

MRM毒理学筛查方法配合Waters Xevo TQ-S micro的运用扩展

Nayan S. Mistry, Jane Cooper, Michelle Wood

Waters Corporation

仅适用于法医毒理学应用。

摘要

本应用简报描述了毒理学相关分析物的标准质量多反应监测(MRM)筛查方法的更新。

优势

与Waters Xevo™ TQ-S micro质谱仪（图1）配合使用的正离子MRM靶向筛查方法得到增强，从而提高了对新型精神活性物质(NPS)和其他新药类别（包括兴奋剂）的覆盖范围，并扩展了该方法的适用性。



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

简介

多年来，串联质谱法因具有优异的分析灵敏度和选择性而广受欢迎，尤其是在MRM模式下使用时。MRM可用于定量分析以及靶向定性筛查。因此，多年来，沃特世的科学家们在MRM分析方面积累了丰富的经验，合力开发出大型、靶向数据库，以满足不同市场领域的需求。

法医毒理学实验室非常需要可以检测高度复杂的生物基质中多种毒物的广泛筛查技术，但是，分析人员通常没有自己开发方法所需的大量资源，因此可靠、易于执行的解决方案非常有用。沃特世近二十年来一直都在提供并支持易于执行的MRM毒理学筛查解决方案。这些解决方案已应用于沃特世的许多串联质谱仪，包括Xevo TQD和后来的TQ-S micro¹⁻³。这些解决方案包括优化的定量和定性离子对以及经过验证的专用色谱方法，可大幅提高正电离和负电离分析物的灵敏度。本文介绍了对常用Xevo TQ-S micro方法的进一步开发。

实验

材料

有证标准物质(CRM)购自默克公司（英国多塞特郡）。真实的无药尿液来自志愿者，收集后进行了合并。

供试品

用pH 3的5 mM甲酸铵（流动相 A）稀释，制备浓度为2000 ng/mL的CRM单标溶液，得到的溶液将用于调整和验证分析物保留时间。

数据采集

调整每种化合物定量和定性MRM离子对的锥孔电压(CV)和碰撞能量(CE)，确定理想参数。为了验证这些新的离子对并确定每种新化合物的保留时间(RT)，我们使用了法医毒理学筛查解决方案提供的色谱方法来采集数据⁴。Xevo TQ-S micro质谱仪采用了正离子电喷雾电离(ESI+)模式。

结果与讨论

在ESI+模式下单独优化了大约200种毒理学相关分析物。完成测试后，将定量和定性离子对以及相关的RT添加到MRM方法中。为便于使用，每个分析物的数据都添加到一个单独的函数中。

随后分析药物混合物以进一步验证该方法。将含有10种苯并咪唑类药物的供试品以500 ng/mL的浓度加入合并的空白尿样中，随后用流动相A稀释10倍，并在分析前涡旋混合。图2详细展示了Xevo TQ-S micro质谱仪检测到的10种苯并咪唑类药物。

MRM筛查方法的最新扩展有效地将以正电离模式电离的物质的分析物覆盖率提高了一倍。此开发成果提高了NPS和其他新药的总体覆盖率，例如策划药苯二氮卓类、致幻药色胺类、苯并咪唑类药物和芬太尼类似物，同时加入了 β 受体阻滞剂、利尿剂、类固醇和受体调节剂药物，将扩大对运动兴奋剂分析的适用性。

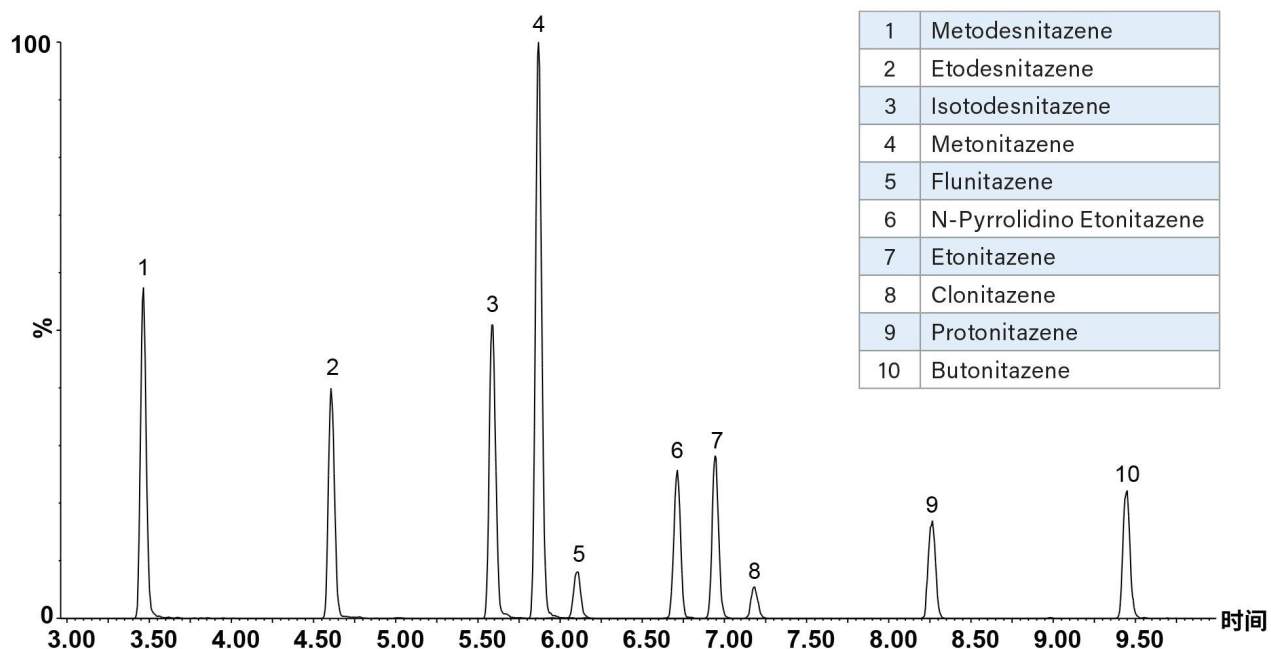


图2.使用提供的靶向MRM方法通过Xevo TQ-S micro检出的合并空白尿液中加标苯并咪唑的色谱图。展示了定量离子通道。

结论

本研究更新了与ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro质谱仪配合使用的MRM标准质量毒理学筛查方法。这些新的开发成果与现有的负电离分析物专用方法一起，现在为超过450种毒理学相关分析物提供了易于执行的方法。

新增功能提高了筛查众多“策划药”和NPS的能力。此更新中还加入了体能增强药物，运动兴奋剂研究实验室对此特别感兴趣。这种修订后的ESI+ MRM筛查方法旨在与ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro质谱仪一起即时使用，并且可以简单地替代以前的MRM方法，因为所有其他参数（MS方法、UPLC条件）保持不变。

参考资料

1. Lee R和Wood M. 应用ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQ-S micro进行靶向MRM筛查.沃特世应用纪要。
[720005606ZH](#).2016.
2. Roberts M和Wood M. 使用ACQUITY UPLC I-Class/Xevo TQD系统进行法医毒理学筛查.沃特世应用纪要。
[720004602ZH](#).2013.
3. Lee R和Wood M. 使用Xevo TQD或Xevo TQ-S micro在负离子电喷雾电离模式下进行法医毒理学靶向MRM筛查.沃特世应用纪要.[720006512ZH](#).2019.
4. 如需法医毒理学筛查解决方案媒体请访问<https://marketplace.waters.com/login?1698708110> <
<https://marketplace.waters.com/login?1698708110>> .

特色产品

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

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

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

MassLynx MS软件 <<https://www.waters.com/513662>>

TargetLynx <<https://www.waters.com/513791>>

720007748ZH, 2022年10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