

简化水污染物的筛查

The Measure of Confidence



安捷伦水质筛查 LC/MS 个人化合物数据库与谱库

利用精确质量数可靠地完成目标与疑似污染物的筛查

随着新法规的实施以及对药物和个人护理产品 (PPCP) 等新兴污染物越来越多的关注，研究人员对全面水质筛查方法的需求正在持续增加。

将 TOF 或 Q-TOF LC/MS 仪器与全新安捷伦水质筛查个人化合物数据库与谱库 (PCDL) 相结合，您可以对 1400 多种水污染物实现筛查，同时还能利用精确质量 MS/MS 完成高度可靠的鉴定。

该谱库还具有支持回顾性分析的优点，因为全离子 MS/MS 谱图采集使您能够测量几乎无限多化合物的母离子和碎片离子。这就意味着您可以随时对数据进行再次分析或挖掘，无需再次运行样品即可研究样品中的新兴污染物。

PCDL 包含下列组件，可大幅节省时间并大大提高性能：

- 包含 1400 多种化合物的精确质量优化数据库
- 包含化合物类别和法规标签的可检索用户注释
- 包含 500 多种化合物的中文名称以及 250 多种化合物的日文名称
- 1000 多种化合物的精确质量 MS/MS 谱图
- 包含数据示例和熟悉练习的快速启动指南
- 包含详细 LC/MS 方法信息的应用简报
- 新版 PCDL Manager 软件



Agilent Technologies

利用 PCDL 进行的目标与疑似污染物筛查工作流程

安捷伦水质筛查 PCDL 与 LC/TOF 和 Q-TOF 仪器的精确质量功能相结合，能够实现：

- 使用全离子 MS/MS 采集全谱非靶向数据，并通过精确质量数、保留时间、同位素模式和碎片离子确证鉴定化合物
- 对所采集的谱图与谱库谱图进行假定匹配，无需分析原标准品
- 为更具针对性的筛查方法创建定制 PCDL
- 利用 MS 数据和“分子式查找”算法预测出疑似污染物列表，然后通过靶向 MS/MS 和谱库搜索确证污染物是否存在并避免假阳性结果

利用“分子特征提取”从自动 MS/MS 实验中挖掘数据，并从 PCDL 中搜索预测化合物

添加用户特有的化合物和谱库谱图以创建用于特定分析的 PCDL

利用新添加至 PCDL 的化合物执行数据的回顾性分析，无需重新运行样品

全新水质筛查 PCDL 使化合物确证和数据挖掘更轻松，即使是分析工作繁重的实验室也能对几乎所有化合物进行真正的全面筛查。

使用全离子软件轻松实现数据挖掘和明确鉴定



使用自动 MS/MS 通过谱库匹配实现化合物确证

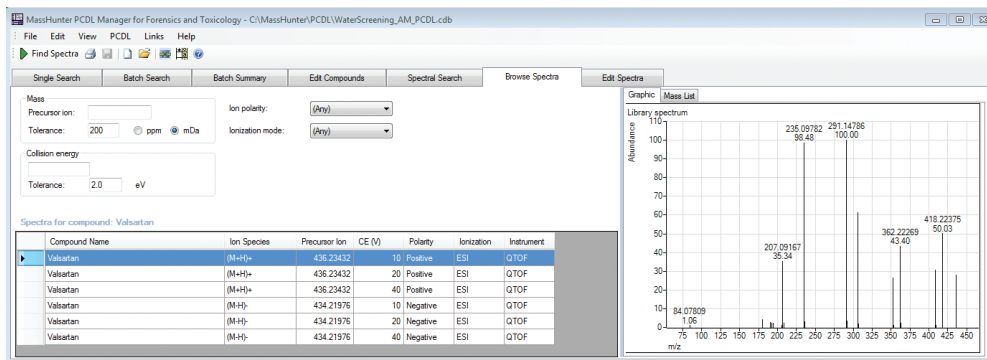


上图：
自动 MS/MS 谱图

中图：
镜像谱图

下图：
谱库谱图

PCDL Manager 软件能够轻松管理数据库与谱库



保护我们的水源并遵守法规标准

安捷伦水质筛查 PCDL 助您满足全球法规认证机构制定的严格要求。该 PCDL 包含 1400 多种化合物，其中包括下列法规和清单所规定的化合物：

欧盟法规

欧盟水框架指令规定的优先化合物

美国法规

美国国家环境保护局方法 521、535、539、1694、1698、1699 和 CCL4 草案

中国法规和列表

- 中国环保局筛查列表
- 中国农业行业标准方法 193、235、265、560
- 中国疾控中心调查列表
- 中国抗生素列表
- CN-GB 2763-2014

日本法规和列表

- 日本肯定列表
- JDWQS

可用类别标签

PPCP、农药、兽药、人用药物、极性代谢物、蓝藻毒素以及上述所有法规和列表的类别标签

数据库与谱库优化可确保获得出色的数据质量

每个优化数据库条目中包括：

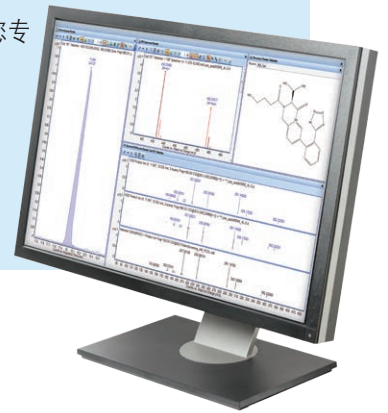
- 化合物常用名
- 中性分子的精确质量数
- IUPAC 名称
- 分子式
- 分子结构
- 离子类型（阴离子、阳离子或中性）
- CAS 号/PubChem 链接（如果存在）
- ChemSpider ID 和超链接（如果存在）

精确质量谱库优化：

- 将每个母离子和子离子峰修正至理论精确质量数
- 在 10、20 和 40 eV 的碰撞能量下采集谱图
- 适用时同时在正离子和/或负离子模式下测量谱图
- 按信号强度筛选谱图并优化：
 - 谱图噪音
 - 化学杂质
 - 错误设置的仪器参数

利用安捷伦独特解决方案完善您的水分析工作流程

- **MassHunter 数据采集和分析软件**使您能够快速执行高质量的筛查方法，且此方法可根据您未来的需求进行修改。用户还可以定制 PCDL
- **Agilent 1290 Infinity II 液相色谱系统**可实现无可比拟的色谱分离度和更短的运行时间，提供高灵敏度和高重现性筛查应用所需的高质量数据。此外，安捷伦喷射流电喷雾离子源能够显著降低水中新兴污染物的检测限
- **安捷伦 TOF 和 Q-TOF 液质联用系统**为您提供可靠的 MS 和 MS/MS 质量准确度。全离子 MS/MS 的全扫描功能使您能够随时回顾所有数据，从而对大量的疑似分析物和未知污染物进行筛查
- **专业的应用咨询**以及全套样品前处理产品、液相色谱柱固定相及其他消耗品能够提高分析效率并帮助您专注于核心工作



订购信息:

安捷伦水质筛查个人化合物数据库与谱库 (G6882CA)

下列是与水质筛查 PCDL 配合使用的其他必要内容:

- Agilent 6200 系列 TOF 或 6500 系列 Q-TOF 液质联用系统
- Agilent MassHunter 采集软件 B.05 (或更高版本) 以及 Windows 7 (64 位)
- Agilent MassHunter 定性分析软件 B.07 (或更高版本)
- Agilent MassHunter 定量分析软件 B.07 (或更高版本)

如需了解有关安捷伦水质筛查 PCDL 的更多信息, 请访问

www.agilent.com/chem/waterscreening

快速提高实验室分析效率

如需联系当地的安捷伦客户服务中心
或安捷伦授权的代理商, 请访问

www.agilent.com/chem/contactus-cn

或致电免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn

安捷伦培训中心:

<https://www.agilent.com.cn/zh-cn/training-events/events/agilent-education>

浏览和订阅 Access Agilent 电子期刊:

www.agilent.com/chem/accessagilent-cn

访问 www.agilent.com/chem/ms

了解市售分析仪和应用套装的说明

安捷伦产品仅用于研究。不可用于诊断目的。
本文中的信息、说明和性能指标如有变更, 恕不另行通知。

© 安捷伦科技 (中国) 有限公司, 2016

2016 年 2 月 2 日, 中国出版

5991-6536CHCN

