

CRIBADO SELECTIVO Y OPTIMIZADO DE COMPUESTOS DE TOXICOLOGÍA FORENSE



Base de datos de MRM activada de toxicología forense de Agilent

Minimice la necesidad de realizar tediosos desarrollos de métodos con una base de datos de transiciones MRM

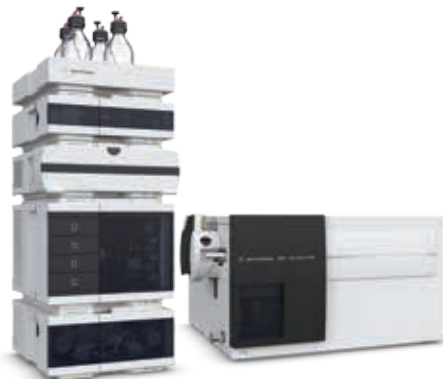
Los análisis de compuestos de interés dentro del campo de la toxicología forense suponen un desafío por dos razones: las bajas concentraciones y la gran cantidad de analitos que hay que monitorizar y cuantificar. Con estas variables, puede resultar difícil encontrar un punto de partida sólido para el desarrollo de métodos.

La base de datos de MRM activada de toxicología forense de Agilent, junto con el sistema LC/MS triple cuadrupolo de Agilent, permite crear al instante métodos para el cribado selectivo y la cuantificación con confianza de cientos de analitos en un único análisis. Gran parte del trabajo de desarrollo ya ha sido realizado por Agilent, lo que le dejará más tiempo para crear datos de calidad que puedan destacar en el escrutinio requerido en las investigaciones de toxicología forense.

Las bases de datos de MRM activadas de Agilent contienen cientos de parámetros de transición para sistemas de LC/MS triple cuadrupolo, lo que le permitirá crear métodos de MRM, MRM dinámica (dMRM) o MRM activada (tMRM). Elija el modo más adecuado para sus necesidades de análisis.

La base de datos de MRM activada incluye los siguientes componentes, que ahorran tiempo y maximizan el rendimiento:

- Base de datos verificada con más de 2.800 compuestos
- Hasta 10 transiciones MRM, tensiones de fragmentador y energías de colisión para todos los compuestos, aplicable en todas las plataformas de LC/MS triple cuadrupolo
- Guía de inicio rápido con ejemplos de datos y ejercicios de familiarización
- Guía de configuración de métodos que le indicarán como crear métodos de MRM, MRM dinámica y MRM activada
- Actualizaciones gratuitas durante 3 años



Agilent Technologies

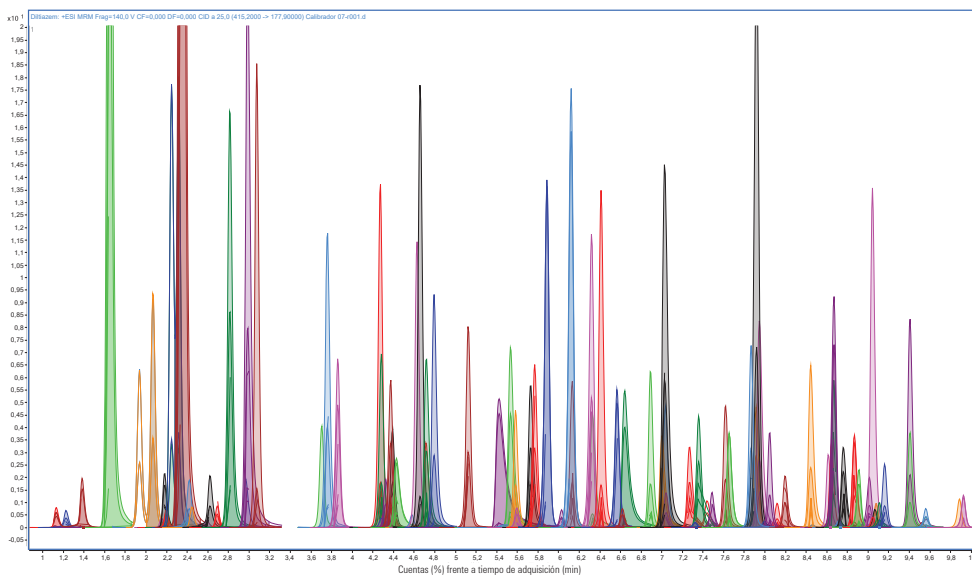
Flujos de trabajo de cribado de compuestos diana con la base de datos de MRM activada

La base de datos de MRM activada y la librería de referencia de toxicología forense de Agilent, junto con las capacidades cuantitativas precisas y de alta sensibilidad del sistema LC/MS triple cuadrupolo, permiten diferentes flujos de trabajo, como:

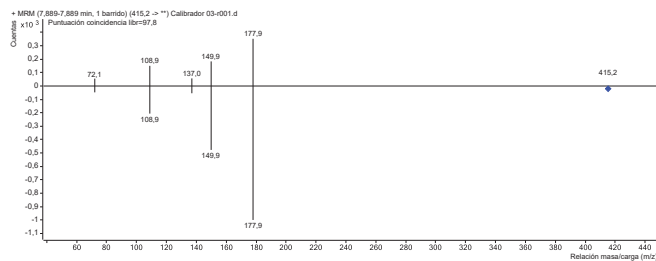
- Crear con facilidad un método de MRM importando de la base de datos todos los parámetros, como nombres de compuestos, transiciones de MRM primarias, tensiones del fragmentador y energías de colisión. Los métodos de MRM son adecuados para realizar rápidamente el cribado y la cuantificación de un número limitado de compuestos, sin necesidad de conocer los tiempos de retención.
- Evaluar tiempos de retención y ventanas de tiempos de retención para actualizar el método de MRM y convertirlo en uno de MRM dinámica. La MRM dinámica maximiza el tiempo de residencia para los analitos dentro de su ventana de tiempo para mejorar la sensibilidad. La MRM dinámica es

adecuada para el cribado y la cuantificación de cientos de analitos en un análisis.

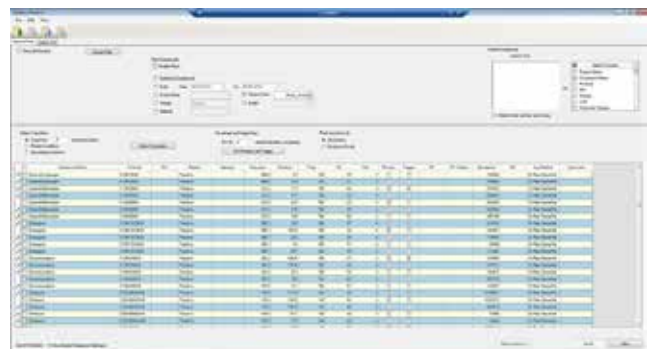
- Si se necesita una especificidad aún mayor, se pueden añadir transiciones secundarias a un método de dMRM para crear un método de MRM activada o tMRM. La MRM activada resulta especialmente útil para compuestos isobáricos y compuestos afectados por interferencia de la matriz. La MRM activada es compatible con la necesidad de tiempos de ciclo rápidos, por lo que puede aplicarse a un subconjunto de compuestos problemáticos o a todos los compuestos en un cribado multiresiduo.
- Crear una librería de referencia a partir de sus datos, específica para sus análisis, y confirmar los resultados con una coincidencia de la librería para evaluar con confianza los resultados límite.



Cromatograma MRM de 10 minutos de 100 analitos toxicológicos (más patrones internos) con hasta cinco transiciones MRM activadas superpuestas.



Coincidencia de la librería de referencia y puntuación para diltiazem.



La base de datos de MRM activada de toxicología forense de Agilent garantiza un desarrollo de métodos rápido y a medida.

La verificación de la base de datos y la librería de referencia garantizan la máxima confianza en los datos

- Nombre común del compuesto
- Número CAS del compuesto nativo
- Fórmula molecular
- Masa unitaria de la molécula neutra
- Transiciones MRM (m/z del precursor y del producto)
- Tensión del fragmentador
- Energía de colisión
- Se han añadido tiempos de retención y ventanas de tiempos de retención
- Se han añadido parámetros del activador
- Transiciones MRM totalmente optimizadas con el software Agilent MassHunter Optimizer para más de 743 compuestos
- Los datos de MRM optimizados se han revisado para comprobar que son correctos

Clases de compuestos:

Drogas de diseño, cannabinoides, alucinógenos, estimulantes, benzodiazepinas, hipnóticos, neurolépticos, barbitúricos, antidepresivos, fármacos cardiovasculares, antiepilépticos, opiáceos.

Consultoría de aplicaciones adaptada a sus necesidades

Instalación y familiarización:

- El personal de servicio experimentado instalará la base de datos de MRM activada y la librería de referencia, verificará todas las funciones con una muestra de comprobación de Agilent y realizará la familiarización con el software de apoyo.

Consultoría avanzada de aplicaciones:

- Deje que le ayudemos a sacar el máximo partido de la base de datos de MRM activada configurando métodos de cribados selectivos para sus muestras de interés y asegúrese de conseguir su resultado científico.

Complete su flujo de trabajo en análisis de compuestos diana con soluciones de última generación de Agilent

- **Software de adquisición de datos y análisis MassHunter**
Junto con la base de datos de MRM activada, totalmente integrada, este avanzado software permite generar rápidamente métodos de adquisición y análisis que pueden modificarse con facilidad para satisfacer sus necesidades. En el software de análisis cuantitativo MassHunter, puede usar procesamiento por lotes para resaltar valores atípicos y obtener una vista rápida de los compuestos para revisar las excepciones.
- **Sistemas Agilent 1290 Infinity II LC y LC/MS triple cuadrupolo Agilent Serie 6400**
Elecciones de eficacia probada para aplicaciones cuantitativas, que ofrecen un rendimiento de separación inigualable, una sensibilidad excepcional, una fiabilidad excelente y una enorme robustez. La fuente de iones de electrospray con focalización de gradiente térmico (Jet Stream) de Agilent rebaja drásticamente los límites de detección.
- **Columnas para LC, consumibles y productos de preparación de muestras Agilent**
Optimice el funcionamiento continuado y consiga los mejores resultados científicos.

Información para pedidos

Base de datos de MRM activada y librería de referencia de toxicología forense (G1734CA)

Se necesita lo siguiente, que no se incluye con la base de datos de MRM activada y librería de referencia de toxicología forense:

- Sistema LC Agilent serie 1260 o 1290 Infinity II
- Sistema LC/MS triple cuadrupolo Agilent Serie 6400
- Software de adquisición de datos Agilent MassHunter (versión B.06 o posterior) y Windows 7 de 64 bits
- Software de análisis cualitativo Agilent MassHunter (versión B.06 o posterior)
- Software de análisis cuantitativo Agilent MassHunter (versión B.05.02 o posterior)
- OPCIONAL: Servicio de familiarización e instalación G1734CA #001
- OPCIONAL: Consultoría de aplicaciones avanzada H2149A (América); R1736A (otras regiones)

Para obtener más información acerca de la base de datos de MRM activada y la librería de referencia de toxicología forense de Agilent, visite www.agilent.com/chem/tmrm

Gestione su laboratorio con la máxima productividad.

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

También puede llamar al **901 11 68 90**
(España)

Visite www.agilent.com/chem/ms
para obtener una descripción de las bases de datos
y librerías de LC/MS, así como de 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. 18 de julio de 2016
5991-7001ES