

Permitiendo nuevos niveles de cuantificación

Usando el Sistema SCIEX Triple Quad™ 7500 LC-MS/MS – QTRAP® Ready, controlado por el software SCIEX OS

La capacidad de lograr un gran nivel de sensibilidad mientras se mantiene el desempeño cuantitativo es clave para alcanzar un resultado analítico robusto. El creciente número de flujos de trabajo exigentes que requieren una cuantificación confiable de más analitos por ensayo, en matrices cada vez más complejas, necesita de un instrumento MS sensible capaz de proporcionar un alto nivel de desempeño cumpliendo los desafíos analíticos. El sistema SCIEX Triple Quad™ 7500 LC-MS/MS–QTRAP Ready permite nuevos niveles de cuantificación en un amplio tipo de muestras y flujos de trabajo. La mayor sensibilidad se logra mediante la incorporación de elementos de hardware que permiten ganancias significativas en la generación, captura y transmisión de iones.

La mejora en la eficiencia de la captura y transmisión de los iones se debe a la guía de iones D Jet™, que logra una mayor sensibilidad al muestrear más iones y sin sacrificar la robustez. La generación y muestreo de iones mejorados se logra por una mejor desolvatación, dada por la adición de la tecnología E Lens™ que brinda más sensibilidad en ESI, al aumentar la intensidad de campo experimentada por las gotas en ESI. La versatilidad de la Fuente de iones OptiFlow® Pro otorga la capacidad de analizar un amplio rango de compuestos, cambiando entre el modo ESI y APCI. Además la arquitectura modular de la Fuente permite al usuario cambiar los flujos simplemente variando las sondas y los electrodos en la fuente. Esta versatilidad mejorada permite a los usuarios lograr una mayor sensibilidad en todas las condiciones, los labs de prueba

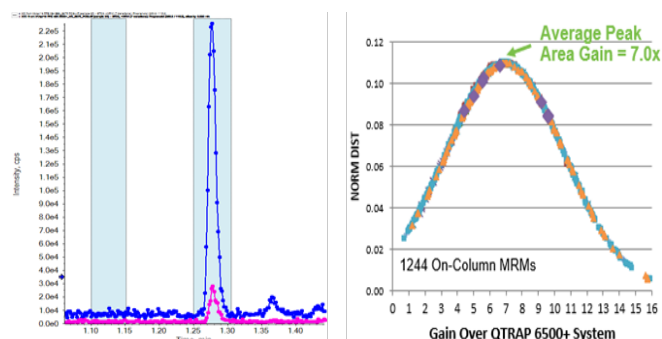


Figura 1. Ganancia de sensibilidad del sistema SCIEX 7500 sobre el sistema QTRAP 6500+. Se corrieron gran cantidad de analitos en varias matrices en ambos sistemas y se midieron las áreas de pico y las ganancias de S/N (Izquierda) Ejemplo datos de propanolol en plasma de rata, ganancia de área de 9 veces con ganancia de S/N de 3 veces. (Derecha) Resumen de comparación de 1244 MRMs en modo positivo y negativo en 10 estudios (pesticidas, drogas, péptidos), la ganancia promedio de área de pico en los compuestos fue de 7 veces.



futuras para innovaciones futuras en muchas aplicaciones diferentes.

Estos elementos tecnológicos integrados en el Sistema SCIEX 7500, dan como resultado ganancias promedio de área de pico, en diferentes tipos de analitos, de aproximadamente 7 veces (Figura 1), aportando al ensayo ganancias significativas de sensibilidad en muchas aplicaciones.^{1,2,3}

Innovaciones clave en el Sistema SCIEX Triple Quad 7500 – QTRAP Ready

- Guía de iones D Jet—Mejor captura y transmisión de iones, combinada con un orificio con mayor área de muestreo para un mejor muestreo de iones, resultando en una mayor sensibilidad
- Tecnología E Lens—Mejor generación de iones a través de una desolvatación de gotas ESI y una recolección de iones más eficiente
- Fuente de iones OptiFlow Pro —diseñada con arquitectura modular, para mayor robustez y fortaleza para preparar al laboratorio para el futuro
- QTRAP ready⁴—Funcionalidad de triple cuadrupolo para cuantificación, más el escaneo completo (full scan) de la trampa de iones lineal MS/MS para confirmación y MRM³ para selectividad⁵
- Sistema de detección con dinodo de alta energía y detector de pulso continuo —cambio rápido de polaridad (5 ms) y hasta 6 órdenes de magnitud en el rango dinámico lineal
- Software SCIEX OS—diseñado para la adquisición y el procesamiento de datos rápidos, intuitivos y simplificado, todo en una misma plataforma.

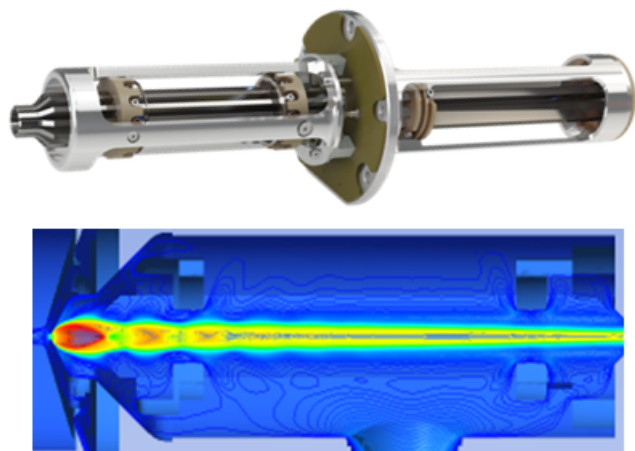


Figura 2. Guía de Iones D Jet. La guía de iones D Jet captura y transmite eficientemente los iones en el alto flujo de gas detrás de la placa del orificio.

Guía de Iones D Jet

Cuando los iones ingresan al espectrómetro de masas a través del orificio, desde presión atmosférica hacia el vacío, experimentan una gran expansión de chorro libre. Es muy importante que haya un elemento detrás del orificio que pueda capturar y enfocar estos iones de manera rápida y eficiente en un haz estrecho. Estos elementos han evolucionado a lo largo de los años, desde conos de skimmer a cuadrupolos para la guía de iones QJet® y ahora la guía de iones D Jet Ion.

La guía de iones D Jet tiene un diseño de doble etapa que transporta iones entre el orificio y Q0. En la primer etapa del vacío, se ha desarrollado una guía de iones RF dodecapolo para capturar y enfocar iones que se muestrean a través del orificio. Las guías de iones QJet en otros sistemas SCIEX son guías de iones cuadrupolo de una etapa. Las guías de iones cuadrupolo enfocan iones a lo largo del eje central de la guía de iones. Sin embargo son menos efectivos para operar a presiones de gas más altas. Por el contrario los multipolares de orden superior tales como los octapolos y dodecapolos confinan iones más hacia la periferia, y tienen mayor pero más uniforme potencial para un voltaje equivalente, lo que los hace ideales para el sistema SCIEX Triple Quad 7500 LC-MS/MS – QTRAP Ready.

Las guías de iones de alta presión como la D Jet requieren una gran cantidad de electrodos para generar un campo multipolo de alto orden. También deben diseñarse para restringir el flujo de gas y la presión en la Segunda etapa de la guía de iones para minimizar las ondas de choque que darían como resultado una eficiencia de transmisión deficiente. Para restringir el flujo de gas dentro de la guía de iones D Jet, las superficies de los electrodos se estrechan gradualmente y se inclinan hacia

adentro para proporcionar un radio más pequeño en la salida. Además, cada uno de la pluralidad de electrodos gradualmente se vuelve más grueso hacia el extremo de salida más angosto de la guía de iones.

Los resultados Experimentales y las simulaciones sugieren que la eficiencia en la transmisión de la guía de iones D Jet es superior a los diseños anteriores. La conclusión de las simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD) (Figura 2) es que el flujo de gas es crítico para la eficiencia de las guías de iones de alta presión. Aunque la contención eléctrica es necesaria el diseño de hardware optimizado para eliminar la emisión y otros efectos nocivos del flujo es crítico. La guía de iones D Jet ha sido optimizada para su uso a alta presión y provee un amplio y optimo potencial RF. Como resultado de esta optimización, las simulaciones han demostrado una eficiencia superior al 90% para la transmisión de iones a través de ambas etapas de la guía de iones D Jet.

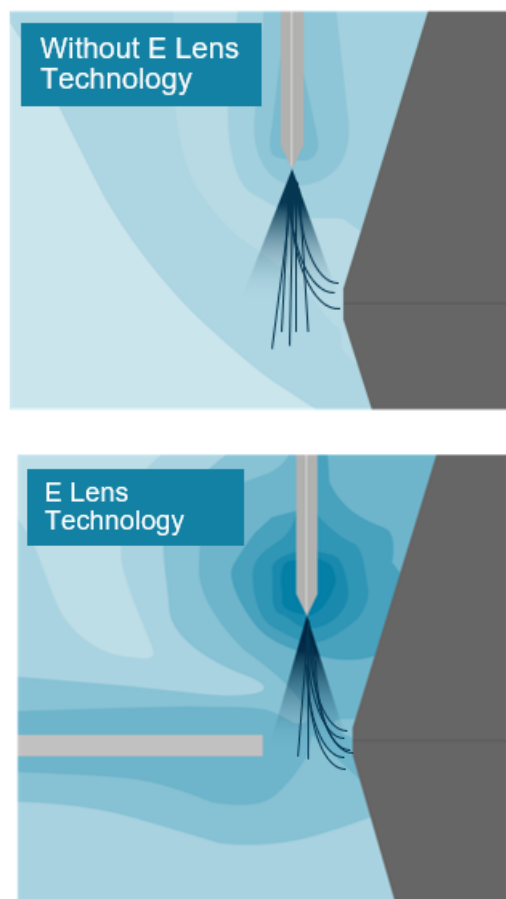


Figura 3. Tecnología E Lens. La tecnología E Lens crea una mayor intensidad de campo cerca del orificio del instrumento, lo que mejora la eficiencia de recolección de iones y conduce a una desolvatación de gotas ESI más energética, mejorando así la generación y sensibilidad de iones.

Black Tea Matrix

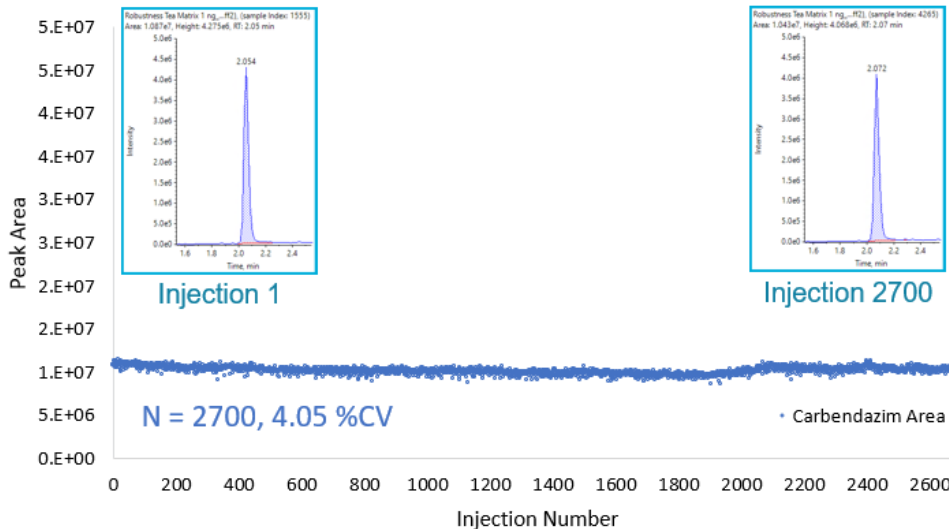


Figura 4. Gran robustez observada en 2700 inyecciones. Para probar la robustez, se realizó una gran cantidad de inyecciones usando un matriz muy compleja (té negro dosificado con carbendazim) usando un gradiente LC corto 4 min a 400 µL/min. Se graficó el área cruda del pico de carbendazim vs. número de inyección y se calculó la variación para estas áreas de pico era del 4.05% para 2700 inyecciones. También se muestran los datos crudos para la primera y la última inyección, destacando un cambio mínimo en S/N en este gran número de inyecciones de matriz compleja.

Fuente de Iones OptiFlow Pro con la Tecnología E Lens

La cuarta generación de la familia Turbo V™, la Fuente de iones OptiFlow Pro ofrece la mayor flexibilidad y funcionalidad, debido a la arquitectura modular, al tiempo que mantiene la robustez y la reproducibilidad de las generaciones previas. La fuente es compatible con un amplio rango de flujo, desde micro flujo (1 µL/min) hasta flujo analítico (hasta 3 mL/min), con electrodos y sondas intercambiables. La Fuente de iones OptiFlow Pro está optimizada para desempeño y robustez; no requiere ajuste posicional a ningún flujo. Las torres intercambiables ESI y APCI permiten al usuario cambiar fácilmente entre los modos de ionización para una amplia cobertura de compuestos.

La tecnología E Lens coloca un electrodo cerca del orificio para conducir los iones desde la columna del spray hacia el orificio. Este lente crea un campo más fuerte que los iones deben atravesar, lo que imparte más energía en la gota y causa una ruptura y liberación más eficiente de más iones, lo que resulta en una mejor recolección de iones (Figura 3). Esta desolvatación mejorada conduce a una mejor sensibilidad con ganancia hasta 2 veces, con mayores ganancias observadas para los péptidos cuando se combina con microflujo.⁷

Robustez en muchas inyecciones

La capacidad de ejecutar un ensayo en muchas muestras complejas durante varios días también es clave para el éxito en muchas aplicaciones. La clave para la robustez de los espectrómetros de masas SCIEX es la combinación del diseño de Fuente de iones OptiFlow Pro altamente eficiente y la geometría optimizada de la interfaz Curtain Gas™. Aquí se realizó un estudio en una matriz muy compleja, (té negro) para probar la robustez del sistema con la guía de iones D Jet en el sistema SCIEX Triple Quad 7500 LC-MS/MS – QTRAP Ready (Figura 4). Se observó una degradación mínima en el área de pico o disminución de la señal-ruido en 2700 inyecciones, con una variación del área de pico en el conjunto de datos de 4.05%. Estos resultados resaltan que la sensibilidad del instrumento aumenta sin pérdida de robustez, proporcionando un desempeño robusto para matrices biológicas complejas.

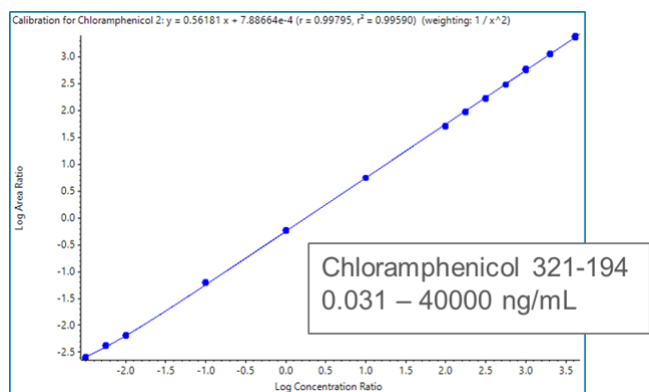


Figura 5. Amplio rango dinámico lineal. El Cloranfenicol se corrió en una matriz simple en un amplio rango de concentración con una linealidad observada desde 0.031 a 40000 ng/mL.

Rango dinámico lineal

El rango dinámico lineal (LDR) es importante en muchas aplicaciones donde las concentraciones de analito varían ampliamente. En el Sistema SCIEX 7500, se pueden lograr hasta 6 órdenes de magnitud en el LDR (Figura 5), lo que mejora el alcance cuantitativo y aumenta el rendimiento del laboratorio. Este sistema de detección equipado con un multiplicador de electrones multicanal y un algoritmo de corrección de tiempo muerto logra una tasa de conteo de pulsos muy alta. Como resultado, se pueden medir picos intensos de hasta 1×10^8 cps sin observar saturación del detector.

Además, debido a la presencia del dinodo de alta energía como parte del detector, el Sistema puede cambiar entre polaridades extremadamente rápido (5 ms), lo que permite la detección de un mayor número de analitos diversos en una sola inyección.

Conclusiones

El Sistema SCIEX Triple Quad 7500 – QTRAP Ready es la próxima plataforma cuantitativa de gama alta de SCIEX. Con la misma fortaleza y robustez de las generaciones anteriores, el Sistema SCIEX 7500 proporciona una mayor sensibilidad para satisfacer las necesidades de los ensayos más exigentes.

- La guía de iones D Jet y la tecnología E Lens integrada se combinan para brindar ganancias de sensibilidad significativas con respecto a la generación anterior de instrumentos: ganancias promedio de área de pico de MRM de 7 veces y ganancias de señal-ruido de 2.5 a 3 veces.
- La fuente de iones OptiFlow Pro, basada en la confiabilidad y eficiencia de la legendaria Fuente de iones Turbo V, ahora ofrece una gran flexibilidad para satisfacer las diversas necesidades de aplicaciones con una única solución de fuente. El diseño modular permite un cambio rápido entre regímenes de flujo alto y bajo, y se adapta a los requisitos de flujo de trabajo (modos de ionización ESI vs. APCI).
- Están disponibles hasta 6 órdenes de rango dinámico lineal y cambio rápido de polaridad (5 ms).

References

1. Sensitivity gains for the evolution of routine bioanalysis. [SCIEX technical note RUO-MKT-02-11885-A.](#)
2. Highly-sensitive pesticide analysis in baby food. [SCIEX technical note RUO-MKT-02-11958-A.](#)
3. High Sensitivity Peptide Quantification Workflow. [SCIEX technical note RUO-MKT-02-11882-A.](#)
4. Powerful scan modes of QTRAP® system technology . [SCIEX technical note RUO-MKT-02-8611-A.](#)
5. MRM³ quantitation for highest selectivity in complex matrices. [SCIEX technical note RUO-MKT-02-2739-A.](#)
6. [SCIEX OS Software](#): Transform your samples into meaningful analytical answers
7. Significant gains in quantitative sensitivity using microflow chromatography. [SCIEX technical note RUO-MKT-02-11887-A.](#)

The SCIEX clinical diagnostic portfolio is For In Vitro Diagnostic Use. Rx Only. Product(s) not available in all countries. For information on availability, please contact your local sales representative or refer to <https://sciex.com/diagnostics>. All other products are For Research Use Only. Not for use in Diagnostic Procedures.

Trademarks and/or registered trademarks mentioned herein, including associated logos, are the property of AB Sciex Pte. Ltd. or their respective owners in the United States and/or certain other countries.

© 2020 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-11886-A. AB SCIEX™ is being used under license.