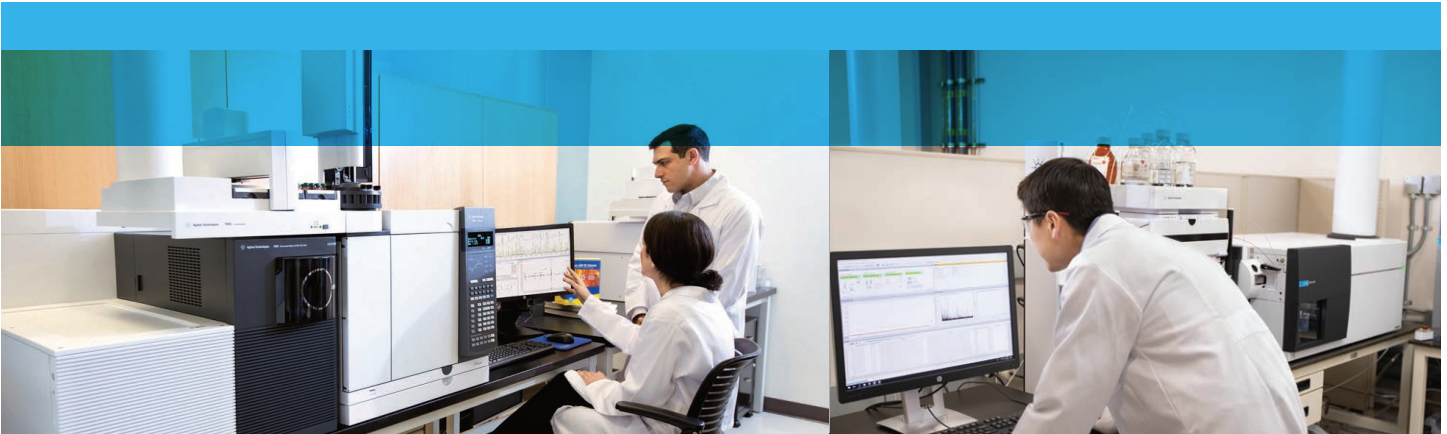


# 분석물질의 확실한 식별

광범위하고 포괄적인 통합 라이브러리를 갖춘 Agilent ChemVista 소프트웨어



Name	CAS	MW	SMILES
Prochloraz	13307-26-2	275.096	CC1=CN=C(C=C1)C(=O)NCCOC2=CC=C(Cl)C=C2Cl

**Prochloraz**

Chemical structure: CC1=CN=C(C=C1)C(=O)NCCOC2=CC=C(Cl)C=C2Cl

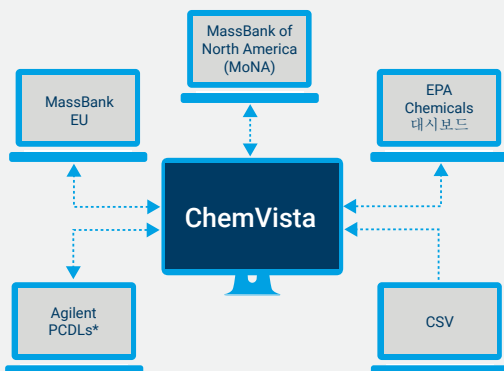
Number of spectra: 12

Latest Retention Times: 10.119, 10.119



## 복잡한 고분해능 데이터에서 신뢰할 수 있는 식별 방법을 찾고 계신가요?

구조 규명의 발전에도 불구하고, 경험적으로 accurate mass 고분해능 MS/MS와 전체 스캔 스펙트럼 비교는 표적 스크리닝 및 비표적 분석을 통해 미지의 물질을 식별하는 데 있어 여전히 표준으로 남아 있습니다. 그러나 질량 스펙트럼 라이브러리를 생성하는 데는 많은 비용과 시간이 소요됩니다. 이러한 라이브러리가 완성되더라도 쉽게 액세스할 수 없는 경우가 많아 워크플로 내에서 식별된 미지 물질의 범위가 제한됩니다.



\*PCDLs: 큐레이션된 개인 화합물 데이터베이스 및 라이브러리

Agilent ChemVista는 LC/Q-TOF 및 GC/Q-TOF 질량 분석법으로 생성된 스펙트럼 라이브러리를 관리하는 독립형 소프트웨어 응용 프로그램입니다. 여러 소스의 화합물 세부 정보, 머무름 시간 및 스펙트럼 정보를 통합합니다. 이 시스템은 다음과 같은 기능을 제공합니다.

- 여러 공공 데이터베이스와 큐레이션된 라이브러리에 액세스합니다
- 스펙트럼을 구성, 관리, 편집 또는 생성합니다
- MassHunter 데이터 분석 애플리케이션과 그 밖의 다른 애플리케이션에서 식별 워크플로를 용이하게 합니다
- 화합물을 더욱 확실하게 식별합니다

또한 ChemVista에는 광범위한 라이브러리 및 데이터베이스 콘텐츠가 포함되어 있습니다.

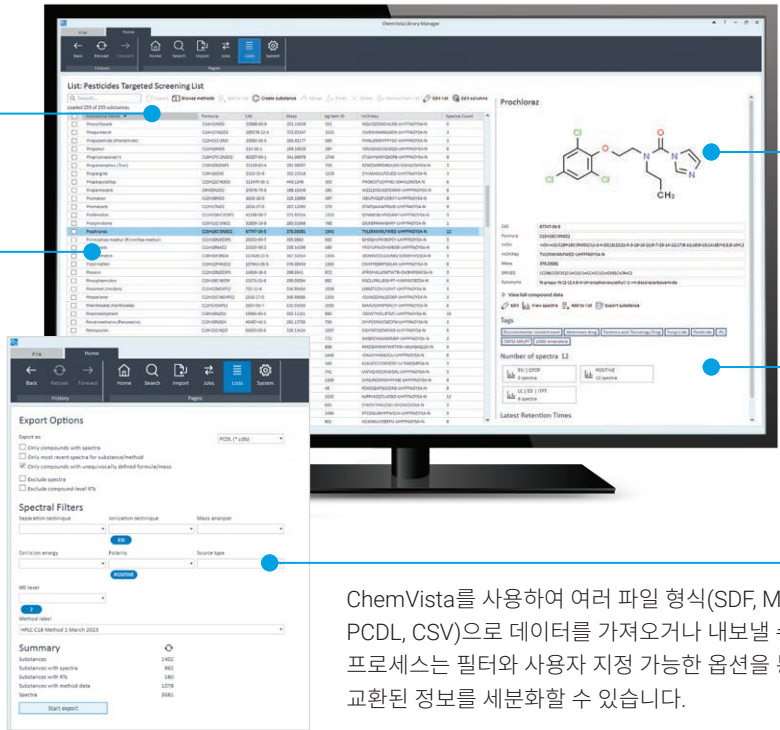
# 화합물 중심 구조로 스펙트럼을 쉽게 구성, 관리 및 편집할 수 있습니다

Agilent ChemVista 소프트웨어의 고유한 기능 중 하나는 여러 소스의 라이브러리 데이터를 관리할 수 있는 유연한 디자인입니다. 또한 Agilent ChemVista 소프트웨어는 머무름 시간(RT)과 지수(RI)를 포함함으로써 화합물 식별에 대한 신뢰도를 높여줍니다. 또한 분석법 정보 및 사용자 지정 가능한 분석법 라벨을 통해 이러한 값을 구성할 수 있으므로 각 화합물에 대해 여러 세부 정보를 편리하게 저장할 수 있습니다.

ChemVista에서 워크플로는 특정 분석과 관련된 목록을 중심으로 이루어집니다. 여러 소스의 스펙트럼 및 화합물 정보를 결합하여 스크리닝 목록을 쉽게 생성할 수 있습니다. 분류 및 병합 프로토콜을 사용하여 데이터를 간소화하여 중복을 제거하고 체계적인 개요를 나타낼 수 있습니다. 사용자 정의 가능한 목록에는 애질런트 ID, MassBank 및 PCDL의 질량 스펙트럼, 다양한 소스에서 수집한 유의어가 포함될 수 있습니다.

워크플로는 특정 분석과 관련된 목록을 중심으로 이루어집니다.

List는 다중 스펙트럼을 갖는 하나의 화합물이 여러 목록에 존재할 수 있도록 관리하는 도구입니다.



향상된 화학정보학은 구조와 식별자를 생성하여 중복을 제거하고 다운스트림 워크플로를 지원합니다.

자동화된 화학 분류 태그는 수동으로 큐레이션된 PCDL에서 할당됩니다.

ChemVista를 사용하여 여러 파일 형식(SDF, MassBank Text, PCDL, CSV)으로 데이터를 가져오거나 내보낼 수 있습니다. 이러한 프로세스는 필터와 사용자 지정 가능한 옵션을 통해 지원되어 교환된 정보를 세분화할 수 있습니다.


ChemVista가 고분해능 질량 분석(HRMS) 스펙트럼 관리의 효율성과 생산성을 어떻게 개선하는지 자세히 알아보려면 당사의 기술 개요를 [다운로드](#)하세요.

## 광범위하고 내장된 저분자 데이터베이스로 미지성분의 안정적인 식별을 지원합니다


Agilent ChemVista는 각각 여러 스펙트럼이 포함된 20,000개 이상의 화합물과 스펙트럼이 포함되지 않은 250,000개 이상의 기타 화합물을 제공합니다. 이러한 라이브러리와 데이터베이스를 통해 다음과 같은 분야에서 미지성분을 LC/Q-TOF 및 GC/Q-TOF로 확실하게 식별할 수 있습니다.

 식품 안전성 및 품질

 환경 분석

 추출물 및 침출물(E&L)

 법독성학

 대사체학 및 METLIN

## 애질런트의 전문적인 지원을 받아보세요

CrossLab은 서비스와 소모품을 통합하여 워크플로 성공을 지원하고 생산성을 개선하며 운영 효율성을 향상시키는 애질런트 솔루션입니다. 애질런트는 모든 작업에 가치있는 정보를 제공하여 고객의 목표 달성을 지원합니다.

[www.agilent.com/crosslab](http://www.agilent.com/crosslab)에서 CrossLab에 대해 자세히 알아보세요.



추가 정보:

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

온라인 구매:

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

국가별 애질런트 고객 센터 찾기:

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

미국 및 캐나다

**1-800-227-9770**

[agilent\\_inquiries@agilent.com](mailto:agilent_inquiries@agilent.com)

유럽

[info\\_agilent@agilent.com](mailto:info_agilent@agilent.com)

아시아 태평양

[inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:inquiry_lsca@agilent.com)

DE11788104

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2023  
2023년 5월 24일, 한국에서 발행  
5994-5965KO

한국애질런트테크놀로지스(주)  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
A+ 에셋타워 9층, 06621  
전화 : 82-80-004-5090 (고객지원센터)  
팩스 : 82-2-3452-2451  
이메일 : [korea-inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:korea-inquiry_lsca@agilent.com)

