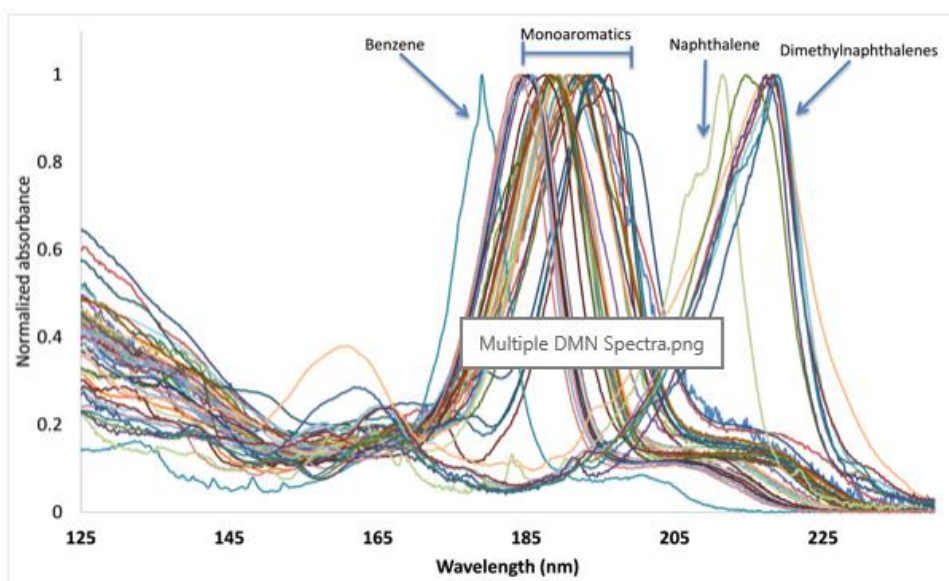


Espectro de Absorción Ultravioleta de Vacío - Cuando un Poco Significa Mucho

Posted by [Jack Cochran](#) on March 27, 2017

Quizás haya leído mi última entrada en el blog acerca del uso de la espectroscopía ultravioleta de vacío (VUV) como poderosa herramienta de detección de terpenos en cromatografía de gases (GC). Si así es, recordará que donde VUV brilla (permítame decirlo así, como pequeña broma de espectroscopía) está produciendo espectros de absorbancia única para los diferentes terpenos, incluso para los isómeros. Los espectros únicos son lo que permiten la deconvolución de los picos de coelución cromatográfica, algo de lo que sé un poco por mi trabajo con espectrómetros de masas de time-of-flight. En la espectrometría de masas (MS), un (principalmente) único ión m/z para cada compuesto coeluyente es lo que permite iniciar la rutina matemática para conseguir la deconvolución y seguirlo con un gráfico de iones m/z para cada pico coeluyente y obtener su espectro verdadero. Esa lógica siempre me ha resultado sencilla para ocupar mi mente con ella. Igual de fácil es ver cómo falla el mismo enfoque de deconvolución MS en isómeros coeluyentes ya que los isómeros tienen espectros de masa esencialmente idénticos.



Como usuario de cromatografía de gases con MS el problema del isómero coeluyente no me molestó nunca demasiado por permitirme practicar el arte de la separación. Sin embargo, inevitablemente, la separación crítica de compuestos termina implicando tiempos de operación más largos, no deseables, lo que nos conduce de nuevo a valorar la técnica de VUV y su singularidad. La compresión de la cromatografía en GC-VUV es alcanzable para compuestos estructuralmente similares. Pero para lo que no estaba preparado cuando me uní a VUV Analytics y empecé a revisar los espectros de absorbancia fue ver lo similar que podrían parecer para un ojo no entrenado (Figura 1 - dimetilnaftalenos). Recuerdo haber iniciado un debate sobre este asunto con mis colegas Sean Jameson y Dale Harrison y me brindaron sus educadas sonrisas que parecían decir "chico nuevo". Desde entonces he aprendido que cada pequeño "wiggle" (movimiento) en un espectro no sólo significa singularidad, sino que es altamente reproducible, lo que simplifica los algoritmos de deconvolución espectral. De hecho, para el ejemplo de dimetilnaftalenos, Kevin Schug ya observó que era posible deconvolver isómeros que tenían diferenciales de concentración de 100. Por cierto, lo que sí reconocí enseguida es la ventaja de los espectros de absorbancia similares en la ayuda para la identificación cualitativa de compuestos y la filtración de clases (¡el chico nuevo no estaba tan desorientado!).

Creo que es importante terminar afirmando inequívocamente que GC y MS y VUV son técnicas complementarias que pueden ser utilizadas juntas para resolver problemas complejos de química analítica. Con todo, ¡sigo estando muy orgulloso de estar asociado con el único de ellos que es nuevo desde las últimas décadas!

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

