

ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL E ANÁLISE DE DESCONHECIDOS

The Measure of Confidence

GC/Q-TOF Agilent 7200 Series



As bibliotecas espectrais comerciais de ionização por elétrons (EI) nem sempre contêm dados de massa espectral para compostos de interesse. Nesses casos, o espectro MS/MS de massa exata gerado pelo **GC/Q-TOF Agilent 7200 Series** pode ser inestimável para estabelecer relações entre íons fragmento, auxiliando a correlação de estrutura.

O **GC/Q-TOF Agilent 7200** pode operar em modo MS/MS a taxas de aquisição rápidas, mantendo a exatidão de massa e alta resolução. Isso permite a aquisição de numerosos MS/MS para cada pico cromatográfico, eliminando assim a necessidade de fazer várias corridas.

Tire proveito da massa exata e dos espectros de MS/MS para elucidar a estrutura de compostos desconhecidos

- A ionização química (CI) pode ser utilizada para confirmar o íon molecular
- A fórmula molecular pode ser determinada pela combinação de:
 - Medição de massa exata do íon molecular
 - Abundância isotópica e espaçamento do íon molecular
- A massa exata permite a atribuição de fórmula empírica aos íons fragmento
- MS/MS pode ser usada para determinar as relações entre os íons fragmento no espectro para fornecer informação estrutural adicional
- O software de correlação da estrutura molecular (MSC) oferece ferramentas para identificar possíveis estruturas moleculares

Para mais informações, acesse:
agilent.com/chem/gcms_qtof



Agilent Technologies

Confirmando a estrutura mais similar

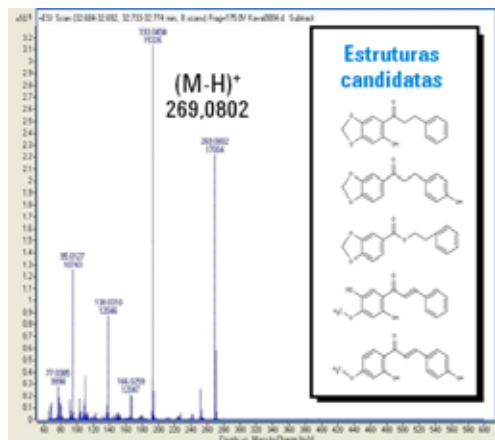


Figura 1. MassHunter Qual pode oferecer informação de fórmula empírica ($C_{16}H_{14}O_4$) para compostos desconhecidos em extrato de Kava

	m/z (experimental)	Fórmula	Erro (ppm)	Pontuação
- H	269,0802	$C_{16}H_{13}O_4$	2,2	80,7
- C_6H_5	193,0494	$C_{10}H_9O_4$	0,6	96,7
- $CH=CH-C_6H_5$	167,0334	$C_8H_7O_4$	3,0	N/D
- $CH_2=CH-C_6H_5$	166,0259	$C_8H_8O_4$	0,6	N/D
- CO	138,0310	$C_7H_6O_3$	1,1	98,1
- CO	110,0359	$C_6H_6O_2$	3,0	N/D
- CH_3	95,0127	$C_5H_3O_2$	0,9	99,5

Figura 2. Resultado experimental de MS/MS

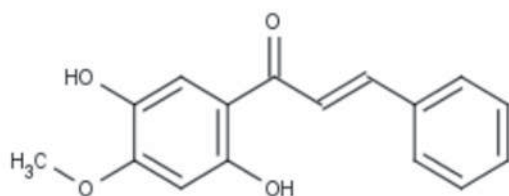


Figura 3. Das 5 estruturas candidatas, apenas uma se encaixa nas perdas identificadas pelos experimentos de MS/MS em diversos íons precursores.

Correlação da estrutura molecular

O software de correlação da estrutura molecular MassHunter (MSC) correlaciona íons fragmento de massa exata MS/MS para um composto de interesse com um ou mais estruturas moleculares propostas para este composto.

A MSC simplifica muito a elucidação da estrutura, fornecendo uma possível fórmula para os íons fragmento e molecular, e avaliando as possíveis estruturas associadas com cada fórmula do íon molecular.

A elucidação estrutural e a análise de desconhecidos podem ser alcançadas usando o GC/Q-TOF Agilent 7200 Series juntamente com o GC Agilent 7890B e o pacote de software MassHunter

Informações adicionais (materiais em inglês):

Brochura GC/Q-TOF Agilent 7200 Series (5991-4806EN)

Diferenças metabólicas induzidas por anestésicos no cérebro murino pelo GC/Q-TOF (5991-2481EN)

Para mais informações, acesse:
www.agilent.com/chem/gcms_qtof

Os produtos Agilent são exclusivos para pesquisas. Não devem ser usados em procedimentos de diagnóstico. As informações, descrições e especificações nesta publicação estão sujeitas a mudanças sem aviso prévio.

© Agilent Technologies, Inc. 2014
Publicado no Reino Unido, 2 de dezembro de 2014
5991-5426PTBR

