

# Vysoké rozlišení hravě s Agilent LC/MS QTOF

*(R)evidentně zábavný kvíz*



**Altium**

# Jak začít kvíz?

- Připojte se k WiFi nebo na data
- Otevřete fotoaparát
- Vyfoťte kód
- Přejděte na odkaz, který se pod ním objeví

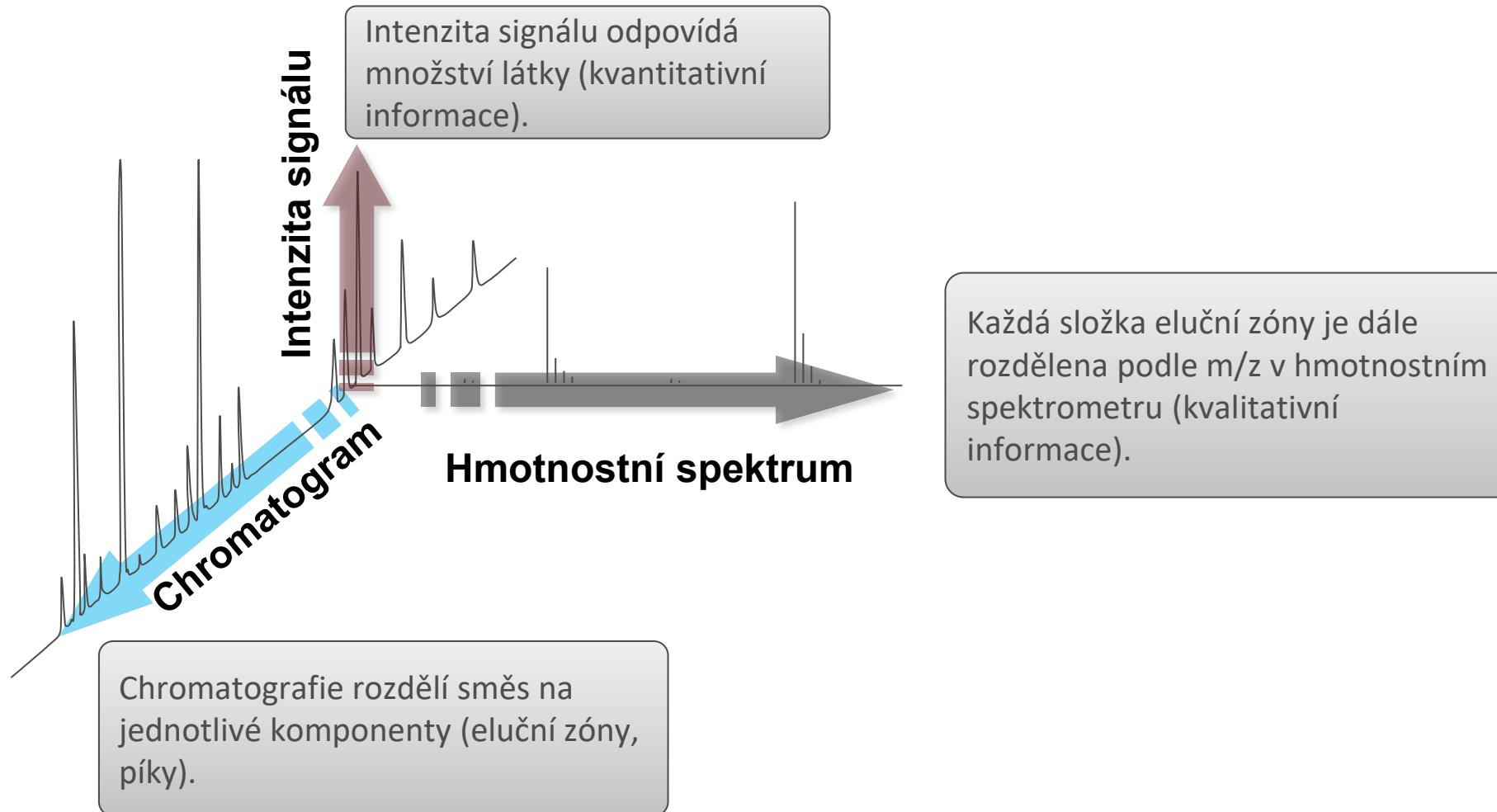




**Altium**

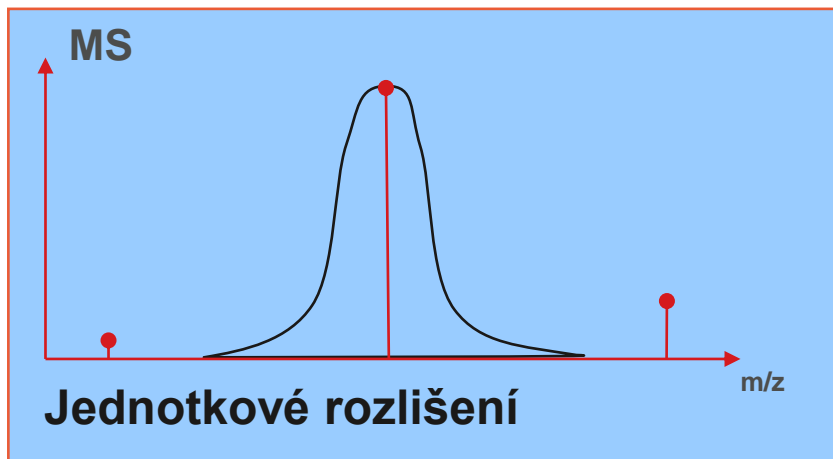
# Kvízová otázka 1

# LC/MS a GC/MS přístroje poskytují 3D data



# Další dimenze díky vysokému rozlišení a přesné hmotě

## Výpočet sumárního vzorce ze spektra



Např. Iontová past,  
QQQ, Q



C12 H14 N9 Cl  
C13 H23 N3 P S Cl  
C14 H24 N2 S2 Cl  
C14 H22 N O3 S Cl  
C14 H16 N6 O Cl  
C15 H25 O P S Cl  
C16 H19 N3 P Cl  
C17 H20 N2 S Cl  
C18 H21 O P Cl



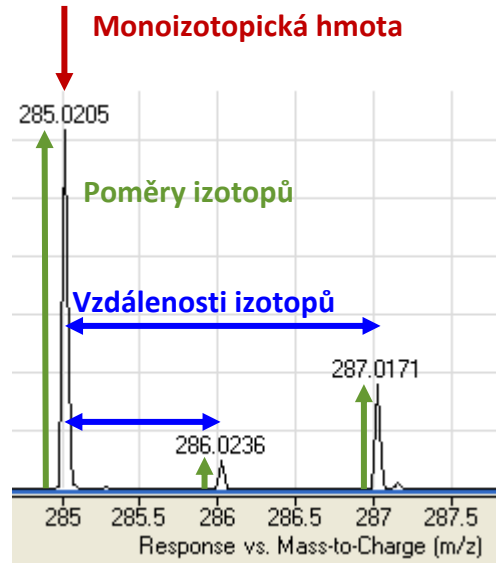
např. QTOF, TOF



C13 H23 N3 P S Cl  
**C14 H24 N2 S2 Cl**  
C14 H22 N O3 S Cl  
C14 H16 N6 O Cl  
C15 H25 O P S Cl  
**C16 H19 N3 P Cl**  
C17 H20 N2 S Cl  
C18 H21 O P Cl

# Další dimenze díky vysokému rozlišení a přesné hmotě

## Výpočet sumárního vzorce ze spektra



Shoda přesné monoizotopické hmoty

Shoda poměru izotopů

Shoda vzdálenosti izotopů

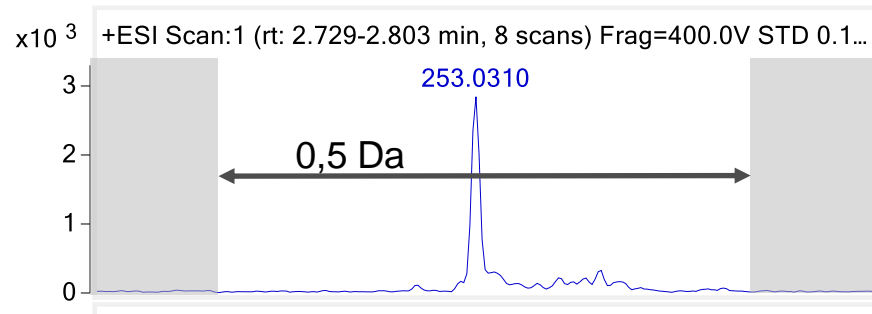
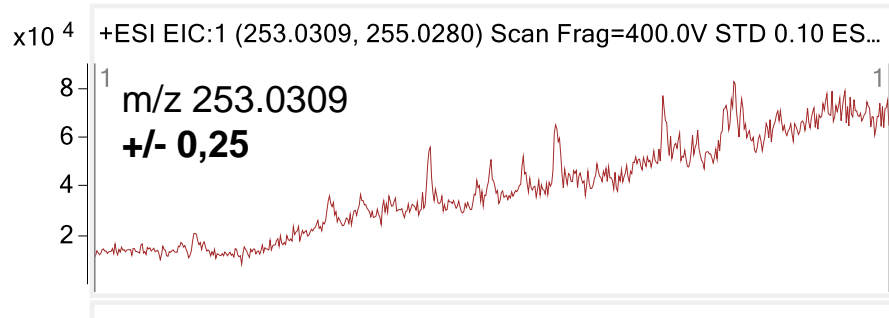
Celkové skóre

MS Formula Results: Cpd 2: C10H9CIN4O2S

Best	Formula (M)	Calc m/z	Score	Cross Score	Mass	Calc Mass	Diff (ppm)	Abs Diff (p)	Spacing Matc	Abund Matc	Mass Match	m/z	DBE
<input checked="" type="checkbox"/>	C10H9CIN4O2S	285.0208	99.55		284.0137	284.0135	-0.71	0.71	99.19	99.26	99.69	285.021	8
<input type="checkbox"/>	C7H12N2O6S2	285.021	77.28		284.0137	284.0137	0.01	0.01	99.54	1.93	100	285.021	3
<input type="checkbox"/>	C7H13CIN4O2S2	285.0241	75.57		284.0137	284.0168	11.12	11.12	99.87	83.87	46.22	285.021	3

# Další dimenze díky vysokému rozlišení a přesné hmotě

## *Vysoké rozlišení - selektivita*





**Altium**

Kvízové otázky 2 a 3



# Co lze měřit na LC(GC)/MS přístrojích

## Cílová analýza

- ✓ Struktura
  - ✓ Retenční čas
  - ✓ Molekulový iont ( $m/z$ )
  - ✓ Produktové ionty ( $m/z$ )
  - ✓ Dostupný standard
- Rychlé zpracování dat
  - Konfirmace a přesná kvantifikace analytů

## Instrumentace:

- **QQQ (MS/MS)**
- **Q-TOF (HRAM)**

## Cílový screening

- ✓ Struktura
  - ✗ Retenční čas
  - ✗ Molekulový iont ( $m/z$ )
  - ? Produktové ionty ( $m/z$ )
  - ? Dostupný standard
- Nalezení podezřelých látek podle seznamu
  - Identifikace nálezů

## Instrumentace:

- **Q-TOF (HRAM)**

## Necílový screening

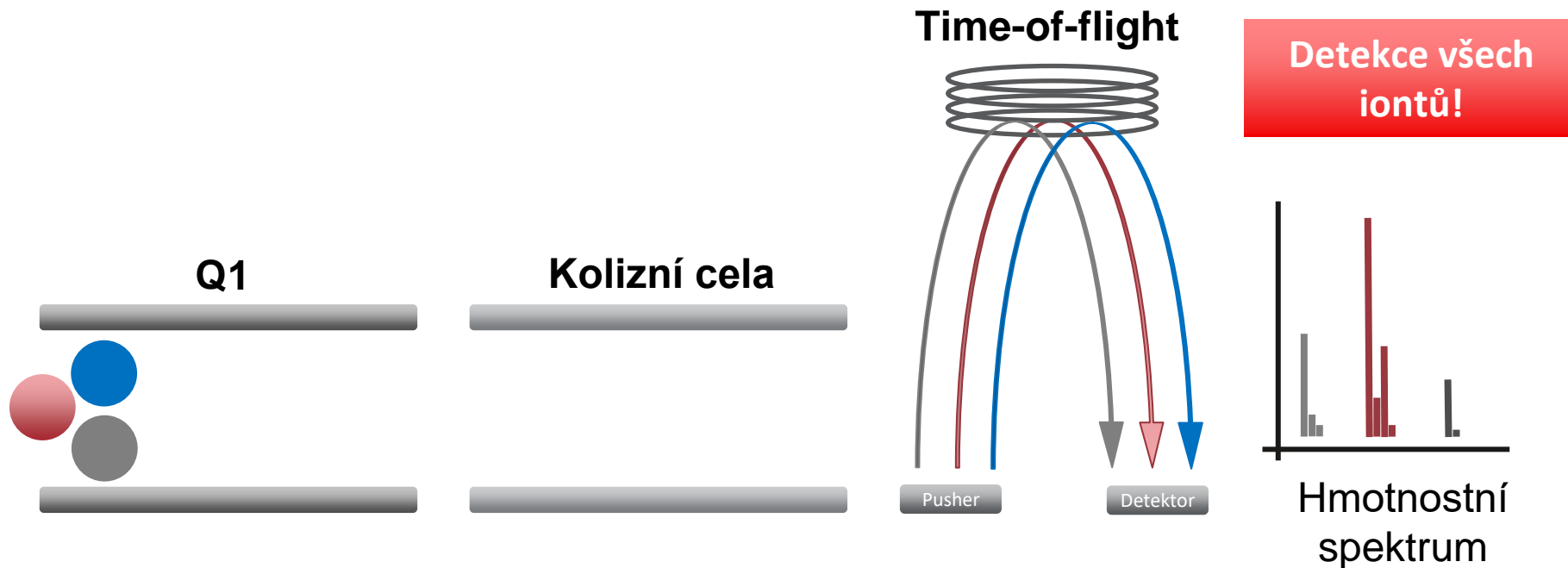
- ✗ Struktura
  - ✗ Retenční čas
  - ✗ Molekulový iont ( $m/z$ )
  - ✗ Fragmenty ( $m/z$ )
  - ✗ Dostupný standard
- Porovnání profilu látek podezřelého a „standardního“ vzorku (t-test, PCA).
  - Identifikace látek, které jsou unikátní pro vyšetřovaný vzorek.

## Instrumentace:

- **Q-TOF (HRAM)**

# Co umožňuje Q-TOF (HRAM)?

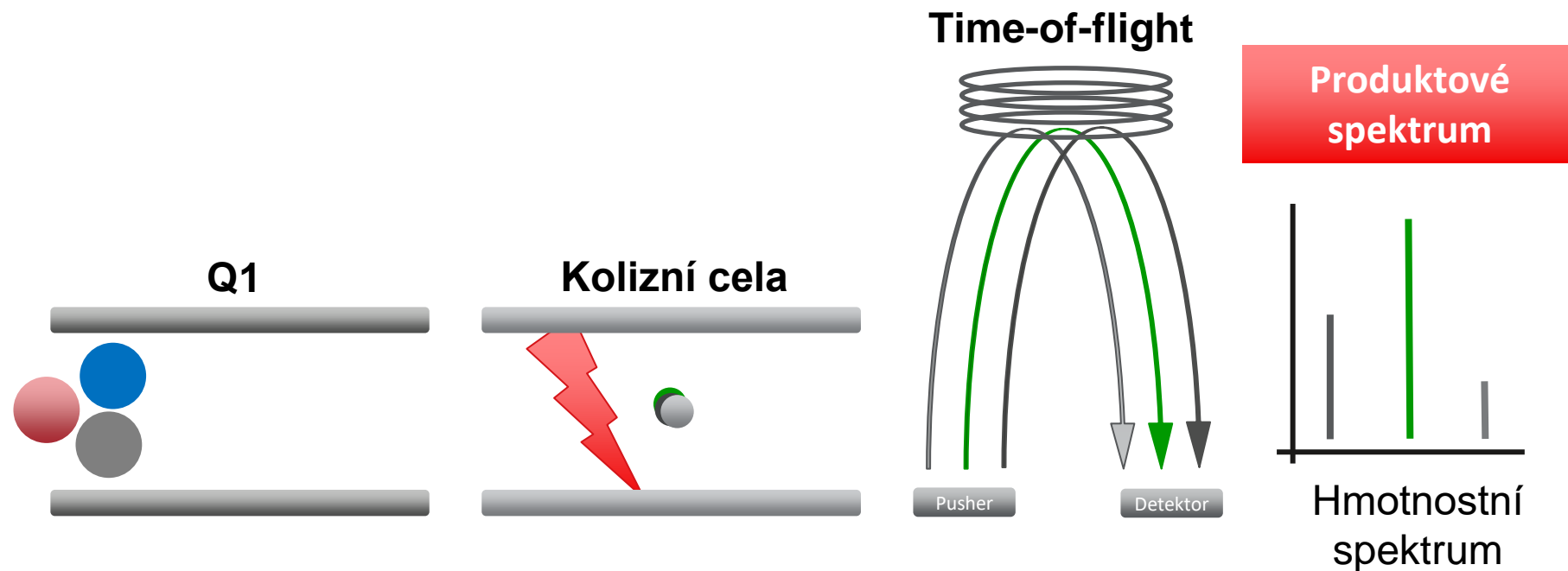
## 1) Měření plných spekter



- Rychlá a citlivá akvizice spekter (široký rozsah  $m/z$ ).
- Přesná izotopová obálka/poměr izotopů
- Přesné  $m/z$  všech iontů

# Co umožňuje Q-TOF (HRAM)?

## 2) Měření produktových spekter



- Velmi rychlé měření produktových spekter (HR MS/MS) – strukturní informace o látce.
- Porovnání naměřených spekter se spektry v knihovně – identifikace analytu.



**Altium**

Kvízové otázky 4 a 5



Altium

# Agilent Revident LC/MS QTOF

Revolutionize Your  
Identification With Rock solid  
Evidence



# Nový Agilent LC-QTOF Revident

- ≈ 2x vyšší citlivost ve srovnání s předchozím modelem.
- Poloviční velikost dat.
- Modulární koncept: snadnější přístup a servis, bez kabelů.
- TCD (Tune, Calibration, Diagnostics): Jednotlivé moduly poskytují readback o svém stavu, FW, datu výroby, historii atd.

## VacShield

Umožňuje rychlé vyčištění vstupní kapiláry bez zavzdušnění, minimalizuje čas potřebný k údržbě.

## Nové CDS (*calibrant delivery system*)

Nový systém založen na pístové pumpě. Stabilní a spolehlivý průtok kalibrantu a reference.

## Nová iontová optika

Prověřená iontová optika převzatá z trojitých kvadrupólů Agilent.

## Teplotně stabilizovaná letová trubice

Teplotní čidla a ohřívací segmenty podél letové trubice zajišťují maximální stabilitu teploty a přesné měření i bez reference.

## Nový ADC detektor

Kompletně nový ADC detektor. Vyšší MS rozlišení pro nízké  $m/z$ , lepší lineární rozsah a přesné měření izotopové obálky.



# Stabilita měření přesné hmoty

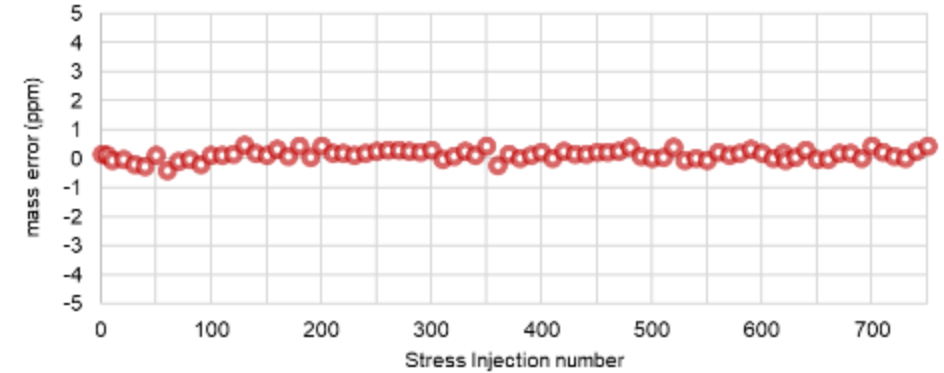
750 nástřiků extraktu brokolice během 14 dnů, cca 230 pesticidů

ZPĚT

Omethoate Results, mean error = 0.1 ppm



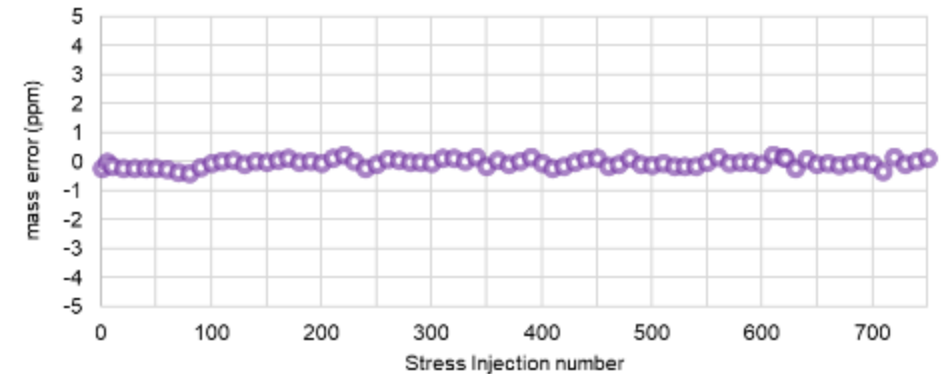
Imidacloprid Results, mean error = 0.1 ppm



Phosphamidon Results, mean error = 0.3 ppm



Tebuthiuron Results, mean error = 0 ppm



Zobrazen pouze každý desátý nástřik



**Altium**

Kvízové otázky 6 a 7



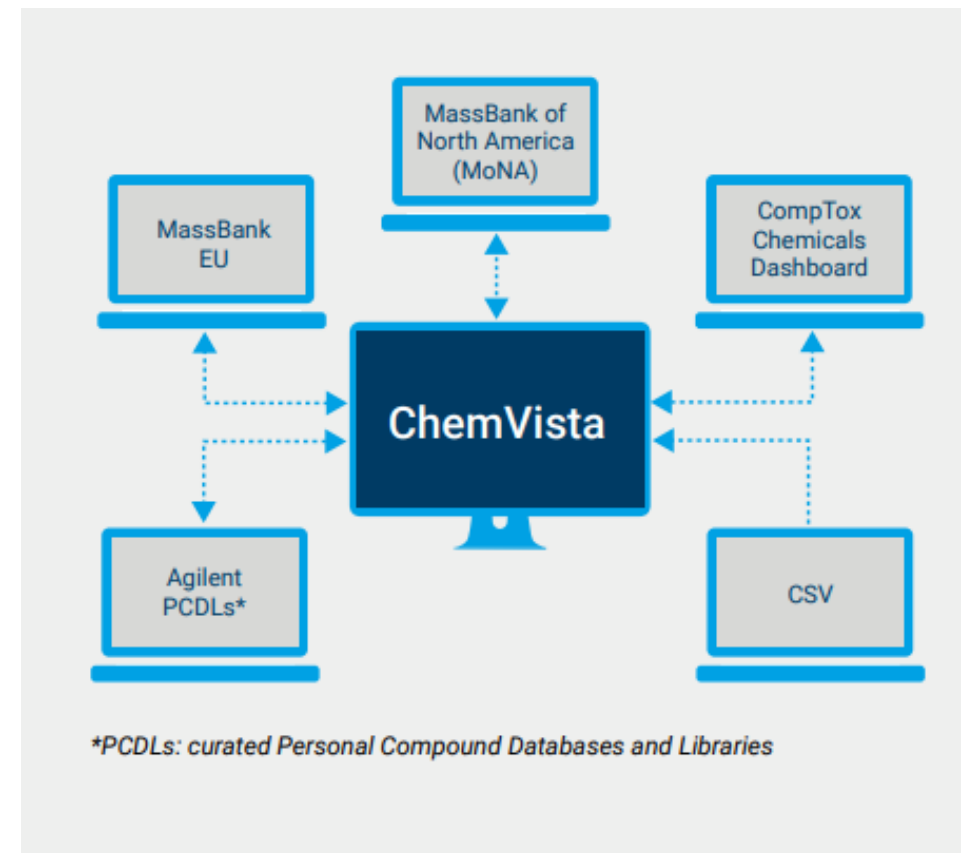
# Agilent ChemVista

Správce knihoven pro LC/Q-TOF a  
GC/Q-TOF



# Agilent ChemVista: Manažer spektrálních knihoven

- Přístup na vybrané veřejné databáze (export/import, import bez duplikátů)
- Chemoinformatická data (InChI, SMILES, CAS) strukturní vzorce, názvy, synonyma.
- Struktura databáze dovoluje uchovat pro jeden analyt řadu RT (podle akviziční metody) i více spekter (EI, ESI, adukty).
- Organizace, management a editace spekter.
- Velká knihovna a seznamy analytů vybrané pro jednotlivé projekty, metody apod.



# ChemVista: Nové knihovny MS spekter

## LC/Q-TOF

### Applied Market PCDL

Celkem **14 518** látek  
Z toho **6131** látek s MS/MS  
spektry

### METLIN PCDL

Celkem **80 000** látek  
Z toho **11 000** látek s MS/MS  
spektry

## GC/Q-TOF

Celkem **13 800** látek  
Z toho **2 300** látek s MS/MS  
spektry

#### Bezpečnost potravin

LC/Q-TOF Mycotoxins PCDL  
LC/Q-TOF Pesticide PCDL (+243 analytů)  
LC/Q-TOF Veterinary Drugs PCDL  
LC/Q-TOF Extractables and Leachables PCDL

#### Toxikologie

LC/Q-TOF Forensic Toxicology PCDL  
Designer drugs (+473 analytů)

#### Životní prostředí

LC/Q-TOF Water Screening PCDL  
EPA ToxCast Screening Library, (+804 analytů)  
PFAS PCDL

#### Life Sciences

LC/Q-TOF METLIN PCDL

#### GC/Q-TOF

Pesticidy, Metabolity, Terpeny PCDLs (+1250 analytů)



**Altium**

Kvízové otázky 8 a 9



**Altium**

Děkujeme za pozornost!