

串联质谱

金成

质谱的基本概念

• 质谱是什么？

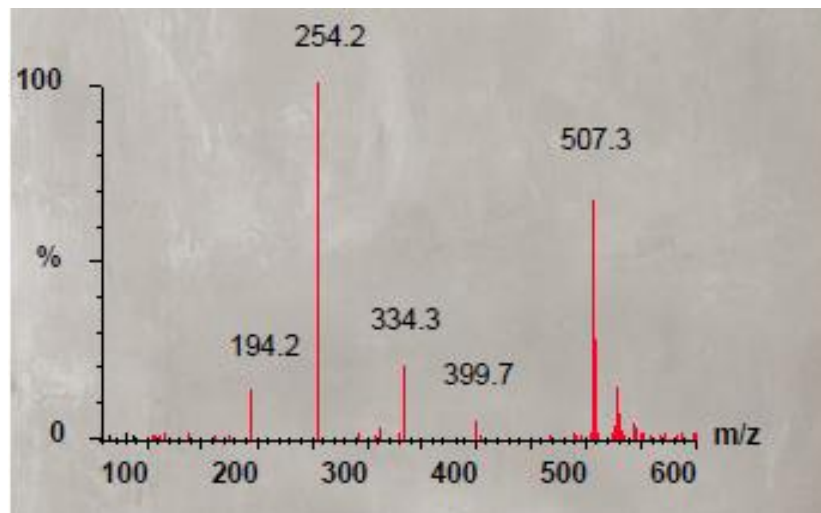
- 特殊的天平：称量离子的质量。
- 质谱学：是一门研究气相离子结构、性质及反应行为的科学。

• 质谱能做什么？

- 定性：化合物的结构
- 定量：混合物的组成
- 领域：化学、生物学、医学、药学、环境、物理、材料、能源等

• 质谱的独到之处是什么？

- Sensitivity 灵敏
- Speed 快速
- Specificity 特异

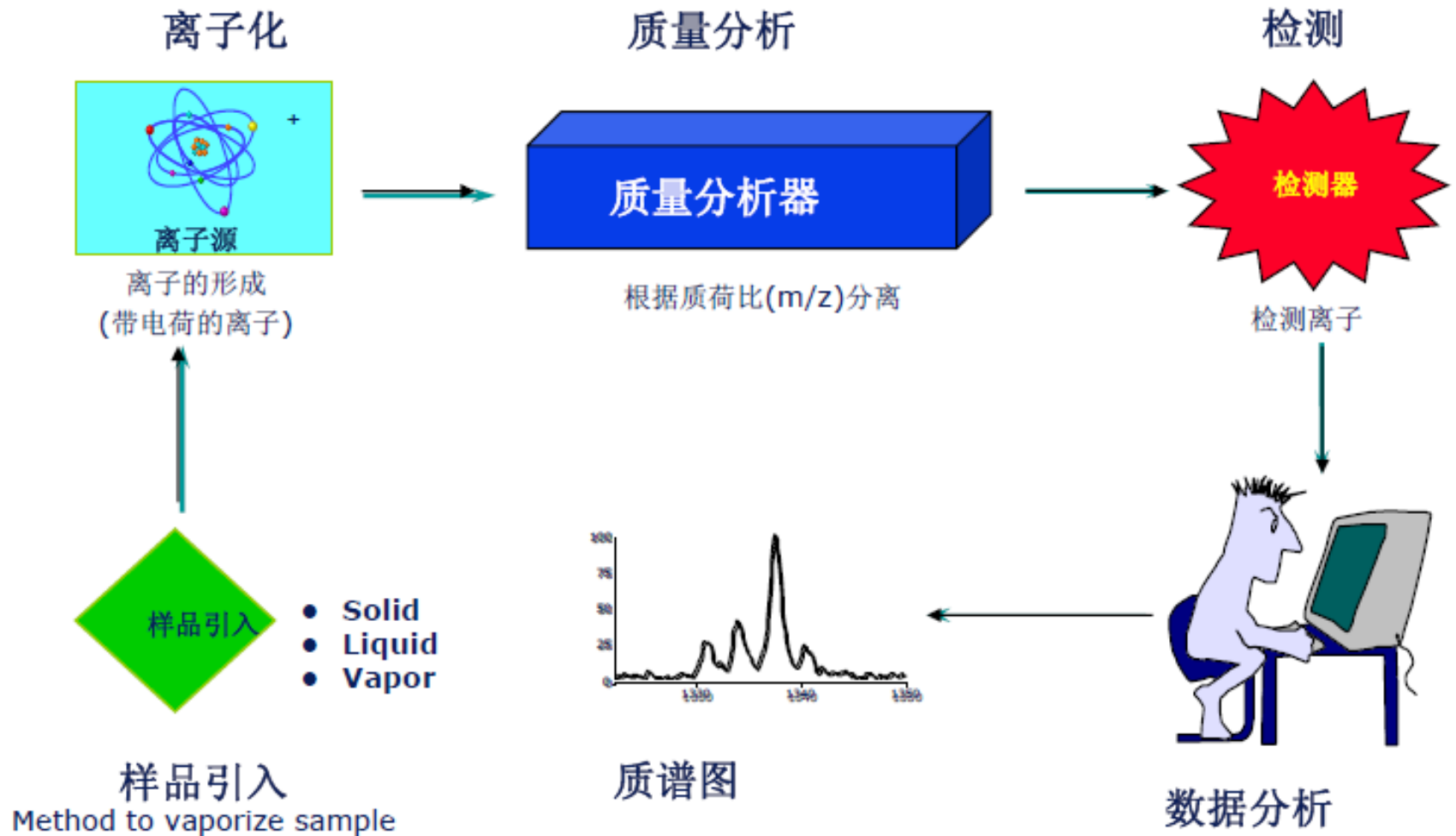


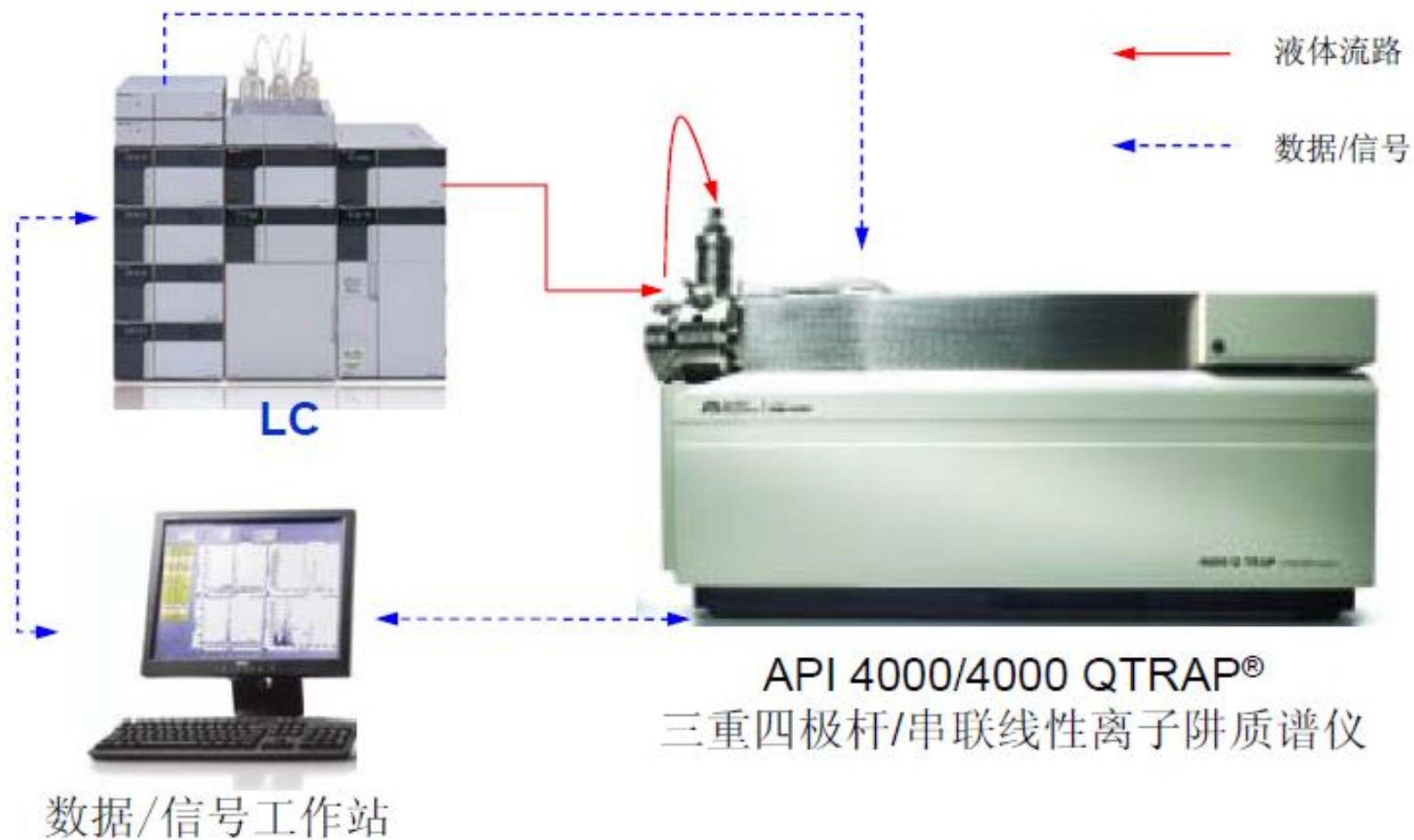
串联质谱法是指用质谱作质量分离的质谱方法。它还有几种名称，如质谱-质谱法，多级质谱法，二维质谱法和序贯质谱法。

质谱技术：

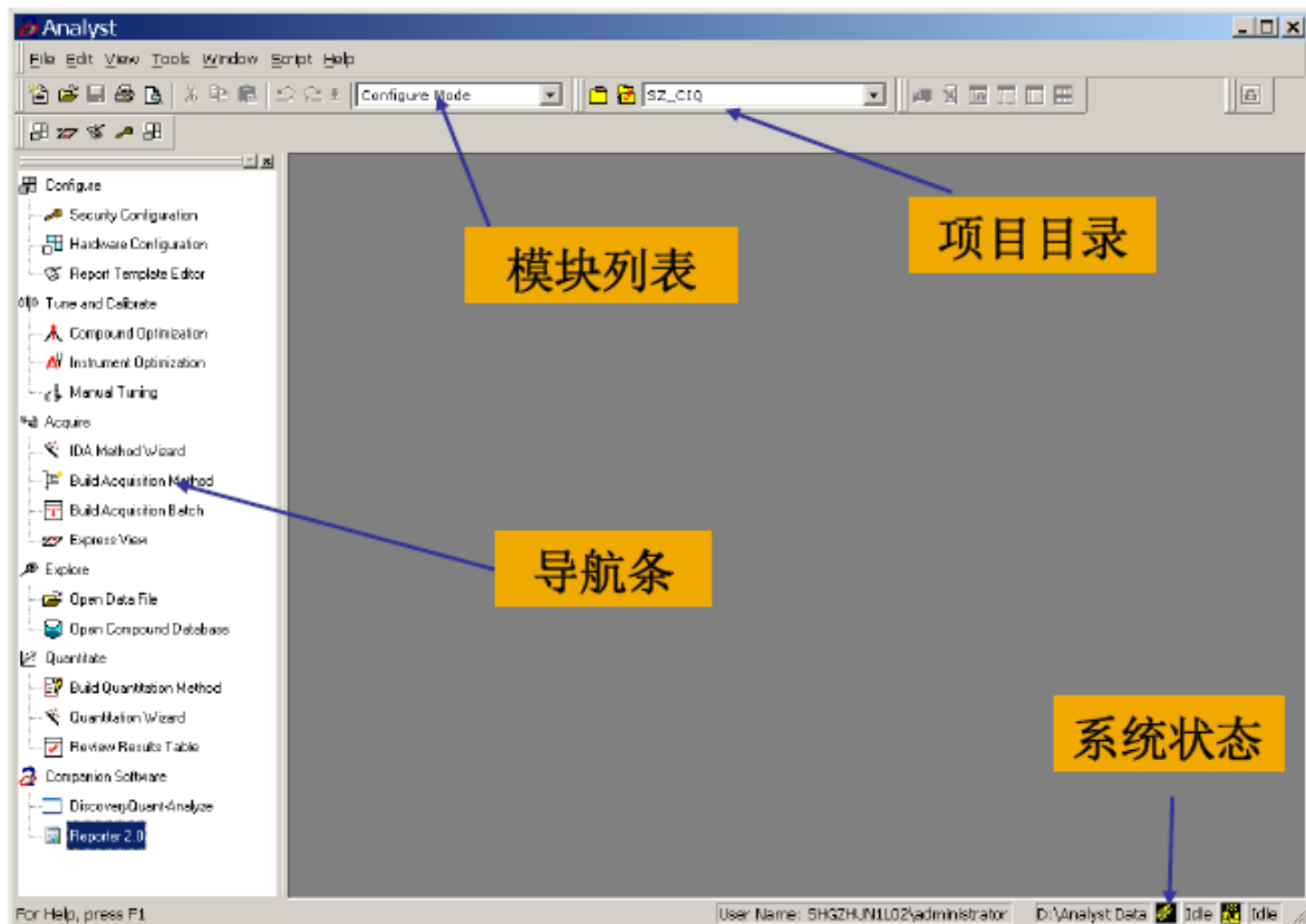
- 质谱分析过程：样品通过进样系统进入**离子源**，由于结构性质不同而电离为各种不同质荷比（ m/z ）的分子离子和碎片离子，而后，带有样品信息的离子碎片被加速进入**质量分析器**，不同的离子在质量分析器中被分离并按质荷比大小依次抵达**检测器**，经记录即得到按不同质荷比排列的离子质量谱，也就是质谱(mass spectrum)。
- 质谱：按离子的质荷比的大小依次排列形成的图谱

质谱是如何工作的





Analyst[®] 软件使用者界面



调谐模块- 质谱参数

MS | Advanced MS

Scan type: Product Ion (MS2)

Polarity: Positive Negative

Center / Width Parameter Range

Product Of: 376.100 (amu)

	Start (amu)	Stop (amu)	Time (sec)
1	100.000	800.000	1.5000
2			

MCA Total Scan Time (includes Pause): 1.5048 (sec)

Period

Duration: 0.251 (min) Cycles: 10 Delay Time: 0 (sec)

MRM (MRM)
Neutral Loss (NL)
Precursor Ion (Prec)
Product Ion (MS2)
Q1 MS (Q1)
Q1 Multiple Ions (Q1 MI)
Q3 MS (Q3)
Q3 Multiple Ions (Q3 MI)

Analyst® 软件文件类型

- 硬件文件 → *.hwpf
- 采集方法 → *.dam
- 数据文件 → *.wiff
- 采集批文件 → *.dab
- 定量结果表文件 → *.rdb
- 定量方法 → *.qmf
- 脚本 → *.dll or .aasf

串联质谱可以做什么？

一 测定未知物质

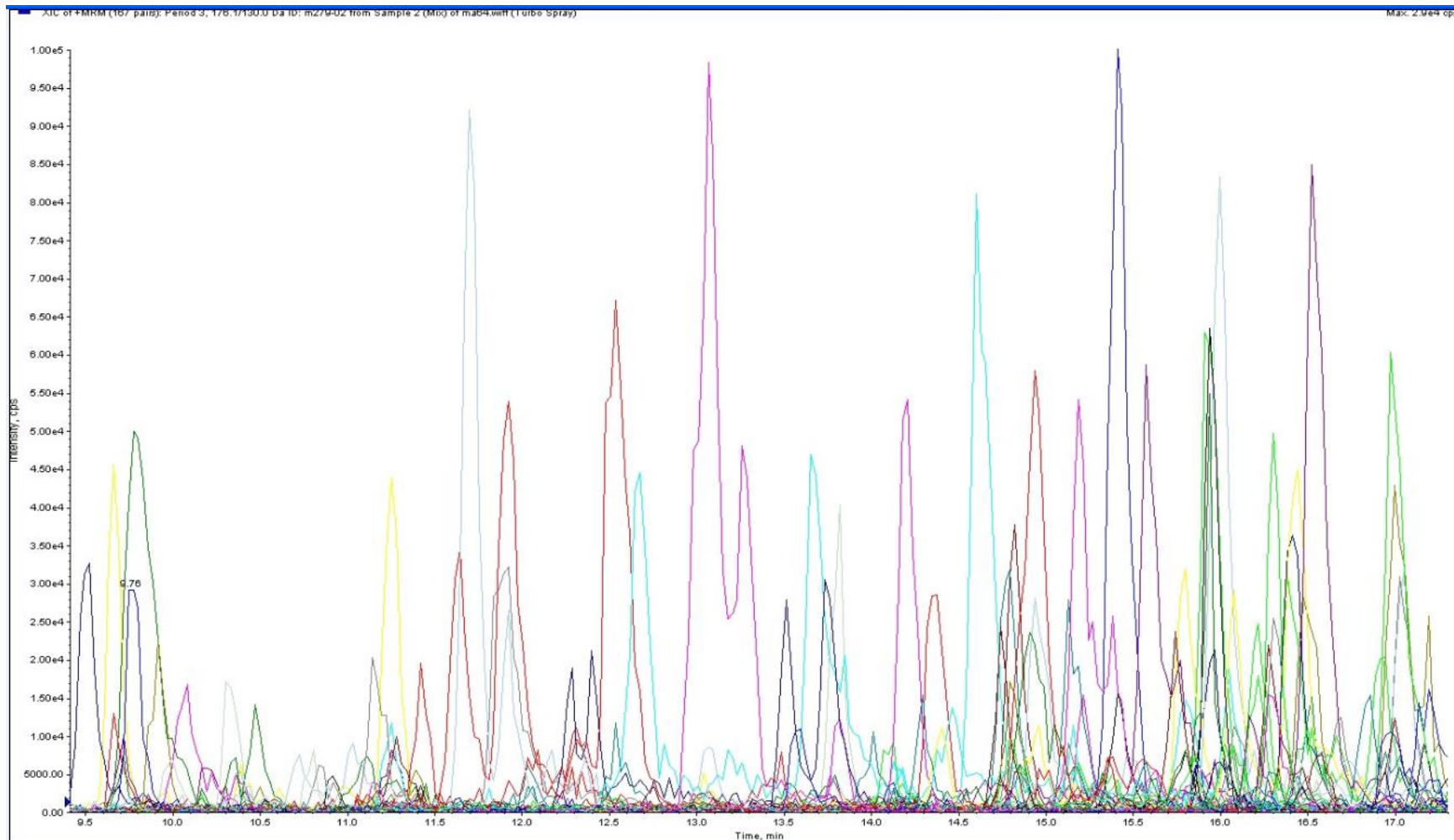
二 定性定量分析已有物质

测定未知物质

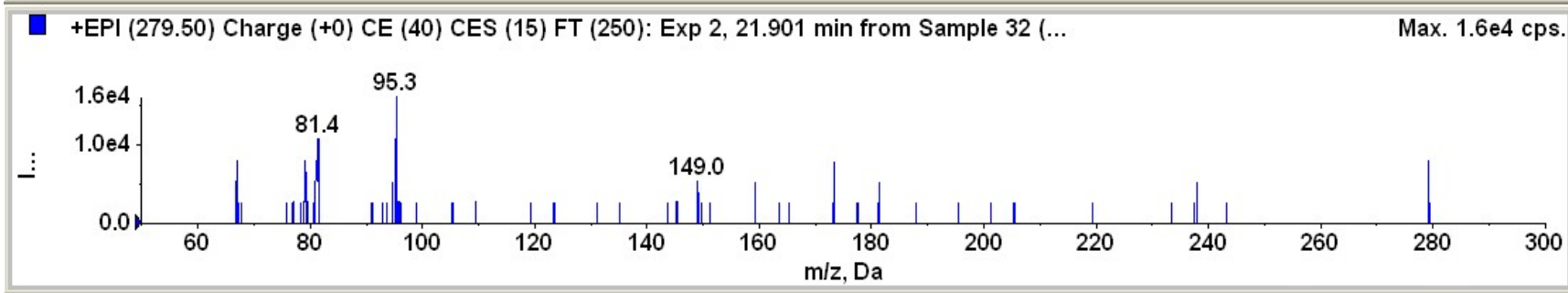
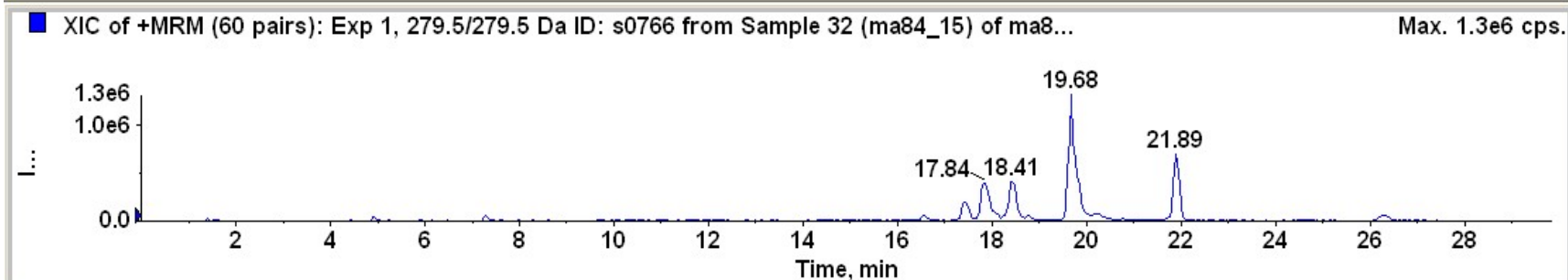
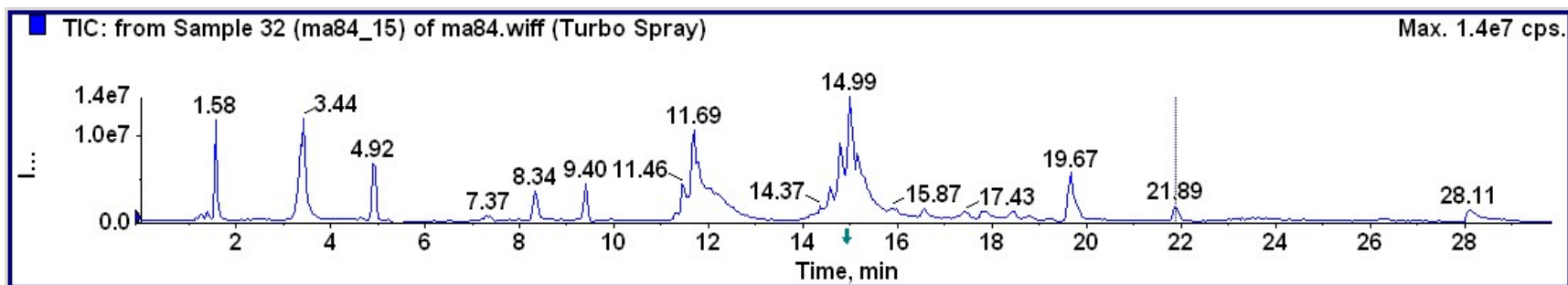
- 代谢组学是一种重要的功能基因组的工具，然而，代谢组学发展的瓶颈是对植物组织中复杂的次生代谢产物进行鉴别与分析（Raoul J. Bino, 2004），所以，对植物次生代谢产物建立一种快速可靠、高通量、高灵敏度的检测与分析方法是必须的（Oliver Fiehn, 2000），对细胞、组织或整个有机体内所有的次生代谢产物进行综合定性及定量分析是代谢组学发展的一个长远而又伟大的目标（Lloyd W. Sumner, 2003）

- 现有的技术中，**Oliver Fiehn**等利用**GC/MS**在拟南芥的叶子抽提物中同时检测到**326**种不同的次生代谢产物，并测定了近一半代谢产物的化学结构（**Oliver Fiehn, 2000**）；**Sofia Moco**等利用**LC/MS**在番茄的果肉和果皮中鉴别出大量的代谢产物，并且建立了番茄代谢数据库（**Sofia Moco, 2006**）；**Kazuki Saito**等利用**LC/MS/MS**在拟南芥的不同组织中检测到上千种峰图，其中大约一半有谱图（**Kazuki Saito, 2009**），但是，这上千种峰图却并不都是不同的物质，有相当一部分是重复的，其主要是**黄酮类**和**糖类物质**

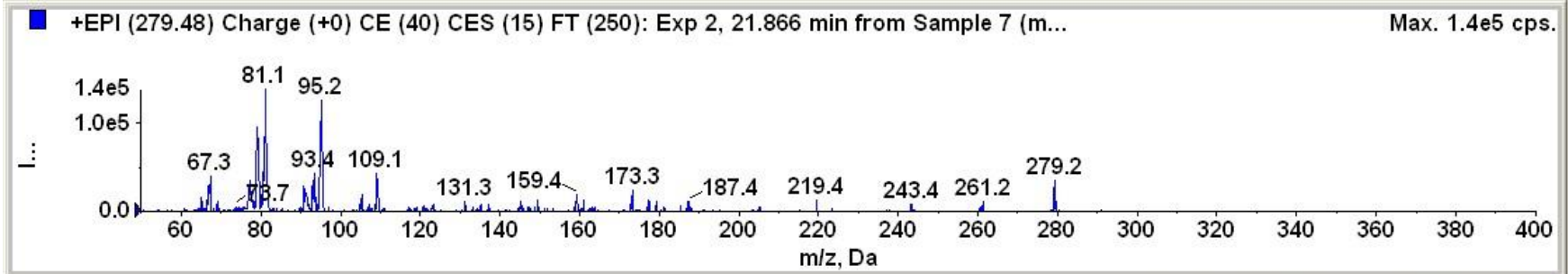
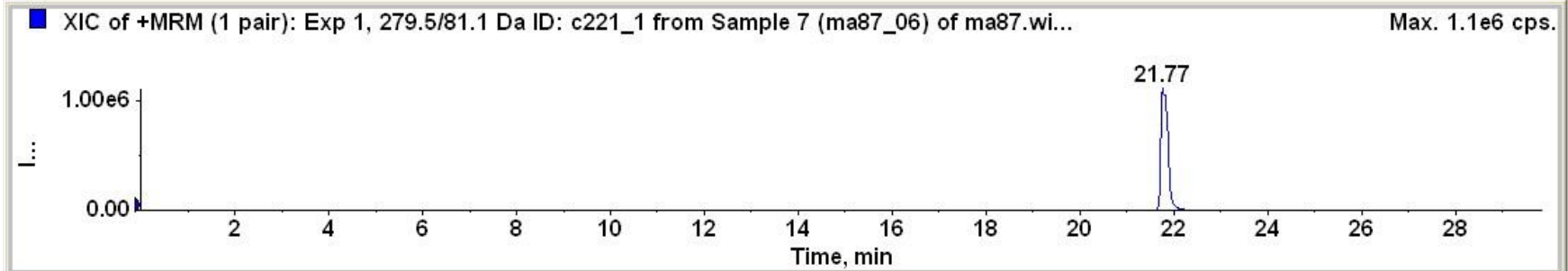
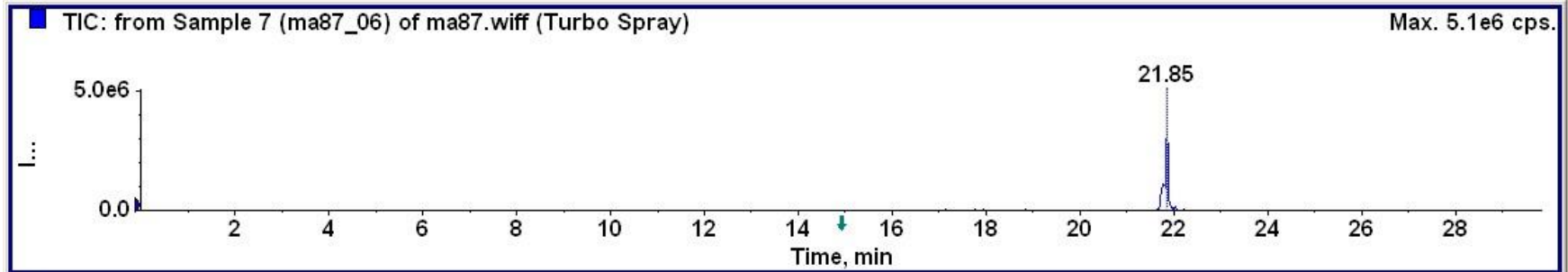
本实验室:O.sativa



定性定量分析



标样:2mg/ml

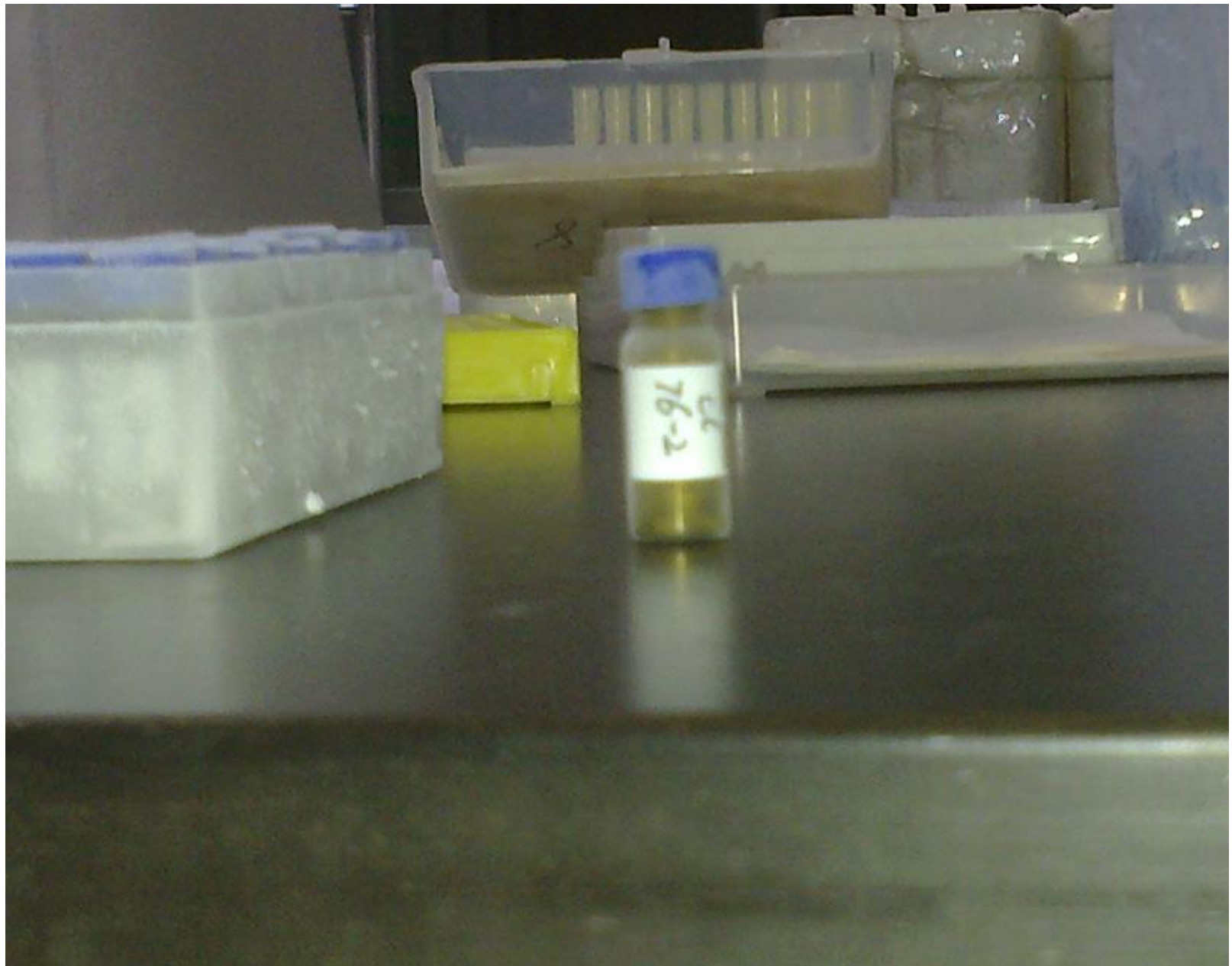


上样:

查阅文献

- 了解被分析物的基本信息，分子量、溶剂、分子极性等
- 了解被分析体系的色谱分析条件：等度/梯度分离、色谱柱与流动相类型等
- 了解化合物提取方法
- 溶剂包括水的纯度，最好色谱纯以上
- 新的色谱柱可能要先冲洗很长时间才能干净,某些样品非常容易吸附在进样阀和管路中，用溶剂清洗
- 质谱仪须校准，预热时间要足够长，气流的稳定也很重要，液N₂阀开度要注意，达到稳定程度











Thank you!

telephone:87280113