

## **UNIFI & Vion IMS QTOF - Ein starkes Team für mit Ionenmobilität gekoppelte Massenspektrometrie in der Routine von Screeninganwendungen**

Gunnar Weibchen & Christoph Thomas, Waters GmbH, Eschborn

Die Kombination aus Ionenmobilität (Trennung der Ionen anhand von Größe und Struktur) und Massenspektrometrie (Trennung der Ionen anhand von Masse und Ladung) führt zu saubereren Massenspektren für die vereinfachte Strukturzuweisung und ergibt darüber hinaus die physikalischen Werte des Stoßquerschnitts (collision cross-section CCS) für die einzelnen Moleküle. Diese Kombination liefert zusätzliche und Matrix-unabhängige Informationen und erlaubt die Identifizierung der Zielverbindungen anhand von drei spezifischen Moleküleigenschaften (RT, m/z und CCS). Die Integration der Ionenmobilität in hochauflösende Screening-Experimente erhöht die Selektivität und verbessert sowohl qualitative und quantitative Ergebnisse.

Anhand des Vion IMS QTOF wird im ersten Teil des Vortrages beschrieben, wie die neuesten Weiterentwicklungen der instrumentelle Technologie die Ionenmobilität als Routinemethode für jeden Anwender einfach zugänglich macht.

Es müssen eine stetig wachsende Anzahl von Analyten überwacht werden. Dazu muss der Umfang bestehender Screeningmethoden erweitert werden. Viele Labore setzen hierfür immer häufiger die hochauflösende Massenspektrometrie ein, die theoretisch simultan sowohl eine unbegrenzte Anzahl an Zielanalyten als auch Informationen über Unbekannte oder Transformationsprodukte liefert. Gleichzeitig werden immer höhere Anforderungen an die Datenverarbeitung der komplexen Datensätze gestellt.

Wir demonstrieren die einfache Handhabung und Wirksamkeit einer daten-unabhängigen Analyse von Ionenmobilitätsdaten in der Routine, gekoppelt mit unserem UNIFI Scientific Information System. Im UNIFI Scientific Information System können Sie Daten auf nur einer einzigen Software-Oberfläche acquirieren, prozessieren und begutachten. Es werden Ergebnisse vorgestellt, die zeigen, wie mit dem Vion IMS QTOF routinemäßig CCS (Collisional Cross Section) Daten verarbeitet werden. Diese zusätzliche Trenndimension liefert von der chromatographischen Retentionszeit unabhängige Datenpunkte und gewährleistet damit eine sichere Identifizierung der Analyte und reduziert gleichzeitig das Risiko von falsch-positiven und falsch-negativen

Ergebnissen. Der zweite Teil unseres Vortrages beschreibt somit die unkomplizierte Auswertung und schnelle Umwandlung informationsreicher Datensätze zu Ergebnissen in der Routine.