

Simplificando una matriz compleja... ¡con filtros espectrales!

Posted by Alex Hodgson on May 3, 2017

Una matriz de muestra compleja es la pesadilla de la química analítica, y es por eso que sufrimos en la preparación de la muestra y el desarrollo del método GC para reducir las interferencias de fondo y aislar a nuestros analitos de interés. Es la aguja proverbial en el problema del pajar. ¿Y si se trata de una matriz compleja no resuelta o problema "chepa-ó-gramo"? ¡Olvidate! Incluso si puedes encontrar tu objetivo, ¿cómo lo integras? ¿qué línea de base escoges?

Pero ¿y si al buscar la aguja, tuvieras un nuevo par brillante de gafas relucientes de rayos X? Bien, si esa "aguja" es espectralmente distinta, podemos utilizar el filtrado espectral para eliminar esencialmente nuestro fondo de matriz por completo, dejando a nuestro objetivo aislado en un fondo mucho menos ruidoso. ¿Qué quiero decir con "espectralmente distinto"? Por supuesto, cada compuesto que absorbe en el rango VUV produce un espectro único, pero las clases de compuestos que comparten características estructurales similares tendrán características espectrales similares. Por ejemplo, hidrocarburos de cadena lineal (C10+) largos tienden a tener la respuesta más alta a 125-135 nm, con una respuesta decreciente a alrededor de 160-170 nm. Los compuestos con restos aromáticos muestran una buena respuesta en el intervalo de 170-240 nm, tal como 3,5-di-terc-butil-4-hidroxitolueno (BHT) y benzotiofeno (Figura 1).



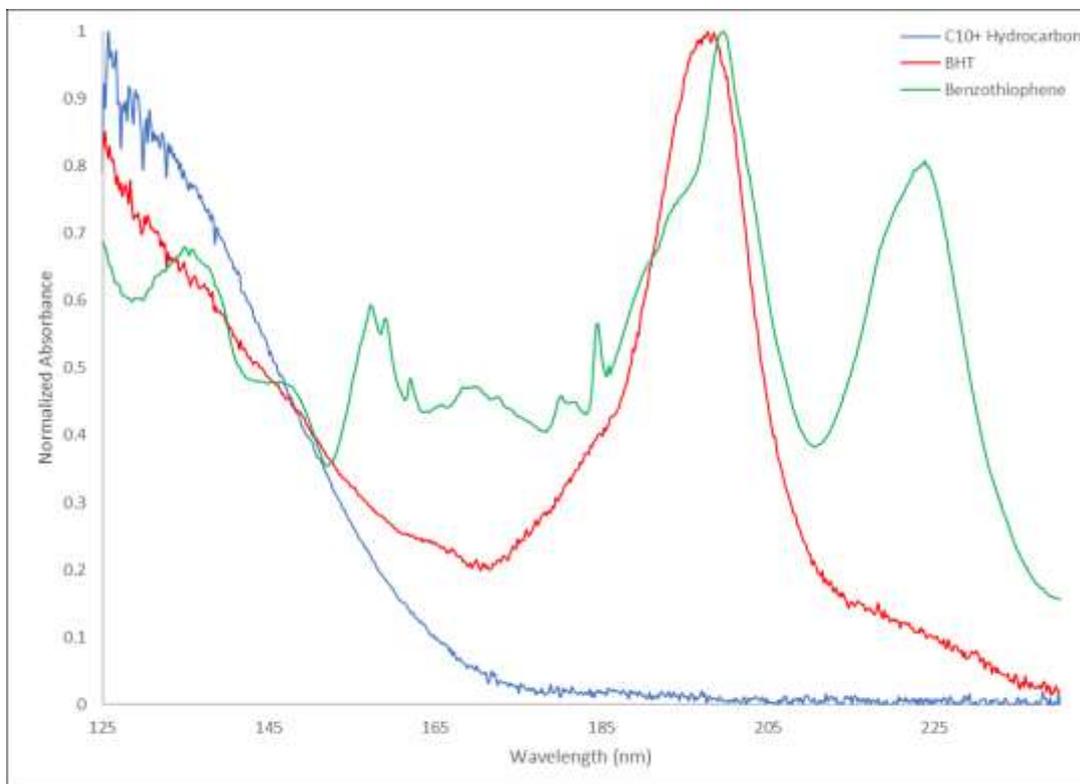


Figure 1: Spectra of a C10+ hydrocarbon (blue), BHT (red), and benzothiophene (green)

Pero ¿por qué BHT y benzotiofeno? Éstos representan dos categorías principales de compuestos en el aceite de transformador, siendo los primeros, inhibidores de oxidación y estos últimos, compuestos de azufre corrosivos. La Figura 2 muestra cuatro filtros espectrales para el cromatograma de una mezcla de 50ng de dos inhibidores de oxidación (BHT y 2,6-di-terc-butilfenol) y tres sulfuros corrosivos (benzotiofeno, dibenzotiofeno y disulfuro de bencilo) en una dilución 1:10 de aceite de transformador. Basta con mirar los filtros verde y azul (125-160 nm y 125-240 nm, respectivamente), para darnos cuenta qué sería difícil localizar con fiabilidad - mucho menos cuantificar - cualquiera de estos analitos distintos de benzotiofeno a 3,55 minutos. Sin embargo, con un cambio simple del filtro (filtro rojo - 170-200 nm, filtro púrpura - 225-235 nanómetro) la magnitud de la UCM se reduce perceptiblemente, dejándonos con picos fácilmente distinguibles. Si aplicamos un filtro aún más enfocado, como con el filtro de 225-235 nm, ¡la altura del pico del dibenzotiofeno casi se triplica!

Aunque no hay reemplazo para una buena cromatografía, los filtros espectrales son una herramienta útil cuando estamos tratando de comprimir la cromatografía para acortar los tiempos de ejecución o, en el caso de la joroba, cuando la matriz se niega a resolver en absoluto. Y como los filtros espectrales son una herramienta de procesamiento de datos, podemos crear y agregar cualquier número de filtros espectrales al archivo de ejecución después de que se recopilen los datos. Funciona como un cromatograma de iones extraídos en MS y potencialmente nos da una cantidad infinita de datos... ¡en un solo análisis!

Simple, ¿verdad?

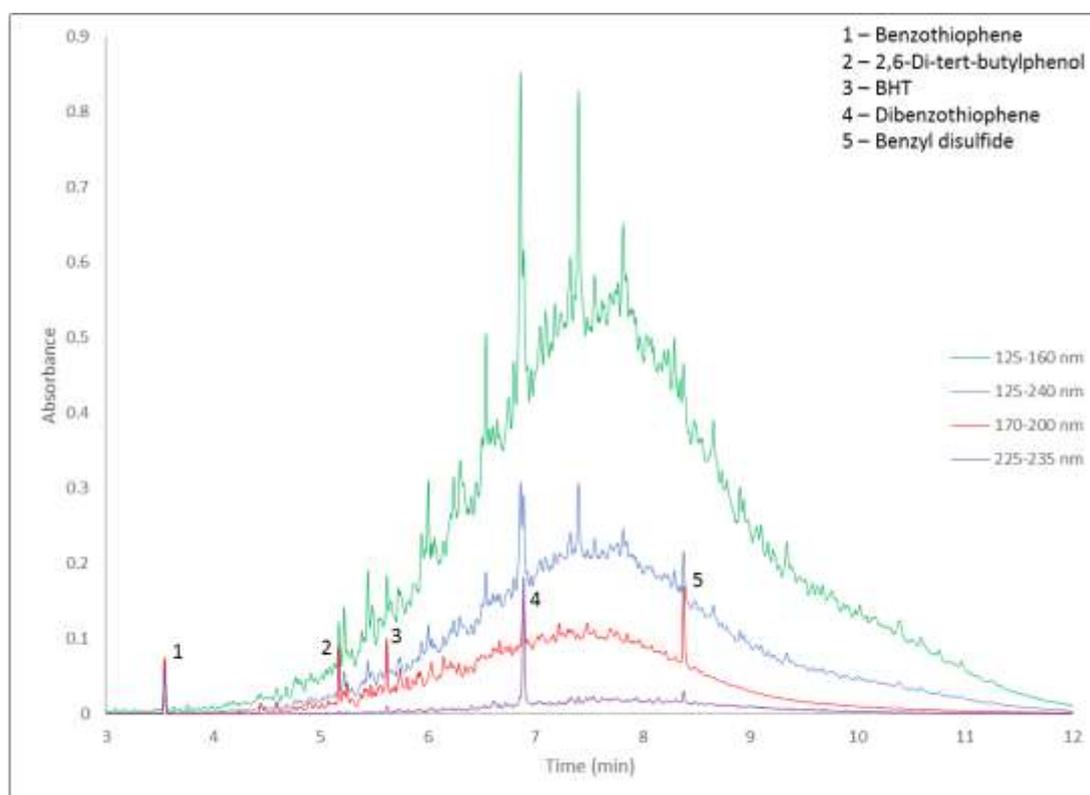


Figure 2: 50 ng mixture of additives in a 1:10 dilution of transformer oil

Puede acceder al artículo original y sus referencias accediendo a este enlace: <http://bit.ly/2uhvXrh>

INFORMACIÓN PUBLICADA EN WWW.VUVANALYTICS.COM
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR VUV ANALYTICS EN ESPAÑA

PARA MÁS INFORMACIÓN, POR FAVOR CONTACTE CON NOSTROS

Teléfono: +34 91 849 90 18
e mail: info@gallpe.com
Soporte: <https://soportegallpe.zendesk.com>
web: www.gallpe.com

Redes Sociales

