

应用ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro进行靶向MRM筛查

Robert Lee, Michelle Wood

Waters Corporation

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

仅供研究使用，不适用于诊断。

摘要

本技术简报重点介绍了Xevo TQ-S micro运行预先配置的靶向MRM定性检测方法时信号响应更强的优势；分别使用Xevo TQ-S micro和Xevo TQD分析相同的样品，所得数据表明Xevo TQ-S micro检测到的真阳性结果数量有所改善。ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro是一款通用性极高的仪器，适用于临床研究，让用户使用同一个仪器平台即可完成覆盖范围极广的定性检测以及高分析灵敏度的定量检测。

优势

一种简单、灵敏的UPLC-MS/MS方法，适合在临床研究中靶向检测各种生物基质中的化合物。

简介

临床研究实验室需要采用可信赖的检测技术来检测死前和死后样本等高度复杂生物基质中的毒物。沃特世于2009年推出了采用ACQUITY TQD系统的临床研究靶向分析灵敏度应用解决方案¹。Rosano等人将该方法与其他

的死后血液样本筛查方法进行了比较²。该解决方案取得成功，沃特世于2013年将其拓展至ACQUITY UPLC I-Class和Xevo TQD系统³。而新发布的Xevo TQ-S micro有望进一步改进这套解决方案⁴。



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

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

实验

试验样品

使用以下商业化人尿液参比对照样品：Basis-line U，购自Medidrug (40201)；Blankcheck尿液样品(UR015)和DCT-25% (UR22020A)，均购自ACQ Science；Urine Toxicology Control DAU HC2 (50701)，购自UTAK；以及购自Bio-Rad的Liquichek尿液毒理学质控样品，包括Negative Control (460)、C2 (442)和S10 (673)。

样品前处理

用流动相A将商业化尿液参比对照样品稀释5倍并涡旋混合。样品离心后，将上清液转移至沃特世最大回收样品瓶中，进样分析三次。

液相色谱条件

系统:	配备FTN的ACQUITY UPLC I-Class
色谱柱:	ACQUITY UPLC HSS C ₁₈ , 100A, 1.8 μm, 2.1 mm x 150 mm (P/N 186003534)
柱温:	50 °C
样品温度:	10 °C
进样体积:	5 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

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:	采用已建立的MRM方法的预配置参数
碰撞能量:	采用已建立的MRM方法的预配置参数

结果与讨论

使用已建立的MRM方法采集数据。该方法可筛查178种化合物，每种化合物设置了两个通道（定性离子和定量离子），并提供锥孔电压和碰撞能量的相关预配置参数。使用上述方法分析三个阴性对照尿液样品（Basis-line U、Blankcheck和Negative Control）和四个分析物含量经过认证的阳性对照尿液样品（C2，S10，DAU HC2和DCT-25%）。使用TargetLynx定量应用软件自动处理数据，考虑到TQ-S micro的响应值更高，我们将峰面积阈值的拒绝参数略微提高了一些。将筛查结果与Xevo TQD平台得到的数据比较，评估其等效性。

两个平台都在阴性对照尿液样品中检测到若干种化合物，包括咖啡因以及与非处方药相关的其他物质，这些都是尿液筛查分析经常检出的物质。

分析经认证的阳性对照尿液样品时，两个平台都在S10对照尿液样品中检测到数量相同的预期化合物。Xevo TQ-S micro从C2和DAU HC2尿液样品中检出的分析物也与Xevo TQD相同，不过除此之外，它还在C2尿液样品中检测到 α -羟基阿普唑仑，并在DAU HC2尿液样品中检测到劳拉西泮。

Xevo TQ-S micro分析ACQ Science DCT-25%样品所得的结果证实，该系统对苯二氮卓类药物具有更高的分析灵敏度。图2详细展示了Xevo TQ-S micro额外检测到的五种苯二氮卓类药物。这种商业化参比对照尿液样品中所含的分析物浓度经过认证，相当于欧洲工作场所药物检测协会(EWDTS)目前推荐用于尿样确认检测的cut-off浓度值的25%⁵；此尿液样品中检测到的苯二氮卓类药物浓度为75 ng/mL。

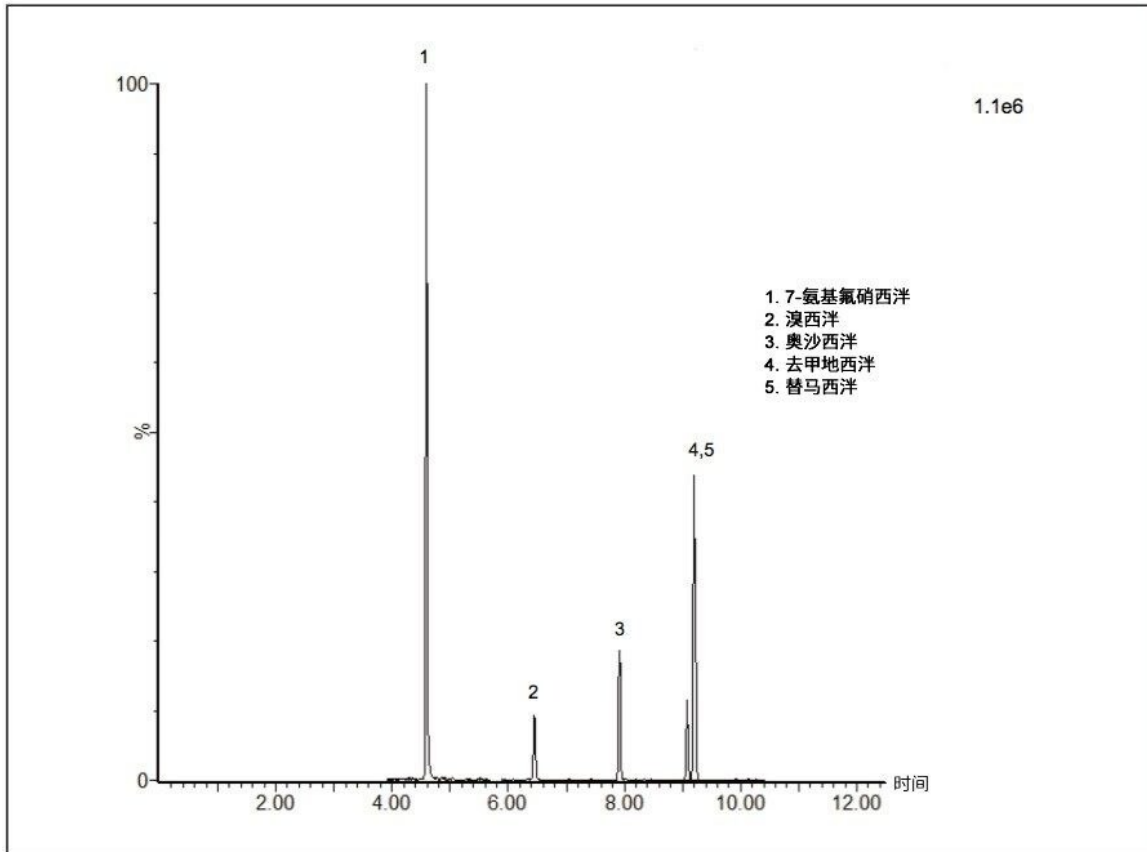


图2.使用Xevo TQ-S micro（而不是Xevo TQD）和已建立的靶向MRM方法分析商业化参比对照尿液样品ACQ DCT-25%时检测到的苯二氮卓类药物的色谱图。图中展示了定量离子对。

随着分析检测系统从ACQUITY TQD发展为ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQD，再发展为如今的ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro，每个功能通道的平均扫描次数逐渐增加；因为已建立的MRM方法驻留时间(10 ms)并没有改变，所以扫描次数的增加要归因于每款新MS平台在电子元件设计方面的改进。每个功能通道的扫描次数增加，使得分析精密度、重现性和灵敏度也随之提高。

参考资料

1. Roberts M, Lee R, and Wood M. Targeted MRM Screening for Toxicants in Biological Samples by UPLC-MS/MS.2009. Waters Application Note, 720002749EN.

2. 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.
3. Roberts M和Wood M. 使用ACQUITY I-Class/Xevo TQD系统进行法医毒理学筛查.013. 沃特世应用纪要, 720004602ZH.
4. Xevo TQ-S micro产品手册.2014沃特世营销手册, 720005046ZH.
5. European Workplace Drug Testing Society Guidelines. <http://www.ewdts.org> (accessed 11 Jan 2016).

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)

[TargetLynx <https://www.waters.com/513791>](https://www.waters.com/513791)

[ACQUITY UPLC色谱柱 <https://www.waters.com/513206>](https://www.waters.com/513206)

720005606ZH, 2023年3月修订



©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