

# 利用SCIEX ZenoTOF™ 7600系统的EAD技术区分中药玛咖中的同分异构体

## Using The EAD Technology of SCIEX ZenoTOF™ 7600 system to Identify Isomers in Maca

史晓媛，钟晨春，龙志敏，郭立海

Xiaoyuan Shi, Chenchun Zhong, Zhimin Long, Lihai Guo

SCIEX 应用支持中心，中国

**Key words:** ZenoTOF™ 7600, EAD, Zeno™ Trap, Natural Products Identification

### 引言

玛咖（Lepidium meyenii Walp.）是原产南美洲安第斯山脉的一种十字花科植物。玛咖根是主要的食用部位，享有“南美人参”的称号。玛咖中含有丰富的蛋白质、氨基酸、维生素和矿物质等营养物质，此外，研究发现玛咖还含有玛咖酰胺、玛咖烯、芥子油苷、生物碱和甾醇等次生代谢产物。玛咖的药用价值体现在能够提高生育力、改善性功能、缓解疲劳、抗氧化、减缓更年期综合征和预防骨质疏松等。但是玛咖中存在的同分异构体用传统的CID（Collision-induced dissociation，碰撞活化解离）碎裂模式无法进行区分，为成分的鉴定带来困难，本实验利用ZenoTOF™ 7600 系统的EAD（Electron activated dissociation，电子活化解离）技术，获得更多的二级碎片，从而得到更准确的鉴定结果，同时采用数据依赖采集+动态背景扣除+ Zeno™ 阵开启（IDA+DBS+Zeno™ Trap on）数据采集模式，使用SCIEX OS软件对玛咖完成数据采集和数据分析工作，鉴定出玛咖中的成分。

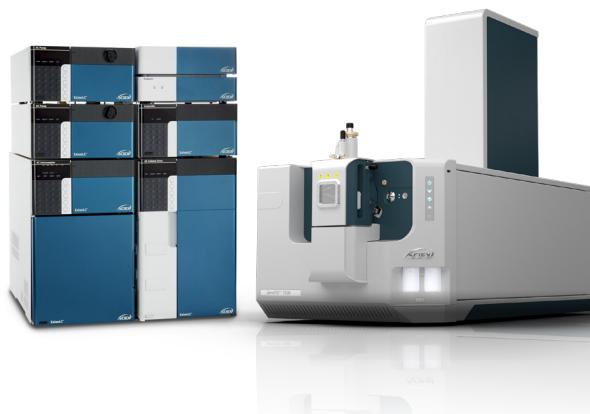
### ZenoTOF™ 7600系统用于中药成分鉴定的主要特点

1. ZenoTOF™ 7600 系统的EAD（Electron activated dissociation，电子活化解离）裂解技术可以获得更多的二级碎片，提高库匹配定性分析结果准确性、使得未知物的鉴定结果更加准确。
2. 在Zeno IDA模式下，Zeno™ Trap可以提高离子占空比，富集MS/MS碎片离子，显著提高二级灵敏度和二级谱图质量：quality大

于80 的二级谱图数目显著提高；从而提高数据库匹配数目。

3. ZenoTOF™ 7600系统是集扫描速度，分辨率和灵敏度于一体的高分辨质谱仪，配合133 Hz快速扫描速度，保证化合物的覆盖率和MS/MS谱图质量的前提下，可以缩短样品运行时间。
4. SCIEX OS软件结合高分辨天然产物二级标准谱库，可快速进行谱库的匹配，保证鉴定的结果快速、准确。

### 实验设备



SCIEX ExionLC™系统+ ZenoTOF™ 7600系统

### 仪器设备

#### 液相方法

色谱柱：T3 (100 × 2.1mm, 1.7 μm)

流动相：A: 水 (含0.1%甲酸);

B: 乙腈 (含0.1%甲酸)

流速: 0.3 mL/min;

梯度洗脱

时间(min)	A(%)	B(%)
0	98	2
2.0	98	2
20.0	2	98
25.0	2	98
25.1	98	2
28.0	98	2

进样体积: 2 μL

## 质谱方法

离子源: ESI源, 正/负离子模式

采集方式: TOF MS -IDA -30 TOF MS/MS

TOF MS范围: 100-1300

TOF MSMS范围: 50-1300

自动校正系统 ( CDS ) 开启

动态背景扣除 ( DBS ) 开启

Zeno On

离子源参数:

喷雾电压: 5500 V/-4500 V 气帘气 CUR: 35 psi

雾化气 GS1: 55 psi 辅助气 GS2: 55 psi

源温度: 550 °C DP电压: 80 V

碰撞能量: 40 ± 20 V

## 实验结果

### 1. 成分鉴定

OS软件结合高质量的二级库搜索快速准确鉴定到大量有效成分; 自动连接ChemSpider 在线数据库并结合Fragment pane碎片归

属功能快速扩展鉴定列表。实验共鉴定到591个化合物，主要包括玛咖吡咯烷酮、玛咖硫代乙内酰脲、玛咖酰胺、咔啉生物碱、咪唑类生物碱、芥子油苷等玛咖独特的次生代谢产物，以及一些氨基酸、维生素、糖、有机酸、脂质等。

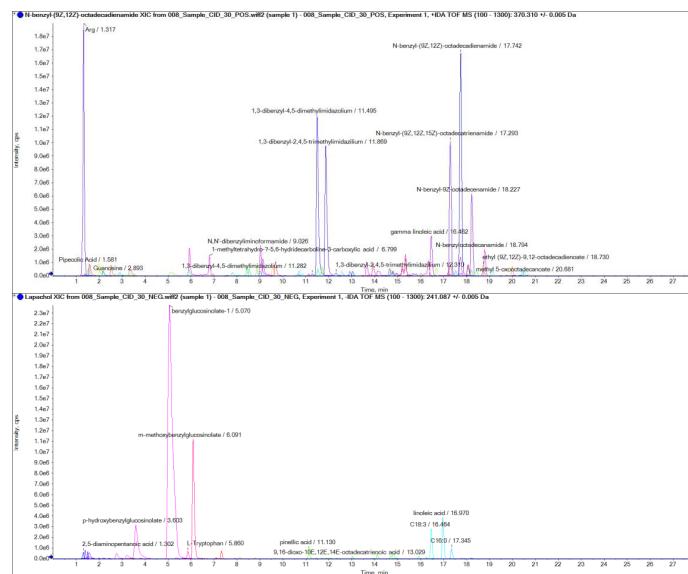


图1. 正负模式下鉴定到化合物的提取离子色谱图

### 2. EAD碎裂技术提供更多的碎片信息

CID模式下，同分异构体二级结构相同，只产生91.05的碎片离子，进一步结构解析有困难，EAD模式下，碎片离子更丰富，除了91.05的碎片离子外，两个化合物分别产生227.152和213.139的离子，两者相差-CH<sub>2</sub>，可以帮助确认甲基的位点，进行结构解析。

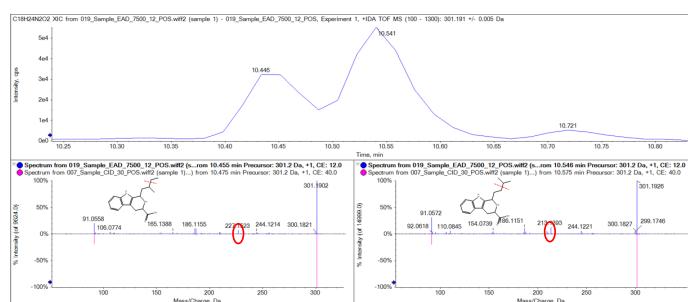


图2. EAD (KE 12eV) MS/MS谱图 (上图) 和CAD (CE 40eV) MS/MS谱图 (下图)，差异碎片使用红框表示，使用SCIEX OS软件解析EAD断裂位点

## 总结

本文使用SCIEX ZenoTOF™ 7600系统建立了玛咖中药成分鉴定方法。Zeno™ Trap技术显著提升了二级质量，提高定性结果的准确性。EAD碎裂技术产生区别于CID碎裂方式的二级碎片信息，可以帮助化合物精细结构确认。ZenoTOF™ 7600系统采集的数据保证得到全面丰富的鉴定结果，帮助进行玛咖成分鉴定。

## 参考文献

1. 李爱民, 赵可心, 党艳婷等. 不同产地玛咖中玛咖酰胺、玛咖烯和芥子油苷含量测定[J]. 中国医药导报, 2019, 16(28): 30-34.
2. Huang Y J, Peng X R, Qiu M H. Progress on the chemical constituents derived from glucosinolates in Maca(*Lepidium meyenii*) [J]. Nat Prod Bioprospect, 2018, 8(6): 405.

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。

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-15148-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: 021-2419-7200  
传真: 021-2419-7333  
官网: [sciex.com.cn](http://sciex.com.cn)

广州分公司  
广州市天河区珠江西路15号  
珠江城1907室  
电话: 020-8510-0200  
传真: 020-3876-0835  
官方微信: SCIEX-China