DM12-Espectrómetro Thihíbrido LC MSn de alta resolución

DM12-Espectrómetro Thihíbrido LC MSn de alta resolución
Tipo de recurso
Unidad de espectrometría de masas

El equipo disponible en el CICT ubicado en la dependencia A2-116 es un espectrómetro de masas (*Mass Spectrometer*, MS, a la derecha de la foto) Thermo modelo IQ-X unido a un cromatógrafo de líquidos de ultraalta presión (*Ultra High Performance Liquid Chromatograph*, UHPLC, a la izquierda de la foto) de micro y nanoflujo de la misma marca, modelo Vanquish Neo.

El cromatógrafo Vanquish Neo dispone de automuestreador con capacidad para automatizar la inyección de hasta 192 muestras, horno termostatizado de columnas, bomba binaria de alta presión y una celda UV-visible para la detección *on-line* de compuestos con la posibilidad de registrar hasta 4 longitudes de onda simultáneamente. Además, la configuración de las válvulas del equipo permite la instalación de una precolumna para la inyección indirecta de analitos, que puede funcionar tanto en flujo inverso (*backward flush*, los analitos entran y salen por el mismo extremo de la precolumna) como en flujo directo (*forward flush*, los analitos entran por un extremo de la precolumna y salen por el otro).

El espectrómetro cuenta con una fuente de iones ESI y APCI para flujos analíticos y micro, y con una fuente nano ESI para flujos nano.

Dispone de un cuadrupolo previo (*Quadrupole*, Q, identificado como **1** en la imagen posterior) que ejerce funciones de aislamiento de iones precursores, un multipolo enrutador de iones (*Ion Routing Multipole*, IRM, **2**) capaz de actuar como celda de colisión de alta energía (HCD) y dos analizadores, uno de alta resolución tipo Orbitrap (hasta 500.000, definido a *m/z* 200, **3**) y otro tipo trampa iónica lineal (*Linear Ion Trap*, LIT, **4**).

DM12

Estos dos últimos analizadores, Orbitrap y trampa iónica, pueden trabajar por separado o en tándem. Si se usan por separado, se puede escanear en alta resolución con el Orbitrap y, simultáneamente, hacerse experimentos MSn a baja resolución en la trampa lineal. También pueden hacerse trabajar en tándem, de manera que la capacidad para hacer fragmentaciones sucesivas (MSn) de la trampa, que es un espectrómetro de baja resolución, se puede complementar con la inyección en el Orbitrap de los iones producto de dicha trampa, pudiéndose medir la masa de estos iones con alta resolución sea cual sea el valor de n. La capacidad de obtener espectros MSn con la potencia de la alta resolución de este recurso permite discernir entre especies químicas muy similares (isómeros posicionales, por ejemplo) que, en algunos casos, sólo se pueden identificar gracias a patrones de fragmentación de iones producto de tercera o cuarta generación (n?3), y, al poder disponer de las masas de esos iones producto con alta resolución se aumenta la certidumbre en la identificación de dichos analitos. Este tipo de experimentos sólo es posible con este tipo de arquitectura de analizadores de masas o en los potentes ciclotrones (FT-ICR). A la alta precisión en la masa se le une la exactitud en la medida de la masa que, gracias a un sistema de calibración interna automático (*EASY-IC*, **5**), puede estar por debajo de 1 ppm.

La capacidad de resolución de los últimos modelos de analizadores tipo Orbitrap es del orden de los ciclotrones (ICR), lo que permite añadir una tercera dimensión en la confirmación de la identidad de los analitos en estudio, la estructura isotópica fina, de manera que la contribución de los diferentes isótopos naturales de los elementos que conforman una fórmula molecular permite distinguir entre analitos isóbaros.

Además, el espectrómetro dispone de un módulo de movilidad iónica diferencial, FAIMS Pro Duo. Este tipo de interfaz se puede colocar opcionalmente entre la fuente y el espectrómetro con la intención cribar iones con criterios estéricos y de carga, para favorecer la entrada de ciertos iones y restringir el paso de otros.

El recurso cuenta con el software "*Xcalibur*" permite controlar todos los instrumentos (espectrómetro y cromatógrafos) de manera simultánea, así como el tratamiento posterior de los datos obtenidos. Además, dispone del software *AcquireX* integrado en *Xcalibur* que es capaz de crear automáticamente listas de exclusión para experimentos auto MSn (*Data Dependent Analysis*, DDA) a partir de blancos y de la propia muestra, de forma que en inyecciones sucesiva de la misma se pueden obtener series de espectros MSn no sólo de las sustancias mayoritarias en la muestra sino de los minoritarios presentes.

También se dispone del software *Compound Discoverer*, de aplicación en metabolómica, y de otro software adicional como *Mass Frontier* para anotación de fragmentaciones MSn de molécula pequeña.