

Detecte más drogas con el analizador de toxicología GC/MS de Agilent con fuente de alta eficiencia

Nota de aplicación

Toxicología forense

Autores

Melissa Churley y
Luis Cuadra-Rodriguez
Agilent Technologies, Inc.

Introducción

El cribado de amplio alcance para drogas en muestras biológicas necesita la confirmación de identificación del espectro completo para un número ilimitado de compuestos diana, así como la identificación espectral de compuestos no diana. El analizador de toxicología GC/MS de Agilent utiliza software Agilent de elaboración de informes de deconvolución (DRS) y biblioteca de la base de datos de toxicología forense y, al configurarlo con el detector selectivo de masas 5977B de Agilent, una fuente de alta eficiencia (HES). En combinación, estas tecnologías detectan un gran número de compuestos diana a bajas concentraciones mientras reducen el tiempo de análisis.



Agilent Technologies

Detecte a bajas concentraciones con la fuente de alta eficiencia

La mayor capacidad de cribado con la fuente de alta eficiencia (HES) se demostró usando suero humano, como se puede ver en la Tabla 1. El suero negativo, 2 ml, se extrajo usando el método general de cribado de drogas Bond Elut Certify M2721 [1] de Agilent. El extracto se reconstituyó en 0,1 ml de metanol y se marcó con la mezcla de comprobación toxicológica GC/MS ref. 5190-0471) para conseguir de 10 a 1.000 ng/ml (en vial) de patrones sin derivatizar.

Tabla 1. Menor cantidad inyectada de drogas en el extracto de suero marcado detectado con AMDIS usando un factor de coincidencia de 75.

	Fuente de alta eficiencia (sintonización automática de HES)			Extractor (etune)		
	Mínima cantidad inyectada (pg) puntuación AMDIS > 75	Puntuación AMDIS	Concentración equivalente en suero (ng/ml)*	Mínima cantidad inyectada (pg) puntuación AMDIS > 75	Puntuación AMDIS	Concentración equivalente en suero (ng/ml)*
Anfetamina	500	94	25	500	75	25
Nicotina	50	92	2,5	50	81	2,5
MDA	500	77	25	500	76	25
MDMA	500	85	25	500	83	25
MDEA	10	76	0,5	500	97	25
Meperidina	10	85	0,5	50	85	2,5
Fenciclidina	50	83	2,5	500	90	25
Metadona	50	87	2,5	500	89	25
Cocaína	50	77	2,5	500	94	25
SKF-525a	50	77	2,5	100	81	5
Codeína	100	88	5	500	90	25
Diazepam	50	90	2,5	50	81	2,5
Hidrocodona	100	91	5	500	90	25
Tetrahidrocannabinol	50	75	2,5	100	78	5
Oxicodona	50	80	2,5	500	83	25
Flunitrazepam	500	88	25	500	75	25
Diacetilmorfina	100	79	5	1.000	83	25
Fentanilo	50	85	2,5	50	77	2,5
Alprazolam	100	76	5	1.000	85	50
Verapamil	50	84	2,5	500	90	25
Estricnina	500	86	25	500	77	25
Trazodona**	> 1.000	(71)	> 50	> 1.000	(68)	> 50

Las drogas encontradas a bajas concentraciones usando la fuente de alta eficiencia (HES) frente a la fuente extractora están destacadas. Las condiciones de sintonización están entre paréntesis.

* Se asume el 100 % de la recuperación de una muestra de suero de 2 ml, reconstitución del extracto en 0,1 ml and 1 µl inyectado.

** La cantidad de trazodona inyectada necesaria para alcanzar una puntuación de 75 supera los 1.000 pg.

Las benzodiazepinas oxazepam, lorazepam, temazepam, nitrazepam y clonazepam no se encontraron a 1.000 pg.

El opioide sintético fentanilo se añadió a la mezcla de comprobación. Los compuestos diana de las drogas cribadas en el suero, como por ejemplo metadona, cocaína, hidrocodona, THC y otras, se pueden identificar de forma positiva usando el modo de barrido completo a baja concentración (por ejemplo 5 ng/ml para la hidrocodona). La fuente de alta eficiencia (HES) maximiza el número de iones que se crean en la fuente y los transfiere al analizador cuadrupolar, que equivale a más señal, y por lo tanto mayor sensibilidad (Figura 1). Este aumento en la respuesta se traduce en encontrar más compuestos diana de la droga durante el proceso de cribado con buena coincidencia de la biblioteca.

Espectros de búsqueda NIST con diferenciación de isómeros

La química forense es necesaria para identificar la droga con el mayor grado de certeza científica. Hasta cierto punto, el problema de la determinación del isómero de la cocaína ha reforzado el requisito para los métodos de alta especificidad [2]. El GC/MSD 5977B con la fuente de alta eficiencia (HES) permite la integridad espectral estricta que es necesaria para diferenciar entre los isómeros de la cocaína y obtener espectros de búsqueda para detectar drogas (Figura 2).

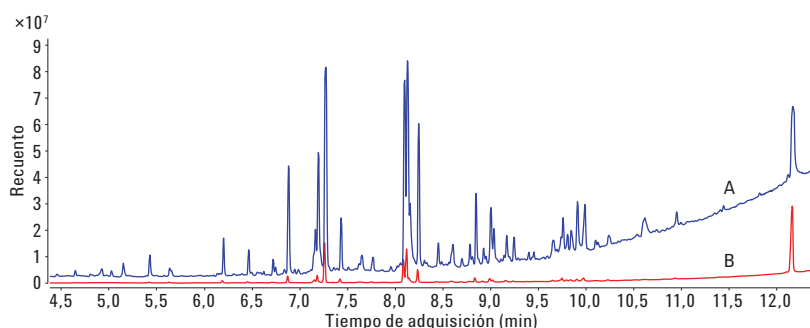


Figura 1. Superposición de TIC de 500 pg del estándar en suero usando A) la sintonización automática de la fuente de alta eficiencia (HES) y B) el etune de la fuente extractora.

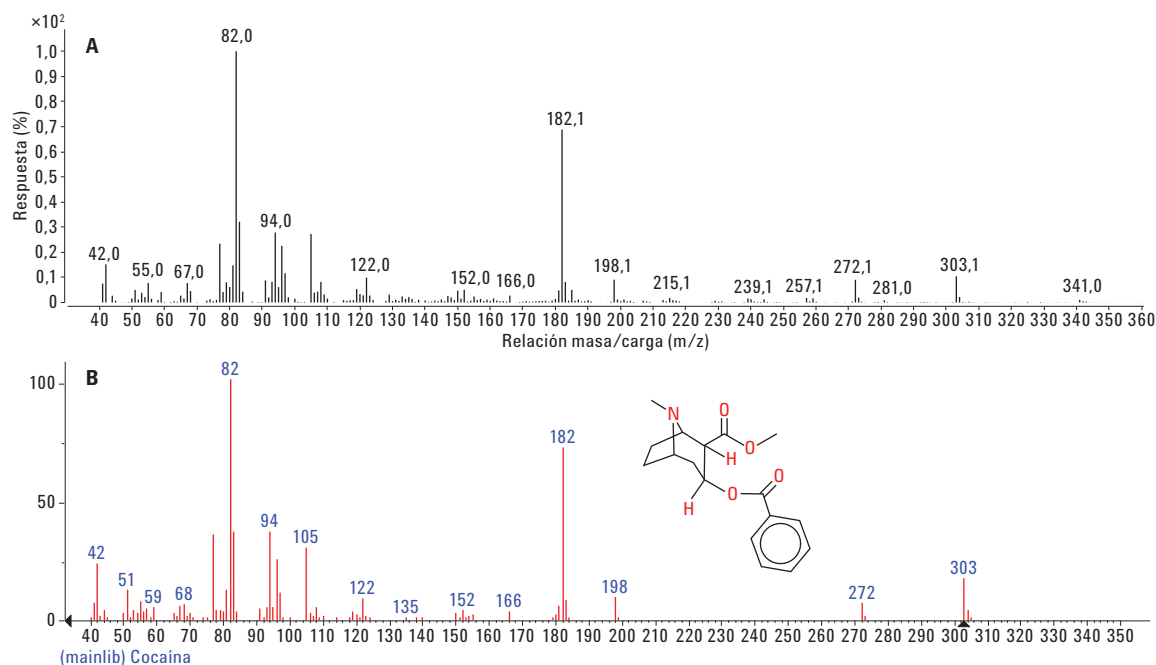


Figura 2. Espectro de masas de 100 pg de cocaína marcada en suero (A) comparado con el espectro NIST (B). La cocaína es la primera en aparecer en el NIST. El factor de coincidencia es 810 (bueno) [3] y se diferencia de la pseudococaína en que tiene un factor de coincidencia de 788 (justo). La concentración equivalente es de 5 ng/ml basándose en una recuperación completa. La excelente biblioteca de NIST coincide (≥ 900) para la cocaína dado que una primera coincidencia se devuelve a concentraciones por encima de este nivel.

Conclusiones

La fuente de alta eficiencia de GC/MSD 5977B Agilent mejora en gran medida la señal de los compuestos diana de las drogas. Los espectros resultantes son clásicos y de búsqueda NIST. Al combinarlos con el software Agilent de elaboración de informes de deconvolución, los límites de detección durante los análisis de cribado se acercan a aquellos que usan el modo SIM con derivatización.

Agradecimientos

Los autores agradecen a Bruce Quimby y a Fred Feyerherm por el debate productivo sobre este trabajo y también a Nathan Contino por sus contribuciones.

Referencias

1. Anon. *Agilent Bond Elut Certify and Certify II Methods Manual*; Agilent Technologies, Inc. Publication number 5991-4939EN, **2014**.
<http://www.agilent.com/cs/library/brochures/Bond%20Elut%20Certify%20MethodsManual.pdf>
2. Schlesinger, H. L. Topics in the chemistry of cocaine. *B. Narcotics* **1985**, *1*, 63-78. United Nations Office on Drugs and Crime, Vienna, Austria.
https://www.unodc.org/unodc/en/data-and-analysis/bulletin/bulletin_1985-01-01_1_1_page006.html
3. Anon. NIST Standard Reference Database 1A, NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library (NIST 14) and NIST Mass Spectral Search Program (Version 2.2), User's Guide. National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce, Gaithersburg, MD, USA.
<http://www.nist.gov/srd/upload/NIST1aVer22Man.pdf>

Más información

Estos datos representan resultados típicos. Si desea obtener más información sobre nuestros productos y servicios, visite nuestra página web www.agilent.com/chem.

www.agilent.com/chem

Solo para uso forense.
La información puede sufrir cambios sin previo aviso.

Agilent no se hace responsable de ningún error incluido en este documento ni de ningún daño accidental o consecuencial relacionado con la distribución, la aplicación o el uso de este material.

© Agilent Technologies, Inc. 2015
Impreso en EE. UU.
miércoles, 14 de octubre de 2015
5991-6294ES



Agilent Technologies