

**Chromatography** Chromatographie

**Multidimensional  
Chromatography** Multidimensionale  
Chromatographie

# Multidimensional Chromatography

Multidimensional methods allow the analysis of complex samples in a few steps. Beside the coupling of several columns with the same properties for highest resolution, combinations of chemically different stationary phases are also used. These approaches enable the increase of the peak capacity and can help to avoid co-elution as can happen in a single dimension chromatography.

In HPLC and GC practice different concepts are used and common:

- peak cutting and the selective transfer of peaks or chromatogram sections onto a second column (heart-cut method)
- continuous two-dimensional chromatography (comprehensive chromatography).

### Deans Switching

Standby (1<sup>st</sup> DET) Standby-Modus (1. DET)

Shift in Retention Time  
Retentionszeitverschiebung

### Multi-Deans Switching

Standby (1<sup>st</sup> DET) Standby-Modus (1. DET)

No Shift in Retention Time  
Keine Retentionszeitverschiebung

#### Comparison between Traditional Deans Switching and Multi-Deans Switching

Vergleich zwischen herkömmlichem Deans Switching und Multi-Deans Switching

### Mechanism of Multi-Deans Switching

Funktionsweise des Multi-Deans Switching

#### Standby Mode Standby-Modus

Pressure (ΔP2) Druck (ΔP2)  
Pressure = P Druck = P  
Pressure = (ΔP1) Druck = (ΔP1)  
Pressure = P-ΔP1 Druck = P-ΔP1

2<sup>nd</sup> Column 2. Säule  
1<sup>st</sup> Column 1. Säule

$P > P - \Delta P1$  1. DET

#### Cut Mode Transfer-Modus

Pressure (ΔP2) Druck (ΔP2)  
Pressure = P Druck = P  
Pressure = (ΔP1) Druck = (ΔP1)  
Pressure = P-ΔP1 Druck = P-ΔP1

2<sup>nd</sup> Column 2. Säule  
1<sup>st</sup> Column 1. Säule

$P - \Delta P2 > P - \Delta P1$  1. DET

# Heart-Cut Gas Chromatography/Gas-Chromatographie

The multidimensional gas chromatography adds a third analytical dimension. With the new Multi-Deans Switch technology the operator can define as many heart-cuts to be transferred to the second column as needed for his target compound analysis.

The MDGC-2010 system can be successfully employed for a wide range of applications in, e.g. flavors and fragrances, environmental, food and clinical analysis. It sets a new standard in multidimensional gas chromatography. The Multi-Deans Switching offers all possibilities of the heart-cut technique without its previous drawbacks.

- very easy method development: just three steps are needed to set up a multidimensional method
- as many heart-cuts as required without any shifts of the very precise retention times
- very easy quantitation
- all operation parameters are controlled via MDGCsolution software
- for detection all conventional GC detectors as well as the extremely sensitive and fast Quadrupole GCMS-QP2010 Plus can be used

Multidimensionale Gas-Chromatographie eröffnet eine dritte Dimension. Die neue Multi-Deans-Switch-Technologie erlaubt dem Anwender so viele Peaks auf die zweite Säule zu transferieren, wie für die Zielkomponentenanalyse benötigt.

Das multidimensionale MDGC-2010 System eignet sich für zahlreiche Anwendungen z.B. in der Duft- und Aromastoff-, Umwelt-, Lebensmittel- und klinischen Analytik und setzt einen neuen Standard in multidimensionaler Gas-Chromatographie. Die Multi-Deans-Switch-Einheit bietet alle Möglichkeiten der Heart-Cut-Technik ohne die Nachteile früherer Systeme.

- sehr einfache Methodenentwicklung: nur drei Schritte zur Erstellung einer multidimensionalen Methode
- Durchführung beliebig vieler Heart-Cuts ohne Verschiebung der hochpräzisen Retentionszeiten
- sehr einfache quantitative Bestimmung
- MDGCsolution Software steuert alle Betriebsparameter
- Detektion mit allen konventionellen GC-Detektoren sowie dem höchstempfindlichen und schnellen Quadrupol GCMS-QP2010 Plus



# Multidimensionale Chromatographie

Multidimensionale Verfahren erlauben es, komplexe Matrices in wenigen Trennschritten zu analysieren. Neben der Kopplung von gleichartigen Trennsäulen für hohe Auflösung werden hierbei auch Säulen unterschiedlicher chemischer Eigenschaften miteinander kombiniert. Sie ermöglichen es, die Peakkapazität entscheidend zu erhöhen und Co-Elutionen zu vermeiden.

In der Praxis kommen in HPLC und GC verschiedene Lösungen zum Einsatz:

- das Ausschneiden von Peaks und das selektive Überführen einzelner Peaks oder Abschnitte eines Chromatogramms auf eine zweite Trennsäule (Heart-Cut-Methode)
- die kontinuierliche zweidimensionale Chromatographie (Comprehensive Chromatographie)



## LC x LC

Comprehensive LC (also called LC x LC) couples two liquid chromatography based separation methods and enables the separation of complex samples as well as the identification of co-eluting peaks. Different separation mechanisms should be chosen in order to achieve maximum possible resolution.

- two binary gradient systems enable maximum flexibility in choosing the separation method and mechanism
- detection after the second dimension only minimizes the transfer volume between the separation steps
- for the sample transfer a switching valve with two sample loops is used and operated in continuous mode
- all types of LC detectors and mass spectrometers can be used

Die Comprehensive LC (auch LC x LC genannt) verknüpft zwei flüssigchromatographische Trennungen und ermöglicht die Analyse komplexer Gemische sowie die Identifizierung von co-eluierenden Komponenten. Um maximale Auflösung zu erreichen sollten unterschiedliche Retentionsmechanismen verwendet werden.

- höchst flexible Auswahl von Trennmethode und -prinzip durch zwei binäre Hochdruckgradienten
- Detektion erst nach der zweiten Trennung gewährleistet kleinstes Systemvolumen und schnellen Probentransfer von der ersten auf die zweite Dimension
- Kontinuierlich betriebenes Schaltventil mit zwei identischen Proben-schleifen für den Probentransfer zwischen beiden Trennsäulen
- kombinierbar mit allen HPLC-Detektoren und Massenspektrometern

# Comprehensive Chromatography/Chromatographie



## GC x GC

### GC x GC (qMS)

Comprehensive chromatography is a true breakthrough in qualitative and quantitative high-end analysis for samples of natural origin from e.g. petrochemical, cosmetic, flavors and fragrances and food industry. It is based on two columns of different polarities.

The key component of GC x GC (qMS) is the patented Zoex modulator connecting both columns. It focuses the compounds from the first column and injects them into the second column.

Correct representation of the very narrow peaks obtained by:

- fast GC-detectors with a minimum filter time constant of 4 ms and a maximum data acquisition frequency of 250 Hz (see chromatography-brochure GC/GCMS)
- GCMS-QP2010 Plus featuring the fastest acquisition rates with a maximum of 50 scans per second

### GC x GC (qMS)

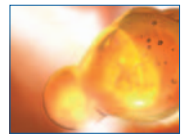
Die Comprehensive Chromatographie ist ein Durchbruch in der qualitativen und quantitativen High-End-Analyse von Proben natürlichen Ursprungs z.B. aus der petrochemischen, Kosmetik-, Duft- und Aromastoff- sowie Lebensmittelindustrie. Sie basiert auf dem Einsatz von zwei Trennsäulen unterschiedlicher Polarität.

Das Herzstück der GC x GC (qMS)-Technologie ist der patentierte thermische Zoex-Modulator als Verbindungselement zwischen den beiden Säulen. Er fokussiert die Substanzen der ersten Säule und injiziert sie in die zweite.

Korrekte Darstellung der extrem schmalen Peaks durch:

- schnelle GC-Detektoren mit einer Filterzeitkonstante von 4 ms und maximale Datenaufnahmefrequenz von 250 Hz (siehe Chromatographie-Broschüre GC/GCMS)
- GCMS-QP2010 Plus mit schnellster Sammelrate von bis zu 50 Scans/sek





## LC-GC coupling

For complex samples it may not be sufficient to couple two GC columns of different polarity to characterize all components. In this case, LC can be coupled to GC. Whereas LC separates compounds by their polarity or size, compounds in GC using non-polar columns are separated by their boiling points.

These different separation mechanisms can be used for the separation of co-elutions in various applications, e.g. characterization of olive oil or polymers or the determination of pesticides in complex matrices. Transfer of the fractions to the GC is performed via a special syringe using the AOC-5000 autosampler.

In principle, LC and GC can be coupled in two different ways:

- inject LC fractions in pre-set time intervals into the GC system (comprehensive chromatography)
- selected parts of the LC chromatogram are injected into the GC for further analysis (heart-cut method).

In the latter case LC serves as sample preparation for the GC. For detection all conventional GC detectors can be used. For correct identification and quantitation of the compounds in the usually very complex samples, however, in most cases a Quadrupole GCMS system is used.

## LC-GC Kopplung

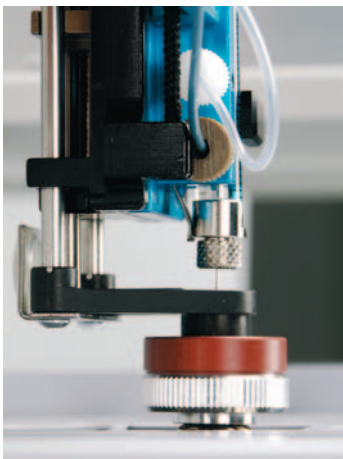
Bei komplexen Proben mag es möglicherweise nicht ausreichen, zwei GC-Säulen verschiedener Polarität einzusetzen, um alle Komponenten zu charakterisieren. In diesem Fall lassen sich LC und GC koppeln. Während die LC nach der Polarität oder Größe von Molekülen trennt, wird in der GC mit unpolaren Säulen nach Siedepunkten getrennt.

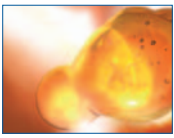
Diese unterschiedlichen Methoden können für die Trennung von Co-Elutionen verschiedenster Fragestellungen eingesetzt werden – etwa der Charakterisierung von Olivenöl oder Polymeren oder der Bestimmung von Pestiziden in komplexen Matrices. Der Transfer der Fraktionen zum GC erfolgt über eine spezielle Spritzentechnik mit dem AOC-5000 Autosampler.

Im Prinzip lassen sich LC und GC auf zwei unterschiedliche Arten koppeln:

- Fraktionen der LC werden in fest eingestellten Intervallen in den GC injiziert (Comprehensive Chromatographie)
- nur bestimmte Bereiche des LC-Chromatogramms werden zur weiteren Trennung in den GC injiziert (Heart-Cut-Methode).

Im zweiten Fall dient die LC als Probenvorbereitung für die GC. Zur Detektion lassen sich alle konventionellen GC Detektoren verwenden. Für eine korrekte Identifizierung und Quantifizierung der Komponenten in den üblicherweise sehr komplexen Proben wird jedoch meist ein Quadrupol-GCMS System eingesetzt.





## Data acquisition and evaluation software packages

### LabSolutions software

- acquires and processes data in multidimensional and comprehensive chromatography

### ChromSquare software

- easy creation of contour plots for further data evaluation in comprehensive chromatography
- identification of compounds in GC-MS applications directly from the contour plot using library searching with linear retention index search

### GCImage software (Zoex)

- for comprehensive GC (GC x GC [qMS]) this well-established tool is perfect for qualitative and quantitative data analysis

### Unique LC x GC software

- controls the complete LC and GC systems including the AOC-5000 autosampler from one user interface

## Software für Datenaufnahme und -verarbeitung

### LabSolutions Software-Familie

- Aufzeichnung und Auswertung aller Daten der multidimensionalen und Comprehensive Chromatographie

### ChromSquare Software

- einfache Erstellung von Konturplots für die weitere Bearbeitung von Comprehensive Chromatographie-Daten
- Identifikation der Komponenten in GC-MS-Anwendungen direkt aus dem Konturplot über Bibliothekssuche mit integrierter Suche nach linearem Retentionsindex

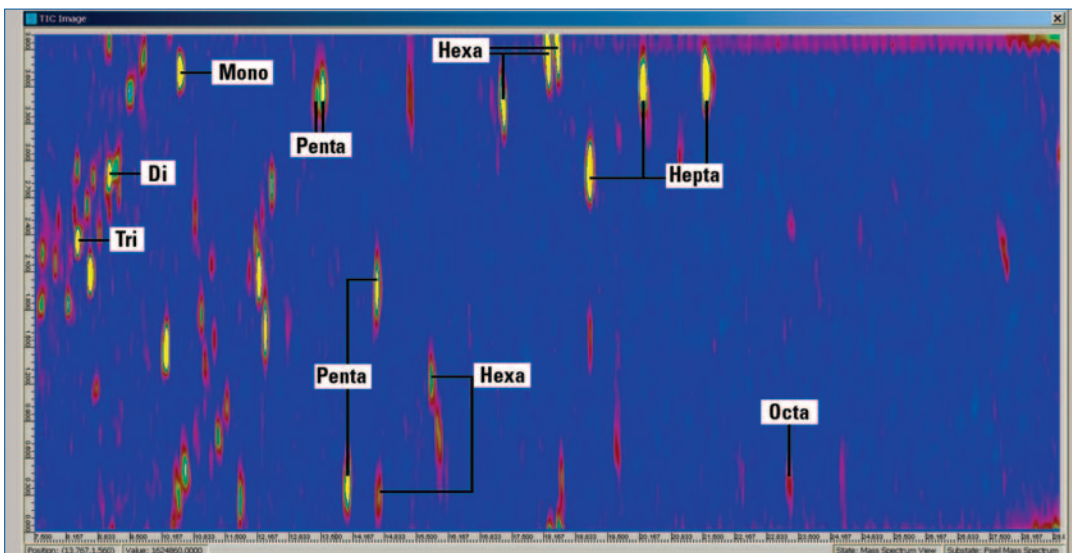
### GCImage Software (Zoex)

- bewährtes Werkzeug für die qualitative und quantitative Datenauswertung von Comprehensive GC-(GC x GC [qMS]) Daten

### Einzigartige LC x GC-Software

- Steuerung des kompletten LC- und GC-Systems einschließlich des AOC-5000 Autosamplers von nur einer Benutzeroberfläche aus

# Software

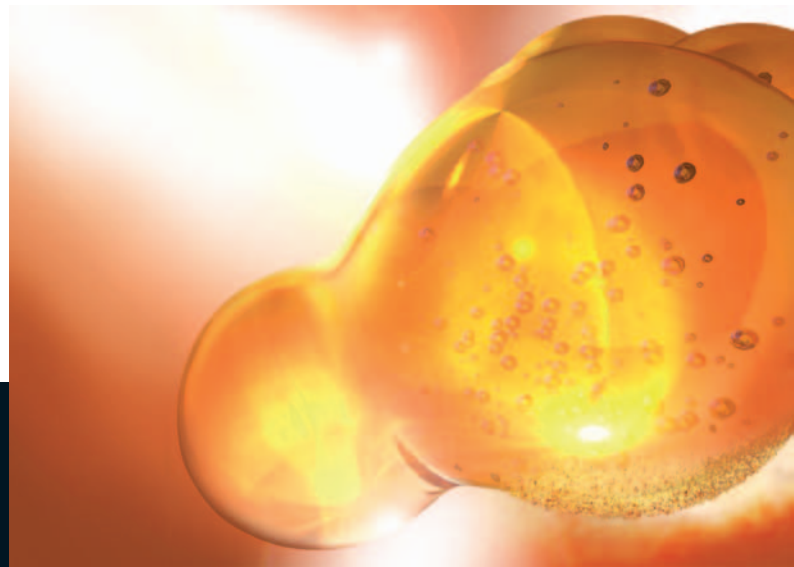


GC x GC(qMS) image of a bovine fat control sample in NCI mode

GC x GC(qMS) Darstellung einer Rinderfett Kontrollprobe im NCI-Modus

The contour plot above shows the analysis of PCBs in bovine fat. A quadrupole mass spectrometer was used as detector after the gas chromatographic separation. In this complex sample excellent selectivity for the PCBs was achieved using the quadrupole MS in NCI mode (Negative Chemical Ionization).

Die Abbildung oben zeigt den Konturplot einer Analyse von PCBs in Rinderfett. Nach der gas-chromatographischen Trennung wurde ein Quadrupol-Massenspektrometer als Detektor eingesetzt. Durch Anwendung des Quadrupol-MS im NCI-Modus (Negative Chemical Ionization) konnte eine exzellente Selektivität für die PCBs in dieser komplexen Probe erreicht werden.



# Multidimensional Chromatography

# Multidimensionale Chromatographie

To find your local Shimadzu contact  
please visit [www.shimadzu.eu](http://www.shimadzu.eu)



**Shimadzu Europa GmbH**  
Albert-Hahn-Str. 6-10 · D-47269 Duisburg

Tel.: +49 - (0)203 - 76 87-0  
Fax: +49 - (0)203 - 76 66 25  
Email: [shimadzu@shimadzu.eu](mailto:shimadzu@shimadzu.eu)