

# Il nuovo MSD 5975 Inert

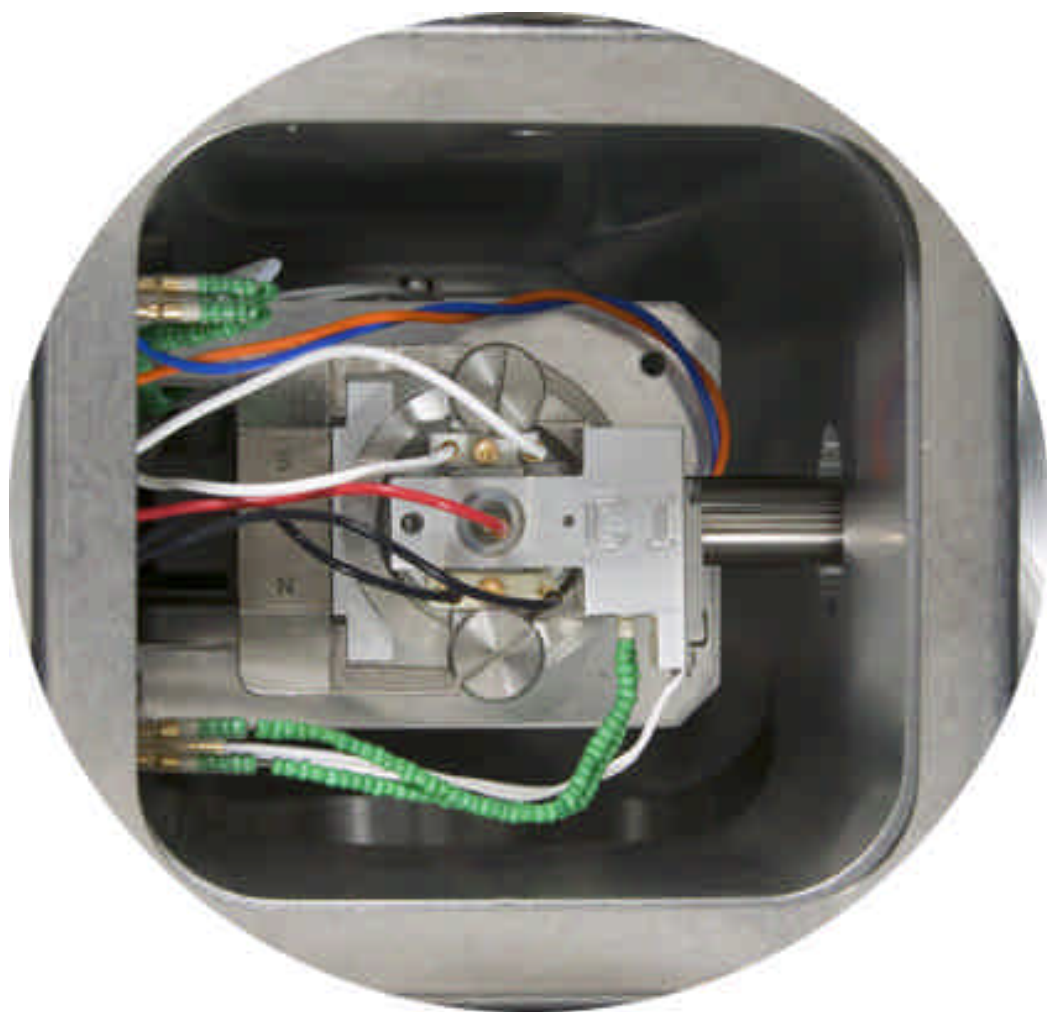


# Alcune tra le novità

- ***Maggiore sensibilità***
- ***Sistema di vuoto più efficiente***
- ***Intervallo di massa esteso***
- ***AutoCI***
- ***Sorgente EI CI combinata***
- ***SIM/Scan simultaneo***
- ***Interfaccia MSD QuickSwap***



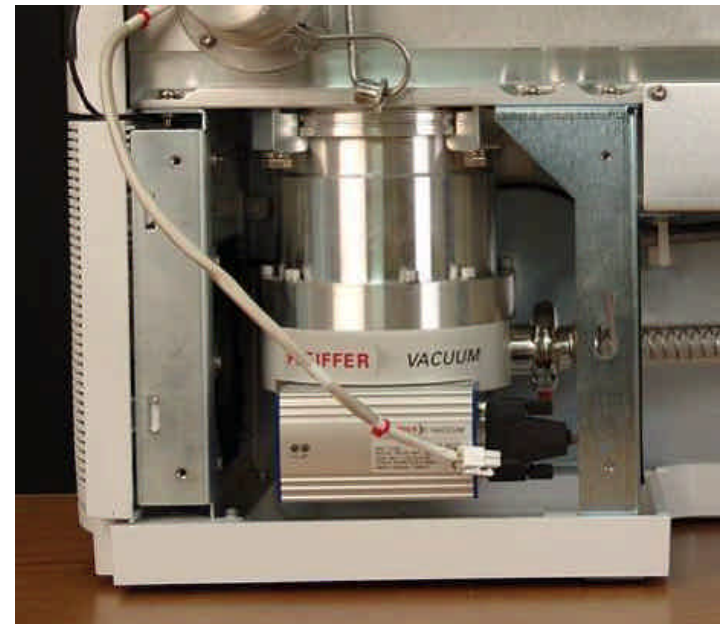
# Finestra frontale



# Pompe più efficienti

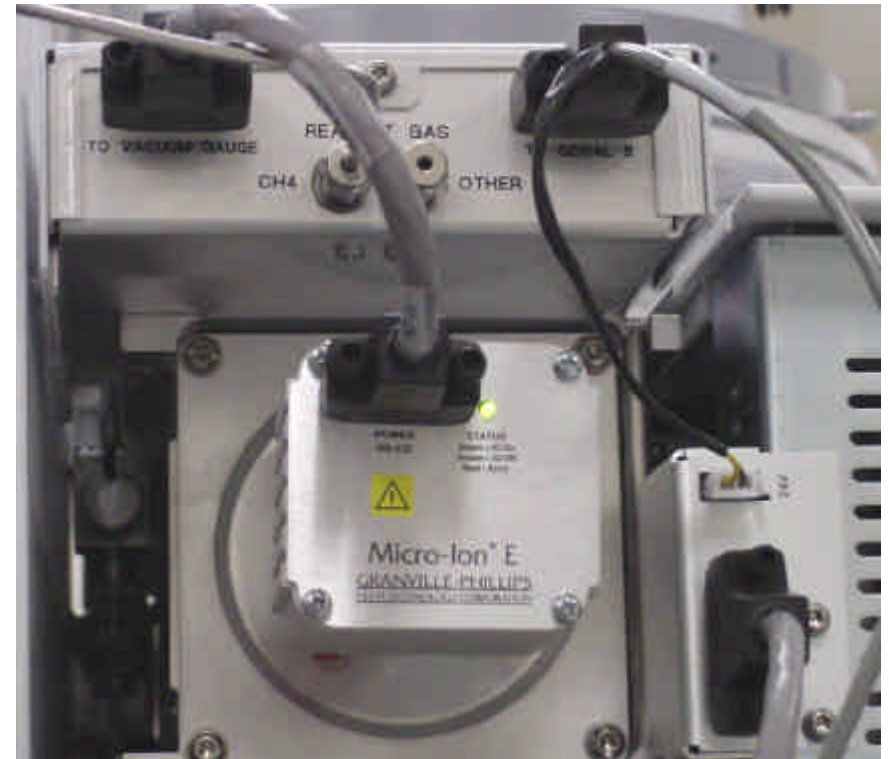
*Più efficienti per elio ed idrogeno*

- *Nuova pompa standard (70 l/sec)*
- *Nuova pompa performance (262 l/sec)*
- *Nuova pompa meccanica da 2,5 m<sup>3</sup>/ora*



# Misuratore del vuoto integrato

- **Misurazione accurata del vuoto**
- **Ideale per diagnosticare piccole perdite**



# Stato del vuoto



Software display



Display locale

# In questa presentazione

- **Il nuovo intervallo di massa**
- ***Auto CI***
- ***SIM/Scan sincronizzata***
- ***Interfaccia MSD QuickSwap***
- ***Splitter attivo***
- ***eMethod***
- ***Nuove funzioni SW***



# Il nuovo intervallo di massa

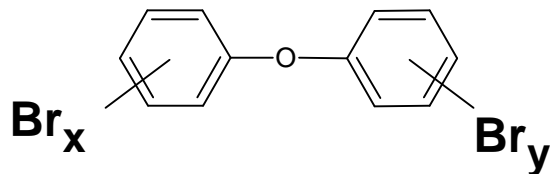
- ***1-1050 m/z***
  - Nuovo quadrupolo
  - Nuova elettronica



# Intervallo di massa per i PBDE

Intervallo di massa del nuovo 5975 di  
Agilent: 1.6 - 1050

***Gli isomeri Octa-BDE, Nona-BDE & Deca-BDE hanno peso molecolare > 800 amu***



Br = 8 P 801.4

Br = 9 P 880.3

Br = 10 P 959.2

# Direttive EU su PBB e PBDE

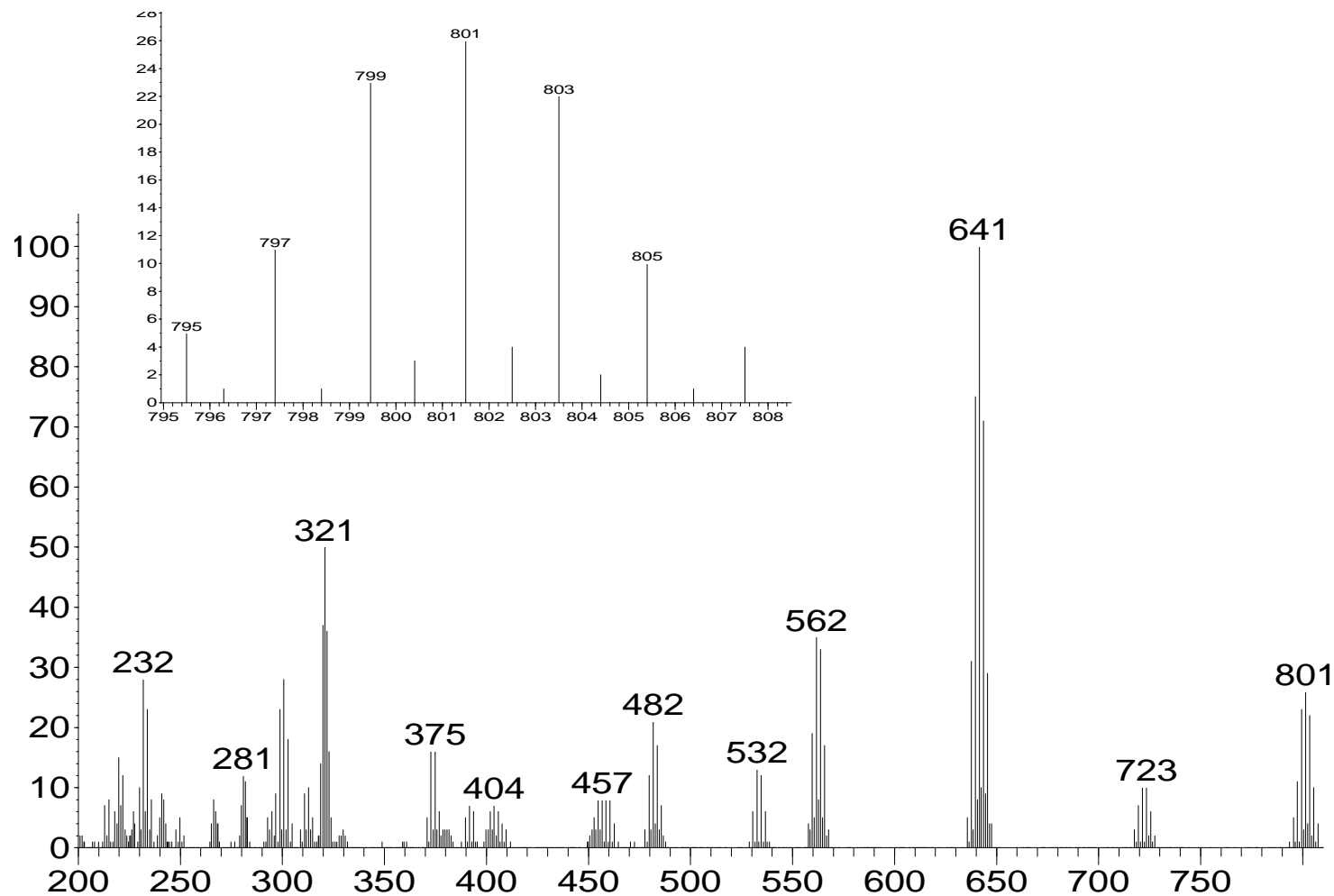
## Waste Electrical & Electronic Equipment (WEEE)

- ***Directive 2002/96/EC segregate plastics containing PBB and PBDE from PBB and PBDE-free plastics.***

## Restrictions of Hazardous Substances (RoHS)

- ***RoHS (Directive 2002/95/EC) ban PBB and PBDE in Electrical and Electronic Equipment (EEE)***
- **Restrictions on marketing and use of certain dangerous substances and preparations (penta-BDE, octa-BDE)**
- ***Directive 2003/11/EC of 6 February 2003 amending for the 24th time Council Directive 76/769/EEC***

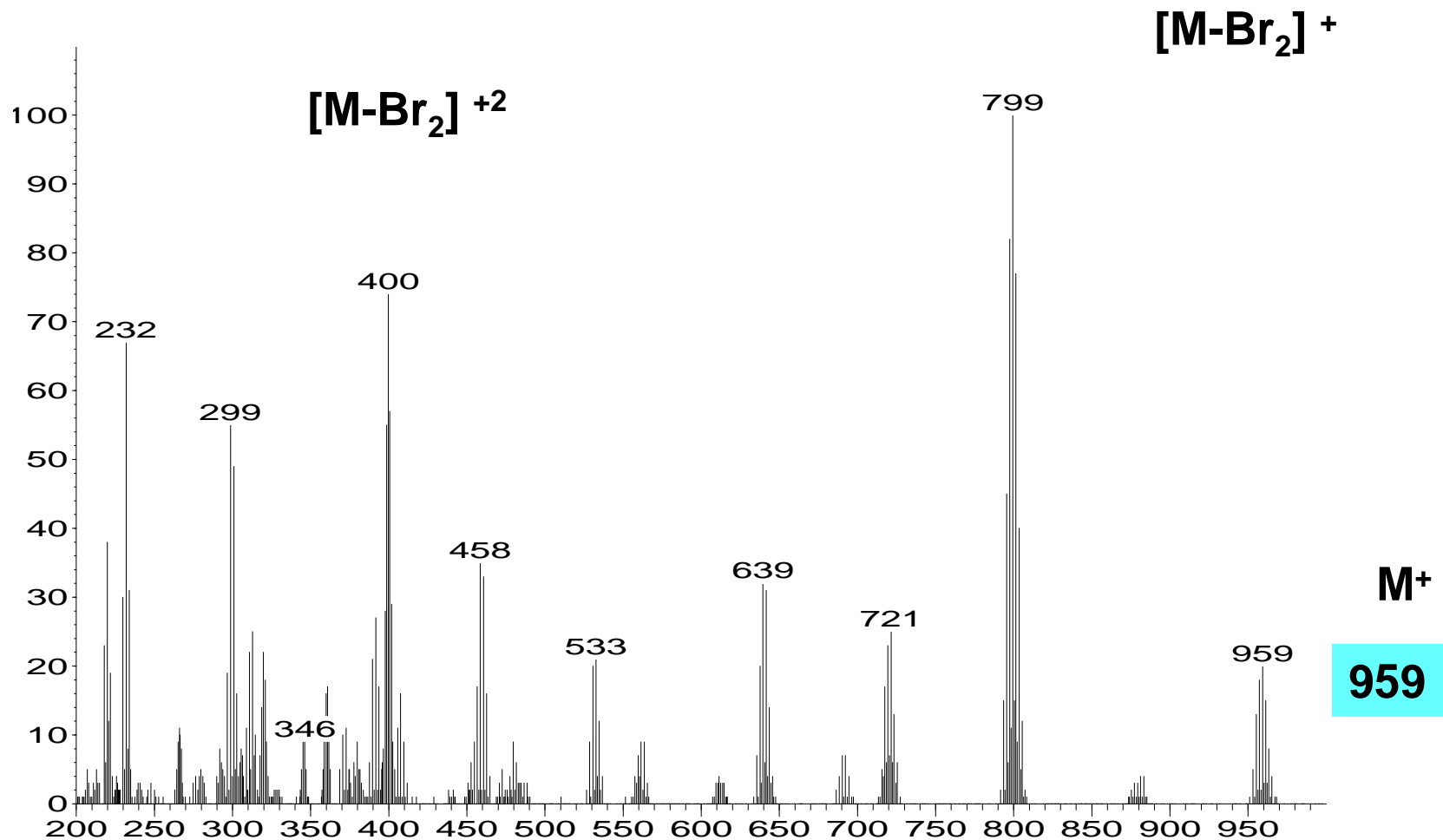
# Spettro di ionizzazione EI di un ottabromodifenil etero (PBDE-203) da 200 a 810 m/z



801

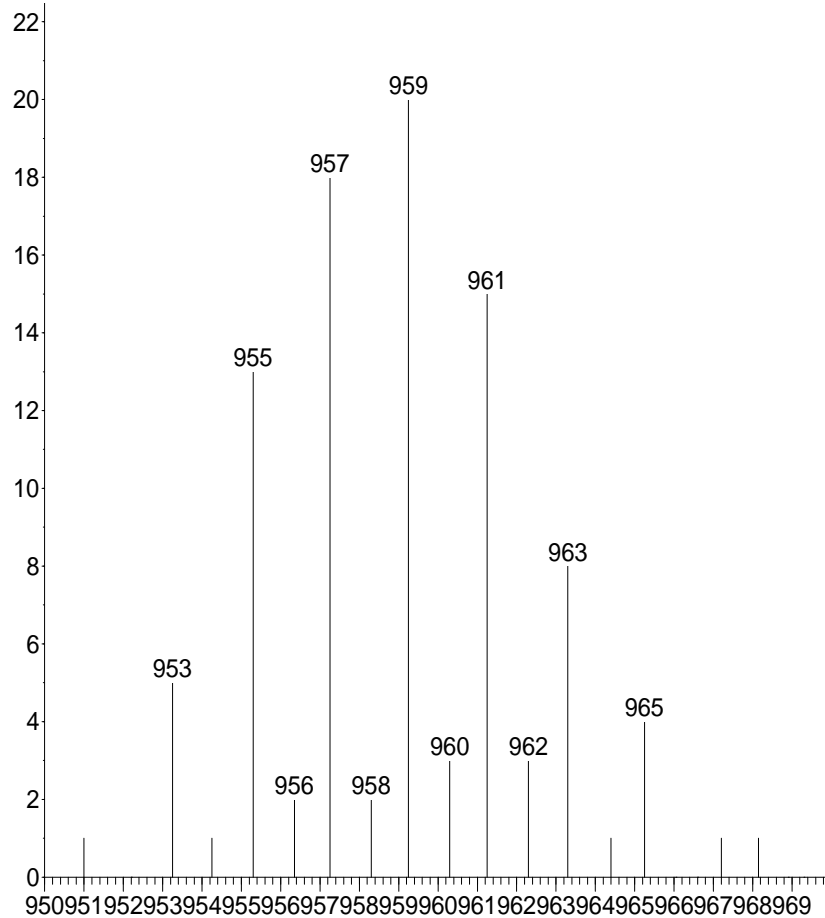
# Aspetti importanti dell'analisi dei PBDE:

Spettro di ionizzazione EI del decabromodifenil etero (PBDE-209) da 200 a 1000 m/z sulla 5975 Inert MSD

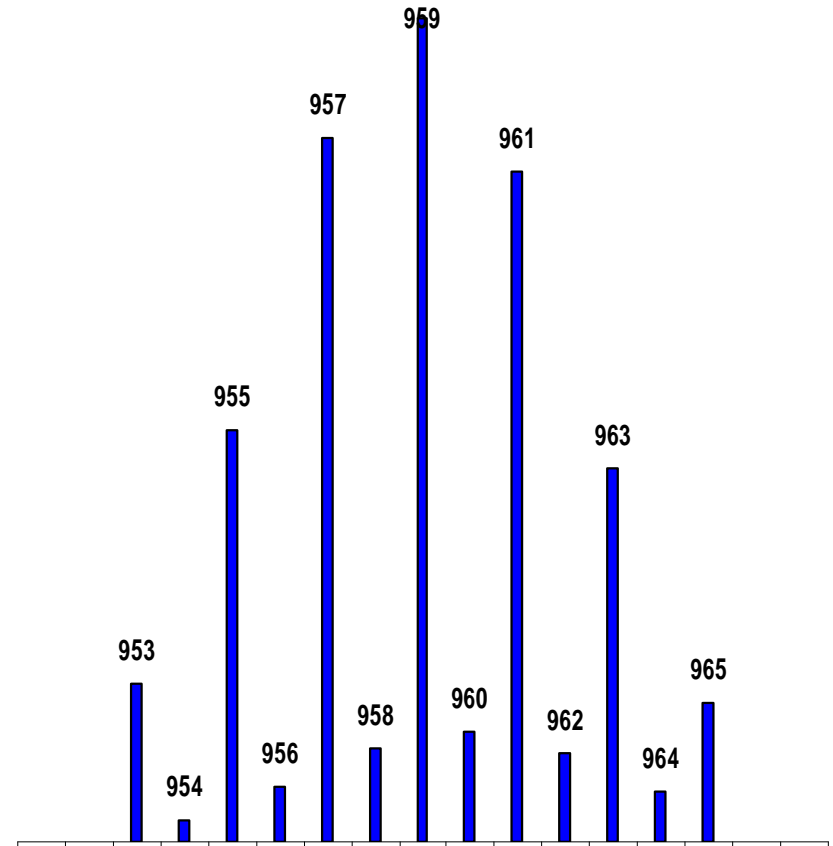


# Aspetti importanti dell'analisi dei PBDE:

## Spettro del decabromodifenil etero (PBDE-209), cluster dello ione molecolare reale e teorico



**Abbondanze sperimentali con  
5975 inert**



**Abbondanze teoriche**

# Una importante caratteristica della 5975

## *Componenti dell'analizzatore riscaldate*

*⚠ I BFR ed i polimeri hanno alti punti di ebollizione!*

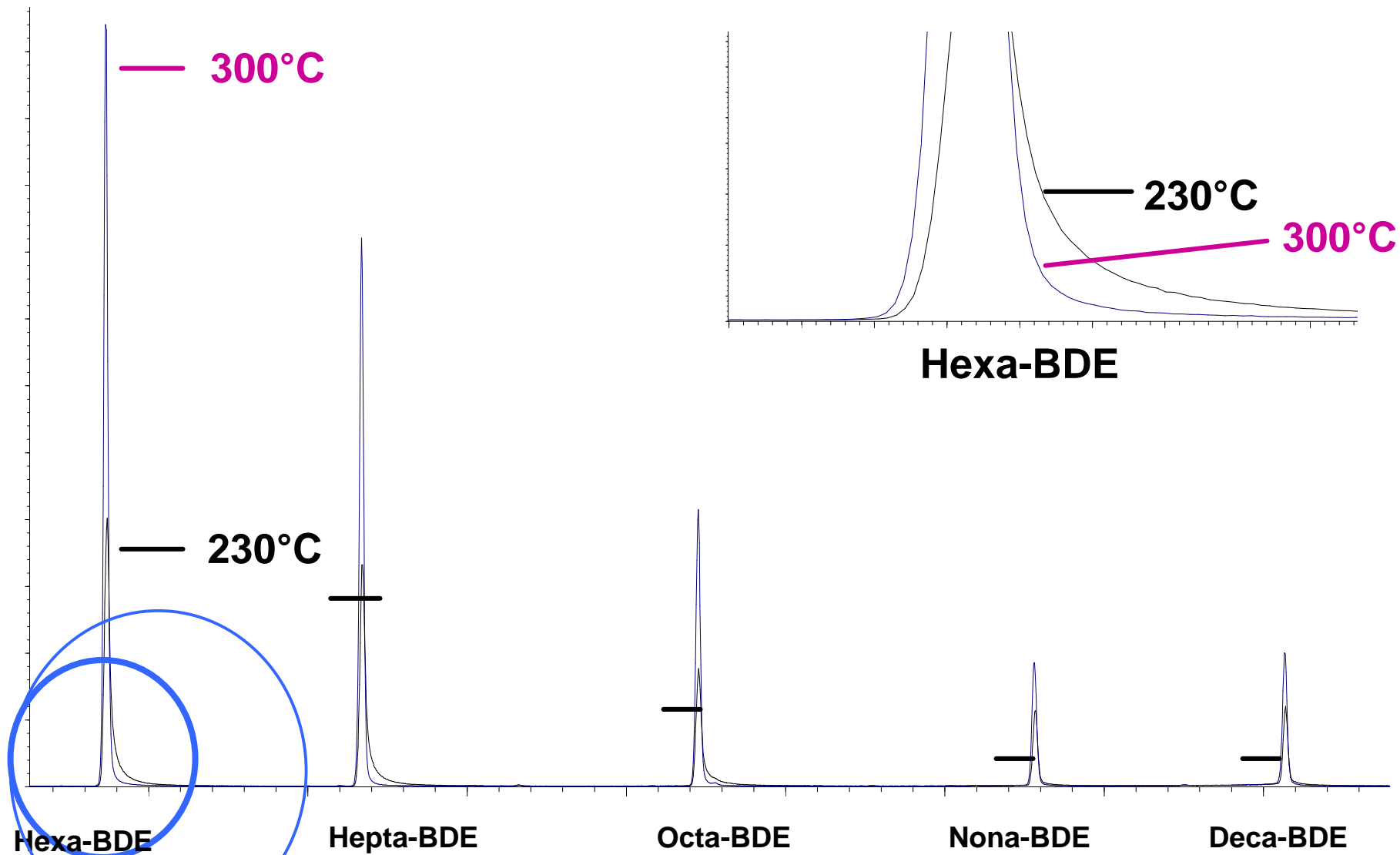
	<b>MAX Source Temp</b>	<b>Quad Temp</b>
<b>Agilent 5975 inert</b>	<b>300 °C</b>	<b>150 °C</b>

Picchi migliori, operatività per tempi più lunghi anche su campioni difficili, come i polimeri

Il quadrupolo riscaldato di Agilent previene che sporcizia proveniente dalla matrice possa condensare su di esso

Quadrupoli non riscaldati richiedono pulizia

# Paragone delle temperature della sorgente: 230 °C e 300 °C



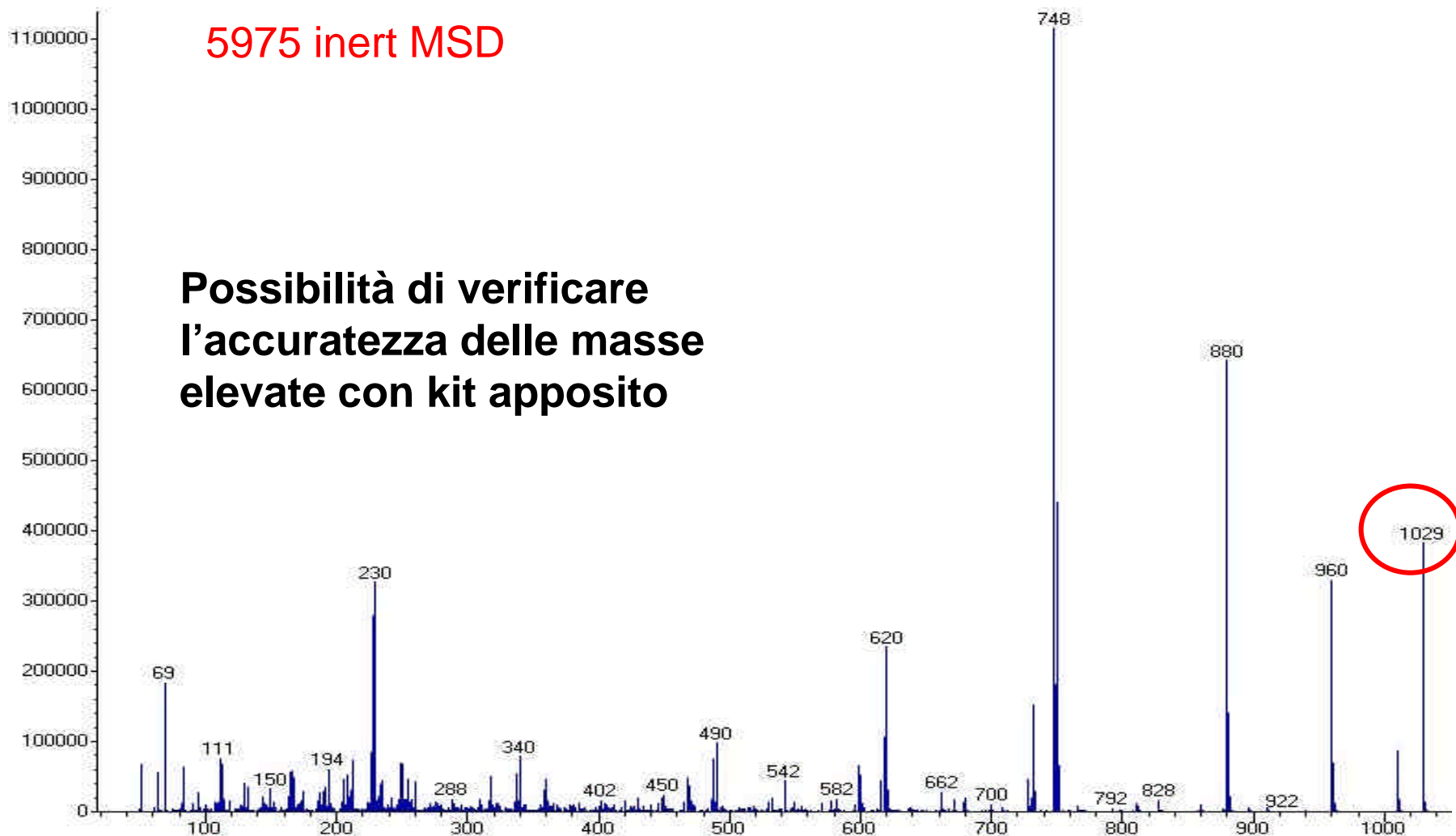
# Perché scegliere la 5975?

- **Accuratezza superiore della massa**  
↳ **corretta identificazione degli isomeri**
- **Tempi di ritenzione costanti e ‘universali’ (RTL)**  
↳ **corretta identificazione dei congeneri**
- **Sensibilità**  
↳ **per i polimeri, occorre diluire**
- **Zone dell’MSD riscaldate**  
↳ **robustezza e resistenza**
- **Possibilità del controllo dell’accuratezza delle masse elevate con apposito kit**

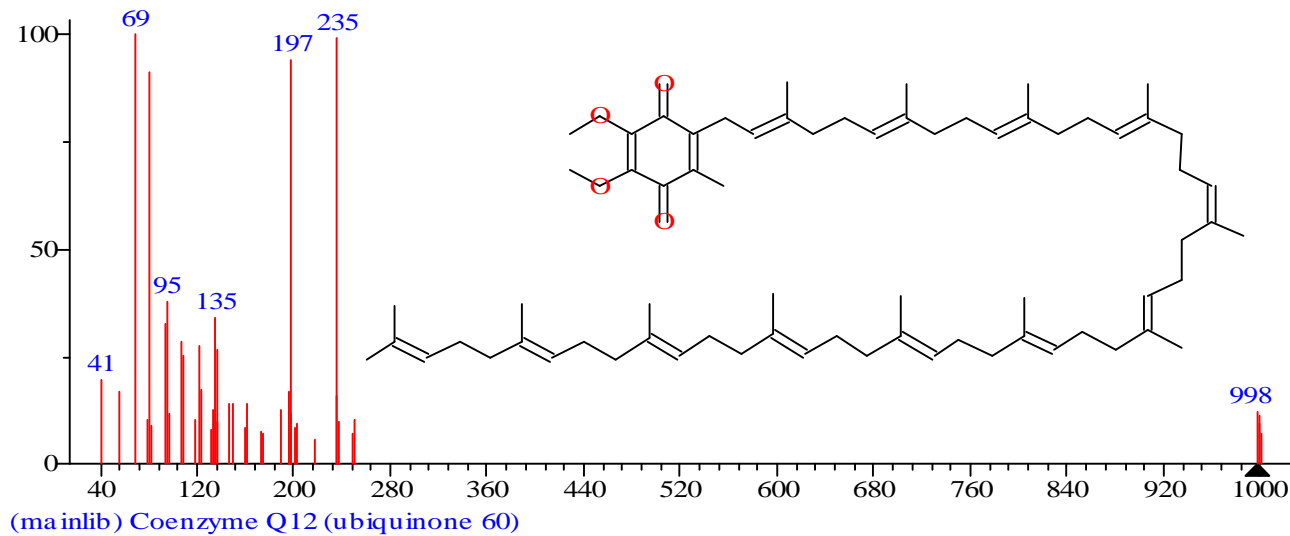
# Perché scegliere la 5975?

5975 inert MSD

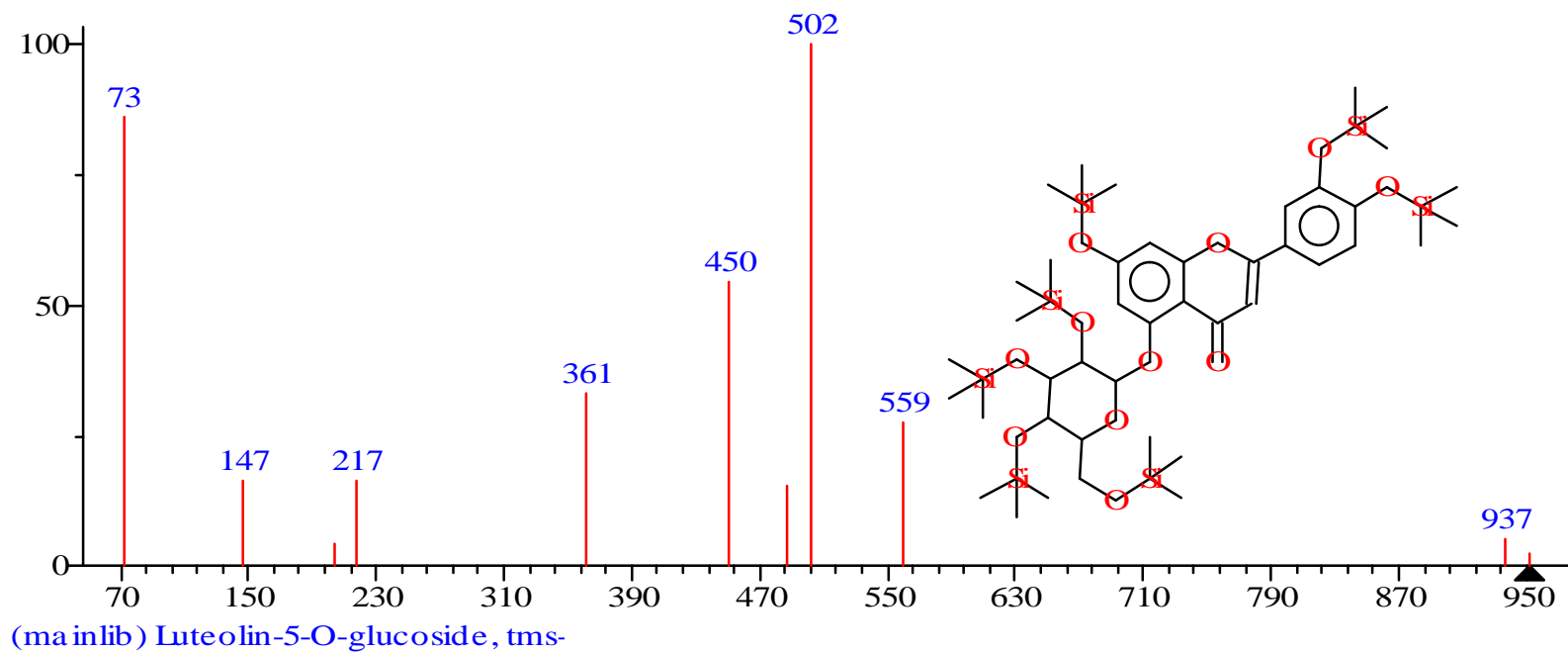
**Possibilità di verificare  
l'accuratezza delle masse  
elevate con kit apposito**



# Perché scegliere la 5975?



# Perché scegliere la 5975?



# In questa presentazione

- *Il nuovo intervallo di massa*
- **Auto CI**
- *SIM/Scan sincronizzata*
- *Interfaccia MSD QuickSwap*
- *Splitter attivo*
- *eMethod*
- *Nuove funzioni SW*

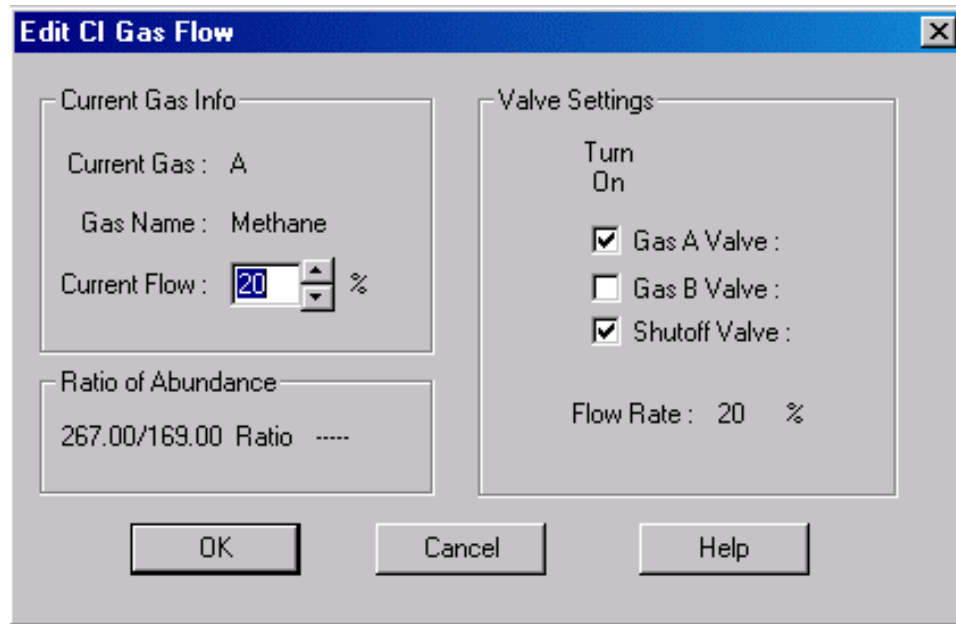


# AutoCI

- ***Tuning e setup automatizzati***
- ***Nessun regolatore esterno***
- ***La CI resa semplice come la EI***



# AutoCI – Nuova interfaccia

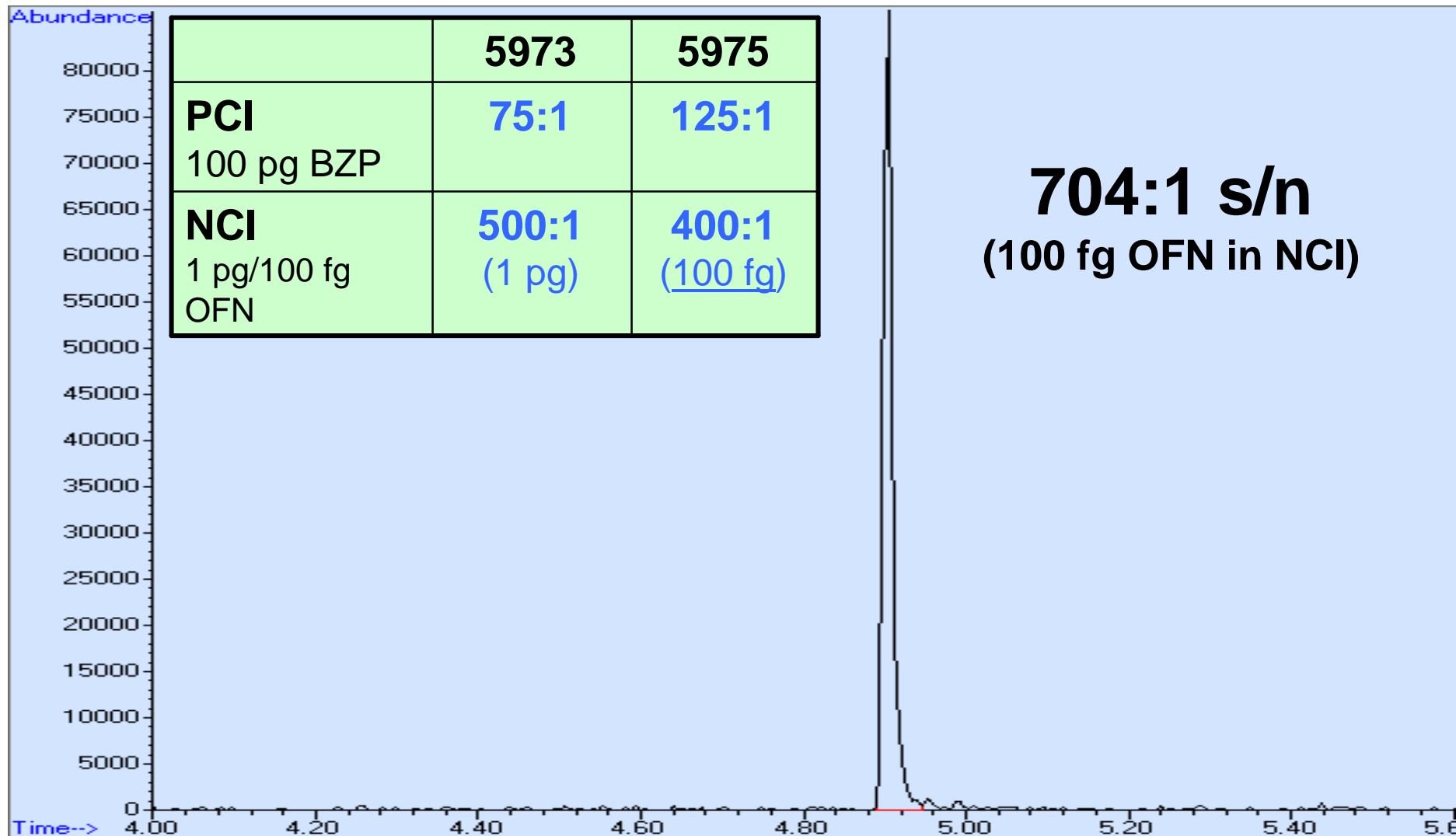


Nuova  
interfaccia CI  
della 5975



Vecchia interfaccia  
CI della 5973

# Maggiore sensibilità – CI Scan



# E' possibile impostare sequenze miste

- La funzione AutoCI permette di lavorare in ionizzazione chimica senza interventi dell'operatore
- La nuova sorgente ibrida EI-CI consente di passare da una forma di ionizzazione all'altra senza intervenire sullo strumento
- Sono quindi possibili sequenze in cui lo stesso campione viene acquisito in modalità EI ed in modalità PCI/NCI

# In questa presentazione

- *Il nuovo intervallo di massa*
- *Auto CI*
- **SIM/Scan sincronizzata**
- *Interfaccia MSD QuickSwap*
- *Splitter attivo*
- *eMethod*
- *Nuove funzioni SW*



# SIM e SCAN

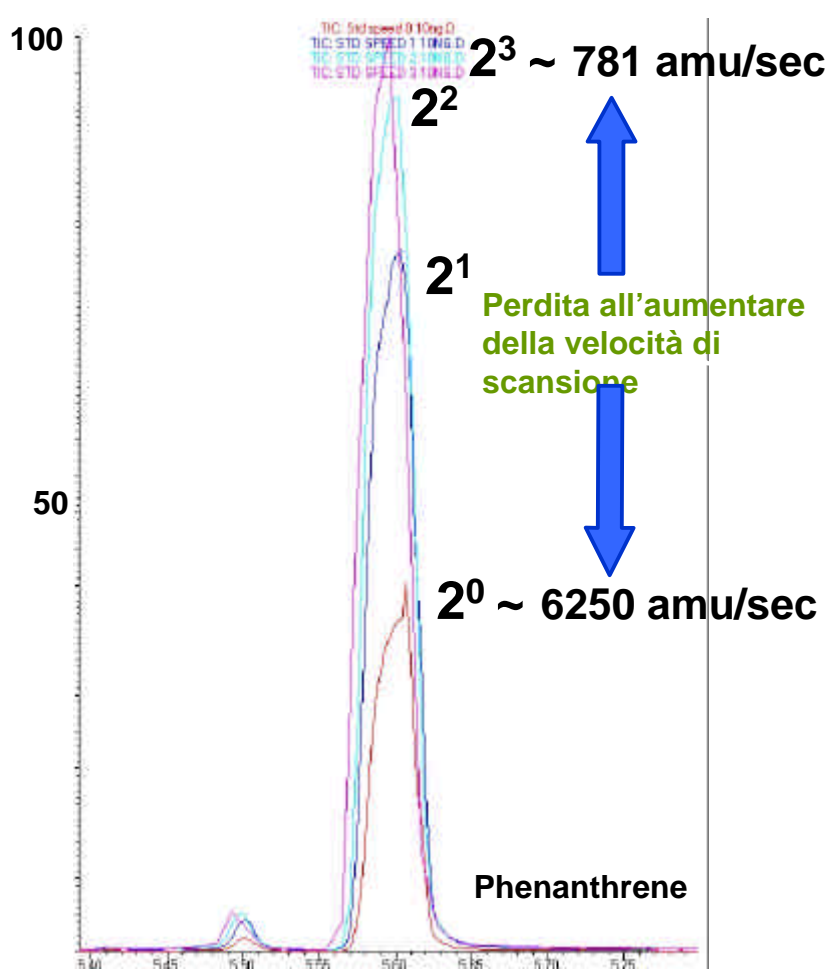
- **La modalità di acquisizione SCAN offre il maggior numero di informazioni, garantendo spettri completi degli analiti di interesse**
- **La modalità di acquisizione SIM è da sempre preferita quando si vuole massimizzare la sensibilità**
- **Una tecnica che unisca i benefici di entrambe le modalità di acquisizione è da sempre il sogno di chi lavora in GC-MS**
- **Le precedenti soluzioni offerte dal mercato hanno sempre rappresentato un compromesso delle prestazioni SIM e SCAN**

# Modalità SIM/scan sincronizzata

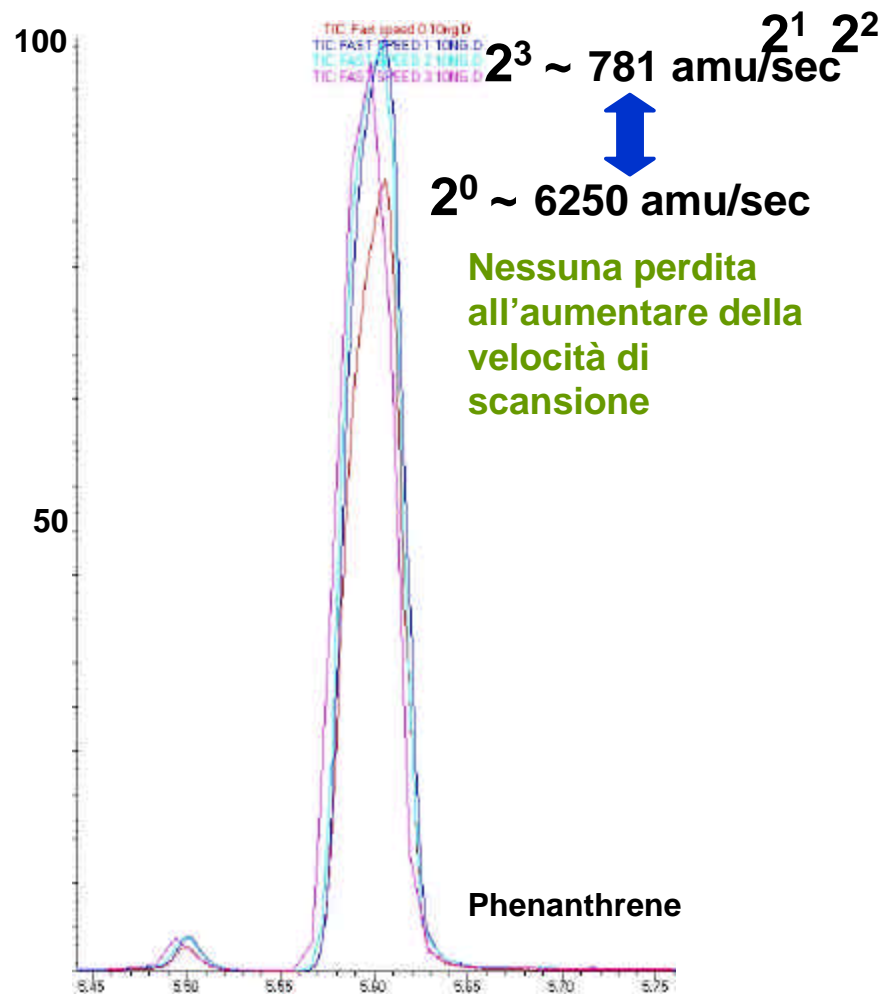
- Il lancio della 5975 MSD è accompagnato dall'introduzione di una nuova revisione del software – **G1701DA D.02**
- La **G1701DA D.02** supporta l'acquisizione sincronizzata in modalità SIM / Scan
- L'acquisizione SIM/Scan offre i benefici di entrambe le tecniche, senza nessun compromesso
- I due elementi cardine di questa modalità di acquisizione sono l'elettronica dell'analizzatore e la velocità di scrittura su disco

# 5975 e 5973 con Elettronica Performance, Full scan

## Elettronica Standard



## Elettronica Performance



# Elettronica Performance – SIM

## Miglioramenti nel SIM

(quando ci si sposta da uno ione all'altro)

<i>Spostamento lungo l'asse delle masse in SIM</i>	<i>Elettronica Standard</i>	<i>Elettronica Performance*</i>
<i>8 amu</i>	<i>14 ms</i>	<i>0.9 ms</i>
<i>80 amu</i>	<i>14 ms</i>	<i>1.5 ms</i>
<i>800 amu</i>	<i>16 ms</i>	<i>8.0 ms</i>

\* Elettronica Performance: standard per 5975 MSD e nelle 5973 MSD installate a partire dal settembre 2004

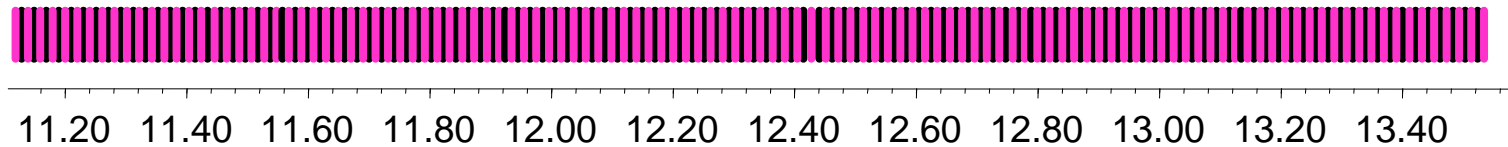
# La rivoluzione dell'elettronica veloce

- **Pressochè azzerati i tempi morti tra una scansione e l'altra in modalità SCAN**
- **Ridottissimi i tempi di re-impostazione dei voltaggi del quadrupolo nel passaggio da uno ione all'altro in modalità SIM**
- **E' possibile tradurre questo tempo guadagnato in maggiore sensibilità o nell'acquisizione simultanea SIM/Scan**



# Modalità SIM/Scan sincronizzata di Agilent

Agilent – campionamento fine per tutta l'analisi

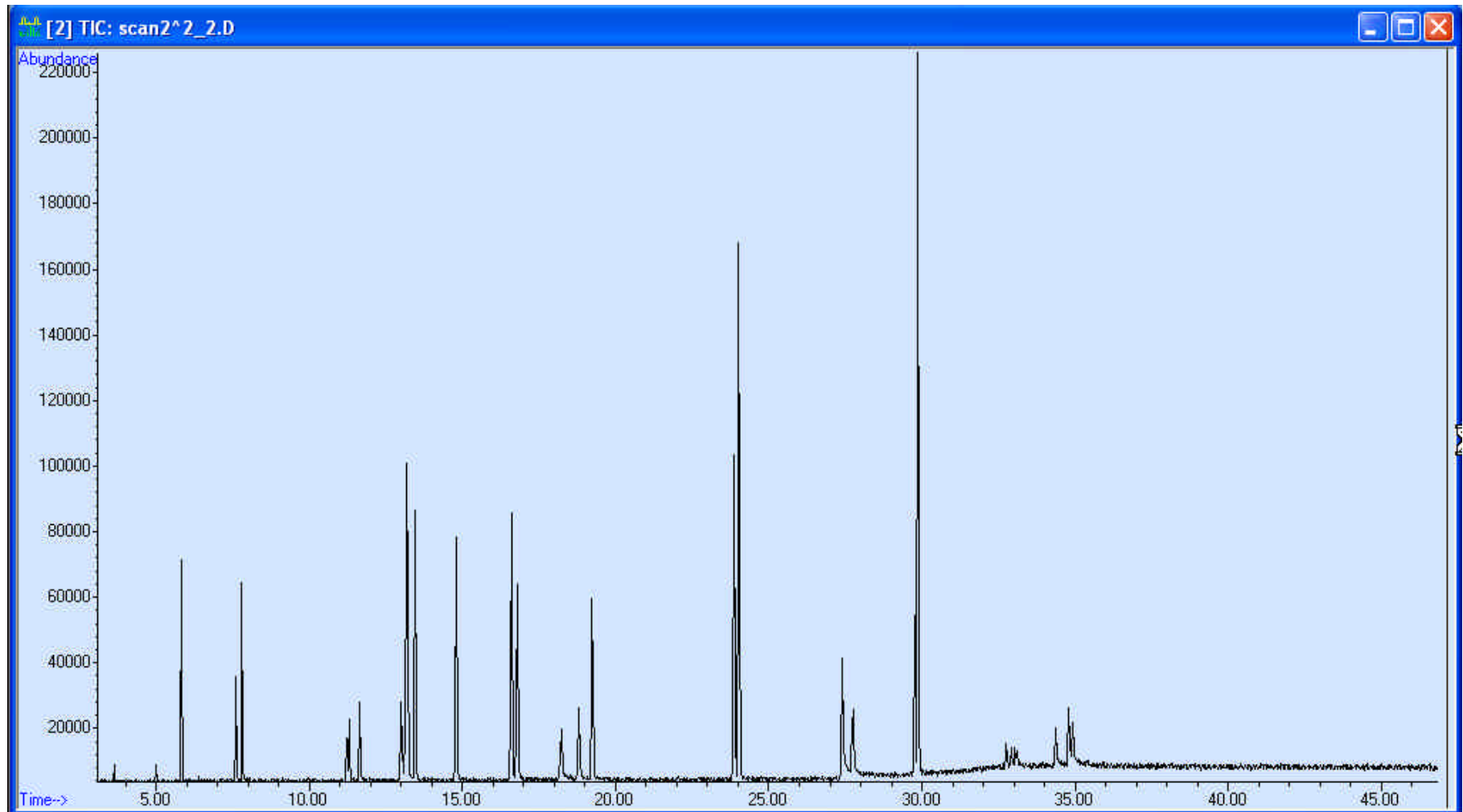


- ***SIM + scan alternati ad alta frequenza***
- ***Alta sensibilità e molte informazioni per tutta la corsa cromatografica***

# La funzione AutoSIM

- ***Converte qualsiasi metodo scan ad un metodo in SIM***
  - Seleziona le finestre di acquisizione degli ioni
  - Seleziona gli ioni
  - Completamente configurabile
- ***Automatico, non è necessario intervenire manualmente***

# Iniettare lo standard



# Eseguire l'AutoSIM

- 1. *Caricare un file***
- 2. *Eseguire l'AutoSIM***

METHOD	CHROMATOGRAM
RUN METHOD...	RUN CUSTOMANALYSIS
LOAD METHOD...	SAVE METHOD...
EDIT METHOD...	EDIT CUSTOMANALYSIS...
<b>GENERATE AUTOSIM METHOD.</b>	EDIT SIM PARAMETERS...
1	
2	
3	
BATCH MODE...	

# Impostare il metodo SIM

Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / SCAN2^2\_2.D (MS Data: Not Quantitated)

File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Toolbars Help

Execute

Sim Group Table

	Start Time (min)	Default Dwell (ms)	Group Label	Calc Cycles/Sec	Ion1	Ion2	Ion3	Ion4	Ion5	Ion6	Ion7	Ion8
1	3.043	85	Auto_1	2.5	180.85	182.85	216.85	218.85				
2	5.816	40	Auto_2	3.6	108.9	110.9	180.95	182.85	218.85			
3	6.298	95	Auto_3	2.2	180.95	182.85	216.85	218.85				
4	7.003	95	Auto_4	2.2	100	269.75	271.75	273.75				
5	7.826	125	Auto_5	1.8	66.05	260.75	262.8	264.8				
6	8.797	95	Auto_6	2.2	80.95	182.85	184.9	236.7				
7	9.773	95	Auto_7	2.2	194.85	236.8	238.8	240.8				
8	10.550	65	Auto_8	1.6	79.05	80.95	81.95	245.95	247.95	262.8	315.9	317.9
9	11.548	150	Auto_9	1.5	194.85	236.8	240.8	242.85				
10	12.146	180	Auto_10	1.3	165	234.95	236	237				
11	13.032	65	Auto_11	1.6	165	226.8	228.8	234.95	236	237	271.75	273.75
12												
13												
14												
15												
16												

Sheet1

Fill down using increment: 0

OK Cancel Help

**AutoSIM crea automaticamente i gruppi SIM e seleziona gli ioni di ciascun gruppo**

# Acquisire un campione SIM/scan

**MS SIM/Scan Parameters** ✕

MS Instrument Parameters

Sample Inlet: GC

EM Voltage: 0 Rel = 1200

Solvent Delay: 3.00 min.

Acq. Mode: SIM

Acquire Scan and SIM data

Real Time Plot

Time Window: 10 min.

MS Window 1

Plot Type: Total

Y-Scale: 0 to 2000000

MS Window 2

Plot Type: None

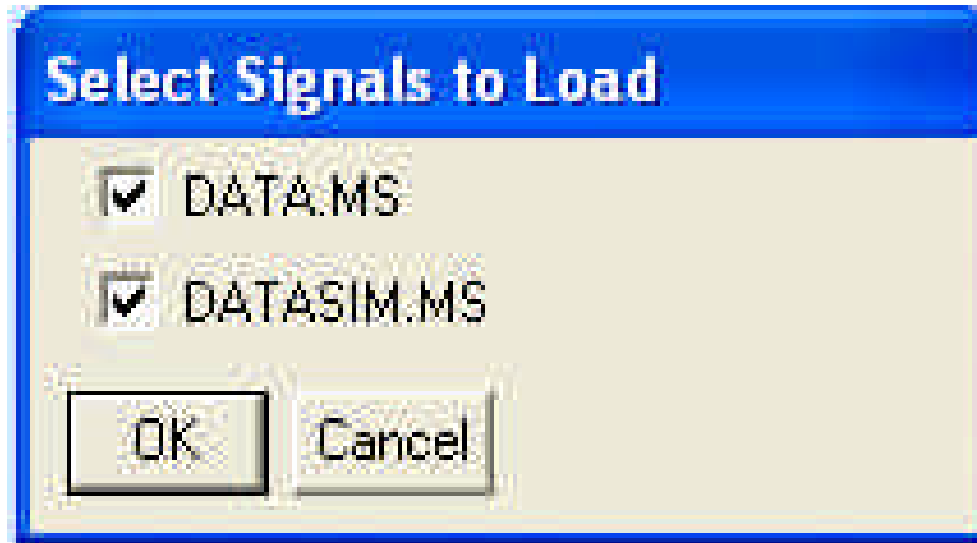
Y-Scale: 0 to 100000

Tune File  
ATUNE.U

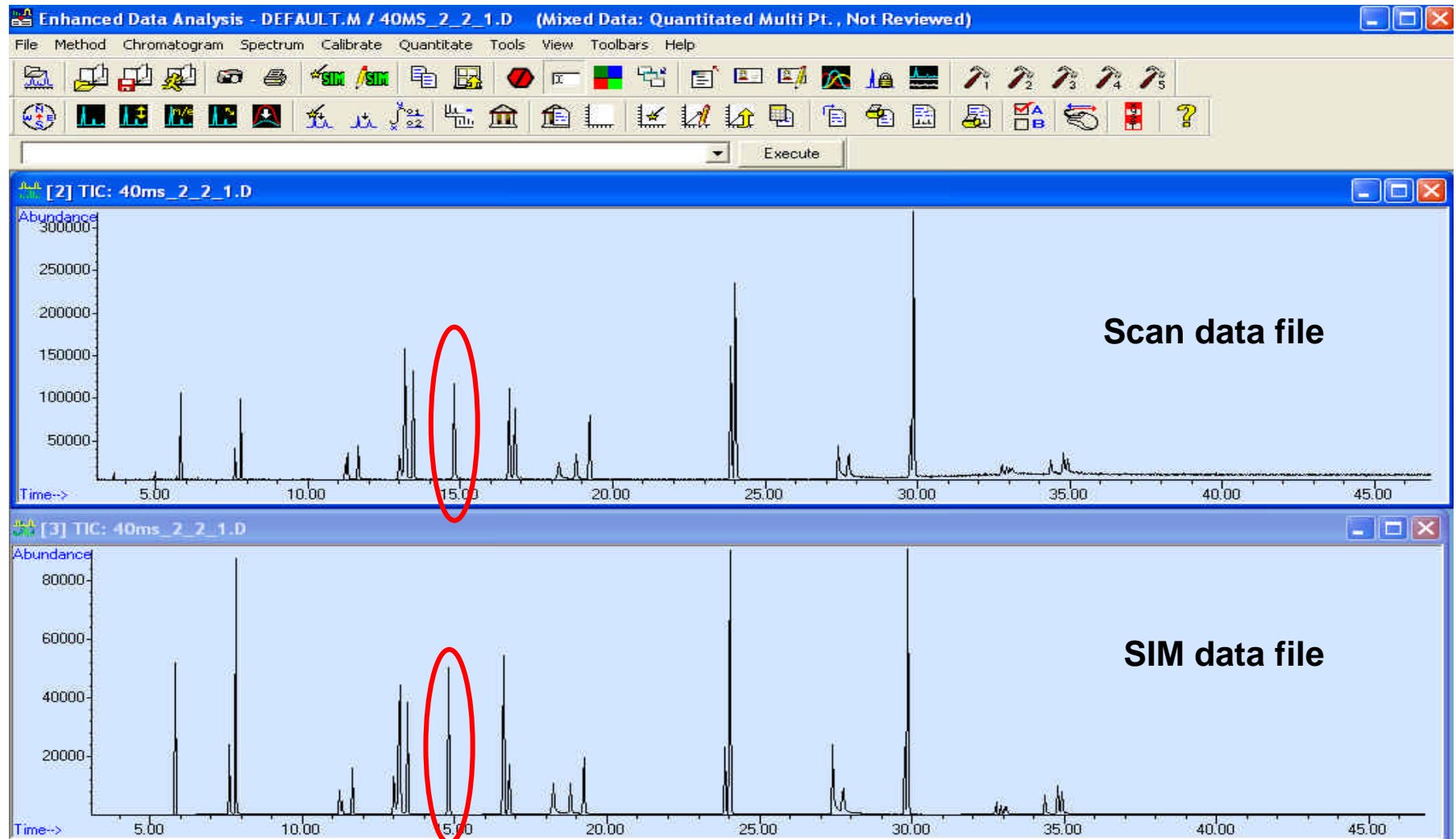
Edit SIM Params    Zones    Timed Events

OK    Cancel    Help

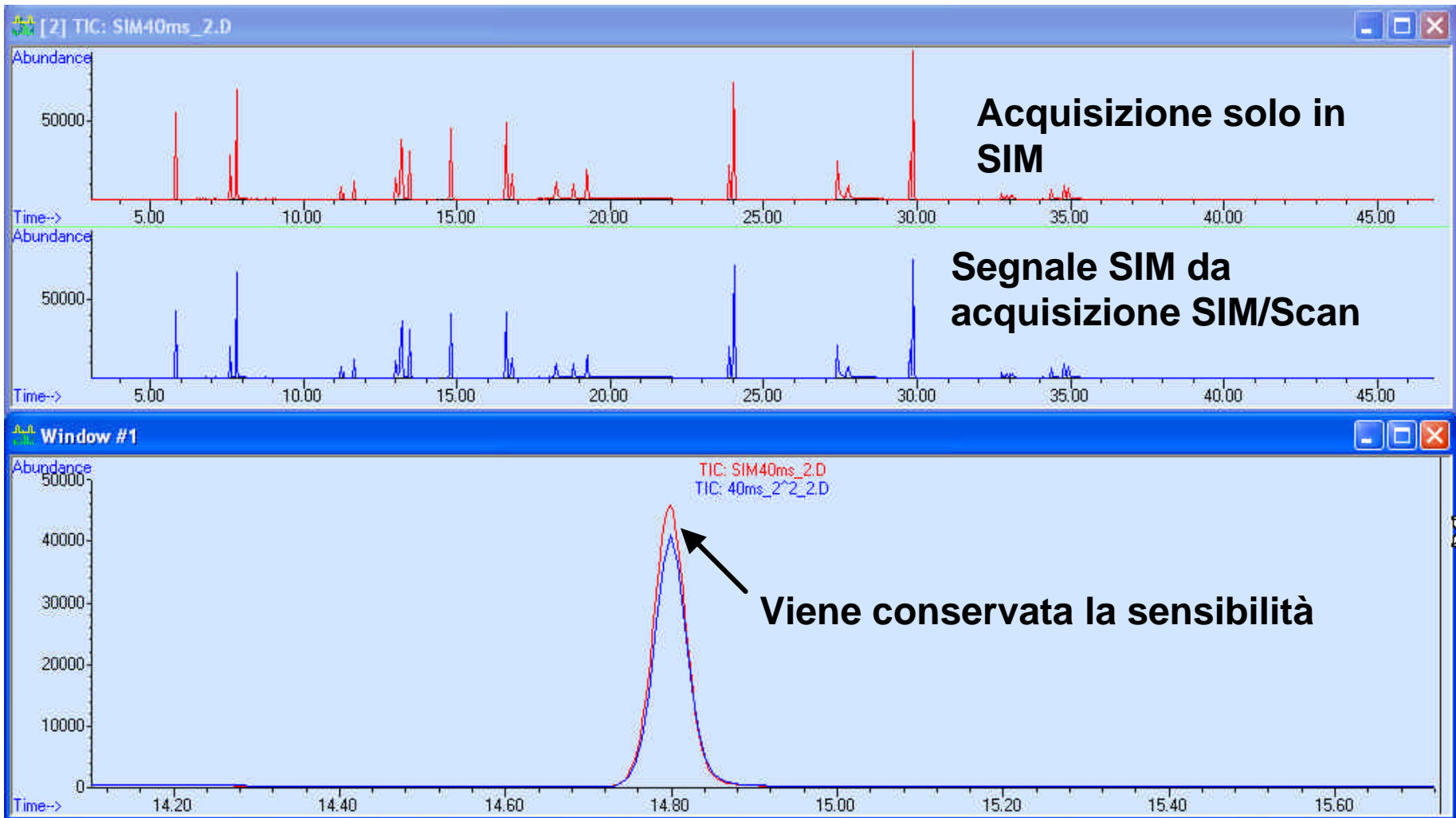
# I dati Scan e SIM sono conservati separatamente



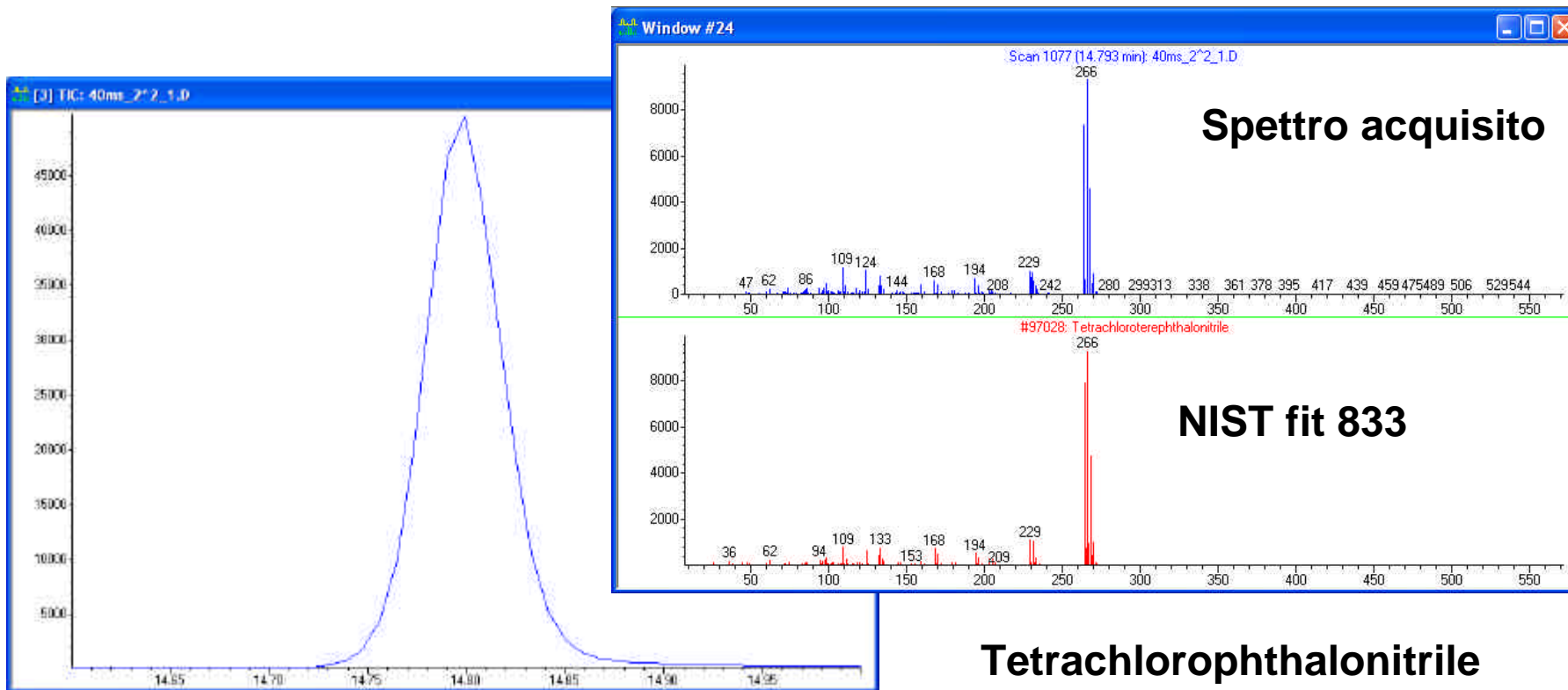
# Visualizzare le tracce simultaneamente



# Mantiene la sensibilità del SIM



# Gli spettri sono identici a quelli in libreria



**Segnale SCAN da acquisizione  
SIM/scan**

# Sensibilità SIM/Scan e solo Scan:

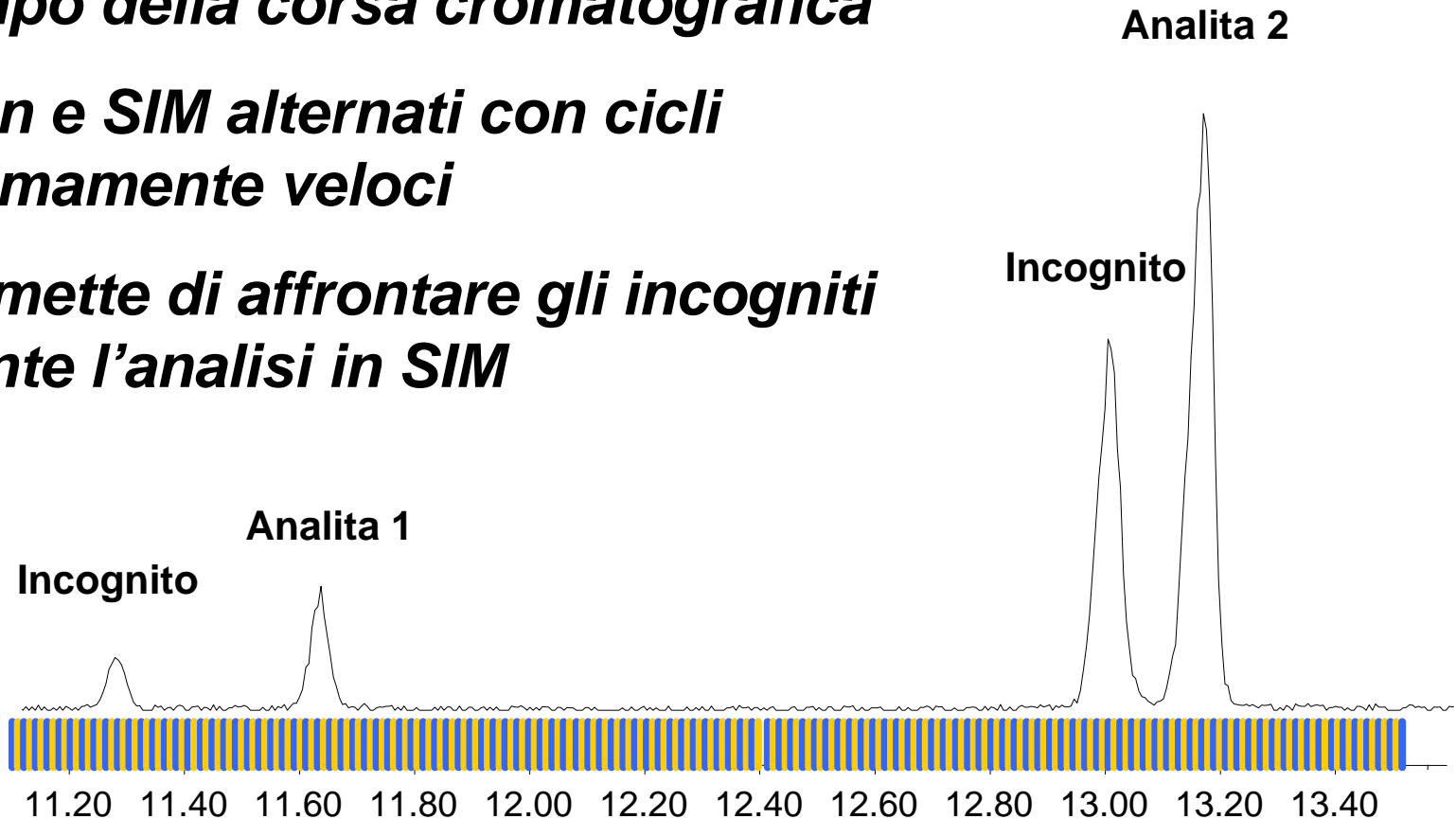
5-ml Purge, 1 ppb Ethyl Chloride (un composto che risponde poco)

Velocity XPT/6890N/5975 P&T/GC/MS system  
20-m X 0.18 mm X 1.0  $\mu$ m DB-VRX column  
Sampling rate = 2 all scan runs; Dwell = 20 ms for SIM

	<i>RMS S/N</i>	<i>Peak/Peak S/N</i>
<i>SIM (SIM/Scan)</i>	749	254
<i>Scan (SIM/Scan)</i>	75	20
<i>Scan (Scan only)</i>	73	17

# La funzione SIM/SCAN

- **Acquisizione SIM/scan durante tutto il tempo della corsa cromatografica**
- **Scan e SIM alternati con cicli estremamente veloci**
- **Permette di affrontare gli incogniti durante l'analisi in SIM**



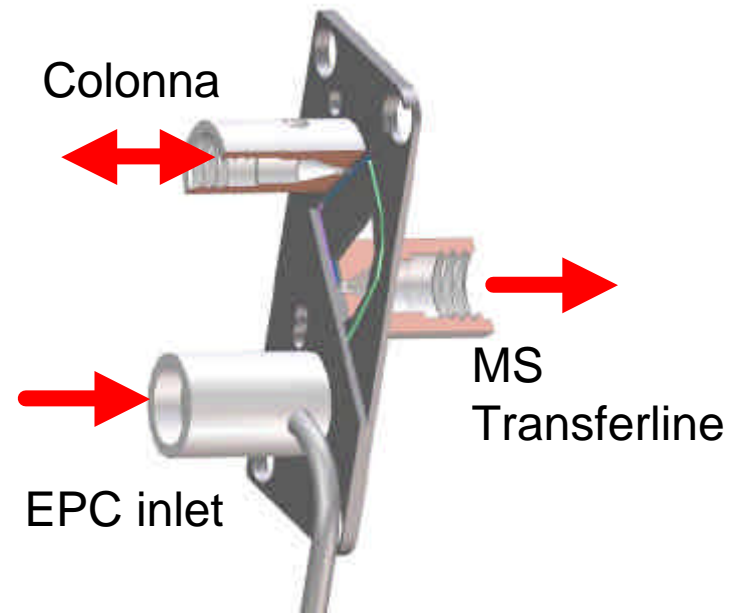
# In questa presentazione

- *Il nuovo intervallo di massa*
- *Auto CI*
- *SIM/Scan sincronizzata*
- **MSD QuickSwap**
- *Splitter attivo*
- *eMethod*
- *Nuove funzioni SW*



# MSD QuickSwap

- Rimpiazza il NoVent
- Sostituzione colonna senza fermare lo strumento
- Modalità backflush
- Manutenzione dell'iniettore con flusso invertito
- Rimuove i componenti più pesanti dalla colonna
- Mantiene un flusso costante all'MSD



Tecnologia microfluidica

# In questa presentazione

- *Il nuovo range di massa*
- *Auto CI*
- *SIM/Scan sincronizzata*
- *MSD QuickSwap*
- **Splitter attivo**
- *eMethod*
- *Nuove funzioni SW*



# Analisi di pesticidi tradizionale

- *GC-ECD per clorurati*
- *GC-FPD per composti con zolfo o fosforo*
- *GC/MS per conferma*

***2 o 3 gas cromatografi***

***3 iniezioni***

# Sistema Agilent per l'analisi di pesticidi

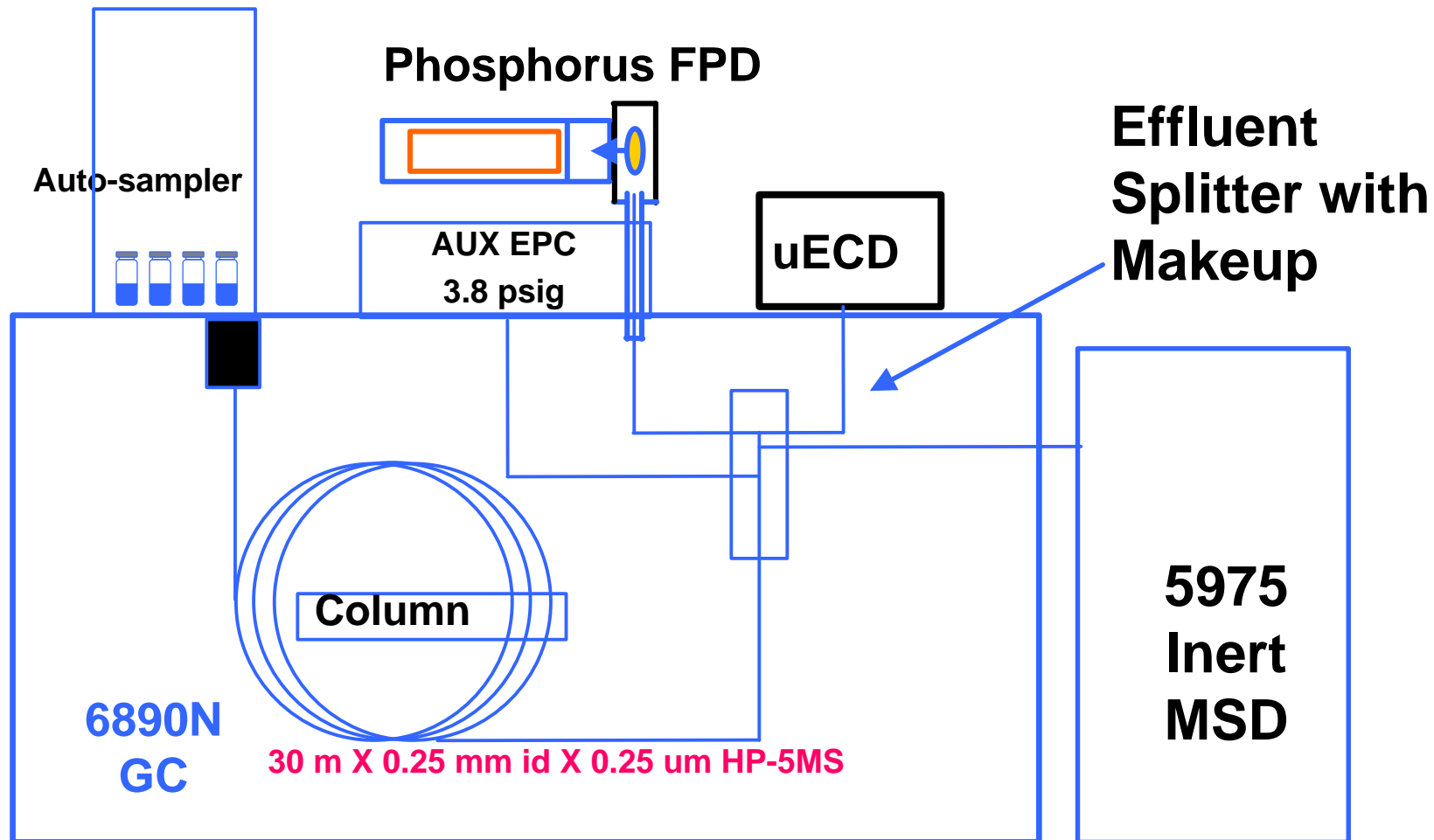
**1 gas cromatografo**

**1 iniezione**

- *FPD*
- *μECD*
- *MS SIM*
- *MS Scan*

# 6890N/5975 inert: analisi di pesticidi con splitter microfluidico

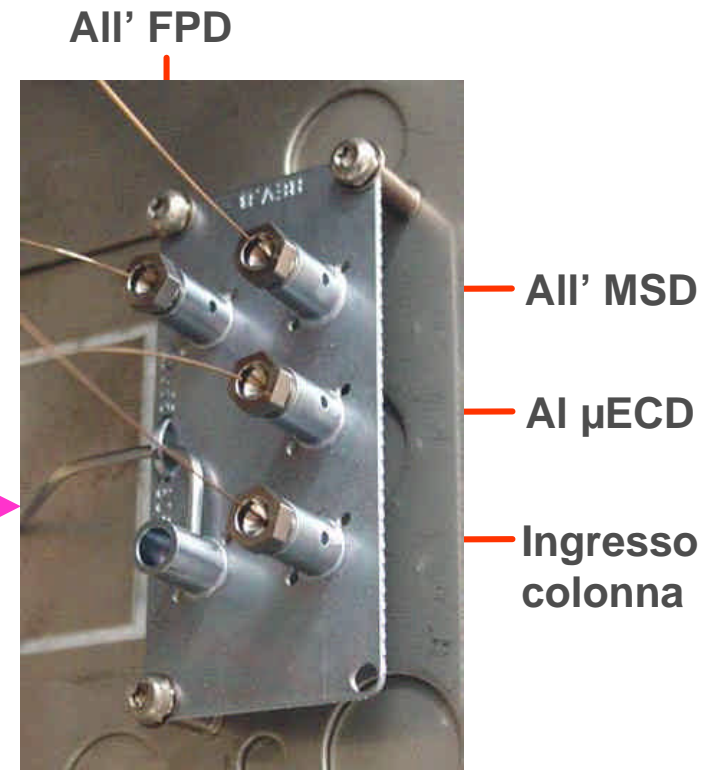
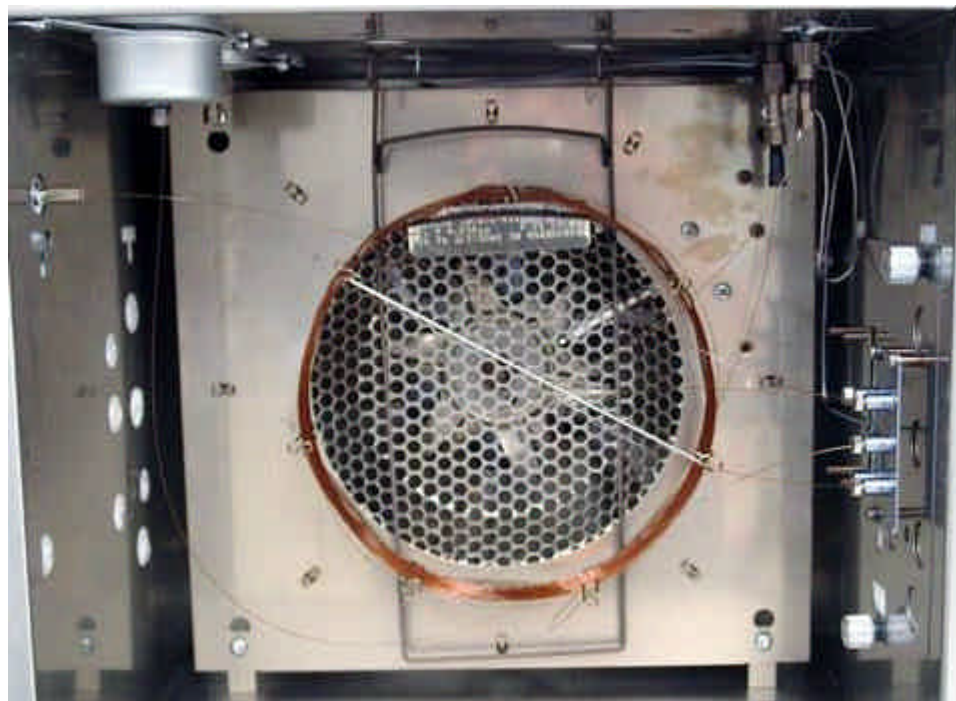
1 singolo metodo con split 10:10:1 FPD:MSD:ECD



# Splitter microfluidico a tre vie

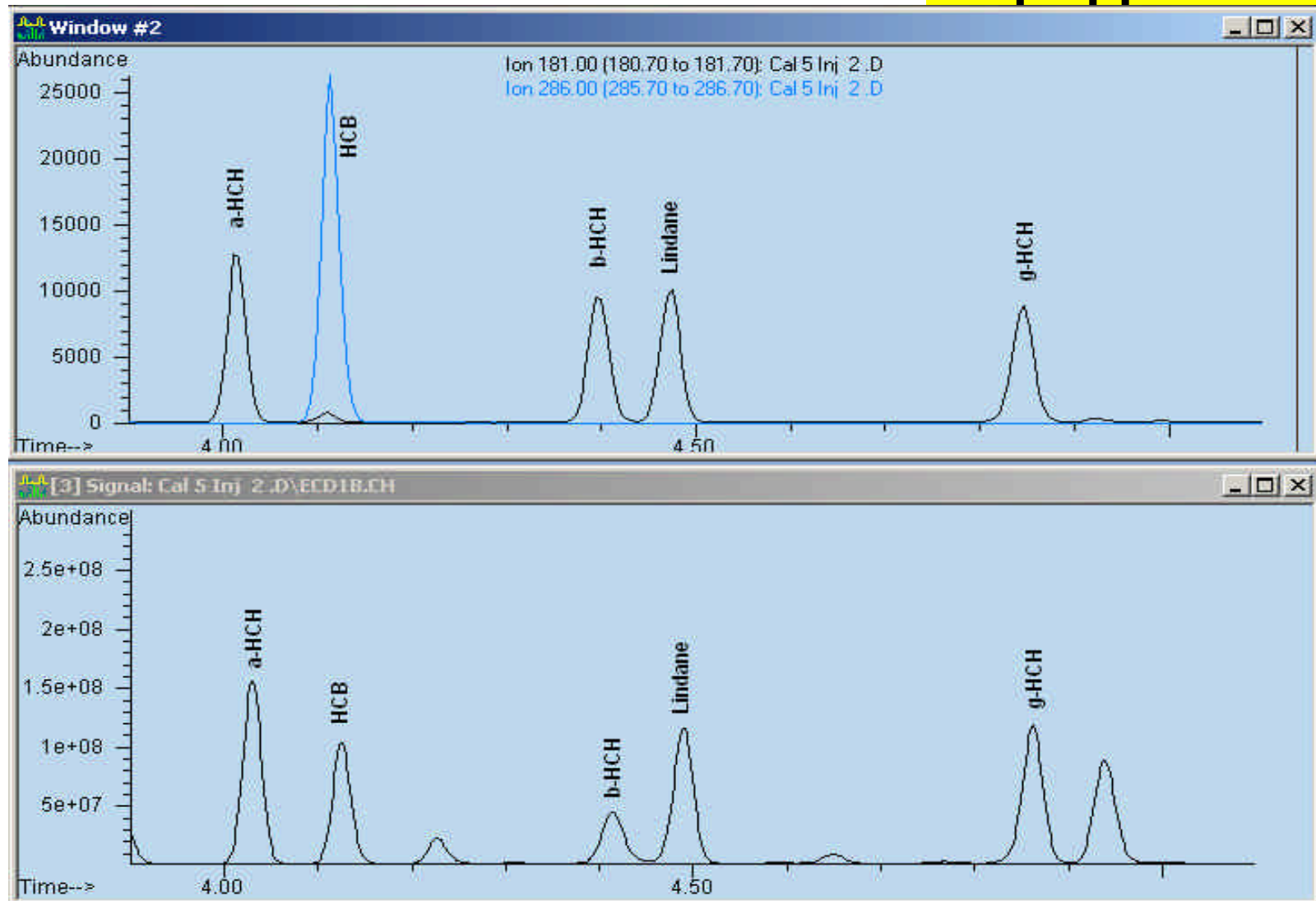
Splitter disattivato che opera a 350 C.

Impiega ferrule metalliche per evitare perdite



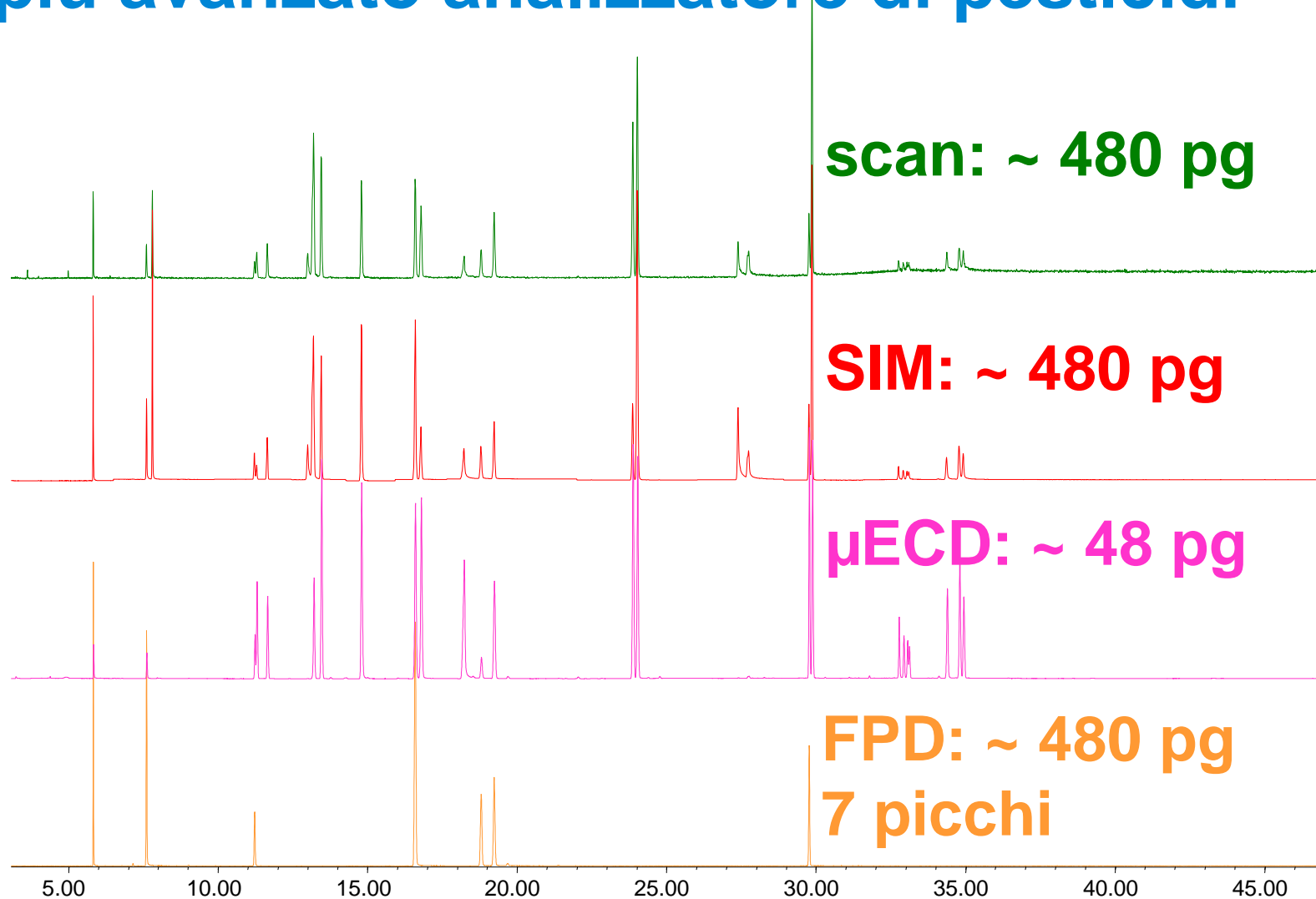
# Canali MSD ed ECD

- Ottima forma dei



# 5975 SIM/scan + 3-splitter a tre vie

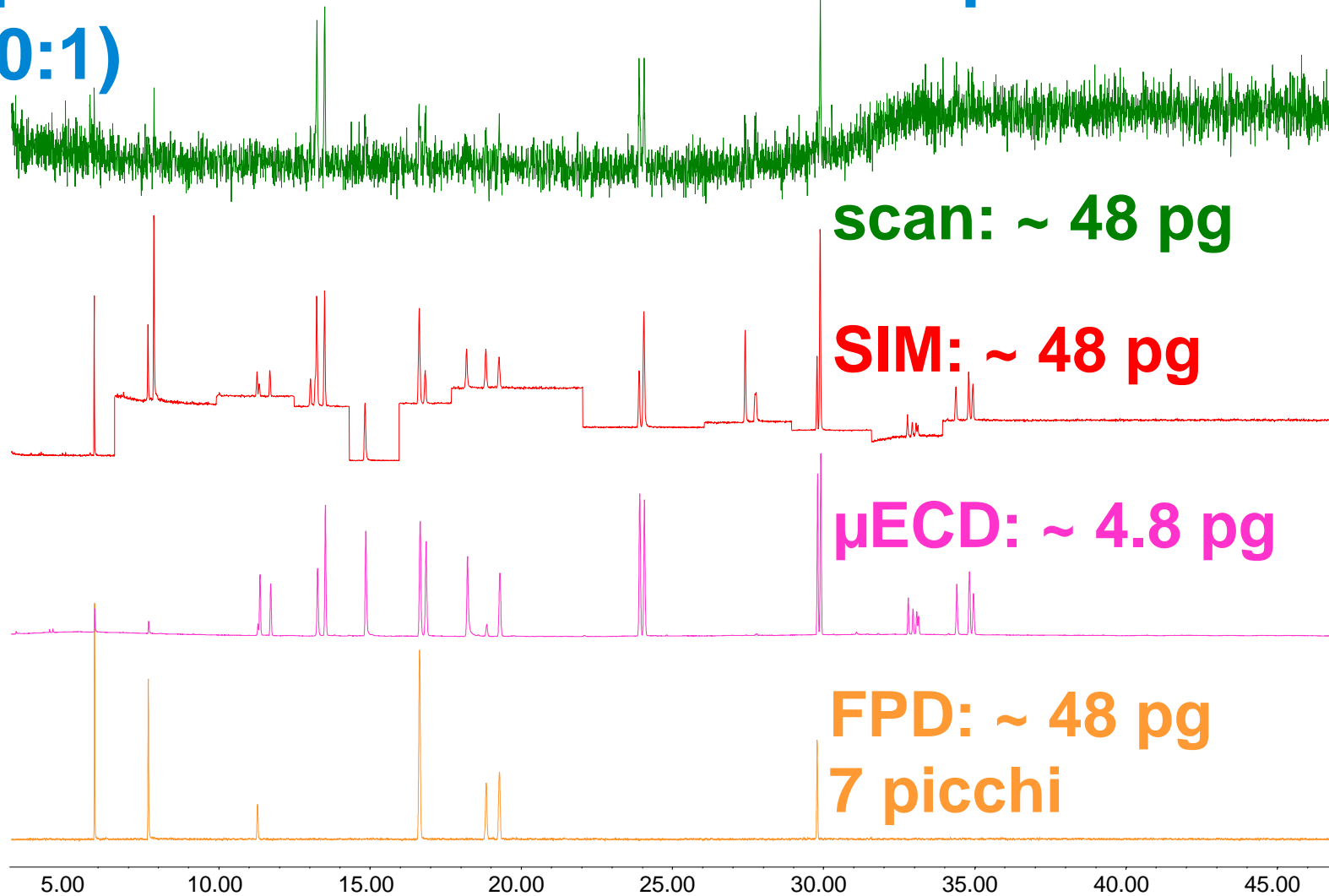
## Il più avanzato analizzatore di pesticidi



# 5975 SIM/scan + 3-splitter a tre vie

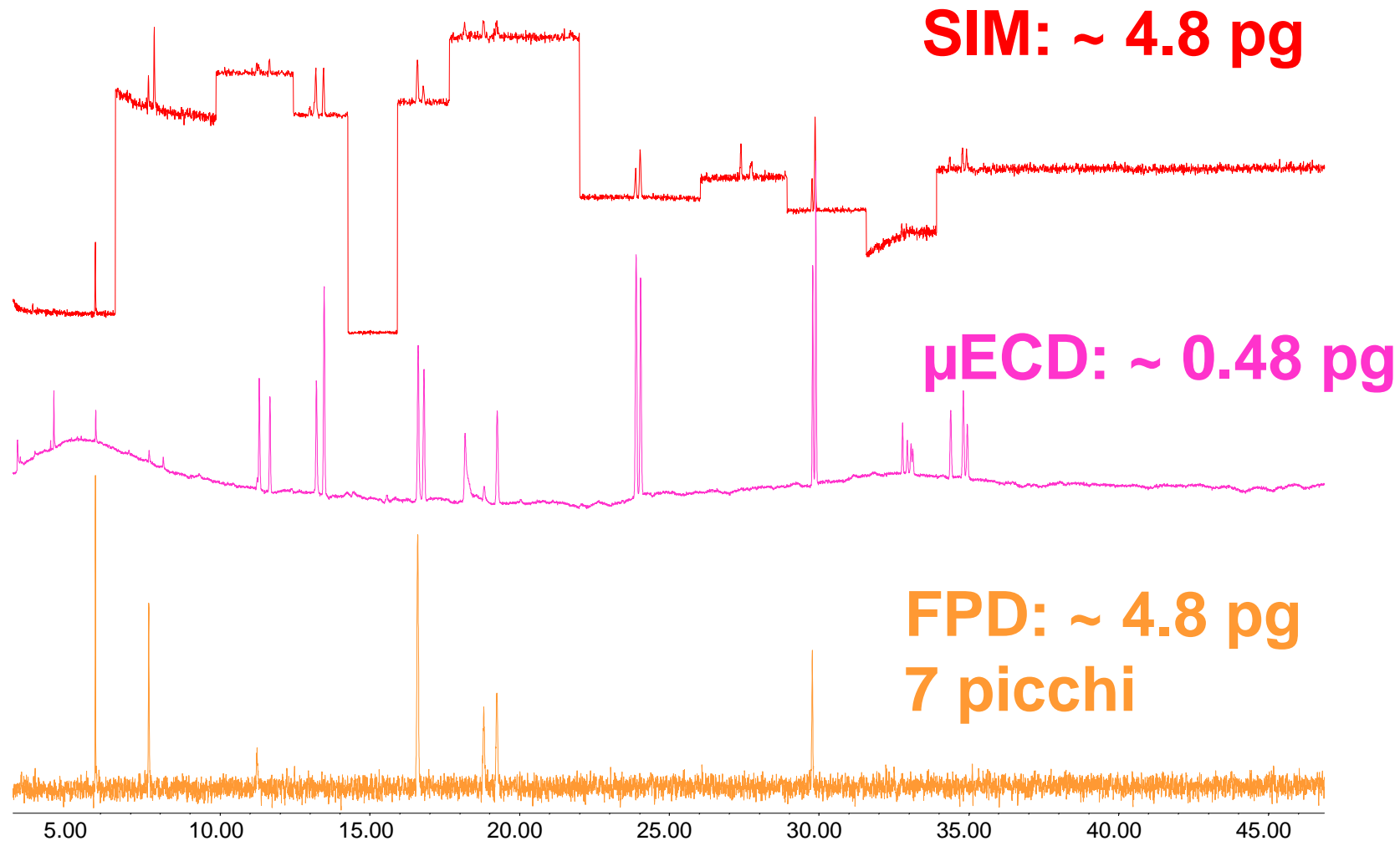
## Il più avanzato analizzatore di pesticidi

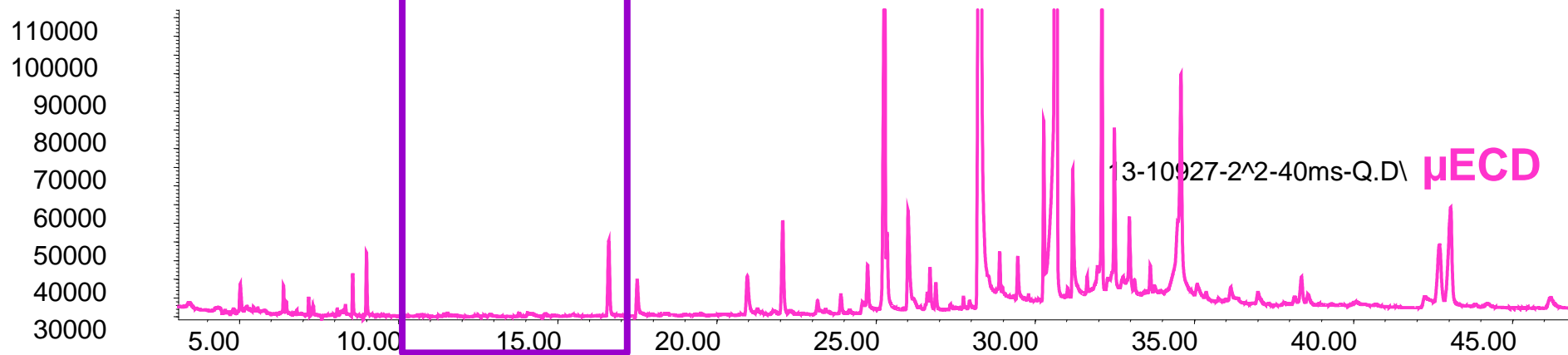
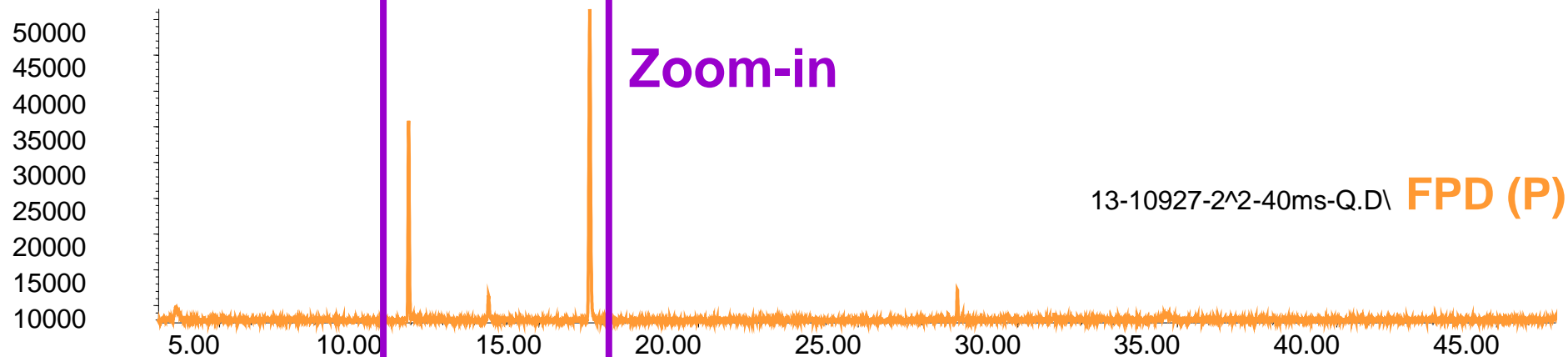
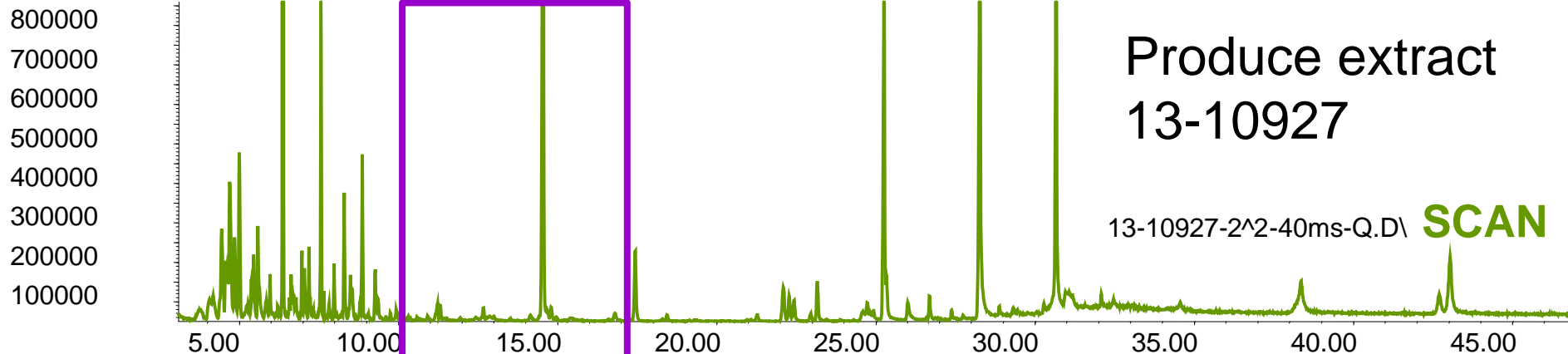
### (10:1)

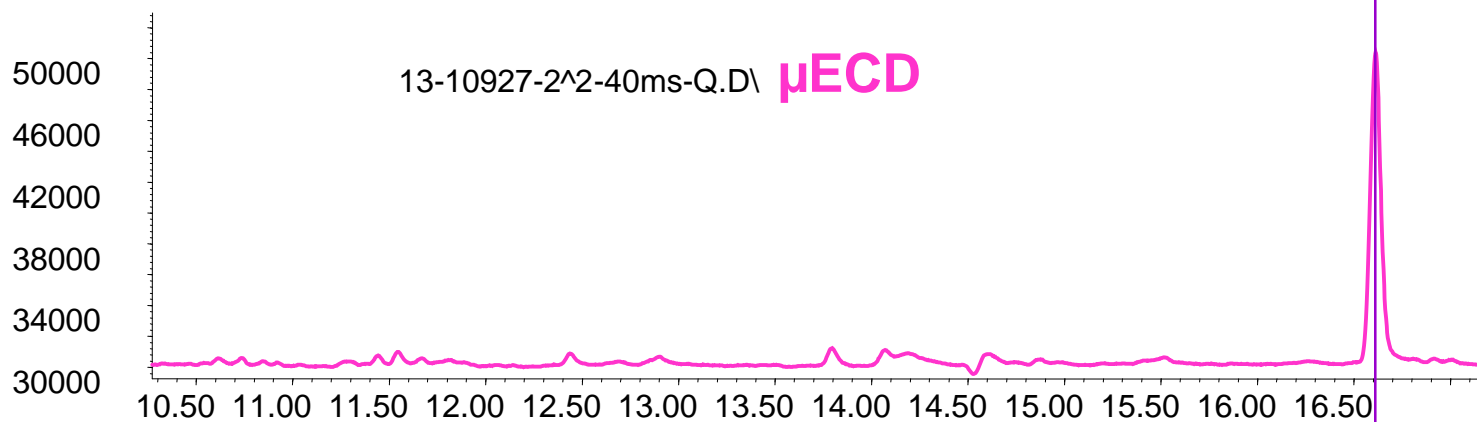
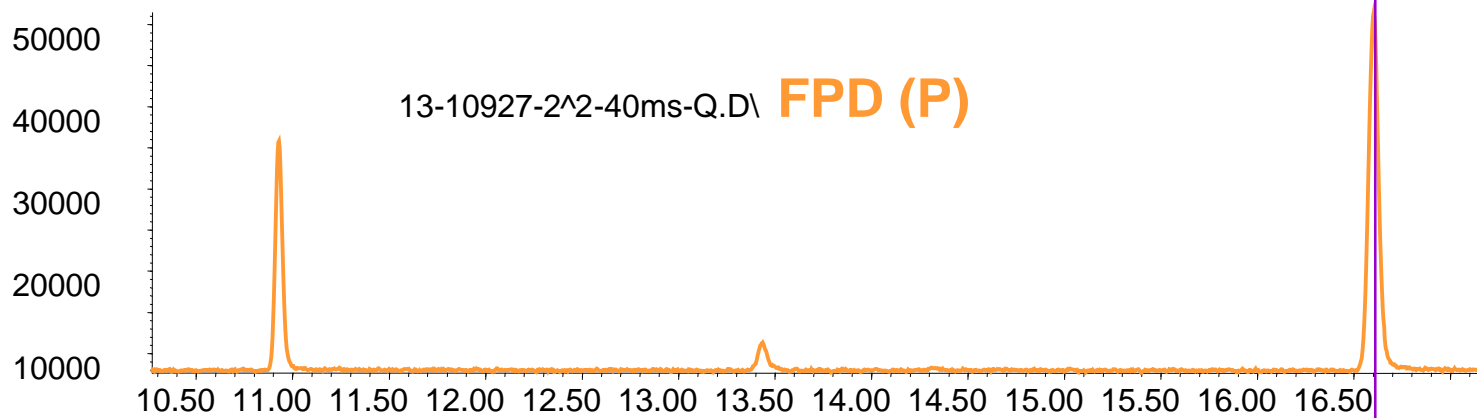
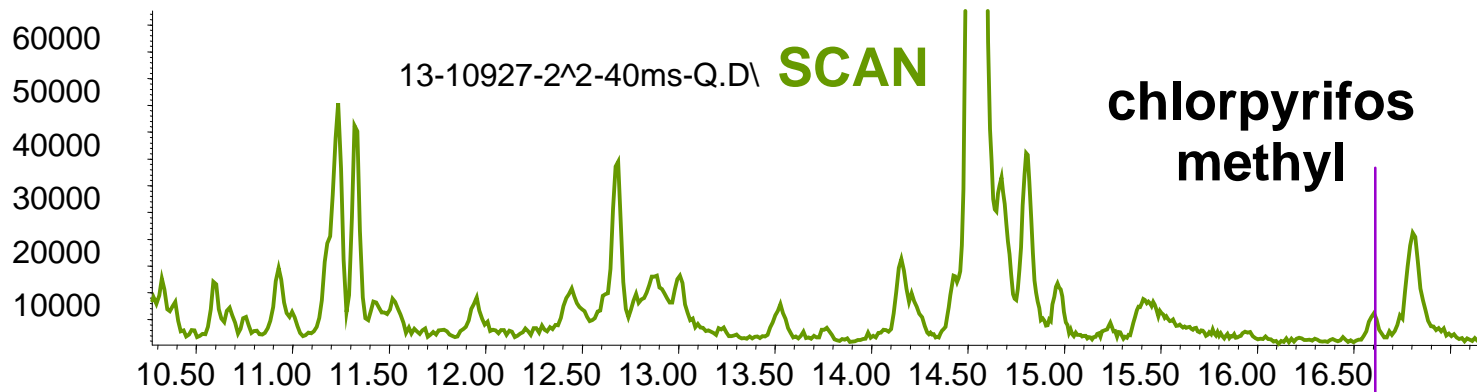


# 5975 SIM/scan + 3-splitter a tre vie

## Il più avanzato analizzatore di pesticidi (100:1)







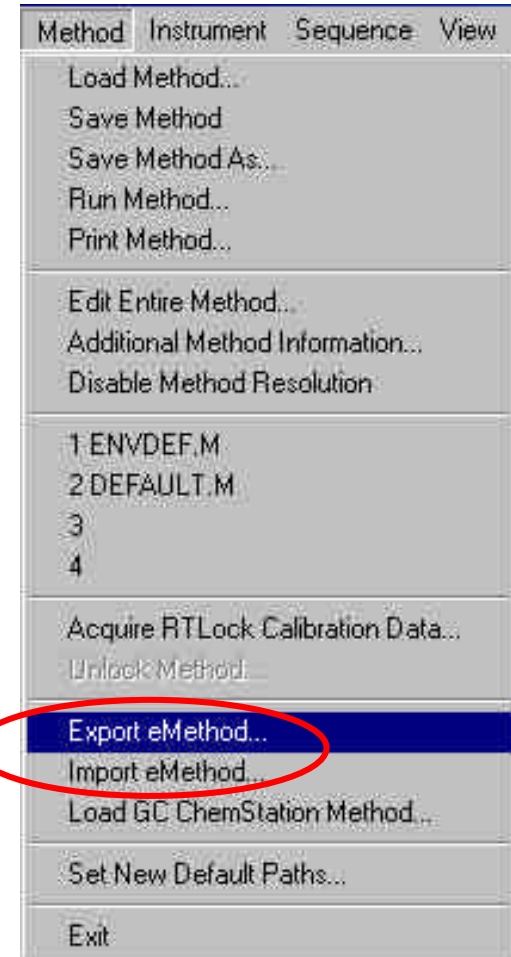
# In questa presentazione

- *Il nuovo range di massa*
- *Auto CI*
- *SIM/Scan sincronizzata*
- *MSD QuickSwap*
- *Splitter attivo*
- **eMethod**
- *Nuove funzioni SW*



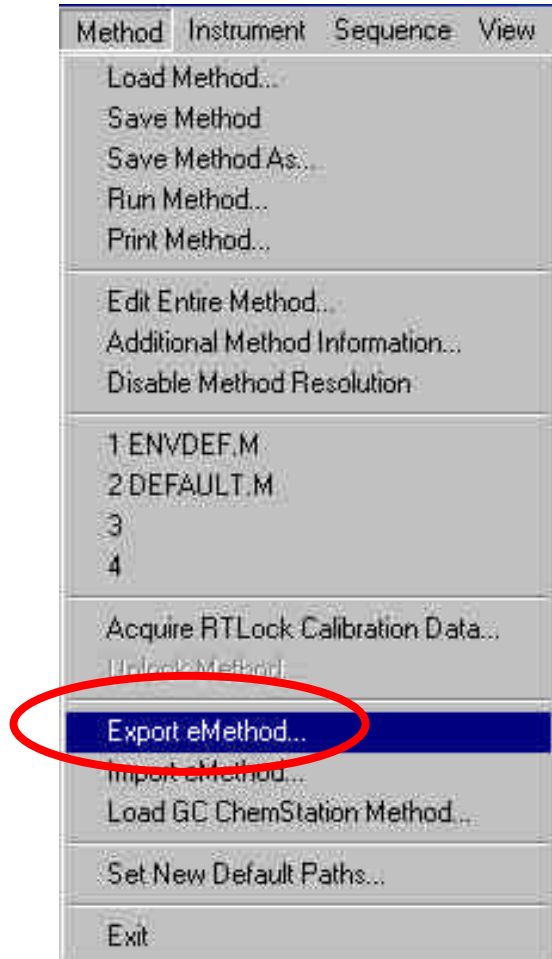
# Cosa sono gli eMethod?

- **eMethod significa Electronic Method**
- **Permette di trasferire metodi GC/MSD già esistenti con semplicità**



# Vantaggi dell'eMethod

- **Messa a punto estremamente veloce della nuova 5975 inert**
- **Facile condivisione di metodiche tra 5973 e 5975**
- **Download del metodo direttamente dal sito web di Agilent nella Chemstation**



# Maggiore produttività con eMethod

N0#	Compound_name	Exp_rt	Lo_rt	Hi_rt	Q_ion	Q1_ion	Q2_ion	Q3_ion	CAS_Number
1	2-Fluorophenol	8.29	7.79	8.79	112	64	0	0	367-12-4
2	bis(2-Chloroethyl)ether	11.01	10.51	11.51	93	63	95	0	111-44-4
3	Phenol-d5	11.03	10.53	11.53	99	42	71	0	13127-88-3
4	Phenol	11.07	10.57	11.57	94	65	66	0	108-95-2
5	2-Chlorophenol	11.11	10.61	11.61	128	64	130	0	95-57-8
6	1,3-Dichlorobenzene	11.39	10.89	11.89	146	148	113	0	541-73-1
7	1,4-Dichlorobenzene-d4	11.52	11.02	12.02	152	115	0	0	3855-82-1
8	1,4-Dichlorobenzene	11.58	11.08	12.08	146	148	113	0	106-46-7
9	1,2-Dichlorobenzene	12.09	11.59	12.59	146	148	113	0	95-50-1
10	Benzyl alcohol	12.19	11.69	12.69	108	79	77	0	100-51-6
11	bis(2-chloroisopropyl)ether	12.59	12.09	13.09	45	77	79	0	108-60-1
12	2-Methylphenol	12.72	12.22	13.22	108	107	0	0	95-48-7
13	Hexachloroethane	12.98	12.48	13.48	117	201	199	0	67-72-1
14	N-Nitroso-di-n-propylamine	13.06	12.56	13.56	70	42	130	0	621-64-7
15	4-Methylphenol	13.16	12.66	13.66	108	107	0	0	106-44-5
16	Nitrobenzene-d5	13.27	12.77	13.77	82	128	54	0	4165-60-0

**Tabella dei composti**

# Maggiore produttività con eMethod



Trasferimento dell'e-method



Applicazione VOC sulla 5973 MSD


Applicazione VOC  
sulla nuova 5975  
Inert

**Nessuna perdita di tempo per  
sviluppare il metodo!**

# Scaricare eMethod dal sito Agilent direttamente allo strumento

***Permette di avere applicazioni complete di:***

- impostazioni dello strumento***
- tabelle di calibrazione***
- tabelle SIM***



**Fast USEPA 8270 Semivolatiles Analysis  
Using the 6890N/5975 inert GC/MSD**  
Application

**Environmental**

**Author**  
John C. ...  
Agilent Technologies, Inc.  
3500 Central Expressway  
Wilmington, CA 94095

**Abstract**  
The analysis of semivolatiles using EPA Method 8270 pre-  
range required for the analysis varies dependent on a particular laboratory's statement of work. Historically, a range of 20-150 ppb (parts-per-billion) has been used. With the increased sensitivity of newer GC/MS systems, laboratories are moving toward lower minimum detection limits (MDLs) and pushing the calibration range down to 1 ppb.

The 6890N/5975 inert GC/MSD (gas chromatography/mass selective detector) system was

# eMethod disponibili

<b>Application Description</b>	<b>Publication No#</b>
<b>8270 w/Performance Electronics</b>	<b>5989-1510</b>
<b>VOCs by P&amp;T</b>	<b>5989-0603</b>
<b>Low-level PAHS</b>	<b>5989-0264</b>
<b>Phthalate esters by GC/MS</b>	<b>5988-2244</b>
<b>FAMES</b>	<b>5988-5871EN</b>
<b>RTL Pesticides</b>	<b>5967-5860E</b>
<b>ASTM Aromatics D5769</b>	<b>5989-0093EN</b>
<b>NCI date rape drug</b>	<b>5968-4364E</b>
<b>PCI Clenbuteral/Norandrosterone</b>	<b>5980-0908E</b>
<b>Forensics tox GC/MS RTL DB (NMS)</b>	<b>Convert existing method</b>

# In questa presentazione

- *Il nuovo range di massa*
- *Auto CI*
- *SIM/Scan sincronizzata*
- *MSD QuickSwap*
- *Splitter attivo*
- *eMethod*
- **Nuove funzioni SW**



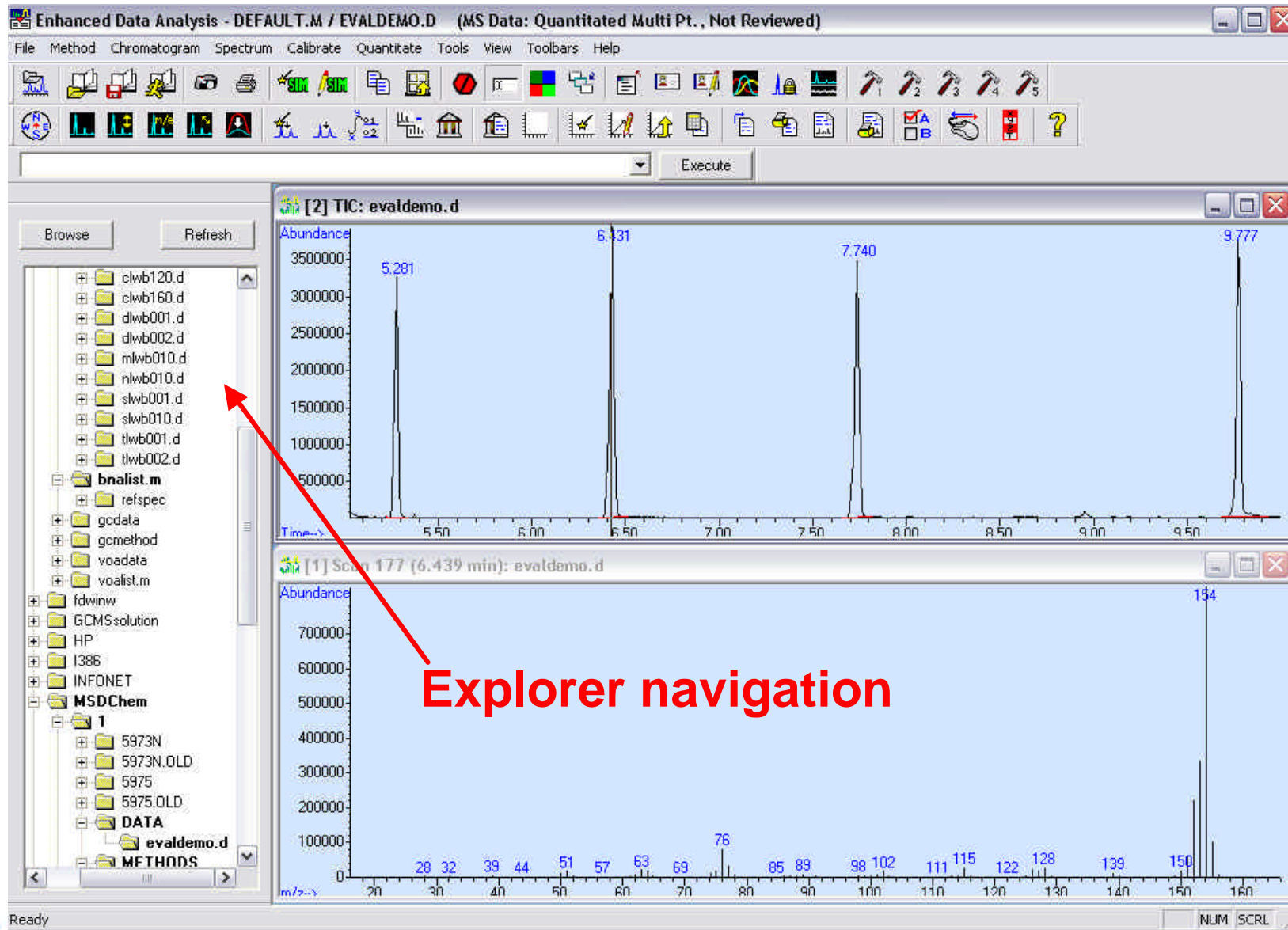
# Miglioramenti del software

- **Un'unica finestra per tutte le impostazioni strumentali**
- **Nuove icone per l'accesso diretto a tutte le funzioni**
- **Tabella delle sequenze completamente configurabile**
- **Nuove funzioni per le sequenze**

# Miglioramenti nell'analisi dei dati

- **strumento di navigazione tipo Explorer**
- **impostazione interattiva dei parametri di integrazione**
- **nuove funzioni attivabili con un click del tasto destro del mouse**
- **tabelle delle sequenze e SIM tipo Excel**
- **icone configurabili**

# Explorer Navigation



# Impostazione interattiva dei parametri di integrazione

Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)

File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Toolbars Help

[2] TIC: evaldemo.d

Abundance

Time-->

[1] Scan 177 (6.439 min): evaldemo.d

Abundance

m/z-->

Specify integration parameters for MS signal (autoint1.e)

Edit Integration Events

Possible Events

Event: Initial Area Reject

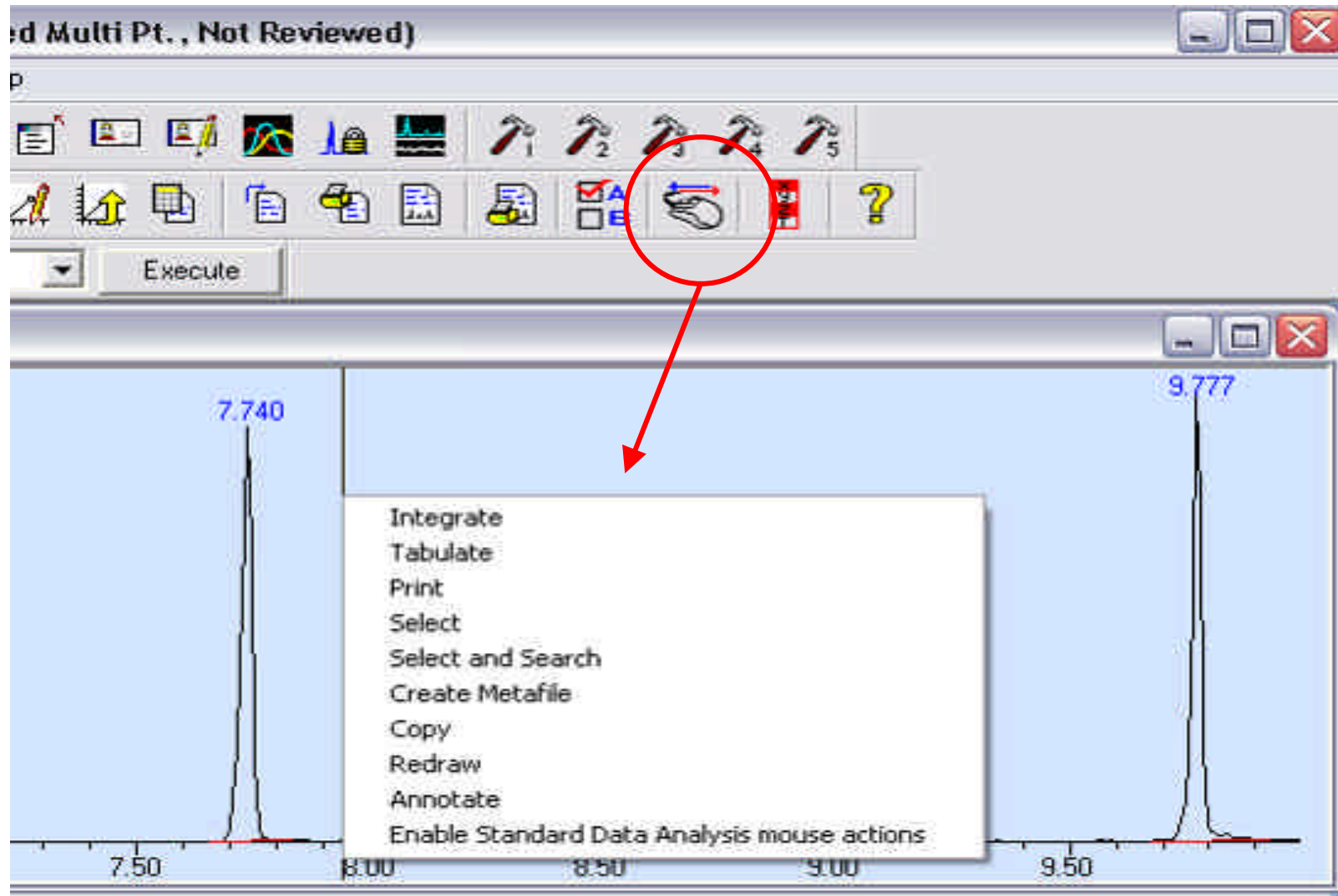
Value: 0

Time: Initial

Integrator Event Name	Value	Time
Initial Area Reject	0	Initial
Initial Peak Width	0.019	Initial
Shoulder Detection	OFF	Initial
Initial Threshold	19.0	Initial

Apply Load Save Enter Delete OK Cancel Help

# Funzioni attivabili con il tasto destro del mouse



# Tabella SIM

Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)

File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Toolbars Help

Abundance

3500000

3000000

2500000

2000000

1500000

1000000

500000

5.281

Time--> 5.50

Sim [2] TIC: evaldemo.d

Sim Group Table

	Start Time (min)	Default Dwell (ms)	Calc Cycles/Sec	Ion1	Ion2	Ion3	Ion4	Ion5	Ion6
1	5.281	100	8.3	74.1					
2									
3									
4									
5									
6									
7									
8									
9									
10									
11									
12									
13									

Sheet1

Number of SIM Groups:

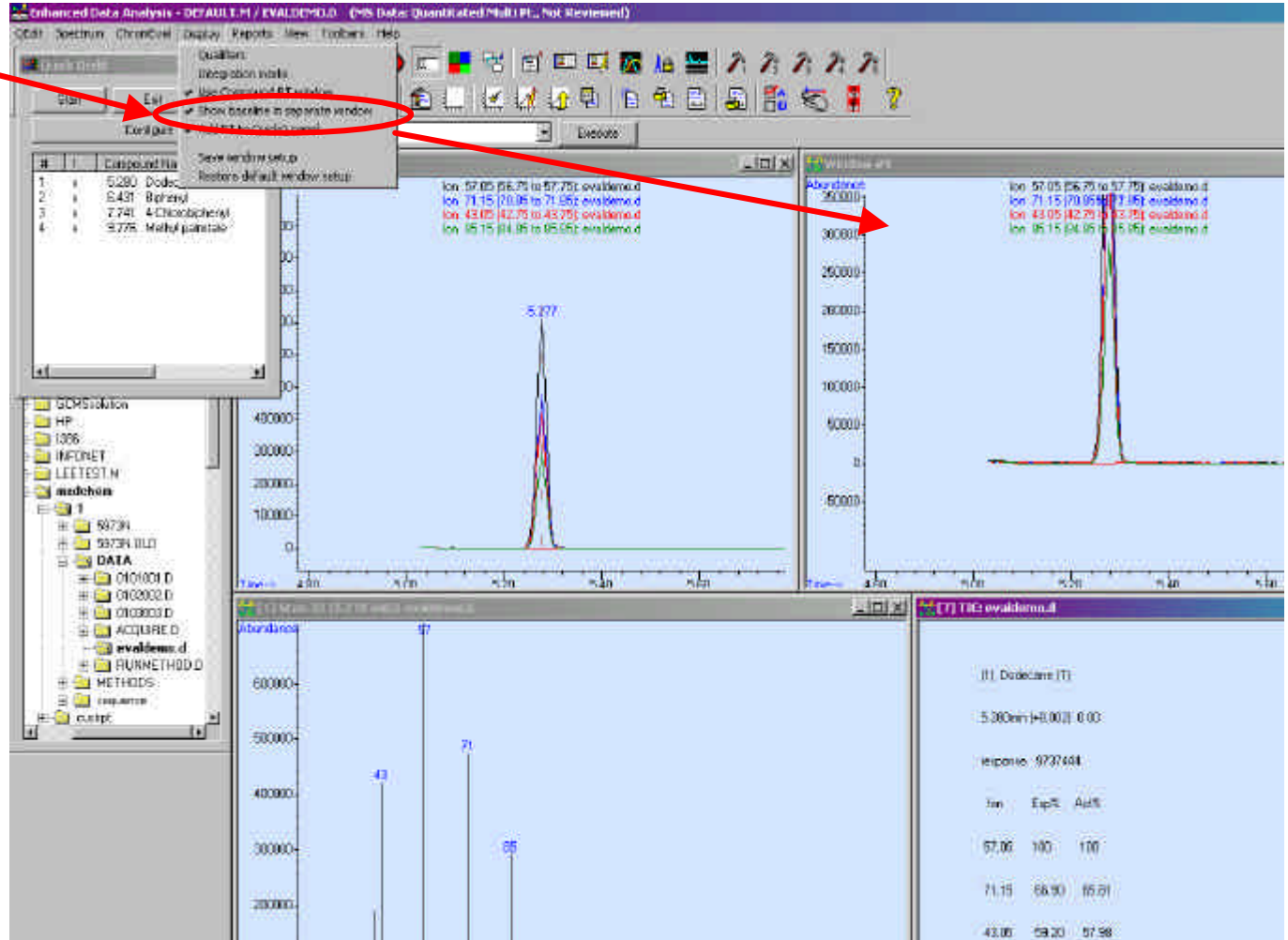
Group #Ions

Fill down using increment: 0

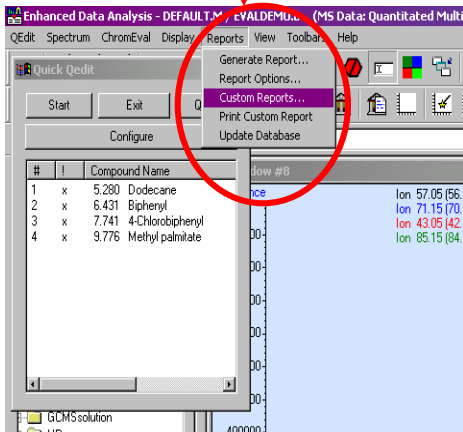
OK Cancel

# QEdit

Linea di base



Bollettini



# Librerie disponibili

- **NIST05**
  - **Wiley 7<sup>th</sup> ed.**
  - **Libreria dei pesticidi Stan**
  - **Pfleger/Maurer/Weber MS Drug Library, 3<sup>rd</sup> ed**
  - **NIST Chemical Structures Library**
- Nuove versioni**

# Altre opzioni

- **Software di deconvoluzione spettri (DRS)**
- **Security ChemStation per CFR 21 Parte 11**
- **Software per spazio di testa**
- **RTL Pesticide Database, FAMES, Flavors, Volatiles Organics, Organotin derivatives, PCB congeners, Forensic toxicology**

# Software DRS

- *Introduzione al software di deconvoluzione*
- *Come funziona la deconvoluzione*
- *Esempi*
- *Nuove funzioni*
- *Nuove librerie*

# Cosa possiamo ottenere dai dati? *(in un mondo ideale)*

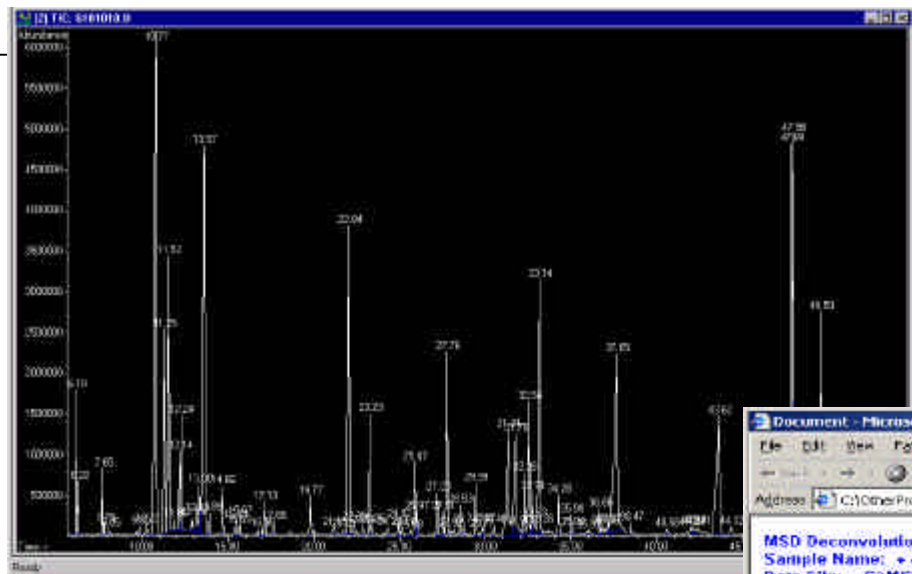
- Conferma di tutti i composti target
  - Ogni composto target quantificato
  - Altri composti di interesse o pericolosi, assenti dalla lista dei target, ricercati ed identificati in libreria
- Un bollettino semplice da interpretare

L'interferenza della matrice causa scadenti ricerche in libreria

- Come separare l'effetto matrice dai composti di interesse?

→ La risposta è il software DRS

# Software DRS



Document - Microsoft Internet Explorer

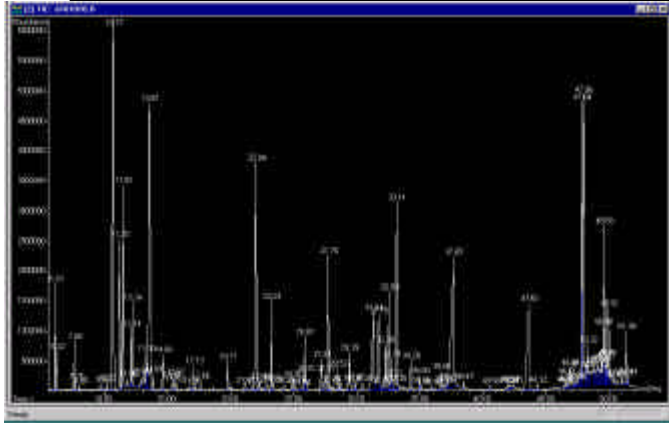
Address: C:\Other Projects\10135 TriFocus Power Point Stuff\Worklog\12-17-03\Spinach\IC.htm

**MSD Deconvolution Report**  
 Sample Name: 400 ppb ISTDs, 25 µl PTV  
 Data File: C:\MSDCHEM\DATA\SPINACH.D  
 Date/Time: 09:42:33 AM Wednesday, Dec 17 2003

The NIST library was searched for the components that were found in the AMDIS target library.

R.T.	Case #	Compound Name	Agilent ChemStation Amount (ng)	AMDIS Match	R.T. Diff. sec.	Reverse Match	Hit Num.
18.445	80742	Di-n-butylphthalate	7.08	86	1.3	92	1
13.966	80067	Bisphenol A		93	7.9	91	1
24.066	72569	p,p'-DDE		79	2.5	77	1
27.928	51035	Piperonyl butoxide	37.83	91	2.2	94	1
29.572	117817	Bis(2-ethylhexyl)phthalate		91	1.5	86	3
31.420	52645631	??? Permethrin I		67	3.7	74	5
31.615	52645631	Permethrin II		66	4.6	91	3
13.718		Phenanthrene-d10	10				

# ChemStation + AMDIS + NIST02 = DRS



Document - Microsoft Internet Explorer

MSD Deconvolution Report  
Sample Name: + 400 ppb ISTDn, 25 µl, PTV  
Data File: C:\MSDCHEM\1\DATA\SPINACH.D  
Date/Time: 09:42:33 AM Wednesday, Dec 17 2003

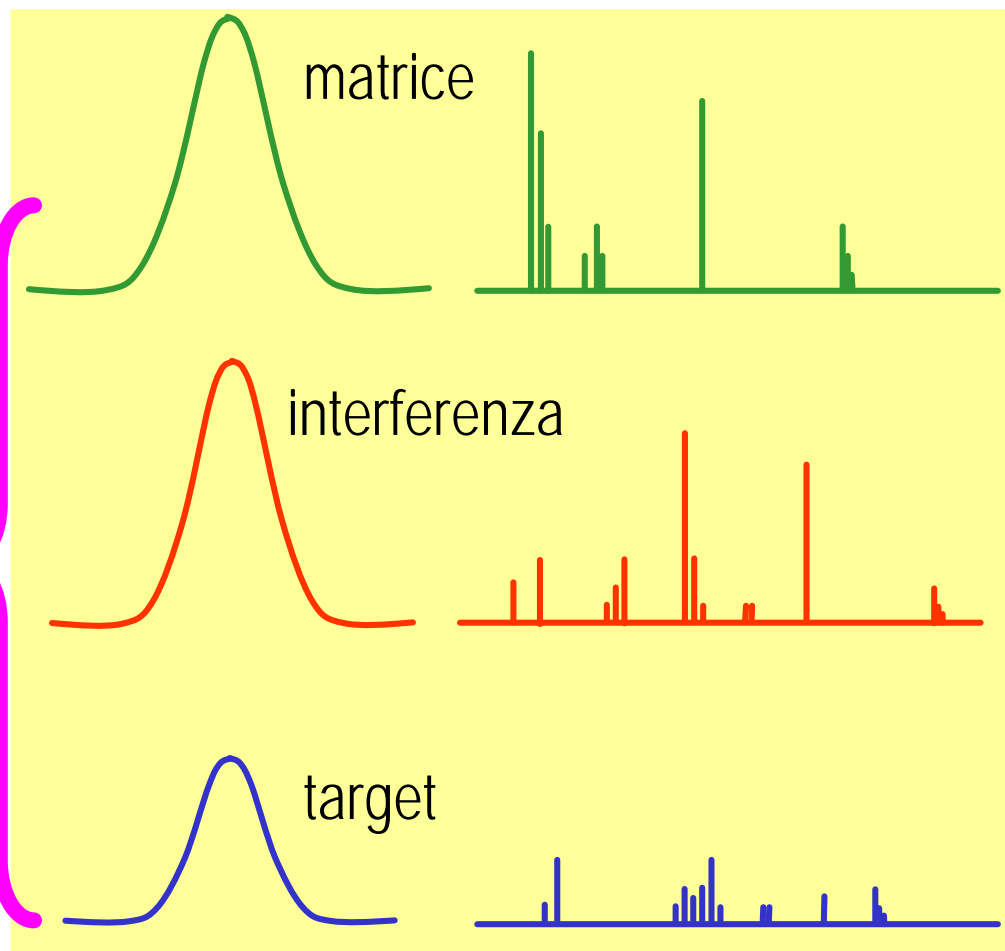
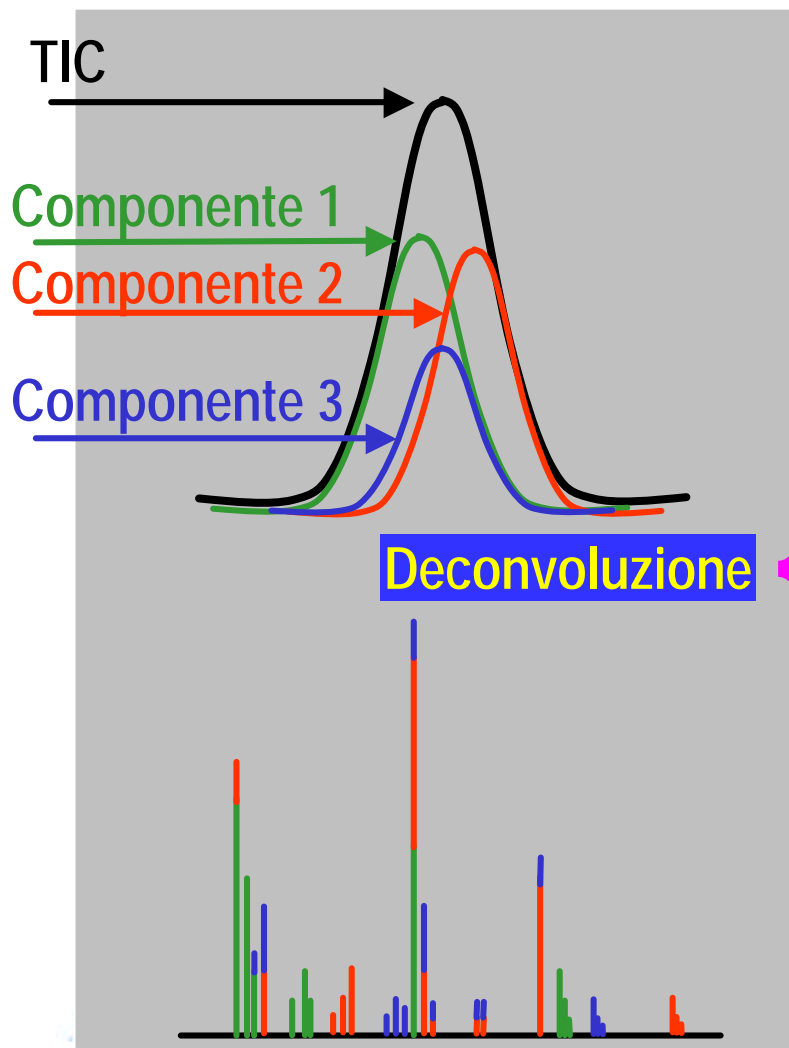
The NIST library was searched for the components that were found in the AMDIS target library.

RT	Conv #	Compound Name	Agilent ChemStation Amount (ng)	AMDIS Match	RT, Diff sec.	NIST Reverse Match	Hz Fnum
10.445	84742	Di-n-butylphthalate	0.00	86	1.3	92	1
23.956	80067	Bisphenol A		95	7.9	91	1
24.050	73589	p,p'-DDE		79	2.5	77	1
27.020	51036	Phenethyl butanoate	0.783	91	2.2	94	1
29.672	117817	Bis(2-ethylhexyl)phthalate		91	1.9	86	2
31.420	62646531	???		87	0.7	74	5
31.616	62646531	Parathion II		88	1.6	91	3
13.718		Phenanthrene-d10	0.0				

# La deconvoluzione estra le tracce dei singoli componenti ed i loro spettri

TIC & Spettro

Spettri deconvoluti



## MSD ChemStation

Quantitativa

## AMDIS + RTL

Deconvoluzione  
+ ricerca Target

## NIST02 MS Search

Ricerca NIST degli spettri  
deconvoluti

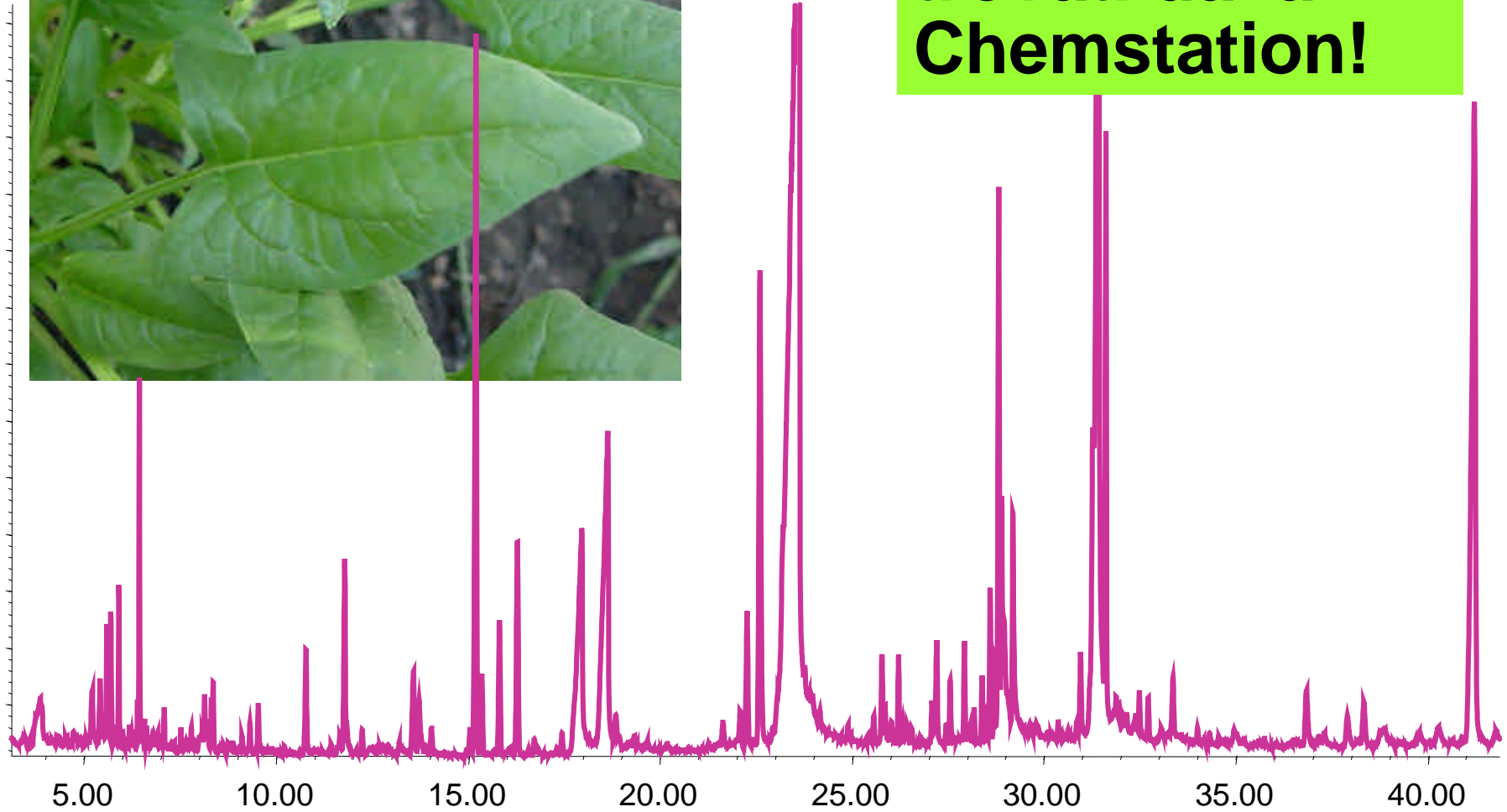
			Agilent	AMDIS		NIST	
R.T.	Cas #	Compound Name	ChemStation Amount (ng)	Match	R.T. Diff sec.	Reverse Match	Hit Num.
7.098	5989275	Limonene	0	85	-0.0	87	1
7.182	100516	Benzyl alcohol		93	-0.5	83	5
8.472	78706	Linalol	0.98	98	-0.3	92	1
11.440	106241	Geraniol	0.01	90	-0.3	86	3
11.809	104552	Cinnamaldehyde		52	0.1	65	2
13.357	97530	Eugenol	0	81	-0.6	79	4
14.846	103548	Cinnamyl acetate	0.58	95	-1.6	95	1
14.952	97541	Isoeugenol	0.04	94	0.3	93	3
19.169	4602840	Farnesol 2	0.14	93	-0.8	88	5
19.886	120514	Benzyl benzoate	0.48	74	0.4	92	1
21.351	118581	Benzyl salicylate	0.25	85	0.5	93	1
10.292		1,4 Dibromobenzene	10				



# TIC di un estratto di spinaci

Pesticidi

> 370 picchi trovati dalla Chemstation!



File Edit View Favorites Tools Help

Address C:\MSDChem\1\DATA\SPINACH.D\SPINACH.htm

Go Links &gt;&gt;

**MSD Deconvolution Report**

Sample Name: + 400 ppb ISTDs, 25 µL PTV

Data File: C:\MSDChem\1\DATA\SPINACH.D

Date/Time: 11:17:02 AM Tuesday, Apr 27 2004

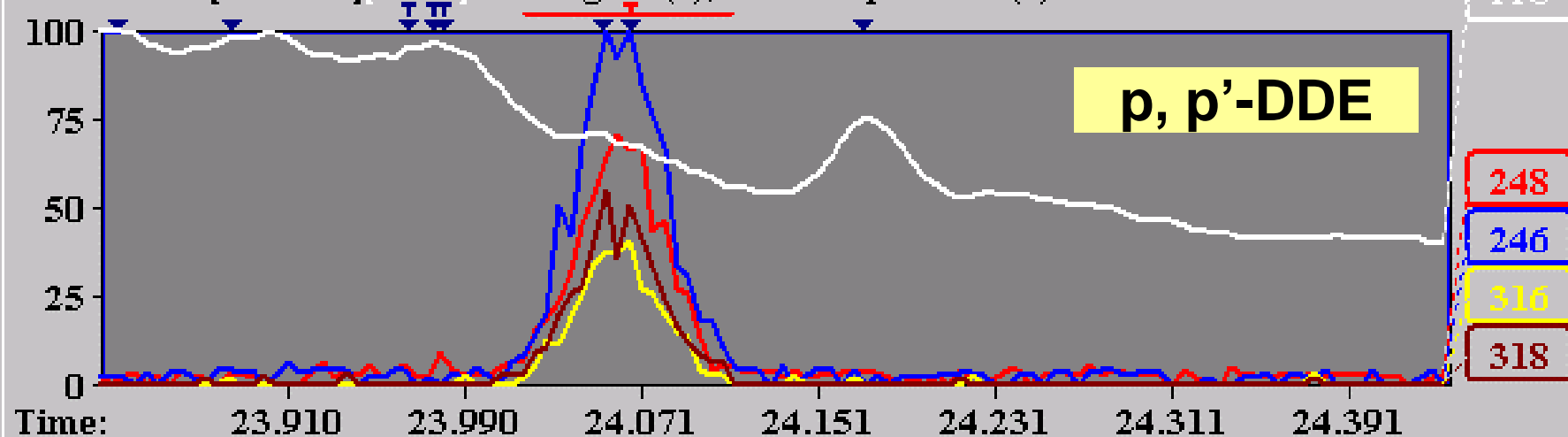
# Tempo di elaborazione: 1 minuto

The NIST library was searched for the components that were found in the AMDIS target library.

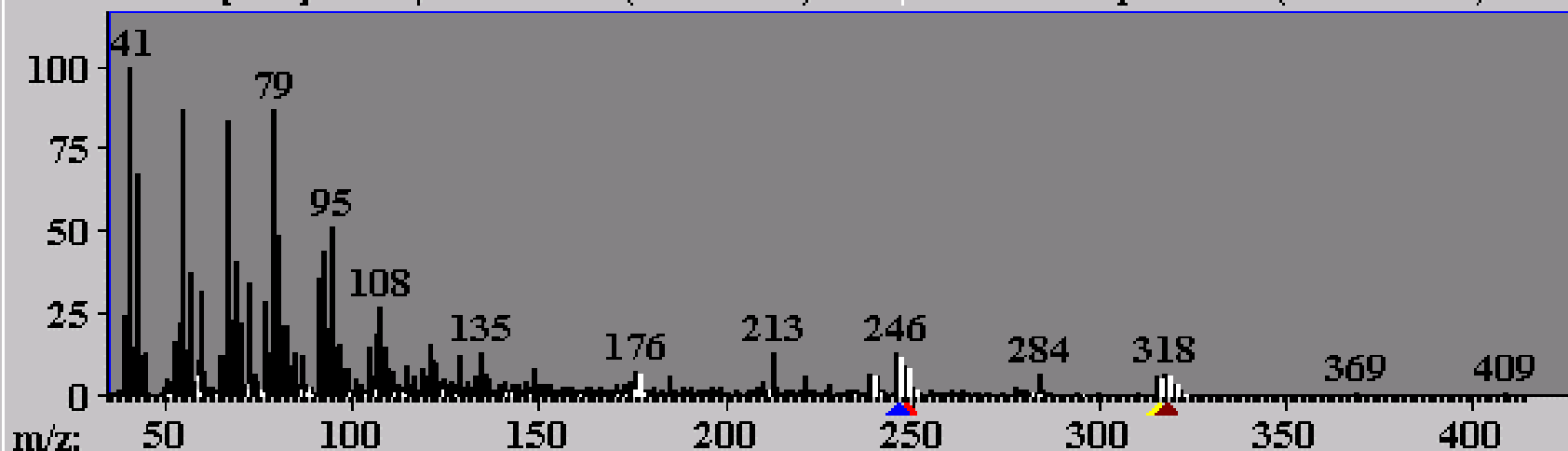
R.T.	Cas #	Compound Name	Agilent ChemStation Amount (ng)	AMDIS Match	R.T. Diff sec.	NIST Reverse Match	Hit Num.
18.445	84742	Di-n-butylphthalate	7.08	86	1.3	92	1
23.966	80057	Bisphenol A		93	7.9	91	1
24.066	72559	p,p'-DDE		79	2.5	77	1
27.928	51036	Piperonyl butoxide	37.83	91	2.2	94	1
29.672	117817	Bis(2-ethylhexyl)phthalate		91	1.9	86	3
31.420	52645531	Permethrin I		67	3.7	74	5
31.616	52645531	Permethrin II		88	4.6	91	3
13.718		Phenanthrene-d10	10				

Ci vorrebbero 20-30 minuti ad un analista per avere lo stesso risultato

Abundance [0.499%][6008] 12 targets (τ), 768 components (▼)



Abundance [233] | Scan 3925 (24.07 min) and | Extracted spectrum (24.066 min)

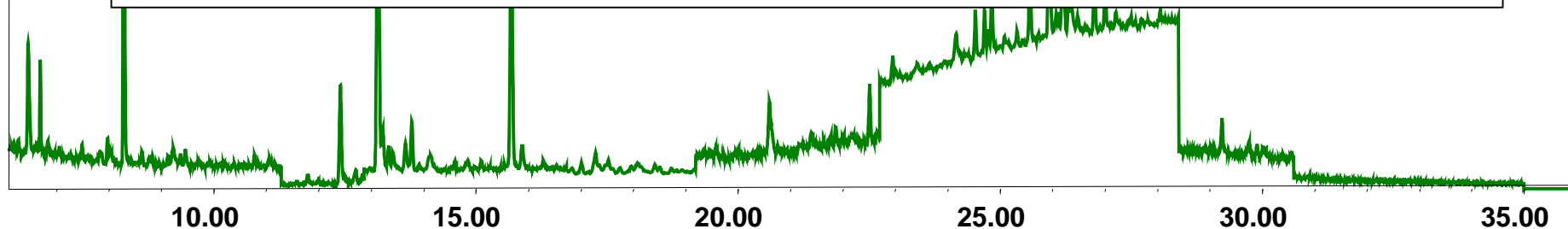


# Nuova revisione DRS A.02.00

## *Miglioramenti*

- ***Analisi dati in SIM***
- ***Nuovo bollettino***
  - Per ogni composto, spettro grezzo, spettro deconvoluto e spettro in libreria
- ***Altri strumenti per una gestione ancora più veloce dei dati***

# Estratto di un acqua (SIM)



**Match Factors**  
**61 to 99**

R.T.	Cas #	Compound Name	Agilent ChemStation Amount (ng)	AMDIS Match	AMDIS R.T. Diff sec.	NIST Reverse Match	NIST Hit Num.
6.1439	759944	EPTC		99	-12.7	65	17
8.0448	112561	2-(2-Butoxyethoxy)ethyl thiocyanate		70	-16.8		
8.0448	84735137	2-Ethylprop-1-ene (1-3)sultine				97	1
8.0673	1929777	Vernolate		90	1.9	61	62
8.8076	1114712	Pebulate		94	7.0		
8.8076	110501547	2-Diisopropylaminoethyl ethyl sulfide				81	1
11.3092	101428	Fenuron		61	1.0	84	66
12.3417	122349	Simazine		95	-1.4	65	24
14.7598	298044	Disulfoton		62	4.8		
14.7598	25623783	2,4,6-Trimethyl-7-oxo-4,7-dihydro-triazolo(3,2-c)triazine				76	1
15.3436	333415	Diazinon		61	11.3		
15.3436	35813388	Acetamide, N-(4-methoxyphenyl)-N-methyl-				91	1
15.8441	2275185	Prothoate		63	-2.6		
15.8441	869294	2-Propene-1,1-diol, diacetate				100	1
17.0045	5598130	Chlorpyrifos Methyl		91	1.9	66	1
17.2394	63252	Carbaryl		94	3.5	82	13
19.3466	51218452	Metolachlor		90	3.3	62	2
19.8904	1861321	Chlorthal-dimethyl		81	8.4	70	18
20.2403	22936750	Dimethametryn		83	-17.5		

# Nuove librerie target

## *TIC (Composti industriali tossici)*

- *Volatili: secondo EPA 502/524, 60 composti*
- *Semivolatili: EPA 8270C Appendice IX, 140 composti*
- *Diossine e furani clorurati: EPA 8280A, 10 composti*
- *PCBs: EPA 8082, 19 ccomposti*
- *Pesticidi: 567 composti*
- *Totale: 796 composti*

# Altre librerie DRS

- ***Nuova libreria dei pesticidi***

- Aggiunge ~200 - 300 composti

- ***Composti di rilevanza tossicologica***

- ~300 composti con derivati

- ***Composti tossici nell'aria***

- 171 composti

- ***Allergeni***

- 60 composti su più colonne

# Benefici del DRS

- ✓ Facile da usare
- ✓ Automatico
- ✓ Riproducibile
- ✓ Sensibile
- ✓ **Il modo migliore per lavorare su matrici complesse**

# Configurazioni GC/MS supportate

- **5973N**
- **5975 inert**      ***El con pompa turbo standard***
- **5975 inert**      ***El con pompa turbo performance***
- **5975 XL**        ***EI/PCI/NCI con pompa turbo performance***

**Tutti i sistemi sono disponibili sia con il GC 6890 che con il GC 6850**

# Controllo del GC 6850 da software

- ***5973N MSD (G2570A)***
- ***5973 inert MSD***
- ***5975 inert MSD***



# Conclusioni

- ***Affidabilità e qualità***
- ***Migliori prestazioni***
  - Maggiore sensibilità
  - eMethod
  - AutoSIM e SIM/scan
  - Ampio intervallo di massa
  - AutoCI
  - Nuovo software e DRS

