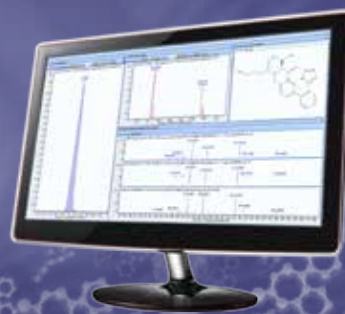


SIMPLIFIQUE SUS PROCESOS DE CRIBADO INTEGRALES DE COMPUESTOS DE TOXICOLOGÍA FORENSE



Librería y base de datos personal de compuestos para toxicología forense mediante LC/MS de Agilent

Realice con confianza tanto el cribado de compuestos diana como aquellos que son sospechosos, gracias al uso de la masa exacta

El análisis toxicológico forense de muestras biológicas es complejo debido al gran número de analitos a nivel de trazas que hay que identificar y confirmar. Estar al día de la continua evolución de las drogas de diseño es especialmente difícil.

Podrá cribar entre más de 9.200 analitos combinando instrumentos de LC/MS para TOF o Q-TOF con la librería y base de datos personal de compuestos para toxicología forense mediante LC/MS de Agilent (PCDL), obteniendo así una identificación de enorme fiabilidad por medio de la comparación de espectros MS/MS de masa exacta. La PCDL incluye, entre otros tipos de compuestos, más de 750 drogas de diseño.

Una característica extraordinaria del análisis del espectro completo es la capacidad de realizar un análisis retrospectivo. La adquisición en modo All Ions (todos los iones) por MS/MS permite medir iones precursores y fragmentos para un número de compuestos virtualmente ilimitado. Esto significa que podrá volver a analizar o extraer los datos en cualquier momento, sin necesidad de repetir el análisis, lo que le permitirá estar al día de las drogas desde el mismo momento en que aparezcan en la calle.

La PCDL incluye los siguientes componentes, que ahorran tiempo y maximizan el rendimiento:

- Base de datos verificada de masa exacta con más de 9.200 compuestos
- Notas de búsqueda para el usuario con clase de compuesto, incluyendo los nombres
- Espectros MS/MS de masa exacta para más de 3.900 analitos, obtenidos con tres energías de colisión diferentes, además de espectros de aductos y pérdidas (más de 13.500 espectros en total)
- Guía de inicio rápido con ejemplos de datos y ejercicios de familiarización
- Guía de configuración de métodos que le enseña cómo configurar métodos de adquisición
- Nota de aplicación con información detallada de métodos para LC/MS
- La versión más reciente del software PCDL Manager
- Actualizaciones de base de datos y librería gratuitas durante 3 años



Agilent Technologies

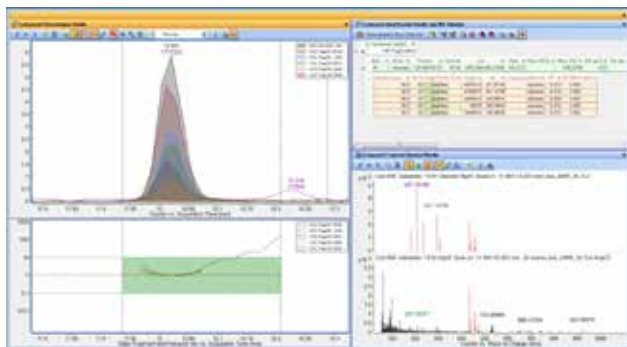
Flujos de trabajo de cribado de compuestos diana y sospechosos con PCDL

La PCDL de toxicología forense de Agilent, en combinación con las capacidades de masa exacta de los instrumentos de LC/TOF y Q-TOF, le permitirá:

- Obtener datos inespecíficos y de espectro completo usando el modo All Ions (todos los iones) por MS/MS e identificar los compuestos mediante masa exacta, tiempo de retención, patrón isotópico y confirmación de fragmentos.
- Realizar una coincidencia presuntiva de los espectros obtenidos con la librería de espectros, sin necesidad de obtener estándares.
- Crear una PCDL personalizada para realizar un cribado más centrado en los productos de interés.
- Proponer una lista de sospechosos con datos de MS y el algoritmo "Find by Formula".

- Confirmar la presencia de contaminantes y eliminar falsos positivos con un análisis MS/MS específico y una búsqueda en librería.
- Extraer datos procedentes de experimentos de MS/MS automatizados utilizando la "Extracción de características moleculares" y comparar los compuestos propuestos con la PCDL.
- Añadir sus propios compuestos y espectros de librería exclusivos para crear PCDL específicas para sus análisis.
- Realizar un análisis retrospectivo de datos con nuevos compuestos añadidos a la PCDL, sin necesidad de repetir los análisis de las muestras.

La PCDL para toxicología forense facilita la confirmación de compuestos y la explotación de datos, incluso para laboratorios con un elevado número de análisis, para que pueda realizar un cribado verdaderamente completo de un número ilimitado de compuestos.



Sencilla explotación de datos e identificación sin ambigüedades con el software All Ions.

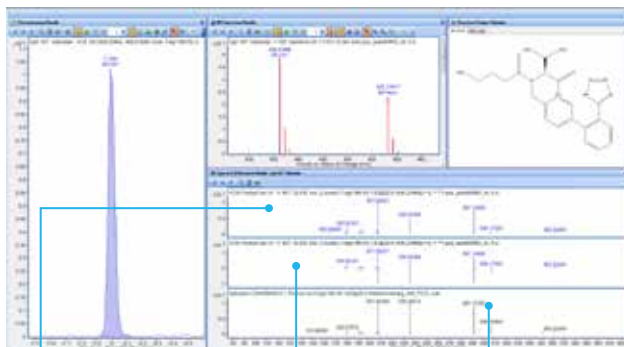


Imagen superior:
Espectro MS/MS
automatizado

Imagen central:
Espectro
espectral

Imagen inferior:
Espectro de librería

Confirme los compuestos mediante coincidencia de librerías usando MS/MS automatizado.



El software PCDL Manager proporciona una sencilla gestión de la base de datos y la librería.

Cribado de alta sensibilidad para compuestos toxicológicos forenses

La PCDL para toxicología forense le ayudará a estar al día en relación con la creciente variedad de drogas nuevas. Incluye más de 9.200 compuestos, entre los que se incluyen:

Etiquetas de clase disponibles:

Fármacos para el dopaje humano, drogas de diseño, fármacos de uso veterinario, pesticidas, micotoxinas, cannabioides, alucinógenos, estimulantes, benzodiazepinas, hipnóticos, neurolépticos, barbitúricos, antidepresivos, controles médicos cardiovasculares, antiepilépticos, opiáceos, anabolizantes, PPCP, hormonas, patrones internos.

La verificación de la base de datos y la librería garantiza la máxima calidad de los datos

- Nombre común del compuesto y nombre IUPAC
- Masa exacta de la molécula neutra
- Fórmula y estructura molecular
- Tipo de ión (anión, catión o neutro)
- Número CAS/enlace PubChem (si existe)
- Id. ChemSpider e hipervínculo (si existe)
- Cada pico de precursor e ión producto corregido según la masa exacta teórica
- Espectros adquiridos con una energía de colisión de 10, 20 y 40 eV
- Espectros medidos en modo de ión positivo y/o negativo donde corresponda
- Incluidos espectros de aductos y pérdidas
- Espectros filtrados según la intensidad de la señal y verificados con respecto al ruido espectral, impurezas químicas y parámetro del instrumento mal ajustados

Consultoría de aplicaciones adaptada a sus necesidades

Instalación y familiarización:

- Personal de servicio cualificado con experiencia instalará la PCDL, verificará todas las funciones por medio de una muestra de comprobación de Agilent y llevará a cabo la familiarización con el software de soporte.

Consultoría de aplicaciones avanzada:

- Déjenos ayudarle a obtener el máximo de la PCDL ajustando métodos de cribado adecuados a sus muestras de interés.

Complete su flujo de trabajo con soluciones de última generación de Agilent

- **El software MassHunter de adquisición y análisis de datos** permite implementar rápidamente métodos de cribado de alta calidad, que podrá modificar para satisfacer sus necesidades futuras. También podrá personalizar su PCDL para adaptarse a su aplicación.
- **El sistema Agilent 1290 Infinity II LC** proporciona una resolución cromatográfica sin igual y reducidos tiempos de análisis, con los que obtendrá los datos de alta calidad que necesita para unas aplicaciones de cribado sensibles y reproducibles.
- **Los sistemas LC/MS TOF y Q-TOF** proporcionan exactitud de masa MS y MS/MS fiable. Gracias a la capacidad de barrido completo del modo All Ions (todos los iones) por MS/MS, podrá acceder a todos los datos en todo momento, de modo que podrá realizar un cribado de un gran número de compuestos sospechosos y desconocidos. Es más, la fuente de iones de electrospray con focalización del gradiente térmico (Jet Stream) de Agilent reduce drásticamente los límites de detección.
- **Las columnas para LC, consumibles, y productos para la preparación de muestras de Agilent** optimizan el funcionamiento continuado y obtienen los mejores resultados científicos.

Información para pedidos

Librería y base de datos personal de compuestos para toxicología forense (G3876CA)

Los siguientes elementos resultan necesarios pero no se incluyen con la PCDL para cribado de toxicología forense:

- Serie LC Agilent 1260 o 1290 Infinity
- Sistemas LC/MS TOF Agilent Serie 6200 o Q-TOF Agilent Serie 6500
- Software de adquisición de datos Agilent MassHunter (versión B.05 o posterior y Windows 7 de 64 bits)
- Software de análisis cualitativo Agilent MassHunter (versión B.07 SP1 o posterior)
- Software de análisis cuantitativo Agilent MassHunter (versión B.07 o posterior)
- OPCIONAL: G3876CA #001 Servicio de instalación y familiarización
- OPCIONAL: Consultoría de aplicaciones avanzada H2149A (América); R1736A (otras regiones)

Para obtener más información acerca del PCDL para toxicología forense visite www.agilent.com/chem/pcdl

Gestione su laboratorio con la máxima productividad.

Póngase en contacto con su representante de Agilent local o con un distribuidor autorizado de Agilent en www.agilent.com/chem/contactus

O bien llame al **901 11 68 90**
(en España)

Visite www.agilent.com/chem/ms
para obtener una descripción de las librerías y bases de datos de LC/MS y los analizadores de GC/MS

Para uso forense.

Esta información está sujeta a cambios sin previo aviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2016
Publicado en EE. UU., 14 de julio de 2016
5991-7000ES