DM11_Espectrómetro de masas GC-QOrbitrap

DM11_Espectrómetro de masas GC-QOrbitrap
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 Thermo modelo Orbitrap Exploris GC 240 unido a un cromatógrafo de gases Trace GC 1610 de la misma casa (a la derecha de la foto). El espectrómetro consta de seis componentes principales:

• Fuente de iones extraíble sin necesidad de romper el vacío (EI y CI)

• Óptica de transferencia de iones, incluidos multipolo plano de inyección y multipolo plano doblado para evitar la entrada de neutros en el cuadrupolo

• Filtro de masas cuadrupolar para la selección de iones precursores

• Dispositivo de almacenamiento intermedio (trampa en C) para la inyección de impulsos cortos de iones hacia el orbitrap

• Celda de colisión para la realización de ensayos de HCD (disociación por colisión a alta energía)

• Analizador Orbitrap para el análisis de masas por transformada de Fourier

Con esta configuración pueden hacerse trabajar en tándem cuadrupolo y orbitrap para hacer experimentos de masas/masas (MS/MS o MS2), así como modos SIM y FS. El rango de masas del analizador es de 30 a 3000 uma, una resolución de hasta 240 000 a *m/z* 200, con una velocidad máxima de barrido de hasta 40 Hz con la resolución definida en 7500 a *m/z* 200. La

resolución, que es una medida de la precisión en el valor de la masa ofrecida por el equipo, sólo está superada por los ciclotrones, se trata pues de un espectrómetro de ultraalta resolución.

El equipo admite la introducción de muestras bien mediante cromatógrafo de gases. Éste consta de dos puertos de inyección, en los que se pueden combinar hasta 3 tipos de inyectores, *split/splitless* (SSL), PTV y *on-column* y está servido por un automuestreador Triplus RSH de Thermo, con capacidad para automatizar inyecciones simples en cualquiera de los dos puertos e inyecciones de espacio de cabeza (HS) y microextracción en fase sólida (SPME, sólo disponible en el puerto de inyección SSL).

También puede usarse la sonda de introducción directa de muestras (DIP) para aquellos casos en los que el analito sea un compuesto sólido o líquido puro (o bien una disolución de éste) y sea volátil a bajas presiones. Con este sistema se produce una vaporización directa del analito en la sonda.

Normalmente se utilizan los programas "*Xcalibur*" y "*Tracefinder*" para controlar los tres instrumentos (espectrómetro, cromatógrafo y automuestreador) de manera simultánea, así como para la adquisición, reprocesamiento y deconvolución de datos para análisis desconocidos y compuestos específicos. Sin embargo, debido a las altas potencialidades que presenta este instrumento de ultra-alta resolución, y el trabajo con librerías, se dispondrá también de software de deconvolución ("*Deconvolution*") para discriminar picos que coeluyen, pero pertenecen a distintos compuestos, y creación de bases de datos propias. También se podrá trabajar con el software "*Compound Discoverer*" que es una herramienta poderosa utilizada en el campo de la metabolómica y la investigación química para el análisis de datos y la identificación de compuestos químicos en

muestras complejas. Por último, “*Mass Frontier*” permitirá una Interpretación espectral para una elucidación estructural en profundidad.