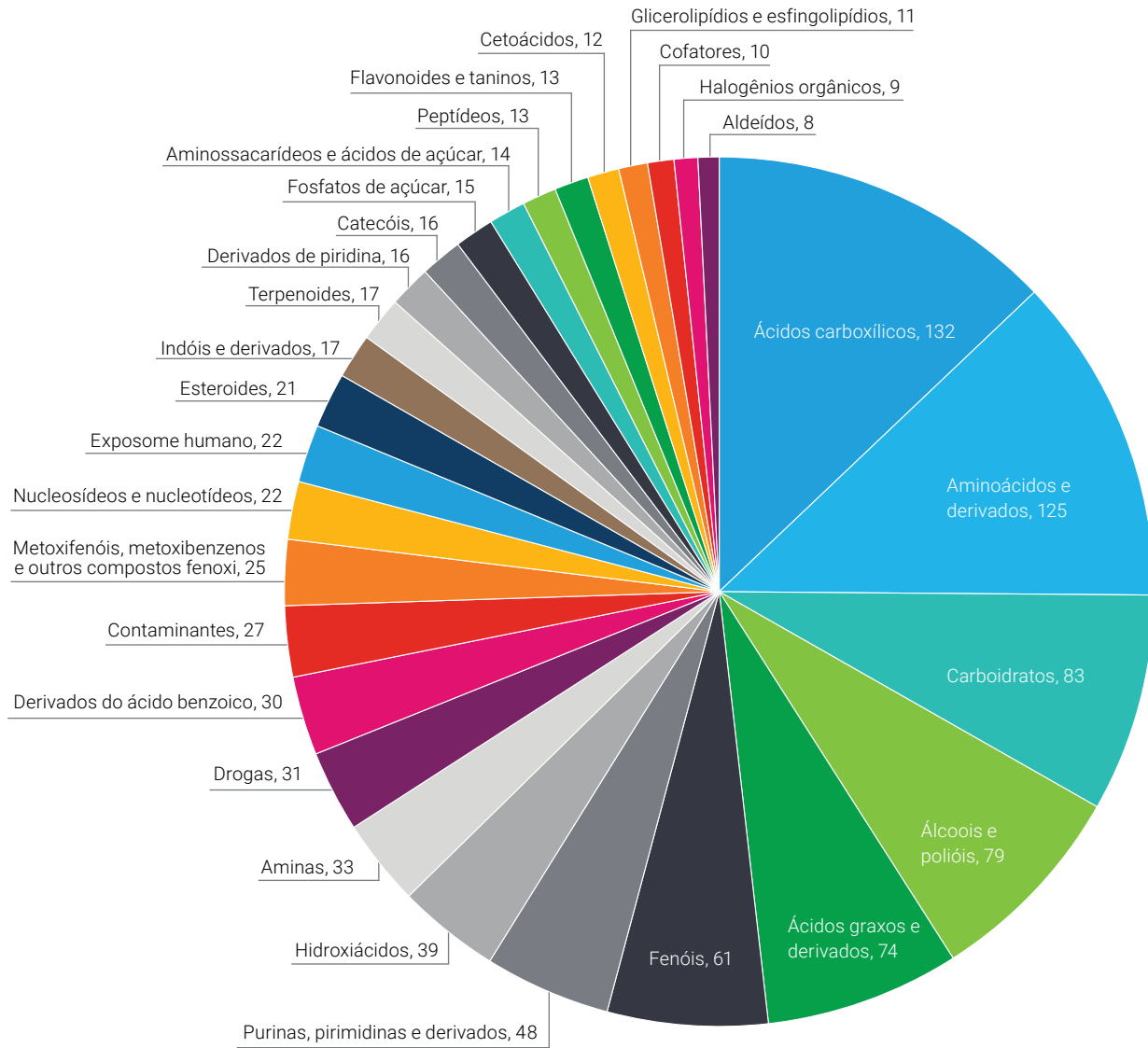
O Pathway Architect, disponível com o Mass Profiler Professional, traz um contexto biológico para dados espectrais de massa. Com o Pathway Architect, você pode obter resultados de experimentos "ômicos" únicos ou múltiplos e mapeá-los em trajetórias biológicas canônicas. Você também pode simultaneamente analisar, visualizar e interpretar informações da trajetória. Esse fluxo de trabalho centrado na trajetória acelera seu percurso desde a descoberta e o planejamento até a validação, e permite planejar e executar com eficiência sua próxima série de experimentos.



Exemplo de resultados do Pathway Architect: Biossíntese de NAD

## Simplifique a identificação de metabólitos com uma biblioteca espectral e um banco de dados de metabolômica de massa exata

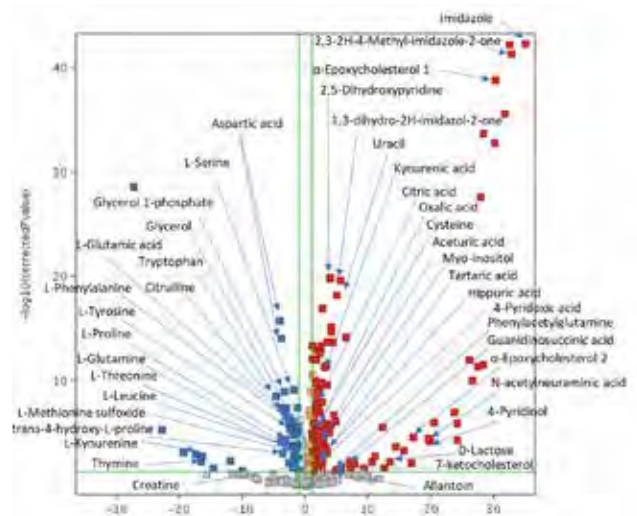
O novo Banco de dados e biblioteca de compostos pessoais (PCDL) de metabolômica de GC/Q-TOF Agilent é uma biblioteca espectral de alta resolução com mais de 900 compostos. Ela representa uma ampla classe de metabólitos.



## Encontre as respostas que procura

### O software Mass Profiler Professional transforma dados complexos em resultados claros

A análise diferencial entre grupos de amostras traz o foco para o que é estatisticamente significativo ao realizar estudos comparativos. Aqui, identificamos diferenças de metabólitos entre indivíduos saudáveis e indivíduos com insuficiência cardíaca. Os resultados são apresentados por meio de análise de modulação em um gráfico de vulcão para fácil visualização.



"O MS Q-TOF de alta resolução, combinado com o software Mass Profiler, permitiu-nos estudar os diferentes componentes da matriz que coeluem com os pesticidas de interesse."

– Carmen Ferrer, PhD

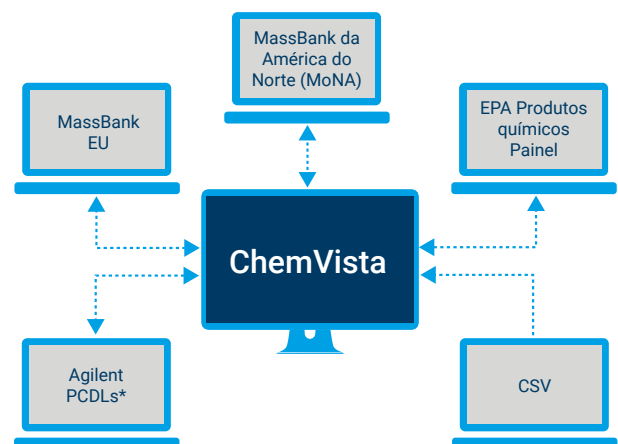
Departamento Analítico, Universidade de Almeria

### O software Agilent ChemVista apresenta bibliotecas integradas extensas e abrangentes

O Agilent ChemVista é um aplicativo de software autônomo que gerencia bibliotecas espectrais criadas por espectrometria de massas LC/Q-TOF e GC/Q-TOF. Ele integra detalhes de compostos, tempo de retenção e informações espectrais de várias fontes, permitindo:

- Acessar vários bancos de dados públicos e bibliotecas com curadoria.
- Organizar, gerenciar, editar ou criar espectros.
- Facilitar os fluxos de trabalho de identificação nos aplicativos de análise de dados do MassHunter e em outros.
- Identificar compostos com maior confiança.

Além disso, o ChemVista inclui conteúdo extenso de biblioteca e banco de dados pré-carregado.



\*Bancos de dados e bibliotecas de compostos pessoais com curadoria



O CrossLab é um recurso da Agilent que integra serviços, consumíveis e gerenciamento de recursos de todo o laboratório para auxiliar o laboratório a melhorar a eficiência, otimizar operações, aumentar o tempo de atividade dos instrumentos, desenvolver a habilidade do usuário e muito mais. Nossos serviços líderes do setor mantêm o máximo desempenho de seus instrumentos e incluem atualizações tecnológicas, consultoria de aplicação, reparos, manutenção preventiva, verificação de conformidade e treinamento.

O Agilent CrossLab oferece suporte aos instrumentos Agilent e instrumentos não Agilent selecionados, fornecendo suporte de consultoria para habilitação do trabalho, análise de laboratório, conformidade, gerenciamento de inventário e ativos, incluindo serviços de realocação.

[Saiba mais sobre o Agilent CrossLab](#) e veja exemplos de ideias para obtenção de ótimos resultados.

Saiba mais:

[www.agilent.com/chem/gcms-qtof](http://www.agilent.com/chem/gcms-qtof)

Encontre um centro de atendimento ao cliente local da Agilent em seu país:

[www.agilent.com/chem/contactus](http://www.agilent.com/chem/contactus)

Brasil

**0800 7281405**

[chem\\_vendas@agilent.com](mailto:chem_vendas@agilent.com)

Europa

[info\\_agilent@agilent.com](mailto:info_agilent@agilent.com)

Ásia e Pacífico

[inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:inquiry_lsca@agilent.com)

**Somente para uso em pesquisas. Não deve ser usado em procedimentos de diagnóstico.**

Estas informações estão sujeitas a alterações sem aviso prévio.

RA45442.6111111

© Agilent Technologies, Inc. 2024  
Publicado nos EUA, 5 de junho de 2024  
5991-8109PTBR

