

## 简化法医毒理学化合物的 靶向筛查



### 安捷伦法医毒理学 tMRM 数据库

#### 利用 MRM 离子对数据库最大程度减少繁琐的方法开发

法医毒理学化合物的分析十分具有挑战性，原因有以下两点，分别是浓度低以及需要监测和定量分析的分析物数量过多。在考虑到这些变量的前提下，很难从一个可靠的起点开始进行方法开发。

安捷伦法医毒理学 tMRM 数据库结合安捷伦三重四极杆液质联用系统，快速建立的方法允许您在一次分析中对上百种分析物进行靶向筛查以及可靠定量分析。安捷伦已完成了大部分开发工作，使您有更多的时间生成高质量数据，从而满足法医毒理学研究中的严格要求。

安捷伦 tMRM 数据库包括上百个三重四极杆液质联用系统的离子对参数，帮助您创建 MRM、动态 MRM (dMRM) 或触发式 MRM (tMRM) 方法。您可选择最适合您分析需求的模式。

**tMRM 数据库包含下列组件，可大幅节省时间并最大限度提高性能：**

- 包含 2800 多种化合物的优化数据库
- 为所有化合物提供多达 10 个 MRM 离子对、碎裂电压和碰撞能量，适用于所有三重四极杆液质联用平台
- 包含数据示例和熟悉练习的快速启动指南
- 方法设置指南为您展示如何创建 MRM、动态 MRM 和触发式 MRM 方法
- 3 年的免费数据库升级

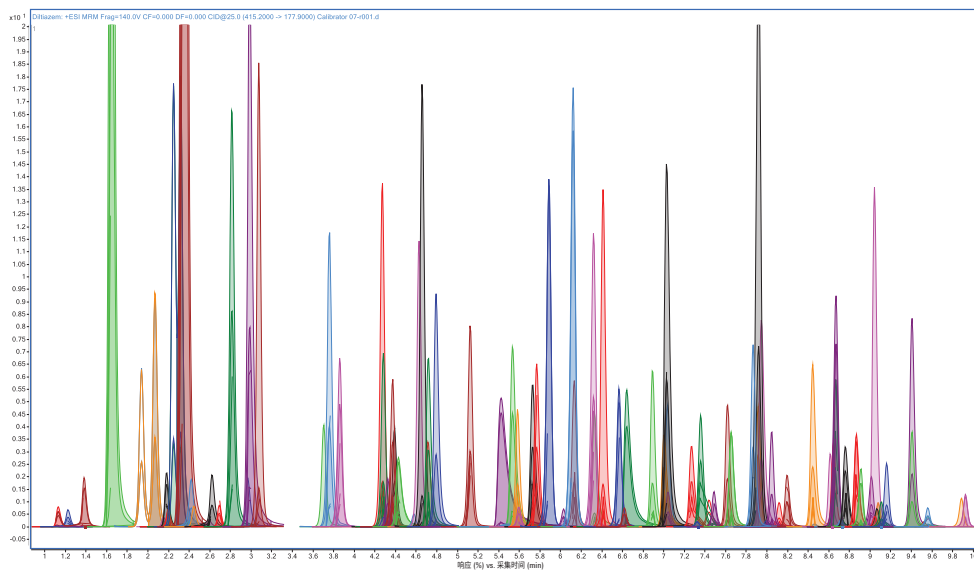


## 利用 tMRM 数据库进行靶向筛查工作流程

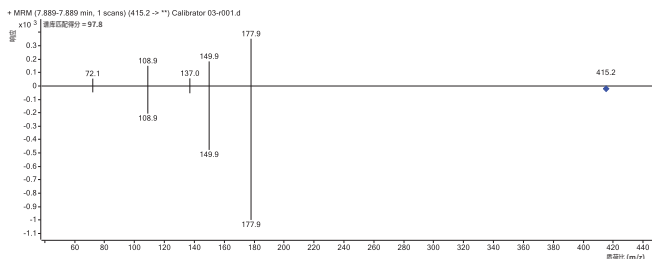
安捷伦法医毒理学 tMRM 数据库和参比谱库结合三重四极杆液质联用系统的高灵敏度和准确定量功能，可进行不同的工作流程，其中包括：

- 通过导入数据库中的化合物名称、主要 MRM 离子对、碎裂电压和碰撞能量等所有设置轻松创建 MRM 方法。MRM 方法适用于对数量有限的化合物进行快速筛查和定量分析，无需得知保留时间
- 评估保留时间和保留时间窗口可将 MRM 方法升级为动态 MRM 方法。动态 MRM 在分析物的时间窗口内最大程度延长驻留时间，从而获得最佳灵敏度。动态 MRM 适用于在一次分析中对上百种分析物进行筛查和定量分析

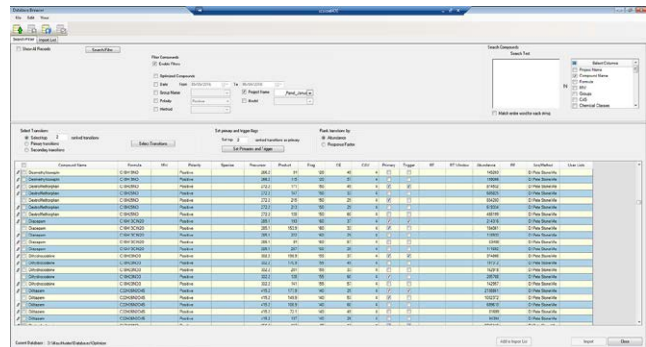
- 如果需要更高的特异性，可在 dMRM 方法中添加次要离子对以创建 tMRM 方法。触发式 MRM 特别适用于同质异构化合物和极易受到基质干扰的化合物。触发式 MRM 可满足对快速循环周期的需求，可将其应用于一系列复杂化合物或多残留筛查中的所有化合物
- 利用您的数据创建针对您分析的参比谱库，并通过数据库匹配确认结果以实现临界结果的可靠评估



100 种毒理学分析物以及内标的 10 分钟 MRM 色谱图，最多叠加了 5 个触发式 MRM 离子对



地尔硫卓的参比谱库匹配和得分



## 数据库和参比谱库的优化确保获得可靠结果

- 化合物常用名
- 天然化合物的 CAS 号
- 分子式
- 中性分子的单位质量数
- MRM 离子对（母离子和子离子 m/z）
- 碎裂电压
- 碰撞能量
- 添加的保留时间和保留时间窗口
- 添加的触发参数
- 采用 Agilent MassHunter 优化软件对超过 743 个化合物的 MRM 离子对进行完全优化
- 优化后的 MRM 数据经过审核以确保正确性

### 化合物类型包括：

化学合成毒品、大麻类药物、致幻剂、兴奋剂、苯二氮卓类药物、催眠药、安定药、巴比妥类药物、抗抑郁药、心血管药物、抗癫痫药以及阿片类药物

## 根据您的需求量身定制的应用咨询

### 安装和现场培训：

- 经验丰富的服务人员将为您安装 tMRM 数据库和参比谱库，使用安捷伦校验样品对所有内容进行功能验证，并使用支持软件进行现场培训

### 高级应用培训：

- 为您的目标样品设置筛查方法，帮助您充分利用 tMRM 数据库，并确保您获得科学成果

## 利用安捷伦的领先解决方案完善您的靶向分析工作流程

### • MassHunter 数据采集和分析软件

这款功能强大的软件结合了完全集成的 tMRM 数据库，可帮助您快速生成采集和分析方法，并可根据需求进行修改。在 MassHunter 定量分析软件中，您可以使用批处理标记异常值，并通过查看化合物概览进行异常审核

### • Agilent 1290 Infinity II 液相色谱仪与 Agilent 6400 系列三重四极杆液质联用系统

定量分析应用的可靠选择为您提供强大的分离性能、卓越的灵敏度、公认的可靠性以及总体稳定性。安捷伦喷射流电喷雾离子源能够显著降低检测限

### • 安捷伦液相色谱柱、备件和样品前处理产品

延长仪器正常运行时间，获得最佳科学成果

## 订购信息

### 法医毒理学 tMRM 数据库和参比谱库 (G1734CA)

下列是与法医毒理学 tMRM 数据库和参比谱库配合使用的其他必要内容：

- Agilent 1260 或 1290 Infinity II 系列液相色谱
- Agilent 6400 系列三重四极杆液质联用系统
- Agilent MassHunter 采集软件 B.06 或更高版本以及 Windows 7 64 位
- Agilent MassHunter 定性分析软件 B.06 或更高版本
- Agilent MassHunter 定量分析软件 B.05.02 或更高版本
- 选件：G1734CA #001 安装和现场培训服务
- 选件：高级应用咨询 H2149A（美国）；R1736A（其他地区）

如需了解更多有关安捷伦法医毒理学 tMRM 数据库和参比谱库的信息，请访问 [www.agilent.com/chem/tmrm](http://www.agilent.com/chem/tmrm)

### 快速提高实验室分析效率

联系当地的安捷伦客户服务中心或安捷伦授权经销商，请访问

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

或拨打 **800-820-3278**

请访问 [www.agilent.com/chem/ms](http://www.agilent.com/chem/ms)

获取有关可用 LC/MS 数据库与谱库以及 GC/MS 分析仪的详细描述

查找当地的安捷伦客户中心：

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

免费专线：

**800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)**

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

安捷伦科技大学：

<http://www.lscs-china.com.cn/agilent>

浏览和订阅 Access Agilent 电子期刊：

[www.agilent.com/chem/accessagilent-cn](http://www.agilent.com/chem/accessagilent-cn)

用于法医鉴定。

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2016

2016 年 7 月 18 日，中国出版

5991-7001CHCN