



Liquid Chromatography High Resolution Mass Spectrometry (LC-HRMS)

<http://lppt.ugm.ac.id>
Monthly Newsletter
Juni 2022

LC-HRMS

Liquid Chromatography High Resolution Mass Spectrometry (LC-HRMS) adalah salah satu instrumen yang ada di LPPT UGM. *LC-HRMS* merupakan kromatografi cair yang digabungkan dengan spektrometri massa resolusi tinggi.



Gambar. Instrumen LC-HRMS
Thermo Scientific Q Exactive benchtop

LC-HRMS di LPPT

Thermo Scientific Q Exactive benchtop LC-HRMS menggabungkan *high-performance quadrupole precursor* dengan *high-resolution (up to 140,000 FWHM) accurate-mass (HR/AM) Orbitrap detection* untuk memberikan kinerja tinggi dan keserbagunaan yang menakjubkan. Menggunakan *software Quanfirmation™* terbaru memungkinkan untuk melakukan karakterisasi, mengukur secara kuantitatif, dan mengonfirmasi dalam analisis tunggal dengan satu instrumen.

Data yang dihasilkan memberikan kualitas yang unggul dengan tingkat kepercayaan yang tinggi untuk berbagai aplikasi kualitatif dan kuantitatif. Kecepatan *scan* yang tinggi dan kemampuan *spectral multiplexing* membuat instrumen ini kompatibel dengan *UHPLC*, *nanoLC*, *PaperSpray*, dan teknik kromatografi cepat, sehingga meningkatkan produktivitas ke level yang baru.

Peningkatan teknis analisis pada instrumen Q Exactive memaksimalkan kinerja dengan kehandalan yang tinggi untuk aplikasi molekul besar dan kecil. *Advanced quadrupole technology (AQT)* meningkatkan pemilihan prekursor dan transmisi untuk kuantisasi yang lebih akurat pada analit dengan *low abundance* dalam matriks yang kompleks.

Teknologi canggih dari *data-dependent acquisition (DDA)* dan *parallel reaction monitoring (PRM)* menghasilkan data kuantitatif dengan hasil kualitatif yang lengkap. *An advanced active beam guide (AABG)* mengurangi *noise* dan memperpanjang interval perawatan.

HR/AM serta kemampuannya dalam *full scan* mampu menangkap semua data sampel sepanjang waktu dan memungkinkan analisis data tanpa perlu mengulang kembali sampel. Kunci utama dari aplikasi Q Exactive dapat digunakan untuk analisis metabolisme yang tidak ditargetkan, proteomik, dan bioanalisis untuk biofarmasi, penelitian klinis, analisis halal gelatin, penyalahgunaan obat-obatan, doping olahraga (kuantisasi urin manusia dan kuda), analisis lingkungan (*screening* kontaminan dan kuantitatifnya), analisis keamanan pangan dan masih banyak lagi.



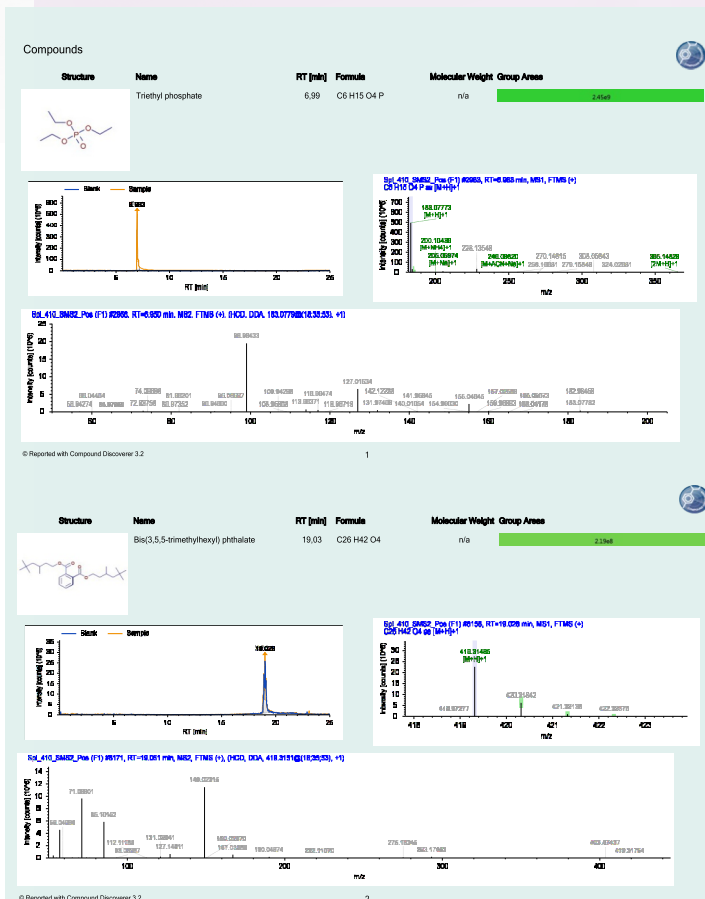
Gambar. Teknisi sedang memasukkan sampel LC-HRMS ke dalam auto sampler

Contoh hasil screening LC-HRMS

No	Name	Formula	Annot. Source: Predicted Compound	Annot. Source: Metabolic Search	Annot. Source: ChemSpider Search	Annot. Source: DetMass (g/mol)	Calc. MW	RT [min]	Area (Max)	# ChemSpider Results	# mCloud Results	mCloud Best Match	mCloud Best Match Confid.	MS2	Group Area: Sample
1	Triethyl phosphate	C6 H15 O4 P	Full match	Full match	No results	Full match	1.88	182.07	6.99	2445484897	2	1	99.2	90.000 for pH 2.4E-09	
2	Bis(3,5,5-trimethylhexyl) phthalate	C26 H42 O4	Full match	Full match	No results	Partial match	1.47	418.308	19.025	287455613	4	2	97.6	80.8.000 for pH 2.2E-08	
3	Diethyl phenyl phthalate	C24 H18 O4	Full match	Full match	No results	Full match	3.85	390.276	18.338	23371178.6	13	8	99.7	93.4.000 for pH 2.2E-08	
4	Encamide	C22 H43 N O	Full match	Full match	No results	Full match	1.92	337.334	17.497	205583402.9	0	1	80.5	50.3.000 for pH 2E-08	
5	Diethyl phosphate	C4 H11 O4 P	Full match	Full match	No results	Full match	1.81	154.039	6.993	180135393.4	1	1	95.6	9.8.000 for pH 1.8E-08	
6	N,N-dimethylamine	C3 H11 N	Full match	Partial match	Partial match	Full match	0.42	122.098	3.781	103892478.3	10	3	79	6.9.000 for pH 1E-08	
7	Bis(3,5,5-trimethylhexyl) phthalate	C26 H42 O4	Full match	Full match	No results	Partial match	1.75	418.308	18.914	102010653.2	4	1	97.8	93.9.000 for pH 1E-08	
8	Triethyl glycol monobutyl ether	C10 H22 O4	Full match	Full match	No results	Full match	1.15	206.152	6.655	96616245.81	0	1	97.7	90.6.000 for pH 9.7E-07	
9	(+)-(2S,3S)-Dihomocitronellol	C8 H16 O4	Full match	Full match	No results	Partial match	1.20	314.243	11.828	79307418.97	7	2	88.6	81.4.000 for pH 2.8E-07	
10	3-Amino-2,2-dimethylbutan-3-ol	C5 H12 O2	Full match	Full match	No results	Not the top	0.84	138.068	8.231	6707685.29	28	15	89.8	9.3.000 for pH 1E-07	
11	Betaine	C5 H11 N O2	Full match	Full match	Partial match	Partial match	0.3	117.079	1.021	6559355.51	14	3	97.9	9.9.000 for pH 6.6E-07	
12	Diethyl phosphate	C4 H11 O4 P	Full match	Full match	No results	Full match	1.71	154.039	1.608	61904002.85	1	2	90.3	9.5.000 for pH 6.2E-07	
13	N-(2,4-Dimethylphenyl)formamide	C9 H11 N O	Full match	Full match	No results	Partial match	0.93	149.084	7.492	29427409.47	10	2	90.1	56.2.000 for pH 3.9E-07	
14	Diisobutylphthalate	C16 H22 O4	Full match	Full match	Partial match	Partial match	1.11	278.152	14.192	34588297.22	15	5	99.5	10.0.000 for pH 3.5E-07	
15	Quercetin	C15 H10 O7	Full match	Full match	Full match	Full match	1.83	302.042	0.231	30089258.34	23	9	98.3	98.4.000 for pH 3E-07	
16	2,2,6,6-Tetramethyl-4-piperidol	C9 H19 N O	Full match	Full match	No results	Full match	1.12	157.146	6.655	29082451.39	0	2	90.8	76.7.000 for pH 2.9E-07	
17	Guanine	C5 H5 N5 O	Full match	Full match	Full match	Full match	1.41	151.049	1.096	24831513.62	4	1	97.5	99.0.000 for pH 2.7E-07	
18	DEET	C12 H17 N O	Full match	Full match	No results	Full match	0.84	191.131	9.48	23886095.72	5	1	98.3	92.7.000 for pH 2.4E-07	
19	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	C15 H22 O3	Full match	Full match	Partial match	Partial match	0.95	234.162	13.364	23657932.39	73	5	96.3	77.5.000 for pH 2.4E-07	
20	Capnolactam	C6 H11 N O	Full match	Full match	No results	Full match	0.8	131.084	3.981	23580285.03	4	1	94.4	71.7.000 for pH 2.4E-07	
21	Tenanol	C12 H24 O3	Full match	Full match	No results	Full match	0.74	216.172	11.549	20362364.22	4	1	93.6	68.7.000 for pH 2E-07	
22	Quercetin	C15 H10 O7	Not the top	Full match	Full match	Full match	1.83	302.042	0.597	17598139.04	23	9	98.3	98.4.000 for pH 1.8E-07	
23	1,2-Ethanedithiol	C2 H6 S2	Full match	Full match	Not the top	Full match	1.71	114.121	15.712	16794154.88	30	5	84.2	71.1.000 for pH 1.1E-07	

Gambar. Contoh hasil screening sampel LC-HRMS

Setiap senyawa dari hasil *screening* LC-HRMS diatas, dapat dilihat secara detail. Berikut adalah contoh detail senyawa triethyl phosphate dan senyawa Bis(3,5,5-trimethylhexyl) phthalate:



Gambar. Hasil screening detail senyawa triethyl phosphate dan senyawa Bis(3,5,5-trimethylhexyl) phthalate

Keunggulan Instrumen LC-HRMS di LPPT

Thermo Scientific™ Q Exactive™ LC-HRMS adalah alat yang ideal untuk *screening* secara kuantitatif/kualitatif, dengan *specifity* yang jauh lebih baik dari level *triple quadrupole*, *Q-TOF*, atau *Q-Trap*. Alat ini mampu melakukan *screening* dan kuantifikasi antibiotik, pestisida atau hormon, *data-dependent™*, kemampuan *full-scan MS/MS* dengan resolusi *superior* mencapai 14.000 dan akurasi massa dengan tingkat kepercayaan tertinggi dalam setiap *ID*. *Thermo Scientific™ Q Exactive™ Plus LC-HRMS* membuat analisis kuantitatif ke tingkatan yang berbeda, memberikan kekuatan *PRM* dengan tingkat kepercayaan yang hanya mungkin dilakukan dengan resolusi tinggi, dengan menggunakan *accurate-mass Orbitrap™ technology*. *LC-HRMS* dapat digunakan untuk mengidentifikasi, mengukur, dan mengonfirmasi dalam analisis tunggal menggunakan satu spektrometer massa.

Pelatihan/webinar LC-HRMS

Pelatihan/webinar terakhir terkait Instrumen *LC-HRMS* dilaksanakan pada bulan Desember 2021. Untuk pelatihan/webinar Instrumen *LC-HRMS* tahun ini direncanakan akan diadakan pada bulan Agustus 2022. Informasi detail terkait pelatihan akan disampaikan melalui web LPPT UGM.

Webinar High Resolution Mass Spectrometry

Rabu
8 Desember 2021
08:00 - 11:00 WIB

Link webinar akan dikirimkan ke peserta yang telah mendaftar.

Free
*E-Sertifikat

Pemateri:

Tri Joko Raharjo, S.Si., M.Si., Ph.D.
Dosen FMIPA UGM

Praktikum:

Triwahyudi, S.Kom.
Laboran LPPT UGM

Gambar. Proster pelatihan Instrumen LC-HRMS tahun 2021