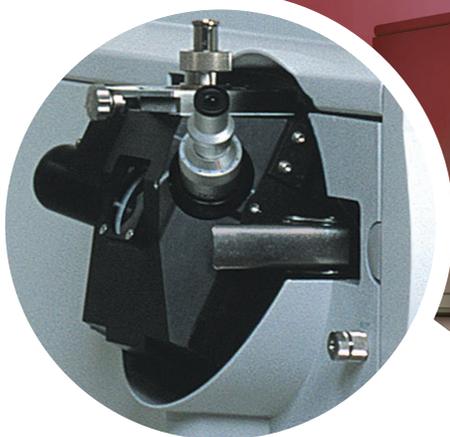
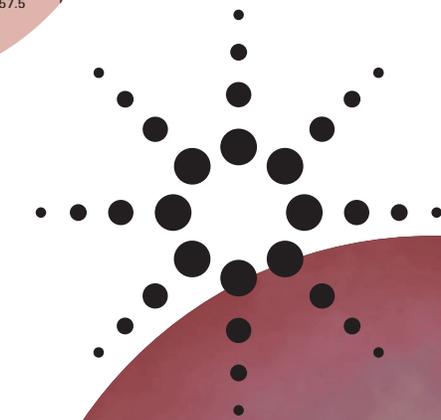
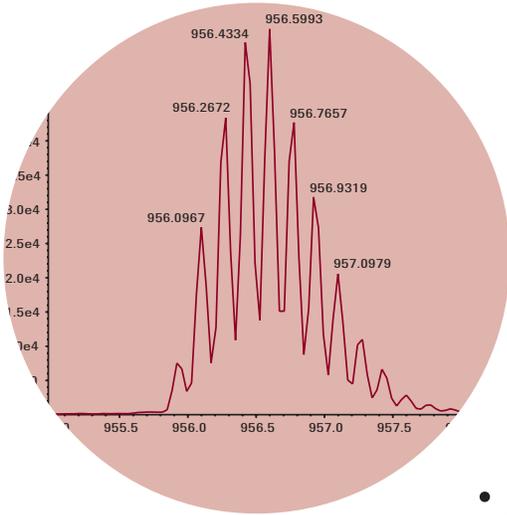


Agilent LC/MSD TOF

Exakte
Massenbestimmung -
nun Routine



Agilent Technologies

Zuverlässige, exakte Massenbestimmung für die Routine

Chemiker, die neue Substanzen synthetisieren, benötigen schnell eine Bestätigung, ob die entsprechenden Stoffe auch dargestellt worden sind. Eine exakte Massenbestimmung liefert Information zum Molekulargewicht und zur elementspezifischen Zusammensetzung als verlässliche Information. Bisher war eine genaue Massenbestimmung jedoch schwierig. Nun können mit dem neuen Agilent LC/MSD TOF Time-of-Flight (Flugzeit) Massenspektrometer auch in der Routine Massen genau bestimmt werden.

Das Agilent LC/MSD TOF verfügt über zwei herausragende Eigenschaften: eine exakte Massenbestimmung und unkomplizierte Bedienung eines Single-Quadrupol Massenspektrometers. Zusätzlich zeichnet sich das LC/MSD TOF durch weitere Vorteile aus:

- Hervorragende Empfindlichkeit, Auflösung und Massengenauigkeit
- Großer dynamischer Bereich
- Übersichtliche Zugabe von Referenzstandards
- Schnelles Scannen
- Mehrere Ionisationsmöglichkeiten
- Neueste Software zur Gerätesteuerung und Datenerfassung
- Agilent Kundendienst weltweit

Hervorragende Leistung durch innovative Gerätekonstruktion

Titelseite: Das Massenspektrum des 6-fach positiv geladenen Molekülions von 5 Picomol Insulin zeigt die außerordentlich gute Auflösung des LC/MSD TOF

Zuverlässige genaue Massenbestimmung

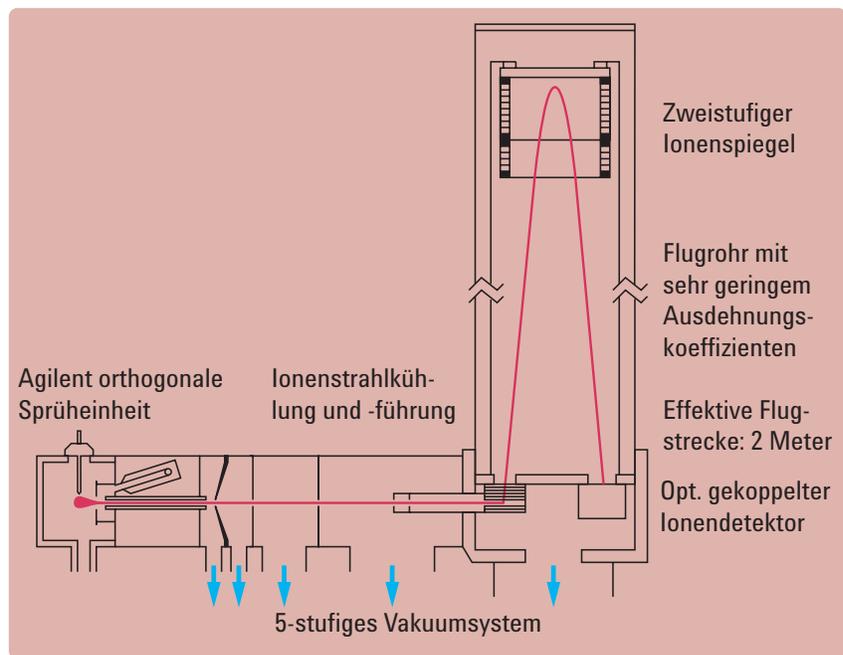
Das Agilent LC/MSD TOF wurde gezielt für eine Empfindlichkeit im unteren Femtomol-Bereich für ein bis zu 10.000-faches Auflösungsvermögen und eine zuverlässige 3 ppm Massengenauigkeit entwickelt — und dies alles mit einem Minimum an Bedienungsaufwand.

Großer dynamischer Bereich erweitert den Einsatzbereich

Ein enger dynamischer Bereich hat bisher die Verwendung der TOF MS stark eingeschränkt. Das LC/MSD TOF verwendet ein innovatives Datenerfassungssystem, das keine

Totzeitkorrektur erfordert und einen dynamischen Bereich über drei Zehnerpotenzen hat.

Durch den überaus weiten dynamischen Bereich müssen Probenkonzentration und interne Referenzmasse nicht aufeinander abgestimmt werden. Die Referenzmasse kann in geringeren Konzentrationen zugegeben werden, wodurch sich die Gefahr der Signalunterdrückung und Signalstörung verringert. Der weite dynamische Bereich erleichtert auch ein automatisches Arbeiten.



Genauigkeit eines internen Standards und Einfachheit eines externen Standards

Benutzer von TOF Geräten verzichten manchmal auf einen internen Standard, weil es schwierig ist, ihn zuzugeben und den Signal-Intensitäts-Abgleich durchzuführen. Nicht so beim Agilent LC/MSD TOF. Mit dem weiten dynamischen Bereich, der Doppelspray-Ionenquelle und dem automatischen Kalibriersystem (Automated Calibrant Delivery System, CDS) wird mit dem LC/MSD TOF die Verwendung eines internen Standards einfach. Auch die Massenkorrektur erfolgt automatisch in Echtzeit. Jedes Spektrum ist präzise und kann sofort ausgewertet werden.

Schnelles Scannen für schnelle Chromatographie und hohen Durchsatz

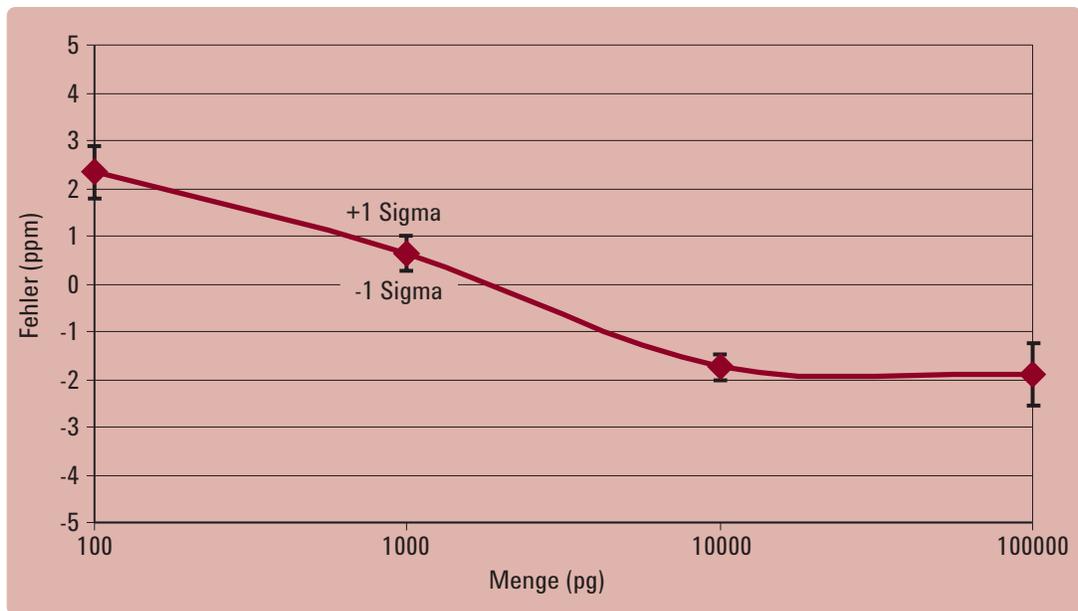
Screening-Tests mit hohem Durchsatz erfordern eine schnelle Chromatographie. Bei fünf bis zehn Scans pro Sekunde über einen weiten Massenbereich kann das LC/MSD TOF viele Spektren problemlos aufnehmen, von den scharfen ~2-Sekunden-Peaks der schnellen Narrowbore-Chromatographie.

Ergebnisse von jeweils 5 Dosierungen mit 100, 1.000, 10.000 und 100.000 pg Reserpin: Bei diesen Mengen, die bei der Synthese von Bedeutung sind, wird eine Massengenauigkeit besser als 3 ppm über 3 Zehnerpotenzen hinweg erreicht.

Viele Ionisationsarten für einen breiten Anwendungsbereich

Der LC/MSD TOF ist mit verschiedenen Ionisationsquellen kompatibel:

- **Elektrospray:** Die Dual-Sprayer-Quelle für LC Flussraten bis zu 1,0 ml/min
- **Nanospray:** Die neue orthogonale Spraytechnik bringt höchste Empfindlichkeit, ist einfach einzurichten und stabil im Betrieb
- **APCI:** Eine wichtige Alternative für Substanzen, die sich nicht gut für Elektrospray eignen
- **AP-MALDI:** Eine schnelle, einfache und sehr empfindliche Alternative für Substanzen, die keine Online-LC-Trennung benötigen



Neue TOF-bezogene Software

Die Software zur LC/MSD TOF Gerätesteuerung und Datenerfassung ist komplett neu entwickelt. Das 32-Bit Windows^(R)-basierende Softwarepaket bietet einfache Konfiguration, Steuerung und Datenerfassung für LC/MSD TOF und beinhaltet:

- Einzelfenster und Parameter-Optimierungsfenster für eine einfache Methodenentwicklung,
- einen Sequenzeditor in Form eines Tabellenblatts zur schnellen und leichten Eingabe von Einzelproben oder Sequenzen,
- präzise Massenzentrierung für hervorragende Massengenauigkeit ohne Schwellenwertanpassung,

- Verwendung einzelner und mehrerer Referenzmassen,
- automatische Massenkorrektur vor der Speicherung der Spektren auf der Festplatte,
- Unterstützung von In-Source CID Versuchen
- zeitprogrammierbare MS- und HPLC-Parameter.

Die Software zur Gerätesteuerung und Datenerfassung wurde mit Visual Basic for Applications (VBA) entwickelt. Der Anwender kann die Datenerfassung und die Auswertung mit VBA Standardskripten anpassen.

Die Datenanalyse erfolgt mit der bewährten AB/MDS-SCIEX Analyst QS Software und applikationsspezifischen Erweiterungen von Agilent.

Eine dieser Erweiterungen, das Empirical Formula Confirmation Programm, überprüft automatisch die Anwesenheit der erwarteten Substanzen. Beginnend mit einer empirischen Formel durchsucht es die erhaltenen Spektren nach den erwarteten Massen. Es berücksichtigt neutrale Fragmente, Addukte und andere häufig vorkommende Modifikationen.

Eine weitere applikationsspezifische Erweiterung ist die Speicherung der aktuellen MS-Parameter über den gesamten Lauf, einschließlich der entsprechenden Spektren.

Service und Unterstützung weltweit, auch vor Ort

Agilent bietet Ihnen optimale Kundendienstleistungen im Bereich der chemischen Analytik. Mit unserer ausgereiften Kommunikationstechnologie und Infrastruktur können wir nahtlos in mehr als 40 Ländern tätig sein und Sie unterstützen.

Weitere Informationen

Wenn Sie mehr zum Thema Agilent LC/MSD TOF oder zu anderen Agilent Produkten und Serviceleistungen erfahren möchten, rufen Sie uns an:

Deutschland: 0800 / 603-1000
(gebührenfrei)
Österreich: 01 /25125-6800
Schweiz: 0848 803560

Oder informieren Sie sich im Internet unter:

www.agilent.com/chem

Agilent Technologies Life Science Produkte werden mit einem ISO 9001 zertifizierten Qualitätssystem entwickelt und hergestellt.

Änderungen vorbehalten

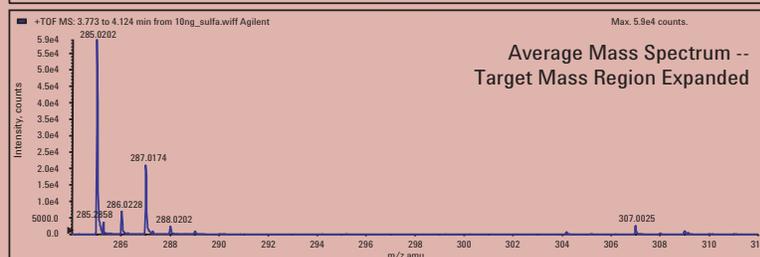
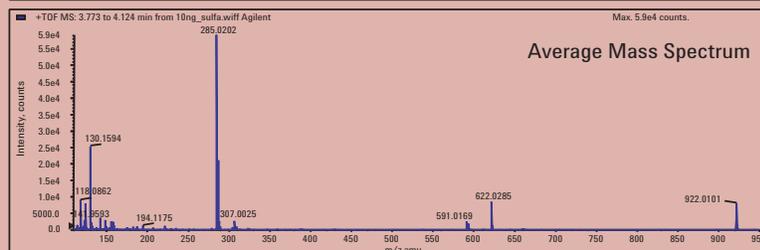
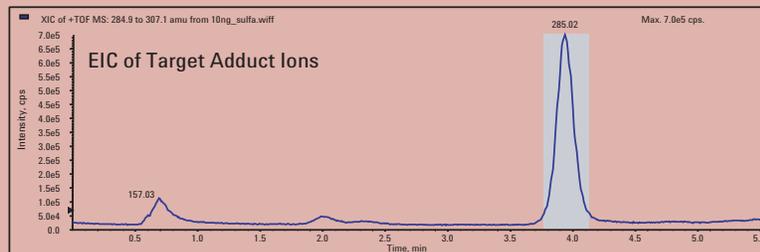
(c) Agilent Technologies, Inc. 2003

Gedruckt in den Niederlanden, August 2003
5988-9597DEE

Empirical Formula Confirmation Report

Page 1 of 1

Empirical Formula: **C10H9CIN4O2S** †Exact Mass: **284.01347** †Sample Name: **10 ng sulfa** †Sample ID:
Data File Name: **p:\Projects\sulfa 2\Data\10ng_sulfa.wiff** †Acq Time: **May 08 2003, 12:05:38 PM**



Species	Abundance (counts)	Target Mass (amu)	Measured Mass (amu)	Mass Error (m/z)	Mass Error (ppm)
[M+H] ⁺	59329.42	285.02075	285.02019	-0.00056	-1.97
[M+Na] ⁺	2799.10	307.00270	307.00248	-0.00021	-0.70