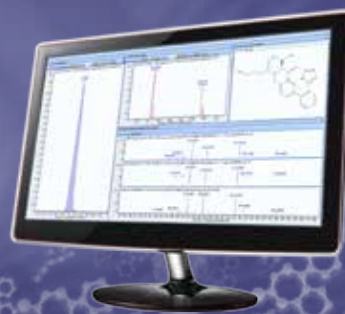


SIMPLIFIEZ VOTRE DÉPISTAGE COMPLET DES COMPOSÉS DE TOXICOLOGIE MÉDICO-LÉGALE



Bibliothèque et base de données de composés personnelles LC/MS Agilent de Toxicologie médico-légale

Dépistage des composés ciblés et suspects en toute confiance à l'aide de la masse exacte

L'analyse de toxicologie médico-légale des échantillons biologiques est un défi à cause des nombreux analytes à l'état de traces à identifier et confirmer. Rester à la pointe dans l'identification des drogues de synthèse évoluant continuellement est particulièrement difficile.

Vous pouvez dépister plus de 9 200 analytes en combinant les instruments TOF ou Q-TOF LC/MS avec la bibliothèque et base de données de composés personnelles de toxicologie médico-légale Agilent (PCDL), résultant en une identification hautement fiable par comparaison de spectre de masse exacte MS/MS. Parmi les autres classes de composés, la PCDL comprend plus de 750 drogues de synthèse.

Une fonctionnalité exceptionnelle de l'analyse de spectre totale est la capacité d'analyse rétrospective. Grâce à l'acquisition All Ions MS/MS, les ions précurseurs et les fragments peuvent être mesurés pour un nombre presque illimité de composés. Cela signifie que vous pouvez ré-analyser et collecter les données à tout moment - sans refaire l'analyse - ce qui vous permet de rester bien informé sur les nouvelles drogues qui arrivent sur le marché.



La PCDL inclut les composants suivants, permettant d'économiser du temps et d'optimiser vos performances :

- Une base de données de masse exacte structurée contenant plus de 9 200 composés
- Des notes utilisateur consultables indiquant la classe de composé
- Spectres MS/MS précis pour plus de 3 900 composés, acquis à 3 énergies de collision différentes, plus spectres d'ion adduit et de perte (total de plus de 13 500 spectres)
- Un guide de démarrage rapide avec des exemples de données et des exercices de familiarisation
- Un guide de configuration de méthode qui vous montre comment initialiser les méthodes d'acquisition
- Une note d'application contenant des informations détaillées sur la méthode LC/MS
- La dernière version du logiciel PCDL Manager
- Base de données et mises à niveau de la bibliothèque gratuites pendant 3 ans



Agilent Technologies

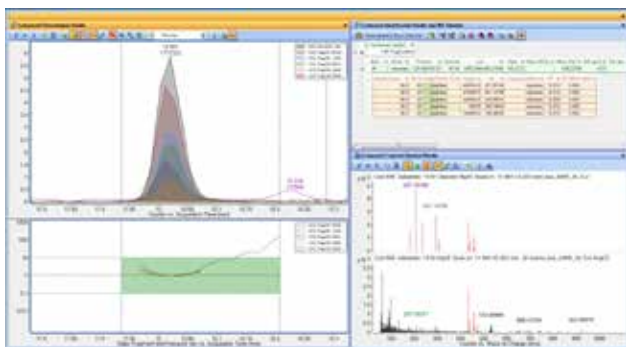
Processus de recherche de composés de criblage et suspects avec la PCDL

Grâce à la PCDL Agilent de Toxicologie médico-légale et aux performances de masse exacte des instruments LC/TOF et Q-TOF, vous pourrez :

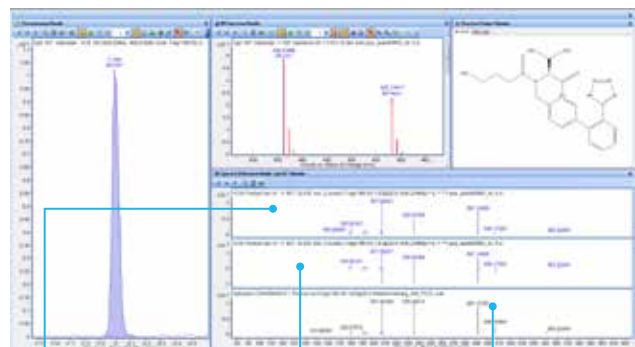
- acquérir des spectres complets, des données non ciblées en utilisant le mode All Ions MS/MS, et identifier les composés d'après leur masse exacte, temps de rétention, profils isotopiques et fragments ;
- trouver les correspondances présumées entre spectres acquis et spectres de la bibliothèque, sans recourir à des étalons ;
- personnaliser votre PCDL pour un dépistage plus sélectif ;
- proposer une liste de suspects avec les données MS et l'algorithme « Trouver la formule » ;
- confirmer la présence de contaminant et éliminer les faux positifs avec le MS/MS ciblé et la recherche dans la bibliothèque ;

- exploiter les données après injection en mode Auto MS/MS à l'aide de l'algorithme « extraction de motifs moléculaires », et rechercher les composés proposés dans la PCDL ;
- ajouter vos propres composés et spectres de bibliothèque, pour créer une PCDL spécifique adaptée à vos analyses ;
- analyser rétrospectivement vos données lorsque de nouveaux composés sont ajoutés à la PCDL, sans devoir ré-analyser les échantillons.

La PCDL de Toxicologie médico-légale facilite la confirmation des composés et l'extraction des données, même dans les laboratoires à forte activité, et permet un dépistage véritablement exhaustif d'un nombre illimité de composés.



Extraction des données aisée et identification non ambiguë avec le logiciel All Ions.



En haut : Spectre Auto MS/MS
Au centre : Spectre miroir
En bas : Spectre de la bibliothèque

Confirmation de composé par correspondance avec la bibliothèque des données « Auto MS/MS ».



Le logiciel PCDL Manager permet une gestion facile de la base de données et de la bibliothèque.

Dépistage à haute sensibilité pour les composés de toxicologie médico-légale

La PCDL de toxicologie médico-légale Agilent peut vous aider à rester à la pointe de la liste de nouvelles drogues en constante augmentation. Elle comprend plus de 9 200 composés - y compris les suivants :

Classes de composés disponibles :

Drogue dopantes, drogues de synthèse, médicaments vétérinaires, drogues équiniques, pesticides, mycotoxines, cannabinoïdes, hallucinogènes, benzodiazépines, hypnotiques, neuroleptiques, barbituriques, antidépresseurs, médicaments cardiovasculaires, médicaments anti-épileptiques, opioïdes, agents anaboliques, PPCPs, hormones, étalons internes.

L'organisation de la base de données et de la bibliothèque garantit une qualité exceptionnelle des données

- Nom commun du composé et nom IUPAC
- Masse exacte de la molécule neutre
- Formule moléculaire et structure
- Type d'ion (anion, cation ou neutre)
- Numéro CAS/liens PubChem (le cas échéant)
- Identifiant ChemSpider et lien hypertexte (le cas échéant)
- Chaque pic de précurseur et d'ion fils corrigé d'après la masse exacte théorique
- Acquisition des spectres à une énergie de collision de 10, 20 et 40 V
- Spectres mesurés en mode ions positifs et/ou ions négatifs si possible
- Comprend les spectres d'ion adduit et de perte
- Spectres filtrés pour intensité de signal et organisés pour bruit de spectre, impuretés chimiques, et paramètres de l'instrument incorrectement définis

Formation à l'analyse sur mesure par rapport à vos besoins

Installation et familiarisation :

- Le personnel de service expérimenté installera le PCDL, vérifiera toutes les fonctions avec un échantillon de contrôle Agilent, et effectuera la familiarisation avec le logiciel de support.

Formation à l'analyse avancée :

- Laissez-nous vous aider à tirer le meilleur de la PCDL en définissant des méthodes de criblage pour vos échantillons d'intérêt.

Améliorez vos méthodologies d'analyse avec les solutions de pointe d'Agilent

- **Le logiciel d'acquisition et d'analyse des données MassHunter** permet une mise en œuvre rapide de méthodes de dépistage de haute qualité et de modifier ces méthodes lorsque vos besoins évoluent. Vous pouvez également personnaliser votre PCDL pour correspondre à votre application.
- **Le système LC Agilent 1290 Infinity II** offre une résolution chromatographique inégalée et réduit vos temps d'analyse, pour vous fournir les données de haute qualité nécessaires à vos applications de criblage sensibles et reproductibles.
- **Les systèmes LC/MS TOF et Q-TOF d'Agilent** offrent une précision en masse fiable en mode MS et MS/MS. Le spectre complet en mode « All Ions MS/MS » vous donne accès à toutes les données et vous permet de rechercher de nombreux composés suspects et inconnus. De plus, la source d'ionisation électrospray Jet Stream d'Agilent abaisse considérablement les limites de détection.
- **Les Colonnes LC Agilent, les consommables, et les produits de préparation d'échantillons** augmentent votre disponibilité et atteignent les meilleurs résultats scientifiques.

Informations pour commander

Bibliothèque et base de données de composés personnelles de toxicologie médico-légale (G3876CA)

Pour utiliser la PCDL de Toxicologie médico-légale, les instruments et logiciels suivants sont nécessaires, mais non inclus :

- LC Agilent de série 1260 ou 1290 Infinity II
- Systèmes LC/MS TOF série 6200 ou Q-TOF série 6500 d'Agilent
- Logiciel d'acquisition MassHunter Agilent B.05 ou supérieur et Windows 7 64-Bit
- Logiciel d'analyse qualitative MassHunter Agilent B.07 SP1 ou supérieur
- Logiciel d'analyse quantitative MassHunter Agilent B.07 ou supérieur
- EN OPTION : G3876CA #001 Service d'Installation et Familiarisation
- EN OPTION : Formation à l'analyse avancée H2149A (Amérique) ; R1736A (autres régions)

Pour en savoir plus sur la PCDL Agilent de Toxicologie médico-légale, consultez notre site www.agilent.com/chem/pcdl

Augmentez rapidement la productivité de votre laboratoire.

Contactez votre représentant Agilent local ou le distributeur Agilent agréé sur www.agilent.com/chem/contactus

Ou appelez le **800-227-9770**
(aux États-Unis ou au Canada)

Visitez www.agilent.com/chem/ms
pour une description des bases de données LC/MS disponibles et des bibliothèques et analyseurs GC/MS disponibles

Pour utilisation médico-légale.

Ces informations peuvent être modifiées sans préavis.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Imprimé aux États-Unis, le 14 juillet 2016
5991-7000FR