

“Vivir Mejor A Través del Sabor de la Química Parte 2- Leer entre (o debajo) líneas ”

Published by Alex Hodgson, VUV Analytics on October 18, 2017

¿Qué pasa si te digo que el cromatograma de terpenos que te mostré la última vez no es lo que parece ser?

Claro, por encima parece un Viejo cromatograma normal, pero mirando debajo de esa línea inocua hay un sinfín de datos espectrales de absorbancia ultravioleta de vacío, el corazón palpitante de nuestra tecnología y un poder que te llevaría a una locura Lovecraftiana si lo vislumbrases directamente.

Pero hemos doblegado a este Gran Viejo a nuestra voluntad, ignorando insignificancias como coeluciones y remodelando el paisaje cromatográfico a voluntad. ¡Un poder tan bello como terrible! Muahahaha! Lo siento, a veces el poder se lleva lo mejor de nosotros.

En la Parte 1 comprimimos deliberadamente la cromatografía para nuestro patrón de terpenos y forzamos algunas coeluciones. Pudimos hacer esto porque podemos distinguir visualmente los espectros de absorbancia de los isómeros estructurales. En la Parte 2 de “Vivir Mejor A Través del Sabor de la Química”, utilizaremos estos espectros únicos de absorbancia y profundizaremos en los datos cromatográficos para deconvolucionar espectralmente algunos de estos isómeros coeluyentes.

La Figura 1 muestra cinco monoterpenos eluyendo en un intervalo de tiempo de 0,2 minutos, cuatro de los cuales son isómeros. Importante: recuerde que nuestros datos cromatográficos son sólo una representación visual de los datos de absorbancia. Echemos un vistazo más de cerca a los datos de absorbancia en cuatro regiones a lo largo de este grupo de picos y veamos qué nos muestran los espectros.



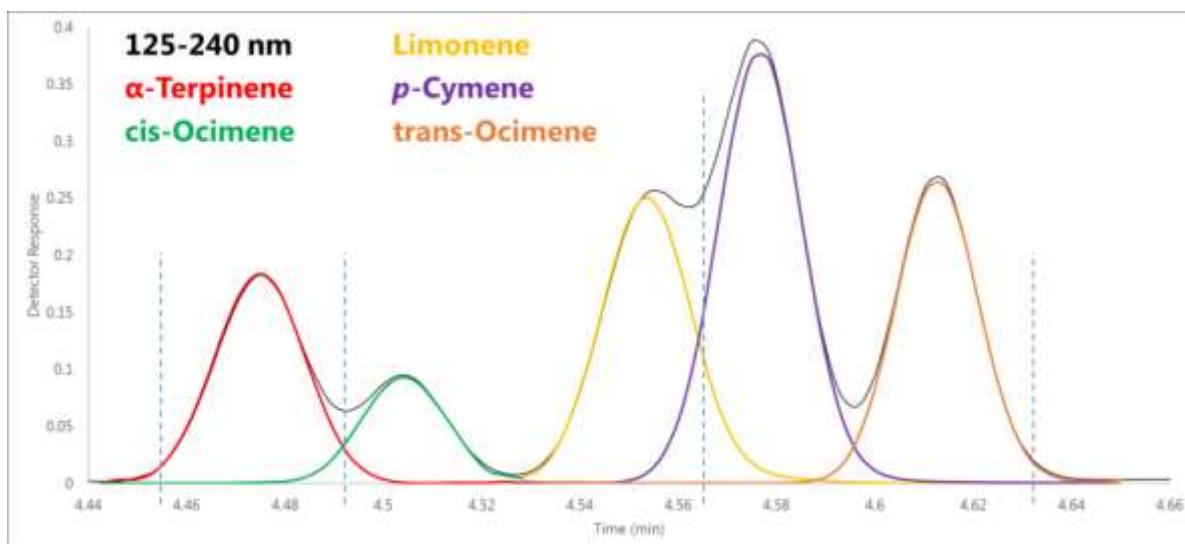


Figura 1. Utilizando los datos espectrales brutos representados visualmente en este cromatograma, podemos deconvolucionar estos picos coeluyentes, cuatro de los cuales son isómeros estructurales.

En la Región 1, donde esperamos ver solo el analito α -terpineno, eso es exactamente lo que encontramos y el ajuste espectral de 0.999 definitivamente respalda esta afirmación (Figura 2).

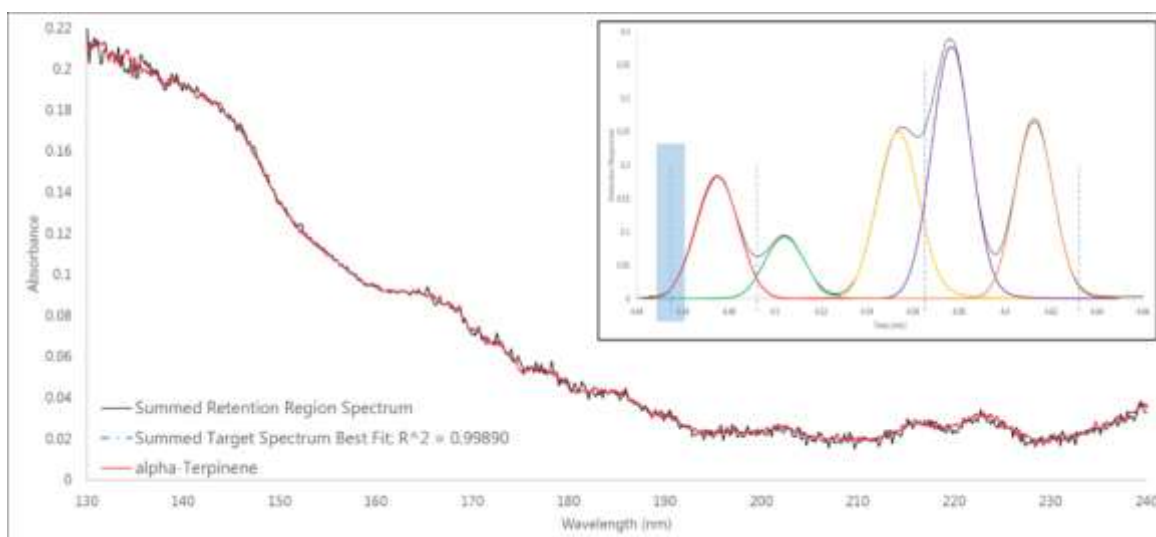


Figura 2. La Región 1 (resaltada en azul) muestra la coincidencia solo con el espectro del analito α -terpineno.

La segunda región es nuestra primera coelución: α -terpineno y cis-ocimeno, que son isómeros de monoterpeno (Figura 3). De nuevo, tenemos un ajuste espectral de 0.999+, que nos da la confianza en nuestros datos. Pero ¿cómo podemos estar tan seguros? Recordando la Ley de Beer, la absorbancia medida es linealmente proporcional a la cantidad de analito que pasa por la celda de flujo. Por lo tanto, los espectros de la librería de analitos individuales pueden sumarse para ajustarse al área del espectro de absorbancia capturado.

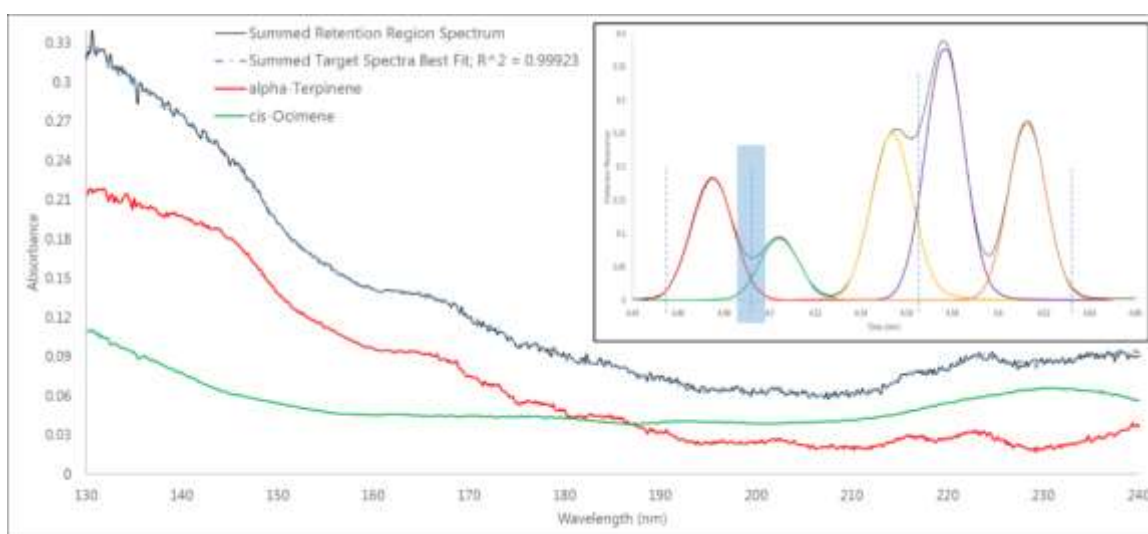


Figura 3. En esta coelución de α -terpineno y cis-ocimeno en la región 2, podemos ver que el espectro medido es simplemente la suma de las absorbancias de los espectros individuales de estos isómeros.

La tercera región es otra coelución (Figura 4), esta vez entre limoneno y p-cimeno (y ajuste de 0.999+). Si bien estos no son isómeros, esta deconvolución resalta, cómo podemos ver visualmente, que el espectro A más el espectro B es igual a nuestro espectro de mejor ajuste.

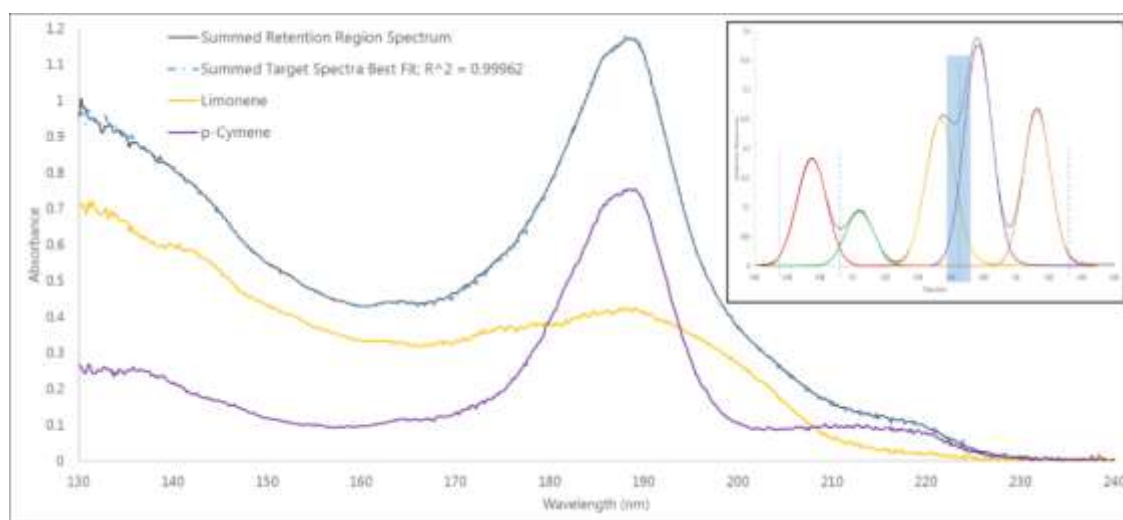


Figura 4. La región 3 tiene otra coelución, entre limoneno y p-cimeno, en la que podemos ver más claramente que los espectros de los componentes se pueden sumar para que coincidan con el espectro de absorbancia medido.

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

Finalmente, volvemos a una sola coincidencia de espectro de analito en la cuarta región, que en este caso es un ajuste de 0.998 a trans-ocimeno (Figura 5).

De acuerdo, tal vez me exalté un poco con el poder de los datos espectrales y espero que tú aún no te hayas vuelto loco. Pero también espero que veas que los datos de absorbancia son lo suficientemente potentes como para separar los isómeros coeluyentes... ¡LO QUE NO ES POCA COSA!

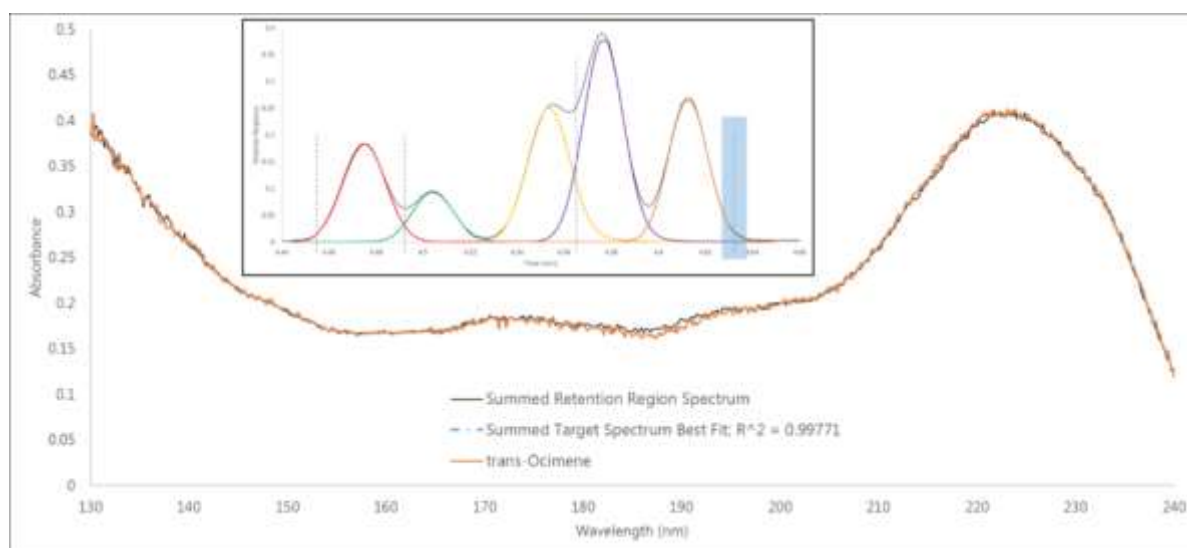


Figura 5. En la región 4 volvemos a una única coincidencia de espectro, esta vez de trans-ocimeno.

¡La próxima vez veremos algunas muestras reales echando un vistazo a los terpenos en aceites esenciales!

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



GALLPE-AC SOLUCIONES Y SERVICIOS PROFESIONALES, S.L • NIF B81731960

Inscrita en el Registro Mercantil de Madrid – Tomo 12175, Folio 109, Sección 8, Hoja nº 192443, Inscripción 1ª. **5/5**