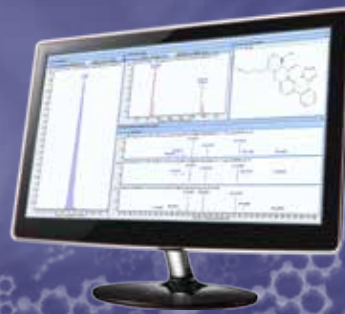


# VEREINFACHEN SIE IHR UMFASSENDES SCREENING AUF VERBINDUNGEN IN DER FORENSISCHEN TOXIKOLOGIE



## Agilent LC/MS Personal Compound Database and Library (PCDL) für forensische Toxikologie

### Zuverlässiges Screening auf Zielsubstanzen und mutmaßliche Verbindungen durch Messung der akkuraten Masse

Aufgrund der vielen Analyten, die im Spurenbereich identifiziert und bestätigt werden müssen, ist die forensische toxikologische Analyse von biologischen Proben eine Herausforderung. Besonders schwierig ist es, bei der Identität der ständig neu auftkommenden Designerdrogen auf dem Laufenden zu bleiben.

Durch die Kombination von TOF- oder Q-TOF-LC/MS-Geräten mit der Agilent Personal Compound Database and Library (PCDL) für forensische Toxikologie können Sie auf mehr als 9200 Analyten screenen und diese mithilfe der Accurate-Mass-MS/MS-Spektren mit großer Zuverlässigkeit identifizieren. Neben anderen Verbindungsklassen enthält die PCDL mehr als 750 Designerdrogen.

Eine herausragende Funktion der Analyse des vollständigen Spektrums ist die Möglichkeit, nachträgliche Analysen durchzuführen. Mit der All Ions MS/MS-Datenakquisition können alle Vorläufer-Ionen und Fragmente für eine nahezu unbegrenzte Anzahl an Verbindungen gemessen werden. Das bedeutet, dass Sie die Daten jederzeit ohne Wiederholungsanalysen erneut analysieren oder durchsuchen können. Dadurch bleiben Sie im Hinblick auf neu in Umlauf kommende Drogen stets auf dem neuesten Stand.



### Die folgenden in der PCDL enthaltenen Komponenten sparen Zeit und optimieren die Leistung:

- Kuratierte Accurate-Mass-Datenbank mit mehr als 9200 Verbindungen
- Durchsuchbare Benutzeranmerkungen mit Markierungen zur Verbindungsklasse
- Accurate-Mass-MS/MS-Spektren für mehr als 3900 Verbindungen, aufgenommen mit 3 unterschiedlichen Kollisionsenergien, plus Addukt- und Verlustspektren (über 13 500 Spektren insgesamt)
- Kurzanleitung mit Datenbeispielen und Einweisungsübungen
- Leitfaden zum Aufsetzen der Methode zur Erstellung von Methoden zur Datenerfassung
- Application Note mit detaillierten Informationen zu LC/MS-Methoden
- Neueste Version der PCDL Manager Software
- 3 Jahre kostenlose Upgrades von Datenbank und Bibliothek



**Agilent Technologies**

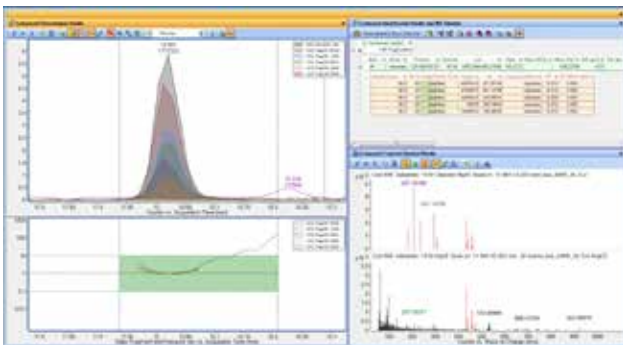
## Arbeitsabläufe für das Screening auf Zielsubstanzen und mutmaßliche Verbindungen mit der PCDL

Mit der Agilent PCDL für forensische Toxikologie in Kombination mit den Messfunktionen der akkuraten Masse der LC/TOF- und Q-TOF-Geräte können Sie:

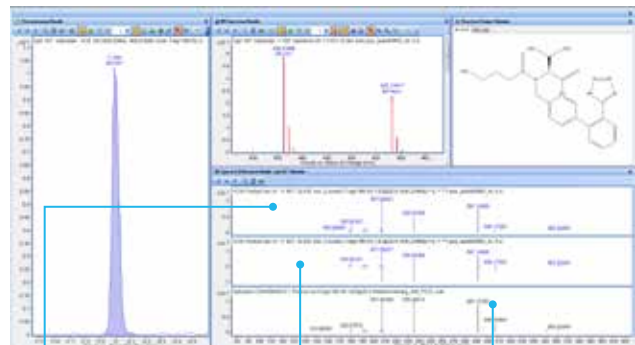
- Nicht-zielspezifische Daten der Gesamtspektren mittels All Ions MS/MS aufnehmen und durch akkurate Masse, Retentionszeit, Isotopenmuster und Fragmentbestätigung Verbindungen identifizieren.
- Mutmaßliche Übereinstimmungen der aufgenommenen Spektren mit Bibliotheksspektren ermitteln – Bezug von Standards ist nicht erforderlich.
- Eine benutzerspezifische PCDL für ein gezielteres Screening erstellen.
- Eine Liste der mutmaßlichen Verbindungen mit MS-Daten und dem „Find by Formula“-Algorithmus vorschlagen.

- Das Vorhandensein einer Kontamination bestätigen und falschpositive Verbindungen mit gezielten MS/MS-Experimenten und Bibliothekssuche eliminieren.
- Daten von Auto-MS/MS-Experimenten mittels „Molecular Feature Extraction“ durchsuchen und nach vorgeschlagenen Verbindungen im Abgleich mit der PCDL suchen.
- Eigene Verbindungen und Bibliotheksspektren hinzufügen, um für Ihre Analysen-spezifische PCDL zu erstellen.
- Nachträgliche Analyse der Daten für neu zur PCDL hinzugefügte Verbindungen ohne eine Wiederholungsanalyse der Proben durchführen.

Die PCDL für forensische Toxikologie macht die Bestätigung von Verbindungen und das Data-Mining einfacher – auch für Labors mit hohem Probendurchsatz. Sie können ein umfassendes Screening auf eine unbegrenzte Anzahl von Verbindungen durchführen.



Einfaches Data-Mining und eindeutige Identifizierung mit der All Ions Software.



**Oben:** Auto MS/MS-Spektrum  
**Mitte:** Beide Spektren gespiegelt  
**Unten:** Bibliotheksspektrum

Bestätigung von Verbindungen durch Übereinstimmung mit der Bibliothek mittels Auto-MS/MS.



Die PCDL Manager Software gestaltet die Verwaltung der Datenbank und Bibliothek einfach.

## Screening mit hoher Empfindlichkeit auf Verbindungen in der forensischen Toxikologie

Die PCDL für forensische Toxikologie von Agilent hilft Ihnen, bei der stets wachsenden Anzahl neuer Arzneimittel und Drogen auf dem Laufenden zu bleiben. Sie enthält mehr als 9200 Verbindungen wie z. B.:

### Verfügbare Klassenmarkierungen:

Menschliche Dopingmittel, Designerdrogen, Veterinär-Arzneimittel, Pferdearzneimittel, Pestizide, Mykotoxine, Cannabinoide, Halluzinogene, Stimulanzien, Benzodiazepine, Schlafmittel, Neuroleptika, Barbiturate, Antidepressiva, kardiovaskuläre Medikamente, Antiepileptika, Opioide, Anabolika, PPCP, Hormone, interne Standards.

## Kuratierung der Datenbank und Bibliothek stellt höchste Datenqualität sicher

- Trivialname und IUPAC-Name der Verbindung
- Akkurate Masse des Neutramoleküls
- Molekularformel und Struktur
- Ionentyp (Anion, Kation oder neutral)
- CAS-Nummer/PubChem-Link (falls vorhanden)
- ChemSpider-ID und Hyperlink (falls vorhanden)
- Jeder Vorläufer- und Produkt-Ionen-Peak wird auf die theoretische akkurate Masse korrigiert
- Mit einer Kollisionsenergie von 10, 20 und 40 eV aufgenommene Spektren
- Im positiven und/oder negativen Ionen-Modus aufgenommene Spektren (falls zutreffend)
- Enthält Addukt- und Verlustspektren
- Nach Signalintensität gefilterte und für das Rauschen des Spektrums, chemische Verunreinigungen und falsch eingestellte Geräteparameter kuratierte Spektren

## Für Ihre Anforderungen maßgeschneiderte Applikationsberatung

### Installation und Einweisung:

- Erfahrene Servicemitarbeiter führen die Installation der PCDL durch, überprüfen alle Funktionen mit einer Checkout-Probe von Agilent und weisen in die unterstützende Software ein.

### Erweiterte Applikationsberatung:

- Wir helfen Ihnen gerne dabei, die PCDL optimal zu nutzen, indem wir Screening-Methoden für die für Sie relevanten Proben erstellen.

## Ergänzen Sie Ihre Arbeitsabläufe in der Analytik mit richtungsweisenden Lösungen von Agilent

- **Mit der MassHunter Software zur Datenakquisition und -analyse** können Sie hochwertige Screening-Methoden einführen und diese an Ihre künftigen Anforderungen anpassen. Sie können zudem die PCDL an Ihre Applikationsbedürfnisse anpassen.
- **Das Agilent 1290 Infinity II LC-System** bietet unübertroffene chromatographische Auflösung bei kürzerer Analysendauer und liefert die qualitativ hochwertigen Daten, die Sie für empfindliche und reproduzierbare Screening-Applikationen benötigen.
- **Agilent TOF- und Q-TOF-LC/MS-Systeme** liefern verlässliche MS- und MS/MS-Massengenauigkeit. Mit der Full-Scan-Funktion der All Ions MS/MS-Spektren erhalten Sie ständigen Zugang zu allen Daten, sodass Sie auf eine große Anzahl von mutmaßlichen und unbekanntem Verbindungen screenen können. Darüber hinaus senkt die Agilent Jet Stream Elektrospray-Ionenquelle die Nachweisgrenzen drastisch.
- **LC-Säulen, Zubehör und Produkte zur Probenvorbereitung** steigern die Betriebszeit und erzielen hervorragende wissenschaftliche Ergebnisse.

## Bestellinformationen

### Personal Compound Database and Library für forensische Toxikologie (G3876CA)

Die folgenden Voraussetzungen sind erforderlich, jedoch nicht im Umfang der PCDL für forensische Toxikologie enthalten:

- Agilent Infinity II LC der Serien 1260 oder 1290
- Agilent TOF LC/MS der Serie 6200 oder Q-TOF LC/MS der Serie 6500
- Agilent MassHunter-Erfassungssoftware B.05 oder höher und Windows 7 64-Bit
- Agilent MassHunter Qualitative Analysis-Software B.07 SP1 (oder höher)
- Agilent MassHunter Quantitative Analysis-Software B.07 oder höher
- OPTIONAL: G3876CA #001 Installations- und Einweisungsservice
- OPTIONAL: Erweiterte Applikationsberatung H2149A (Nord-, Mittel-, Südamerika); R1736A (andere Regionen)

Weitere Informationen über die Agilent PCDL für forensische Toxikologie erhalten Sie im Internet unter [www.agilent.com/chem/pcdl](http://www.agilent.com/chem/pcdl)

### Mit Ihrem Labor bei der Produktivität auf die Überholspur.

Wenden Sie sich an Ihren lokalen Agilent Vertriebsbeauftragten oder an autorisierte Agilent Vertriebspartner unter

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

Oder rufen Sie uns an unter **0800 603 1000**  
(Deutschland)

Unter [www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms) finden Sie eine Beschreibung der erhältlichen LC/MS-Datenbanken und -Bibliotheken und der GC/MS-Analyser

Für forensische Zwecke.

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2016  
Veröffentlicht in den USA, 14. Juli 2016  
5991-7000DEE