

使用StepWave™ XS改善Xevo™ G3 QTof质谱仪上不稳定物质的传输

Lisa Reid, David Pickles

Waters Corporation

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

用于体外诊断。仅在部分国家/地区销售。

摘要

质谱仪离子光学元件中不稳定离子的碎裂会导致分析物离子传输减少并产生误导性的MS谱图，这会对检测限、数据库搜索和结构解析产生不利影响。为应对这一挑战，Xevo G3 QTof配备了新型StepWave XS离子导入器，可将信号传输提高至22倍。使用“软传输”模式可将信号进一步提高至57.8倍，用于本次评估中所示化合物的特定、脆弱的分析物。随着离子传输增加，灵敏度和完整分析物与碎片离子比显著提高，从而改善了分析物离子检测和结构确认。

优势

采用新的StepWave XS离子导入器时，不稳定物质的传输增加，从而提高了灵敏度和完整分析物与碎片离子比。验证StepWave XS上不稳定化合物传输的优化参数，以适应缺省参数的简单快速转换。

简介

精确质谱法在许多学科（例如药物质量控制、蛋白质组学、代谢组学、天然产物、药物代谢、环境监测、法医毒理学和食品分析）中广泛应用于不稳定化合物的分析，从而分析成分和识别单个分析物。在这些应用领域中，分

析物可能出现明显的意外碎裂，因此灵敏度和专属性对于分析物检测和结构分析至关重要，这些分析物包括：小分子药物、药物代谢物、杀虫剂和内源性生物分子。

意外的分析物碎裂通常是由于不稳定的分子键分解，这是由离子从离子源传输到质量分析器的过程中发出的能量所导致的。这种碎裂会导致完整分析物离子信号减少，甚至完全丢失，并可能导致误鉴关键分析物。使用其他市售的QToF质谱仪验证或定量这些不稳定化合物可能需要对子离子而不是目标分析物（母离子）离子进行积分，并会妨碍分析物的可靠鉴定或定量。

Waters Xevo G3质谱仪（图1）配备了StepWave XS离子导入器，这是一种新设计，有利于不稳定离子的完整传输。我们通过本研究证明，与配备旧款离子传输光学元件设计的QToF仪器相比，即使StepWave XS使用缺省设置，Xevo G3 QToF上不稳定分析物的碎裂也显著减少。我们还展示了调整StepWave XS设置以促进“软传输”模式的能力，这进一步减少了意外碎裂效应并改善了分析物离子的检测。

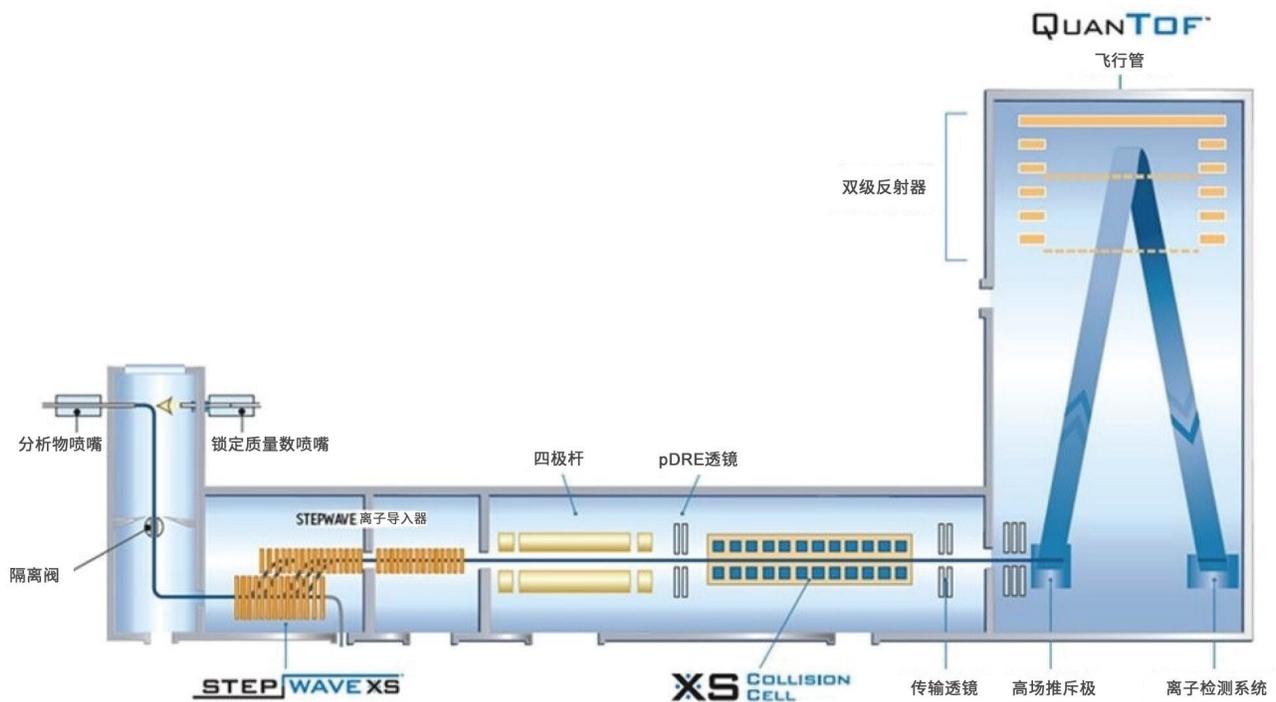


图1.展示StepWave XS设计的Xevo G3示意图

结果与讨论

为了评估StepWave XS离子导入器在LC/MS分析中的优势，我们在Xevo G3 QTof和上一代Xevo G2-XS QTof上分析了已知可能发生碎裂的小分子化合物的混合物。所选分析物列于下方（表1）：

- 小分子药物：安非他命、去甲舍曲林、布洛芬、阿司匹林。
- 杀虫剂：氯苯胺灵。
- 内源性化合物：25-羟基维生素D3。

使用反相色谱梯度分析测试化合物，然后在正离子MS模式和负离子MS模式下进行检测。在包含旧StepWave设计的QTof仪器(Xevo G2-XS QTof)上，使用缺省StepWave调谐参数进行评估，并在Xevo G3 QTof上使用缺省StepWave XS调谐参数以及优化的“软传输”调谐参数进行评估（表2）。每台仪器在每种运行模式下进行六次测试溶液进样，并测量每种分析模式下母离子的平均峰面积值。

化合物	分子式	母离子 <i>m/z</i>	碎片离子 <i>m/z</i>
安非他命	C ₉ H ₁₃ N	136.113	91.05
氯苯胺灵	C ₁₀ H ₁₂ ClNO ₂	214.064	172.02
去甲舍曲林	C ₁₆ H ₁₅ Cl ₂ N	292.066	158.98
25-羟基维生素D3	C ₂₇ H ₄₄ O ₂	401.342	365.32
布洛芬	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	205.123	161.13
阿司匹林	C ₉ H ₈ O ₄	179.034	93.03

表1.化合物母离子和碎片离子的详细信息

调谐设置	缺省参数	软传输
StepWave RF (<i>VP-p</i>)	150	50
主体梯度(<i>V</i>)	20	5
传输碰撞能量(<i>V</i>)	2	2

表2.StepWave XS的缺省调谐参数以及经过优化的“软传输”模式下的调谐参数

当使用缺省调谐参数时，与Xevo G2-XS QTof相比，Xevo G3 QTof上观察到所有测试分析物的完整分析物离子响

应显著增加。这种改善取决于化合物，范围从布洛芬母离子峰面积增加3.9倍到安非他明母离子峰面积增加22.7倍。此外，与使用缺省StepWave XS调谐设置运行Xevo G3 QToF获得的结果相比，当对Xevo G3 QToF StepWave XS调谐设置进行“软传输”优化时，所有测试分析物的完整分析物离子响应均进一步增加。与使用Xevo G2-XS QToF获得的母离子峰面积相比，Xevo G3 QToF的完整分析物离子响应的进一步改善使母离子峰面积总体增加5.6~57.8倍（图2）。

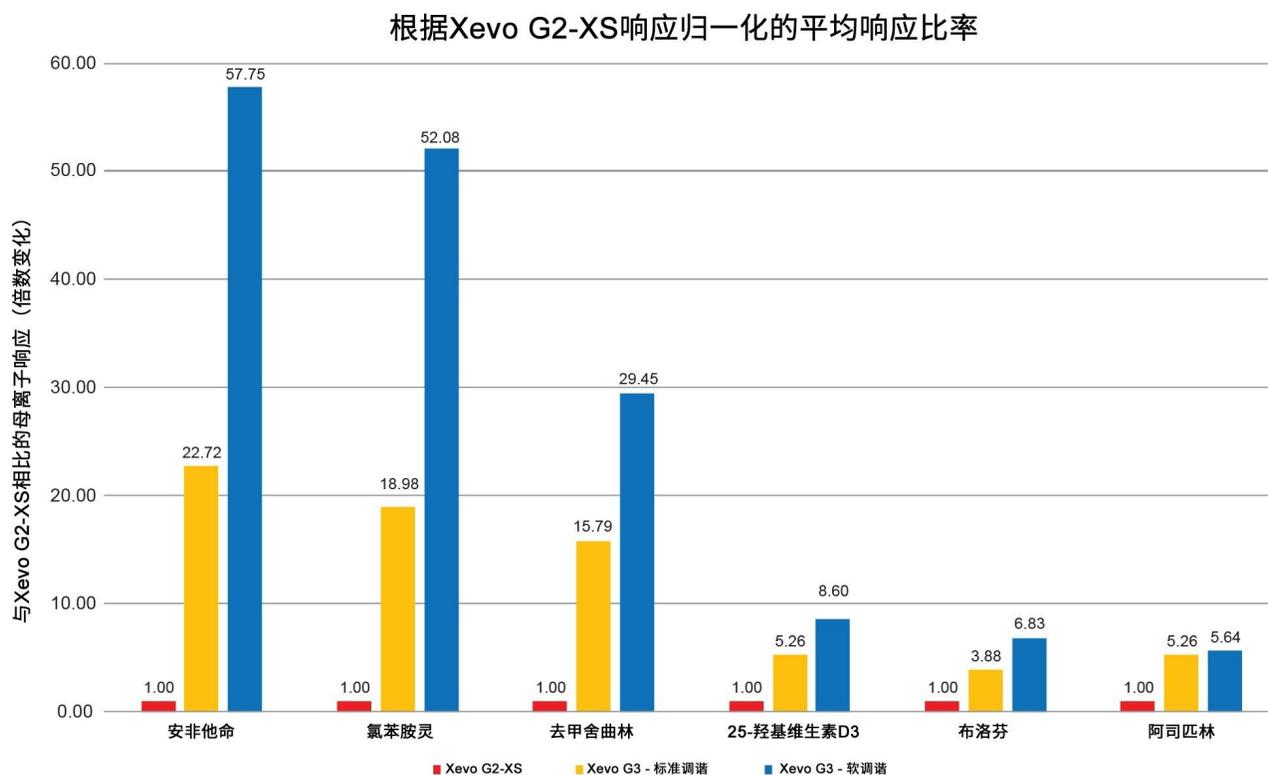


图2.每种不稳定分析物的灵敏度改善总结，已针对Xevo G2-XS数据对响应进行了归一化。显示了相对于Xevo G2-XS上观察到的母离子响应的倍数变化的改善。

除了监测不稳定分析物峰面积响应的增加外，还可以评估意外碎裂占分析物离子的百分比。该碎裂值计算为完整分析物母离子响应与母离子和碎片离子的总离子响应的百分比（母离子/（母离子+碎片离子）*100）。通过此计算可以看出，与Xevo G2-XS QToF相比，六种测试分析物中有五种在Xevo G3 QToF上产生的分析物母离子碎裂明显较少。布洛芬的母离子信号与碎片离子之比在两种仪器上都相对较高(>50%)，它是唯一一种在Xevo G3 QToF上分析时未表现出改善的分析物。

当在Xevo G3 QToF上使用“软传输”调谐参数进行分析时，所有化合物的完整分析物离子强度与总组合离子信号相比有所提高。与Xevo G2-XS QToF中的传统离子光学元件相比，使用具有“软传输”参数的Xevo G3 QToF，去甲舍曲林信号显示出20倍以上的增加（相当于0.7%至20.3%）。氯苯胺灵和阿司匹林这两种化合物在分析时都出现>99%的碎裂。尽管碎裂仍然很明显，但在Xevo G3 QToF上实施“软传输”调谐参数时，这两种分析物的完整母离子信号确实略有改善（图3）。

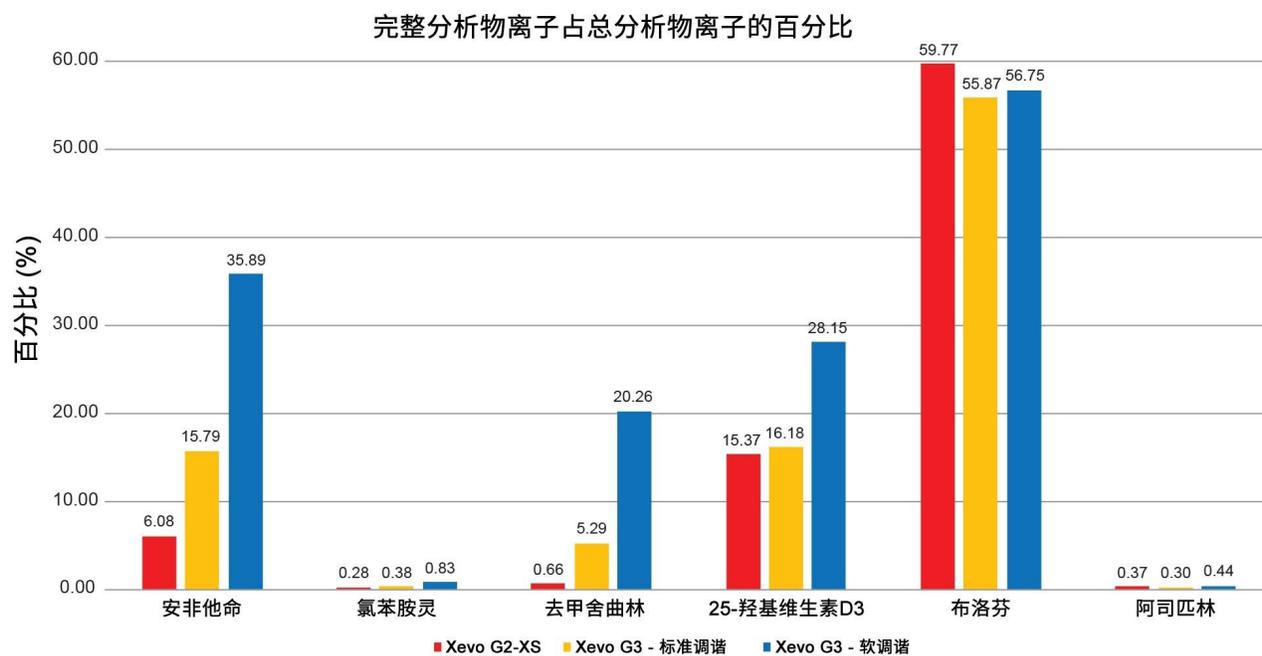


图3. 每种不稳定分析物的母离子占总分析物离子百分比改善的总结。

结论

不稳定化合物会在质谱仪的离子源和离子光学元件中发生碎裂，这会对峰检测、检测限、灵敏度、数据库搜索和结构解析产生不利影响。Waters StepWave XS设计已被证明可以减少质谱仪离子光学元件中不稳定离子的碎裂。这项研究表明，Waters StepWave XS离子导入器可以显著改善不稳定化合物的完整分析物离子的传输，尤其是在使用“软传输”模式优化参数时。有关StepWave技术的详细信息，请参阅文档：StepWave - Enhancing MS Sensitivity and Robustness（《StepWave - 增强MS灵敏度和稳定性》）([720004175](#) <

<https://www.waters.com/webassets/cms/library/docs/720004175en.pdf>)。

在测试的六种不稳定化合物中：四种在正电离模式下电离最有效，两种在负电离模式下电离最有效。该数据集中分析的大多数化合物的完整分析物离子信号与“总”组合离子强度相比有所提高。与之前的StepWave设计相比，使用StepWave XS时，进样的所有分析物的响应提取离子流色谱图(XIC)（母离子的峰面积）都有显著改善。与缺省StepWave设置相比，使用优化的“软传输”StepWave参数在Xevo G3 QToF上分析时，所有分析物也有所改善。

特色产品

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

[StepWave <https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=134673601>](https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=134673601)

[Xevo G2-XS QToF四极杆飞行时间质谱仪 <https://www.waters.com/134798222>](https://www.waters.com/134798222)

720007794ZH, 2022年11月

© 2023 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私](#) [商标](#) [网站地图](#) [招聘](#) [Cookie](#) [Cookie设置](#)

[沪ICP备06003546号-2](#) [京公网安备 31011502007476号](#)