

LC-QTOF-MS in der forensischen Praxis

Torsten Dame
Forensisch Toxikologisches Centrum München

Schuldfragen



- Vorstellung FTC
- TOF-System
- Messmodi
- Qualifizierung
- Quantifizierung

Einführung

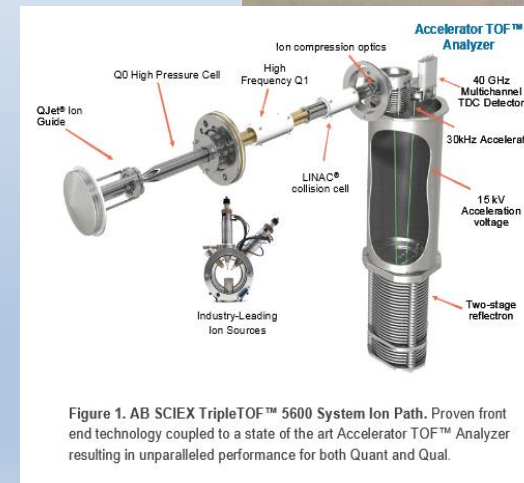
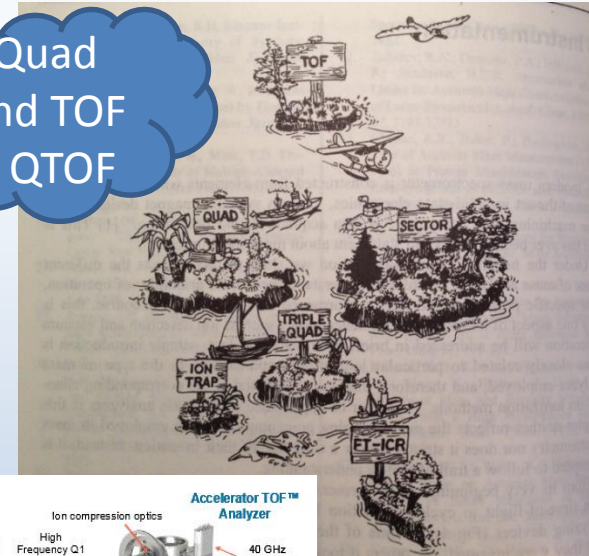
- FTC München ist auf dem Gebiet der Analytik von Drogen und Medikamenten in verschiedenen Matrices (Haare, Urin, Blut) tätig
- Fragestellungen hierbei sind
 - Fahreignungsdiagnostik (MPU)
 - Verkehrsdelikte (§24a)
 - Abstinenzkontrollen
 - Staatsanwaltschaft
 - Leichentoxikologie



Warum QTOF-MS?

- QTOF-MS
- Qualifizierung und Quantifizierung
- (Non) Targeted Peak Finding
- Omnipotent
- Fast
- Massengenauigkeit, Messmodi
- Summenformel, Software

Quad
und TOF
= QTOF



Unterschiedliche Messmodi in Kombination mit generischen LC-Methoden

- Tof-IDA
- Tof-HMRM
- Tof-SWATH

The image displays three overlapping screenshots of an acquisition method configuration interface, likely from a chromatography software package. Each screenshot shows a different configuration for the MS (Mass Spectrometry) section.

- Top Screenshot:** Shows the 'Advanced MS' tab. The 'Experiment' is set to 2. The 'Scan type' is 'Product Ion'. The 'Product Of' is 'IDA'. The 'TOF Masses (Da)' range is set from 50 to 1000. The 'IDA Experiment' checkbox is checked.
- Middle Screenshot:** Shows the 'Advanced MS' tab. The 'Experiment' is set to 2. The 'Scan type' is 'Product Ion'. The 'Product Of' is '312.2 (Da)'. The 'TOF Masses (Da)' range is set from 50 to 1000. The 'IDA Experiment' checkbox is unchecked.
- Bottom Screenshot:** Shows the 'Advanced MS' tab. The 'Experiment' is set to 1. The 'Scan type' is 'TOF MS'. The 'Accumulation time' is 0.050003 (secs). The 'TOF Masses (Da)' range is set from 100 to 1000. The 'Polarity' is set to 'Positive'. The 'Period' is set to 12.009 (mins), 'Cycles' to 655, and 'Delay Time' to 20 (secs). The 'Cycle time' is 1.1001 (secs).

Auswertung mittels PeakView-Software

Übereinstimmung mit Datenbank-Eintrag

The screenshot displays the PeakView software interface with several key components:

- Chromatograms:**
 - XIC (Total Ion Chromatogram):** Shows a single prominent peak at 8.12 minutes.
 - Leerprobe (Blank Sample):** Shows a noisy baseline with several small peaks labeled at 7.64, 7.92, 8.42, and 8.46 minutes.
- MasterView Table:** A table listing identified compounds. The first entry is highlighted:

#	Name	Formula	Mass (Da)	Adduct	Extraction Mass (Da)	Found At Mass (Da)	Error (ppm)	Expected RT (min)	Found At RT (min)	RT % Error	Isotope Ratio Difference (%)	Intensity	Library Hit	Library Score
8	5F-ADB	C20H28FN3O3	377.21147	+H	378.21875	378.21921	1.2	8.1	8.12	0.21	1.2	416762	5F-ADB	99.5
- Annotations:**
 - Eingetragene Substanznamen:** Points to the 'Name' column in the table.
 - Eingetragene Summenformeln:** Points to the 'Formula' column in the table.
 - Übereinstimmung mit Datenbank-Eintrag:** Points to the 'Library Hit' and 'Library Score' columns.
- Mass Spectra:**
 - MS-Spektrum:** Shows the mass spectrum of the sample peak at 8.12 min, with a base peak at m/z 378.2192 and another significant peak at 379.2221.
 - MS/MS-Spektrum:** Shows the fragmentation pattern of the sample peak, with a base peak at m/z 233.1083 and other fragments at 69.0731, 145.0398, 177.0461, 213.1021, 318.1977, and 378.2197.
 - Vergleichsspektrum:** Shows the library reference mass spectrum for 5F-ADB, which closely matches the sample MS/MS spectrum.

Eingetragene Summenformeln

Wirkstoffscreening im Blut - Kalibrierung

Calculations | Library Searching | Columns | Confidence Settings | User Settings

Mass Error
Mass Error (ppm)

Retention Time
% Error

Isotope
Isotope Ratio
% Difference

Library Hit
Library Score

Formula Finder
Formula Finder
Score

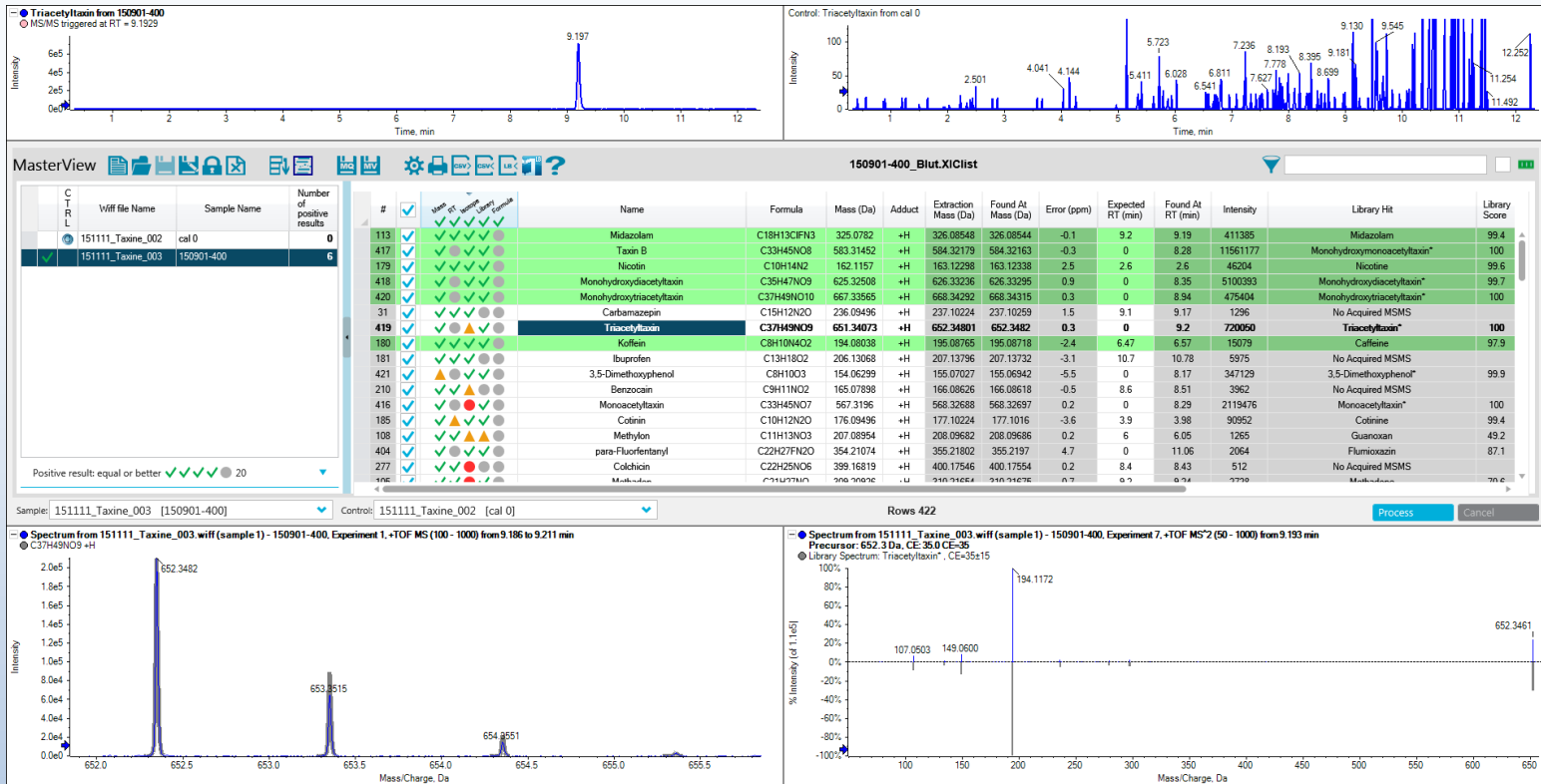
Use RT Error % for RT Score
 Use RT Error Delta for RT Score

Library Hit

Library Hit	Library Score
zxyethylamphetamine	99.4
Zolpidem	99.9
amazepine	99.4
zylecgonine	98.8
JMA-D5	100
triptiline	99.1
lidine	99
azepam	99.3
rtlidine	96.6
nitrazepam	99.3
tazapine	100
MPPH	98.6
Morphine	99.1
alopram	99.4
sergide	97.6
alafaxine	99.6
nazepam	99.8
roxetine	95.5
tiformin	98.3
etapine	99.5
azepam	99.7
Doxepin	97.5
Oxazepam	98
Nordazepam	98.9
Alprazolam	99
Tramadol	99.8
Fentanyl	99.8
Methadone	91.2
Doxylamin	100

Sample: 170214_XY_WS_004 [Cal 1 WS1] Control: 170214_XY_WS_003 [Cal 0] Rows 507

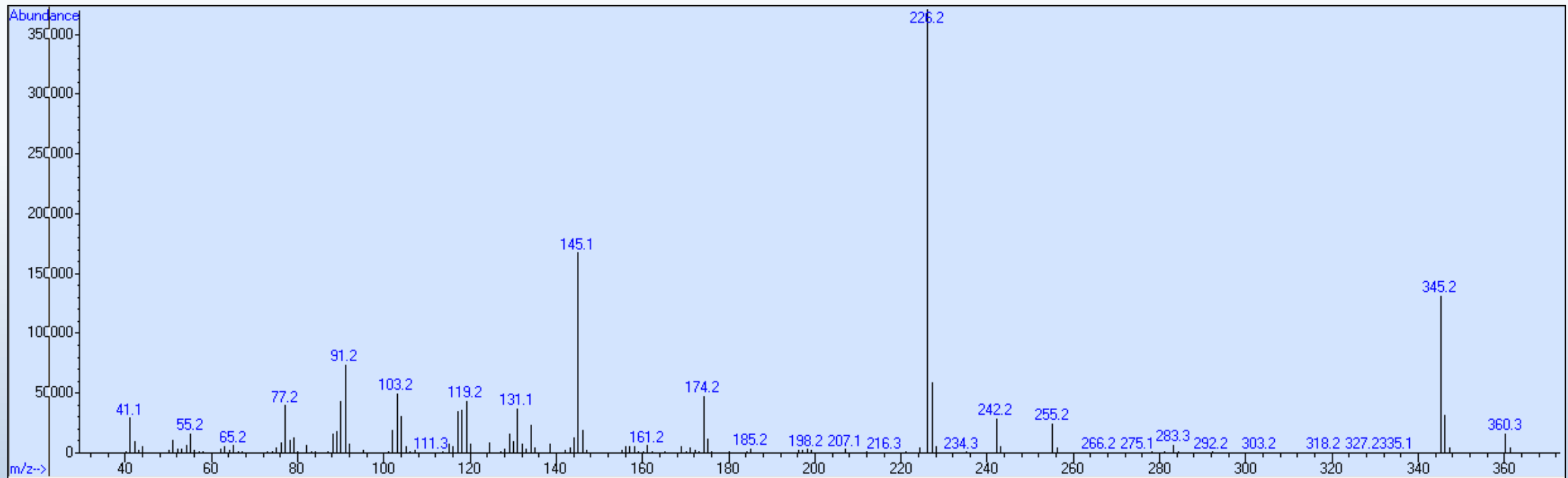
Eiben-Intoxikation



- Nachweis von Taxinen in einer postmortalen Blutprobe
- Aufnahme eigener Datenbank-Spektren
- Abgleich mit Literaturdaten
- Interlabor-Vergleich mit FTC Wien

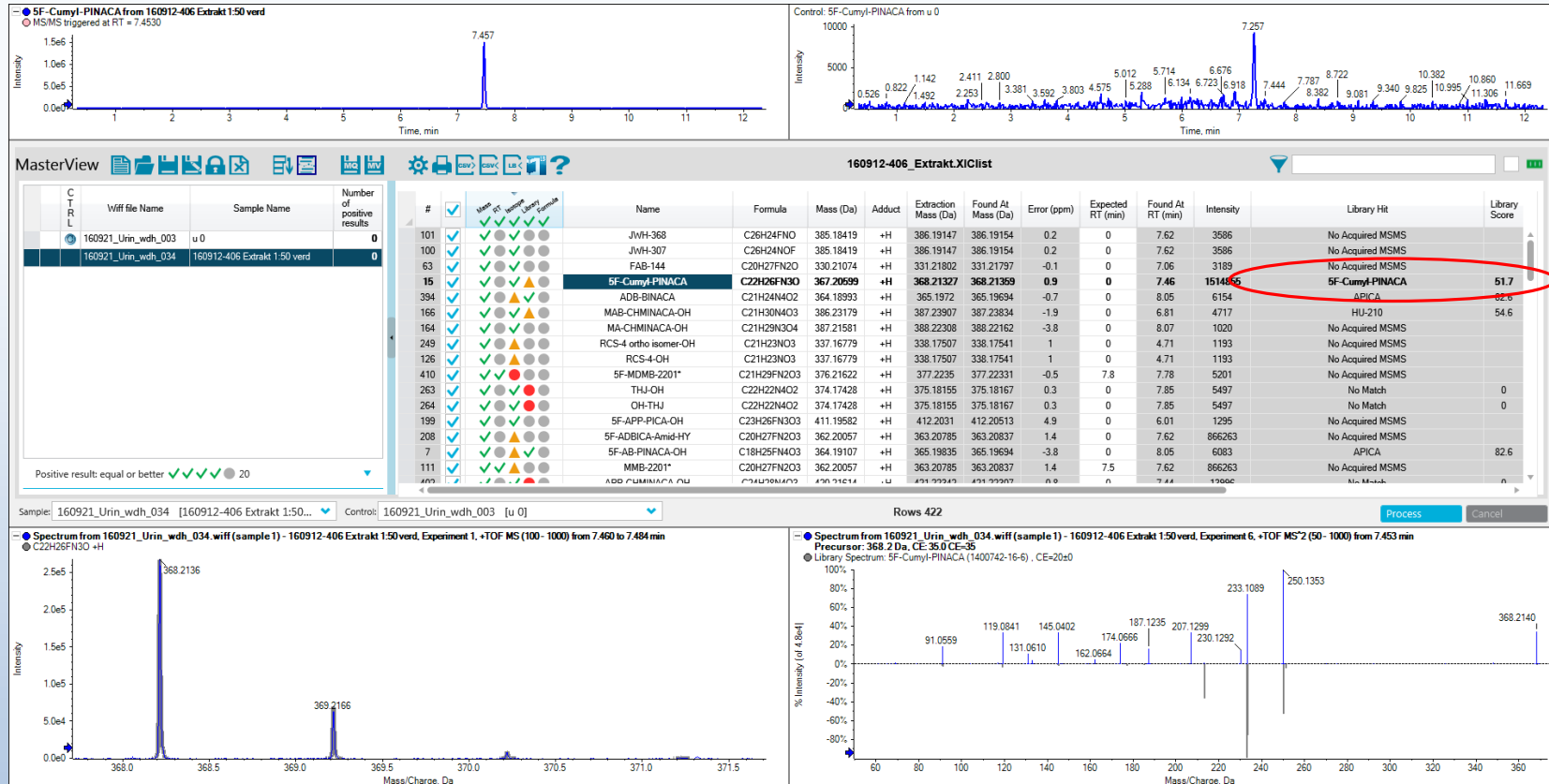
Monohydroxytaxin, Monoacetyltaxin, Monohydroxymonoacetyltaxin, Triacetyltaxin, Monohydroxydiacetyltaxin, Monohydroxytriacetyltaxin, 3,5-Dimethoxyphenol

Extrakt aus einer Räuchermischung



EI-Spektrum der unbekanntes Verbindung

Untersuchung des Extrakts mittels Spice-XIC-Liste



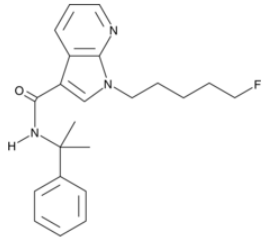
- „Treffer“ bei 5F-Cumyl-PINACA
- Cave: Library Score nur 51.7%
- Literaturrecherche
- Summenformel $C_{22}H_{26}FN_3O$

Möglicherweise 5F-Cumyl-P7AICA?

5-fluoro CUMYL-P7AICA

Item № 18370

Purity ≥98%



Formulation A neat solid

SIZE	PRICE	QUANTITY	SUBTOTAL
1 mg	See a distributor in your region for pricing		
5 mg	See a distributor in your region for pricing		

BULK & CUSTOM **GO TO CART**

CART TOTAL € 0,00

DESCRIPTION

Features

- This product has been manufactured and tested to meet ISO17025:2005 and Guide 34:2009 guidelines
- This product is intended to be used as an analytical reference standard
- Bulk material is available for academic research at qualified institutions; please contact our sales department for pricing

Synonyms

- CUMYL-5-fluoro-P7AICA

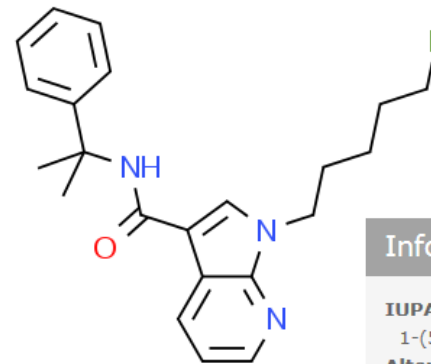
TECHNICAL INFORMATION

Formal Name	1-(5-fluoropentyl)-N-(2-phenylpropan-2-yl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carboxamide
Synonyms	CUMYL-5-fluoro-P7AICA
Molecular Formula	C ₂₂ H ₂₆ FN ₃ O
Formula Weight	367.5



HOME | ALL STRUCTURES | ADMINISTRATION

1-(5-Fluoropentyl)-N-(2-phenylpropan-2-yl)-7-azaindole-3-carboxamide



Formula: C₂₂H₂₆FN₃O
Average mass: 367.459747314 Da

Information

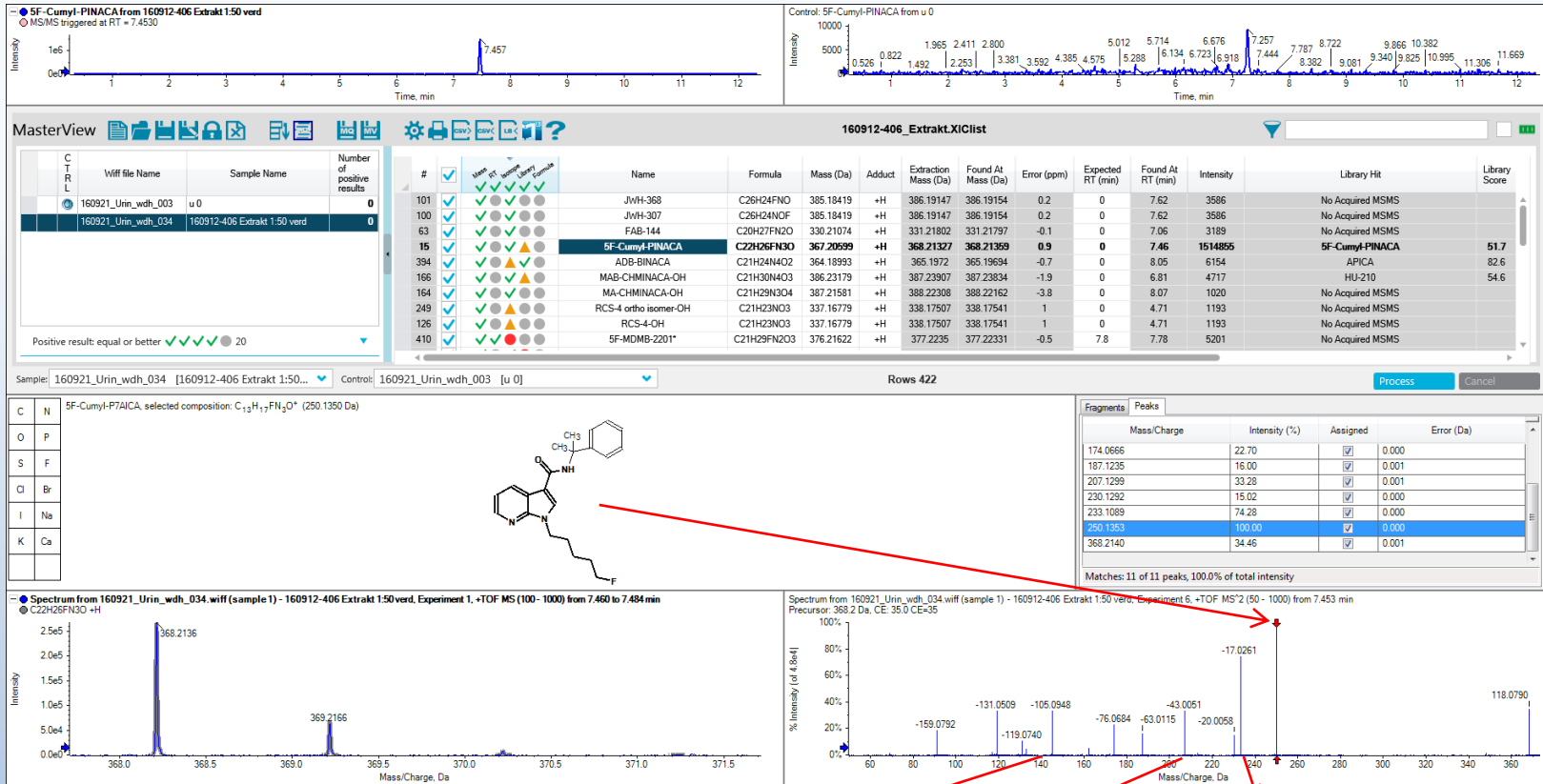
IUPAC name:

1-(5-Fluoropentyl)-N-(2-phenylpropan-2-yl)-7-azaindole-3-carboxamide

Alternative names:

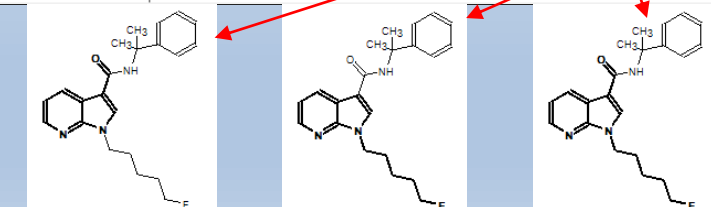
CUMYL-5F-P7AICA, SGT-263

5F-Cumyl-P7AICA mit Mol-File und Fragments-Pane



- Starker Hinweis auf 5F-Cumyl-P7AICA in der untersuchten Räuchemischung
- Identifizierung auch ohne Referenzstandard möglich

Matches: 11 of 11 peaks

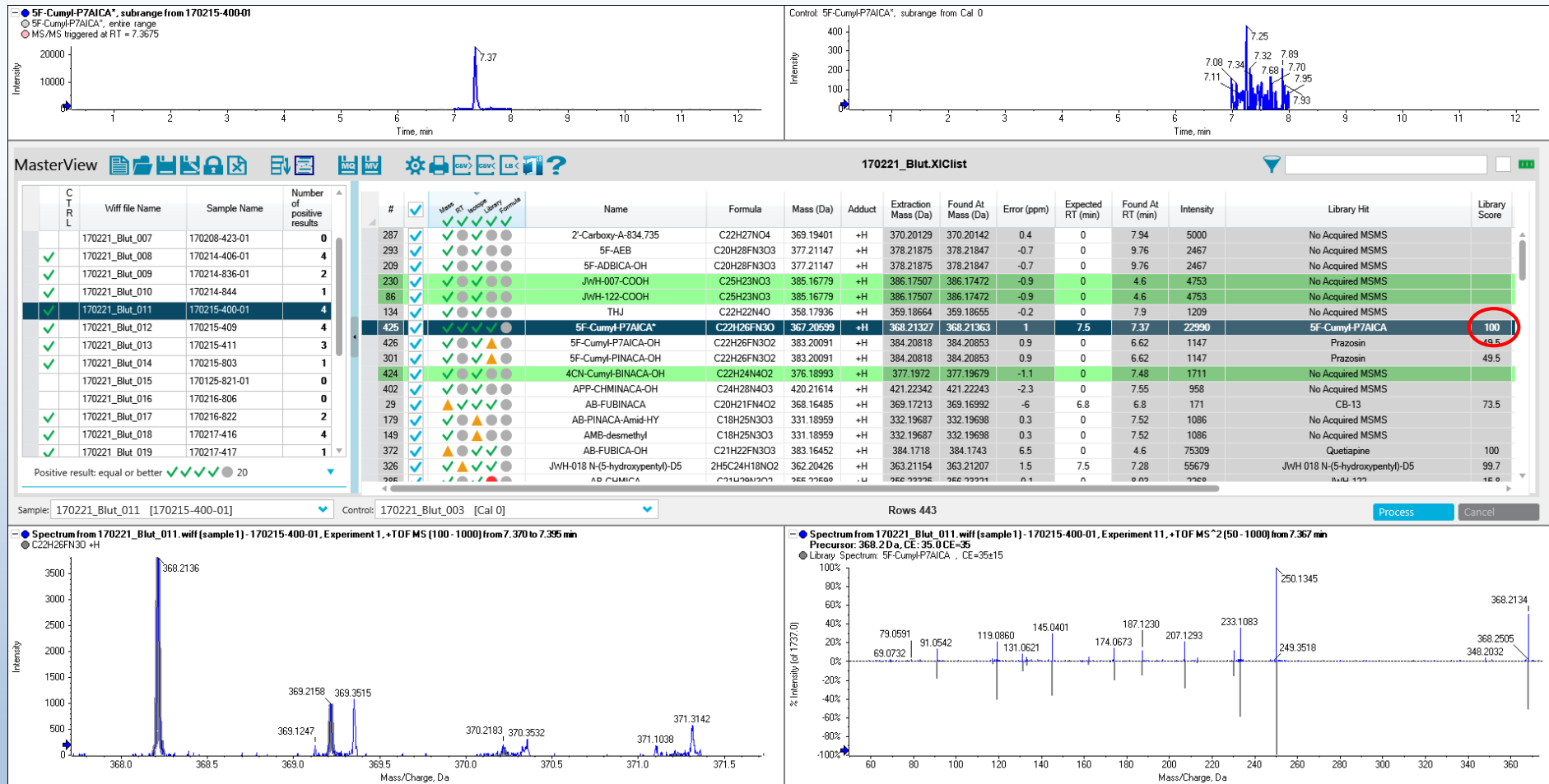


m/z 145.0402

m/z 207.1299

m/z 233.1089

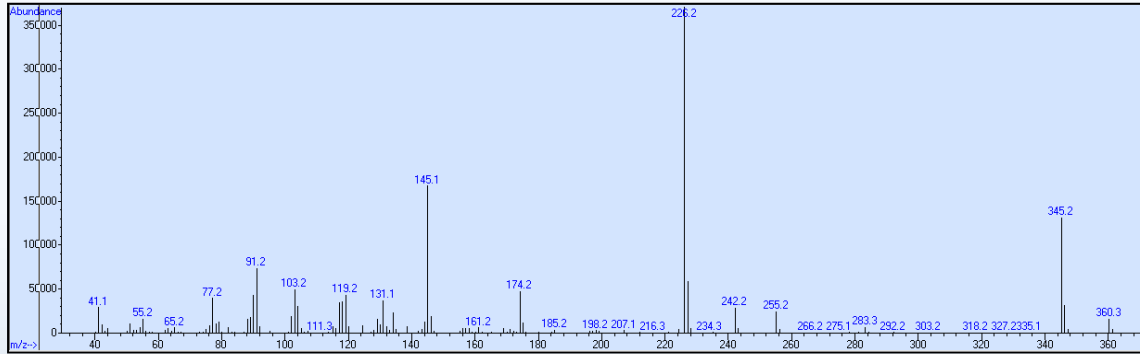
Positive Blutprobe auf 5F-Cumyl-P7AICA



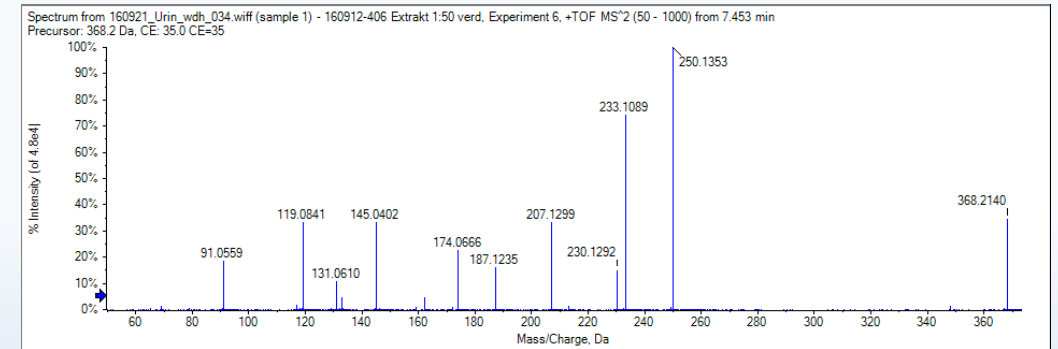
Library Score:
100%

Aufgenommenes Datenbank-Spektrum aus Referenzsubstanz

Übereinstimmung mit EI-Spektrum?

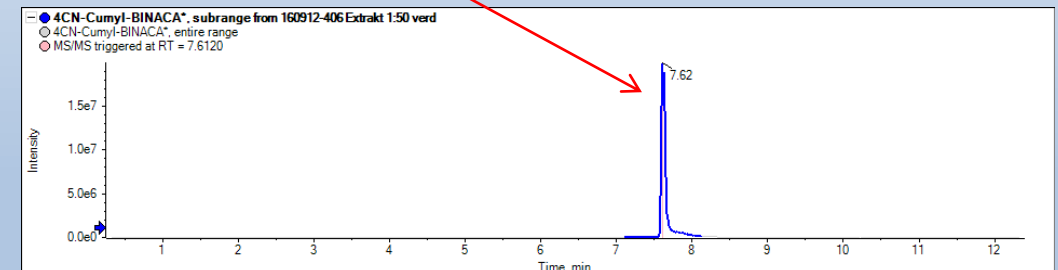


EI-Spektrum (GC-MS)



MS/MS-Spektrum (LC-QTOF-MS)

- Zusätzliche Durchführung eines Non-Targeted Peak-Findings
- Weiterer Peak mit der Summenformel $C_{22}H_{24}N_4O$
- Literaturrecherche



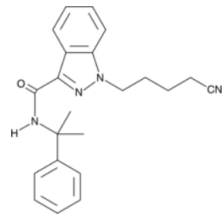
Möglicherweise 4CN-Cumyl-BINACA?

4-cyano CUMYL-BUTINACA

Item № 20194

CAS № 1631074-54-8

Purity ≥ 98%



Formulation A crystalline solid

SIZE	PRICE	QUANTITY	SUBTOTAL
1 mg	See a distributor in your region for pricing		
5 mg	See a distributor in your region for pricing		

BULK & CUSTOM

CART TOTAL € 0,00

DESCRIPTION

Synonyms

- 4-CN CUMYL-BINACA
- CUMYL-4CN-BINACA
- CUMYL-CB-PINACA
- CUMYL-CYBINACA
- SGT-78

TECHNICAL INFORMATION

Formal Name	1-(4-cyanobutyl)-N-(1-methyl-1-phenylethyl)-1H-indazole-3-carboxamide
CAS Number	1631074-54-8
Synonyms	4-CN CUMYL-BINACA CUMYL-4CN-BINACA CUMYL-CB-PINACA CUMYL-CYBINACA SGT-78
Molecular Formula	C ₂₂ H ₂₄ N ₄ O
Formula Weight	360.5

ANALYTICAL REPORT¹

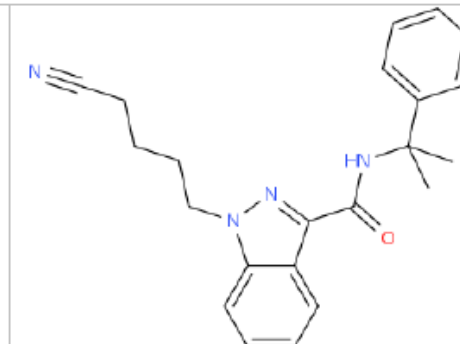
CUMYL-4CN-BINACA (C22H24N4O)

1-(4-cyanobutyl)-N-(1-methyl-1-phenylethyl)-1H-indazole-3-carboxamide

Remark – other NPS detected: **none**

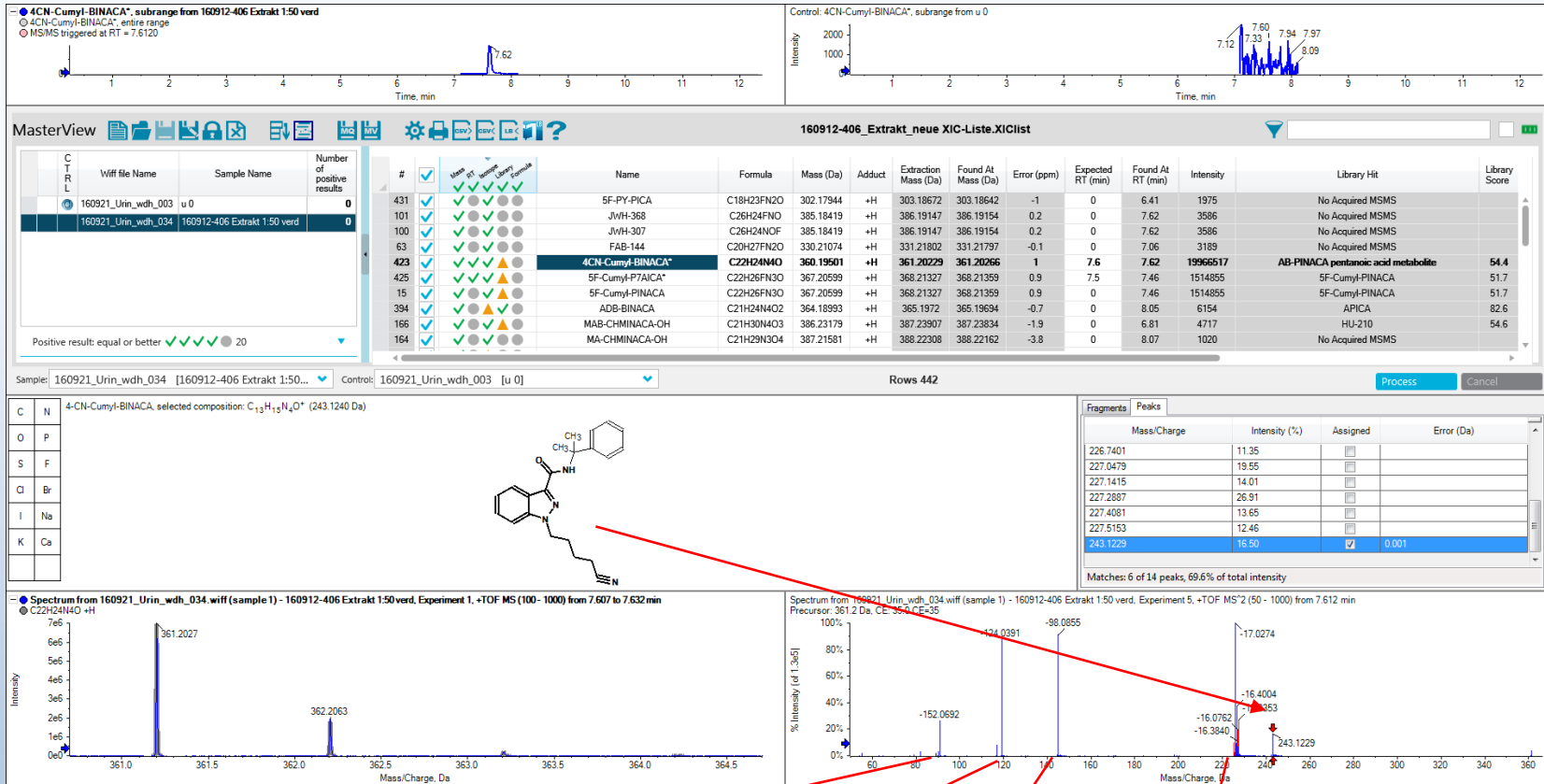
Sample ID:	1666-16
Sample description:	powder - white-off
Sample type:	test purchase /RESPONSE -purchasing
Date of sample receipt (M/D/Y):	10/4/2016
Date of entry (M/D/Y) into NFL database:	12:00:00 AM
Report updates (if any) will be published here:	http://www.policija.si/apps/nfl_response_web/seznam.php

Substance identified - structure² (base form)



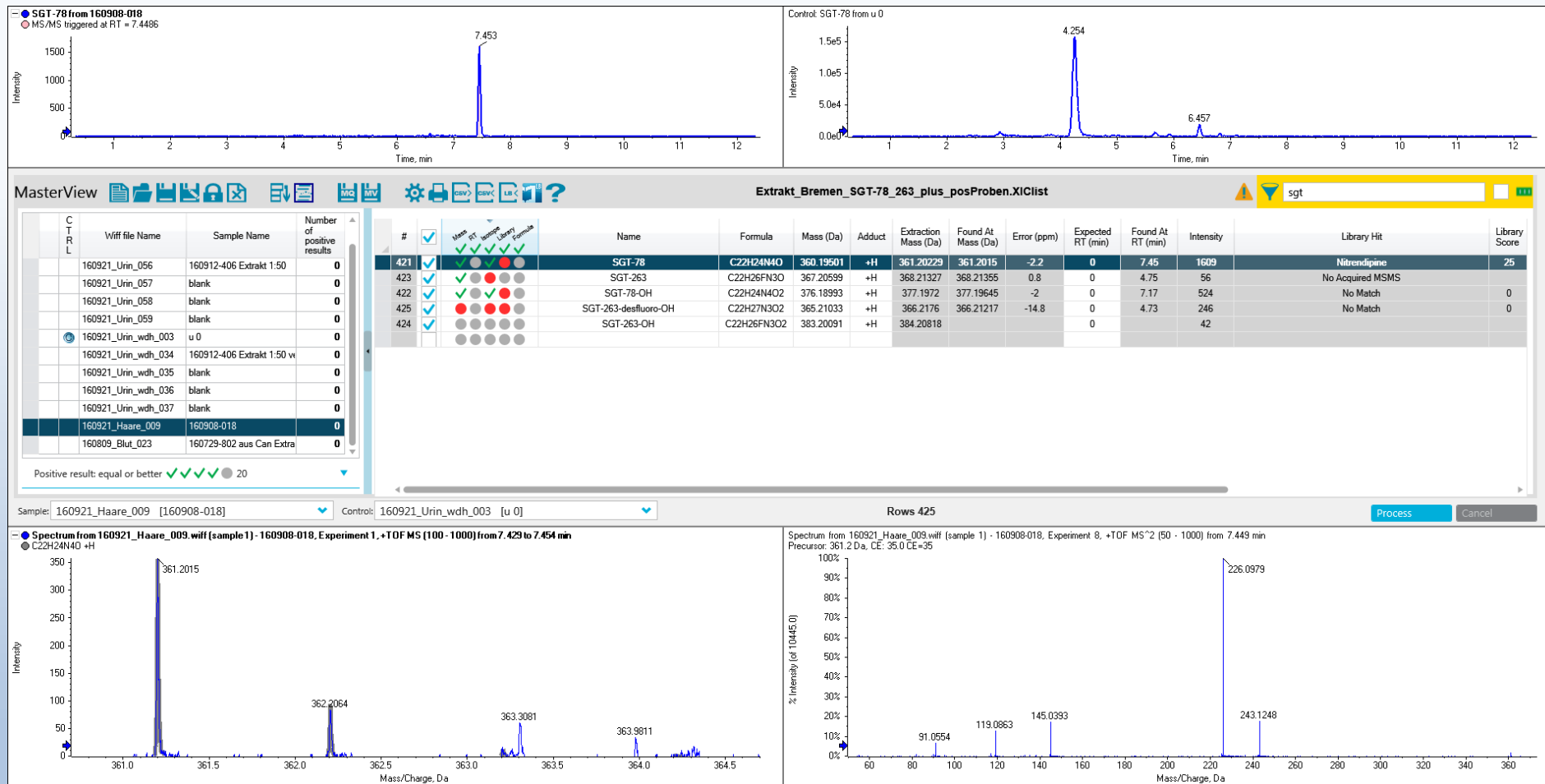
Systematic name	1-(4-cyanobutyl)-N-(1-methyl-1-phenylethyl)-1H-indazole-3-carboxamide
Other names	SGT-78, CUMYL-CYBINACA; Cumyl-CB-PINACA
Formula (per base form)	C22H24N4O

4CN-Cumyl-BINACA mit Mol-File und Fragments-Pane



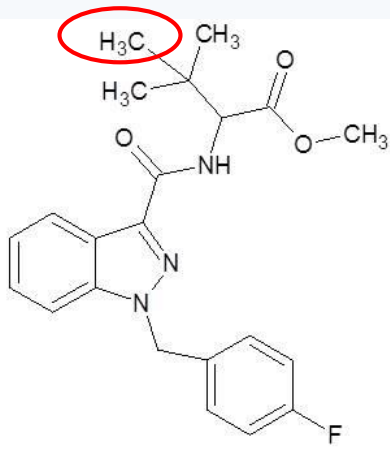
- Starker Hinweis auf 4CN-Cumyl-BINACA in der Räuchermischung
- MS/MS-Spektrum passend zum EI-Spektrum
- Aufnahme beider Substanzen in XIC-Liste für synthetische Cannabinoide

Positive Haarprobe auf 4CN-Cumyl-BINACA (SGT-78)

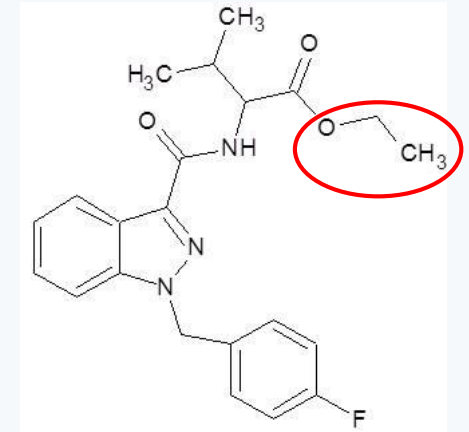


Positive Blutprobe auf 4CN-Cumyl-BINACA (SGT-78)

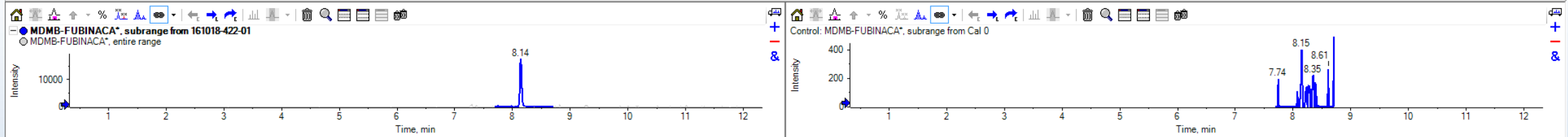




“No Acquired MSMS”



MDMB- oder EMB-FUBINACA?

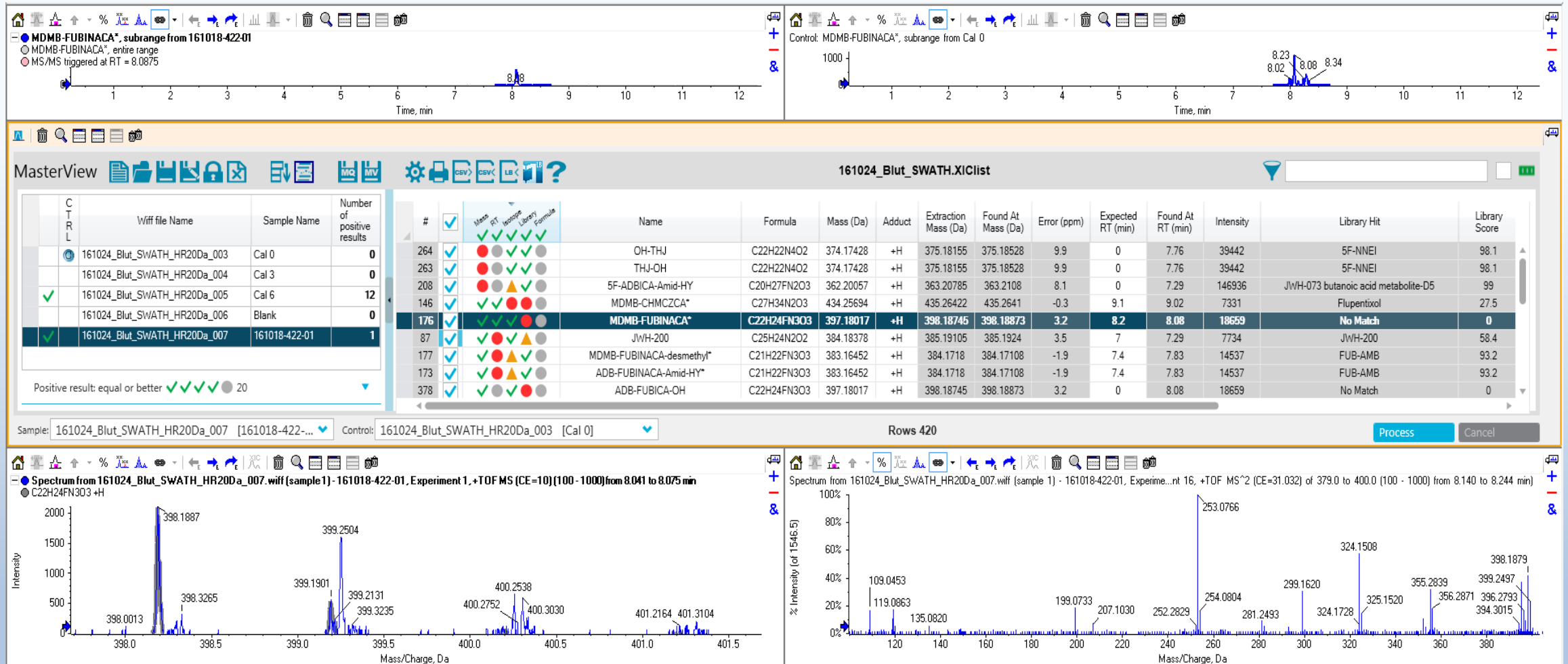


MasterView 161024_Blut.XIClist

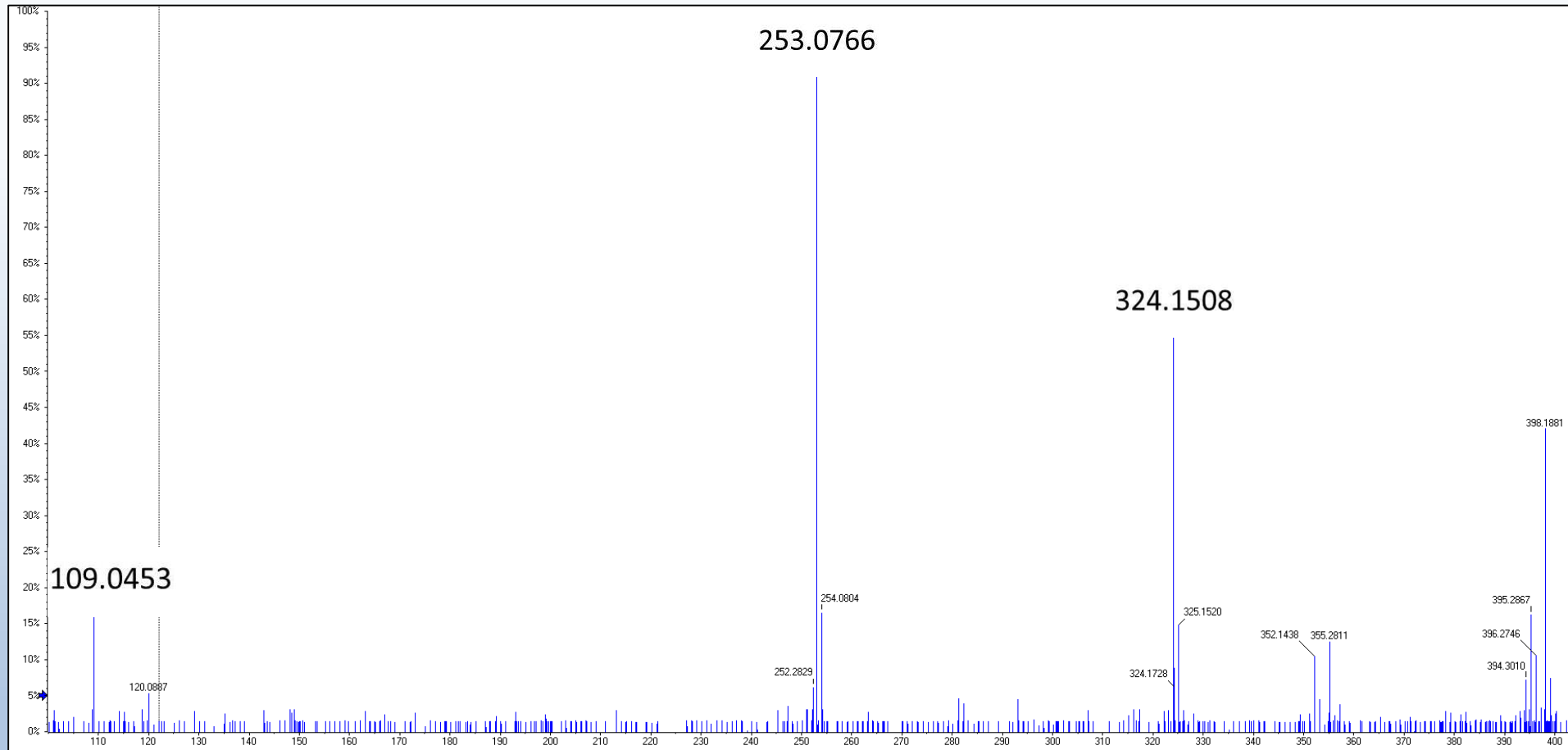
CTRL	Wiff file Name	Sample Name	Number of positive results	#	Mass	RT	Isotope	Library	Formula	Name	Formula	Mass (Da)	Adduct	Extraction Mass (Da)	Found At Mass (Da)	Error (ppm)	Expected RT (min)	Found At RT (min)	Intensity	Library Hit	Library Score
	161024_Blut_003	Cal 0	0	17	✓	✓	✓	✓	C24H23FN2O	5F-NNEI	C24H23FN2O	374.17944	++	375.18672	375.18652	-0.5	0	7.82	37813	5F-NNEI	100
✓	161024_Blut_004	Cal 3	3	378	✓	✓	✓	✓	C22H24FN3O3	ADB-FUBICA-OH	C22H24FN3O3	397.18017	++	398.18745	398.18751	0.2	0	8.14	17606	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_005	Cal 6	19	204	✓	✓	✓	✓	C22H24FN3O3	5F-APP-PINACA-Amid-HY	C22H24FN3O3	397.18017	++	398.18745	398.18751	0.2	0	8.14	17606	No Acquired MSMS	
	161024_Blut_006	Blank	0	357	✓	✓	✓	✓	C22H30N2O4	MO-CHMINACA	C22H30N2O4	386.22056	++	387.22783	387.22768	-0.4	0	8.96	14649	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_007	161018-422-01	11	176	✓	✓	✓	✓	C22H24FN3O3	MDMB-FUBINACA*	C22H24FN3O3	397.18017	++	398.18745	398.18751	0.2	8.2	8.14	17606	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_008	161018-809	1	48	✓	✓	✓	✓	C24H20N2O	AM-2232	C24H20N2O	352.15756	++	353.16484	353.16488	0.1	0	7.56	3255	Trifluoromazine	85.2
	161024_Blut_009	161018-833	0	372	✓	✓	✓	✓	C21H22FN3O3	AB-FUBICA-OH	C21H22FN3O3	383.16452	++	384.1718	384.17153	-0.7	0	7.89	19012	No Acquired MSMS	
	161024_Blut_010	161018-837	0	170	✓	✓	✓	✓	C20H20FN3O3	AB-FUBINACA-Amid-HY*	C20H20FN3O3	369.14887	++	370.15615	370.15643	0.8	7.1	7.03	2308	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_011	161018-844	3	159	✓	✓	✓	✓	C20H20FN3O3	FUB-AMB-desmethyl*	C20H20FN3O3	369.14887	++	370.15615	370.15643	0.8	7.1	7.03	2308	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_012	161018-854	5	247	✓	✓	✓	✓	C23H21FN2O3	5F-PB-22-OH	C23H21FN2O3	392.15362	++	393.1609	393.16171	2.1	0	7.84	840	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_013	161020-812	0	254	✓	✓	✓	✓	C23H21FN2O3	5F-SDB-005-OH	C23H21FN2O3	392.15362	++	393.1609	393.16171	2.1	0	7.84	840	No Acquired MSMS	
✓	161024_Blut_014	161021-811	1	67	✓	✓	✓	✓	C21H22FN3O3	FUB-AMB*	C21H22FN3O3	383.16452	++	384.1718	384.17153	-0.7	8	7.89	19012	No Acquired MSMS	
				326	✓	✓	✓	✓	2H5C24H18NO2	JWH-018 N-(5-hydroxypentyl)-D5	2H5C24H18NO2	362.20426	++	363.21154	363.21119	-1	7.5	7.33	127881	JWH 018 N-(5-hydroxypentyl)-D5	99.8
				385	✓	✓	✓	✓	C21H29N3O2	AB-CHMICA	C21H29N3O2	355.22598	++	356.23325	356.23296	-0.8	0	8.12	6763	No Acquired MSMS	

Sample: 161024_Blut_007 [161018-422-01] Control: 161024_Blut_003 [Cal 0] Rows 420

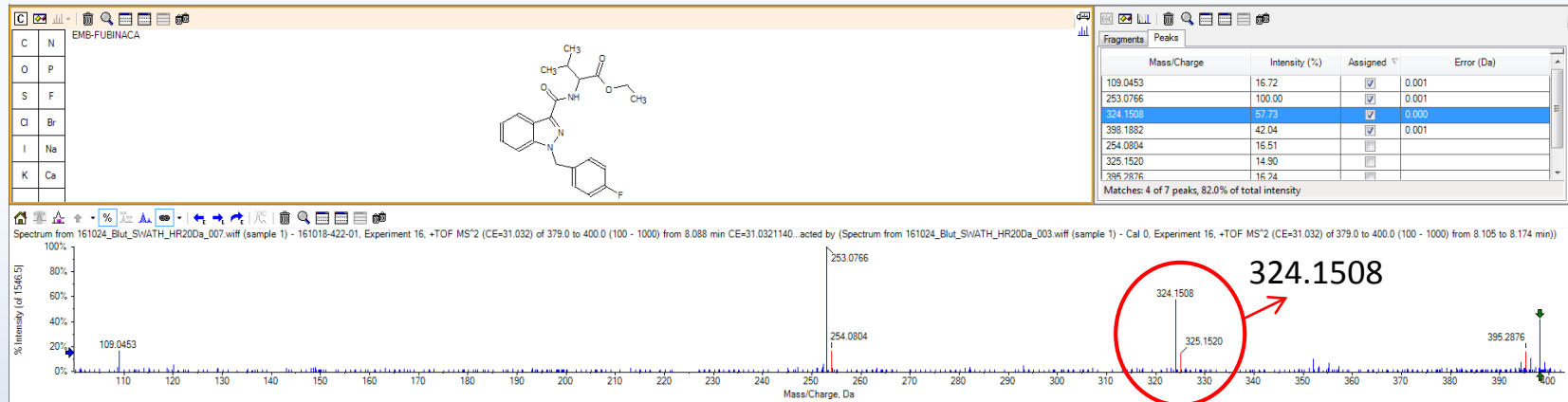
Messung der Blutprobe mittels SWATH Acquisition



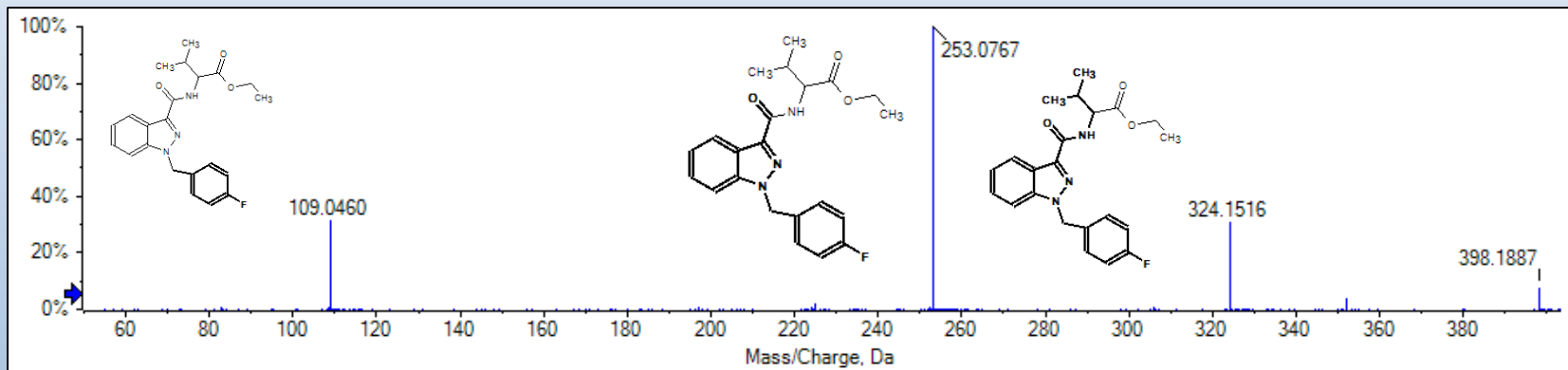
MS/MS-Spektrum nach 'Background Subtraction'



EMB-FUBINACA



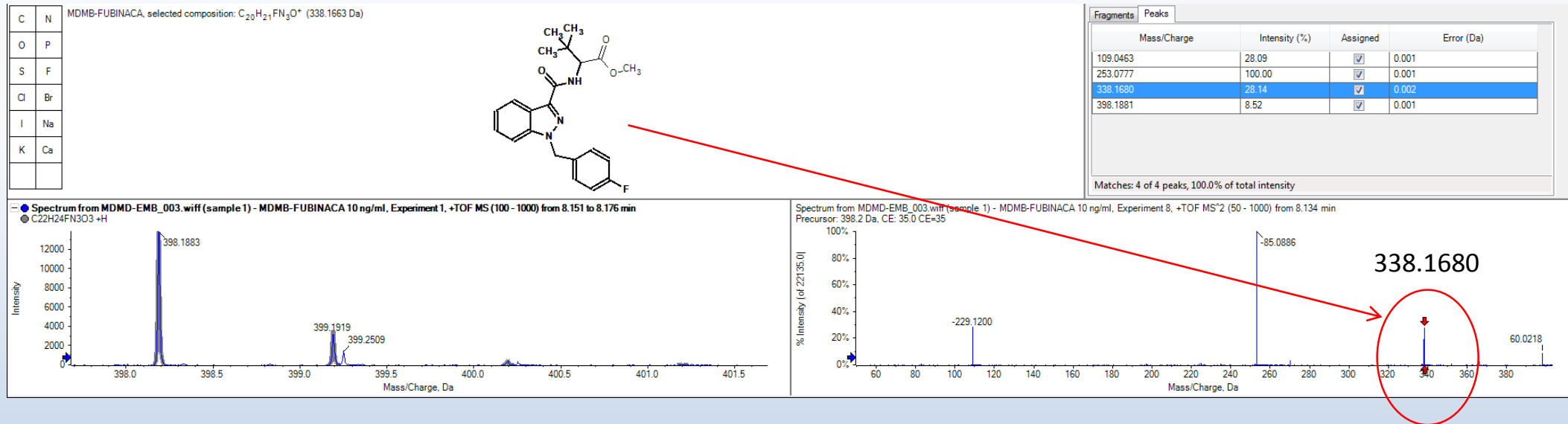
MS/MS-Spektrum aus der Blutprobe



MS/MS-Spektrum von EMB-FUBINACA (Referenzstandard)

Nachweis von EMB-FUBINACA in der untersuchten Blutprobe

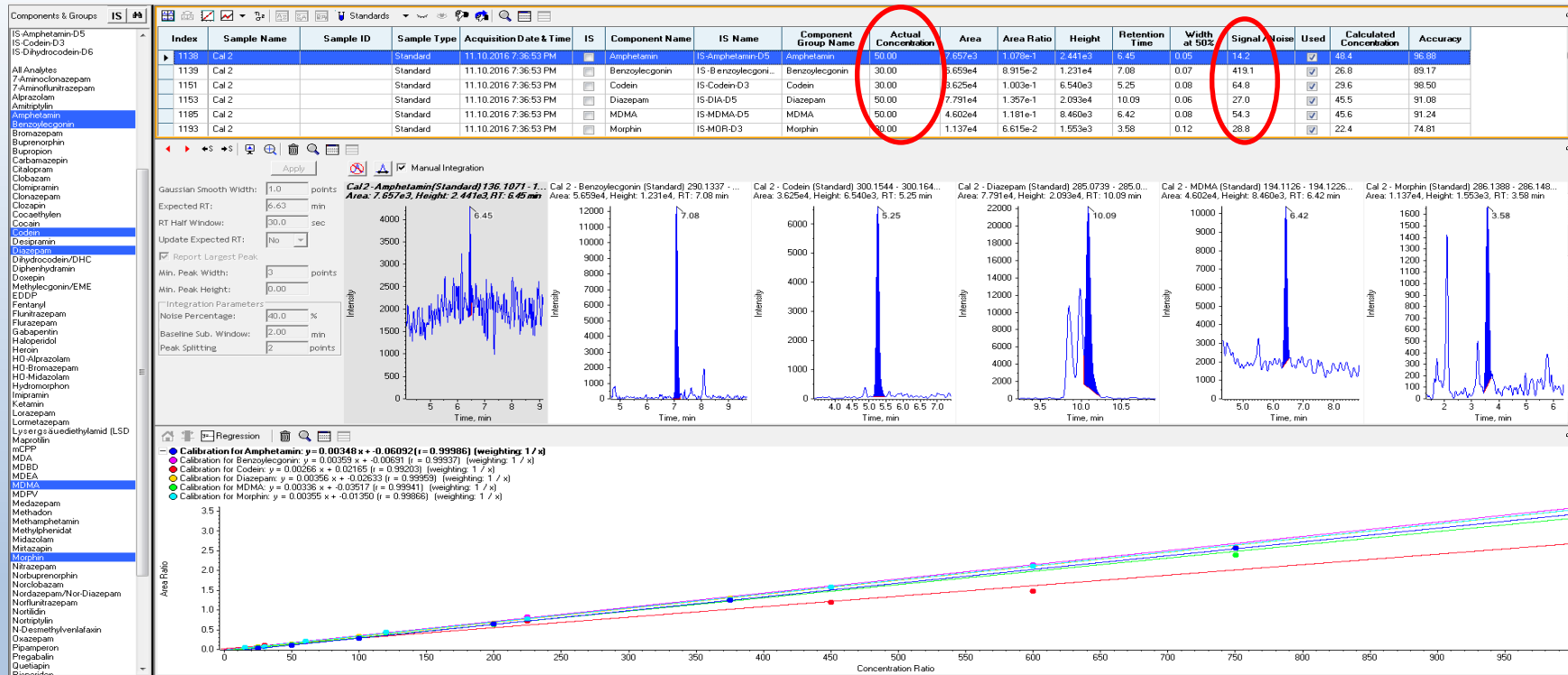
MDMB-FUBINACA



MS- und MS/MS-Spektrum von MDMB-FUBINACA (Referenzstandard)

Quantifizierung über akkurate Masse

- Kalibrierung ausgewählter Analyten im Urin über den relevanten Bereich (Bestimmungsgrenze)



Amphetamin (50 ng/ml)
Benzoyllecgonin (30 ng/ml)
Codein (30 ng/ml)
Diazepam (50 ng/ml)
MDMA (50 ng/ml)
Morphin (30 ng/ml)

Ringversuch SFD 3/16 Urin

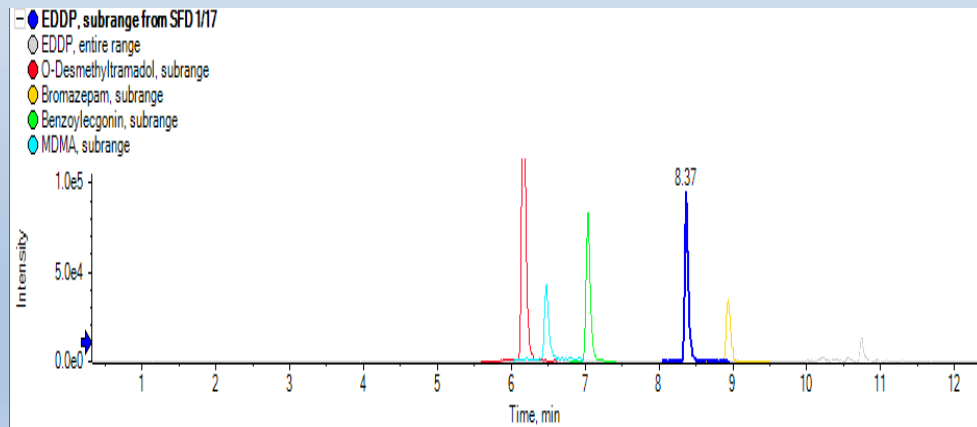
- Quantifizierung mittels MultiQuant-Software
- 7-Punkt-Kalibrierung
 - Amphetamin 25 – 1000 ng/ml
 - Benzoylecgonin 15 – 600 ng/ml
 - Dihydrocodein 15 – 600 ng/ml

Nachgewiesener Wirkstoff	Messwert (LC-QTOF-MS) [ng/ml]	Messwert (LC-MS/MS) [ng/ml]	Zielwert [ng/ml]
Amphetamin	298	310	309
Benzoylecgonin	312	335	267
Dihydrocodein	159	147	148

Ringversuch SFD 1/17 Urin

- Semiquantitative Bestimmung mittels PeakView-Software

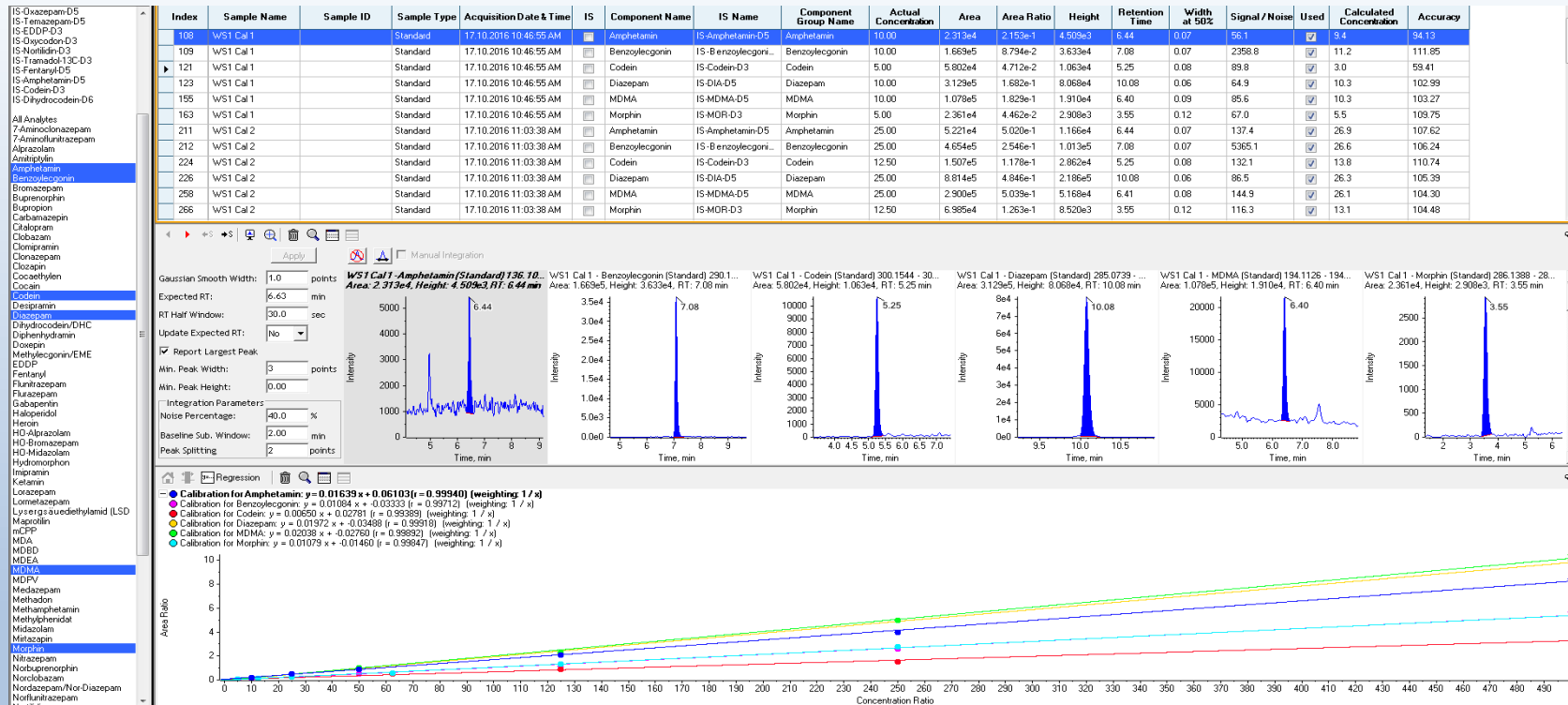
#	<input checked="" type="checkbox"/>	Mass RT Isotope Library Formula	Name	Formula	Mass (Da)	Adduct	Extraction Mass (Da)	Found At Mass (Da)	Error (ppm)	Expected RT (min)	Found At RT (min)	Known Concentrat ion	Calculated Concentrat ion	Width (Da)	Library Hit	Library Score
83	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	IS-MDMA-D5	2H5C11H10NO2	198.14166	+H	199.14894	199.14896	0.1	6.49	6.46	200	135.5406	0.01	MDMA-D5	98.9
85	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	IS-MPPH	C16H14N2O2	266.10553	+H	267.1128	267.11258	-0.8	9.47	9.42	500	444.6048	0.01	MPPH	97.8
202	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	O-Desmethyltramadol	C15H23NO2	249.17288	+H	250.18016	250.18012	-0.1	6.1	6.16	200	379.1764	0.01	N-Desmethyl-cis-tramadol	100
24	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	Bromazepam	C14H10BrN3O	315.00072	+H	316.008	316.00804	0.1	9	8.94	200	323.8499	0.01	Bromazepam	100
20	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓	Benzoylcegonin	C16H19NO4	289.13141	+H	290.13868	290.13882	0.5	7.1	7.04	120	152.1722	0.01	No Acquired MSMS	
81	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	IS-Benzoylcegonin-D3	2H3C16H16NO4	292.15024	+H	293.15752	293.15777	0.9	7.1	7.04	200	202.4425	0.01	D3-Benzoylcegonine	99.4
84	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	IS-MOR-D3	2H3C17H16NO3	288.15532	+H	289.1626	289.16282	0.8	3.8	3.76	200	192.5621	0.01	D3-Morphine	98.5
99	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓✓	MDMA	C11H15NO2	193.11028	+H	194.11756	194.11731	-1.3	6.5	6.47	200	129.7674	0.01	MDMA	99.8
180	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓	Koffein	C8H10N4O2	194.08038	+H	195.08765	195.08757	-0.4	6.47	6.43			0.01	Caffeine	99.6
74	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓	Heroin	C21H23NO5	369.15762	+H	370.1649	370.16513	0.6	7.3	7.24			0.01	Heroin	64.8
64	<input checked="" type="checkbox"/>	✓✓✓✓	EDDP	C20H23N	277.18305	+H	278.19033	278.19026	-0.2	8.5	8.37	200	121.4043	0.01	No Acquired MSMS	



Nachgewiesener Wirkstoff	Messwert (LC-QTOF-MS) [ng/ml]	Messwert (LC-MS/MS) [ng/ml]
MDMA	129	191
Benzoylcegonin	152	198
EDDP	121	106
Bromazepam	323	341
O-Desmethyltramadol	379	451

Quantifizierung über akkurate Masse

- Kalibrierung ausgewählter Analyten im Blut über den relevanten Bereich (Bestimmungsgrenze)



- Amphetamin (10 ng/ml)
- Benzoyllecgonin (10 ng/ml)
- Codein (5 ng/ml)
- Diazepam (10 ng/ml)
- MDMA (10 ng/ml)
- Morphin (5 ng/ml)

Ringversuch BTMF 3/16 Blut

Nachgewiesener Wirkstoff	Messwert (LC-QTOF-MS) [ng/ml]	Messwert (LC-MS/MS) [ng/ml]	Zielwert [ng/ml]
Amphetamin	76.9	65.7	68.9
Methamphetamin	149	183	198
MDMA	63	64.5	79.3
Benzoylecgonin	245	243	278
Codein	183	186	186
Morphin	30.7	27.2	31.3

„Alte psychoaktive Stoffe“ Narcobarbital

10 Bayern & Region

Telefon: (089) 53 06-424
bayern@merkur-online.de
Telefax: (089) 53 06-86 54

War es doch ein Mord?

Ehefrau erwürgt: Womöglich wurde die 39-Jährige vor ihrem Tod narkotisiert

Traunstein – Im Prozess um den Totschlag an einer dreifachen Mutter und die Schändung der Leiche bahnt sich eine Wende an. Überraschend sagte gestern der medizinische Gutachter vor dem Traunsteiner Landgericht aus, dass bei der Obduktion im Körper des Opfers deutliche Spuren eines Narkosemittels gefunden wurden.



Der Angeklagte

DPA

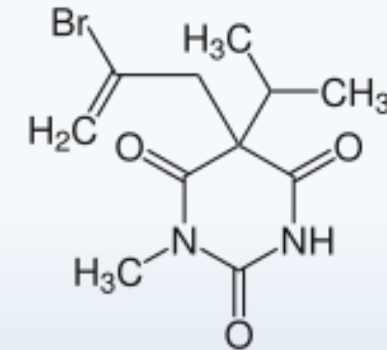
Der Ehemann der Getöteten hatte am ersten Verhandlungstag ausgesagt, der 39-Jährigen die Substanz erst nach der Tötung eingeflößt zu haben. Womöglich stimmt diese Version nicht. Denn das Mittel hätte sich dann nicht mehr in dem Maße im Körper ausbreiten können. Der 53-Jährige ist angeklagt, seine

Frau im Sommer 2013 in Neumarkt-Sankt Veit nahe Mühlendorf a. Inn im Streit um die Trennung erwürgt zu haben. Die Staatsanwaltschaft äußerte sich nicht dazu, ob sie aufgrund der neuen Indizien an ihrer Anklage wegen Totschlags festhält oder womög-

lich auf Mord umschwenkt. Die Konzentration des Narkosemittels im Blut des Opfers könnte nach Angaben des Gutachters den Schluss zulassen, dass der mutmaßliche Täter der Frau die Substanz bereits vor deren Tod verabreichte. Die 39-Jährige wäre dann in schon bewusstlos im Zustand erwürgt worden. Daraus könnte sich womöglich ein Vorsatz für die Tat ableiten. „Das würde den gesamten Tathergang ändern“, sagte der Vorsitzende Richter Erich Fuchs zu der neuen Entwicklung.

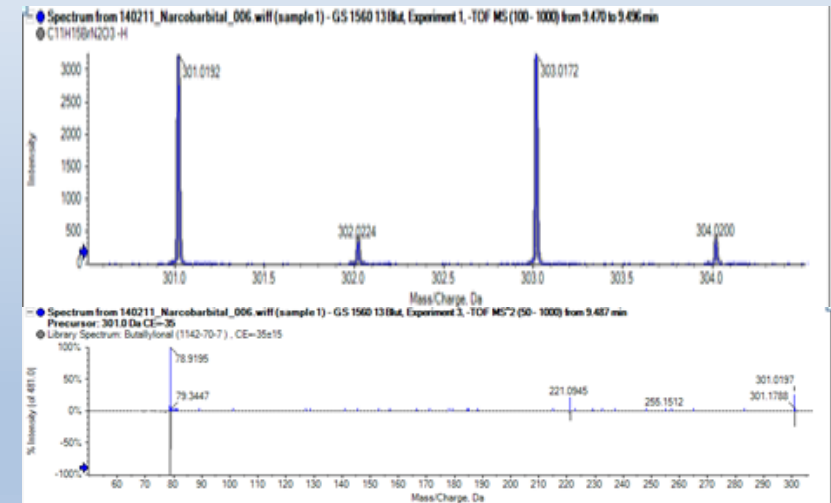
Bisher war die Anklagebehörde davon ausgegangen, dass der Mann seine Frau am Abend des 6. Juli 2013 im Streit erwürgte, ehe er sich im

Schlafzimmer an der Leiche verging. Auffällig ist nach Aussage des Gutachters auch, dass keinerlei Kampfspuren entdeckt wurden, die bei Tod durch Erwürgen eigentlich zu erwarten wären. Das in der Medizin nicht mehr verwendete Mittel will der Mann aus Haushaltsauflösungen in seiner Wohnung gehabt haben. Zunächst muss jetzt ein Vergleichspräparat des Narkosemittels aus Kanada besorgt werden, um für den Prozess nachträglich die genaue Konzentration im Blut bestimmen zu können. Dies könnte den Prozess um Wochen verzögern oder sogar zur Aussetzung des Verfahrens führen. Der Prozess müsste dann neu aufgerollt werden. lby

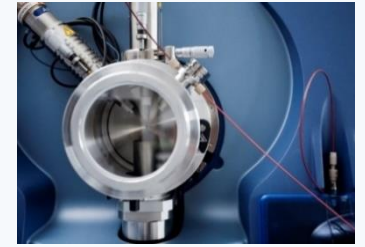


Seit 1992 in Deutschland nicht mehr verbreitet

Narcobarbital (C₁₁H₁₅N₂BrO₃)



Zusammenfassung



- Ausbau des allgemeinen Drogen- und Arzneimittelscreenings (XY-Screening) von 200 auf über 500 Substanzen

Drug Test Anal. 2016 Jul 4. doi: 10.1002/dta.2039. [Epub ahead of print]

Liquid chromatography-quadrupole-time-of-flight mass spectrometry screening procedure for urine samples in forensic casework compared to gas chromatography-mass spectrometry.

Fels H¹, Dame T¹, Sachs H¹, Musshoff F¹.

- Aufbau einer Screeningmethode für Badesalze (ca. 320 Substanzen)
- Bearbeitung von etlichen Spezialfällen (z.B. U-47700) inklusive Quantifizierung
- Retrospektive Auswertung von Proben und damit einhergehende Erweiterung des Umfangs des Analytspektrums mittels Datenbankabgleich (ca. 2000 Substanzen)
- Aufbau einer Screeningmethode für Spice (ca. 150 Substanzen plus ca. 300 Metaboliten)

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

