



Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200B

## РЕШЕНИЕ СЛОЖНЕЙШИХ АНАЛИТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

The Measure of Confidence



**Agilent Technologies**

КВАДРУПОЛЬНО-ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ ГХ-МС AGILENT 7200B

## РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ АНАЛИЗА ЦЕЛЕВЫХ КОМПОНЕНТОВ И НЕИЗВЕСТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

### Agilent 7200B — расширение возможностей ведущего мирового квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200B предоставляет усовершенствованные возможности благодаря следующим особенностям:

- ▶ Ионизация электронным ударом (EI) и химическая ионизация (CI) во всех системах.
- ▶ Диапазон масс расширен вплоть до  $m/z$  3000.
- ▶ Точность определения массы составляет менее 3 ppm (среднеквадратичное значение).
- ▶ Система быстрой обратной продувки для повышения функциональности ГХ.
- ▶ Новые функции программного обеспечения, а также инструменты библиотеки точных масс-спектров.
- ▶ Библиотека точных масс пестицидов для квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС.



Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС 7200B превосходит ГХ Agilent 7890B и демонстрирует еще большую разделяющую способность благодаря включенной в него системе быстрой обратной продувки. Такие усовершенствованные характеристики 7200B, как расширенный диапазон масс, особенно полезны для анализа соединений большой массы с помощью устройства ввода твердых образцов.



**ГХ-МСД Agilent 5977E**  
Исключительное решение для рутинного анализа



**ГХ-МСД Agilent 5977A**  
Отраслевой стандарт чувствительности, стабильности и достоверности спектрального анализа с помощью моноквадрупольных систем



**ГХ-МСД Agilent 5975T LTM**  
Первый в мире портативный ГХ-МСД



**Трехквадрупольный ГХ-МС Agilent 7000C**  
Проверенный выбор для современных стандартизованных методов



**Трехквадрупольный ГХ-МС Agilent 7010**  
Новые стандарты характеристик ионизации электронным ударом

## Лучший выбор для качественного и количественного анализа

Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200В сочетает имеющиеся востребованные функциональные возможности наших флагманских систем для ГХ-МС вместе со следующими расширенными возможностями:

### Высокое разрешение и точность определения массы

Высокая точность определения массы (около 1 ppm) в сочетании с разрешением, в 15–50 раз большим, чем у моноквадрупольного МС, дает возможность анализа целевых, нецелевых и неизвестных соединений с еще большей достоверностью.

### Расширенный диапазон масс

Расширенный диапазон масс позволяет анализировать соединения с большой массой, что является преимуществом при использовании устройства ввода твердых образцов.

### Низкие пределы обнаружения

Полный спектр с чувствительностью, большей, чем у квадрупольного МС, позволяет получать спектры масс при содержании вещества на колонке на уровне пикограмма для большинства соединений.

### Не имеющая равных селективность в режиме МС-МС

Селективность обнаружения метода МС-МС с высоким разрешением значительно превосходит характеристики прочих анализаторов МС-МС. Более того, точные масс-спектры дочерних ионов помогают подтверждать целевые и нецелевые вещества, а также уточнять состав неизвестных соединений.

### Простота обработки данных и точные результаты МС и МС-МС

Программное обеспечение Agilent MassHunter предоставляет ценные инструменты для идентификации, количественного определения и подтверждения.

- Обнаружение соединений в сложных образцах с помощью деконволюции, оптимизированной для режима ионизации электронным ударом (EI) или химической ионизации (CI).
- Сочетание результатов поиска по библиотеке и расчетных формул для молекулярных и фрагментных ионов упрощает идентификацию состава соединения.
- Mass Profiler Professional, программа, ориентированная на масс-спектрометрию, позволяет выполнять многовариантный статистический анализ в нескольких файлах данных.

Точные данные масс позволяют качественно распознавать соединения и проводить количественные расчеты с максимальной достоверностью.

## ПРОВЕРЕННАЯ ВРЕМЕНЕМ КОНСТРУКЦИЯ С ПЕРЕДОВЫМИ УСОВЕРШЕНСТВАМИ



### ГХ Agilent 7890В

ГХ Agilent 7890В обеспечивает оптимальную производительность системы при сочетании с масс-спектрометром.



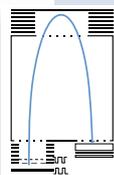
### Высокочувствительный источник ионизации

Программируется до 350 °С для надежной совместимости со сложными матрицами.



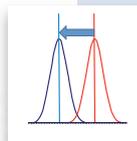
### Горячий кварцевый монолитный квадруполь гиперболической формы

Допускает разогрев до 200 °С — без потери разрешения или чувствительности — с целью исключения загрязнения от высококипящих соединений.



### Стабильная, высокоэффективная времяпролетная технология

Ортогональные времяпролетные технологии компании Agilent обеспечивают единообразие рабочих параметров для тысяч систем времяпролетных ВЭЖХ-МС, квадрупольно-времяпролетных ВЭЖХ-МС и квадрупольно-времяпролетных ГХ-МС.



### Коррекция по внутреннему эталону массы (IRM)

При необходимости, в целях максимальной точности определения массы, в источник можно вводить внутренний эталон массы.



### Съемный источник ионизации

Компьютерное управление интерфейсом между ГХ и МС и запорным механизмом для изолирования МС обеспечивает несложную замену ионного источника в течение 30 минут.

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

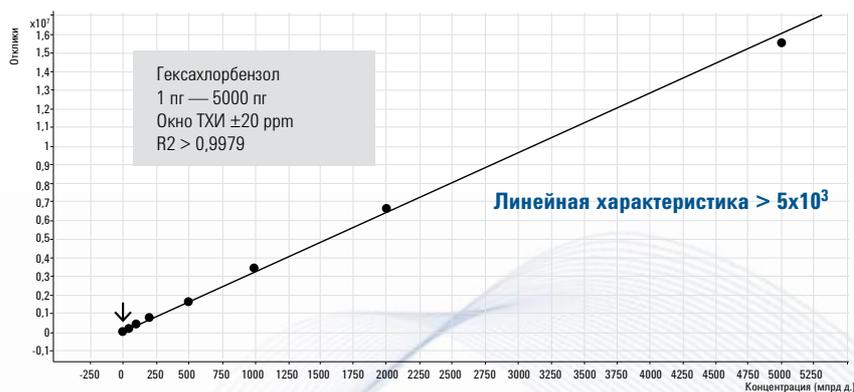
## Результаты *доказывают*, что технология квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС делает исключительный качественный и количественный анализ *осуществимым* и простым



**Удобные и понятные видео и программное обеспечение** содержат инструкции для всех необходимых этапов процесса снятия и установки источника, позволяя проводить его правильно и безопасно.



**Съемный источник ионизации** позволяет проводить его замену целиком, включая отражающую линзу, ионную камеру, экстракционную линзу и двойной катод, в течение приблизительно 30 минут без сброса вакуума.



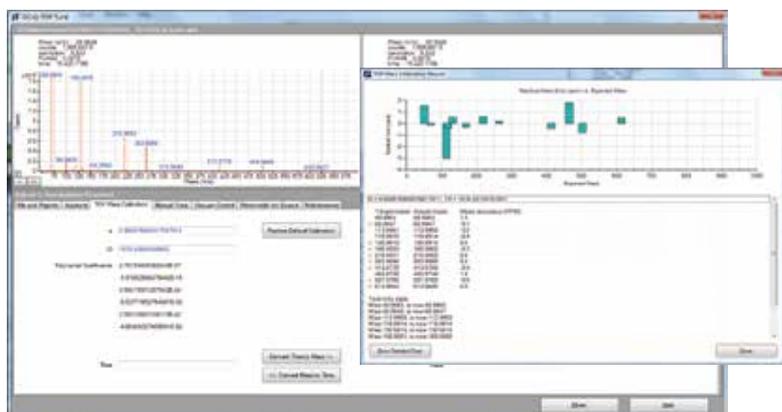
**Аналогово-цифровой преобразователь (АЦП):** Скорость сбора данных преобразователя, равная 4 ГГц, обеспечивает исключительную линейность в режиме высокого разрешения. Для еще более широкого линейного диапазона усилители с двойным коэффициентом передачи одновременно обрабатывают сигналы детектора каналов с низким и высоким коэффициентом усиления.

пг, на колонке	погрешность определения массы, ppm	
	2-формил-тиофен	2-ацетил-тиазол
1	-3,57	-0,79
2	-4,46	-0,79
5	-2,68	-0,79
10	-2,68	0,79
20	-2,68	0,00
50	-0,89	1,57
100	0,00	1,57
200	-1,79	1,57
500	2,68	1,57
1000	1,79	-1,57
Среднее значение	-1,43	0,31

**Внутренний эталон массы (IRM)** представляет собой патентованную систему, которая жестко привязывает ось массы для каждого сканирования к составу калибранта. IRM обеспечивает точность определения массы низкой концентрации в самых сложных хроматографических условиях.

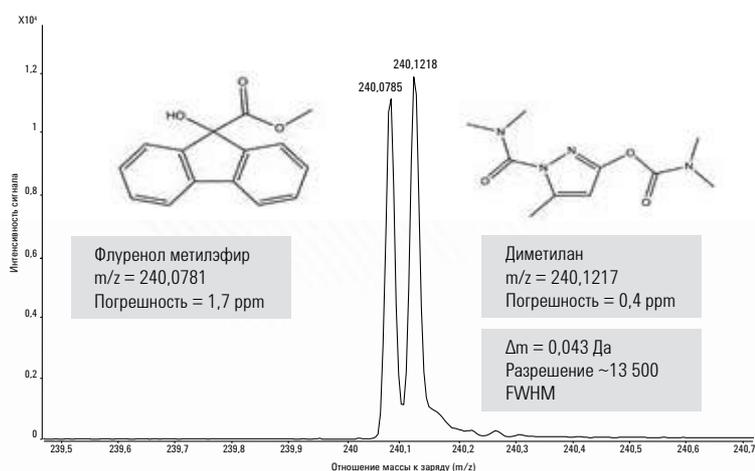
## Высокое разрешение и точность определения массы позволяют выполнять анализ целевых, нецелевых и неизвестных соединений

Обладая высокой точностью определения массы (на уровне 1 ppm) и большой разрешающей способностью, квадрупольно-времяпролетный Agilent 7200В для ГХ помогает снизить неопределенность, минимизировать ложноположительные результаты, подтвердить результаты поиска по библиотекам, а также составить молекулярные формулы для неизвестных соединений.



### Быстрая, понятная и удобная настройка

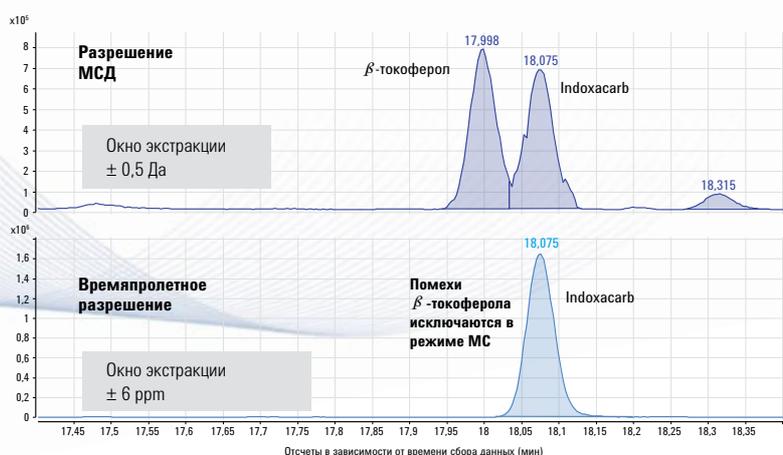
Наше автоматизированное программное обеспечение проведет вас через каждый шаг процесса настройки и калибровки массы для прецизионной работы с высоким разрешением и точным определением массы.



### Исключительная разрешающая способность необходима для уверенной идентификации аналита

Разрешение 13 500 (FWHM) позволяет легко различать два соединения с номинальными массами 240 Да, точные массы которых отличаются только на 0,0436 Да.

Исключительная разрешающая способность обязательна для уверенной идентификации аналитов в сложных матрицах.



### Точность определения массы позволяет эффективно устранить влияние матрицы

Использование окна экстракции шириной  $\pm 6$  ppm позволяет легко отделить фрагментный ион целевого аналита — индосакарба (150,01195 Да) — от влияния мешающих ионов матрицы —  $\beta$ -токоферола (150,06839 Да). Это способствует достоверному количественному анализу.

Когда требуется большая селективность, МС-МС с точным определением массы может еще лучше разделить целевые аналиты и мешающие вещества матрицы.

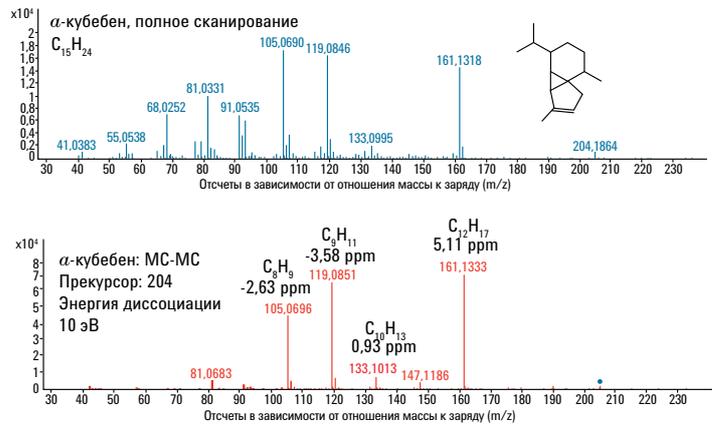
Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

# Однозначная расшифровка структуры и подтверждение целевого вещества

Обнаружение искомого или неизвестного соединения может быть произведено с помощью различных методов.

- Проведение поиска по библиотеке спектров, снятых в режиме ионизации электронным ударом (EI)
- Определение молекулярного иона при химической ионизации в режиме регистрации положительных ионов
- Реализация режима MS-MS для выявления пути фрагментации — *эксклюзивный метод компании Agilent*
- Вычисление молекулярных формул для всех ионов на основании данных измерения точной массы

Для очень сложных разделений, таких как  $\alpha$ -куббен на примере справа, селективность MS-MS также создает упрощенный спектр, помогающий уточнить структуру.

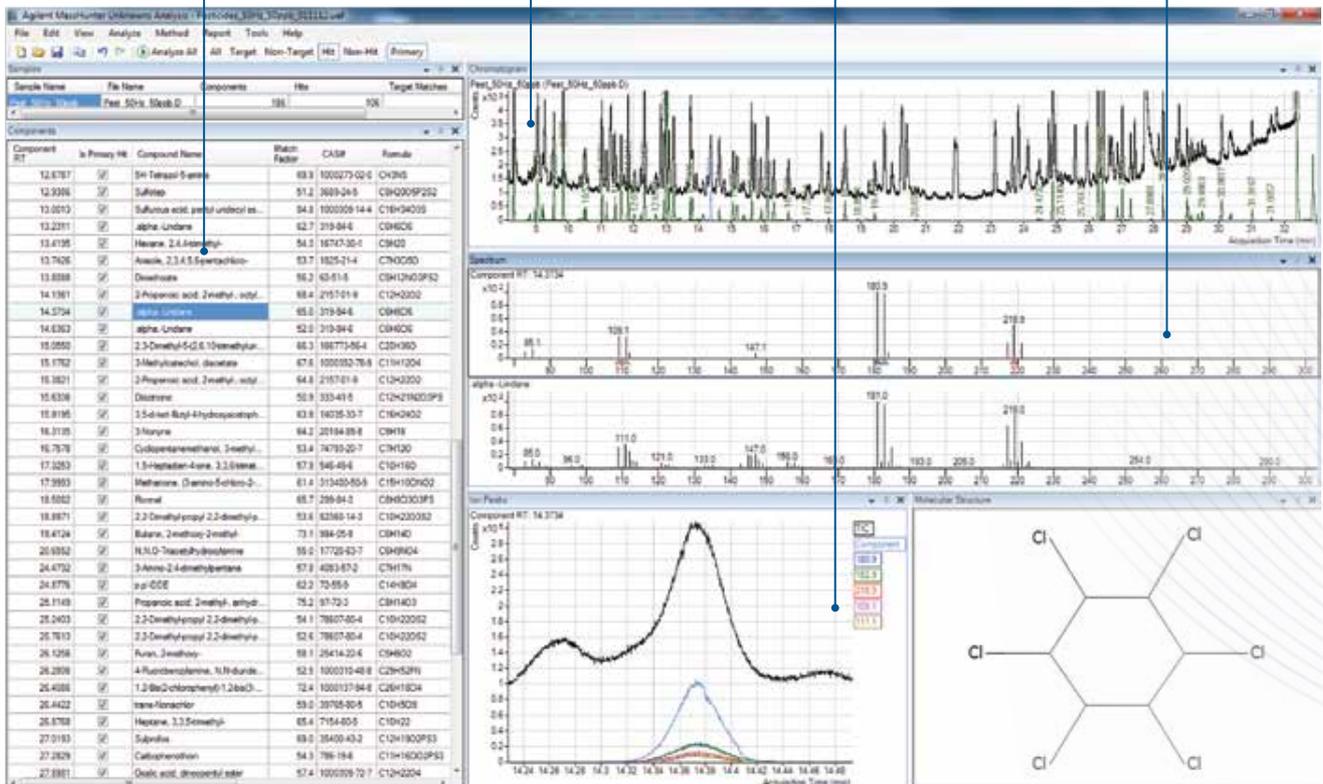


Перечень совпадений после деконволюции спектров и библиотечного поиска

Хроматограмма полного ионного тока (TIC) и хроматограмма идентифицированных компонентов после обработки

TIC и хроматограммы выделенных ионов (SIM)  $\alpha$ -линдана

Спектр  $\alpha$ -линдана после деконволюции

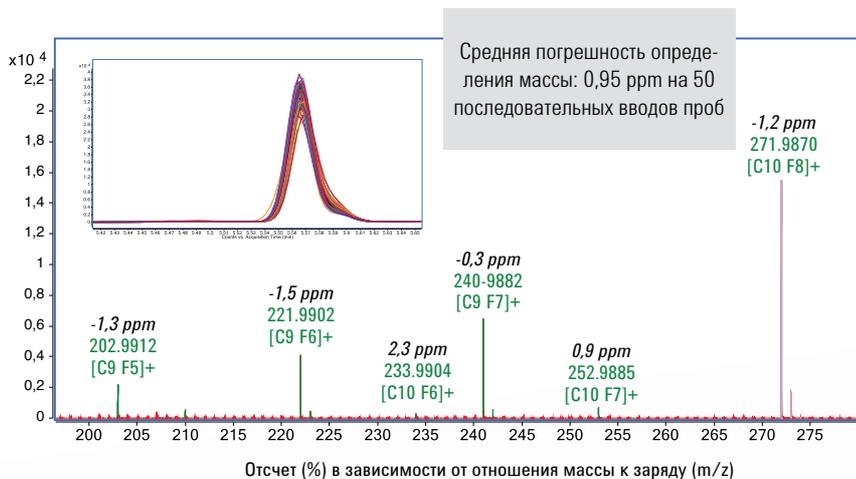


Высокоскоростной сбор данных спектров является еще одним важным преимуществом модели 7200. Скорость в 50 Гц позволяет эффективно определять значительное количество компонентов путем деконволюции с помощью инструмента MassHunter's Unknowns Analysis.

# Новый квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС 7200В

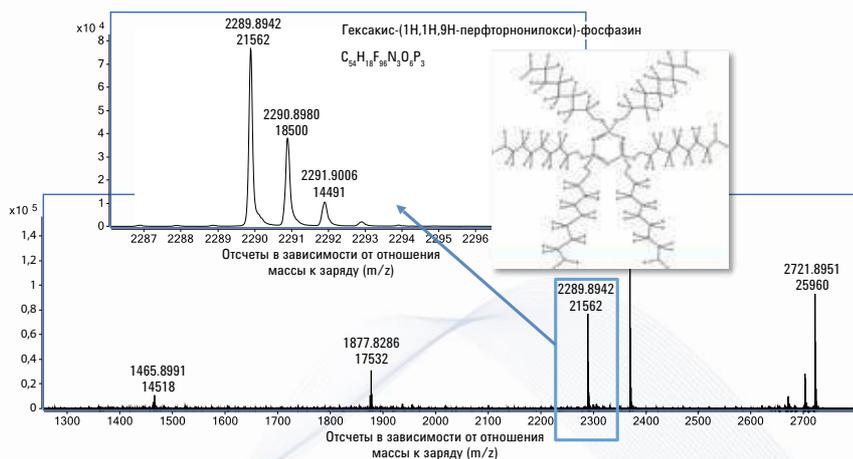
## Максимальное расширение аналитических возможностей

**Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200В** предоставляет новые возможности и усовершенствованные рабочие характеристики, в том числе повышенные стандарты точности массы (менее 3 ppm) и расширенный диапазон масс, которые особенно ценны в сочетании с использованием устройств ввода твердых образцов (TSP и DIP). Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent лучше всего подходит для решения самых сложных аналитических задач.



### Превосходная и стабильная точность определения массы

В данном эксперименте октафторнафталин вводили последовательно (50 раз) в течение 5 часов. Наложение пиков (вставка) подтверждает стабильность квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС 7200В, а масс-спектр (внизу) демонстрирует превосходную точность определения массы. Средняя погрешность определения массы для 50 вводов пробы составила 0,95 ppm.



### Расширенный диапазон масс

Анализ гексакис-(1H,1H,9H-перфторонилокси)-фосфазина с пиками, которые находятся за пределами m/z 2722. Верхнее значение демонстрирует соотношение массы к заряду (m/z), а нижнее — разрешение по массе. Выделенный пик m/z 2290, демонстрирующий пики изотопов, показан крупным планом во вставке.

Подробнее о последних усовершенствованиях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

# ПРОВЕРЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СОЧЕТАНИИ С НОВЫМИ УНИКАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ

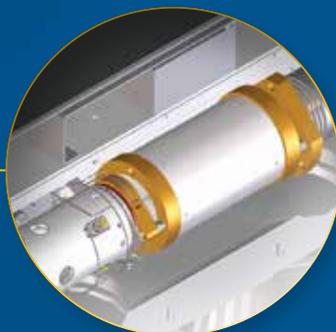
## ДВУХСТУПЕНЧАТОЕ ИОННОЕ ЗЕРКАЛО

обеспечивает временную фокусировку второго порядка для высокого разрешения по массе.



## ГЕКСАПОЛЬНАЯ ЯЧЕЙКА СОУДАРИЙ

ускоряет ионы, позволяя быстрее создавать высококачественные спектры МС-МС без перекрестных помех.

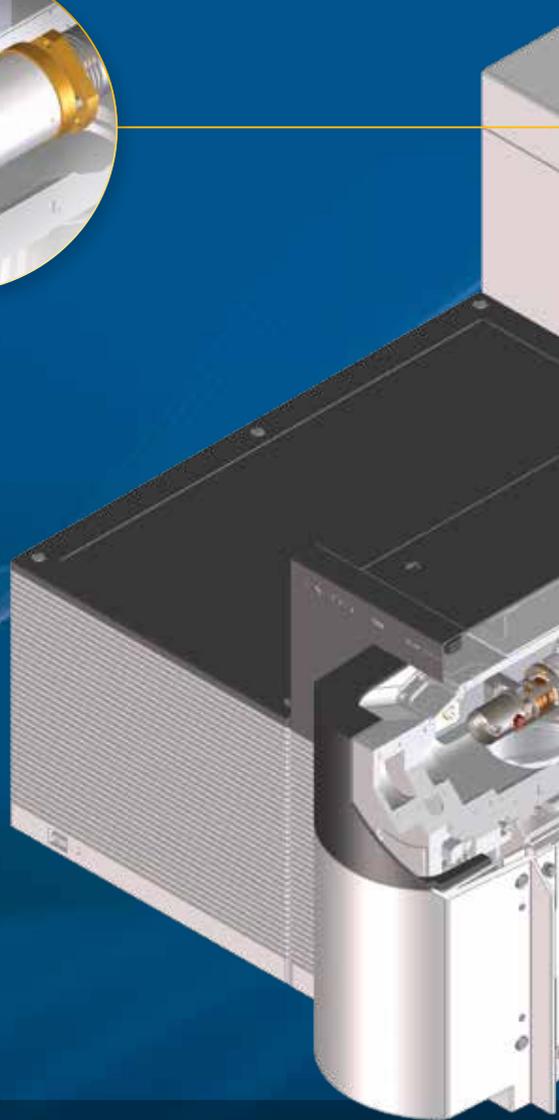


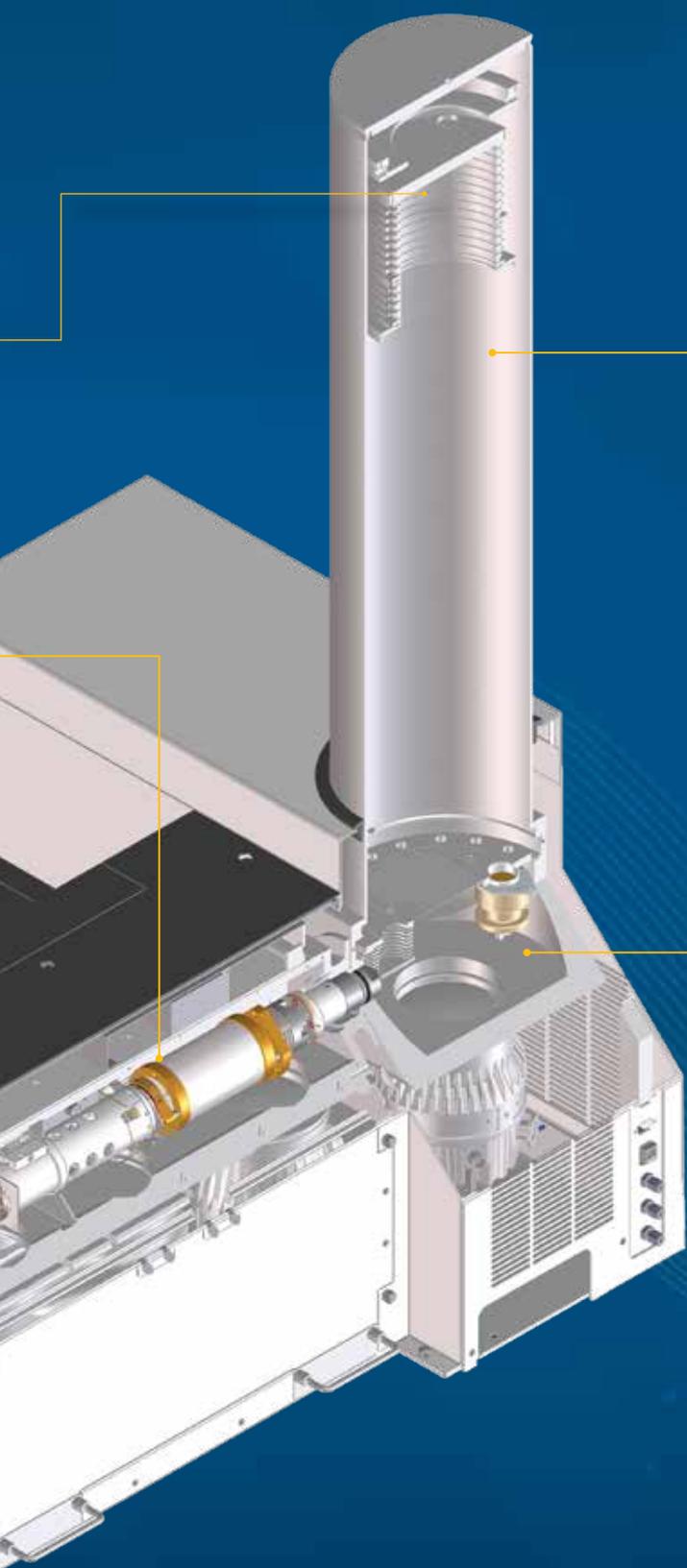
## РАБОТАЮЩИЕ С ЧАСТОТОЙ 4 ГГц ЭЛЕКТРОННЫЕ АЦП

позволяют получать высокую скорость сбора данных (32 Гбит/с), обеспечивающую высокое разрешение, точность определения массы и чувствительность.

## ГОРЯЧИЙ, МОНОЛИТНЫЙ, КВАРЦЕВЫЙ КВАДРУПОЛЬ

используется в более чем 30 000 приборов ГХ-МС от Agilent.



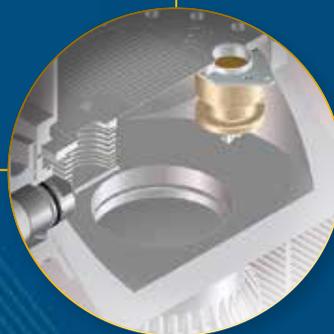


**ПАТЕНТОВАННАЯ ИНВАРОВАЯ ПРОЛЕТНАЯ ТРУБКА,**

герметизированная в оболочке с вакуумной изоляцией, поддерживает постоянную точность определения массы благодаря устранению температурного градиента.

**ФЭУ С МИКРОКАНАЛЬНОЙ ПЛАСТИНОЙ**

обеспечивает чувствительность обнаружения вплоть до отдельного иона, великолепное временное разрешение и широкий линейный диапазон.



**ТРИ ТУРБОМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАСОСА,**

включающие два насоса с делением потока и один одноступенчатый насос для источника и квадрупольного анализатора, создают оптимальный вакуум в каждой функциональной части анализатора.

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

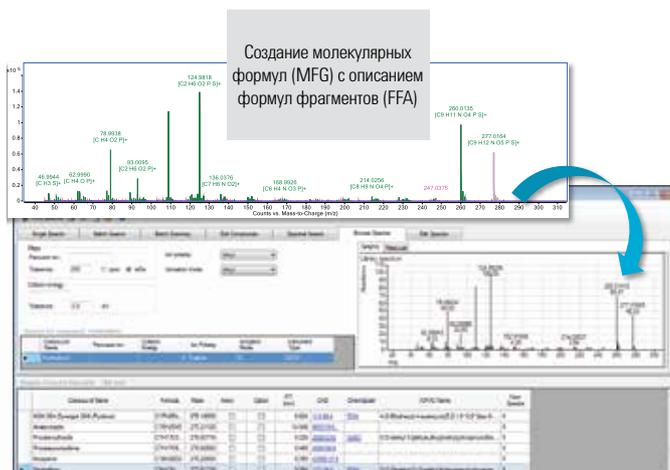
# НАДЕЖНЫЙ СКРИНИНГ И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ТОКСИКАНТОВ В СЛОЖНЫХ МАТРИЦАХ

Обычные методы скрининга пестицидов для обнаружения нескольких целевых соединений основаны на трехкварупольной технологии. Однако возможности этих методов ограничены набором целевых соединений и не позволяют проводить ретроспективный анализ собранных данных.

Использование квадрупольно-времяпролетной (Q-TOF) технологии для скрининга пестицидов позволяет:

- выполнять скрининг практически неограниченного числа пестицидов в различных матрицах;
- возвращаться к данным в любой момент, *без повторного анализа пробы*, для исследования проб на предмет как целевых, так и нецелевых соединений;
- определять в пробах неизвестные соединения или появляющиеся токсиканты.

Более того, можно одновременно проводить надежную идентификацию пестицидов и выполнять скрининг практически неограниченного числа соединений благодаря сочетанию **библиотеки точных масс пестицидов для квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent и ПО MassHunter Qualitative Analysis**.



Программные средства, такие как создание молекулярных формул с описанием формул фрагментов, создающие спектры EI с точным определением массы и описанием формул, **позволяют легко создавать библиотеки точных масс-спектров для квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС**. Фрагменты, образованные после ионизации EI, **автоматически преобразовываются** в теоретические массы, и скорректированные спектры помещаются в персональную библиотеку точных масс (PCDL).

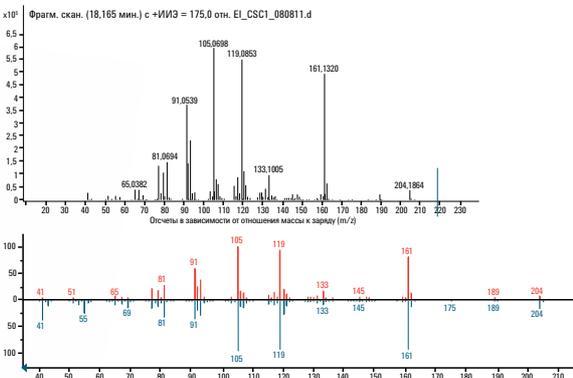


**Упрощение скрининга целевых и неизвестных пестицидов** благодаря ПО All Ions, которое позволяет настраивать метод в соответствии с конкретными задачами и требованиями. Также с помощью Compound Details View (Представление сведений о соединениях) можно быстро просмотреть результаты.

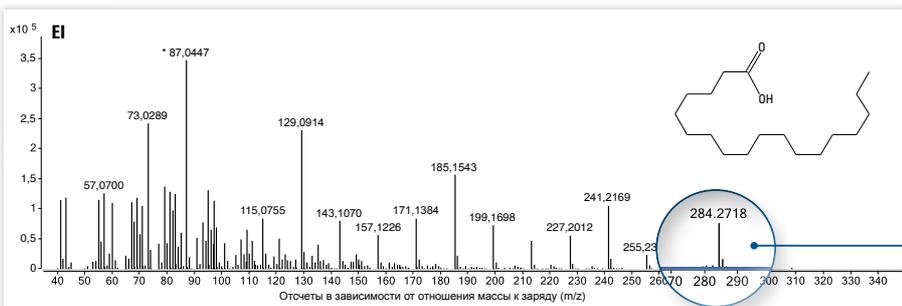
# ПОСТРОЕНИЕ ПРОГНОСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРИ ОЦЕНКЕ ОЛИВКОВОГО МАСЛА ХОЛОДНОГО ОТЖИМА

При помощи программного обеспечения Mass Profile Professional (MPP), используя статистические приемы, можно провести сенсорный анализ для оценки качества анализируемого объекта достаточно сложного состава. Для предсказания результата проведения такого анализа в модели использовалось пять специфических соединений.

Для подтверждения молекулярных ионов соединений, используемых в модели, в дополнение к спектральным данным ионизации в режиме EI были необходимы точные масс-спектры, полученные в режиме ионизации PSI.



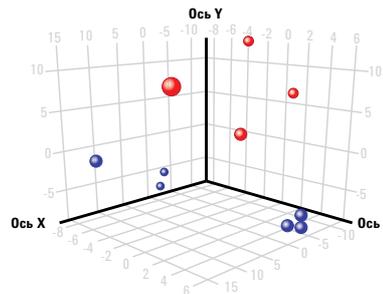
Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 создает спектры, которые можно найти в доступных коммерческих библиотеках спектров EI номинальных масс.



Полученные в режиме CI с образованием положительных ионов спектральные данные обеспечивают дополнительную точную информацию о массах молекулярных ионов. Аддукт-ионы, образующиеся в результате взаимодействия аналита с газом-реагентом, можно легко обнаруживать, дополнительно облегчая подтверждение молекулярного иона.

Источник:

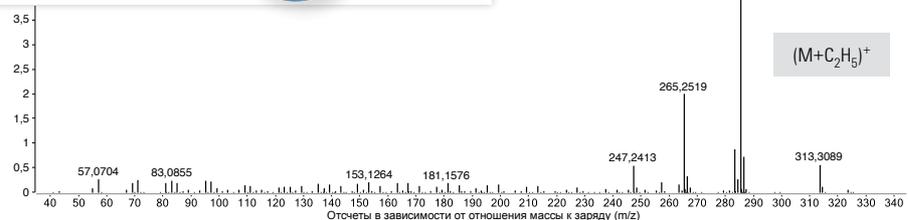
Характеризация оливкового масла с использованием квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent и программного обеспечения Mass Profiler Professional: № публикации 5991-0106EN



Анализ главных компонент (АГК) в MPP отображает кластеры данных. Синие пробы прошли сенсорный тест, в то время как красные — нет.

Identifier	Grade	Training	Predicted(Class Pre-)	Confidence
PAC1-E-1-Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
ESC2-E-1-Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
ESC1-E-1-Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
SAC1-E-1-Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
RFC2-E-1-Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
PSA2-E-1-Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
CSC1-E-1-Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
PSA1-E-1-Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
ESC1-E-1-Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
PSW2-E-1-Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000

Прогностическая модель MPP точно предсказала результаты прохождения теста для всех проб. Не используемые для построения прогностической модели пробы указаны со значением обучающей переменной, обозначенным как «None».



Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

# АНАЛИЗ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИЗМЕНЕНИЙ КЛЕТЧНОГО МЕТАБОЛИЗМА

Метаболомика является мощным инструментом для понимания метаболических изменений. При комплексных исследованиях в области метаболомики важна чувствительность во всем спектре и точность определения массы квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС, а также его возможности МС-МС для уточнения структуры неизвестных метаболитов. Расширенный динамический диапазон квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200 позволяет точно и одновременно определять количество широкого спектра метаболитов, присутствующих в клетке.

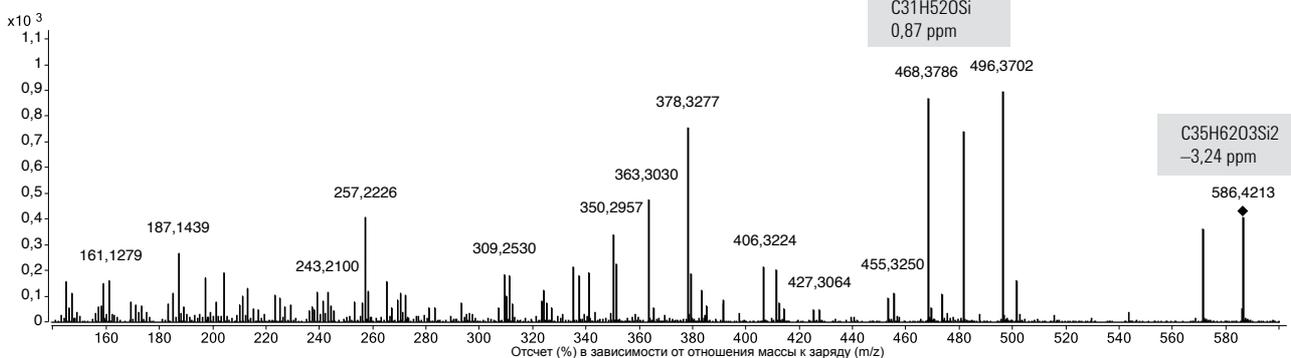
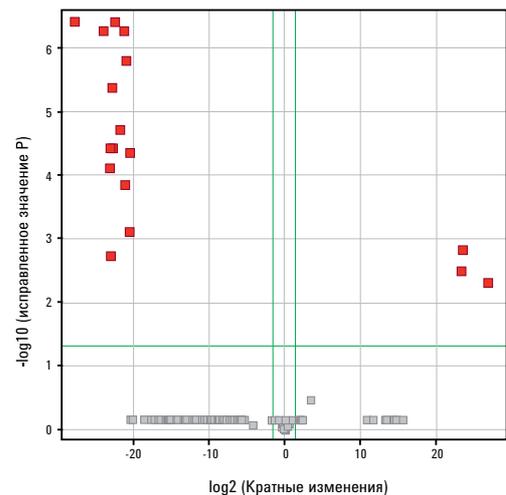
В одном простом эксперименте квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 обеспечил точные данные масс и высокую чувствительность в режиме полного сканирования, а также динамический диапазон, необходимый для выявления и количественной оценки всех интересных промежуточных путей, и однозначно выявил этап происходящей в обработанной пробе биохимической реакции.

Пакет Mass Profiler Professional (MPP) использовался для статистической оценки данных. В анализ были включены фильтрация данных, коррекция базовой линии и проверка значимости. Программные инструменты визуализации также сыграли важную роль в интерпретации данных.

Метаболиты в обработанной пробе существенно изменились	Кратные изменения в обработанной пробе
Сквален	2,5 (снижается)
Ланостерин	1,7 (возрастает)
4,4-диметил-5 $\alpha$ -холесто-8,24-диен-3 $\beta$ -ол	1,4 (возрастает)
4 $\alpha$ -карбокси-4 $\beta$ -метил-5 $\alpha$ -холесто-8,24-диен-3 $\beta$ -ол	360,8 (возрастает)
Зимостерин	2,9 (снижается)
Эргостерин	1,3 (снижается)

↓ Путь биосинтеза эргостерина

**Анализ значимости, выполненный в пакете MPP,** облегчает идентификацию метаболитов, которые изменяют свои уровни в различных условиях.



**МС-МС с точным спектром масс дочерних ионов** облегчает уточнение структуры неизвестных соединений.

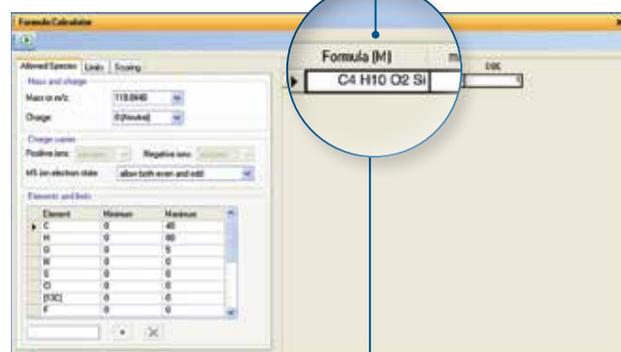
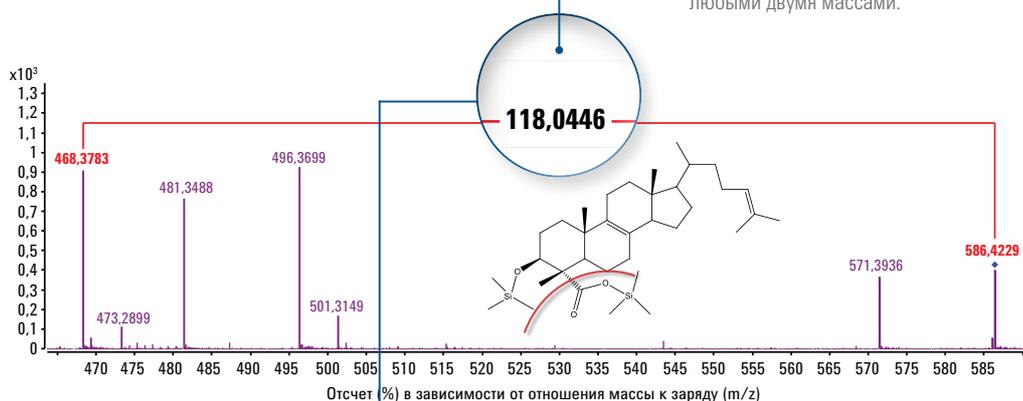
## Подтверждение предполагаемой структуры метаболитов на основании точного спектра масс дочерних ионов

Исследования по метаболомике часто выявляют значительное число нецелевых и неизвестных метаболитов, которые потенциально могли бы играть критическую роль в биологической интерпретации данных. Таким образом, структура этих важных метаболитов должна быть подтверждена или уточнена.

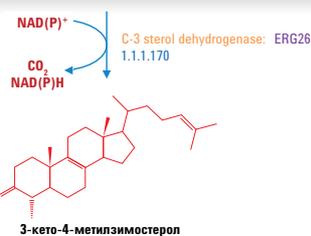
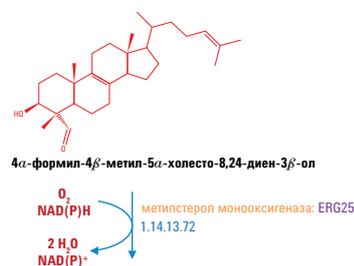
Сочетание квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200 и ПО MassHunter Workstation является идеальным для такого типа исследований.

### Окончательное уточнение структуры:

инструмент MassHunter Qual Workstation's Mass Caliper можно использовать для расчета значения нейтральной частицы между любыми двумя массами.



Программа MassHunter Qual для расчета качественно-количественного состава использует точные данные о массе квадрупольно-времяпролетного анализатора 7200 для определения всех фрагментных ионов (или выбросов нейтральных частиц) из спектра.



Благодарности:

Это приложение основано на работе Манхонг Ву<sup>1</sup> (Manhong Wu), Роберта Сэйнт-Онге<sup>2</sup> (Robert St. Onge), Сундари Суреш<sup>2</sup> (Sundari Suresh), Рональда Дэвиса<sup>2</sup> (Ronald Davis) и Гари Пельтца (Gary Peltz)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Отделение анестезии, школа медицины Стенфордского университета

<sup>2</sup>Центр биохимии генома Стенфордского университета

Источник:

Определение метабологического профиля дрожжевых стеролов с применением квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200: № публикации 5991-0571EN

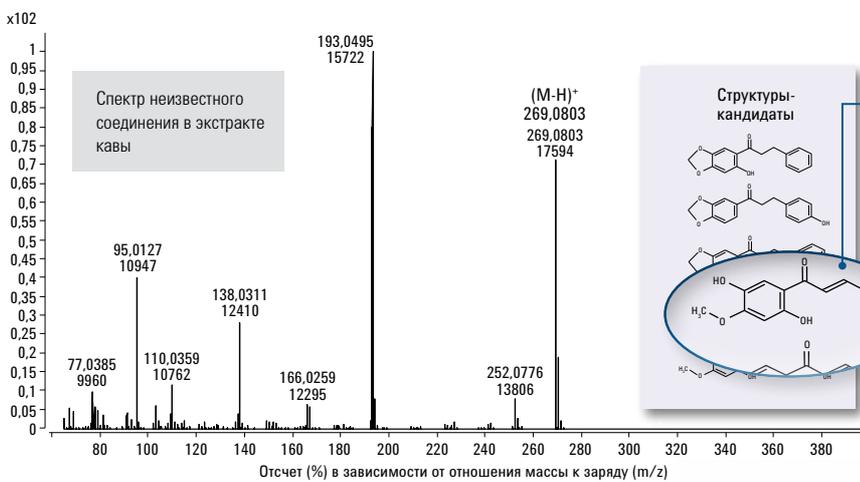
Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

# СОЧЕТАНИЕ ТОЧНЫХ ДАННЫХ МАСС И СПЕКТРОВ MS-MS УТОЧНЯЕТ СТРУКТУРУ НЕИЗВЕСТНОГО СОЕДИНЕНИЯ

Растительные экстракты содержат большое количество соединений, которые должны быть определены. Однако библиотеки спектров EI не всегда содержат спектральные данные масс для целевых соединений. В этих случаях данные точных масс-спектров дочерних ионов, полученные

с помощью квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200, могут иметь неоценимое значение для установления связей между фрагментными ионами, что способствует корреляции структуры.

## Идентификация неизвестных веществ в экстракте кофе



Из пяти перспективных структур только одна соответствует нейтральным частицам, определенным экспериментами MS-MS на нескольких родительских ионах.

## Экспериментальные данные MS-MS

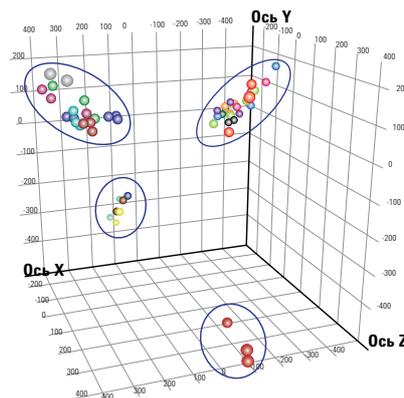
	<i>m/z</i> (экспериментально)	Формула	Погрешность (млн д.)	Индекс
(M-H) <sup>+</sup>	269,0803	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	-1,99	80,7
(M-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sup>+</sup>	193,0494	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	-0,18	96,7
(M-CH=CH-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sup>+</sup>	167,0334	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	-2,9	Не прим.
(M-CH <sub>2</sub> =CH-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sup>+</sup>	166,0259	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	-0,96	Не прим.
-CO	138,0311	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	-0,33	98,1
-CO	110,0359	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	-3,01	Не прим.
-CH <sub>3</sub>	95,0127	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	-0,59	99,5

Точные масс-спектры дочерних ионов помогают устранить любые неопределенности между различными нейтральными частицами, которые имеют одинаковую номинальную массу.

# АНАЛИЗ ПРОИСХОЖДЕНИЯ ЗАПРЕЩЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Расследование преступлений в сфере наркоторговли, в том числе торговли героином, часто связано с выявление группы преступников, являющихся посредниками в незаконном обороте наркотиков в пределах какой-либо страны.

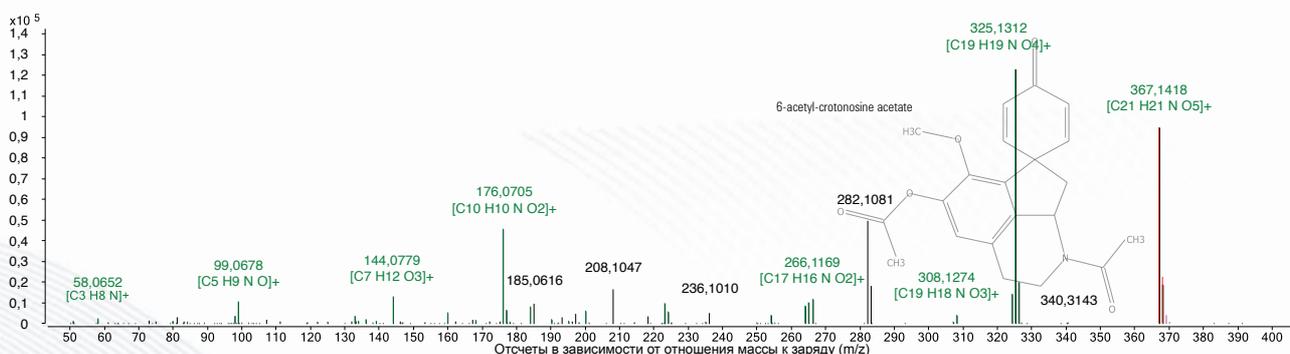
Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 может быть использован для выполнения сравнительного анализа запрещенных препаратов, что позволяет органам наркоконтроля определить общий источник происхождения. Точные данные масс также можно использовать для определения загрязняющих веществ, что облегчает определение происхождения наркотиков.



**Инструменты пакета MPP**, такие как Principal Component Analysis и Hierarchical Cluster Analysis, дают возможность визуализировать сходные параметры и формировать кластеры из отдельных групп.

	[1] (Прогностический показатель)	[2] (Прогностический показатель)	Точность
(Верно) [1]	11	1	91,667
(Верно) [2]	0	12	100,000
<b>Общая точность</b>			<b>95,833</b>

**Классовые прогностические модели** можно использовать для классификации проб неизвестных соединений.



**Инструменты для описания спектра в программе MassHunter Qual** позволяют быстро подтвердить предварительно идентифицированные соединения с применением точных данных масс.

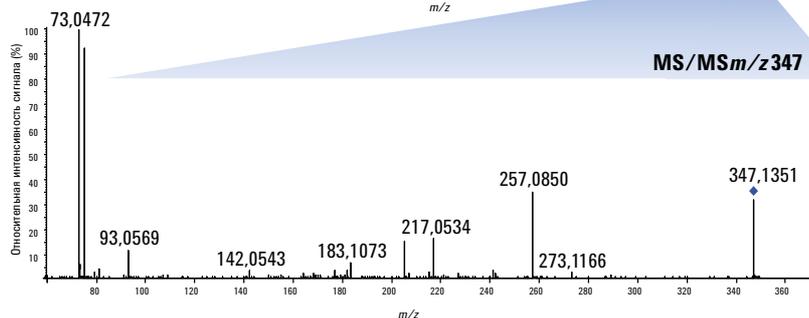
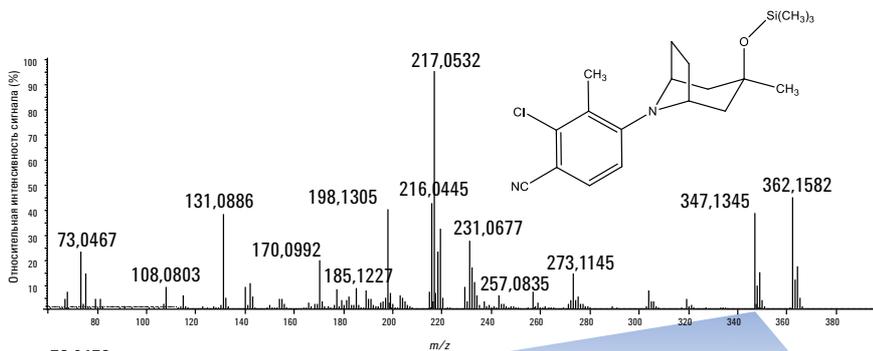
Источник:

Характеризация и классификация героина, содержащегося в изъятых партиях, с применением квадрупольно-времяпролетного ГХ-МС Agilent 7200: № публикации 5991-4369EN

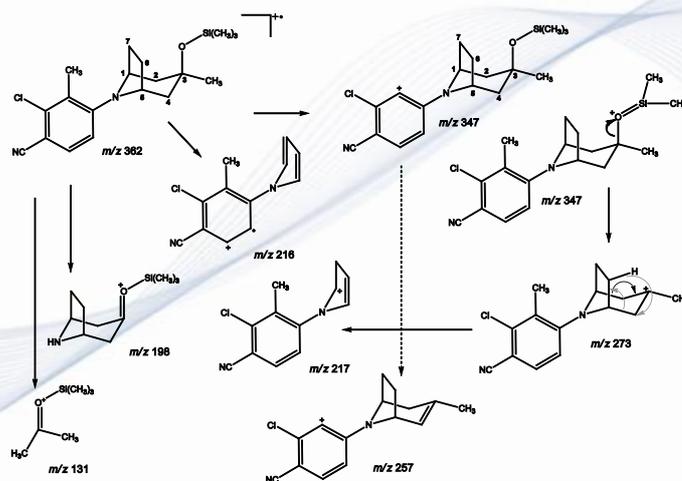
Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

# ЗАЩИТА ЗДОРОВЬЯ СПОРТСМЕНОВ И ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДОСТОВЕРНОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ СОРЕВНОВАНИЙ

Для комплексного допинг-контроля необходимы как целевой, так и нецелевой подходы, включающие детальные исследования путей биотрансформации препаратов. Препараты, похожие по структуре (по метаболизму и строению), можно определить с помощью уточнения структуры характерных фрагментационных ионов.



Спектры дочерних ионов точной массы имеют исключительно важное значение при уточнении путей разложения препаратов в допинг-тестах.



Источник:

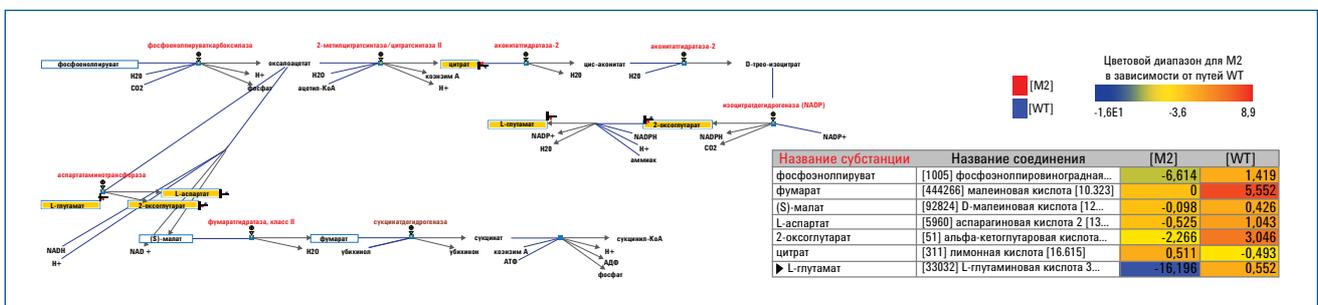
Тевис с соавт., Rapid Commun. Mass Spectrum. 2013 г., 27: 1173

# ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИЗМЕНЕНИЙ МЕТАБОЛИЗМА БАКТЕРИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОИЗВОДСТВЕ БИОТОПЛИВА

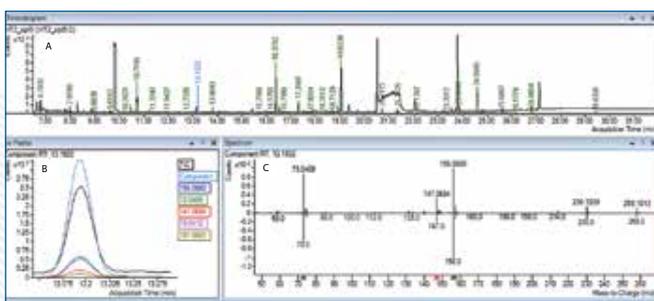
Проблема выброса CO<sub>2</sub>, а также ограниченная доступность природного топлива, подтолкнули к созданию микроорганизмов, вырабатывающих альтернативные вещества. Фотосинтетические микроорганизмы, поглощающие CO<sub>2</sub>, такие как цианобактерии, благодаря их способности использовать парниковые газы в качестве источника углерода и свет в качестве источника энергии, открывают новые горизонты в области получения топлива.

В оценке этих микроорганизмов ключевую роль играют метаболомные исследования. Они позволяют интерпретировать положительное влияние конкретных мутаций и определить потенциальные затруднения — продуцентов биотоплива.

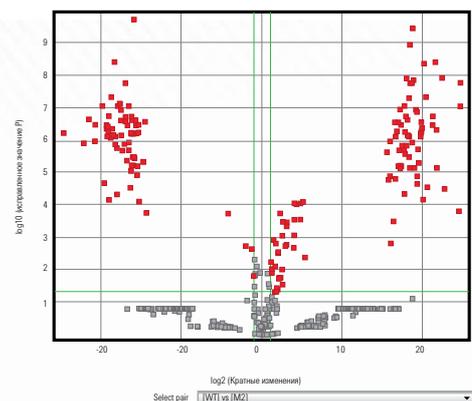
Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 хорошо подходит для анализа изменений в профилях метаболитов с целью дальнейшего подтверждения происхождения метаболитов с использованием точных масс.



Анализ путей MPP: картирование метаболомных различий между биохимическими путями.



Инструмент для анализа неизвестных соединений Unknowns Analysis может быть использован для быстрой деconvолуции точных масс и поиска по библиотеке.



Пакет MPP предоставляет мощные инструменты для статистического анализа и визуализации, позволяющие эффективно идентифицировать метаболомные различия.

Источник:

Метаболомика поглощающих углерод мутировавших цианобактерий с помощью квадрупольно-времяпролетного анализатора для ГХ: № публикации 5991-3476EN

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

# СТАБИЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РУТИННОГО АНАЛИЗА ОТ ЛУЧШИХ НА РЫНКЕ СИСТЕМ ДЛЯ ГХ-МС

## Agilent предлагает широкий ассортимент систем ГХ-МС для повышения эффективности и производительности лаборатории.

- Высокочувствительные детекторы для проб любого типа
- Гибкие конфигурации, которые подходят для сложных измерений вне лаборатории и соответствуют межотраслевым требованиям
- Расширенные аналитические возможности
- Увеличенные пропускная способность и время непрерывной работы
- Различные варианты насосов — диффузионные насосы, стандартные турбонасосы и турбонасосы повышенной эффективности.
- Инертный источник ионизации для анализа следовых количеств веществ



### ГХ-МСД Agilent 5977A

- Повышенная чувствительность благодаря новому источнику ионизации и протоколам настройки
- Новые интегрированные функции аппаратного и программного обеспечения упрощают рабочий процесс
- Доступна бюджетная система ГХ-МСД Agilent 5977E
- Портативный ГХ-МСД 5975T LTM обеспечивает неизменно высокую производительность как в лаборатории, так и за ее пределами.



### Трехквadrupольный ГХ-МС Agilent 7000

- Чувствительность на уровне фемтограммов для рутинного анализа, а также превосходная селективность
- Скорость сбора данных до 500 MRM-переходов в секунду



### Трехквadrupольный ГХ-МС Agilent 7010

- Сверхэффективная ионизация электронов
- Ускоренный анализ со сниженными пределами обнаружения

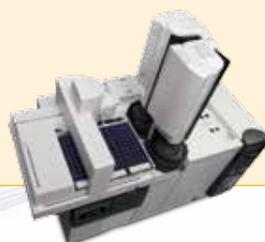


### Анализаторы ГХ-МС Agilent

- Готовые к эксплуатации пакеты рабочих решений для более чем 60 основных приложений
- Предварительно настроены и испытаны на заводе-изготовителе с применением специализированных методов и тестовой смеси для проверки прибора

## Широчайший ассортимент устройств для ввода пробы

Квadrupольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent отвечает всем требованиям по вводу образцов с помощью широкого набора устройств ввода жидких проб, равновесного пара, газообразных и даже твердых веществ.



Автоматический дозатор жидких образцов Agilent 7693A



Автосамплер PAL



Автоматический дозатор жидких образцов Agilent 7693



Устройство ввода твердых образцов

# СТАБИЛЬНОСТЬ МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ ПИКОВ ПЛЮС МАКСИМАЛЬНАЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ ЛАБОРАТОРИИ

Мировой лидер в области хроматографии, компания Agilent обладает уникальной возможностью снабдить вас инновационными продуктами для подготовки проб, колонками для ГХ и инертными компонентами тракта, чтобы помочь вам решать самые сложные аналитические задачи.

## Достижение точных и воспроизводимых результатов с меньшим количеством повторных проб

Только Agilent предлагает полную линейку продуктов для подготовки проб в соответствии с вашими задачами и приборами.

- **Полимерные сорбенты Agilent Bond Elut SPE** обеспечивают самые чистые экстракты и избирательно удаляют мешающие компоненты из сложных матриц. Самый широкий выбор на рынке — более 40 видов сорбентов более чем в 30 видах фасовки.
- **Лучшие на рынке наборы Agilent QuEChERS** — это экономически выгодный способ сделать подготовку проб быстрее, проще и надежнее.



Подробнее: [agilent.com/chem/sampleprep](http://agilent.com/chem/sampleprep)

## Надежная и стабильная инертность от устройства для ввода пробы к детектору

Инертные компоненты тракта Agilent обеспечивают инертность всех поверхностей, соприкасающихся с пробами, что позволяет снизить адсорбцию аналита и выполнять обнаружение на уровне миллиардных (ppb) и триллионных (ppt) долей в соответствии с требованиями современного анализа.

- **Колонки для ГХ Agilent J&W Ultra Inert** тестируются с применением самой сложной в отрасли тестовой смеси для обеспечения стабильной инертности и исключительно низкого уровня уноса неподвижной фазы.
- **Лайнеры Ultra Inert** обеспечивают надежность, воспроизводимость и инертность, как при использовании стекловолокна, так и без него.
- **Варианты испарителя с делением и без деления потока** обеспечивают дополнительную инертность пути прохождения пробы.
- **Позолоченные уплотнения Ultra Inert** дополнительно пассивированы *поверх* позолоты для еще большей инертности и лучшей герметичности.
- **Гибкие металлические обжимные ферулы UltiMetal Plus** совместимы с фитингами для CFT, обеспечивают высокую степень герметизации, для которой требуется меньшее количество оборотов при уплотнении.
- **Системы фильтрации для очистки газов** обеспечивают высочайшую чистоту газа, уменьшая загрязнение колонок и потерю чувствительности.
- **Детекторы для ГХ** обеспечивают высокий уровень селективности и чувствительности, требуемый для современных аналитических задач.



Подробнее: [agilent.com/chem/inert](http://agilent.com/chem/inert)

Подробнее о возможностях квадрупольно-времяпролетного анализатора Agilent 7200 для ГХ см. на сайте [agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)



КВАДРУПОЛЬНО-ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ ГХ-МС AGILENT 7200

## НАДЕЖНОЕ СТРУКТУРНОЕ ПОД- ТВЕРЖДЕНИЕ ЦЕЛЕВЫХ, НЕЦЕЛЕВЫХ И НЕИЗВЕСТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

**Квадрупольно-времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200** представляет собой первый в мире квадрупольно-времяпролетный масс-спектрометр, специально предназначенный для ГХ-МС. Он сочетает проверенные технологии ГХ Agilent 7890В, трехквадрупольного ГХ-МС 7000В и квадрупольно-времяпролетного ВЭЖХ-МС 6500 с высоким разрешением. Преимущества:

- **Высокоточное определение данных масс:** Усилитель с двойным коэффициентом передачи и двойным аналогово-цифровым обнаружением записывает несколько событий в широких массовых и динамических диапазонах.
- **Скорость сбора данных 32 Гбит/с:** Работая с частотой 4 ГГц электронные АЦП улучшают разрешение, точность определения массы и чувствительность для проб с небольшим относительным содержанием.
- **Постоянная точность определения массы:** Наша патентованная пролетная трубка INVAR, помещенная в герметичную вакуумированную оболочку, стабилизирует калибровку массы в зависимости от температурных изменений.
- **Быстрое получение высококачественных спектров МС-МС:** Ускорение ионов происходит в уникальной гексапольной ячейке соударений.
- **Простое рутинное техническое обслуживание:** Замена съемного источника ионизации, линз и катода без сброса вакуума в массовом анализаторе.

### Дополнительные сведения

Дополнительная информация:  
[agilent.com/chem/GCMS\\_QTOF](http://agilent.com/chem/GCMS_QTOF)

Россия

**8 800 500 9227; +7 495 797 3900**  
[agilentRU@agilent.com](mailto:agilentRU@agilent.com)

Европа

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

Азиатско-Тихоокеанский регион  
[inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:inquiry_lsca@agilent.com)

В других странах обратитесь  
к местному представителю или  
местному уполномоченному  
дистрибьютору Agilent:  
[agilent.com/chem/contactus](http://agilent.com/chem/contactus)

### Услуги компании Agilent позволят вам уделять больше внимания своей работе



Независимо от того, возникает ли необходимость в техническом сопровождении одного прибора или оборудования различных поставщиков в нескольких лабораториях, программы обслуживания Agilent Advantage помогут быстро устранить любые проблемы, добиться бесперебойной работы и оптимизировать использование ресурсов. Ниже перечислены некоторые возможности поддержки и технического обслуживания.

- Профилактическое обслуживание на объекте заказчика, обеспечивающее стабильную работу оборудования
- Устранение неполадок и ремонт приборов Agilent и оборудования других производителей
- Удаленная диагностика и мониторинг для повышения производительности
- Услуги по обеспечению наиболее полного соответствия нормативным требованиям отрасли и обучающие курсы
- Привлечение экспертов для консультаций и обучения



### Гарантия работоспособности Agilent

Компания Agilent гарантирует, что с момента приобретения прибор сохранит работоспособность в течение 10 лет. В противном случае компания дает скидку на приобретение более новой модели прибора в размере остаточной стоимости имеющегося.

Информация может быть изменена без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2014.  
Напечатано в США 20 августа 2014 г.  
5990-8194RU



**Agilent Technologies**