

LabSolutions™ LCMS用

LC/MS精密質量ライブラリ 薬毒物 Ver. 2



乱用薬物、精神神経病用薬、医薬品、農薬、天然毒など、
薬毒物分析で必要となる化合物を含む精密質量分析用のデータベースです。

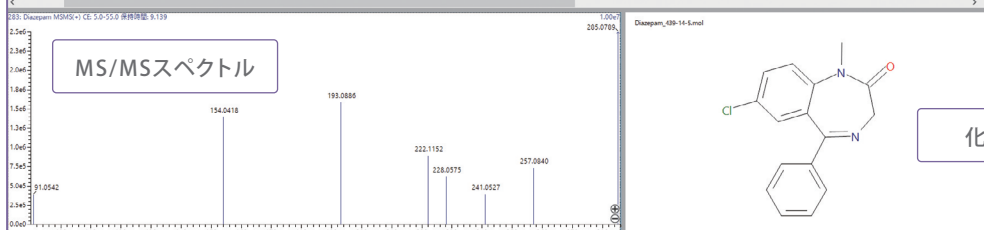
1,200成分^注以上の薬毒物MS/MSスペクトルを登録

2種類のHPLC分離条件をもとに作成した乱用薬物や精神神経病用薬、医薬品などを含む2種類の精密質量分析に対応したMS/MSスペクトルライブラリをご提供します。薬毒物のスクリーニングやノンターゲット分析で取得したデータの解析にご活用いただけます。

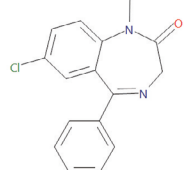
#	化合物名	プリカー m/z	保持時間	保留係数/示性式	理論分子量	MS/MS	イオン化法	質量範囲	プリジョンエネルギー	プリジョンスプレッド
266	Desethylamiodaron	617.9997	9.949	(2-Butyl-1-benzofuran-3-yl)(4-(2-(ethylamino)ethoxy)-3,5-diodophenyl)methanone	616.9924	2	ESI	201.0910 - 617.9997	5.0 - 55.0	230.0000
267	Desipramine	267.1856	7.174	3-(10,11-Dihydro-5H-dibenzof[7,8]azepin-5-yl)-N-methyl-1-propanamine	266.1783	2	ESI	72.0608 - 267.1856	5.0 - 55.0	230.0000
268	Desmodipham	318.1448	7.256	3-(Ethoxycarbonylamino)phenyl phenylcarbamate	303.1110	2	ESI	108.0444 - 318.1448	5.0 - 55.0	230.0000
269	Desmethylaloxepam	311.1554	6.111	1-(4-Fluorophenyl)-1-(3-(methylamino)propyl)-1,3-dihydro-2-benzofuran-5-carbonitrile	310.1481	2	ESI	83.0290 - 311.1554	5.0 - 55.0	230.0000
270	Desmethylclomipramine	301.1466	7.870	3-(3-Chloro-10,11-dihydro-5H-dibenzof[7,8]azepin-5-yl)-N-methyl-1-propanamine	300.1393	2	ESI	72.0608 - 301.1466	5.0 - 55.0	230.0000
271	Desmethylflunitrazepam	300.0779	7.227	5-(2-Fluorophenyl)-7-nitro-1,3-dihydro-2H-1,4-benzodiazepin-2-one	299.0706	2	ESI	198.0714 - 300.0779	5.0 - 55.0	230.0000
272	Desmethylmianserin	251.1543	6.514	1,2,3,4,10,14b-Hexahydroindolo[2,3-b]pyridazine(1,2-a)azepine	250.1470	2	ESI	91.0642 - 251.1543	5.0 - 55.0	230.0000
273	Desmethylmirtazapine	252.1495	5.721	1,2,3,4,10,14b-Hexahydropropazepin[2,1-b]pyridin[2,3-c]benzazepine	251.1422	2	ESI	115.0942 - 252.1495	5.0 - 55.0	230.0000
274	Desmethylsertaline	292.0654	7.858	1-(5-(4-Chlorophenyl)-1,2,3,4-tetrahydro-1-naphthalenamine)	291.0582	2	ESI	91.0542 - 275.0389	5.0 - 55.0	230.0000
275	Desmethylsubramine	266.1670	7.248	1-(1-(4-Chlorophenyl)cyclobutyl)-N,3-dimethyl-1-butanamine	265.1597	2	ESI	89.0386 - 266.1670	5.0 - 55.0	230.0000
276	Desmethylvenlafaxine	264.1958	4.194	4-(2-(Dimethylamino)-1-(1-hydroxy-2-(phenylethyl)phenyl)-1-propanamine)	263.1885	2	ESI	105.0699 - 264.1958	5.0 - 55.0	230.0000
277	Desmetoprolol	214.1121	6.701	N-(4-(4-Chlorophenyl)-1-methyl-4-piperidyl)-1,3,5-triazene-2,4-diamine	213.1048	2	ESI	68.0343 - 214.1121	5.0 - 55.0	230.0000
278	Deschlorpheniramine	275.1310	5.877	(S)-3-(4-Chlorophenyl)-N,N-dimethyl-3-(2-pyridinyl)-1-propanamine	274.1237	2	ESI	118.0651 - 230.0731	5.0 - 55.0	230.0000
279	Dezfenfluramine	232.1308	6.844	(S)-N-Ethyl-1-[1-(3-trifluoromethylphenyl)-2-propanamine]	231.1235	2	ESI	109.0448 - 232.1308	5.0 - 55.0	230.0000
280	Dextromethorphan	272.2009	6.913	(8a,13a,14a)-3-Methoxy-17-methylmorphinan	271.1936	2	ESI	121.0648 - 272.2009	5.0 - 55.0	230.0000
281	Dextropropoxyphene	340.2271	7.036	(S)-N-(4-(Dimethylamino)-3-methyl-2-diphenyl-2-butanyl propionate)	339.2198	2	ESI	91.0542 - 340.2271	5.0 - 55.0	230.0000
282	Diacetolol	209.1009	3.634	N-(3-Acetyl-4-(2-hydroxy-2-isopropylamino)propoxy)phenylacetamide	208.1736	2	ESI	98.0964 - 209.1009	5.0 - 55.0	230.0000
283	Diazepam	252.0727	9.139	7-Chloro-1-methyl-5-phenyl-1,3-dihydro-2H-1,4-benzodiazepin-2-one	250.0754	2	ESI	91.0542 - 285.0789	5.0 - 55.0	230.0000
284	Diazoxide	230.9990	4.817	7-Chloro-3-methyl-2H-1,2,4-benzothiazine 1,1-dioxide	229.9917	2	ESI	63.0229 - 230.9990	5.0 - 55.0	230.0000
285	Dichlorvos	220.9532	5.598	2-(2-Dichlorovinyl) dimethyl phosphate	219.9459	2	ESI	78.9943 - 220.9532	5.0 - 55.0	230.0000
286	Diclozapem	319.0399	8.900	7-Chloro-5-(2-chlorophenyl)-1-methyl-1,3-dihydro-2H-1,4-benzodiazepin-2-one	318.0327	2	ESI	154.0418 - 319.0399	5.0 - 55.0	230.0000
287	Diclofenac	296.0240	8.294	1-(2-(2-(4-Chlorophenyl)amino)phenyl)acetic acid	295.0167	2	ESI	214.0418 - 296.0240	5.0 - 55.0	230.0000
288	Didesmethylamitriptyline	250.1590	7.297	1-(10,11-Dihydro-5H-dibenzof[7,8]azepin-5-ylidene)-1-propanamine	249.1518	2	ESI	79.0542 - 250.1590	5.0 - 55.0	230.0000
289	Didesmethylsubramine	252.1514	7.192	1-(1-(4-Chlorophenyl)cyclobutyl)-3-methyl-1-butanamine	251.1441	2	ESI	89.0386 - 252.1514	5.0 - 55.0	230.0000
290	Dietheofencarb	268.1543	7.550	hexopropyl (3,4-diethoxyphenyl)carbamate	267.1471	2	ESI	80.0495 - 268.1543	5.0 - 55.0	230.0000
291	Diethylphosphate	155.0468	1.150	Diethyl hydrogen phosphate	154.0395	2	ESI	80.0736 - 155.0468	5.0 - 55.0	230.0000

化合物情報

登録化合物のプリカーサイオンの m/z情報、分子式、モノアイソトピック質量などの基本情報と、スペクトルを取得した際の情報(保持時間、イオン化法、コリジョンエネルギー)が含まれています。



化学構造式



ライブラリの表示例

注：追加で約700成分を無償提供いたします。詳細は当社営業までお問い合わせください。

LC/MS 精密質量ライブラリ 薬毒物 Ver. 2

LabSolutions Insight Explore™を使った簡便なデータ解析

島津QTOFで取得したデータの解析は、LabSolutions Insight Exploreを用いて簡便に行うことができます。例えば、ライブラリ検索による化合物同定は、3ステップで結果が得られます。また、検索結果の表示は視覚的にわかりやすくなっています。

ライブラリ検索による化合物同定手順

- STEP 1** 取得データに対してアナライズを実行し、検出した化合物情報を化合物テーブルに登録する。
- STEP 2** 検出した化合物情報に含まれるMS/MSスペクトルに対してライブラリ検索を実行する。
- STEP 3** ライブラリ検索の結果がライブラリ類似度、構造式とともに表示される。

検索結果表示画面例

注意事項

1. LabSolutions LCMSはVer. 5.128以降、LabSolutions Insight™はVer. 4.2 SP1以降が必要です。
2. 本メソッドパッケージは研究用です。臨床診断用途で使用することはできません。
3. 本製品の販売先は、特定のお客様（警察、違法薬物の取扱資格を有する顧客等）に限られます。詳細は当社営業までお問い合わせください。

LabSolutions、LCMS、LabSolutions Insight ExploreおよびLabSolutions Insightは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。

なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

株式会社 島津製作所

分析計測事業部

604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

製品情報 価格お問合せ



東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631
(大学担当) (03) 3219-5616
(会社担当) (03) 3219-5622
関西支社 (06) 4797-7230
札幌支店 (011) 700-6605
東北支店 (022) 221-6231
郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511
(会社担当) (029) 851-8515
北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095
(会社担当) (048) 646-0081
横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106
(会社担当) (045) 311-4615
静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521
(会社担当) (052) 565-7531
京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604
(会社担当) (075) 823-1603
神戸支店 (078) 331-9665
岡山営業所 (086) 221-2511
四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652
九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332
(会社担当) (092) 283-3334

島津コールセンター ☎ 0120-131691
(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等:(075) 813-1691