



*Cromatògraf de líquids amb espectròmetre de masses*

## Cromatògraf de líquids d'ultra eficàcia acoblat a un espectròmetre de masses híbrid de triple quadrupol i trampa lineal

### CROMATÒGRAF DE LÍQUIDS

1

Marca  
**Waters**

Model  
**Acquity**

#### Especificacions tècniques

- Sistema de gradient binari.
- Sistema desgasificador mitjançant buit de 6 canals (4 eluents i 2 solvents de neteja).
- Bomba de flux programable de 10  $\mu$ L a 2 mL/min.
- Pressió de treball fins a 15.000 psi permetent treballar amb columnes de tamany de partícula inferior a 2  $\mu$ m.
- Injector automàtic de mostres XYZ refrigerat per sistema Peltier.
- Volum mort del sistema inferior a 150  $\mu$ L.

#### Descripció tècnica

La cromatografia de líquids (LC) és una tècnica usada per a la separació dels components d'una mescla i es basa en la interacció química entre les substàncies a analitzar i una fase estacionària (columna cromatogràfica).

La mostra és injectada a través de la fase estacionària mitjançant el bombeig d'un líquid (fase mòbil) a alta pressió. Els analits es retenen depenent de les interaccions químiques i/o físiques amb la columna cromatogràfica a mida que avancen per aquesta. El grau de retenció depèn de la naturalesa del compost, tipus de fase estacionària i composició de la fase mòbil. El temps en que triga un compost en ser eluït de la columna es denomina temps de retenció i es considera una propietat identificativa d'un compost en una determinada fase estacionària i mòbil.

El cromatògraf de líquids d'ultra eficàcia preparat per suportar pressions de fins a 15.000 psi, permet treballar amb columnes de mida de partícula inferior a les 2  $\mu$ m incrementant així la velocitat lineal dels analits dins la columna, reduint la seva difusió i millorant tant l'eficàcia com la resolució de la cromatografia.

## ESPECTRÒMETRE DE MASSES

2 Marca **ABSciex**

Model **QTrap® 5500**

### Especificacions tècniques

- Font d'ionització Turbo V, tant per ESI com APCI.
- Rang de m/z de 5 a 1.250 amu.
- Velocitat d'escaneig en Q fins a 12.000 amu/s i 20.000 amu/s en QTrap.
- Rang dinàmic de 5 ordres de magnitud.
- Sensibilitat: injecció 50fg de Reserpine en columna a 200µL/min proporciona una S/N:60(MRM); 500fg de Reserpine en columna a 200µL/min proporciona una S/N>500(EPI i MS<sup>3</sup>).

### Descripció de la tècnica

Un cop s'ha dut a terme la separació cromatogràfica, s'obtenen els ions en fase gas a la font d'ionització. La ionització a pressió atmosfèrica en les modalitats d'electrospai (ESI) i ionització química (APCI) són les més comuns en l'acoblament amb la LC.

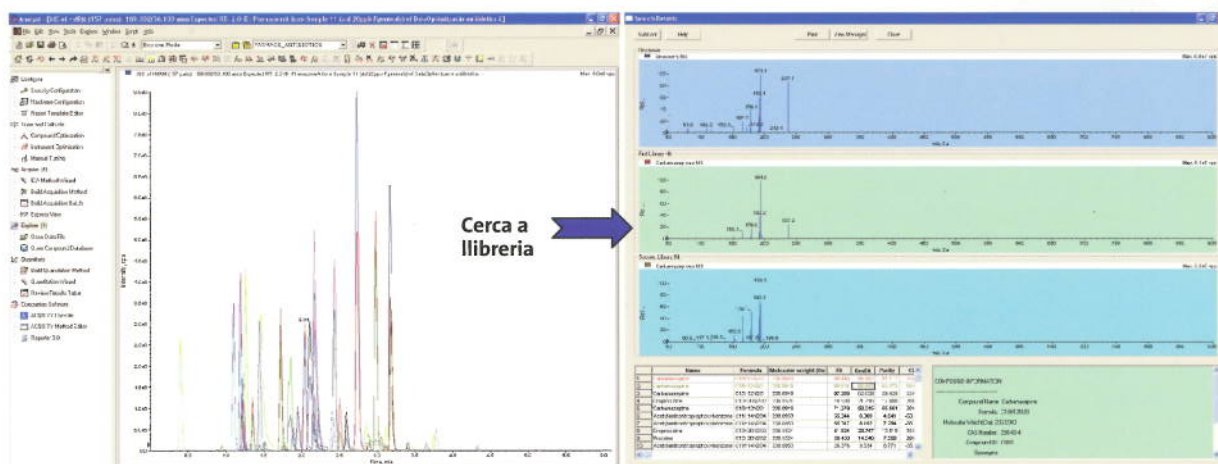
A continuació els ions generats són transferits a l'analitzador de masses a través d'una interfase entre la zona de pressió atmosfèrica i de buit. Mitjançant l'aplicació de camps magnètics i elèctrics els ions formats són separats en funció la seva relació de massa/càrrega (m/z) i posteriorment detectats.

La representació gràfica de l'espectre de masses de la molècula s'anomena comunament empremta digital i ens permet la identificació inequívoca de la mateixa.

El sistema QTrap5500 és un espectròmetre de masses híbrid de tecnologia múltiple de triple quadrupol i trampa d'ions lineal. L'analitzador es compon de 3 quadrupols: Q1 i Q3 que s'usen com a filtre de massa; Q2 és la cel·la de col·lisió quadrupolar d'alta pressió de disseny corbat (LINAC) on les molècules i/o fragments provinents de Q1 són trencades en fragments de masses més petites. Addicionalment Q3 es pot utilitzar com a trampa d'ions lineal emmagatzemant els ions formats i donant lloc a un augment de la sensibilitat.

### Aplicacions

- > La determinació de compostos orgànics emergents en el medi ambient està estretament lligada a la capacitat d'anàlisi dels equipaments disponibles, especialment en el camp de l'espectrometria de masses. El desenvolupament d'instruments cada vegada més sensibles i versàtils ha permès la seva detecció als baixos nivells trobats en el medi ambient, així com també han proporcionat les eines necessàries per garantir-ne una identificació precisa, d'acord amb els criteris fixats per les directrius europees cada vegada més estrictes.
- > La millora en la velocitat i la sensibilitat del QTRAP 5500 permet tenir a més a més una eina de treball més eficient en la identificació de metabòlits.
- > Obtenció d'espectres d'ió producte i comparació amb biblioteques espectrals pròpies o importades.



Cromatograma TIC, espectre de masses i identificació a través de llibreria de compostos farmacèutics.