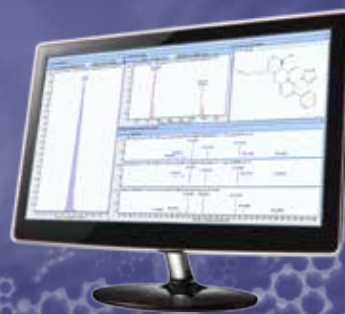


SIMPLIFIQUE O SEU SCREENING ABRANGENTE DE COMPOSTOS DE TOXICOLOGIA FORENSE



Banco de dados e bibliotecas de compostos pessoais de LC/MS Agilent para toxicologia forense

Execute com confiança o screening de alvos e suspeitos usando massa exata

A análise toxicológica forense de amostras biológicas é complexa devido ao grande número de analitos em nível de traços que deve ser identificado e confirmado. Permanecer no topo da identidade de drogas sintéticas em constante desenvolvimento é especialmente difícil.

Você pode fazer o screening de mais de 9.200 analitos ao combinar instrumentos LC/MS TOF ou Q-TOF com o Banco de dados e bibliotecas de compostos pessoais para toxicologia forense Agilent (PCDL), resultando em identificação altamente confiável por comparação de espectros de MS/MS de massa exata. Entre outras classes de compostos, a PCDL inclui mais de 750 drogas sintéticas.

Um recurso excelente da análise de espectro completa é a capacidade de realizar análise retrospectiva. A aquisição All Ions MS/MS permite medir ions precursores e fragmentos para um número praticamente ilimitado de compostos. Isso significa que é possível analisar novamente os dados a qualquer momento, sem refazer as corridas, o que permite manter-se atualizado em relação às drogas à medida que elas chegam às ruas.

A PCDL inclui os seguintes componentes que economizam tempo e aumentam o desempenho:

- Banco de dados selecionado de massa exata com mais de 9.200 compostos
- Notas de usuário pesquisáveis contendo identificações de classe do composto
- Espectros de MS/MS de massa exata para mais de 3.900 compostos, adquiridos em 3 energias de colisão diferentes, mais espectros de aduto e perda (mais de 13.500 espectros)
- Guia de início rápido com exemplos de dados e exercícios de familiarização
- Guia de configuração de método que mostra como definir métodos de aquisição
- Nota de aplicação com informações detalhadas do método LC/MS
- Versão mais recente do software PCDL Manager
- Atualizações gratuitas de banco de dados e biblioteca por 3 anos



Agilent Technologies

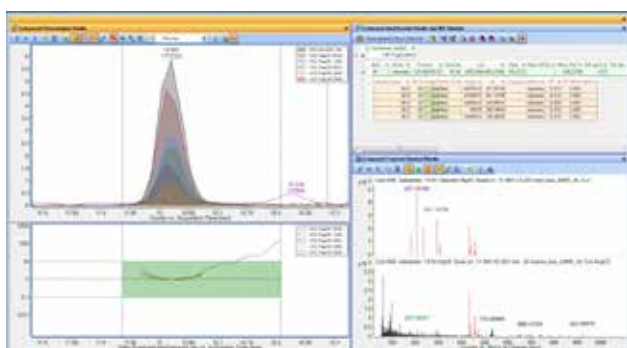
Fluxos de trabalho de screening de alvos e suspeitos com a PCDL

A PCDL para toxicologia forense Agilent, combinada aos recursos de massa exata dos instrumentos LC/TOF e Q-TOF, permite que você:

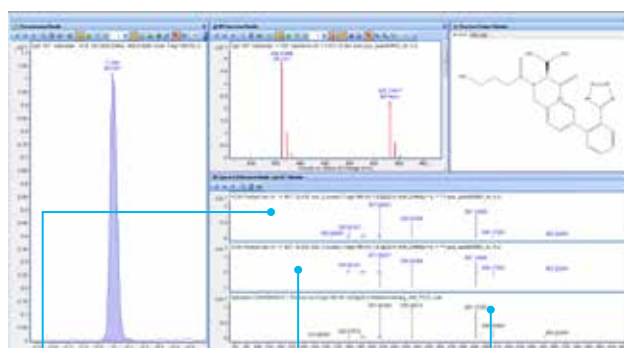
- Adquira dados de espectro total e não direcionados utilizando All Ions MS/MS e identifique compostos através de massa exata, tempo de retenção, padrão isotópico e confirmação de fragmento
- Execute correspondência presumida do espectro adquirido com o espectro da biblioteca, sem a necessidade de uma fonte de padrões
- Crie uma PCDL personalizada para obter uma abordagem de screening mais focada
- Proponha uma lista de suspeitos com dados de MS e o algoritmo "Find by Formula".

- Confirme a presença de contaminantes e elimine falsos positivos com MS/MS alvo e pesquisa na biblioteca
- Trabalhe com dados experimentais do MS/MS automático utilizando a função "Molecular Feature Extraction" e pesquise compostos propostos contra a PCDL.
- Adicione seus próprios compostos exclusivos e espectros de biblioteca para criar PCDLs específicas para a sua análise
- Realize análise retrospectiva de dados com compostos recentemente adicionados à PCDL, sem a necessidade de reexecução de amostras

A PCDL para toxicologia forense facilita a confirmação de compostos e o data mining, mesmo em laboratórios com alta produtividade, para executar um screening verdadeiramente abrangente de um número ilimitado de compostos.



Data mining fácil e identificação sem ambiguidades utilizando o software All Ions.



Topo: Espectro MS/MS automático
Meio: Espectro em espelho
Base: Espectro da biblioteca

Obtenha confirmação de compostos através da correspondência de biblioteca utilizando MS/MS automático.



O software PCDL Manager proporciona fácil gerenciamento do banco de dados e da biblioteca.

Screening de alta sensibilidade para compostos de toxicologia forense

A PCDL para toxicologia forense Agilent pode ajudá-lo a manter-se no topo da lista crescente de novas drogas. Ela inclui mais de 9.200 compostos, como:

Rótulos de classe disponíveis:

Drogas de doping humano, drogas sintéticas, drogas veterinárias, drogas para equinos, pesticidas, micotoxinas, canabinoides, alucinógenos, estimulantes, benzodiazepinas, hipnóticos, neurolépticos, barbitúricos, antidepressivos, medicamentos cardiovasculares, anti-epiléticos, opioides, agentes anabólicos, PPCPs, hormônios, padrões internos.

A curadoria do banco de dados e da biblioteca assegura a mais alta qualidade de dados

- Nome comum e nome IUPAC do composto
- Massa exata de molécula neutra
- Fórmula molecular e estrutura
- Tipo de íon (ânion, cátion ou neutro)
- Número CAS/link PubChem (se existir)
- ID e hyperlink ChemSpider (se existir)
- Pico de cada precursor e íon produto corrigido para a massa exata teórica
- Espectros adquiridos com energia de colisão de 10, 20 e 40 V
- Espectros medidos em modo de íon positivo e/ou negativo, onde aplicável
- Inclui espectros de aduto e perda
- Espectros filtrados para intensidade de sinal e curados para o ruído do espectro, impurezas químicas e parâmetros de instrumento definidos incorretamente

Consultoria de aplicação adaptada às suas necessidades

Instalação e familiarização:

- Uma equipe de serviço com experiência na instalação de PCDL examina todas as funções com uma amostra de verificação Agilent e faz a familiarização com o software de suporte.

Consultoria de aplicação avançada:

- Deixe-nos ajudá-lo a aproveitar ao máximo a PCDL ao configurar métodos de screening para as suas amostras de interesse.

Conclua seu fluxo de trabalho de análise com as soluções de ponta da Agilent

- **O software de aquisição e análise de dados MassHunter** permite que você implemente rapidamente métodos de screening de alta qualidade, que podem ser modificados para atender às suas necessidades futuras. Você também pode personalizar a PCDL para adequá-la à sua aplicação.
- **O sistema LC Agilent 1290 Infinity II** proporciona resolução cromatográfica inigualável e tempos de análise reduzidos, fornecendo os dados de alta qualidade que você precisa em aplicações de screening sensíveis e reproduzíveis.
- **Os sistemas LC/MS TOF e Q-TOF** oferecem exatidão de massa MS e MS/MS confiável. A capacidade total de varredura do All Ions MS/MS permite que você acesse todos os dados, sempre, de modo que seja possível examinar grandes números de compostos suspeitos e desconhecidos. Além disso, a fonte de íons eletrospray Agilent Jet Stream reduz bastante os limites de detecção.
- **Colunas, consumíveis e produtos para preparo de amostras de LC da Agilent** aumentam o tempo em atividade e obtenha os melhores resultados científicos.

Informação para pedidos

Banco de dados e bibliotecas de compostos pessoais para toxicologia forense (G3876CA)

Os seguintes itens são necessários, mas não estão incluídos com a PCDL para toxicologia forense:

- LC Agilent serie 1260 ou 1290 Infinity II
- Sistemas LC/MS TOF Agilent serie 6200 ou Q-TOF serie 6500
- Software de aquisição Agilent MassHunter B.05 ou superior e Windows 7 (64 bits)
- Software de análise qualitativa Agilent MassHunter B.07 SP1 ou superior
- Software de análise quantitativa Agilent MassHunter B.07 ou superior
- OPCIONAL: G3876CA #001 Serviço de instalação e familiarização
- OPCIONAL: Consultoria de aplicação avançada H2149A (Américas); R1736A (outras regiões)

Para obter mais informações sobre a PCDL para toxicologia forense Agilent, acesse www.agilent.com/chem/pcdl

Coloque o seu laboratório nos trilhos da produtividade.

Entre em contato com seu representante local Agilent ou com o distribuidor autorizado Agilent em www.agilent.com/chem/contactus

Ou ligue para **0800-728-1405**
(no Brasil)

Acesse www.agilent.com/chem/ms para consultar uma descrição de bancos de dados e bibliotecas de LC/MS e analisadores de GC/MS disponíveis

Para uso forense.

Essas informações estão sujeitas a alterações sem aviso prévio.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Publicado nos EUA, 14 de julho de 2016
5991-7000PTBR