

# SEMINARIOS SAEM

## CICLO DE SEMINARIOS VIRTUALES EDICIÓN 2024



2º Seminario Virtual - 6 de septiembre - 11:00 a.m.

**“Beneficios de los datos de sección transversal de colisión (CCS) obtenidos por UPLC-ESI-IMS-QTOFMS y GC-APGC-IMS-QTOFMS para la identificación de moléculas pequeñas en aplicaciones de cribado”**

Dr. Juan Vicente Sancho Llopis | Department of Physical and Analytical Chemistry, Research Institute of Pesticides and Waters, Universitat Jaume I, 12071 Castelló, Spain

En esta presentación, se abordarán los beneficios y desventajas de implementar los sistemas LC-ESI-QTOFMS y GC-APCI-QTOFMS con tecnología IMS, en particular Waters Vion, en el flujo de trabajo de detección e identificación de residuos y contaminantes en muestras complejas.

Los principales beneficios de agregar separación IMS a UPLC-ESI-QTOFMS y GC-APCI-QTOFMS incluyen:

- Espectros de masas más limpios con energía de colisión alta y baja cuando se alinean mediante IMS, similar al espectro de masas de iones producto (MS/MS) sin la necesidad de volver a inyectar muestras y preseleccionar el ion precursor de interés. Los datos podrán consultarse retrospectivamente en el futuro, con datos de buena calidad para los iones principales y sus fragmentos.
- Posibilidad de resolver compuestos isobáricos/isoméricos coeluidos basados en movilidades iónicas parcialmente diferentes. Interesante para residuos y contaminantes, donde se podrían esperar isómeros potenciales, así como para discriminar metabolitos isoméricos conjugados.
- Es menos probable que los valores de CCS se vean afectados por la matriz a diferencia de lo que le ocurre al tiempo de retención cromatográfico. Por lo tanto, los valores de CCS serán comparables en la misma familia de instrumentos (el mismo separador de movilidad iónica), lo que promueve la construcción de bibliotecas empíricas de CCS para la identificación de residuos y contaminantes.
- Los valores de CCS están relacionados con la diferente forma de las moléculas ionizadas. Por lo tanto, la predicción de CCS para residuos o contaminantes sospechosos o sus metabolitos cuando faltan sus estándares podría ser una buena alternativa para la identificación tentativa junto con una anotación precisa de masas y fragmentos.



V Congreso Argentino de  
Espectrometría de Masa.  
23-25 octubre- 2024  
Buenos Aires, Argentina.

Sigamos compartiendo nuestros conocimientos en Espectrometría de Masa.

# SEMINARIOS SAEM

## CICLO DE SEMINARIOS VIRTUALES

### EDICIÓN 2024



2º Seminario Virtual - 6 de septiembre - 11:00 a.m.

**“Beneficios de los datos de sección transversal de colisión (CCS) obtenidos por UPLC-ESI-IMS-QTOFMS y GC-APGC-IMS-QTOFMS para la identificación de moléculas pequeñas en aplicaciones de cribado”**

Dr. Juan Vicente Sancho Llopis | Department of Physical and Analytical Chemistry, Research Institute of Pesticides and Waters, Universitat Jaume I, 12071 Castelló, Spain

La espectrometría de movilidad de iones (IMS) separa iones según su forma, masa y relación m/z, así como sus interacciones con un gas "tampón", lo que la convierte en una poderosa herramienta analítica para investigar muestras complejas. Las colisiones se producen entre iones y un gas amortiguador neutro bajo un campo eléctrico, lo que da lugar a diferentes tiempos de deriva en el rango de milisegundos. La sección transversal de colisión (CCS) de un ion es un valor IMS único y se calcula a partir del tiempo de deriva. La estructura química y la conformación tridimensional de una molécula influyen en la CCS, donde las moléculas más pequeñas (más esféricas y compactas) muestran valores de CCS más pequeños que las más extendidas (estructuras planas, cadenas extendidas, hélices). Con toda esta información química almacenada dentro de este valor, el CCS se puede utilizar como parámetro adicional para identificar un compuesto.

Tradicionalmente, la detección e identificación de compuestos se basa en la comparación de los espectros de masas exactas y el tiempo de retención con un estándar de referencia. Sin embargo, con los enfoques basados en la cromatografía convencional surge un problema adicional, los componentes isobáricos de la matriz de la muestra pueden interferir con la señal de un residuo o contaminante presente en la muestra o confundirse con residuos o contaminantes no presentes en la misma, lo que lleva a resultados falsos, negativos o positivos, respectivamente. Sin embargo, los valores de CCS se miden en la fase gaseosa, lejos de la fuente de iones, lo que significa que no se ven afectados por la matriz de la muestra y son consistentes entre instrumentos y entre diferentes condiciones experimentales. Por estas razones, el uso de valores de CCS como cuarta dimensión (junto con el tiempo de retención, la masa exacta y la intensidad) para identificar compuestos presenta una gran alternativa para los químicos analíticos.



V Congreso Argentino de  
Espectrometría de Masa.  
23-25 octubre- 2024  
Buenos Aires, Argentina.

Sigamos compartiendo nuestros conocimientos en Espectrometría de Masa.