Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

采用XEVO TQ MS进行同时定性和定量：碎片离子确认扫描(PIC)

Marian Twohig, Gordon Fujimoto, Joanne Mather, and Robert S. Plumb
Waters Corporation, Milford, MA, U.S.

引言

串联四极杆质谱仪被广泛地用于制药行业中目标物的定量分析。由于样品基质的复杂性，这些定量工作主要通过多反应监控(MRM)模式来进行，因为MRM的专属性可得到最好的信噪比。

除了定量分析之外，当仪器以全扫描模式运行时，沃特世Xevo TQ质谱仪还可以得到原始的定性信息。这些信息可以用于目标色谱峰的确证。

在复杂的基质中，由于存在代谢物或基质效应等干扰，即使在MRM模式下也可导致背景信号增大。这将导致认峰的准确性下降，并且需要再一次实验进行确证。碎片离子确认扫描功能提供了一个有效手段，可以对MRM目标峰进行定性确认。

对于传统的仪器，需要进行单独的全扫描分析，才能完成定性分析。大多数传统的串联四极杆质谱仪不能在一个LC色谱峰的出峰时间内同时采集MRM模式和全扫描模式数据，更不能保证获得的数据质量。Waters® Xevo™ TQ质谱仪有创新的碰撞室设计。新型的碰撞池允许一直开着碰撞气，这样可以对LC或UPLC®色谱柱中流出的色谱峰进行定量(MRM)分析的同时，进行定性分析，而且保证良好的数据质量。

新的ScanWave™操作模式允许离子在碰撞室内累积，然后按照质荷比(m/z)分批释放。将释放离子的频率与第二个四极杆质量分析器的扫描频率同步，极大地改善了工作循环，并显著增强了全扫描和产物离子扫描谱图的信号强度。

图1. 配有ACQUITY UPLC®系统的Xevo TQ质谱仪。

实验部分

Xevo TQ MS的碎片离子确认

Xevo TQ MS可同时采集MRM色谱图和碎片离子确认(PIC)扫描谱图，从而获得目标色谱峰的额外信息。PIC扫描能够在MRM模式采集的同时，获得任意下列信息：

- 全扫描
- 采用ScanWave模式进行增强的全扫描
- 产物离子扫描
- 采用ScanWave DS模式进行增强的产物离子扫描

在PIC模式中，如果LC色谱峰的强度达到最小强度阈值，那么从色谱峰达到顶点后的四个点开始，Xevo TQ MS将自动从MRM模式切换到碎片离子扫描模式，触发PIC模式。如果满足最低强度阈值，仪器将利用第二个离四极杆(MS2)获取MS或MS/MS全扫描质谱图(如图2)，直到自动切换回MRM模式。这个强度阈值能够确保得到的PIC扫描谱图的质量，足够帮助用户进行定性分析。

Xevo TQ MS的数据采集速率很高，这使得即使在MRM数据采集时触发了PIC扫描，也可保证MRM峰面积的定量准确性，因为PIC扫描并不影响MRM色谱峰。这样，便可同时获得准确的定量和定性数据。

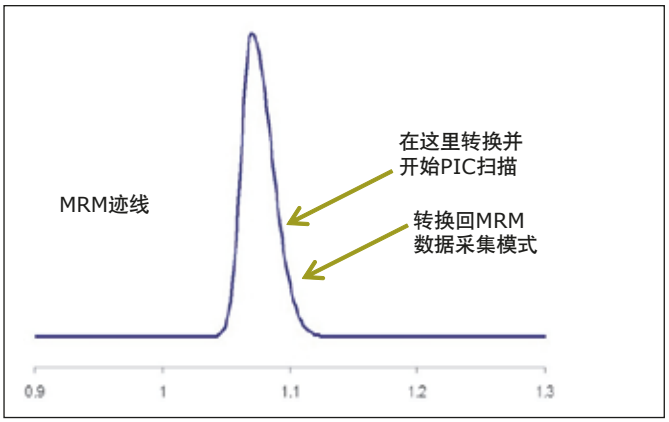

图2. 碎片离子确认(PIC)扫描原理的示意图。

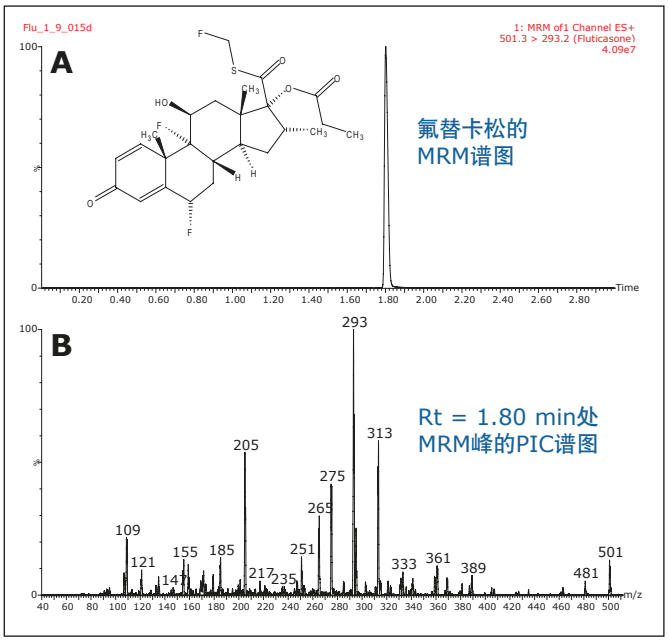

图3. 氟替卡松的色谱图(MRM 501>293)以及对应的ScanWave DS PIC谱图。

图3展示了皮质甾类化合物氟替卡松(m/z 501)进行定量分析时的MRM色谱图(如图3A)，其定性信息是由ScanWave DS增强的PIC谱图(如图3B)。在这个例子中，PIC扫描范围是软件自动选择的，为m/z 40到511。

图4A展示了采用ScanWave DS增强功能得到的PIC谱图，并对比了氟替卡松做传统的碎片离子扫描(DS)的谱图4B，和使用ScanWave DS增强的碎片离子扫描谱图4C。使用ScanWave DS增强的PIC扫描(4A)和组合的ScanWave DS碎片离子扫描(4C)，光谱数据的质量都可以得到保障。

数据表明，使用ScanWave DS增强模式采集的PIC扫描谱图(4A)，与使用传统的碎片离子扫描模式得到的谱图(4B)相比，4A信号强度增加4倍。这归因于ScanWave模式下更有效的工作循环方式。

由于ScanWave可显著增强灵敏度，使得即使在低浓度水平下也可以得到高质量的光谱信息。

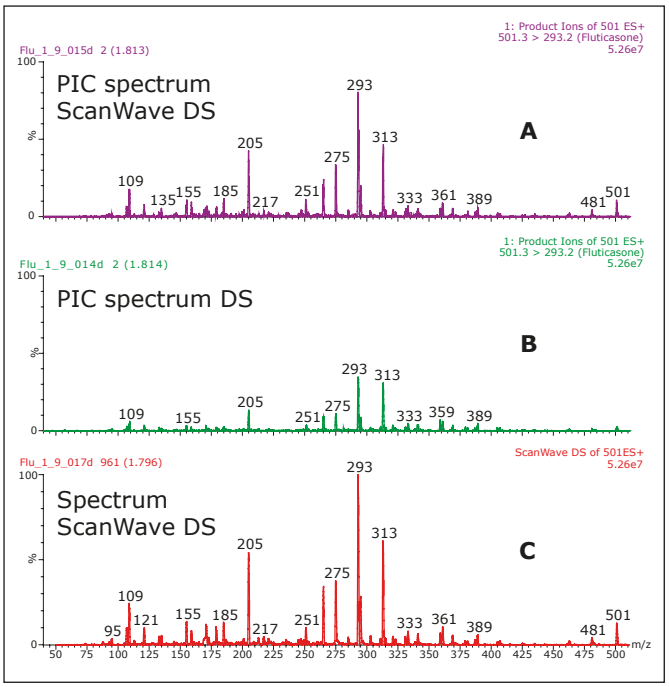

图4. A、B、C依次为：使用ScanWave DS增强的氟替卡松(m/z 501)PIC扫描质谱图、传统的氟替卡松PIC扫描质谱图，以及使用ScanWave DS增强的氟替卡松碎片离子扫描质谱图。

结论

Xevo TQ MS可以检测经色谱系统流出的氟替卡松MRM色谱峰并同时进行定量、定性分析。当需要对MRM色谱峰的进行二次定性确认时，Xevo TQ MS可以避免再次进样分析，减少样品分析的总体时间。当进行常规检测时，碎片离子确认扫描增强了用户对复杂基质定性分析的信心，同时也减少了再次进样的需求。

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

Waters，UPLC和ACQUITY UPLC是沃特世公司的注册商标。
Xevo，ScanWave和The Science of What's Possible是沃特世公司的商标。所有其它商标都是它们各自拥有者的私有财产。

©2011 沃特世公司 中国印刷
2011年12月 720002829ZH

沃特世科技（上海）有限公司
北京：010 - 5209 3866
上海：021 - 6156 2666
广州：020 - 2829 6555
成都：028 - 6554 5999

沃特斯中国有限公司
香港：852 - 2964 1800

免费售后服务热线：800 (400) 820 2676
www.waters.com