

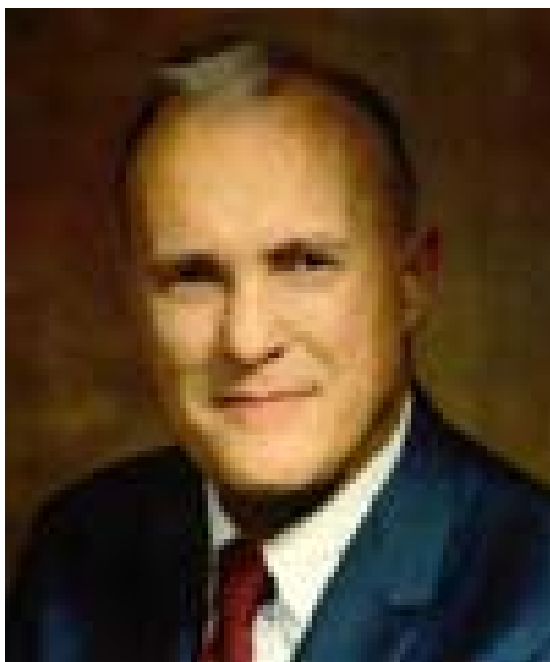
КОМПАНИЯ



представляет

# Оборудование Waters для задач клинической и судебной токсикологии

## Символичное начало...



James Logan Waters

Год основания 1958



Ангар на старой полицейской станции (1958-1965)





# Крупнейший в мире производитель хроматографического оборудования

**Главной офис в Манчестере**

Родина жидкостной хроматографии

Город Нобелевских лауреатов

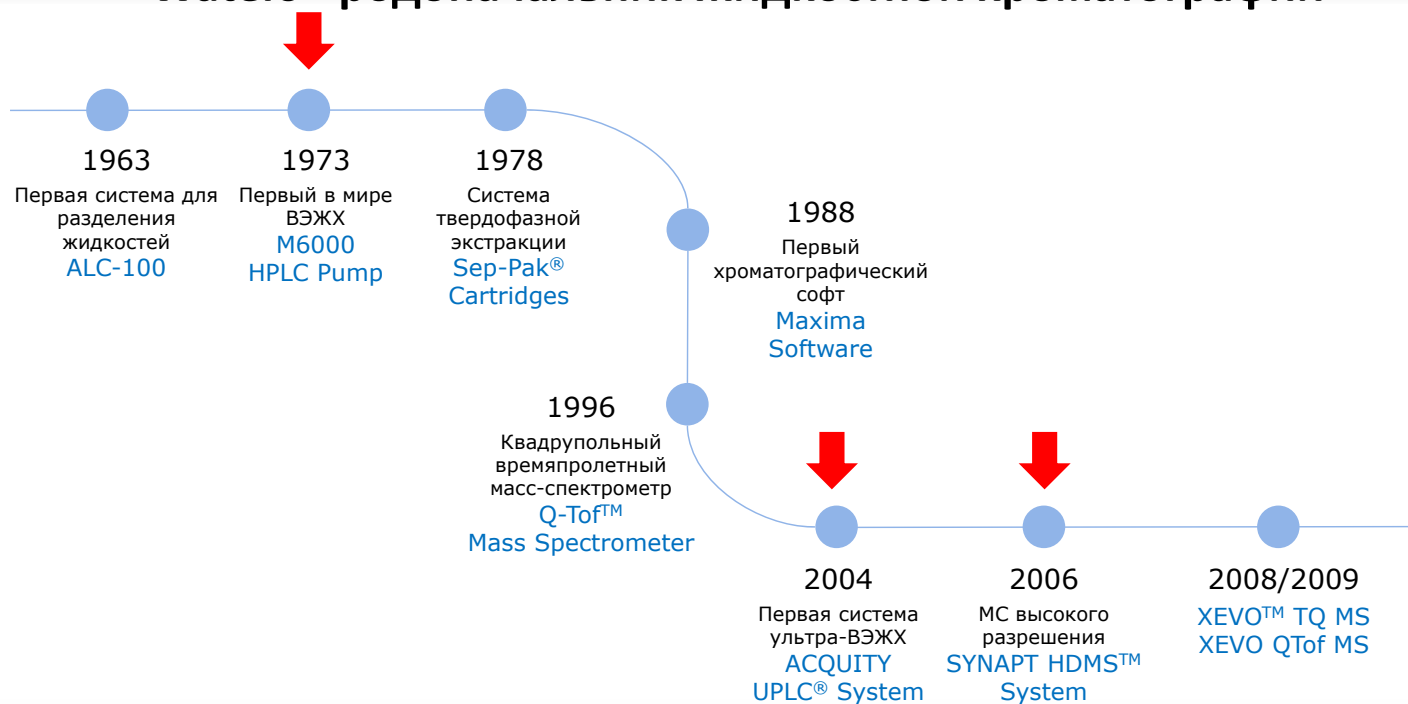
**Входит в ТОП 50 самых  
мощных производственных  
компаний**

По рейтингу The Business Week

Оборот компания > 2 млрд. \$



## Waters - родоначальник жидкостной хроматографии



## Waters для решения токсикологических задач

- Целевой скрининг
- Поиск и идентификация неизвестных соединений
- Высокоточный количественный анализ ультра следовых содержаний



## Две основные стратегии

1

Целевой скрининг или детектирование целевых соединений.  
В этом случае задача состоит в определении заранее выбранных соединений.

Матрица сложная, ищем вещества в ультра следовых содержаниях и поиск должен быть селективным.

2

Поиск неизвестных веществ и запись полного спектра.

Включает идентификацию всех компонентов образца с последующим выбором среди них наиболее значимых, исходя из целей анализа.



### SQD2



Одиночный квадруполь  
Бюджетный вариант  
Селективный анализ в  
режиме MC  
[www.interlab.ru](http://www.interlab.ru)

### Xevo TQD



Тройной квадруполь  
«Рабочая лошадка»  
Информативный анализ  
в режиме MC + MC/MC

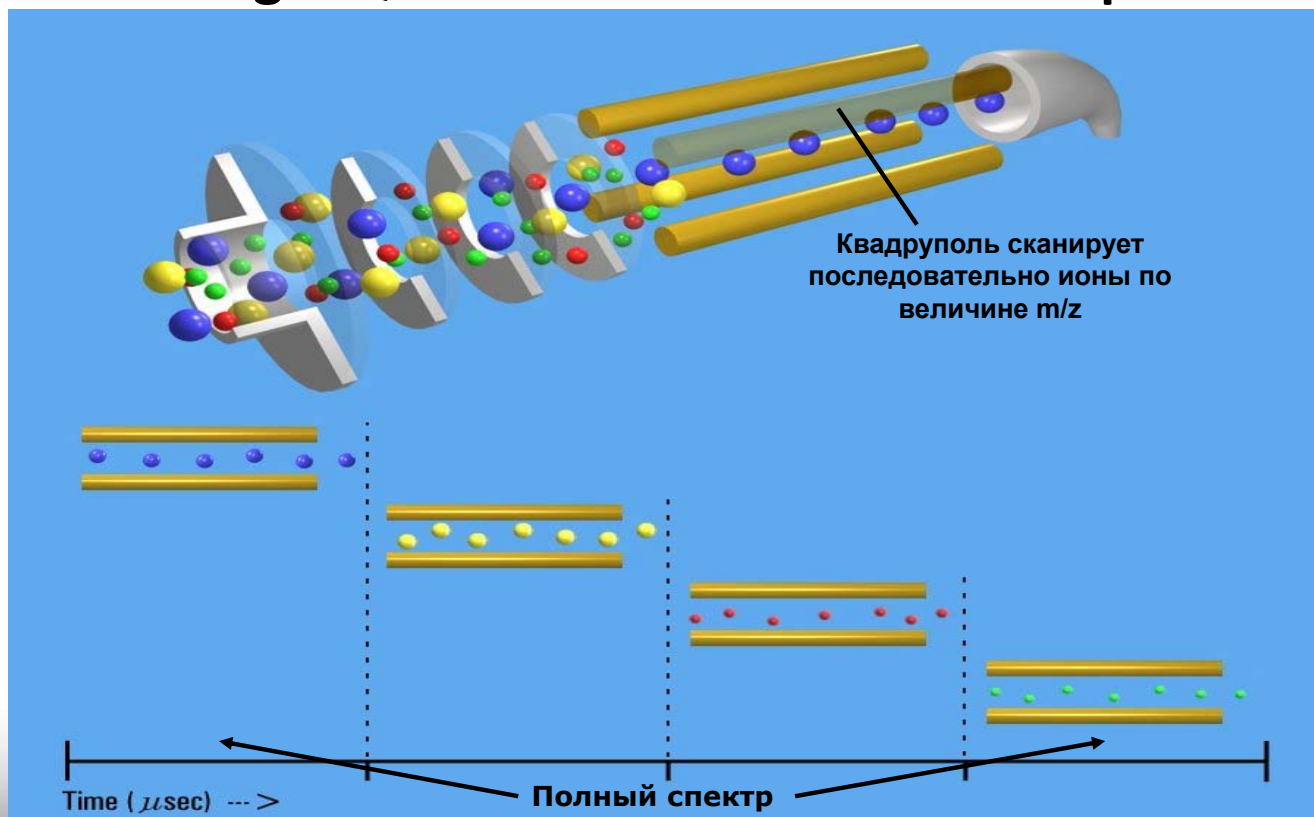
### Xevo G2-XS QTof

Времяпролетный  
Определение структуры  
неизвестных соединений

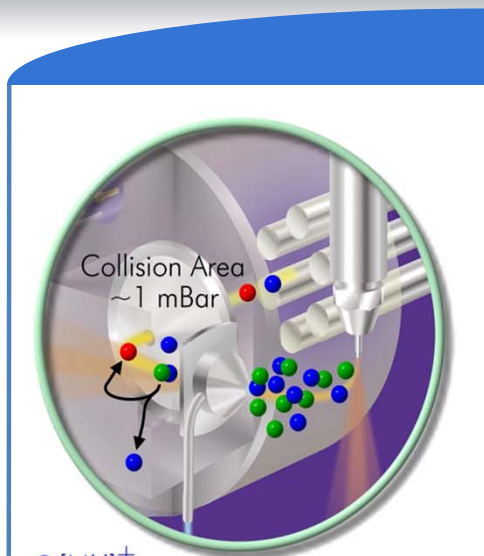




## Single Quad: Запись полного спектра



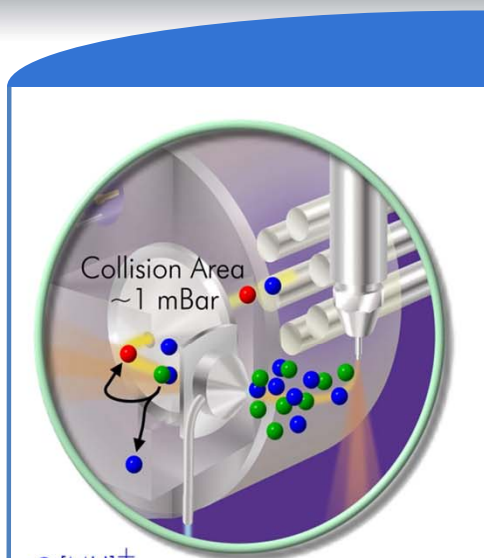




●  $[\text{MH}]^+$

●  $\text{N}_2$  molecules

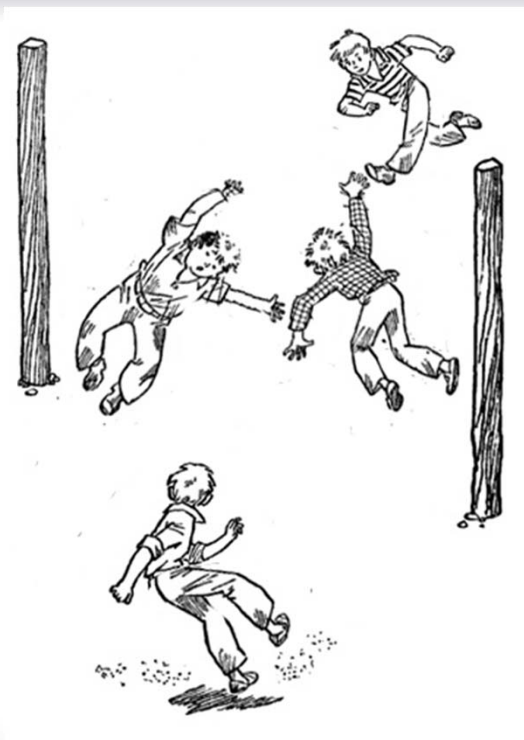
●  $[\text{Fragment}]^+$



●  $[MH]^+$

●  $N_2$  molecules

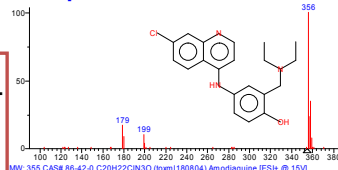
●  $[Fragment]^+$



Фрагментации нет

$[MH]^+$

$[M-H]^-$



+15 Вольт

-15 Вольт

+30 Вольт

-30 Вольт

+45 Вольт

-45 Вольт

+60 Вольт

-60 Вольт

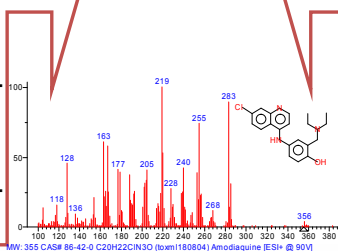
+75 Вольт

-75 Вольт

+90 Вольт

-90 Вольт

Исчерпывающая  
структурная  
информация



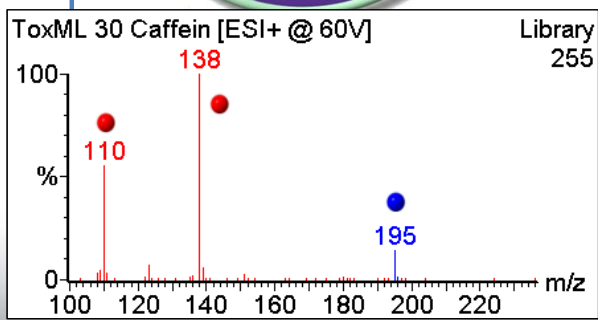
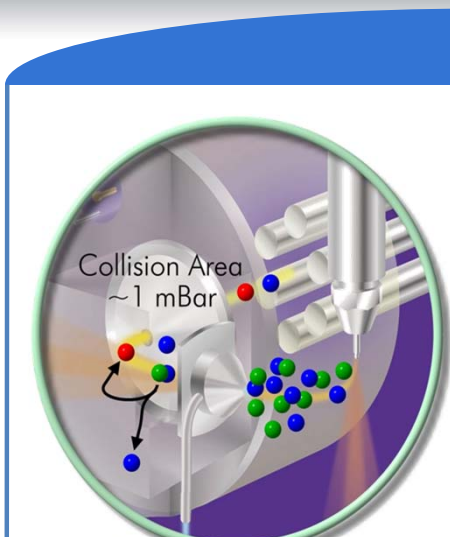
Полная фрагментация

$F^+$

$F^-$

(495) 788 0983/82

interlab@interlab.ru



Library  
255

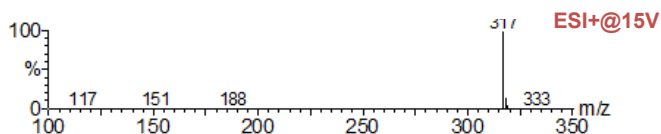
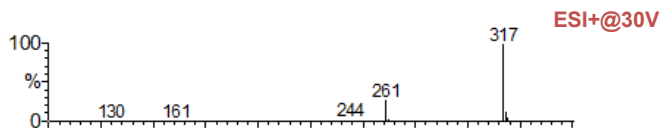
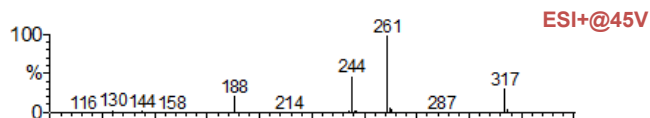
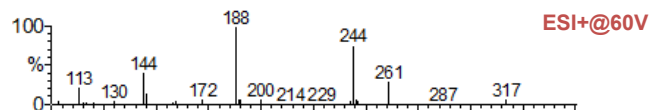
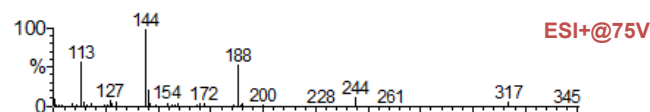
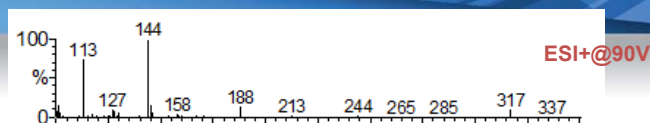
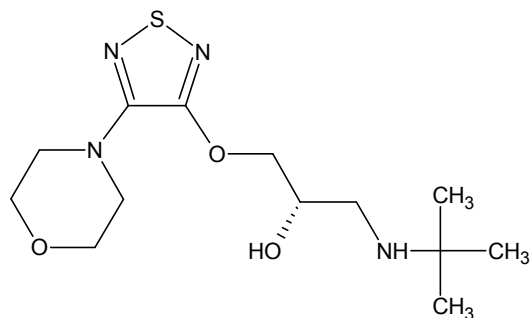
Бета-адреноблокатор

**Тимолол**

$C_{13}H_{24}N_4O_3S$

MW 316.4 (Nominal 316)

CAS# 91524-16-2





# Библиотека масс-спектров

## MassLynx® + ChromaLynx®

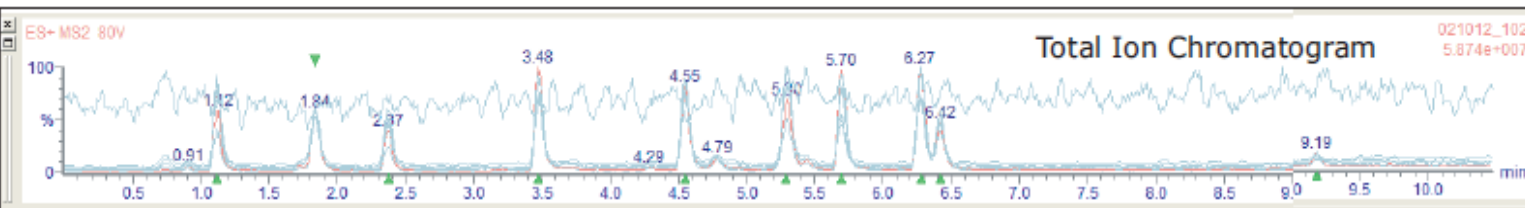
Набор масс-спектров более чем 1000 токсичных, сильнодействующих и наркотических веществ

Информация об ионах-предшественниках и ионах-фрагментах, полученных методом CID, MRM, SIM

Информацию о временах удерживания (RT) компонентов с описанием условий, при которых достигнуто хроматографическое разделение



**Важно!** Совместимо с базой данных NIST MS Search

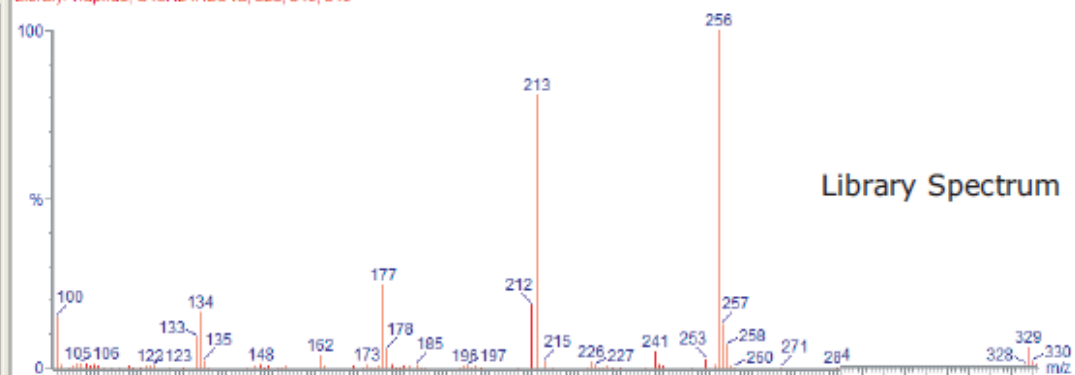


Candidate List - 021012\_102

✓	Nicotine Avg 854.83
✓	Tiaproide Avg 775.00
✓	Tiaproide : Avg 775.00
	Function 2 (ES+ MS2 20V) : Match Factor 825
	Function 3 (ES+ MS2 35V) : Match Factor 882
	Function 4 (ES+ MS2 50V) : Match Factor 880
	Function 5 (ES+ MS2 65V) : Match Factor 585
→	Function 6 (ES+ MS2 80V) : Match Factor 810
	Function 7 (ES+ MS2 95V) : Match Factor 668
✗	Clonazepam : Avg 208.17
✗	6-monooacetylmorphine : Avg 174.83
✗	Naloxone : Avg 151.83
✗	Oxycodone : Avg 102.17
✗	Tizanidine : Avg 95.40
✓	Scopolamine Avg 808.67
✓	Metoprololamide Avg 817.50
✓	Buflomedil Avg 743.17
✓	Milnacipran Avg 772.67
✓	Trazodone Avg 806.67
✓	Triprolidine Avg 772.67
✓	Clozapine Avg 760.67
✓	Perphenazine Avg 741.83

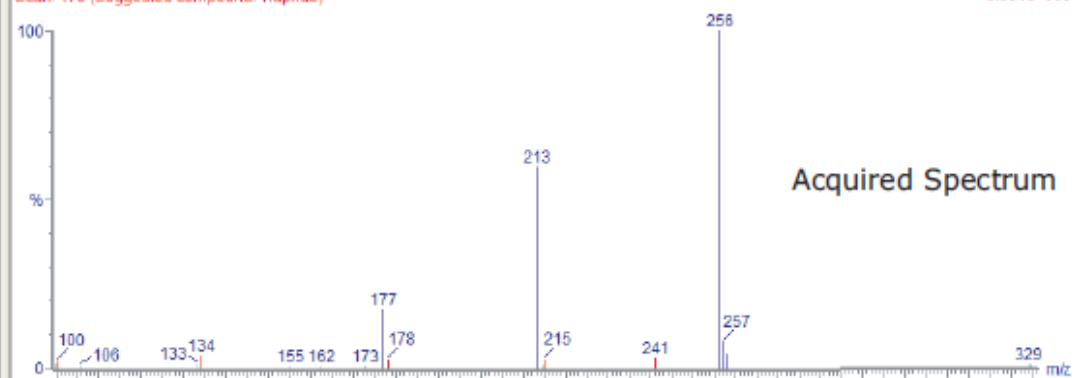
### Candidate Listing

Library: Tiaproide; C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>S; 328; 810; 810



Scan: 170 (Suggested compound: Tiaproide)

9.881e+005



# Библиотечный фонд

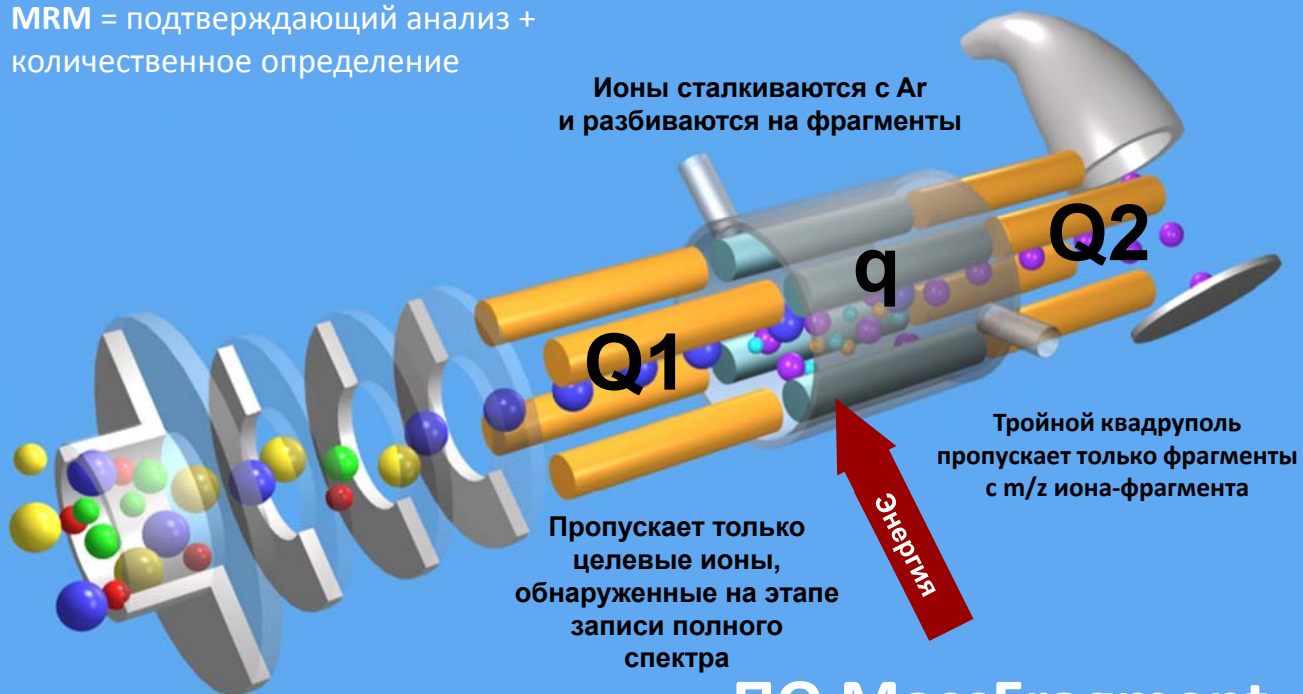
База данных масс-спектров включает в себя информацию о молекулярных и фрагментных ионах следующих групп веществ

AMPHETAMINES	ANTIDEPRESSANTS
ANAESTHETIC AGENTS	ANTIHYPERTENSIVES
ANALGESICS ANTIARRHYTHMICS	ANTITUSSIVES
ANTIASTHMATICS	BENZODIAZEPINES
ANTICONVULSANTS	BETA BLOCKERS
ANTIEMETICS	COCAINE METABOLITES
ANTIEPILEPTICS	OPIOIDS
ANTIHISTAMINES	PESTICIDES
ANTIMALARIALS	SSRIs
ANTIPSYCHOTICS	TCAs
ANTI-SEIZURE	PIPERAZINES
	CATHINONES

База данных содержит в том числе дизайнерские наркотики: синтетические катионы ("соли для ванн") и синтетические каннабиноиды.

## Triple Quad: Запись спектров MRM

**MRM** = подтверждающий анализ +  
количественное определение



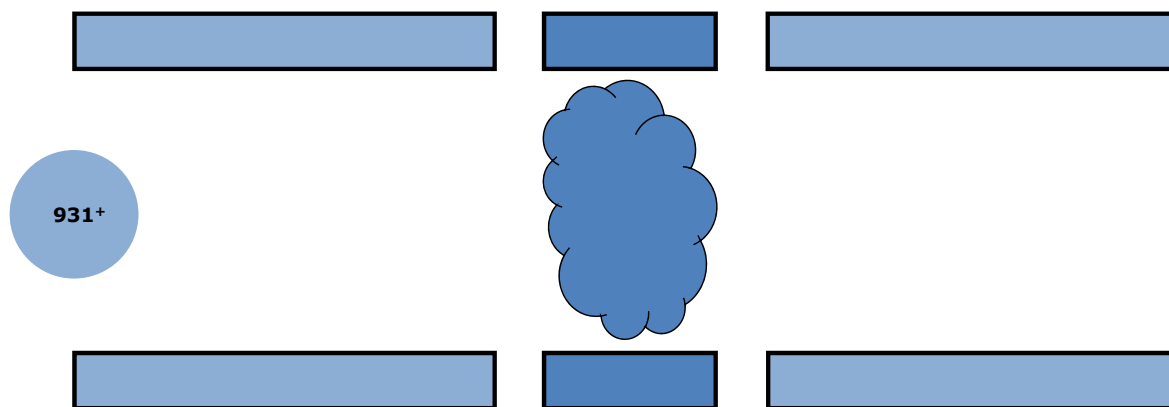
**ПО MassFragment**



## Коллизионная ячейка

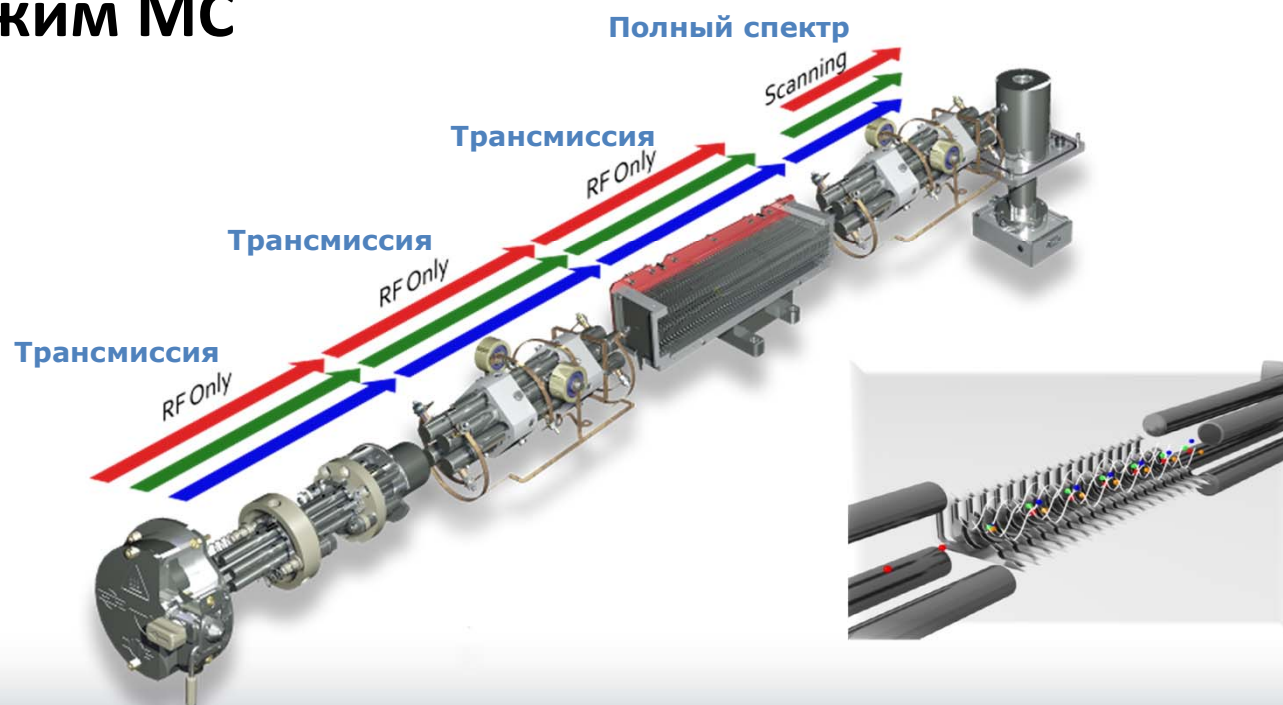
MS1

MS2

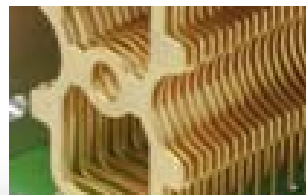
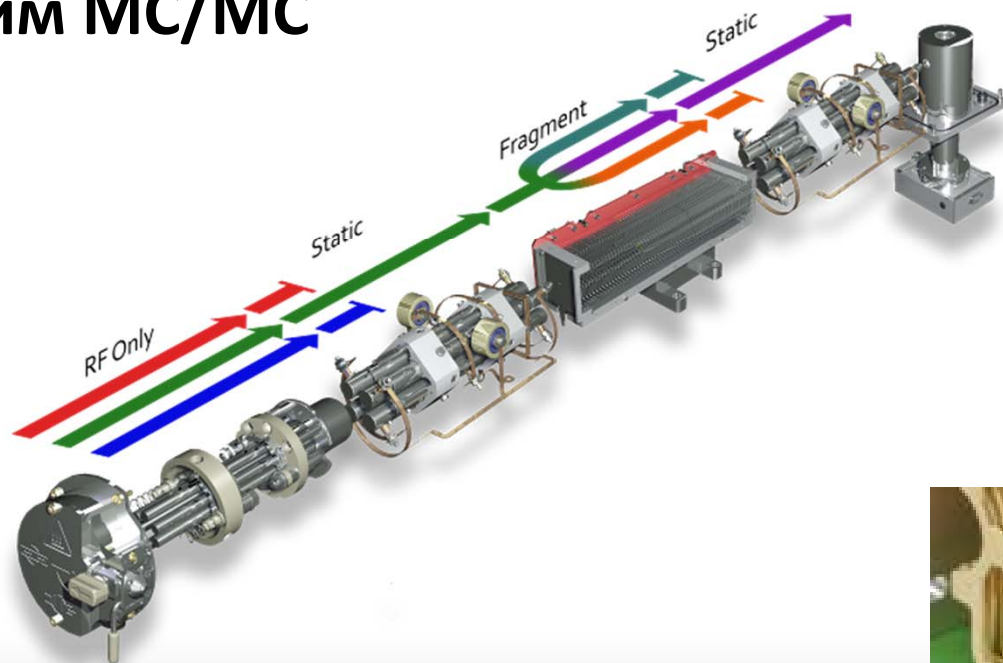


Определение осуществляется по заранее выбранным ионам

## Режим МС



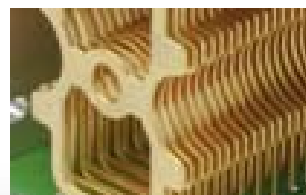
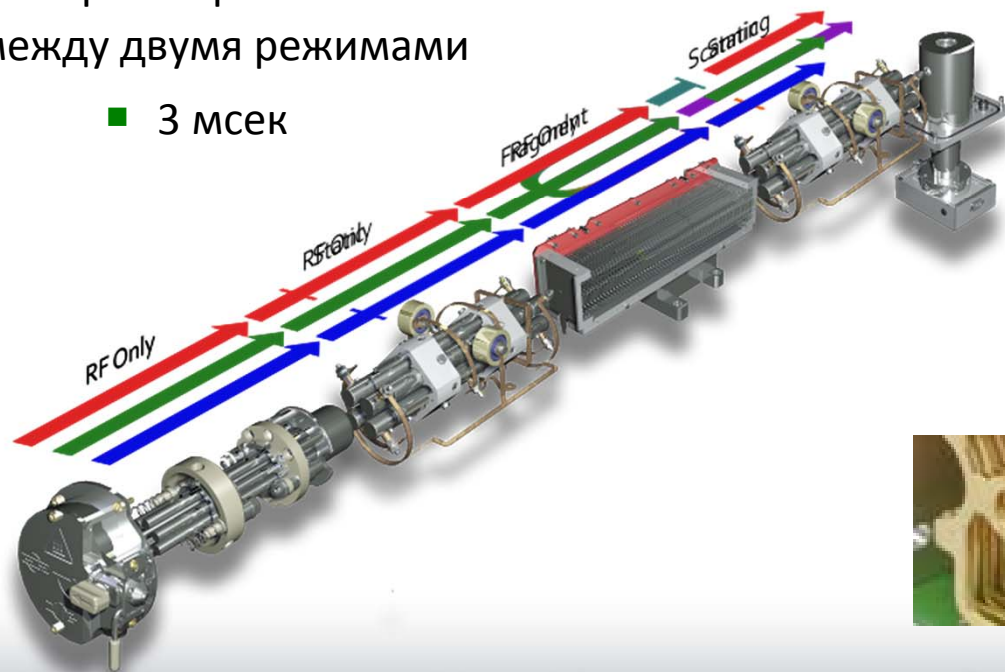
## Режим МС/МС



## МС и МС/МС

- Быстрое переключение между двумя режимами
  - 3 мсек

**(RADAR)**

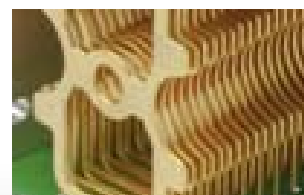
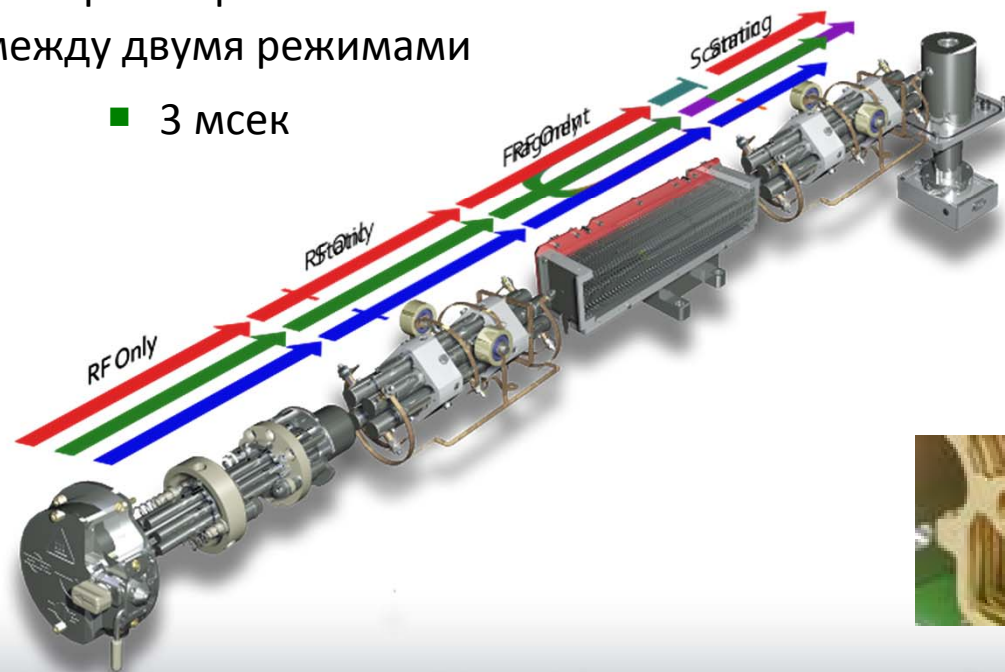




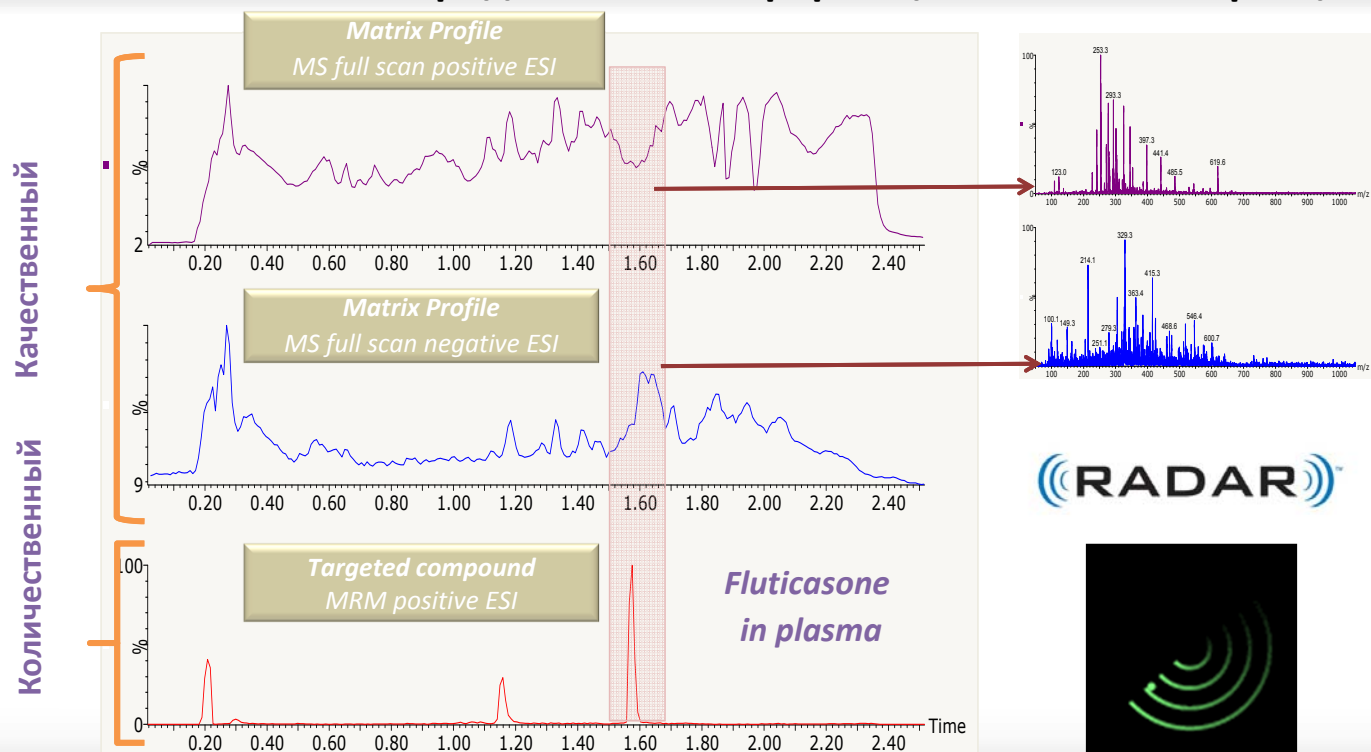
## МС и МС/МС

- Быстрое переключение между двумя режимами
  - 3 мсек

((RADAR))



## Количественное определение + информация о составе образца



## Xevo® G2-XS QToF

Времяпролетный масс-спектрометр



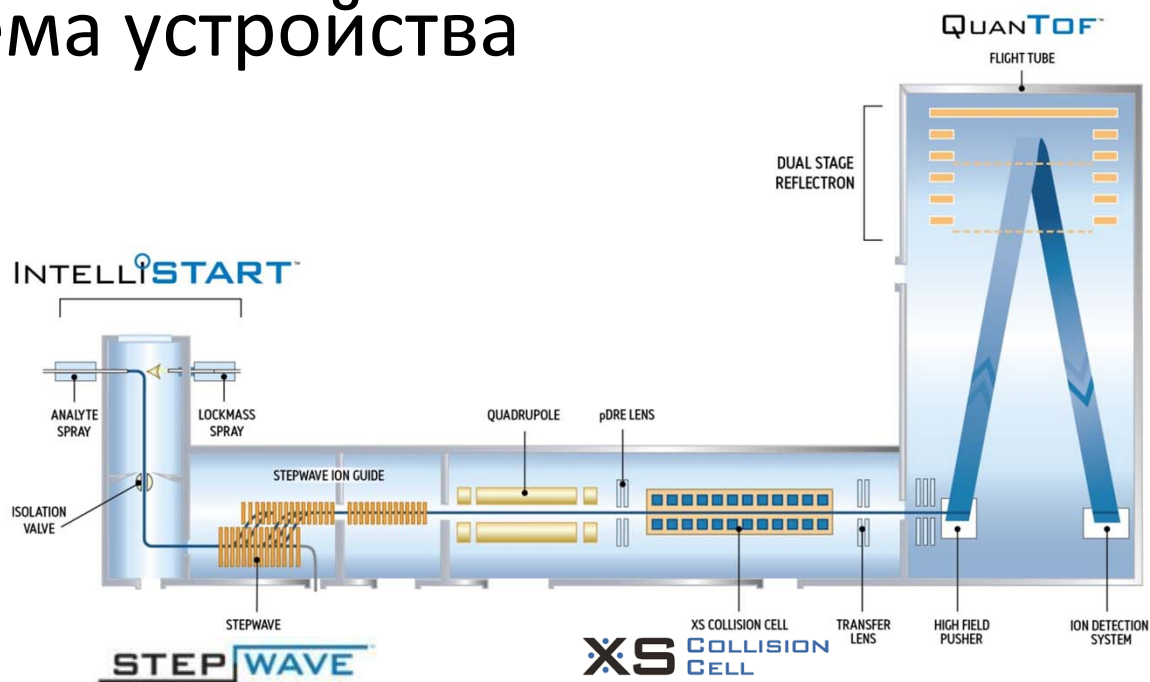
Разрешение 40 000 Да

Точность измерения масс ~ 1 ppm

Скорость сканирования 30 спектров/сек

**Quad + ToF** = точная информация о  
структуре вещества + количественный  
анализ выбранных соединений

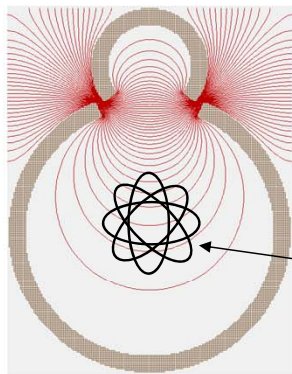
# Схема устройства





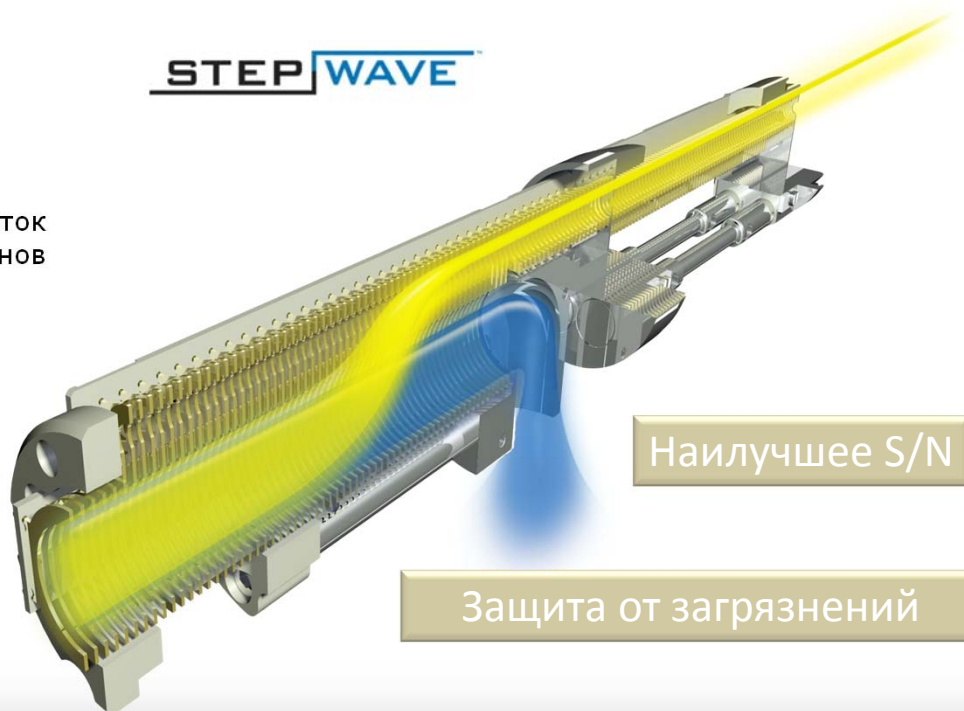
## Запатентованная ионная оптика

Электрическое поле  
↑



Поток  
ионов

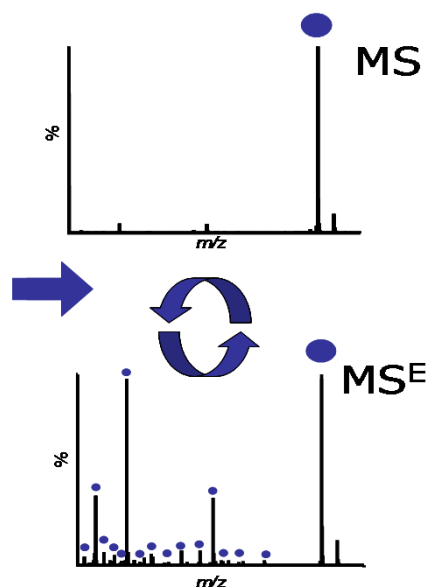
**STEP** **WAVE**



Наилучшее S/N

Защита от загрязнений

Низкая энергия столкновений позволяет  
получить масс-спектр иона-предшественника



Высокая энергия столкновений позволяет  
получить масс-спектр ионов-продуктов

# Tof-MRM

*Улучшенное соотношение S:N  
для целевого количественного  
анализа*

