

Identificación Exacta en Análisis Forenses

Uso de la Librería Wiley de datos de alta resolución de Masas en Tandem: MSforID

Pierre Negri¹, Adrian M. Taylor² 1 SCIEX, US; 2 SCIEX, CA

La espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) utilizando los instrumentos SCIEX TripleTOF® o X500R QTOF proporciona a los investigadores forenses una herramienta poderosa para la detección de compuestos toxicológicos y nuevas drogas de abuso. La alta velocidad de adquisición de datos MS and MS/MS asegura la obtención de datos espectrales de masas exactos de una gran cantidad de analitos, incluso a bajas concentraciones. Tener el espectro completo de un analito formado de sus fragmentos MS/MS específicos en el flujo de identificación de compuestos aumenta la selectividad, especificidad y confianza en los resultados. **Combinando estos resultados con la librería Wiley de registro de datos de alta resolución de Masas en Tandem: MSforID** permite la detección exacta de compuestos a través de la correspondencia espectral con la librería. El proceso automatizado hace coincidir los datos de MS con la masa del analito y el MS/MS coincide con el patrón de fragmentación del analito en la librería, proporcionando un “*fit score*” que permite evaluar la exactitud en la identificación del compuesto. Como se muestra en la Figura 1, se utilizan múltiples puntos de alta calidad para detectar e identificar la codeína y su metabolito principal, la norcodeína; a partir de una muestra postmortem con un *fit score* excelente de 100 % para ambos analitos.

Principales ventajas de la librería Wiley con espectros de alta resolución LC-MS/MS

- La librería Wiley contiene datos espectrales de Masas en Tandem: MSforID contiene una variedad de compuestos que incluyen: pesticidas, compuestos farmacéuticos, drogas ilícitas y otras moléculas bioorgánicas pequeñas, haciendola una herramienta útil para investigadores en metabolómica, investigación farmacéutica, forense y toxicológica.
- Comprende una colección de 10,000 espectros MS/MS de alta resolución en modo positivo y negativo para más de 1,200 compuestos, todos obtenidos cuidadosamente en condiciones controladas para permitir resultados de búsqueda exactos, confiables y reproducibles en una amplia variedad de configuraciones.
- La librería Wiley es compatible con el software de SCIEX OS para procesar datos de los sistemas TripleTOF®, X-Series QTOF and QTRAP® que cuenten con este software.
- Adicionalmente se brinda la capacidad de crear librerías personalizadas para sus flujos de trabajo específicos. Lo único que se debe realizar es seleccionar los analitos de interés en el software LibraryView™.

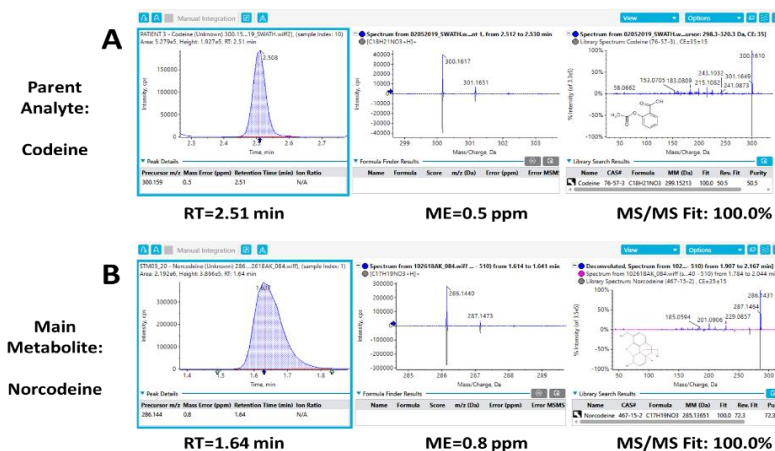


Figura 1: Obtenga una amplia Cobertura y gran Exactitud en la Identificación de Compuestos utilizando la librería Wiley de datos Espectrales de Masas en Tandem: MSforID. Los espectros XIC, TOF MS and MS/MS obtenidos muestran una identificación segura y exacta de (A) codeína y (B) su metabolito principal, norcodeína; a partir de una muestra de un caso postmortem. La muestra se analizó utilizando IDA en el instrumento X500R QTOF SCIEX, los datos adquiridos se buscaron en la librería espectral Wiley de alta resolución LC-MS/MS.

El portafolio de SCIEX para diagnóstico clínico es solamente para Uso de Diagnóstico In Vitro. Los productos no están disponibles en todos los países. Para información sobre disponibilidad comuníquese con su representante de ventas o consulte <https://sciex.com/diagnostics>. Todos los demás productos son para uso exclusivo en Investigación. No debe utilizarse para Diagnóstico.

Las marcas registradas y/o marcas registradas mencionadas en este documento son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios en los Estados Unidos y/o en otros países

© 2020 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. Related to RUO-MKT-02-10085-A. AB SCIEX™ es utilizado bajo licencia.