

법의학 독성학 화합물의 표적 스크리닝 효율화



애질런트 법의학 독성학 tMRM 데이터베이스

MRM transition 데이터베이스를 이용해 지루한 분석법 개발 요구 최소화

법의학 분야의 독성학 화합물 분석은 두 가지 이유로 까다롭습니다. 하나는 농도가 낮다는 것이고 다른 하나는 모니터링 및 정량화해야 할 대상 물질이 많다는 것입니다. 이러한 변수를 고려해야 하기 때문에 분석법 개발의 명확한 출발점을 찾기가 어려울 수 있습니다.

애질런트 법의학 독성학 tMRM 데이터베이스와 Agilent Triple Quadrupole LC/MS를 조합하면 표적 스크리닝을 위한 분석법을 즉시 개발하고, 한 번의 실행으로 수백 가지의 분석물질을 확실하게 정량화할 수 있습니다. 대부분의 개발 작업은 이미 애질런트가 완료한 상태로서, 법의학 독성학 연구에 필요한 검토에 적합한 양질의 데이터를 만드는 데 더 많은 시간을 할애하십시오.

Agilent tMRM 데이터베이스는 Triple Quadrupole LC/MS에 대해 수백 가지의 Transition 매개변수를 포함하고 있으므로, MRM, Dynamic MRM(dMRM) 또는 Triggered MRM(tMRM) 분석법을 작성할 수 있습니다. 고객은 자신의 분석 요구에 가장 적합한 모드를 선택할 수 있습니다.

tMRM 데이터베이스에는 시간을 줄이고 성능을 극대화하는 다음과 같은 구성 요소가 포함됩니다.

- 2,800종 이상의 화합물에 대한 큐레이트된 데이터베이스
- 모든 화합물에 대해 최대 10개의 MRM transition, Fragmentor 전압 및 충돌 에너지, 모든 Triple Quadrupole LC/MS 플랫폼에 적용 가능
- 데이터 예제와 적응 연습 문제를 포함한 빠른 시작 안내서
- MRM, Dynamic MRM 및 Triggered MRM 분석법 작성 방법을 보여주는 분석법 설정 가이드
- 3년 동안 무료 데이터베이스 업그레이드



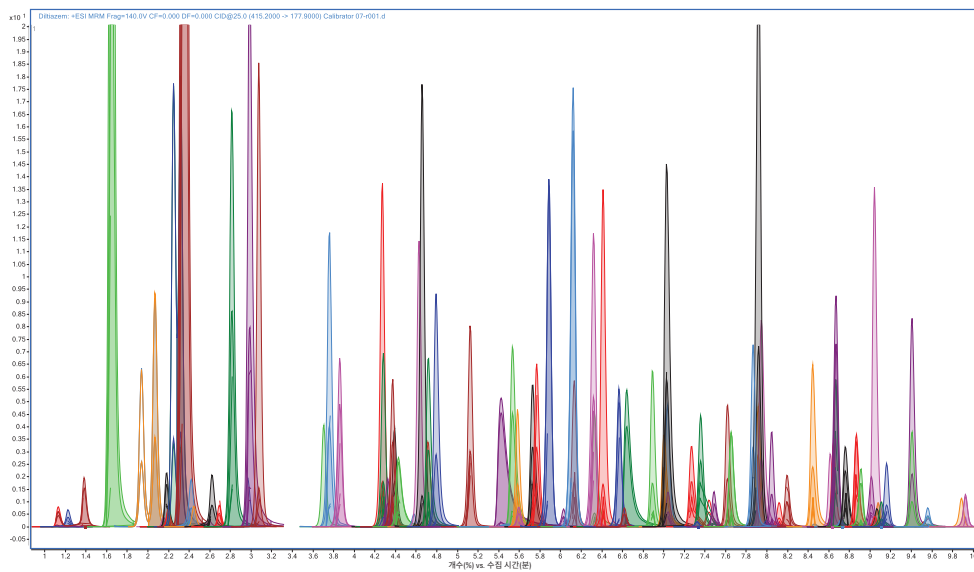
Agilent Technologies

tMRM 데이터베이스를 활용한 표적 스크리닝 워크플로

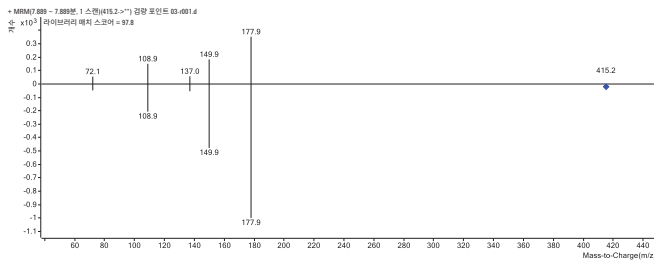
애질런트 법의학 독성학 tMRM 데이터베이스와 참조 라이브러리는 Triple Quadrupole LC/MS 시스템의 고감도에 정확한 정량 능력과 결합되어 다음과 같은 다양한 워크플로를 지원합니다.

- 화합물 이름, Primary MRM transition, Fragmentor 전압 및 충돌 에너지와 같은 모든 설정을 데이터베이스로부터 가져와 MRM 분석법을 쉽게 작성할 수 있습니다. MRM 분석법은 머무름 시간을 알 필요 없이 상당수 화합물의 고속 스크리닝과 정량에 적합합니다.
- 머무름 시간 및 머무름 시간 창을 평가하여 MRM 분석법을 Dynamic MRM 분석법으로 업데이트합니다. Dynamic MRM은 최고의 감도를 위해 분석물질에 대한 머무름 시간을 시간 창 내에서 극대화합니다. Dynamic MRM은 한 번의 실행으로 수백 가지의 분석물질을 스크리닝 및 정량하기에 적합합니다.

- 훨씬 더 많은 특이성이 요구되는 경우, 2차 Transition을 dMRM 분석법에 추가하여 tMRM 분석법을 만들 수 있습니다. Triggered MRM은 특히 동중 원소 화합물 및 매트릭스 간섭에 영향을 받는 화합물의 분석에 이상적입니다. Triggered MRM은 빠른 주기 시간이 요구하는 분야에 적합하므로 문제가 되는 화합물의 하위 세트에 또는 다중 잔류물 스크린에서 모든 화합물의 분석에 적용 가능합니다.
- 수집한 데이터로부터 분석에 맞는 참조 라이브러리를 생성하고, 애매한 결과를 확실하게 평가하기 위해 라이브러리 매치를 통해 결과를 확인할 수 있습니다.



최대 5개의 Triggered MRM transition 중첩을 가진 100종의 독성 분석물질(및 내부 표준물질)에 대해 10분간 MRM 크로마토그램



Diliazem에 대한 참조 라이브러리 매치 및 스코어

Compound Name	Retention	MW	Formula	Score
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	1000
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	950
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	900
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	850
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	800
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	750
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	700
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	650
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	600
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	550
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	500
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	450
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	400
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	350
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	300
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	250
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	200
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	150
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	100
Diliazem	177.9	248.2	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	50

애질런트 법의학 독성학 tMRM 데이터베이스는 빠르고 맞춤형된 분석법 개발을 보장합니다

데이터베이스와 참조 라이브러리의 큐레이션으로 신뢰성이 높은 결과 보장

- 화합물 일반명
- 고유 화합물의 CAS 번호
- 분자식
- 중성 분자의 단위 질량
- MRM transition(Precursor 및 Product m/z)
- Fragmentor 전압
- 충돌 에너지
- 머무름 시간 및 머무름 시간 창 추가
- 트리거 매개변수 추가
- MRM transition은 743종 이상의 화합물에 대해 Agilent MassHunter Optimizer 소프트웨어를 이용해 완전히 최적화됩니다
- 최적화된 MRM 데이터의 정확도가 검토됩니다

화합물 종류:

신경합성마약류, 칸나비노이드, 환각제, 흥분제, 벤조디아제핀, 최면제, 신경이완제, 바르비투르(Barbiturate), 항우울제, 심혈관치료제, 간질약, 오피오이드.

수요에 맞는 응용 컨설팅

설치 및 학습:

- 경험 많은 서비스 요원이 tMRM 데이터베이스와 참조 라이브러리를 설치하고, 애질런트 점검 시료를 이용해 모든 기능을 확인하며, 지원 소프트웨어를 통해 학습을 수행해 드립니다.

고급 응용 컨설팅:

- 관심 시료에 맞는 표적 스크리닝 분석법을 설정하여 tMRM 데이터베이스를 최대한 활용하고 과학적 성과를 달성하실 수 있도록 도와 드리겠습니다.

애질런트의 첨단 솔루션을 이용한 완벽한 표적 분석 워크플로

• MassHunter 데이터 수집 및 분석 소프트웨어

완전히 통합된 tMRM 데이터베이스와 더불어, 이 강력한 소프트웨어를 이용해 수집 및 분석 방법을 빠르게 생성하고 요구에 맞도록 쉽게 변경할 수 있습니다. MassHunter Quantitative Analysis 소프트웨어에서, Outlier에 대해 일괄 처리 기능을 이용하여 플래그를 추가할 수 있고 예외별로 화합물을 간단히 검토할 수 있습니다.

• Agilent 1290 Infinity II LC 및 Agilent 6400 시리즈 Triple Quadrupole LC/MS 시스템

정량화 응용 작업에 입증된 선택으로 탁월한 분리 능력, 우수한 감도, 확실한 신뢰성 및 전체적인 완전성을 제공합니다. Agilent Jet Stream electrospray 이온 소스는 검출 수준을 현저히 낮춰줍니다.

• Agilent LC 컬럼, 소모품 및 시료 전처리 제품

가동 시간을 늘리고 최고의 과학적 성과를 달성할 수 있습니다.

주문 정보

법의학 독성학 tMRM 데이터베이스 및 참조 라이브러리(G1734CA)

다음은 필요하지만 법의학 독성학 tMRM 데이터베이스 및 참조 라이브러리에 포함되지 않았습니다.

- Agilent 1260 또는 1290 Infinity II 시리즈 LC
- Agilent 6400 시리즈 Triple Quadrupole LC/MS 시스템
- Agilent MassHunter 수집 소프트웨어 B0.06 이상, Windows 7 64비트
- Agilent MassHunter 정성 분석 소프트웨어 B.06 이상
- Agilent MassHunter 정량 분석 소프트웨어 B.05.02 이상
- 옵션: G1734CA #001 설치 및 학습 서비스
- 옵션: 고급 응용 컨설팅 H2149A(미주); R1736A(기타 지역)

애질런트 법의학 독성학 tMRM 데이터베이스 및 참조 라이브러리에 대한 자세한 내용은 www.agilent.com/chem/tmr을 참조하시기 바랍니다

실험실의 생산성을 높여드립니다

현지 애질런트 담당자나 애질런트 공인 대리점으로 문의하세요

www.agilent.com/chem/contactus

또는 **800-227-9770**번으로 전화 주십시오(한국)

www.agilent.com/chem/ms를 방문하여 이용 가능한 LC/MS 데이터베이스 및 라이브러리와 GC/MS 분석기에 대해 자세히 확인하십시오

법의학용

이 정보는 사전 공지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
2016년 7월 18일 한국에서 발행
5991-7001KO

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