

SCIEX高分辨质谱联合MExplorer Ultimate 赋能食品风味、品质鉴别与营养健康代谢组学研究应用案例集

Collection of Application Cases: SCIEX High-Resolution Mass Spectrometry and MExplorer Ultimate Empowering Food Flavor, Quality Authentication, and Nutritional Health Metabolomics Research

满卓¹, 司丹丹¹, 陈爱明², 傅川碧²
Zhuo Man¹, Dandan Si¹, Aiming Chen², Chuanbi Fu²

¹ SCIEX 应用支持中心, 中国; ² 大连达硕

Key words: MExplorer Ultimate; Metabolomics; ZenoTOF

背景

本应用案例聚焦食品科学（牛肉风味调控）、酒类品质监管（酱香型白酒掺杂鉴别）与营养健康（中枢疲劳干预）三大核心领域，针对行业内关键技术痛点提供解决方案：牛肉风味形成的脂质前体机制不明确，制约产品风味定向优化；酱香型白酒掺杂鉴别缺乏精准高效技术，影响市场规范发展；中枢疲劳的微生物-肠-脑轴调控机制尚未阐明，亟须有效的营养干预方案。这些难题直接关乎产品品质提升、市场秩序维护与公众健康保障，亟须先进的分析技术与工具提供支撑。

高分辨代谢组学作为精准解析复杂体系化学成分的核心技术，能够全面捕获样本中代谢物的动态变化，精准鉴定关键标志物，为揭示物质转化机制、建立品质鉴别模型、阐明营养干预路径提供核心数据支撑。通过与高分辨质谱技术结合，该技术可突破传统分析方法定性不准、覆盖度低、效率低下的局限，实现从成分鉴定到功能解析的全链条分析，为多领域研究提供深度科学依据。

SCIEX旗下X500R QTOF、TripleTOF 6600+、ZenoTOF 7600/7600+等高分辨质谱仪器，凭借高灵敏度、高分辨率、高稳定性的性能优势，为代谢组学研究提供高质量原始数据。



MExplorer Ultimate（ME软件网址：www.chemdatasolution.com；邮箱：contact@chemdatasolution.com）作为大连达硕与SCIEX联合研发的一站式代谢组学数据分析平台，核心亮点突出：一站式全流程分析覆盖从数据导入到报告生成完整环节；实时数据质控保障数据可靠性；超大规模定性依托100万+二级质谱库实现精准广泛鉴定；智能化差异分析一键完成筛选与解析；兼容SCIEX全系列质谱并支持多工具对接，大幅降低分析门槛，高效解决科研核心痛点。

案例一 基于脂质组学解析牛肉关键香气形成的脂质前体机制

1. 研究背景

牛肉风味是产品市场竞争力的核心，脂质作为香气前体物质，其种类、含量及热加工变化直接影响香气生成。不同品种牛肉脂质组成差异、热加工对脂质的调控作用，以及关键脂质与香气化合物的关联机制尚未明确，制约风味品质定向优化，亟须精准脂质组学技术揭示内在规律。



2. 仪器与实验样本信息

仪器：SCIEX 6600 quadrupole time-of-flight mass spectrometer 等仪器

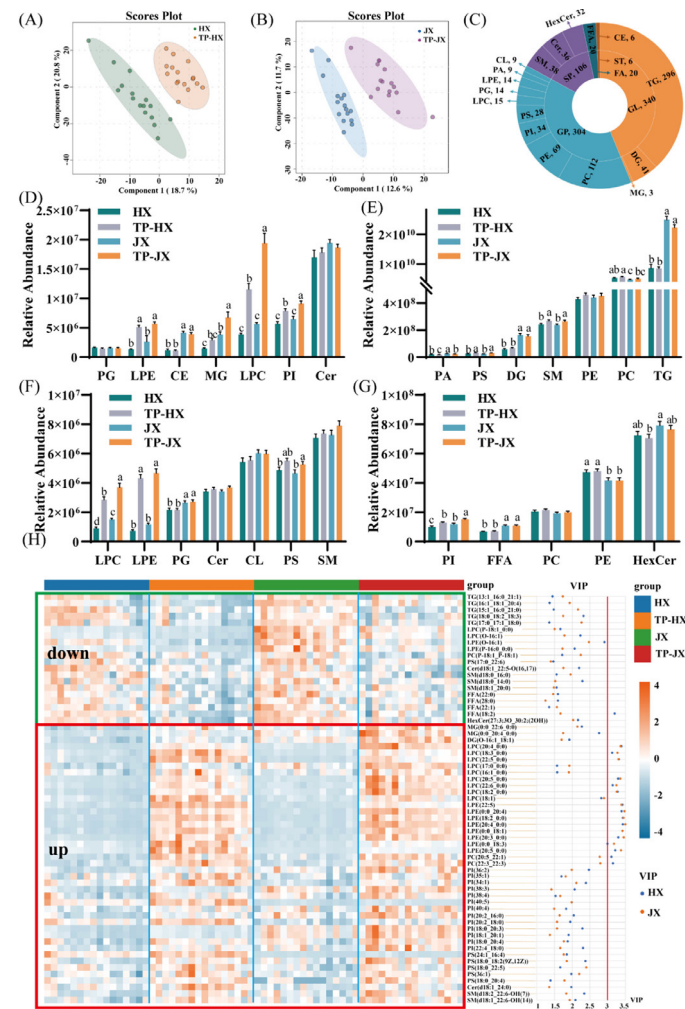


图3. 差异脂质表达热图

样本：华西牛和郑县红牛的背最长肌样本，每组 16 个样本，分别进行未加热和 100°C 加热 30 分钟处理。

3. 实验方法

通过绝对定量脂质组学与游离脂肪酸衍生化分析，并与关键香气化合物结合分析，表征两种牛肉脂质组成及热加工后的转化变化；通过 PLS-DA、Pearson 相关性分析构建脂肪酸热氧化模型，探究关键脂质与香气化合物关联机制。所有质谱数据的峰检测、对齐、定性定量及差异分析均通过 ME 软件完成全流程处理。

4. 研究结果

(1) 脂质定量：绝对定量获得 265 种脂质分子，涵盖 11 类亚类，郑县红牛甘油三酯和游离脂肪酸含量更高。

(2) 脂质变化：热加工后甘油三酯、游离脂肪酸含量下降，溶血磷脂酰胆碱等升高，不饱和脂肪酸显著降低。

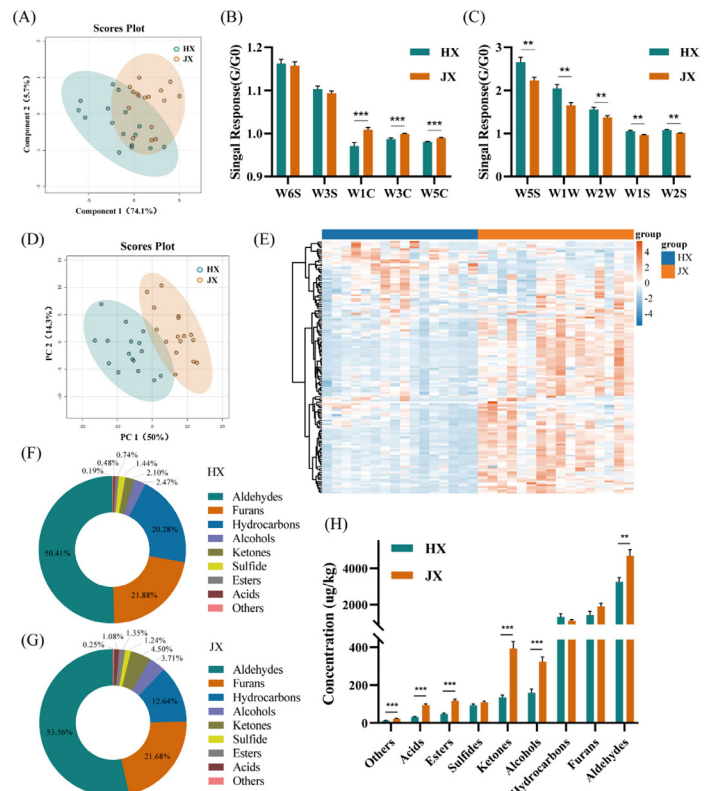


图2. 主要脂质亚类含量差异柱状图

(3) 关联分析: TG(16:0-18:1-18:1) 等脂质分子与关键香气化合物呈显著正相关, 为核心前体物质。

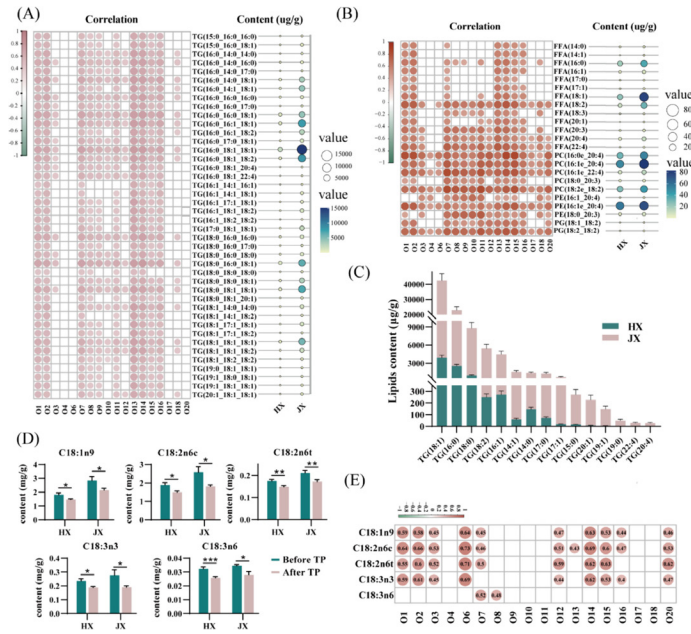


图4. 脂质与香气化合物关联热图及散点图

5. 结论与展望

本研究明确不饱和脂肪酸链修饰的甘油三酯、磷脂酰胆碱、磷脂酰乙醇胺是牛肉关键香气核心脂质前体, 溶血磷脂酰胆碱和溶血磷脂酰乙醇胺可能参与香气保留, 为牛肉品质改良与风味调控提供理论依据。未来可基于 ME 的拟靶向分析功能, 深入阐明脂质介导的香气形成机制, 助力食品风味定向优化。

案例二 UPLC-Q-TOF/MS 结合代谢组学鉴别酱香型白酒中食用酒精掺杂

1. 研究背景

酱香型白酒作为高端品类, 独特风味与品质深受认可, 但高昂价值催生食用酒精掺杂造假行为。传统鉴别方法依赖感官评价或单一成分检测, 准确性不足, 难以满足精准监管需求, 亟须建立高效代谢组学鉴别技术, 保障行业健康发展。



2. 仪器与实验样本信息

仪器: SCIEX X500R QTOF 质谱仪

样本: 62个酱香型白酒样本 (含 6个翻沙酒、18个坤沙酒、38个碎沙酒), 60个人工制备食用酒精掺杂酒样本 (两种掺杂工艺)

3. 实验方法

采用UPLC-Q-TOF/MS技术采集正负离子模式质谱数据, 通过ME软件完成峰提取、定性鉴定与数据预处理, 结合MetaboAnalyst进行PCA、OPLS-DA分析, 筛选差异代谢物, 建立掺杂鉴别模型。

4. 研究结果

(1) 成分鉴定: 鉴定出 175 种化合物, 74 种存在显著差异, 为掺杂鉴别提供丰富化学依据。

(2) 模型构建: OPLS-DA 分析实现正品与掺杂酒清晰分离, 模型 Q2 和 R2Y 值均高于 0.9, 稳定可靠。

(3) 标志物筛选: 噻唑、5Z,11Z,14Z-二十碳三烯酸等为特征标志物, 正品中含量显著高于掺杂酒。

(4) 聚类验证: 聚类分析实现精准聚类, 鉴别准确率高。

5. 结论与展望

本研究建立 UPLC-Q-TOF/MS 与代谢组学结合的酱香型白酒掺杂鉴别方法, 明确噻唑、长链脂肪酸、吡嗪类等特征标志物, 为品质监管提供高效技术手段。未来可借助ME批量数据分析功能, 扩大样本库, 优化模型实现不同掺杂比例的精准定量鉴别。

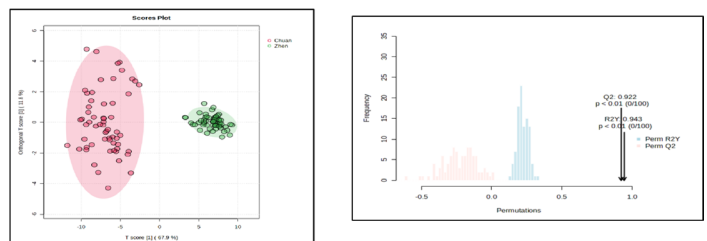


图5. OPLS-DA 得分图

表 1. 差异化合物分子 formula、保留时间等关键信息

No	Compounds	Molecular formula	Ions	Retention time (min)	Mass error (ppm)	t value	p value (FDR)	Fold change	VIP value
1	Thiazole	C ₃ H ₃ NS	[M+H] ⁺	2.31	-3.7	-27.63	5.47E-52	73.2	1.15
2	3,4-Dimethylaldehyde	C ₉ H ₁₀ O	[M+H] ⁺	12.55	0.5	-24.06	3.58E-46	5.8	1.13
3	(8Z,11Z,13E,15S)-15-Hydroxyicos-8,11,13-trienoic acid	C ₂₀ H ₃₄ O ₃	[M+H] ⁺	14.23	-0.8	-18.61	8.93E-36	74.1	1.07
4	Diethyl suberate	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	[M+H] ⁺	12.23	-0.4	-18.11	7.30E-35	9.9	1.07
5	2,3-Diethyl-5-methyl-pyrazine	C ₉ H ₁₄ N ₂	[M+H] ⁺	9.4	-1	-17.94	1.36E-34	13.4	1.07
6	3-Methylbutyl benzoate	C ₁₂ H ₁₆ O ₂	[M+H] ⁺	13.49	0.8	-17.81	2.18E-34	39.9	1.06
7	9-Oxo-10(E),12(E)-octadecadienoic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₃	[M+H] ⁺	12.75	-0.5	-17.46	1.04E-33	14.5	1.05
8	9,12-Octadecadienoic acid	C ₁₈ H ₂₈ O ₂	[M+H] ⁺	14.25	-0.7	-17.33	1.72E-33	83.9	1.05
9	2-Oxopropanal	C ₃ H ₄ O ₂	[M+H] ⁺	9.63	-3.2	-17.21	2.78E-33	9.3	1.03
10	Dimethoxymethanethiol	C ₃ H ₆ O ₂ S	[M+H] ⁺	0.91	-2.6	-17.185	2.82E-33	12.4	1.06
11	Diethyl azelate	C ₁₃ H ₂₄ O ₄	[M+H] ⁺	12.54	-1.4	-17.01	6.32E-33	10.3	1.06
12	4-Hydroxybutanoic acid lactone	C ₄ H ₆ O ₂	[M+H] ⁺	6.06	0.4	-16.88	1.08E-32	18.3	1.04
13	Linolenic acid-1	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	13.81	-0.9	-16.81	1.43E-32	27.6	1.04
14	Hydroxyisocaproic acid	C ₆ H ₁₂ O ₃	[M+H] ⁺	6.66	0.1	-16.77	1.61E-32	21.4	1.01
15	Benzoic acid	C ₇ H ₆ O ₂	[M-H] ⁻	2.25	-0.2	-16.56	4.32E-32	15.6	1.03
16	3-Phenylpropionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	[M-H] ⁻	4.76	-0.4	-16.45	7.10E-32	18.8	1.03
17	4-Penten-2-ol	C ₅ H ₁₀ O	[M-H ₂ O+H] ⁺	9.79	-3.1	-16.42	7.80E-32	14.0	1.06
18	5-Isobutyl-2,3-dimethylpyrazine	C ₁₀ H ₁₆ N ₂	[M+H] ⁺	10.7	-0.1	-16.35	1.07E-31	26.0	1.06
19	Pinelic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₃	[M-H] ⁻	5.65	1.2	-16.17	4.22E-31	33.4	1.03
20	FA 18:2-O	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	[M-H] ⁻	10.09	-1.3	-15.98	6.24E-31	21.0	1.03
21	Isovaleraldehyde	C ₅ H ₁₀ O	[M+H] ⁺	9.77	-1.9	-15.98	6.80E-31	14.2	1.05
22	9-HODE	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	[M-H] ⁻	10.55	-2.1	-15.92	7.58E-31	17.4	1.02
23	9(10)-Epoxy-12Z-octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	[M-H] ⁻	10.23	-1.6	-15.87	9.50E-31	22.6	1.02
24	SZ,11Z,14Z-Eicosatrienoic acid	C ₂₀ H ₃₄ O ₃	[M+H] ⁺	16.03	-0.9	-15.84	1.06E-30	28.5	1.04
25	Methyl trans-p-methoxycinnamate	C ₁₁ H ₁₂ O ₃	[M-H] ⁻	7.02	-0.6	-15.77	1.46E-30	15.1	1.02
26	Ethyl (E)-hept-2-enoate	C ₉ H ₁₆ O ₂	[M+H] ⁺	11.54	-0.5	-15.76	1.48E-30	5.4	1.04
27	Undecadienoic acid	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	[M-H] ⁻	5.45	0.1	-15.75	1.52E-30	19.5	1.01
28	2-Hydroxy-4-methoxyacetophenone	C ₉ H ₁₀ O ₃	[M+H] ⁺	9.66	0.3	-15.73	1.59E-30	251.4	1.01
29	3-(Methylthio)-1,2-propanediol	C ₄ H ₁₀ O ₂ S	[M+H] ⁺	0.93	-2.2	-15.73	1.59E-30	8.8	1.03
30	2-Ethyl-3-methylpyrazine	C ₇ H ₁₀ N ₂	[M+H] ⁺	7.07	-1.9	-15.71	1.65E-30	31.0	1.05
31	O-cresol	C ₇ H ₈ O	[M-H] ⁻	6.57	0.2	-15.66	2.07E-30	11.7	1.01
32	13R-Hydroxy-9Z,11E-octadecadienoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	[M-H] ⁻	10.42	-3.1	-15.59	2.89E-30	11.4	1.04
33	Ethylhexyl methoxycinnamate	C ₁₈ H ₂₆ O ₃	[M+H] ⁺	13.82	0.7	-15.59	3.15E-30	17.3	1.03

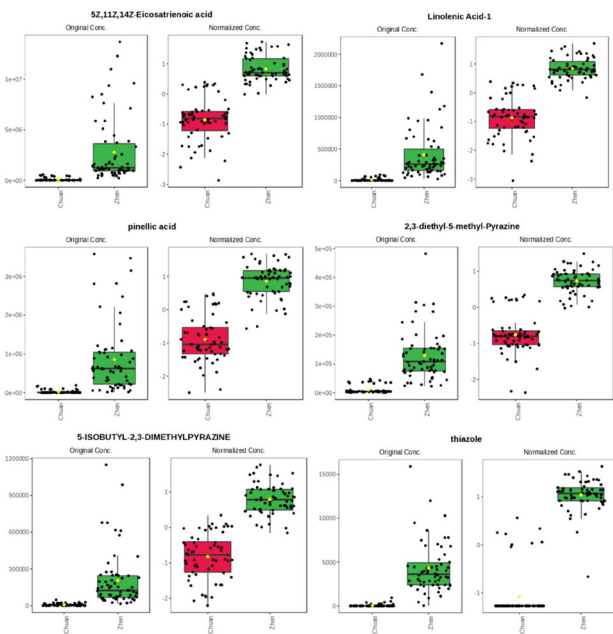


图6. 典型差异化合物含量箱线图

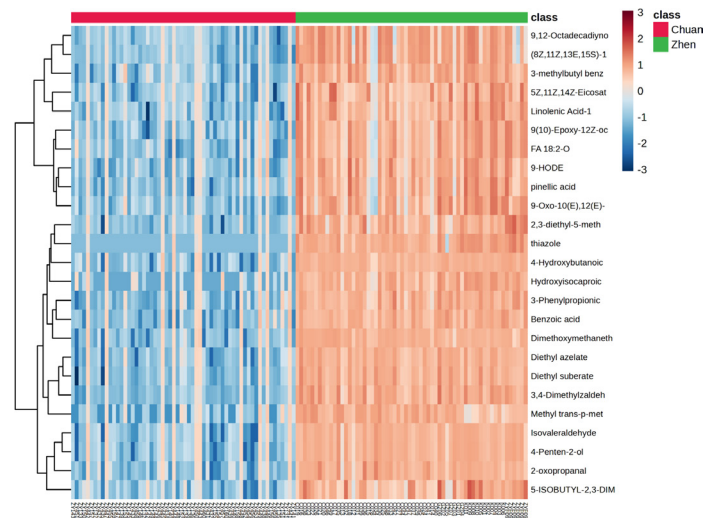


图7. 代谢物聚类热图

案例三 基于微生物 - 肠 - 脑轴探讨苦荞多酚缓解中枢疲劳的代谢机制

1. 研究背景



中枢疲劳已成为普遍健康问题，与微生物 - 肠 - 脑轴功能紊乱密切相关，但缺乏明确代谢调控机制与有效营养干预方案。苦荞多酚作为天然活性成分，具有调节肠道菌群平衡和神经保护的潜在作用。其通过微生物 - 肠 - 脑轴缓解中枢疲劳的代谢路径尚未阐明，需代谢组学技术系统解析。

2. 仪器与实验样本信息

仪器：SCIEX TripleTOF 6600+ UHPLC-Q-TOF-MS/MS系统

样本：32只6周龄雄性BALB/c小鼠，分为对照组、模型组、阳性对照组、苦荞多酚组，每组8只，通过高强度运动建立中枢疲劳模型

3. 实验方法

采用UHPLC-Q-TOF-MS/MS技术分析小鼠血清代谢物与苦荞多酚成分，结合16S rRNA测序分析肠道菌群，通过行为学测试、神经递质及炎症因子测定评价抗疲劳效果；利用ME软件完成代谢物定性定量、差异筛选与通路分析。

4. 研究结果

(1) 成分与行为验证：鉴定出苦荞多酚中36种主要活性成分，显著改善小鼠疲劳相关行为。

表3. 活性成分保留时间、质谱数据等关键信息

No	Identification	Retention (min)	Time MS/MS(m/z)	Peak (Mean value)	area	Formula
1	Narcissin	2.61	137.02	190912		C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆
2	Butein	5.59	624.17	160355		C ₁₅ H ₁₂ O ₅
3	Spiraeoside	3.98	241.12	111654		C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂
4	Silybin	6.29	548.06	29547.1		C ₂₅ H ₂₂ O ₁₀
5	Silibinin	7.79	432.10	644000		C ₂₅ H ₂₂ O ₁₀
6	Rutin	15.22	277.22	1740.33		C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆
7	Quercitrin	13.21	307.19	133944		C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁
8	Quercetin	1.37	117.02	735456		C ₁₅ H ₁₀ O ₇
9	Pyrocatechol	6.29	464.09	62266		C ₆ H ₆ O ₂
10	Procyanidin C1	15.30	294.18	18338.7		C ₄₅ H ₃₈ O ₁₈
11	Phlorizin	5.01	223.06	308044		C ₂₁ H ₂₄ O ₁₀
12	Morin	1.50	610.15	16176		C ₁₅ H ₁₀ O ₇
13	Maritimetin	7.98	578.16	38418.8		C ₁₆ H ₁₂ O ₆
14	Mangiferin	10.23	327.04	22262.8		C ₁₉ H ₁₈ O ₁₁
15	Kaempferol	4.71	463.09	112763		C ₁₅ H ₁₀ O ₆
16	Hypericin	4.34	771.20	544674		C ₃₀ H ₁₆ O ₈
17	Glycitein	1.83	279.06	141294		C ₁₆ H ₁₂ O ₅
18	Gallic acid	2.47	315.07	23485		C ₇ H ₆ O ₅
19	Galangin	6.02	180.07	38029.5		C ₁₅ H ₁₀ O ₅
20	Epicatechin-3-O-gallate	10.26	283.06	54038.6		C ₂₂ H ₁₈ O ₁₀
21	Epicatechin 3-glucoside	14.01	476.28	18729.6		C ₂₁ H ₂₄ O ₁₁
22	Epicatechin	14.70	452.28	20261.8		C ₁₅ H ₁₄ O ₆
23	Endocrocin	2.23	169.01	143339		C ₁₆ H ₁₀ O ₈
24	Ellagic acid	5.75	567.17	9275.36		C ₁₄ H ₆ O ₈
25	Dihydrokaempferol	3.41	149.02	409597		C ₁₅ H ₁₂ O ₆
26	Cyanidin-3-O-galactoside	15.44	352.28	24045.6		C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁
27	Cosmosiin	8.95	659.14	74419.4		C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀
28	Chrysoeriol	1.00	333.06	81825.7		C ₁₆ H ₁₂ O ₆
29	Catechol	1.06	594.16	20184.1		C ₆ H ₆ O ₂
30	Catechin	7.67	567.12	69656		C ₁₅ H ₁₄ O ₆
31	Biochanin A	6.07	543.13	209391		C ₁₆ H ₁₂ O ₅
32	6-Gingerol	15.69	368.32	47025.3		C ₁₇ H ₂₆ O ₄
33	(-)-Pinoresinol	6.30	609.15	22018.7		C ₂₀ H ₂₂ O ₆
34	(+)-Taxifolin	8.33	321.02	28745.1		C ₁₅ H ₁₂ O ₇
35	Hyperoside	4.77	951.18	18284.7		C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂
36	Emodin	7.72	271.06	2312.73		C ₁₅ H ₁₀ O ₅

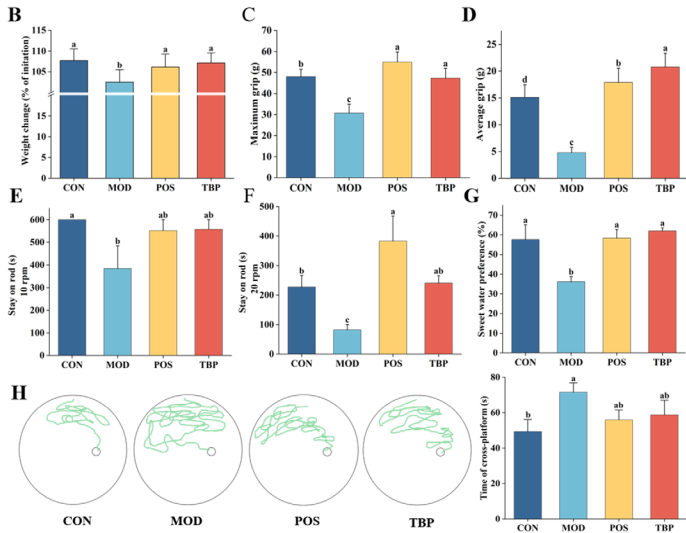


图8. 行为学测试结果

(2) 菌群调控: 调节肠道菌群组成, 提高有益菌丰度, 降低有害菌丰度, 恢复菌群多样性。

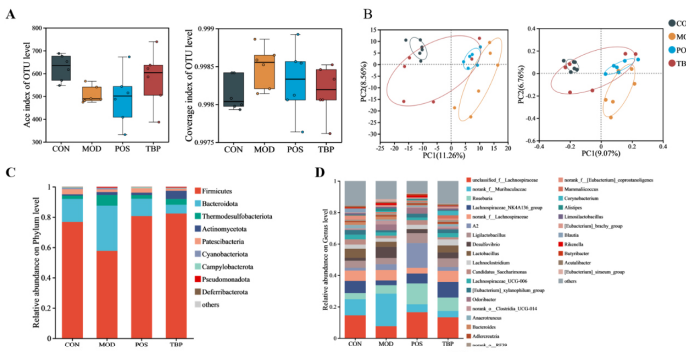


图9. 肠道菌群 Alpha 多样性指数、PCA 分析及物种相对丰度图

(3) 代谢物与通路筛选: 筛选出 2583 种差异代谢物, 显著调节丙氨酸 - 天冬氨酸 - 谷氨酸代谢等关键通路, 恢复中枢疲劳相关核心代谢标志物的正常水平。

(4) 氧化与炎症调控: 降低促炎因子与 MDA 水平, 提高抗氧化酶活性, 调节神经递质平衡, 缓解氧化应激与炎症反应。

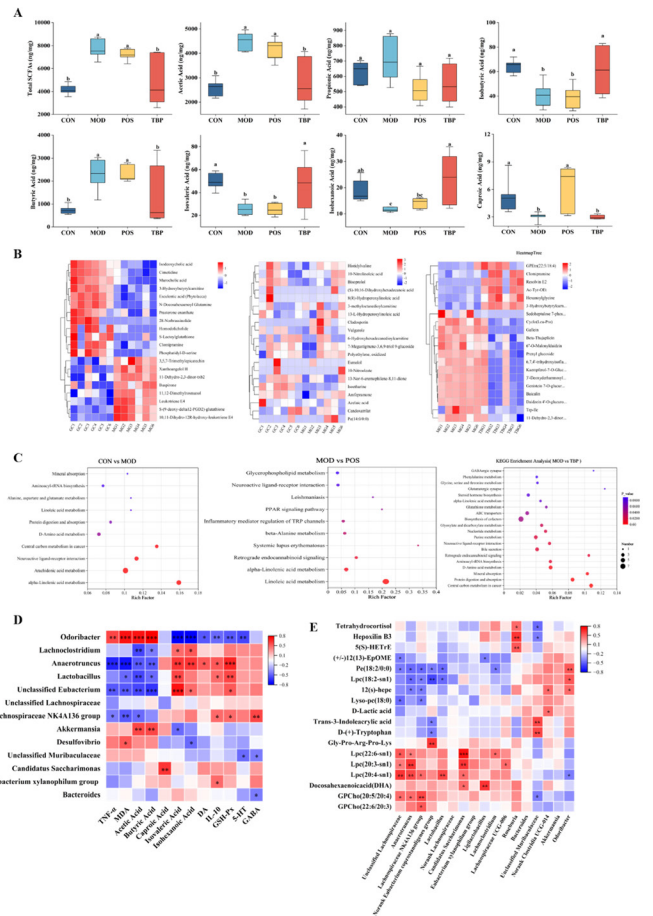


图10. KEGG 通路富集图

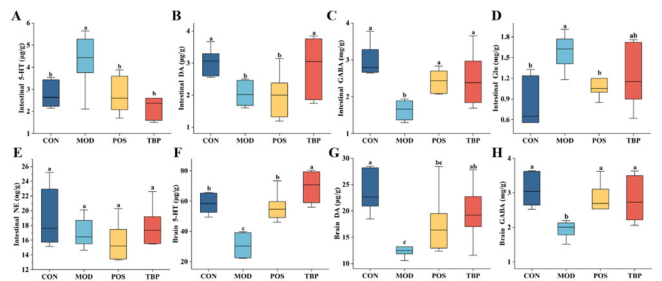


图11. 神经递质、氧化应激指标及炎症因子差异柱状图

5. 结论与展望

本研究证实苦荞多酚通过调节肠道菌群、改善肠道屏障功能、调控关键代谢通路与神经递质平衡缓解中枢疲劳，为天然活性成分抗疲劳应用提供理论支撑。未来可基于 ME 的拟靶向分析与正负离子整合功能，深入阐明分子网络机制，为功能食品开发提供新靶点。

ME Explorer Ultimate 赋能：食品风味、品质鉴别与营养健康领域的核心解决方案

ME 深度贴合三大领域研究需求，以“精准、高效、智能”核心能力破解行业痛点：

一站式全流程分析：贯穿数据导入、实时质控、峰表提取、定性定量、差异筛选、通路解析至报告生成完整链路，在牛肉脂质组学、白酒代谢物分析、小鼠血清代谢组研究中，实现原始数据到核心结论的高效直达；

超大规模定性：依托 100 万 + 二级质谱库与本地 / 云端双库支持，结合多级定性体系，快速完成牛肉 265 种脂质分子、白酒 175 种差异化合物、苦荞多酚 36 种活性成分的精准鉴定，解决传统定性覆盖度低、准确性不足的核心难题；

智能化差异分析：与多维度数据整合功能，支持正负离子整合分析与多类统计工具，快速锁定关键标志物与调控通路，同时支持代谢组学与肠道菌群数据联合关联，构建完整研究链条；

多维度数据整合：搭配严格实时数据质控与人性化兼容设计，保障复杂样本数据可靠性，无缝对接 SCIEX 全系列质谱，适配多类复杂基质，让科研人员聚焦科学问题本身，高效产出高质量成果。

总结

本应用案例集聚焦食品风味机制解析、白酒品质鉴别、中枢疲劳营养干预三大核心领域，通过 SCIEX 高分辨质谱与 ME 软件的深度协同，成功破解了行业内关键技术痛点。SCIEX 仪器凭借卓越性能提供高质量原始数据，ME 则以一站式全流程分析、超大规模定性、智能化差异筛选等核心功能，实现从数据到生物解释的高效转化，大幅提升科研效率与解析准确性。

二者的联合应用，不仅为牛肉风味优化、白酒品质监管、功能食品开发提供了科学可靠的技术方案，更彰显了其在代谢组学研究中的广泛适用性与核心竞争力。未来，随着技术持续迭代，SCIEX 高分辨质谱与 ME 将进一步拓展应用场景，为食品科学、营养健康、品质监管等领域的创新发展提供更强大的技术支撑，助力科研人员快速突破瓶颈，推动行业高质量发展。

参考文献

1. Zhou L, Ren Y, Shi Y, et al. Comprehensive foodomics analysis reveals key lipids affect aroma generation in beef[J]. Food Chemistry, 2024, 461: 140954.
2. Peng Z, Chen X, Zhang J, et al. Identification of Adulteration in JiangFlavor Chinese Spirits with Edible Alcohol Based on UPLCQTOF/MS Combined with Metabolomics[J]. Food Analytical Methods, 2024, 17: 1511-1522.
3. Wu T, Wang B, Long F, et al. Exploring the Anti-Central Fatigue Effects of Tartary Buckwheat Polyphenols via the Microbiota-Gut-Brain Axis[J]. Food Science and Human Wellness, 2027, 16.

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. 或在英国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2026 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-37863-ZH-A



SCIEX 中国

北京分公司
北京市昌平区生命科学园科学园路
18 号院 A 座一层
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

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