

# 基于GC-MS/MS Scan/MRM模式的鼠尿中代谢物分析(1)

岛津GCMS-TQ8030是具备Scan/MRM模式的GC-MS/MS，可以同时进行Scan与MRM测定。

如果在多成分同时分析中采用Scan/MRM模式，则以Scan测定受杂质影响小、Scan模式下有足够灵敏度的成分，这样，将MRM测定的目标成分减少到最小限度。这样可以最大限度地减少MRM的分析条件的探讨工作。如果已有登录了化合物信息的Scan测定用方法文件时，只需在此方法文件中追加MRM测定的分析条件，就可以轻松地进行Scan/MRM测定。此次，使用在GC/MS代谢数据库的Scan测定用方法中追加了5种成分的MRM测定的Scan/MRM模式，测定了从鼠尿提取的代谢物。

## 实验

将鼠尿经脲酶处理直接干燥法[1]处理、三甲基硅基化后作为测定样品。

## 分析条件

测定模式使用了Scan/MRM。分析条件如Table 1所示。

在已登录了GC/MS代谢成分数据库中179种成分的Scan测定方法文件中，追加了5个成分的MRM条件后进行了测定。

Table 1 分析条件

GC-MS :GCMS-TQ8030 色谱柱:DB-5 (长30m, 0.25mm I.D., df=1.0 μm)	
[GC] 气化室温度:280℃ 柱温箱温度:100℃(4分)→(4℃/分)→320℃(0分) 进样模式:无分流 采集时间:1 分 载气控制:线速度(39.0 cm/秒) 进样量:1 μL	[MS] 接口温度:280℃ 离子源温度:200℃ 调谐模式:标准 测定模式:Scan/MRM 质量范围: $m/z$ 45 - 600 扫描事件时间:0.2秒 扫描速度:3,333 u/秒 测定模式:MRM

MRM 监测  $m/z$

Compound name	RT (min)	Quantitative Transition		Qualitative Transition	
		Precursor>Product	CE (V)	Precursor>Product	CE (V)
Lactic acid-2TMS	7.51	219 > 149	8	219 > 191	5
Glycerol-3TMS	14.711	218 > 159	6	218 > 113	14
Glutaric acid-2TMS	18.827	158 > 116	8	158 > 101	15
Adipic acid-2TMS	22.078	275 > 141	8	275 > 111	10
Suberic acid-2TMS	27.76	303 > 109	12	303 > 191	4

分析结果

以Scan/MS/MS模式测定鼠尿中的代谢物，得到的扫描总离子色谱图如Fig. 1所示。Fig. 2表示扫描的质色图、Fig. 3表示MS/MS的质色图。扫描测定、MS/MS测定都未受到杂质等的影响。

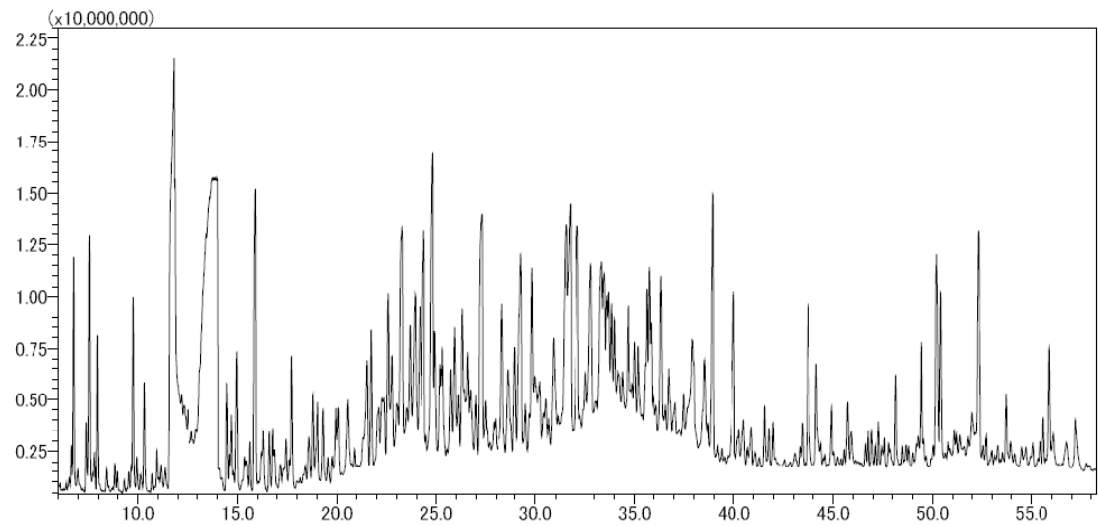


Fig. 1 Scan/MS/MS 测定鼠尿中代谢物的扫描部分总离子流图

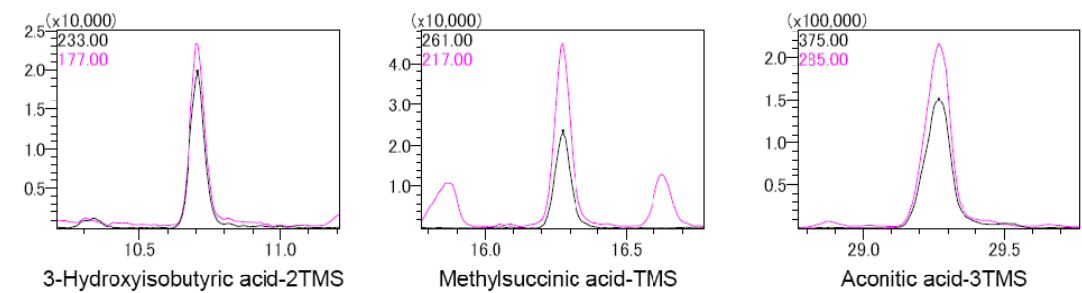


Fig. 2 鼠尿中的代谢物的扫描质色图比较

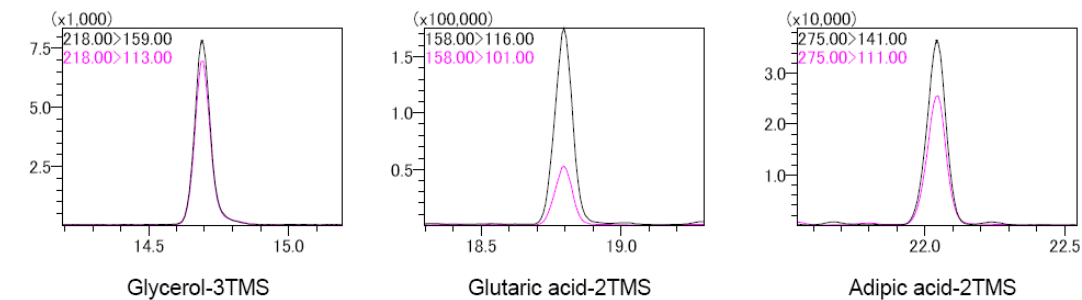


Fig. 3 鼠尿中的代谢物的 MS/MS 质色图比较

# 基于GC-MS/MS Scan/MRM模式的鼠尿中代谢物分析(2)

岛津GCMS-TQ8030是具备Scan/MRM模式的GC-MS/MS，可以同时进行Scan与MRM测定。

如果使用Scan/MRM模式，则可以同时进行基于MRM高选择性的高灵敏度分析和基于Scan谱图的定性分析。

发挥这些特长，能够以MRM准确定量目标成分，而对于非目标未知成分，则可以通过谱库检索经Scan测定得到的的质谱予以定性。

此次，以Scan/MRM模式测定了从鼠尿提取的代谢物，5个目标成分以MRM测定，对于未知峰，利用Scan得到的质谱进行谱库检索而予以鉴定。

## 实验

将鼠尿经脲酶处理直接干燥法[1]处理、三甲基硅基化后作为测定样品。

## 分析条件

测定模式采用了Scan/MRM。分析条件如Table 1所示。

Table 1 分析条件

GC-MS :GCMS-TQ8030	
色谱柱:DB-5 (长30m, 0.25mm I.D., df=1.0 μm)	
[GC]	[MS]
气化室温度:280℃	接口温度:280℃
柱温箱温度:100℃ (4分)→(4℃/分)→320℃ (0分)	离子源温度:200℃
进样模式:无分流	调谐模式:标准
采集时间:1 分	测定模式:Scan/MRM
载气控制:线速度(39.0 cm/秒)	质量范围: $m/z$ 45 - 600
进样量:1 μL	扫描事件时间:0.2秒
	扫描速度:3,333 u/秒
	测定模式:MRM

MRM 监测  $m/z$

Compound name	RT (min)	Quantitative Transition		Qualitative Transition	
		Precursor>Product	CE (V)	Precursor>Product	CE (V)
Lactic acid-2TMS	7.51	219 > 149	8	219 > 191	5
Glycerol-3TMS	14.711	218 > 159	6	218 > 113	14
Glutaric acid-2TMS	18.827	158 > 116	8	158 > 101	15
Adipic acid-2TMS	22.078	275 > 141	8	275 > 111	10
Suberic acid-2TMS	27.76	303 > 109	12	303 > 191	4

分析结果

以Scan/MS/MS模式测定的鼠尿中代谢物的扫描总离子色谱图和MRM的质谱图如图Fig. 1所示。Fig. 2、Fig. 3表示扫描测定质谱和谱库检索时命中的谱库检索质谱。

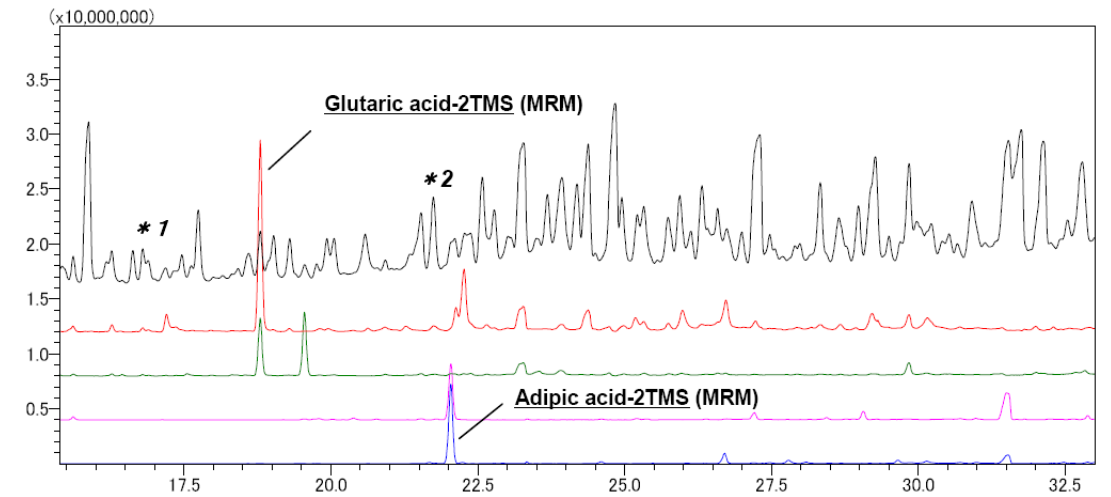


Fig. 1 以Scan/MS/MS测定的鼠尿中代谢物的扫描部分总离子流图

黑：扫描总离子色谱图，红：MRM Transition158 > 116，绿：MRM Transition158 > 101，  
紫：MRM Transition275 > 141，蓝：MRM Transition275 > 111

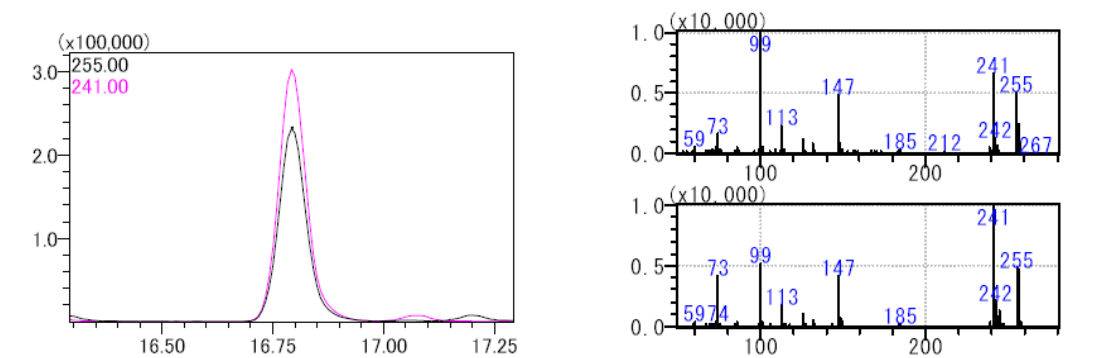


Fig. 2 Uracil-2TMS(\*1)的扫描质谱图和质谱（上段：测定谱图、下段：谱库检索谱图）

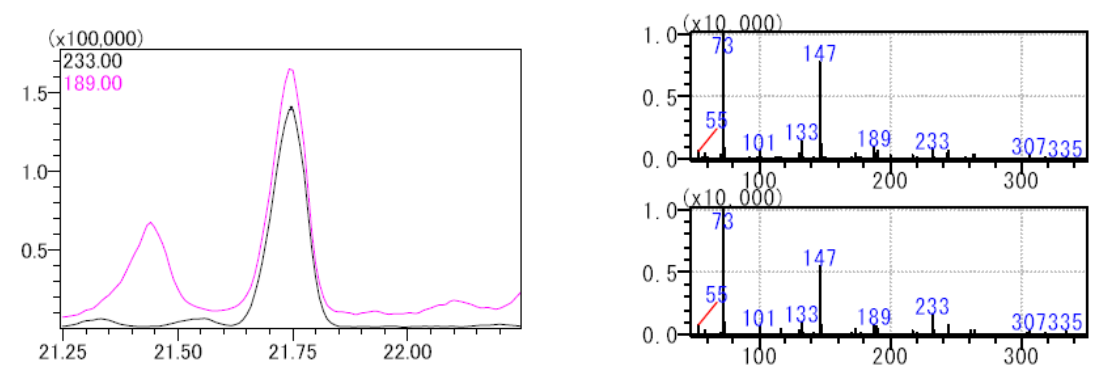


Fig. 3 Malic acid-3TMS(\*2)的扫描质谱图和质谱（上段：测定谱图、下段：谱库检索谱图）