Agilent 7250 GC/Q-TOF

BETRACHTEN SIE DAS GANZE

Agilent Technologies

BETRACHTEN SIE DAS GANZE

Das neue Agilent 7250 GC/Q-TOF ist optimal für alle anspruchsvollen Identifizierungs-, Quantifizierungs- und Untersuchungssaufgaben in der GC/MS geeignet. Durch die zuverlässige Bestimmung der Bestandteile einer Probe und ihrer jeweiligen Konzentrationen erhalten Sie ein umfassendes und vollständiges Bild – und können so die notwendigen Schlussfolgerungen und Durchbrüche erzielen, um die von Ihrer Organisation gesetzten Ziele zu erreichen. Diese Zuverlässigkeit bei sämtlichen GC/MS-Arbeitsabläufen bietet Agilent mit dem 7250 GC/Q-TOF und der umfassenden MassHunter-Software.

Weniger ist mehr

Von Routine-Arbeitsabläufen für das Screening bis hin zu bahnbrechenden Forschungsprojekten – für Ihre GC/MS-Applikationen ist das Beste gerade gut genug. Ob bei komplexen Metabolomik-Studien, beim Pestizid-Screening in schwierigen Matrizes, bei der Identifikation von Komponenten in Kräuterextrakten oder bei der Untersuchung des Verunreinigungsgrades von Beschickungsgut in der Chemie – moderne Analysegeräte müssen den immer komplexeren Anforderungen in der Wissenschaft gewachsen sein. Das 7250 GC/Q-TOF ist für hervorragende GC/MS-Leistung unter realen Bedingungen konzipiert und für den robusten Betrieb im Labor gebaut und bietet somit genau das, was Ihr Labor braucht: gleichbleibend hervorragende Resultate, jederzeit.

Mit diesem revolutionären All-in-One-GC/Q-TOF können Sie mit weniger mehr erreichen.

Das Agilent 7250 GC/Q-TOF bietet MEHR:	Das bedeutet für Sie WENIGER:
Empfindliche Detektionen	Sorgen bezüglich zukünftiger Vorschriften
Genaue Quantifizierungen	Unsicherheit bei Ergebnissen
Aufwand für Untersuchungen	Echte unbekannte Strukturen
Vereinfachte Spektren	Zeit für die Datenauswertung
Reproduzierbare Daten	Uneindeutige Wiederholungsanalysen

„Die Geräte von Agilent sind für unser Labor aus drei Gründen besonders nützlich: Sie sind zuverlässig, genau und benutzerfreundlich.“

– **MIKE THURMAN, PHD,** CENTER FOR ENVIRONMENTAL MASS SPECTROMETRY, UNIVERSITY OF COLORADO, USA

Vertrauen Sie den Experten

Seit mehr als 40 Jahren unterstützt Agilent die unterschiedlichsten Labore bei der Erfüllung der wachsenden Anforderungen an die Massenspektrometrie. Die sich laufend verändernden analytischen Herausforderungen erfordern neue Ansätze und neue Methoden – und Agilent hat einmal mehr eine Antwort gefunden. Das Agilent 7250 GC/Q-TOF ist für höchste Leistungsfähigkeit über das gesamte analytische Spektrum und für die Lösung der komplexesten Herausforderungen in der GC/MS konzipiert.

Das Gerät ist das neueste und technisch fortschrittlichste GC/Q-TOF in Agilents umfassendem Angebot an Massenspektrometern, mit dem sich praktisch alle Arten von Molekülen und Elementen analysieren lassen. In Agilents Lösungen für die Massenspektrometrie fließen mehr als 40 Jahre kontinuierliche Innovationen ein. Das Ergebnis sind analytische Systeme, die den Standard bei der Zuverlässigkeit, Flexibilität und außergewöhnlichen Leistung setzen.

Identifizieren. Quantifizieren. Vereinfachen. Sehen Sie das Agilent 7250 GC/Q-TOF im Gesamtzusammenhang.

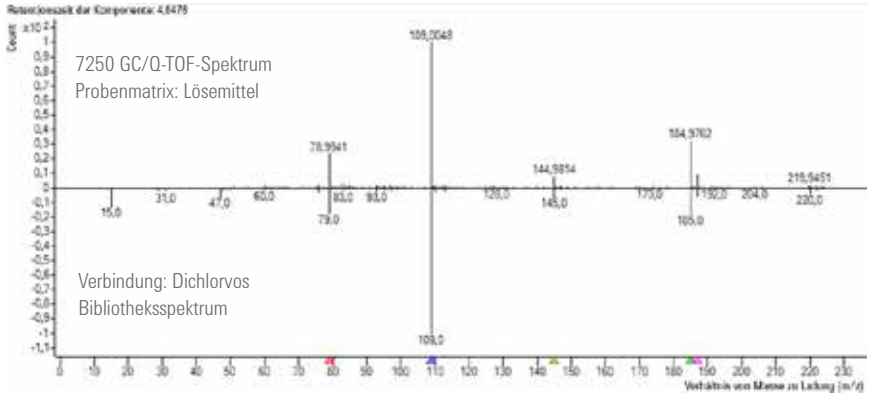
ZUVERLÄSSIGKEIT

Ein unvollständiges Bild der Bestandteile Ihrer Proben kann ernste Folgen für Ihre Forschungs-, Entwicklungs- und QC-Tätigkeiten haben. Echte Zuverlässigkeit ergibt sich aus Erfahrung und Kompetenz. Agilents Erfahrung in der GC/MS sucht ihresgleichen, und durch die analytischen Kapazitäten des 7250 GC/Q-TOF und der MassHunter-Software eröffnen sich für die Identifikation von Verbindungen ungeahnte Möglichkeiten.

- **Spektren in Bibliotheksqualität** – Spektraltreue ohne Verzerrungen ermöglicht die verlässliche Identifikation von Verbindungen mithilfe kommerziellen Spektrenbibliotheken.
- **Isotopengenauigkeit** – Erhaltung der Isotopenmuster bringt höhere Sicherheit bei der Zuordnung von Molekularformeln.
- **Breiter Dynamikbereich im Spektrum** – Der Nachweis von Analyten in Spurenmengen gelingt zuverlässig, auch bei Koelution abundanter Verbindungen.
- **Strukturaufklärung** – MS/MS-Messungen mit hochaufgelösten Accurate-Mass-Produkt-Ionen-Spektren können Strukturinformationen geben, die Selektivität weiter erhöhen und Matrixinterferenzen umgehen.

Übereinstimmung mit Spektrenbibliotheken

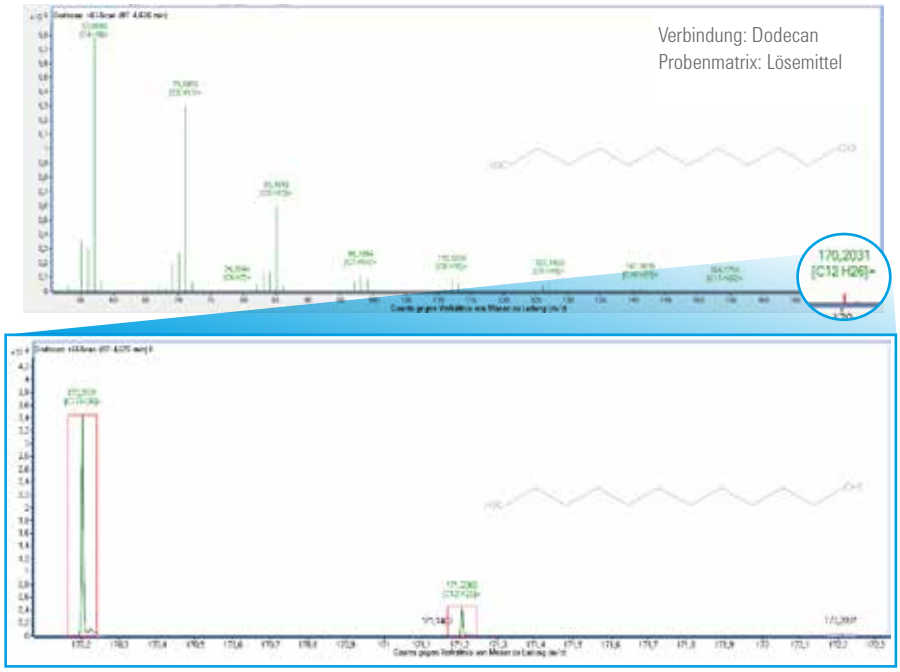
Identifizieren Sie Verbindungen auf einfachste Weise – durch Spektrenvergleich mit kommerziell erhältlichen Bibliotheken. Fragmentierungsmuster, die den Mustern in den Bibliotheken entsprechen, und die Möglichkeit der Aufnahme vollständiger Spektren machen das 7250 GC/Q-TOF zur idealen Plattform für die Substanzidentifizierung durch GC/MS. Das 7250 GC/Q-TOF wurde konzipiert, um die Spektren von hunderttausenden von Verbindungen mit derselben hohen Qualität wiederzugeben, die die entsprechenden Bibliotheksspektren aufweisen, von denen die meisten mit HP bzw. Agilent Quadrupol-GC/MS-Systemen aufgenommen wurden. Das dargestellte Beispiel von Dichlorvos zeigt die hervorragende Spektraltreue und Massengenauigkeit des Geräts.



Isotopengenauigkeit

Höhere Zuverlässigkeit bei der Identifikation von Verbindungen erfordert mehr als hohe Massengenauigkeit. Die Berücksichtigung unabhängiger Verbindungseigenschaften, wie z. B. des Isotopenmusters, ist von entscheidender Bedeutung.

Durch qualitative Analyse mithilfe der MassHunter-Software kann die Isotopengenauigkeit auf einfache Weise dargestellt werden und Informationen liefern, die für eine zuverlässige Identifikation von Verbindungen die exakte Massenbestimmung ergänzen. Das 7250 GC/Q-TOF weist eine hervorragende Isotopengenauigkeit auf, selbst bei Isotopen im Spurenbereich, wie dieses Spektrum für Dodecan mit einem kleinen M^+ Peakcluster zeigt.

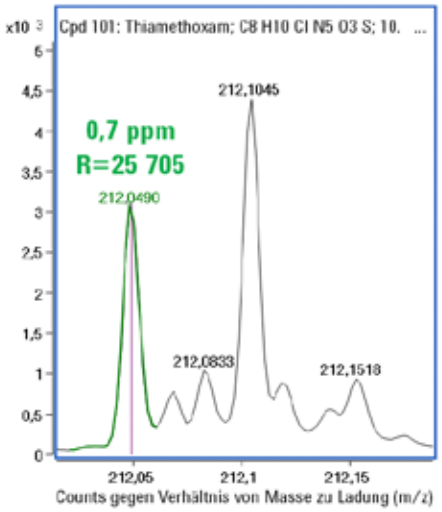


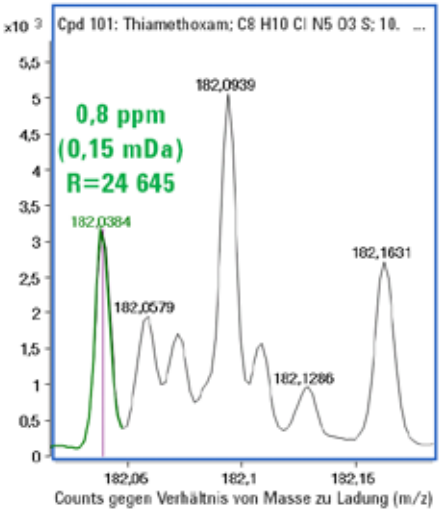
Hochauflösung und Massengenauigkeit

Hochauflösung ist nötig, wenn Analyten von Interferenzen getrennt werden müssen. Um jedoch bestmöglichen analytischen Nutzen zu bieten, muss dieses Leistungsmerkmal unter schwierigen Bedingungen einsetzbar sein, wie z. B. bei komplexen Matrices und Analyten im Spurenbereich.

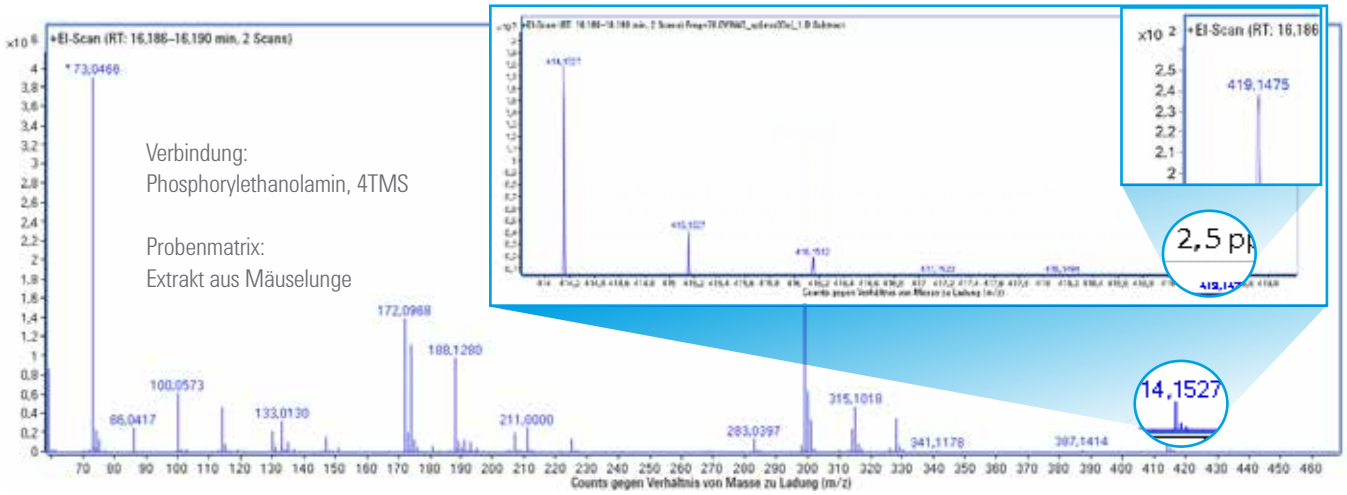
Das hier gezeigte Beispiel illustriert solch ein schwieriges Szenario: die Analyse des Insektizids Thiamethoxam in einer Konzentration von 5 ppb in Avocados, einer komplexen Matrix mit starkem Hintergrund. Selbst unter diesen Bedingungen werden charakteristische Massenpeaks mit einer Massengenauigkeit vom Hintergrund getrennt, die den Anforderungen des Leitfadens SANTE/11945/2015 zur Identifikation von Verbindungen entspricht.

Darüber hinaus lässt sich diese hohe spektrale Leistung unabhängig von der Akquisitionsgeschwindigkeit oder dem Massenbereich erzielen. Das 7250 GC/Q-TOF bietet maximalen verwertbaren Nutzen bei der HRAM und eignet sich daher auch für anspruchsvollste GC/MS-Anwendungen.





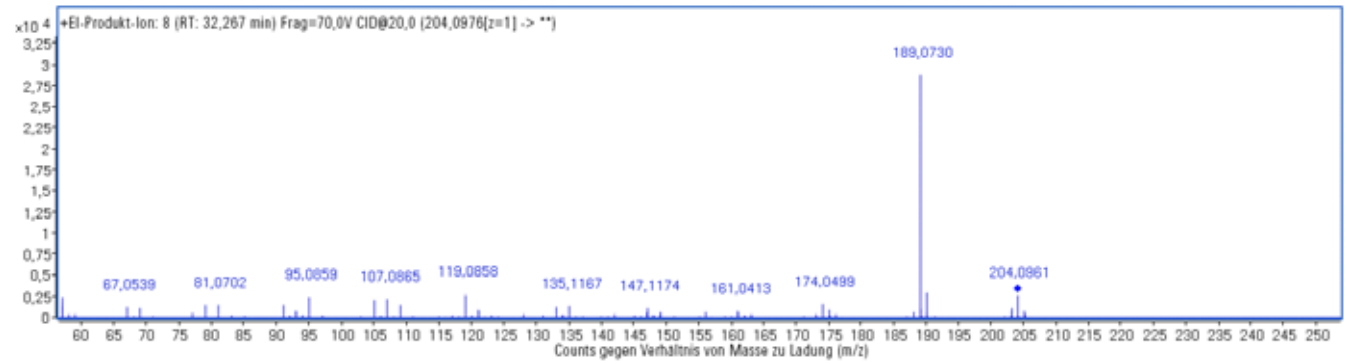
Breiter Dynamikbereich im Spektrum



Der breite Dynamikbereich im Spektrum erlaubt den zuverlässigen Nachweis von Analyten in Spurenmengen auch bei starkem Hintergrund und anderen Koeluenten.

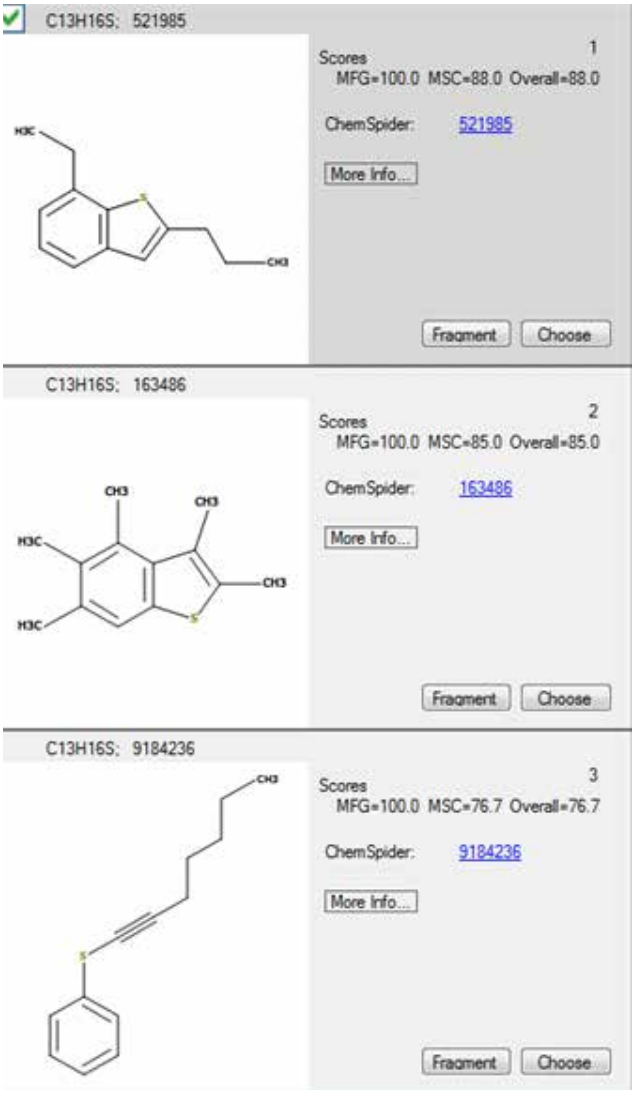
Das 7250 GC/Q-TOF bietet in der Regel einen Dynamikbereich im Spektrum von vier Größenordnungen, selbst bei schwierigen Matrices. Das dargestellte Beispiel zeigt für die identifizierte Verbindung Phosphorylethanolamin (4TMS) in einer komplexen biologischen Probe – einem Extrakt aus Mäuselunge – einen Bereich von 16 000+:1.

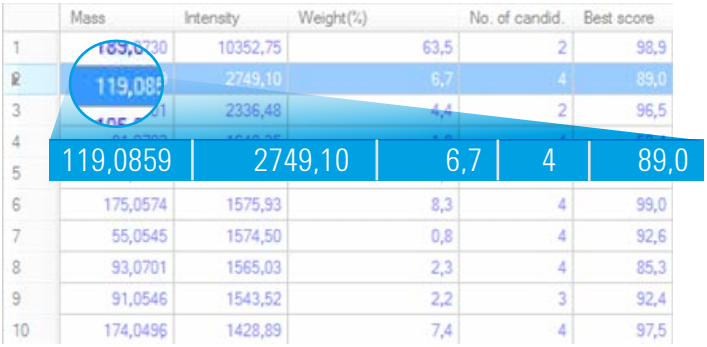
MSC-Arbeitsablauf

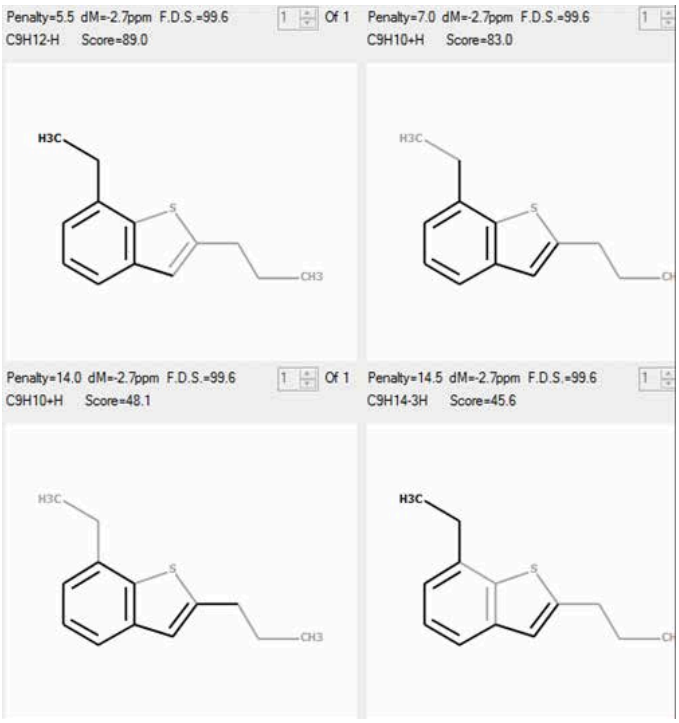


Auf der Grundlage eines MS/MS Produkt-Ionen-Spektrums, das anhand eines mutmaßlichen Molekül-Ions erstellt wurde, kann eine leistungsfähige Molecular Structure Correlator-Software Strukturvorschläge für Verbindungen machen und basierend auf den Fragmentdaten deren Wahrscheinlichkeit angeben.

Verbindungen mit unbekannter Identität oder Struktur können bewertet werden, um den Bereich der Möglichkeiten einzugrenzen.



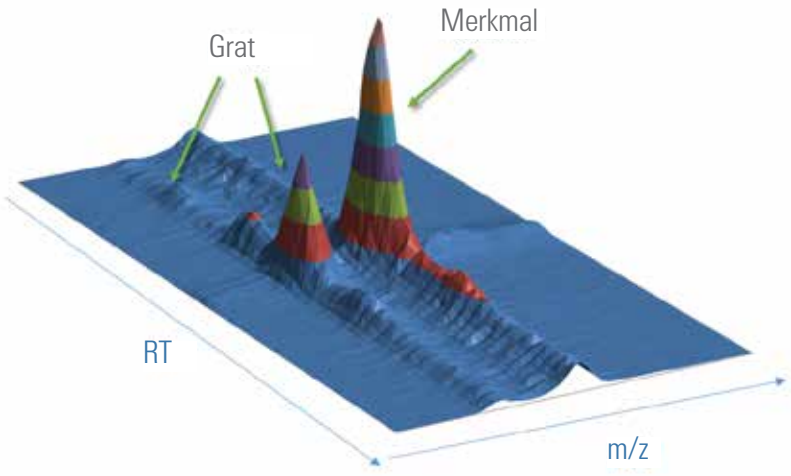




GENAUE QUANTIFIZIERUNGEN

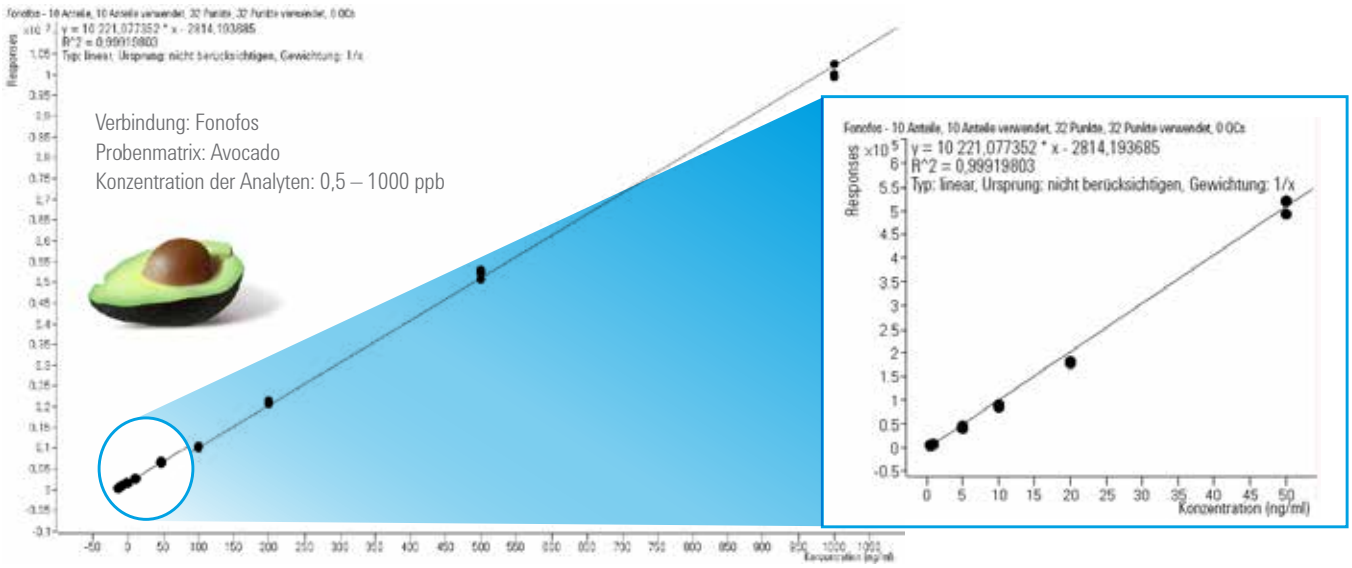
Gezielte Quantifizierung bei ungezielter Aufnahme ist ein leistungsfähiger Ansatz. Dank der Kombination aus überlegener Chromatographie, guter Massenauflösung und einem breiten dynamischen Bereich bietet das Agilent 7250 GC/Q-TOF hohe quantitative Genauigkeit.

- **Erweiterter linearer dynamischer Bereich mit Hochauflösung** – Linearität über einen breiten Konzentrationsbereich bei quantitativen Messungen wird durch modernste Elektronik zur Massentrennung und -detektion ermöglicht.
- **Präzision und Richtigkeit** – Konsistente Response-Faktoren, selbst bei Analyten im Spurenbereich vor einem Hintergrund abundanter Matrix, ergeben hohe Analyseleistung für reale Proben.
- **Chromatographische Kompatibilität** – Schnelle Akquisitionsgeschwindigkeiten plus hochaufgelöste Spektren erlauben die Dekonvolution von schmalen, koeluierenden GC-Peaks – für eine exakte Quantifizierung bei hoher Geschwindigkeit.
- **SureMass** – Optimierte Massengenauigkeit und Signalintensität dank Agilent-eigenem Signalverarbeitungsalgorithmus erleichtern den Nachweis von Verbindungen.



SureMass-Signalverarbeitung

Quantifizierung



Ein breiter linearer dynamischer Bereich gewährleistet Genauigkeit bei der Quantifizierung über einen breiten Konzentrationsbereich. Response-Faktoren werden selbst bei geringen Konzentrationen in einer komplexen Probe beibehalten, wie diese Daten zur Bestimmung von Fonofos in Konzentrationen von 0,5 – 1000 ng/ml in einer Avocado-Matrix zeigen.

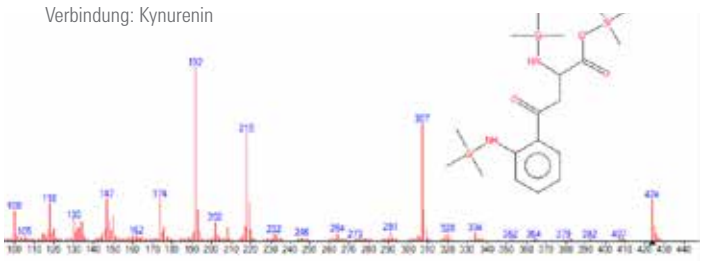
VEREINFACHUNG DER ANALYSE

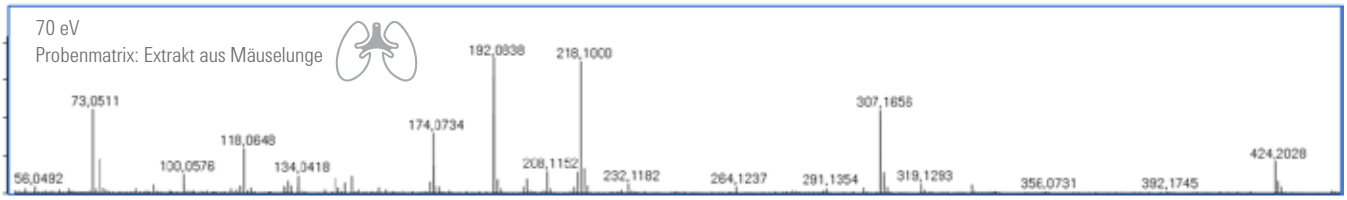
Das einzige hochauflösende GC/Q-TOF der Welt, jetzt mit Niedrigenergie-EI, ermöglicht neue Arbeitsabläufe, die zuvor nicht praktikabel oder unmöglich waren. Auf der Grundlage der revolutionären High Efficiency Source (HES), die sich im Agilent 5977B High-Efficiency Source GC/MSD und im 7010B Triple Quadrupol GC/MS bereits bewährt hat, wurde die EI-Quelle im 7250 GC/Q-TOF für den Betrieb bei niedrigen Energien optimiert und übertrifft immer noch die herkömmliche Ionisation bei 70 eV. Modifikationen am patentierten HES-Design ermöglichen die Verwendung von Niedrigenergie-EI ohne größere Beeinträchtigung der Empfindlichkeit – ein Paradigmenwechsel bei der weichen Ionisation für die GC/MS. Die Aufnahme vereinfachter Spektren ohne Rückgriff auf chemische Ionisierung oder andere spezielle Methoden und unter Beibehaltung der universellen Anwendbarkeit der EI verspricht GC/MS-Laboren neue leistungsfähige Möglichkeiten für die Identifizierung und Aufklärung.

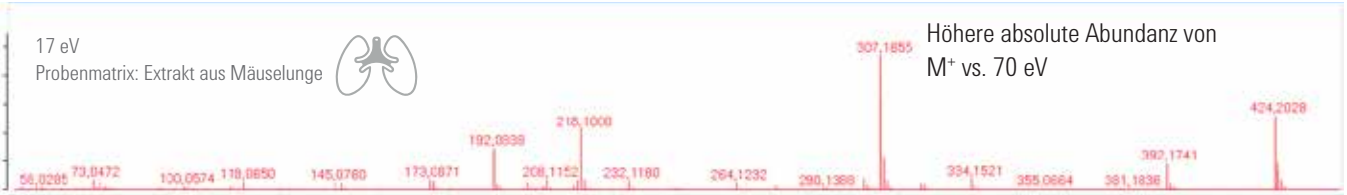
- **Erhaltung des Molekül-Ions** – Erhaltung des Molekül-Ions des Analyten oder Steigerung seines Anteils für zuverlässigere Identifizierung und empfindlichere MS/MS-Experimente (applikationsabhängig).
- **Universelle Anwendbarkeit** – Ionisation über Analytklassen hinweg, die Einschränkungen in Bezug auf Verbindungen und Verluste der analytischen Empfindlichkeit, wie sie häufig bei PCI und anderen Methoden der weichen Ionisation auftreten, zum größten Teil vermeidet.
- **Bewährte Leistung** – Effizienz bei der Ionisation mit bewährter, proprietärer Ionenquellentechnologie vom Weltmarkt-Führer im Bereich GC/MS.

Die revolutionäre HES-Technologie von Agilent Niedrigenergie-EI mit ausreichender Empfindlichkeit für universelle Ionisation und verlässliche Detektion

Niedrigenergie-EI







Bei einem Metabolomik-Experiment wurde die Verbindung Kynurenin in einem Extrakt aus Mäuselunge nachgewiesen. Jedoch kann die Identifizierung von Metaboliten (und anderen Verbindungsklassen mit ähnlichen Strukturen) in komplexen Matrices schwierig sein. Die Erniedrigung der Ionisationsenergie führt zu einem höheren Anteil des Molekül-Ions im Spektrum. In diesem Fall nehmen sowohl die relative als auch die absolute Menge des Molekül-Ions bei 17 eV zu, weshalb sich das System ideal für MS/MS-Experimente eignet. Bei noch geringeren Ionisationsenergien wird das vorgeschlagene Molekül-Ion im Substanzspektrum zum Basision, was die Identifizierung noch zuverlässiger macht.

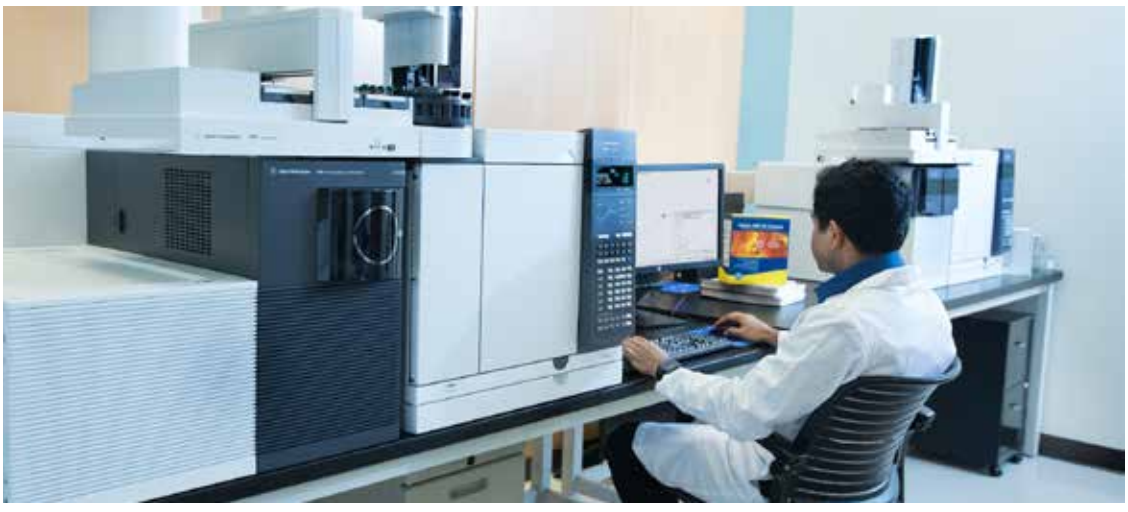
LEBENSMITTELSICHERHEIT

Keine Kompromisse

Der globale Handel, strenge Richtlinien und die stärkere Sensibilisierung der Öffentlichkeit für Themen in Zusammenhang mit der Lebensmittelsicherheit machen häufigere und detailliertere Lebensmittelprüfungen erforderlich. Lebensmittelhersteller und Verbraucher sehen sich Bedrohungen durch Lebensmittelverfälschung und betrügerische Kennzeichnung ausgesetzt. Für Sie stehen gleichbleibende Qualität und kompromisslose Sicherheit an erster Stelle, um sowohl die Verbraucher als auch Ihre Marke zu schützen. Agilent steht Ihnen dabei zur Seite.

Um solchen Herausforderungen zu begegnen, benötigen Sie eine einzige Plattform, mit der sich das Screening nach Zielsubstanzen, mutmaßlichen Verbindungen und unbekannten Strukturen gleichermaßen optimieren lässt. Das 7250 GC/Q-TOF wurde entwickelt, um diese Anforderungen mithilfe von zweckmäßigen Messfunktionen und leistungsfähigen, umfassenden Software-Werkzeugen zu erfüllen.

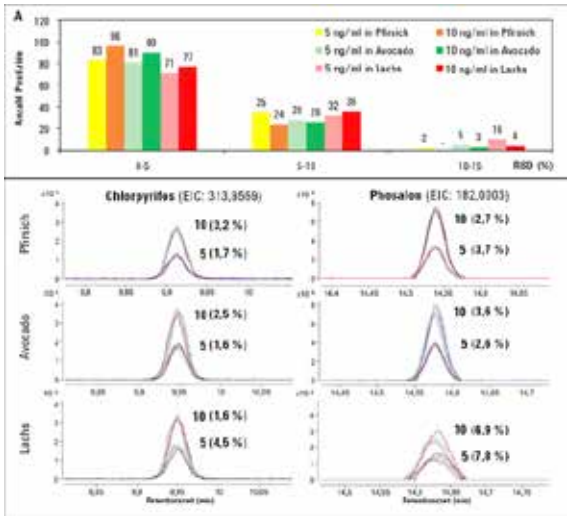
- In einer anwenderspezifisch anpassbaren Bibliothek stehen hochaufgelöste Spektren von mehr als 850 Pestizid-Analyten zur Verfügung.
- Durch Koelutionsvergleich und Ionenverhältnisbewertung von ausgewählten Ionen mit Agilents fragmentbasiertem Arbeitsablauf können mutmaßliche Analyten zuverlässig identifiziert werden.
- Die Quantifizierung von Zielsubstanzen über einen breiten linear dynamischen Bereich hinweg und die Identifizierung unbekannter Strukturen mithilfe kommerzieller Spektrenbibliotheken lassen sich beide durch SureMass-Signalverarbeitung optimieren.



LEBENSMITTELPRÜFUNG

Es kommt auf die Matrix an

Matrices von Lebens- und Futtermitteln können einfach oder komplex sein. Agilent bietet die Expertise, die Materialien und Werkzeuge, die Sie zur einfachen Erstellung zuverlässiger und reproduzierbarer Ergebnisse in sämtlichen Matrices, die Sie in Ihrem Labor untersuchen, benötigen.



Das umfassende Screening nach Pestiziden in Lebensmittelmatrices kann durch ungezielte Aufnahme und mithilfe von Bibliotheken hochaufgelöster Spektren deutlich verbessert werden. A) Die hier gezeigten GC/Q-TOF-Daten zeigen 120 Pestizide, die drei verschiedenen Lebensmittelmatrices zugesetzt wurden, darunter Avocado und Lachs. Die Reproduzierbarkeit (RSD %) bei einer Zugabe von 5 ng/ml und 10 ng/ml belegt die hervorragende Analyseleistung des Systems. Zwei Beispiele für Replikate detektierter charakteristischer Ionen sind dargestellt. B) Hier ist die quantitative Genauigkeit für eine Konzentration 10 ng/ml beim schnellen Vergleich mit Rückstandshöchstmengen illustriert, und zwar in sechs Lebensmittelmatrices mit unterschiedlicher Komplexität. Selbst in komplexen Matrices wie Avocado und Lachs sind die Anforderungen des Leitfadens SANTE/11945/2015 (± 20 % vs. Standard) bei mehr als 97 % der für jede Lebensmittelart getesteten Pestizid-Lebensmittel-Paare erfüllt.

„... Mit dem GC/MS-Q-TOF-System konnten wir sowohl die positiven Ergebnisse bestätigen als auch falsch positive Ergebnisse vermeiden."

– **PETER FÜRST, PHD,** ABTEILUNG ZENTRALE ANALYTISCHE SERVICES
CHEMISCHES UND VETERINÄRUNTERSUCHUNGSAMT MÜNSTERLAND-EMSCHER-LIPPE

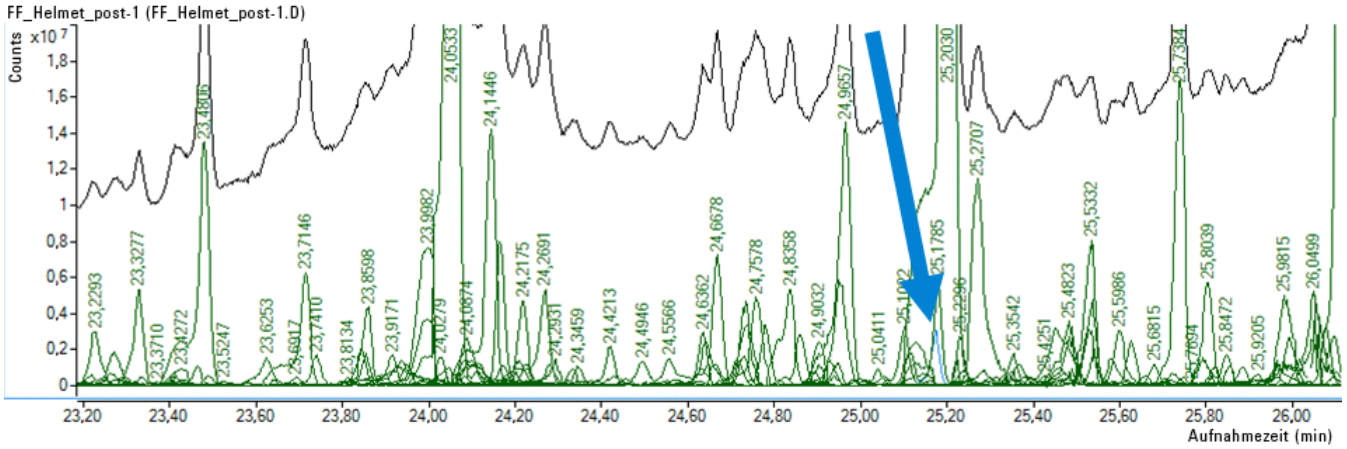
UMWELT

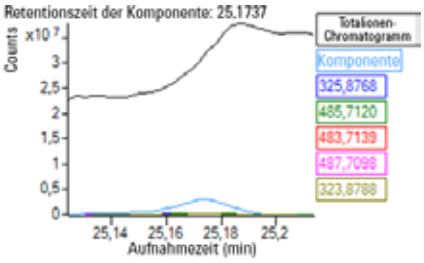
Umweltanalytik in einer ganz neuen Qualität

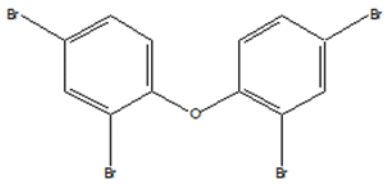
Jeden Tag sind wir mit neuen Fragen zum Einfluss des Menschen auf die Umwelt und den Einfluss der Umwelt auf uns konfrontiert. Die sinnvolle Beantwortung dieser komplexen Fragen setzt Werkzeuge mit steigender Leistungsfähigkeit voraus. Im 7250 GC/Q-TOF umgesetzte, revolutionäre technologische Verbesserungen sollen zur einfachen und effizienten Beantwortung dieser Fragen beitragen.

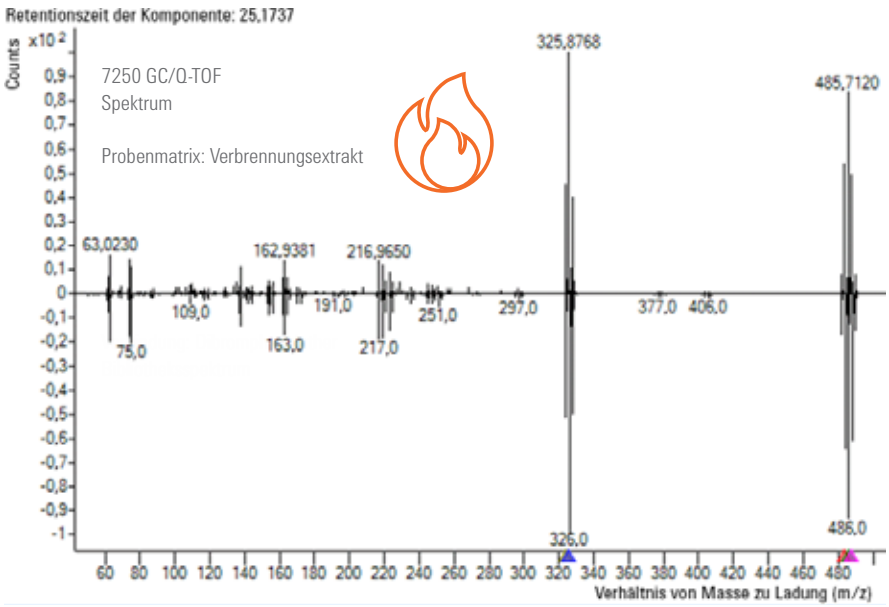
- **Retrospektive Auswertung** – Ermöglicht nach einer einmaligen Messung wiederholte Analysen mit vollständigen Spektrendaten, die in der Zukunft auf neue Zielsubstanzen hin untersucht werden können.
- **Hochauflösung im gesamten Spektrum** – Aufnahme von hochaufgelösten Spektren über einen breiten Massenbereich (bis zu 3000 m/z) für den Nachweis und die Speziation von Kongeneren.
- **Niedrigenergie-EI** – Ein Durchbruch gegenüber 70 eV EI unter Beibehaltung der Signalintensität mit einer hocheffizienten Ionisationsquelle, die für die Ionisation bei unterschiedlichen Elektronenenergien optimiert ist.

Analyse von unbekannten Strukturen mit MassHunter









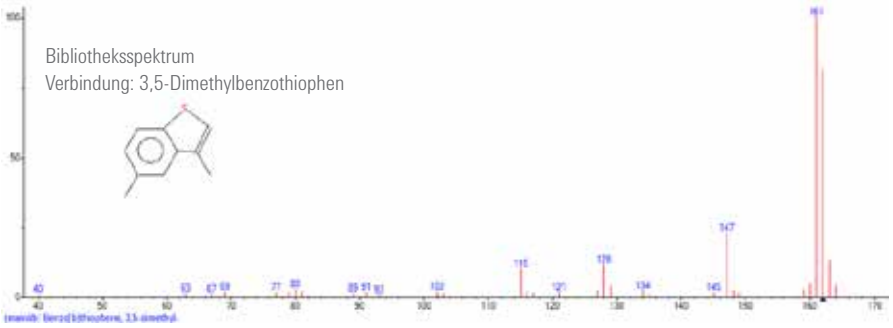
Die MassHunter-Software zur Analyse von unbekannten Strukturen liefert in Kombination mit der SureMass-Signalverarbeitung Ergebnisse mit einer Genauigkeit, die über die der herkömmlichen Dekonvolutionsmethoden hinausgeht. Selbst Nebenkomponenten werden trotz des Vorliegens eines starken Hintergrundsignals genau extrahiert und identifiziert. Die hier gezeigten Daten illustrieren den Spurennachweis von Dibromphenylether mit einem Übereinstimmungswert von besser als 95 in einem komplexen Gemisch von Verbrennungsnebenprodukten.

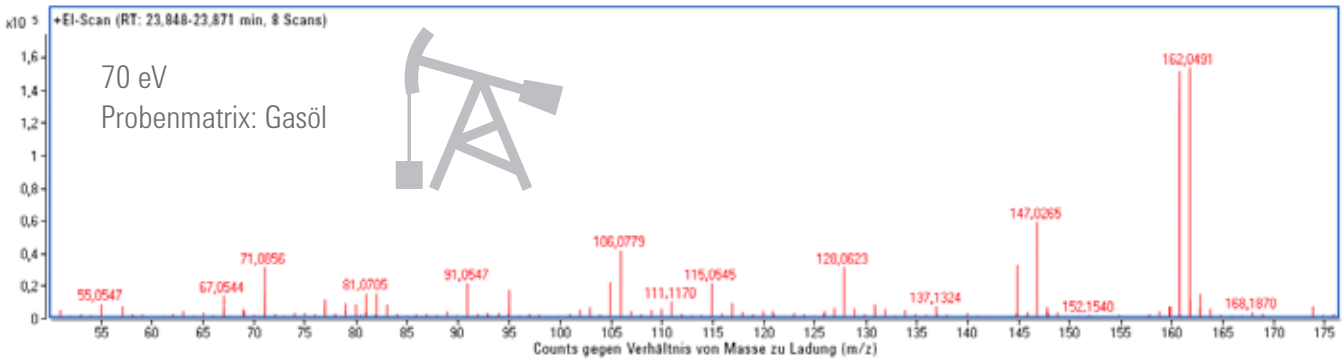
ENERGIE UND CHEMIE

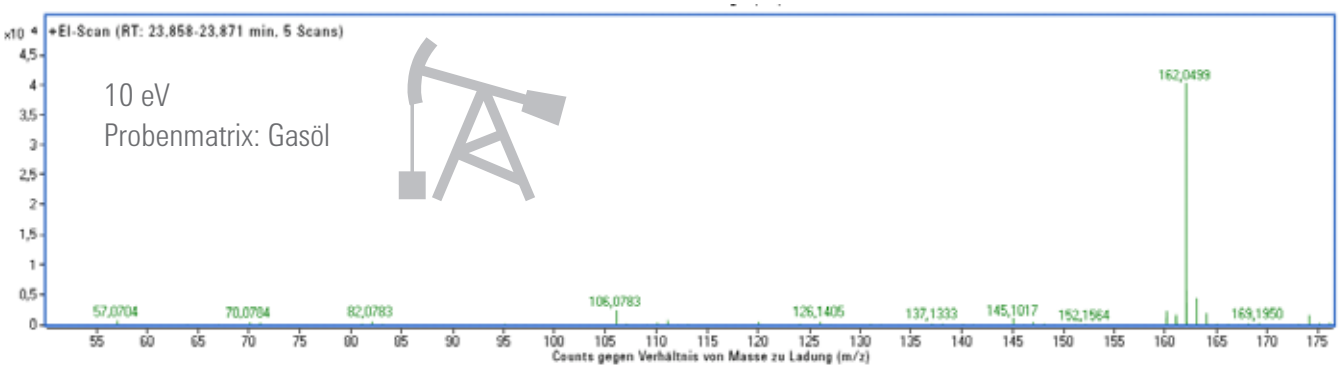
Betrachten Sie das Ganze

Die Charakterisierung der Bestandteile einer komplexen Probe ist keine einfache Aufgabe. Voraussetzungen hierfür sind Wissen, Kenntnis und leistungsfähige analytische Methoden. Dank hochauflösender exakter Massenbestimmung, Niedrigenergie-EI-Fähigkeit, schneller Spektrenerfassung für umfassende GCxGC-Kompatibilität und hochempfindlichen MS/MS-Messungen ist das Agilent 7250 GC/Q-TOF die Plattform der Wahl für die Charakterisierung komplexer Proben.

- **Hohe Akquisitionsrate** – Charakterisierung schmaler chromatographischer Peaks oder ultraschmaler 2-dimensionaler GC-Peaks mit Datenraten von bis zu 50 Hz und geschwindigkeitsunabhängiger hoher Trennleistung.
- **Vereinfachung von Spektren** – Ableitung von Molekül-Ionen für ähnliche chemische Spezies mit Niedrigenergie-EI und Bestätigung durch empfindliche MS/MS-Messungen.
- **Strukturaufklärung** – Hochaufgelöste Accurate-Mass-Produkt-Ionen-Spektren, ausgewertet mit der leistungsfähigen Molecular Structure Correlator-Software, geben Einblick in die chemische Struktur der untersuchten Analyten.







Mit der revolutionären Niedrigenergie-EI-Ionisationsquelle des 7250 GC/Q-TOF lassen sich die Unsicherheiten bei Spektren verringern. Basierend auf der High Efficiency Source der 5977 HES GC/MSD- und 7010 GC/TQ-Plattformen bietet die Niedrigenergie-EI-fähige Ionisationsquelle weitestgehend dieselbe Empfindlichkeit für Substanzen, sorgt aber für eine mengenmäßige Verschiebung im Spektrum zugunsten des Molekül-Ions. Dieses Beispiel zeigt den Nachweis von 3,5-Dimethylbenzothiophen in Gasöl, wobei die Identifizierung durch den Einsatz der Niedrigenergie-EI erleichtert wurde.

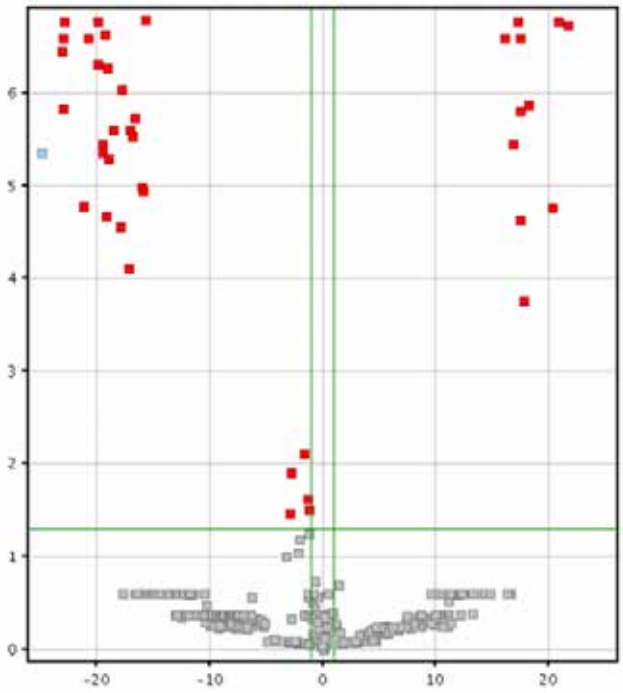
BIOWISSENSCHAFTLICHE GRUNDLAGENFORSCHUNG

Erschöpfende Analyse

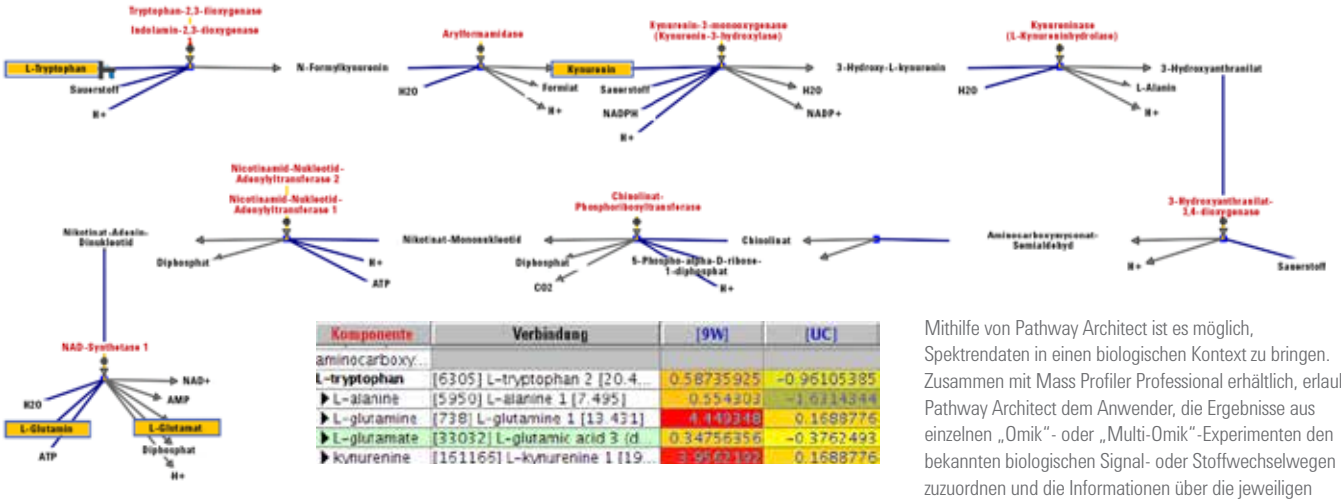
Jeder Tag bringt neue Fortschritte auf dem Gebiet der menschlichen Gesundheit und ihres Schutzes. Die Grundlagenforschung, die diese Fortschritte möglich macht, erfordert die sorgfältige Planung und Ausführung von Experimenten. Das Agilent 7250 GC/Q-TOF treibt die Forschung voran mit Daten von hochaufgelösten, vollständigen Spektren und einer leistungsfähigen Software, die die wichtigen Aspekte in den Fokus rückt.

	P all	P < 0.05	P < 0.02	P < 0.01	P < 0.0050	P < 0.0010
FC all	679	41	38	37	36	36
FC > 1.1	664	41	38	37	36	36
FC > 1.5	638	41	38	37	36	36
FC > 2.0	625	41	38	37	36	36
FC > 3.0	601	38	38	37	36	36
Expected by ch...		2	0	0	0	0

Compound	p	p (Corr)	FC
L-Threonine, 3TMS derivative	1.84E-03	3.13E-02	-2.29
Inosine, 4TMS derivative	1.62E-07	4.36E-06	-31162314.0
D-Gluconic acid, 6TMS derivative	1.11E-08	5.38E-07	-530736.88
Silane, (octadecyloxy)-	2.42E-09	2.35E-07	-614400.88
D-Galactofuranose, 1,2,3,5-tetrakis-O-(trimethylsilyl)-, bis(...	1.67E-07	4.36E-06	-736603.19
Phosphorylethanolamine, 4TMS derivative	2.09E-03	3.46E-02	+7.21
Uric acid, N,O,O',O''-tetrakis(trimethylsilyl)-	7.06E-04	1.26E-02	+7.11
Pseudo uridine penta-tms	2.01E-08	9.09E-07	-218838.31
L-Glutamic acid, 3TMS derivative	1.37E-03	2.38E-02	-2.49
Serine, 3TMS derivative	4.22E-04	7.74E-03	+3.07
D-Ribose, 2,3,4-tris-O-(trimethylsilyl)-, 5-[bis(trimethylsilyl...	9.33E-09	4.87E-07	-960156.19
1H-Indole-3-propanoic acid, alpha.-hydroxy-, methyl ester	1.01E-06	2.13E-05	-583467.62
D-(+)-Ribono-1,4-lactone, 3TMS derivative	1.24E-09	1.69E-07	-1003281.19
Gluconic acid, 2,3,4,5-tetrakis-O-(trimethylsilyl)-, trimethyl...	1.21E-07	3.58E-06	-710218.94
l-Norvaline, N-(2-methoxyethoxycarbonyl)-, undecyl ester	7.71E-08	2.49E-06	+139145.16
Itaconic acid, 2TMS derivative	3.63E-08	1.45E-06	+7787654.50
2-Hydroxyisocaproic acid, (S)-, 2TBDMS derivative	3.97E-09	2.50E-07	-7910914.50
7-(Trimethylsilyl)-2,6-bis(trimethylsilyloxy)-7H-purine	6.18E-09	3.50E-07	-8249361.00
Inosose, 2-desoxy-, O-methyloxime, tetrakis-O-(trimethylsi...	7.26E-07	1.64E-05	-2244370.50
L-Lysine, 3TMS derivative	3.33E-09	2.50E-07	-1685603.25
L-Phenylalanine, 2TMS derivative	1.01E-09	1.69E-07	-7575707.00
L-Proline, 2TMS derivative	7.95E-07	1.74E-05	1272716.75
2-Mercapto-4,6-dimethylnicotinonitrile, TBDMS derivative	1.14E-06	2.34E-05	173959.05
Phenylalanine, 2TMS derivative	1.05E-09	1.69E-07	1804999.38
Mandelic acid, 2TBDMS derivative	7.70E-10	1.69E-07	152992.62



Komplexe Daten werden mithilfe der leistungsfähigen Mass Profiler Professional-Software in vereinfachte Ergebnisse überführt. Die differenzielle Analyse unterschiedlicher Probengruppen lenkt den Fokus auf das, was bei Vergleichsstudien statistisch von Bedeutung ist. Die dargestellten Daten zeigen Unterschiede hinsichtlich der identifizierten Metaboliten zwischen dem Lungengewebe von mit Tuberkulose-Erregern infizierten und nicht infizierten Mäusen 9 Wochen nach der Infektion. Die Progression ist zur leichteren Interpretation als Fold Change-Analyse in einem Vulkandiagramm dargestellt.



Komponente	Verbindung	[9W]	[UC]
aminocarboxy...			
L-tryptophan	[6305] L-tryptophan 2 [20.4...	0.58735925	-0.96105385
L-alanine	[5950] L-alanine 1 [7.495]	0.554303	-1.6314344
L-glutamine	[738] L-glutamine 1 [13.431]	4.449348	0.1688776
L-glutamate	[33032] L-glutamic acid 3 (d...	0.34756356	-0.3762493
kynurenine	[151165] L-kynurenine 1 [19...	3.9562192	0.1688776

Mithilfe von Pathway Architect ist es möglich, Spektrendaten in einen biologischen Kontext zu bringen. Zusammen mit Mass Profiler Professional erhältlich, erlaubt Pathway Architect dem Anwender, die Ergebnisse aus einzelnen „Omik"- oder „Multi-Omik"-Experimenten den bekannten biologischen Signal- oder Stoffwechselwegen zuzuordnen und die Informationen über die jeweiligen Wege gleichzeitig zu analysieren, darzustellen und zu interpretieren. Dieser an Signal- und Stoffwechselwegen orientierte Arbeitsablauf beschleunigt die Validierung von Entdeckungen und gewonnenen Einsichten. Er erlaubt es den Forschern darüber hinaus, die nächste Serie an Experimenten effizient zu planen und auszuführen.

Die Arbeitsabläufe im Bereich Metabolomik sind ein nützliches Hilfsmittel für das Studium der Systembiologie. Komplexe Metabolomik-Untersuchungen profitieren von der hohen analytischen Empfindlichkeit über das gesamte Spektrum und der Massengenauigkeit des GC/Q-TOF und nutzen seine MS/MS-Funktionalität zur Unterstützung bei der Strukturaufklärung unbekannter Metaboliten. Der erweiterte dynamische Bereich des Agilent 7250 GC/Q-TOF erlaubt die genaue und gleichzeitige Quantifizierung der unterschiedlichsten in einer Zelle vorliegenden Metaboliten.

MASSHUNTER

Antworten finden

Die fortschrittlichen Data-Mining- und Datenverarbeitungs-Tools in unserer MassHunter-Suite ermöglichen die schnelle und präzise Gewinnung aller verfügbaren Informationen zu den in den Proben vorhandenen Analyten. Sie erleben beispiellose Produktivität mit zeitsparenden Funktionen wie:

- Fragmentbasierter Arbeitsablauf für das gezielte qualitative Screening mit Ergebnissen auf einen Blick.
- Einfache Erstellung quantitativer Methoden basierend auf der Detektion qualifizierter Zielsubstanzen.
- Leistungsfähige multivariate Analyse zur Eingrenzung der Datensets auf unterschiedlich relevante Analyten.

Agilent bietet Ihnen Unterstützung für Ihren vollständigen analytischen Arbeitsablauf, von der Probe bis zum Bericht. Überzeugende Analyseergebnisse auf höchstem Niveau mit der branchenführenden Leistung des bahnbrechenden Agilent 7250 GC/Q-TOF.

Charakterisierung von Profilen

MassHunter Acquisition

- Vertraute, flexible Bedienung
- SWARM Autotune für optimale Leistung bei jeder einzelnen Probe

MassHunter Profinder
Analyse von unbekannten Strukturen mit MassHunter

- Qualitativ hochwertige Detektion und Extraktion von Verbindungen mithilfe von Molecular Feature Extractor (MFE) und SureMass-Signalverarbeitung

MassHunter Profiler Professional

- Multivariate statistische Analyse für die Chemometrie
- Darstellungs-Tools für die schnelle Erstellung übersichtlicher Berichte

ID Browser

- Integrierte Identifikation interessierender Verbindungen

Pathway Architect

- Omik-Untersuchungen
- Visuelle Kontextualisierung biologischer Signal- und Stoffwechselwege aus größeren Quellen mithilfe statistisch relevanter Daten.

Screening

MassHunter Acquisition

- Vertraute, flexible Bedienung
- SWARM Autotune für optimale Leistung bei jeder einzelnen Probe

MassHunter Qualitative Analysis

- Gezieltes qualitatives Screening mit fragmentbasierten und anwenderspezifisch anpassbaren Spektrenbibliotheken

MassHunter Quantitative Analysis

- Import von Verbindungen aus MassHunter Qualitative Analysis mit einem Klick
- Genaue Quantifizierung und SureMass-Signalverarbeitung

MassHunter Berichterstellung

- Anpassbare Lösung für die Berichterstellung – ganz nach den Anforderungen in Ihrem Labor

Personal Compound Database & Library Software (PCDL-Manager)

- Von Experten kuratierte HRAM-Bibliothek mit 850 Pestiziden für GC/Q-TOF
- Einfaches Hinzufügen von Annotationen und zusätzlichen Verbindungen

Identifizieren und Aufklären

MassHunter Acquisition

- Vertraute, flexible Bedienung
- SWARM Autotune für optimale Leistung bei jeder einzelnen Probe
- Niedrigenergie-EI für mehr Molekül-Ionen
- MS/MS-Spektren für Strukturinformationen

MassHunter Profinder MassHunter Unknowns Analyse

- Qualitativ hochwertige Detektion und Extraktion von Verbindungen mithilfe von Molecular Feature Extractor (MFE) und SureMass-Signalverarbeitung

Molecular Structure Correlator

- Hilfe bei der Identifizierung von unbekannten Strukturen und bei der Strukturaufklärung
- Zugriff auf umfassenden Online-Ressourcen zur Vertiefung der Suche

„Das hochauflösende Q-TOF MS in Kombination mit der Mass Profiler-Software ermöglichte uns die Untersuchung der unterschiedlichen Matrixkomponenten, die mit relevanten Pestiziden koeluieren."

– CARMEN FERRER, PHD, ANALYTICAL DEPARTMENT, UNIVERSITY OF ALMERIA

Klassenvorhersage

MassHunter Acquisition

- Vertraute, flexible Bedienung
- SWARM Autotune für optimale Leistung bei jeder einzelnen Probe

MassHunter Profinder Analyse von unbekannten Strukturen mit MassHunter

- Qualitativ hochwertige Detektion und Extraktion von Verbindungen mithilfe von Molecular Feature Extractor (MFE) und SureMass-Signalverarbeitung

Mass Profiler Professional

- Multivariate statistische Analyse für die Chemometrie
- Darstellungs-Tools für die schnelle Erstellung übersichtlicher Berichte

Probenklassenprädiktor

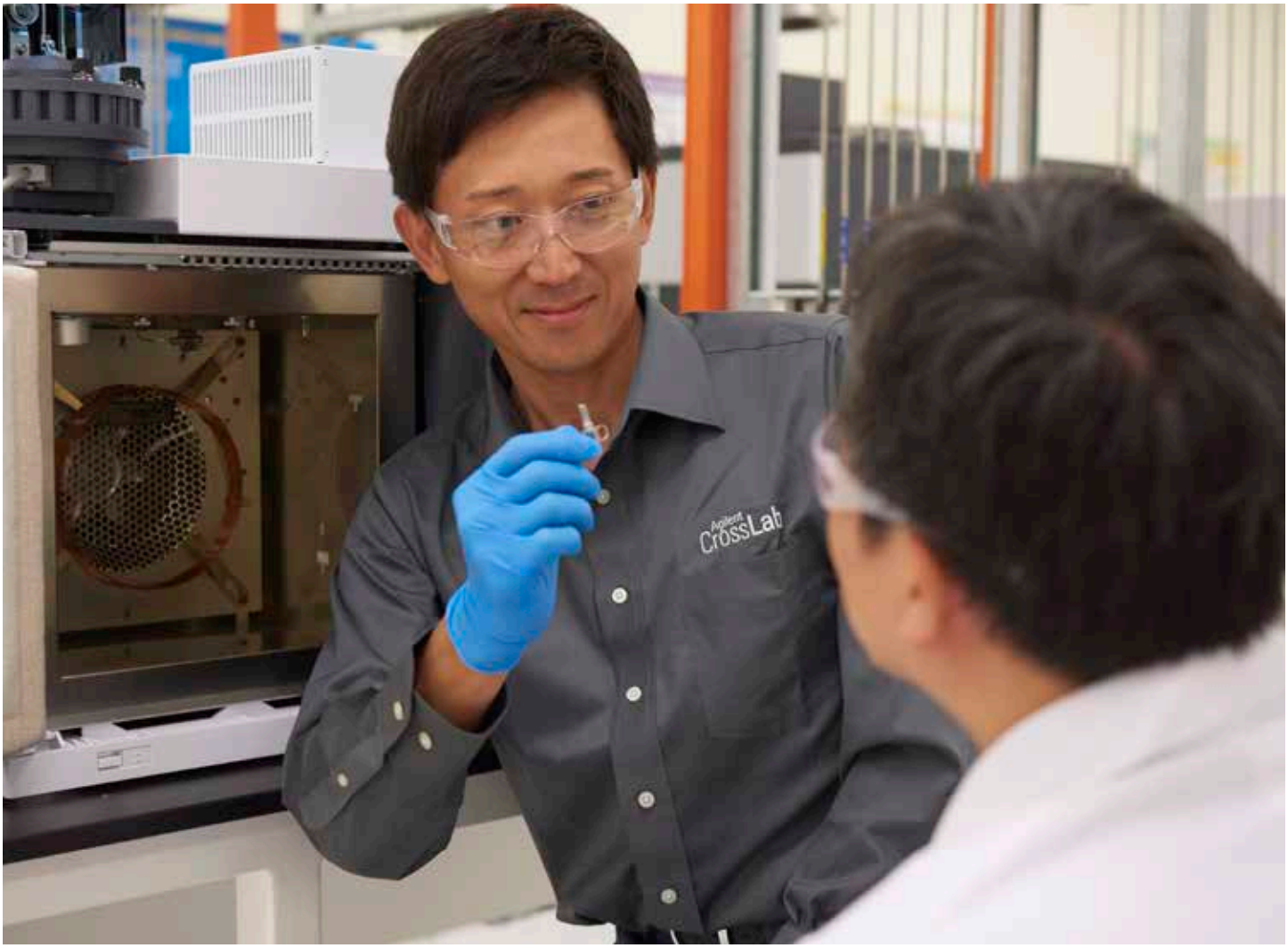
- Training und Validierung von Klassenvorhersagemodellen für optimierte künftige Vorhersagen

Agilent CrossLab Services: Maximale Betriebszeit mit umfassendem Support

Sie können den Agilent CrossLab-Serviceexperten vertrauen: Sie halten wertvolle Informationen bereit und sorgen dafür, dass Ihre Geräte optimal funktionieren. Unsere branchenführenden Services lassen sich genau auf Ihre Anforderungen zuschneiden und beinhalten: Geräteübergang, Applikationsberatung, Reparaturen, vorbeugende Wartung, Compliance-Prüfung und Schulung. Fragen Sie uns, wie wir Ihr Labor heute unterstützen können.

Agilent CrossLab

From Insight to Outcome



Agilent Wertversprechen

Wir garantieren Ihnen mindestens 10 Jahre Lebensdauer ab Kaufdatum. Andernfalls rechnen wir Ihnen den Restwert des Systems auf ein neueres Modell an.

Mehr Infos
www.agilent.com/chem/GCMS_QTOF

Deutschland
0800 603 1000
CustomerCare_Germany@agilent.com

Europa
info_agilent@agilent.com

Asien und Pazifik
inquiry_lsca@agilent.com

Hier finden Sie Ihr Agilent Kundeninformationszentrum in Ihrem Land:
www.agilent.com/chem/contactus

Änderungen vorbehalten.
Ausschließlich zu Forschungszwecken. Nicht für Diagnoseverfahren geeignet.

© Agilent Technologies, Inc. 2017
Gedruckt in den USA, Mai 2017
5991-8109DEE

Agilent Technologies