

NUEVO PROCEDIMIENTO PARA EL ANÁLISIS DE DATOS DE METABOLÓMICA NO DIRIGIDA BASADA EN LC-MS

Investigadores procedentes del CIBER, la URV y el IISPV han desarrollado un nuevo método de análisis de datos que permite identificar metabolitos procedentes de muestras complejas de una manera precisa y rápida.

La necesidad

Actualmente la anotación e identificación de datos provenientes del análisis LC-MS en experimentos de metabolómica no dirigida, especialmente de muestras complejas, resulta muy complicado.

Esto es debido a la gran cantidad de datos crudos que se generan (centenares de miles) al realizar una cromatografía de líquidos o una electroforesis capilar, acoplada a un espectrómetro de masas.

La solución

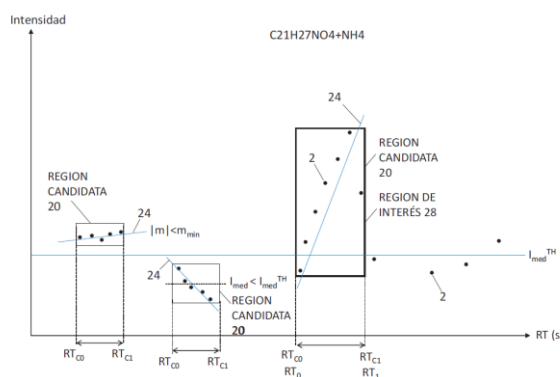
La presente invención propone un nuevo procedimiento que permite identificar estos compuestos ionizados de la muestra biológica, aumentando entre otros, la cobertura de detección de posibles biomarcadores.

Aspectos Innovadores

El nuevo procedimiento incluye un método de análisis de datos que permite procesar datos crudos de regiones de interés definidas en un rango de tiempo de retención de estos metabolitos ionizados.

Además, el enfoque es "peak-picking free / peak-shape free / feature finding free", esto hace que el nuevo procedimiento sea independiente de las condiciones cromatográficas.

El procedimiento genera como output una lista de inclusión anotada y muy precisa, facilitando la identificación de metabolitos.



Ejemplo de determinación y caracterización de regiones candidatas

Estado de Desarrollo:

Validación del método mediante experimentos de marcaje isotópico y espectrometría de masas en tándem en diferentes matrices complejas: aguas residuales, células humanas y bacterias.

Propiedad Industrial e Intelectual

- Solicitud de patente española, enero 2020.

Datos de contacto

Centro de Investigación Biomédica en Red (CIBER)
gemma.gomez@ciberisciii.es
transferencia@ciberisciii.es
<https://www.ciberisciii.es/en>