

应用纪要

应用ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro进行系统性毒理学筛查

Robert Lee, Michelle Wood

Waters Corporation



仅适用于法医毒理学应用。

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

摘要

使用Xevo TQ-S micro对之前开发的方法进行性能评估。

优势

一种简单、灵敏的UPLC-MS方法，适合在法医毒理学筛查应用中用于检测各种生物基质中的化合物。

简介

法医毒理学实验室需要采用可靠的筛查技术来检测高度复杂的生物基质（死前和死后样本）中的各种毒物。最初的沃特世系统性毒理学筛查解决方案使用Waters Alliance 2695分离单元和Waters/Micromass ZQ单四极杆质谱仪¹。2009年，这种方法被拓展至ACQUITY TQD系统，仅用一半时间就能完成同等的综合毒理学筛查分析²。该解决方案在随后几年内进一步发展，现在已经可以进行全扫描筛查和相关毒理学库搜索，15 min内即可筛查950种以上的药物和代谢物。该方法大获成功，被全球许多毒理学实验室应用于常规分析^{3,4}。考虑到该方法的应用日益广泛，沃特世在2013年又继续将其扩展到了ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQD联用系统⁵。而新发布的Xevo TQ-S micro有望进一步改进这套已经大获成功的解决方案⁶。

实验

试验样品

Bio-Rad S10 Liquichek Urine Toxicology Quality Control人尿液样品，购自Bio-Rad（英国赫默尔亨普斯特德）。

样品前处理

使用简单的液-液萃取方法提取参比尿液样品(250 μ L)。取上层有机相，蒸发去除有机溶剂，然后用50 μ L流动相A复溶，转移到沃特世全回收样品瓶中。

液相色谱条件

系统:	ACQUITY UPLC I-Class
色谱柱:	ACQUITY UPLC HSS C ₁₈ , 100Å, 1.8 μm, 2.1 mm × 150 mm
柱温:	50 °C
样品温度:	10 °C
进样体积:	10 μL
清洗溶剂:	乙腈/水(95:5 v/v)
清除溶剂:	5 mM甲酸铵, pH 3.0
流速:	0.4 mL/min
流动相A:	5 mM甲酸铵, pH 3.0
流动相B:	含0.1%甲酸的乙腈

质谱条件

质谱系统:	Xevo TQ-S micro
电离模式:	ESI+
毛细管电压:	3.0 KV
离子源温度:	150 °C
脱溶剂气温度:	400 °C

脱溶剂气流速:	800 L/h
锥孔气流速:	20 L/h
锥孔电压:	50 V~125 V, 增量为15 V (采用既有的MS方法的预配置参数)
采集范围:	m/z 80-650

结果与讨论

采用ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro联用系统, 可将这种既有的UPLC-MS筛查方法应用于最新一代沃特世质谱仪。



图1. ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro联用系统。

该技术先进行源内碰撞诱导碎裂, 然后使用ChromaLynx应用管理软件进行谱库匹配。之前使用Xevo TQ-S micro

分析药物混合物所得的结果表明，要使Xevo TQ-S micro产生与上一代质谱仪（例如Xevo TQD）相当的碎裂模式，需要更高的锥孔电压，因此本研究修改分析条件之后重新准备并评估了化合物谱库。图2比较了两个平台得到的质谱图，如图中所示，Xevo TQ-S micro每个功能通道的锥孔电压都比Xevo TQD高30 V。

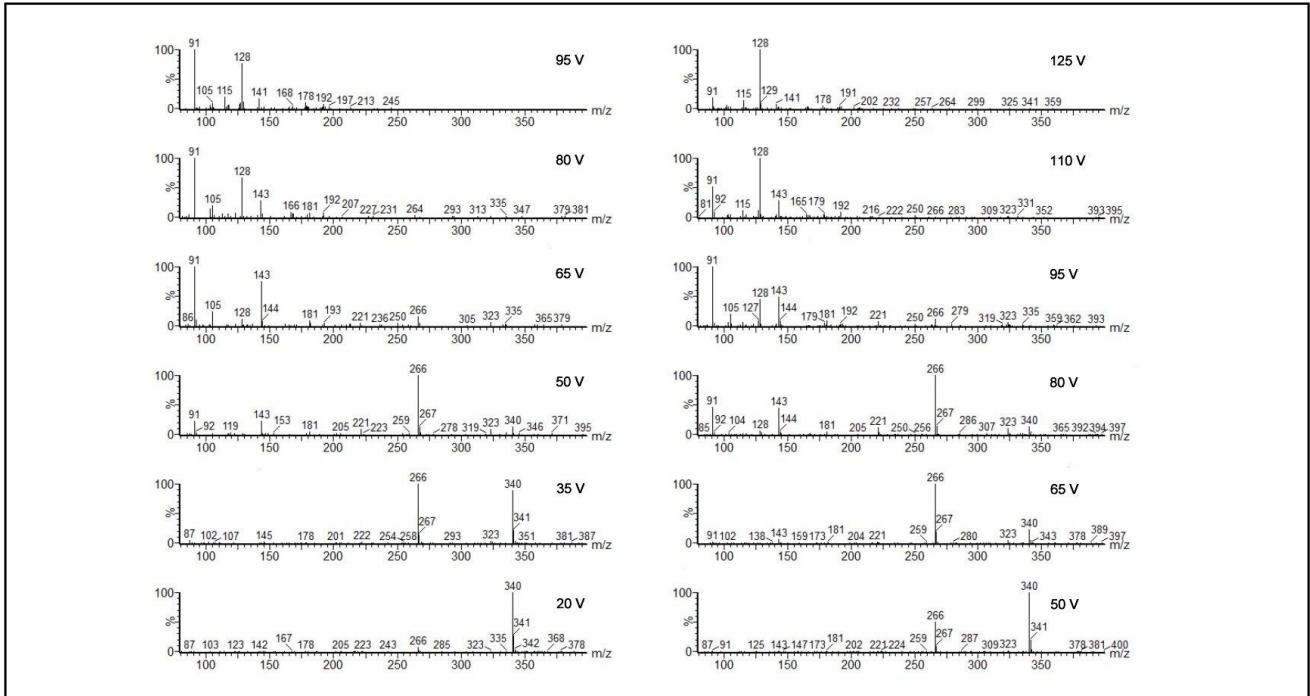


图2.使用Xevo TQD（左图）和Xevo TQ-S micro（右图）分析Bio-Rad S10 Liquichek Urine Toxicology Quality Control参比尿液样品得到的丙氧芬碎裂模式比较。

图3所示为ChromaLynx结果浏览器中提取尿液样品的一部分信息。

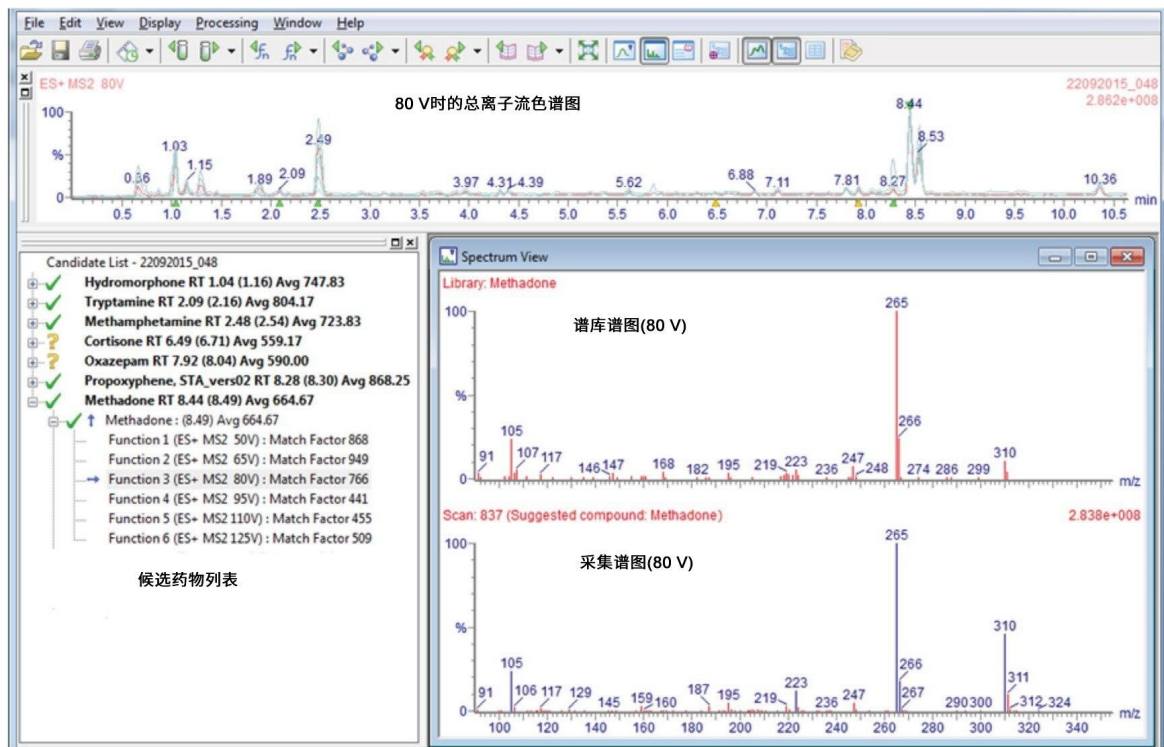


图3. ChromaLynx浏览器界面，图中所示为Bio-Rad S10 Liquichek Urine Toxicology Quality Control尿液样品分析的部分信息，突出展示了美沙酮的鉴定结果。

结论

Xevo TQ-S micro是一款串联质谱仪，能够快速获取可靠且可重现的数据，此外还能在较宽的动态范围内实现一致性良好的低浓度定量分析。本研究证明，通过更改采集方法条件，可以补偿Xevo TQ-S micro与其他平台离子源内施加的能量之间的差异，进而将这套已经非常成功的系统性毒理学筛查方案成功转换至Xevo TQ-S micro。结合经过修订的谱库，Xevo TQ-S micro平台可发挥与之前的Waters MS平台相当的出色性能。Xevo TQ-S micro是一款通用性极高的仪器，适用于毒理学筛查分析，让用户使用同一个仪器平台即可完成覆盖范围极广的全扫描MS定性分析、靶向MRM筛查分析，以及高灵敏度的定量检测。

参考资料

1. Humbert L, Lhermitte M, and Grisel F. General Unknown Screening for Drugs in Biological Samples by LC/MS.2007. Waters Application Note, 720001552EN.
2. Lee R, Roberts M, Paccou A, and Wood M. Development of a New UPLC/MS Method for Systematic Toxicological Analysis.2009. Waters Application Note, 720002905EN.
3. Humbert L, Grisel F, Richeval C, and Lhermitte M. Screening of Xenobiotics by Ultra-Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry Using In-Source Fragmentation at Increasing Cone Voltages: Library Constitution and an Evaluation of Spectral Stability. *Journal of Analytical Toxicology* 2010; 34: 571–580.
4. Rosano T, Wood M, and Swift T. Postmortem Drug Screening by Non-targeted and Targeted Ultra-Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry Technology. *Journal of Analytical Toxicology* 2011; 35: 411–423.
5. Roberts M和Wood M. 使用ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQD系统进行法医毒理学筛查.2013. 沃特世应用纪要, 720004602ZH.
6. Xevo TQ-S micro产品手册.2014沃特世营销手册, 720005046ZH.

本文旨在为分析方法原理演示提供支持，文中给出了使用所述配置可获得的典型结果示例。此方法代表用户自己进行方法验证时应采用的基本起始条件。

特色产品

[ACQUITY UPLC I-Class PLUS系统 <https://www.waters.com/134613317>](https://www.waters.com/134613317)

[Xevo TQ-S micro三重四极杆质谱仪 <https://www.waters.com/134798856>](https://www.waters.com/134798856)

[Xevo TQD三重四极杆质谱仪 <https://www.waters.com/134608730>](https://www.waters.com/134608730)

[ChromaLynx <https://www.waters.com/513759>](https://www.waters.com/513759)

720005661ZH, 2016年3月



©2019 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私策略](#) [商标](#) [招聘](#) [法律和隐私声明](#) [危险化学品生产经营许可证](#) [Cookie](#) [Cookie](#)
[设置](#)

沪ICP备06003546号-2 京公网安备 31011502007476号