

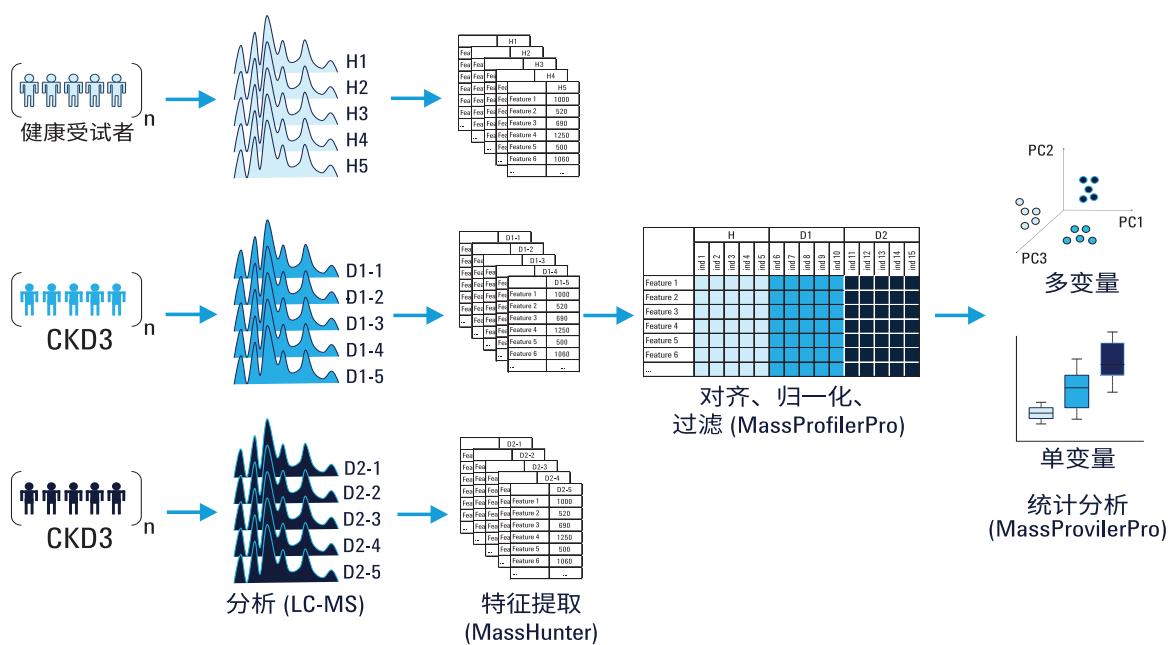
# 使用 AGILENT 6545 Q-TOF LC/MS 系统进行代谢组学研究

代谢组学可在研究人员未掌握任何基础生物学或病理生理学先验知识的情况下，帮助其同时对数千种可能的生物标记物进行检测。鉴于样品的复杂性，研究人员需要一款兼具优异的质量分辨率、质量精度、灵敏度和先进的数据分析的软件。Agilent 6545 Q-TOF LC/MS 系统和 Agilent MassHunter 软件正是满足以上所有要求的完美组合。

本应用采用 6545 LC/Q-TOF 系统和 1290 Infinity 液相色谱系统，对健康受试者以及 3 期和 5 期慢性肾病 (CKD) 患者的血清提取物分别进行了分析。采用全新 Swarm 群集自动调谐功能对质谱仪进行调谐，以在代谢物的  $m/z$  范围内达到最佳性能。分别采用正离子化和负离子化模式采集数据，同时进行参比质量校正。典型的代谢组学工作流程如下所示。

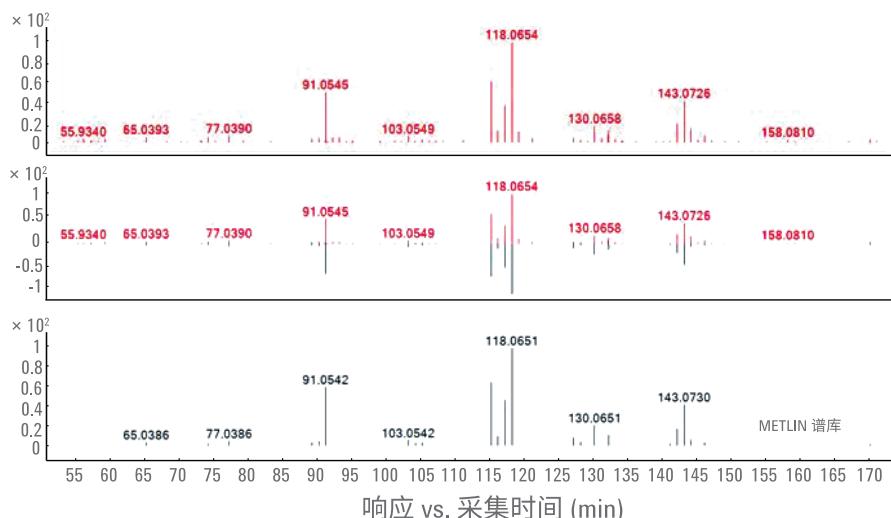
显著提高灵敏度有助于改善分析结果

6545 Q-TOF LC/MS 以更高灵敏度使研究人员能够提取 5817 个特征，而同样在正离子化模式下采用相同柱容量的上一代 Q-TOF 只能提取 2102 个特征。即使柱容量减少为 1/5，仍能提取 2489 个特征。

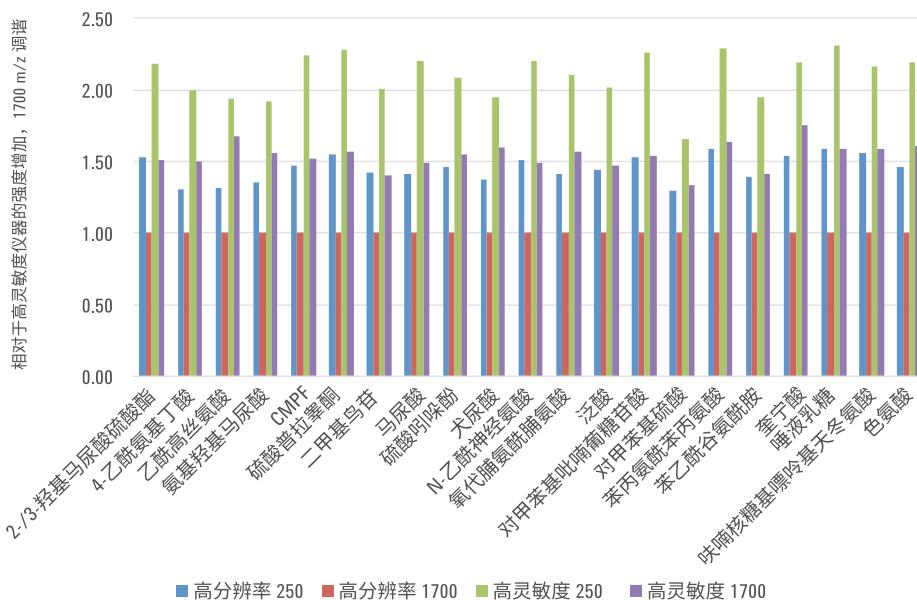


本应用中，所鉴定的生物标记物在正离子化模式下，灵敏度均有 2-7 倍不同程度的提高。某些化合物只能通过 6545 Q-TOF 进行检测。这些测量过程中的质量精度通常低于 1 ppm。

标记物发展	健康受试者			CKD3			CKD5		
	峰面积 (6545)	峰面积 (上一代 Q-TOF)	峰面积 (6545/上一代 Q-TOF)	峰面积 (6545)	峰面积 (上一代 Q-TOF)	峰面积 (6545/上一代 Q-TOF)	峰面积 (6545)	峰面积 (上一代 Q-TOF)	峰面积 (6545/上一代 Q-TOF)
色氨酸 ↓	31960076	12840877	2.49	27059409	11084681	2.44	10591592	5028854	2.11
呋喃核糖基嘌呤基天冬氨酸 ↑	102176	17157	5.96	221093	44063	5.02	1521394	282713	5.38
唾液乳糖 ↑	66575	0	∞	160999	31472	5.12	1083488	180847	5.99
奎宁酸 ↑	-	-	-	255901	120752	2.12	899575	385270	2.33
氧化脯氨酸酰脯氨酸 ↑	-	-	-	106715	16747	6.37	3721863	483834	7.69
N-苏氨酰氨基甲酰腺苷 ↑	72366	16027	4.52	176765	37413	4.72	1636856	274936	5.95
烟尿酸异烟尿酸 ↑	-	-	-	95482	0	∞	1570370	469079	3.35
犬尿酸 ↑	84257	19330	4.35	208262	48814	4.27	4252626	833638	5.10
谷氨酰苯丙氨酸 ↑	314998	87567	3.60	347270	76350	4.55	762331	170651	4.47
肉桂酰甘氨酸 ↑	296651	81692	3.63	448622	124378	3.61	983804	269980	3.64



利用谱库搜索功能或带 ChemSpider 功能的分子结构关联软件 (MSC)，6545 Q-TOF 可实现代谢标记物的灵敏检测，并可通过 MSMS 碎裂质谱实现结构确认。左图显示 CKD 进展抑制标记物色氨酸的鉴定结果。



增加离子传输（由 Swarm 群集自动调谐功能实现）和拓宽限幅器位置可提高分析物检测性能。

6545 Q-TOF 使用少量的宝贵生物样品即可完成代谢物的检测。

本文仅限研究使用。不可用于诊断目的。  
本文中的信息、说明和指标如有变更，  
恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2015  
2015 年 9 月 23 日，中国出版  
5991-5876CHCN

