

Архангельск (8182)63-90-72
Астана (7172)727-132
Астрахань (8512)99-46-04
Барнаул (3852)73-04-60
Белгород (4722)40-23-64
Брянск (4832)59-03-52
Владивосток (423)249-28-31
Волгоград (844)278-03-48
Вологда (8172)26-41-59
Воронеж (473)204-51-73
Екатеринбург (343)384-55-89
Иваново (4932)77-34-06

Ижевск (3412)26-03-58
Иркутск (395)279-98-46
Казань (843)206-01-48
Калининград (4012)72-03-81
Калуга (4842)92-23-67
Кемерово (3842)65-04-62
Киров (8332)68-02-04
Краснодар (861)203-40-90
Красноярск (391)204-63-61
Курск (4712)77-13-04
Липецк (4742)52-20-81
Киргизия (996)312-96-26-47

Магнитогорск (3519)55-03-13
Москва (495)268-04-70
Мурманск (8152)59-64-93
Набережные Челны (8552)20-53-41
Нижний Новгород (831)429-08-12
Новокузнецк (3843)20-46-81
Новосибирск (383)227-86-73
Омск (3812)21-46-40
Орел (4862)44-53-42
Оренбург (3532)37-68-04
Пенза (8412)22-31-16
Казахстан (772)734-952-31

Пермь (342)205-81-47
Ростов-на-Дону (863)308-18-15
Рязань (4912)46-61-64
Самара (846)206-03-16
Санкт-Петербург (812)309-46-40
Саратов (845)249-38-78
Севастополь (8692)22-31-93
Симферополь (3652)67-13-56
Смоленск (4812)29-41-54
Сочи (862)225-72-31
Ставрополь (8652)20-65-13
Таджикистан (992)427-82-92-69

Сургут (3462)77-98-35
Тверь (4822)63-31-35
Томск (3822)98-41-53
Тула (4872)74-02-29
Тюмень (3452)66-21-18
Ульяновск (8422)24-23-59
Уфа (347)229-48-12
Хабаровск (4212)92-98-04
Челябинск (351)202-03-61
Череповец (8202)49-02-64
Ярославль (4852)69-52-93

<https://bruker.nt-rt.ru/> || bku@nt-rt.ru

Доклинический скрининг и диагностика in vitro (IVD)



ЯМР с высокой пропускной способностью для разработки и валидации высококачественных и экономически эффективных исследований IVD за ЯМР и доклинических анализов скрининга in vitro.

Стандартизированная платформа спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР), обеспечивающая экономически эффективный, высокопроизводительный доклинический скрининг ЯМР, а также обнаружение и валидацию (на уровне RUO) методом ЯМР (на уровне RUO) новых анализов ЯМР. Новая система AVANCE IVDr, в настоящее время предназначенная только для исследовательских целей, представляет собой законченную, проверенную и стандартизированную платформу для доклинических исследований и скрининга ЯМР, а также для исследований IVD за ЯМР.

VI-методы

Включение стандартизации IVDr ЯМР

Клинические и трансляционные исследования ЯМР стремительно растут, и формируются всемирные сети исследовательских групп, такие как сеть центров Phenome. В результате все большее внимание уделяется стандартизации для обеспечения переносимости и воспроизводимости данных. В настоящее время делается акцент на стандартизации следующего:

- ЯМР приборы
- Стандартные операционные процедуры
- Процедуры анализа
- Обработка метаданных

VI-Methods, доступный в настоящее время в системе AVANCE IVDr, является основой для разработки технологий анализа данных и позволяет стандартизировать анализ жидкостей организма методом ЯМР.



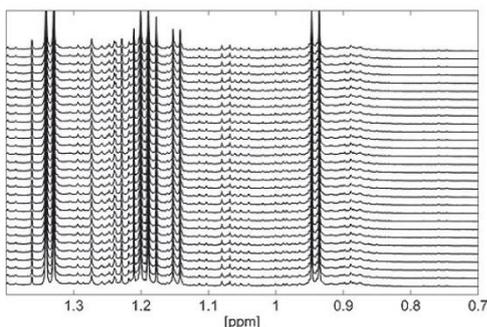
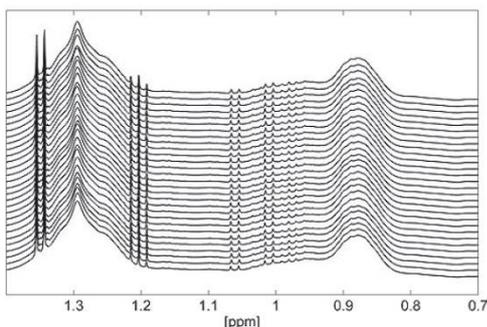
VI-методы связывают платформу IVDr с сервисом автоматического анализа данных Bruker и содержат все методы автоматизации, необходимые для стандартизированной генерации данных биологических жидкостей. Он также включает эффективные методы контроля качества, необходимые при работе с образцами человека, и обеспечивает возможность передачи полученных спектральных данных. Хотя вся система предназначена только для исследовательских целей, VI-методы прокладывают путь для возможного будущего использования в клинических условиях, выполняя определенные требования для аккредитации и сертификации.

VI-методы включает в себя

- Стандартные рабочие процедуры для пробоподготовки
- Стандартизированные наборы параметров для измерения уровня жидкости в организме и контроля качества
- Система отчетов о контроле качества, включая отчеты о проверке и контрольные диаграммы
- QuantRefManager полностью интегрирован в TopSpin для управления количественной калибровкой системы IVDr для мочи, плазмы / сыворотки и CSF
- Автоматическая настройка IcpNMR в соответствии с требованиями системы IVDr
- Стандартизированные шаблоны для SampleTrack
- Модуль для автоматического доступа к серверу анализа данных Bruker
- Браузер данных IVDr позволяет легко управлять данными IVDr (спектры и метаданные) и позволяет выбирать, копировать или накладывать их часть

Преимущества VI-методов

- Стандартизированная генерация данных и высокое качество данных, полученных в полной автоматизации
- Строгая калибровка спектрометра и проверка качества, включая строгие отчеты
- Включение объединения данных, полученных в нескольких системах, в объединенные базы данных.
- Обеспечение совместного использования и совместной разработки статистических моделей в лабораториях.
- Надежная и последовательная генерация данных ЯМР в крупномасштабных исследованиях с долгосрочными горизонтами
- Поддержка ЯМР лабораторного сетевого подхода, включая сети феномен-центров



Долгосрочная воспроизводимость спектров плазмы (верхний график) и мочи (нижний график), полученных с использованием методов VI. Отдельные образцы были подготовлены и измерены в качестве ежемесячного контроля качества в рамках лабораторной системы контроля качества.

	Urine	Plasma / Serum	CSF
O1 optimization experiment	✓	✓	✓
1D NOESY Presat	✓	✓	✓
CPMG		✓	
Diffusion Filter		✓	
Fast 2D JRES	✓	✓	✓
QuantRef calibration	✓	✓	✓
5mm tube operation	✓	✓	✓
3mm tube operation	✓	✓	✓

Таблица 1: Обзор наборов параметров биологических методов, связанных с ЯМР в жидкости организма.

	Tube Diameter	QC Report	Control Charts
Filcor calibration	5mm	✓	✓
Temperature calibration	3mm & 5mm	✓	✓
Shim & water suppression optimization	3mm & 5mm	✓	✓
QuantRef calibration & validation	3mm & 5mm	✓	✓

Таблица 2: Обзор методов калибровки и контроля качества (QC), диаграммы отчетности и контроля, включенные в BI-методы.

Покупка пакета BI-методов

Пакет BI-Methods поставляется в стандартной комплектации с системой AVANCE IVDr от ЯМР. Также можно заказать модернизацию подходящих систем, не поддерживающих IVDr, до систем, совместимых с IVDr или IVDr. Установка методов IVDr выполняется специально обученными сервисными инженерами в рамках установки IVDr или в качестве обновления до систем, не поддерживающих IVDr. Это гарантирует, что пакет BI-Methods правильно установлен, а прибор правильно откалиброван и подключен к серверу анализа данных Bruker.

Анализ подкласса липопротеинов

Включение инструментов на платформе IVDr

Липопротеины представляют собой супрамолекулярные сборки, которые переносят нерастворимые в воде липиды в крови. Липопротеины также несут аполипопротеины, которые определяют структуру и функцию. Аполипопротеины, монослой амфифильных фосфолипидов и встроенного в них холестерина, образуют поверхность липопротеинов, которые «скрывают» липиды от водной среды. Внутреннее ядро в основном состоит из триглицеридов и этерифицированного холестерина.

Липопротеины обычно делятся на пять основных групп:

- Chylomicrons
- Липопротеины очень низкой плотности (ЛПОНП)
- Липопротеины средней плотности (IDL)
- Липопротеины низкой плотности (ЛПНП)
- Липопротеины высокой плотности (ЛПВП)

В контексте оценки сердечно-сосудистого риска, специфические для класса липопротеинов концентрации холестерина и триглицеридов представляют интерес помимо их общих концентраций в плазме. Существует явное указание на то, что дополнительная подклассификация липопротеинов может улучшить прогнозирование риска сердечно-сосудистых заболеваний.

Анализ подкласса липопротеинов с помощью ЯМР

Панель липопротеинов Bruker BI-LISA обладает значительными преимуществами по сравнению с современными методами тестирования, например, методом ультрацентрифугирования, который обычно занимает 1 неделю образца. В настоящее время ультрацентрифуги обрабатывают до 16 образцов параллельно; однако процедура требует многократного точного ручного взаимодействия. Для анализа подкласса VLDL требуется антрацентрифуга с регулируемыми углами. Поэтому ищутся альтернативные подходы.

Брукер руководил проектом по созданию анализа подклассов липопротеинов на основе спектроскопии ¹H-ядерного магнитного резонанса (¹H-ЯМР) образцов плазмы крови или сыворотки с использованием регрессионного анализа



результатов ультрацентрифугирования.

Целью было предоставить аналитический метод, который:

- Определяет количество холестерина, фосфолипидов, триглицеридов, аполипопротеинов A1, A2, B и ЛПНП для частиц основного и подклассов липопротеинов для плазмы и сыворотки.
- Работает с высокой пропускной способностью (до 150 проб в день при высококачественном регулярном скрининге) при низкой стоимости за пробу, при полной автоматизации, простой подготовке проб и автоматической генерации отчетов
- Обеспечивает достаточную точность при максимальной воспроизводимости и полной передаче от инструмента к инструменту.

Выбранный метод основан на анализе сигналов в спектре ¹Н-ЯМР, которые связаны с липопротеинами. Различия в составе, размерах и плотности липопротеинов переводят в соответствующие различия формы сигнальных линий, которые могут быть использованы для извлечения информации об основных и подклассах липопротеинов (см. Рисунок 1).

Необходимо было разработать регрессионную модель, используя набор обучающих данных, который состоит из:

- Анализы липопротеинов из общего и подклассов плазмы и ультрацентрифугирования
- ¹Н-ЯМР спектры того же набора образцов

После того как регрессионная модель была установлена, алгоритм прогнозирования вычисляет липопротеиновые аналиты непосредственно из спектров ¹Н-ЯМР новых образцов плазмы или сыворотки без дальнейшей необходимости ультрацентрифугирования.

Используя этот метод ¹Н-ЯМР, можно получить информацию о связанной с липопротеином информации о:

- Плазма и сыворотка
- Основные классы ЛПОНП, ЛПВП, ЛПНП и ЛПВП
- Шесть подклассов VLDL от VLDL-1 до VLDL-6 (отсортированы по возрастанию плотности и уменьшению соответственно)
- Шесть подклассов ЛПНП от ЛПНП-1 до ЛПНП-6
- Четыре HDL-подкласса HDL-1 до HDL-4

Информация состоит из концентраций липидов, то есть холестерина, свободного холестерина, фосфолипидов, триглицеридов, концентраций аполипопротеинов Apo-A1, Apo-A2 и Apo-B и количества частиц ЛПНП. В таблице 1 приведены все параметры, рассчитанные с помощью анализа ¹Н-ЯМР липопротеинов. На рисунке 1 показана титульная страница автоматического отчета (BI-LISA).

	Triglyceride	Cholesterol	Free Cholesterol	Phospho-lipids	Apo-A1	Apo-A2	Apo-B	LDL-particle
PLASMA	✓	✓	✓	-	✓	✓	✓	✓
VLDL	✓	✓	✓	✓	-	-	✓	✓
VLDL-1 to -6	✓	✓	✓	✓	-	-	✓	-
IDL	✓	✓	✓	✓	-	-	✓	✓
LDL	✓	✓	✓	✓	-	-	✓	✓
LDL-1 to -6	✓	✓	✓	✓	-	-	✓	✓
HDL	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-	-
HDL-1 to -4	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-	-

Таблица 1: Список всех параметров, полученных в результате анализа подкласса липопротеинов ¹Н-ЯМР.

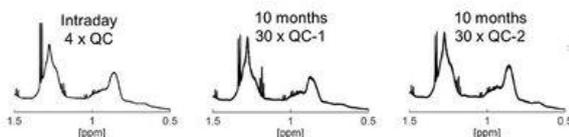
Страница 1 отчета BI-LISA, охватывающая основную информацию о фракциях.

Важно отметить, что из-за характера регрессионного подхода аналиты, перечисленные в таблице 1, частично коррелированы и не могут считаться независимыми аналитами. Соотношение между анализируемыми веществами зависит только от нескольких скрытых факторов, которые определяются как липидным обменом, так и пределами набора тренировочных данных ультрацентрифугирования, используемых для обучения регрессионной модели. Модель регрессии была разработана только для спектров 600 МГц.

Валидация анализа подкласса липопротеинов

Чтобы проверить достоверность результатов, были приняты следующие меры и постоянно следовали:

- Проверка воспроизводимости измерений и анализа (рисунок 2)
- Тест переносимости измерения и анализа
- Лабораторные сравнительные испытания
- Тесты на прослеживаемость по основным параметрам с использованием сертифицированных эталонных образцов



	TG	CH	LDL-C	HDL-C
target: imprecision (%)	< 5%	< 3%	< 4%	< 4%
average imprecision (intraday)	QC sample-1	0.3 %	0.5 %	0.8 %
	QC sample-2	0.6 %	0.5 %	0.8 %
impresion (long term) over 10 months	QC sample-1	1.7 %	1.4 %	1.9 %
	QC sample-2	1.4 %	1.5 %	2.3 %

¹NCEP Criteria for Lipid and Lipoprotein Testing

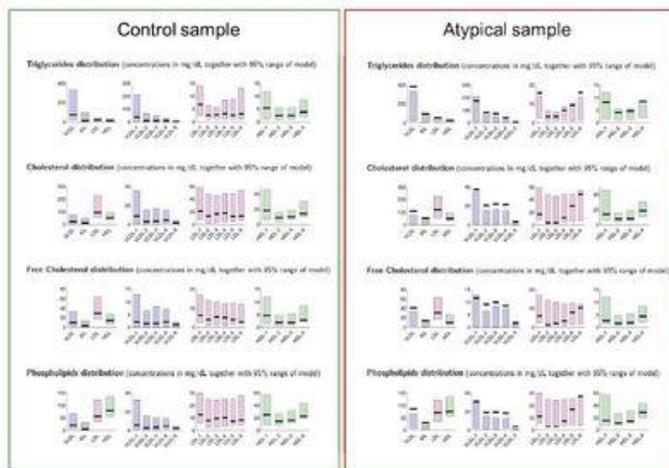
Кратковременная и долгосрочная неточность измерений липопротеинов методом ЯМР (NCEP Национальная образовательная программа по холестерину, США).

Преимущества анализа липопротеинов Bruker BI-LISA IVDr

- Более низкая стоимость, чем ультрацентрифугирование
- Гораздо быстрее время выполнения заказа - минуты против дней
- Полностью автоматизирован и прост в управлении (например, с помощью МТА)
- Равная чувствительность и специфичность как ультрацентрифугирование
- Небольшой объем образца (500 микролитров) - лучшее соблюдение пациентом
- Простая пробоподготовка
- Нет прямого контакта между образцом и устройством
- Спектры могут быть использованы для нескольких видов анализа

Использование анализа подкласса липопротеинов в клинических и трансляционных исследованиях

1. Атеросклероз
2. Сердечно-сосудистые заболевания (исследования по профилактике, раннему выявлению, классификации и лечению)
3. Сахарный диабет 2 типа, ожирение, метаболический синдром
4. Жирная болезнь печени
5. тромбоз
6. Инсульт
7. Цереброваскулярные заболевания
8. Воспалительные заболевания
9. рак
10. Влияние пищи на здоровье
11. Биобанки, контроль качества плазмы / сыворотки, состояние натошак, концентрационная панель со спектрами
12. Эпидемиологические исследования



Два примера для распределения липидов, рассчитанные из анализа подкласса липопротеинов Bruker IVDr BI-LISA.

Требования к анализу подкласса липопротеинов

- Платформа IVDr на частоте 600 МГц
- Использование Bruker SOP для плазмы / сыворотки
- Абсолютную температуру, подавление растворителя и количественную оценку эталонного образца необходимо регулярно проверять (желательно ежедневно)
- Доступ к серверу Bruker Data Analysis для полностью автоматизированного удаленного анализа (передача спектров после измерения на сервер Bruker через частный ftp, обратная передача отчета о результатах)

BIQUANT-UR

Воспроизводимое количественное определение метаболита в моче

Анализ мочи на метаболизм является особенно ценным и богатым информацией, поскольку в моче можно определить метаболические пути широкого спектра питательных веществ, лекарств и загрязнителей окружающей среды, даже если анализ мочи очень сложен для анализа. Большие выборочные когорты в клинических исследованиях требуют автоматизированных решений, способных измерять и анализировать с максимальным информационным содержанием и воспроизводимостью.

Новый модуль BIQUANT-UR™ успешной платформы Bruker Avance® IVDr (In vitro Diagnostics research) теперь обеспечивает точные, чувствительные и полностью воспроизводимые результаты, которые продемонстрировали большой потенциал в доклинических исследованиях на животных и в клинических / трансляционных исследованиях.



BIQUANT-UR доступен в трех версиях

- **BIQUANT-UR b:** базовая версия, 50 соединений с диапазонами концентраций, встречающихся в большинстве мочи человека
- **BIQUANT-UR e:** расширенная версия, 150 соединений с диапазонами концентраций, возраст от 6 месяцев и выше, включая **IEM** и другие маркеры заболеваний
- **BIQUANT-UR ne:** расширенная версия для новорожденных, 150 соединений с диапазоном концентраций, включая маркеры заболеваний и нецелевую классификацию по модели здоровых новорожденных

Используйте BIQUANT-UR для дальнейшего обучения в:

- эпидемиология
- Частые заболевания, такие как повреждение почек, диабет, метаболический синдром, ожирение и рак
- Способность контролировать и оптимизировать лечение
- Проблемы со здоровьем, связанные с микробиомом
- Пища и влияние окружающей среды на здоровье
- Мониторинг концентрации соединений в персонализированном метаболическом профиле мочи

Расширенные версии могут быть использованы в этих приложениях плюс:

- Педиатрия
- Эффективность лекарств и мониторинг лечения пациентов с IEM
- Функциональная пищевая эффективность и дозировка / состав
- Выборочный скрининг
- Здоровье новорожденных

Стандартизированный контроль качества

В то время как число биобанков в мире быстро растет, контроль качества всего процесса является требованием для обеспечения ценности биобанков. Стандартизация необходима, чтобы позволить исследователям интегрировать результаты, полученные в результате испытаний образцов из 1 или более биобанков.

Стандартизация также включает в себя процесс контроля качества, который должен охватывать все аспекты предварительной аналитики и хранения образцов. Кроме того, валидация метапараметров образца / донора имеет дополнительную ценность. ЯМР особенно подходит для проведения QC-анализа жидких биопсий и может предоставить большое количество критериев, основанных на одном измерении QC на образец. В дополнение к информации о КК ЯМР может доставлять большое количество метаболической информации с использованием тех же спектров, которые генерируются в процессе КК. С этой информацией в моче определено 150 метаболитов в 2 возрастных диапазонах. В плазме / сыворотке 115 параметров, связанных с липопротеинами (включая подклассы) и 26 метаболитов / параметров, проанализированы и определены количественно, весь процесс находится под автоматизированной кнопкой и может быть обработан обученным медицинским техническим помощником.

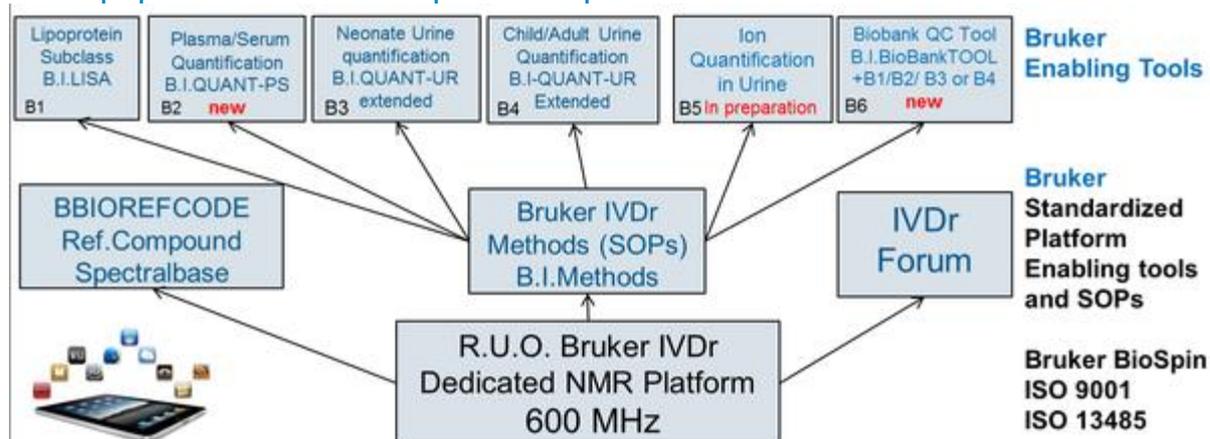
Пример Резюме БиоБанка

Выдержка из сводной страницы отчета BIBioBankQC-PS и BIBioBankQC-UR.

Test	Result	Flag
NMR Experiment Parameter Test	not passed	●
NMR Experiment Quality Test	passed	●
NMR Preparation Quality Test	passed	●
Matrix Identity Test	EDTA plasma	●
Matrix Integrity Test	passed	●
Matrix Contamination Test	not passed	●

Test	Result	Flag
NMR Experiment Parameter Test	not passed	●
NMR Experiment Quality Test	not passed	●
NMR Preparation Quality Test	passed	●
Matrix Identity Test	Urine	●
Matrix Integrity Test	not passed	●
Matrix Contamination Test	not passed	●
Medication Test	passed	●
Protein Background Test	passed	●
Further Indicative Parameter Test	not passed	●

Платформа IVDR и ее встроенные решения



Богатая спектральная информация

Основываясь на выдающихся характеристиках ЯМР в воспроизводимости и переносимости, доступен высококачественный анализ данных, чтобы предоставить дополнительную информацию для образцов биобанка. Вместе с биобанком предлагаются пакеты инструментов для количественного определения плазмы / сыворотки и мочи, как описано выше. Множество релевантных для заболевания, а также эндогенных метаболитов и информации о липопротеинах извлекается из анализа спектров КК.

— ● Analysis Report

Bruker IVDr BioBank QC B.I.BioBankQC™ in Urine

Sample ID: test_urine_005

Measuring Date: 14-Jun-2018 07:18:24

Reporting Date: 18-Jun-2018 17:56:31, 7 page(s), Version 1.0.0

Quantification Method Version: BioBankQC UR 1.0.0

Disclaimer

RESEARCH USE ONLY: This is no clinical diagnostic analysis report. Must not be used for clinical (medical or IVD) diagnosis or for patient management! Additional concentration range information (95% range) provided numerically or graphically in this report must not be used for clinical diagnostic interpretation.

Summary

Test	Result	Flag
NMR Experiment Parameter Test	passed	●
NMR Experiment Quality Test	passed	●
NMR Preparation Quality Test	passed	●
Matrix Identity Test	Urine	●
Matrix Integrity Test	passed	●
Matrix Contamination Test	passed	●
Medication Test	passed	●
Protein Background Test	passed	●
Further Indicative Parameter Test	passed	●

Пример отчета о контроле качества, доступного в B1BioBankTool

Спектры вместо аликвот

Основываясь на концепции платформы IVDr и ее строгой стандартизации для генерации данных ЯМР, можно выбирать спектры из нескольких биобанков для крупных эпидемиологических исследований по всему миру или расширить диапазон тестирования клинических испытаний, предоставляя, например, спектры из здоровых когорты из биобанков Вместо генерации всегда новых аликвот. Это создает новое ценностное предложение для биобанков, позволяющее экономить средства и эффективно использовать большие данные. Новые диагностические тесты, основанные на ЯМР, могут быть подтверждены на всемирной основе и для нескольких фенотипов без увеличения стоимости исследования. Данные, полученные в ходе тестирования 11 IVDr на платформе, ясно подтверждают эту уникальную особенность ЯМР.

BIQUANT-PS

Воспроизводимое количественное определение метаболитов в плазме / сыворотке

Платформа Bruker IVDr оптимизирована для поддержки анализа эпидемиологических исследований с помощью крупномасштабных специализированных клинических и трансляционных исследований. Использование стандартного модуля Bruker IVDr Methods (BIMethods) гарантирует высокую воспроизводимость и качество данных при полной автоматизации независимо от системы ЯМР и оператора.

Платформа Bruker IVDr позволяет комбинировать разные решения. Таким образом, следуя уже проведенному нами анализу подкласса липопротеинов Bruker IVDr (BILISA TM) в образцах плазмы / сыворотки, мы теперь расширяем нашу панель биомаркеров с одновременным количественным определением малых молекул, используя тот же спектр, что и для BILISA. Автоматическое количественное определение в плазме / сыворотке (BIQUANT-PS TM) основано на собственных разработанных алгоритмах, включающих подгонку предварительно определенных сигналов ^1H , как это уже имеет место для образцов мочи (BIQUANT-UR TM).

Преимущества BIQUANT-PS

- Простота использования, простая и быстрая подготовка образцов
- Полностью автоматизированное количественное определение 26 метаболитов
- Различные классы аналитов могут быть количественно определены одновременно за один прогон
- Абсолютная концентрация для каждого метаболита дана из-за калибровки с одним контрольным образцом для количественного определения (BIMethodsTM)
- Валидация всех LOD проводилась в соответствии с руководящими принципами ISO 17025 для мокрого пикирования.
- Экспресс-анализ: ежедневно можно подготовить, измерить и проанализировать до 160 образцов
- Ретроспективный анализ возможен, если образец был подготовлен и измерен с использованием модуля BIMethods
- Работает на образцах плазмы или сыворотки

Пример автоматического отчета

6 Keto acids and derivatives

Compound	Conc. mmol/L	LOD mmol/L	95% Range mmol/L	Graphics (*)
3-Hydroxybutyric acid	0.04	0.02	≤ 0.26	
Acetoacetic acid	< 0.01	0.01	≤ 0.02	
Acetone	0.03	0.01	≤ 0.06	
Pyruvic acid	0.20	0.03	≤ 0.07	

(*) Gray horizontal boxes represent 95% concentration range, black vertical lines represent sample value.

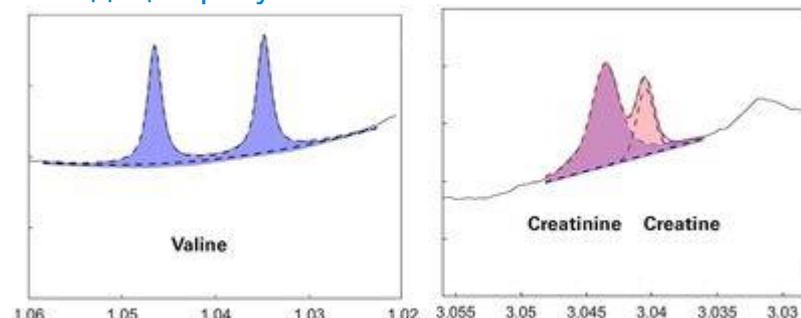
7 Sugars and derivatives

Compound	Conc. mmol/L	LOD mmol/L	95% Range mmol/L	Graphics (*)
Glucose	4.1	0.54	1.73 - 6.08	
Glycerol	< 0.25	0.25	≤ 0.49	

(*) Gray horizontal boxes represent 95% concentration range, black vertical lines represent sample value.

Экстракт BIQUANT-PS образца сыворотки от пациента с высоким содержанием глюкозы.

Валидация результатов количественного анализа



Дальнейшая информация

Модуль BIQUANT-PS предлагается по фиксированной годовой ставке. Он предназначен только для исследовательских целей и не выпущен для клинической диагностики.

Доклинический скрининг и диагностика in vitro (IVD)



ЯМР с высокой пропускной способностью для разработки и валидации высококачественных и экономически эффективных исследований IVD за ЯМР и доклинических скрининговых анализов in vitro.

Стандартизированная платформа спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР), обеспечивающая экономически эффективный, высокопроизводительный доклинический скрининг ЯМР, а также обнаружение и валидацию (на уровне RUO) методом ЯМР (на уровне RUO) новых анализов ЯМР. Новая система AVANCE IVDr, в настоящее время предназначенная только для исследовательских целей, представляет собой законченную, проверенную и стандартизированную платформу для доклинических исследований и скрининга ЯМР, а также для исследований IVD за ЯМР.

Он обладает высокой чувствительностью и богатым информационным выходом на частоте протонного ЯМР 600 МГц и включает в себя передовое аппаратное обеспечение, программное обеспечение, автоматизацию, спектральные библиотеки и стандартные рабочие процедуры (SOP) для высокопроизводительной валидации анализа биологических жидкостей и доклинического скрининга. Преимущества для клиентов включают более высокий уровень информативности и спектральной характеристики по сравнению с системами ЯМР в слабых полях, а также превосходную воспроизводимость, высокую пропускную способность и потенциально значительно более низкую стоимость на образец для лучшей подготовки и поддержки клинического скрининга, а также обнаружения и валидации методом IVD за ЯМР. (на уровне RUO).

ВВIOREFCODE

Справочная база данных метаболитов

ВВIOREFCODE 2 представляет собой базу данных, содержащую в настоящее время спектры 800 соединений, которые обычно обнаруживаются в виде метаболитов в жидкостях организма или в качестве компонентов в образцах из анализа продуктов питания, кормов и напитков. Кроме того, также содержится ряд типичных загрязнителей.

AMIX Software предоставляет мощные алгоритмы поиска для идентификации соединений в базе данных в спектрах смесей. Это позволяет назначать неожиданные сигналы в спектрах от приложений скрининга и идентификации компонентов.

Спектры поставляются при различных значениях pH, так что экспериментальные условия спектров смеси и базы данных могут быть сопоставлены для поиска в базе данных.

Высокое качество данных

Все спектры, представленные в базе данных, получены при 600 МГц в водном растворе в четко определенных условиях. Следуя СОП, как, например, используется на IVDr. Данные представлены при 11 различных значениях pH, что позволяет точно согласовать экспериментальные условия спектров смеси.

Все спектры очищены (просматриваются в файле истории, где перечислены все рабочие шаги) и полностью назначены. Они хранятся в специальном сжатом формате,

который резко уменьшает объем данных и позволяет чрезвычайно быстро выполнять процессы поиска, а также одновременную обработку большого количества спектров.

Галерея приложений

Характеристики

Данные ЯМР получены при 600 МГц в четко определенных условиях. Протонные спектры поставляются при одиннадцати различных значениях pH от 3 до 8. Для основных pH 3, 5 и 7 представлены 2D-спектры (JRES, COSY, TOCSY, HSQC и HMBC), а также 13C-спектры для pH 3 и 7. Все Соединения снабжены 3D-структурой, а спектры полностью распределены. Генерация данных - это непрерывный процесс. После установки базы данных ее можно обновить и расширить с помощью пакетов новых доступных соединений.

НОВЫЙ

В июне 2018 года для базы данных для всех значений pH VBIORFCODE 2 был выпущен пакет из 50 новых соединений. Эта база данных теперь доступна в общей сложности с 800 соединениями.

База данных и использование

Текущая полная база данных VBIORFCODE включает 800 компонентов. Он состоит из базового пакета из 350, основного пакета обновлений из 150 и в настоящее время 5-6 дополнительных пакетов обновлений по 50 соединений в каждом. Пакеты можно приобрести индивидуально. Дальнейшее обновление с дополнительными пакетами возможно в любое время. Для использования базы данных AMIX требуется , но не входит в комплект. Можно использовать существующие установки AMIX.

Доступные пакеты

- Данные VBIORFCODE2 из всех доступных значений pH для различных применений. Полная база данных содержит 800 соединений.
- VBIORFCODE2 pH3 спектры при pH3 только для пищевых применений. Полная база данных теперь с 700 соединениями.
- VBIORFCODE2 pH7 спектры при pH7 только для жидкостей организма. Полная база данных теперь с 700 соединениями.

НОВЫЙ

Обновите пакет 6 для соединения 751 - 800, доступного для существующего VBIORFCODE2, до SHD011 (A) -06.

Содержатся данные

Обычно данные предоставляются для одиннадцати различных значений pH от 3 до 8 с шагом 0,5. 2D-данные при pH 3, 5 и 7, включая COSY, TOCSY, JRES, HSQC и HMBC. Растворимость и / или стабильность некоторых соединений могут ограничивать получение данных до определенного диапазона pH или препятствовать предоставлению данных 2D и 13C.

Архангельск (8182)63-90-72
Астана (7172)727-132
Астрахань (8512)99-46-04
Барнаул (3852)73-04-60
Белгород (4722)40-23-64
Брянск (4832)59-03-52
Владивосток (423)249-28-31
Волгоград (844)278-03-48
Вологда (8172)26-41-59
Воронеж (473)204-51-73
Екатеринбург (343)384-55-89
Иваново (4932)77-34-06

Ижевск (3412)26-03-58
Иркутск (395)279-98-46
Казань (843)206-01-48
Калининград (4012)72-03-81
Калуга (4842)92-23-67
Кемерово (3842)65-04-62
Киров (8332)68-02-04
Краснодар (861)203-40-90
Красноярск (391)204-63-61
Курск (4712)77-13-04
Липецк (4742)52-20-81
Киргизия (996)312-96-26-47

Магнитогорск (3519)55-03-13
Москва (495)268-04-70
Мурманск (8152)59-64-93
Набережные Челны (8552)20-53-41
Нижний Новгород (831)429-08-12
Новокузнецк (3843)20-46-81
Новосибирск (383)227-86-73
Омск (3812)21-46-40
Орел (4862)44-53-42
Оренбург (3532)37-68-04
Пенза (8412)22-31-16
Казахстан (772)734-952-31

Пермь (342)205-81-47
Ростов-на-Дону (863)308-18-15
Рязань (4912)46-61-64
Самара (846)206-03-16
Санкт-Петербург (812)309-46-40
Саратов (845)249-38-78
Севастополь (8692)22-31-93
Симферополь (3652)67-13-56
Смоленск (4812)29-41-54
Сочи (862)225-72-31
Ставрополь (8652)20-65-13
Таджикистан (992)427-82-92-69

Сургут (3462)77-98-35
Тверь (4822)63-31-35
Томск (3822)98-41-53
Тула (4872)74-02-29
Тюмень (3452)66-21-18
Ульяновск (8422)24-23-59
Уфа (347)229-48-12
Хабаровск (4212)92-98-04
Челябинск (351)202-03-61
Череповец (8202)49-02-64
Ярославль (4852)69-52-93

<https://bruker.nt-rt.ru/> || bku@nt-rt.ru