

使用MS Quan简化食品分析中的LC-MS/MS数据处理

Jinchuan Yang和Paul Rainville

沃特世公司，美国马萨诸塞州米尔福德

摘要

MS Quan是waters_connect™定量软件平台中的一个应用程序，旨在通过创新的工作流程、数据可视化 and 数据导航来简化LC-MS/MS数据处理和审查。本白皮书介绍了MS Quan应用程序的主要工作流程和总体功能，例如任务导向的工作流程、批次级审查和异常集中审查，并使用多种B族维生素LC-MS/MS分析数据集进行了说明。

简介

随着消费者越来越追求健康、安全的食品，以及监管机构对食品质量安全的要求不断提高，越来越多的实验室采用质谱(MS)等先进技术来满足常规食品分析不断增长的需求。液相色谱(LC)联用串联质谱(MS/MS)是一种强大的工具，特别是在灵敏度、专属性和通量方面，与使用光学检测技术(如UV/Vis、荧光或示差折光检测器)的LC相比，可提供更优异的分析性能。然而，在另一方面，LC-MS/MS分析往往会生成大量数据，需要更多的时间和专业知识来处理 and 审查，尤其是在测定多种分析物时，这可能会成为一个主要瓶颈。waters_connect™定量软件平台是一个包含一系列应用程序的平台，用于基于MS的分析。MS Quan是waters_connect定量软件平台中的一个应用程序，旨在通过创新的工作流程、数据可视化和数据导航工具来简化LC-MS/MS数据处理和审查。它可以大幅提高数据分析的效率和质量，并缩短样品流转时间。本白皮书旨在关注MS Quan应用程序在简化LC-MS/MS数据处理和查看方面的主要功能。如需了解MS Quan应用程序的其他功能，请参阅Waters™白皮书：《waters_connect MRM处理应用程序 - MS Quan的优势》([720007479ZH](#))。

优势：

- MS Quan能够帮助分析人员有效地处理和审查大量LC-MS/MS数据，同时确保高质量的分析。
- MS Quan是提高常规LC-MS/MS定量分析效率的适宜工具。

简化LC-MS/MS处理和审查的主要功能

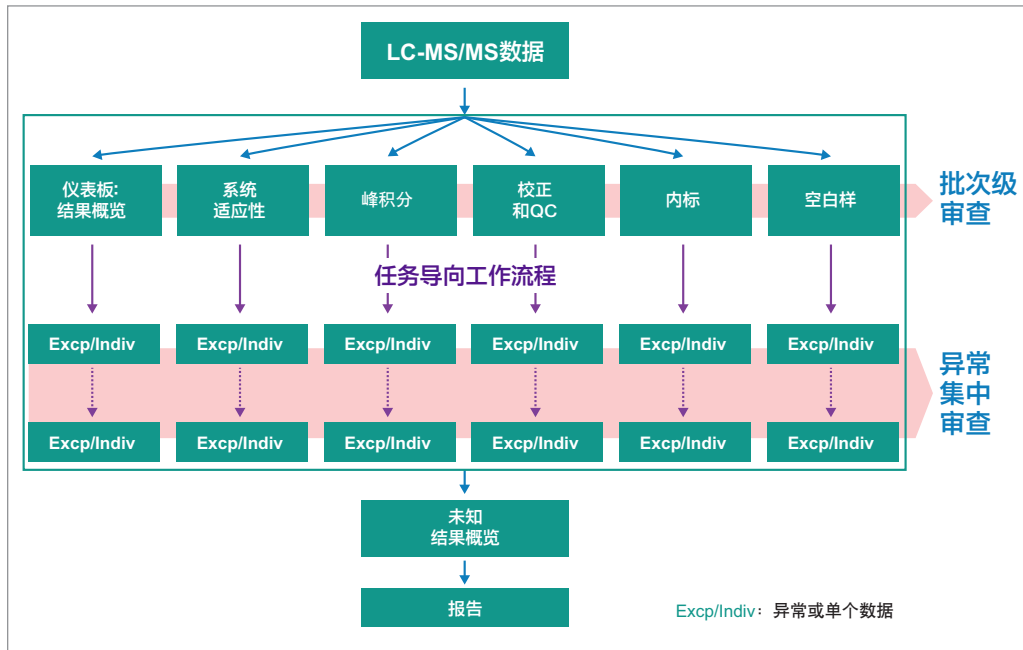


图1. MS Quan中LC-MS/MS数据处理的主要工作流程和主要功能示意图。

MS Quan应用程序具有任务导向的工作流程、批次级审查和异常集中审查等功能，简化了LC-MS/MS的数据处理和审查。图1展示了MS Quan的主要工作流程和主要功能的示意图。复杂的LC-MS/MS数据处理和审查被分解为几个简单的任务，例如处理和查看峰积分、内标、校正和QC、空白样和系统适应性。这些任务在单独的任务导向工作流程中执行，工作流程从批次级的数据概览开始，然后查看单个数据。

工作流程用户界面针对特定任务而设计。所有与特定任务相关的数据和处理参数（包括色谱图、峰结果、方法设置和样品信息）都显示在同一页面（用户界面）上，便于处理和查看。用户可以快速浏览批次级数据，然后在MS Quan中查看单独的目标进样或异常，而无需对处理数据进行繁琐耗时的逐个进样评估。异常是指不符合基于标准操作程序(SOP)或法规指南建立的分析性能标准（或规则）的处理数据。在批次级概览中，整个批次（或大量进样结果）的结果并排显示在同一页面上，分析人员能够轻松识别处理数据中的任何不一致（例如，积分峰不当），减少数据处理中的潜在错误，从而提高分析质量。

这些功能可显著加快处理数据的评估速度，同时提高分析的整体质量。下面我们将以食品补充剂中多种维生素B的LC-MS/MS分析为例，介绍MS Quan的主要功能。此处重点介绍了三项主要任务，即峰积分、校正和QC，以及内标的处理和查看。此次多种维生素B分析是在配备Xevo™ TQ-S micro质谱仪的Arc™ Premier系统上执行的。

峰积分



图2a. Peak Integration (峰积分) 页面。



图2b. 查看单次进样的峰积分和设置。

MS Quan Overview-Peak Integration (概述 - 峰积分) 页面提供了样品批次中所有进样的积分峰概述 (图2a)。每个峰积分的关键特性都清楚地显示在图中, 包括峰起点和终点、峰基线、积分峰、定量迹线 (彩色迹线) 和确认迹线 (灰色迹线)。这些图也具有相同的保留时间窗口, 便于进行简单比较。Exception Filters (异常筛选器) 和 Sample Type Filters (样品类型筛选器) 可用于更有针对性的比较。通过此页面不仅可以非常方便地查看大量进样的峰积分结果 (批次级审查), 还可以让分析人员在下一步中更多地关注少数有异常或积分不恰当的进样峰。所有图都是交互式的。分析人员可以双击图并导航至单个峰积分页面 (图2b), 其中与峰积分任务相关的数据和设置显示在同一页面上, 便于处理和审查。如果需要, 可以更新积分设置并将其应用于所有进样。通过左侧的可滚动列, 可以直接从单个峰积分页面访问其他进样 (图2b)。

校正和QC



图3a. Calibrations and QCs (校正和QC) 页面。



图3b. 单个校正和QC页面。

MS Quan Overview-Calibrations and QCs (概览 - 校正和QC) 页面包含分析物的标准曲线、残差图和QC图 (图3a)。在一页上可以显示的标准曲线数量取决于显示设置。从这个概览中可以轻松评估拟合标准曲线的质量和QC结果。这些图中的所有数据点都会链接到相关数据。通过单击特定的数据点, 系统将检索并在单个校正和QC页面上显示相关的标准曲线和QC图、色谱图以及设置 (图3b)。这种任务导向的工作流程可以节省浏览不同进样中各种标准浓度水平校正数据的时间, 大大简化了校正过程。

内标

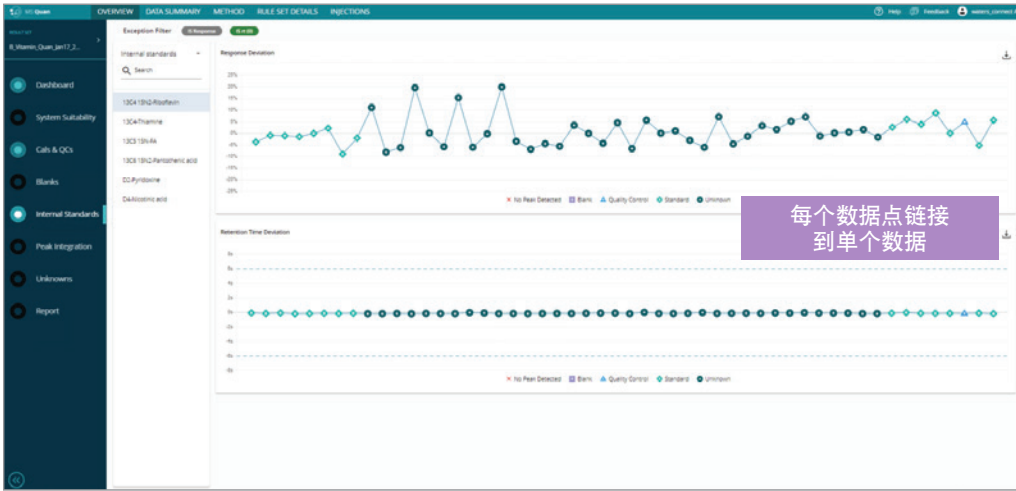


图4a. Internal Standards (内标) 页面。

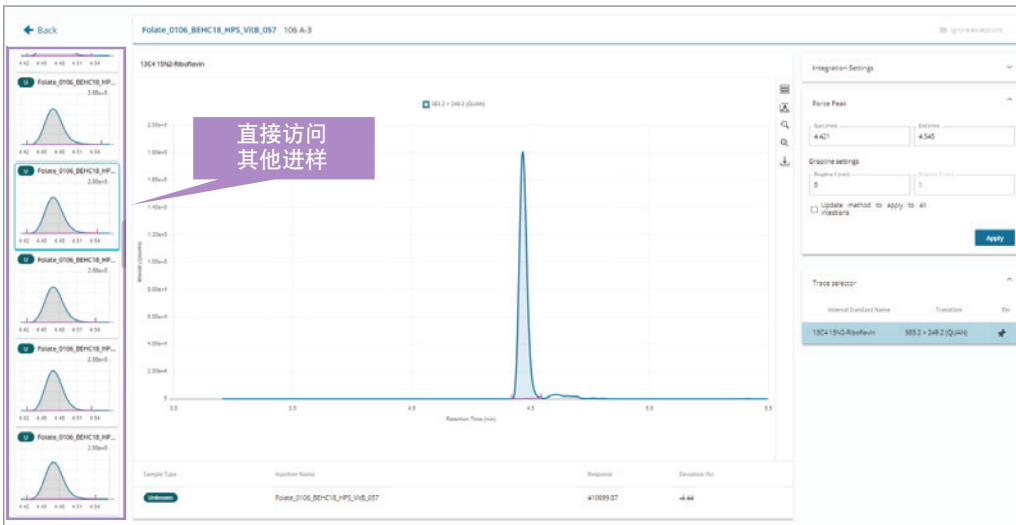


图4b. 链接到Internal Standards (内标) 页面上数据点的单个内标页面。

图4a展示了MS Quan Overview-Internal Standards (概览 - 内标) 页面，其中包含整个样品批次内标的相对响应和保留时间趋势图。这种批次级的审查可以清晰地展示不同进样的数据如何变化，这对于发现任何异常趋势非常有用。这些图中的数据点会链接到单个数据。单击这些数据点后，分析人员可以导航到特定进样的相关数据，包括色谱图、积分峰、峰结果、峰积分设置和样品信息 (图4b)。在此页面中，还可以通过左侧的可滚动列直接访问其他进样的内标数据。

结论

MS Quan将复杂的LC-MS/MS数据处理和审查分解为几个简单的任务，以便分析人员可以更有效地执行这些任务。每个任务导向工作流程都从高效的批次级概览开始，然后进行更有针对性的单个数据处理和审查。在任务导向工作流程界面中，用户可以通过交互式链接轻松导航，还可轻松访问所有相关数据和设置，从而大大加快了LC-MS/MS数据的处理和审查速度。批次级的审查还可以提高数据处理的一致性，减少了因数据处理不当或不一致而导致的错误。MS Quan会标记出异常数据，以使用户根据需要进行异常集中审查。MS Quan中的这些功能能够帮助分析人员有效地处理和查看大量LC-MS/MS数据，同时确保高质量的分析。MS Quan是支持常规、高通量LC-MS/MS定量分析的合适工具。

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

Waters、The Science of What's Possible、Arc、waters_connect和Xevo是沃特世公司的商标。
所有其他商标均为其各自所有者的资产。

©2022 Waters Corporation. 中国印刷。2022年4月 720007594ZHCN IH-PDF

Waters Corporation (沃特世公司)
上海市浦东新区东育路 255 弄 5 号
前滩世贸中心一期 B 座 23 楼 01 单元
邮编: 201206
电话: (021) 6156 2666
传真: (021) 6156 2777
www.waters.com