

Xevo™ G3 QToF的灵敏度和线性动态范围

Lisa Reid, Lee A. Gethings

Waters Corporation

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

摘要

本文展示了Waters Xevo™ G3 QToF在进行化合物的快速、准确筛查时所具有的宽动态范围。Xevo G3 QToF质谱仪可提供高达5个数量级的宽动态范围。本次分析使用了一组标准品，这些标准品由茶树（绿茶）产品中的天然活性成分组成，包括咖啡因和各种儿茶素化合物。这款紧凑型台式四极杆飞行时间质谱仪不仅能够提供出色的动态范围，而且还具有高达30,000 FWHM的质量分辨率和2 ppm以内的高质量精度，适用于小分子应用。

优势

本文展示了Waters Xevo G3 QToF对常见天然产物活性成分（咖啡因和儿茶素）的宽动态范围（高达5个数量级），证明了该仪器能够提供很宽的动态范围，有助于对化合物进行快速、准确的MS^E全扫描筛查。

简介

在表征复杂基质或分析一系列样品中未知或不同浓度水平的目标分析物时，质谱仪需能够为这些分析物提供较宽的动态范围。宽动态范围可降低所选样品因目标化合物超出标准曲线或检测器限值而需要更改制备方法和重新进样的可能性。

任何质谱仪，随着灵敏度的提高，都可以检测到较低浓度的化合物，虽然这对于低浓度分析物来说是个好消息，但对于丰度更高的化合物则可能引发问题。提高灵敏度时，定量上限可能会受到影响，因为检测器可能会饱和，不再产生线性响应。通过扩大仪器的动态范围，可以改善质谱仪的检测下限，从而能够检测更低含量的分析物，并保持检测上限，准确定量高含量的分析物。宽动态范围意味着分析浓度差异很大的单个样品可以通过单次进样进行分析，并且有很高比例的分析物将落在仪器的动态范围之内。

结果与讨论

研究测试了系统线性动态范围，以确保典型分析水平下的数据可信度，并展示了用于定量目的的线性响应。本次分析使用购自Sigma（英国多塞特）的市售100 µg/mL绿茶儿茶素混标（货号：G-016）。在进样至系统之前，使用25:75 (v:v)甲醇:水溶剂稀释该标准品，以绘制标准曲线。为了评估线性和灵敏度，研究中制备了五个数量级的稀释系列，浓度范围为0.001 µg/mL~100 µg/mL。每个点进样1 µL，使每种分析物的柱上进样量范围为1 pg至100 ng。有关实验的详细信息，请参阅应用纪要：[720008031ZH](#)。

使用ACQUITY™ Premier UPLC™色谱系统和Xevo G3 QToF质谱仪，进样儿茶素标准品稀释液各1 µL，在正离子模式下进行分析，并使用MS^F连续采集方法收集数据。

如图1所示，在所制备的浓度范围内，绿茶活性化合物的线性动态范围在5~3个数量级之间变化。观察到的变化是每种分析物的检测下限(LLOD)所致，这种变化似乎并非由每种分析物的强度引起，而是由线性回归的斜率所导致。一些化合物的信号衰减速率似乎比其他化合物快得多（图2）。这些动态范围也是在系统不饱和的情况下实现的，因此可能存在比此处引用的值更宽的线性范围（图3）。

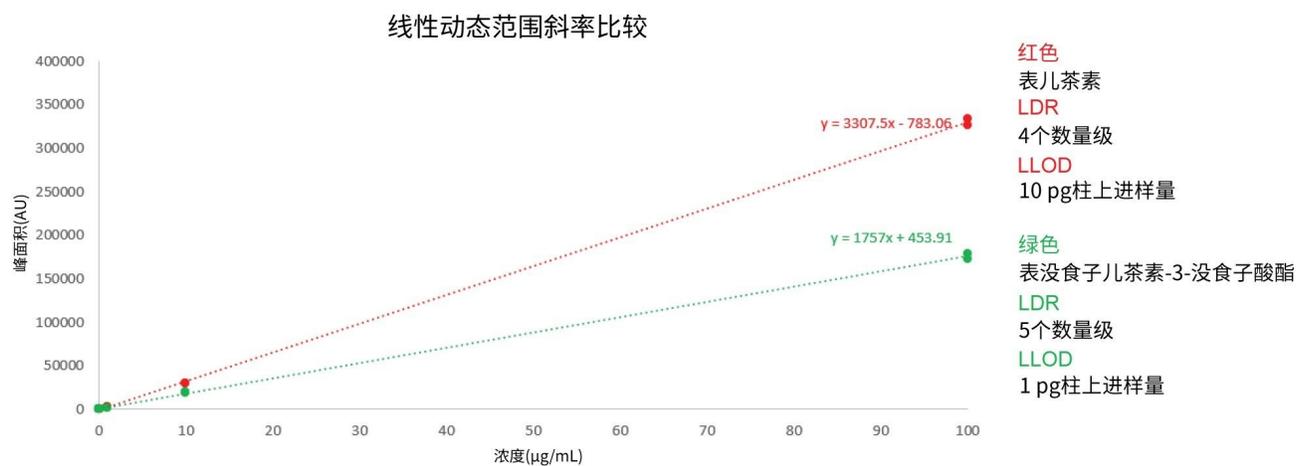
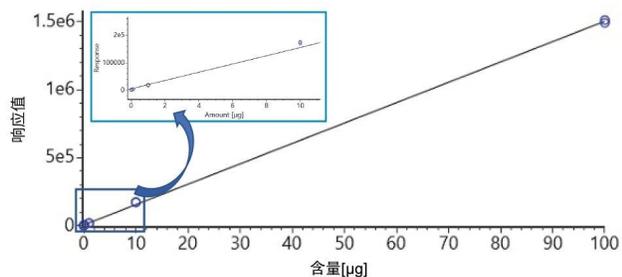


图1.线性动态范围(LDR)图，展示了两种标准品（表儿茶素和表没食子儿茶素-3-没食子酸酯）的不同斜率方程。

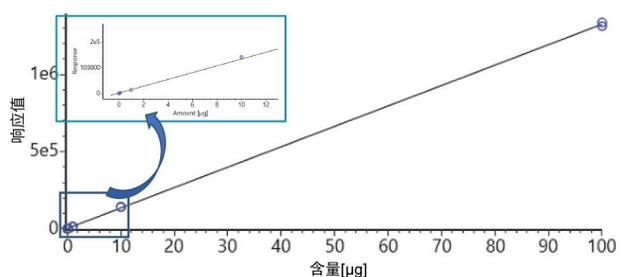
标准曲线组分: (-)-表没食子儿茶素3-没食子酸酯
方程: $Y = 1.5e4 * X + 6.25e3$
加权: 无

% RSD (%): 3.567
 R^2 : 0.999738



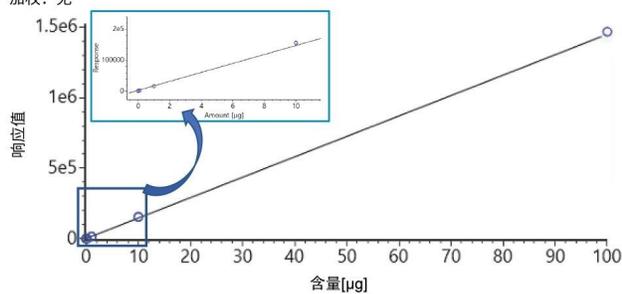
标准曲线组分: (-)-没食子儿茶素3-没食子酸酯
方程: $Y = 1.32e4 * X + 2.3e3$
加权: 无

% RSD (%): 2.632
 R^2 : 0.999861



标准曲线组分: (-)-表儿茶素没食子酸酯
方程: $Y = 1.45e4 * X + 2.99e3$
加权: 无

% RSD (%): 3.604
 R^2 : 0.999739



标准曲线组分: (-)-表儿茶素
方程: $Y = 2.21e4 * X - 4.61e3$
加权: 无

% RSD (%): 2.921
 R^2 : 0.999822

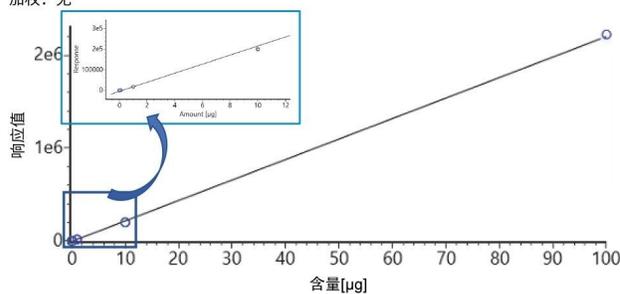


图2.四种绿茶活性成分的浓度曲线，展示了Xevo G3 QToF的线性动态范围。A) 儿茶素-3-没食子酸酯，B) 咖啡因，C) 表儿茶素-3-没食子酸酯，D) 表没食子儿茶素-3-没食子酸酯。

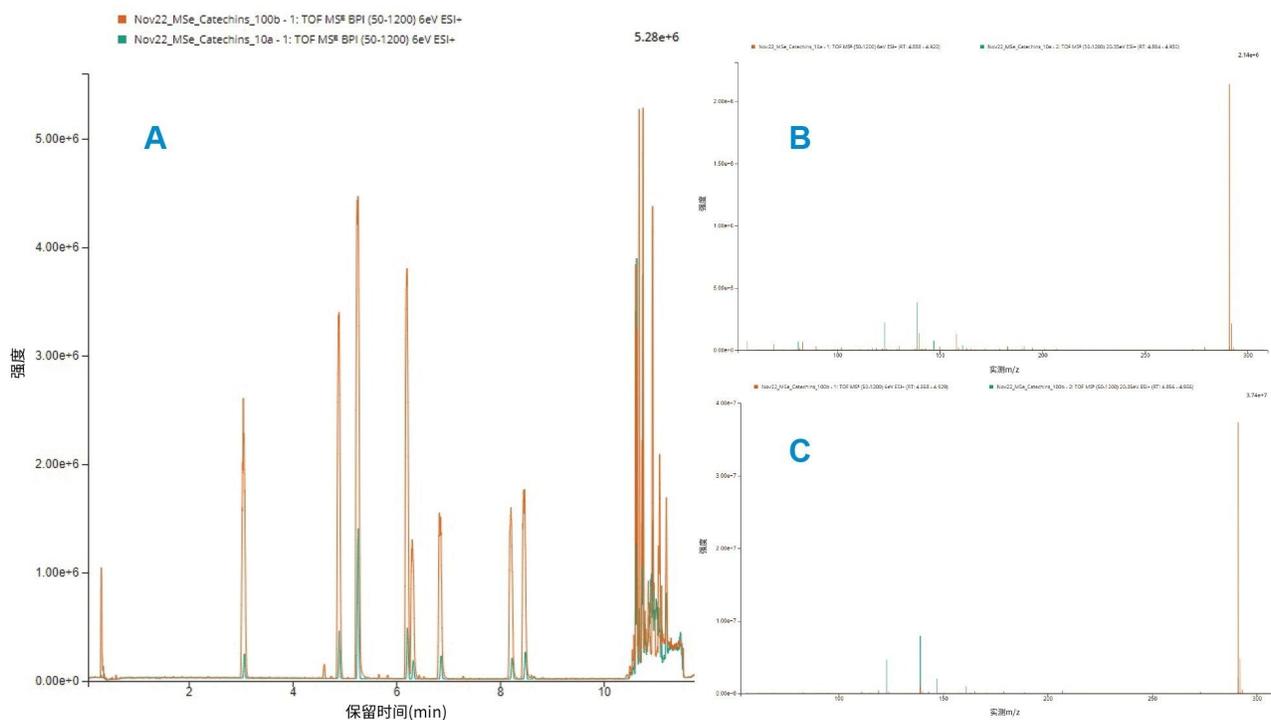


图3. 色谱柱载样50 ng和100 ng时的色谱图和质谱图质量。图中叠加了BPI(A)，以及提取低能量谱图和高能量谱图(B+C)，(B)儿茶素色谱柱载样量50 ng；(C)儿茶素色谱柱载样量100 ng。

标准曲线的顶点是典型标准品采集水平（柱上进样量100 ng），在该浓度下，仪器在线性范围内产生了窄幅的高斯色谱峰和质谱图，且没有任何化合物导致系统（色谱或检测器）过载。生成的所有线性曲线均显示出直至该上限校准点的线性响应。纯标准品的进样体积为1 μ L，保留该点作为曲线的上限点，因为历史系统的分析数据表明，对于这些特定标准品而言，柱上进样量超过250 ng会导致色谱饱和，峰形和分离效果变差。

LLOD被确定为色谱图上出现的一个可见峰的浓度，其信噪比(S/N) >3。图4展示了使用Skyline分析得到的示例（华盛顿大学MacCoss实验室），其中显示了表没食子儿茶素-3-没食子酸酯的LLOD提取色谱图(XIC)。数据集中包含的最低S/N值为7.0，这是咖啡因柱上载样量为5 pg的实测结果。

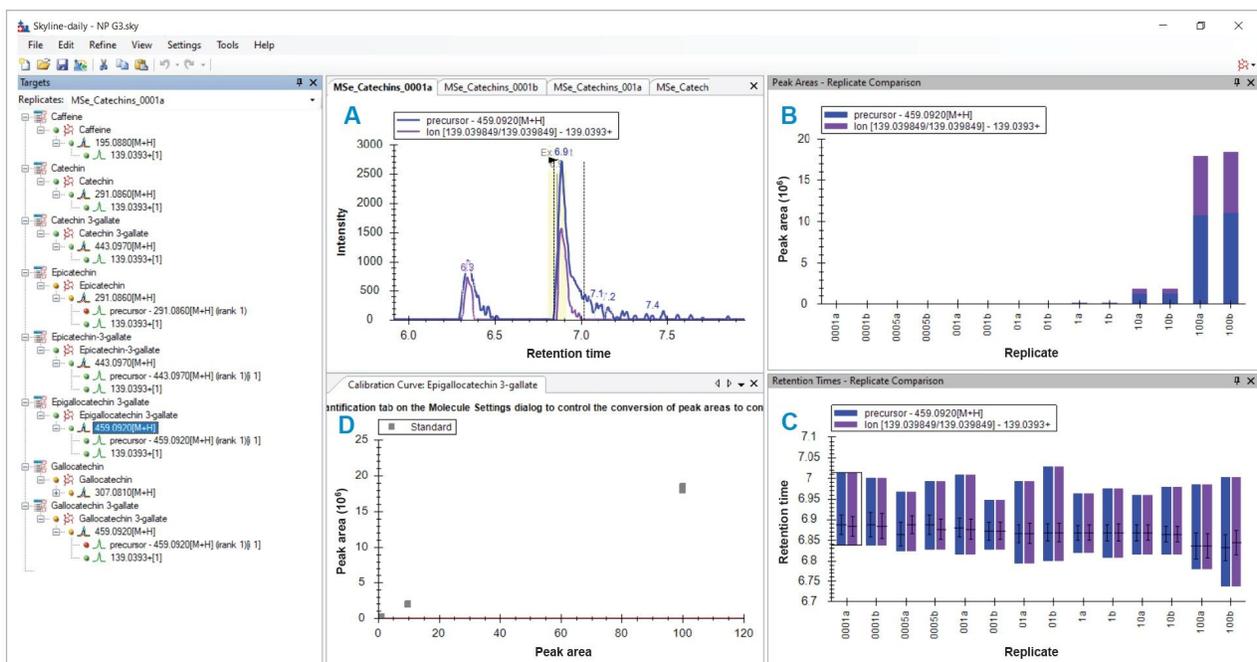


图4.表没食子儿茶素-3-没食子酸酯的Skyline视图，针对母离子和子离子显示了LLOD的XIC (A)、峰面积概览(B)、保留时间(C)，以及化合物的响应曲线(D)。

结论

本应用展示了Xevo G3 QToF质谱仪可覆盖5个数量级的线性动态范围。对于绿茶活性化合物，测得的Xevo G3 QToF LLOD介于柱上进样量1 pg~10 pg之间（即，进样1 μ L 1~10 ng/mL浓度的标准品），通过计算S/N > 3的可见峰确定。ACQUITY Premier色谱系统和Xevo G3 QToF质谱仪均可在100 ng柱上校准点（即，进样1 μ L 100 μ g/mL浓度的标准品）下轻松生成优质的数据。

特色产品

ACQUITY Premier色谱系统 <<https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135077739>>

[Xevo G3 QToF质谱仪 </nextgen/cn/zh/products/mass-spectrometry-systems/xevo-g3-qtof.html>](/nextgen/cn/zh/products/mass-spectrometry-systems/xevo-g3-qtof.html)

[MassLynx MS软件 <https://www.waters.com/513662>](https://www.waters.com/513662)

720008043ZH, 2023年9月



© 2024 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私](#) [商标](#) [招聘](#) [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](#)