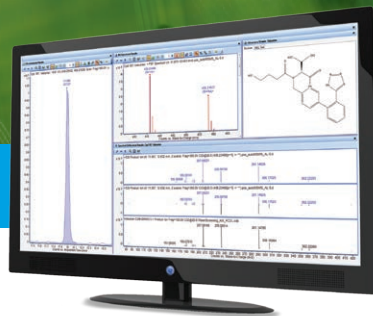


简化全面的 农药筛查

安捷伦农药 LC/MS 个人化合物数据库与谱库



为满足农药的严格监管标准，实验室必须能够对 1000 多种农药进行检测和鉴定。

传统的多目标物农药筛查方法以高灵敏度三重四极杆技术为基础，这种技术在指定化合物组的靶向分析中表现优异，但对农药检测对象的选择是一项日益严峻的挑战。因此，许多实验室现在利用非靶向全谱质谱 (MS)，还可研究超出靶向方法范围的化合物。

使用精确质量数可靠地完成目标物与疑似物的 筛查

将 TOF 或 Q-TOF LC/MS 与安捷伦农药个人化合物数据库与谱库 (PCDL) 相结合，您可以对 1700 多种农药进行筛查，还可通过比较精确质量数谱图可靠地鉴定化合物。

此外，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，从而实现回顾性分析。这就意味着您可以随时对数据进行重新分析或挖掘，无需重新运行样品即可研究样品中的新兴污染物。

安捷伦农药 PCDL 中包括以下组件，可节省时间并大幅提升性能

- 包含 1700 多种化合物的精确质量优化数据库
- 800 多种化合物的精确质量数 MS/MS 谱图，共 2700 多张谱图
- 包含化合物类别和法规标签的可检索用户注释
- 包括中文名称/日文名称
- 包含数据示例和熟悉练习的快速启动指南
- 指导如何创建采集方法的方法设置指南
- 包含详细 LC/MS 方法参数的应用简报
- 新版 PCDL Manager 软件
- 3 年的免费数据库升级



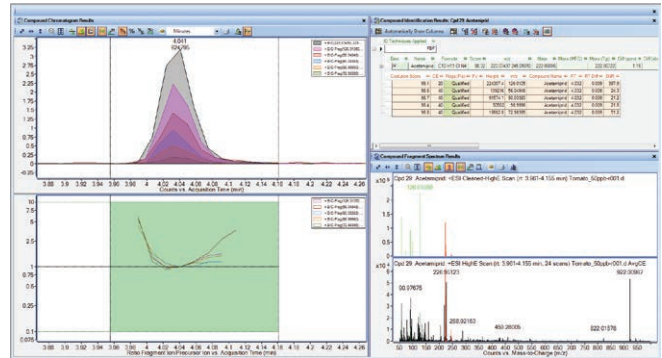
Agilent Technologies

对几乎无限多的化合物进行真正的全面筛查

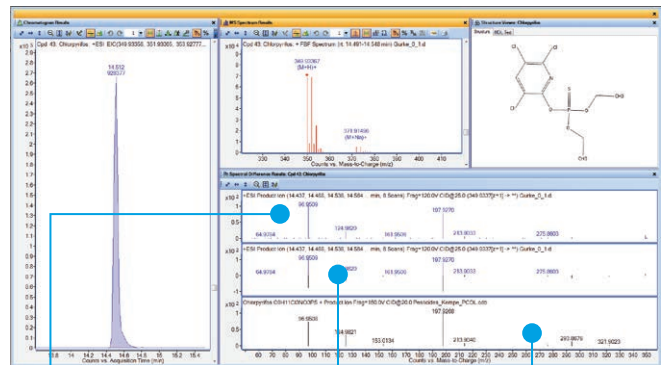
安捷伦农药 PCDL 与 LC/TOF 和 Q-TOF 仪器的精确质量功能相结合，能够实现：

- 使用全离子 MS/MS 采集全谱非靶向数据
- 通过精确质量数、保留时间、同位素模式和碎片离子确认**鉴定化合物**
- 对所采集的谱图与谱库谱图进行**假定匹配**，无需分析源标准品
- 为更具针对性的筛查方法**创建定制 PCDL**
- 根据质谱数据和“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**确认污染物并避免假阳性结果**
- 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
- **添加用户自己的化合物和谱库谱图**以根据其需要创建特定 PCDL
- 使用新增的 PCDL 化合物进行**回顾性数据分析**，无需重新分析样品

简而言之，农药 PCDL 使化合物确认和数据挖掘更轻松，尤其适用于高通量实验室。

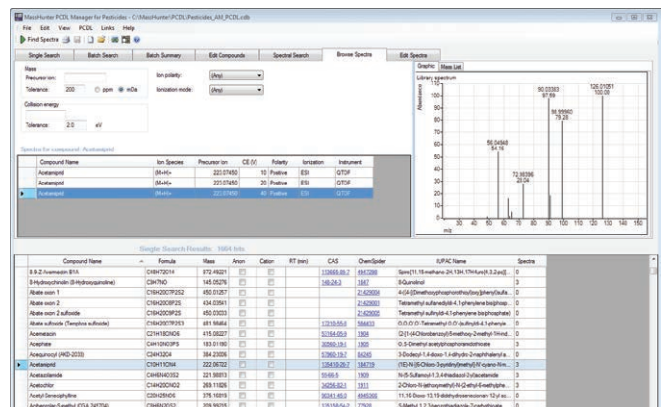


使用全离子软件实现直观的数据挖掘和明确鉴定。



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 通过谱库匹配可靠地确认化合物。



PCDL Manager 软件能够轻松控制数据库与谱库。

保护我们的食品供应并遵守法规标准

安捷伦农药 PCDL 助您满足全球食品法规认证机构制定的严格要求，包括：

EU

EC 396/2005、EU WFD

中国/日本

GB 2763-2014、NY 235、JPL、JDWQS

U.S.

40 CFR part 180、EPA 535/1699、CCL4 草案

可用类别标签

农药、杀虫剂、除草剂、杀真菌剂等

通过数据库与谱库优化大大提高数据质量

- 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
- 包含加合离子和丢失离子谱图
- 提供正离子和/或负离子模式下测量的谱图（如适用）
- 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

应用咨询让您专注于核心工作

安装和现场培训（可选）：

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，并帮助您熟悉支持软件。

高级应用培训（可选）：

为您的目标样品设置筛查方法，帮助您充分利用 PCDL。

了解如何更快速地分析更多农药。

请访问 www.agilent.com/chem/application-kits

完善农药分析工作流程

MassHunter 数据采集和分析软件

快速实施高质量的筛查方法，并根据您未来的需求对其进行修改。您还可根据应用需求定制您的PCDL。

Agilent 1290 Infinity II 液相色谱系统

获得无可比拟的色谱分离度和更短的运行时间，并提供高灵敏度和高重现性筛查所需的高质量数据。

安捷伦 TOF 和 Q-TOF LC/MS 系统

全离子 MS/MS 的全扫描功能使您能够随时回顾所有数据，从而可使用精确质量数对大量的疑似农药和未知农药进行筛查。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，获得出色科学成果。



订购信息：

农药个人化合物数据库与谱库 (G3878CA)

农药 PCDL 中不包括以下必要组件：

Agilent 1260 或 1290 Infinity II 液相色谱系统

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) 和 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)

可选：G3878CA #001 安装和现场培训服务

可选：高级应用咨询 H2149A (美国)；R1736A (其他地区)

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经销商，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)

如需获取有关可用 LC/MS 数据库与谱库以及 GC/MS 分析仪的详细描述，请访问

www.agilent.com/chem/ms

仅限研究使用。不可用于诊断目的。
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 6 月 22 日, 中国出版
5991-7060CHCN