

# УПРОЩЕНИЕ НАПРАВЛЕННОГО СКРИНИНГА СОЕДИНЕНИЙ В СУДЕБНО- МЕДИЦИНСКОЙ ТОКСИКОЛОГИИ



## База данных tMRM от Agilent для судебно-медицинской токсикологии

### Минимизируйте кропотливую разработку методики вручную, используя базу данных MRM-переходов

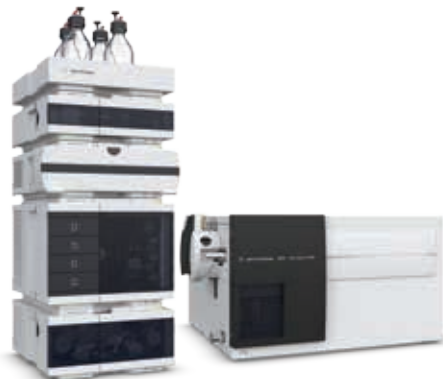
Судебно-медицинский токсикологический анализ соединений осложняется двумя аспектами: низкими концентрациями и большим числом аналитов, требующих мониторинга и количественного определения. Учитывая эти факторы, бывает непросто выбрать начальную точку для разработки методики.

Совместное использование базы данных tMRM от Agilent для судебно-медицинской токсикологии и трехквadrupольного ВЭЖХ-МС Agilent позволяет мгновенно создавать методики направленного скрининга и получать надежные результаты количественного анализа сотен веществ за один цикл. Большая часть процесса разработки уже выполнена компанией Agilent, за счет чего у вас остается больше времени на формирование качественных данных, соответствующих строгим требованиям к судебно-медицинским токсикологическим исследованиям.

База данных tMRM Agilent содержит сотни параметров переходов для трехквadrupольного ВЭЖХ-МС и позволяет создавать методики для режимов MRM, динамического MRM (dMRM) и триггерного MRM (tMRM). Выберите методику, которая будет подходить именно вам.

### База данных tMRM включает следующие компоненты, позволяющие экономить время и повышать качество работы:

- Редактируемая экспертами база данных, содержащая более 2 800 соединений
- До 10 MRM-переходов, значения напряжения фрагментатора и энергии соударения для всех соединений, применимые для всех трехквadrupольных систем ВЭЖХ-МС
- Краткое руководство с примерами данных и ознакомительными упражнениями
- Руководство по настройке методики, помогающее создать методики для режимов MRM, динамического MRM и триггерного MRM
- Бесплатные обновления базы данных в течение 3 лет



**Agilent Technologies**

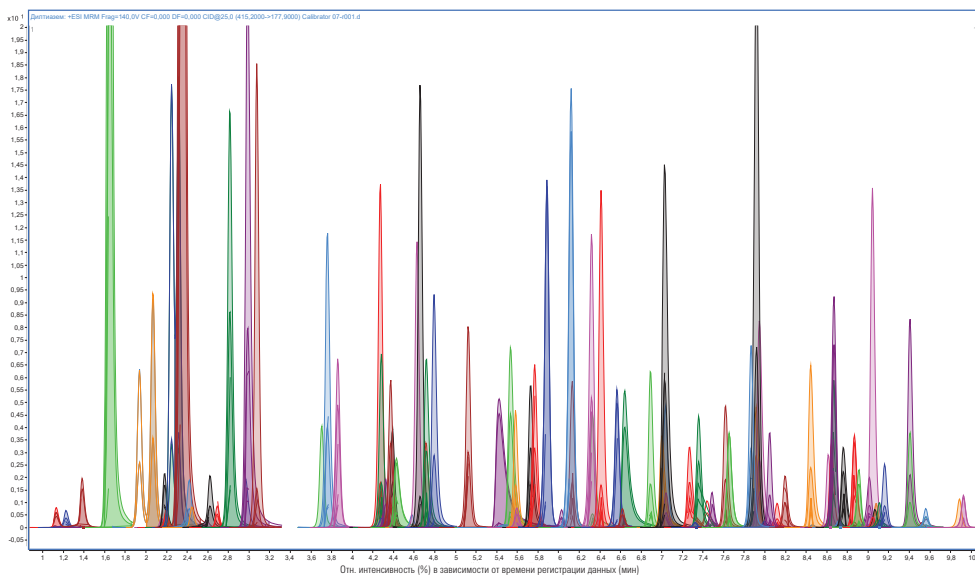
## Рабочие процессы направленного скрининга с базой данных tMRM

База данных и библиотека tMRM от Agilent для судебно-медицинской токсикологии вместе с высокой чувствительностью и точностью количественного определения трехкврупольных систем ВЭЖХ-МС позволяют использовать в работе различные процессы.

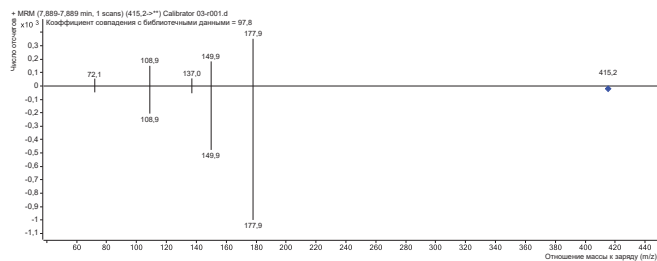
- С легкостью создавайте методики MRM, импортируя из библиотеки все настройки, например названия соединений, основные MRM-переходы, значения напряжения фрагментатора и энергии соударения. Методика MRM подходит для скоростного скрининга и количественного анализа ограниченного числа соединений, если нет необходимости определения времени удерживания.
- Для перехода от методики MRM к методике динамического MRM настройте определение времени удерживания и интервалов времени удерживания. Динамический режим MRM увеличивает время задержки

для аналитов на соответствующий период, позволяющий добиться максимальной чувствительности. Динамический режим MRM подходит для скрининга и количественного анализа сотен аналитов за один цикл.

- Чтобы повысить специфичность, можно добавить к методике dMRM вторичные переходы и получить методику tMRM. Триггерный режим MRM наиболее эффективен для изобарических соединений и соединений, подверженных влиянию посторонних компонентов образца. Триггерный режим MRM подходит для коротких циклов, и его можно использовать либо для набора сложных соединений, либо для всех соединений в многокомпонентном скрининге.
- Создайте библиотеку эталонов на основе ваших данных, соответствующую вашим параметрам анализа и позволяющую точно определить совпадения с библиотекой для оценки пограничных результатов.



10-минутная хроматограмма MRM ста токсикологических аналитов (с внутренними стандартами) с наложением до пяти триггерных MRM-переходов



Совпадение с базой данных и коэффициент совпадения для дилтиазема

Соединение	Массовое отношение	Массовое отношение	Массовое отношение	Массовое отношение
...	...	...	...	...

База данных tMRM для судебно-медицинской токсикологии от Agilent позволяет быстро разрабатывать настраиваемые методики

## Редактирование базы данных и библиотеки экспертами обеспечивает максимально надежные результаты

- Общепринятое название соединения
- Номер CAS исходного соединения
- Молекулярная формула
- Единичная масса нейтральной молекулы
- MRM-переходы (исходное и итоговое отношения массы к заряду)
- Напряжение фрагментирования
- Энергия соударений
- Добавление времен удерживания и интервалов времени удерживания
- Добавление триггерных параметров
- Оптимизация MRM-переходов для более чем 743 соединений с помощью ПО Agilent MassHunter Optimizer
- Проверка правильности оптимизированных данных MRM

### Классы соединений включают следующие:

синтетические наркотики, каннабиноиды, галлюциногены, стимуляторы, бензодиазепины, снотворные средства, нейролептики, барбитураты, антидепрессанты, средства для лечения сердечно-сосудистых заболеваний, противосудорожные препараты, опиаты.

### Методические рекомендации для ваших нужд

#### Установка и ознакомление:

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

#### Расширенные методические рекомендации:

- Мы поможем вам максимально эффективно использовать базу данных и библиотеку tMRM за счет настройки методик направленного скрининга для интересующих вас проб, чтобы вы могли получить необходимые научные результаты.

### Передовые решения от Agilent для завершения процесса направленного анализа

- **Программное обеспечение MassHunter для сбора и обработки данных**  
и полностью интегрированная база данных tMRM составляют мощный комплекс, позволяющий быстро создавать методики сбора и анализа данных, которые в дальнейшем можно изменять для ваших нужд. В ПО для количественного анализа MassHunter Quantitative Analysis можно использовать обработку данных в пакетном режиме для поиска выбросов и получать наглядные результаты для проверки по исключениям.
- **Система ВЭЖХ Agilent 1290 Infinity II и трехквadrupольная система ВЭЖХ-МС Agilent серии 6400** — это проверенные приборы для количественного анализа с непревзойденной эффективностью разделения, высокой чувствительностью, доказанной надежностью и оптимальными параметрами. Источник ионизации в электроспрее Agilent Jet Stream существенно снижает пределы обнаружения.
- **Колонки, расходные материалы и материалы для пробоподготовки Agilent для ЖХ**  
увеличивают время работы и позволяют добиться наилучших результатов.

## Информация для заказа

### База данных и библиотека tMRM от Agilent для судебно-медицинской токсикологии (G1734CA)

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

- Система ВЭЖХ Agilent 1260 или 1290 Infinity II
- Трехквadrupольная система для ВЭЖХ-МС Agilent серии 6400
- Программное обеспечение Agilent MassHunter Acquisition версии B.06 (или выше) и 64-разрядная ОС Windows 7
- Программное обеспечение Agilent MassHunter Qualitative Analysis версии B.06 (или выше)
- Программное обеспечение Agilent MassHunter Quantitative Analysis версии B.05.02 (или выше)
- ДОПОЛНИТЕЛЬНО — услуги по установке и ознакомлению (G1734CA #001)
- ДОПОЛНИТЕЛЬНО — расширенные методические рекомендации (H2149A — для Северной и Южной Америки; R1736A — для других регионов)

Узнать подробнее о базе данных и библиотеке tMRM от Agilent для судебно-медицинской токсикологии можно на странице

[www.agilent.com/chem/tmrn](http://www.agilent.com/chem/tmrn)

### 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)

Телефон: **+7 495 664 73 00**

(Российская Федерация)

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

Для использования в судебно-экспертизе.

Информация может быть изменена без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2016  
Напечатано в США 18 июля 2016 г.  
5991-7001RU