

# Speziationsanalytik

## Lösungen für LC-ICP-MS

HPLC-Kopplung für die Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma



## LC-ICP-MS: PQ LC und PlasmaQuant® MS

Machen Sie mehr aus Ihrer täglichen Laborroutine und entdecken Sie mehr als je zuvor. Die Kombination von PQ LC und PlasmaQuant® MS bietet die perfekte Lösung für Ihre Anforderungen in der Speziationsanalytik.

Die Kombination von PQ LC und PlasmaQuant® MS (LC-ICP-MS) bietet eine vielseitige, robuste und hochempfindliche Lösung für die Bestimmung von Elementspezies in verschiedensten Proben. Die Spezies oder chemische Form von Elementen bestimmt ihre Mobilität, Bioverfügbarkeit und Toxizität. Da diese Eigenschaften je nach der Spezies, in der ein Element vorliegt, stark variieren, ist deren präzise Bestimmung in Umwelt-, Lebensmittel- und landwirtschaftlichen Proben sowie in Konsumgütern unerlässlich. Flüssigchromatographie oder Ionenchromatographie erlauben eine Trennung dieser Spezies. Die anschließende Detektion mittels induktiv gekoppelter Plasma-Massenspektrometrie liefert eine hochempfindliche Methode für ihre Quantifizierung. Damit stellen LC-ICP-MS und IC-ICP-MS eine wichtige Methode zur Bewertung von Nutzen und/oder Risiko von in der Probe vorhandenen Elementen dar.

### Umwelt

Die Elementspeziation spielt eine wichtige Rolle bei der Bewertung von Chemie, Geochemie oder Biogeochemie verschiedener Schadstoffe, ihrer Bioverfügbarkeit und Toxizität gegenüber Organismen, sowie ihrer chemischen und physikalischen Auswirkungen auf natürliche Kreisläufe. Elemente von Interesse in der Speziesidentifikation sind Arsen, Selen, Chrom, Quecksilber, Cadmium und andere.

### Nahrungsmittel und Landwirtschaft

Die Quantifizierung von Haupt- und Spurenelementen, essentiellen, ernährungsphysiologisch notwendigen und potentiell toxischen Elementen ist eine häufige Anwendung in der ICP-MS. Da ein Element allein auf Grund seines Oxidationszustandes oder der Verbindung, in der es auftritt, essentiell oder giftig sein kann, ist die Bestimmung von Elementspezies in Nahrungsmitteln und Getränken so wichtig für die Gewährleistung der Lebensmittelsicherheit. Die LC-ICP-MS ermöglicht dies, beispielsweise in der Untersuchung von Lebensmittelproben wie Seefisch, Reis, Schokolade und Apfelsaft auf Arsen, Selen oder Chrom.

### Klinische Anwendungen und Pharma

Zahlreiche Vorschriften und Standards beschreiben Qualitätskontrollverfahren, um die Wirksamkeit und Unbedenklichkeit von pharmazeutischen Produkten sicherzustellen. Während der Produktion können diese beispielsweise mit Chrom kontaminiert werden. Daher müssen nach definierten Standards Chromspezies bestimmt werden, um die potentielle Toxizität dieser Produkte bewerten zu können.

In der klinischen Analyse spielt die Elementspeziation eine untergeordnete Rolle. Die Identifizierung von Arsenspezies in Körperflüssigkeiten wie Vollblut, Serum oder Urin ermöglicht jedoch beispielsweise Erkenntnisse für die Risikobewertung von Arbeitsplätzen.

PlasmaQuant MS

# PQ LC

Lösungen für LC-ICP-MS



# LC-ICP-MS ist der Schlüssel zur Welt der Elementspezies

Machen Sie mehr aus Ihrer täglichen Laborroutine. Wählen Sie Workflows und Lösungen, die mehr als nur Ergebnisse bieten. Nutzen Sie hohe Effizienz, Einfachheit und Flexibilität ohne Kompromisse bei Produktivität, Zuverlässigkeit oder Präzision einzugehen.



## PQ LC-Serie für die Hochleistungsflüssigkeitschromatographie

PQ LC ist eine Serie modularer Chromatographie-Systeme und ist als kompaktes Routine-LC-System für begrenzten Laborraum oder als voll ausgestattetes LC-Modell mit verschiedenen Erweiterungsoptionen, wie Temperaturregelung für den Probeninjektor, Säulenofen oder UV/Vis-Detektor erhältlich. Eine Ionenchromatographie vervollständigt das Portfolio.

### Ihre Vorteile

- Flexibles System zur individuellen Anpassung an Ihre Anforderungen
- Variabler modularer Aufbau für einfache Erweiterung
- Einfache Handhabung mit bis zu vier Lösungsmitteln für kompromisslose Methodenflexibilität
- Interaktives Setup für nahtlose Kommunikation

Ein LC-ICP-MS-Interface-Kit ermöglicht eine schnelle Verbindung mit dem ICP und minimiert das Totvolumen für eine präzise Peaktrennung.

Die Chromatography Data Station (CDS) übernimmt die vollständige Instrumentensteuerung für alle PQ LC-Modelle sowie die Datenerfassung und -verarbeitung. Die Kommunikation zu HPLC und ICP-MS gewährleistet einen sicheren Betrieb. Alle Ergebnisse werden von der CDS verarbeitet. Dies ermöglicht eine effiziente Auswertung für die einfache Bestimmung von Elementspezies.

Die PQ LC-Serie bietet drei Modelle die sich individuell an Ihre Bedürfnisse anpassen lassen:

- **PQ LC compact**, das HPLC-System für die Routineanalytik, metallfrei in PEEK
- **PQ LC**, erhältlich in Edelstahl und PEEK mit verschiedenen Upgrades
- **PQ IC**, die kompromisslose Ionenchromatographie-Lösung

Alle System der PQ LC-Serie sind ausgestattet mit einem Probenzuführungssystem für die Injektion variabler Volumina, einem quaternären Gradienten-HPLC-Pumpensystem mit Vakuumentgaser und einem Tablett für die sichere Lagerung aller Lösungsmittel.

#### PQ LC compact

PQ LC compact ist ein für Routineanwendungen optimiertes Chromatographie-System. Mit seinem geringen Platzbedarf und seiner metallfreien Konfiguration in PEEK ermöglicht es alle Anwendungen in der Lebensmittel- und Umweltanalyse. PQ LC compact kann mit einem UV/Vis-Detektor aufgerüstet werden.

#### Features:

- Metallfreies System zur flexiblen Anpassung an verschiedene Anwendungen
- Kompaktes Design für begrenzten Platz im Labor
- Einfache Handhabung bei Routineanwendungen in LC-ICP-MS

#### PQ LC

PQ LC ist ein vielseitiges System, das verschiedene Optionen für eine flexible Konfiguration bietet. Es ist in Edelstahl und PEEK erhältlich und kann zusätzlich zum Basissystem mit einer Kühl- und Heizoption für das Probenzuführungssystem, einem Säulenofen für eine temperaturstabilisierte Säulumgebung und einem UV/Vis-Detektor zur Überwachung der chromatographischen Trennung erweitert werden.

#### Features:

- Flexibles System aus Edelstahl oder PEEK
- Upgrade auf ein voll ausgestattetes HPLC-System
- Einfache Handhabung für Routine- und anspruchsvolle Anwendungen in der LC-ICP-MS

#### PQ IC

PQ IC ist die Ionenchromatographie-Lösung für die Routineanalytik von Proben mit hohem Matrixgehalt. Die metallfreie Konfiguration in PEEK umfasst neben dem Basissystem ein Ionenchromatographie-Modul zur Verringerung der Hintergrundleitfähigkeit der Lösungsmittel. Das System kann außerdem mit einem UV/Vis-Detektor aufgerüstet werden.

#### Features:

- Inertes System in PEEK zur flexiblen Anpassung an verschiedene Anwendungen
- Matrixunterdrückung für zuverlässige und präzise Detektion
- Einfache Handhabung für Routineanwendungen in der IC-ICP-MS

Die PQ LC-Serie umfasst ein Standard-LC-System, eine kompakte Version und eine IC-Lösung.



# Gute Gründe sich für PlasmaQuant® MS und PQ LC zu entscheiden

01

## Simultane Bestimmung von Hauptspezies und Ultraspuren

- Zuverlässige Identifizierung von Elementspezies im Spurenbereich mit extrem niedrigen Nachweisgrenzen dank unerreichter Empfindlichkeit des PlasmaQuant® MS
- Weiter linearer Arbeitsbereich bei voll-digitaler Detektion (ADD<sup>10</sup> – 10 Größenordnungen linear-dynamischer Bereich)

02

## Hoher Probendurchsatz und minimale Ausfallzeiten

- Schnelle und einfache Kopplung von PlasmaQuant® MS und PQ LC und kurze Aufwärmphasen
- Kurze Analysezeiten dank hoher Empfindlichkeit und außergewöhnlicher Langzeit-Robustheit
- Flexible Automatisierung und Anbindung von Upgrade-Modulen
- Ideal für den unbeaufsichtigten Betrieb rund um die Uhr
- Geringer Wartungsaufwand

03

## Einfache Handhabung und reibungslose Arbeitsabläufe

- Intuitive Handhabung und farbige Statusanzeige
- Einfacher Zugriff auf alle Steuerparameter
- Schneller Wechsel der Anwendungen durch modularen Aufbau des PQ LC
- Nahtlose Softwareanbindung zu ICP-MS
- Einfach zu bedienen mit interaktiver und benutzerfreundlicher Software-Oberfläche
- Automatische Sicherheitsprüfung, Alarmfunktion und Sicherheitsabschaltung

04

## Flexible Konfiguration und individuelle Anpassung an Ihre Bedürfnisse

- Verschiedene Erweiterungsmodule, z. B. Temperaturregelung für den Probeninjektor, Säulenofen oder UV/Vis-Detektor
- Schnelle und einfache Kopplung mit dem ICP-MS für schnellen Wechsel der Anwendungen
- Flexible Automatisierung mit variablen Vial-Racks und Adaptern für Mikrotiterplatten
- Minimale Stellfläche - einschließlich Autosampler und Lösungsmitteltablett

## Rundum-Sorglos

Ein flexibles Softwarepaket hilft Ihnen bei allen Ihren Aufgaben.

### Chromatography Data System – CDS

Das LC-System und die Komponenten werden von der Clarity Chromatography Software (DataApex) gesteuert. Diese verbindet sich ebenso mit der ASpect MS-Gerätesoftware des ICP-MS. Sobald das ICP-MS gestartet ist, übernimmt Clarity die gesamte Steuerung und Datenverarbeitung. Regelmäßige Status-Updates gewährleisten eine nahtlose Kommunikation sowie ein Abschalten aller Komponenten im Falle von Systemstörungen. Das Clarity-Softwarepaket unterstützt auch LC-Systeme anderer Hersteller und bietet damit eine hohe Flexibilität in der Anwendung.

### Konformität nach FDA 21 CFR Part 11

Die Clarity Chromatography Software bietet eine Vielzahl von Tools zur Konfiguration des Chromatographie-Systems, um die Anforderungen der FDA 21 CFR Part 11 zu erfüllen, darunter:

- Softwarevalidierung
- Installations- und Betriebsqualifizierung
- Erstellung von Benutzerprofilen und Definition einzelner Benutzerkonten
- Elektronische Signaturen und Audit Trail
- Historie aller Methoden und Kalibrierungen als Teile von Chromatogramm-Datensätzen
- Systemeignungstest
- Überwachung von Methodenperformance und konstanter Systemleistung
- Gedruckte Berichte

#### Ihre Vorteile

- Nahtlose Überwachung aller Komponenten
- Flexible Datenverarbeitung mit vollem Leistungsumfang von CDS
- Höhere Flexibilität durch Unterstützung verschiedener HPLC-Systeme
- Volle Unterstützung für GxP-Praktiken



## Lösungen für Ihre Bedürfnisse

LC-ICP-MS bietet eine einfache, aber hochempfindliche Methode zur Identifizierung und Charakterisierung von Elementspezies in verschiedenen Anwendungsbereichen.

Die Kopplung von PlasmaQuant® MS und PQ LC bietet eine herausragende Präzision und Genauigkeit mit klar definierten und deutlich getrennten Peaks. Die Kombination aus exzellenter Chromatographie und der hohen Empfindlichkeit des PlasmaQuant® MS ermöglicht Nachweisgrenzen für Arsen- oder Chromspezies im sub-ppt-Bereich (<1 ng/l).

### Umwelt

In der Umweltüberwachung werden verschiedene Probenmatrizes, Quellen und Parameter untersucht. Abwässer und Emissionsquellen können die Umwelt mit verschiedenen Schadstoffen belasten die komplexe Reaktionen eingehen und neue Spezies oder Verbindungen bilden. Diese können in die Nahrungskette gelangen und ein potenzielles Risiko für Organismen darstellen. Aber auch natürliche Quellen können Ursache für Verunreinigungen in Wasser, Boden oder Luft sein. Daher ist eine Überwachung sowie eine Bewertung und Untersuchung von Quellen und natürlichen Kreisläufen von entscheidender Bedeutung für die Gesundheit von Mensch und Tier.

### Nahrungsmittel und Landwirtschaft

LC-ICP-MS ermöglicht eine einfache Identifizierung von toxischen und nicht-toxischen Elementspezies in Lebensmitteln und landwirtschaftlichen Produkten, wie Reis, Fisch und Getränken. Insbesondere Arsen kommt in Lebensmitteln in verschiedenen Spezies mit unterschiedlicher Toxizität vor. Das anorganische dreiwertige Arsen (AsIII) und das fünfwertige Arsen (AsV) zum Beispiel sind die giftigsten Formen, während das organische Monomethylarsen (MMA) und Dimethylarsen (DMA) deutlich weniger giftig sind, und Arsenobetain (AsB) gar nicht giftig ist.

Tabelle 1: Beispiel für die As-Spezies-Konzentration in Apfelsaftproben

	Konzentration (µg/L)				
	AsIII	DMA	MMA	AsV	Total As
Saft 1	0,297	0,088	0,010	1,550	1,945
*Saft 2	0,052	0,037	0,007	0,102	0,198
Saft 3	0,186	0,084	0,007	0,430	0,707
Saft 4	1,172	0,220	0,006	0,197	1,595
Saft 5	0,331	0,051	0,000	1,847	2,229

\* Saft 2 ist ein Produkt aus ökologischem Anbau und weist die geringsten As-Konzentrationen auf. Der Gesamtarsengehalt überschreitet in keinem der fünf Säfte 3 µg/l.





## Konsumgüter

Konsumgüter prägen unser tägliches Leben. Textilien, Kunststoffe, Leder sowie Spielzeug und andere Produkte für Kinder durchlaufen komplexe Produktionsschritte, darunter chemische Reaktionen oder die Behandlung mit Chemikalien. Kontakt mit der Haut oder eine orale Aufnahme können zu schweren Vergiftungen führen, wenn im Endprodukt toxische Elemente oder Spezies vorhanden sind. Die Sicherheit von Spielzeug und Kinderprodukten ist in Normen wie der Europäischen Norm EN 71 geregelt. Diese beschreibt beispielsweise Materialkategorien, Migrationsmethoden und zu überwachende Grenzwerte. Neben giftigen Elementen wie As, Cd, Pb und Sb wird insbesondere Chrom überwacht, da seine hexavalente Form, Cr(VI), für den Menschen hochgiftig ist. LC-ICP-MS bietet eine einfache und dennoch sehr zuverlässige Methode zur Überwachung von Chromspezies und anderen schädlichen Bestandteilen in Konsumgütern.

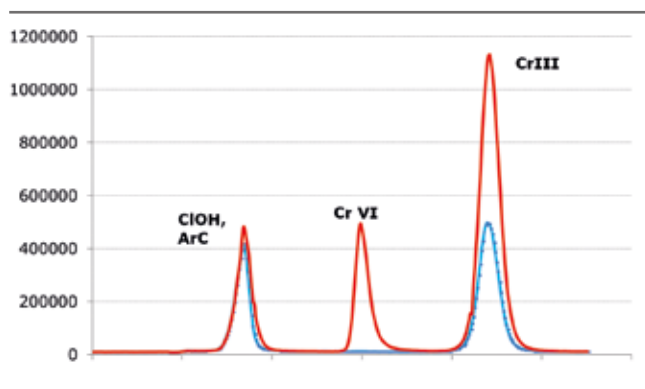


Abbildung 1: Chromatogramm mit 0,005 mg/kg Spike (rot) auf Cr(III) und Cr(VI) in einer Spielzeugprobe (blau)

Abbildung 1 zeigt die überlagerten Chromatogramme von Cr(III) und Cr(VI) für eine Spielzeuglackprobe und die mit 0,1 µg/l dotierte Probe (0,005 mg/kg). Die Spikekonzentration stellt die niedrigste Grenze für Cr(VI) aus den drei Kategorien dar.



## Lösungen für Ihre Bedürfnisse

LC-ICP-MS bietet eine einfache, aber hochempfindliche Methode zur Identifizierung und Charakterisierung von Elementspezies in verschiedenen Anwendungsbereichen.



### Klinische und pharmazeutische Anwendungen

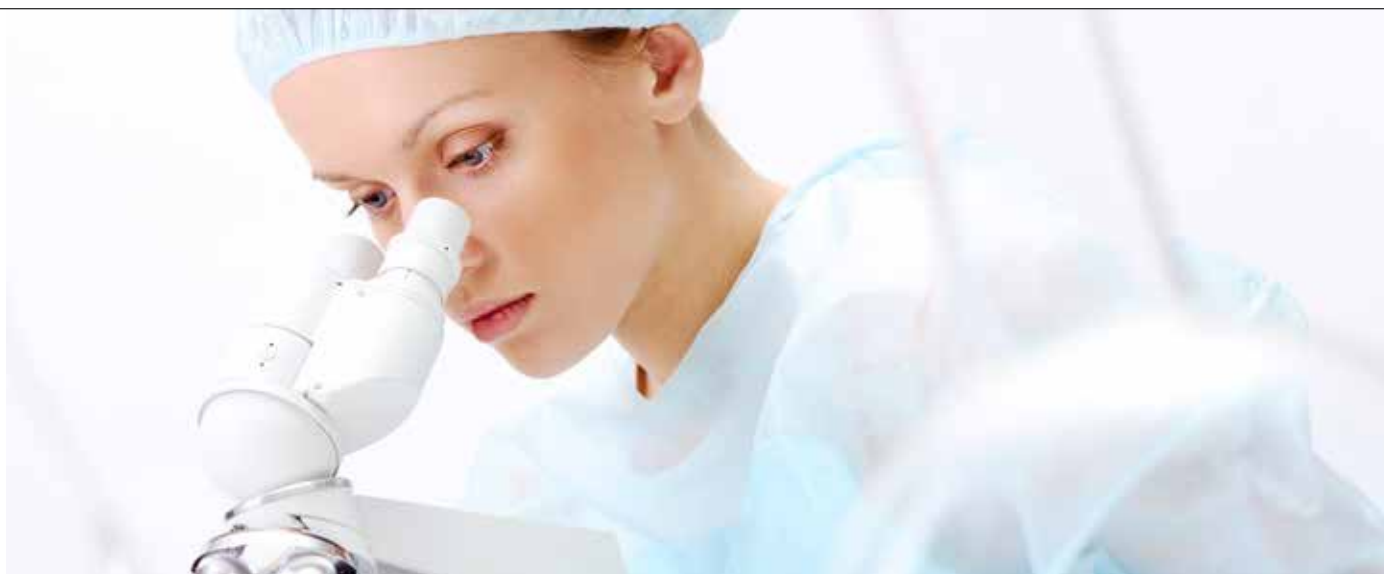
Da Toxizität, Mobilität und Bioverfügbarkeit innerhalb der Spezies, in denen ein Element vorkommt, erheblich variieren können, kann die Angabe der Gesamtkonzentrationen allein oft irreführend sein. Die Überwachung von Arsenspezies im Urin kann beispielsweise bei risikobasierten Toxizitätsbewertungen helfen, wenn erhöhte Arsenspiegel im Urin nachgewiesen werden. Die Speziationsanalyse ermöglicht die Unterscheidung zwischen schädlichen Arsenverbindungen, die aus kontaminierten Arbeitsumgebungen stammen können, oder ungiftigen organischen Arsenverbindungen, die durch den Verzehr von Meeresfrüchten entstehen.

Ein Beispiel für die Speziation von Arsen in Urin ist in Tabelle 2 dargestellt. Die Urin-Referenzmaterialien ClinCheck® Urin Control Level I und II (Recipe, Deutschland) wurden mittels LC-ICP-MS charakterisiert.

Tabelle 2: Ergebnisse für die As-Speziation im Referenzmaterial

	ClinCheck® level I [ $\mu\text{g/l}$ ]		ClinCheck® level II [ $\mu\text{g/l}$ ]	
	Kontrollbereich	gemessener Wert	Kontrollbereich	gemessener Wert
AsB	12,6 – 21,0	16,4	23,0 – 34,6	27,9
As III	1,44 – 3,84	2,6	7,05 – 11,8	9,4
DMA	5,88 – 13,7	8,9	32,6 – 54,3	41,5
MMA	1,50 – 3,50	2,3	5,03 – 8,38	6,9
As V	2,10 – 4,90	3,6	18,9 – 31,5	25,8

Mit Nachweisgrenzen im unteren ng/l-Bereich für die einzelnen Spezies in Urin ist die LC-ICP-MS eine hervorragende Methode zur Risikobewertung in der produzierenden Industrie.



### Akademia & Forschung

In der Speziationsanalytik ist die Überwachung sowie die Bewertung und Untersuchung von Quellen, natürlichen Kreisläufen und Stoffwechselwegen von Elementspezies entscheidend, um ihre Wirkung auf Organismen zu verstehen und eine zuverlässige Risikobewertung hinsichtlich ihrer Toxizität zu ermöglichen.

In der Lebensmittelanalytik zum Beispiel sind die routinemäßig identifizierten Arsenspezies nur ein Bruchteil der mehr als 250 bekannten Arten. Verbindungen aus Gruppen wie Arsenolipiden und Arsenzuckern, die vielfach in marinen Organismen vorkommen, sind ein vielbeachtetes Forschungsgebiet, um mehr über deren Chemie und Stoffwechselwege sowie mögliche Toxizität zu erfahren.

Ein anderes Forschungsgebiet, das u.a. mittels LC-ICP-MS untersucht wird, sind Gadolinium-Komplexe, die in Gadolinium-basierten Magnetresonanztomographie (MRI) -Kontrastmitteln verwendet werden. Einige dieser Verbindungen können das Risiko einer nephrogenen systemischen Fibrose bei Patienten mit chronischer oder schwerer Nierenerkrankung und akuter Nierenschädigung erhöhen. Gadotersäure wird beispielsweise als harmlos betrachtet, während Gadopentetsäure für Patienten mit Nierenerkrankungen unbedingt vermieden werden sollte

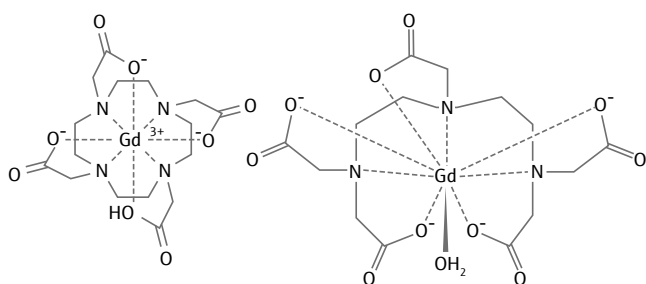


Abbildung 2: Chemische Struktur von Gadotersäure (links) und Gadopentetsäure (rechts)

(Abbildung 2). Daher ist ein klares Verständnis der Struktur des auf Gadolinium basierenden Mittels unverzichtbar, wobei die LC-ICP-MS eine einfache Methode zur Trennung und Identifizierung der einzelnen Gadoliniumverbindungen darstellt.

### Andere Anwendungsgebiete

Neben der Identifizierung verschiedener Verbindungen und des chemischen Zustands eines Elements werden andere Parameter zur Trennung von Spezies verwendet, wie beispielsweise die Größe von Molekülen. Dies wird in der Größenausschlusschromatographie verwendet. In Kombination mit ICP-MS bietet dies komplementäre Informationen, wie die Eigenschaften des Zentralatoms oder der Elemente, die an molekulare Strukturen gebunden sind.

#### Hauptsitz

---

Analytik Jena AG  
Konrad-Zuse-Str. 1  
07745 Jena · Deutschland

Tel +49 3641 77 70  
Fax +49 3641 77 9279  
info@analytik-jena.de  
www.analytik-jena.de

Bilder: Analytik Jena AG  
Änderungen in Ausführung und Lieferumfang sowie technische Weiterentwicklung vorbehalten!