

## 水中药物与个人护理品 (PPCP) 检测

### X500R QTOF 系统提升环境检测能力

使用 HPLC-X500R QTOF 高效液相色谱质谱联用系统，借助强大的 SCIEX OS 软件及高分辨二级谱库，建立水中药物与个人护理品 (PPCP) 同时定性定量分析方法。

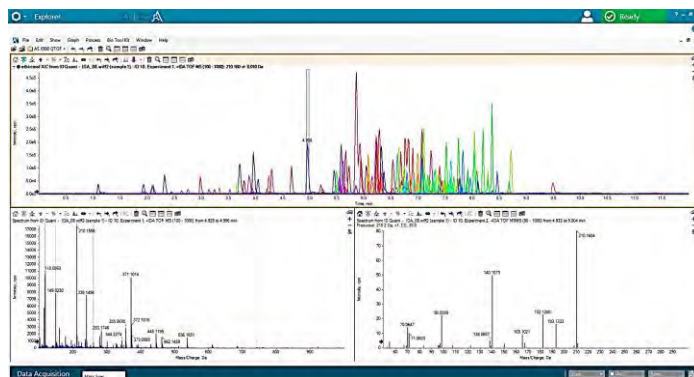
样品处理

第一步

- 水样直接进样分析



SCIEX OS 可以快速建立方法



SCIEX OS 可以方便浏览 TOF MS 及 TOF MS/MS 数据

液相方法

色谱柱	Phenomenex Kinetex Biphenyl, 100 x 2.1 mm, 2.6 μm column	
流动相 A	水 (含 0.1% 甲酸)	
流动相 B	甲醇 (含 0.1% 甲酸)	
流速	0.6 mL/min	
柱温	30 °C	
进样体积	100 uL	
梯度	<b>Time (min)</b>	<b>% B</b>
	0	2
	1	2
	7	65
	7.1	100
	9	100
	9.1	2
	12	2

## 质谱方法

**Method Overview**  
Device: X500 QToF  
Ion Source: TurboSpray

Method duration: 20 min    Total scan time: 0.760605 sec  
Estimated cycles: 1577

**Source and Gas Parameters**  
Ion source gas 1: 50 psi    Curtain gas: 30    Temperature: 450 °C  
Ion source gas 2: 70 psi    CAD gas: 7

**Experiment** IDA  
Polarity: Positive V    Spray voltage: 5500 V

**TOF MS**  
TOF start mass: 100 Da    Declustering potential: 80 V    Collision energy: 10 V  
TOF stop mass: 1000 Da    DP spread: 0 V    CE spread: 0 V  
Accumulation time: 0.2 sec

**IDA Criteria** Small molecule  
Maximum candidate ions: 10     Dynamic background subtraction  
Intensity threshold exceeds: 100 cps     Exclude former candidate ions  
For: 5 sec  
After: 1 occurrences

**Advanced Criteria**  
**TOF MSMS**  
Precursor ion: 1.27 Da    Declustering potential: 80 V    Collision energy: 35 V  
TOF start mass: 50 Da    DP spread: 0 V    CE spread: 15 V  
TOF stop mass: 1000 Da    Accumulation time: 0.05 sec

常规环境检测 SCIEX OS 软件 IDA(数据依赖性扫描) 推荐设置

## 数据处理

Index	Sample Name	Sample Type	Retention Time	Abundance	Area	Height	Width	Skew	Tail	Resolution	Signal-to-Noise	Peak Purity	Identification
1	Sample 1	Standard	1.23	10000	100000	0.5	0.1	0.05	0.02	10000	1000	0.99	Compound X
2	Sample 2	Standard	2.45	20000	200000	0.8	0.2	0.1	0.05	20000	2000	0.99	Compound Y

使用强大的 SCIEX OS 同时浏览定量结果与二级谱库匹配情况

## X500R 高分辨数据库

Compound	CAS Number	Formula	Parent Weight
Acetaminophen	103-90-2	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	151.16
Aspirin	50-81-3	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	180.15
Paracetamol	103-90-2	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	151.16

Download the XIC List

Download a FREE Trial of the MS/MS Library

下载完整药物与个人护理品 (PPCP) XIC 化合物列表 (包含分子式与精确质量数)  
下载免费试用版完整高分辨二级谱库 (包含 2135 种化合物)

想了解更多, 请浏览 [sciex.com/ X-All in One](http://sciex.com/X-All in One).

Answers for Science. Knowledge for Life.™

AB Sciex is doing business as SCIEX.

© 2015 AB Sciex. For research use only. Not for use in diagnostic procedures. The trademarks mentioned herein are the property of the AB Sciex Pte. Ltd. or their respective owners. AB SCIEX™ is being used under license.

RUO-MKT-07-4565-ZH-A



### SCIEX 中国公司

北京分公司  
地址: 北京市朝阳区酒仙桥中路24号院  
1号楼5层  
电话: 010-5808 1388  
传真: 010-5808 1390

上海公司及亚太区应用支持中心  
地址: 上海市长宁区福泉北路518号  
1座502室  
电话: 021-2419 7200  
传真: 021-2419 7333

广州分公司  
地址: 广州市天河区珠江江西路15号  
珠江城1907室  
电话: 020-8510 0200  
传真: 020-3876 0835

全国免费垂询电话: 800 820 3488, 400 821 3897

网址: [www.sciex.com.cn](http://www.sciex.com.cn)

微博: @SCIEX