

Sistemas PEAQ-ITC

Tecnologia MicroCal

Desvendando as interações biomoleculares

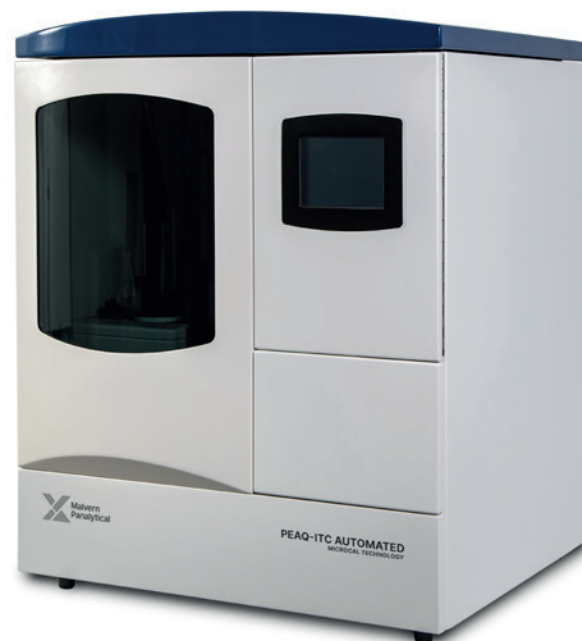


PEAQ-ITC em ação – versatilidade comprovada

Milhares de citações em bases de dados de referência ilustram as diversas aplicações dos sistemas PEAQ-ITC (Tecnologia MicroCal) da Malvern Panalytical. Eles são usados para determinar a afinidade de ligação e as propriedades termodinâmicas de qualquer alteração biomolecular que possa influenciar o reconhecimento entre parceiros de ligação.

Quando combinados com informações estruturais, os dados do PEAQ-ITC fornecem insights mais profundos sobre as relações estrutura-função e os mecanismos de ligação.

Embora os exemplos a seguir forneçam apenas uma parte destas possibilidades, você pode encontrar diversas informações detalhadas sobre aplicações em: www.malvernpanalytical.com

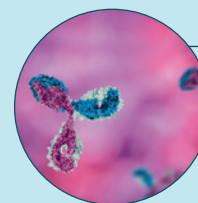


Com a calorimetria de titulação isotérmica você pode:

- Verificar atividade do alvo antes da triagem.
- Descobrir a afinidade e sítios de ligação, entalpia e entropia.
- Obter uma compreensão mais profunda dos mecanismos de ligação para qualquer interação biomolecular.

Principais aplicações

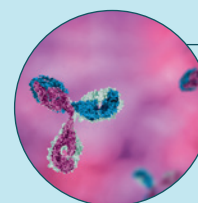
Amplamente utilizado em ciências da vida e descoberta de medicamentos



Otimizando a cinética enzimática

Os métodos tradicionais, como o ensaio bioquímico com medições finais por HPLC, eram complicados e propensos a erros sistemáticos. Baumann e colaboradores

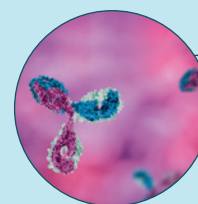
desenvolveram um sistema para medir a cinética da xilanase com PEAQ-ITC. O método ITC também apresentou maior sensibilidade e utilizou menos material.



Poder preditivo e produtividade na descoberta de fármacos baseada em fragmentos

Usados na fase inicial da descoberta de fármacos para o tratamento de tumores resistentes a medicamentos. Dados de um PEAQ-ITC automatizado foram usados para validar resultados de uma triagem primária e para classificar com precisão

as afinidades dos fragmentos de modo que apenas os ligantes mais fortes foram selecionados para tentativas de co-cristalização e planejamento de fármacos baseado na estrutura.



Dimerização de uma chaperona induzida por zinco

UreG é uma chaperona molecular que ativa a urease ao entregar dois íons de níquel. Evidências conflitantes sugerem que a UreG pode existir como monômero ou como dímero.

Como a UreG não é estruturada em solução, Zambeli e colegas usaram o

ITC para entender o papel das regiões desordenadas da UreG, da *Helicobacter*. As medidas de estequiometria do ITC indicaram que a UreG poderia existir em qualquer forma, dependendo da espécie do íon metálico.

Caracterizando interações biomoleculares para:

- Confirmar ligação e atividade
- Determinar parâmetros estequiométricos e termodinâmicos
- Estudar relações de estrutura-atividade

Estudar a interação de quaisquer duas biomoléculas, incluindo:

- Proteínas, ácidos nucleicos, lipídios, fármacos e inibidores

Descoberta de fármacos para:

- Identificação e validação do alvo
- Geração, otimização e P&D de processo para preparação do protótipo
- Mecanismo de ação

Meça vários parâmetros de ligação em um único experimento

Microcalorimetria de titulação isotérmica

A microcalorimetria de titulação isotérmica (ITC) é uma ferramenta essencial na descoberta de fármacos e no estudo da regulação da interação de proteínas. Tendo sido desenvolvidos especificamente para atender às necessidades dos cientistas que trabalham nessas áreas, os calorímetros PEAQ-ITC da Malvern Panalytical oferecem desempenho excepcional e dados de excelente qualidade necessários nessas áreas de aplicação.

Os sistemas PEAQ-ITC (Tecnologia MicroCal) medem diretamente o calor liberado ou absorvido durante um evento de ligação biomolecular. O resultado é uma medição direta e sem marcação da afinidade de

ligação, estequiometria e termodinâmica em um único experimento. Eles fornecem informações abrangentes para estudar uma ampla variedade de interações biomoleculares.

Oferecendo alta sensibilidade, uma ampla faixa de afinidade, consumo reduzido de amostras e opções para maior rendimento com automação independente, os microcalorímetros PEAQ-ITC atendem totalmente aos exigentes requisitos dos laboratórios de pesquisa atuais. Eles também fornecem a segurança associada a um portfólio de produtos baseado nos mais de 40 anos de experiência da MicroCal em microcalorimetria.

Isto é apoiado por dezenas de milhares de artigos científicos que confirmam o valor destas tecnologias na investigação e desenvolvimento.



Principais benefícios dos sistemas ITC da Malvern Panalytical

Todos os calorímetros de titulação isotérmica PEAQ-ITC permitem a medição direta e sem marcação em solução da medição do calor de reação e termodinâmica em um único experimento, permitindo a determinação precisa de constantes de ligação (K_D), estequiometria de reação (N), entalpia (ΔH) e entropia (ΔS).

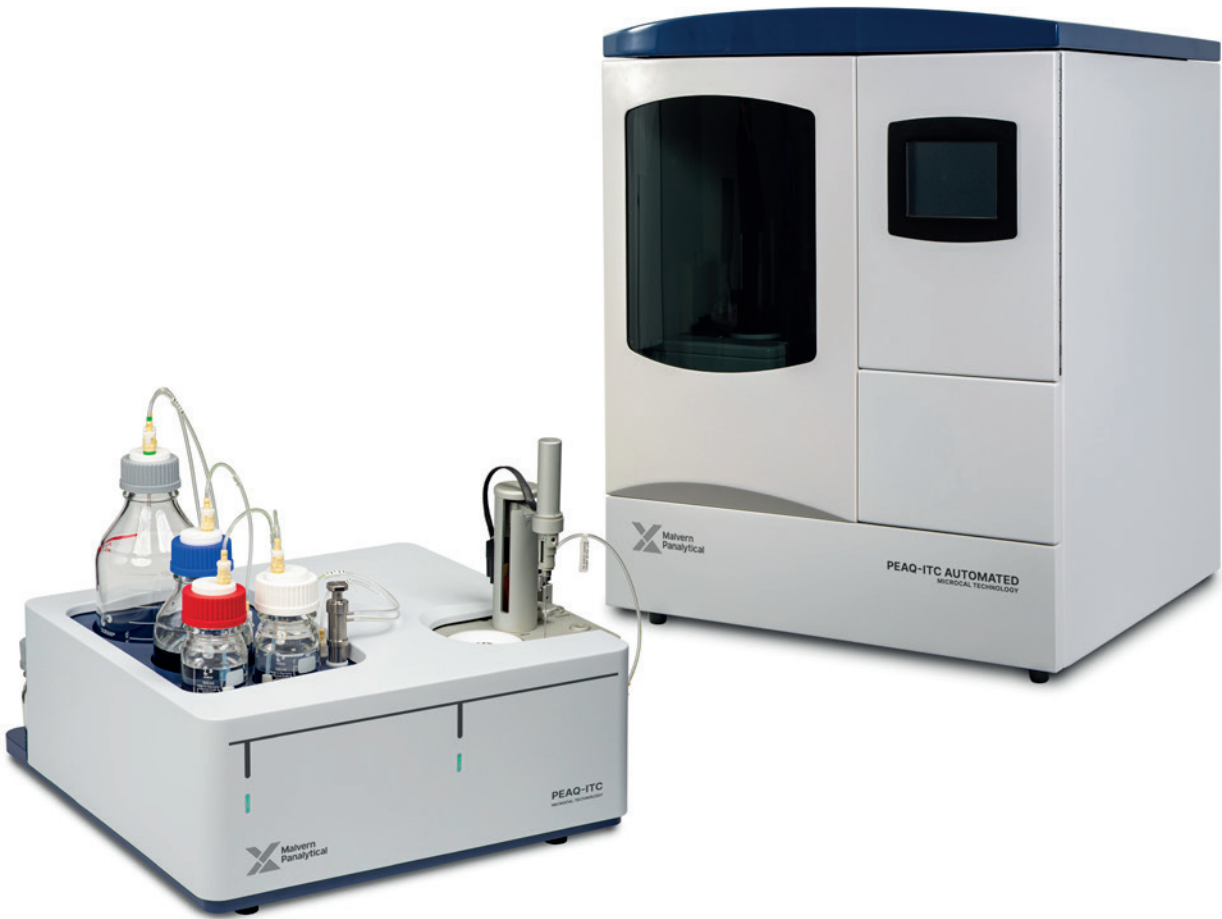
Isto fornece um perfil termodinâmico completo da interação molecular. O ITC vai além das afinidades de ligação e pode elucidar os mecanismos subjacentes às interações moleculares.

Uma variedade de sistemas para atender às suas necessidades.

PEAQ-ITC oferece sensibilidade excepcional e dados de alta qualidade com baixo consumo de amostra. Fluxos de trabalho guiados de fácil utilização com vídeos de ajuda incorporados proporcionam a qualquer nível de usuário a capacidade de gerar dados de alta qualidade.

O PEAQ-ITC Automated combina a alta sensibilidade do PEAQ-ITC com a automação das análises para atender às necessidades de produtividade de laboratórios com alta demanda para pesquisa e descoberta de fármacos.

Desvendando as interações moleculares



Modelo	Volume de amostra	Tamanho da cela de amostra	Operação	Rendimento
PEAQ-ITC Automatizado	370 µL	200 µL	Totalmente automatizado	Até 42 por 24 h (SIM)
PEAQ-ITC	280 µL	200 µL	Manual	8 a 12 por 8 horas por dia

Visão geral da linha PEAQ-ITC

PEAQ-ITC

PEAQ-ITC (Tecnologia MicroCal) foi projetado para facilidade de uso e sensibilidade excepcional. A ampla faixa de afinidade permite a análise de ligantes de afinidade fraca a alta, com excelente reprodutibilidade. O software de análise PEAQ-ITC oferece simulação de projeto de experimento, avaliação em lote de grandes conjuntos de dados, avaliação automatizada da qualidade dos dados e uma interface de usuário simplificada que orienta o usuário até os números finais e gráficos de qualidade de apresentação de forma rápida e fácil. O PEAQ-ITC é uma ferramenta essencial para qualquer laboratório de pesquisa que estude interações biomoleculares onde alta sensibilidade e resultados rápidos são fundamentais.

Características:

- Fluxos de trabalho guiados e fáceis de usar com tutoriais em vídeo incorporados oferecem a qualquer nível de usuário a capacidade de gerar dados de alta qualidade
- Alto sinal-ruído proporciona mais confiança no acesso à qualidade dos dados e à relevância da afinidade gerada e dos parâmetros termodinâmicos
- A lavagem automatizada com detergente da cela de amostra e da seringa de titulação auxilia na produção de dados reproduzíveis de alta qualidade
- Analisa todos os parâmetros de ligação (afinidade, estequiometria, entalpia, entropia) em um único experimento
- Obtenção rápida do primeiro resultado com desenvolvimento mínimo do ensaio e sem rotulagem
- Sensível o suficiente para investigar a interação biomolecular usando apenas 10 µg de proteína
- Mede diretamente afinidades de submilimolar a nanomolar
- Mede constantes de dissociação nanomolar a picomolar usando ligação competitiva (10^{-9} a 10^{-12} M)
- Software de análise PEAQ-ITC
 - Abra vários experimentos em uma única sessão
 - Modelos de adaptação automatizados (One-Site, Two-Site, Sequencial, competitivo, Cinética Enzimática, Dissociação)
 - Avaliação automatizada da qualidade dos dados
 - Dados de boa qualidade - Ligação
 - Dados de boa qualidade - Sem ligação
 - Dados de baixa qualidade - Verifique os dados



Visão geral da linha PEAQ-ITC

PEAQ-ITC automatizado

Combinando o desempenho excepcional do PEAQ-ITC com automação total e operação autônoma, o PEAQ-ITC Automatizado é um ativo valioso para qualquer laboratório de pesquisa movimentado. O software de fácil utilização garante um projeto experimental eficiente, enquanto a análise automatizada de dados fornece resultados rápidos e confiáveis. A automação e o rendimento que oferece tornam-no uma escolha particularmente boa para aplicações de descoberta de fármacos como validação de resultados, na qual a produtividade é crucial.

Características:

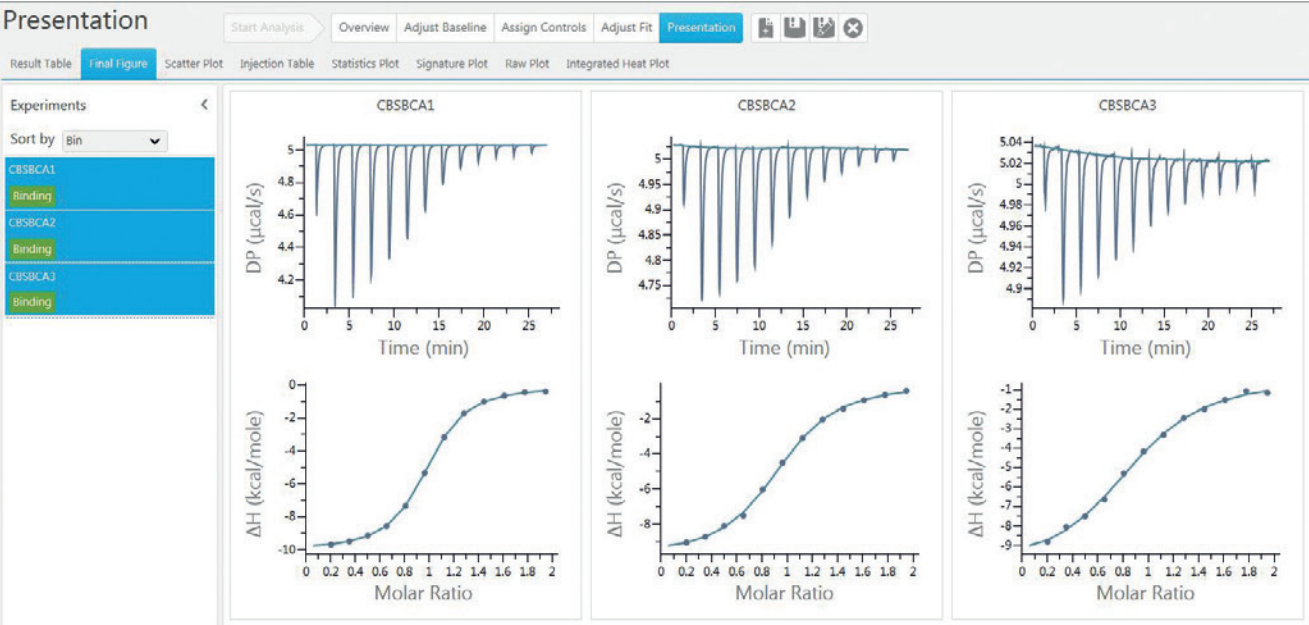
- Totalmente automatizado com capacidade para operar quatro placas de 96 poços de forma autônoma
- Scripts de automação otimizados para melhorar o desempenho e a confiabilidade do ensaio
- Software que agiliza fluxos de trabalho e melhora a consistência da análise de dados para tomadas de decisões confiáveis
- Acrescente novos experimentos “em execução” para aumentar a produtividade
- Carregamento de seringa única para múltiplas titulações (ou seja, 4 experimentos de 10 uL)
- Novo layout simplificado



Software fácil de usar para análises rápidas e precisas

Software de controle de instrumentos que leva você do experimento ao resultado final:

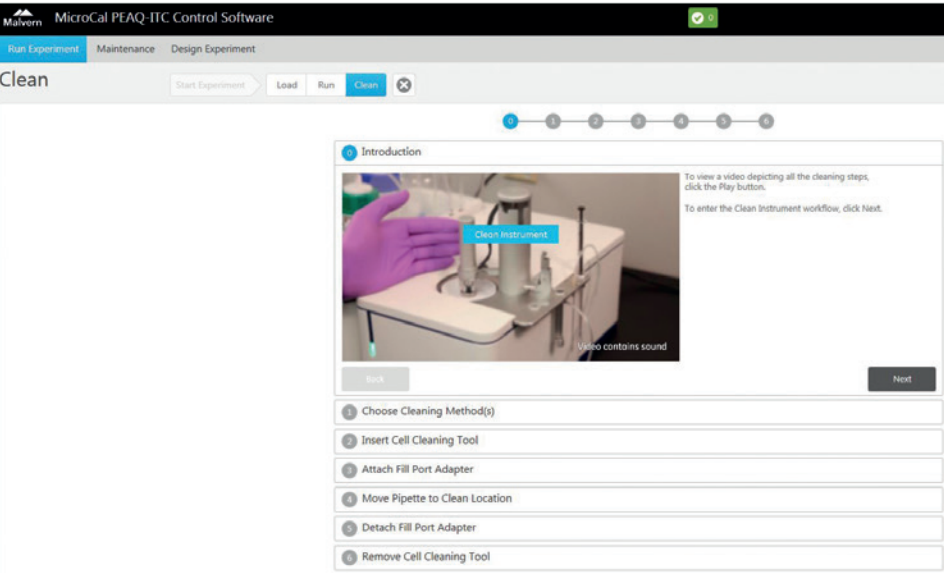
O software de controle de instrumentos PEAQ-ITC incorpora todas as ferramentas que você precisa para passar do projeto experimental aos resultados finais de maneira rápida e fácil.



Fluxos de trabalho guiados

Fluxos de trabalho guiados e fáceis de usar com vídeos de ajuda incorporados proporcionam a qualquer nível de usuário a capacidade de gerar dados de alta qualidade com o PEAQ-ITC.

A manutenção nunca foi tão fácil



Configuração do experimento passo a passo

1 Load Cell



Move the pipette out of the way (i.e. to the Clean Location).

Fill the loading syringe with 300 μ l of sample.

Slowly insert the loading syringe into the sample cell port, gently touch the cell bottom, and move up approximately 1 mm.

Back

2 Attach Fill Port Adapter



If the pipette is in the Clean Location, you must press the clamp's release lever.

Move the pipette to the Rest Location.

Align the hole in the pipette's housing to the hole in the pipette's rotating assembly.

Insert the fill port adapter. A soft click should be felt.

Next

3 Move Pipette to Load Location



Load approximately 75 μ l of titrant in one of the supplied microcentrifuge tubes.

Ensure the microcentrifuge tube has its lid properly situated in the keyed Load Location.

Move the pipette to the Load Location.

Click Next.

Next

4 Detach Fill Port Adapter



Move the pipette to the Rest Location.

Detach the fill port adapter from the pipette and return it to its Storage Location.

Click Next.

Back

5 Move Pipette to Cell



If the cell is loaded, move the pipette into the cell.

Be sure the pipette is firmly seated in the cell port.

Now you may start your experiment.

Click Done

Back

Done



Resumo de comparação de especificações

Parâmetro	ITC	
	PEAQ-ITC automatizado	PEAQ-ITC
Parâmetro de medição	Afinidade (K_D)	Afinidade (K_D)
Parâmetro de medição	Entalpia ΔH	Entalpia ΔH
Parâmetro de medição	Entropia ΔS	Entropia ΔS
Parâmetro de medição	Estequiometria (N)	Estequiometria (N)
Capacidade de amostra	384 (quatro placas de 96 poços)	N/A
Faixa de temperatura da bandeja de amostras	4°C± 2°C em temperatura ambiente	N/A
Volume da amostra	370 µL	280 µL
Volume da cela	200 µL	200 µL
Volume da seringa de injeção	40 µL	40 µL
Precisão do volume de injeção	< 1% @ 2 µL	< 1% @ 2 µL
Apresentação da amostra	placa de 96 poços	N/A
Rendimento	Até 42 por 24 horas (SIM)	8-12 per 8 horas por dia
Material da cela	Hastelloy	Hastelloy
Configuração da cela	Em forma de moeda	Em forma de moeda
Ruído	0,15 ncal/s	0,15 ncal/s
Faixa de temperatura	2°C a 80°C	2°C a 80°C
Estabilidade de temperatura a 25 °C	± 0,00012°C	± 0,00012°C
Tempo de resposta	8 s*	8 s*
Vários modos de feedback	Sim (passivo, alto ganho, baixo ganho)	Sim (passivo, alto ganho, baixo ganho)
Atualização para versão automatizada	N/A	Sim
Ambiente operacional		
- Faixa de temperatura	10°C a 28°C	10°C a 28°C
- Umidade	0% a 70% UR, sem condensação	0% a 70% UR, sem condensação
Avaliações elétricas		
- Tensão	100 - 240 V	100 - 240 V
- Frequência	50/60 Hz	50/60 Hz
- Potência	400 W	130 W
Peso	91 kg	13,6 kg
Dimensões (L x A x P)	63 × 77 × 35 cm	(calorímetro + estação de lavagem)

* O tempo de resposta do instrumento PEAQ-ITC é uma constante ao longo do tempo. É o intervalo de tempo entre o primeiro desvio da linha de base e o ponto no pico que é 63% da altura máxima do pico.

Sobre a Malvern Panalytical

Utilizamos o poder dos nossos instrumentos analíticos e serviços para tornar o invisível visível, e o impossível possível.

Por meio da análise química, física e estrutural de materiais, os nossos sistemas analíticos de alta precisão e serviços de alto nível apoiam os nossos clientes na criação de um mundo melhor. Nós os ajudamos a melhorar tudo, desde as energias que nos alimentam e os materiais com os quais construímos, até os medicamentos que nos curam e os alimentos que apreciamos.

Somos parceiros de muitas das maiores empresas, universidades e organizações de pesquisa do mundo. Eles nos valorizam não apenas pelo poder das nossas soluções, mas também pela profundidade da nossa experiência, colaboração e integridade.

Estamos comprometidos em atingir a neutralidade de carbono em nossas operações até 2030, e em toda a nossa cadeia até 2040. Isso faz parte da estrutura dos nossos negócios, e ajudamos nossos funcionários e clientes a pensar responsabilidades na criação de um mundo mais saudável, mais limpo e mais produtivo.

Com mais de 2300 funcionários, atendemos o mundo todo e fazemos parte do Grupo Spectris plc, líder mundial em medições de precisão.

Malvern Panalytical. We're BIG on small™

Serviço e suporte

A Malvern Panalytical fornece treinamento, serviço e suporte global necessário para conduzir continuamente seus processos analíticos ao mais alto nível. Ajudamos você a aumentar o retorno do seu investimento e garantimos que, à medida que suas necessidades laboratoriais e analíticas aumentem, estaremos lá para ajudar.

A nossa equipe mundial de especialistas agrega valor a seus processos de negócios, garantindo experiência em aplicações, tempo de resposta rápido e o maior de tempo de atividade do seu equipamento.

- Suporte local e remoto
- Variedade completa e flexível de contratos de suporte
- Suporte de conformidade e validação
- Cursos de treinamento no local ou em salas de aula
- Cursos de treinamento de e-Learning e palestras na Web
- Consultoria de amostras e aplicações



Malvern Panalytical,
uma divisão da Spectris do Brasil Instr. Eletron. Ltda.
Rua Luís Correia de Melo, 92 – 25º andar
Vila Cruzeiro, 04726-220 - São Paulo / SP - Brasil

Tel. +55 11 5188 8184
E-mail: brasil@malvernpanalytical.com

Malvern Panalytical

Groveswood Road, Malvern,
Worcestershire, WR14 1XZ,
United Kingdom

Tel. +44 1684 892456
Fax. +44 1684 892789

Lelyweg 1,
7602 EA Almelo,
The Netherlands

Tel. +31 546 534 444
Fax. +31 546 534 598