

# 基于SCIEX QTOF高分辨质谱系统对不同品牌纯生啤酒的品质差异化研究

## Detection Scheme of Quality Differentiation of Pure Draft Beer Based on SCIEX QTOF System

程龙<sup>1</sup>, 杨总<sup>1</sup>, 赵福雄<sup>2</sup>, 周天<sup>2</sup>, 刘政杰<sup>2</sup>, 吴闻<sup>2</sup>, 刘冰洁<sup>1</sup>, 郭立海<sup>1</sup>

Cheng Long<sup>1</sup>, Yang Zong<sup>1</sup>, Zhao FuXiong<sup>2</sup>, Zhou Tian<sup>2</sup>, Liu Zhengjie<sup>2</sup>, Wu Wen<sup>2</sup>, Liu Bingjie<sup>1</sup>, Guo Lihai<sup>1</sup>  
SCIEX China<sup>1</sup>; PALL China<sup>2</sup>

**关键词:** 高分辨质谱; QTOF; 啤酒; 组学

**Key words:** HRMS; QTOF; Beer; omics

### 引言

啤酒是作为全球第三大饮料, 被称为“液体面包”, 因其丰富的营养和独特的口感备受喜爱。在琳琅满目的啤酒种类中, 纯生啤酒以其口感纯正、颜色清亮、泡沫细腻、低酒精度、高营养价值, 而深受消费者的青睐。如今, 纯生啤酒已成为高品质啤酒的代名词, 其市场潜力巨大, 是众多啤酒品牌产品重要销售来源。然而, 随着人们生活水平的不断提高和啤酒行业的快速发展, 纯生啤酒市场出现了同质化严重、行业竞争愈发激烈的困境。了解啤酒的成分可以帮助我们更好地欣赏和品尝啤酒, 针对啤酒营养成分和品质进行差异化分析, 也成为目前啤酒研究的热点之一。

本试验选用纯生啤酒作为试验对象, 使用SCIEX QTOF系统对三个不同品牌的纯生啤酒进行成分分析并寻找其成分的差异, 对于啤酒品质的差异化的研究具有重要的参考意义。

### 本方案具有如下特点:

1. SCIEX QTOF高分辨质谱系统具有超快的扫描速度(100Hz), 同时兼顾分辨率、灵敏度、准确度, 可以实现一针进样, 采集到啤酒样本中尽可能多的一级和二级质谱信息, 结合动态背景扣除技术(DBS)功能, 保证了数据的完整性和有效性;

2. 仪器具有优异的稳定性, 本次实验连续进样采集了36个啤酒样品, 连续跑样超过72小时。质控样本QC重复性好, 仪器具有超强的抗基质干扰能力和优异的稳定性;
3. 结合OS软件以及丰富的天然产物数据库、网络数据ChemSpider等, 快速鉴定啤酒中的成分; 专业的组学软件MarkerView™能够快速实现主成分(PCA)以及T检验等统计分析, 帮助实验人员快速找到不同组分的差异化合物;
4. 该实验鉴定到啤酒中的304种营养成分, 包含了主要包括有糖类、有机酸类、氨基酸类、小分子肽类、嘌呤核苷类、黄酮类、生物胺类、酚类、酯类、醇类、醛类等, 结果表明三种不同品牌纯生啤酒具有显著性差异, 对啤酒品质的研究具有重要的参考意义;

### 实验方法

#### 1. 色谱条件

- a) 色谱柱: Kinetex C18 100 × 2.1 mm 1.8 μm, 或性能相当者。
- b) 流动相: 正、负模式  
A: 水(0.05%甲酸水溶液+5 mM甲酸铵), B: 乙腈(0.05%甲酸水溶液+5 mM甲酸铵)
- c) 流速: 300 μL/min
- d) 柱温: 40°C
- e) 洗脱程序: 梯度洗脱

## 2. 质谱方法

扫描方式: TOF-IDA-MS/MS

TOF MS:  $m/z$  80-1000

TOF MS/MS:  $m/z$  50-1000

TOF MS was followed by 15 product ions scan

Dynamic background subtraction on (DBS on)

扫描模式: 详细质谱条件见表1

表1. 质谱条件

质谱条件	参数
电喷雾电离 (ESI)	正/负
气帘气CUR (psi)	35
碰撞气CAD (psi)	9
喷雾电压IS (V)	5500/-4500
温度TEM (°C)	550
雾化气GS1 (psi)	50
辅助雾化气GS2 (psi)	55

## 3. 快速样品前处理

取成品啤酒5 mL, 在5 000 rpm条件下离心10 min, 转入样品瓶, 待LC-MS/MS上机测定。

## 结果与讨论

本次实验总共运行了72个样品 (正离子36个, 负离子36个); 每个样本各取一定量进行混合, 制成 QC 样品。在进样过程中, 每相隔5个样本, 运行一个 QC 样品。全部QC样品的TIC图重合, 取样本中不同时间段的分子量有差异的离子比较重复性差异 (见图1)。尽管仪器采集样品时间长, 四个不同保留时间的不同质荷比的离子可以重合, 表明仪器的具有超强的抗基质干扰能力和优异的稳定性, 保证了整批数据的可靠性。

SCIEX QTOF具有超快的扫描速度, 一针进样同时获得高分辨的一级和高分辨的二级质谱图; 扫描1张一级谱图和15张二级谱图仅需0.015 min, 且在超快的扫描速度下依然可以采集到12个点以上, 保证了定量的准确性, 并且不管一级质谱图还是二级质谱图均保持高分辨、高灵敏度(图2)。

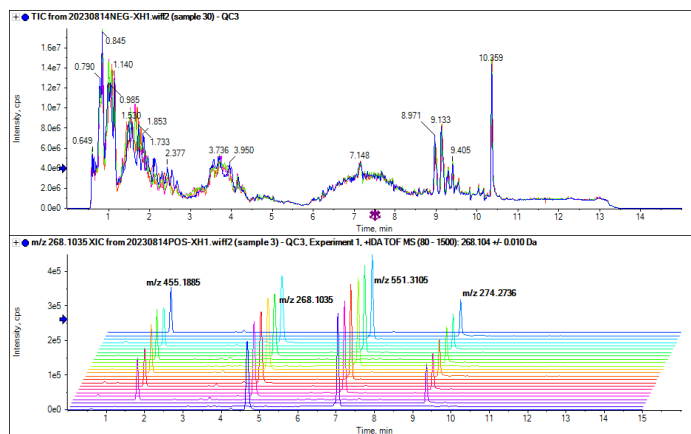


图1. QC样品的重复性考察

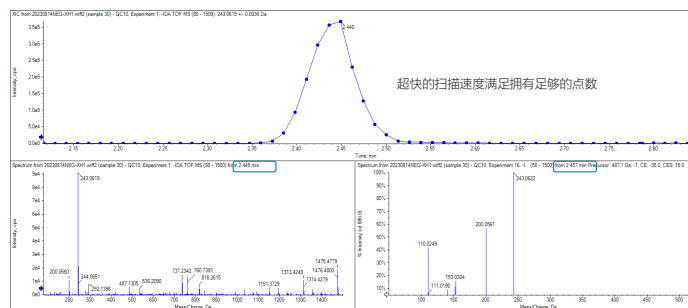


图2. 在超快的扫描速度下, 兼顾分辨率、高灵敏度、高准确度

通过 DBS 功能可以很好的去除背景离子的干扰, 保证了整个色谱梯度采集到的二级质谱图有效和高质量; 如图3所示, 质荷比149虽然响应值很高, 但是提取离子色谱图没有明显的色谱峰, 因此不会打二级质谱图; 然而对于有些丰度较低的化合物, 只要提取有明显的色谱峰, 通过DBS功能依然可以采集高质量的二级质谱图, 为化合物鉴定提供了很好的手段(图3)。

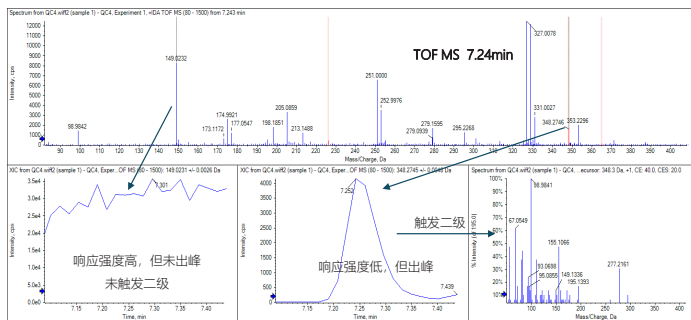


图3. DBS功能示例

结合SCIEX高分辨天然产物及代谢物库等对成分进行快速鉴定，以啤酒中特有麦芽多糖为例，m/z 827.267，保留时间在0.624 min，一级质量误差1.0 ppm，与库匹配得分99.5分，通过“一级误差、同位素峰匹配、二级谱库的匹配”三关锁定简单高效的完成化合物的鉴定。

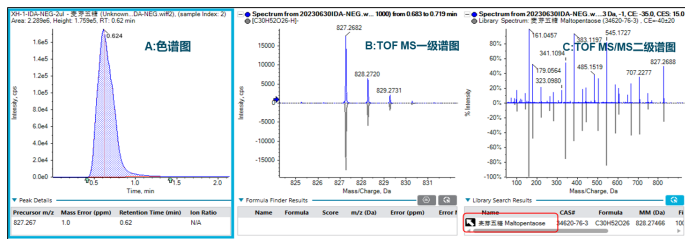


图4. 靶向鉴定结果展示

啤酒中鉴定出304种营养成分，包含了主要包括有糖类、有机酸类、氨基酸类、小分子肽类、嘌呤核苷类、黄酮类、生物胺类、酚类、酯类，醇类，醛类等。三种不同品牌纯生啤酒中营养物质种类基本一致，但不同种类化合物所占比例存在区别。使用MarkerView™软件进行数据的导入和PCA分析，t检验等统计分析(图5, 6)，热图展示如下(图7)。

## 总结

1. 基于SCIEX高分辨质谱系统对三种不同品牌纯生啤酒的成分进行分析，结合SCIEX高分辨天然产物及代谢物库等对成分进行快速鉴定，共发现304种营养成分，包含了主要包括有糖类、有机酸类、氨基酸类、小分子肽类、嘌呤核苷类、黄酮类、生物胺类、酚类、酯类，醇类，醛类等，结果表明不同品牌纯生啤酒的营养成分具有显著性差异，对啤酒品质的研究具有重要的参考意义。
2. SCIEX高分辨质谱系统拥有优异的性能，结合动态背景扣除(DBS)功能和超快的扫描速度(100Hz)，同时兼顾高分辨、高灵敏、高准确度，在啤酒样本基质复杂，共流出物多的情况下，一针进样，就可以同时采集到高分辨一级和高分辨二级的完整数据。QC样品化合物重现性RSD值均在5%以内，完全满足组学研究中数据的要求。

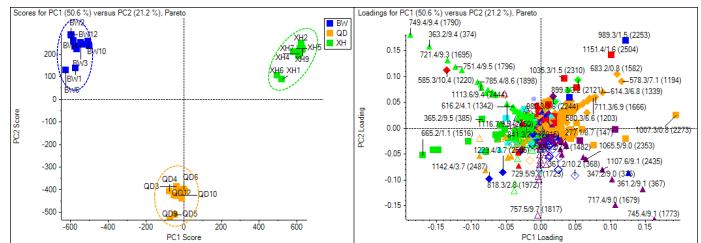


图5. 三种不同品牌纯生啤酒主成分分析及载荷图

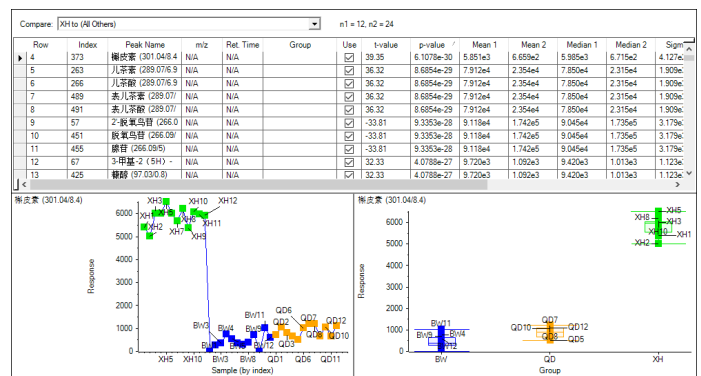


图6. 三种不同品牌纯生啤酒t检验数据处理结果

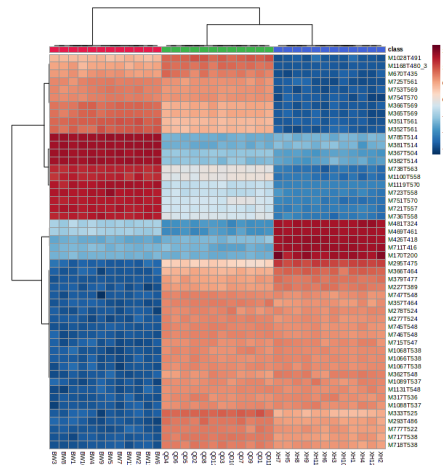


图7. 三种不同品牌纯生啤酒差异化合物热图

3. SCIEX OS软件简单易用性，兼顾MarkerView™强大组学分析能力，通过PCA和t-test分析，帮助快速发现差异化合物，确定差异标志物。整体过程快速简单，大大节省操作者的分析时间。SCIEX高分辨质谱系统为啤酒品质差异化研究提供全面的解决方案。

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息，请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标，也包括相关的标识、标志的所有权，归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-15751-ZH-A



#### SCIEX中国

北京分公司  
北京市朝阳区酒仙桥中路24号院  
1号楼5层  
电话：010-5808-1388  
传真：010-5808-1390  
全国咨询电话：800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心  
上海市长宁区福泉北路518号  
1座502室  
电话：021-2419-7201  
传真：021-2419-7333  
官网：[sciex.com.cn](http://sciex.com.cn)

广州办公室  
广州国际生物岛星岛环北路1号  
B2栋501、502单元  
电话：020-8842-4017

官方微信：[SCIEX-China](#)