

Food and Environmental

Confirmación de contaminantes en el agua utilizando el sistema SCIEX Triple Quad™ 5500+ LC-MS/MS - QTRAP® Ready y el software SCIEX OS-Q

Combinando la última plataforma QTRAP con software integrado para la confirmación de ID de alta confianza

KC Hyland
SCIEX, Redwood City, CA, USA

Qué: los laboratorios de pruebas se enfrentan con frecuencia a la necesidad de más información confirmatoria cuando se trata de la identificación de contaminantes en muestras ambientales. En matrices complejas, las interferencias pueden complicar la interpretación de los datos, lo que da como resultado falsos positivos o niveles de residuos informados que pueden cuestionarse. La combinación de velocidad y sensibilidad con la tecnología QTRAP y el software SCIEX OS-Q permite la recopilación de espectros MS/MS de exploración completa para contaminantes antropogénicos específicos en muestras de agua. Esos datos MS/MS se pueden buscar posteriormente en las bibliotecas verificadas por SCIEX para obtener una confirmación cualitativa inequívoca de la detección e identificación de pesticidas.

Cómo: El método de MS se configuró con una lista específica de PPCP y pesticidas que comprende más de 200 transiciones MRM. Los criterios IDA (Adquisición dependiente de la información) se definieron de manera que la adquisición de Ion de producto mejorado (EPI) se activaría cuando una señal MRM excediera un umbral de 2000 cps. Este tipo de adquisición de datos da como resultado la recopilación de información espectral MS/MS además de la señal MRM (Figura 1).

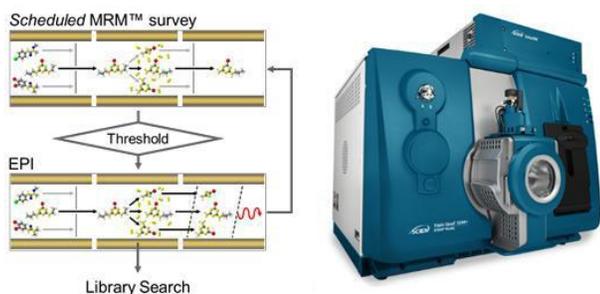


Figura 1. El sistema SCIEX Triple Quad 5500+ - QTRAP Ready para MRM-MS/MS. El sistema SCIEX Triple Quad 5500+ - QTRAP Ready para MRM-MS/MS. La funcionalidad del sistema QTRAP se empleó con el tipo de escaneo EPI activado por la señal de los pesticidas objetivo monitoreados en modo MRM. El espectro MS/MS resultante se comparó con los espectros de la biblioteca para su confirmación.

Se recogieron muestras del agua superficial del ambiente y se analizaron. Los datos se procesaron en el software SCIEX OS-Q para cuantificación por MRM e identificación espectral por coincidencia de biblioteca. La figura 2 muestra los espectros de MS/MS que se utilizan para confirmar la identidad de acefato tanto por MS/MS como por tiempo de retención. Esta rigurosidad adicional en la confirmación de identidad podría ayudar a proteger contra la notificación de falsos positivos y proporcionar confianza adicional y defendible en los resultados cualitativos y cuantitativos.

Index	Sample T. (min)	Component	Area	Retention Time	Signal	Processor	RT Conf.	Library Conf.	Library Hit	Library Score
763	Unknown	Thiacloprid-1	1.142e6	4.14	179.4	253.200	✓	✓	Thiacloprid	99.0
637	Unknown	Clothianidin-1	2.501e7	3.58	2109.7	250.123	✓	✓	Clothianidin	98.2
186	Unknown	Chlorpyrifos-1	4.015e3	6.34	4.0	350.000	✓	✓	Clofentapropargil	97.2
764	Unknown	Thiamethoxam-1	6.197e5	3.10	139.6	292.000	✓	✓	Thiamethoxam	96.8
606	Unknown	improvingha-1	5.775e7	3.81	2356.4	233.000	✓	✓	improvingha	96.6
585	Unknown	Flonicamid-1	2.006e7	3.11	1489.7	230.000	✓	✓	Flonicamid	95.8
697	Unknown	Acetamiprid-1	1.103e6	3.84	219.6	233.200	✓	✓	Acetamiprid	95.3
632	Unknown	Thiacloprid-1	1.948e6	4.19	25382.2	253.200	✓	✓	Thiacloprid	95.1
618	Unknown	Fluralaner-1	1.206e5	6.05	29.9	301.000	✓	✓	Bifenoxate	94.2
738	Unknown	Methoprene-1	6.913e3	6.76	2.8	279.000	✓	✓	Methoxyfenozate	88.3
448	Unknown	Chlorpyrifos-1	2.839e3	6.16	4.6	350.000	✓	✓	Clofentapropargil	87.8
733	Unknown	Fenitrothion-1	2.028e4	5.15	3.0	279.014	✓	✓	Quaflyl	87.1
790	Unknown	Caffeine-1	2.239e6	3.46	18.8	195.100	✓	✓	Trifluoruron BH 833-5	87.1
551	Unknown	Sulfamerazine-1	3.808e3	3.35	3.1	279.000	✓	✓	Quaflyl	87.0
613	Unknown	Pachlobutrazol-1	6.285e4	5.24	648.0	294.100	✓	✓	Pachlobutrazol	86.7
4	Unknown	Caffeine-1	1.337e8	3.46	241.7	195.100	✓	✓	Trifluoruron BH 833-5	86.4
83	Unknown	Methoprene-1	3.296e3	6.16	2.8	279.000	✓	✓	Quaflyl	85.9
695	Unknown	Acetamiprid-1	5.075e5	3.85	384.8	184.100	✓	✓	Acetamiprid	84.9
765	Unknown	Acetamiprid-1	6.303e3	4.47	1.6	342.000	✓	✓	Thiamethoxam	84.8

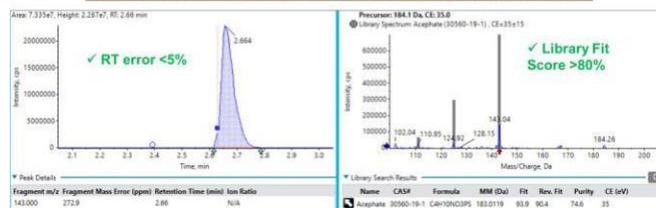


Figura 2. Alta confianza en la detección positiva posible con MS/MS y el software SCIEX OS-Q. La identificación y cuantificación de contaminantes se puede lograr con alta confianza utilizando la trampa de iones para recolectar espectros de MS/MS además de los picos de MRM. El tiempo de retención más los espectros de MS/MS confirman que el pico identificado es acefato. La tabla de resultados del software SCIEX OS-Q utiliza características visuales (marcas de verificación verdes) en las columnas de Confianza, donde los picos se han confirmado con una puntuación de ajuste de la biblioteca de > 80%. Las columnas de Confianza se pueden filtrar y ordenar para encontrar coincidencias positivas o potencialmente coincidencias rápidamente, lo que hace posible la evaluación rápida de grandes conjuntos de muestras, lo que en última instancia resulta en una mayor eficiencia del procesamiento de datos y una mayor confianza cualitativa en las detecciones informadas durante los informes de resultados de residuos en muestras de agua.