



ACD/Labs

ACD/IntelliXtract

**Автоматическая Экстракция Хроматографических
Компонентов и Определение Молекулярной Массы**

Представительство в России и СНГ

тел.: +7 (499) 503-1-035

e-mail: acdlabs@chemlabs.ru

Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs)

Visionary Software



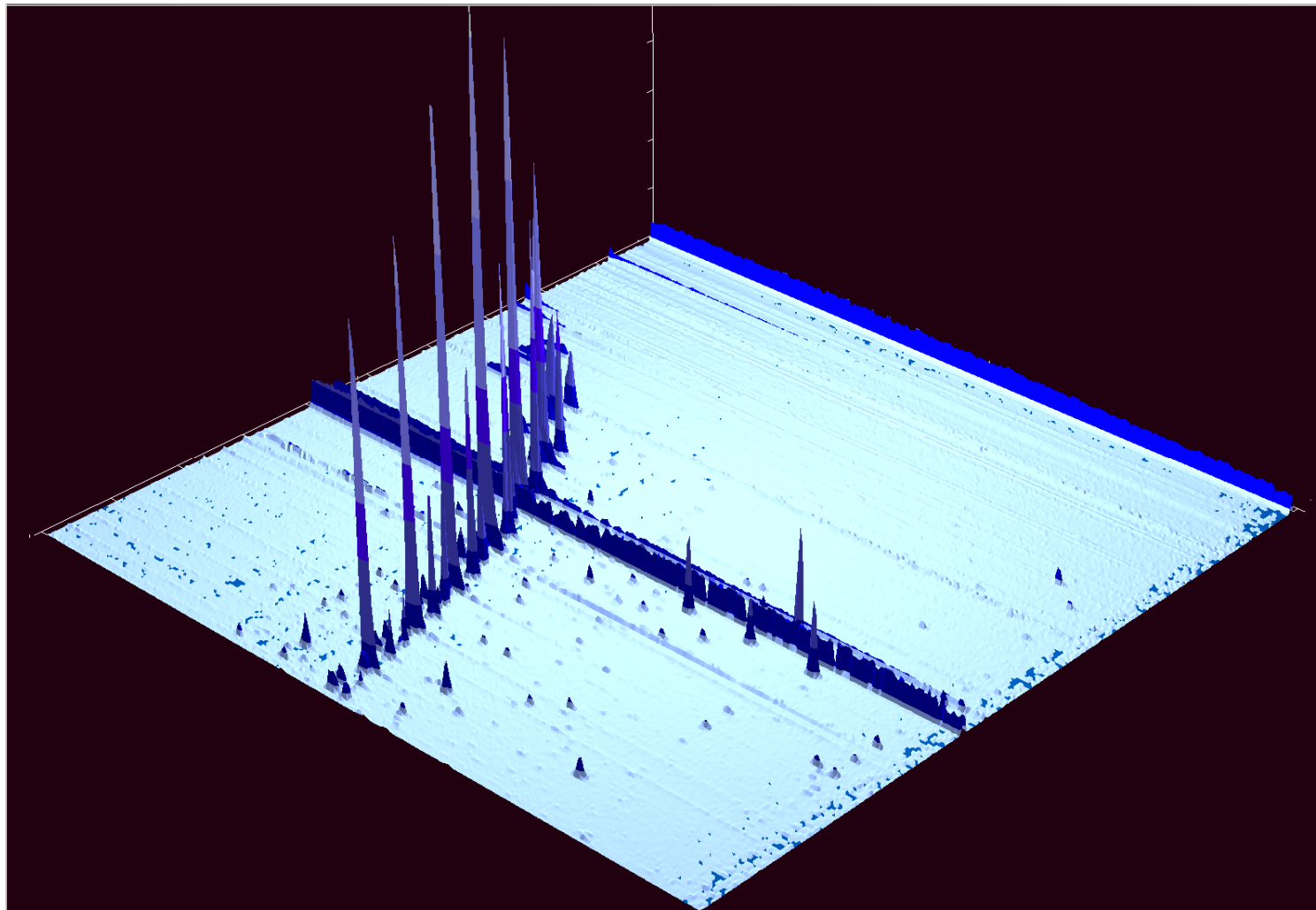
Advancing Research

Вызовы Стоящие Перед MS Анализом

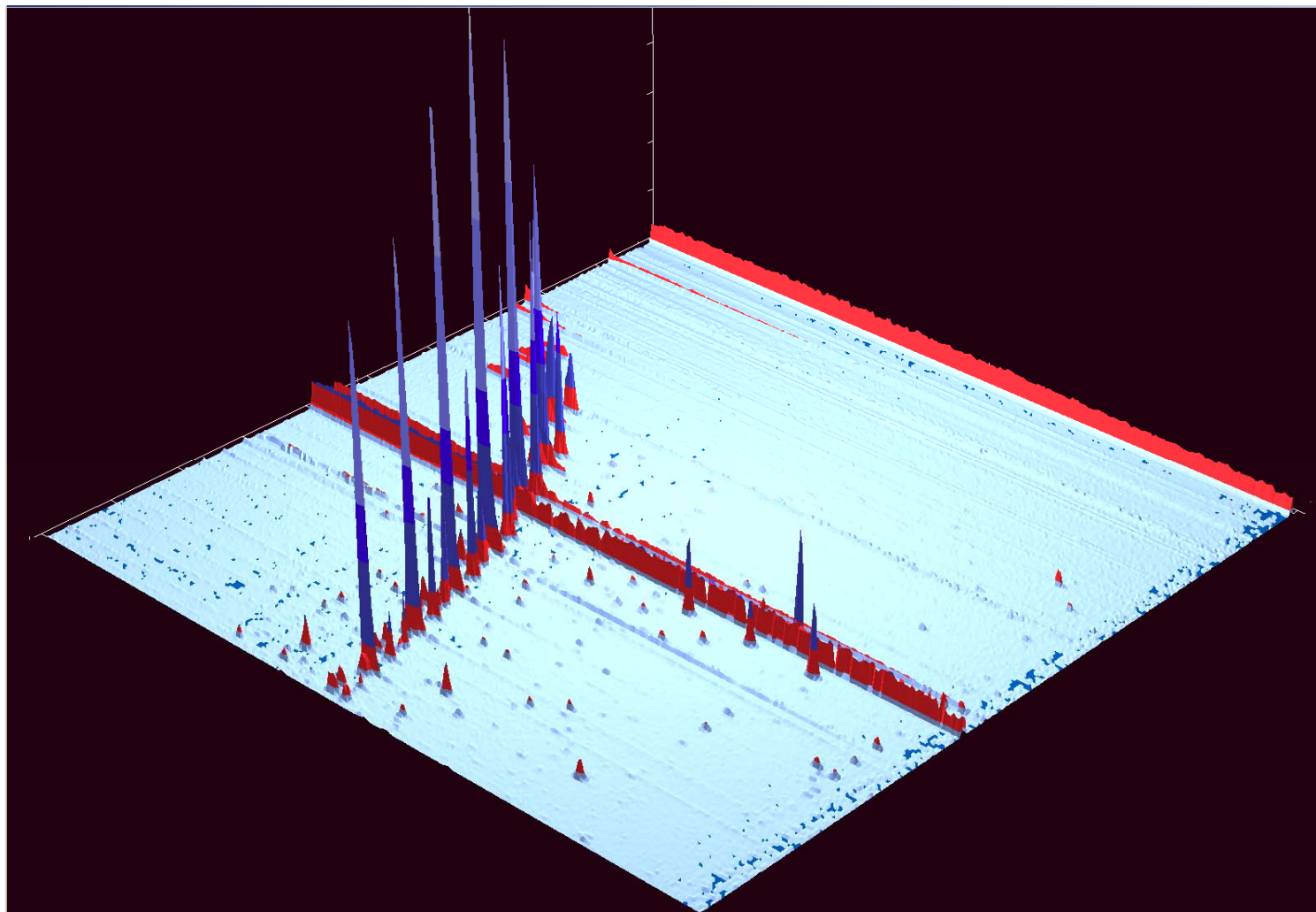
- Вызовы из GC/MS и LC/MS наборов данных:
 - Высокий уровень шума (низкое S/N)
 - Перекрывание/совместное элюирование компонентов

- ACD/IntelliXtract работает следующим образом:
 1. Общая экстракция пиков
 2. Детектирование компонентов (понижение шума)
 3. Индексы качества для каждого XIC, основанные на индивидуальных MS свойствах
 4. Фильтрация результатов на основе требований пользователя

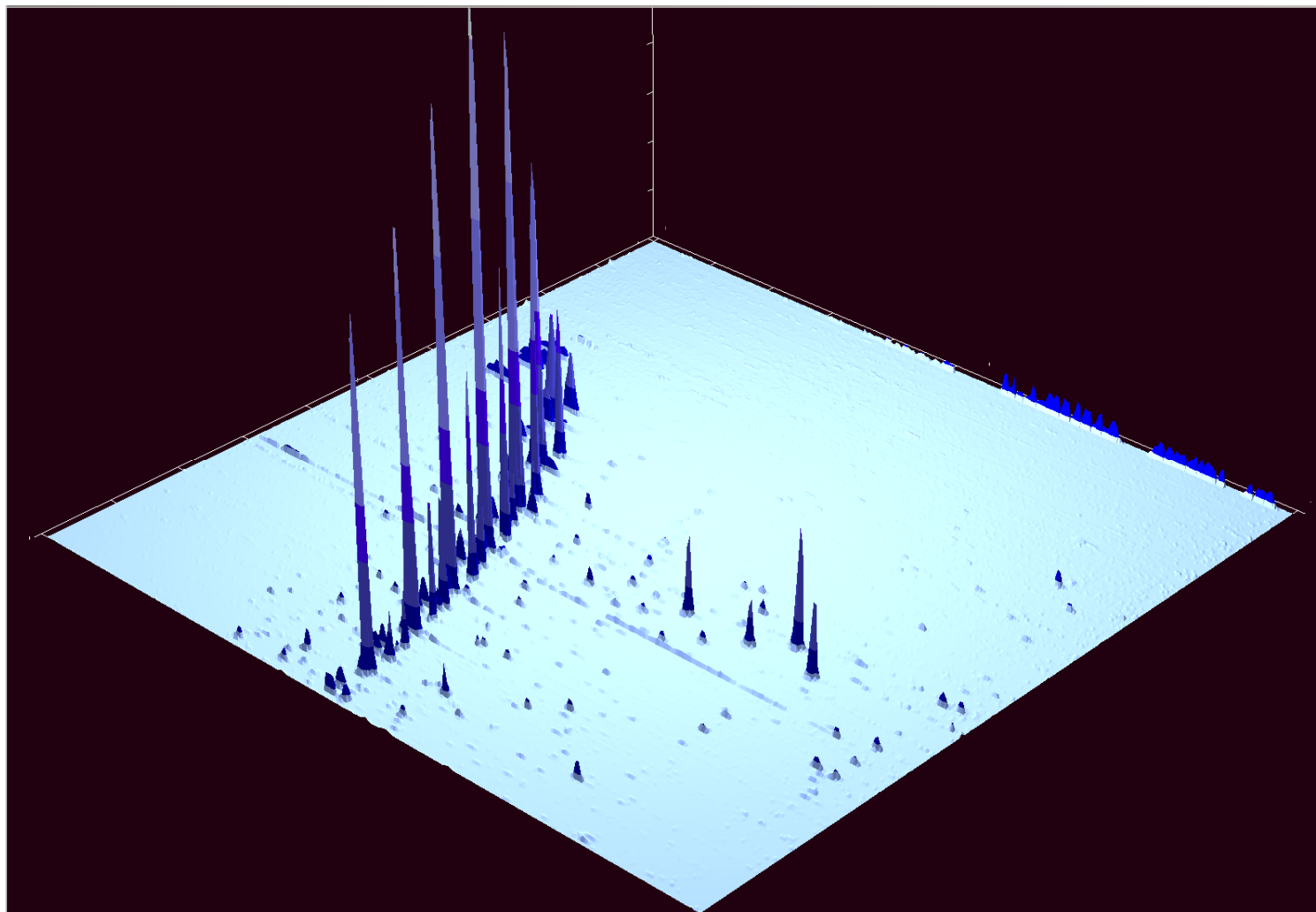
Понижение Уровня Шума и Автоматический Выбор Пиков Сырой Набор Данных



Удаление / Снижение низкочастотного шума

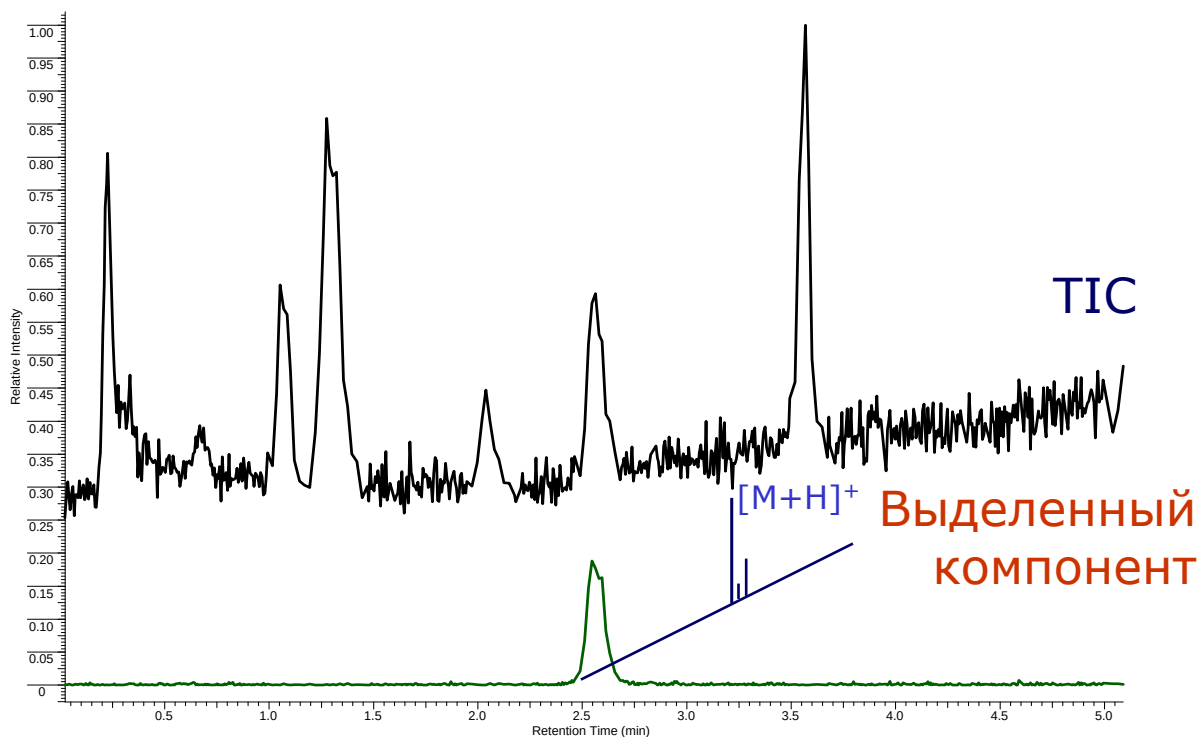


Снижение Шума и Автоматический Выбор Пиков



Определения Компоненты (components)

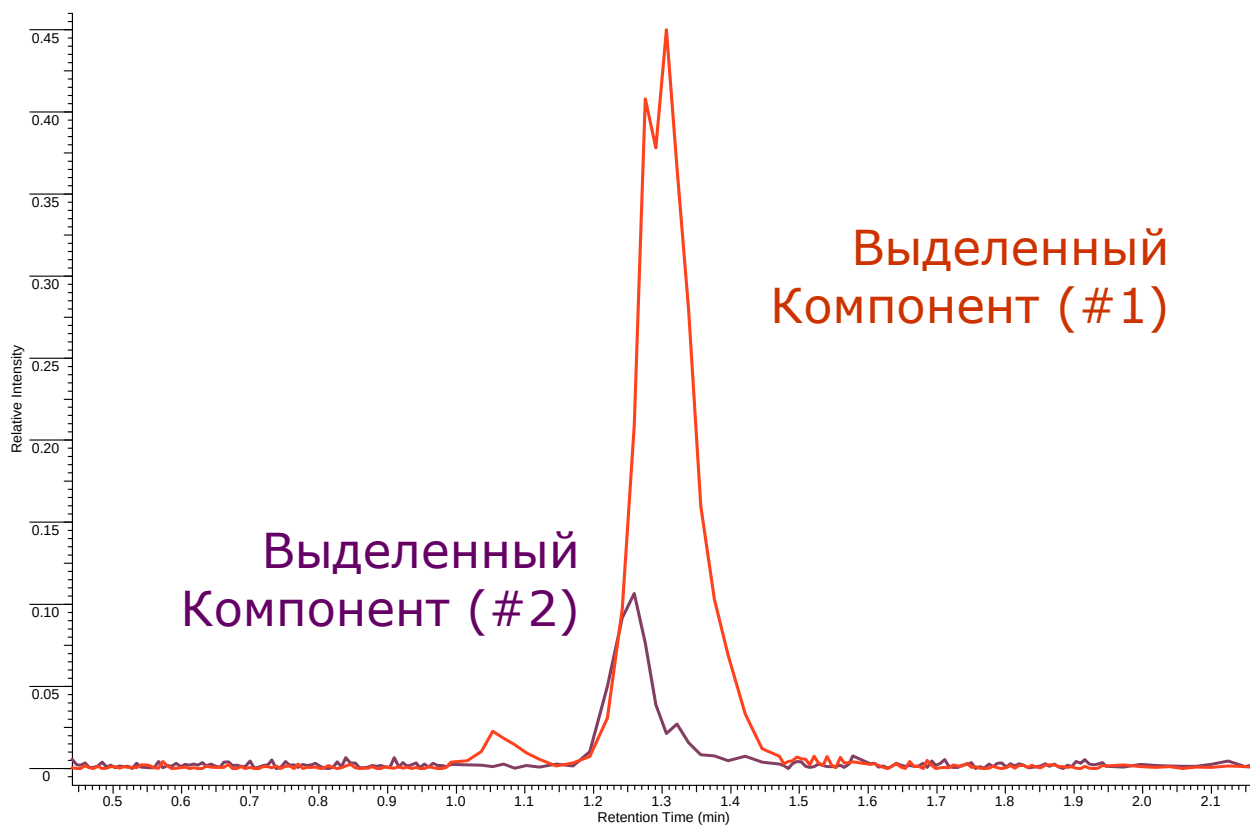
Компонент определяется как **единичная химическая сущность**, элюируемая при хроматографическом разделении



Определения

Компонентизация (componentization)

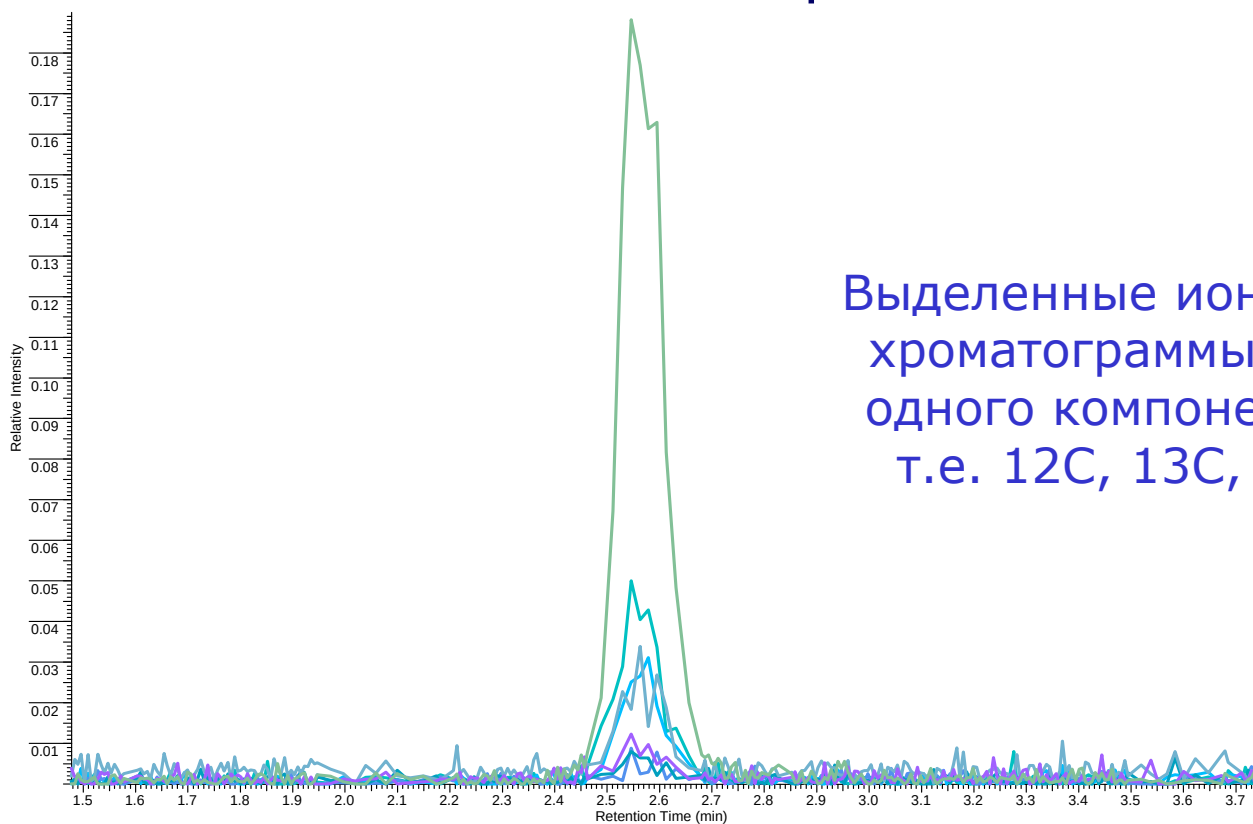
Компонентизация может быть определена как способность **разделения индивидуальных сигналов ионов** в зависимости от времени выхода (t_R) И...



Определения

Компонентизация (componentization)

... различить индивидуальные сигналы ионов,
которые составляют единое элюируемое
химическое вещество

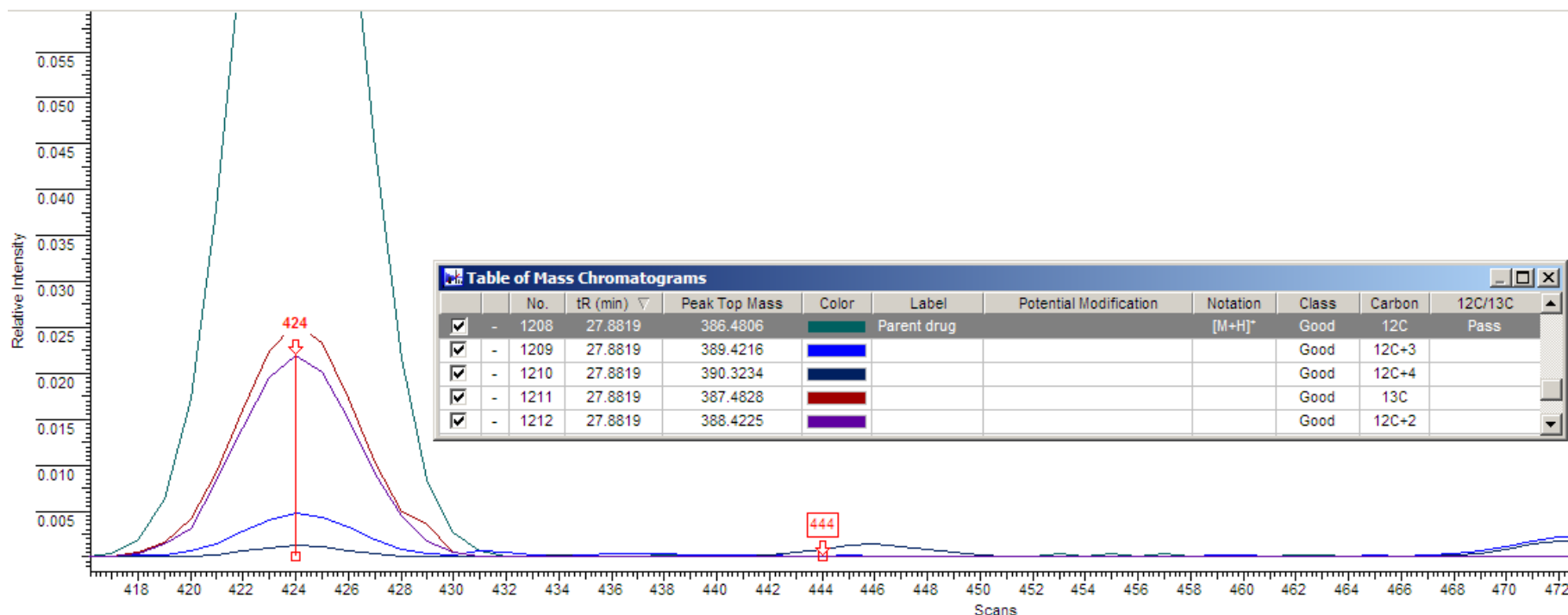


Первичные Фильтры Знаний, Полученных с Помощью ACD/IntelliXtract

- Ключевые поля данных (среди остальных):
 - Масса – Mass [Номинальная – Nominal/Точная – Accurate]
 - Время выхода – Retention time/Номер Скана – Scan No.
 - Родительский ион – Parent ion $[M+H]^+$
 - Изотоп - Isotope [^{12}C , ^{13}C , $^{12}\text{C}+2$, $^{12}\text{C}+n$]
 - $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio (соотношение $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$)
 - Пригодность изотопного кластера (Isotope cluster qualification)
 - Автоматически посчитанные Нейтральные Потери (Neutral Loss)
 - Аннотация Мультимер (Multimer)
 - Аннотация Продукт Присоединения (Adduct) (может определяться по критериям пользователя)
 - Уникальность (Uniqueness) (при условии присутствия контрольного образца)

Первичные Фильтры Знаний, Полученных с Помощью ACD/IntelliXtract

- Каждый компонент появляется как строка в **Таблице Массовых Хроматограмм** и отражается как цветная кривая в окне TIC.

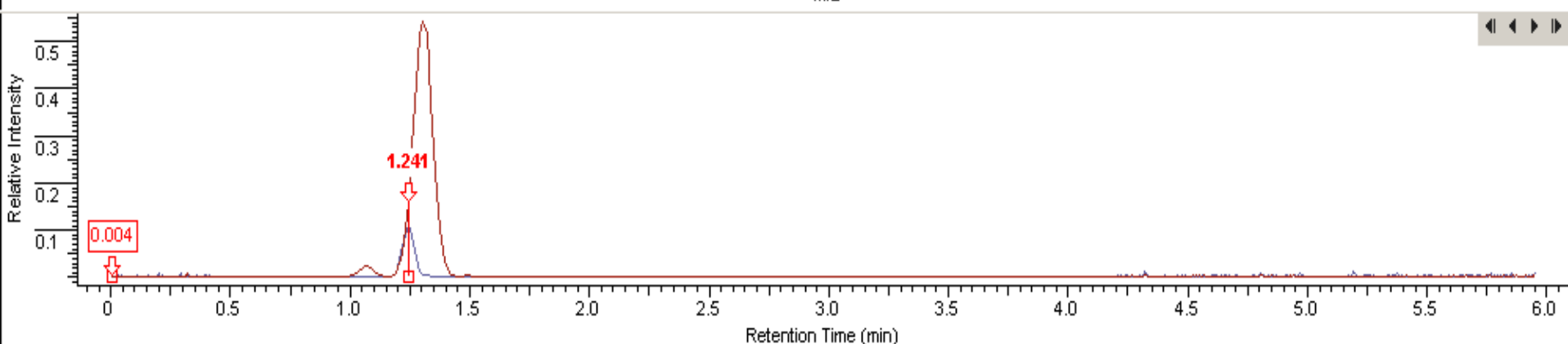
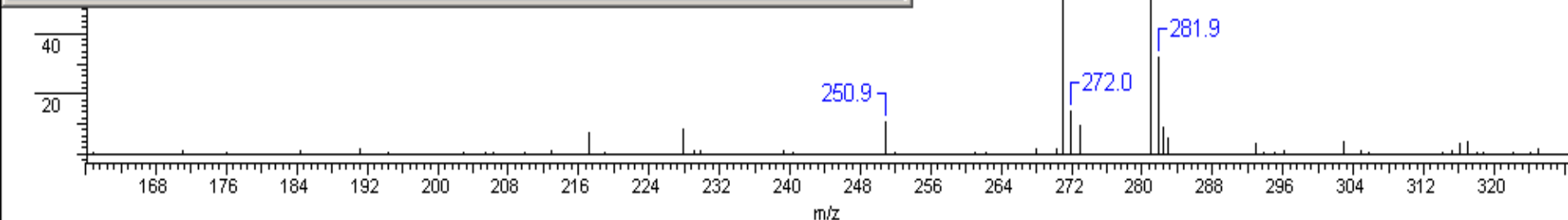


Компонентизация GC/LC/MS данных

Table of Mass Chromatograms

	Label	Component	Notation	Carbon	12C/13C	PQI	Peak Top Mass
☒	Sulfamethizole	17	[M+H] ⁺	12C	Pass	47.2	271.0
☐		17		13C		21.4	272.0
☐		17		12C+2		17.7	273.0
☐		18				8.3	217.0
☒	Sulfamethoxypyridazine	18	[M+H] ⁺	12C	Pass	87.3	281.0
☐		18		13C		25.4	282.0
☐		18		12C+1		15.2	282.0
☐		18		12C+2		11.7	283.0
☐		18	[M+Na] ⁺			6.4	303.0
☐		18				6.0	338.8

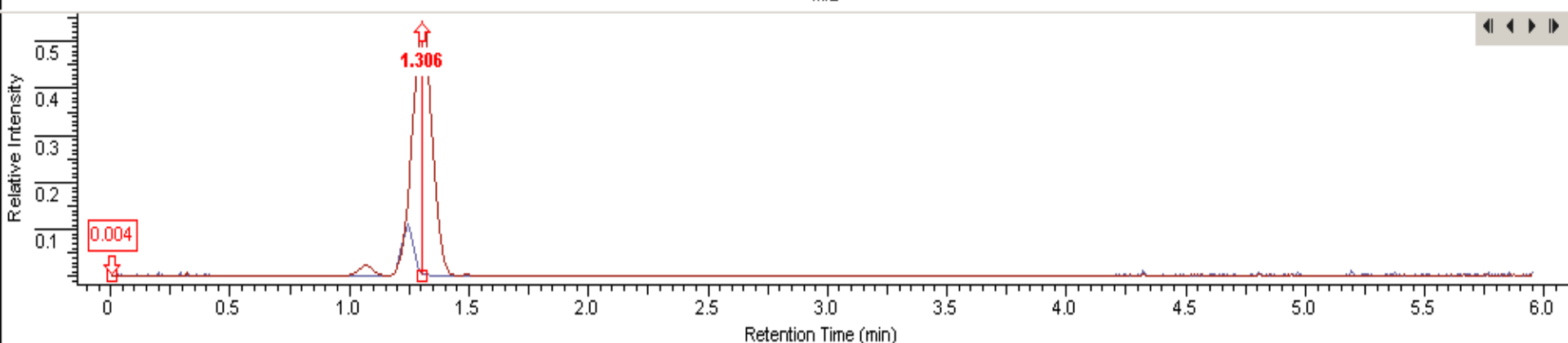
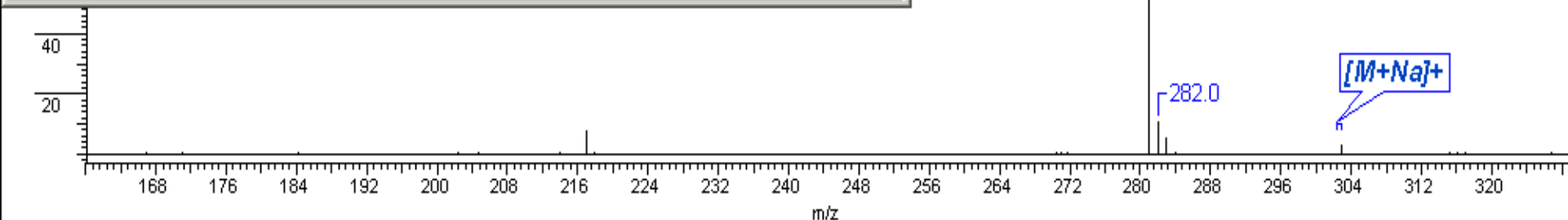
Retention Time: 1.241



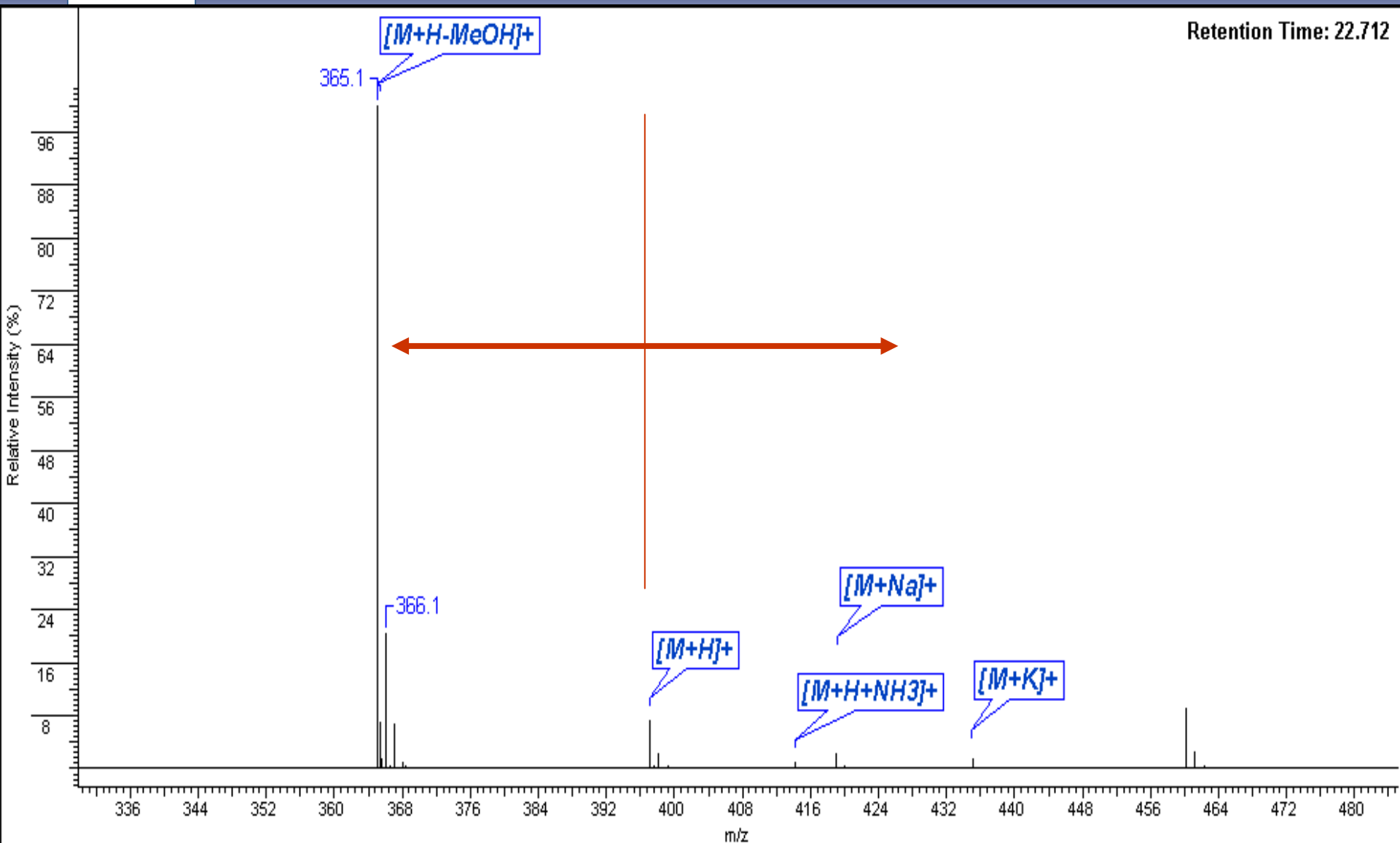
Компонентизация GC/LC/MS данных

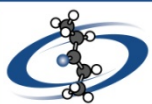
Table of Mass Chromatograms

	Label	Component	Notation	Carbon	12C/13C	PQI	Peak Top Mass
☒	Sulfamethizole	17	[M+H] ⁺	12C	Pass	47.2	271.0
☐		17		13C		21.4	272.0
☐		17		12C+2		17.7	273.0
☐		18				8.3	217.0
☒	Sulfamethoxypyridazine	18	[M+H] ⁺	12C	Pass	87.3	281.0
☐		18		13C		25.4	282.0
☐		18		12C+1		15.2	282.0
☐		18		12C+2		11.7	283.0
☐		18	[M+Na] ⁺			6.4	303.0
☐		18				6.0	338.8



Авто-анализ серий КОМПЛЕКСНЫХ ИОНОВ

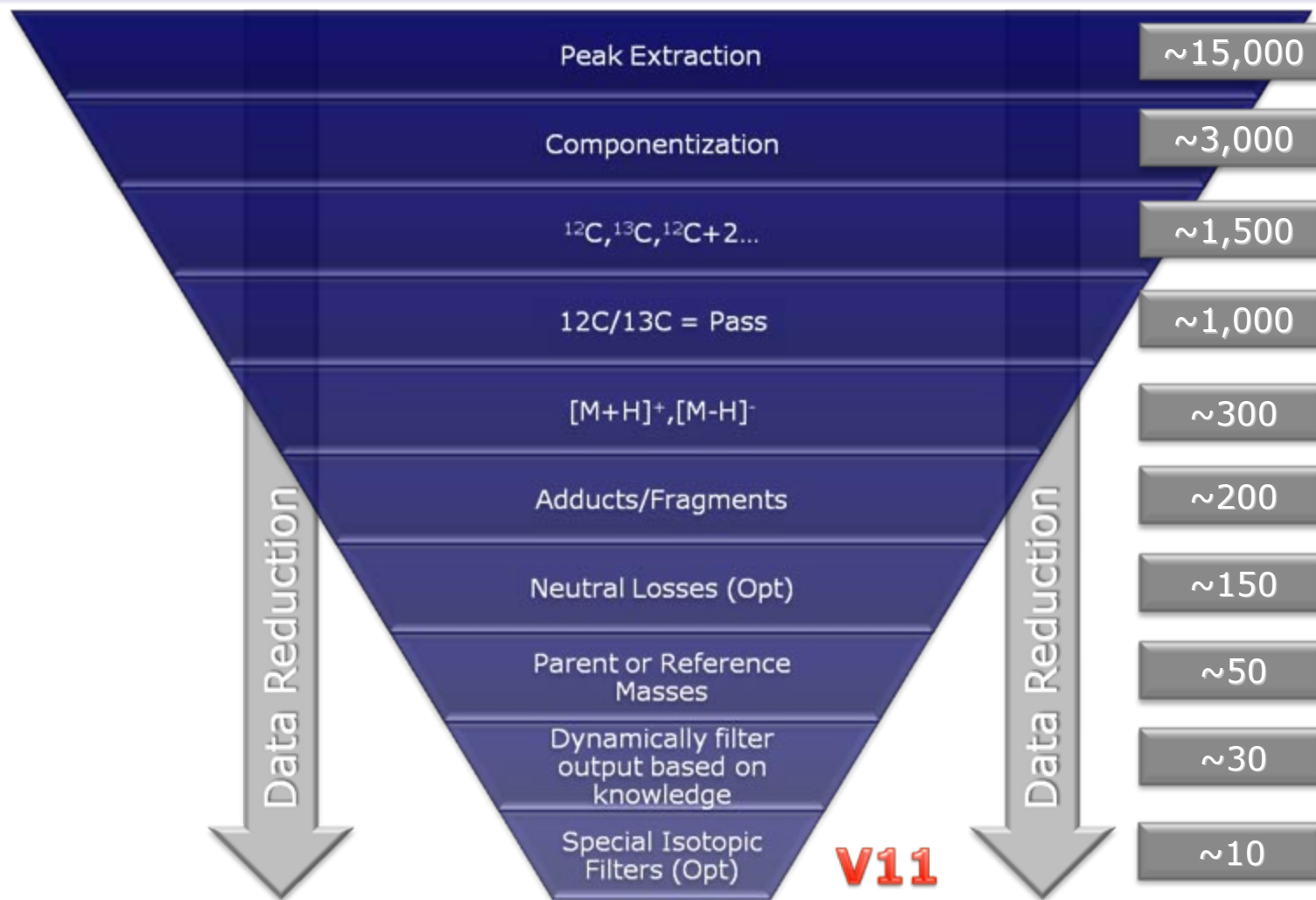




Advanced
Chemistry
Development

ACD/Labs

Уменьшение количества GC/LC/MS Данных с Помощью ACD/IntelliXtract



V11



Дополнительные Функции

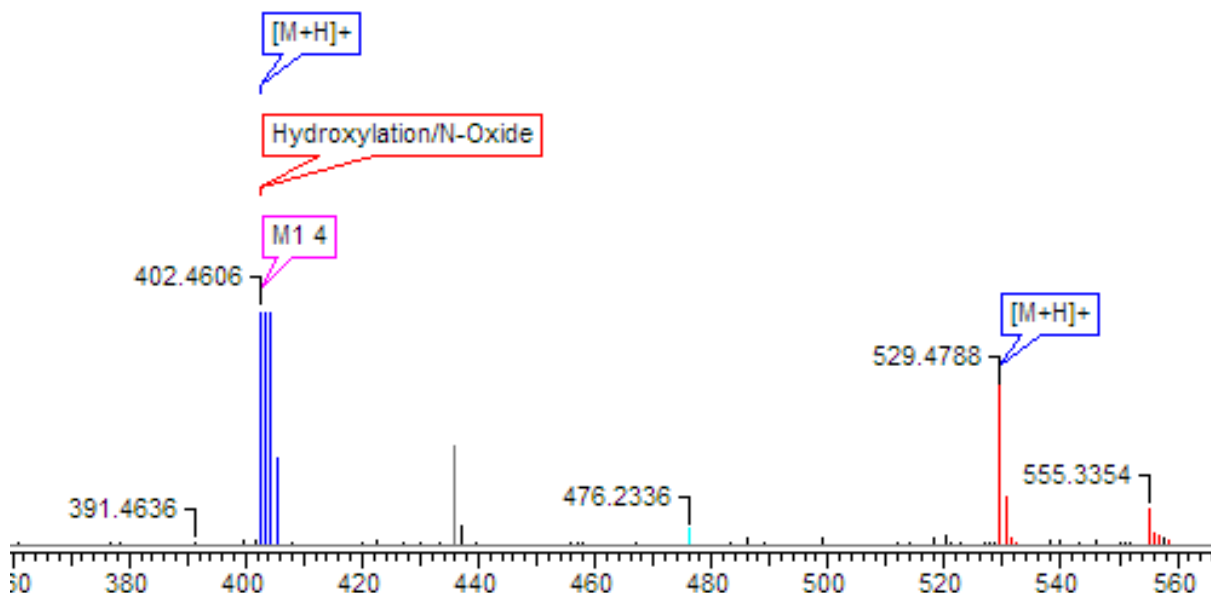
Идентификация Метаболитов

- Если программе предоставлена масса исследуемого лекарства, система может **автоматически пометать метаболиты**, исходя из табличных дельта-значений для трансформаций Фазы I и II (Phase I/II)
- Множественные родительские ионы (Multiple parent ions)** могут быть заданы (cassette-dosing studies) ИЛИ фрагменты могут быть заданы как псевдо-родительские для содействия в **био-трансформационных исследованиях**

Дополнительные Функции

Общее

- Благодаря процессу компонентизации, программа может точно вычислять, какие ионы получены из основного компонента, а какие из близко выходящих (closely-eluting) компонентов – т.е., определить **спектры чистых компонентов**



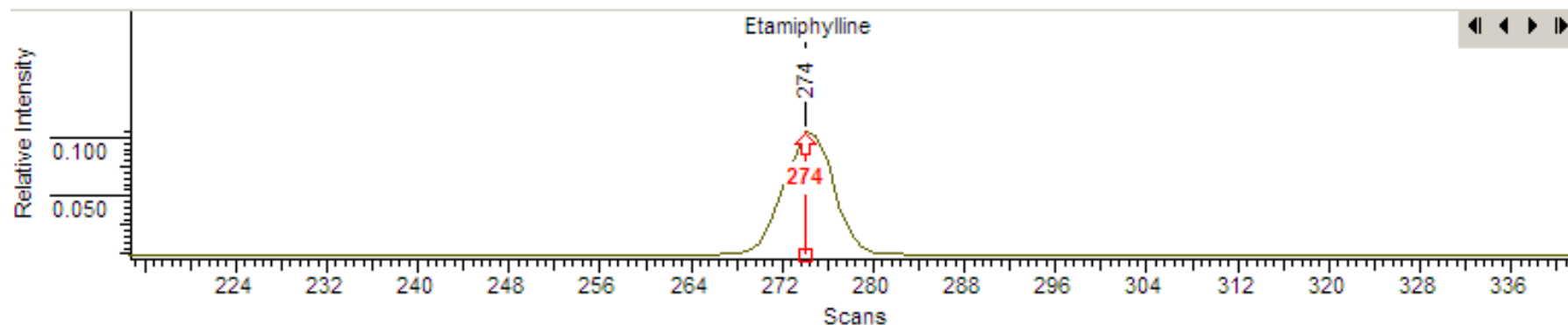
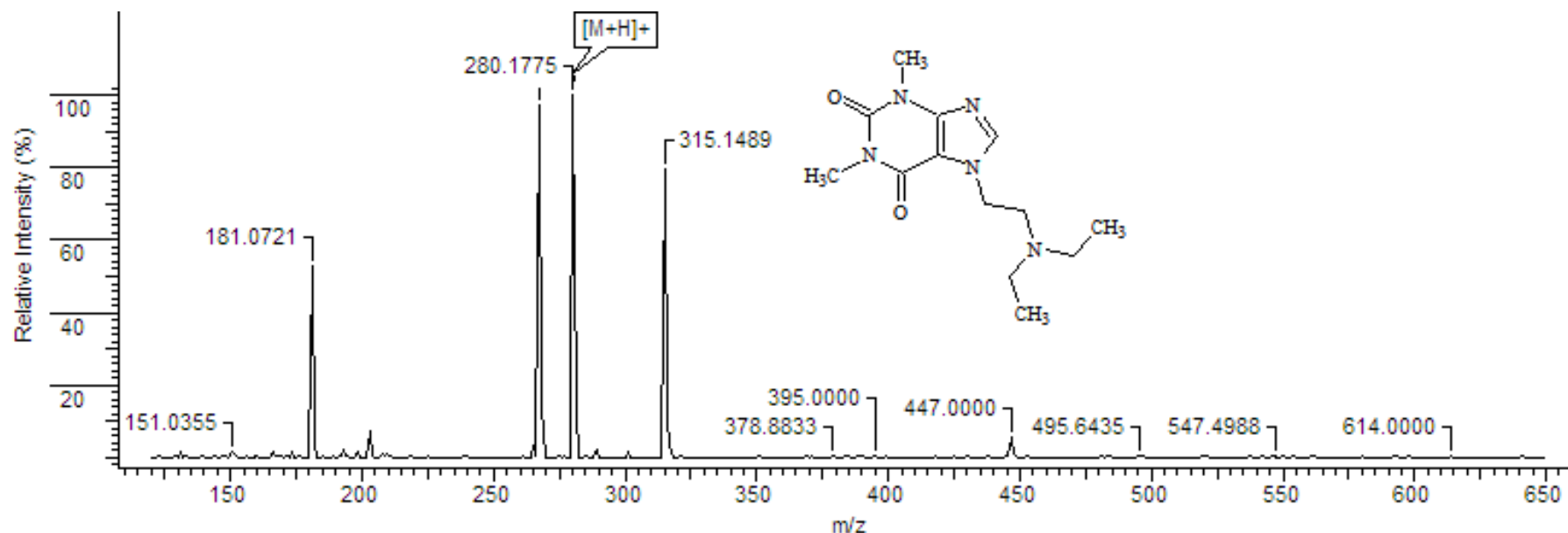
Дополнительные Функции

Общее

- При помощи привязки баз данных химических структур к ACD/IntelliXtract, программа может автоматически искать ожидаемые компоненты и вставлять соответствующие аннотации и химические структуры
- Это может принести значительную пользу в экологических исследованиях, оценке качества воды или судебном применении, где от пользователя требуется искать огромное количество соединений, чье присутствие ожидаемо
- Аналогично может производиться поиск среди данных, полученных с использованием программы для предсказания метаболитов

Дополнительные Функции

Общее



Дополнительные Функции

Общее

- В то время как ACD/IntelliXtract может работать с единичным набором данных, дополнительные преимущества достигаются при **обработке экспериментального образца на фоне контрольного образца**
- Это позволяет дополнительно классифицировать выделенные ионные хроматограммы по степени Уникальности: **Уникальная, Другая или Похожая**
- Классификация основана на **сравнении времени выхода (t_R) и площади/высоты обоих компонентов, а также схожести их MS спектров**

Резюме

- ACD/IntelliXtract делает огромный шаг по пути к созданию полностью автоматического подхода к уменьшению GC/LC/MS данных
- Автоматическая система для потребностей высокого порядка:
 - Идентификация Метаболитов, Анализ Примесей и Дегрантов, Судебный, Экологический или Анализ Качества Пищевых Продуктов
 - Автоматическое отслеживание пиков при Разработке Хроматографического Метода
- Отчетность и Сохранение в Базе Данных при помощи одного клика мыши (ACD/MS Manager)

Официальный дистрибьютор ACD/Labs в России и СНГ

тел.: +7 (499) 503-1-035

e-mail: acdlabs@chemlabs.ru