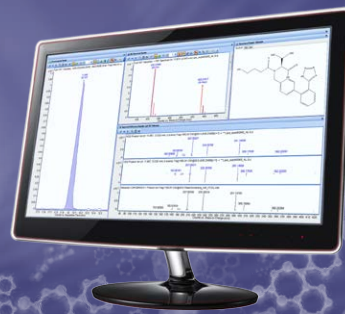


## 简化对法医毒理学化合物的 全面筛查



### 安捷伦法医毒理学 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

生物样品的法医毒理学分析十分具有挑战性，这是由于需要对多种痕量分析物进行鉴定和确证。其中，对不断发展的化学合成毒品进行始终准确的鉴定尤其困难。

结合使用 TOF 或 Q-TOF LC/MS 仪以及安捷伦法医毒理学个人化合物数据库与谱库 (PCDL) 可对 9200 多种分析物进行筛查，以便通过精确质量数 MS/MS 谱图对比可实现高度可靠的鉴定。在其他化合物种类中，PCDL 包含 750 多种化学合成毒品。

全谱分析一项突出的特点是能够进行回顾性分析。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。这也就意味着您无需重新分析即可随时对数据进行重新分析或挖掘，让您随时掌握这些新药物的最新动态。

#### PCDL 包含下列组件，可大幅节省时间并提高性能：

- 包含 9200 多种化合物的精确质量优化数据库
- 包含化合物类别标签的可检索用户注释
- 在三个不同碰撞能量下采集的 3900 多种化合物的精确质量数 MS/MS 谱图，以及加合离子和丢失离子谱图（共 13500 多张谱图）
- 包含数据示例和熟悉练习的快速启动指南
- 指导如何设置采集方法的方法设置指南
- 包含详细 LC/MS 方法信息的应用简报
- 最新版 PCDL Manager 软件
- 3 年的免费数据库与谱库升级



Agilent Technologies

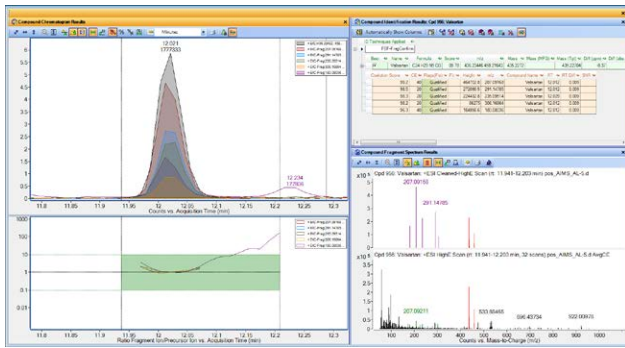
## 利用 PCDL 进行的目标与疑似污染物筛查工作流程

安捷伦法医毒理学 PCDL 与 LC/TOF 和 Q-TOF 仪器的精确质量功能相结合，能够实现：

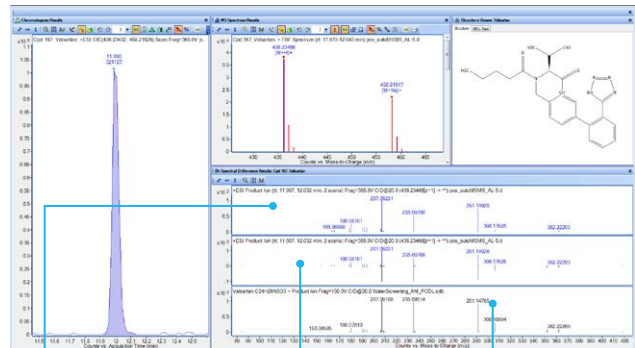
- 使用全离子 MS/MS 采集全谱非靶向数据，并通过精确质量数、保留时间、同位素模式和碎片离子确证鉴定化合物
- 对所采集的谱图与谱库谱图进行假定匹配，无需分析原标准品
- 为更具针对性的筛查方法创建定制 PCDL
- 利用质谱数据和“分子式查找”算法预测出疑似污染物列表

- 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

法医毒理学 PCDL 使化合物确证和数据挖掘更轻松，即使是高通量实验室也能对几乎所有化合物进行真正的全面筛查。

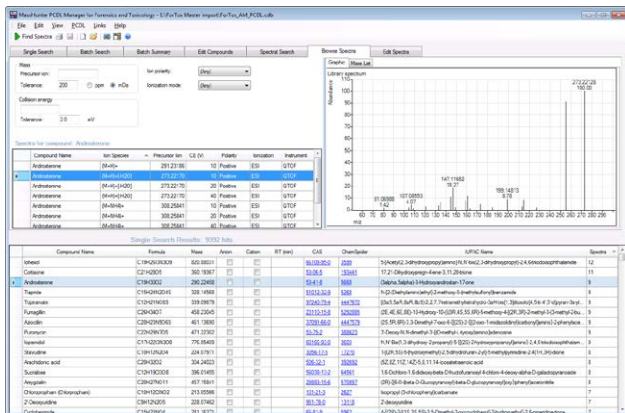


使用全离子软件轻松实现数据挖掘和明确鉴定。



上图：自动 MS/MS 谱图  
中图：镜像谱图  
下图：谱库谱图

使用自动 MS/MS 通过谱库匹配实现化合物确证。



PCDL Manager 软件能够轻松管理数据库与谱库。

## 高灵敏度的法医毒理学化合物筛查

安捷伦法医毒理学 PCDL 可帮助您随时掌握不断发展的新药物的最新动态。它包括 9200 多种化合物，主要有以下几种类别：

### 可用的类别标签：

人用兴奋剂、化学合成毒品、兽药、马药、农药、真菌毒素、大麻类药物、致幻剂、兴奋剂、苯二氮卓类药物、催眠药、安定药、巴比妥类药物、抗抑郁药、心血管药物、抗癫痫药、阿片类药物、同化剂、PPCP、激素以及内标。

## 数据库与谱库优化可确保获得更出色的数据质量

- 化合物常用名称和 IUPAC 名称
- 中性分子的精确质量数
- 分子式和分子结构
- 离子类型（阴离子、阳离子或中性离子）
- CAS 号/PubChem 链接（如存在）
- ChemSpider ID 和超链接（如存在）
- 修正至理论精确质量数的每个母离子和子离子峰
- 在 10、20 和 40 V 的碰撞能量下采集的谱图
- 适用时同时在正离子和/或负离子模式下测量的谱图
- 包含加合离子和丢失离子谱图
- 根据信号强度过滤，并经过谱图噪音、化学杂质和错误设置的仪器参数修正的谱图

## 根据您的需求量身定制的应用咨询

### 安装和现场培训：

- 经验丰富的服务人员将为您安装 PCDL，使用安捷伦校验样品验证所有功能，并使用支持软件进行现场培训

### 高级应用培训：

- 为您的目标样品设置筛查方法，帮助您充分利用 PCDL

## 利用安捷伦出色的解决方案完善您的分析工作流程

- **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，该方法可根据您未来的需求进行修改。您还可根据应用需求定制您的 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
- **安捷伦 TOF 和 Q-TOF LC/MS 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，从而对大量的疑似化合物和未知化合物进行筛查。另外，安捷伦喷射流电喷雾离子源能够显著降低检测限
- **安捷伦液相色谱柱、备件和样品前处理产品**延长仪器正常运行时间，获得出色的科学成果

## 订购信息

### 法医毒理学个人化合物数据库与谱库 (G3876CA)

下列是与法医毒理学 PCDL 配合使用的其他必要内容：

- Agilent 1260 或 1290 Infinity II 系列液相色谱
- Agilent 6200 系列 TOF 或 6500 系列 Q-TOF LC/MS 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 SP1 或更高版本
- Agilent MassHunter 定量分析软件 B.07 或更高版本
- 选件：G3876CA #001 安装和现场培训服务
- 选件：高级应用咨询 H2149A（美国）；R1736A（其他地区）

如需了解有关安捷伦法医毒理学 PCDL 的更多信息，请访问

[www.agilent.com/chem/pcdl](http://www.agilent.com/chem/pcdl)

### 快速提高实验室分析效率。

联系当地的安捷伦客户服务中心或安捷伦授权经销商，请访问

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

请访问 [www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms)

获取有关可用 LC/MS 数据库与谱库以及 GC/MS 分析仪的详细描述

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

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](http://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](http://www.agilent.com/chem/accessagilent-cn)

用于法医鉴定。

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2016  
2016 年 7 月 14 日，中国出版  
5991-7000CHCN