

# 应用 MALDImini-1 紧凑型 MALDI 数字离子阱质谱仪确认甘油三酯结构组成

MALDI-047

**摘要：** 本文展示了使用 MALDImini-1 紧凑型基质辅助激光解吸电离数字离子阱质谱 (MALDI-DIT) 对甘油三酯结构组成进行分析的应用案例。通过一级质谱成功检测到样品的  $[M+Na]^+$  单一同位素峰及其他同位素峰；二级质谱结果成功检测到母离子碎片的钠离子加合峰和氢离子加合峰，根据碎片分子量信息可推测出甘油三酯断裂方式，从而推测出甘油三酯结构组成，推测结果与理论相符。本应用案例表明 MALDImini-1 的多级碎裂功能适用于甘油三酯类化合物的解析，为相关脂质化合物的复杂结构分析提供参考。

**关键词：** 基质辅助激光解吸电离数字离子阱质谱 MALDImini-1 甘油三酯 结构分析

## 技术特点：

- ❖ MALDImini-1 用于脂质化合物分子量的快速表征。
- ❖ MALDImini-1 的多级碎裂功能用于化合物复杂结构解析。

甘油三酯 (TG) 是一种有机化合物，是由甘油的 3 个羟基与 3 个脂肪酸分子酯化生成的甘油酯。为非极性物质，以非水合形式贮存于体内，是体内储量最大和产能最多的能源物质。组成甘油三酯的脂肪酸种类及其在甘油骨架上的位置决定了甘油三酯的营养价值，研究甘油三酯的组成十分必要。

目前，常用的甘油三酯检测方法主要有 GC、LC 等，一般只能对有标准品且保留时间不同的甘油三酯进行定性定量区分。岛津 MALDImini-1 质谱仪整合

了 MALDI 离子源和数字离子阱 (DIT)，仅需微量样品和极短的抽真空时间，无需对照品即可实现蛋白质、多肽、多糖等样品分析，其多级碎裂功能还可以对未知样品进行复杂的结构分析。本文展示了利用 MALDImini-1 的多级碎裂功能来检测甘油三酯结构组成的方法，根据二级碎片分子量信息成功推测出甘油三酯的组成，结果与理论相符。分析过程具有速度快、成本低的特点。

## 实验部分

### 1.1 仪器

MALDImini-1 紧凑型 MALDI 数字离子阱质谱仪



图 1 岛津 MALDImini-1 质谱仪

## 1.2 试剂与样品

基 质：2,5-二羟基苯甲酸 (DHB)。

样 品：2份甘油三酯标准品信息如表 1。

表 1 样品信息表

No.	CAS	Compound	分子式	MW
1	555-43-1	TG (18:0/18:0/18:0)	C <sub>57</sub> H <sub>110</sub> O <sub>6</sub>	890.83
2	77145-69-8	TG (18:0/18:0/20:0)	C <sub>59</sub> H <sub>114</sub> O <sub>6</sub>	918.86

## 1.3 分析条件

扫描范围：m/z 350-3000

分析模式：线性正离子

激 光 器：349 nm 固态激光器

激 光 能 量：40-65

## ■ 样品前处理

将甘油三酯标准品用二氯甲烷配制成 1 mg/mL 的样品溶液，作为样品工作液。用含 0.1% 三氟乙酸的乙腈水溶液 (50/50, v/v) 将 DHB 基质配制成 10 mg/mL 的基质溶液。将上述 1 μL 样品工作液点到靶板上。待自然干燥后再覆盖 1 μL 基质溶液。待自然干燥后，将靶板送入质谱分析。

## ■ 结果与讨论

以 2,5-二羟基苯甲酸 (DHB) 为基质，在正离子模式下进行 2 份甘油三酯样品的质谱数据采集。2 个样品质谱分析结果如下。

1 号样品 TG (18:0/18:0/18:0) 的一级质谱检测结果如图 2 所示，在 m/z 650-3000 范围内，检测到该样品 C<sub>57</sub>H<sub>110</sub>O<sub>6</sub> 的 [M+Na]<sup>+</sup> 单一同位素峰 (m/z 913.66) 及其他同位素峰，各同位素峰分布良好。选择 m/z 913.66 作为母离子进行 MSMS 二级碎裂，二级质谱检测结果如图 3 所示，在 m/z 350-3000 范围内，检测到 TG (18:0/18:0/18:0) 母离子失去 18 个 C 的饱和脂肪酸得到的碎片 C<sub>39</sub>H<sub>75</sub>O<sub>4</sub> 的钠离子加合峰 (m/z 630.46) 和氢离子加合峰 (m/z 608.42)，且各同位素峰分布良好。根据碎片分子量信息，推测 TG (18:0/18:0/18:0) 二级碎片断裂方式如图 4，符合甘油三酯二级碎片的断裂规则，因此可以推测该化合物为 TG (18:0/18:0/18:0)。与理论相符。

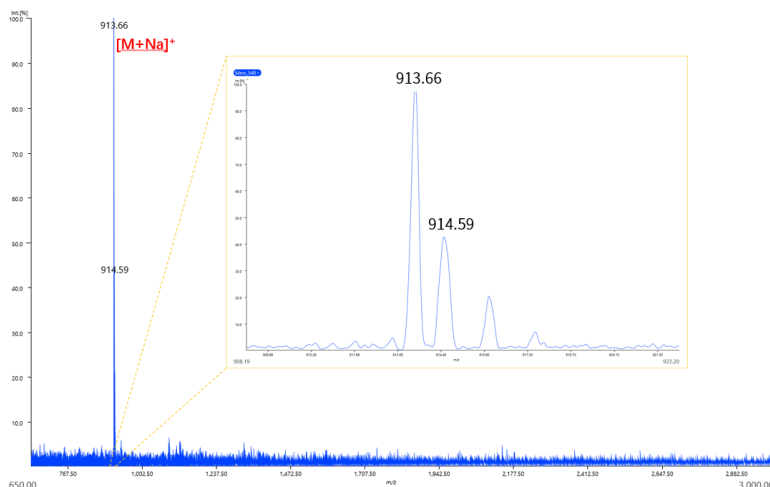


图 2 1 号样品一级质谱图 (m/z 650-3000)

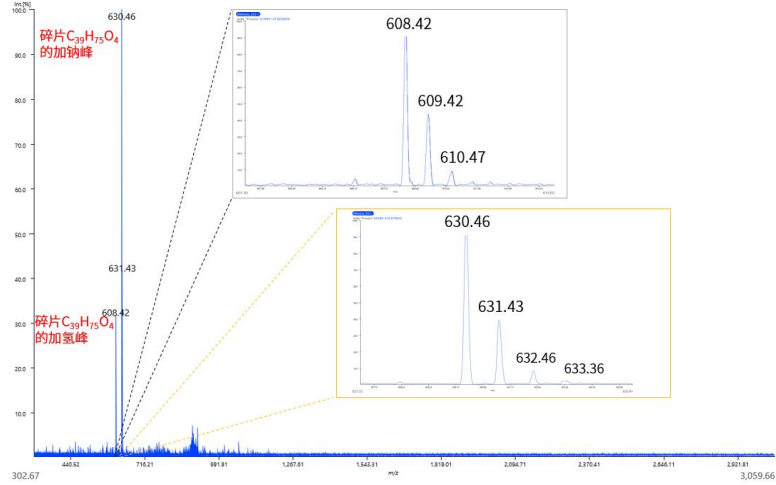


图 3 1号样品二级质谱图 (m/z 350-3000)

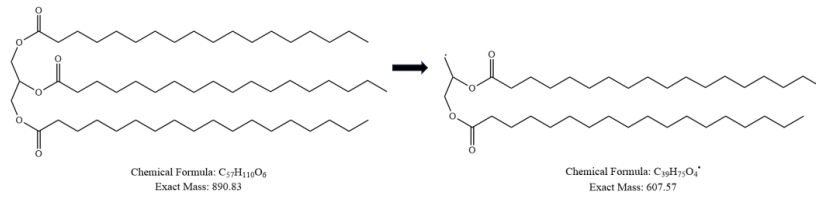


图 4 1号样品 TG (18:0/18:0/18:0) 二级碎片断裂示意图

2号样品 TG (18:0/18:0/20:0) 的一级质谱检测结果如图 5 所示, 在 m/z 650-3000 范围内, 检测到该样品  $C_{59}H_{114}O_6$  的  $[M+Na]^+$  单一同位素峰 (m/z 941.65) 及其他同位素峰, 各同位素峰分布良好。选择 m/z 941.65 作为母离子进行 MSMS 二级碎裂, 二级质谱检测结果如图 6 所示, 在 m/z 350-3000 范围内, 检测来自母离子的 2 种碎片类型, 信号最强的 2 个峰 m/z 658.45 和 m/z 630.41 分别对应母离子失去 18 个 C 的饱和脂肪酸的碎片  $C_{41}H_{79}O_4$  和母离子失去 20 个 C 的饱和脂肪酸的另一种碎片  $C_{39}H_{75}O_4$  的钠离子加合峰。且各同位素峰分布良好。此外, 还检测到 2 种碎片的氢离子加合峰 m/z 636.44 和 m/z 608.38。根据 2 种碎片分子量信息, 推测 TG (18:0/18:0/20:0) 二级碎片断裂方式如图 7, 符合甘油三酯二级碎片的断裂规则, 因此推测该化合物为 TG (18:0/18:0/20:0)。与理论相符。

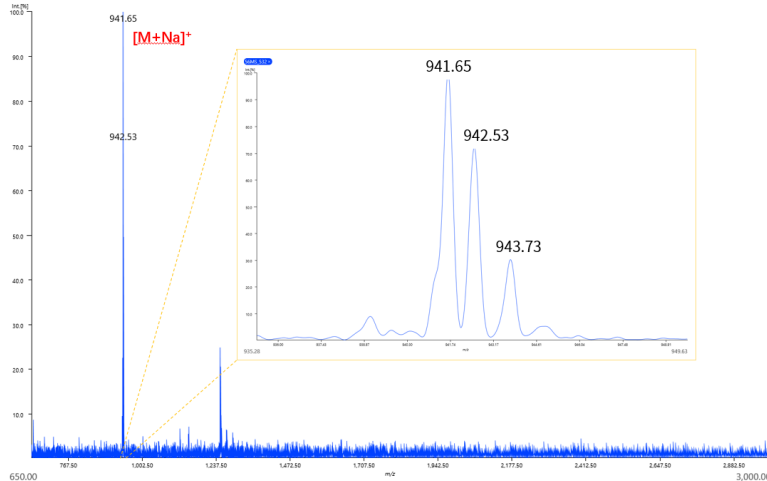


图 5 2号样品一级质谱图 (m/z 650-3000)

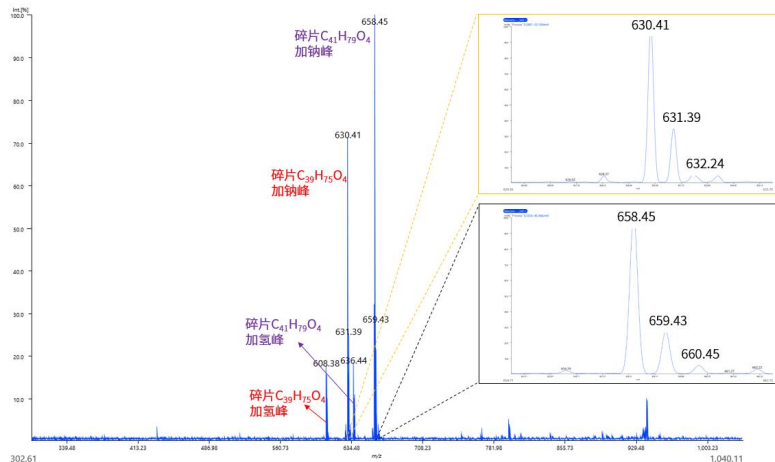


图 6 2号样品二级质谱图 (m/z 350-3000)

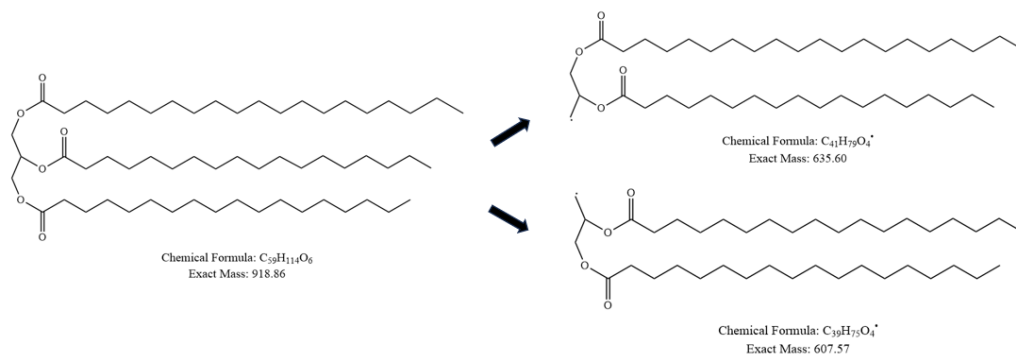


图 7 2号样品 TG (18:0/18:0/20:0) 二级碎片断裂示意图

## 结论

本文应用岛津 MALDImini-1 对甘油三酯类样品进行检测，获得了 2 份甘油三酯标准品在一级和二级质谱模式下的分子量信息，根据二级碎片分子量信息成功推测出甘油三酯的组成。该方法具有前处理简便、分析速度快、成本低的特点，为甘油三酯等相关脂质化合物的结构组成预测和结构确认提供方法参考。

岛津应用云

