

OPTIMIERUNG DES TARGET-SCREENINGS VON VERBINDUNGEN IN DER FORENSISCHEN TOXIKOLOGIE



Agilent tMRM-Datenbank für die forensische Toxikologie

Geringerer Aufwand für die Methodenentwicklung dank Datenbank von MRM-Übergängen

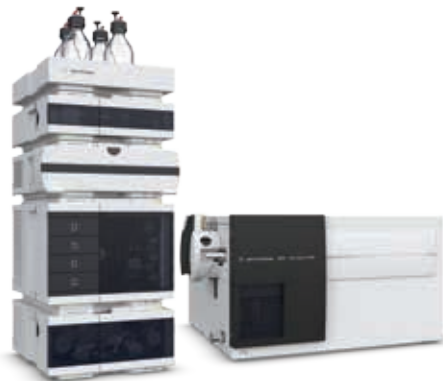
Das Analysieren von Verbindungen in der forensischen Toxikologie stellt aus zwei Gründen eine Herausforderung dar: Die Konzentrationen sind gering und es müssen sehr viele Analyten beobachtet und quantifiziert werden. Bei diesen Variablen kann es unter Umständen schwierig sein, einen sinnvollen Ausgangspunkt für die Methodenentwicklung zu finden.

Mit der Agilent tMRM-Datenbank für die forensische Toxikologie in Kombination mit einem Triple Quadrupol LC/MS-System von Agilent können Sie in kürzester Zeit Methoden für das Target-Screening und die zuverlässige Quantifizierung von Hunderten von Analyten in ein und demselben Lauf erstellen. Ein Großteil des Entwicklungsaufwands wurde bereits von Agilent erledigt. Damit haben Sie mehr Zeit für die Generierung hochwertiger Daten, die auch den strengen Kriterien für Untersuchungen in der forensischen Toxikologie standhalten.

Die tMRM-Datenbanken von Agilent enthalten Hunderte von Übergangsparametern für die Triple Quadrupol LC/MS, mit denen Sie MRM-, dynamische MRM (dMRM)- oder getriggerte MRM (tMRM)-Methoden erarbeiten können. Wählen Sie einfach den für Ihren Analysebedarf am besten geeigneten Modus aus.

Die folgenden in der tMRM-Datenbank enthaltenen Komponenten sparen Zeit und optimieren die Leistung:

- Kuratierte Datenbank mit mehr als 2800 Verbindungen
- Bis zu 10 MRM-Übergänge, Fragmentorspannungen und Kollisionsenergien für alle Verbindungen, anwendbar auf allen Triple Quadrupol LC/MS-Plattformen
- Kurzanleitung mit Datenbeispielen und Einweisungsübungen
- Anleitung zum Aufsetzen der Methode zur Erstellung von MRM-, dynamischen MRM- und getriggerten MRM-Methoden
- 3 Jahre kostenloses Upgrade der Datenbank



Agilent Technologies

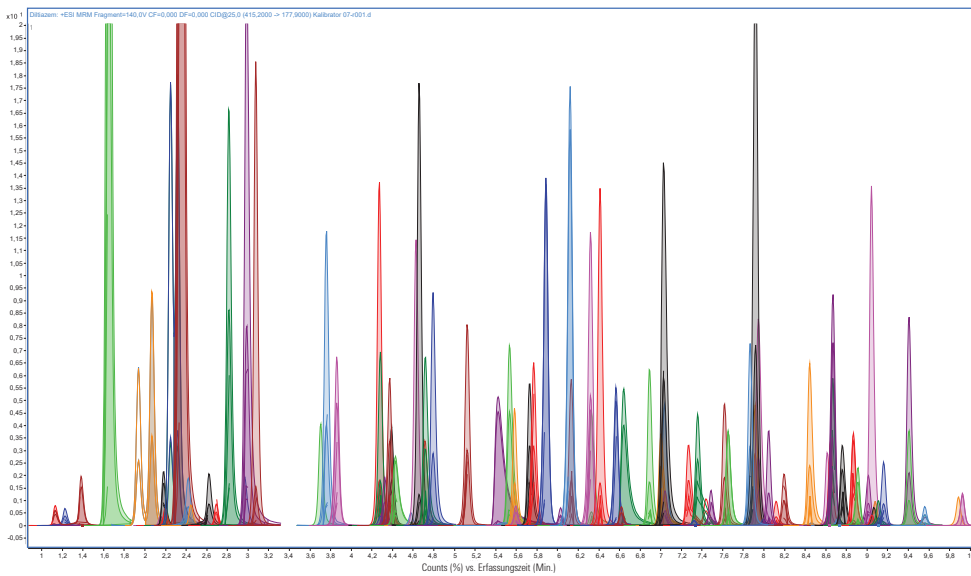
Arbeitsabläufe für das Screening auf Zielsubstanzen mit der tMRM-Datenbank

Die tMRM-Datenbank und Referenzbibliothek von Agilent für die forensische Toxikologie in Kombination mit der hohen Empfindlichkeit und den akkuraten quantitativen Funktionen des Triple Quadrupol LC/MS-Systems ermöglichen unterschiedliche Arbeitsabläufe, einschließlich:

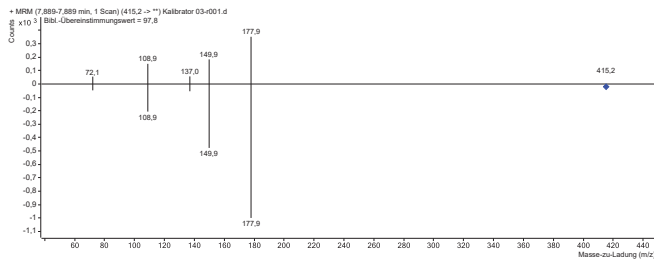
- Einfache Erstellung einer MRM-Methode durch Importieren aller Einstellungen wie Verbindungsname, primäre MRM-Übergänge, Fragmentorspannungen und Kollisionsenergien aus der Datenbank. Eine MRM-Methode eignet sich für das Screening und die Quantifizierung einer bestimmten Anzahl von Verbindungen in kürzester Zeit, ohne dass hierfür die Retentionszeiten bekannt sein müssen.
- Evaluierung von Retentionszeiten und Retentionszeitfenstern zur Umwandlung einer MRM-Methode in eine dynamische MRM-Methode. Dynamisches MRM maximiert die Verweilzeit für Analyten in deren Zeitfenster, um so eine

optimale Empfindlichkeit zu erreichen. Dynamisches MRM ist geeignet für das Screening und die Quantifizierung hunderter Analyten in einem Lauf.

- Wird eine noch höhere Spezifität benötigt, können einer dMRM-Methode sekundäre Übergänge hinzugefügt werden, um eine tMRM-Methode zu erzeugen. Getriggertes MRM ist besonders für isobare Verbindungen und solche Verbindungen geeignet, auf die Matrixinterferenz einwirkt. Getriggertes MRM eignet sich, wenn kurze Zykluszeiten gefordert sind, und kann daher entweder auf eine Teilgruppe problematischer Verbindungen oder auf alle Verbindungen in einer Multirückstand-Analyse angewendet werden.
- Erstellen Sie aus Ihren Daten eine für Ihre Analyse spezifische Referenzbibliothek und bestätigen Sie Ergebnisse durch Übereinstimmung zur Bibliothek, um grenzwertige Ergebnisse zuverlässig zu überprüfen.



10-Minuten-MRM-Chromatogramm von 100 toxikologischen Analyten (plus interner Standards), überlagert mit bis zu fünf getriggerten MRM-Übergängen.



Übereinstimmung zur Referenzbibliothek und Wert für Diltiazem.

Das Screenshot zeigt die tMRM-Datenbank für die forensische Toxikologie von Agilent. Die Tabelle enthält Informationen über die Analyten, die Referenzbibliothek und die Ergebnisse der Analyse.

Analyt	Retentionszeit (Min.)	Überschneidung (%)	Überschneidungswert
Diltiazem	7,8	97,8	177,9
...

Die tMRM-Datenbank für die forensische Toxikologie von Agilent gewährleistet eine schnelle kundenspezifische Methodenentwicklung.

Kuratierung der Datenbank und Referenzbibliothek für Ergebnisse höchster Zuverlässigkeit

- Trivialname der Verbindung
- CAS-Nummer der nativen Verbindung
- Molekularformel
- Einheitsmasse des Neutalmoleküls
- MRM-Übergänge (m/z der Vorstufe und des Produkts)
- Fragmentorspannung
- Kollisionsenergie
- Plus Retentionszeiten und Retentionszeitfenster
- Plus Trigger-Parameter
- Die Agilent MassHunter Optimizer Software bietet Zugang zu umfassend optimierten MRM-Übergängen für mehr als 743 Verbindungen
- Korrektheitsüberprüfung optimierter MRM-Daten

Verbindungsklassen beinhalten:

Designerdrogen, Cannabinoide, Halluzinogene, Stimulanzien, Benzodiazepine, Hypnotika, Neuroleptika, Barbiturate, Antidepressiva, kardiovaskuläre Medikamente, krampflösende Mittel, Opioide.

Auf Ihren Bedarf maßgeschneiderte Applikationsberatung

Installation und Einweisung:

- Erfahrene Servicetechniker installieren die tMRM-Datenbank und die Referenzbibliothek, führen eine umfassende Überprüfung der Funktionalität mit einer Checkout-Probe von Agilent durch und weisen Sie in die unterstützende Software ein.

Erweiterte Applikationsberatung:

- Wir helfen Ihnen bei der optimalen Nutzung der tMRM-Datenbank und Erreichung der gewünschten wissenschaftlichen Ergebnisse durch Aufsetzen von Target-Screening-Methoden für Ihre relevanten Proben.

Ergänzen Sie Ihre Arbeitsabläufe bei der gezielten Analyse mit richtungsweisenden Lösungen von Agilent

• **MassHunter Software zur Datenakquisition- und -analyse**

Mit dieser leistungsstarken Software in Kombination mit der vollständig integrierten tMRM-Datenbank können Sie im Handumdrehen Akquisitions- und Analysemethoden erstellen und diese später je nach Bedarf verändern. In der MassHunter Quantitative Analyse Software können Sie mithilfe der Batch-Verarbeitung Ausreißer markieren und Verbindungen anzeigen, um sie auf einen Blick nach Ausnahmen zu überprüfen.

• **Agilent 1290 Infinity II LC-System und Agilent Triple Quadrupol LC/MS-Systeme der Serie 6400**

Die bewährte Wahl für quantitative Applikationen; sie bieten unübertroffene Trennleistung, ausgezeichnete Empfindlichkeit sowie die bekannte Zuverlässigkeit und umfassende Systemrobustheit. Die Agilent Jet Stream Elektrospray-Ionenquelle senkt Ihre Nachweisgrenzen drastisch.

• **Agilent LC-Säulen, Verbrauchsmaterialien und Produkte zur Probenvorbereitung**

Steigern Sie Ihre Betriebszeit und erzielen Sie optimale wissenschaftliche Ergebnisse.

Bestellinformationen

tMRM-Datenbank und Referenzbibliothek für die forensische Toxikologie (G1734CA)

Die folgenden Voraussetzungen sind erforderlich, jedoch nicht im Umfang der tMRM-Datenbank und Referenzbibliothek für die forensische Toxikologie enthalten:

- Agilent Infinity II LC-System der Serie 1260 oder 1290
- Agilent Triple Quadrupol LC/MS-System der Serie 6400
- Agilent MassHunter Erfassungssoftware B.06 oder höher und Windows 7 64-Bit
- Agilent MassHunter Qualitative Analysis-Software B.06 oder höher
- Agilent MassHunter Quantitative Analysis-Software B.05.02 oder höher
- OPTIONAL: G1734CA #001 Installations- und Einweisungsservice
- OPTIONAL: Erweiterte Applikationsberatung H2149A (Nord-, Mittel-, Südamerika); R1736A (andere Regionen)

Weitere Informationen über die Agilent tMRM-Datenbank und Referenzbibliothek für die forensische Toxikologie finden Sie bei uns im Internet auf www.agilent.com/chem/tmrm

Mit Ihrem Labor bei der Produktivität auf die Überholspur.

Nehmen Sie bitte Kontakt zu Ihrem Agilent Vertreter vor Ort oder Ihrem autorisierten Agilent Vertriebspartner auf unter www.agilent.com/chem/contactus

oder telefonisch unter **0800 603 1000**
(in Deutschland)

Auf www.agilent.com/chem/ms finden Sie eine Beschreibung verfügbarer LC/MS-Datenbanken und -Bibliotheken und GC/MS-Analysern

für forensische Zwecke.

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Veröffentlicht in den USA, 18. Juli 2016
5991-7001DEE