

## 简化全面的 可萃取物与可浸出物筛查



### 安捷伦可萃取物和可浸出物 LC/MS PCDL



不论是药物、药包材、医疗器械制造商还是包装食品生产商，在对可萃取和可浸出 (E&L) 化合物进行灵敏且准确的分析研究方面承受着越来越大的压力。

安捷伦为小分子和大分子 E&L（挥发性、半挥发性、非挥发性、重金属和寡聚物）提供了一系列互补的技术和软件工具。

### 利用精确质量数可靠地完成目标与疑似污染物的筛查

可搜索 1000 多种可萃取物与可浸出物 — 根据 LC/MS TOF 或 Q-TOF 以及安捷伦可萃取物与可浸出物个人化合物数据库与谱库 (PCDL) 中获得的精确质量数质谱数据，可靠地鉴定化合物。

此外，根据全离子 MS/MS 谱图采集，对几乎无限的化合物执行回顾性分析。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可萃取/可浸出化合物。

### 安捷伦可萃取物与可浸出物 PCDL 包含以下信息，可以大幅节省时间，大大提升分析性能

- 包含 1000 多种化合物的精确质量优化数据库
- 包含 360 种化合物的精确质量数 MS/MS 谱图，总共超过 1300 张谱图
- 包含化合物类别和法规标签的可检索用户注释
- 超过 125 种化合物带有保留时间信息
- 中文名称
- 包含数据示例和熟悉练习的快速启动指南
- 新版 PCDL Manager 软件
- 3 年的免费数据库升级

# 对无限数量的化合物进行真正的全面筛查

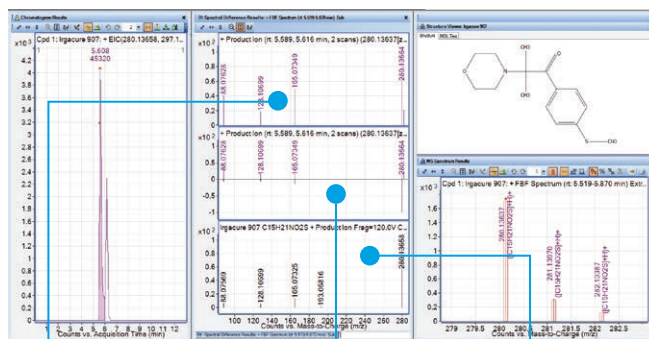
安捷伦可萃取物与可浸出物 PCDL 与 LC/TOF 和 Q-TOF 仪器的精确质量功能相结合，能够实现：

- 使用仅 MS 和全离子 MS/MS 等多种数据采集模式 **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**，无需分析源标准品
- 为更具针对性的筛查 **创建定制 PCDL**
- 基于质谱数据和“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** 并避免假阳性结果
- 利用“分子特征提取”或者“Profinder”从仅 MS 和自动 MS/MS 实验中 **挖掘数据**，并从 PCDL 中搜索预测化合物
- 利用 Mass Profiler 或 Mass Profiler Professional 软件的分子式生成和数据库搜索功能， **识别两组或多组样品之间的差异**
- **添加用户自己的化合物**和谱库谱图，创建满足用户特定需求的 PCDL
- 使用新添加的 PCDL 化合物 **执行回顾性数据分析**，无需再次运行样品

简而言之，可萃取物与可浸出物 PCDL 使化合物确证和数据挖掘更加轻松，是高通量实验室以及 LC/MS 新用户的理想工具。



使用全离子软件简化数据挖掘和明确鉴定。



# 对可萃取物与可浸出物分析 日益增长的需求做好充分准备

安捷伦可萃取物与可浸出物 PCDL 中的化合物类别和法规标签有助于轻松缩小筛查应用范围：

- 瑞士条例 (SR 817.023.21)、欧洲议会和理事会条例 (EC) No. 1272/2008 和 EU 2005/84/EC
- ELSIE (可萃取物与可浸出物安全信息交换数据库)
- 稳定剂、加速剂、中间体、残留单体、抗氧化剂、食品包装污染物和印刷油墨组分及其分解产物

## 通过数据库与谱库优化大幅提高数据质量

- 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 (如有)
- ChemSpider ID 和超链接 (如有)
- 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

## 优质的咨询服务让您专注于核心工作

### 安装和现场培训服务 (可选)：

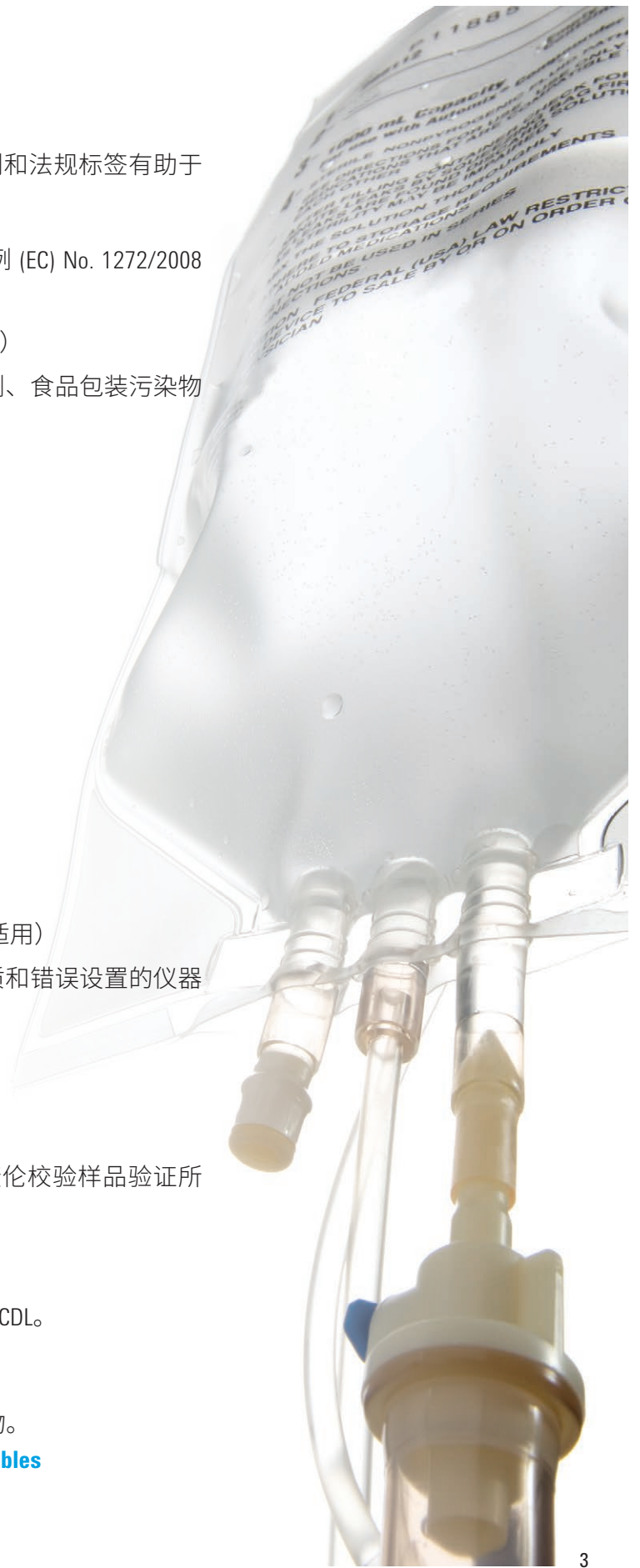
经验丰富的服务人员将为您安装 PCDL，使用安捷伦校验样品验证所有功能，并使用支持软件进行现场培训。

### 方法和应用服务 (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的可萃取物与可浸出物。

请访问 [www.agilent.com/chem/extractables-leachables](http://www.agilent.com/chem/extractables-leachables)



## 完善您的 E&L 分析工作流程

### MassHunter 数据采集和分析软件

能够快速执行高质量的筛查方法，并根据您未来的需求修改这些方法。您还可根据应用需求定制您的 PCDL。

### Agilent 1260 或 1290 Infinity II 液相色谱系统

实现无可比拟的色谱分离度和更短的运行时间，获得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

全离子 MS/MS 的全扫描功能使您能够随时回顾所有数据，通过精确质量数对大量的疑似化合物以及未知的可萃取物和可浸出物进行筛查。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，获得出色科学成果。



## 订购信息：

### 可萃取物和可浸出物 PCDL (G6890CA)

#### 未包含在 E&L PCDL 中的必需设备：

Agilent 1260 或 1290 Infinity II LC (超洁净配置)

Agilent 6200 系列 TOF 或 6500 系列 Q-TOF LC/MS

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)

可选：Agilent Mass Profiler 软件 (B.07.00 或更高版本)

可选：Agilent Mass Profiler Professional 软件 (14.5 或更高版本，随附有分子结构关联软件 B.07.00 和 MassHunter Profinder B.06.00)

可选：G6890CA #001 安装和现场培训服务

可选：方法和应用服务 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的代理商，请访问

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

或致电免费专线：

**800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)**

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](http://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 8 月 29 日, 中国出版  
5991-7373CHCN