



A Q Exactive hibrid Orbitrap rendszerek bemutatása és az élelmiszeranalitikai alkalmazások áttekintése

Novák Márton
Unicam Magyarország Kft.

Bevezetés

- + Orbitrap rendszerek bemutatása – 2005, töretlen fejlődés az elmúlt 14 évben
- + Jelenleg elérhető készülékek: (15)

Exactive (1)

Q Exactive (1)

Exactive Plus & Exactive Plus EMR (2)

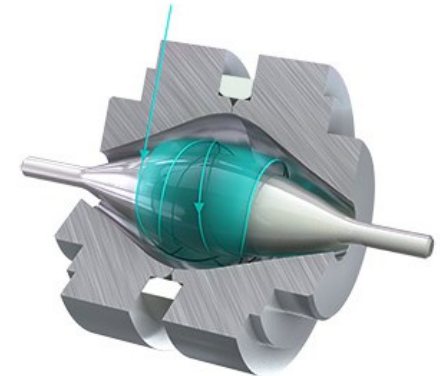
Q Exactive Focus, Q Exactive, Q Exactive Plus,

Q Exactive HF, Q Exactive HF-X, Q Exactive Biopharma,

Q Exactive UHMR (7)

Orbitrap Elite (1)

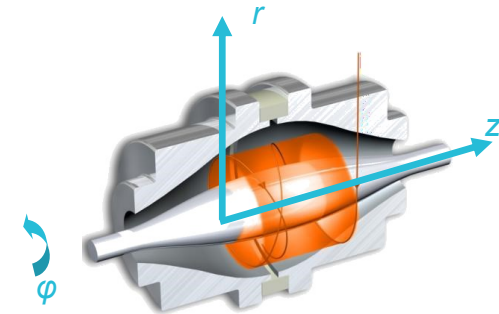
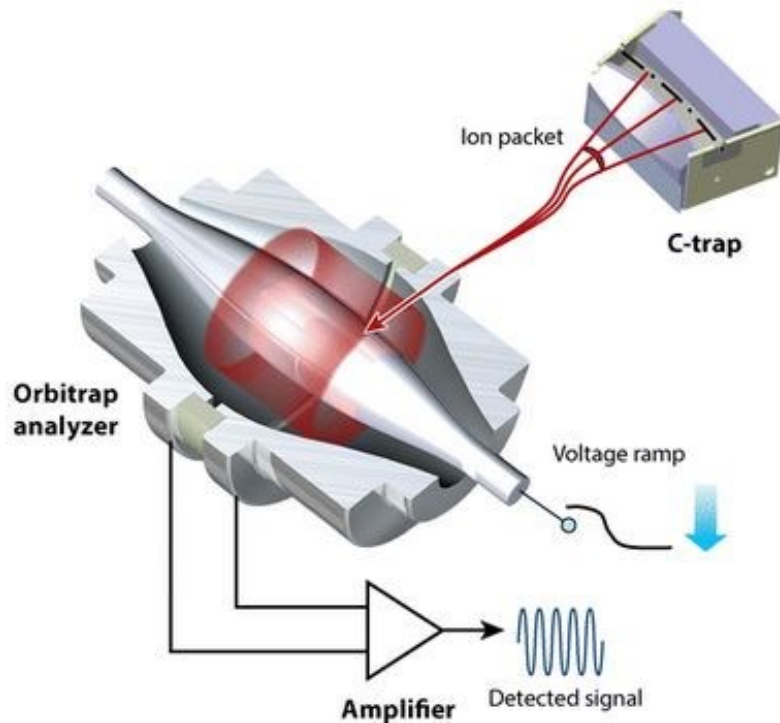
Orbitrap Fusion Lumos, Orbitrap Fusion, Orbitrap ID-X (3)



+ Az Orbitrap technika számos **olyan egyedi tulajdonsággal/mérési üzemmóddal** rendelkezik amely lehetővé teszi a klasszikus HR/AM szerkezetkutató feladatokon felül a kvantitatív mérések kivitelezésére kiemelkedő érzékenységgel

=> **Élelmiszeranalitikai alkalmazások**

Az ORBITRAP technológia



Hyper-logarithmic potential distribution:
"ideal Kingdon trap"

$$U(r, z) = \frac{k}{2} \cdot \{z^2 - r^2 / 2 + R_m^2 \cdot \ln(r / R_m)\}$$

▪ Characteristic frequencies:

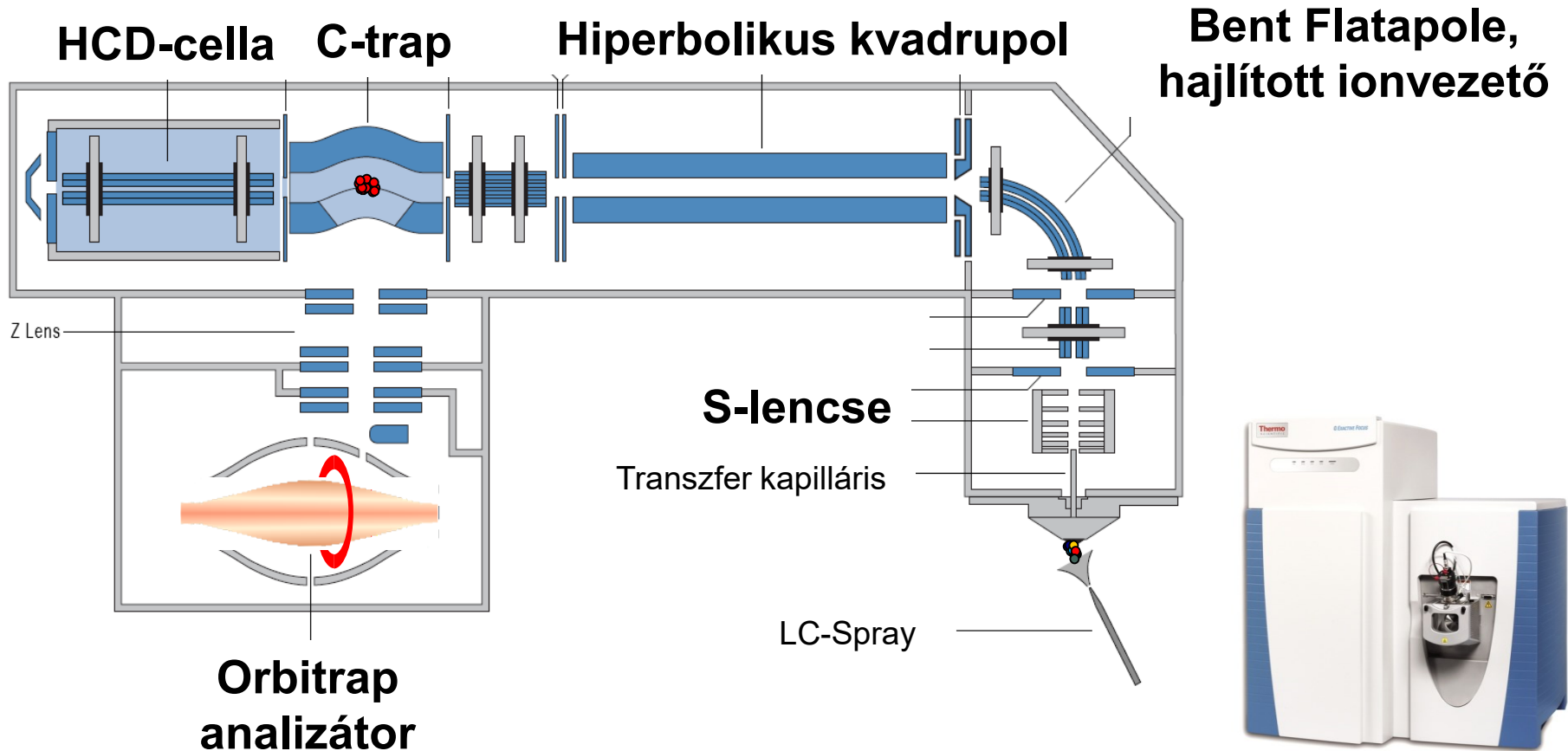
- Frequency of rotation ω_ϕ
- Frequency of radial oscillations ω_r
- Frequency of axial oscillations ω_z

$$\omega_z = \sqrt{\frac{k}{m/q}}$$

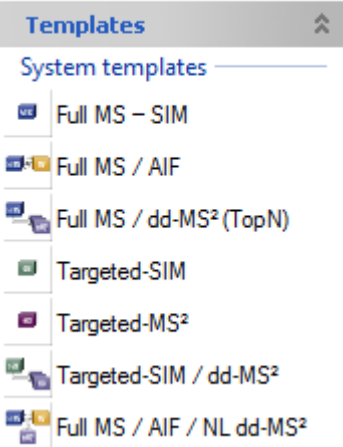
$$\omega_\phi = \frac{\omega_z}{\sqrt{2}} \sqrt{\left(\frac{R_m}{R}\right)^2 - 1} \quad \omega_r = \omega_z \sqrt{\left(\frac{R_m}{R}\right)^2 - 2}$$

Az Orbitrap egy analizátor és detektor is egyben!

Q Exactive™ Hybrid Quadrupole-Orbitrap™ Mass Spectrometer



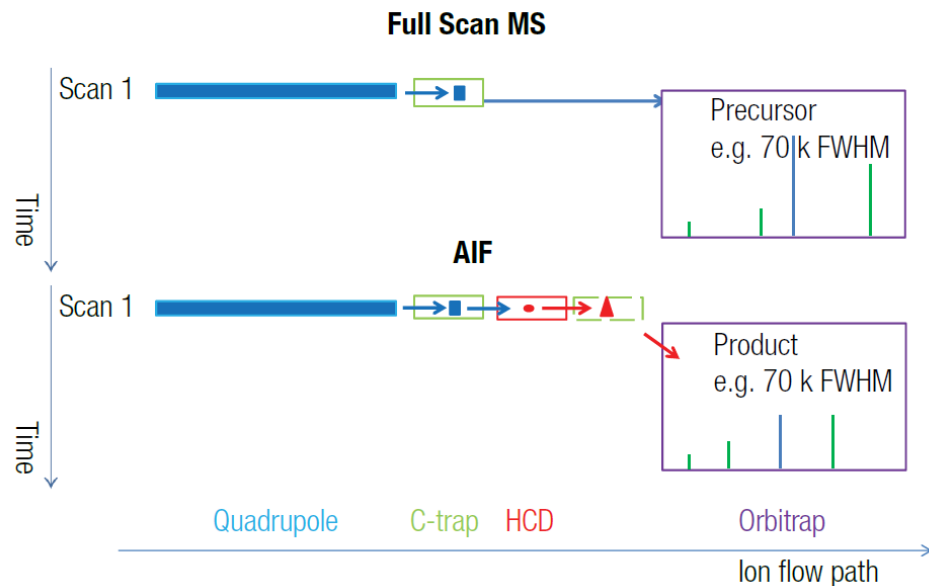
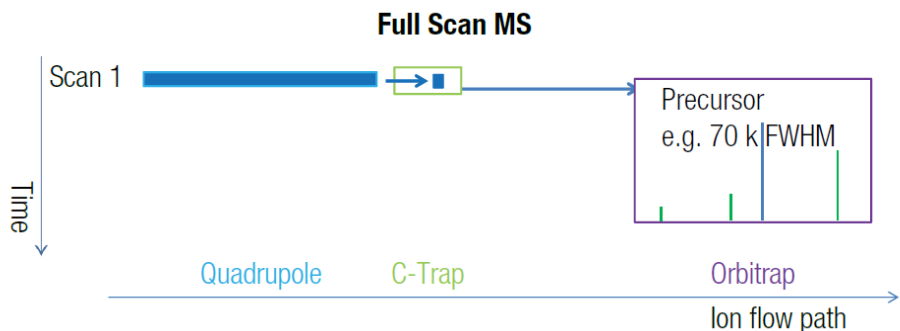
Experiments



Beépített üzemmódok:

- **Full MS:** Full MS Scan
- **Full MS / AIF:** Full MS Teljes Ion Fragmentációval (All-Ion-Fragmentation-AIF)
- **Targeted SIM:** Célzott SIM az „inclusion list”-ben előre megadott prekursor ionokra
- **Targeted MS2 - PRM:** Célzott MS2 az „inclusion list”-ben előre megadott prekursor ionokra
- **Full MS / dd-MS2:** Top N
- **Targeted SIM / dd-MS2:** : Célzott SIM az „inclusion list”-ben előre megadott prekursor ionokra / Ugyanerre a prekursorokra MS2 dd-Scan
- **Full MS / AIF / NL dd MS2:** Full MS Teljes Ion Fragmentációval. Semleges vesztes esetén MS2 felvétel a prekuzorról
- **Data independent acquisition (DIA)**

Az üzemmódok kombinálhatók egymással

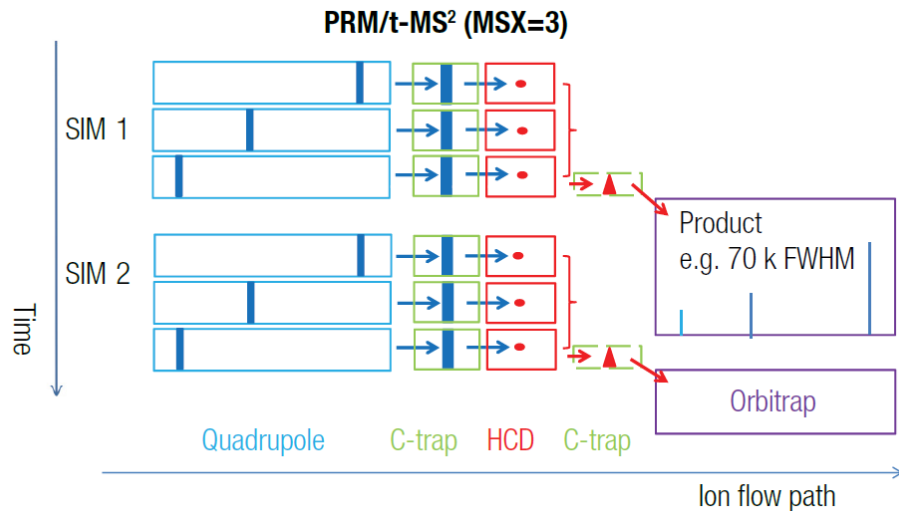
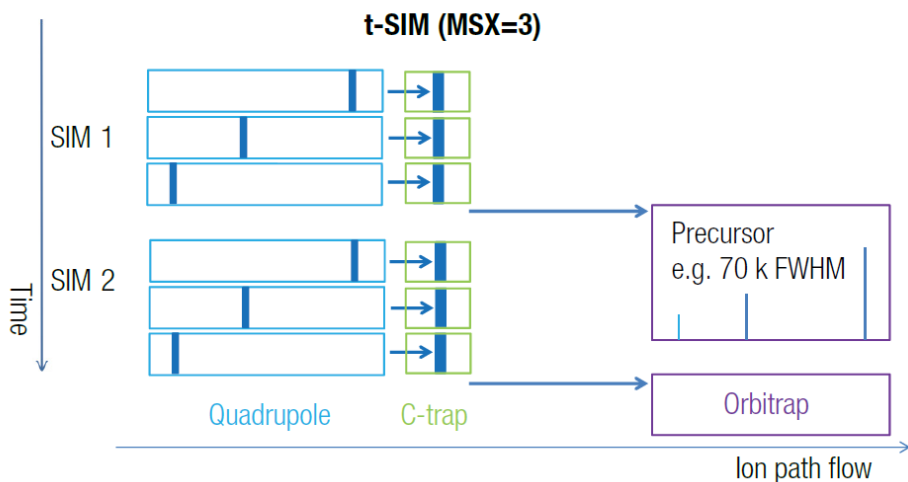


- Megadott tömegtartományban teljes spektrum felvétele a kvadrupol izolációs ablak (**Quadrupole Isolation Window, QIW**) illetve az Orbitrap detektálási ablak (**Orbitrap detection window, ODW**) definiálásával (pl m/z 100-1500)
- Kvadrupol m/z tartomány izoláció, gyűjtés C-trap, Orbitrap
- C-trap gyűjtés és Orbitrap mérés **párhuzamosan**

- Egy cikluson belül:
- **Full MS** mérés a megadott a tömegtartományra
- A teljes tömegtartomány fragmentálása a HCD cellában (**AIF – All ion fragmentation**), majd a teljes product ion tartomány gyűjtése a C-trapben, Orbitrap detektálás.
- => HR MS1 spektrum + HR MS2 spektrum a teljes scan tartományból

Targeted SIM

Targeted MS2/ PRM

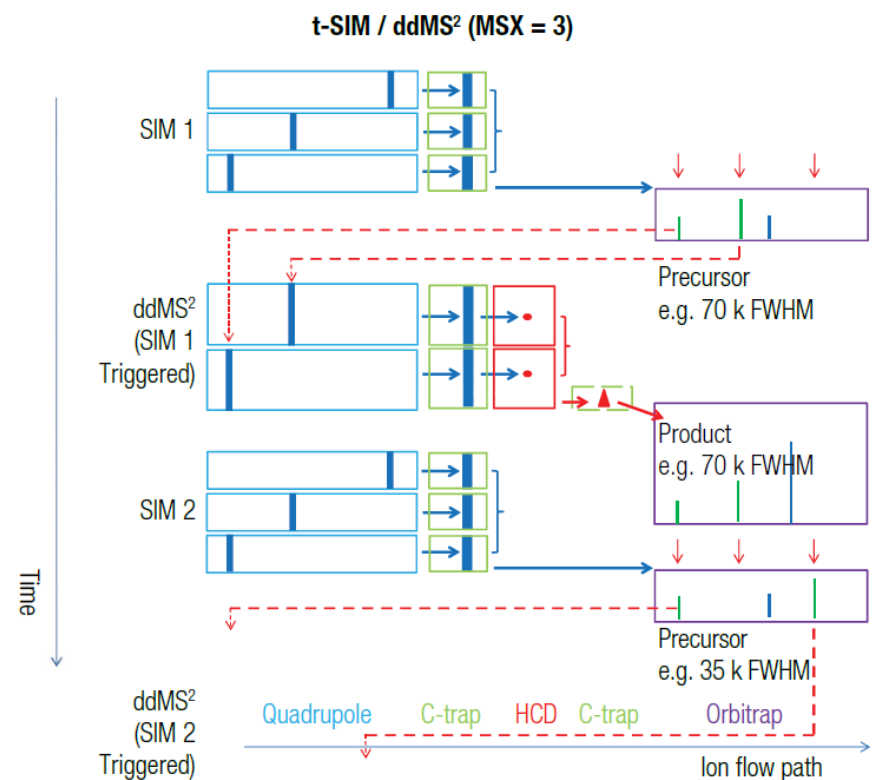
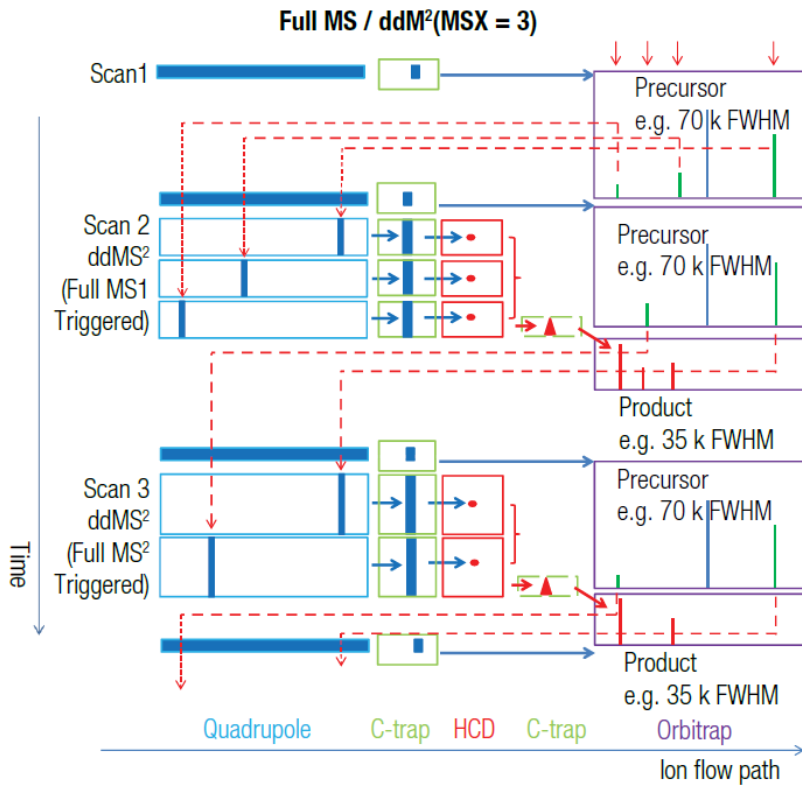


- Ismert célvegyületek ismert m/z értékeinek mérése HR/AM
- csak az adott prekursor halad át a kvadrupolon, prekursor gyűjtés C-trap, Orbitrap
- Lehetőség átlapolásra: **Multiplexing (MSX count)**, kvadrupol egyesével ereszti át a prekursorokat, majd prekursorok gyűjtése a C-csapdában, több prekursor egy Orbitrap mérésen belül

- Ismert célvegyületek ismert m/z értékeinek mérése, **prekursorok fragmentálása, termékionok Orbitrap HRAM**
- csak az adott prekursor halad át a kvadrupolon, prekursor C-trap, → HCD cella: fragmentáció, gyűjtés → fragmensek C-trap, Orbitrap
- **Multiplexing** lehetőség
- A teljes fragmentációs spektrumot látjuk, az összes keletkezett termékion egy időben detektálásra kerül, nincs szükség átmenetek optimalizálására (QqQ)

Full MS/ dd MS2

Targeted SIM/ dd MS2



- **Full MS** mérés, Full MS Scan spektrum elemzés

- Ha az **előre definiált m/z-k** (intenzitáslimit):

MS2 mérés ezen tömegekre (prekurzor szelekció a kvadrupolban, HCD fragmentálás, fragmensek Orbitrap mérése)

- **Multiplexing**

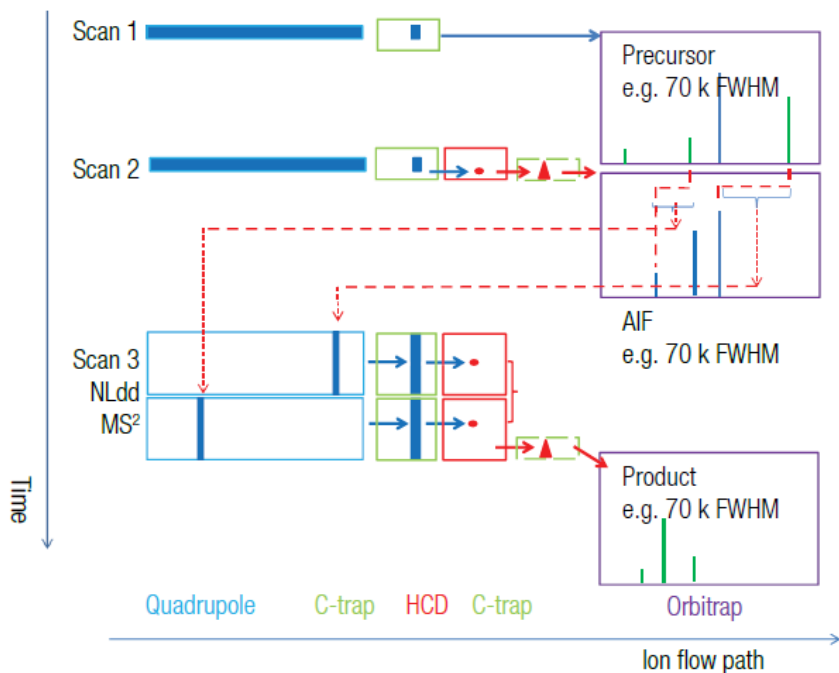
- **Targeted SIM** mérés, spektrum elemzés

- Ha az **előre definiált m/z-k** (intenzitáslimit)

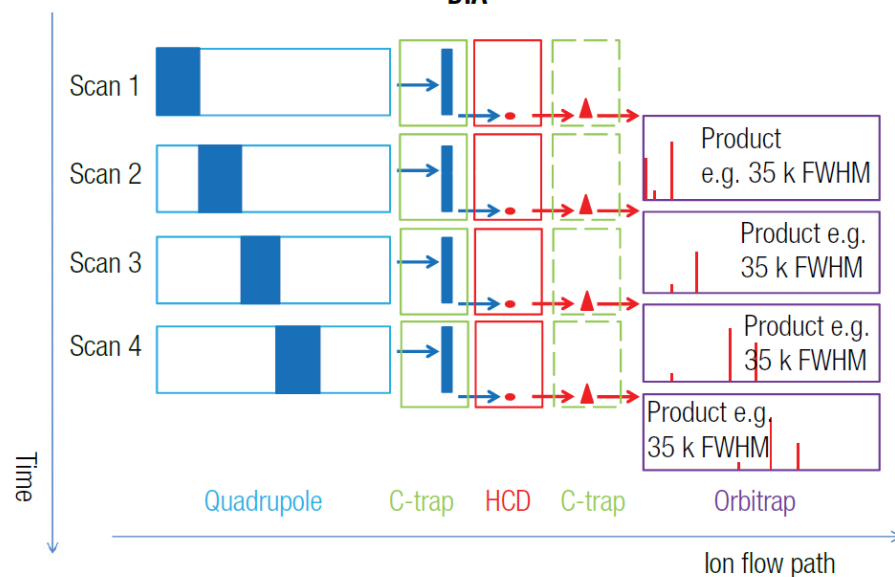
MS2 mérés ezen tömegekre (prekurzor szelekció a kvadrupolban, HCD fragmentálás, fragmensek Orbitrap mérése)

- **Multiplexing**

Full MS / AIF NL / dd-MS² (MSX = 2)



DIA



- DIA (Data Independent Analysis)

- Hasonló FullMS/AIF

A FullMS mérést követően a fragmentálás nem a teljes scan m/z tartományra történik egyszerre, hanem szakaszosan, általunk definiált m/z tartományokra lebontva.

- m/z tartomány szelekció: Kvadrupol

=> „tisztább” MS2 spektrumok, mint AIF

- Full MS/AIF ciklus

- Ha előre definiált m/z semleges veszteség történik:

MS² mérés az adott prekuzorra (prekuzor szelekció a kvadrupolban, HCD fragmentálás, fragmensek Orbitrap mérése)

Élelmiszeranalitikai alkalmazások áttekintése I.

Növényvédőszer maradék vizsgálatok

Del Mar Gómez-Ramos et al.: 139 peszticid, QuEChERS, 100 minta: paradicsom, paprika, narancs, zöld tea. Full MS és Full MS/dd-MS2 Q Exactive LC-HRAM MS, Quan + Qual kiértékelés Full MS + 1 db m/z dd-MS2 méréssel. QqQ mérések szintén, a két módszer összehasonlítása: Azonos kvitatív eredmények, Q Exactive: retrospektív adatelemzés, jobb szelektivitás

Del Mar Gomez-Ramos, M.; Rajski, L.; Heinzen, H.; Fernandez-Alba, A. R. Liquid chromatography Orbitrap mass spectrometry with simultaneous full scan and tandem MS/MS for highly selective pesticide residue analysis. Anal. Bioanal. Chem. 2015 Aug; 407(21):6317-26.

Wang et al.: 166 peszticid, QuEChERS, gyümölcs és zöldség minták. Full MS a kvantitatív kiértékeléshez, dd-MS2 a kvalitatív megerősítéshez. Teljeskörű validálás, a módszer teljesen alkalmasnak bizonyult, módszerfejlesztési igény sokkal kevesebb! (QqQ)

Wang, J.; Chow, W.; Leung, D.; Chang, J. Application of ultrahigh-performance liquid chromatography and electrospray ionization quadrupole orbitrap high-resolution mass spectrometry for determination of 166 pesticides in fruits and vegetables. J. Agric. Food Chem. 2012, Dec 12;60(49):12088-104.

Wang et al.: 451 peszticid, QuEChERS, gyümölcs és zöldség minták, 10 mintamátrix vizsgálata. Full MS a kvantitatív kiértékeléshez, dd-MS2 a kvalitatív megerősítéshez. Teljeskörű validálás, a módszer teljesen alkalmasnak bizonyult, módszerfejlesztési igény sokkal kevesebb! (QqQ). FullMS/ddMS2 könyvtári adatbázisokkal együtt növényvédőszer azonosításban is kiváló nem csak a rutinszerű monitoringban

Wang, J.; Chow, W.; Chang, J.; Wong, J. W. Ultrahigh-performance liquid chromatography electrospray ionization Q-Orbitrap mass spectrometry for the analysis of 451 pesticide residues in fruits and vegetables: method development and validation. J. Agric. Food Chem. 2014, Oct 22;62(42):10375-91.

-Zöldség és gyümölcs minták, QuEChERS: 139, 166 és 451 peszticid Q Exactive LC-MS módszerek

-FullMS/ddMS2 üzemmód, A Full MS scan HR MS1 adatokból a kvantitatív kiértékelést, míg ddMS2 spektrumok minőségi megerősítésre

-Teljeskörű validálás: Kiváló érzékenység (QqQ-val azonos), kiemelkedő szelektivitás

-Módszerfejlesztési igény kevesebb (átmenetek!)

-Nem várt komponensek, bomlástermékek későbbi azonosítása lehetséges

Zomer et al. : 184 peszticid, QuEChERS, gyümölcs, zöldség minták (saláta, narancs, alma, bab, brokkoli, répa, zeller szőlő, póréhagyma nektarin, paradicsom). DIA üzemmód, kvantitatív és kvalitatív screening vizsgálatokra egyaránt. Kvantitatív: 184 peszticid, narancs és saláta, teljeskörű validálás, adalékolt minták 10 és 50 ng/g. Kvalitatív screening: 184 peszticid, további 9 mátrixból, adalékolt minták 10, 50, 200 ng/g => az összes komponensre az összes mátrixból >93% találat. Egy mérési módszerből, gyakori komponensekre rutinszerű kvantitatív mérés, ritkán előforduló anyagokra egy sokkal szélesebb körű kvalitatív screening egy mérésből, ugyanazon adatokból, de más adatfeldolgozással (Tracefinder)

Zomer, P. and Mol H. G. J. Simultaneous quantitative determination, identification and qualitative screening of pesticides in fruits and vegetables using LC-Q-Orbitrap™-MS. Food Addit. Contam: Part A. 2015 Sep 15:1-9. [Epub ahead of print].

- Zöldség és gyümölcs minták, QuEChERS, 184 peszticid, DIA üzemmód

**- A DIA módszer segítségével egy mérésből kétféle adatfeldolgozási metodikával:
rutinszerű kvantitatív módszer a gyakori komponensekre + kvalitatív screening jóval szélesebb körben**

Rajski et al. : 170 peszticid, QuEChERS, gyümölcs, zöldség minták (paradicsom, paprika, narancs, zöld tea). A felbontás hatásának vizsgálata a detektálás hatásfokára: 17 500, 35 000, 70 000 felbontás, 10, 50, 100 ug/kg adalékolt minta. A 10 ug/kg szinten R=17 500: 91% találat paradicsom, 83% találat zöld tea. A 10 ug/kg szinten R=70 000: 98% találat paradicsom, 88% találat zöld tea. A fals negatív találatokat az érzékenység hiánya illetve a mátrix ion szupresszió okozta

Rajski, Ł.; Gomez-Ramos Mdel, M.; Fernandez-Alba, A. R. Large pesticide multiresidue screening method by liquid chromatography-Orbitrap mass spectrometry in full scan mode applied to fruit and vegetables. J. Chromatogr. A. 2014, Sep 19;1360:119-27.

- Zöldség és gyümölcs minták, QuEChERS, 170 peszticid, FullIMS üzemmód

- Felbontás változtatása és a scan spektrumokból történő sikeres komponens azonosítás különböző mátrixokból

- R=70 000: egyszerűbb mátrixok: 98%; bonyolultabb mátrixok: 88%

- A fals negatív esetekben MS2 üzemmódok alkalmazása a megoldás

Kumar et al. : 8 szintetikus + természetes hormon vizsgálata, állati vizeletből, full MS/AIF, full MS/tMS2 (PRM), full MS/ddMS2, és t-SIM/ddMS2 üzemmódok alkalmazhatóságának vizsgálata, t-SIM/ddMS2 üzemmód a legjobb a célkomponens kvantitatív analízisre, teljeskörű validálás. A módszer összehasonlítása QqQ mérésekkel, jobb érzékenység, sokkal jobb szelektivitás

Kumar, P.; Rubies, A.; Centrich, F.; Granados, M.; Cortes-Francisco, N.; Caixach, J.; Companyo, R. Targeted analysis with benchtop quadrupole-orbitrap hybrid mass spectrometer: application to determination of synthetic hormones in animal urine. Anal. Chim. Acta. 2013, May 30;780:65-73.

-Szintetikus és természetes hormonok, állati vizeletből, 4 üzemmód tesztelése (full MS/AIF, full MS/tMS2 (PRM), full MS/ddMS2, t-SIM/ddMS2) → t-SIM/ddMS2 a legjobb a kvantitatív célokra.

-Eredmények összehasonlítása QqQ → jobb érzékenység, sokkal jobb szelektivitás

Kaufmann et al. : 100 állatgyógyászati hatóanyag tej mintákból, SOSLE minta-előkészítés (Salting Out Supported Liquid Extraction) Full MS mérés, 140-1000 m/z, R=70 000, teljeskörű validálás. Full MS üzemmód kellően érzékeny és szelektív a kvantifikáláshoz + további metabolitok, markerek, nem várt komponensek azonosíthatósága

Kaufmann, A.; Butcher, P.; Maden, K.; Walker, S.; Widmer, M. Multi-residue quantification of veterinary drugs in milk with a novel extraction and clean up technique: salting out supported liquid extraction (SOSLE). Anal. Chim. Acta. 2014, Apr 11;820:56-68.

-Állatgyógyászati hatóanyagok, tej mintákból, 100 komponens, Full MS üzemmód

-Full MS mérés R=70 000 érzékeny és szelektív + alkalmas nem várt metabolitok azonosítására is

Jia et al. : 58 mikotoxin tejtermékekből, QuEChERS. FullIMS R= 70 000 és FullIMS/ddMS2 TopN üzemmódok, kvantifikálás FullIMS, minőségi megerősítés FullIMS/ddMS2. Kiemelkedő érzékenység, validált módszer 58 mikotoxinra alkalmas screening vizsgálat élelmiszerekből

Jia, W.; Chu, X.; Ling, Y.; Huang, J.; Chang, J. Multi-mycotoxin analysis in dairy products by liquid chromatography coupled to quadrupole orbitrap mass spectrometry. J. Chromatogr. A. 2014, Jun 6;1345:107-14.

-Mikotoxinok, tejtermékekből, 58 komponens, FullIMS/ddMS2 üzemmód

-FullIMS kvantitatív eredmény, ddMS2 minőségi megerősítés

Dzuman et al. : 323 peszticid, 55 mikotoxin, 11 növényi toxin, búza, póré hagyma, tea, QuEChERS FullIMS R=70 000 80-1200 m/z és FullIMS/ddMS2 TopN üzemmódok, kvantifikálás FullIMS, minőségi megerősítés ddMS2. A módszer egyaránt alkalmas célkomponens kvantifikálásra, non targeted screeningre és retrospektív adatelemzésre egyaránt egy futásból .

Dzuman, Z.; Zachariasova, M.; Veprikova, Z.; Godula, M.; Hajslova J. Multi-analyte high performance liquid chromatography coupled to high resolution tandem mass spectrometry method for control of pesticide residues, mycotoxins, and pyrrolizidine alkaloids.

Anal. Chim. Acta. 2015, Mar 10;863:29-40.

- 323 Peszticid, 55 mikotoxinok, 11 növényi toxin, búza hagyma és tea mintákból

- FullIMS/ddMS2 mérési üzemmód

Jia et al. : 258 peszticid és 75 állatgyógyászati hatóanyag, QuEChERS, 93 csecsemőtápszer minta vizsgálata. FullIMS R= 70 000 és FullIMS/ddMS2 TopN üzemmódok, kvantifikálás FullIMS, minőségi megerősítés

Jia, W.; Chu, X.; Ling, Y.; Huang, J.; Chang, J. High-throughput screening of pesticide and veterinary drug residues in baby food by liquid chromatography coupled to quadrupole Orbitrap mass spectrometry. J. Chromatogr. A. 2014, Jun 20;1347:122-8.

- 258 Peszticid, 75 állatgyógyászati hatóanyag, csecsemőtápszer mintákból

- FullIMS/ddMS2 mérési üzemmód

Gómez-Pérez et al. : 300 peszticid és állatgyógyászati hatóanyag, 18 állati tápszerből. Orbitrap és QTOF módszerek összehasonlítása. Orbitrap (Exactive!) LOQ értékek egy nagyságrenddel jobbak, nagyobb felbontás, szelektivitás, ToxID szoftverrel gyors screening, lock mass nem feltétlenül szükséges, tömegpontosság stabilitás jobb

Gomez-Perez, M. L.; Romero-Gonzalez, R.; Martinez Vidal, J. L.; Garrido Frenich, A. Analysis of veterinary drug and pesticide residues in animal feed by high-resolution mass spectrometry: comparison between time-of-flight and Orbitrap.

Food Addit. Contam. Part A Chem. Anal. Control Expo. Risk. Assess. 2015, Mar 18:1-10.

- Exactive Orbitrap és QTOF rendszer összehasonlítása, 300 peszticid és állatgyógyászati hatóanyag, tápszer mintákból

- Orbitrap 1 nagyságrenddel érzékenyebb; nagyobb felbontás=> szelektivitás; tömegpontosság stabilitás!

Peer reviewed journals:

LC and LC-MS methods

Title	Authors	Publication
Release of non-intentionally added substances (NIAS) from food contact polycarbonate: Effect of aging	Chiara Bignardi, Antonella Cavazza, Carmen Laganà, Paola Salvadeo, Claudio Corradini	Food Control, Volume 71, January 2017, Pages 329–335
UHPLC-high-resolution mass spectrometry determination of bisphenol A and plastic additives released by polycarbonate tableware: influence of aging and surface damage	Chiara Bignardi, Antonella Cavazza, Carmen Laganà, Paola Salvadeo, Claudio Corradini	Analytical and Bioanalytical Chemistry, October 2015, Volume 407, Issue 26, Pages 7917–7924
Targeted and untargeted data-dependent experiments for characterization of polycarbonate food-contact plastics by ultra-high-performance chromatography coupled to quadrupole Orbitrap tandem mass spectrometry	Chiara Bignardi, Antonella Cavazza, Claudio Corradini, Paola Salvadeo	Journal of Chromatography A, Volume 1372, 12 December 2014, Pages 133–144
Liquid chromatography–full scan-high resolution mass spectrometry-based method towards the comprehensive analysis of migration of primary aromatic amines from food packaging	Monica Mattarozzi, Francesca Lambertini, Michele Suman, Maria Careri	Journal of Chromatography A, Volume 1320, 13 December 2013, Pages 96–102

Methods

Title	Authors	Publication
The challenge of identifying non-intentionally added substances from food packaging materials: A review	C. Nerin, P. Alfaro, M. Aznar, C. Domeño	Analytica Chimica Acta, Volume 775, 2 May 2013, Pages 14–24
Rapid qualitative analysis of phthalates added to food and nutraceutical products by direct analysis in real time/Orbitrap mass spectrometry	Randy L. Self, Wen-Hsin Wu	Food Control, Volume 25, Issue 1, May 2012, Pages 13–16
PCDD and PCDF levels in paper with food contact	H. Beck, A. Droß, W. Mathar	Chemosphere, Volume 25, Issues 7–10, October–November 1992, Pages 1533–1538



Dominic Roberts et al.:

- **Csomagolóanyagokból kioldódó ismeretlen komponensek azonosítása GC - Q Exactive technikával**
- **EI/PCI ionozáció, Full MS 50-700 Da, R=120 000,**
- **EI ionozáció: fragmentációs spektrum, PCI ionozáció: molekulaion => a két mérés kombinációjával sikeres azonosítás**

Characterizing unknowns in food packaging using GC Orbitrap Mass Spectrometry

Dominic Roberts¹, Jesus Varela², Yves-Alexis Hammel² and Paul Silcock¹ ¹ Thermo Fisher Scientific, Runcorn, UK ² Nestle, Lausanne, Switzerland, Thermo Scientific application note: AN 10527

352 RAJSKI ET AL.: JOURNAL OF AOAC INTERNATIONAL VOL. 101, NO. 2, 2018

SPECIAL GUEST EDITOR SECTION

Coupling Ion Chromatography to Q-Orbitrap for the Fast and Robust Analysis of Anionic Pesticides in Fruits and Vegetables

LUKASZ RAJSKI, FRANCISCO JOSÉ DÍAZ GALIANO, VÍCTOR CUTILLAS, and AMADEO R. FERNÁNDEZ-ALBA¹

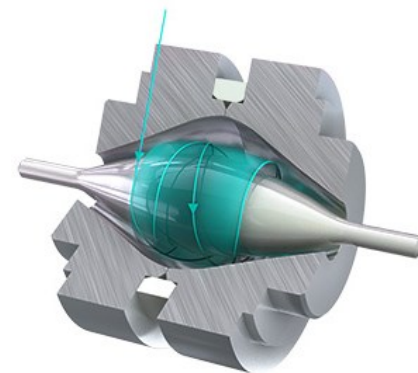
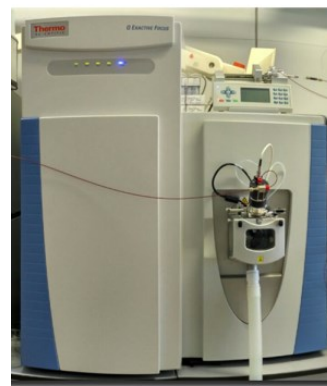
University of Almería, Department of Chemistry and Physics, Agrifood Campus of International Excellence (CeiA3), European Union Reference Laboratory for Pesticide Residues in Fruits and Vegetables, 04120 Almería, Spain

- + **nincs szükség származékképzésre, szelektivitás: IC-s elválasztás Extrakció és 5X hígítás**
- + **5 különböző zöldség mátrixra validálva**
- + **szelektív és érzékeny módszer LOQ: 0,01 mg/kg**
- + **nagyon gyors és egyszerű módszer 25 perces futás, 8 komponens**



AMPA
Chlorate
Glyphosate
Glyphosate ¹³C
Perchlorate
Fosetyl
Phosphonic acid
N-acetyl AMPA
N-acetyl glyphosate

- + Rutinszerű kvantitatív feladatok QqQ érzékenység, de sokkal jobb szelektivitás
- + A legtöbb kvantitatív feladat Full MS üzemmódban megoldható, így lehetőség van retrospektív adatelemzésre egyaránt, ill. a módszerfejlesztési igény sokkal kisebb
- + A különböző MS2 üzemmódok kombinálhatók Full MS üzemmóddal, lehetővé teszik a minőségi megerősítést az MS1 HR spektrumok kiegészítésével.
- + Kombinált üzemmódok: ismeretlen azonosítás + nagy adatbázisokból kvalitatív screening + rutinszerű kvantitatív feladatok egy mérésből
- + Széles dinamikus tartomány
- + Kiemelkedő tömegpontosság stabilitás
- + Q Exactive: LC, GC, IC – csatolásban is



Köszönöm a megtisztelő figyelmet!

thermoscientific

APPLICATION NOTE

Characterizing unknowns in food packaging using GC Orbitrap Mass Spectrometry

Authors: Dominic Roberts¹, Jesus Varela², Yves-Alexis Hamme³ and Paul Silcock¹
¹Thermo Fisher Scientific, Runcorn, UK
²Nestlé, Lausanne, Switzerland

Key Words

Food packaging, Q Exactive GC, Orbitrap mass spectrometry, unknown identification, structural elucidation, food safety



Analytica Chimica Acta 760 (2013) 65–73



Targeted analysis with benchtop quadrupole-orbitrap hybrid mass spectrometer: Application to determination of synthetic hormones in animal urine

No. 10527



CrossMark
Click for updates

Food Additives & Contaminants: Part A

Publication details, including instructions for authors and subscription information: <http://www.tandfonline.com/loi/tafca20>

Analysis of veterinary drug and pesticide residues in animal feed by high-resolution mass spectrometry: comparison between time-of-flight and Orbitrap

María Luz Gómez-Pérez², Roberto Romero-González², José Luis Martínez Vidal¹ & Antonia Garrido Frenich¹

¹Research Group "Analytical Chemistry of Contaminants", Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almería, Agrifood Campus of International Excellence, Almería, Spain
 Published online: 18 Mar 2015.

JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY

Article
pubs.acs.org/JAF

Ultrahigh-Performance Liquid Chromatography Electro spray Ionization Q-Orbitrap Mass Spectrometry for the Analysis of 451 Pesticide Residues in Fruits and Vegetables: Method Development and Validation

Jian Wang^{a,b}, Willis Chow,^c James Chang^d and Jon W. Wong^e

^aCanadian Food Inspection Agency, Calgary Laboratory, 3650-36th Street N.W., Calgary, Alberta T2L 2L1, Canada

^bThermoFisher Scientific, 355 River Oaks Parkway, San Jose, California 95134, United States

^cCenter for Food Safety and Applied Nutrition, U.S. Food and Drug Administration, 5100 Paint Branch Parkway, College Park, Maryland 20740, United States

DOI: 10.1002/anie.201401579

PAPER IN FOREFRONT

Liquid chromatography Orbitrap mass spectrometry with simultaneous full scan and tandem MS/MS for highly selective pesticide residue analysis

María del Mar Gómez-Ramos¹, Lukasz Rajski¹, Horacio Heinzen², Amadeo R. Fernández-Alba¹

352 RAJSKI ET AL.; JOURNAL OF AOAC INTERNATIONAL VOL. 101, NO. 2, 2018

SPECIAL GUEST EDITOR SECTION

Coupling Ion Chromatography to Q-Orbitrap for the Fast and Robust Analysis of Anionic Pesticides in Fruits and Vegetables

LUKASZ RAJSKI, FRANCISCO JOSÉ DÍAZ GALIANO, VÍCTOR CUTILLAS, and AMADEO R. FERNÁNDEZ-ALBA¹
 University of Almería, Department of Chemistry and Physics, Agrifood Campus of International Excellence (CeiA3), European Union Reference Laboratory for Pesticide Residues in Fruits and Vegetables, 04120 Almería, Spain

Analytica Chimica Acta 820 (2014) 56–68

Contents lists available at ScienceDirect

Analytica Chimica Acta

journal homepage: www.elsevier.com/locate/aca

Multi-residue quantification of veterinary drugs in milk with a novel extraction and cleanup technique: Salting out supported liquid extraction (SOSLE)

A. Kaufmann^a, P. Butcher, K. Maden, S. Walker, M. Widmer

Official Food Control Authority of the Canton of Zurich, Fehrenstrasse 15, Zurich 8032, Switzerland

CrossMark

thermoscientific
WHITE PAPER 65147
Selecting the best Q Exactive Orbitrap mass spectrometer scan mode for your application

reviewed journals:

LC and LC-MS methods

Title	Authors	Publication
Release of non-intentionally added substances (NIAS) from food contact polycarbonate: Effect of aging	Chiara Bignardi, Antonella Cavazza, Carmen Laganà, Paola Salvedo, Claudio Corradini	Food Control, Volume 71, January 2017, Pages 329–335
LHPLC-high-resolution mass spectrometry determination of bisphenol A and plastic additives released by polycarbonate: influence of aging and surface damage	Chiara Bignardi, Antonella Cavazza, Carmen Laganà, Paola Salvedo, Claudio Corradini	Analytical and Bioanalytical Chemistry, October 2015, Volume 407, Issue 26, Pages 7917–7924
Targeted and untargeted data-dependent experiments for characterization of polycarbonate food-contact plastics by ultra-high performance chromatography coupled to quadrupole-Orbitrap tandem mass spectrometry	Chiara Bignardi, Antonella Cavazza, Claudio Corradini, Paola Salvedo	Journal of Chromatography A, Volume 1372, 12 December 2014, Pages 133–144
Liquid chromatography–full scan–high resolution mass spectrometry-based method towards the comprehensive analysis of migration of primary aromatic amines from food packaging	Monica Mattarozzi, Francesca Lambertini, Michele Sumari, Maria Careri	Journal of Chromatography A, Volume 1320, 13 December 2013, Pages 96–102

Methods

Title	Authors	Publication
The challenge of identifying non-intentionally added substances from food packaging materials: A review	C. Nerin, P. Alfaro, M. Aznar, C. Domeño	Analytica Chimica Acta, Volume 775, 2 May 2013, Pages 14–24
Rapid qualitative analysis of zwitterions added to food and nutraceutical products by direct analysis in real time/Orbitrap mass spectrometry	Randy L. Seif, Win-Hsin Wu	Food Control, Volume 25, Issue 1, May 2012, Pages 13–16
PCDD and PCDF levels in paper with food contact	H. Beck, A. Droll, W. Mether	Chemosphere, Volume 25, Issues 7–10, October–November 1992, Pages 1533–1538

Journal of Bioanal Chem

DOI: 10.1007/s00216-015-8709-z

PAPER IN FOREFRONT

Liquid chromatography Orbitrap mass spectrometry with simultaneous full scan and tandem MS/MS for highly selective pesticide residue analysis

María del Mar Gómez-Ramos¹, Lukasz Rajski¹, Horacio Heinzen², Amadeo R. Fernández-Alba¹

Journal of Chromatography A, 2014 (2014) 107–114
 Contents lists available at ScienceDirect
 Journal of Chromatography A
 journal homepage: www.elsevier.com/locate/chroma

Multi-mycotoxin analysis in dairy products by liquid chromatography coupled to quadrupole orbitrap mass spectrometry

Wei Jia^{a,b}, Xiaogang Chu^{a,b,c}, Yun Ling^b, Junrong Huang^d, James Chang^c

^a College of Chemistry & Chemical Engineering, Shaanxi University of Science & Technology, Xi'an 710021, China

^b Institute of Food Safety, Chinese Academy of Inspection and Quarantine, Beijing 100123, China

^c ThermoFisher Scientific, 355 River Oaks Parkway, San Jose, CA 95134, USA