

Jak na screening s novým LC/MS QTOF Revident



Altium

Ondřej Lacina



Altium

Revident

Revolutionize Your Identification
With Rock solid Evidence



Revident: První inteligentní LC-QTOF



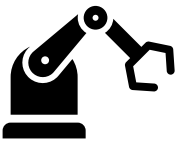
Ladění & kalibrace

SWARM autotune používá techniku „Optimalizace hejnem částic“ (*Particle Swarm Optimization*) ke zjištění nejlepšího nastavení celé skupiny parametrů.



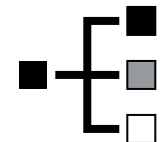
Aktivní monitoring

Early Maintenance Feedback hlásí závady, upozorňuje na pravidelné údržby systému.



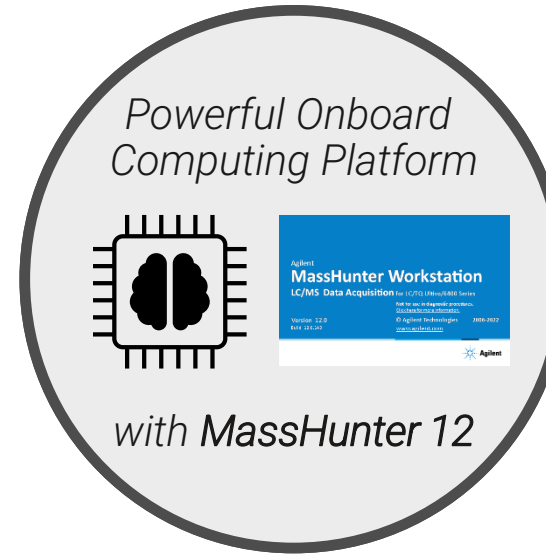
Automatizace

Automatické ladění/kalibrace m/z zajistí, že přístroj je vždy nakalibrován a v optimálním stavu. Kalibraci hmot i ladění lze plánovat.



Inteligentní Reflex

Intelligent Reflex na základě předchozího nástřiku systém upraví sekvenci podle daných příkazů (carryover, rychlý screening apod).

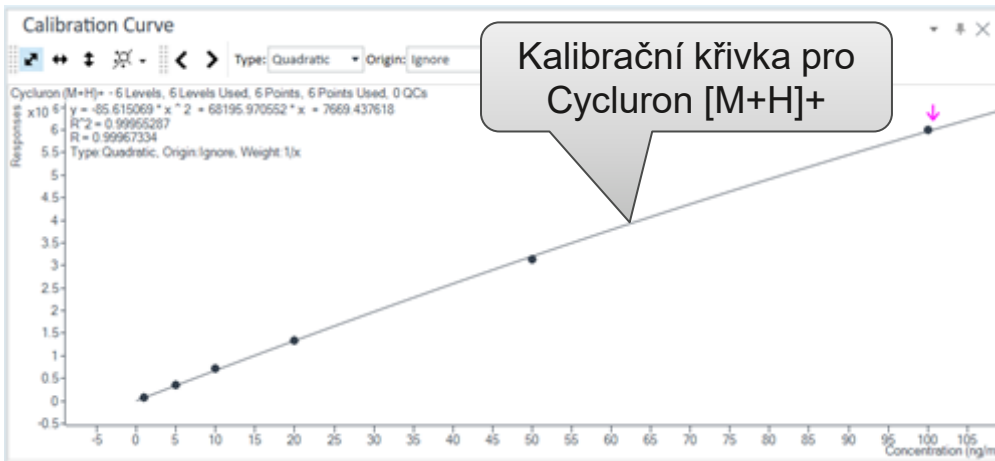


Cílená kvantifikace × Screening

Strategie pro různé analytické úkoly

Cílená kvantifikace

- Kvantifikace cílových sloučenin pomocí standardů
- Kvantifikace sloučenin se provádí pomocí kalibrační křivky.
- Referenční standard je nezbytný pro kvantifikaci.
- Retenční čas je znám ze standardu.
- Reportuje se koncentrace sloučeniny.



Screening

- Potvrzení přítomnosti sloučeniny.
- Referenční standard není nutný (není dostupný).
- Vyžaduje databázi sloučenin.
- Report z analýzy obsahuje detekované, nedetekované a podezřelé sloučeniny.

Find Compounds interface showing MS/MS library search results. The search criteria are: Enter one attribute per line. Examples: 140.074, Glycine, 200.01. The search results table shows 56 hits. A callout points to the table with the text: "Knihovna MS/MS spekter pro screening".

Compound Name	Formula	Mass	Retention Time	Cation	Anion	CAS
Methamidophos (Methamidophos)	C ₂ H ₈ NO ₂ P	141.00134	2.718	☐	☐	10265-92-6
Methomyl	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₂ S	162.0463	3.097	☐	☐	16752-77-5
Fenuron (N,N-Dimethyl-N-phenylurea)	C ₉ H ₁₂ N ₂ O	164.09496	3.808	☐	☐	101-42-8
IPC / Propham	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.09463	6.296	☐	☐	122-42-9
Acetate	C ₄ H ₁₀ NO ₃ P	183.0119	2.776	☐	☐	30560-19-1

Screening: požadavky a nástrahy

- **Potřebujeme seznam analytů!** Může být velmi obsáhlý, ale nelze nalézt analyty, které na něm nejsou.
 - Musíme znát sumární/strukturní vzorce analytů:
 1. Nalezení podezřelých píků na základě molekulových iontů: všechny možné adukty.
 2. Identifikace analytu spočívá ve shodě změřeného **produktového** spektra se spektrem v knihovně (nutná knihovna MS/MS spekter).
 3. *Pokud není dostupná knihovna, lze provést alespoň in-silico fragmentaci a interpretaci změřeného spektra se strukturou. **Seriózní identifikace analytů je však možná pouze porovnáním se spektrem/standardem.***
- Analyty různých fyzikálně-chemických vlastností potřebují odlišnou extrakci, chromatografii... Jsme vůbec schopni je ve vzorku analyzovat stávající technikou?
 - Labilní analyty mohou fragmentovat už v iontovém zdroji → nemáme molekulový ion → nelze najít analyt a spojit jej s produktovým spektrem z knihovny!

Požadavky na identifikaci analytů pro HRMS

Document N° SANTE/11312/2021 v2, v platnosti od 1.1.2024

Table 3. Identification requirements for different MS techniques²

MS detector/Characteristics		Acquisition	Requirements for identification	
Resolution	Typical systems (examples)		minimum number of ions	additionally
Accurate mass measurement	High resolution MS: (Q-)TOF (Q-)Orbitrap	Full scan, limited m/z range, SIM, fragmentation with or without precursor-ion selection, or combinations thereof	<u>2 ions with mass accuracy ≤ 5 ppm^{a, b, c)}</u>	$S/N \geq 3^d)$ <u>Analyte peaks from precursor and/or product ion(s) in the extracted ion chromatograms must fully overlap.</u> Ion ratio: see D12

^{a)} preferably including the molecular ion, (de)protonated molecule or adduct ion

^{b)} including at least one fragment ion

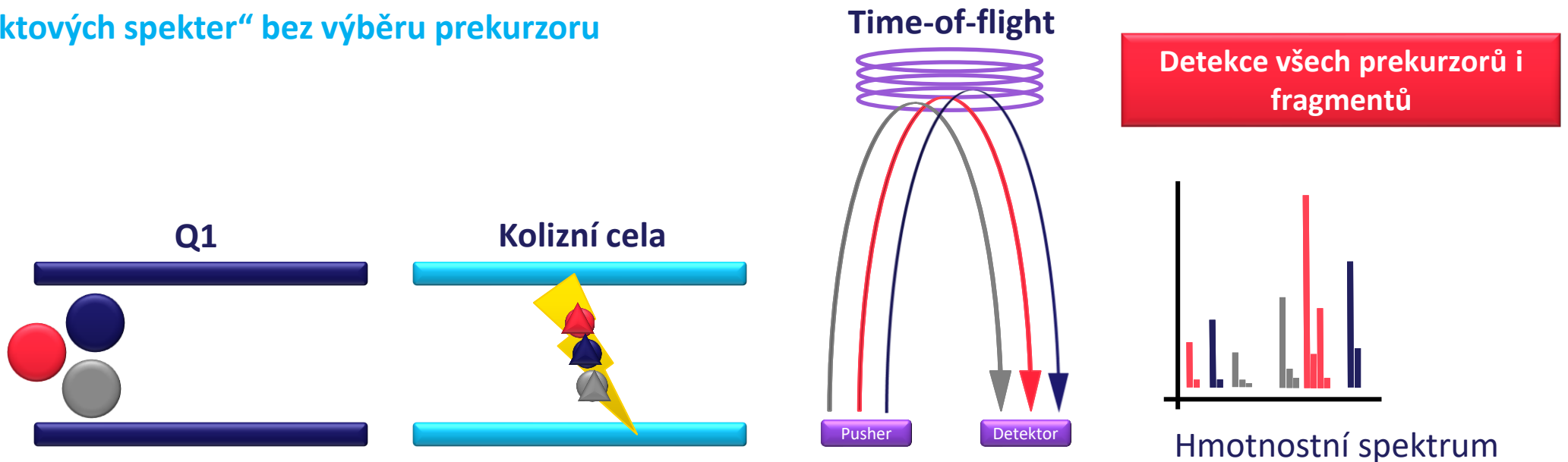
^{c)} <1 mDa for $m/z < 200$

^{d)} in case noise is absent, a signal should be present in at least five subsequent scans

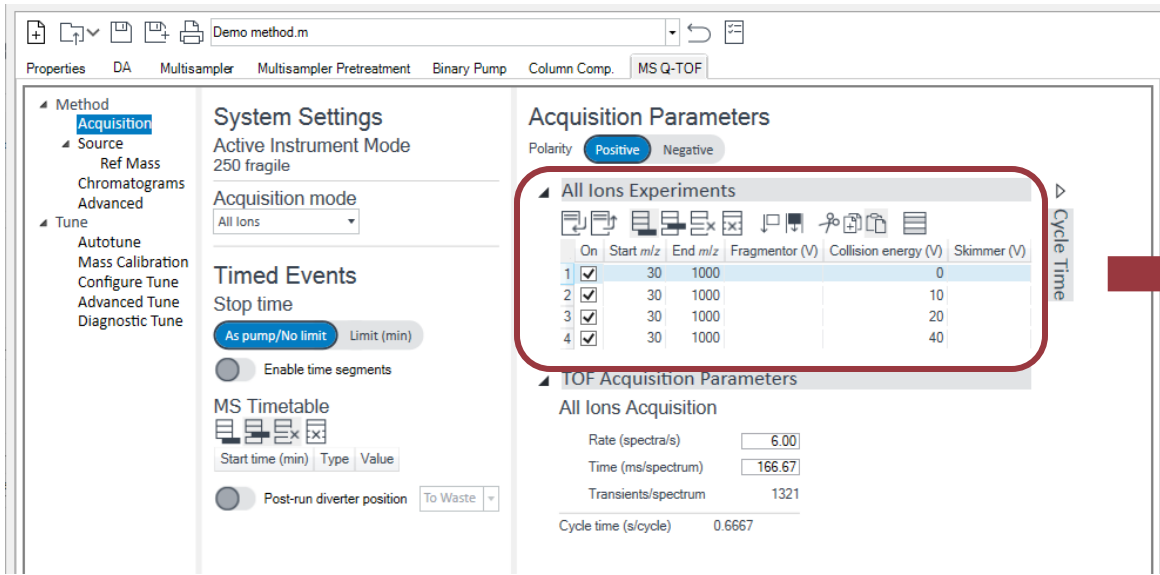
All Ions MS/MS: produktové ionty pro všechny analyty

- Měření produktových iontů bez selekce prekursoru v kvadrupólu (Q je transmisní).
- Alternace různých kolizních energií (např. 10V-20V-40V), získáváme produktová spektra kontinuálně pro **všechny prekuzory přes celý rozsah m/z** .
- Někdy se tomuto módu říká DIA: Data Independent Analysis.

Měření „produktových spekter“ bez výběru prekursoru



All Ions MS/MS: Nastavení metody



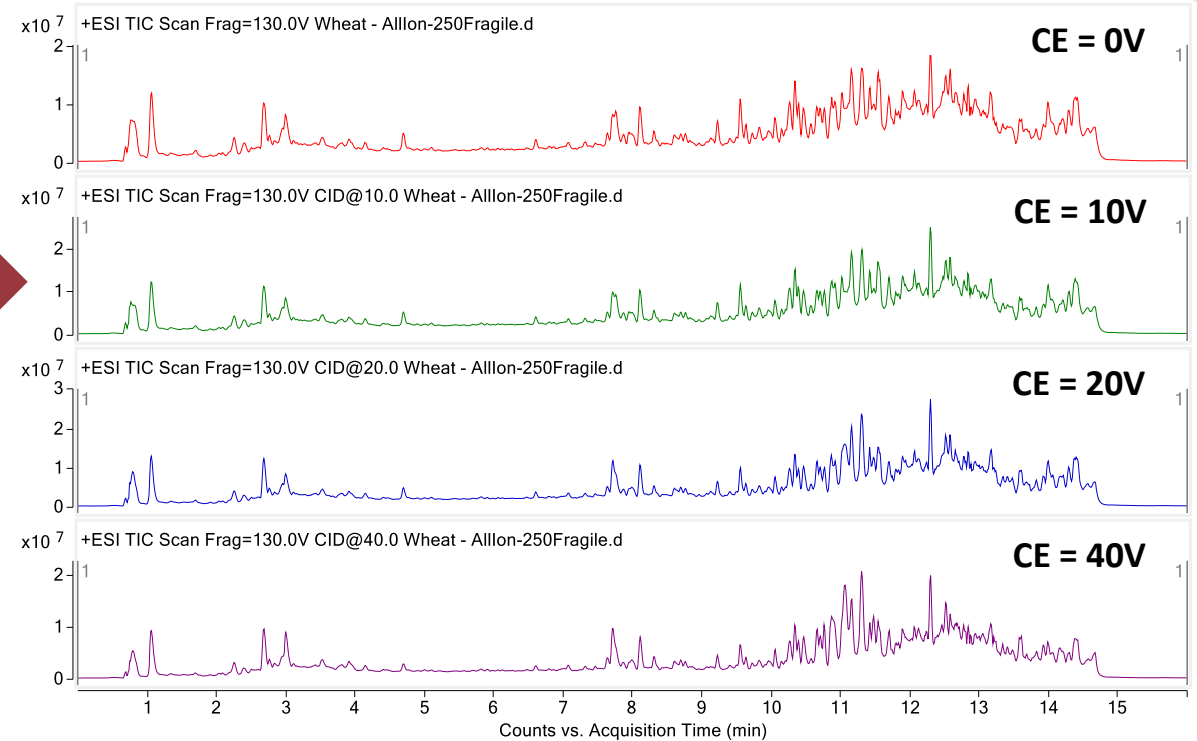
The screenshot shows the Altium software interface for method configuration. The 'All Ions Experiments' table is highlighted with a red box, and a red arrow points from it to the right. The 'TOF Acquisition Parameters' section is also visible.

On	Start m/z	End m/z	Fragmentor (V)	Collision energy (V)	Skimmer (V)
☒	30	1000		0	
☒	30	1000		10	
☒	30	1000		20	
☒	30	1000		40	

TOF Acquisition Parameters

All Ions Acquisition

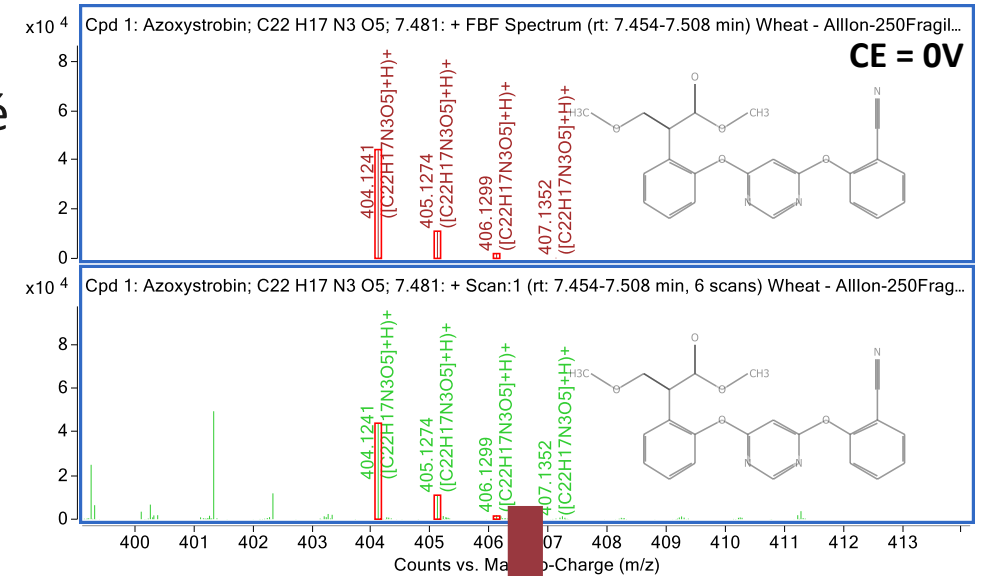
Rate (spectra/s): 6.00
Time (ms/spectrum): 166.67
Transients/spectrum: 1321
Cycle time (s/cycle): 0.6667



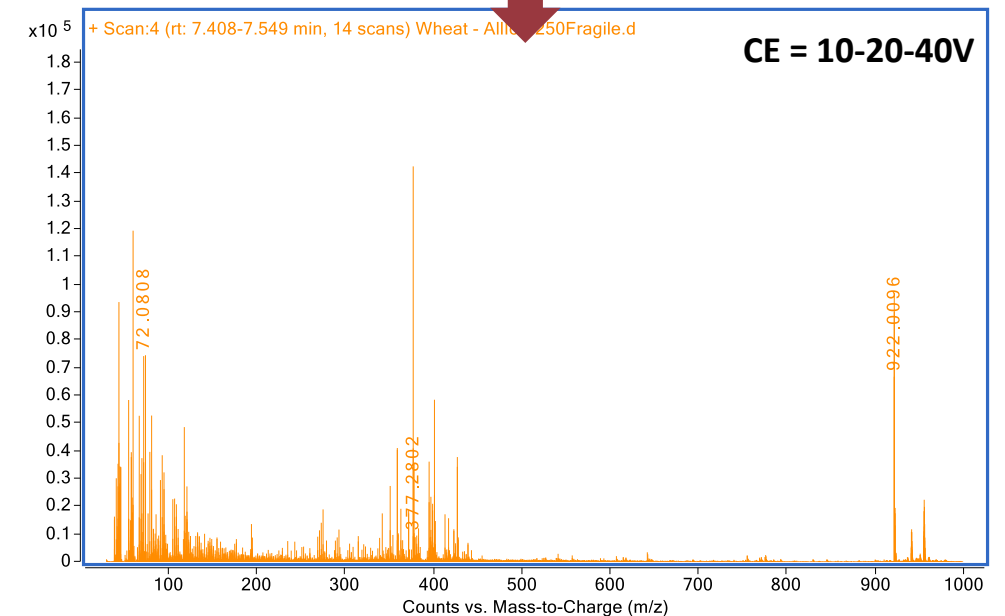
- ✓ Jednoduché nastavení akviziční metody: MS mód, pouze změny v kolizní energii.
- ✓ Vysoký duty cycle: Není potřeba přepínat do MS/MS.
- ✓ Produktové ionty na několika CE pro celý rozsah m/z .

All Ions MS/MS: Procesování dat

1. Ve spektru bez fragmentace jsou vyhledány prekurzorové ionty a pokud je nalezen signál, vyextrahuje se i produktové spektrum.



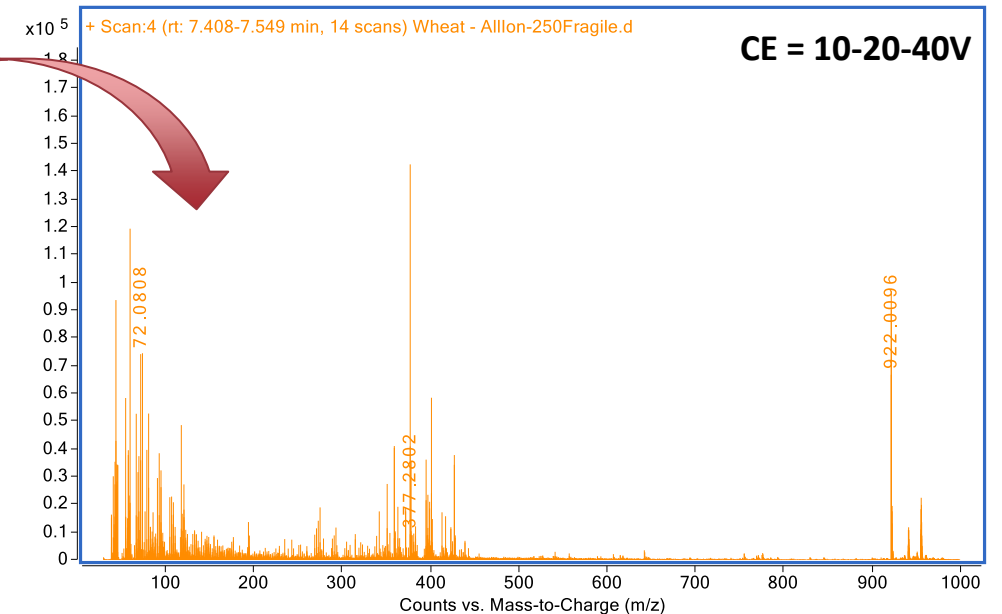
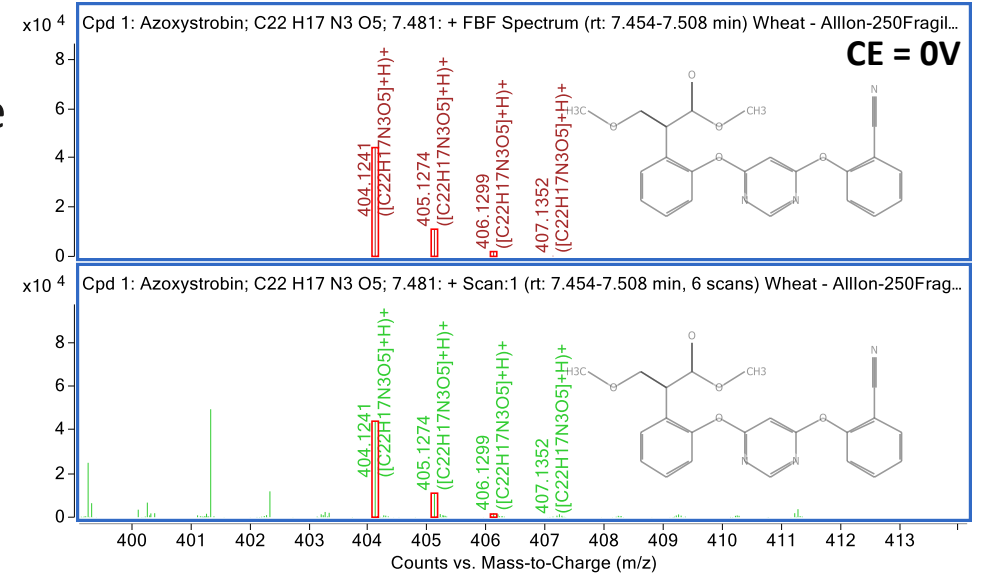
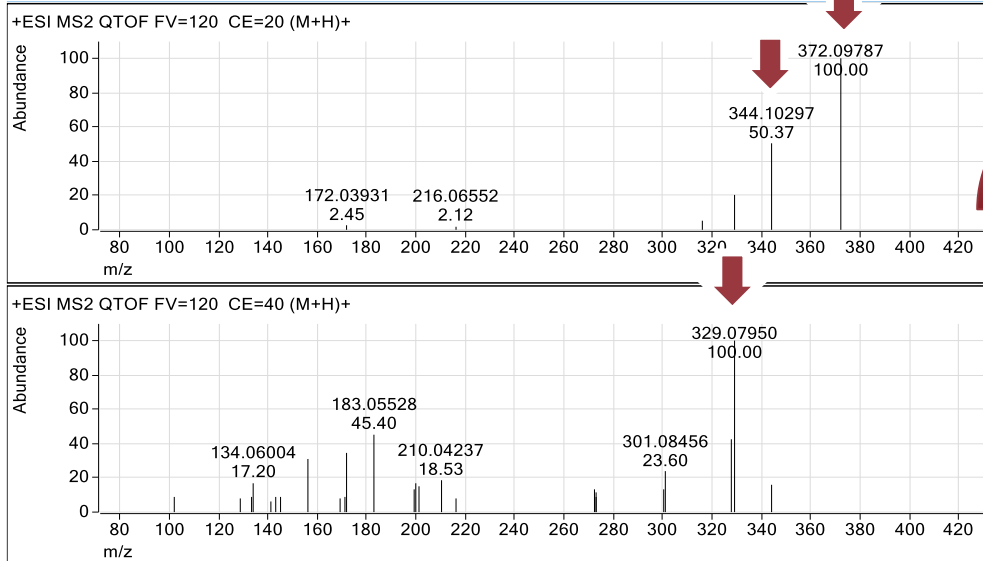
Produktová spektra bez informace o prekurzoru, není jasné jaké fragmenty vznikly z kterého prekurzoru.



All Ions MS/MS: Procesování dat

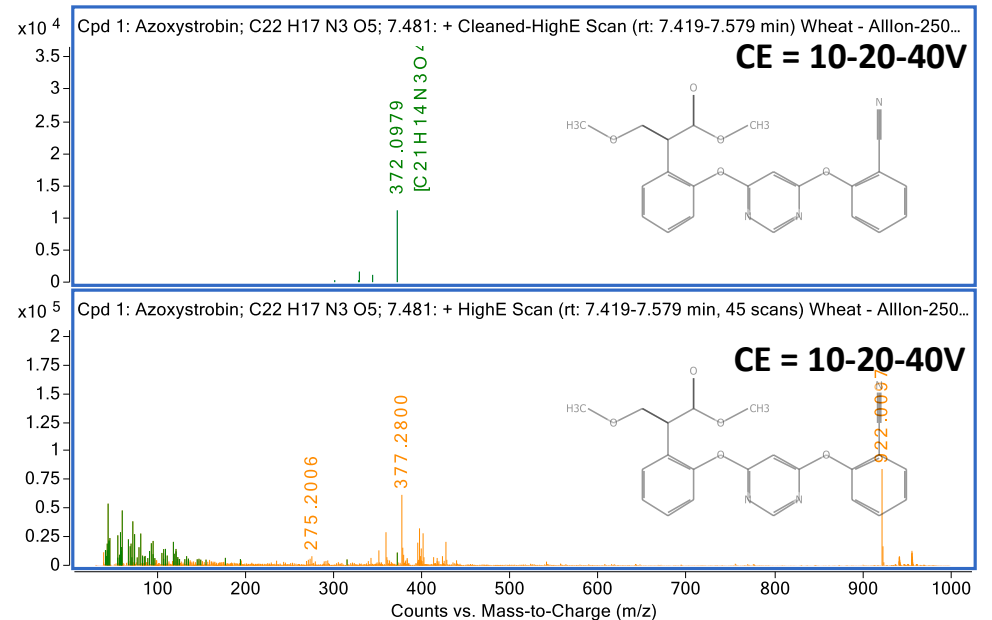
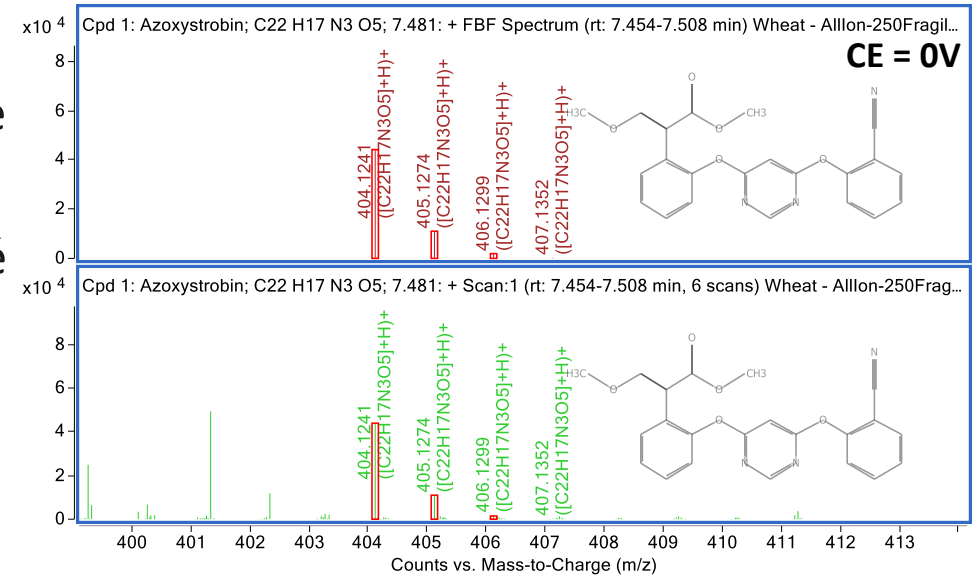
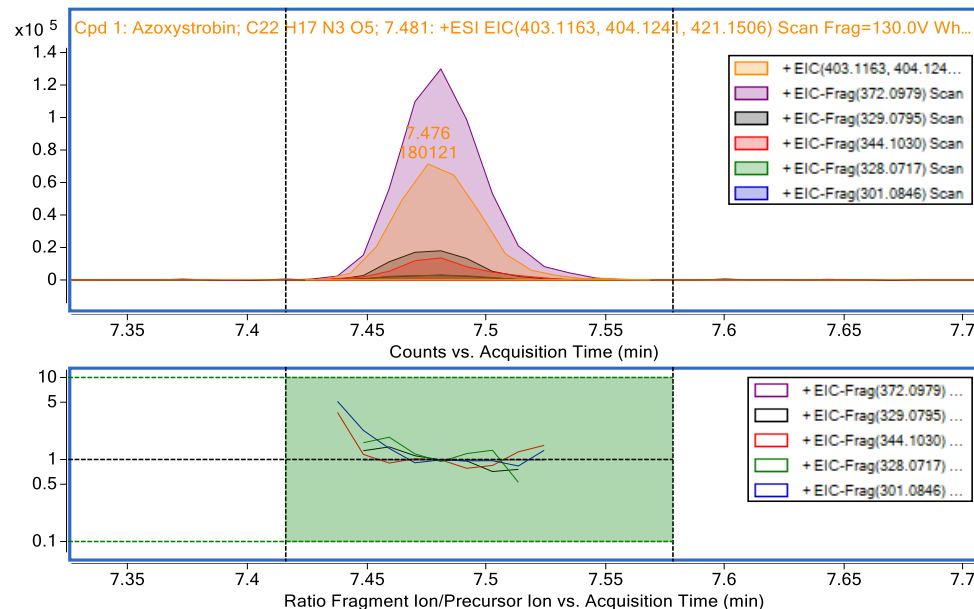
1. Ve spektru bez fragmentace jsou vyhledány prekurzorové ionty a pokud je nalezen signál, vyextrahuje se i produktové spektrum.

Knihovna MS/MS spekter



All Ions MS/MS: Procesování dat

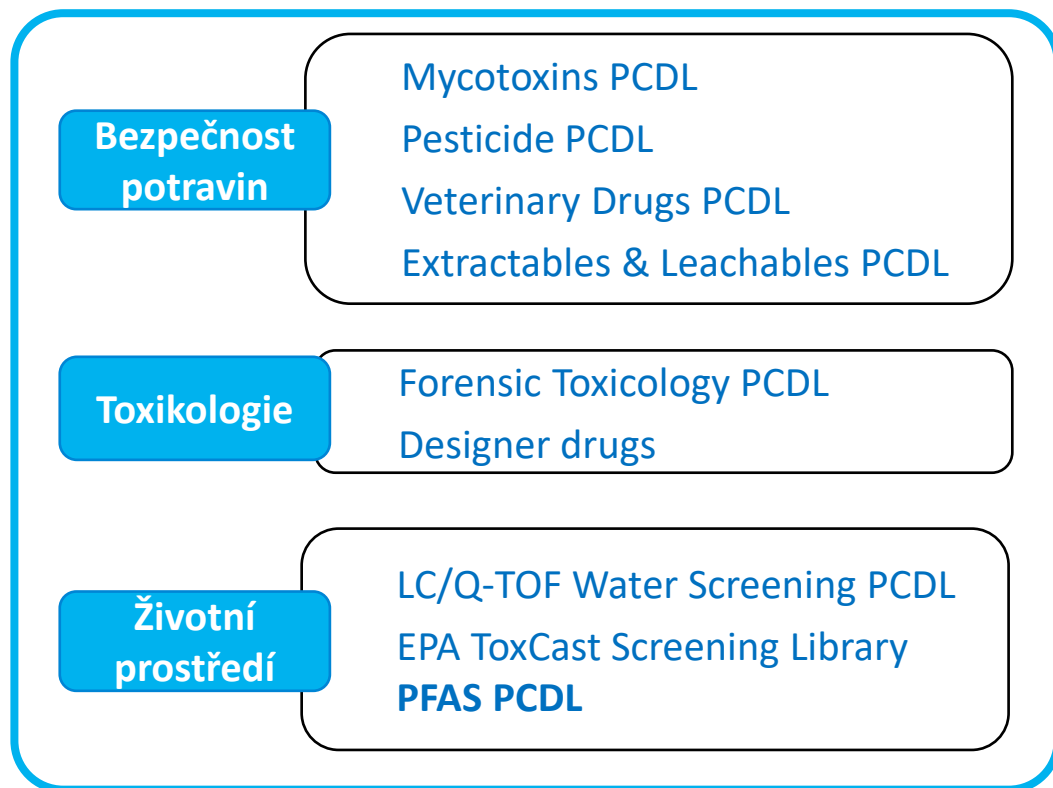
1. Ve spektru bez fragmentace jsou vyhledány prekurzorové ionty a pokud je nalezen signál, vyextrahuje se i produktové spektrum.
2. V retenčním čase potenciálního analytu jsou vyextrahované chromatogramy produktových iontů z **MS/MS knihovny** a spočítáno jejich koeficientní skóre.



Knihovny: základ úspěchu (nejen) u screeningu

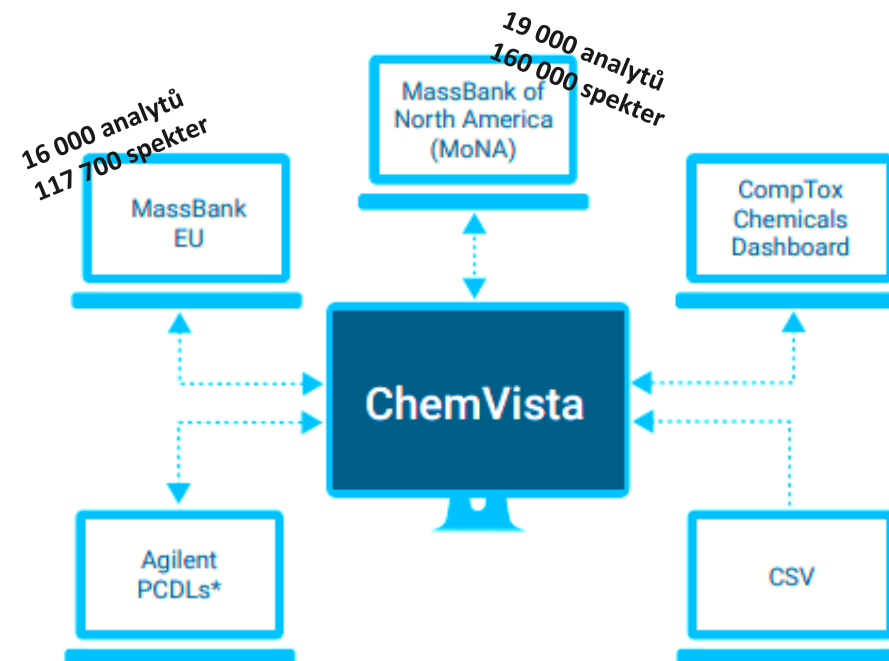
Bez identifikace není výsledek!

Agilent Applied Market LC QTOF knihovna



> 14500 analytů, > 6000 analytů s MS/MS spektry

Správce databází ChemVista



*PCDLs: curated Personal Compound Databases and Libraries

Možnost importu **spekter z internetových databází**.
Přidávání vlastních analytů, spekter, RT apod.

Cílová kvantifikace

Screening - [Result Review]										
File Home Targets Suspects Previous Next Sample 4 8 202 Total: 214										
Status	Promoted	Compound Name	CAS#	Formula	R.T.	R.T. Diff.	Final Conc.	Mass Match Score	Target Ion	Mass Accuracy
✓	☐	Isoprocab	2631-11-4	C11H15NO2	1.058	0.016		78.6	194.1176	0.3%
✓	☐	Dinotefuran	165252-70-1	C7H14N4O3	2.604	0.013		80.7	203.1139	0.0%
✓	☐	Acetamidiprid	187166-40-1	C10H11ClN4	3.876	0.007	3.4029	90.4	223.0745	0.0%
⚠	☐	Methylcarb	1129-41-5	C9H11NO2	4.874	0.192		81.7	166.0863	0.8%
⚠	☐	Imazamethabenz-methyl	81405-85-8	C16H20N2O3	5.696	0.112		84.5	289.1547	0.0%
⚠	☐	Fenazachlor	67129-08-2	C14H16ClN3O	6.654	0.008		47.6	278.1055	0.9%
⚠	☐	Fenpropimorph (Ro 14-3169)	67564-91-4	C20H33NO	7.982	0.864		77.7	304.2635	0.9%
⚠	☐	Diethofencarb	87130-20-9	C14H21N2O4	7.234	0.258	0.1822	84.4	268.1543	0.1%
✓	☐	Azoxystrobin	131860-33-8	C22H17N3O5	7.491	0.002	7.0933	99.4	404.1241	0.5%
⚠	☐	Dodine	112-65-2	C13H28N3	8.820	0.030		73.4	228.2434	-1.6%
⚠	☐	Haloxypop	69806-34-4	C15H11ClF3NO4	8.860	0.003		90.0	362.0401	-1.2%
⚠	☐	Difenconazole(II)	119446-68-3	C19H17Cl2N3O3	9.601	0.039	2.6378	15.4	406.0720	-0.9%

Screening

Extrahované
fragmentové
ionty

The screenshot displays the Quantitative Analysis software interface for a 2024-10-20 analysis of pesticides. The top menu bar includes View, Method, Tools, and Help. The main window is divided into several sections:

- Batch Table:** A table listing samples and their associated data files. The sample 'Wheat' is highlighted.
- Compound Information:** A section showing the ESI EIC (404.1241) Scan Frag=130.0V/Wheat.d. It displays a chromatogram with a peak at 7.491 min. and a table of peak data.
- Calibration Curve:** A graph showing the relationship between concentration and response for Azoxystrobin. The curve is linear, with the equation $y = 18430.423307 \cdot x + 981.234031$ and $R^2 = 0.999871639$.

The peak data table in the Compound Information section is as follows:

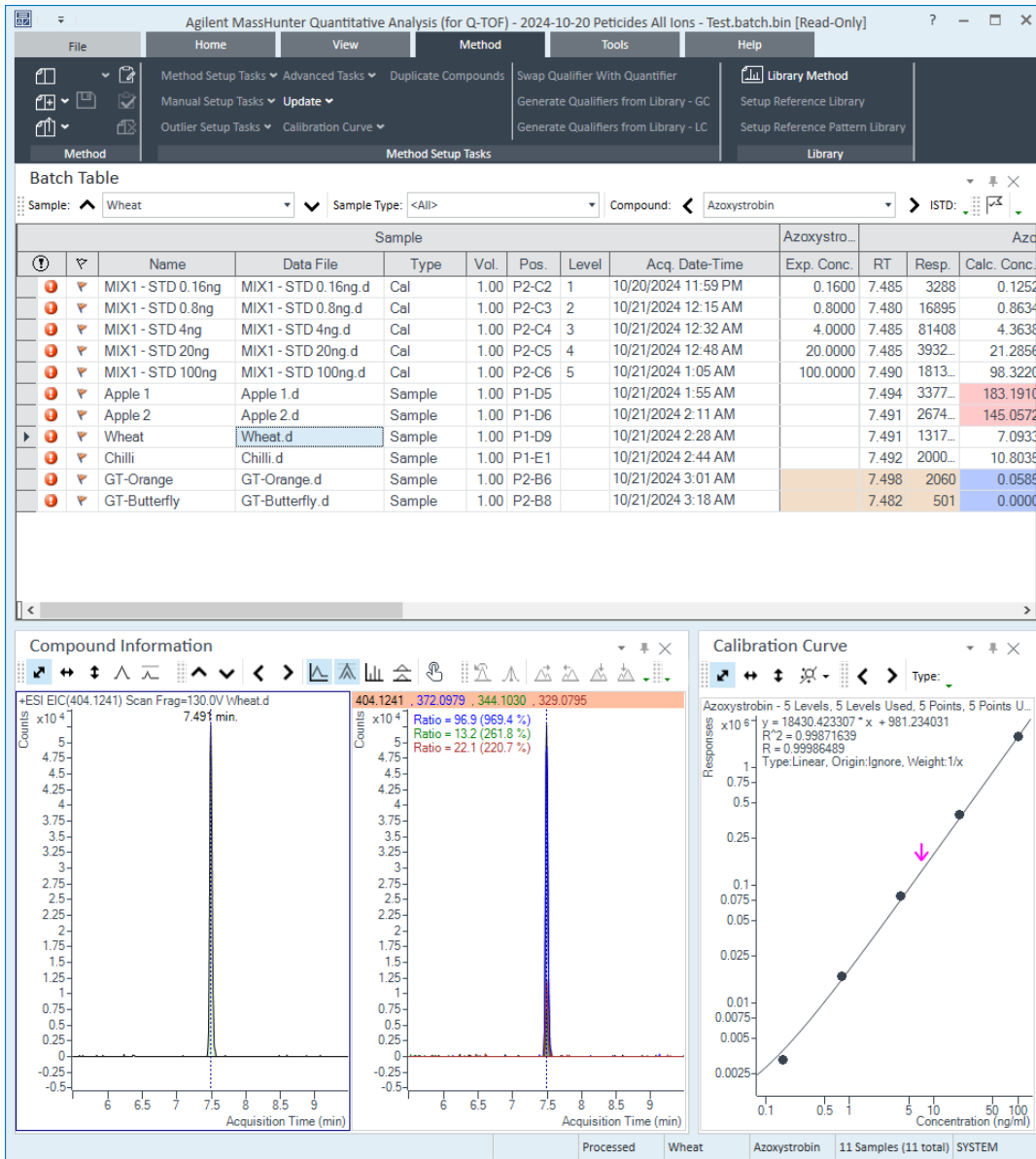
Peak	Ratio	Area	Height	Width
1	96.9 (96.9 %)	372.0979	344.1030	329.0795
2	13.2 (261.8 %)			
3	22.1 (220.7 %)			

The Calibration Curve section shows the following data:

Concentration (ng/ml)	Response
0.1	0.0025
0.5	0.0075
1	0.015
5	0.075
10	0.15
50	0.75
100	1.5



Nastavení *kvantifikační* metody pro QTOF



Kvantitativní metoda z PCDL knihovny:

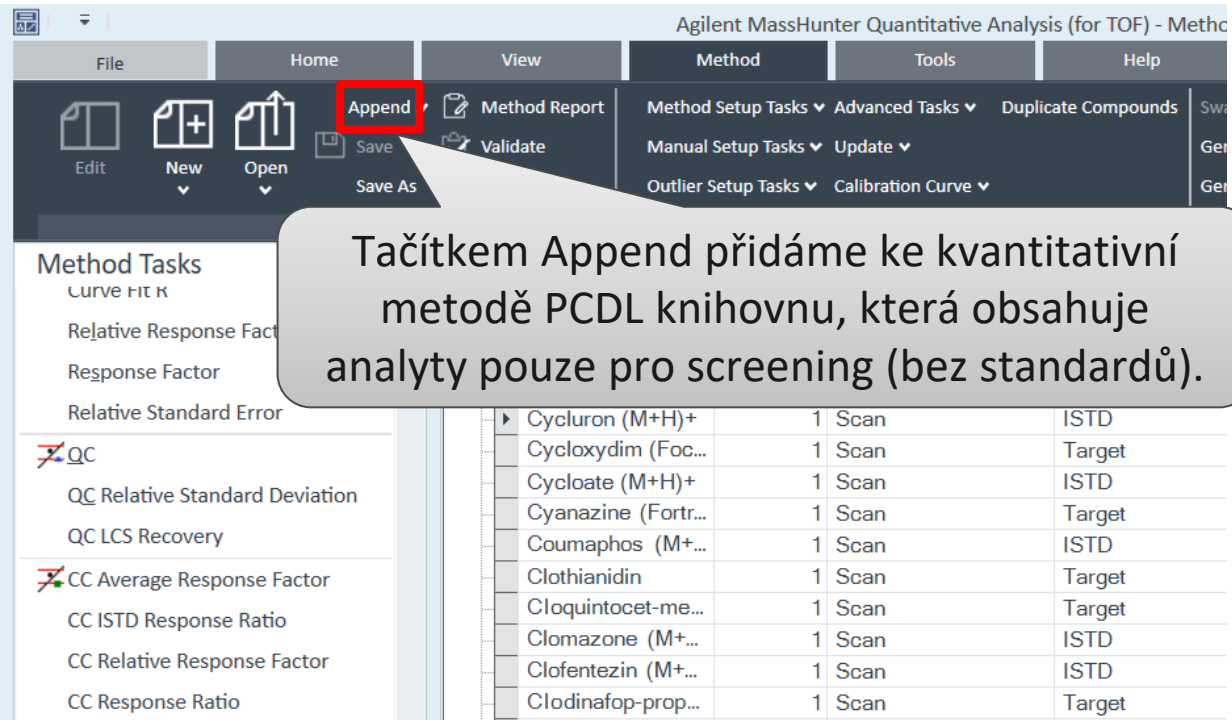
- Uvažované adukty se vypočítají ze sumárního vzorce.
- Přesné m/z produktů z MS/MS spekter.
- RT pro cílové analyty – máme standard.
- Doplníme koncentrace – máme standard.

The screenshot displays the MassHunter PCDL Manager - Pesticides interface. The main window shows a list of compounds and their properties, including Name, Formula, Mass, Retention Time, Cation, Anion, CAS, and ChemSpider. The list is filtered to show 196 hits. A red arrow points from the calibration curve in the previous figure to this table, indicating the source of the compound data.

Name	Formula	Mass	Retention Time	Cation	Anion	CAS	ChemSpider
Chlorophthalm (Chlorophthalm)	C10H12OIN2O	213.05566	7.54301522			101-21-3	2627
Acinathin (Rufast)	C26H21FNO5	541.13239	14.06056399			103833-18-7	10459290
Butoxycarbonyl	C7H14NO4S	222.06743	2.814267455			34681-23-7	7845475
Chlorfluazuron (Chlorfluazuron)	C20H9Cl3F5N3O3	538.96297	13.61164939			71422-67-8	82810
Cnidon-ethyl	C19H17O2NO4	393.05346	15.59511928			142891-20-1	4722745
Cycloxydim (Focus)	C17H27NO3S	325.17116	11.67467538			101205-02-1	10469292
Cyflue (Cythiate)	C8H12NO5PS2	296.98945	4.783162787			115-93-5	7392
Diclofop-methyl	C16H14ClO2O4	340.02691	11.9697424			51338-27-3	36567
Fenoxaprop	C16H12ClNO5	333.0404	9.657414851			73519-55-8	77708
Fipronil	C12H4Cl2F6N4O5	435.93871	9.50199711			120068-37-3	3235
Fomesafen	C15H10ClF3N2O...	437.99002	7.909353122			72178-02-0	46694
Haloxyp	C15H11ClF3NO4	361.03287	9.766498401			69806-34-4	46140
Hexaflumuron	C16H8Cl2F6N2O3	459.98162	11.24565688			86479-06-3	82839
Formothion	CH12NO4PS2	256.99454	4.904052964			2540-82-1	16412
Isoproturon	C12H18N2O	206.14191	6.699694971			34123-59-6	33695
Propanil	C9H9Cl2NO	217.00612	7.666391219			709-98-8	4764
Fluroxyp	C7H5Cl2F2NO3	253.96613	12.99740859			69377-81-7	45757
3-Hydroxycarbofuran	C12H15NO4	237.10011	3.81128346			16655-82-6	26024
1-Naphthylacetic acid (1-Naphthaleneacetic acid)	C12H10O2	186.06808	4.965639042			86-87-3	6601
2,4,5-TP / Silvex (Fenoprop)	C9H7Cl3O3	267.94608	8.838507244			93-72-1	6891
5-Hydroxybutyric acid	C4H8O3	116.06808	6.824819068			949-71-0	97281

PCDL knihovna s RT pro tvorbu cílené metody

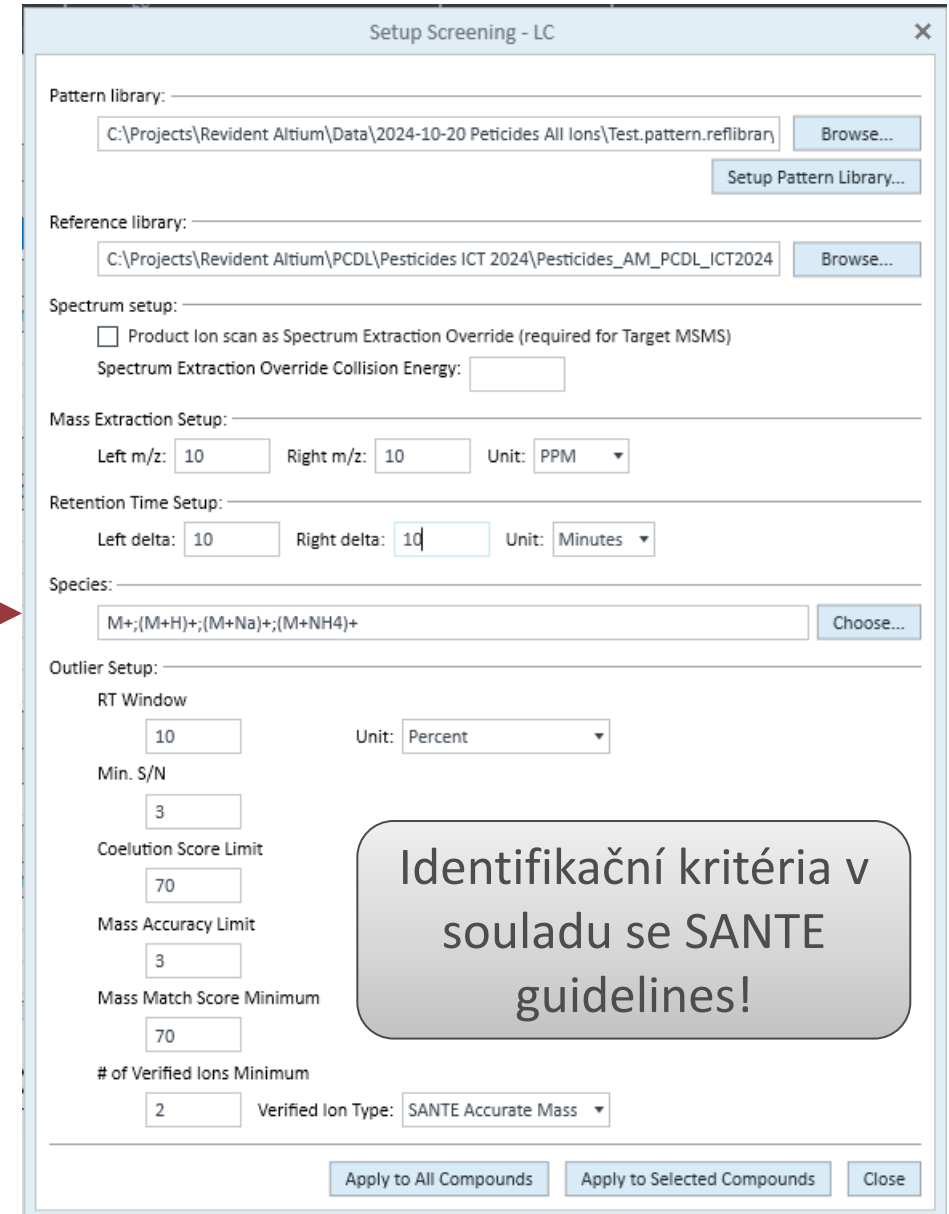
Nastavení *screeningové* metody pro QTOF



Compound	Scan Type	Target
Cycluron (M+H)+	1 Scan	ISTD
Cycloxydim (Foc...	1 Scan	Target
Cycloate (M+H)+	1 Scan	ISTD
Cyanazine (Fortr...	1 Scan	Target
Coumaphos (M+...	1 Scan	ISTD
Clothianidin	1 Scan	Target
Cloquintocet-me...	1 Scan	Target
Clomazone (M+...	1 Scan	ISTD
Clofentezin (M+...	1 Scan	ISTD
Clodinafop-prop...	1 Scan	Target

Screeningová metoda z PCDL knihovny:

- Uvažované adukty se vypočítají ze sumárního vzorce.
- Přesné m/z produktů z MS/MS spekter.
- **NE**známe RT pro cílové analyty – **NE**máme standard.
- **NE**doplníme koncentrace – **NE**máme standard.



Pattern library: C:\Projects\Revident Altium\Data\2024-10-20 Pesticides All Ions\Test.pattern.reflibrar Browse... Setup Pattern Library...

Reference library: C:\Projects\Revident Altium\PCDL\Pesticides ICT 2024\Pesticides_AM_PCDL_ICT2024 Browse...

Spectrum setup: ☐ Product Ion scan as Spectrum Extraction Override (required for Target MSMS)
Spectrum Extraction Override Collision Energy:

Mass Extraction Setup: Left m/z: 10 Right m/z: 10 Unit: PPM

Retention Time Setup: Left delta: 10 Right delta: 10 Unit: Minutes

Species: M+;(M+H)+;(M+Na)+;(M+NH4)+ Choose...

Outlier Setup: RT Window: 10 Unit: Percent
Min. S/N: 3
Coelution Score Limit: 70
Mass Accuracy Limit: 3
Mass Match Score Minimum: 70
of Verified Ions Minimum: 2 Verified Ion Type: SANTE Accurate Mass

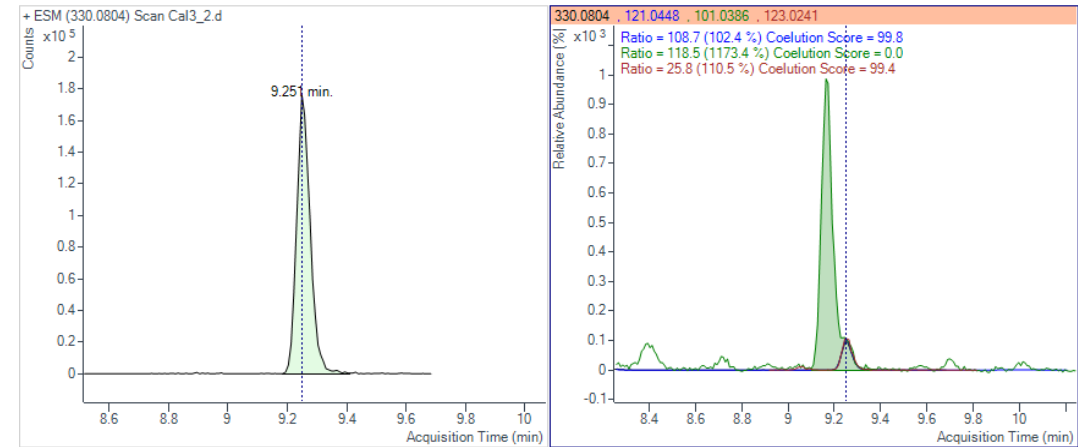
Apply to All Compounds Apply to Selected Compounds Close

Odvrácená strana mince...

All Ion MS/MS mód trpí na velké množství interferencí, především ve spektrech s fragmentací.

Nutné revidovat výsledky, jinak hrozí **falešně negativní nálezy**.

Řešení: Použít z knihovny více fragmentů, interference obvykle není na všech iontech.

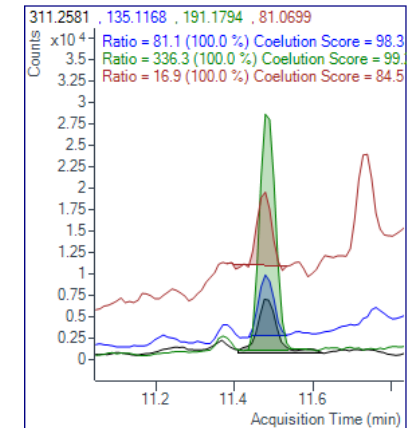


Mnohem častější jsou díky interferencím **falešně pozitivní chyby**.

Řešení:

- Více produktových iontů potřebných pro identifikaci.
- Zvýšit požadované koeluční skóre.
- Zvýšit požadované MS skóre.
- **Přidat RT analytů.**

Zpřísnění pravidel pro identifikaci analytů může vyřadit i pozitivní nálezy!



Skutečný methoprene
(RT = 11,5)

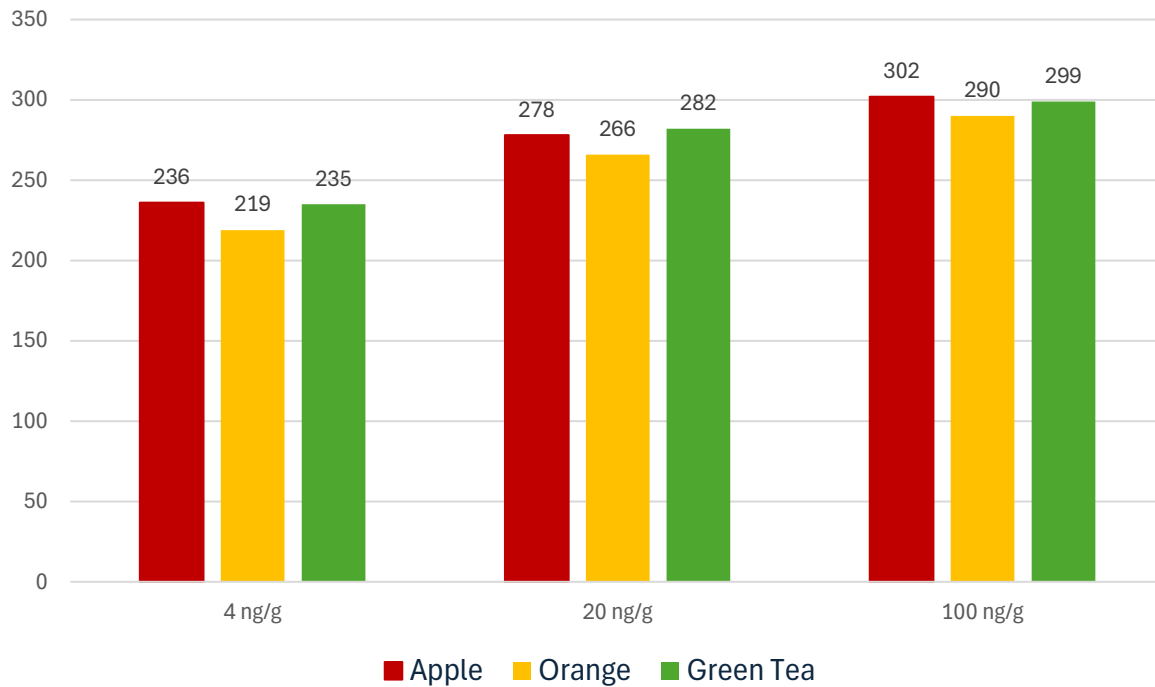
Vliv znalosti RT na výsledek screeningu

- Tři matrice: Jablka × Pomeranče × Zelený čaj
- Tři koncentrace: 4, 20 a 100 ng/g.
- Spike: **341 pesticidů**

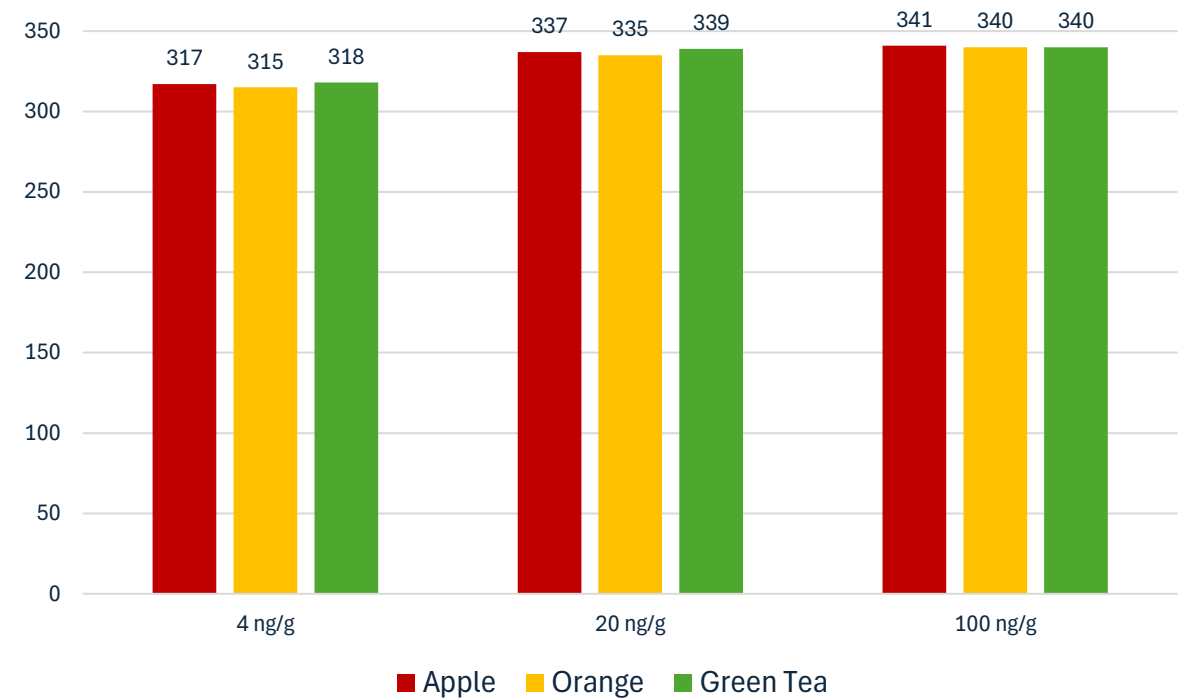
Agilent 1290 LC + Agilent Revident QTOF
Nástřik: 1 μ l
Kolona: Agilent Zorbax EC-C18 100 $\times$ 2.1; 1,8 μ m
Ionizace: ESI+



Správně identifikované analyty **bez RT**



Správně identifikované analyty **s RT**



Jak přidat retenční časy analytům, které neznáme?

Retention time prediction

- Matematické modelování retence analytů na HPLC koloně.
 - Změření skutečných RT stovek různých analytů.
 - Trénování modelu: Vložení všech známých parametrů analytů (hmotnost, funkční skupiny, polarita, pKa, logP apod) do vybraného modelu.
 - Predikce RT analytů na základě znalosti všech chemicko-fyzikálních parametrů analytu (i teoreticky vypočtených).



Deep learning for retention time prediction in reversed-phase liquid chromatography

Elizaveta S. Fedorova ^a, Dmitry D. Matyushin ^a, Ivan V. Plyu
 Andrey N. Stavrianidi ^{a,b}, Aleksey K. Buryak ^a

Show more

nature communications

Explore content About the journal Publish with us

nature > nature communications > articles > article

Article | Open access | Published: 29 May 2023

Retention time prediction for chromatographic enantioseparation by quantile geometry-enhanced graph neural network

Hao Xu, Jinglong Lin, Dongxiao Zhang & Fanyang Mo

Nature Communications 14, Article number: 3095 (2023) | Cite this article

communications chemistry

Explore content About the journal Publish with us

nature > communications chemistry > articles > article

Article | Open access | Published: 08 March 2024

Generic and accurate prediction of retention times in liquid chromatography by post-projection calibration

Yan Zhang, Fei Liu, Xiu Qin Li, Yan Gao, Kang Cong Li & Qing He Zhang

Communications Chemistry 7, Article number: 54 (2024) | Cite this article



Search text, DOI, authors, etc.



Journal of Agricultural and Food Chemistry > Vol 71/Issue 24 > Article

Cite Share Jump to Expand

FUNCTIONAL STRUCTURE/ACTIVITY RELATIONSHIPS | June 9, 2023

Predictive Quantitative Read-Across Structure–Property Relationship Modeling of the Retention Time (Log t_R) of Pesticide Residues Present in Foods and Vegetables

Shilpayan Ghosh, Mainak Chatterjee, and Kunal Roy*

Jak přidat retenční časy analytům, které neznáme?

HighResNPS

- Uzavřenou komunitou vyvíjená HRMS databáze nových psychoaktivních substancí s produktovými spektry.
- Přibližně 2,300 analytů; 1,658 analytů má produktová spektra.
- Databáze obsahuje retenční časy na základě **vlastního predikčního modelu.**



Agilent Forensic Toxicology PCDL

- Pečlivě zkontrolovaná a uspořádaná HRMS knihovna pro LC-QTOF Agilent, součást ChemVista.
- Obsahuje přes 9200 analytů, pro asi 4400 analytů jsou změřená a revidovaná MS/MS spektra.

Stále ve fázi vývoje, ale je na co se těšit:

- Metoda pro forenzní toxikologii, cca 5000 analytů s MS/MS spektry.
- Změřené a predikované retenční časy pro tři chromatografické metody s délkou separace 25/15/10 min.
- Plán predikce RT pro všech > 12 000 analytů v ChemVista.

Validace modelu pro predikci RT

Predikce RT pro ≈ 2500 na základě 700 změřených standardů.

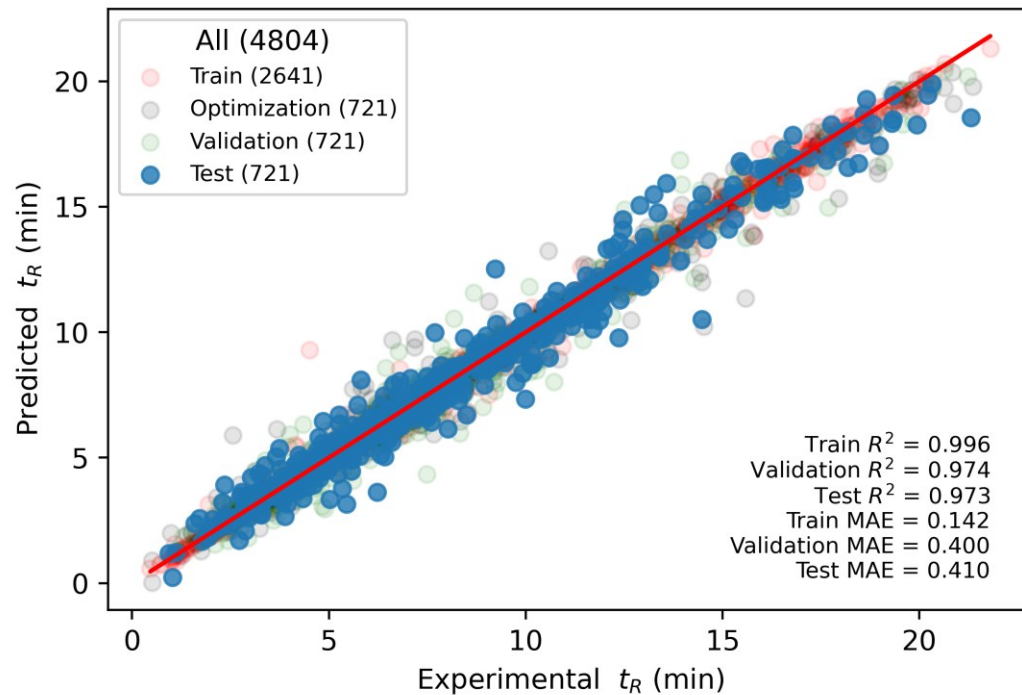
Development of a single retention time prediction model integrating multiple liquid chromatography systems: Application to new psychoactive substances



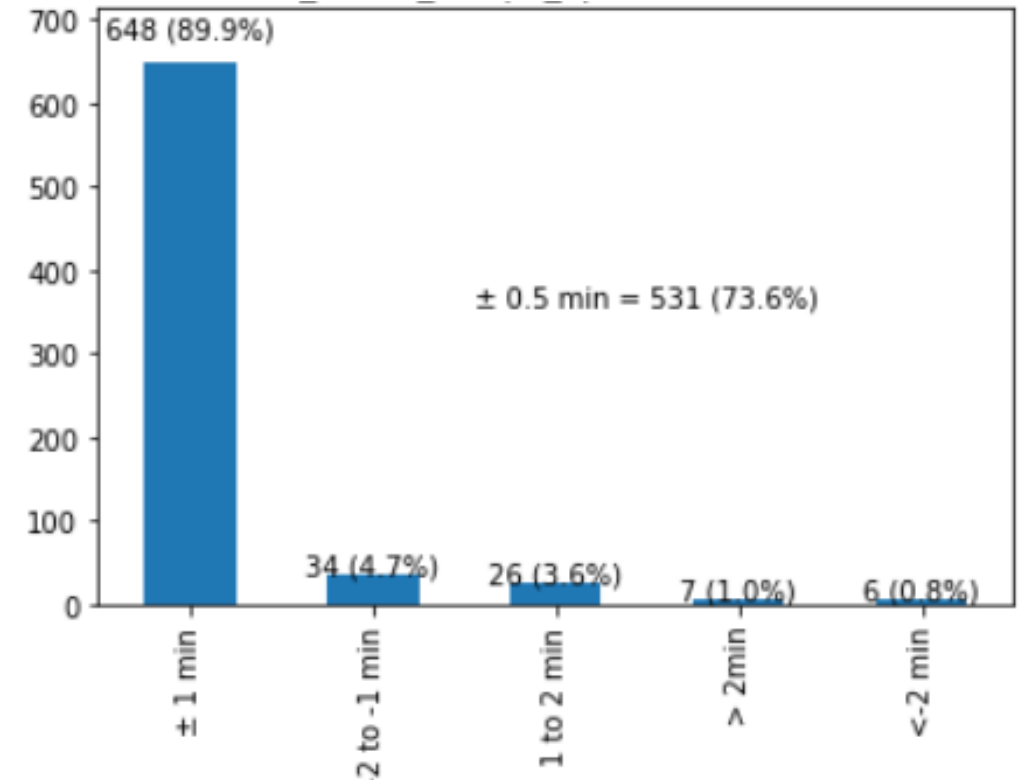
Daniel Pasin^{*}, Christian Brinch Mollerup, Brian Schou Rasmussen, Kristian Linnet, Petur Weihe Dalsgaard

Section of Forensic Chemistry, Department of Forensic Medicine, Faculty of Health and Medical Sciences, University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark

Validace predikčního modelu



Odchylka predikovaného RT od skutečného RT.



Využití predikovaných RT

Izomery fluoromethamphetaminu (FMA)

Suspect hits:

2-FMA

3-FMA

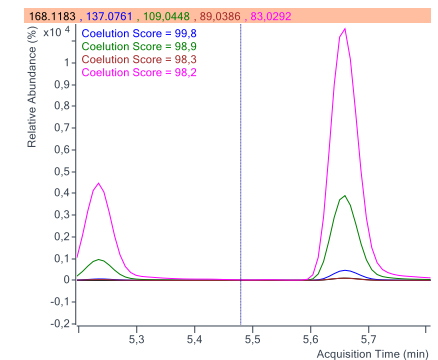
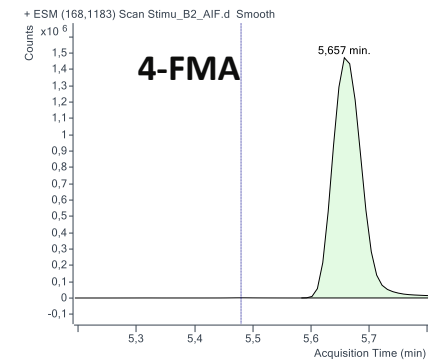
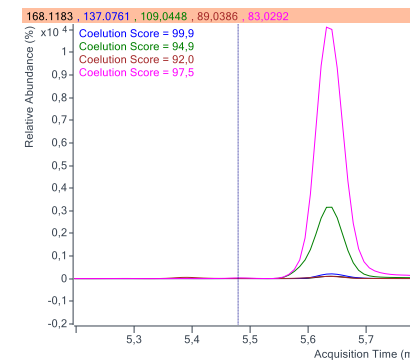
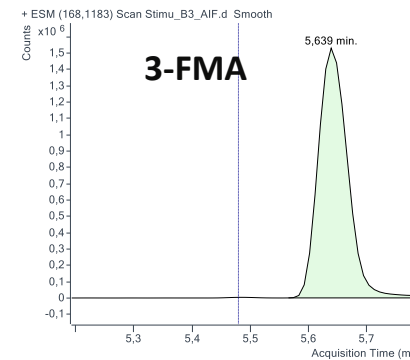
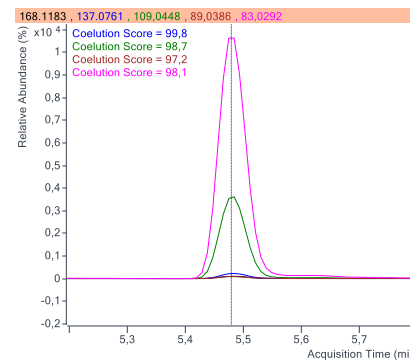
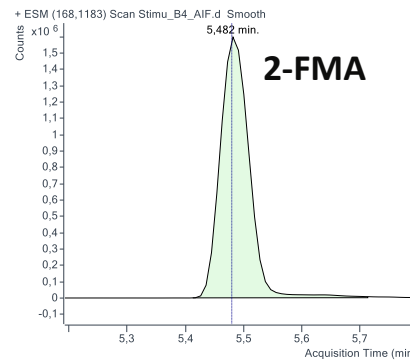
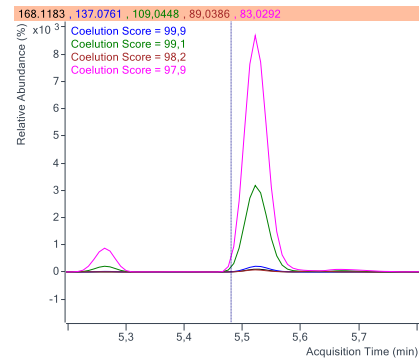
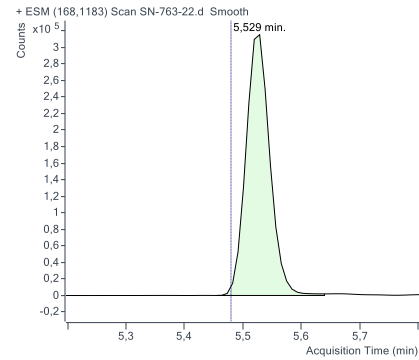
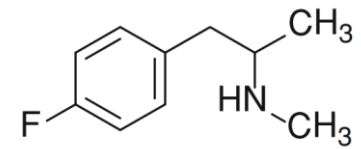
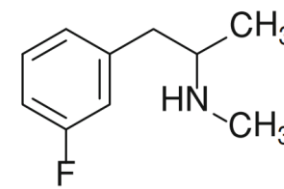
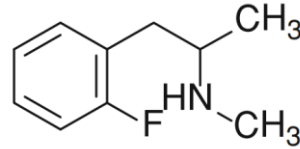
4-FMA

RT diff. [min] vs. predicted

0.04

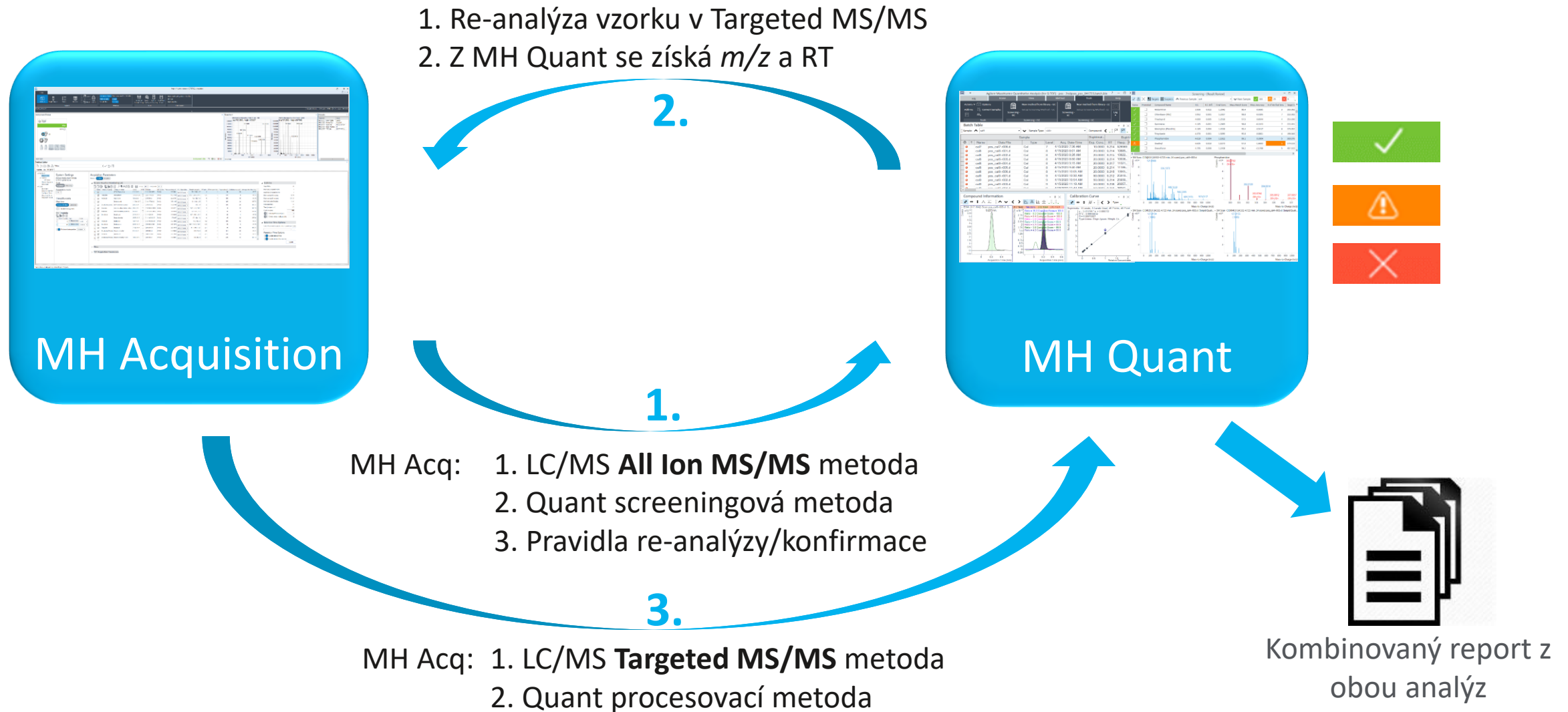
0.12

0.14



Intelligentní Reflex: Screening a konfirmace

Jak automaticky snížit množství falešně pozitivních nálezů...



Intelligent Reflex: Screening a konfirmace

Nastavení inteligentního reflexu ve screeningové metodě:

Method Editor

Pesticidy - All Ion 10-207...
Pesticidy - tMSMS - 207...
Pesticidy - tMSMS - 207...

Properties DA Multisampler Multisample Treatment Binary Pump Column Comp

Data Conversions Qual Quant Intelligent Reflex

☒ Intelligent Reflex Enabled

Sample Intelligent Reflex Parameters

Intelligent Reflex Type TS Confirmation Intelligent Reflex Acq Method D:\Projects\Revident Altium\Methods\Pesticidy - tMSMS - 2... View Method

Screening Status Green

Výběr „reflexu“

Konfirmační tMS/MS metoda (stejná chromatografie)

Worklist

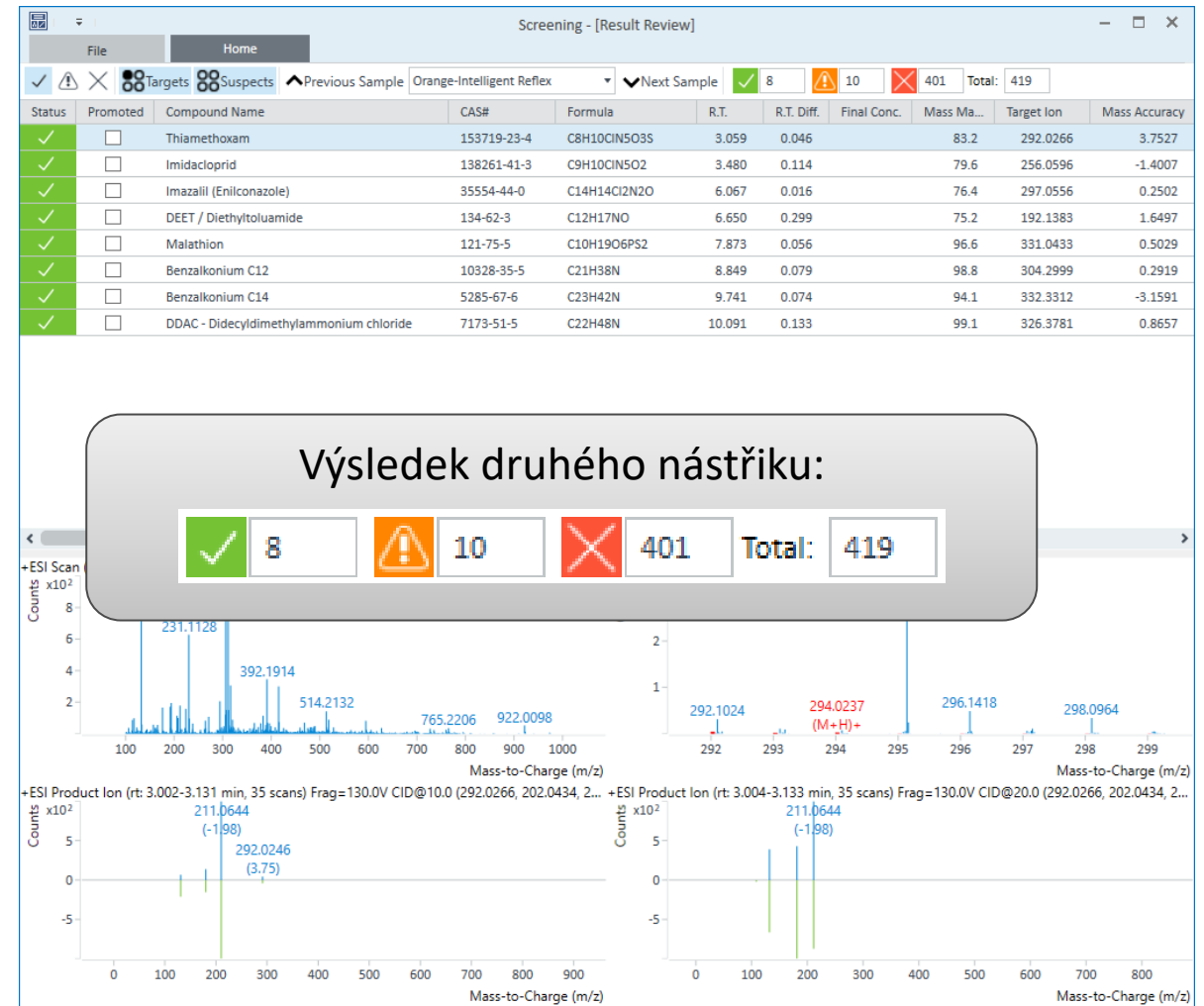
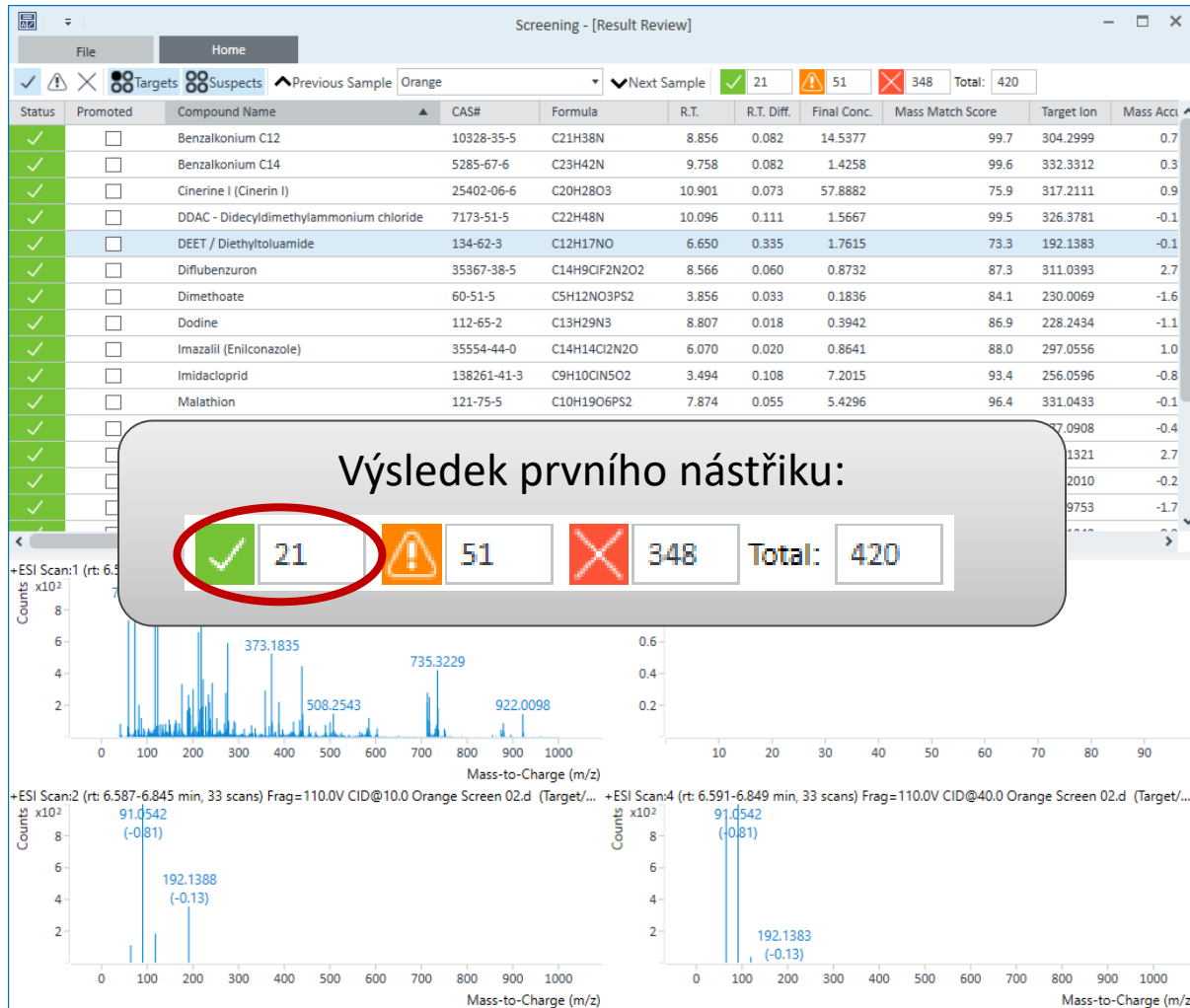
2024-11-10 TS Confirm.w

	✓	Status	Sample Name	Sample Position	Method	Data File	Sample Type	Level Name	Inj Vol (µl)	Intelligent Reflex	Intelligent Reflex	First Pass Quant I	Second Pass Qua	Screening Status
1	✓	Completed		No Injection	Pesticidy IC	WorklistData-0009.d	Blank		As Method	No				
2	✓	Completed	Blank	P2-E1	Pesticidy IC	Blank Screen 02.d	Blank		2	No				
3	✓	Completed	QC	P2-A7	Pesticidy IC	QC Screen 02.d	QC	6	2					
4	✓	Completed	Orange	P2-E2	Pesticidy IC	Orange Screen 02.d	Sample		2	TS Confirmation	Pesticidy ICT - tM	QUANT Methods	QUANT Methods	Green
5	✓	Completed	Apple	P2-E3	Pesticidy IC	Apple Screen 02.d	Sample		2	TS Confirmation	Pesticidy ICT - tM	QUANT Methods	QUANT Methods	Green
6	✓	Completed Intelligent Reflex	Orange-Intelligent Reflex-Blar	P2-E1	Pesticidy IC	Orange Screen 02-Intelligent Reflex-Bi	Blank		2	No Intelligent Ref			QUANT Methods	
7	✓	Completed Intelligent Reflex	Orange-Intelligent Reflex	P2-E2	Pesticidy IC	Orange Screen 02-Intelligent Reflex.d	Sample		2	No			QUANT Methods	
8	✓	Completed Intelligent Reflex	Apple-Intelligent Reflex-Blank	P2-E1	Pesticidy IC	Apple Screen 02-Intelligent Reflex-Bla	Blank		2	No			QUANT Methods	
9	✓	Completed Intelligent Reflex	Apple-Intelligent Reflex	P2-E3	Pesticidy IC	Apple Screen 02-Intelligent Reflex.d	Sample		2	No Intelligent Ref			QUANT Methods	

Původní worklist

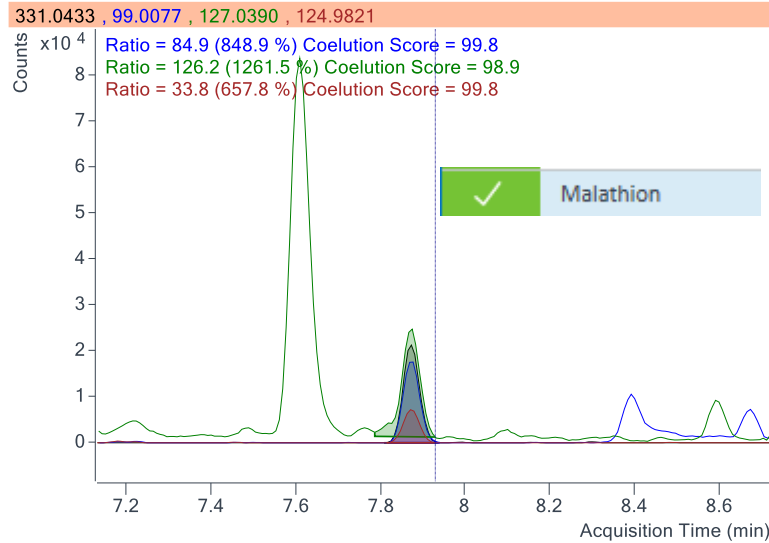
Přidané nástřiky pro konfirmační metodu.

Intelligent Reflex: Screening a konfirmace

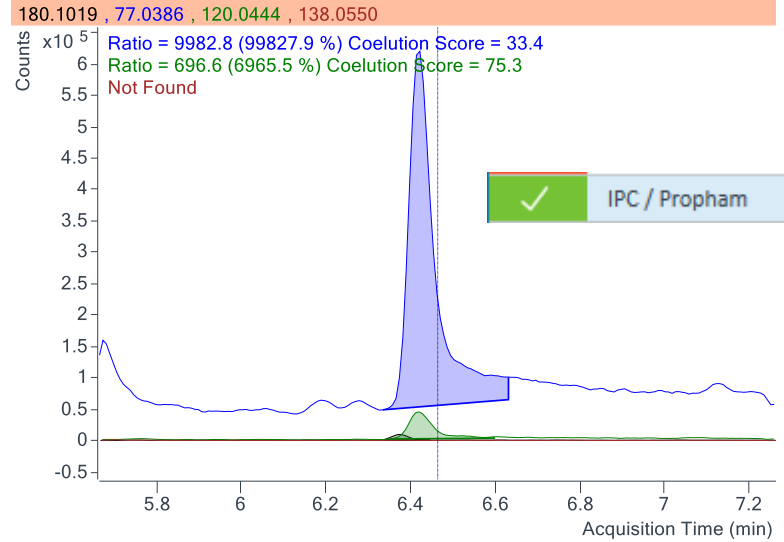


Intelligentní Reflex: Screening a konfirmace

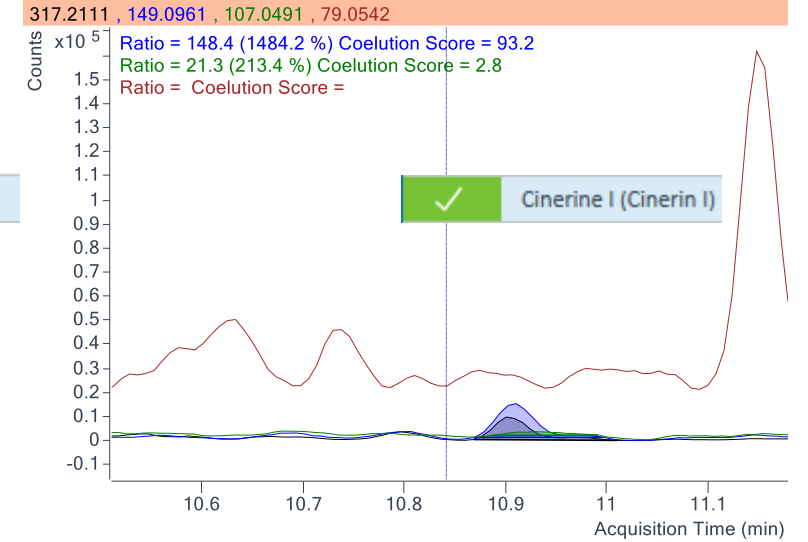
Malathion



Propham



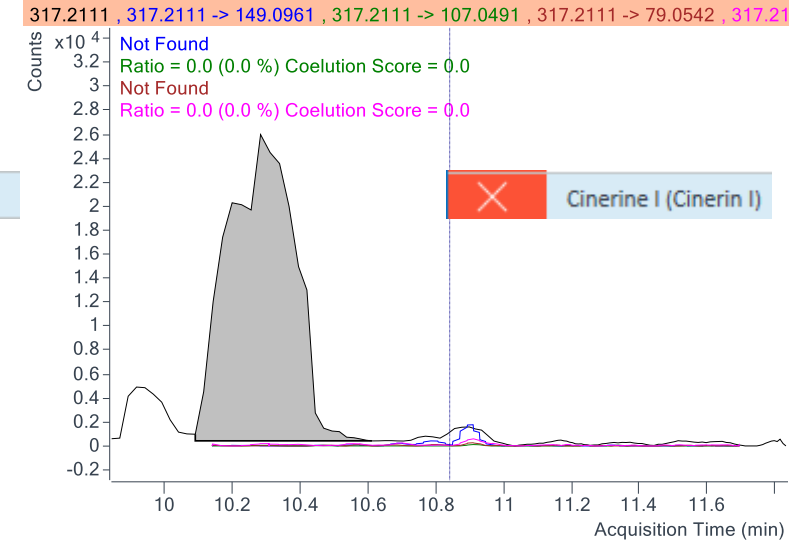
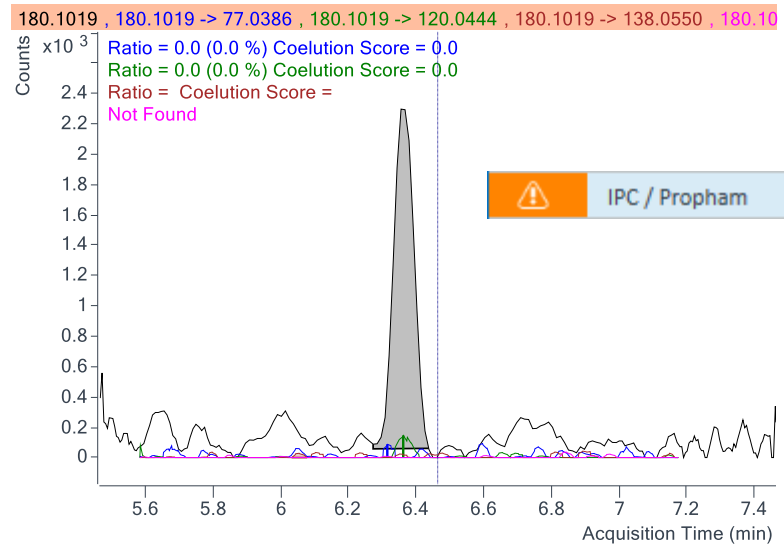
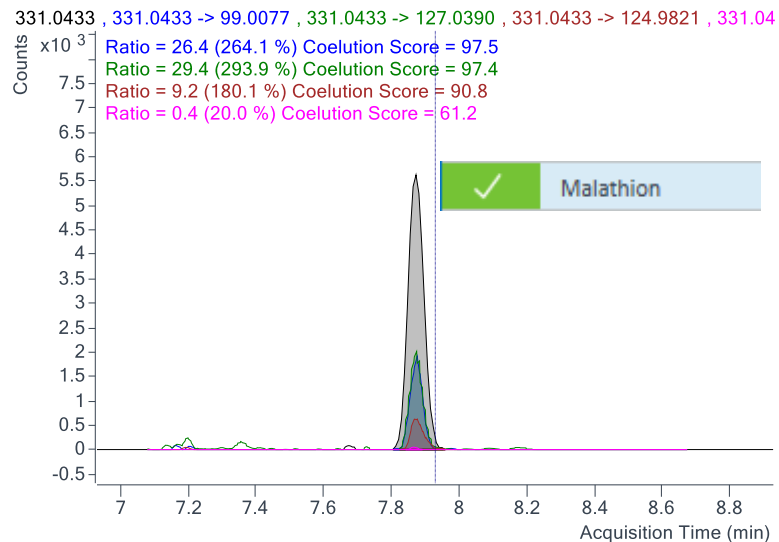
Cinerine I



1. Nástrík: All Ions



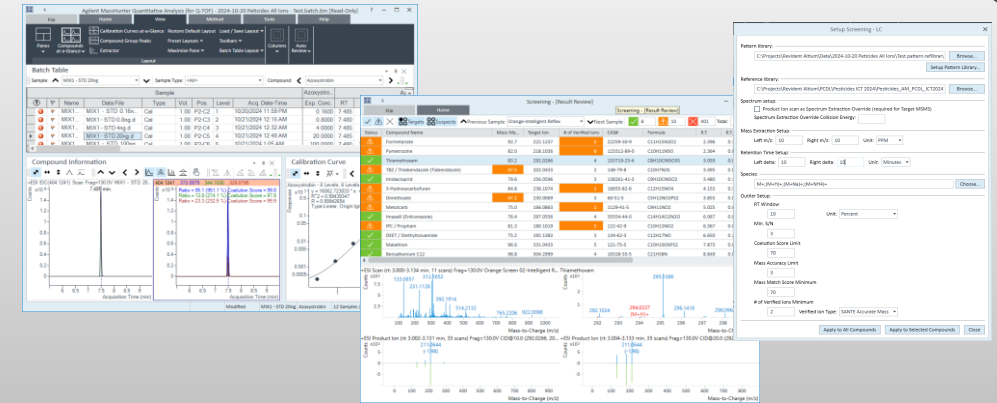
2. Nástrík: tSMS



Závěr

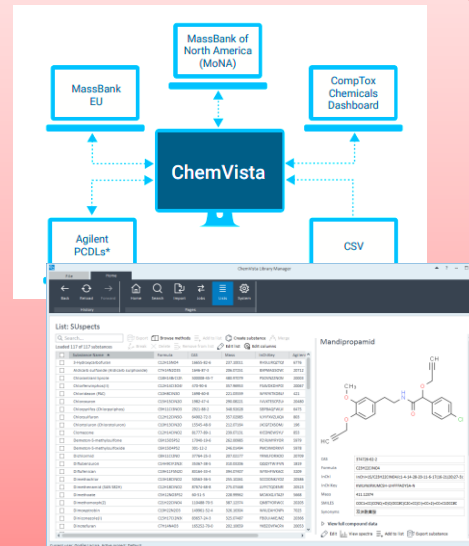
Komplexní hardwarové a softwarové řešení od Agilent pro efektivní screening velkého množství analytů:

- Současná kvantifikace a screening analytů v **MH Quant 12**.
- Přehledná filtrace pozitivních nálezů v **MH Screener**.
- Jednoduchá tvorba vyhodnocovací metody z **PCDL** knihovny.
- „**Target MS/MS Confirmation**“ inteligentní reflex pro redukci falešně pozitivních nálezů.



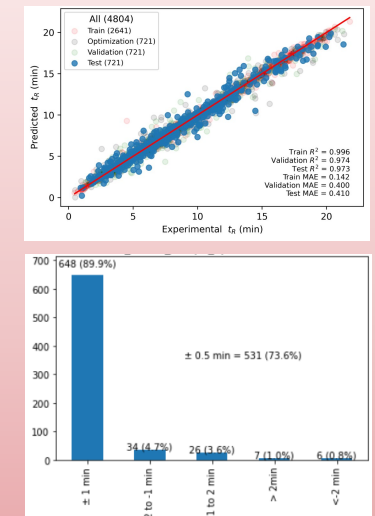
- **ChemVista Applied Market**
> 14 000 analytů, přes 6000 látek má MS/MS spektra

> 35 000 analytů ve veřejných knihovnách MassBank EU a MoNA.



HighResNPS

- **Predikce retenčních časů** může významně zlepšit (a zrychlit) identifikace analytů při screeningu.





Děkuji za
pozornost...