



què pot fer el
SAQ per tu?

Servei d'Anàlisi Química

Dra. A. Eustaquio

Què és el SAQ?

El Servei d'Anàlisi Química (SAQ) és una unitat tecnològica dels serveis científicotècnics de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) que està a la disposició de la comunitat científica de la pròpia Universitat, del Parc de Recerca de la UAB i també d'altres institucions públiques o privades.

La seva finalitat principal és donar suport a la recerca mitjançant la utilització de la instrumentació analítica amb la qual està dotat.

Algunes dades

- El SAQ es va crear en el 1990
- El SAQ analitza anualment unes 10.000 mostres
- El SAQ emet anualment uns 80.000-100.000 resultats analítics
- Dóna servei a més de 200 investigadors UAB
- Certificat ISO 9001:2015

Àrees instrumentals

Espectroscòpia
Molecular

Microanàlisi
CHNS

Espectroscòpia
Atòmica

Cromatografia i
Espectrometria
de Masses

Àrees instrumentals

Espectroscòpia
Molecular

Microanàlisi
CHNS

Espectroscòpia
Atòmica

Cromatografia i
Espectrometria
de Masses

Espectroscòpia Molecular

Anàlisi de mostres líquides, sòlides o dissolucions segons la tècnica:

- ✓ Espectroscòpia d'infraroig (IR)
- ✓ Espectrofotometria UV-Vis
- ✓ Dispersió òptica rotatòria (ORD)

Possibilitat de registres en Autoservei en el Laboratori d'Espectroscòpia Molecular (LEM)

Espectroscòpia Molecular

2023



Espectrofotòmetre IR Alpha II, Bruker

- ✓ Registre directe amb mòdul ATR (1 reflexió)
- ✓ Mostres sòlides i líquides
- ✓ Identificació de grups funcionals, i/o productes
- ✓ Possibilitat d'identificació per comparació amb biblioteca d'espectres

Espectroscòpia Molecular

1998



Espectrofotòmetre UV-Vis 8453, Agilent Technologies

- ✓ Registres de dissolucions o mostres líquides
- ✓ Detecció de cromòfors
- ✓ Anàlisi qualitativa o quantitativa

Espectroscòpia Molecular

Polarímetre Autopol I, Rudolph

2017



- ✓ Registre dispersió òptica rotatòria (ORD)
- ✓ Registres en dissolució
- ✓ Estudi d'isòmers òptics

Àrees instrumentals

Espectroscòpia
Molecular

Microanàlisi
CHNS

Espectroscòpia
Atòmica

Cromatografia i
Espectrometria
de Masses

Microanàlisi CHNS

Anàlisi elemental orgànica:

- Anàlisi de mostres sòlides, viscoses i líquides no volàtils: mostres de síntesi, productes vegetals, sòls, femta, òrgans, pèl de porc,...
- ✓ Restriccions:
 - Mostra homogènia (molturada)
 - ~ 1 mg / combustió
 - No viable per mostres volàtils

Microanàlisi CHNS



2010

**Analitzador elemental FLASH 2000,
Thermo**

- ✓ % C, %H, %N, %S totals
- ✓ TOC (*total organic carbon*)
- ✓ Límit quantificació: 0,1% p/p

Àrees instrumentals

Espectroscòpia
Molecular

Microanàlisi
CHNS

Espectroscòpia
Atòmica

Cromatografia i
Espectrometria
de Masses

Espectroscòpia Atòmica

Anàlisi elemental inorgànica:

Anàlisi de tot tipus de mostres líquides o sòlides

- ✓ Injecció directa de mostres aquoses:
 - aigües (riu, xarxa, mar, ...)
 - dissolucions aquoses estables

- ✓ Dilució – dissolució:
 - Orina
 - Sang / sèrum sanguini
 - dissolucions aquoses estables
 - mostres solubles en medi aquós

Espectroscòpia Atòmica

Anàlisi elemental inorgànica:

Anàlisi de tot tipus de mostres líquides o sòlides

- ✓ Digestió en forn de microones:
 - Aigües residuals
 - Cru bioreactors, medis de cultiu, ...
 - Mostres de síntesi, fàrmacs,...
 - ...
 - Anàlisi de ***quasi* QUALSEVOL TIPUS** de mostres sòlides/líquides, d'origen orgànic o inorgànic

Espectroscòpia Atòmica

Analitzador de mercuri DMA-80, Milestone

- ✓ Anàlisi directe, sense pretractament de mostra
- ✓ Mostres líquides i sòlides
- ✓ Interval concentració: 1 - 1000ng Hg en mostra mesurada

2019



Espectroscòpia Atòmica



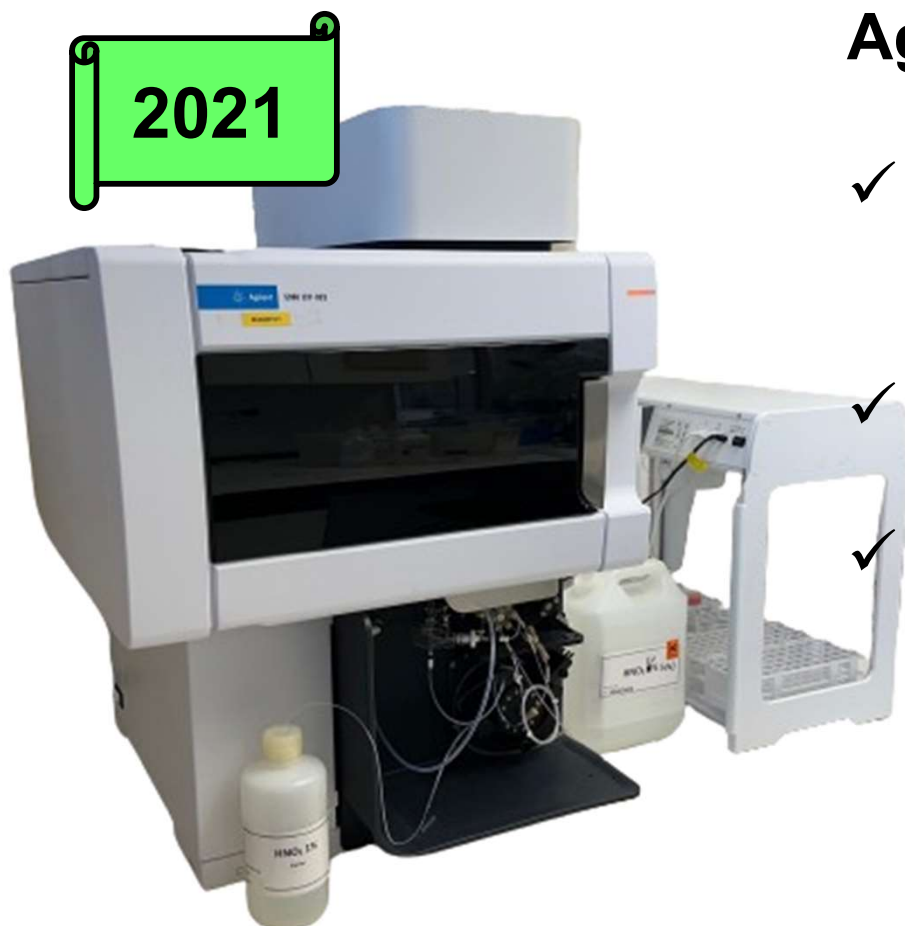
Digestor de microones Ultrawave, Milestone

- ✓ Mostres orgàniques i inorgàniques
- ✓ El SAQ pot establir el procediment
- ✓ Pas previ a l'anàlisi per ICP
- ✓ Demanada substitució a la convocatòria d'infraestructura del Ministerio 2024

Espectroscòpia Atòmica

ICP-OES 5900, Agilent Technologies

2021



- ✓ Anàlisi simultània de diferents elements
- ✓ Interval lineal ampli
- ✓ Límits de Quantificació: ppb's (depenent de l'element)

Espectroscòpia Atòmica

2021

ICP-MS 7900, Agilent Technologies

- ✓ Anàlisi simultània de diferents elements
- ✓ Generació d'espectres m/z
- ✓ Informació isotòpica
- ✓ Interval lineal ampli
- ✓ Límits de Quantificació: ppt's (depenent de l'element)



Espectroscòpia Atòmica

Resultats que podem obtenir?

- ✓ Determinacions quantitatives
- ✓ Estimacions semiquantitatives (ICP-MS):
 - Caracterització elemental inorgànica
 - Desviacions ~ 30-40% vs. valor nominal
- ✓ Mesures isotòpiques (ICP-MS):
 - Relació isotòpica (Pb, ...)
 - Dilució isotòpica
- ✓ Especiació (no establert actualment)

Àrees instrumentals

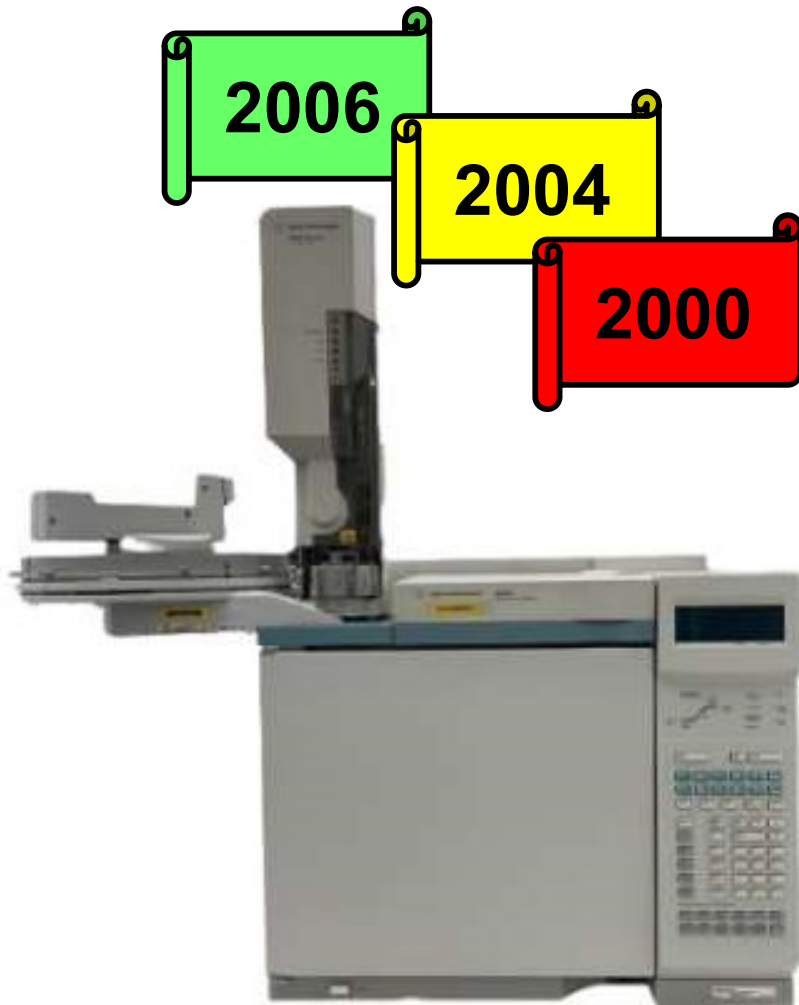
Espectroscòpia
Molecular

Microanàlisi
CHNS

Espectroscòpia
Atòmica

Cromatografia i
Espectrometria
de Masses

Cromatografia de Gasos



Cromatògraf de Gasos 6890, Agilent Technologies

- ✓ Anàlisi de compostos volàtils o semivolàtils
- ✓ Detector: Ionització de Flama (FID)
- ✓ Anàlisi qualitativa i quantitativa
- ✓ Possible necessitat de preparació prèvia de la mostra per a matrius complexes

Cromatografia de Gasos – Espectrometria de Masses

2023

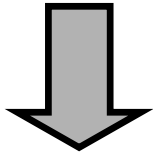


GC-MS/MS EVOQ TQ, Bruker

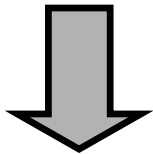
- ✓ Anàlisi de compostos volàtils o semivolàtils
- ✓ Possibilitat registre espectres MS i espectres MS/MS
- ✓ Anàlisi qualitativa per comparació amb biblioteca d'espectres
- ✓ Anàlisi quantitativa a nivells de traces

Cromatografia de Gasos

introducció de mostra



columna cromatogràfica



detector

Injecció líquida

Espai en cap (Head Space)

Microextracció en fase sòlida (SPME)

El SAQ disposa de columnes per aplicacions diverses

Ionització de Flama (FID)

Espectrometria de Masses (MS)

Cromatografia de Gasos / Espectrometria de Masses

Cromatografia de Gasos, alguns exemples:

- AGV o AGVL en matrius d'origen animal
- Aromes en vi, llet, iogurt, sucs, pinsos, ...
- FAMEs en diverses matrius
- Enantiòmers en medis de cultiu
- ...

Cromatografia de Gasos-Espectrometria de Masses, alguns exemples:

- Identificació de compostos en mescles
- Seguiment de reaccions
- Quantificació de retardants de flama
- ...

Cromatografia Líquida



HPLC 1100, Agilent Technologies

- ✓ Anàlisi de compostos semivolàtils o no volàtils
- ✓ Detector UV-Vis: analits cromòfors
- ✓ Anàlisi qualitativa i quantitativa
- ✓ No permet termostatitzar les mostres

Cromatografia Líquida

2006



HPLC 1200, Agilent Technologies

- ✓ Anàlisi de compostos semivolàtils o no volàtils
- ✓ Anàlisi qualitativa i quantitativa
- ✓ Permet termostatitzar les mostres
- ✓ Dos detectors: UV-Vis i ELSD

Cromatografia Líquida – Espectrometria de Masses

HPLC 1260 Infinity II – MS/MS 6420, Agilent Technologies

2017



- ✓ Anàlisi de compostos semivolàtils o no volàtils
- ✓ Permet termostatitzar les mostres
- ✓ Possibilitat registre espectres MS i espectres MS/MS (ESI)
- ✓ Enfocat a anàlisi quantitativa en matrius complexes

Cromatografia Líquida

UV-Vis (analits amb cromòfor), alguns exemples:

- test de puresa
- determinació principis actius o excipients en fàrmacs
- seguiment reaccions
- ...

ELSD (detector universal), alguns exemples:

- possible substitut del detector índex de refracció
- possible alternativa per analits sense cromòfor
- molt utilitzat per sucres
- ...

UPLC/GC/sonda-timsTOF

2023



UPLC/GC/sonda-timsTOF

2023



Registre IMS-MS:

- Injecció directe dissolucions
- Registres:
 - MS
 - MS/MS
 - IMS-MS
 - IMS-MS/MS
- Registres MS i MS/MS en alta resolució
- Fonts ionització: ESI i APCI

UPLC/GC/sonda-timsTOF

2023



Registre UPLC-IMS-MS:

- Injecció en UPLC
- Registres:
 - MS, MS/MS
 - UV-MS, UV-MS/MS
 - UV-IMS-MS
 - UV-IMS-MS/MS
- Registres MS i MS/MS en alta resolució
- Fonts ionització: ESI i APCI

UPLC/GC/sonda-timsTOF

2023



Registre IMS-QTOF:

- Registre directe mostra sòlida o líquida
- Registres:
 - MS
 - MS/MS
 - IMS-MS
 - IMS-MS/MS
- Registres MS i MS/MS en alta resolució
- Fonts ionització: APCI

UPLC/GC/sonda-timsTOF

2023



Registre GC-IMS-QTOF:

- Injecció en GC
- Registres:
 - GC-MS
 - GC-MS/MS
 - GC-IMS-MS
 - GC-IMS-MS/MS
- Registres MS i MS/MS en alta resolució
- Fonts ionització: APCI

UPLC/GC/sonda-timsTOF

TOF, alguns exemples:

- Registre MS i MS/MS en alta resolució
- Proposta fórmula empírica a partir de massa exacta
- Anàlisi qualitativa i quantitativa en matrius complexes
- Anàlisi “target” i “non target”
- Sonda de sòlids per a mostres difícils de dissoldre
- **NOVA** tarifa: Registre de MS de producte “pur”

IMS o mobilitat iònica:

- **NOU** servei: registre de mobilitat iònica
- resolució d'isòmers
- resolució analits no resolts cromatogràficament
- **Pendent formació (previst servei inici 2025)**

UPLC/GC/sonda-timsTOF

HPLC-IMS-MS/MS:

- Mateixes capacitats que per a TOF, però separat cromatogràficament per UPLC, obtenint fins a 4 dimensions o punts d'identificació: temps de retenció, IMS, MS i MS/MS
- Disponible aplicació automatitzada per detecció i identificació de pesticides en aigua
- Possibilitat d'anàlisis retrospectives

UPLC/GC/sonda-timsTOF

GC-IMS-MS/MS:

- **NOU** servei: registre GC-MS en alta resolució
- Mateixes capacitats que per a TOF, però separat cromatogràficament per GC, obtenint fins a 4 dimensions o punts d'identificació: temps de retenció, IMS, MS i MS/MS.
- **Pendent formació (previst servei inici 2025)**

Per a tota la plataforma:

- Es disposa de software per a fer estudis estadístics de les dades registrades en qualsevol dels mòduls
(pendent formació, previst servei inici 2025)
- Possibilitat d'extracció de dades en mode autoservei

Funcionament del Servei

Règims de treball:

- Serveis per encàrrec
- Autoservei
- Serveis fets a mida

Servei per encàrrec

Usuaris o Clients han d'aportar:

- La sol·licitud de treball (disponible al web)
- La informació requerida per l'anàlisi
- Les mostres degudament etiquetades

El SAQ:

- Realitzarà la preparació de les mostres rebudes (si s'escau) i la seva anàlisi
- Emetrà l'informe de resultats

Aplica a **TOTS** els Serveis que ofereix el SAQ.

Autoservei

Usuaris o Clients:

- Realitzen registres de forma autònoma
- Es fan responsables del registre de dades sol·licitades i de la cura d'instruments i instal·lacions

El SAQ:

- Realitzarà l'habilitació necessària per a que l'usuari o client sigui completament autònom
- Estarà disponible per a resoldre incidències

Aplica a registres UV-Vis, IR, ORD i Balances.

Serveis fets a mida

Usuaris o Clients han d'aportar:

- La sol·licitud de treball (disponible al web)
- La informació requerida per l'anàlisi
- Les mostres degudament etiquetades

El SAQ:

- **Usuaris o Clients i el SAQ** pactaran el grau d'autonomia durant l'anàlisi
- El SAQ donarà el suport necessari durant tota l'anàlisi

I en cas de dubte...



pregunteu si el SAQ us pot ajudar

SAQ: l'equip més important

