

利用Xevo™ MRT多反射超高分辨质谱进行人粪便样本代谢组学分析

张永明，曾玮 沃特世公司

Waters Corporation, United States

Published on September 01, 2025

摘要

本实验使用Xevo MRT MS进行人粪便样本代谢组学分析，使用数据依赖型采集模式（DDA）进行数据采集，其结果显示，该仪器能够提供超高的质谱分辨率，长期的系统稳定性；同时其高灵敏度、采集速度和质量精度，保证了MS/MS 覆盖率和化合物鉴定数量。

样品前处理

- 取粪便样品50 mg，加入500 µL预冷的80%乙腈，振荡15 min；12,000 rpm，4 °C下离心10 min；取上清液进行浓缩，使用100 µL纯甲醇复溶后，放入进样瓶中用于LC-MS分析。
- 质控混样：取待研究的每个生物样品的少量等分试样，将它们充分混合，然后定期进样。

产品特点

- Waters Xevo™ MRT MS采用多反射超高分辨率飞行时间（MRT）技术可在较宽的m/z 范围内提供始终如一的质谱分辨率和优异的质量精度，即使在100 Hz的扫描速率下分辨率结果也不会受到影响。
- Xevo MRT MS经过精心设计，将高端技术融入台式平台中，可帮助用户解决棘手难题。创新的采集系统配备双增益模数转换器，在高动态范围内亦可保持长期的系统稳定性，从而确保始终如一的优异数据质量、耐用性和重现性。
- 在Xevo MRT质量分析器内(见图1)，4 m飞行路径将发生总共8次反射，在高达100 Hz的扫描速率下，分辨率可达100,000 FWHM，实现出色的MS/MS性能。

LC-MS方法

液相色谱条件

液相系统:	ACQUITY™ Premier UPLC System
色谱柱:	ACQUITY UPLC HSS T3 (2.1 x 100 mm, 1.8 µm)
流动相A:	0.1% 甲酸水
流动相 B:	0.1% 甲酸乙腈
柱温:	40 °C
样品室温度:	10 °C
进样量:	1 µL

质谱条件

质谱系统:	Xevo MRT MS
-------	-------------

采集模式:	DDA, Top 15
动态排除设置:	acquire and then exclude for a duration of 4 s
采集范围:	m/z 50–1,200
MS采集速率:	10 Hz
MS/MS采集速率:	20 Hz
离子化模式:	ESI+
离子源温度:	120 °C
脱溶剂气温度:	550 °C
毛细管电压:	1.0 kV
锥口电压:	20 V
锥口气流速:	100 L/hour
脱溶剂气流速:	1,000 L/hour

数据处理软件

使用waters_connect™ 软件进行数据采集，在waters_connect 的MS Toolkit 应用程序中将数据进行可视化，并通过MARS组学软件（Mass-Analytica™）进行数据处理，使用人类代谢组数据库(HMDB)进行化合物鉴定。

实验结果谱图展示

1. 样品基峰色谱图(BPI)图展示，见图2：为单针人粪便样本对应的BPI图，色谱分离度良好。

2. 特定离子的质谱图和色谱图展示，见图3：其中以利血平正离子 m/z 609.2807@6.66 min为例，其质谱分辨率在8万以上；同时该离子色谱峰宽 9 s，可以采集到10个点，满足相对定量的要求。

3. 样品MS/MS谱图展示，见图4：Xevo MRT MS的高灵敏度和采集速度，可以提供足够多高质量的MS/ MS谱图，用于后续的鉴定；如下图所示，样品在约0.01 min的时间窗口内(5.621-5.630 min, 6.639-6.650 min)可以采集到10张MS/MS谱图，单针30 min的检测时长，可以采集到20,000+的MS/MS谱图。

4. 质控混样叠加图展示，见图5：样品，空白及质控混样共200针，每针30 min检测时长，连续跑样100小时，其中每隔15针插入一针混样用于质控，如下所示，所有混样谱图叠加良好，表明仪器具有很强的稳定性和抗污染能力，适用于大队列组学研究。

MARS数据分析

1. 峰提取结果查看，见图6：使用MARS组学软件进行数据处理，共提取到72,970个特征离子，其中39,841 个特征离子得到MS/MS，MS/MS覆盖率达到50%以上。

2. 数据过滤及化合物鉴定，见图7：可以选择对上述数据进行过滤（MS/MS过滤，QC过滤，空白过滤，RT 过滤等），最终可得到6,077个特征离子；使用HMDB数据库进行鉴定（包含217,753个化合物，50,412张MS/MS谱图），最终有3,380个化合物可得到鉴定结果；其中以离子 m/z 176.0707@5.65 min为例，鉴定结果为吡哆乙酸，它常被视为肠道菌群代谢活性的特征代谢物之一，其质量偏差为 500 ppb。

实验结论

本实验采用ACQUITY Premier UPLC-Xevo MRT MS进行DDA模式采集，结合代谢组学软件对人粪便样本进行代谢组学分析：

- Xevo MRT MS采用多反射超高分辨率飞行时间（MRT）技术可在较宽的m/z范围内提供始终如一的质谱分辨率：以离子m/z 609.2807@6.66为例，其分辨率在8万以上；
- 创新的采集系统配备双增益模数转换器，使其在高动态范围内亦可保持长期的系统稳定性：样品、空白及混样共200针，每针30min检测时长，连续跑样100小时，其中每隔15针插入一针混样用于质控，质控混样谱图叠加良好；
- Xevo MRT MS的高灵敏度、采集速度和质量精度，保证了MS/MS覆盖率和化合物鉴定数量：单针30 min的检测时长，可以采集到20,000+MS/MS谱图；所有样品共提取到72,970个特征离子，其中39,841个特征离子得到MS/MS，MS/MS覆盖率达到50%以上；对数据进行过滤，可得到6,077个化合物，使用HMDB数据库进行搜库，最终有3,380个化合物可得到鉴定结果。

参考文献

1. MARS: A Multipurpose Software for Untargeted LC-MS-Based Metabolomics and Exposomics.” *Analytical Chemistry* 96.4(2024):1468-1477.
2. Goracci, Laura , *et al.* “Lipostar, a Comprehensive Platform-Neutral Cheminformatics Tool for Lipidomics.” *Analytical Chemistry* (2017):acs.analchem.7b01259.
3. Gall, Le , *et al.* “Metabolomics of fecal extracts detects altered metabolic activity of gut microbiota in ulcerative colitis and irritable bowel syndrome.”

特色产品

ACQUITY Premier System <

<https://www.waters.com/nextgen/global/products/chromatography/chromatography-systems/acquity-premier-system.html>>

Xevo MRT Mass Spectrometer <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass->

[spectrometry/mass-spectrometry-systems/xevo-mrt.html](https://www.waters.com/mass-spectrometry-systems/xevo-mrt.html)>

[waters_connect Informatics <https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/waters_connect.html>](https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/waters_connect.html)

720008916ZH, 2025年6月



© 2025 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私声明](#) [商标](#) [招聘](#) [法律和隐私声明](#) [危险化学品经营许可证](#) [Cookie](#) [Cookie设置](#)
[沪ICP备06003546号-2](#) [京公网安备 31011502007476号](#)