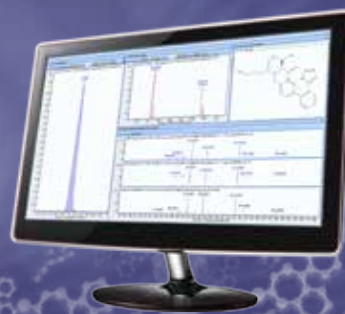


# ПРОСТАЯ ПРОЦЕДУРА КОМПЛЕКСНОГО СКРИНИНГА СОЕДИНЕНИЙ В СУДЕБНО- МЕДИЦИНСКОЙ ТОКСИКОЛОГИИ



**Персональная база данных и библиотека соединений от Agilent для ВЭЖХ-МС в судебно-медицинской токсикологии**

## Надежное выполнение направленного скрининга и скрининга предполагаемых примесей на основании точных масс

Судебно-медицинский токсикологический анализ биологических образцов — сложная процедура, поскольку необходимо идентифицировать и подтвердить наличие большого числа веществ в следовых количествах. Особенно сложно выполнять анализ постоянно меняющихся синтетических наркотиков.

Используя времяпролетные или квадрупольно-времяпролетные приборы ВЭЖХ-МС совместно с персональной базой данных и библиотекой соединений (PCDL) для судебно-медицинской токсикологии от Agilent, можно проводить скрининг более 9 200 анализов с надежной идентификацией на основании сравнения результатов МС-МС с точным определением масс. Среди прочих классов соединений в персональной базе данных и библиотеке содержится более 750 синтетических наркотиков.

Дополнительным преимуществом анализа полного спектра является функция ретроспективного анализа. Сбор данных по методике All Ions MS/MS позволяет проводить определение ионов-предшественников и фрагментарных ионов для практически неограниченного количества соединений. Это означает, что можно повторно анализировать и извлекать данные в любое время без необходимости повторной обработки, благодаря чему новые наркотические вещества могут быть проанализированы в момент их появления.

## Персональная база данных PCDL включает следующие компоненты, позволяющие экономить время и повышать качество работы:

- Редактируемая экспертами база данных точных масс для более чем 9 200 соединений
- Система пользовательских записей с возможностью поиска, содержащая метки классов соединений
- Спектры МС-МС с точно измеренными массами для более чем 3 900 соединений, полученные с использованием трех значений энергии соударений, а также аддукт и спектры потерь (всего более 13 500 спектров)
- Краткое руководство с примерами данных и ознакомительными упражнениями
- Руководство по настройке методики, помогающее подобрать методы сбора данных
- Рекомендации по применению с подробными сведениями о методиках ВЭЖХ-МС
- Последняя версия программного обеспечения PCDL Manager
- Бесплатные обновления базы данных и библиотеки в течение 3 лет



**Agilent Technologies**

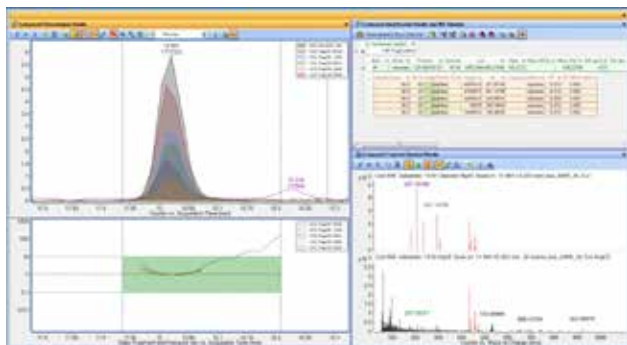
## Рабочие процессы направленного скрининга и скрининга предполагаемых примесей с использованием персональной базы данных PCDL

Преимущества совместного использования персональной базы данных и библиотеки для судебно-медицинской токсикологии от Agilent и времяпролетных и квадрупольно-времяпролетных систем ВЭЖХ с возможностью точного измерения масс:

- Ненаправленный сбор данных во всем масс-спектральном диапазоне с использованием режима All Ions MS/MS и идентификация соединений по точной массе, времени удерживания, изотопному распределению и на основании сопоставления спектров фрагментарных ионов
- Выполнение предварительного сопоставления полученного спектра с библиотечными спектрами без необходимости в поиске стандартов
- Создание пользовательской персональной базы данных и библиотеки для более направленного скрининга
- Возможность задать список предполагаемых соединений и алгоритм поиска по формуле
- Подтверждение присутствия загрязнителя и избавление от ложноположительных результатов с помощью целевого анализа МС-МС и поиска по библиотеке

- Анализ результатов экспериментов автоматической МС-МС с использованием алгоритма выделения молекулярных признаков и поиск предполагаемых соединений по персональной базе данных и библиотеке
- Создание пользовательских баз данных PCDL для конкретных аналитических нужд путем добавления собственных уникальных соединений и библиотечных спектров
- Выполнение ретроспективного анализа данных по соединениям, недавно добавленным в персональную базу данных и библиотеку, без необходимости повторной обработки проб

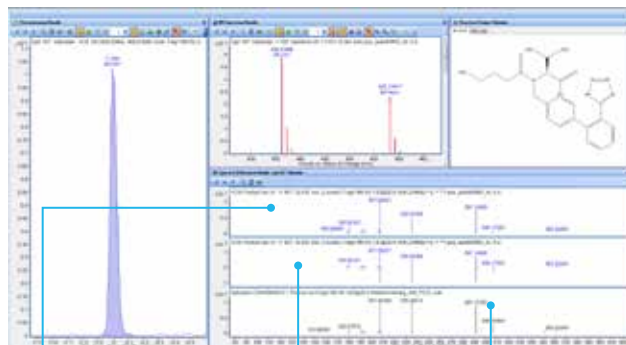
Персональная база данных и библиотека для судебно-медицинской токсикологии упрощает идентификацию соединений и анализ данных — даже для лабораторий с большим пробопотоком — и позволяет выполнять по-настоящему исчерпывающий скрининг неограниченного количества соединений.



Простота анализа данных и однозначная идентификация с помощью ПО All Ions



Программное обеспечение PCDL Manager обеспечивает простое управление базой данных и библиотекой



**Вверху** — спектр в режиме Auto MS/MS  
**Посередине** — зеркальный спектр «эксперимент/данные библиотеки»  
**Внизу** — библиотечный спектр

Подтверждение соединения по совпадениям с данными библиотеки с помощью режима Auto MS/MS

## Высококчувствительный скрининг соединений для судебно-медицинской токсикологии

Персональная база данных и библиотека для судебно-медицинской токсикологии от Agilent позволит не отставать от все растущего списка новых наркотиков. Она включает более 9 200 соединений и имеет перечисленные ниже преимущества.

### Доступные метки класса:

допинговые препараты для людей, синтетические наркотики, ветеринарные препараты, препараты для лошадей, пестициды, микотоксины, каннабиноиды, галлюциногены, стимуляторы, бензодиазепин, снотворные, нейролептики, барбитураты, антидепрессанты, средства для лечения сердечно-сосудистых заболеваний, противосудорожные препараты, опиаты, анаболики, фармацевтические препараты и средства личной гигиены, гормоны, внутренние стандарты.

### Регулярное редактирование экспертами базы данных и библиотеки обеспечивает высочайшее качество данных

- Указывается общепринятое название соединения и название по IUPAC
- Точная масса нейтральной молекулы
- Молекулярная формула и структура
- Тип иона (анион, катион или нейтральная молекула)
- Номер CAS или ссылка на базу данных PubChem (при наличии)
- Идентификационный номер в базе данных ChemSpider с гиперссылкой (при наличии)
- Все пики ионов-предшественников и дочерних ионов скорректированы по теоретически рассчитанным точным массам
- Спектры получены при энергии соударений 10, 20 и 40 В
- Спектры измеряются в режиме регистрации положительных и/или отрицательных ионов (если применимо)
- Наличие аддуктов и спектров потерь
- Спектры фильтруются по интенсивности сигнала и проверяются на предмет спектрального шума, химических примесей и неверно заданных параметров оборудования

### Методические рекомендации для ваших нужд

#### Установка и ознакомление:

- Опытные специалисты по обслуживанию установят персональную базу данных и библиотеку, проверят все функции с использованием контрольной пробы Agilent и проведут ознакомление с соответствующим программным обеспечением.

#### Расширенные методические рекомендации:

- Мы поможем вам максимально эффективно использовать персональную базу данных и библиотеку за счет настройки методик скрининга для интересующих вас проб.

### Передовые решения от Agilent для завершения процесса анализа

- **Программное обеспечение MassHunter для сбора и обработки данных**  
позволяет быстро внедрить высокоэффективные методики скрининга, которые можно модифицировать в соответствии с возникающими потребностями. Также можно настроить персональную базу данных и библиотеку соединений таким образом, чтобы они соответствовали вашим нуждам.
- **Система ВЭЖХ Agilent 1290 Infinity II**  
обеспечивает непревзойденное хроматографическое разрешение, ускорение анализа и получение высококачественных данных, необходимых для чувствительного и воспроизводимого скрининга.
- **Системы ВЭЖХ-МС от Agilent с времяпролетными и квадрупольно-времяпролетными масс-спектрометрами**  
обеспечивают точность определения массы в обычных и tandemных масс-спектральных измерениях. Возможность полного сканирования в режиме All Ions MS/MS предоставляет доступ ко всем данным в любое время, что позволяет выполнять скрининг большого количества предполагаемых и неизвестных соединений. Кроме того, съемный источник ионизации Agilent Jet Stream существенно снижает пределы обнаружения.
- **Колонки, расходные материалы и материалы для пробоподготовки Agilent для ВЭЖХ** увеличивают время работы и позволяют добиться наилучших результатов.

## Сведения о порядке заказа

### Персональная база данных и библиотека соединений для судебно-медицинской токсикологии (G3876CA)

Необходимы следующие компоненты, не включенные в персональную базу данных и библиотеку для судебно-медицинской токсикологии:

- Система ВЭЖХ Agilent 1260 или 1290 Infinity II
- Времяпролетная система Agilent ВЭЖХ-МС серии 6200 или квадрупольно-времяпролетная система ВЭЖХ-МС серии 6500
- Программное обеспечение для сбора данных Agilent MassHunter Acquisition версии В.05 (или выше) и 64-разрядная ОС Windows 7
- Программное обеспечение для качественного анализа Agilent MassHunter Qualitative Analysis версии В.07, пакет обновления 1 (или выше)
- Программное обеспечение Agilent MassHunter Quantitative Analysis версии В.07 или выше
- ДОПОЛНИТЕЛЬНО — услуги по установке и ознакомлению (G3876CA #001)
- ДОПОЛНИТЕЛЬНО — расширенные методические рекомендации (H2149A — для Северной и Южной Америки; R1736A — для других регионов)

Узнать подробнее о персональной базе данных и библиотеке от Agilent для судебно-медицинской токсикологии можно на странице [www.agilent.com/chem/pcdl](http://www.agilent.com/chem/pcdl)

### Скоростной и высокопроизводительный анализ в вашей лаборатории.

Контактные данные регионального представителя или официального дистрибьютора Agilent см. на странице [www.agilent.com/chem/contactus](http://www.agilent.com/chem/contactus)

Либо звоните по телефону **800-227-9770** (в США или Канаде)

Посетите страницу [www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms), чтобы ознакомиться с описанием доступных баз данных и библиотек для ВЭЖХ-МС и анализаторов ГХ-МС

Для использования в судебно-экспертизе.

Информация может быть изменена без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2016  
Напечатано в США 14 июля 2016 г.  
5991-7000RU