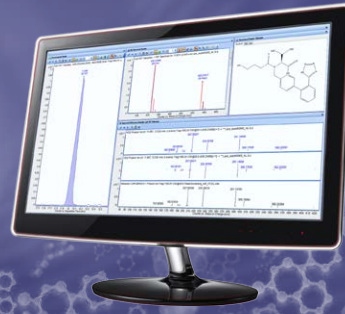


## 법의학 독성학 화합물의 종합 스크리닝 단순화



### 애질런트 법의학 독성학 LC/MS 개인 화합물 데이터베이스 및 라이브러리(PCDL)

#### Accurate Mass를 통한 표적 및 의심되는 화합물의 정확한 스크리닝

생물학적 시료의 법의학 독성학 분석은 많은 수의 극미량 수준 분석물질을 식별하고 확인해야 하기 때문에 어려움을 겪고 있습니다. 지속적으로 발전하는 신종합성마약류의 정보를 정확하게 파악하는 일이 특히 어렵습니다.

TOF 또는 Q-TOF LC/MS 기기와 애질런트의 법의학 독성학 개인 화합물 데이터베이스 및 라이브러리(PCDL)를 조합하여 9,200종 이상의 분석물질을 스크리닝하므로, Accurate Mass MS/MS 스펙트럼 비교를 통해 신뢰성 높은 식별이 가능합니다. PCDL은 기타 화합물 종류 중에서도 750종 이상의 신종합성마약류를 포함하고 있습니다.

전체 스펙트럼(Full-spectrum) 분석의 한 가지 우수한 특징은 소급 분석 능력입니다. All Ions MS/MS 수집을 이용해 사실상 무제한적으로 화합물의 전구 이온(Precursor ion)과 조각 이온(Fragment ion)을 측정할 수 있습니다. 이는 언제든지 재실행하지 않고도 데이터를 재분석하거나 마이닝할 수 있다는 의미이며, 최대한 신속하게 신종 마약류의 정체 식별할 수 있습니다.



#### PCDL에는 시간을 줄이고 성능을 극대화하는 다음과 같은 구성 요소가 포함됩니다.

- 9,200여 가지 화합물에 대한 큐레이트된 Accurate Mass 데이터베이스
- 화합물 종류 태그를 가지는 검색 가능한 사용자 메모
- 3개의 서로 다른 충돌 에너지에서 획득한 3,900종 이상의 화합물에 대한 Accurate Mass MS/MS 스펙트럼 이외에 부가물 및 손실 이온 스펙트럼(총 13,500 이상의 스펙트럼)
- 데이터 예제와 적응 연습 문제를 포함한 빠른 시작 안내서
- 수집 분석법의 설정 방법을 보여주는 분석법 설정 가이드
- 상세한 LC/MS 분석법 정보를 포함한 응용 자료
- 최신 버전의 PCDL Manager 소프트웨어
- 데이터베이스 및 라이브러리에 대한 3년 동안 무료 업그레이드

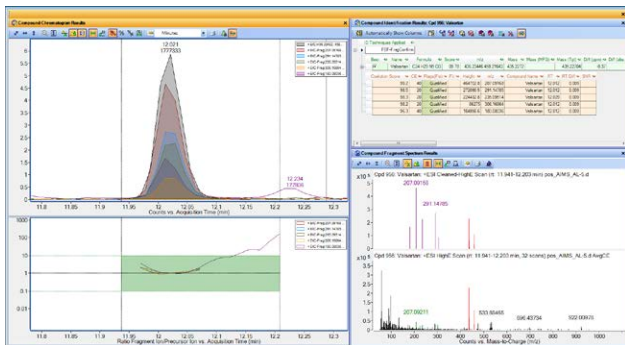
## PCDL을 이용한 표적 및 의심되는 화합물의 스크리닝 워크플로

애질런트 법의학 독성학 PCDL은 LC/TOF 및 Q-TOF 기기의 Accurate Mass 분석 능력과 함께 조합하여 다음과 같은 기능을 지원합니다.

- All Ions MS/MS를 이용하여 전체 스펙트럼(Full-spectrum), 예상치 못한 오염물질에 대한 데이터를 수집하고 Accurate Mass, 머무름 시간, Isotope pattern 및 Fragment confirmation을 통해 화합물을 식별합니다.
- 표준물질 없이 수집한 스펙트럼과 라이브러리 스펙트럼의 예측적인 일치도(Presumptive Matching) 확인작업을 수행합니다.
- 보다 집중된 스크리닝 방법을 위해 맞춤형 PCDL을 생성합니다.
- MS 데이터와 "Find by Formula" 알고리즘을 이용해 의심 목록을 제안합니다.

- 오염물질 존재를 확인하고 표적 MS/MS 및 라이브러리 검색을 통해 오인으로 검출된 물질을 제거합니다.
- "Molecular Feature Extraction"을 이용해 Auto MS/MS 실험으로부터 데이터를 발굴하고 제안된 화합물을 PCDL에서 검색합니다.
- 사용자 자신의 고유 화합물 및 라이브러리 스펙트럼을 추가하여 분석에 맞는 PCDL을 생성합니다.
- 재실행할 필요 없이, 새로 PCDL에 추가된 화합물로 데이터의 소급적 분석(Retrospective analysis)을 실시합니다.

법의학 독성학 PCDL은 심지어 대규모 실험실에서도 화합물 확인과 데이터 마이닝을 더 쉽게 만들어 주어 화합물 수의 제한을 받지 않는 종합 스크리닝을 수행할 수 있습니다.

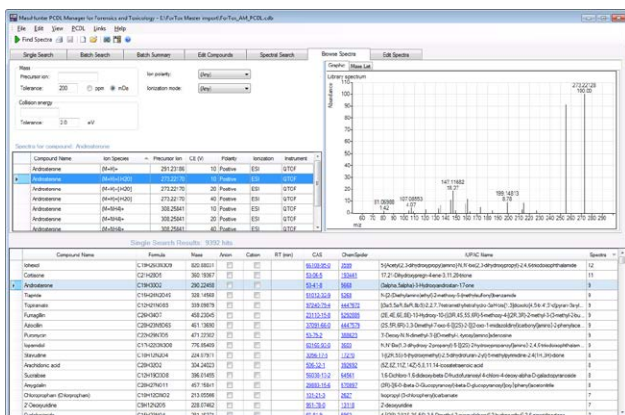


All Ions Software를 이용한 간편한 데이터 마이닝 및 정확한 식별



위: Auto MS/MS 스펙트럼  
중간: Mirror 스펙트럼  
아래: 라이브러리 스펙트럼

Auto MS/MS와 라이브러리 매칭을 통한 화합물 식별



PCDL Manager 소프트웨어를 이용한 데이터베이스와 라이브러리의 손쉬운 관리

## 법의학 독성학 화합물의 고감도 스크리닝

애질런트의 법의학 독성학 PCDL을 통해 지속적으로 출현하는 신종 마약류의 정보를 신속하게 확인할 수 있습니다. 다음을 비롯해 9,200종 이상의 화합물을 포함하고 있습니다.

### 이용 가능한 종류 태그

인체용 도핑 약물, 신중합성마약류, 수의학 약품, 말용 의약품, 농약, 마이코톡신, 카나비노이드, 환각제, 흥분제, 벤조디아제핀, 최면제, 신경이완제, 바르비투르(Barbiturate), 항우울제, 심혈관치료제, 간질약, 오피오이드, 동화 약물, PPCP, 호르몬제, 내부 표준물질.

## 최고의 데이터 품질을 보장하는 데이터베이스 및 라이브러리 큐레이션

- 화합물 일반명 및 IUPAC 이름
- 중성 분자의 정확한 질량
- 분자식 및 구조
- 이온 유형(음이온, 양이온 또는 중성 이온)
- CAS 번호/PubChem 링크(존재할 경우)
- ChemSpider ID 및 하이퍼링크(존재할 경우)
- 이론적 정밀 질량으로 보정된 각 Precursor ion 및 Product ion 피크
- 10, 20 및 40V 충돌 에너지에서 획득한 스펙트럼
- 해당하는 경우 양이온 및/또는 음이온 모드에서 측정된 스펙트럼
- 부가물 및 손실 이온 스펙트럼 포함
- 신호 세기에 필터링되고 스펙트럼 노이즈, 화학적 불순물 및 부정확하게 설정된 기기 파라미터에 큐레이팅된 스펙트럼

## 수요에 맞는 응용 컨설팅

### 설치 및 학습:

- 경험 많은 서비스 엔지니어가 PCDL을 설치하고, 애질런트 점검 시료를 이용해 모든 기능을 확인하며, 지원 소프트웨어를 통해 학습을 수행해 드립니다.

### 고급 응용 컨설팅:

- 관심 시료에 맞게 스크리닝 분석법을 설정하여 PCDL을 최대한 활용할 수 있도록 도와 드립니다.

## 애질런트의 첨단 솔루션을 이용한 완벽한 분석 워크플로

- **MassHunter 데이터 수집 및 분석 소프트웨어**를 이용하여 고품질 스크리닝 분석법을 신속하게 구현할 수 있고, 향후 요구에 맞게 수정할 수 있습니다. 또한 사용자가 응용 분야에 맞게 PCDL을 정의할 수도 있습니다.
- **Agilent 1290 Infinity II LC 시스템**은 탁월한 크로마토그래피 분리능과 절감된 분석 시간을 제공하며, 고감도와 재현성 높은 스크리닝 응용 분석에 필요한 고품질 데이터를 제공합니다.
- **Agilent TOF 및 Q-TOF LC/MS 시스템**은 신뢰성 있는 MS 및 MS/MS 스펙트럼의 질량 정확도를 제공합니다. All ions MS/MS 방식의 Full-scan 기능을 이용해 언제든지 모든 데이터에 접근할 수 있어서, 수 많은 의심되는 분석물과 미지 화합물을 스크리닝할 수 있습니다. 게다가, Agilent Jet Stream electrospray 이온 소스는 검출 수준을 현저히 낮춰줍니다.
- **Agilent LC 컬럼, 소모품 및 시료 전처리 제품**을 이용해 실험실 가동 시간을 늘리고 최고의 과학적 성과를 달성할 수 있습니다.

## 주문 정보

### 법의학 독성학 개인 화합물 데이터베이스 및 라이브러리(G3876CA)

다음은 필요하지만 법의학 독성학 PCDL에 포함되지 않았습니다.

- Agilent 1260 또는 1290 Infinity II 시리즈 LC
- Agilent 6200 시리즈 TOF 또는 6500 시리즈 Q-TOF LC/MS 시스템
- Agilent MassHunter 수집 소프트웨어 B0.05 이상, Windows 7 64비트
- Agilent MassHunter 정성 분석 소프트웨어 B0.07 SP1 이상
- Agilent MassHunter 정성 분석 소프트웨어 B0.07 이상
- 옵션: G3876CA #001 설치 및 학습 서비스
- 옵션: 고급 응용 컨설팅 H2149A(미주); R1736A(기타 지역)

애질런트 법의학 독성학 PCDL에 대한 자세한 내용은  
[www.agilent.com/chem/pcdl](http://www.agilent.com/chem/pcdl)에서 참조하시기 바랍니다

## 실험실의 생산성을 높여드립니다

현지 애질런트 담당자나 애질런트 공인  
대리점으로 문의하세요

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

또는 **800-227-9770**번으로 전화 주십시오

[www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms)를 방문하여  
이용 가능한 LC/MS 데이터베이스 및  
라이브러리와 GC/MS 분석기에 대해 자세히  
확인하실 수 있습니다

법의학용

이 정보는 사전 공지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2016  
2016년 7월 14일 한국에서 발행  
5991-7000K0

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 우)04418  
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부  
고객지원센터 080-004-5090 [www.agilent.co.kr](http://www.agilent.co.kr)