**设备简介**

1. **三重四极杆液质联用仪(3500)**
2. **功能特色**

① Triple Quad 3500使用Turbo VTM离子源，确保化合物的高效电离，即使在大体积进样时，仍然能够有效消除交叉污染，在很宽的流速范围内进行可靠的定量分析。

②适用小分子的定性和定量检测，独有的MRM采集模式，具有灵敏度高、专属性强的优势，可实现多组分高通量同时定量分析，检测灵敏度可达ppb级水平。

1. **技术参数**

**液相部分**

超高压二元泵：最大耐压19000psi，流速0.1ml~5ml/min；进样范围：0.01uL~100uL，样品瓶位数120位；柱温箱：4~40℃，检测器：DAD二极管阵列检测器190~800nm；

**质谱部分**

检测范围：5-2000 amu；四级杆扫描速度：12000u/s；灵敏度：在血浆基质中，0.01ppb氯霉素，信噪比S/N≥20；分辨率：分辨率＞6000（扫描速度为50amu/s时）；扫描功能：Q1 MS、Q3 MS、子离子、母离子、中性缺失或增益、MRM，数据分析：MultiQuant 数据处理软件。

1. **应用举例**

AB SCIEX 3500应用广泛，可应用于药代动力学ADME、临床医学药物剂量监测、药物相互作用监测、食品农药残留检测、生物样品中毒品/滥用药物检测、食品和环境污染物筛查、毒物学及法医学分析、产品配方非法添加物筛查等。

**药代动力学ADME**

采用HPLC/UPLC色谱技术对目标化合物进行快速分离，结合三重四极杆独有的多反应监测模式(MRM)，优化目标化合物的质谱参数和用于定量分析的离子对，对基质组成复杂的生物样品中含量较低的代谢产物进行含量测定，得到相关药代动力学参数。  

图1.药时曲线图 图2.药代动力学参数

**复杂中药样品体系中多组分同时定量分析**

通过较低浓度的对照品建立目标化合物的质谱参数和定量离子对，对复杂中药样品体系中紫外吸收较弱或含量较低的目标化合物实现同时定量分析，可用于比较不同炮制方法、不同工艺、不同前处理方法、不同产地中药材或者中成药中目标化合物的含量测定及比较分析。



图3.质谱参数及离子对信息



图4.多成分含量测定TIC图谱(MRM模式)

1. **三重四极杆气质联用仪**

**(1)功能特色**

① Agilent 7890B可大体积进样，省去样品浓缩步骤，具备快速气相色谱的所有功能，比标准气相色谱仪快10倍，内置法规遵从功能。

②串联的7000D三重四极杆质谱采用dMRM采集模式，利用可加热镀金四极杆、三轴 HED-EM 检测器和快速排气功能减少了常见污染物、中性噪音，提高了质谱性能，从而获得理想的实验结果。

③具有保留时间锁定软件，无论何时何地都可以将方法转移至另外一台安捷伦气相色色谱仪使用。可将色谱图的保留时间以及质谱图的相关数据与数据库对比确定未知化合物分子式、分子量及其结构。

**(2)技术参数**

**气相部分**

流路压力设定范围：0-150 psi，流量设定范围：0-1250mL/min；最高使用温度：400˚C；

液体自动进样器：进样范围为0.1-50μL之间，样品瓶位数为16位；顶空进样器：样品数为12位，样品瓶为10或20mL。

**质谱部分**

检测范围：10-1050 m/z；仪器检测限指标及灵敏度：IDL(MRM): 10fg OFN；分辨率：0.4~4amu分辨可调；最大扫描速度：20,000 u/sec；最大MRM速度：888道/sec；具有全扫描、子离子、母离子、中性丢失、选择离子和多反应扫描模式；具有NIST14谱库和化学结构式库；

数据分析：MassHunter采集、分析软件。

**(3) 应用举例**

Agilent 7890B-7000D应用广泛，主要用于有机化学、药物化学、植物化学、生物化学、材料化学、食品化学等领域，包括挥发油、农药残留、香精香料等成分的痕量分析。

**挥发油组分分析**

通过气相程序升温将挥发油中的化合物进行分离，采用GC-MS联用技术，分析挥发油中成分，结合NIST数据库定性，以面积归一化法计算相对百分含量，并进行分类比较。

****

图5.GC-MS-TIC图谱

****

图6.NIST MS数据库检索

1. **超高效液相色谱仪**
2. **功能特色**

① Agilent 1290 Infinity II为高压二元泵系统，具有卓越的分离能力，在1200bar下流速可达2mL/min，800bar下流速可达5mL/min，同时能实现超快速梯度分离。

②采用固定定量管进样模式，实现超快速循环周期，具有针座自动反冲功能，将交叉污染降到最低，确保获得更高质量的数据。

③独有的二极管阵列检测器及带微流控光学波导技术的最大光强卡套式流通池，几乎完全消除了示差折光效应，降低了基线漂移和噪音的影响，极大的提高了检测灵敏度。

1. **技术参数**

二元泵系统：0.1-2ml/min为1300bar，2-5ml/min为800bar；流量范围：0.001ml/min~5.0ml/min；

检测器：二极管阵列检测器，波长范围为190~640nm；pH范围：1~14；柱温箱范围：4～110˚C；进样范围：0.1~40μL连续可调，软件系统为Agilent ChemStation采集与分析软件

1. **应用举例**

Agilent 1290 Infinity II应用广泛，主要用于有机化学、药物化学、植物化学、生物化学、材料化学、食品化学等领域化合物的分析、分离及定性和定量研究。

**中药复杂组分的定性定量分析**

超细粒径(≤3.7μm)的色谱柱填料结合高压二元泵系统，对中药复杂体系中的化合物实现超快速梯度分离，大大提高了检测灵敏度和色谱峰间的分离度，改善了色谱峰峰形，缩短了分析时间，高质量的实现对目标化合物的定性和定量分析。

****

图7.UPLC图谱