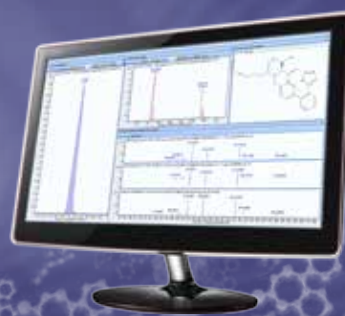


SEMPLIFICA LO SCREENING COMPLETO DEI COMPOSTI PER LA TOSSICOLOGIA FORENSE



Database e libreria personale di composti LC/MS Agilent per la tossicologia forense

Effettua screening affidabili delle sostanze target e sospette usando la massa accurata

L'analisi tossicologica forense dei campioni biologici è impegnativa, per via del gran numero di analiti presenti in tracce da identificare e confermare. Tenersi aggiornati sull'identità delle droghe sintetiche in continua evoluzione è particolarmente difficile.

È possibile effettuare lo screening di oltre 9.200 analiti combinando gli strumenti di LC/MS TOF o Q-TOF con database e libreria personale di composti (PCDL) Agilent per la tossicologia forense, al fine di ottenere un'identificazione altamente affidabile in massa accurata tramite il confronto degli spettri MS/MS. Tra le varie classi di composti, la PCDL include oltre 750 droghe sintetiche.

Una caratteristica eccezionale dell'analisi dello spettro completo è la capacità di effettuare l'analisi retrospettiva. L'acquisizione MS/MS All Ions permette di misurare gli ioni precursori e i frammenti di un numero praticamente illimitato di composti. Questo comporta la possibilità di rianalizzare o estrarre i dati in qualsiasi momento, senza ripetere le analisi, il che consente di tenersi sempre aggiornati sulle nuove droghe non appena arrivano sul mercato.



PCDL comprende i seguenti componenti, che permettono di risparmiare tempo e ottimizzare le prestazioni:

- Database in massa accurata contenente oltre 9.200 composti e relative note
- Note utente consultabili tramite ricerca che riportano le etichette delle classi dei composti
- Spettri MS/MS in massa accurata per oltre 3.900 composti, acquisiti a 3 diverse energie di collisione, più spettri degli addotti e dello ione derivante dalla perdita di frammenti (oltre 13.500 spettri in totale)
- Guida di avvio rapido con esempi di dati ed esercizi per la familiarizzazione
- Guida alla configurazione dei metodi, che mostra come impostare i metodi di acquisizione
- Nota applicativa con informazioni dettagliate sul metodo LC/MS
- Versione più recente del software PCDL Manager
- Aggiornamenti di database e libreria gratuiti per 3 anni



Agilent Technologies

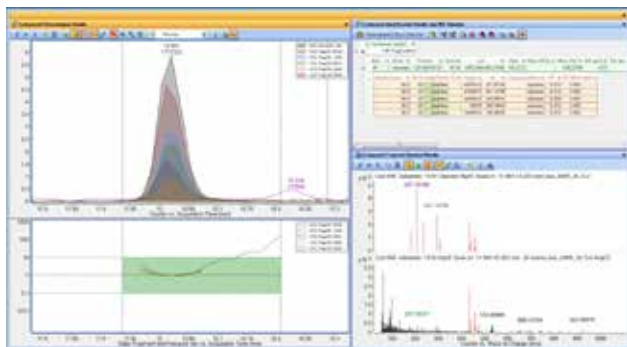
Flussi di lavoro per lo screening di sostanze target e sospette con PCDL

PCDL Agilent per la tossicologia forense, combinata con le capacità di massa accurata degli strumenti LC/TOF e Q-TOF, permette di:

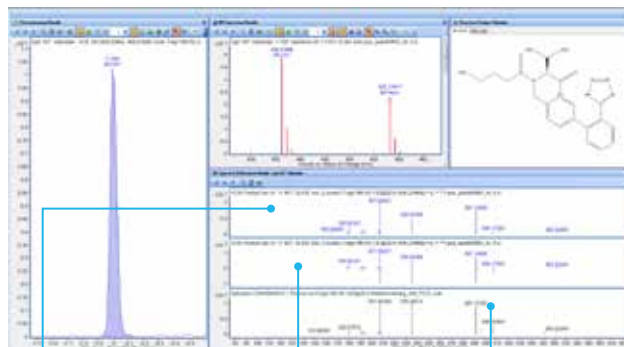
- Acquisire dati non target, relativi agli spettri completi, utilizzando la tecnica MS/MS All Ions e identificare i composti tramite la massa accurata, il tempo di ritenzione, il pattern isotopico e la conferma dei frammenti.
- Confrontare gli spettri acquisiti e gli spettri della libreria sulla base della corrispondenza presunta, senza necessità di fare ricorso a standard.
- Creare una PCDL personalizzata per un approccio allo screening più mirato.
- Proporre un elenco di sostanze sospette con i dati MS e l'algoritmo "Find by Formula".

- Confermare la presenza del contaminante ed eliminare i falsi positivi tramite MS/MS target e ricerca in libreria.
- Estrarre dati dagli esperimenti di spettrometria MS/MS automatizzata usando l'opzione "Molecular Feature Extraction" e confrontare i composti proposti con PCDL.
- Aggiungere composti personalizzati e spettri alla libreria per creare PCDL specifiche per le proprie analisi.
- Effettuare analisi retrospettive dei dati con composti appena aggiunti a PCDL senza necessità di ripetere le analisi dei campioni.

PCDL per la tossicologia forense facilita, anche per i laboratori a elevata produttività, la conferma dei composti e la ricerca dei dati, permettendo uno screening veramente completo di un numero illimitato di composti.



Semplice ricerca dei dati e identificazione sicura con il software All Ions.



In alto: Spettro MS/MS
Al centro: Spettro speculare
In basso: Spettro della libreria automatizzato

Conferma i composti tramite il confronto con la libreria, usando l'analisi MS/MS automatizzata.



Il software PCDL Manager permette una facile gestione del database e della libreria.

Screening ad alta sensibilità dei composti per la tossicologia forense

PCDL Agilent per la tossicologia forense consente di tenersi aggiornati sull'elenco sempre crescente delle nuove droghe. Include oltre 9.200 composti, tra cui:

Etichette di classificazione disponibili:

Sostanze dopanti per l'uomo, droghe sintetiche, farmaci veterinari, farmaci per equini, pesticidi, micotossine, cannabinoidi, allucinogeni, stimolanti, benzodiazepine, ipnotici, neurolettici, barbiturici, antidepressivi, farmaci cardiovascolari, antiepilettici, oppiacei, anabolizzanti, prodotti farmaceutici e per la cura della persona (PPCP), ormoni, standard interni.

La cura del database e della libreria garantisce la massima qualità dei dati

- Nome comune del composto e nome IUPAC
- Massa accurata della molecola neutra
- Formula e struttura molecolare
- Tipo di ione (anione, catione o neutro)
- Numero CAS/link a PubChem (se esistente)
- ID ChemSpider e relativo link (se esistente)
- Tutti i picchi degli ioni precursore e prodotto corretti per la massa accurata teorica
- Spettri acquisiti con un'energia di collisione di 10, 20 e 40 eV
- Spettri misurati in ionizzazione positiva e/o negativa, laddove possibile
- Include spettri di perdita e dell'addotto
- Spettri filtrati per intensità del segnale e corretti per rumore spettrale, impurezze chimiche e parametri dello strumento impostati in maniera errata

Consulenza sull'applicazione personalizzata in base alle necessità

Installazione e familiarizzazione:

- I nostri tecnici esperti installeranno PCDL, verificheranno tutte le funzioni con un campione di controllo Agilent e procederanno alla familiarizzazione con il software di supporto.

Consulenza sull'applicazione avanzata:

- Ti aiuteremo a sfruttare al meglio le potenzialità di PCDL configurando i metodi di screening per i campioni di interesse.

Completa il tuo flusso di lavoro di analisi con le soluzioni all'avanguardia di Agilent

- **Il software di acquisizione e analisi dei dati MassHunter** ti permette di implementare rapidamente metodi di screening di alta qualità, modificabili in modo da soddisfare le tue esigenze future. Puoi anche personalizzare la tua PCDL per adattarla alla tua applicazione.
- **Il sistema LC Agilent 1290 Infinity II** offre una risoluzione cromatografica impareggiabile e tempi di analisi ridotti, producendo dati di qualità elevata necessari per applicazioni di screening sensibili e riproducibili.
- **I sistemi LC/MS TOF e Q-TOF di Agilent** garantiscono un'accuratezza di massa di grande affidabilità per le analisi MS e MS/MS. La capacità di scansione completa della tecnologia MS/MS All Ions permette di accedere a tutti i dati in qualsiasi momento, rendendo possibile lo screening di una grande varietà di composti sospetti e incogniti. Inoltre, la sorgente ionica elettrospray Jet Stream di Agilent riduce drasticamente i limiti di rivelazione.
- **Le colonne per LC, i prodotti di consumo e i prodotti per la preparazione del campione di Agilent** consentono di incrementare la produttività e ottenere i migliori risultati scientifici.

Informazioni per gli ordini

Database e libreria personale di composti per la tossicologia forense (G3876CA)

Per PCDL per la tossicologia forense sono richiesti i seguenti elementi (non inclusi):

- LC Agilent serie 1260 o 1290 Infinity II
- Sistemi TOF Agilent serie 6200 o LC/MS Q-TOF Agilent serie 6500
- Software di acquisizione MassHunter Agilent versione B.05 o successiva e Windows 7 64-Bit
- Software di analisi qualitativa MassHunter Agilent versione B.07 SP1 o successiva
- Software di analisi quantitativa MassHunter Agilent versione B.07 o successiva
- OPZIONALE: G3876CA #001 Installazione e familiarizzazione
- OPZIONALE: Consulenza sull'applicazione avanzata H2149A (Americhe); R1736A (altre regioni)

Per maggiori informazioni su PCDL Agilent per la tossicologia forense, visita il sito www.agilent.com/chem/pcdl

Fai entrare il tuo laboratorio nella corsia preferenziale della produttività.

Contatta il rappresentante Agilent della tua zona o un distributore autorizzato all'indirizzo www.agilent.com/chem/contactus

Oppure telefona al numero verde **800-012-575** (Italia)

Visita il sito www.agilent.com/chem/ms per una descrizione dei database e delle librerie per LC/MS e degli analizzatori per GC/MS disponibili

Per uso forense.

Le informazioni fornite possono variare senza preavviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Pubblicato negli Stati Uniti, 14 luglio 2016
5991-7000ITE