

Масс-спектрометрическое детектирование токсичных веществ в практике ветеринарных лабораторий



INTERLAB

Масс-спектрометрические детекторы от компании Agilent Technologies



INTERLAB

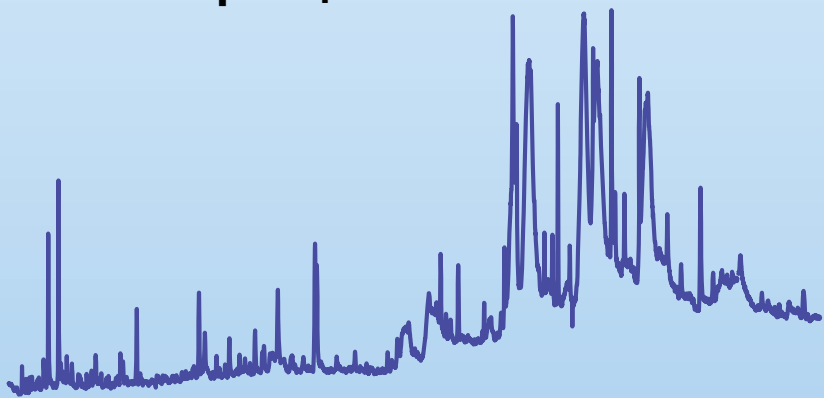


**Готовое решение от компании Agilent
для определения содержания
пестицидов с использованием
GC/MS 5975C и новой DRS-библиотеки**

INTERLAB

Проблемы анализа пестицидов

- ⇒ Следовой уровень содержания в сложных матрицах требует применения оборудования с высокой чувствительностью и селективностью
 - Многократные инъекции пробы требуются для получения селективности/чувствительности (GC) и подтверждения (MS)
- ⇒ Необходимость сокращения времени анализа для увеличения производительности лаборатории
 - Зачастую длительное время анализа связано с необходимостью прогрева колонки для удаления из нее тяжелых компонентов
- ⇒ Сложность подтверждения обнаружения целевых соединений в сложных матрицах
 - Низкий процент совпадения с масс-спектральными библиотеками
 - Длительное время обработки результатов (вычитание фона)
- ⇒ Необходимость идентификации неизвестных соединений в образцах



Сколько целевых соединений в том образце?

Сколько необходимо затратить времени, чтобы подтвердить их наличие?

Готовое решение от Agilent для определения содержания пестицидов

Пробоподготовка

Прибор

Анализ данных

Отчет

QuEChERS*



- ★ Quick
- ★ Easy
- ★ Cheap
- ★ Effective
- ★ Rugged
- ★ Safe

- ★ Технология капиллярных потоков
- ★ Фиксация времен удерживания
- ★ Одновременность SIM/Scan
- ★ Инертный источник (350°C)
- ★ Диапазон масс до 1050 а.е.м.
- ★ Возможность использования водорода в качестве газа-носителя

- ★ Специальное программное обеспечение деконволюции спектров
- ★ AutoQuant
- ★ AutoSIM
- ★ SemiQuant
- ★ Custom Report

INTERLAB

Готовое решение от Agilent для определения содержания пестицидов



➔ **Легкость использования**

➔ **Автоматизация**

➔ **Увеличение производительности**

➔ **Минимальное число**

ложноположительных и отрицательных результатов



★ Специальное программное обеспечение деконволюции спектров

★ AutoQuant

★ AutoSIM

★ SemiQuant

★ Custom Report

★ Высокая пропускная способность

★ Простота в обслуживании

★ Инертный источник (350°C)

★ Диапазон масс до 1050 а.е.м.

★ Возможность использования

★ Широкий диапазон температур

★ Широкий диапазон температур

★ Широкий диапазон температур

★ Широкий диапазон температур

газа-носителя

INTERLAB

Готовое решение от Agilent для определения содержания пестицидов



- ★ Инертный источник (350°C)
- ★ «Умная» хим.ионизация
- ★ Электронные методы
- ★ Диапазон масс до 1050 а.е.м.
- ★ Безмаслянный насос
- ★ Возможность использования водорода в качестве газа-носителя

- ★ Технология капиллярных потоков
- ★ Специальная автонастройка на высокую чувствительность
- ★ Trace Ion Detection

- ★ Фиксация времен удерживания
- ★ Одновременность SIM/Scan

INTERLAB

Что такое фиксация времен удерживания? Как она помогает анализу пестицидов?

**Электронное управление
газовыми потоками
с точностью до 0,001 psi**

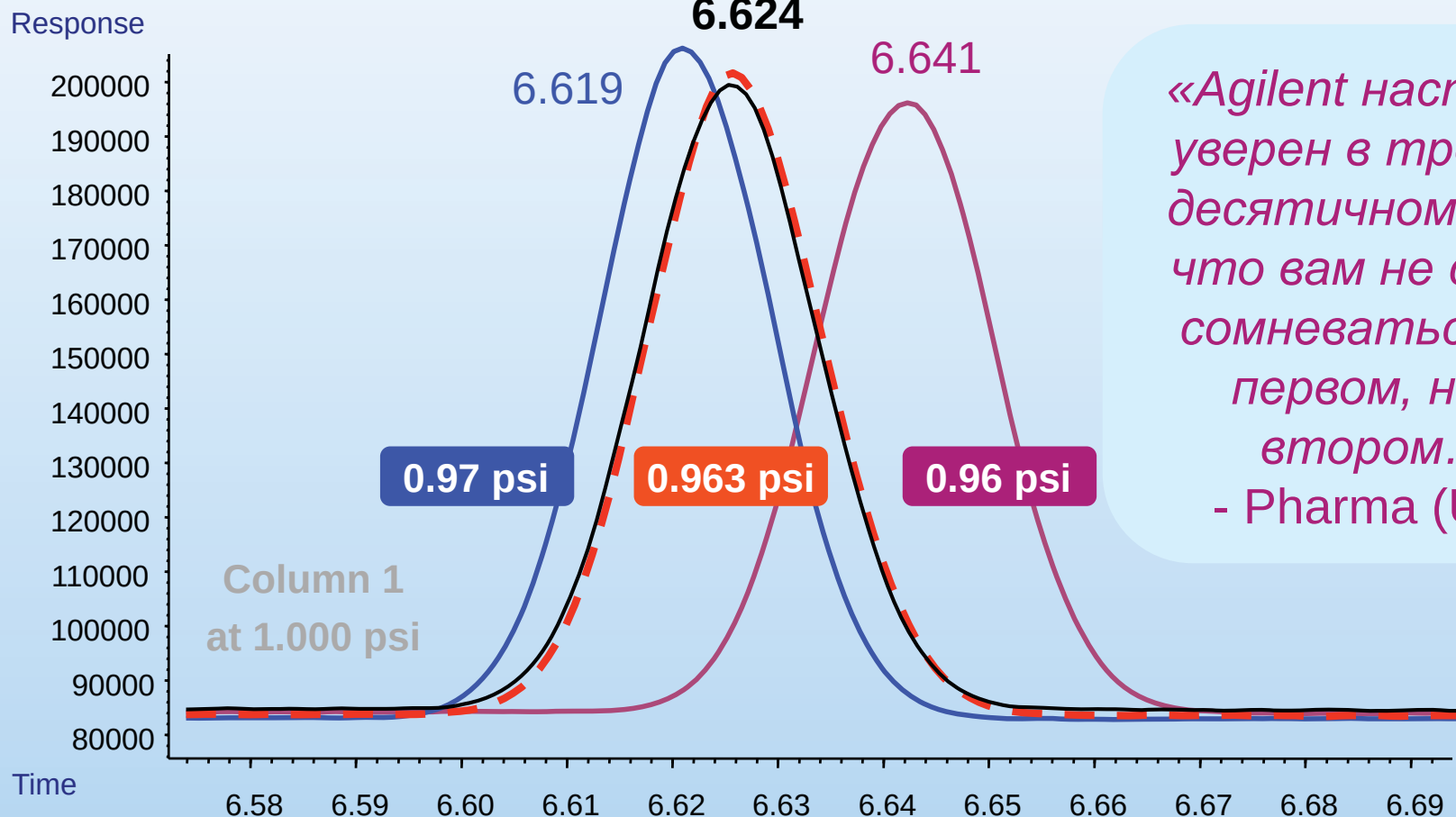
**Возможность калибровки времени
удерживания аналита от давления
в инжекторе**

**Создание библиотек
АБСОЛЮТНЫХ
времен удерживания**

**Идентификация целевых соединений
при отсутствии стандартных
образцов
Высокая стабильность
аналитических результатов**

Для чего необходима точность в 1/1000 psi?

- Для наиболее точного фиксирования времен удерживания (RTL)!



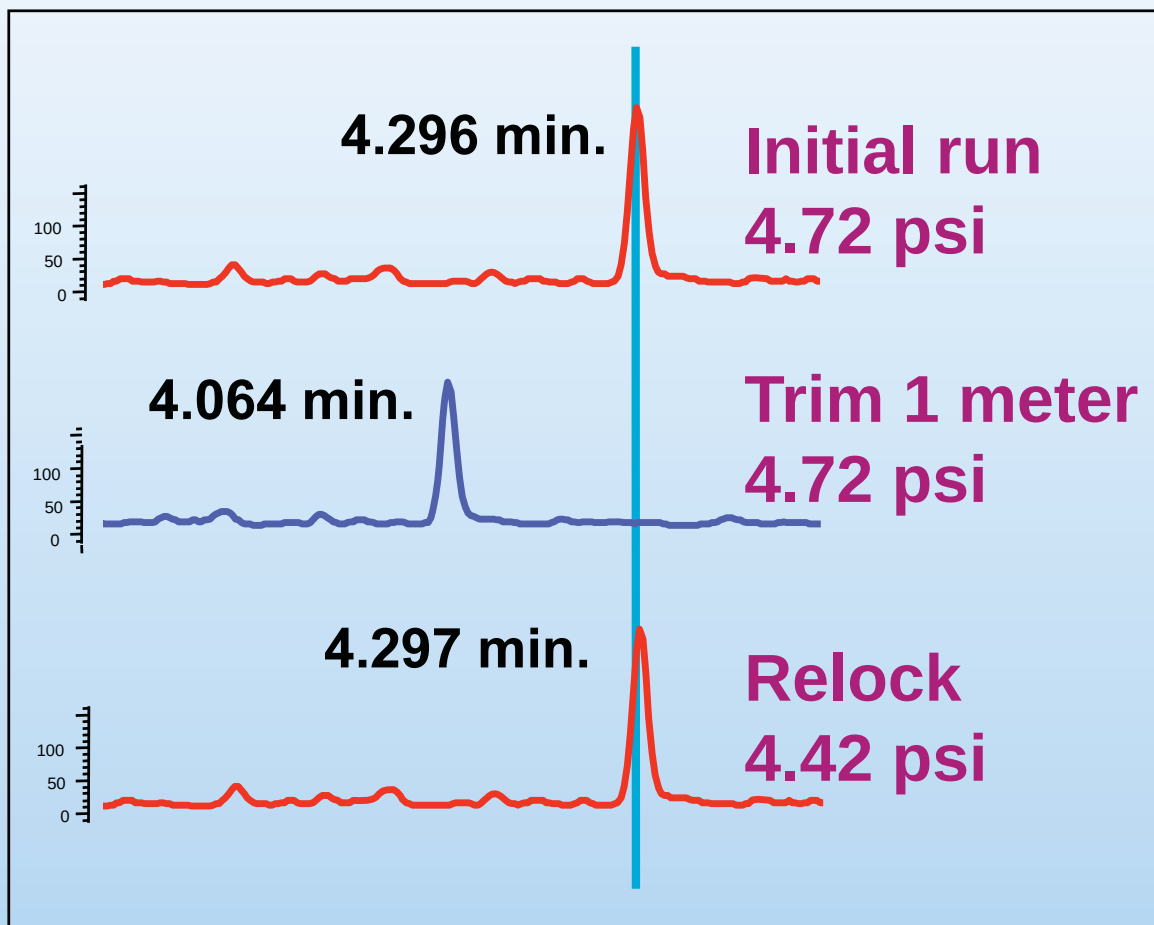
«Agilent настолько уверен в третьем десятичном знаке, что вам не стоит сомневаться ни в первом, ни во втором...»
- Pharma (USA)

INTERLAB

Фиксация времен удерживания (RTL)

Больше уверенности с использованием (RTL)

- Легкость
- Быстрота
- Воспроизводимость
 - От анализа к анализу
 - От оператору к оператору
 - От инструмента к инструменту



INTERLAB

Некоммерческие библиотеки абсолютных времен удерживания



1. Полихлорированные бифенилы
2. Фенолы
3. Органические соединения олова
4. Метилловые эфиры жирных кислот
5. Наркотические вещества и их метаболиты

Коммерческие библиотеки абсолютных времен удерживания



1. Пестициды и их метаболиты (более 920 соединений)
2. Токсичные вещества в окружающем воздухе (170 соединений)
3. Токсичные химикаты (731 соединение)
4. Наркотики и их метаболиты (720 соединений)

Что такое технология капиллярных потоков?

Как она помогает анализу пестицидов?

**Устройство
капиллярных
потоков**

**Семейство решений для расширения
производительности лаборатории**

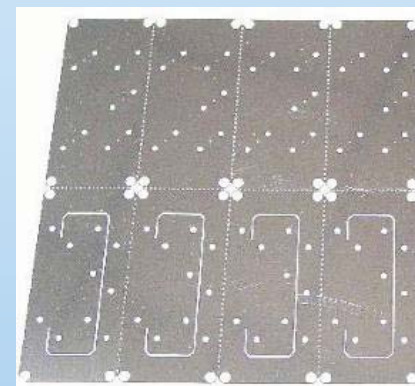
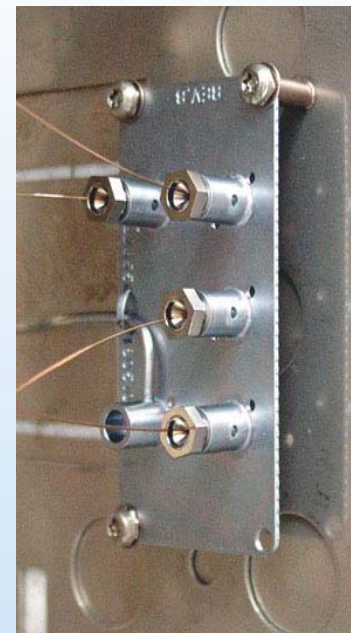
**Следовый анализ
в сложных матрицах**

**Делитель пробы позволяет получать
элементселективные сигналы и масс-
спектры за один ввод пробы**

Технология капиллярных потоков

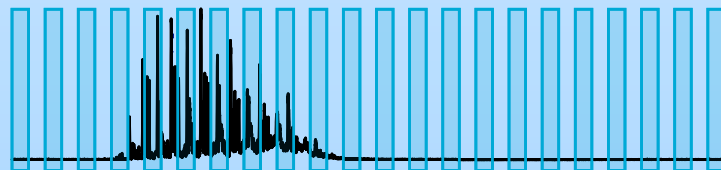
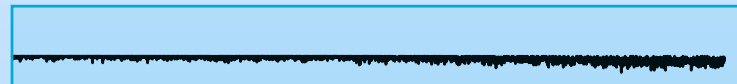
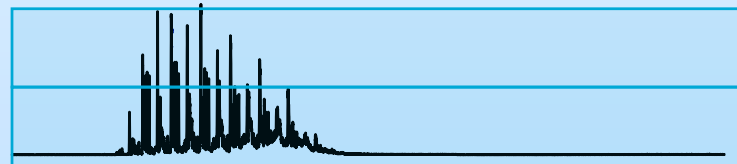
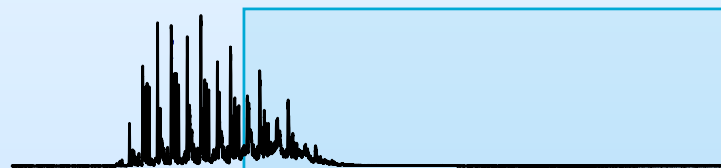
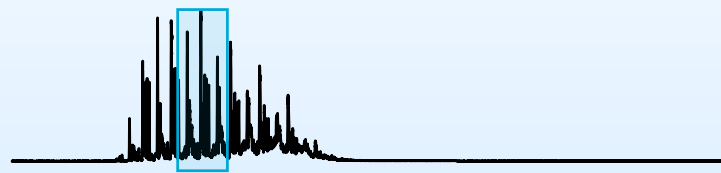
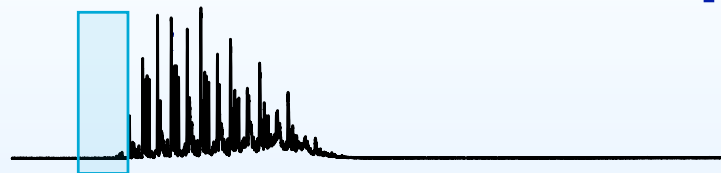
... запатентовано Agilent Technology

- Фотолитографическое химическое травление для минимизации «мертвого» объема
- Диффузносвязанные пластины формируют единую плату управления потоками
- Минимальная толщина пластины обеспечивает одновременный нагрев пластины с термостатом хроматографа
- Выступающие приваренные коннекторы обеспечивают надежное присоединение капилляров
- Деактивирование внутренних поверхностей гарантирует их инертность



INTERLAB

Технология капиллярных потоков неограниченные возможности!



Удаление растворителя (Solvent Bypass)

- устранение начальных пиков

**** Снижение стоимости обслуживания детектора**

Вырезание фрагмента хроматограммы (Heart Cut)

- вырезание пиков и перенос их на другую колонку

О

Обратная продувка (Backflush)

- удаление поздно выходящих пиков

**** Сокращение времени анализа, удаление тяжелых компонентов образца, сохранение колонки, снижение стоимости обслуживания детектора**

Деление (Split)

- Деление всей пробы на несколько детекторов

**** Получение дополнительной информации за один ввод пробы.**

Нахождение целевых пиков в неизвестных пробах

QuickSwap (GC/MS)

- обслуживание инжектора, смена колонки без выключения и сброса вакуума в MS.

**** Сокращение времени обслуживания MS**

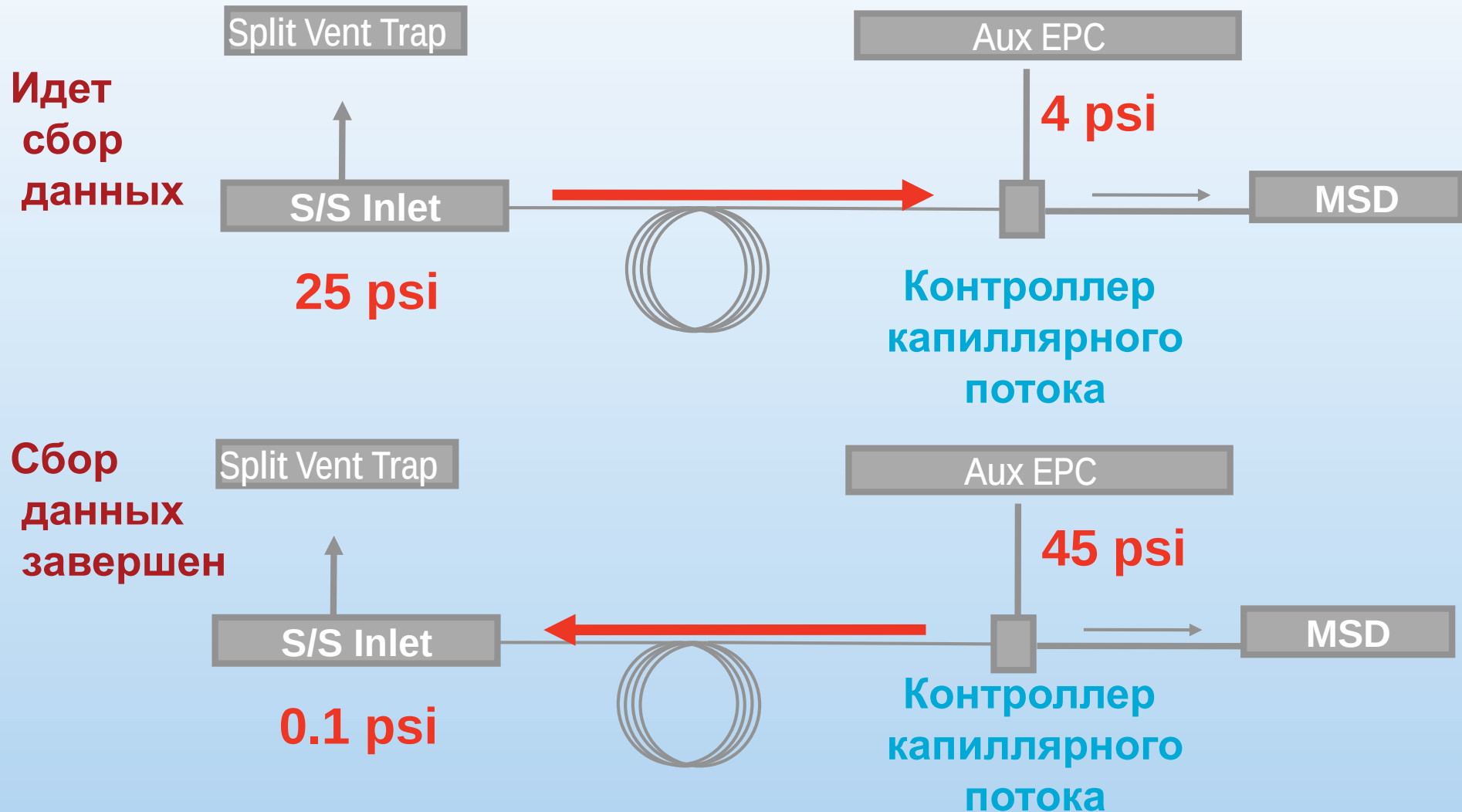
Modulate (New)

- Перемещение отдельных фракций на вторую колонку в любой момент

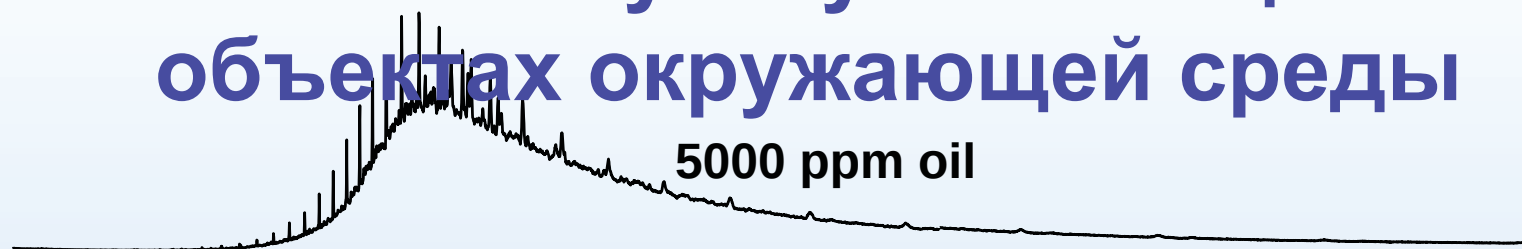
**** отличное разделение и получение простой информации для сложных образцов**

INTERLAB

Обратная продувка

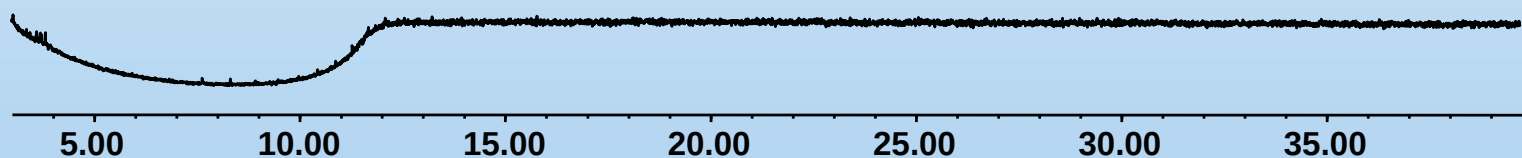


Анализ «полуплетучих» веществ в объектах окружающей среды



Шкала в 20 раз
интенсивнее, чем на
верхней хроматограмме

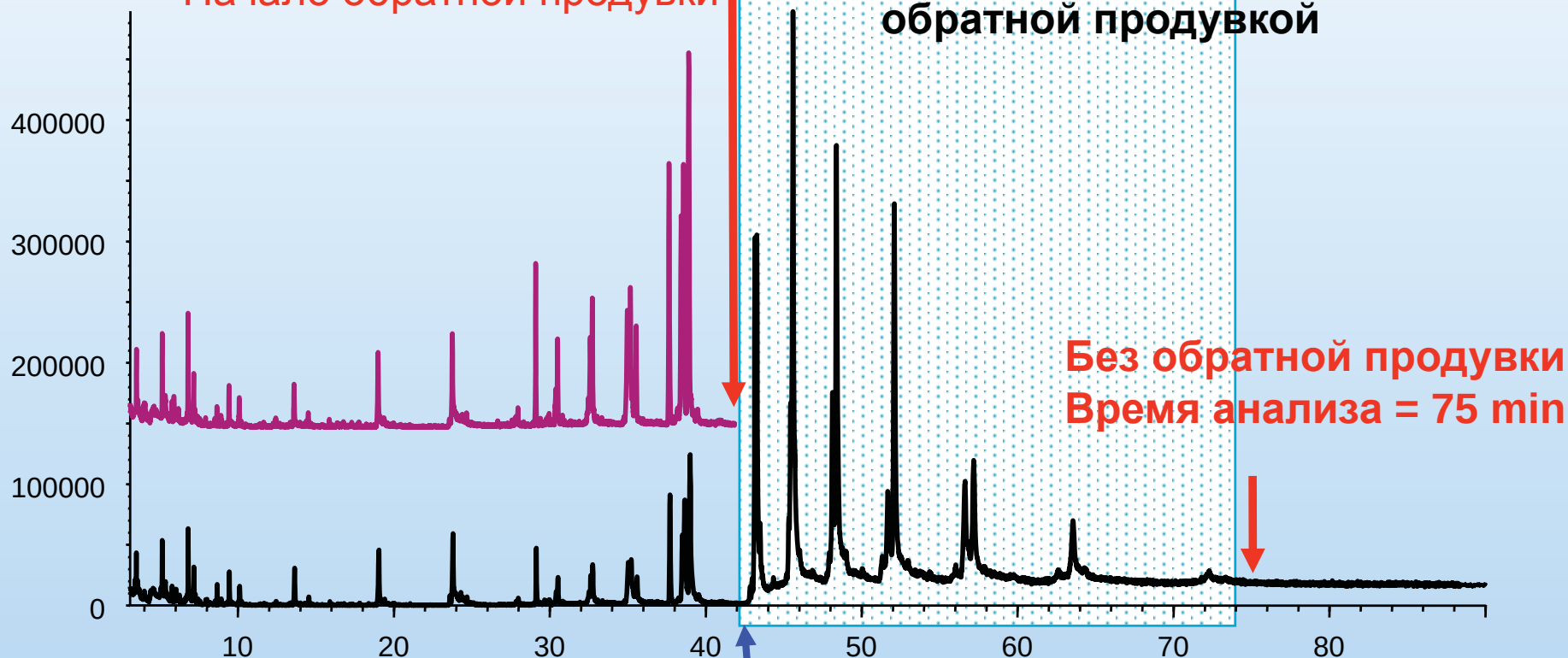
Ввод чистого растворителя
демонстрирует чистоту инжектора и
колонки



Пример обратной продувки – анализ пестицидов в экстракте молока

Время от начала
хроматограммы = 42 мин
Начало обратной продувки

Эти высококипящие
компоненты удаляются
обратной продувкой

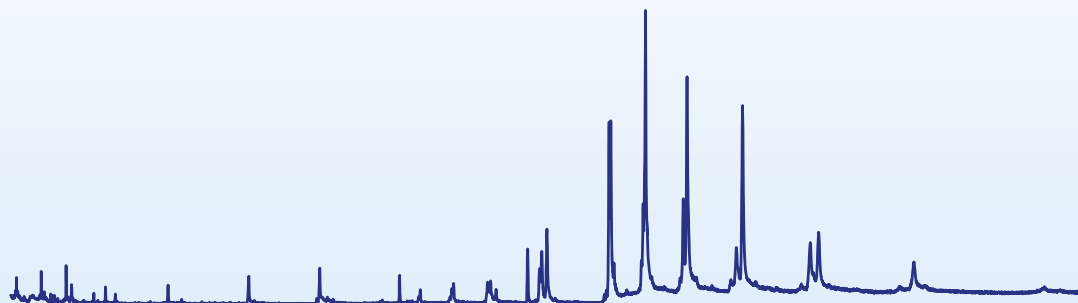


Без обратной продувки
Время анализа = 75 min

Температура печи поднимается до 320° для
удаления «тяжелых» компонентов

INTERLAB

Ускорение времени анализа....



Подготовка к вводу
ALS – 3 мин

Время сборки
42 мин

После сборки
Продувка 33 мин

После сборки
Охлаждение 4 мин

Суммарное время анализа 82 мин

Тот же метод с новыми возможностями увеличения производительности

Подготовка к вводу
с перекрыванием
1 мин

Время сборки
42 мин

Обратная
продувка
7 мин

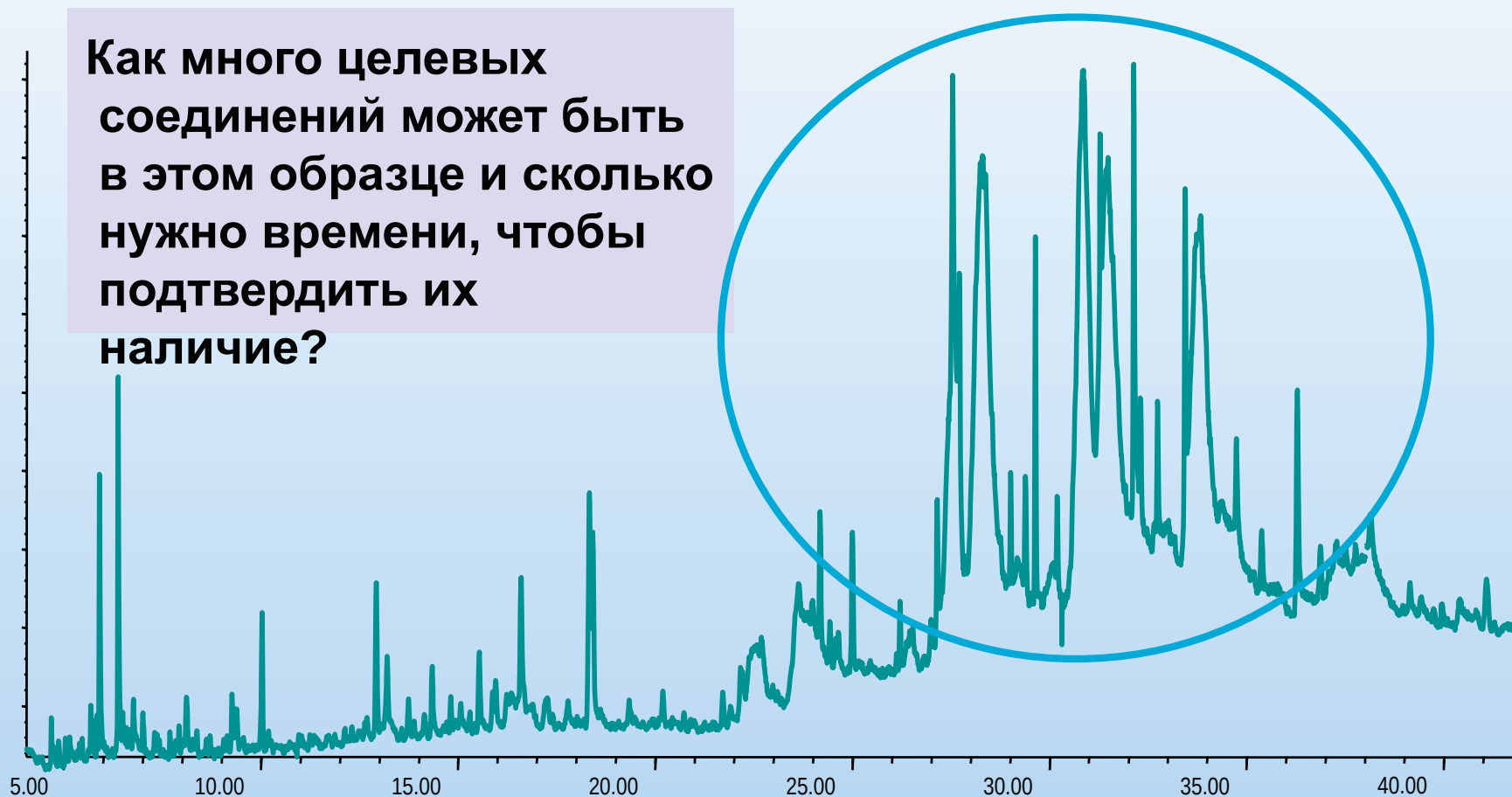
Быстрое
охлаждение
3 мин

Суммарное время анализа 53 мин

INTERLAB

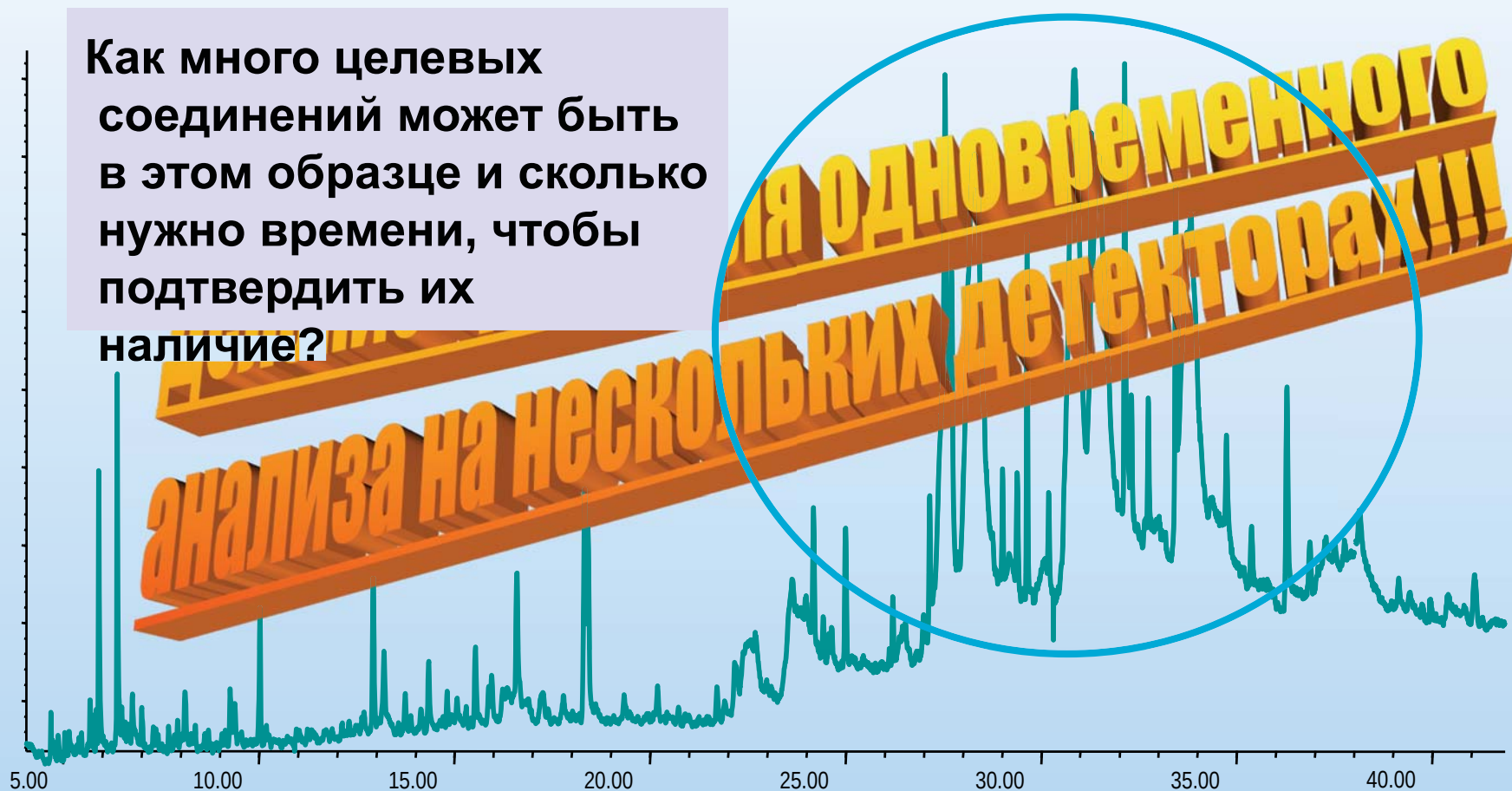
Обычный результат GC/MS-анализа сложной матрицы

Как много целевых соединений может быть в этом образце и сколько нужно времени, чтобы подтвердить их наличие?



Обычный результат GC/MS-анализа сложной матрицы

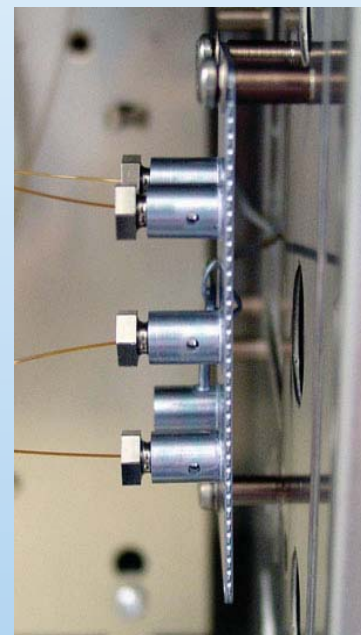
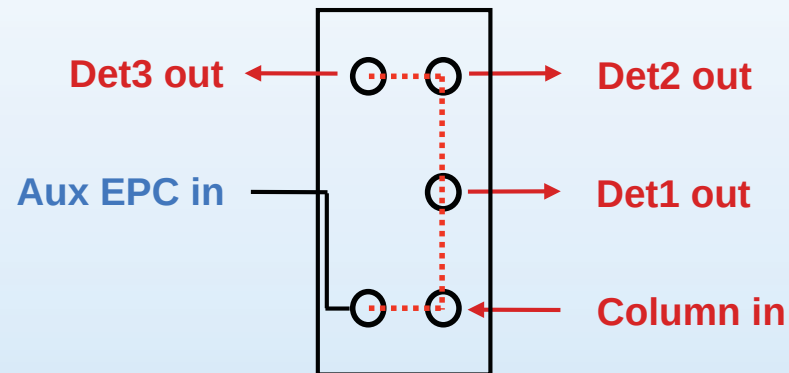
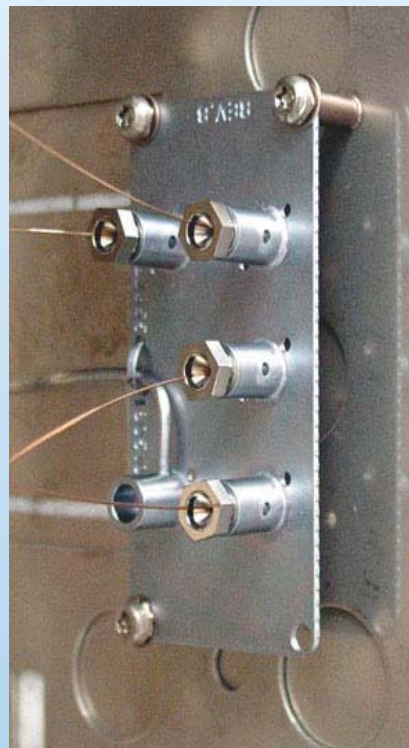
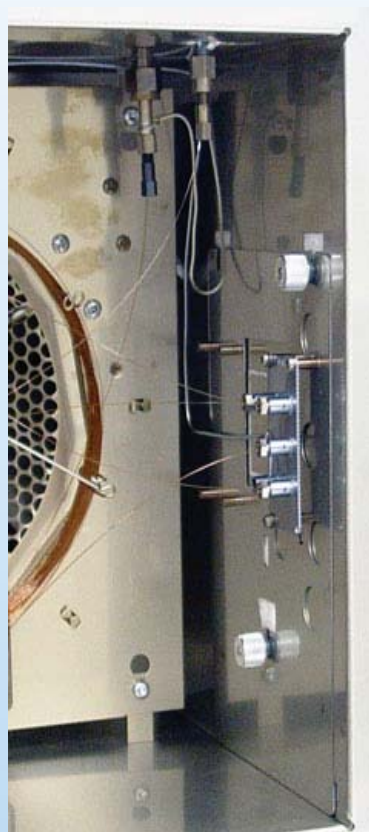
Как много целевых соединений может быть в этом образце и сколько нужно времени, чтобы подтвердить их наличие?



Технология капиллярных потоков

Трехканальный делитель

Деление потока на три потока

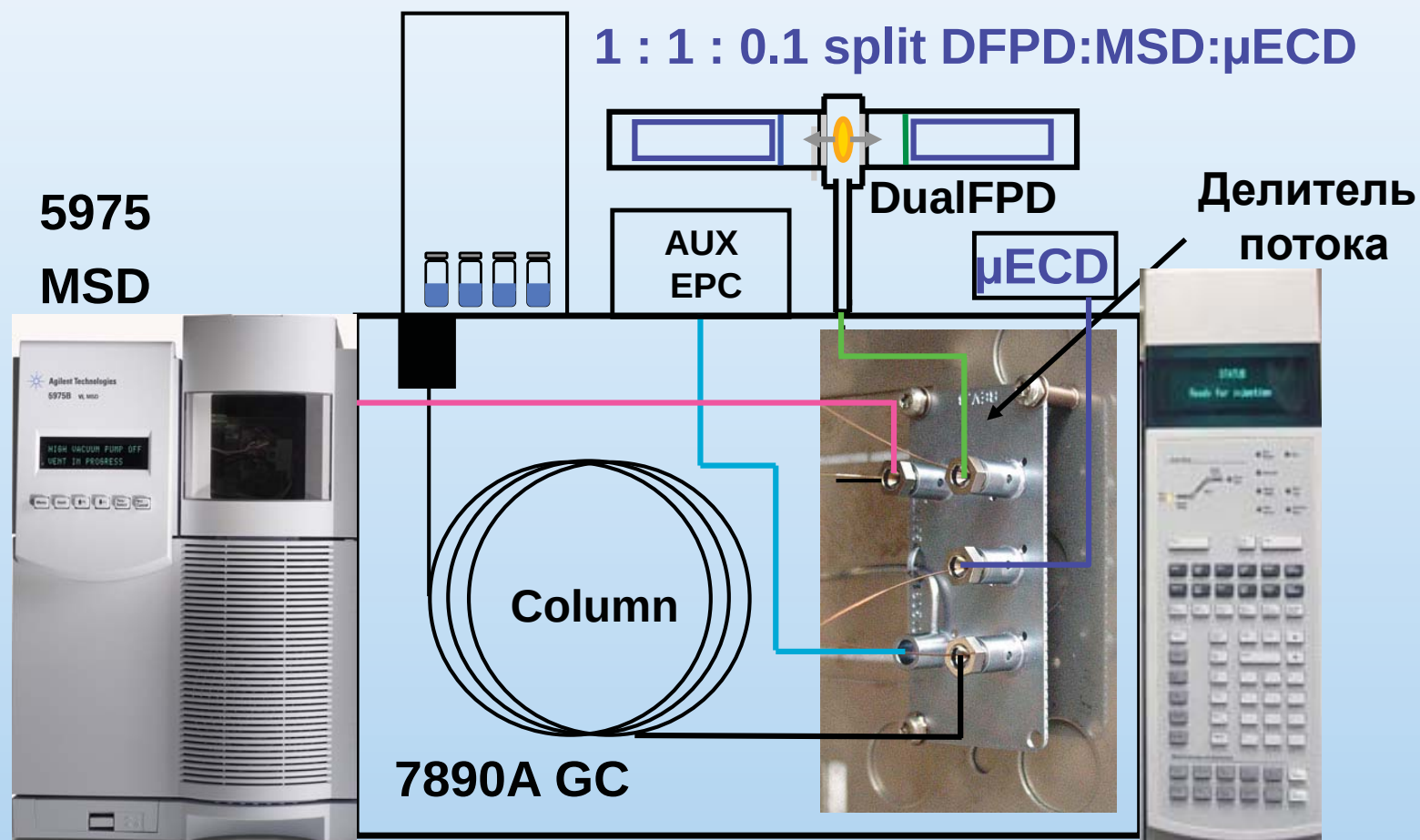


INTERLAB

Технология капиллярных потоков

Решение для высокопроизводительного анализа пестицидов

*Поток с колонки делится на несколько детекторов:
MSD (вакуум) и детекторы ГХ (атмосферное давление)*



INTERLAB

Конфигурирование колонок

Простота установки метода

Configuration Dialog

File

Edit Config: Filename {C:\CCSnaps\Ohana\LFS_Drivers\parts\78SeriesGC\BinBuilt\3way.xml}

Connection Configuration

Miscellaneous Columns Modules ALS

+ / -	Column	!	Calibration Results	Inlet	Outlet	Heated By
↑	Ag HP-5MSI: 30 m x 250 μ m x 0.25 μ m Primary Column: HP5MSI		Uncalibrated	Back Inlet	Aux Pressure 2	Oven
↓	Ag R-MSD: 1.444 m x 180 μ m x 0 μ m MSD Restrictor: RMSD		Uncalibrated	Aux Pressure 2	Vacuum	Oven
	Ag DFPDR: 0.532 m x 180 μ m x 0 μ m DFPD Restrictor: DPFPR		Uncalibrated	Aux Pressure 2	Back Detector	Oven
	Ag uECDR: 0.507 m x 100 μ m x 0 μ m uECD Restrictor: uECDR		Uncalibrated	Aux Pressure 2	Front Detector	Oven
	Column 4: 50 m x 400 μ m x 4 μ m :		Uncalibrated	None	None	Oven
	Column 5: 60 m x 450 μ m x 5 μ m :		Uncalibrated	None	None	Oven

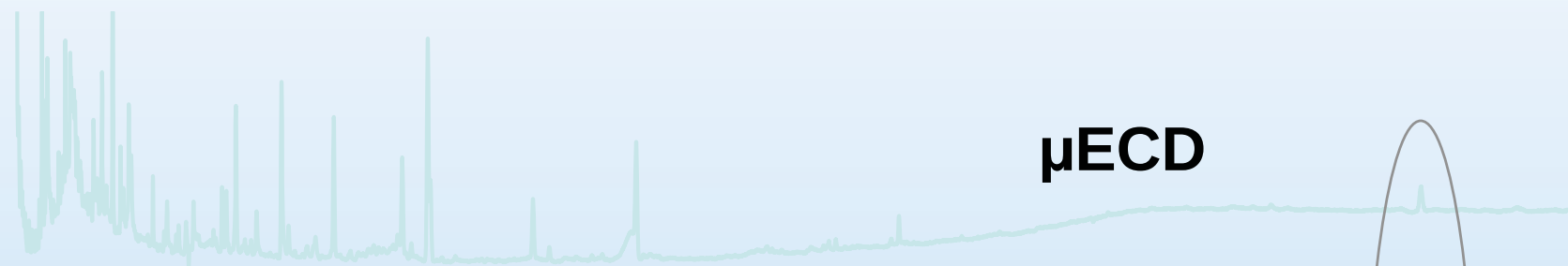
Help Download Done

Неизвестный пик в экстракте земляники TIC

Нет сигнала в
режиме
сканирования



μ ECD

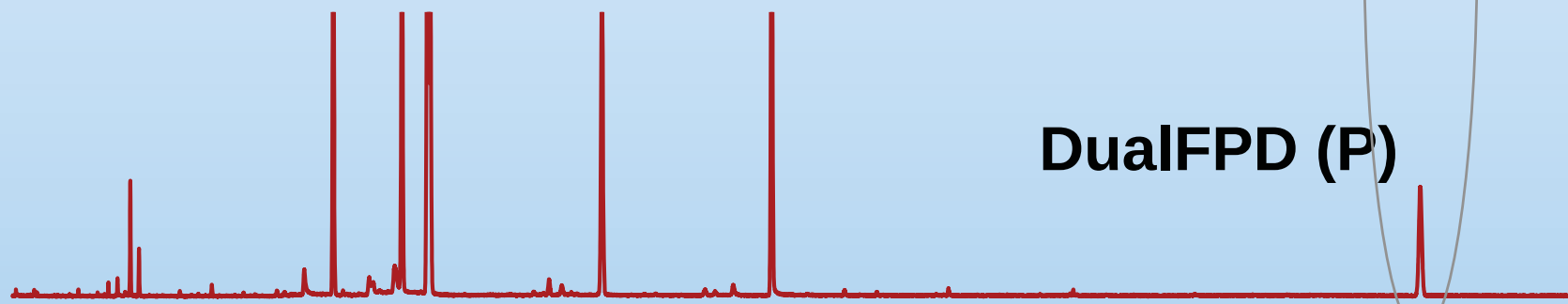


неизвестный

DualFPD (S)



DualFPD (P)



5.00

10.00

15.00

20.00

25.00

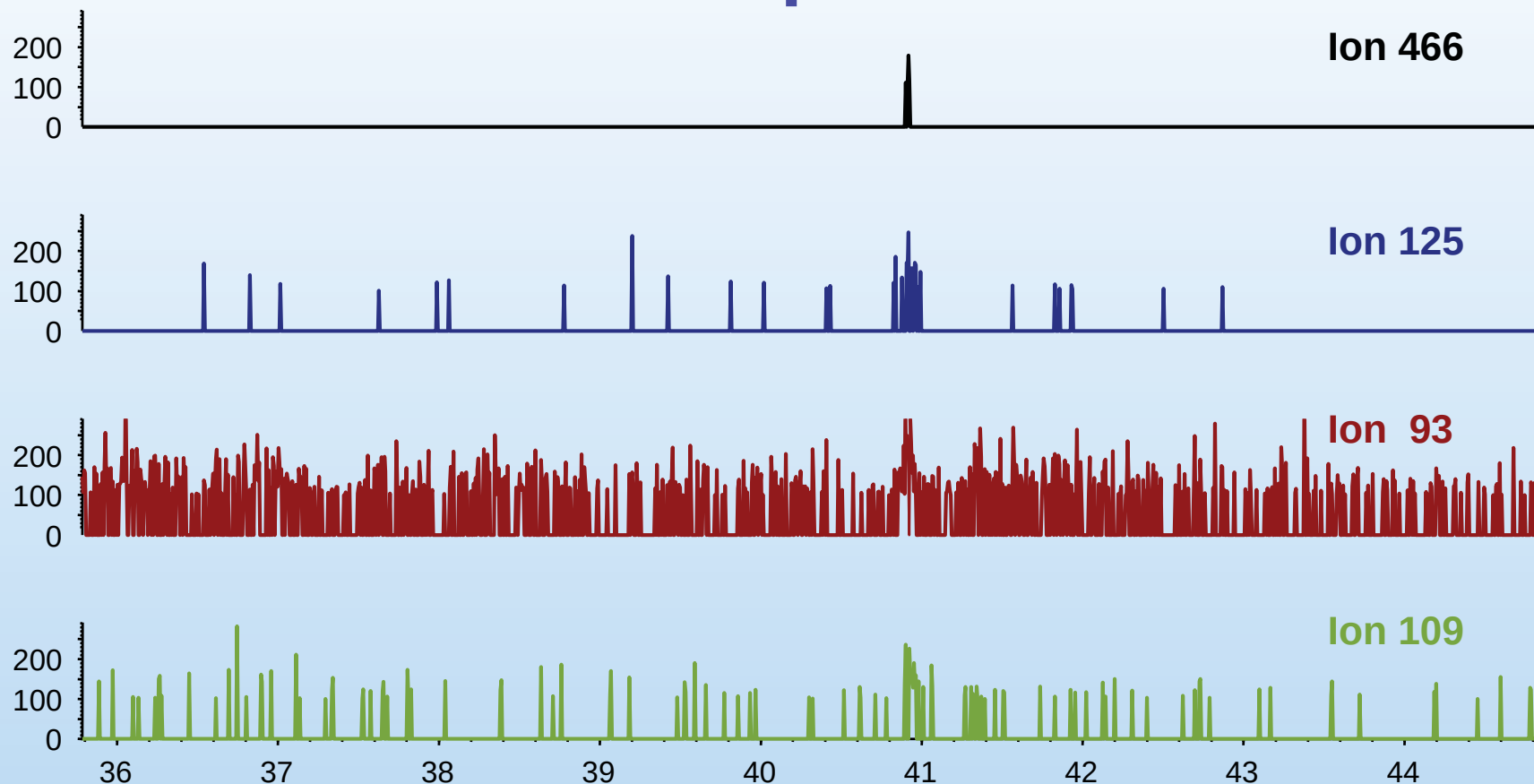
30.00

35.00

40.00

INTERLAB

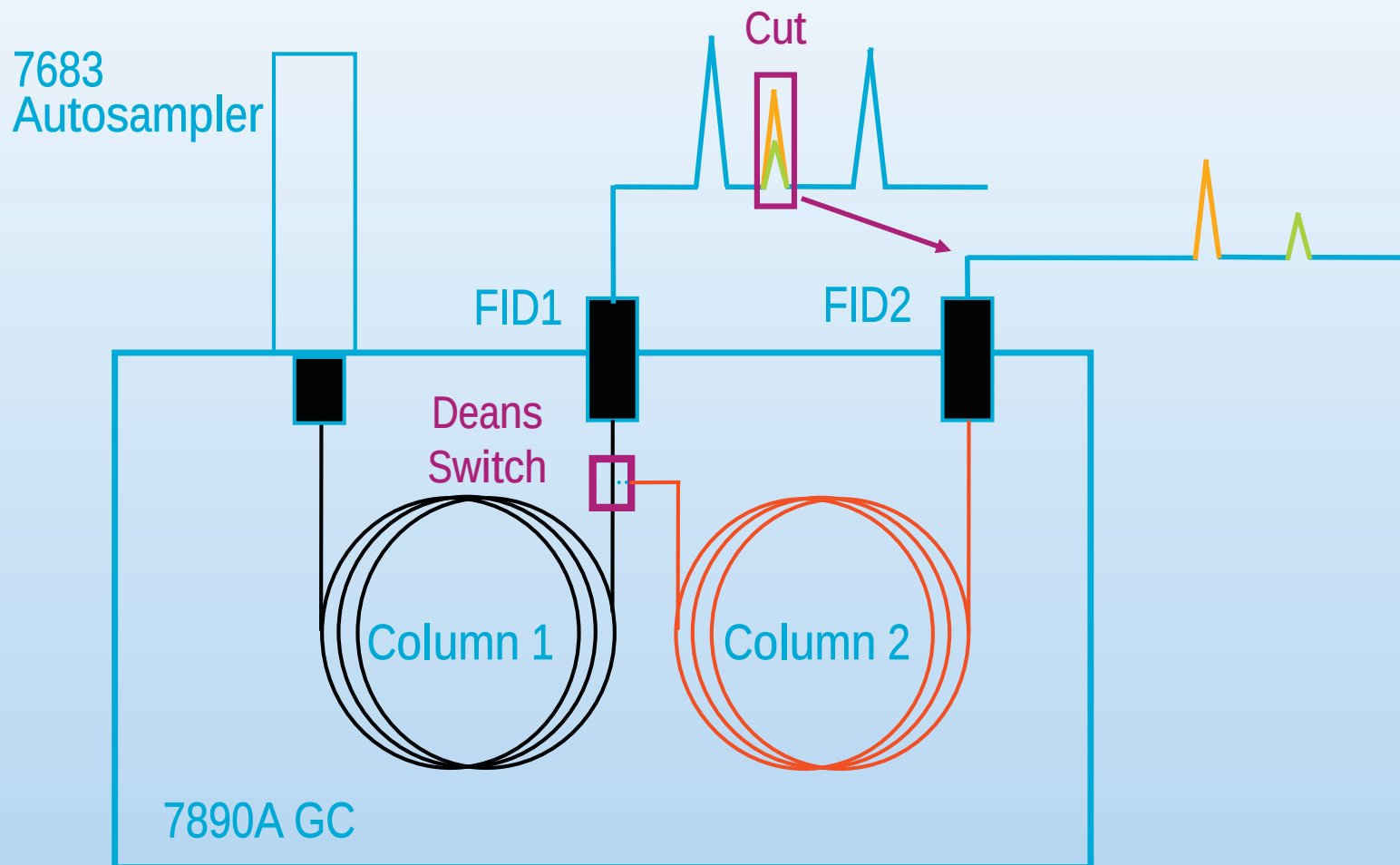
Целевой и подтверждающие пики для темефоса



Несмотря на низкую интенсивность пиков их полное совпадение по времени удерживания 40,9 мин позволяет идентифицировать неизвестный пик как темефос

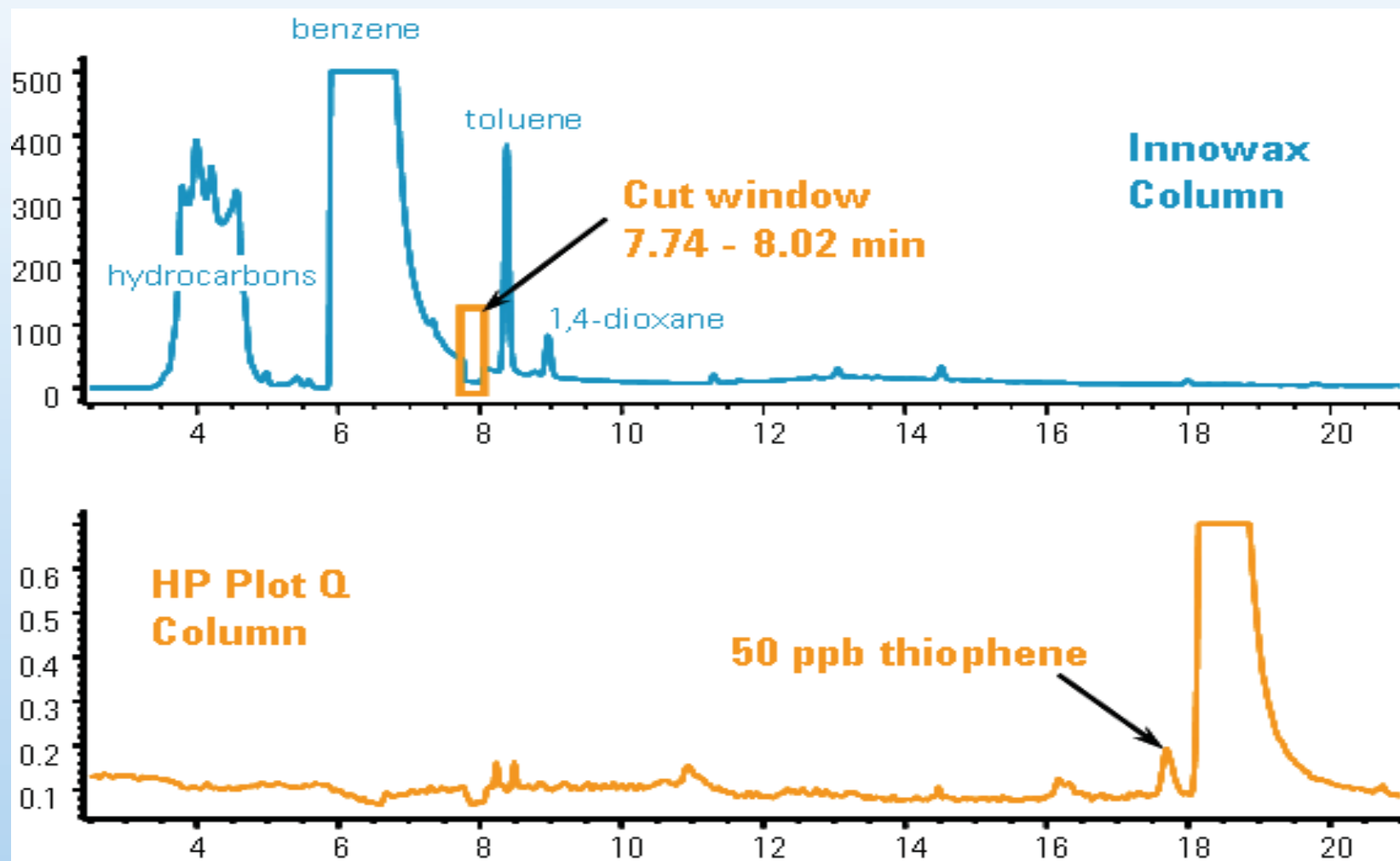
Технология капиллярных потоков

Принцип работы технологии «Deans Switch»



Пример применения технологии «Deans Switch»

Следовый анализ серы в бензоле без применения
S-специфического детектора



5975C Series GC/MSD

**Больше эффективности,
...больше возможностей,
...больше продуктивности**



Обычный внеосевой детектор

ЕІ источник → ионы
аналита, гелия,
возбужденный
гелий, фотоны

квадрупольный
анализатор масс

Высокое напряжение
от HED (high energy
dynode) вытягивает
ионы с энергетической
нейтралью

*Анализатор масс может
удалить ионы гелия, но не
способен удалять
нейтральные частицы, в
том числе возбужденные
атомы гелия*

Ионный пучок

После анализатора
возбужденные атомы
гелия могут
ионизировать молекулы
газовой фазы и
генерировать другие
ионы с поверхности

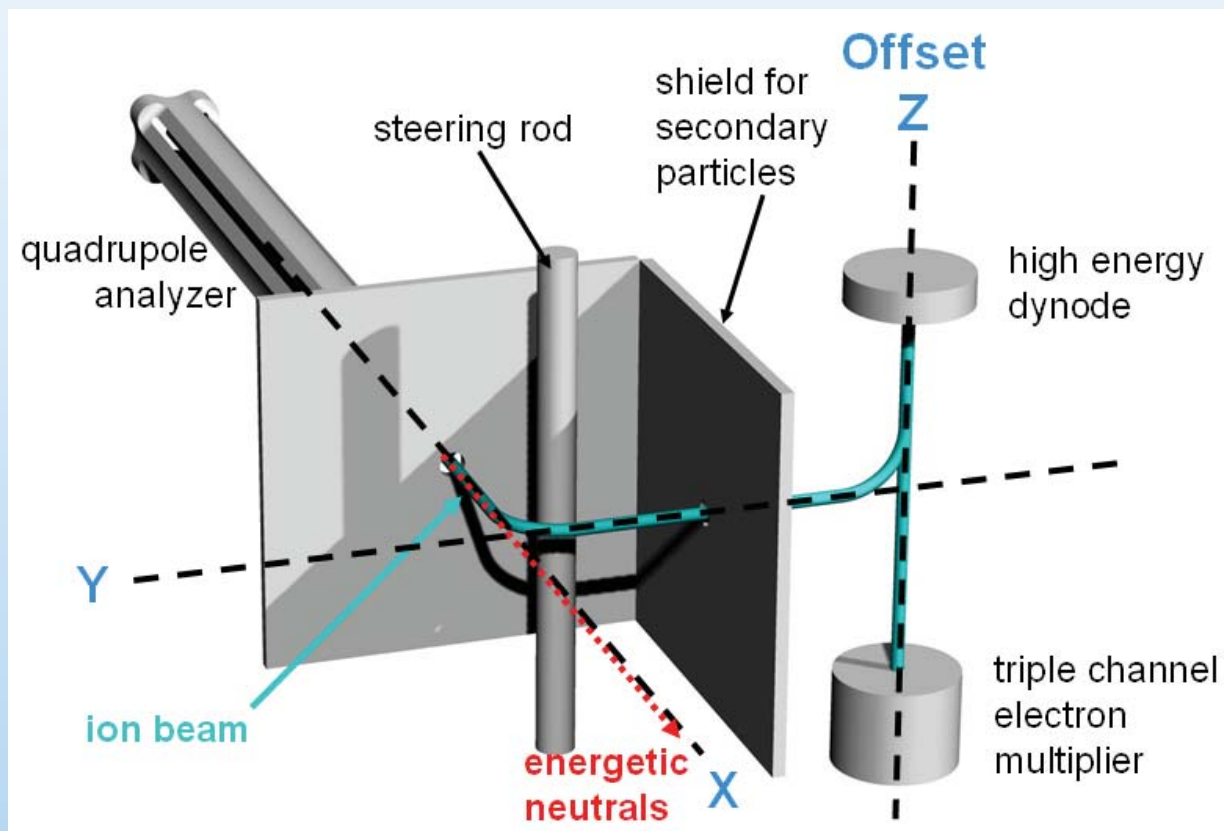
Электронный
умножитель

Энергетическая
нейтраль

INTERLAB

Повышенная чувствительность

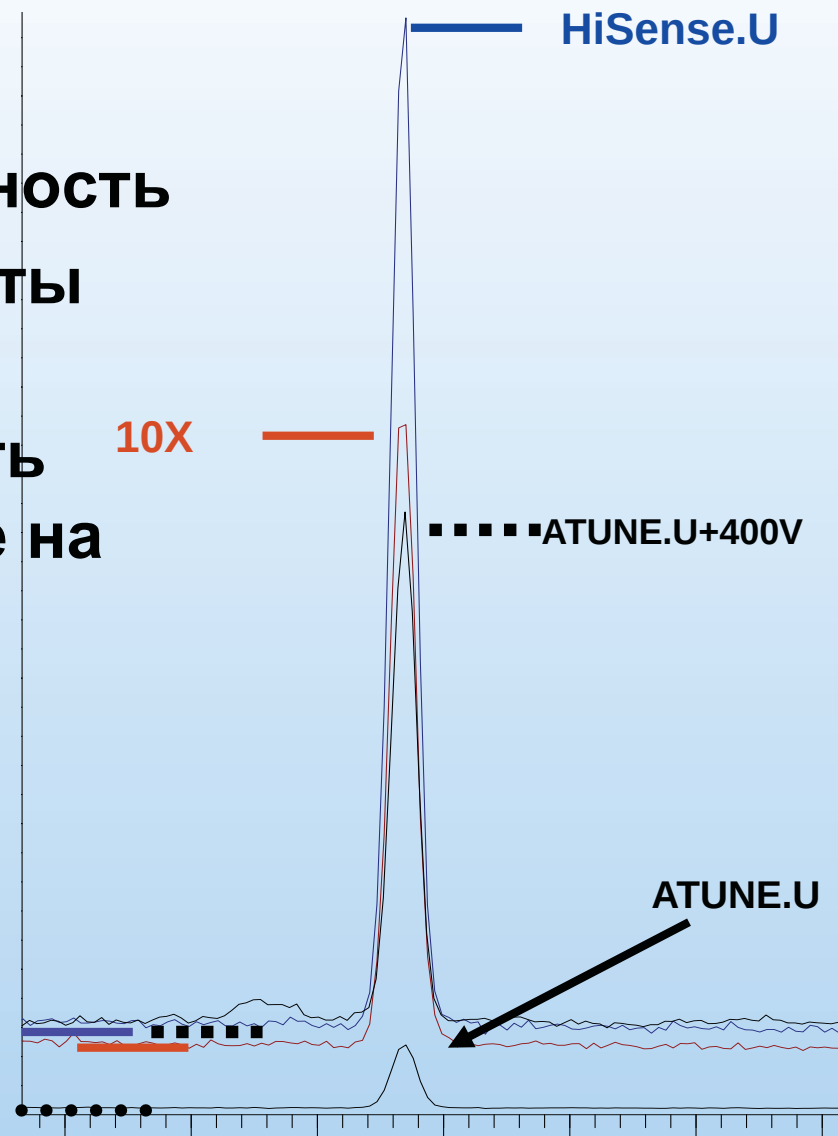
Новая 3D геометрия направления
ионного пучка в электронный умножитель



INTERLAB

Новый алгоритм автонастройки «High Gain»

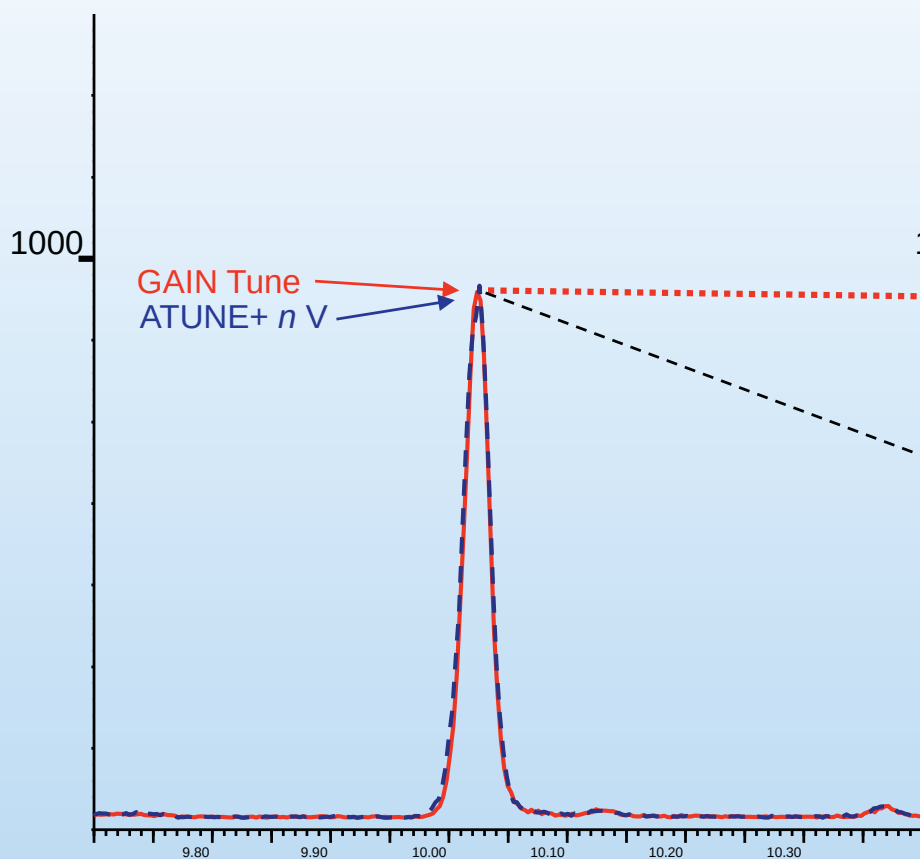
- Повышенная эффективность
- Увеличенный срок работы детектора
- Возможность сравнивать результаты, полученные на разных приборах



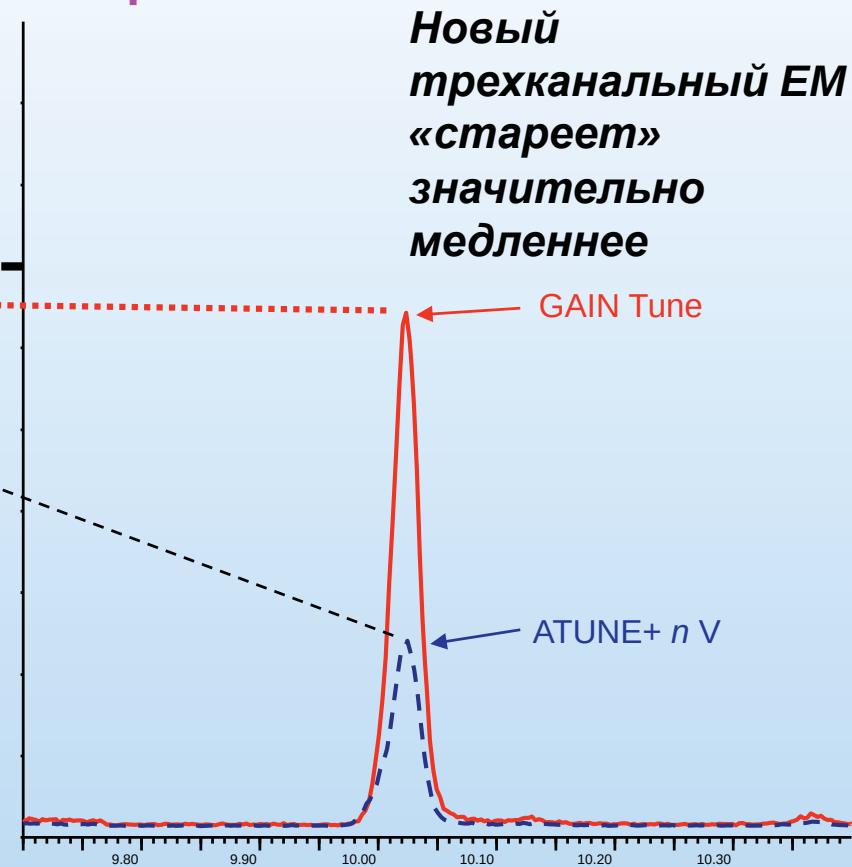
INTERLAB

Новый алгоритм автонастройки «High Gain»

“Новый”



“Старый”



Стабильная чувствительность в течение всей жизни умножителя!
Стабильная чувствительность от прибора к прибору!

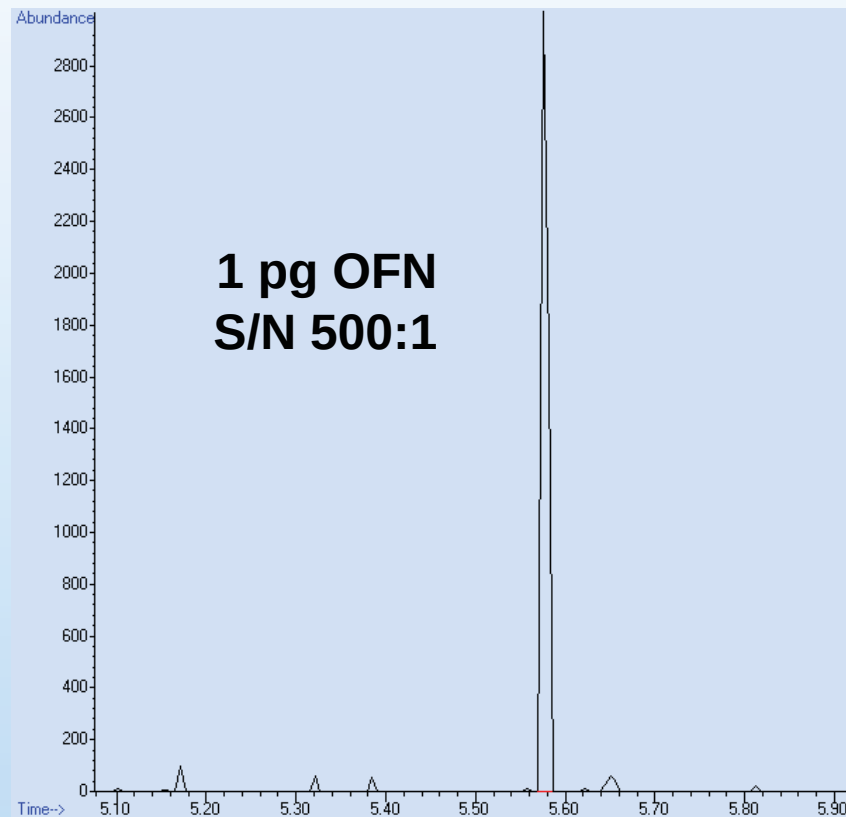
INTERLAB

Повышенная чувствительность

- Спецификация в режиме EI, SCAN в диапазоне **50–300 u**, газ-носитель **He**

Ввод 1- μ L раствора 1 pg/ μ L OFN
дает **500:1** S/N на массе 272

- Спецификация в режиме CI с использованием **NH₃**
- Спецификация в режиме EI, SCAN, газ-носитель **H₂**
 - 250:1 S/N для турбонасоса
 - 150:1 S/N для диффузионного насоса

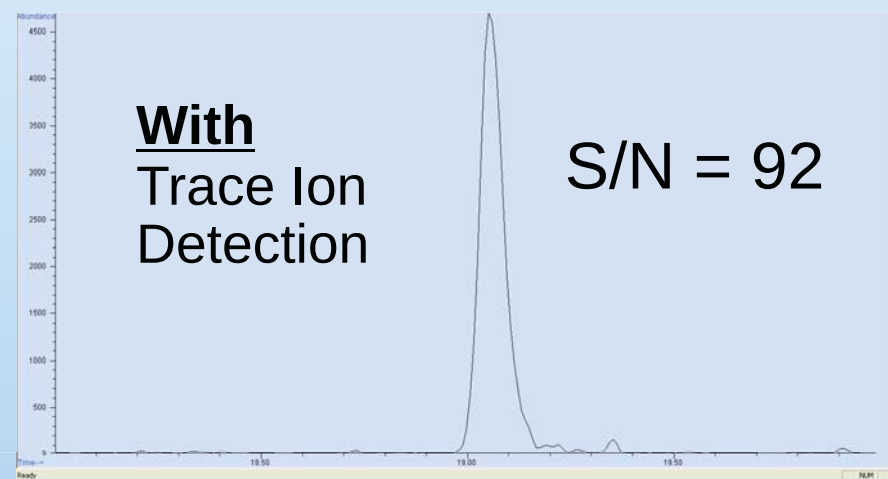
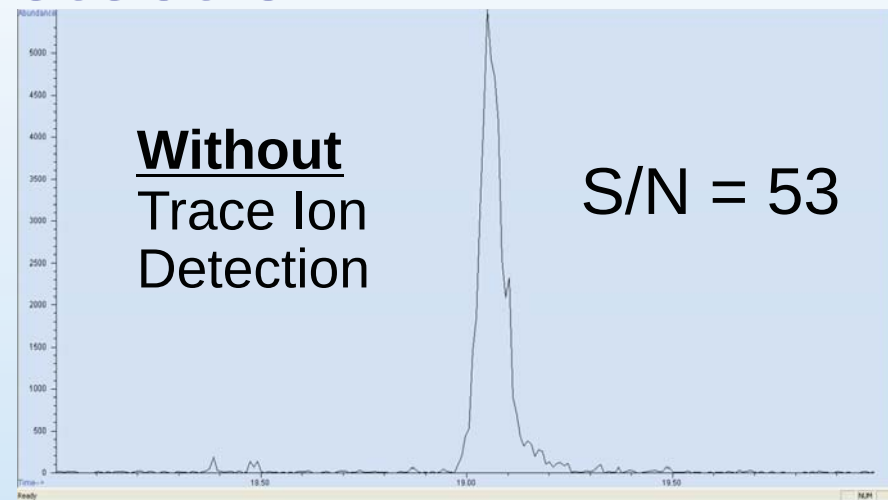


... наилучшие показатели
чувствительности

INTERLAB

Специальный алгоритм сборки **Trace Ion Detection**

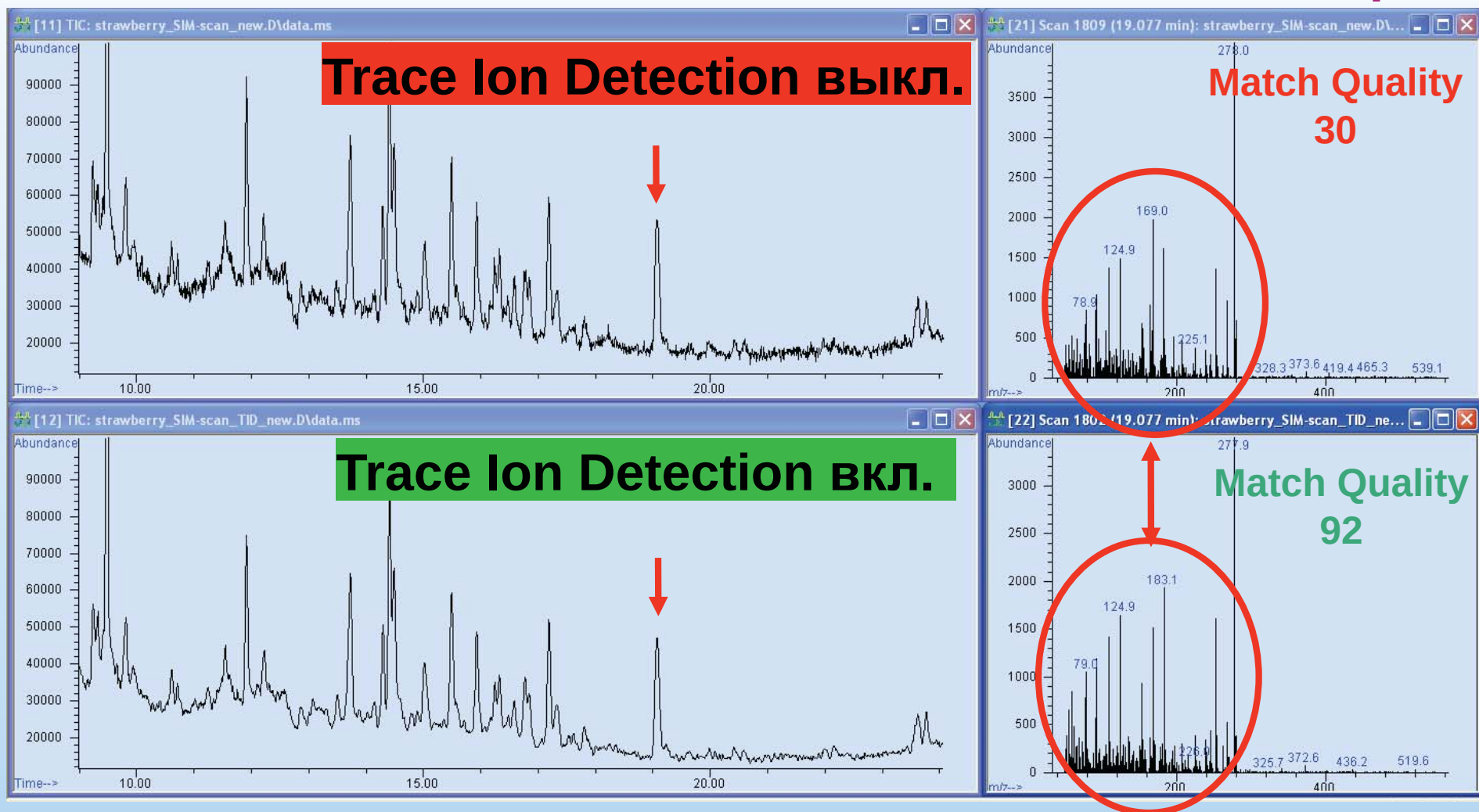
- Agilent разработан специальный алгоритм, который:
- Уменьшает уровень фона
- Улучшает форму пиков
- Улучшает сходимость с библиотечными спектрами



... лучше детектирование следовых количеств

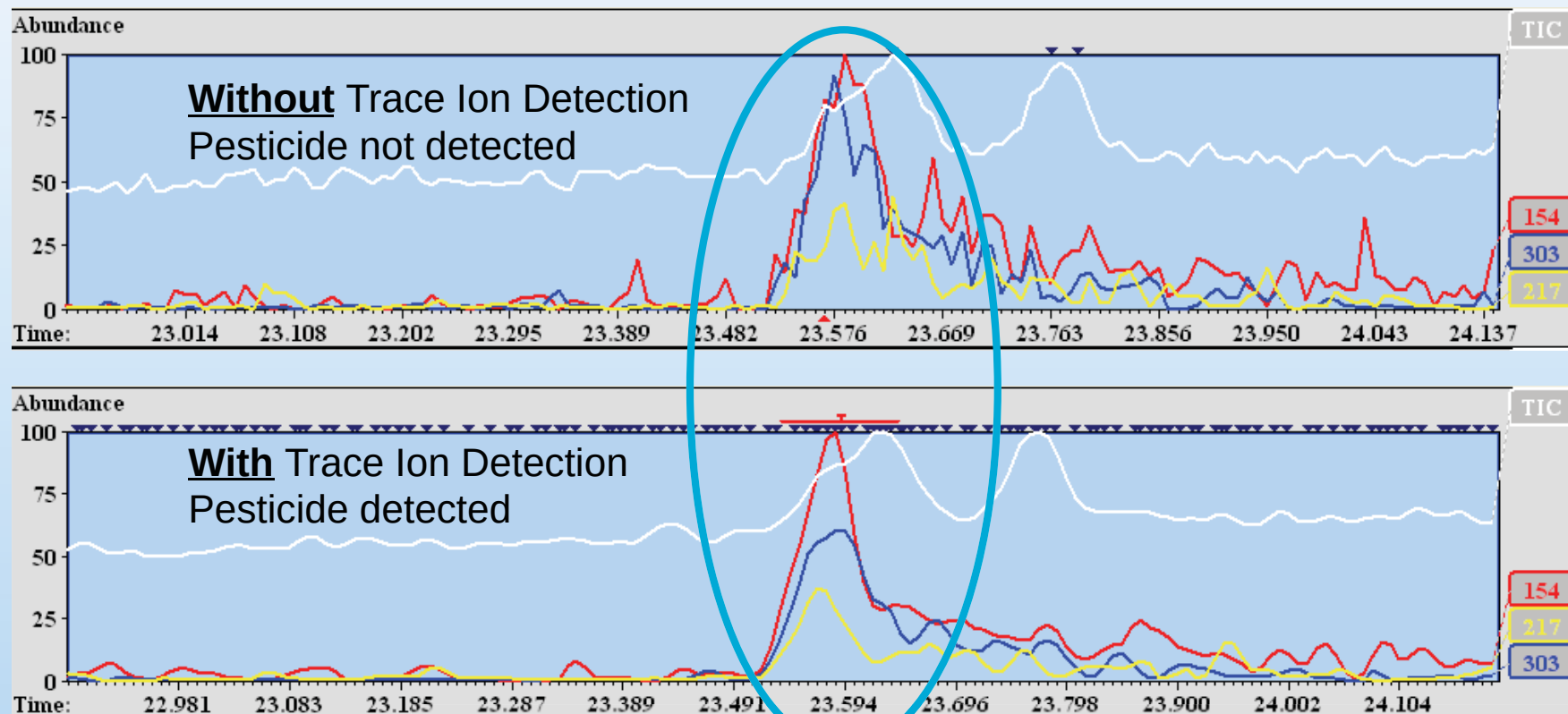
INTERLAB

Улучшение качества библиотечного поиска Fenthion в земляничном экстракте



Пестициды в земляничном экстракте

Использование **T**race **I**on **D**etection и **D**econvolution **R**eporting **S**oftware позволяет производить автоматическую идентификацию малоинтенсивных пиков

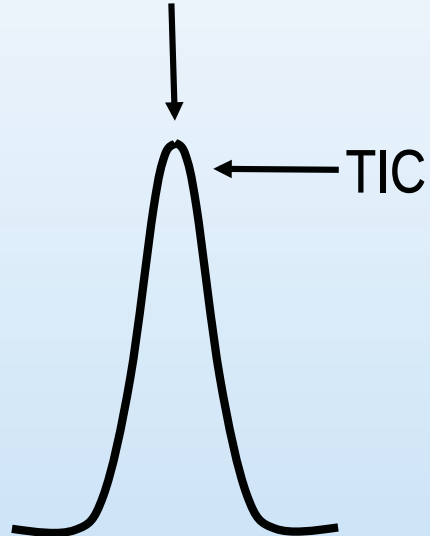


... чувствительность, которую вы можете использовать для реальных образцов

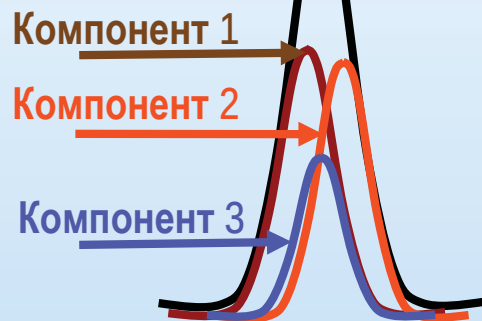
INTERLAB

Trace Ion Detection и Deconvolution

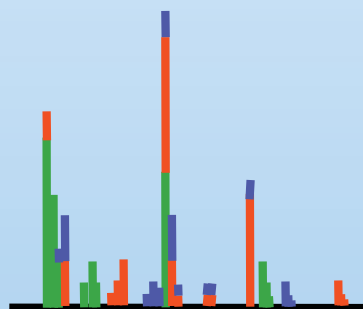
Детектирование пика
с использованием
Trace Ion Detection



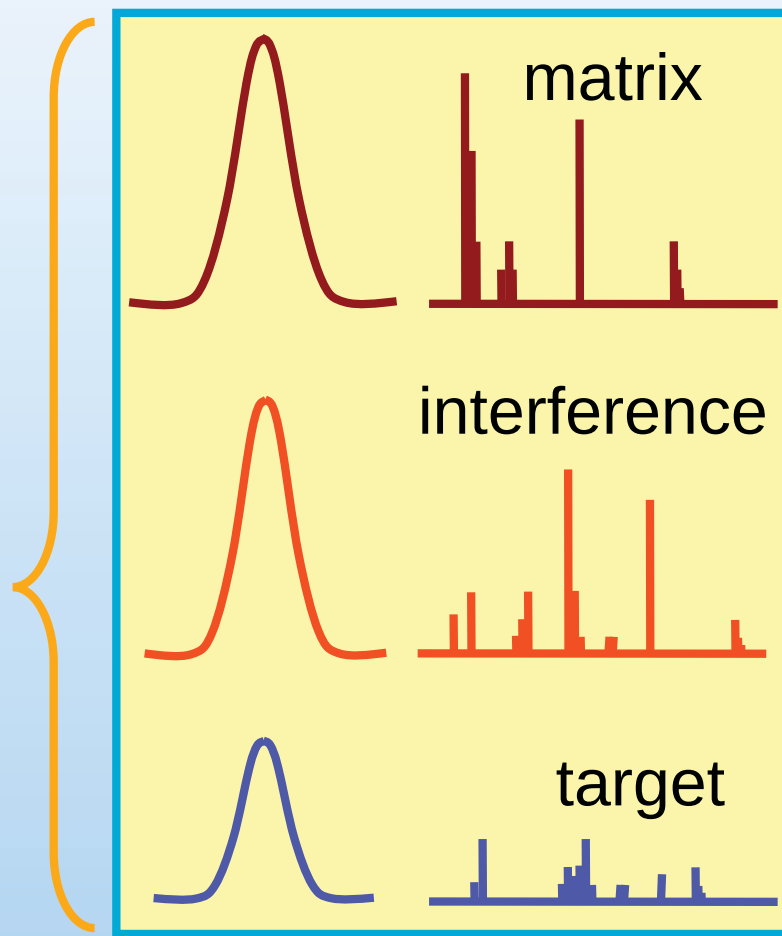
TIC и спектр



Deconvolution



Деконволюция пиков и спектров



INTERLAB

Deconvolution Reporting Software

MSD Deconvolution Report

Sample Name: strawberry

Data File: C:\msdchem\1\DATA\112106-sim-scan-TID\strawberry_SIM-scan_TID.D

Date/Time: 01:47 PM Wednesday, Jan 24 2007

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

R.T.	Cas #	Compound Name	Agilent	AMDIS		NIST	
			ChemStation Amount (ng)	Match	R.T. Diff sec.	Reverse Match	Hit Num.
18.3490	84742	Di-n-butylphthalate		91	-4.0		
18.3490	0000	Phthalic acid, butyl cyclobutyl ester				92	1
19.0589	55389	Fenthion		91	-3.7	85	2
23.5824	22224926	Phenamiphos		71	-0.3	63	2

... больше информации в одном отчете

INTERLAB

Новый ионный источник с температурой нагрева до 350° C



- Особенности:

- Источник может быть нагрет до 350°C
 - Комбинация с обогреваемым кварцевым квадруполем
 - Увеличивается отклик большинства соединений

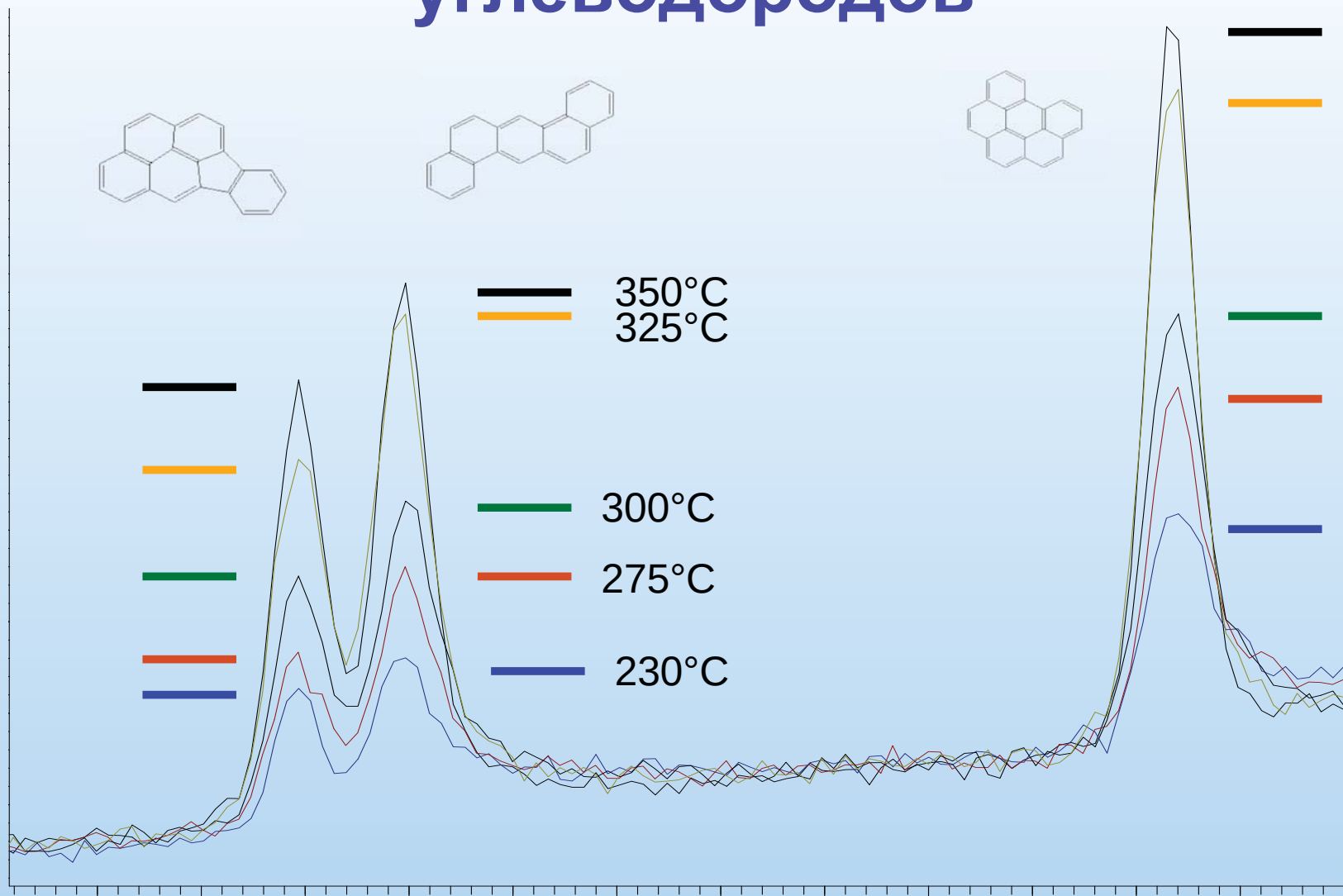
- Преимущества:

- Ускоренный анализ веществ с большими временами удерживания
- Большая устойчивость к «тяжелым» образцам
- Быстрое восстановление от анализа к анализу

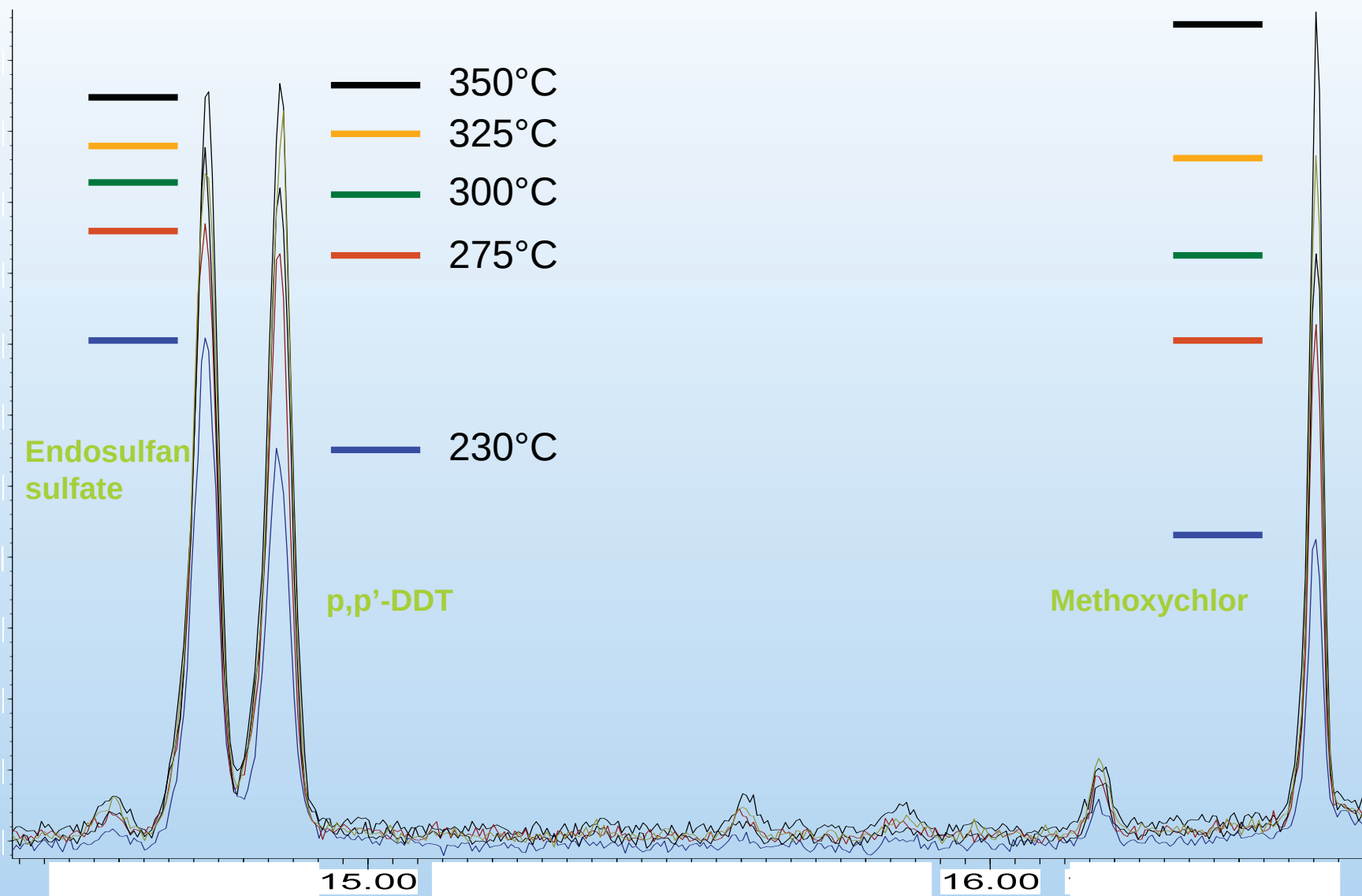
... больше эффективности в широком
диапазоне применений

INTERLAB

Анализ полиароматических углеводородов



Анализ хлорорганических пестицидов

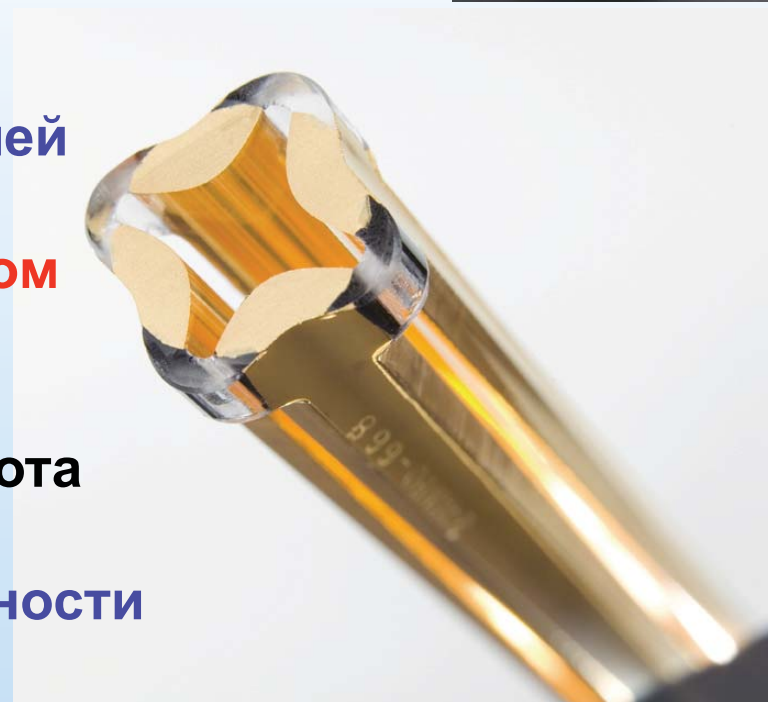


INTERLAB

Уникальный гиперболический «золотой» квадруполь



- Диапазон 1050 а.е.м для всех моделей
Модель с диффузионным насосом с таким же диапазоном
- Обогреваемый до 200°C
Устойчивая и стабильная работа
- Истинные гиперболические поверхности
Отличная форма пиков
Превосходное разрешение
Высокий коэффициент переноса (чувствительность)



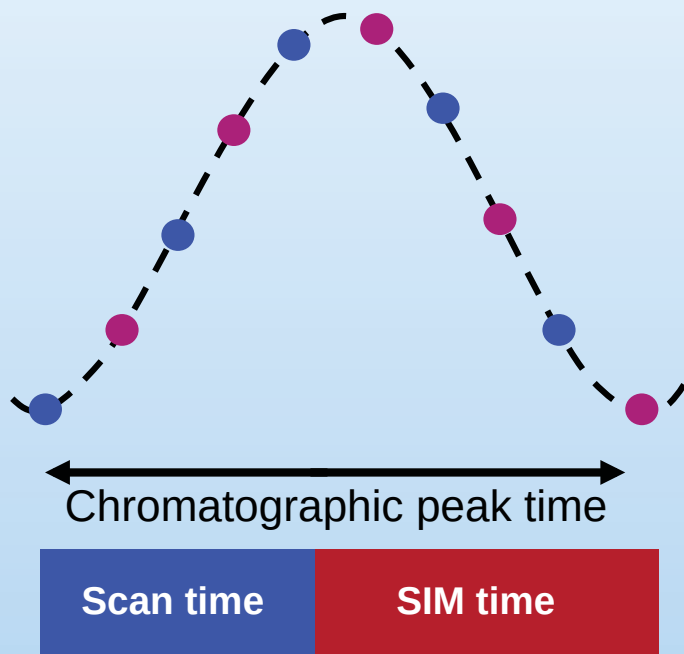
В мире нет ни одного подобного квадруполя!

INTERLAB

Одновременность SIM/Scan

Сборка в режимах SIM и Scan за один анализ

- SIM = максимальная чувствительность для целевых соединений
- Scan = наилучшая идентификация неизвестных



- Данные Scan
- Данные SIM

... больше информации за один анализ

INTERLAB

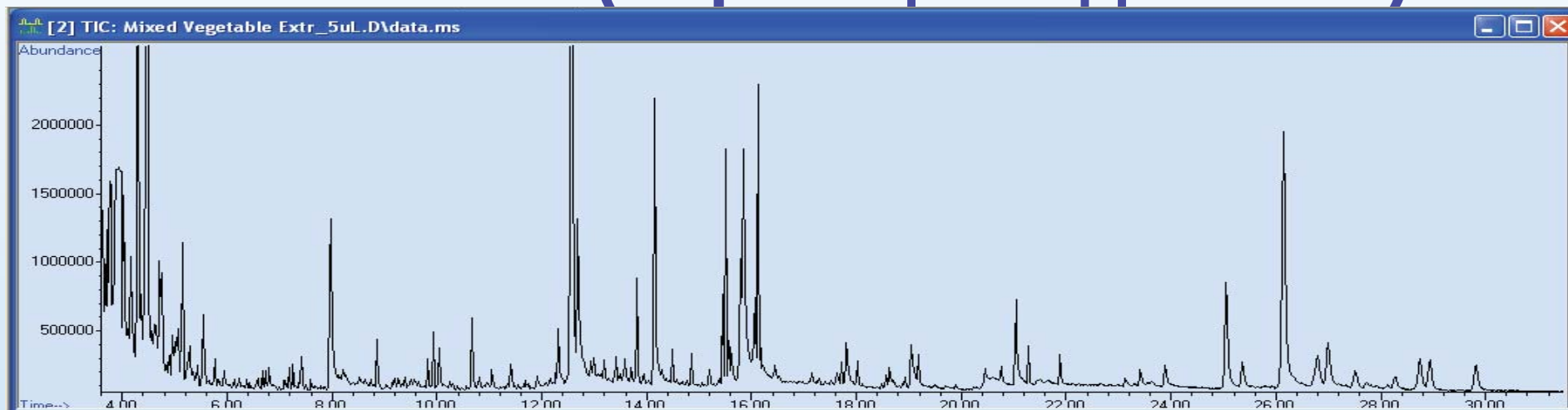
Готовое решение от Agilent для анализа пестицидов

- Используется программное обеспечение Agilent's DRS
- Включены все пестициды, которые могут быть определены методом ГХ
- Более 900 пестицидов и Фенантрен- d_{10} в качестве внутреннего стандарта
- Анализ полученных результатов с использованием DRS занимает 2-3 min
 - Быстрый анализ
 - Отсутствие ложно положительных/отрицательных результатов
 - Скрининг более 900 пестицидов за один GC/MS анализ

Готовое решение от Agilent для анализа пестицидов

- **Колонка:** 30 m X 0.25 mm X 0.25 μ m DB-5MS (P/N 122-5532)
- **Температурная программа:** 50 °C (1 min), 25 °C/min to 125 °C (0 min), 10 °C/min to 300 °C (10 min)
- **Газ-носитель:** Гелий, режим постоянного давления
- **Фиксация времен удерживания:** Метил-хлорпирофос, зафиксировано 13.443 мин
- **MSD:** Scan 35-550 (or SIM/Scan), Trace Ion Detection *on*
- **Agilent DRS Database/Library:** библиотека фиксированных времен удерживания пестицидов

Экстракт из образца овощной смеси: DRS отчет (образец без добавки)



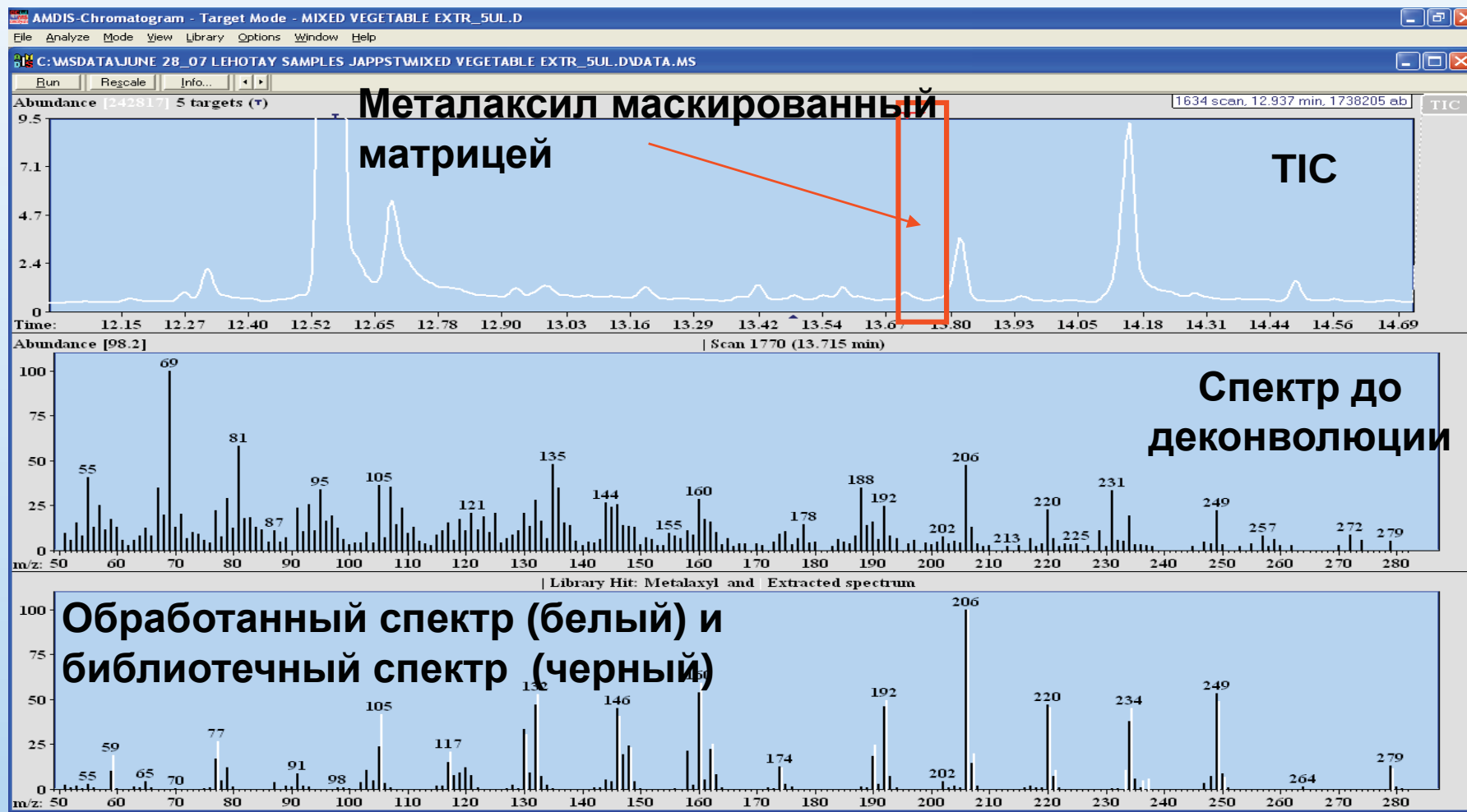
R.T.	Cas #	Compound Name	Agilent	AMDIS	NIST		
			ChemStation Amount (ng)	Match	R.T. Diff sec.	Reverse Match	Hit Num.
6.5630	10265926	Methamidophos		68	8.0	77	1
8.5817	30560191	Acephate		66	-2.3	69	1
10.7634	122394	Diphenylamine		69	-1.4	67	1
12.5722	1517222	Phenanthrene-d10		98	-0.7	84	2
13.7143	57837191	Metalaxyl		85	-0.8	79	2
12.571		Phenanthrene-d10	10				

Отчет за
90 секунд

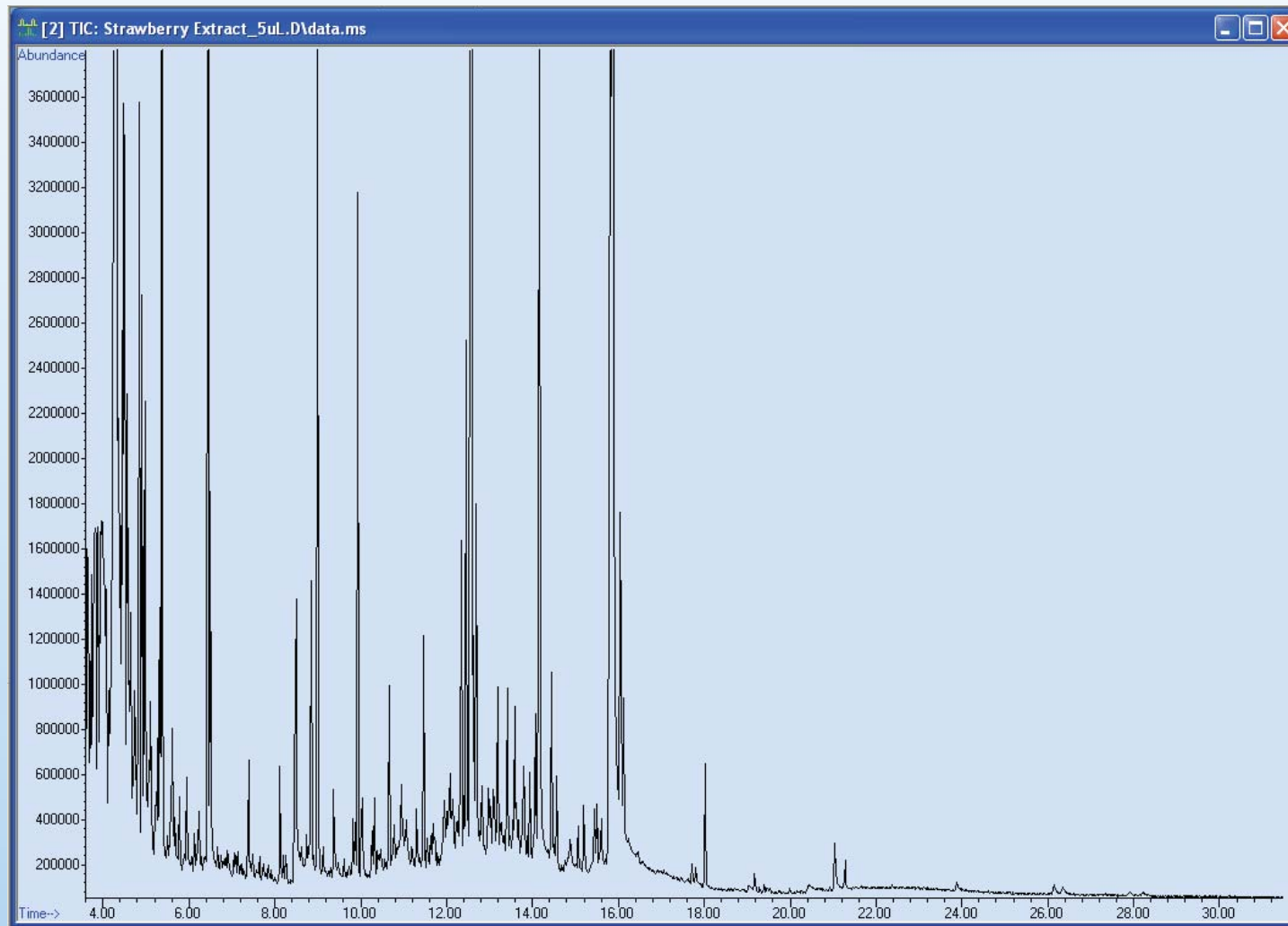


INTERLAB

Металаксил идентифицированный при помощи DRS в экстракте из овощной смеси (обзор в AMDIS)



Хроматограмма земляничного экстракта



INTERLAB

Отчет по обнаружению добавки в земляничный экстракт с использованием программного обеспечения DRS

Document - Microsoft Internet Explorer provided by Agilent Technologies, Inc.							
File Edit View Favorites Tools Help							
Back Forward Stop Home Search Favorites Refresh Print Mail W Yellow Blue Green							
Address C:\MSData\May 02_07 Lehotay Extracts Jap Meth\Strawberry Extract-1.D\Strawberry Extract-1.htm							
MSD Deconvolution Report							
Sample Name: Strawberry Extract							
Data File: C:\MSData\May 02_07 Lehotay Extracts Jap Meth\Strawberry Extract-1.D							
Date/Time: 05:06 PM Tuesday, Jun 5 2007							
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.
11.4914	298022	Phorate		93	-0.4	89	1
12.3620	13071799	Terbufos		95	-0.6	89	1
12.4632	333415	Diazinon		98	-0.7	91	1
12.5796	1517222	Phenanthrene-d10		99	-0.2	84	2
12.7125	298044	Disulfoton		64	-0.3	69	1
14.0919	2032657	Methiocarb		90	1.0	81	1
14.4542	55389	Fenthion		97	-0.4	89	1
16.0165	22224926	Fenamiphos		92	0.7	82	1
12.582		Phenanthrene-d10	10				

Как пользоваться решением по анализу пестицидов методом GC/MS

- Использовать Фиксацию Времен Удерживания для получения стандартных времен из базы данных Agilent
- Запустить программное обеспечение для поиска целевых веществ из базы данных Agilent
- Произвести калибровку по найденным пестицидам
- Выполнить количественный анализ для найденных пестицидов
- Введение 15 мкл образца в PTV-инжектор позволяет обнаруживать большинство пестицидов на уровне 10 ppb
- Введение 2 мкл в инжектор с делением/без деления потока позволяет проводить скрининг большинства образцов

Готовое решение от Agilent для анализа пестицидов

Аппаратурное оформление:

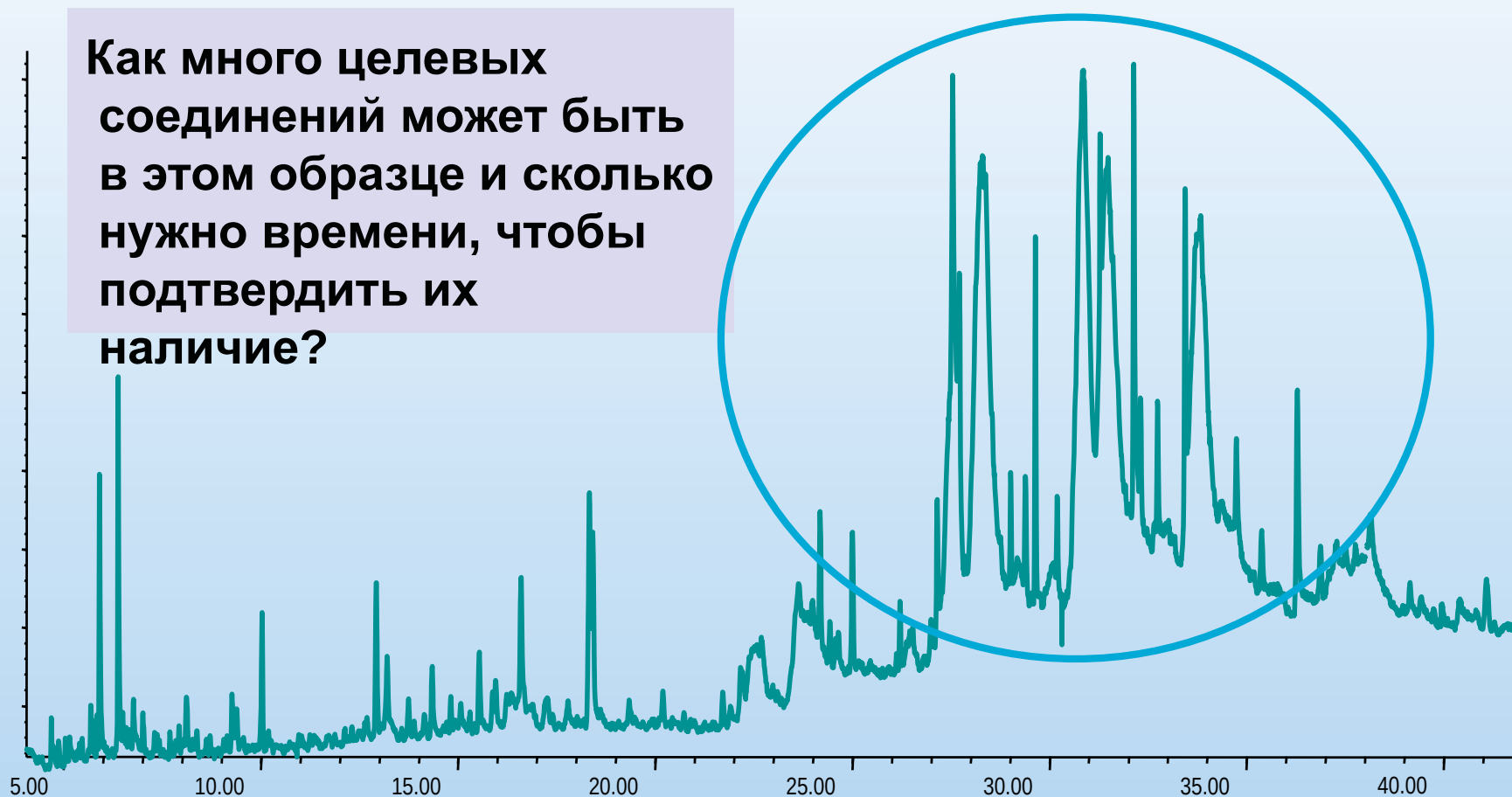
- Конфигурация с микропоточным делителем потока позволяет проводить скрининг пестицидов с одновременным получением информации от селективных детекторов (SIM/Scan, μ ECD, DFPD(S and P))
- Обратная продувка сокращает время аналитического цикла и продлевает время эксплуатации колонки

Программное обеспечение:

- Комбинация программного обеспечения фиксации времен удерживания и библиотеки абсолютных времен удерживания пестицидов позволяют идентифицировать следовые количества пестицидов без применения сканирования во всем диапазоне масс.

Обычный результат GC/MS-анализа сложной матрицы

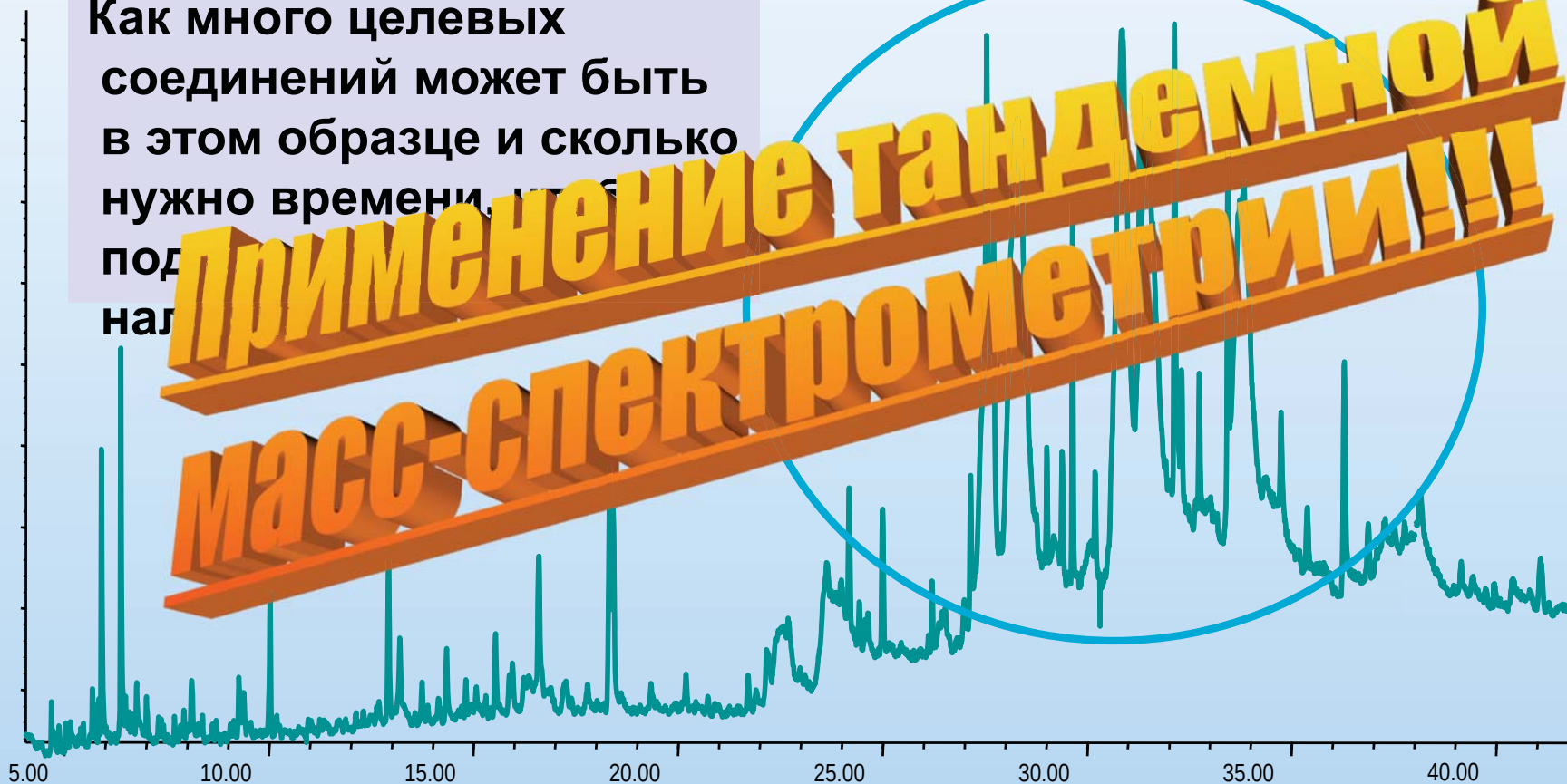
Как много целевых соединений может быть в этом образце и сколько нужно времени, чтобы подтвердить их наличие?



Обычный результат GC/MS-анализа сложной матрицы

Как много целевых соединений может быть в этом образце и сколько нужно времени, чтобы под-
нал

**Применение тандемной
масс-спектрометрии!!!**



INTERLAB

Тройной квадрупольный масс-спектрометр для ГХ Agilent 7000A

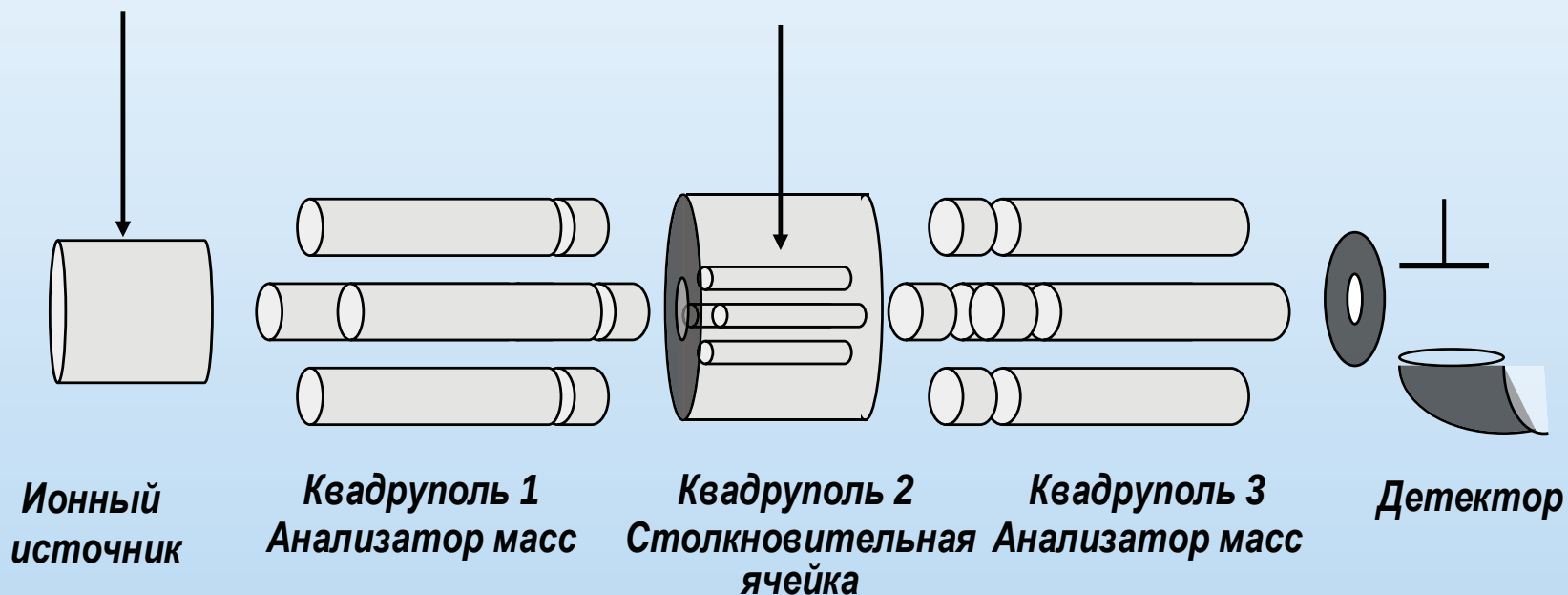


INTERLAB

Классический GC/MS тройной квадруполь (QQQ)

Газ-носитель (He, H₂)

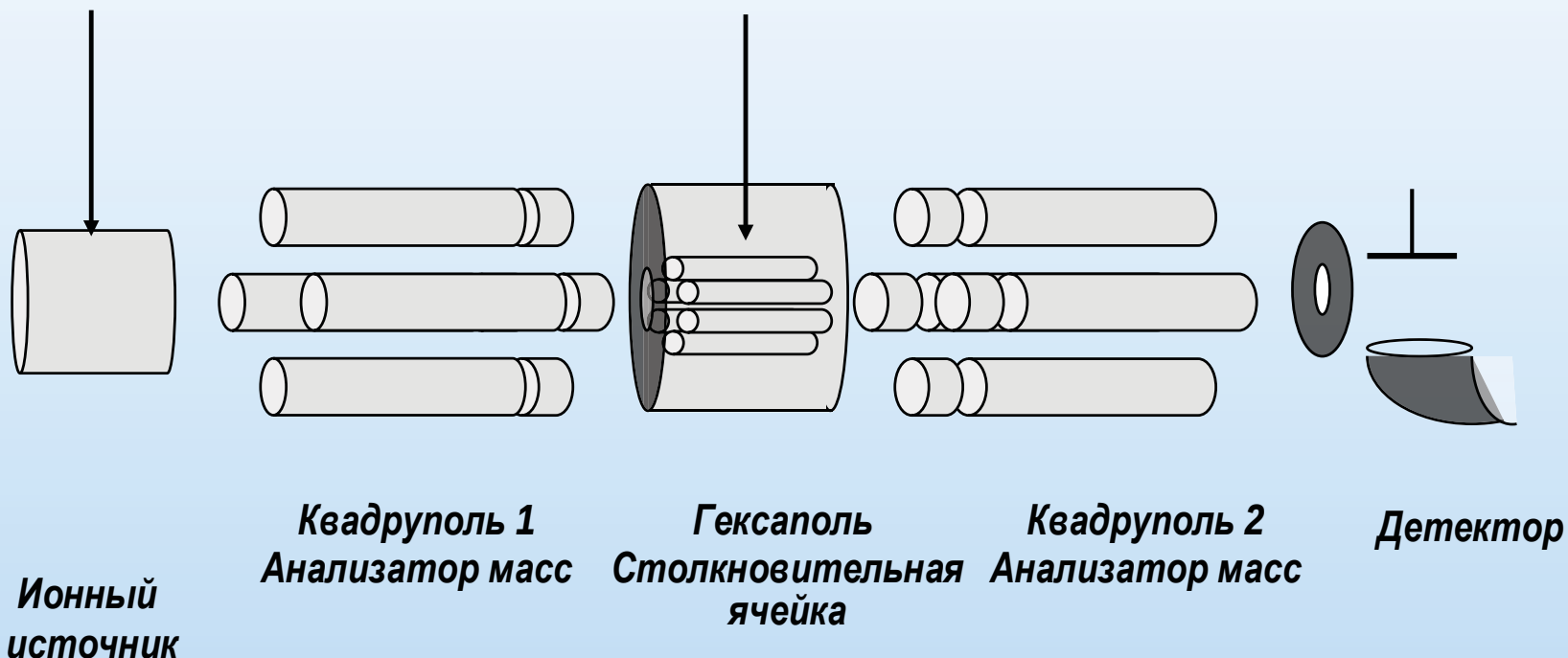
Газ-реактант (Ar, N₂, He)



Agilent 7000 GC/MS/MS

Газ-носитель (He, H₂)

Газ-реактант (N₂)



Столкновительная ячейка **не является** анализатором масс

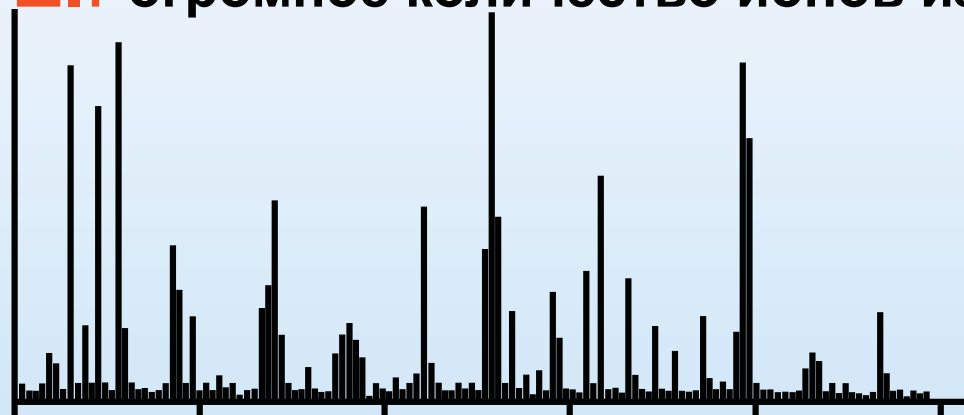
Задача ячейки перенести с максимальной эффективностью ВСЕ ионы (прекурсоры и продукты) во второй квадруполь

INTERLAB

Что такое MRM MS/MS?

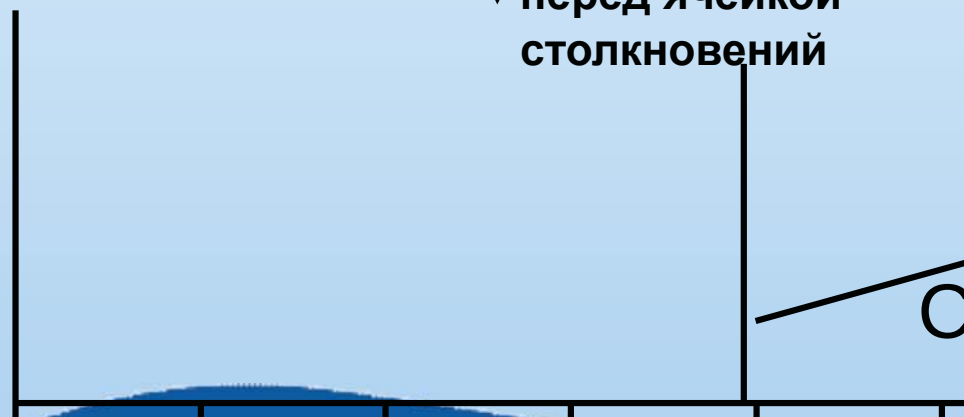
Мониторинг множественных реакций

EI: огромное количество ионов из источника

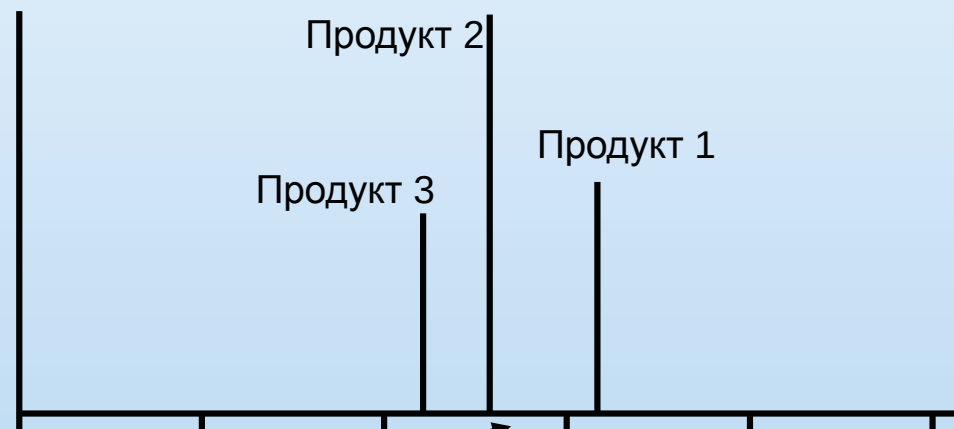


Q1 SIM

Выделение
прекурсора
перед ячейкой
столкновений



EI-MS/MS



CID + Q2 SIM

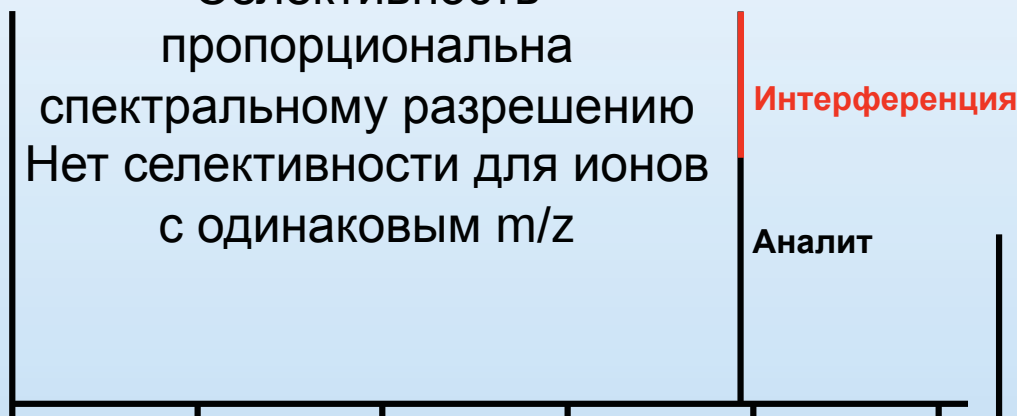
INTERLAB

Почему MS/MS?

Повышенная селективность по сравнению с SIM

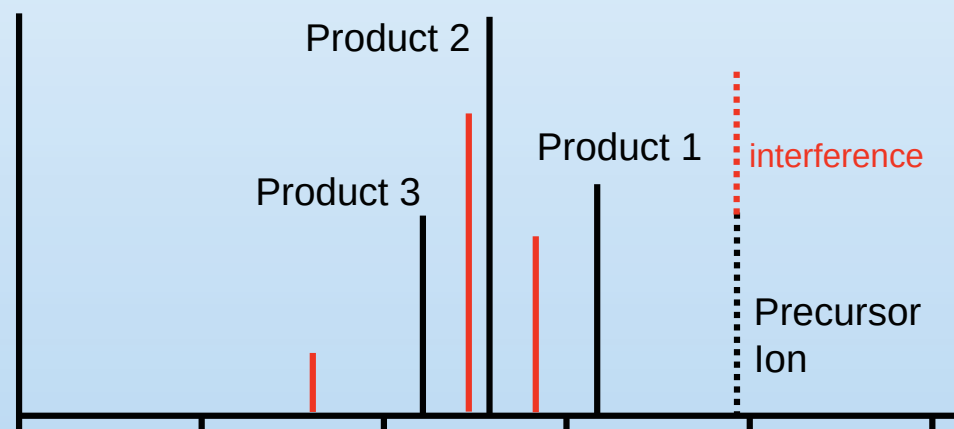
EI-SIM

Селективность
пропорциональна
спектральному разрешению
Нет селективности для ионов
с одинаковым m/z



EI-MS/MS

Прекурсор тот же, что и в SIM
Вероятность того, что диссоциация
прекурсора будут одинаковой с
интерференцией ничтожно мала

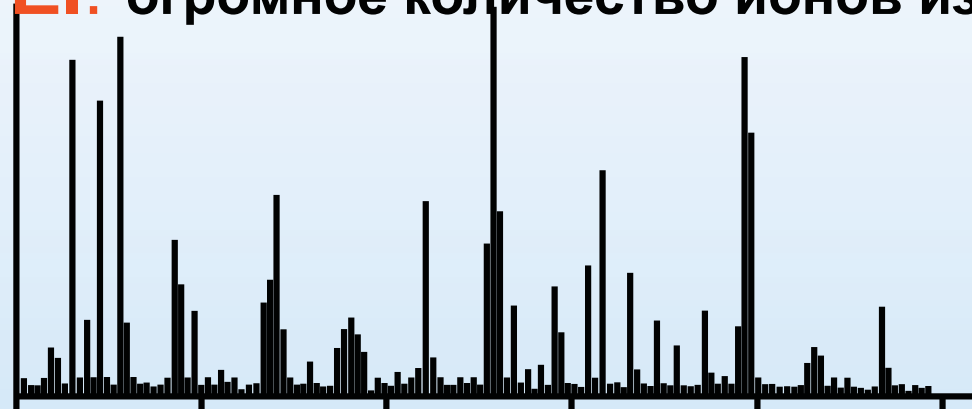


Прекурсор не может быть выбран для
количественного анализа, так как интерференция
имеет одинаковое с ним m/z в режиме SIM

Почему MS/MS?

Прекрасные пределы обнаружения за счет удаления фона

EI: огромное количество ионов из источника

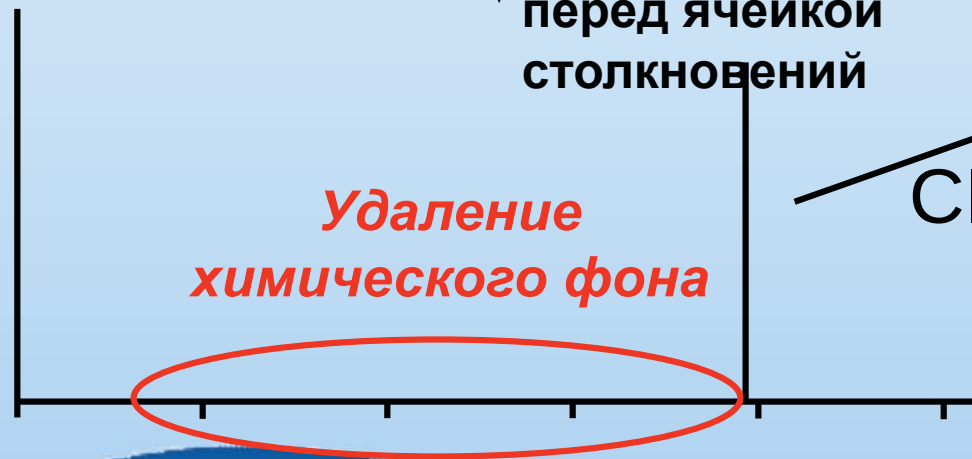


Интенсивность вторичных ионов зачастую снижается, но снижение интенсивности фона более значительное особенно в сложных образцах, что приводит к улучшению соотношения сигнал/шум и снижению пределов обнаружения

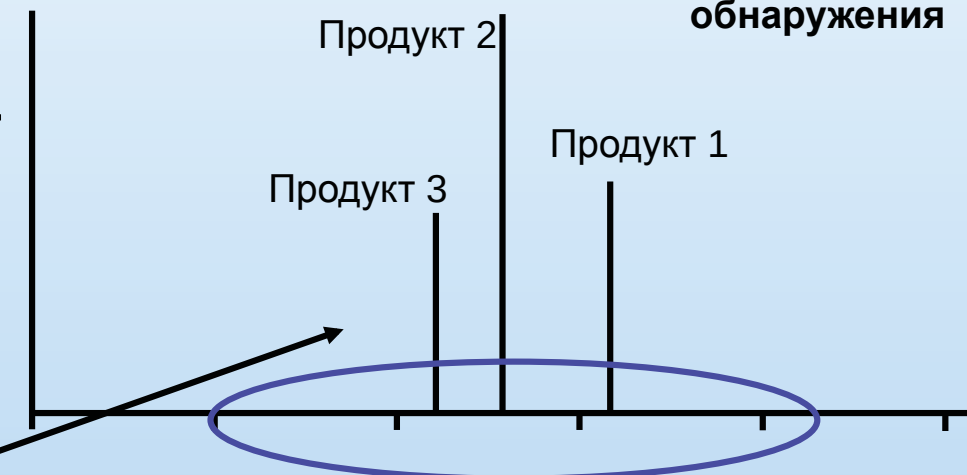
Q1 SIM

Выделение
прекурсора
перед ячейкой
столкновений

Удаление
химического фона



CID +
Q2 SIM



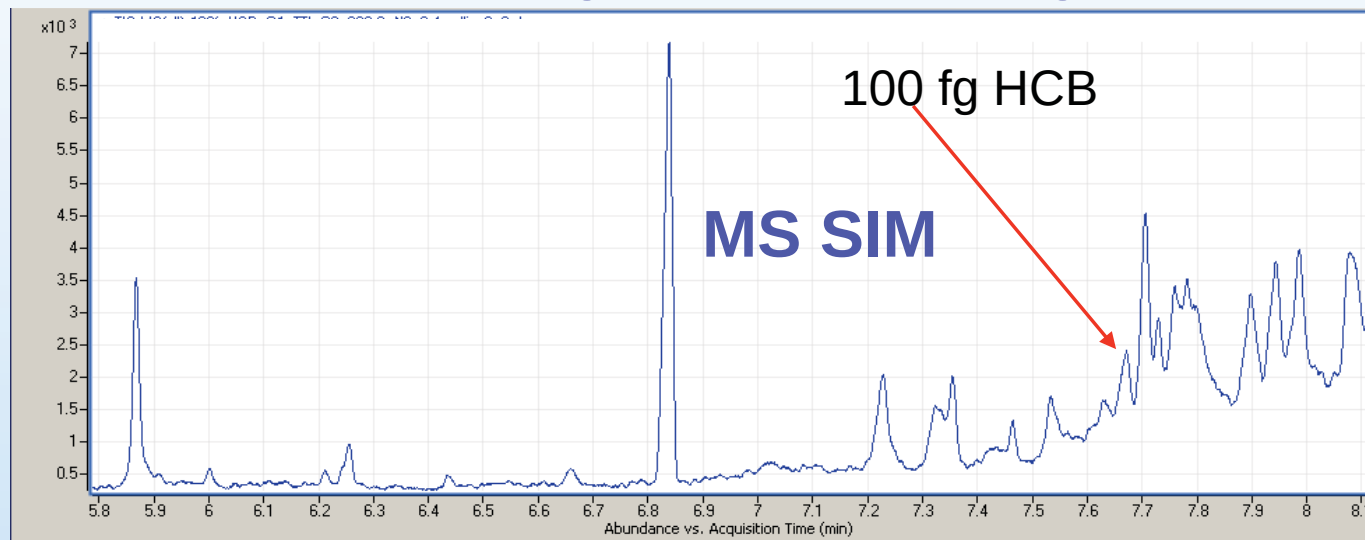
Целевые ионы
измеряются при
полном отсутствии
химического фона

Почему технология MS/MS?

- Незаменима для селективного количественного анализа целевых соединений в образцах со сложной матрицей
- Позволяет получать значительно более высокие соотношения сигнал/шум на образцах со сложной матрицей, практически недостижимые на обычных квадрупольных приборах в режимах SCAN или SIM
- Новые нормативные акты требуют использования аналитического метода GC/MS/MS

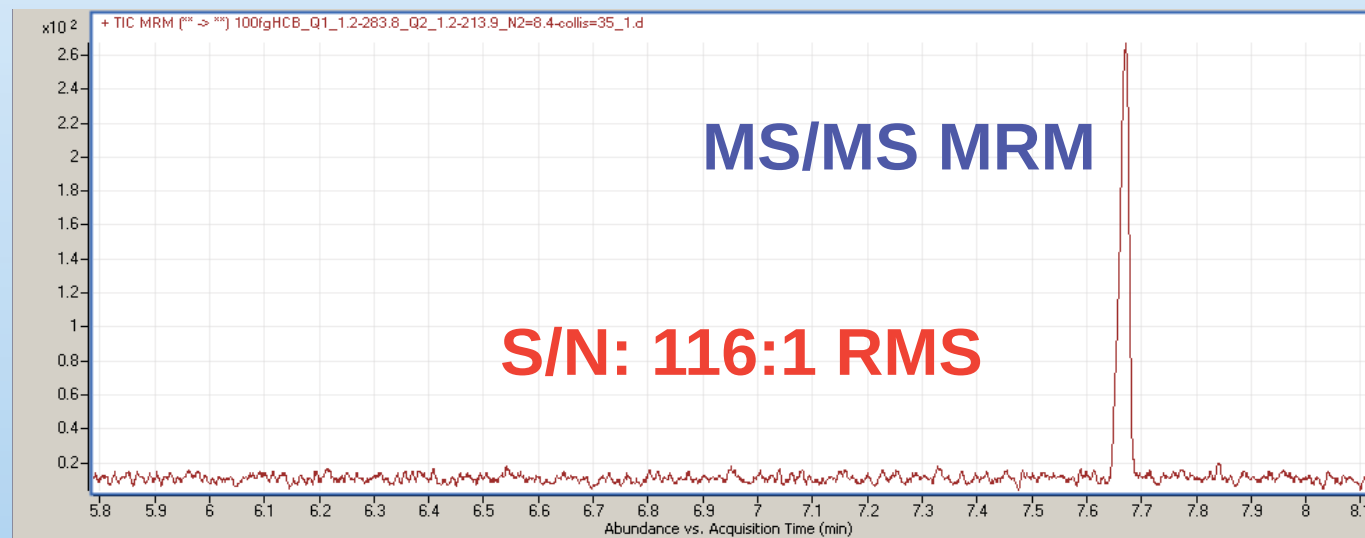
Почему MS/MS?

Лучше один раз увидеть...



GC/MS Single
Quad SIM

EI 100fg HCB
«грязной»
матрице



GC/MS/MS QQQ
MRM

*Мечта
хроматографиста:
один пик на плоской
базовой линии!!!*

INTERLAB

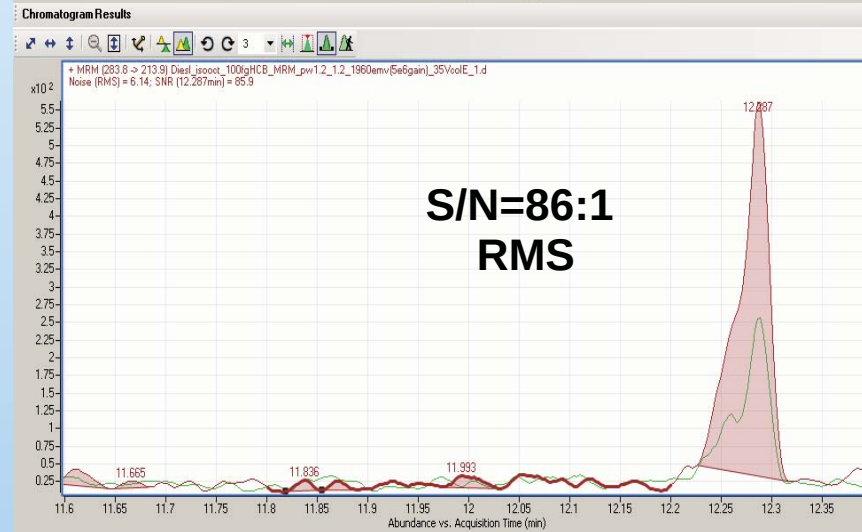
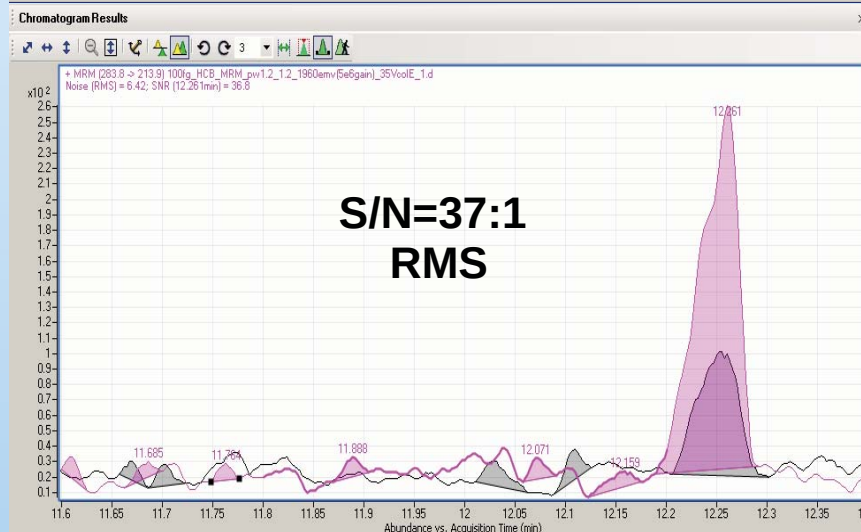
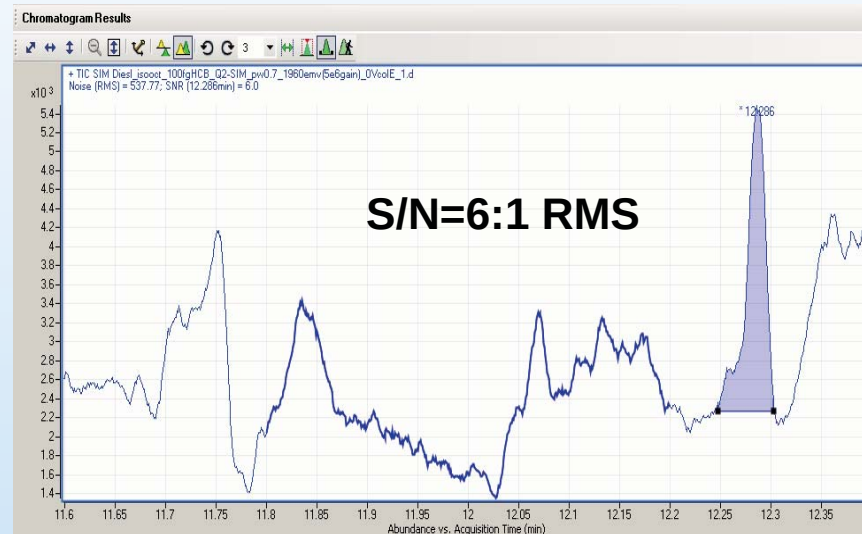
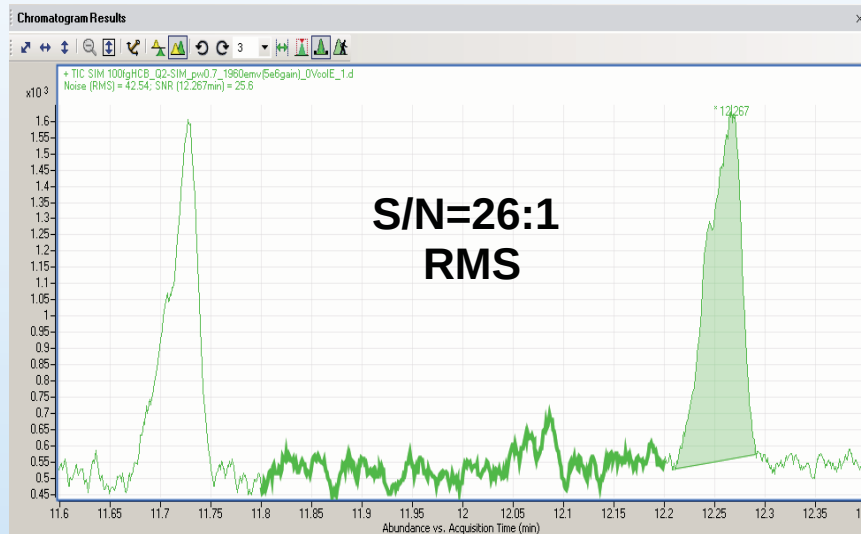
Сравнение SIM и MRM для НСВ

100 fg НСВ в чистой матрице

300 fg НСВ в дизтопливе

Single MS: SIM 283.8

MS/MS: 283.8:213.9



INTERLAB

Технология

Agilent применил все лучшее, что было достигнуто при разработке

лучшей в мире серии хромато-масс-спектрометров 597X Series GC/MSD:

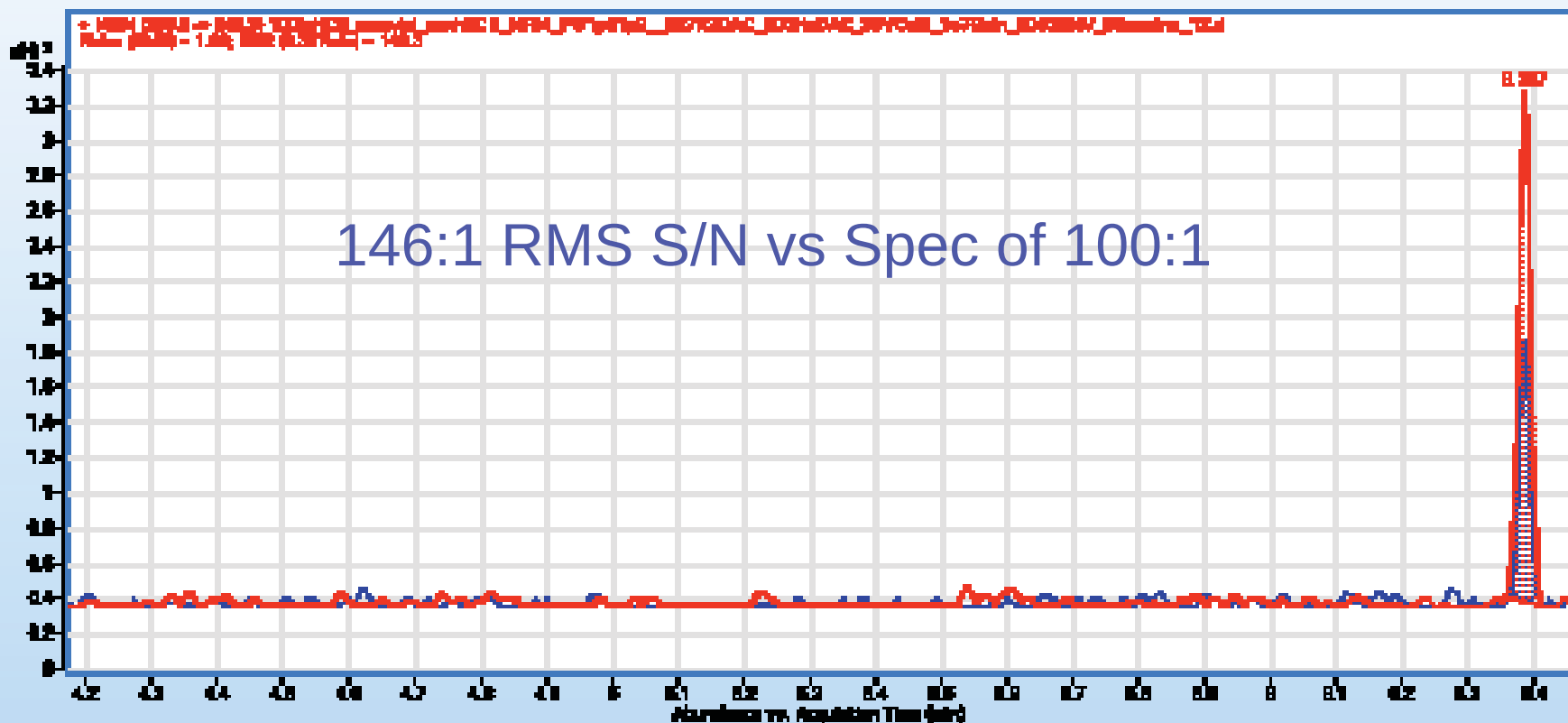
- Обогреваемый монокристаллический кварцевый квадруполь с золотым покрытием
- Доказавшую свою высочайшую эффективность конструкцию ионного источника
- Автонастройку

и тройного квадрупольного масс-спектрометрического детектора для ВЭЖХ Agilent 6410A LC/QQQ:

- Коллизионная ячейка с улучшенным линейным ускорением
- Конструкция ионной оптики для работы в широком массовом диапазоне
- Программное обеспечение «Mass Hunter»

INTERLAB

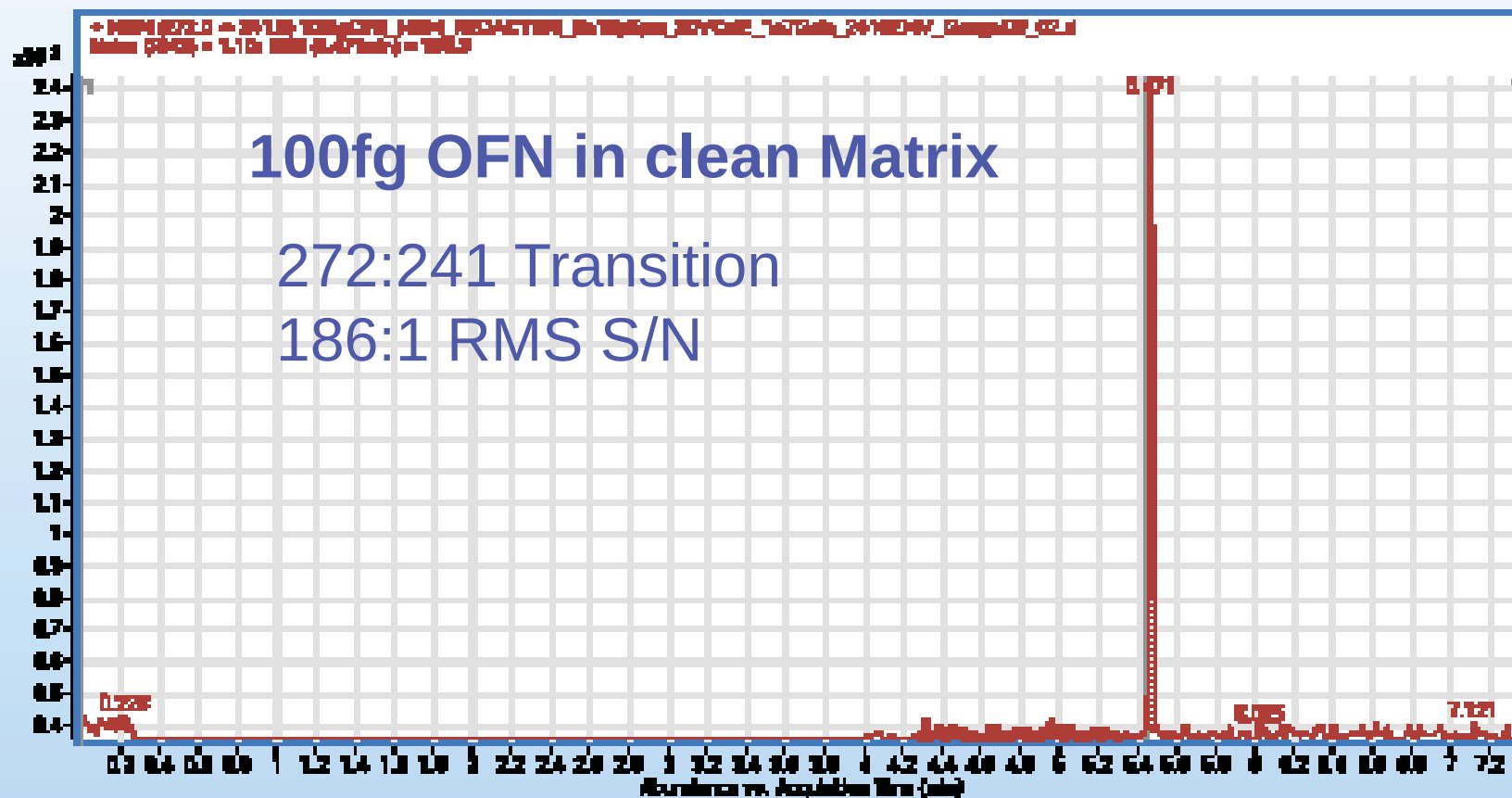
Чувствительность Agilent 7000A 100 fg HCB (гексахлорбензол)



Сравнение теста на чувствительность 1pg HCB

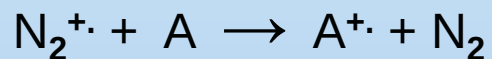
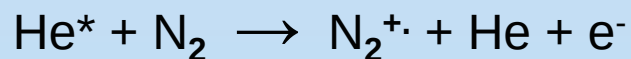
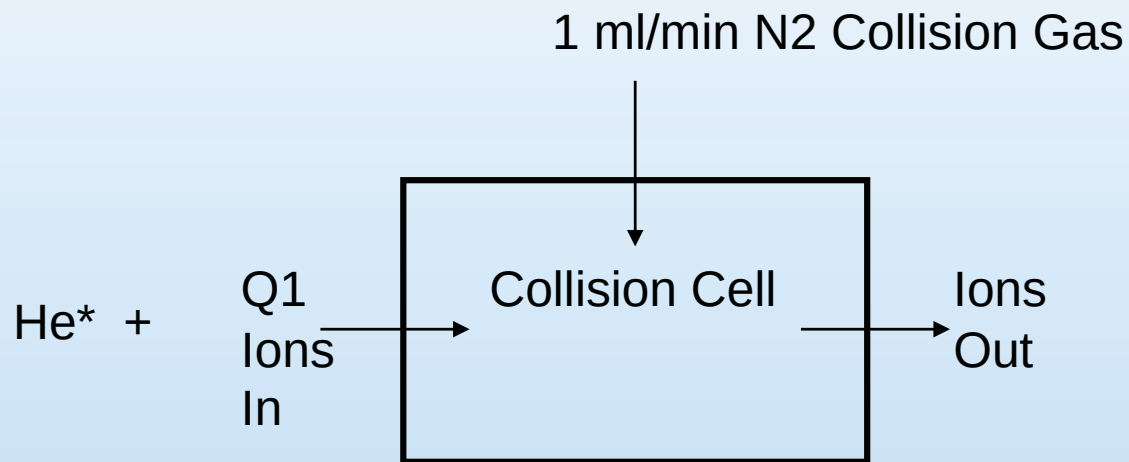
Agilent GC/QQQ	>1000:1
Конкурент X	100:1

Чувствительность Agilent 7000A OFN (октафторнафталин)

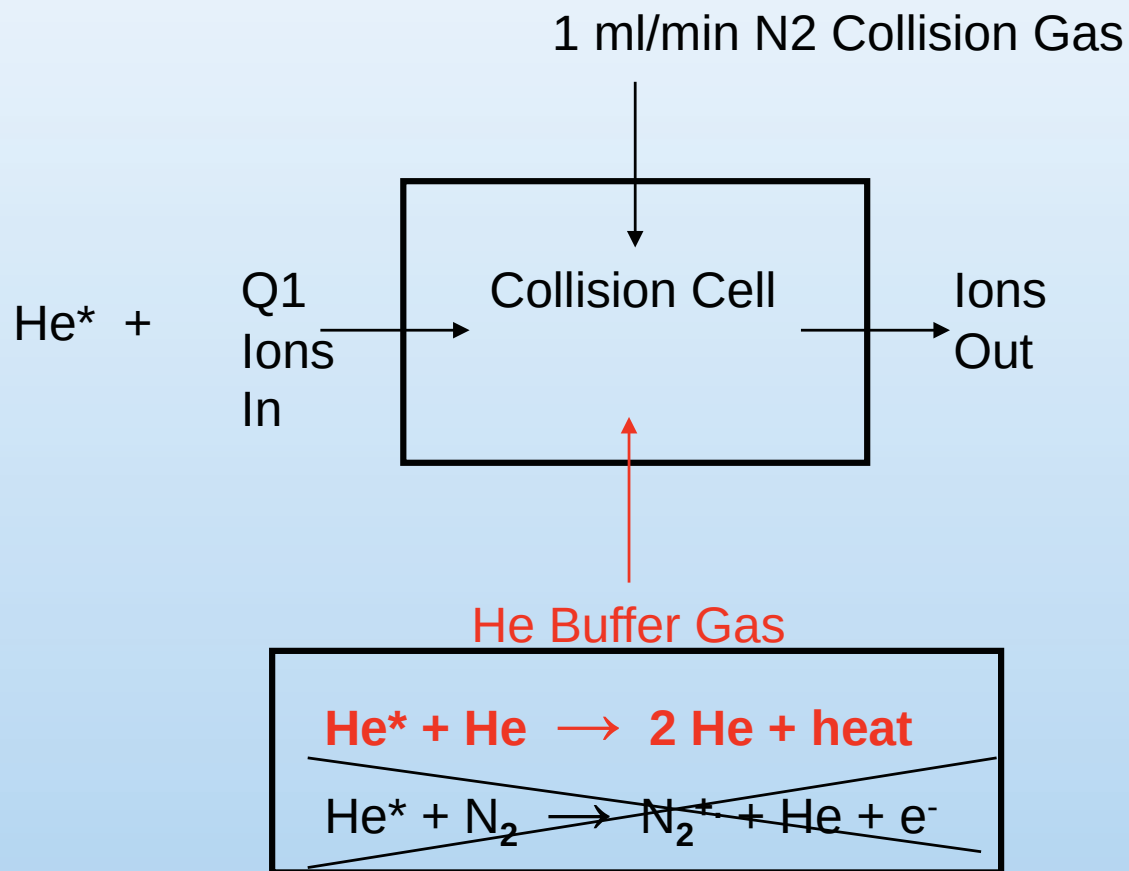


**Как удалось достичь такого
уровня чувствительности для
GC/MS/MS систем?**

Подача газов в столкновительную ячейку

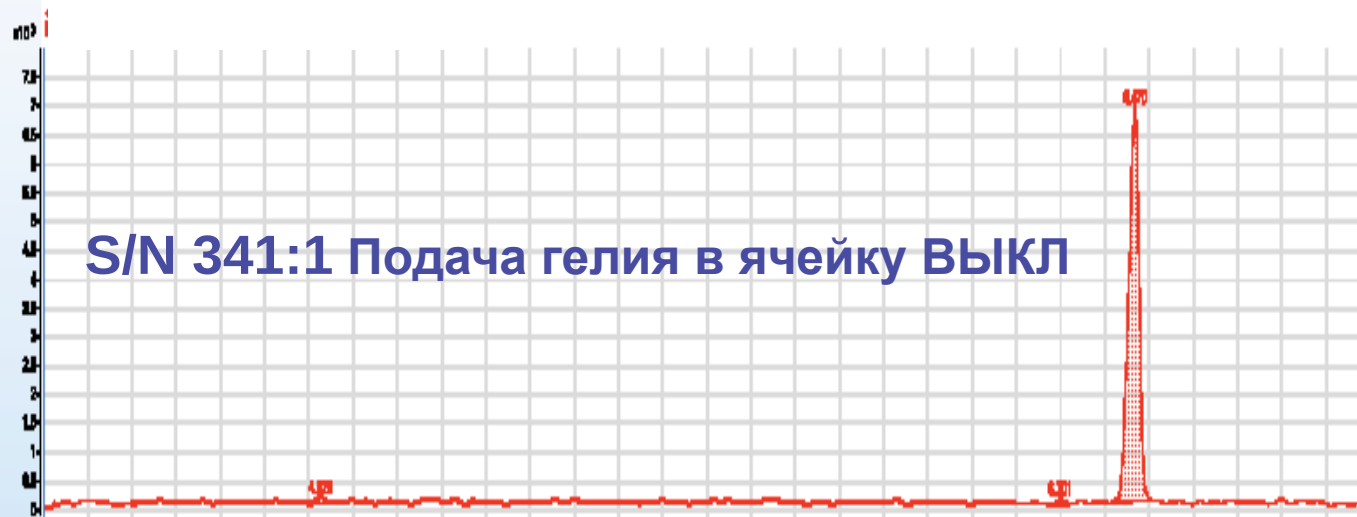


Подача газов в столкновительную ячейку

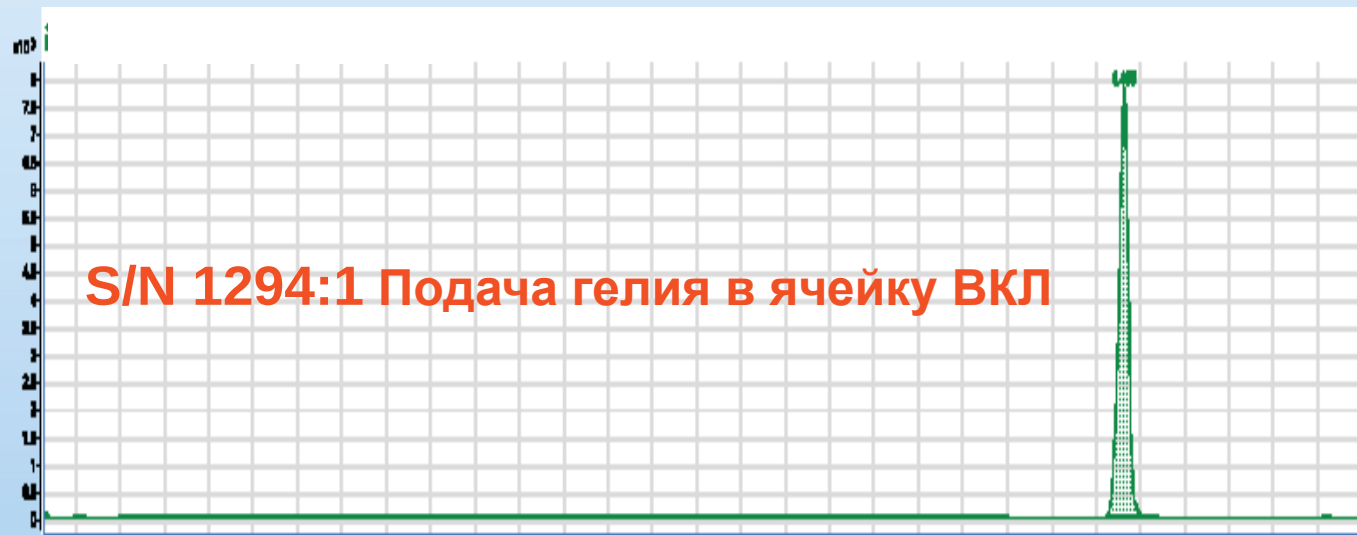


Эффект гелиевого «гашения»

S/N 341:1 Подача гелия в ячейку ВЫКЛ

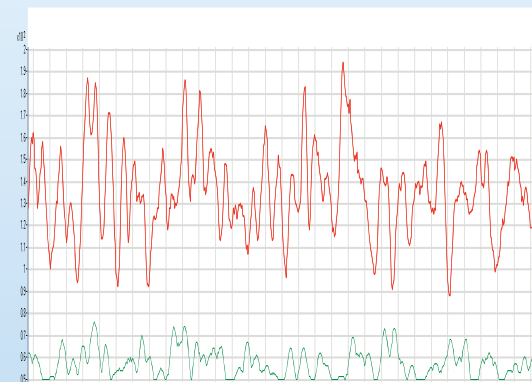


S/N 1294:1 Подача гелия в ячейку ВКЛ



Протестировано на
гексахлорбензоле

Сравнение уровня шума



INTERLAB



**Использование
Agilent G7000A GC-QQQ
для анализа хлорорганических
пестицидов (ХОП) и полихлорированных
бифенилов (ПХБ)**



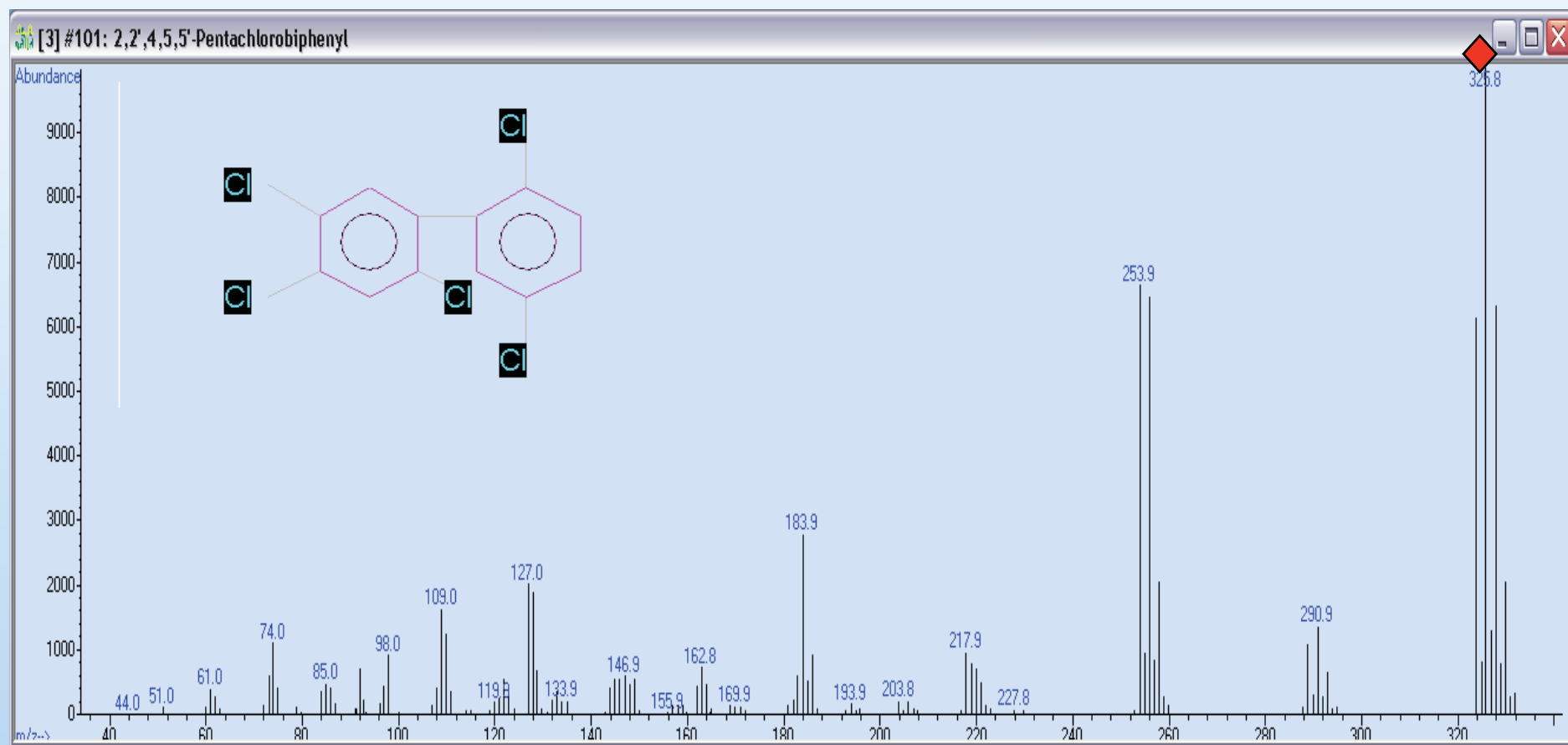
INTERLAB

Протокол анализа

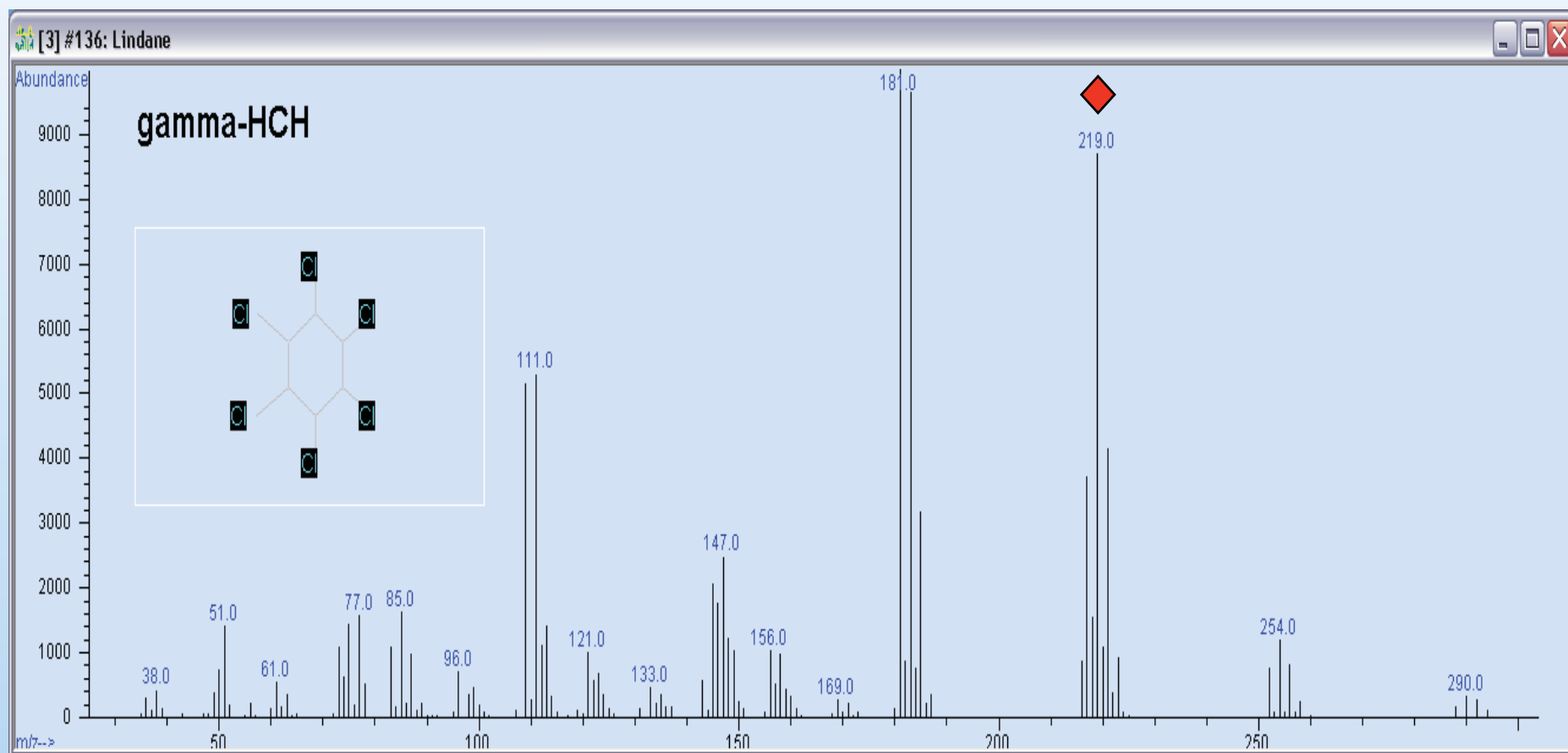
15 целевых веществ и два внутренних стандарта

TS	Start Time	Ион прекурсор	Соединение	Ret Time
1	2.0	219	a-HCH	6.19
		219	b-HCH	6.76
		219	Lindane	6.89
		219	d-HCH	7.45
2	7.80	256	PCB 28	8.25
3	8.80	292	PCB 52	9.15
4	9.30	263	Aldrin	9.47
5	9.90	193	Isodrin	10.24
6	10.90	360	PCB 155 (ISTD)	11.28
7	11.40	326	PCB 101	11.51
8	11.90	263	Dieldrin	12.18
		263	Endrin	12.56
9	12.70	326	PCB 118	12.84
10	13.00	360	PCB 153	13.25
		360	PCB 138	13.72
11	14.20	394	PCB 180	14.75
12	14.90	272	Mirex (ISTD)	15.09

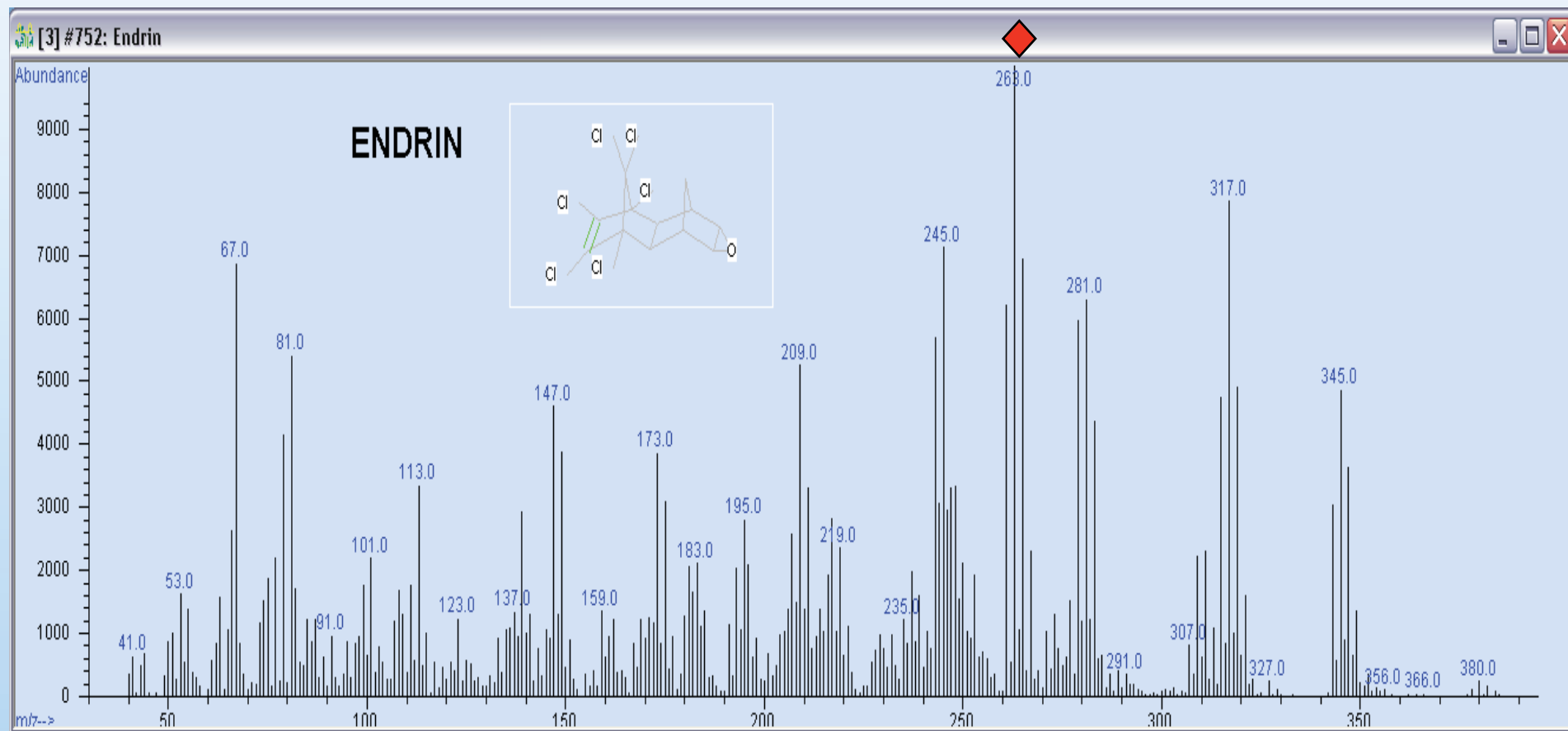
Пример масс-спектра электронного удара – РСВ 101



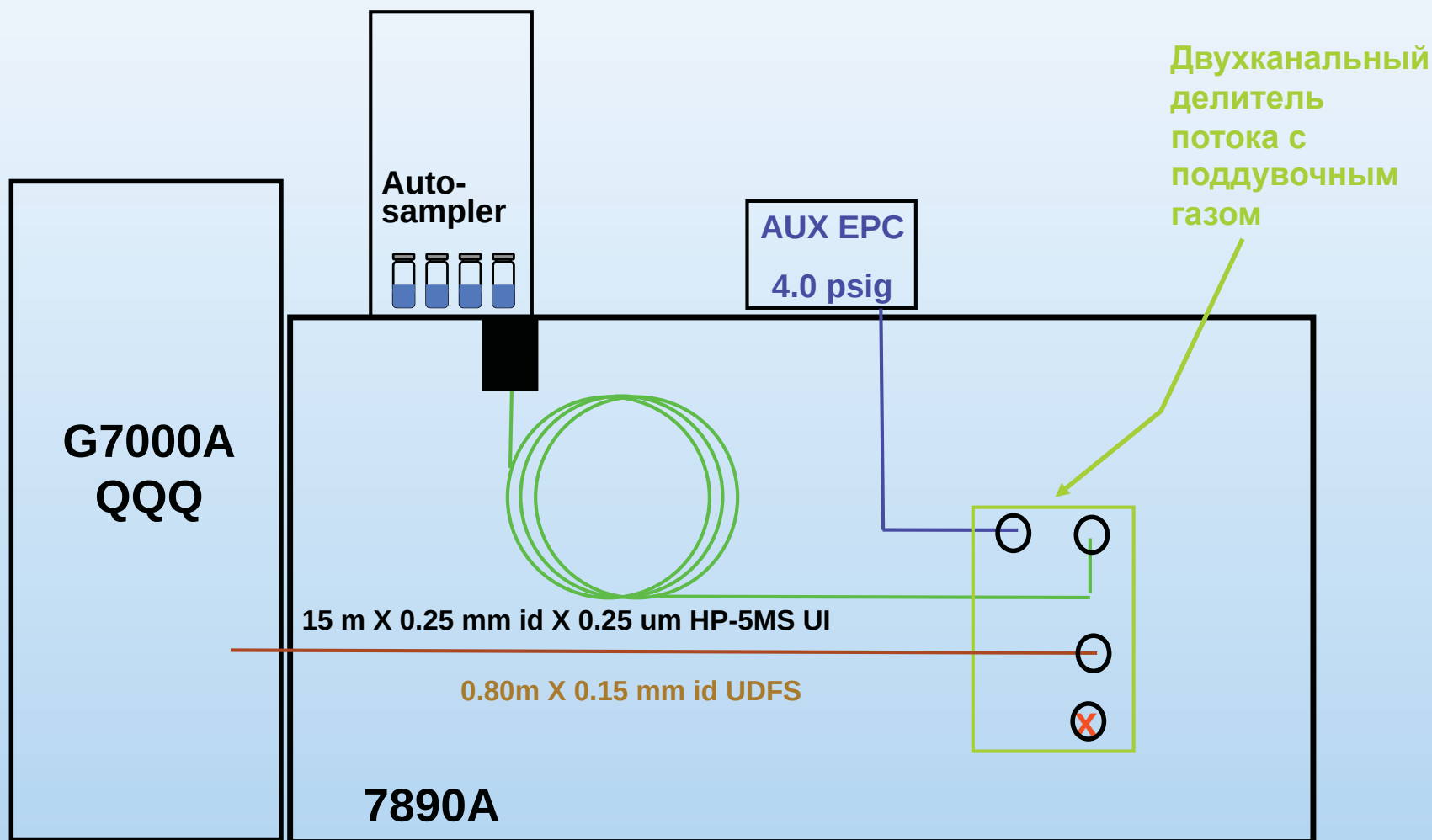
Пример масс-спектра электронного удара – γ -ГХЦГ



Пример масс-спектра электронного удара - эндрин



Конфигурация прибора для анализа ХОПов и ПХБ с обратной продувкой



Обычный химический фон в GC/MS это ионы отличные от аналита

- Привнесенные растворителем
- Большие пики матричных веществ, выходящие перед пиком растворителя
 - Малоинтенсивные, но с длинным «хвостом», перекрывающие пики аналита
- Выходящие одновременно с аналитом
- Поздно выходящие пики причина многих проблем:
 - Переносятся на колонку слишком медленно
 - Перемещаются по колонке слишком медленно
 - Для удаления из колонки требуют слишком высокой температуры, что снижает срок службы колонки

Увеличение химического фона и изменение времен удерживания без обратной продувки

Abundance

A: TIC: lettuce_blank.D\data.ms

B: TIC: lettuce_blank3.D\data.ms

Data provided by user
in Almeria, Spain

После ввода **ТОЛЬКО**
трех образцов
фоновый сигнал
значительно возрос
(увеличение
химического фона в
каждом спектре)

Большое количество матрицы
меняет селективность колонки
и изменяет времена
удерживания

Увеличивается фоновый
сигнал при анализе
образцов с высоким
содержанием матрицы

B

A

4.6e+07
4.4e+07
4.2e+07
4e+07
3.8e+07
3.6e+07
3.4e+07
3.2e+07
3e+07
2.8e+07
2.6e+07
2.4e+07
2.2e+07
2e+07
1.8e+07
1.6e+07
1.4e+07
1.2e+07
1e+07
8000000
6000000
4000000
2000000
0

Time

4.00 6.00 8.00 10.00 12.00 14.00 16.00 18.00 20.00

Наложение двух хроматограмм экстракта салата-латука **ПЕРВЫЙ** ввод (A) и **ТРЕТИЙ** ввод (B) без обратной продувки

INTERLAB

Стабильность базовой линии и времен удерживания с применением обратной продувки

Abundance

4.6e+07
4.4e+07
4.2e+07
4e+07
3.8e+07
3.6e+07
3.4e+07
3.2e+07
3e+07
2.8e+07
2.6e+07
2.4e+07
2.2e+07
2e+07
1.8e+07
1.6e+07
1.4e+07
1.2e+07
1e+07
8000000
6000000
4000000
2000000
0

TIC: lettuce_10_ppb.D\data.ms

TIC: lettuce_100_ppb.D\data.ms

TIC: lettuce_5_ppb.D\data.ms

Data provided by user
in Almeria, Spain

Стабильные
времена
удерживания и
базовая линия
Отсутствие
химического фона

Time

4.00 6.00 8.00 10.00 12.00 14.00 16.00 18.00 20.00

Наложение трех хроматограмм экстракта салата-латука с использованием обратной продувки

INTERLAB

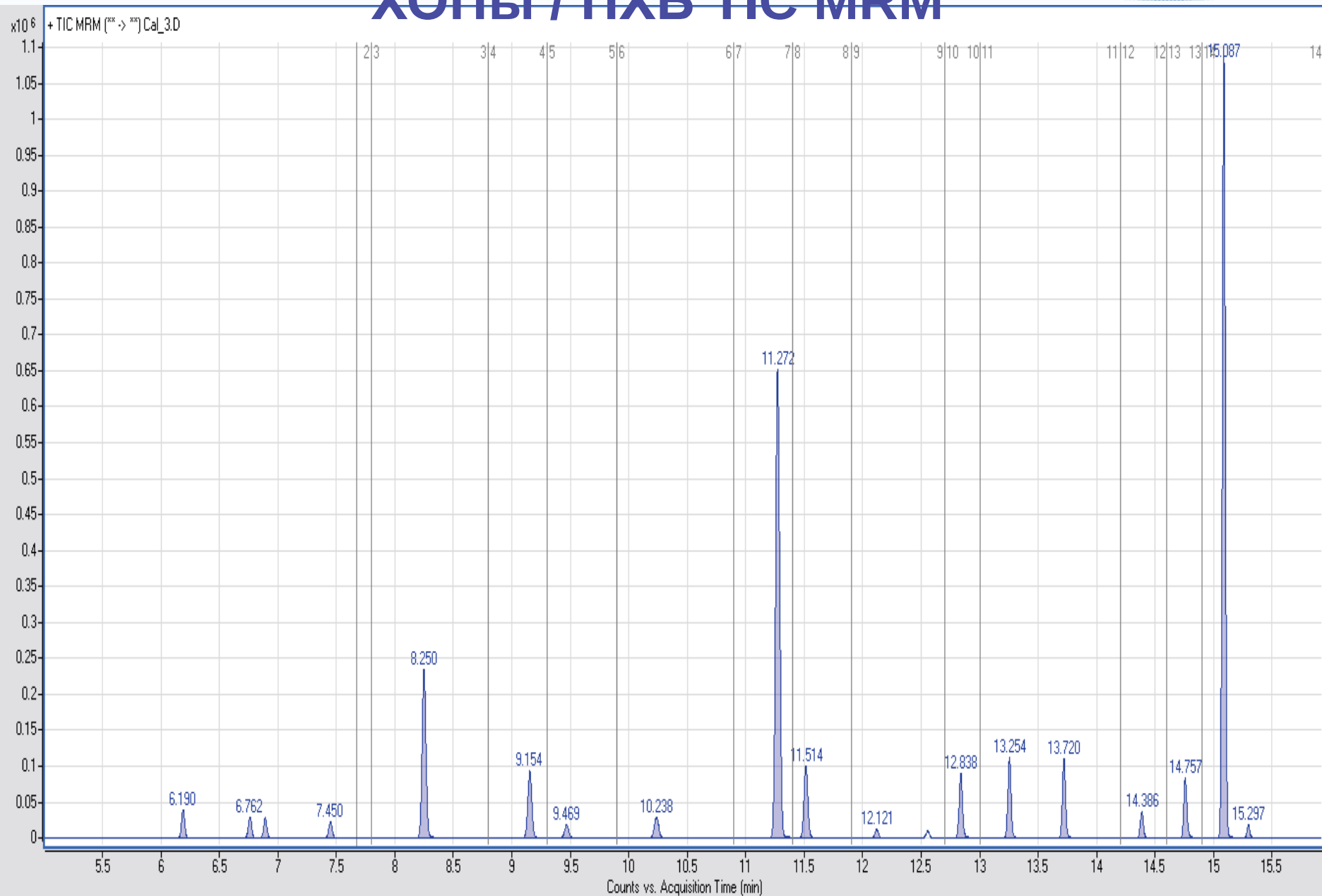
Калибровочный диапазон

Std Ref	Conc ppb	uL Injected	pg injected
Cal 5	200	2	400
Cal 4	100	2	100
Cal 3	40	2	80
Cal 2	20	2	40
Cal 1	8	2	16
Low Cal A	1.6	2	3.2
Low Cal B	0.8	2	1.6
Low Cal C	0.2	2	0.4
Low Cal D	0.1	2	0.2

Целевые времена удерживания и MS-MS переходы

TS	Target	Ret Time	Precurson Ion m/z	Quant m/z	Qual m/z	CV
1	a-HCH	6.19	219	147	183	20
	b-HCH	6.76	219	147	183	20
	Lindane	6.89	219	147	183	20
	d-HCH	7.45	219	147	183	20
2	PCB 28	8.25	256	186	151	20
3	PCB 52	9.15	292	220	257	20
4	Aldrin	9.47	263	193	228	30
5	Isodrin	10.24	193	123	157	30
6	PCB 155 (ISTD)	11.28	360	290		20
7	PCB 101	11.51	326	256	291	20
8	Dieldrin	12.18	263	193	228	30
	Endrin	12.56	263	193	228	30
9	PCB 118	12.84	326	256		20
10	PCB 153	13.25	360	290	325	20
	PCB 138	13.72	360	290	325	20
11	PCB 180	14.75	394	324	359	20
12	Mirex (ISTD)	15.09	272	237		20

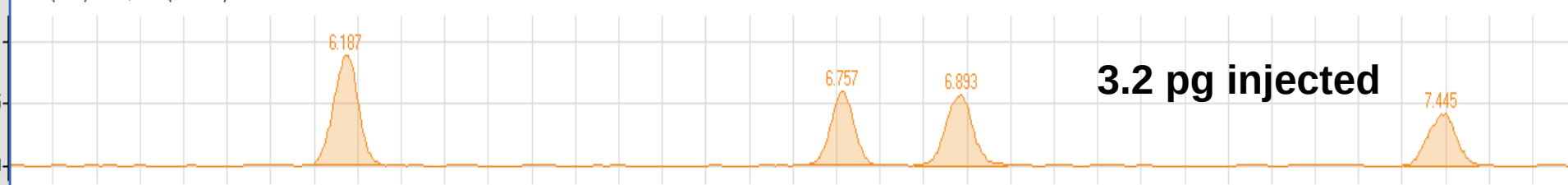
ХОПЫ / ПХБ TIC MRM



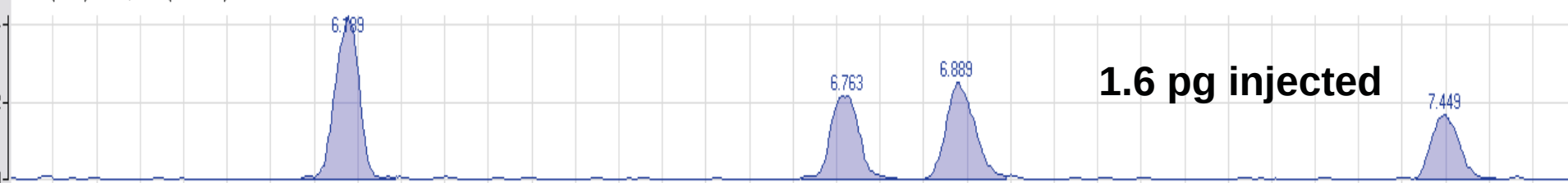
INTERLAB

ГХЦГ: MRM переходы 219 → 147

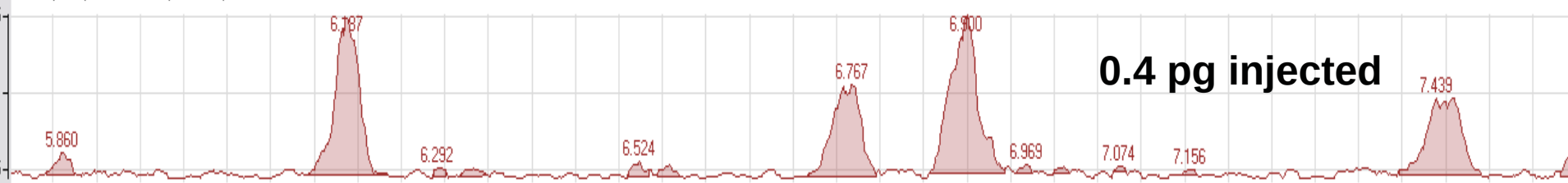
+ MRM (219.00000 → 147.00000) Low_Cal_A.D
Noise (RMS) = 1.70; SNR (6.187min) = 523.8



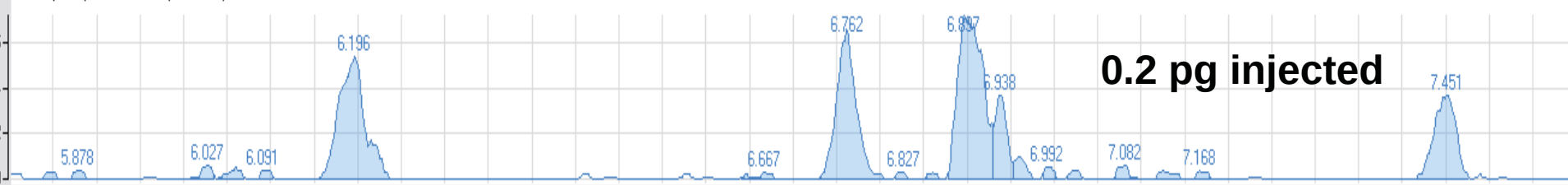
+ MRM (219.00000 → 147.00000) Low_Cal_B.D
Noise (RMS) = 1.39; SNR (6.189min) = 304.5



+ MRM (219.00000 → 147.00000) Low_Cal_C.D
Noise (RMS) = 1.67; SNR (6.900min) = 61.4



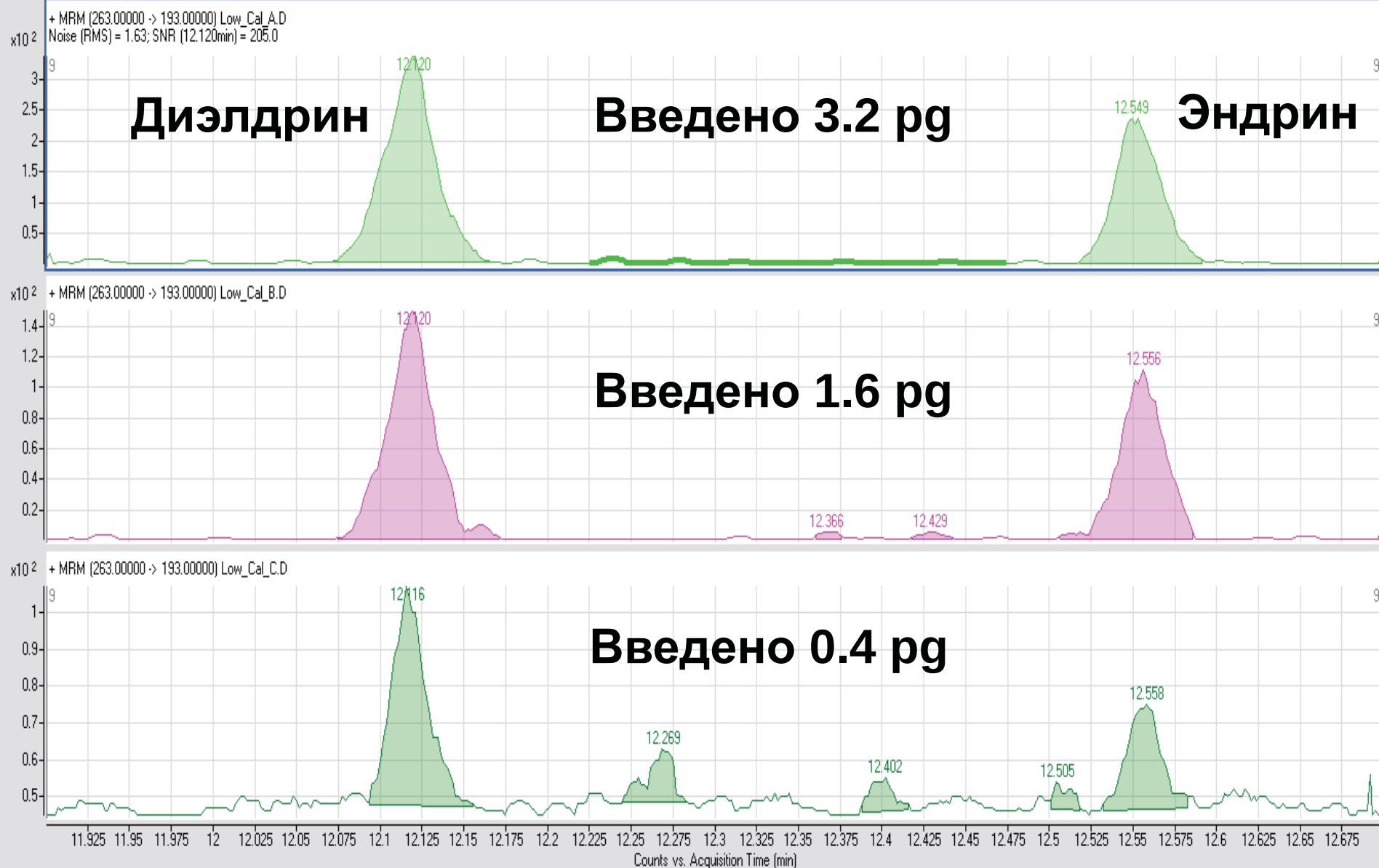
+ MRM (219.00000 → 147.00000) Low_Cal_D.D
Noise (RMS) = 1.04; SNR (6.897min) = 69.2



Counts vs. Acquisition Time (min)

INTERLAB

MRM переход 263 → 193



ГХЦГ : MRM 219 → 147,

соотношение сигнал/шум для введенных 200 fg



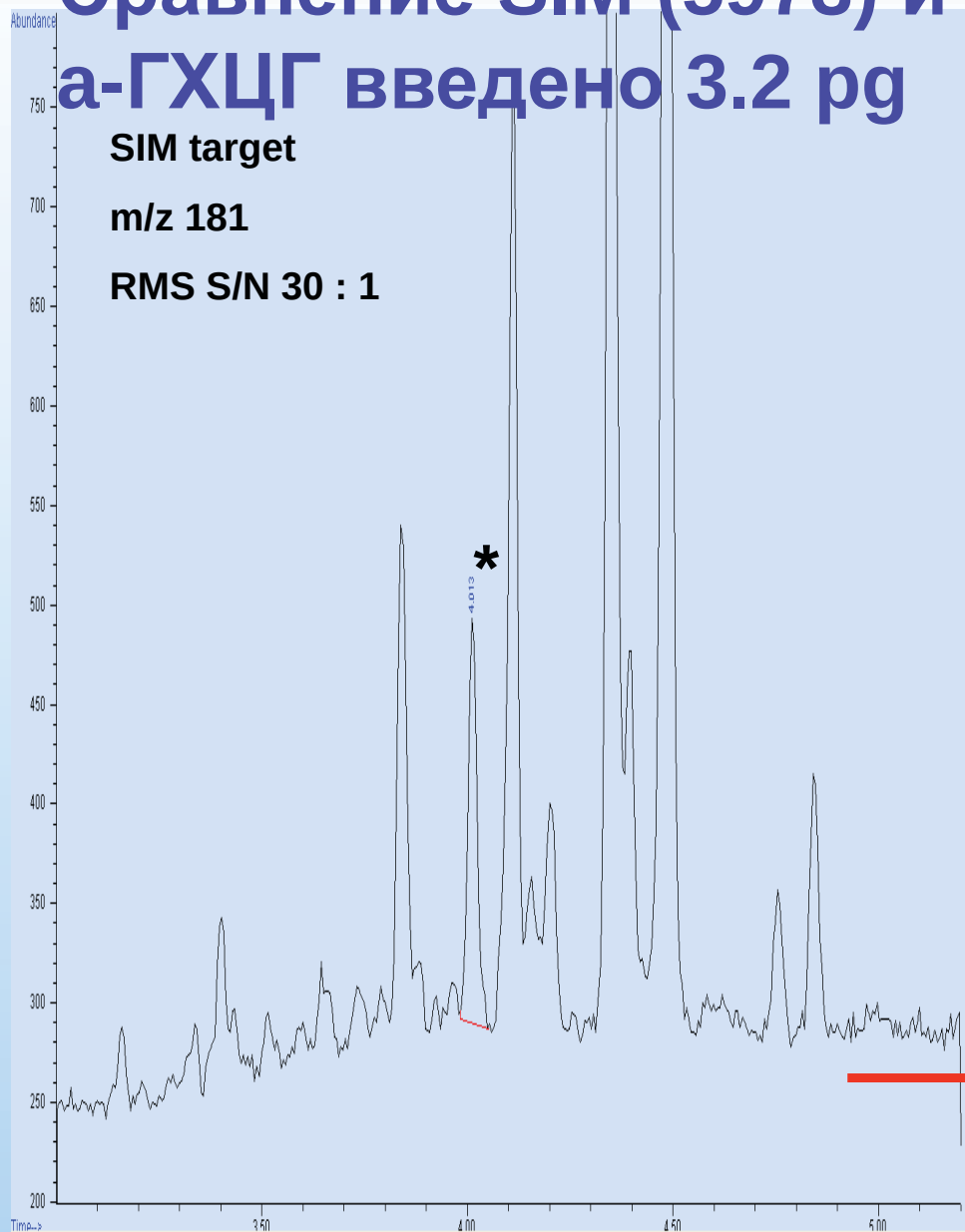
Сравнение SIM (5973) и MRM:

а-ГХЦГ введено 3.2 µg

SIM target

m/z 181

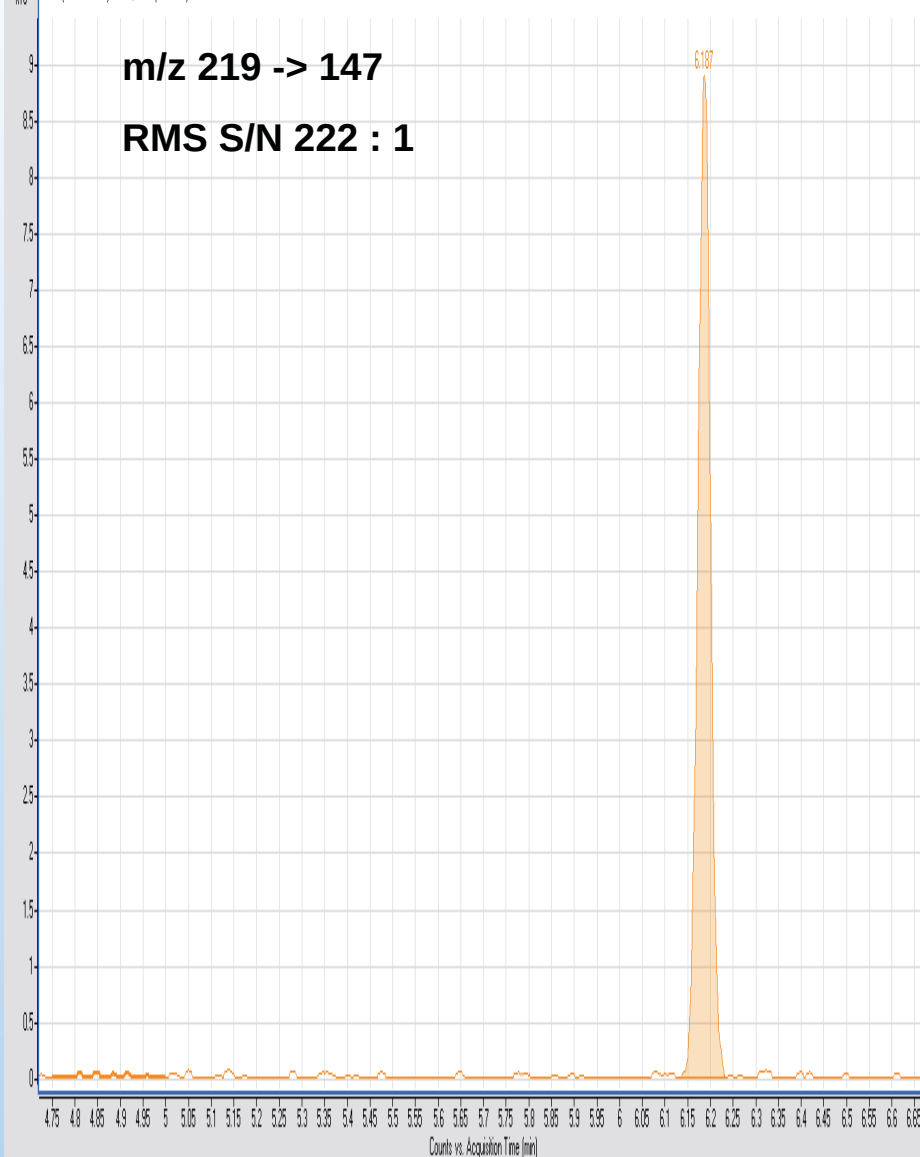
RMS S/N 30 : 1



+ MRM (219.00000 -> 147.00000) Low, Cal, A.D
Noise (Peak to Peak) = 4.00, S/NR (6.187min) = 222.1

m/z 219 -> 147

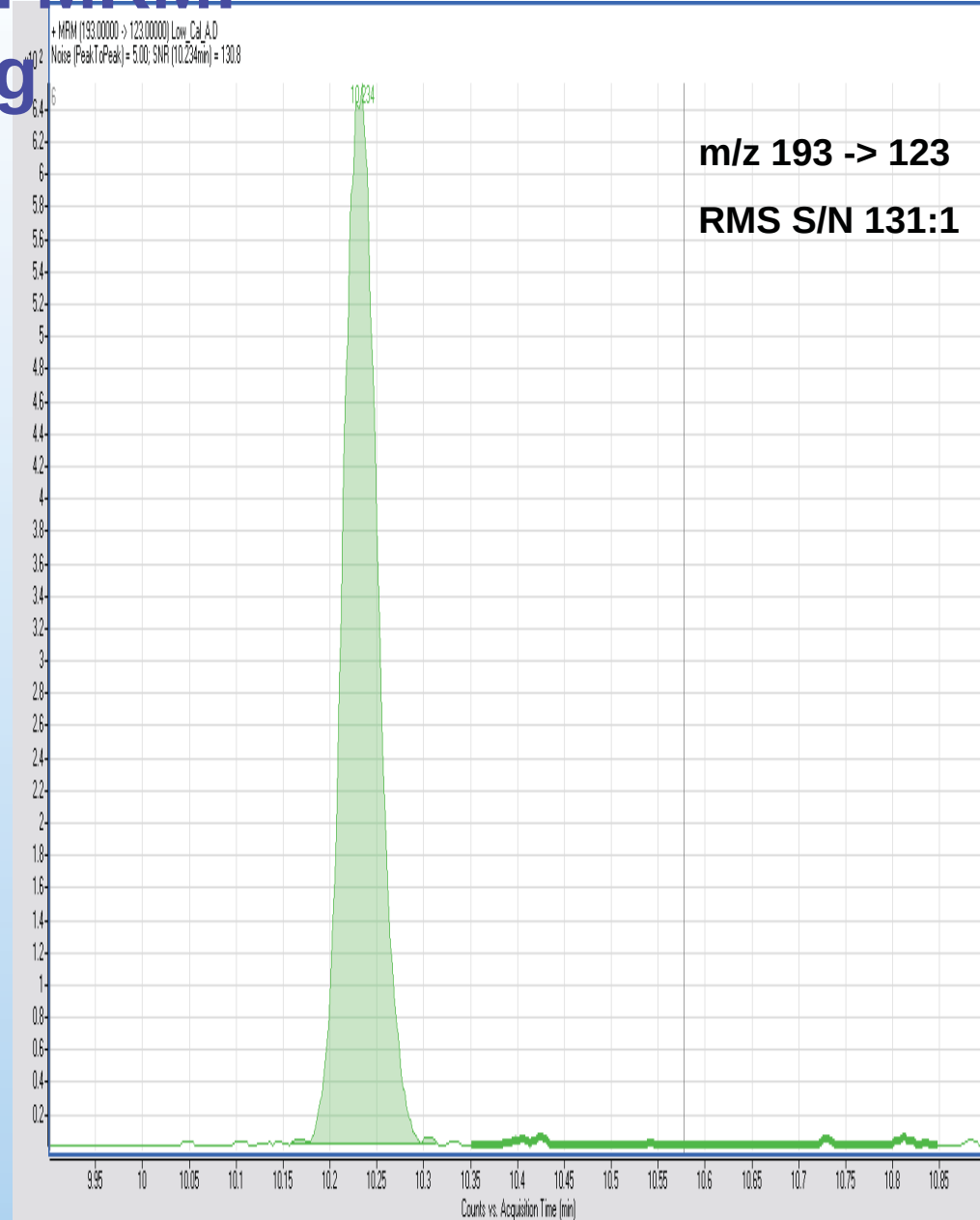
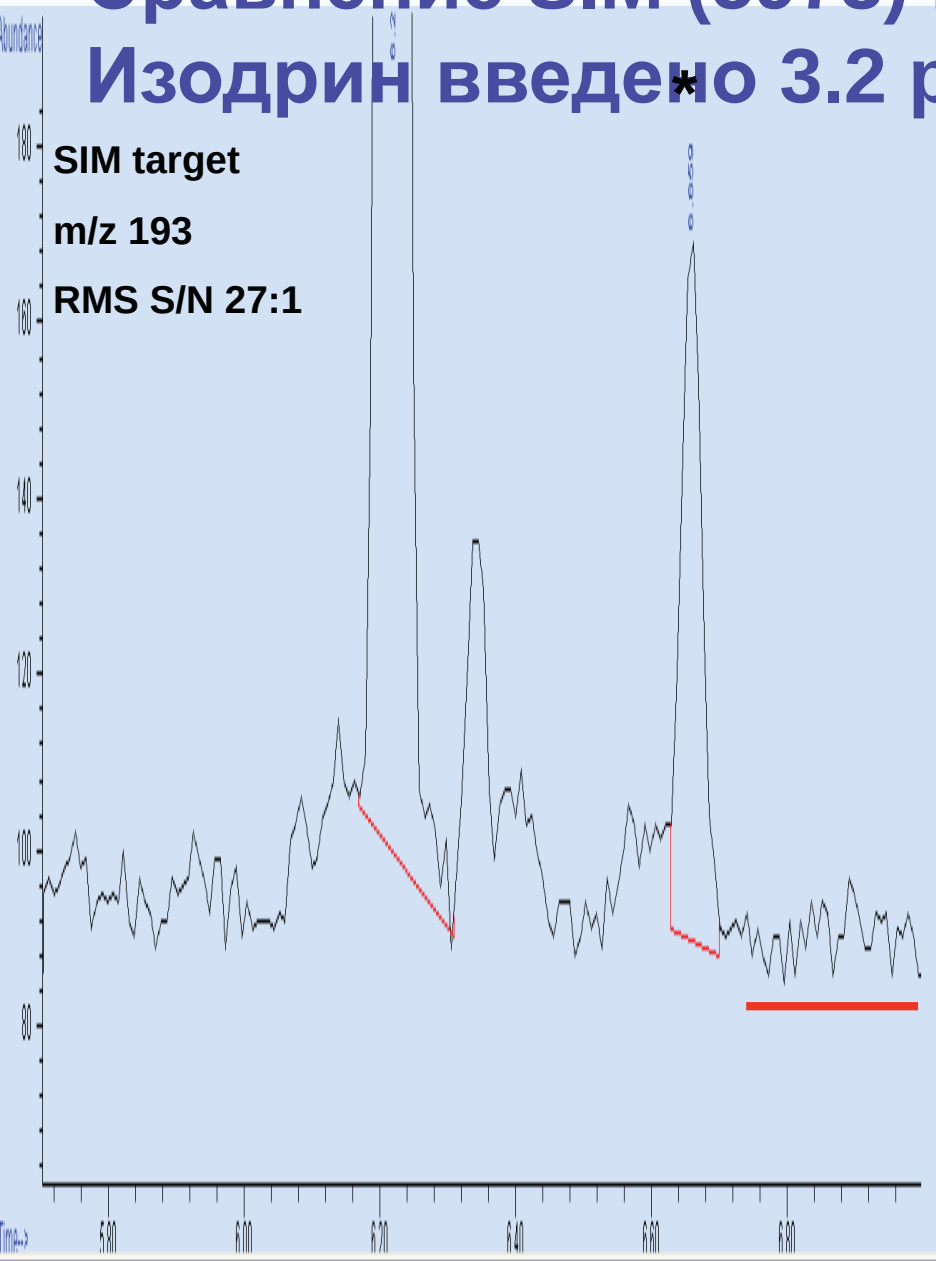
RMS S/N 222 : 1



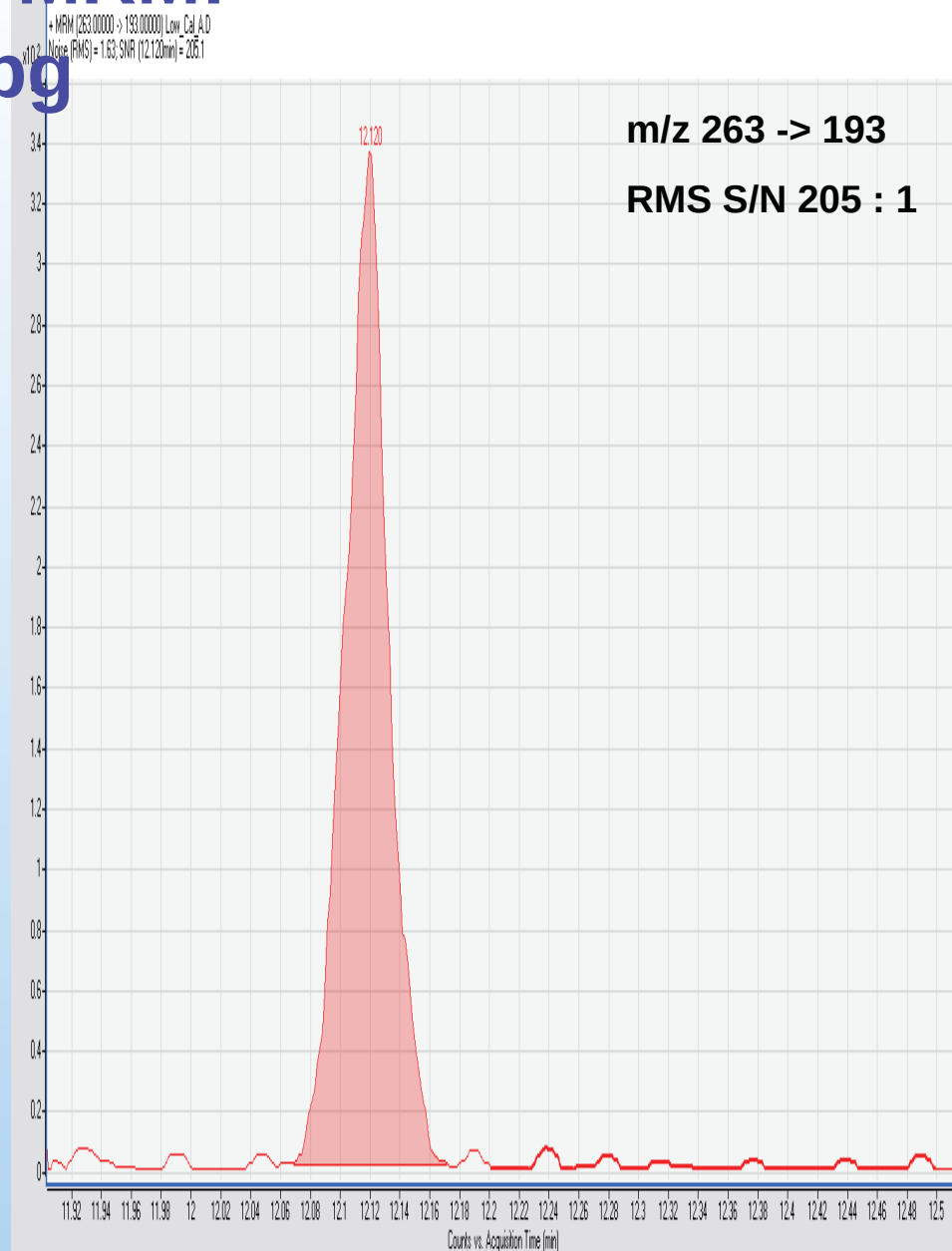
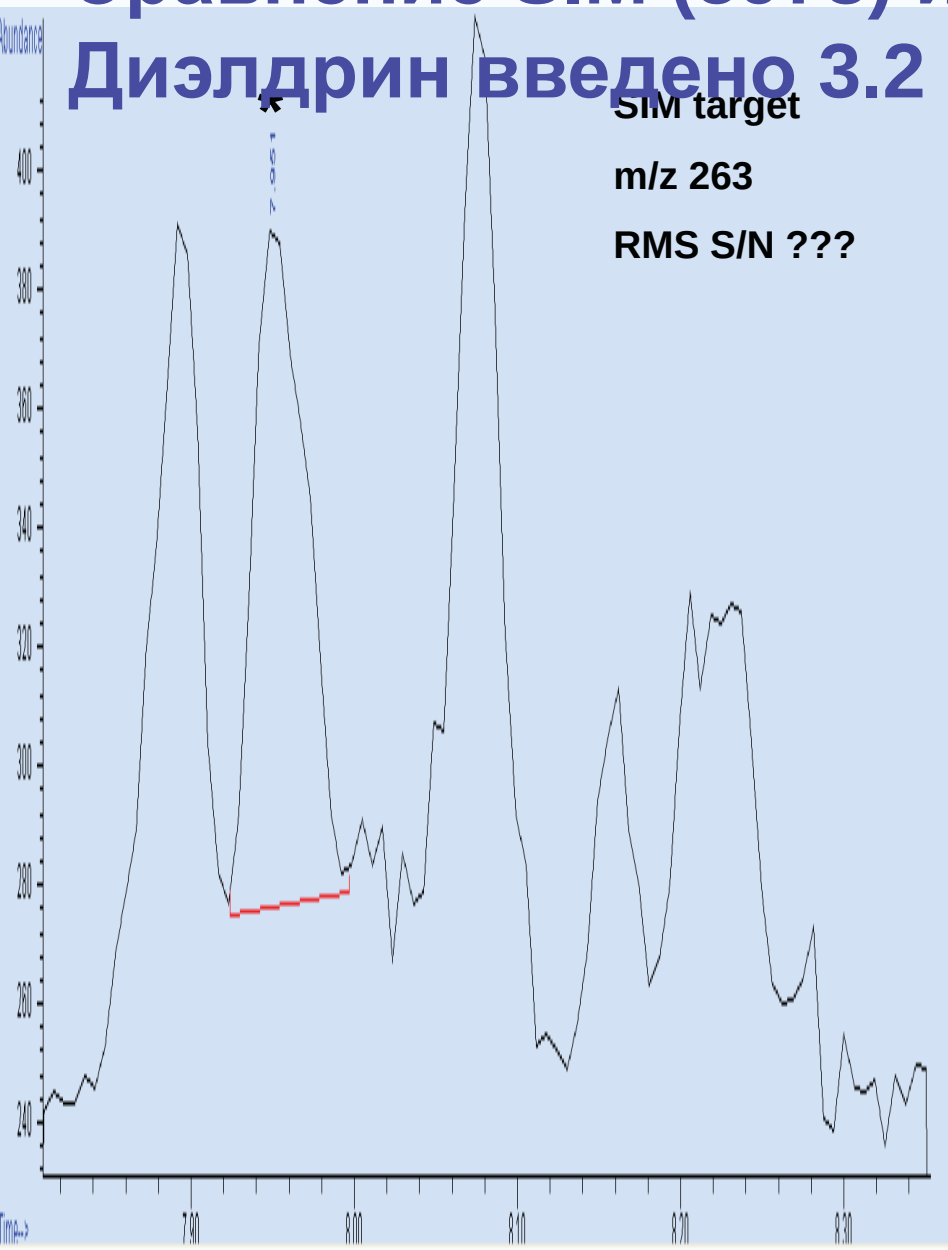
INTERLAB

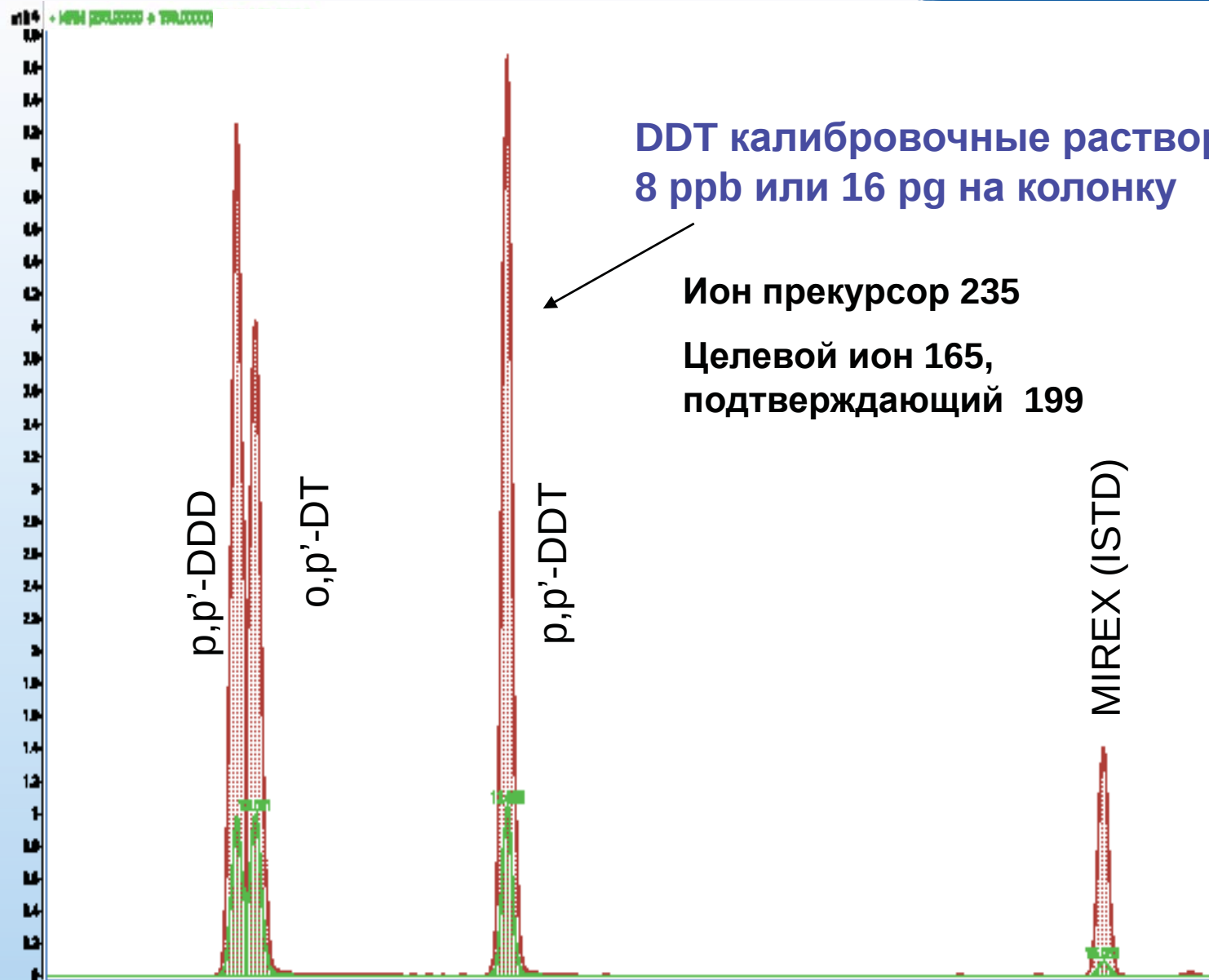
Сравнение SIM (5973) и MRM:

Изодрин введено 3.2 µg

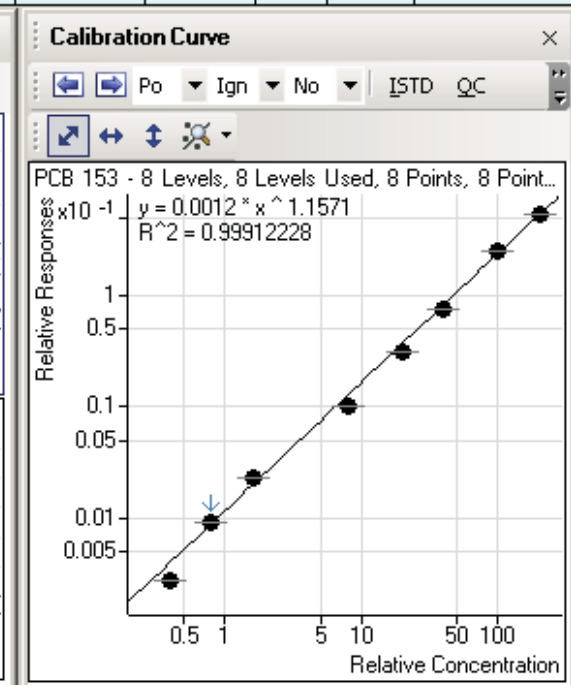
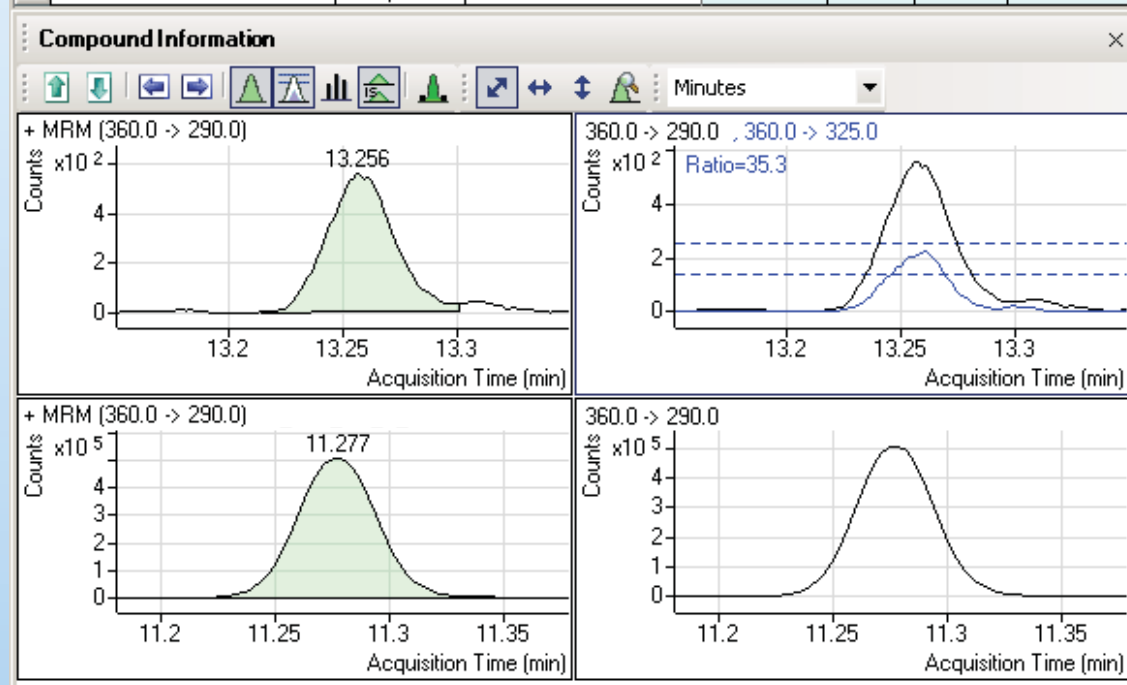


Сравнение SIM (5973) и MRM: Диэлдрин введено 3.2 µg





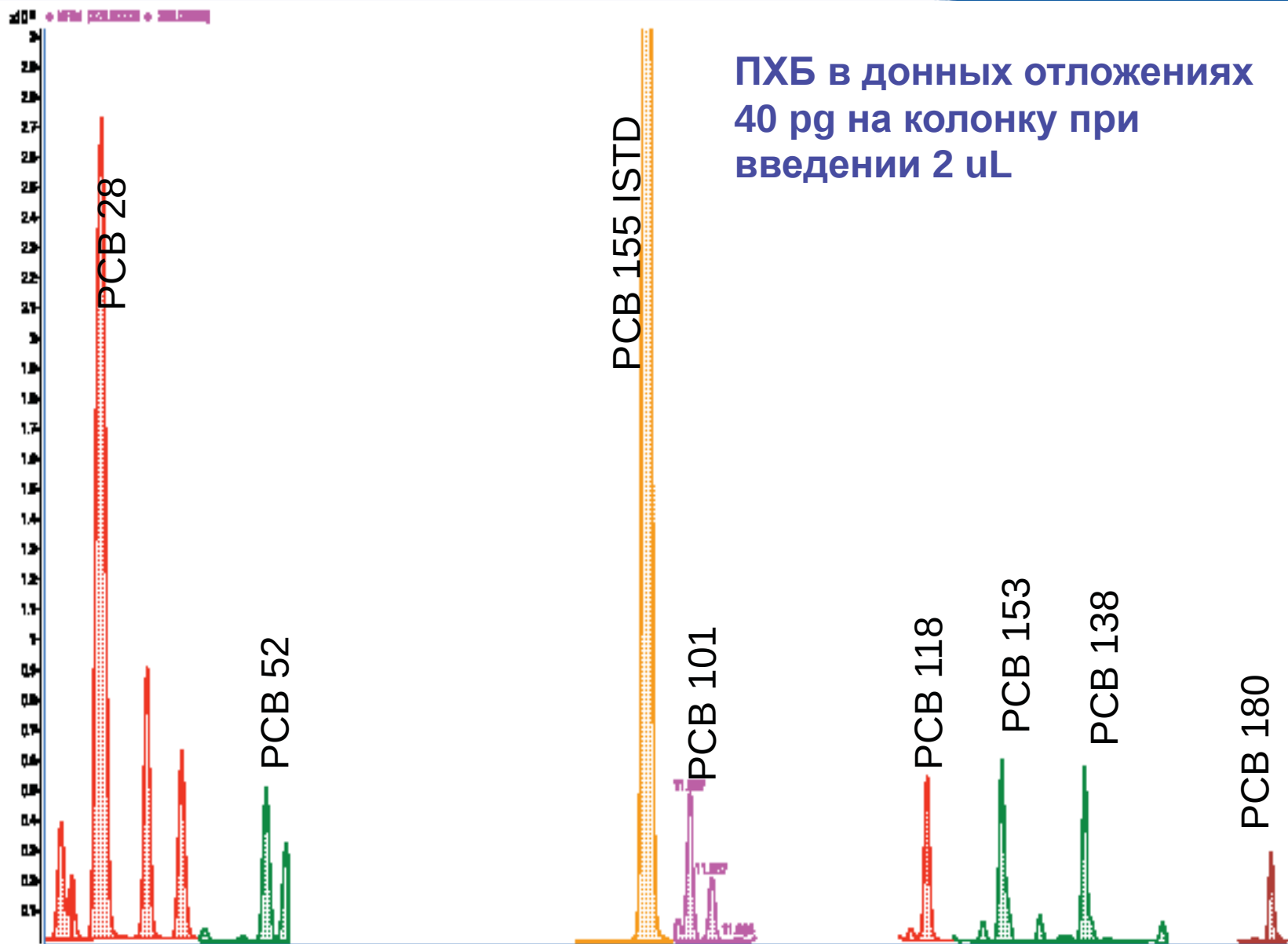
Sample				PCB 153...	PCB 153 Results					Qu...	PCB 155 (ISTD) (IST...	
Name		Type	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	RT	Resp.	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Ratio	RT	Resp.
	Low Cal C	Cal	8/5/2008 3:06 PM	0.4000	13.256	392	0.2905	0.2905	72.6	41.5	11.280	1407548
▶	Low Cal B	Cal	8/5/2008 3:23 PM	0.8000	13.256	1153	0.8234	0.8234	102.9	35.3	11.277	1240816
	Low Cal A	Cal	8/5/2008 3:42 PM	1.6000	13.257	3195	1.7957	1.7957	112.2	34.0	11.277	1394530
	Cal 01	Cal	8/5/2008 4:01 PM	8.0000	13.257	13772	6.5645	6.5645	82.1	35.1	11.276	1341342
	Cal 02	Cal	8/5/2008 4:20 PM	20.0000	13.258	44311	16.9417	16.9417	84.7	35.0	11.275	1440849
	Cal 03	Cal	8/5/2008 4:39 PM	40.0000	13.259	93432	36.7860	36.7860	92.0	34.9	11.277	1238753
	Cal 04	Cal	8/5/2008 4:58 PM	100.0000	13.259	330146	103.6555	103.6555	103.7	35.9	11.276	1320111
	Cal 05	Cal	8/5/2008 5:17 PM	200.0000	13.258	781324	199.0773	199.0773	99.5	36.7	11.276	1468188
	Extract Biota Blank	Sample	8/5/2008 6:53 PM		13.256	409	0.0805	0.0805		69.7	11.277	6486277
	Biota	Sample	8/5/2008 7:31 PM		13.258	10272	1.5128	1.5128		42.2	11.280	5467023
	Biota	Sample	8/5/2008 8:09 PM		13.258	9834	1.4803	1.4803		35.1	11.280	5366849
	Biota	Sample	8/5/2008 8:47 PM		13.261	10925	1.5501	1.5501		41.1	11.284	5652983
	Extract Sediment Blank	Sample	8/5/2008 9:25 PM		13.261	9597	2.7890	2.7890		35.3	11.283	2516798
	Sediment	Sample	8/5/2008 10:03 PM		13.275	132267	25.1141	25.1141		43.7	11.295	2727390
	Sediment	Sample	8/5/2008 10:41 PM		13.278	135023	24.4716	24.4716		43.8	11.300	2868966
	Sediment	Sample	8/5/2008 11:19 PM		13.279	119553	23.8858	23.8858		28.8	11.301	2612484

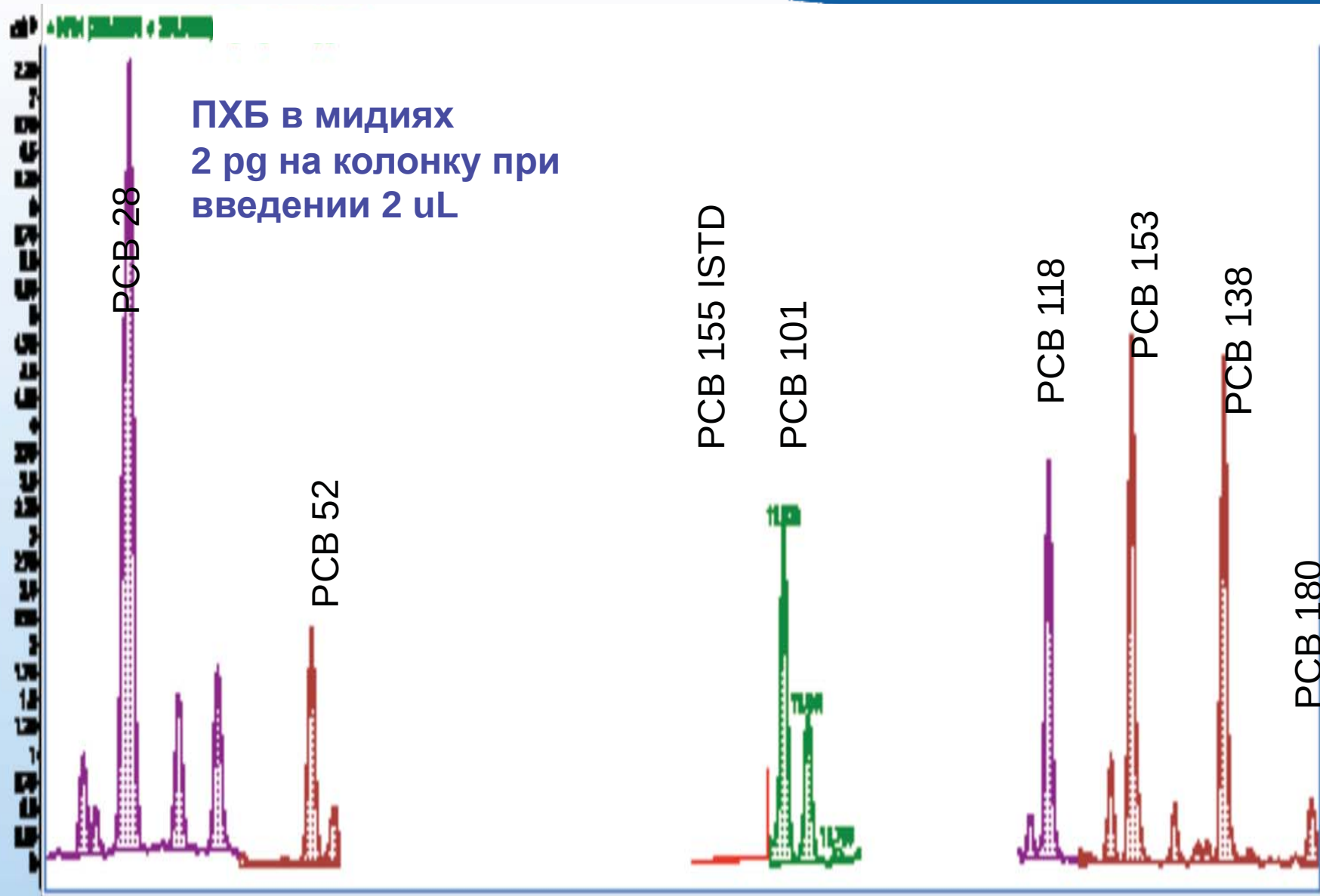


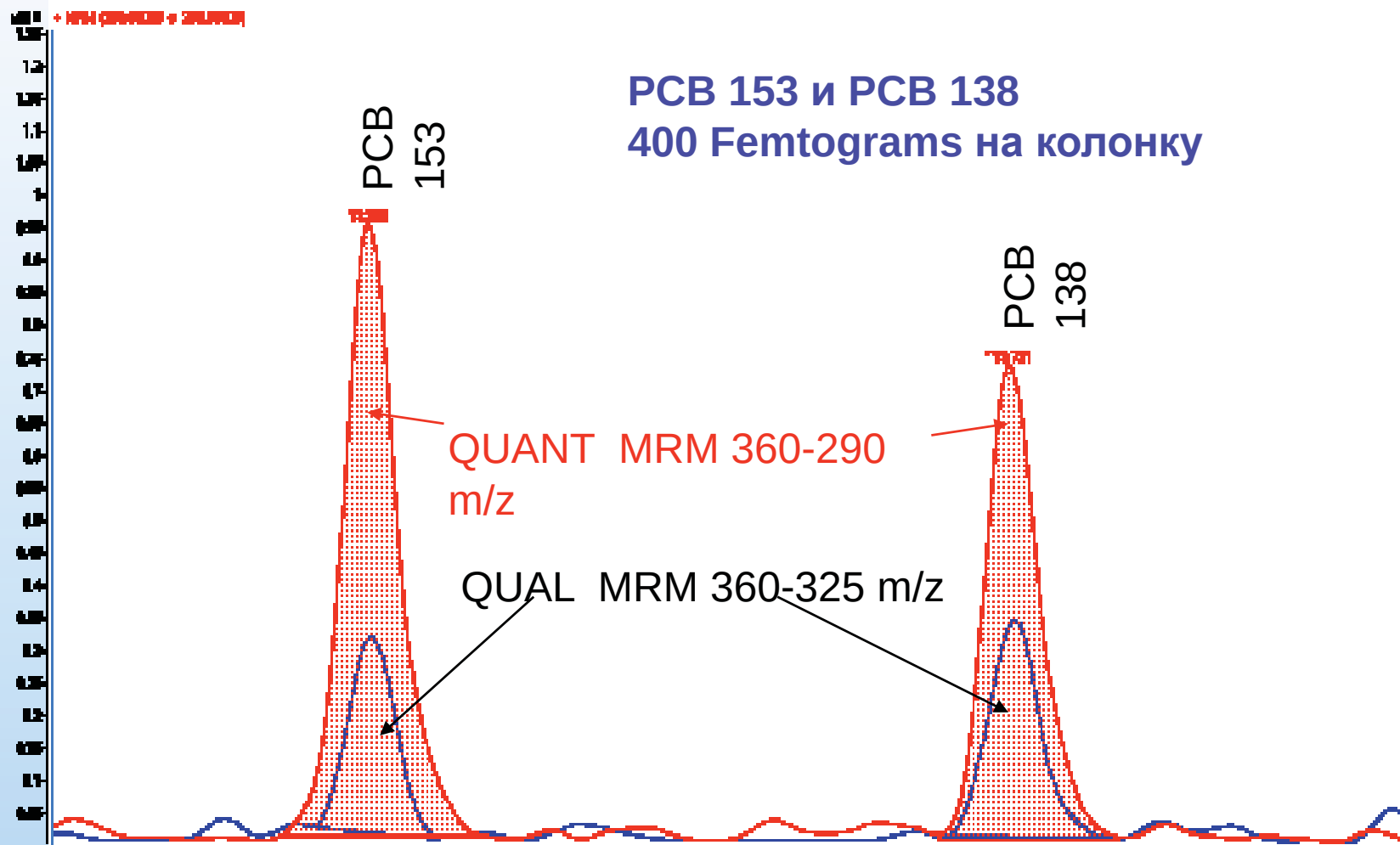
INTERLAB

Quant Reproducibility– ppb

	•PCB 28	•PCB 52	•PCB 101	•PCB 118	•PCB 153	•PCB 138	•PCB 180
Blank	•0.03	•< 0.01	•<0.01	•0.04	•ND	•ND	•ND
•	•	•	•	•	•	•	•
• Mussels Extract	•0.72	•0.63	•0.83	•1.47	•1.51	•1.47	•1.02
• Mussels Extract	•0.74	•0.66	•0.84	•1.47	•1.48	•1.46	•1.03
• Mussels Extract	•0.76	•0.64	•0.85	•1.55	•1.55	•1.48	•1.14
• Extract Sediment	•	•	•	•	•	•	•
Blank	•0.94	•2.93	•1.59	•2.49	•2.79	•1.57	•4.36
•	•	•	•	•	•	•	•
• Sediment Extract	•46.69	•23.29	•18.81	•23.03	•25.11	•25.10	•19.36
• Sediment Extract	•44.87	•21.83	•18.60	•23.65	•24.47	•25.05	•19.29
• Sediment Extract	•45.28	•22.28	•18.29	•22.25	•23.88	•24.41	•18.87







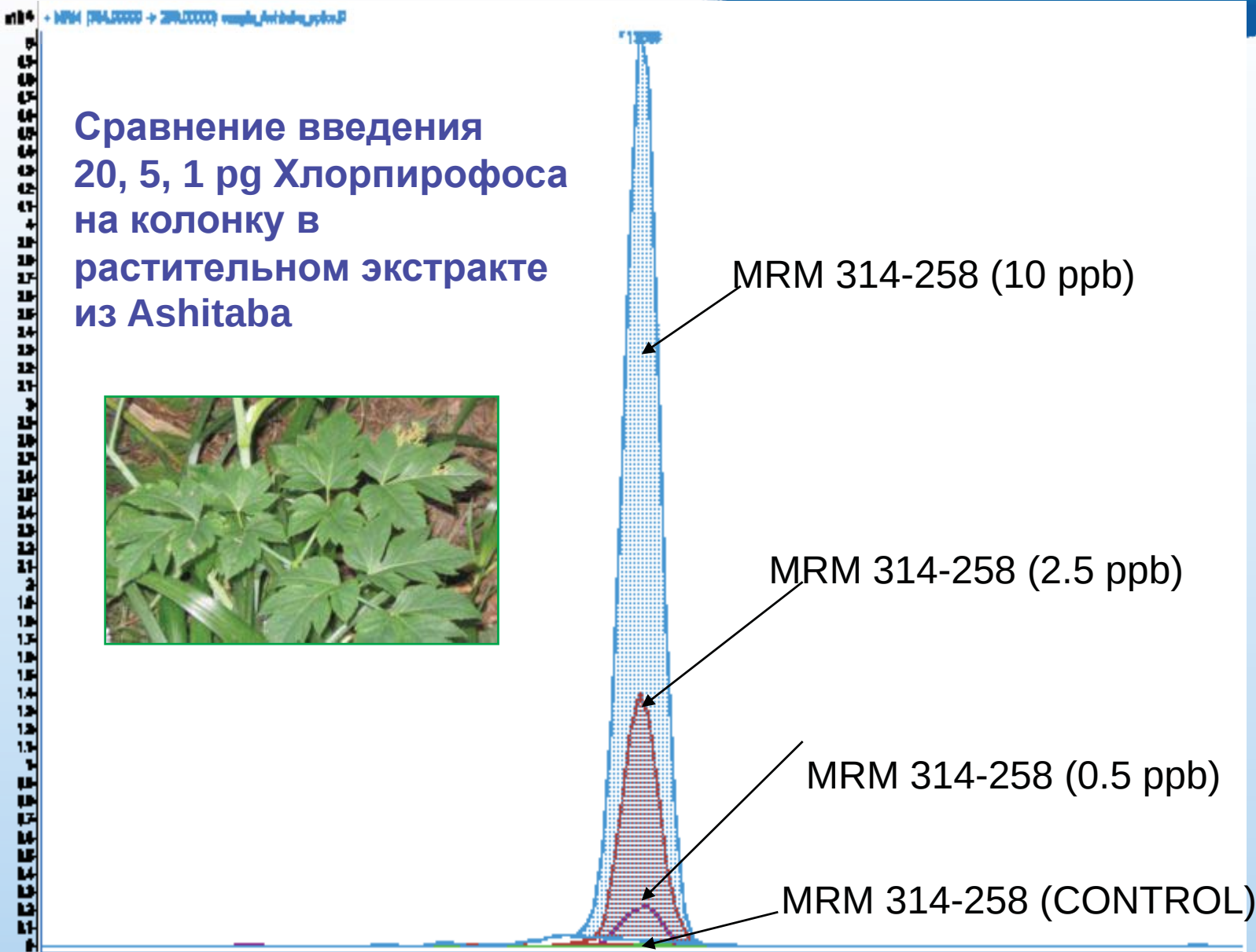
Хлорпирофос добавка
10 ppb чай сорта «Pu-erh»



Целевой MRM 314-258

Подтверждающий
MRM 314-286

Сравнение введения
20, 5, 1 рг Хлорпирфоса
на колонку в
растительном экстракте
из Ashitaba

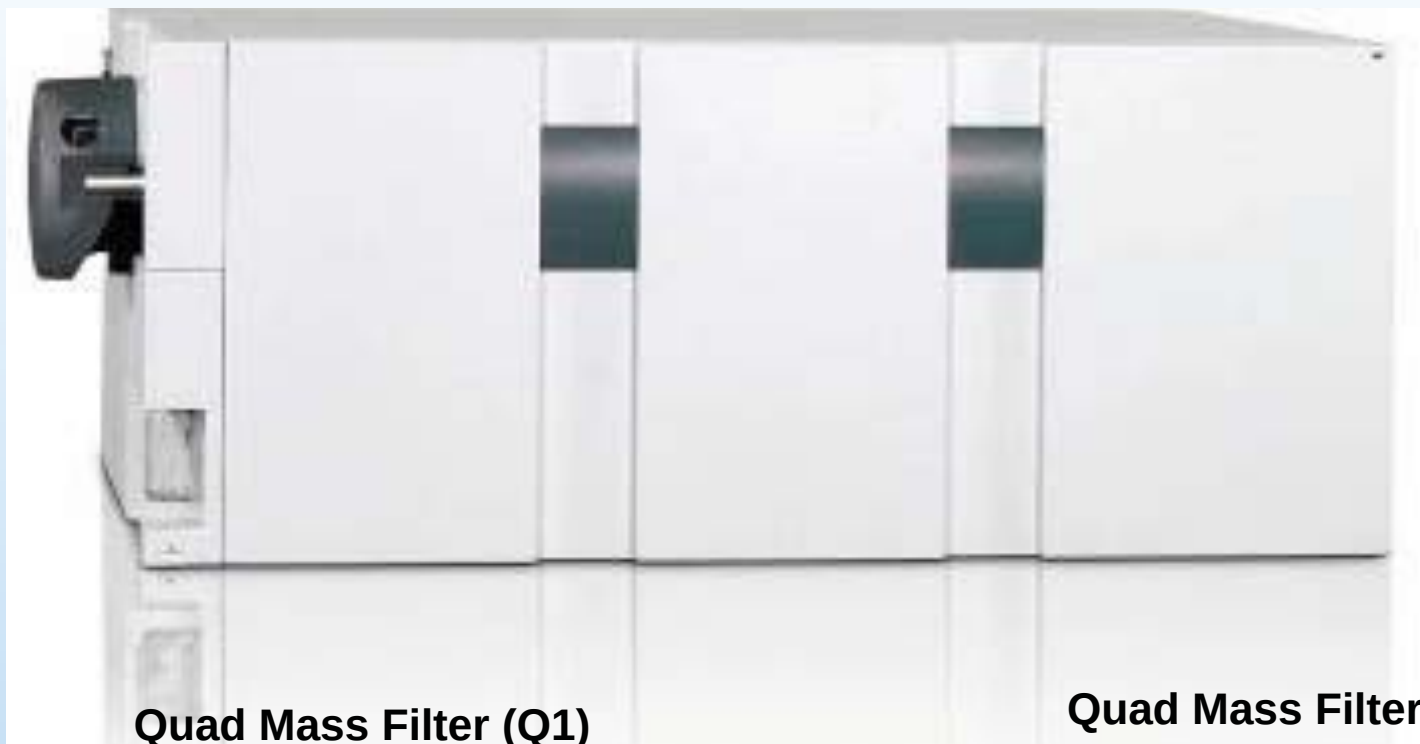


Скрининг нелетучих и термически неустойчивых пестицидов с использованием тандемной масс- спектрометрии (QQQ)



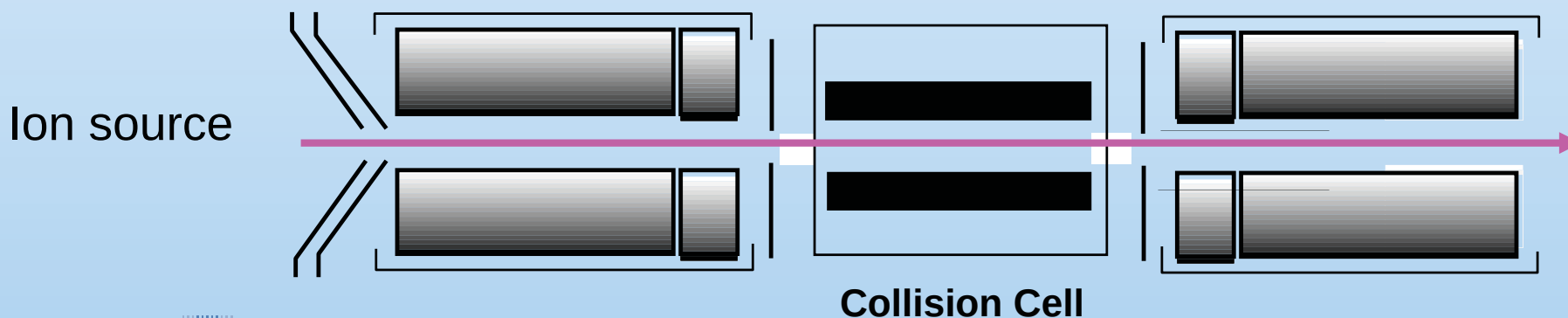
INTERLAB

Тройной квадруполь для ВЭЖХ



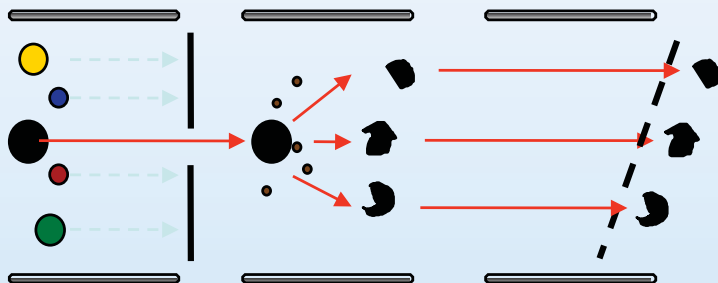
Quad Mass Filter (Q1)

Quad Mass Filter (Q3)



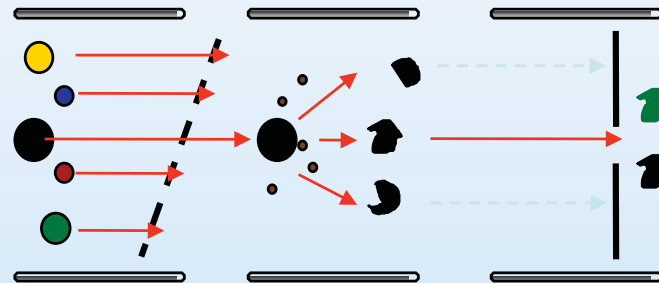
Режимы работы Agilent 6410 QQQ

сканирование дочерних ионов



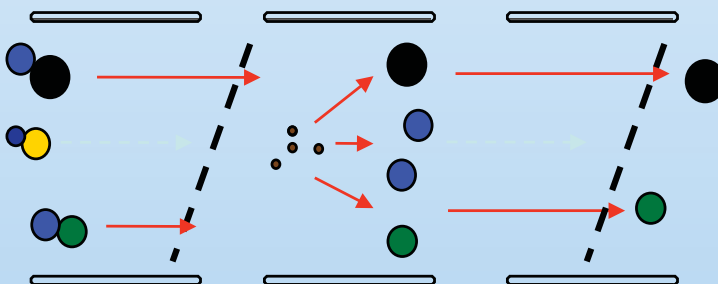
выбор иона-прекурсора
сканирование дочерних ионов

сканирование ионов-прекурсоров



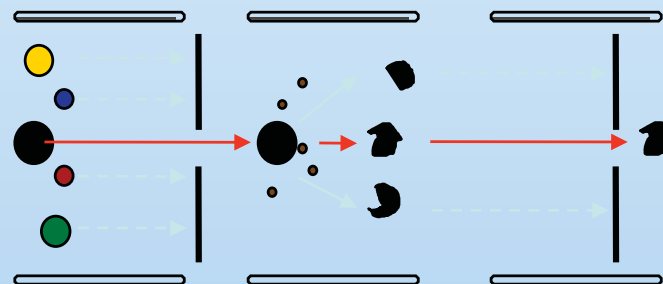
сканирование иона-прекурсора
выбор дочернего иона

сканирование Neutral Loss



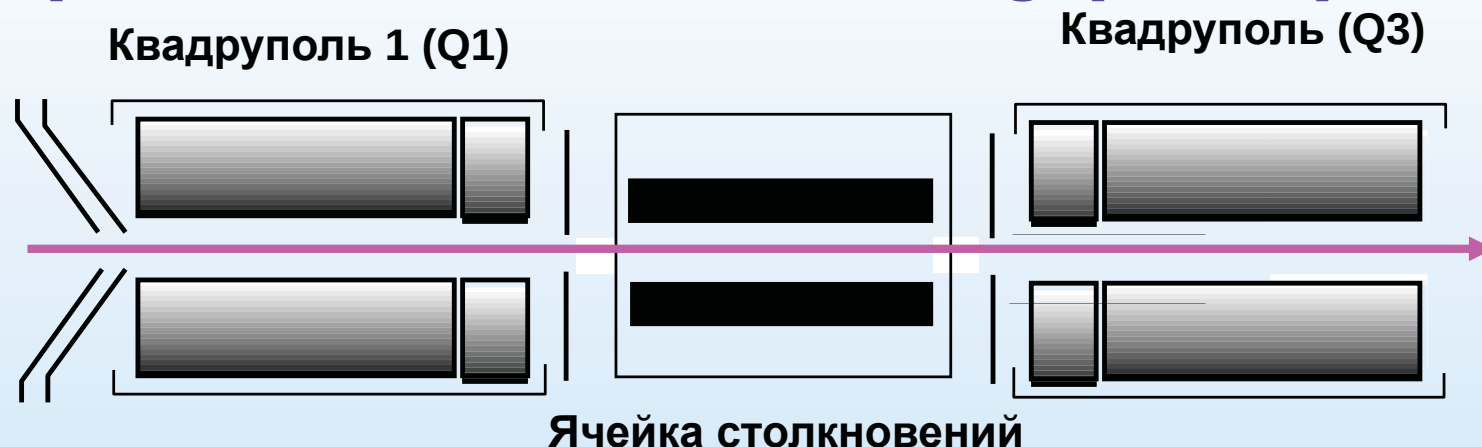
фиксированная разница в диапазоне
сканирования между Q1 и Q2

Multiple Reaction Monitoring (MRM)

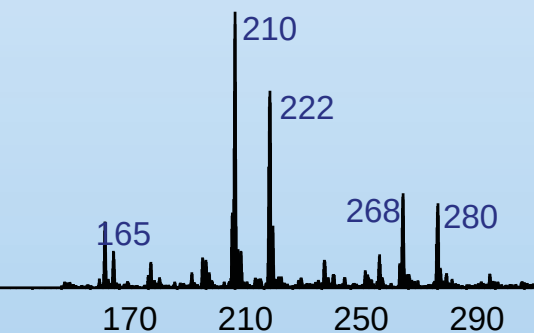


выбор иона-прекурсора
выбор дочернего иона

Multiple Reaction Monitoring (MRM)



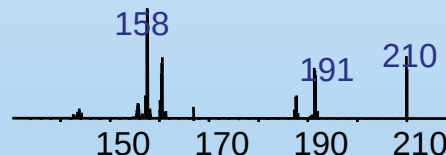
Масс-спектр с
фоном (ESI)



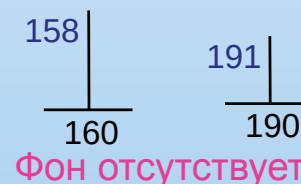
Q1 пропускает
только ион
210



Ион 210
разбивается в
ячейке
столкновений

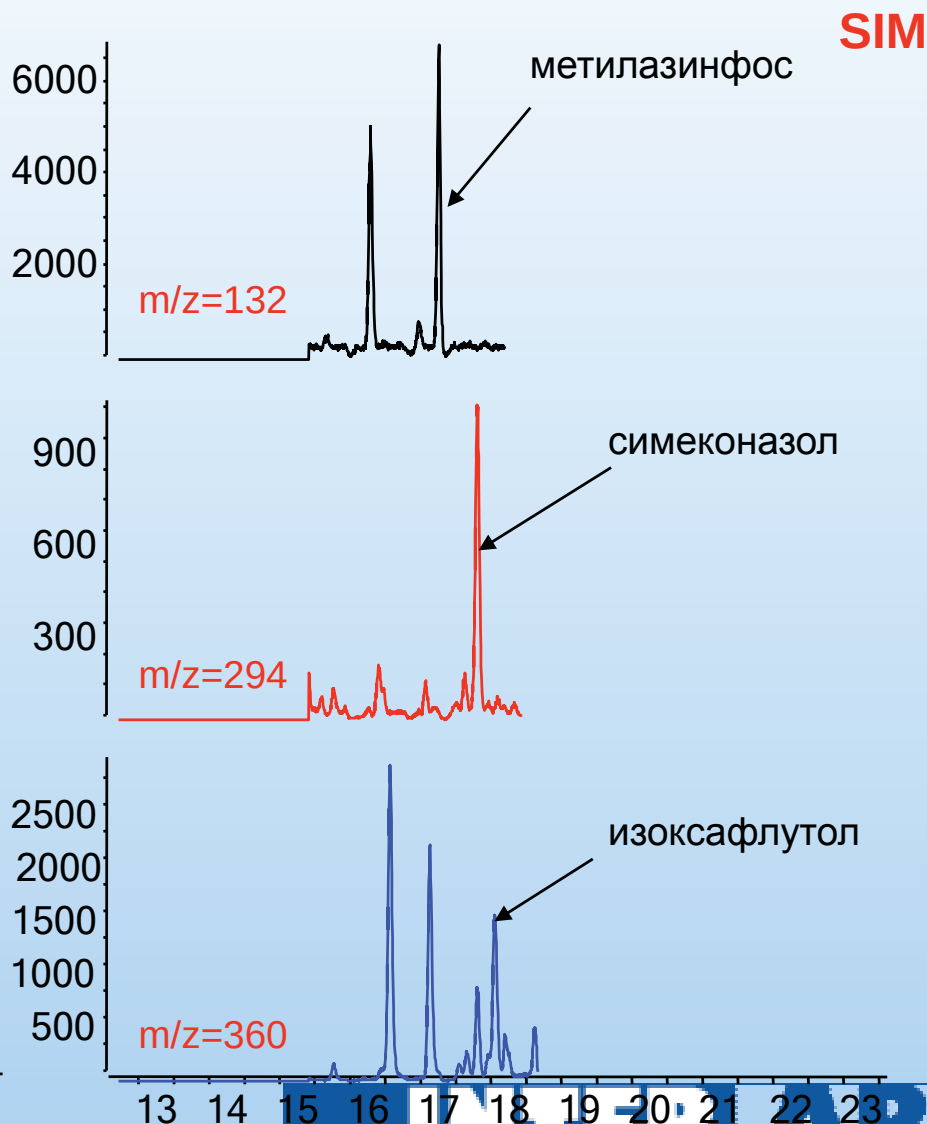
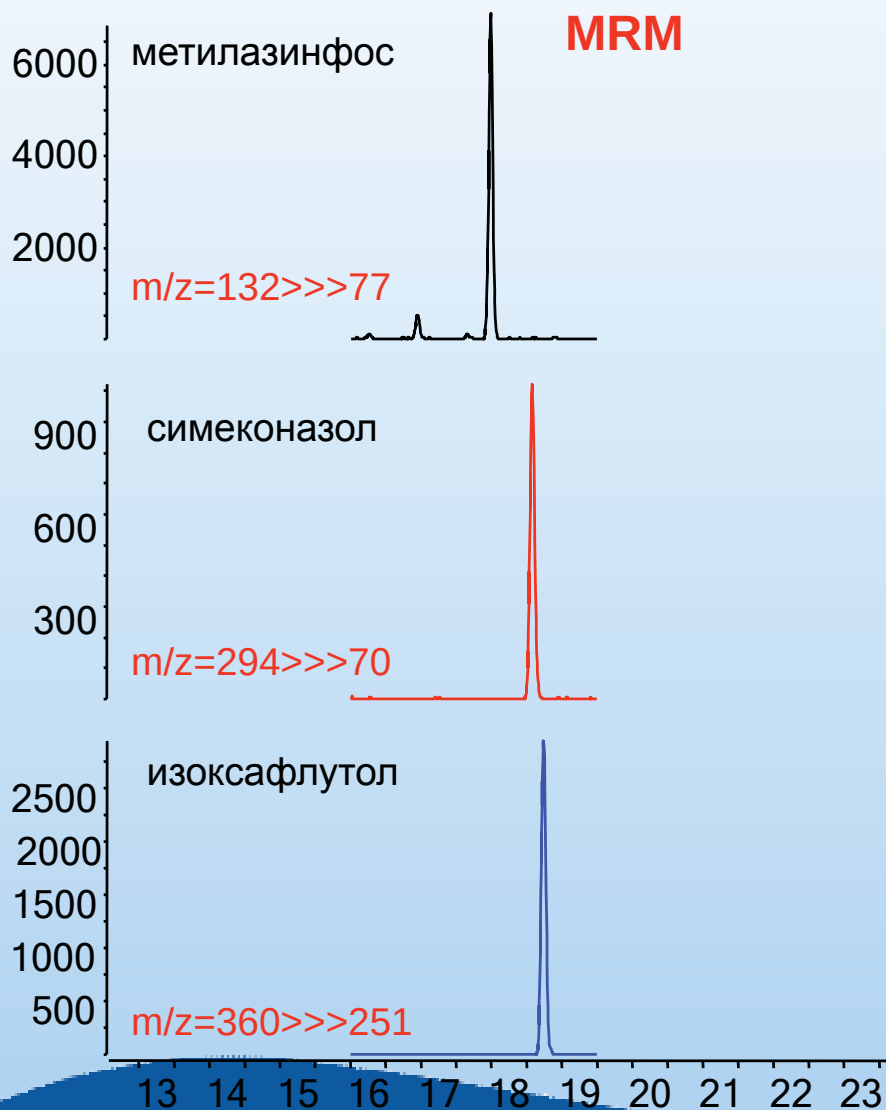


Q3 пропускает
лишь
характеристичные
ионы 158 и 191 от
210



INTERLAB

Сравнение MRM и классического SIM (пестициды в апельсиновом соке)



Метод протестирован более чем на 300 пестицидах

3,4,5-Trimethacarb	Benalaxyl	Carbofuran	Cycloate
3-Hydroxycarbofuran	Bendiocarb	Carboxin	Cymoxanil
Acephate	Benfuracarb	Carfentrazone-ethyl	Cyproconazole
Acetamiprid	Bensulfuron-methyl	Chlorbromuron	Cyprodinil
Acetochlor	Benzoximate	Chlorfenvinphos	Cyromazine
Acibenzolar-S-methyl	Bifenox	Chlorfluazuron	Daminozide
Aclonifen	Bitertanol	Chloridazon	Deethylatrazine
Alachlor	Bromacil	Chlorotoluron	Deethylterbuthylazine
Aldicarb	Bromoxynil	Chloroxuron	Deisopropylatrazine
Aldicarb Sulfone	Bromuconazole 1	Chlorpropham	Demeton-S-methyl-sulfone
Aldicarb Sulfoxide	Bromuconazole 2	Chlorpyrifos methyl	Desmedipham
Aldoxycarb	Bupirimate	Chlorsulfuron	Diazinon
Ametryn	Buprofezin	Cinosulfuron	Dichlofenthion
Aminocarb	Butocarboxim	Clethodim	Dichlofluanid
Anilazine	Butocarboxim-sulfoxide	Clodinafop-propargyl	Dichlorvos
Atrazine	Buturon	Clofentezine	Diclobutrazol
Azamethiphos	Butylate	Clomazone	Diethofencarb
Azinphos-ethyl	Carbaryl	Cloquintocet-mexyl	Difeconazole-1
Azinphos-methyl	Carbendazim	Coumaphos	Difeconazole-2
Azoxystrobin	Carbetamide	Cyanazine	Difenoxuron

Метод протестирован более чем на 300 пестицидах

Diflubenzuron	Ethofumesate	Fenuron	Haloxypop-methyl
Diflufenican	Ethoprophos	Fipronil	Heptenophos
Dimefuron	Ethoxyquin	Flam prop-isopropyl	Hexaconazole
Dimethachlor	Etrimfos	Flam prop-methyl	Hexaflumuron
Dimethenamid	Famoxadone	Flazasulfuron	Hexazinone
Dimethoate	Fenamiphos	Fluazifop-P-butyl	Hexythiazox
Dimethomorph 1	Fenarimol	Flufenacet	Hydroxyatrazine
Dimethomorph 2	Fenazaquin	Flufenoxuron	Imazalil
Diniconazole	Fenbuconazole	Fluodioxinil	Imazapyr
Diphenylamine	Fenfuram	Fluometuron	Imazaquin
Disulfoton	Fenhexamid	Fluoroglycofene-ethyl	Imidacloprid
Diuron	Fenobucarb	Fluoroxypyr	Indoxacarb
Dodemorph	Fenoxaprop-ethyl	Flurtamone	Ioxynil
EPN	Fenoxycarb	Flusilazole	Iprodione
Epoxiconazole	Fenpiclonil	Flutriafol	Iprovalicarb
Ethiofencarb	Fenpropathrin	Folpet	Irgarol
Ethiofencarb sulfone	Fenpropidin	Fonofos	Irgarol Metabolite
Ethiofencarb sulfoxide	Fenpropimorph	Formetanate	Isazofos
Ethion	Fenthion 1	Fuberidazole	Isofenphos
Ethirimol	Fenthion 2	Furathiocarb	Isoproturon

INTERLAB

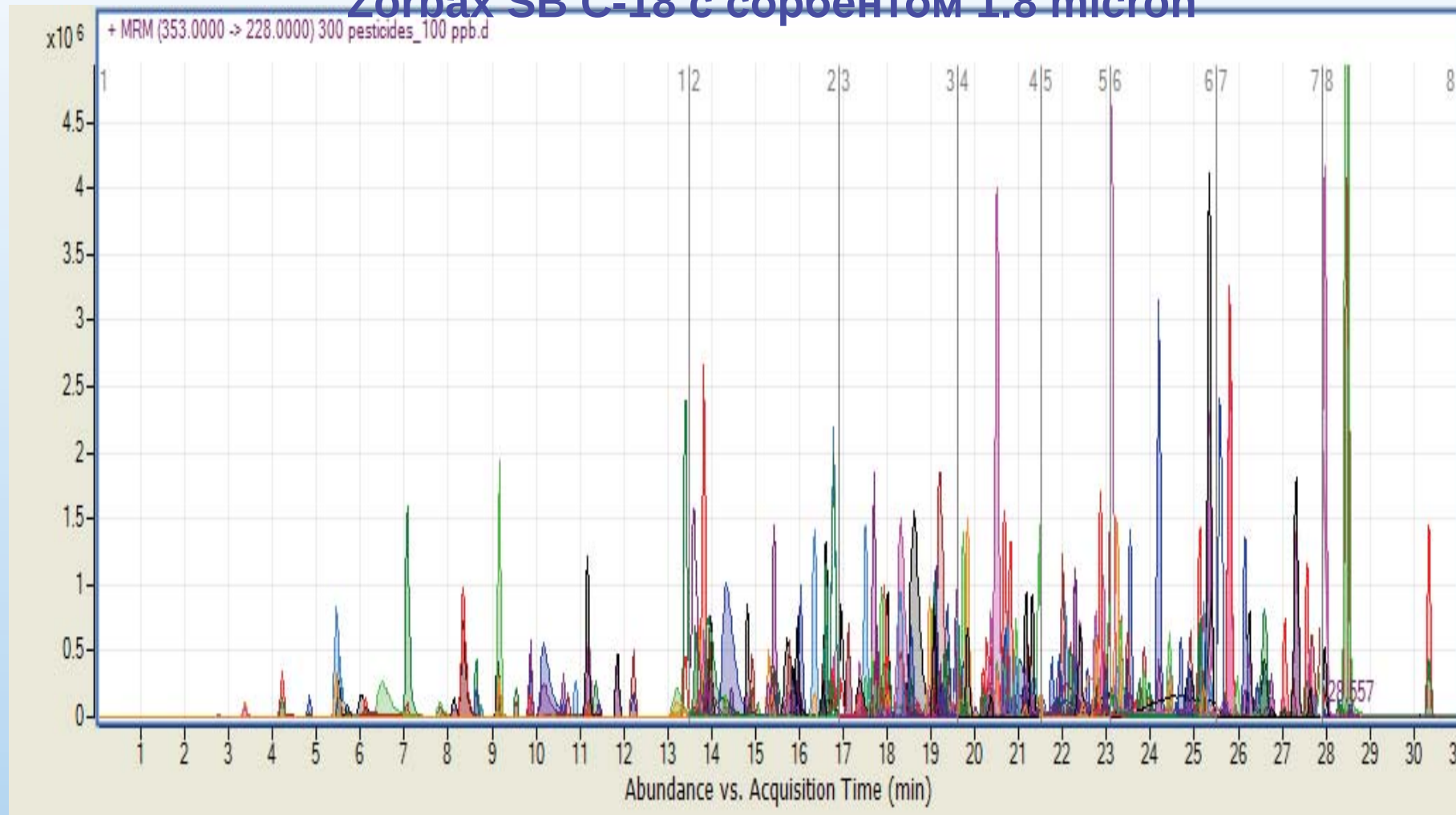
Параметры хроматографического разделения

- Колонка Zorbax SB C18 4.6 x 150 mm (1.8 μ m)
- Элюент 10% ACN и 90% H₂O с 0.1% HCOOH
- Градиент от 10% ACN до 98% ACN за 28 минут, затем до 100% ACN до 30 минут и 100% ACN удерживается до 31 минуты
- Скорость потока 0.6 mL/min
- Давление 350 bar.
- Температура колонки 25 °C.
- Объем вводимой пробы 10 μ L.

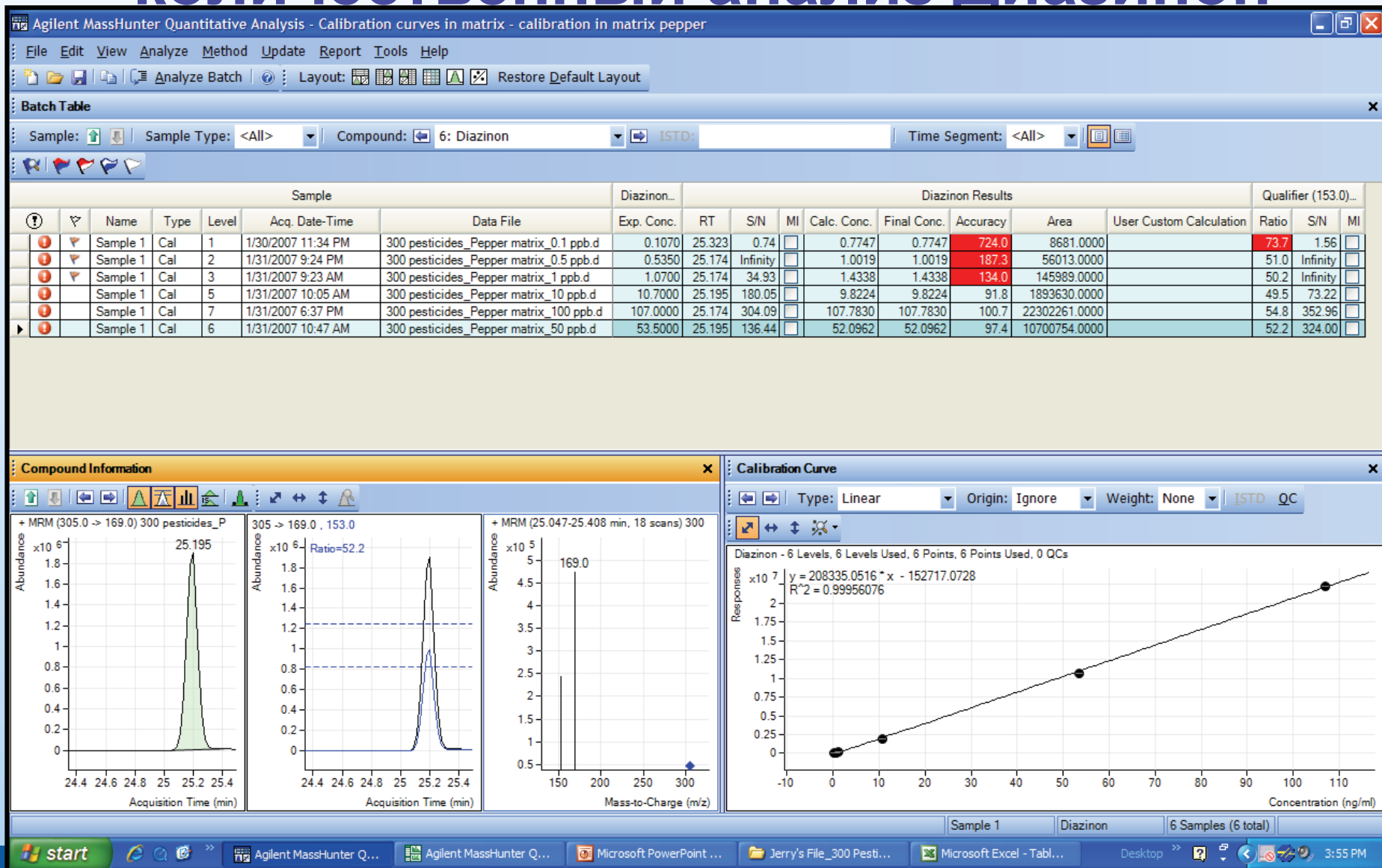
Параметры масс-спектрометрического детектирования для QQQ-LC/MS

- **Способ ионизации** Electrospray с детектирование положительных ионов, напряжение на ESI 4000v.
- **Температура интерфейса** 300 °C.
- **Поток газа** через распылитель 9 L/min и **давление** 40 psi.
- **Время детектирования одного иона** 10 msec и **напряжение на умножителе** на 700 V выше, чем при автонастройке.
- **Временные интервалы MRM сегментов** #1 - 0-13.5 мин, #2 - 13.5-16.9 мин, #3 - 16.9-19.6 мин, #4 - 19.6-21.5 мин, #5 - 21.5-23.1 мин, #6 - 23.1-25.5 мин, #7 - 25.5-27.9 мин, и #8 - 27.9-31 мин.

**MRM-Хроматограмма показывает разделение 301 соединения на
Agilent 1200 HPLC с использованием колонки
Zorbax SB C-18 с сорбентом 1.8 micron**

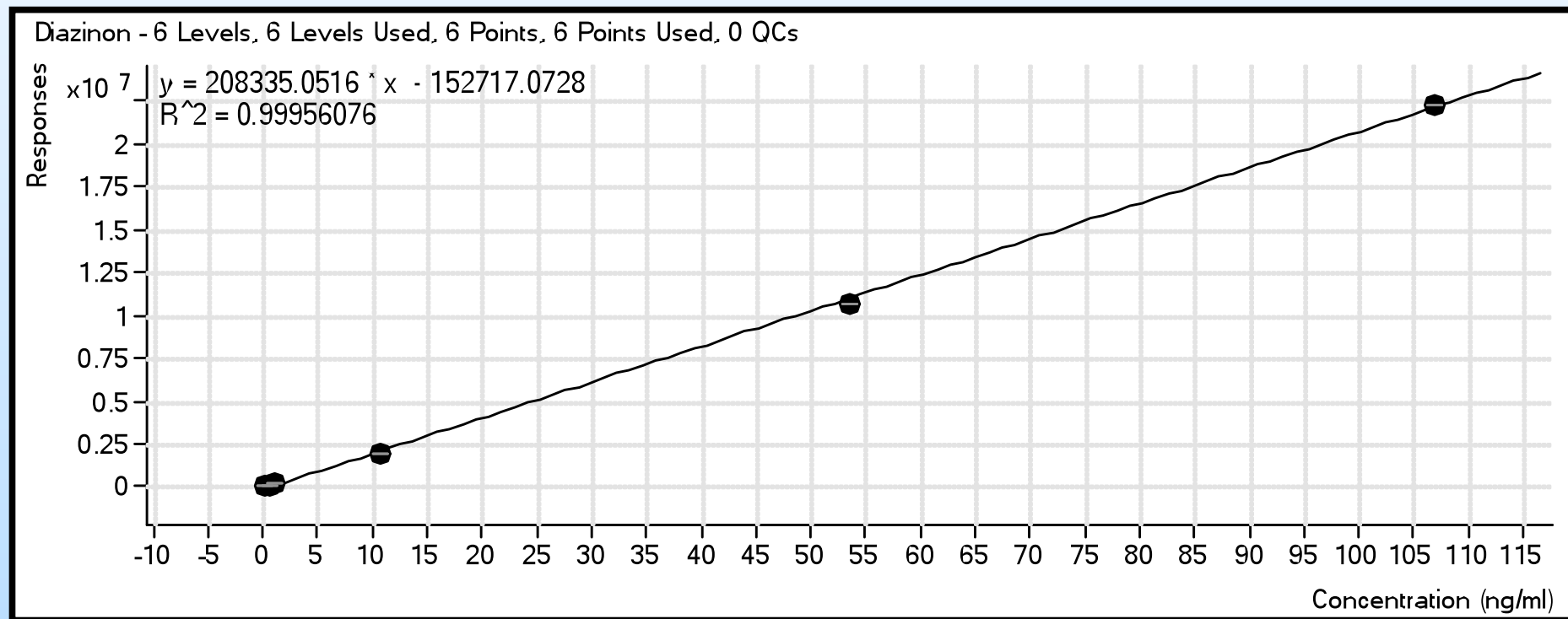


Программное обеспечение MassHunter: количественный анализ Диазинов



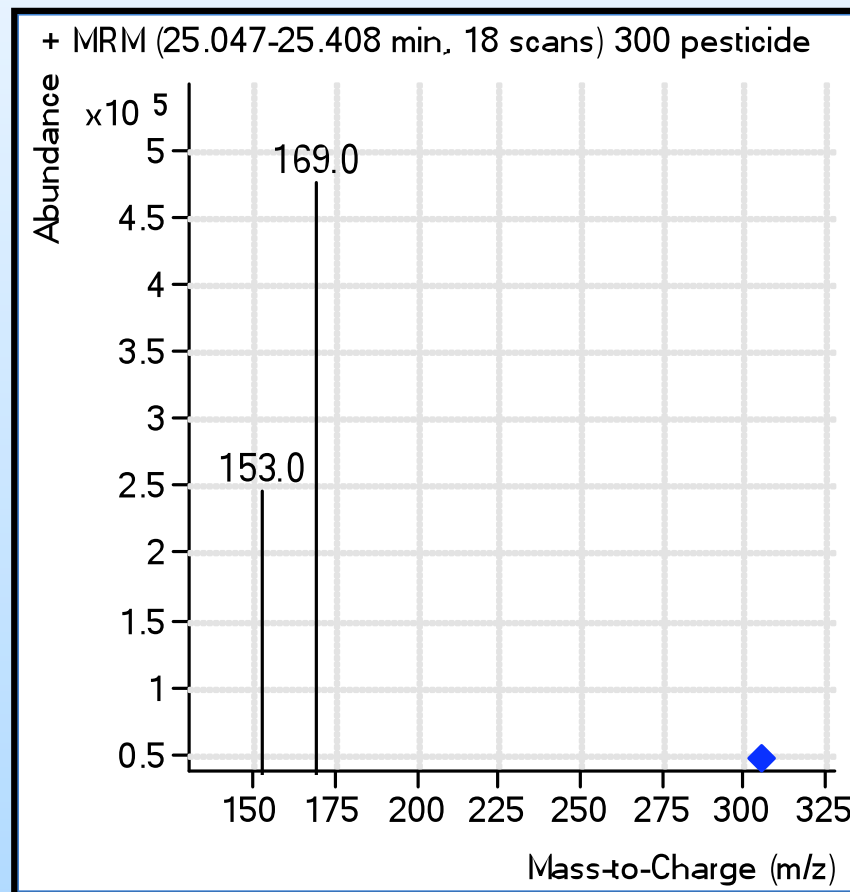
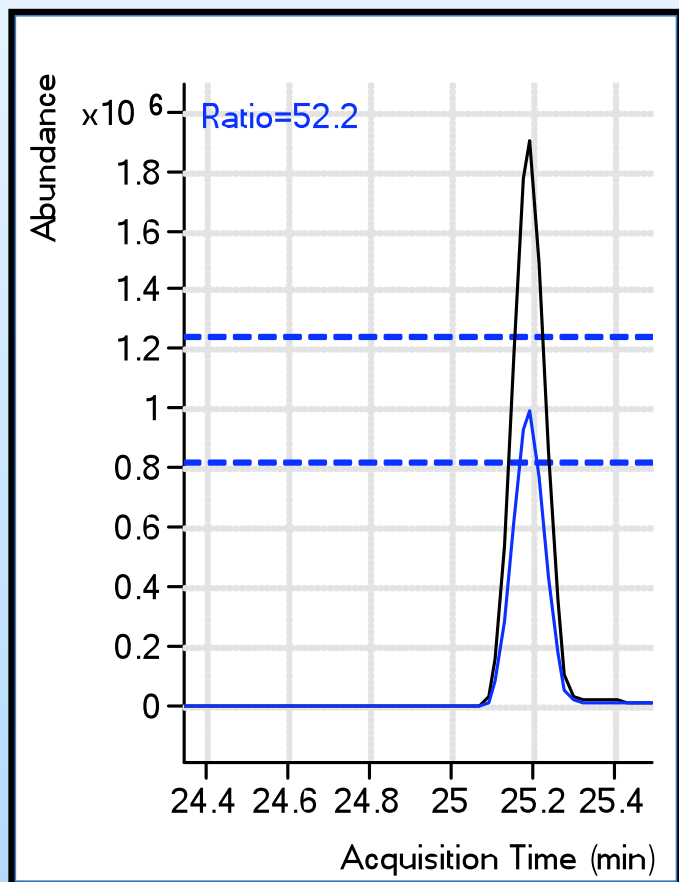
Диазинон в перце

Калибровочная кривая



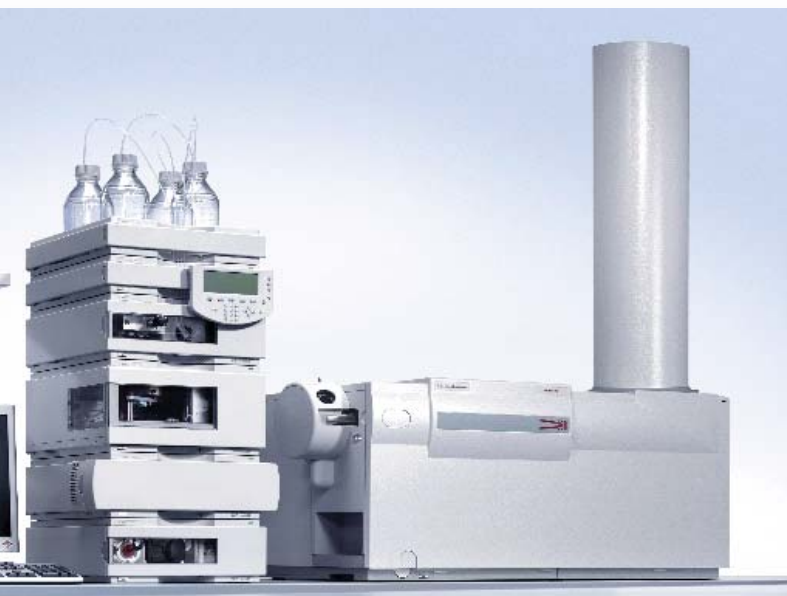
Диазинон в перце

Масс-спектр и соотношение основного и подтверждающего ионов



Анализ пестицидов методом ВЭЖХ и танDEMной масс-спектрометрии (HPLC-QQQ-MS)

- 279 соединений обнаруживаются методом HPLC-QQQ-MS с пределом обнаружения 0.010 мкг/кг (10 ppb), что соответствует европейским нормам для детского питания.
- Пределы обнаружения для Agilent 6410 QQQ составляют от 1 до 10 pg для более чем 50% нормируемых соединений и 100 pg для 90% таких соединений.
- Такие пределы обнаружения позволяют поместить прибор в тройку самых чувствительных приборов, основываясь на литературных данных.



Скрининг пестицидов с использованием масс-спектрометрии высокого разрешения (LC/MS TOF)



INTERLAB

Скрининг пестицидов с использованием масс-спектрометрии высокого разрешения (LC/MS TOF)

- Точная молекулярная масса увеличивает селективность
- Высокое разрешение позволяет удалять молекулярные наложения
- Всегда имеются данные полного сканирования
- Неограниченное количество анализируемых соединений
- Неизвестные и нецелевые соединения могут быть детектированы и идентифицированы



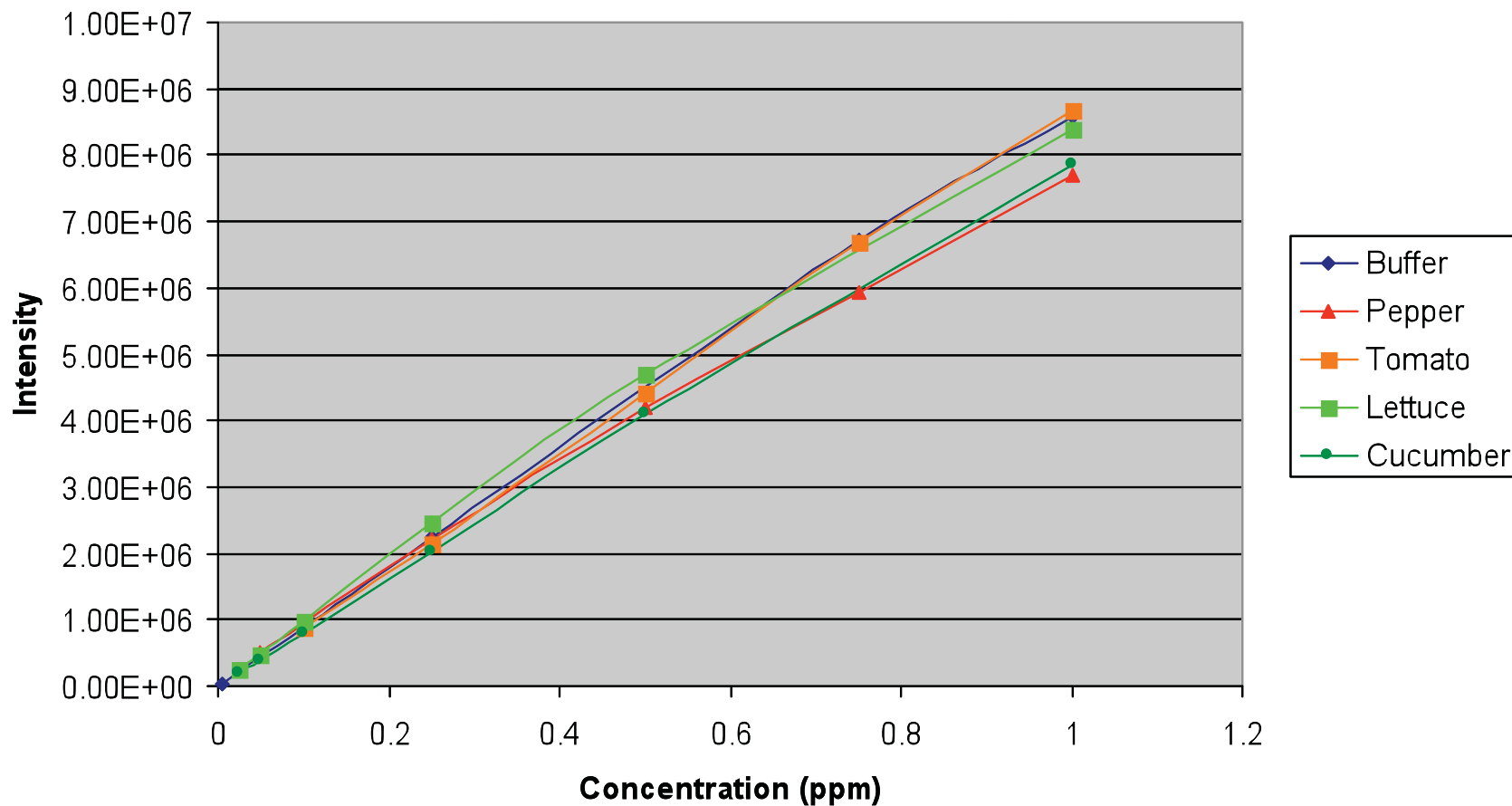
INTERLAB

Скрининг пестицидов с использованием LC/MS TOF

- Протестировано более 100 пестицидов
- Оценена линейность и эффекты матричного подавления
- Создана и успешно используется база данных более 600 соединений
- При поиске используется точная молекулярная масса

Эффекты матричного подавления LC/MS TOF

Сравнение различных матриц для Имидаклоприда



INTERLAB



Table 3
LC-TOF-MS accurate mass measurements in a tomato extract fortified with the pesticide mixture

Compound	Formula	Retention time	Selected ion	m/z experimental	m/z calculated	Error	
						mDa	ppm
Cyromazine	$C_6H_{10}N_6$	3.2	$[M+H]^+$	167.1040	167.10397	0.029	0.17
Carbendazim	$C_9H_9N_3O_2$	6.1	$[M+H]^+$	192.0767	192.07675	-0.05	0.27
Thiabendazole	$C_{10}H_7N_3S$	7.5	$[M+H]^+$	202.0430	202.04334	-0.34	1.7
Methomyl	$C_5H_{10}N_2O_2S$	12.3	$[M+Na]^+$	185.0355	185.03552	-0.02	0.11
Imidacloprid	$C_9H_{10}N_5O_2Cl$	15.7	$[M+H]^+$	256.0597	256.05957	0.12	0.47
Acetamiprid	$C_{10}H_{11}N_4Cl$	16.6	$[M+H]^+$	223.0742	223.07450	-0.3	1.3
Thiacloprid	$C_{10}H_9N_4ClS$	17.7	$[M+H]^+$	253.0308	253.03092	-0.12	0.48
Spinosyn A	$C_{41}H_{65}NO_{10}$	20.9	$[M+H]^+$	732.4668	732.46812	-1.32	1.81
Spinosyn D	$C_{42}H_{67}NO_{10}$	21.9	$[M+H]^+$	746.4832	746.48377	-0.57	0.77
Dimethomorph	$C_{21}H_{22}NO_4Cl$	22.8	$[M+H]^+$	388.1310	388.13101	-0.01	0.03
Azoxystrobin	$C_{22}H_{17}N_3O_5$	24.3	$[M+H]^+$	404.1243	404.12409	0.20	0.50
Triflumizol	$C_{15}H_{15}N_3OF_3Cl$	25.9	$[M+H]^+$	346.0925	346.09285	-0.35	1.0
Hexaflumuron	$C_{16}H_8N_2O_3F_6Cl_2$	27.2	$[M+H]^+$	460.9885	460.98889	-0.39	0.85
Teflubenzuron	$C_{14}H_6N_2O_2F_4Cl_2$	27.6	$[M+H]^+$	380.9816	380.98152	0.077	0.20
Lufenuron	$C_{17}H_8N_2O_3F_8Cl_2$	28.6	$[M+H]^+$	510.9854	510.98570	-0.30	0.58
Flufenoxuron	$C_{21}H_{11}N_2O_3F_8Cl$	29.2	$[M+H]^+$	489.0440	489.04351	0.49	1.0

Concentration, 0.05 mg/kg.

CSV file for 100 Compound Data Base

67	C10H19N5	20.3	241.1361163	Prometryn	
68	C9H10N2O	23.8	248.011933	Linuron	
69	C14H21NO	29	251.1338365	Prosulfocarb	
70	C10H9N4S	18.3	252.0236447	Thiacloprid	
71	C11H19N5	21.2	253.13557	Irgarol	
72	C7H5N2O3	19.2	253.9661257	Fluroxypyr	
73	C9H10N5O	16	255.0523023	Imidacloprid	
74	C11H10N2	14.6	256.0170184	Imazalil Degradate	
75	C11H15NO	15.2	257.0721787	Ethiofencarb sulfone	
76	C11H15NO	17.7	257.0721787	Methiocarb sulfone	
77	C9H11N2O	22.1	258.0003902	Metobromuron	
78	C9H13N2O	18.5	260.0160403	Bromacil	
79	C13H15N3	13.7	261.1113414	Imazapyr	
80	C12H15N3	18.1	265.0884974	Albendazole	
81	C14H20NO	26.1	269.1182566	Acetochlor	
82	C10H13N	26.1	147.1042509	Acetochlor Fragment Ion	
83	C14H20NO	26.1	269.1182566	Alachlor	
84	C11H15N	26.1	161.119901	Alachlor Fragment Ion	
85	C11H15N4	11.9	270.0878	Nitenpyram	
86	C7H3NOB	21.7	274.8581389	Bromoxynil	
87	C12H18NO	24.3	275.0746772	Dimethenamide	
88	C14H18N2	19.1	278.1266	Oxadixyl	
89	C12H14N2	19.1	218.105	Oxadixyl Fragment Ion	
90	C15H21NO	21.5	279.1470582	Metalaxyl	
91	C13H19N3	30.2	281.1375561	Pendimethalin	
92	C8H9N3O4	30.2	211.0587573	Pendimethalin Fragment Ion	
93	C15H22NO	25.9	283.1339067	Metolachlor	
94	C16H18N2	21.6	286.1317425	Difenoxuron	
95	C12H21N2	21.1	288.1238937	Diazoxon	
96	C15H15N2	23.6	290.0822054	Chloroxuron	
97	C10H14NO	27.3	291.033	Parathion Ethyl	
98	C15H18N3	23.6	291.1138399	Cyproconazole	
99	C9H10N2O	24.01	291.9614179	Chlorbromuron	
100	C16H13N3	18.4	295.0956913	Mebendazole	
101	C14H14N2	18.1	296.0483185	Imazalil	
102	C18H35NO	19.7	297.2668	SPIROXAMINE	
103	C9H8N2O4	24.4	299.0344	Carbaryl	

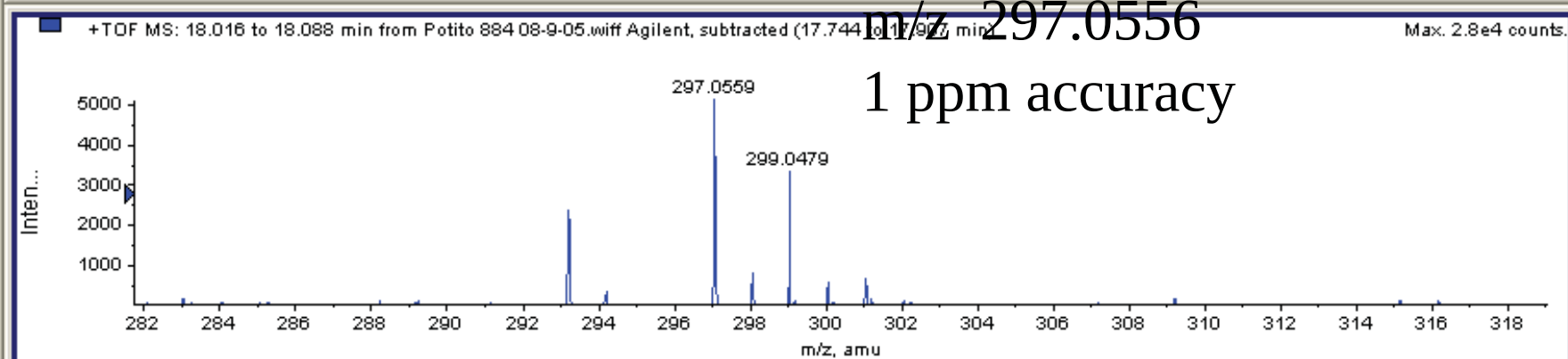
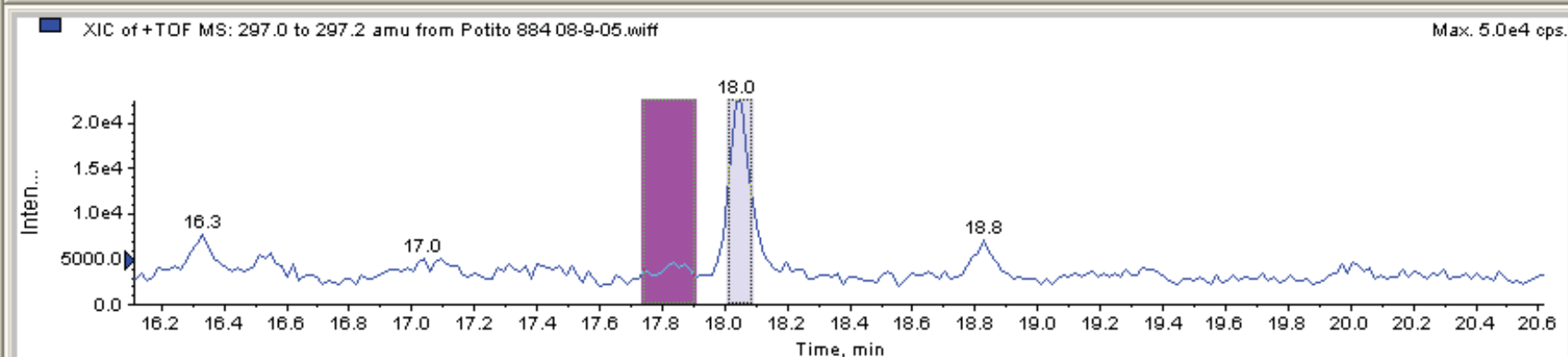
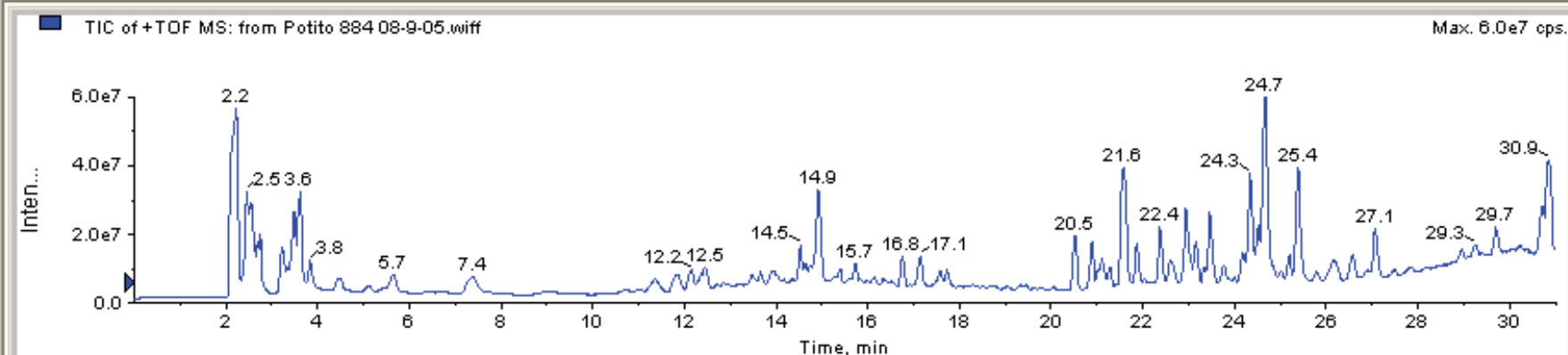
Fragment Ion



Pesticide_dbase_100_Agilent/

INTERLAB

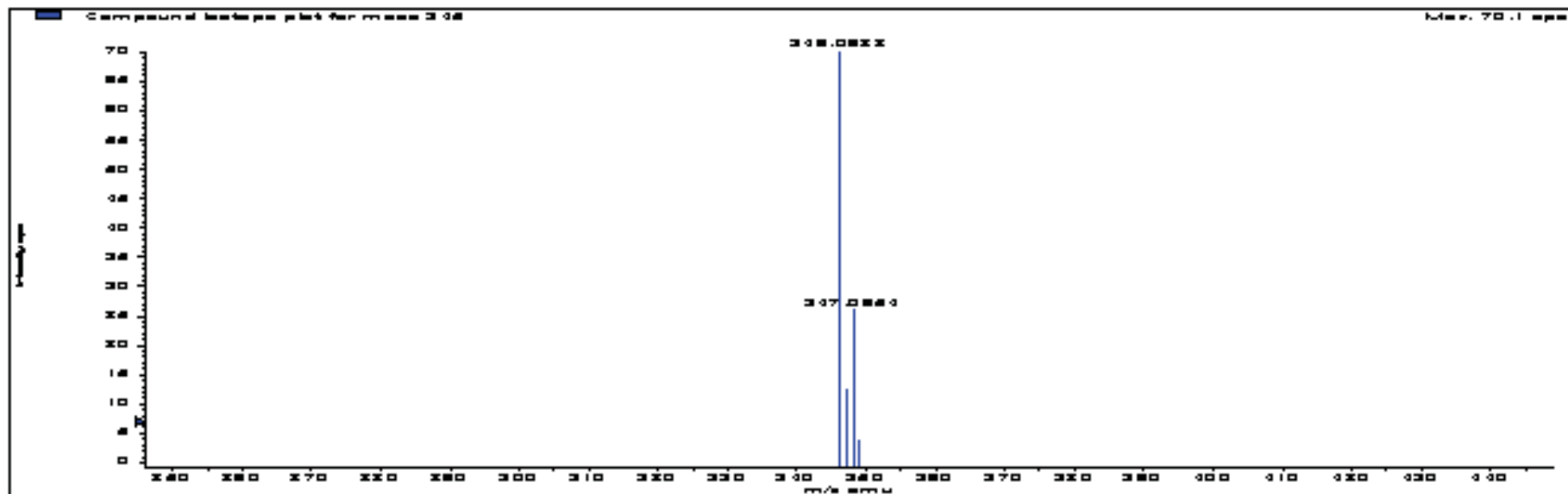
Имазалил в детском питании: Груша, апельсин и банан, содержание 25 pg!



Трифлумизол в перечном экстракте



Трифлумизол в перечном экстракте



Experiment#: 1 Compound#: 327 Mass : 345.08553

Mass Value = 345.08553

Fungicide

#	Formula	Compound	Mass	Error (mDa)	* Error (ppm)	Ret. Time Error	Description
1	C15H15N3OCIF3	Triflumizol	345.08557	-0.04	-0.1	-0.02	

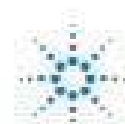
Пример отчета по поиску вещества в сложной матрице
по базе точных молекулярных весов

INTERLAB

Итоги

- Лучший показатель чувствительности среди TOF приборов
- Высочайшие показатели точности определения масс в MS и MS/MS режимах (!!!)
- Точность определения масс дочерних ионов (MS/MS режим), не превышающая 2 ppm, снижает количество ложноположительных идентификаций белков по пептидам примерно вдвое
- Широчайший выбор источников ионизации
- Программное обеспечение создано для быстрой обработки масс-спектрометрических данных высокого разрешения
- Непревзойденная надежность приборов Agilent Technologies

Спасибо за внимание!



Agilent Technologies

Authorized Distributor

По всем вопросам обращаться в ООО «Химмед»

Адрес: 115230, г.Москва, Каширское шоссе, д.9, корп.3

Тел.: (495) 728-4192, 742-8265/66, (499) 613-2964,

Факс: (495) 742-8341

E-mail : mail@chimmed.ru

www.chimmed.ru

**All the performance.
All the time.**



Introducing the all new Agilent 1200 Series LC and 6000 Series LC/MS systems.

INTERLAB