

Φασματομετρία Μαζών μέρος 2^ο

Δρ. Μάριος Κωστάκης

1

Παρούσα Κατάσταση

- Τα τελευταία 20 χρόνια, η Φασματομετρία Μαζών έχει κυριαρχήσει ως αναλυτική τεχνική.
- Αναλύσεις Ρουτίνα
 - Φυτοφάρμακα
 - Κτηνιατρικά Κατάλοιπα
 - Οργανικοί ρύποι
- Έρευνα
 - Ανάπτυξη Νέων Μεθοδολογιών
 - Αναδυόμενοι Ρύποι
 - Αυθεντικότητα Τροφίμων, Food Fraud
 - Ανακάλυψη νέων βιοδεικτών.

2

Γιατί;

- Ταυτόχρονος προσδιορισμός και ποσοτικοποίηση αναλυτών
- Χαμηλά όρια ανίχνευσης
- Δυνατότητα ανίχνευσης άγνωστων ενώσεων, ειδικά με τεχνικές υψηλής διακριτικής ικανότητας
- Μείωση σχέσης κόστους και χρόνου ανάλυσης
- Ισχυρά κριτήρια ανίχνευσης, ειδικά με τη διαδοχική ή/και τη φασματομετρία υψηλής διακριτικής ικανότητας (HRMS)



3



Ως Αποτέλεσμα...

- ✓ • Χρήση φασματομετρίας μαζών από τον επίσημο έλεγχο
- ✓ • Οι εξελιγμένες τεχνικές φασματομετρίας μαζών γίνονται όλο και πιο φιλικές στο χρήστη, ειδικά με HRMS
- ✓ • Νέες προχωρημένες μεθοδολογίες αναπτύσσονται, αυθεντικότητα, αναδυόμενοι ρύποι κλπ.
- ✗ • Αυξημένες ανάγκες για κατευθύνσεις σχετικά με τη διασφάλιση ποιότητας.
- ✗ • Τεχνική επάρκεια, όσο αυξάνεται η πολυπλοκότητα των προβλημάτων που επιλύονται
- ✗ • Κατευθυντήριες οδηγίες

4

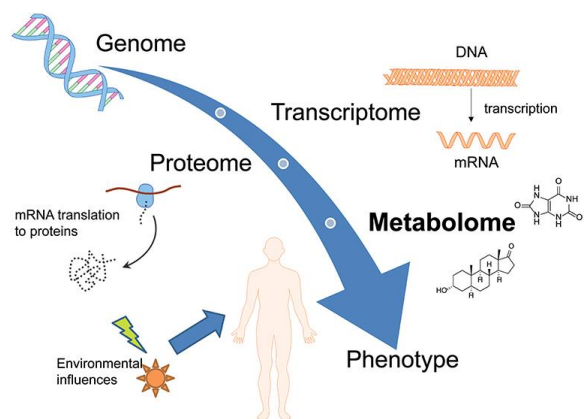
Τεχνολογίες Omics

- Η εξέλιξη της φασματομετρίας μαζών είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την μεγάλη ανάπτυξη των τεχνολογιών omics και ιδιαίτερα της μεταβολομικής (metabolomics).
- Omics: Ως ομική αναφέρεται ο συλλογικός χαρακτηρισμός και η ποσοτικοποίηση μιας σειράς βιολογικών μορίων που μεταφράζονται στη δομή, τη λειτουργία και τη δυναμική ενός οργανισμού ή οργανισμών.
- Τα omics ξεκίνησαν από τη βιολογία (genomics) αλλά επεκτάθηκαν σε μια σειρά φυσικών επιστημών (ιδιαίτερα τη χημεία).

5

Metabolomics

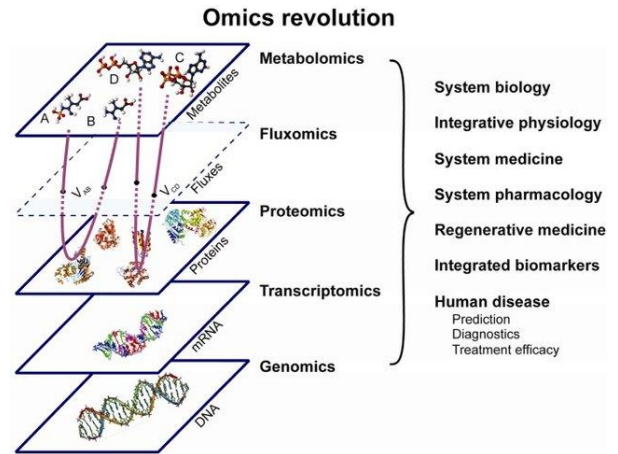
- Μεταβολομική είναι η επιστημονική μελέτη των χημικών διεργασιών των μεταβολιτών.
- Μεταβολίτες είναι τα μικρού μοριακού βάρους μόρια (<1.5 kDa) που δρουν είτε ως υπόστρωμα, είτε ως ενδιάμεσο προϊόν είτε ως τελικό προϊόν του κυτταρικού μεταβολισμού.



6

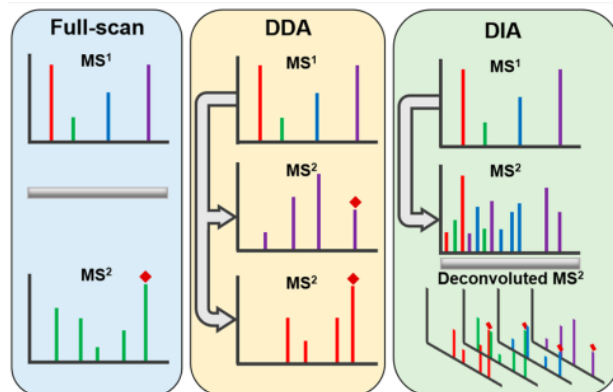
Metabolomics

- Μεταβολομική είναι η επιστημονική μελέτη των χημικών διεργασιών των μεταβολιτών.
- Μεταβολίτες είναι τα μικρού μοριακού βάρους μόρια που δρουν είτε ως υπόστρωμα είτε ως ενδιάμεσο προϊόν είτε ως τελικό προϊόν του κυτταρικού μεταβολισμού.



7

Μέθοδοι Σάρωσης

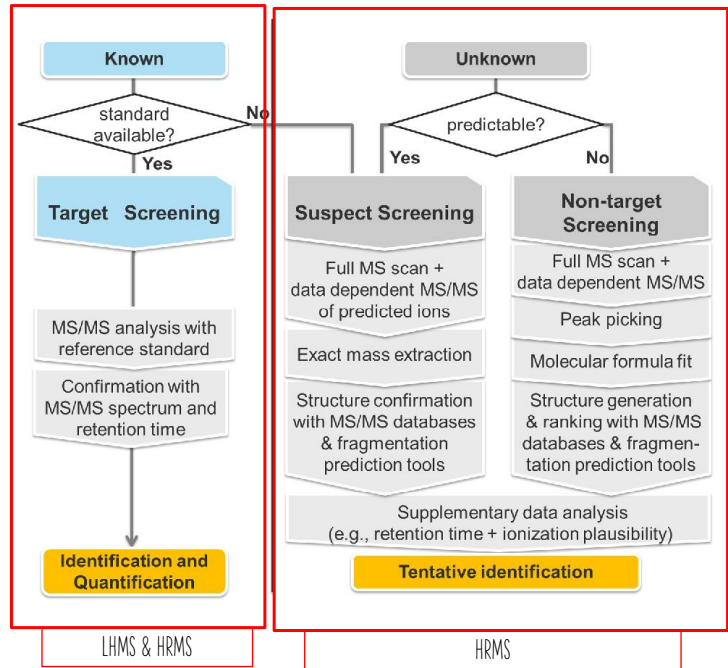


DDA: Data Dependent Acquisition

DIA: Data Independent Acquisition

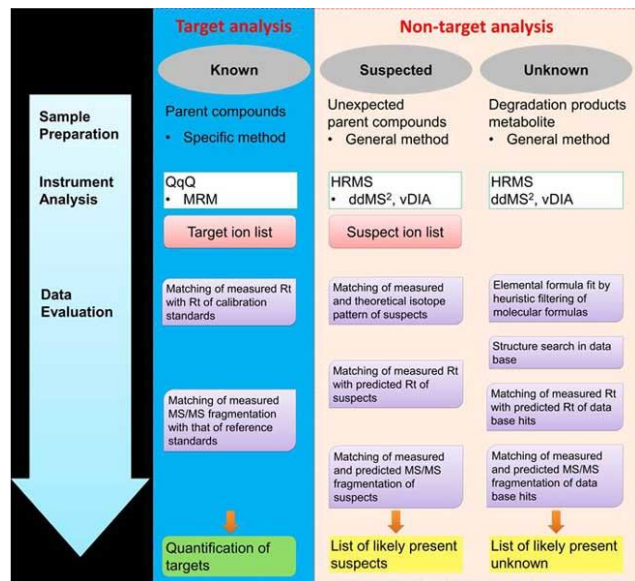
8

Μέθοδοι Σάρωσης



9

Μέθοδοι Σάρωσης



10

Non-target Methods (1^η προσέγγιση)



11

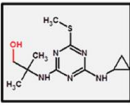
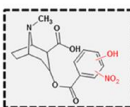
Non-target Methods (2^η προσέγγιση)



12

Κριτήρια Ταυτοποίησης

- Η 1^η Προσέγγιση αφορά παραλλαγή της στοχευμένης σάρωσης
- Τα κριτήρια ταυτοποίησης είναι σημαντικά (5 επίπεδα ταυτοποίησης)

Example	Identification confidence	Minimum data requirements
	Level 1: Confirmed structure by reference standard	MS, MS ² , RT, Reference Std.
	Level 2: Probable structure a) by library spectrum match b) by diagnostic evidence	MS, MS ² , Library MS ² MS, MS ² , Exp. data
	Level 3: Tentative candidate(s) structure, substituent, class	MS, MS ² , Exp. data
$C_6H_5N_3O_4$	Level 4: Unequivocal molecular formula	MS isotope/adduct
192.0757	Level 5: Exact mass of interest	MS