

全面的精确质量代谢组学谱库及其在靶向和非靶向数据分析工作流程中的评估

作者

Luis Valdiviez,
Shunyang Wang,
Wasim Sandhu,
Honglian Ye, Oliver Fiehn
加州大学戴维斯分校
西海岸代谢组学中心,
美国加利福尼亚州

Sofia Nieto
安捷伦科技有限公司

摘要

在代谢组学研究中，可靠的代谢物注释和标识对于提供生物学背景至关重要。也有助于了解哪些生物化学通路受到疾病状态和候选药物的影响，从而推进基础生物学的研究。全面的谱库有助于解决参与生物通路的代谢物鉴定的关键挑战，从而助力生物学解析。本应用简报介绍了全新的 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学个人化合物数据库与谱库 (PCDL) 及其在使用血浆样品进行的靶向和非靶向筛查工作流程中的表征和评估。为代谢组学应用提供精确质量 GC/MS 谱库使研究人员能够扩大复杂生物基质中代谢物鉴定的范围、灵敏度和可靠性。

前言

长期以来，GC/MS 一直被视为重要的靶向和非靶向代谢物分析工具。它凭借稳定的性能、尖锐的峰形和可重现的电子电离 (EI) 源谱图在代谢物的鉴定中得到广泛使用。最近，随着高分辨率精确质量飞行时间 (TOF) 仪器的问世，研究人员拥有了更强大的资源，能够更可靠地鉴定更多的生物相关分子。

事实证明，GC/MS 质谱库是轻松实现快速化合物鉴定的重要工具^[1-4]。保留时间/指数和精确质量信息为确认或否決化合物鉴定结果提供了更多的证据，同时可有效降低假阳性率^[5,6]。精确质量 GC/MS 谱库特别适用于涉及复杂基质或目标化合物分子式较为复杂的应用，代谢组学应用就是其中之一。为了帮助提高代谢组学应用的可靠性和通量，创建了生物基质中常见化合物的精确质量保留时间锁定 (RTL) EI 谱库。该谱库包含 900 多个条目，涵盖了广泛的化合物类别。

使用血浆样品通过靶向和非靶向筛查工作流程对精确质量代谢组学 PCDL 库进行了测试。此外，研究表明，精确质量代谢组学 PCDL 库可用于鉴定各种组织样品中的独特代谢物和共流出代谢物。

实验部分

样品前处理

对代谢物进行衍生化是提高极性代谢物的挥发性，使其更适用于 GC/MS 分析的常用方法。根据其他研究所述，本研究将代谢物标样、血浆和组织提取物进行甲氧基化衍生，然后采用 MSTFA + 1% TMCS 进行硅烷化^[7]。在进行衍生化前，向每个样品中加入 D27 肉豆蔻酸作为内标。使用乙腈:异丙醇:水 (3:3:2) 从血浆和组织中提取代谢物。干燥物的提取和衍生化过程如前所述，然后用其来评估精确质量谱库的筛查工作流程。

数据采集和数据处理

使用精确质量高分辨质谱仪 Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统采集已知色谱分离良好的单标或代谢物混合物的 EI 谱图。包括标准品和提取物在内的所有数据均在 70 eV 的 EI 模式下获得。数据采集参数见表 1。精确质量代谢物 PCDL 中各化合物的保留指数 (RIs) 都是基于脂肪酸甲酯和正构烷烃计算得到的。使用 Agilent MassHunter 10 版定性分析软件将精确质量 EI 碎片转换为理论 m/z 值。然后，使用 Agilent PCDL Manager 8.0 版软件将谱图导入精确质量代谢组学 PCDL。使用全新的谱库管理软件 Agilent ChemVista 1.0 对 PCDL 进行了进一步的修改，增加了关联数据和化学结构信息。使用 Agilent MassHunter 定量分析软件 (10.2 版和 11.1 版) (包括未知物分析软件工具) 对数据进行了处理。

表 1. 数据采集参数

参数	值
MS	Agilent 7250 GC/Q-TOF
GC	Agilent 7890B GC
色谱柱	Agilent J&W DB-5ms 超高惰性柱 30 m × 0.25 mm × 0.25 μm, DuraGuard, 10 m
进样口	分流/不分流进样口, 4 mm 安捷伦超高惰性进样口衬管, 单锥
进样量	1 μL
进样模式	不分流
进样口温度	280 °C
柱温箱升温程序	50 °C (保持 0.5 min); 以 10 °C/min 升至 325 °C, 保持 10 min
载气	氮气
色谱柱流速	1 mL/min, 恒流模式
传输线温度	280 °C
四极杆温度	150 °C
离子源温度	200 °C
电子能量	70 eV
发射电流	5 μA
谱图采集速率	5 Hz
质量范围	m/z 50–1200

结果与讨论

构建精确质量代谢组学 PCDL

精确质量代谢物 PCDL 当中的化合物都是经过挑选的，确保包含大多数参与主要代谢通路并适合进行 GC/MS 分析的代谢物。此外，为了扩大谱库的适用范围和效用性，还添加了 250 多种生物基质中常见的次级代谢物和外源性物质。

为了将所采集谱图中的每个碎片离子 m/z 数值转换为理论值，MassHunter 定性软件会自动给谱图中的碎片离子标注其对应的化学式。在将谱图导出到 PCDL 之前，如有必要，可以对自动标注的化学式手动进行审查和更改（图 1）。在 ChemVista 谱库管理软件中添加化学结构、结构标识符（InChI String、InChIKey、SMILES）和各种数据库标识符（CAS、PubChem ID 等）等关联数据。GC/Q-TOF 的精确质量代谢组学 PCDL 库包含保留指数（基于正构烷烃和脂肪酸甲酯）。当前版本的谱库包含 900 多张精确质量 EI 谱图，对应 670 多种化合物。

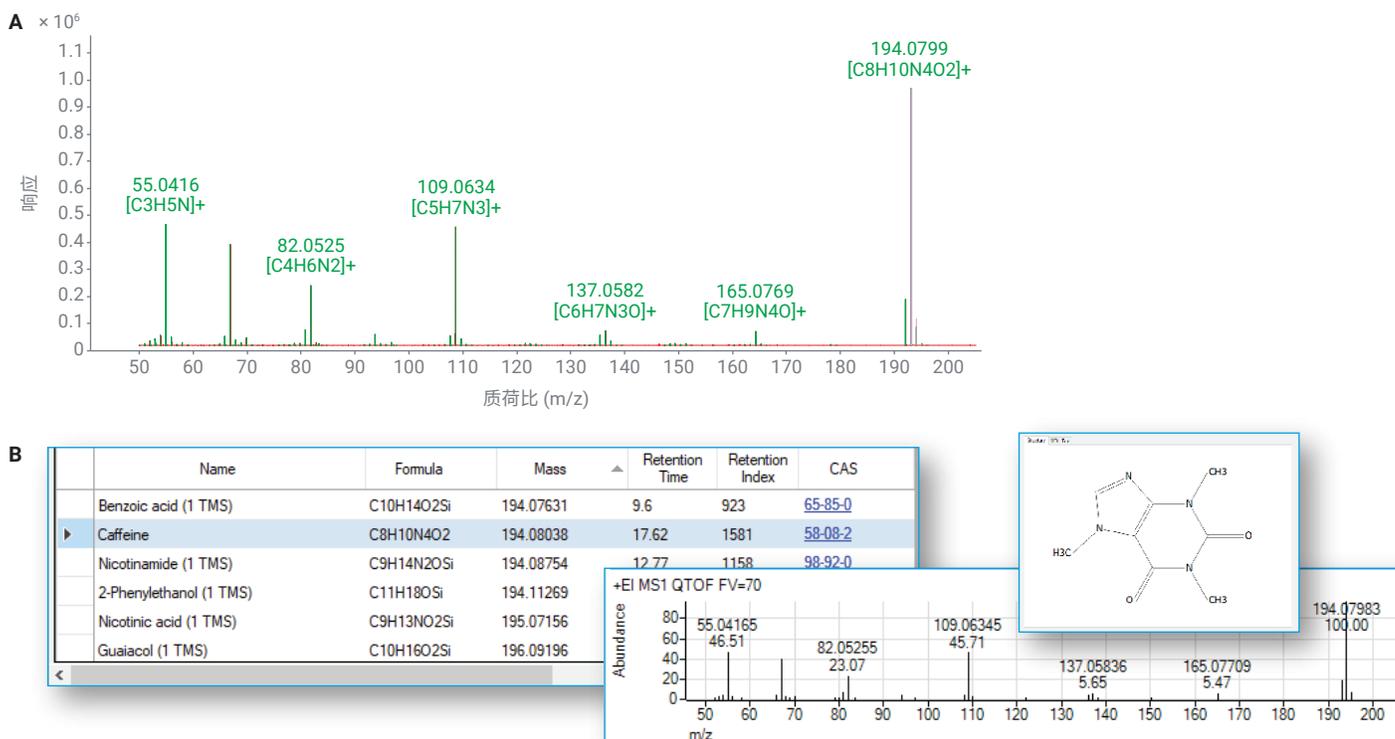


图 1. 创建 PCDL。(A) 碎片离子对应化学式自动标注，用于后续将质谱当中所有碎片离子采集得到的精确 m/z 转换为理论 m/z 。(B) Agilent PCDL Manager 软件中显示的 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL，可以在其中编辑关联数据

精确质量代谢组学 PCDL 与单位质量 GC/MS 代谢组学谱库的比较

全新的精确质量代谢组学 PCDL 与现有的单位质量 Agilent Fiehn GC/MS 代谢组学库 (Fiehn.L) 中重叠部分的化合物数量如图 2 所示。注意, 在本比较中, 将可以形成多种衍生生化状态的代谢物条目视为一种化合物实体。虽然两个谱库之间有近 500 种共有的实体, 但有近 200 种化合物为精确质量 PCDL 所特有。因此, 两个谱库在化合物覆盖率方面存在互补性。尽管代谢组学 PCDL 提供了精确质量和科瓦指数的额外优势, 但基于脂肪酸甲酯 RI 的单位质量代谢组学谱库还可用于检索 GC/Q-TOF 数据。

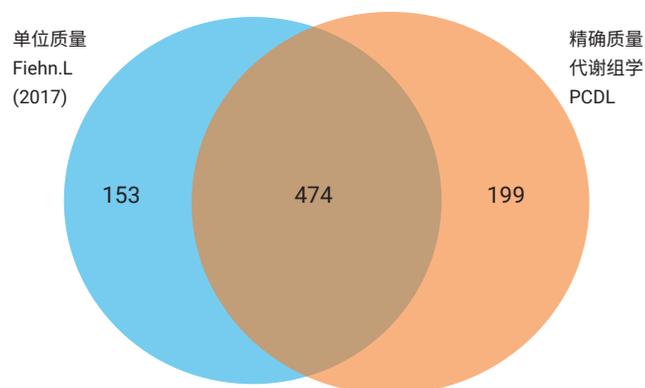


图 2. 精确质量代谢化合物 PCDL 与单位质量 Fiehn GC/MS 代谢物谱库中各自独有化合物数量比较

与单位质量 GC/MS 代谢组学谱库不同, 精确质量代谢组学 PCDL 包含质量范围更宽, 碎片质荷比更高的全扫描质谱图 (最高可达 m/z 1200)。由于单位质量 Fiehn GC/MS 代谢组学谱库基于单四极杆质谱数据, 而四极杆仪器的离子传输效率相对较低, 因此采集的数据上限为 m/z 600。与四极杆系统相比, TOF 仪器在高 m/z 下具有更高的离子传输效率, 这在采集衍生生化代谢物的数据时具有优势, 因为这些物质的许多质谱信息包含高于 m/z 600 的离子, 有时甚至高达 m/z 1000 及以上。通过检测这些通常为独特标识符的额外高 m/z 质量, 精确质量 GC/Q-TOF 可以为谱图匹配提供额外的数据点。图 3 显示了来自精确质量代谢组学 PCDL 和单位质量代谢组学谱库的此类化合物谱图示例, 并突出显示了 GC/Q-TOF 的扩展质量数范围所提高的特异性。从以上示例可以看出, 对于代谢组学相关应用和谱库, 在宽的质量范围内采集质谱数据可以增强对化合物进行准确性的信心。

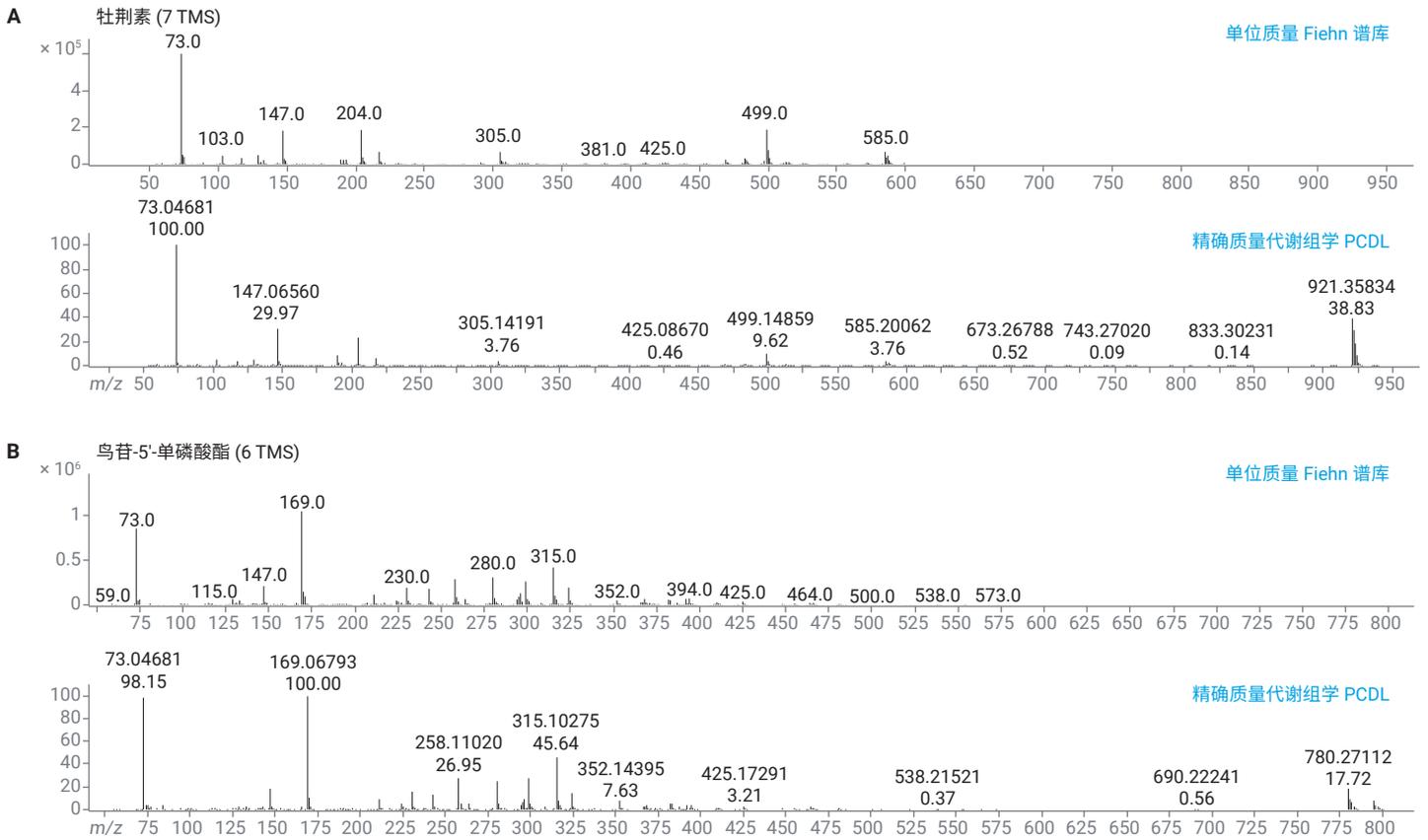


图 3. 谱库当中具有高分子量和高质量端 m/z 碎片的化合物谱图示例

精确质量代谢组学 PCDL 的化合物类别覆盖率及其使用多种组织提取物进行的表征

当前版本的精确质量代谢组学 PCDL 包含各种适合 GC 分析的化合物类别，其分布如图 4 所示。最重要的化合物类别包括羧酸、氨基酸和碳水化合物，它们对于理解基本的生物结构单元和能量代谢至关重要。

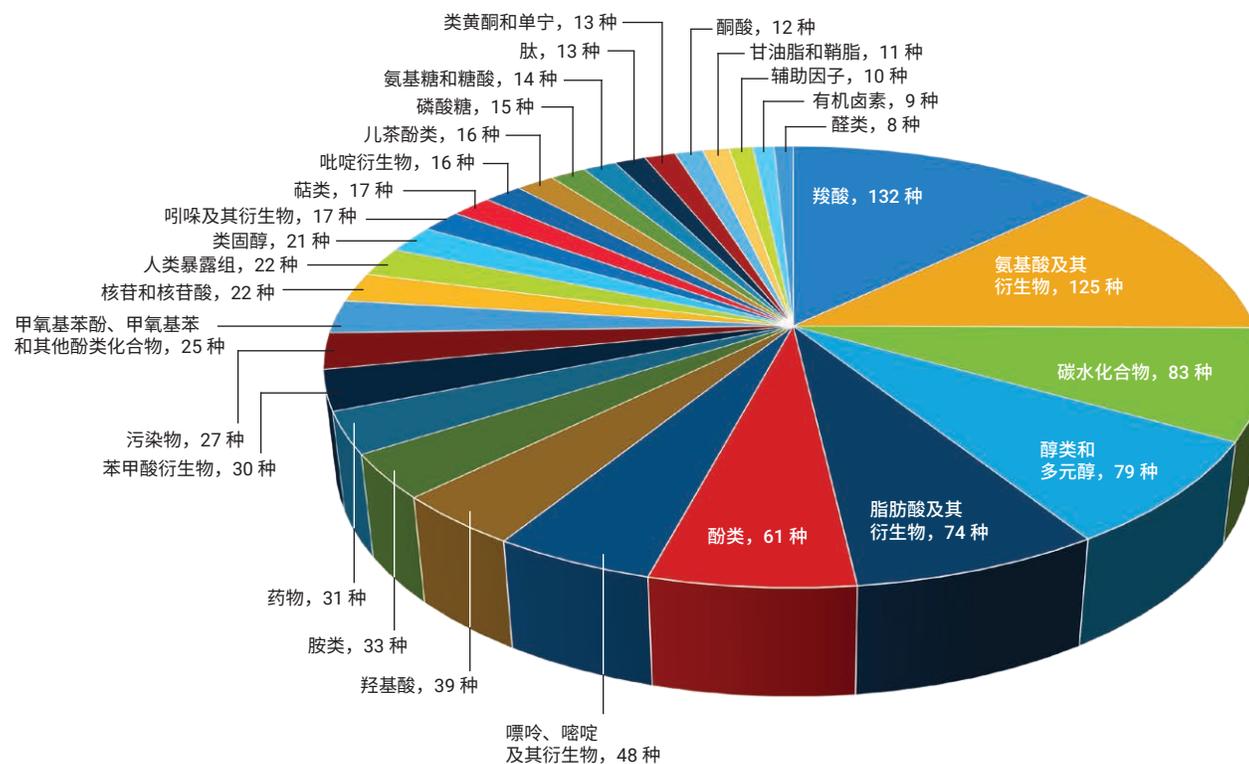


图 4. Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL 中包含的化合物类别

使用精确质量代谢组学 PCDL 和未知物分析工具，在 5 种小鼠组织（包括脑、肝、肾、血浆和血清）中鉴定出 200 多种化合物。如文氏图（图 5）所示，在分析的所有组织中发现了 86 种共有代谢物。但在每种组织中都鉴定出了一些独有的化合物（表 2）。不足为奇的是，在血浆和血清中发现了大量的成对重叠，主要包括有机酸（表 3）。在肝脏和肾脏中观察到不同组织之间的另一个突出的成对重叠，以低聚糖和磷酸化代谢物为主（表 3）。

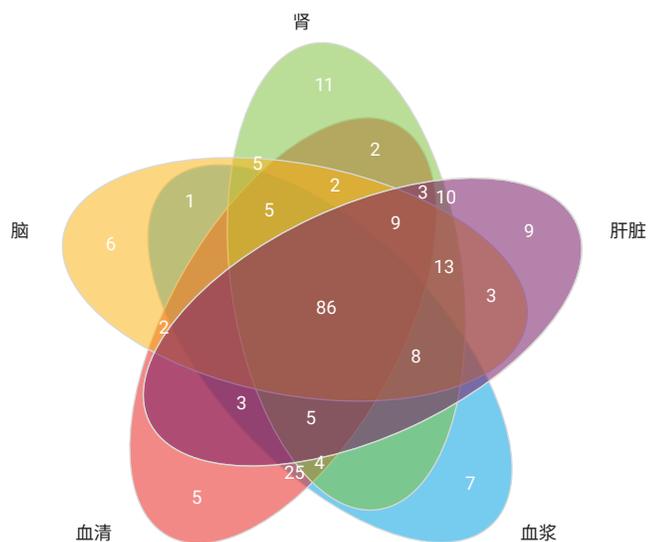


图 5. 通过 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL 鉴定得到的各种小鼠组织中的代谢物重叠

表 3. 在以下各对小鼠组织中鉴定得到的 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL 特有谱库匹配结果列表

血浆-血清	肾-肝
2-酮异戊酸	甘油醛
1,3-丙二醇	焦磷酸盐
2-咪喃甲酸	二羟丙酮磷酸
2-羟基丁酸	D-葡萄糖-6-磷酸酯
2-羟基-3-甲基丁酸	黄嘌呤核苷
2-氨基丁酸	纤维二糖 1
2-酮基-3-甲基戊酸 1	纤维二糖 2
2-酮基-3-甲基戊酸 2	棉籽糖
2-酮基异己酸	麦芽三糖 1
苯甲酸	麦芽三糖 2
烟酸	
D-蔗糖醇	
对羟基苯乙酸	
月桂酸	
邻苯二甲酸	
D-山梨醇	
3-吡啶乙酸	
3-吡啶丙酸	
邻苯二甲酸单(2-乙基己基)酯	
硬脂酸	
山萘酸	
D-海藻糖	
2-十八烷酸单甘油酯	
β-生育酚	
α-生育酚	

表 2. 只有利用 Agilent Fiehn 精确质量代谢化合物 PCDL 才能在各种小鼠组织中鉴别出来的结果列表

脑	肾	肝脏	血浆	血清
2'-脱氧胞苷	N-乙酰基-L-丙氨酸	胞嘧啶	N-甲基-L-脯氨酸	2,3-丁二醇
3-氨基吡啶-2(1H)-酮	β-氧基-L-丙氨酸	尿黑酸	N-乙酰基甘氨酸	丙酮酸
胸腺嘧啶	L-甲硫氨酸亚砷	十七碳烯酸	1,2,4-苯三酚	吡啶-3-乳酸
N-乙酰基-L-天冬氨酸	D-半乳糖	5-甲基尿甙	β-甘油磷酸酯	血清素
L-抗坏血酸	半乳糖醛酸	槐糖 1	山梨糖 1	邻苯二甲酸二辛酯
5'-脱氧-5'-(甲硫基)腺苷	葡萄糖醛酸	槐糖 2	花生酸	
	H-Pro-Hyp-OH	蜜二糖 1	双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯	
	L-胱氨酸 1	蜜二糖 2		
	L-胱氨酸 2	β-谷甾醇		
	甘露糖-6-磷酸酯			
	果糖-6-磷酸酯			

使用血浆样品在非靶向和靶向筛查工作流程中评估精确质量代谢组学 PCDL

在代谢组学应用中，常常使用靶向和非靶向方法。因此，使用衍生化血浆提取物，在两种工作流程中对新的精确质量代谢组学 PCDL 进行了评估。在未知物分析软件中执行非靶向工作流程，该软件内置的 ExactMass 工具（图 6）可以帮助有效消除假阳性结果。为了更好地了解精确质量代谢组学 PCDL 在非靶向方法中的潜在优势，除了精确质量代谢组学 PCDL 外，还

对单位质量谱库 (NIST17) 进行了测试。MassHunter 定量分析软件中包含靶向筛查工作流程，其完全基于精确质量谱库；因此，在本例中使用精确质量代谢组学 PCDL。靶向筛查结果如图 7 所示。在 MassHunter 定量分析软件中实施的靶向筛查方法的一个优势在于，可以为每种化合物单独设置所有方法参数，具有极大的灵活性。筛查谱库汇总视图使用户能够快速查看结果，以便进一步优化方法，尽可能减少假阳性和假阴性结果。

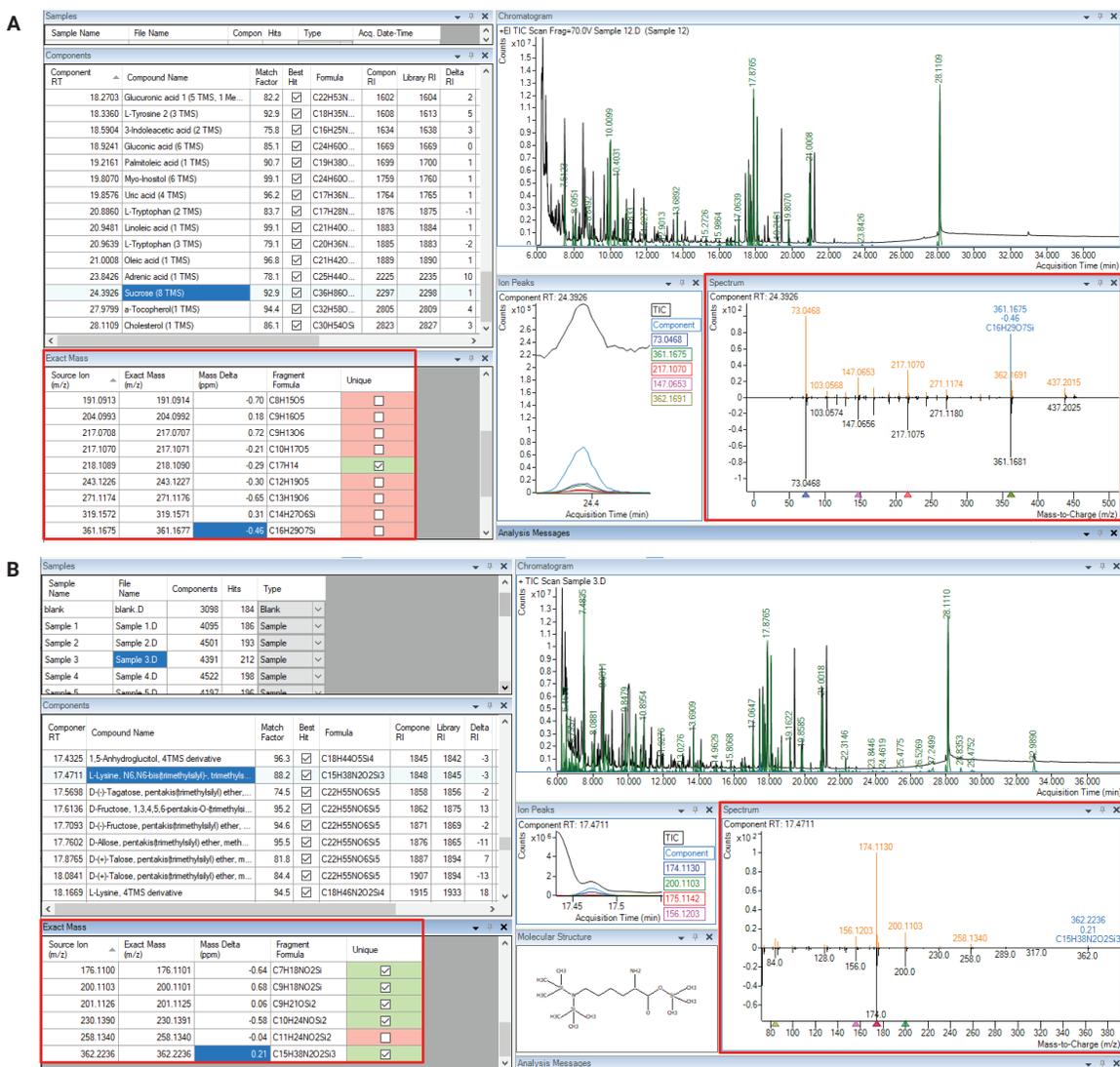


图 6. 在安捷伦未知物分析软件中使用 (A) Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL 和 (B) 单位质量 NIST17 谱库进行非靶向分析。

ExactMass 结果显示于汇总表和镜像图中。与谱库匹配分子式一致的化合物谱图碎片离子以橙色和蓝色突出显示

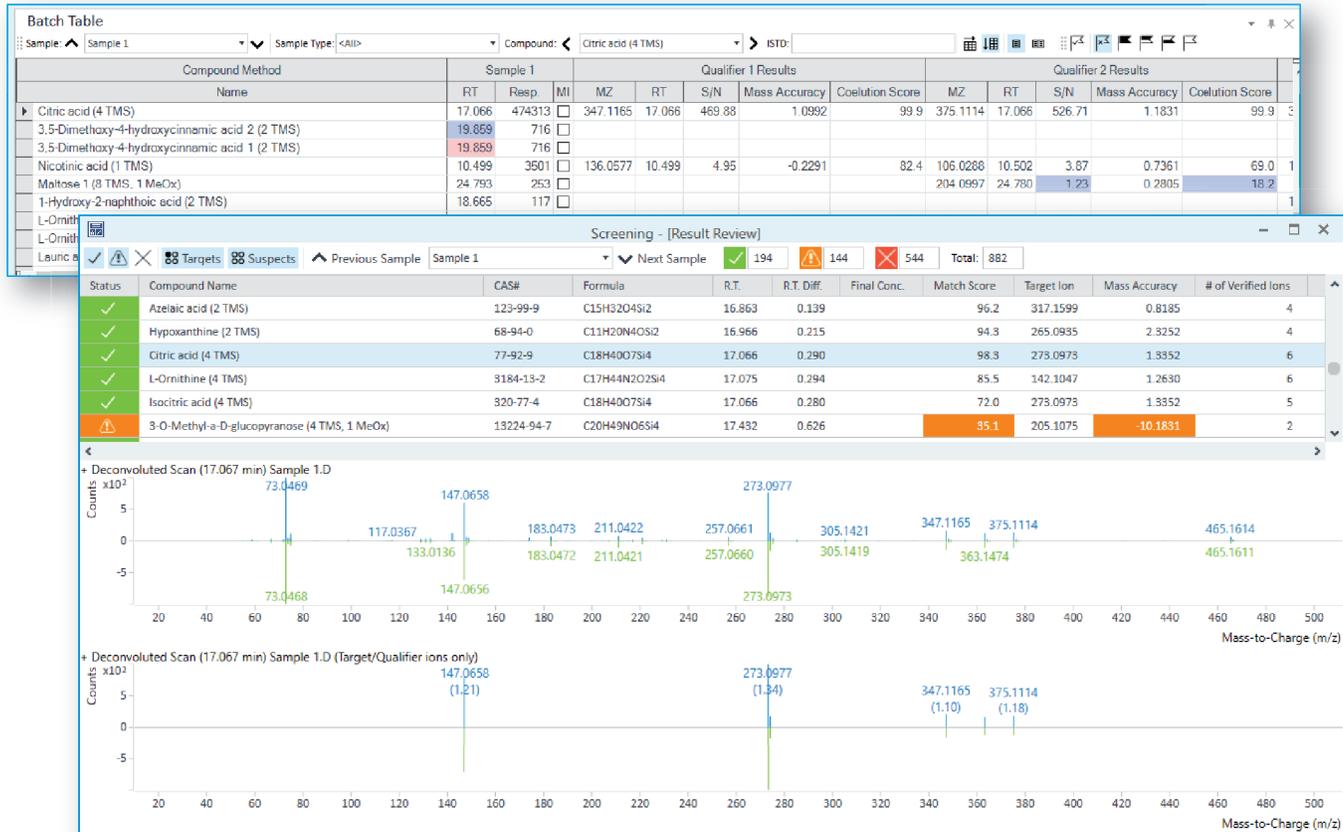


图 7. 可视化靶向筛查结果。顶部所示为包含每种化合物完整信息的详细定量分析表。底部所示为筛查汇总窗口，允许快速查看最有意义的结果

使用 ExactMass 工具基于精确质量信息过滤并借助 NIST 谱库得到结果，消除假阳性。图 8 显示了几个示例。根据精确质量信息发现，每个样品大约有 36–48 个谱库匹配结果为假阳性结果。这大约占总匹配数的 30%。使用精确质量代谢组

学 PCDL（靶向和非靶向方法）可以自动排除精确质量偏差导致的假阳性结果，因为其检测内置于筛查谱库和谱库搜索工具中。

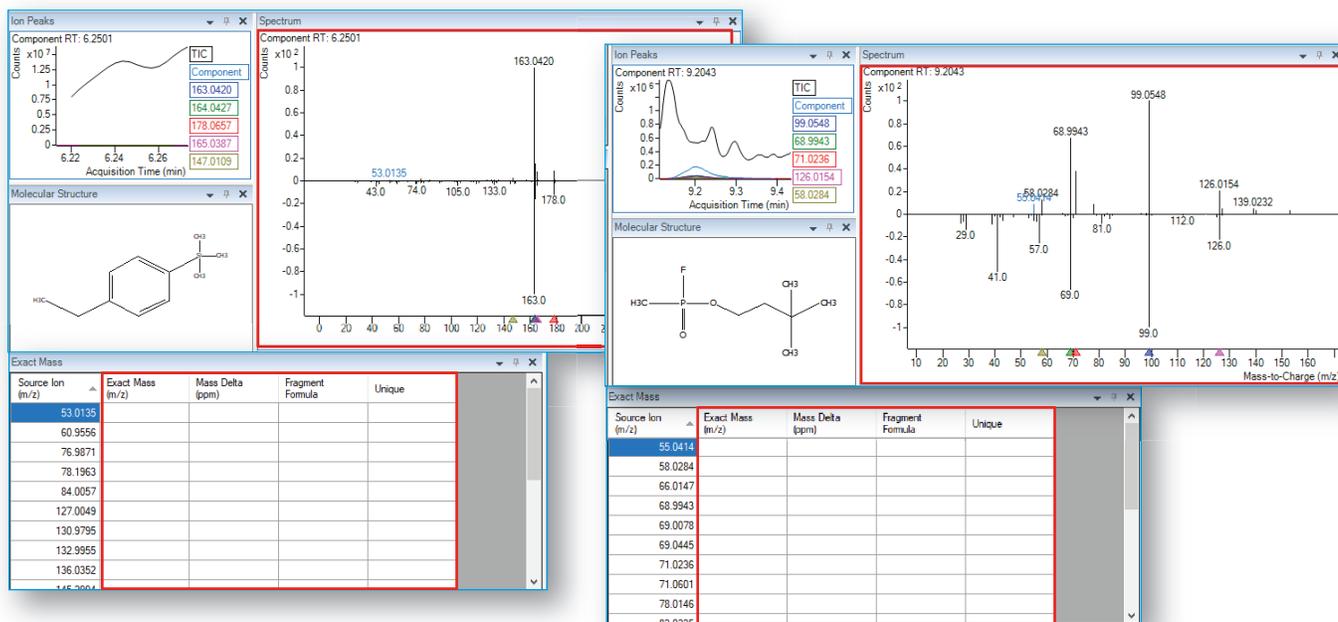


图 8. 借助 ExactMass 工具可以轻松识别的假阳性结果示例。注意 ExactMass 表为空并且镜像图中没有突出显示的离子。使用 NIST17 谱库进行谱库搜索

本研究比较了使用精确质量代谢组学 PCDL 的靶向筛查方法与使用 NIST17 和精确质量代谢组学 PCDL 的非靶向分析方法在血浆样品中鉴定得到的化合物数量（表 4）。在大多数情况下，使用精确质量代谢组学 PCDL 鉴定得到的化合物数量比使用 NIST 谱库得到的更多。然而，有趣的是，对于每种方法鉴定得到的特定化合物，靶向和非靶向方法具有互补性。

使用代谢组学 PCDL 库在血浆中可靠地鉴定出了一系列参与初级代谢和脂质代谢的极性和非极性代谢物，如表 5 所示。由于篇幅的原因，本文仅显示两种工作流程中谱库匹配得分大于 80 分的谱库匹配结果。

表 4. 使用单位质量和精确质量谱库（分别为 NIST17 和 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL）通过不同的筛查方法鉴定得到的化合物数量

样品名称	鉴定的化合物数量		
	筛查谱库	UA PCDL	UA NIST
样品 A	153	151	140
样品 B	149	146	144
样品 C	151	146	138
样品 D	152	146	143
样品 E	145	138	145
样品 F	141	141	139
样品 G	139	148	146
样品 H	164	144	147
样品 I	146	139	131
样品 J	152	148	136
样品 K	151	146	132
样品 M	168	151	140
样品 N	167	152	157

表 5. 使用 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL 通过靶向 (筛查谱库) 和非靶向 (UA) 方法在血浆中鉴定得到的化合物。该表仅显示两种方法中谱库匹配得分 > 80 的化合物鉴定结果

RT	化合物名称	衍生物分子式	UA 谱库 匹配得分	筛查谱库得分
6.48	硼酸	C ₉ H ₂₇ BO ₃ Si ₃	93.2	82.1
7.33	L-乳酸	C ₉ H ₂₂ O ₃ Si ₂	95.4	83.8
8.39	2-羟基丁酸	C ₁₀ H ₂₄ O ₃ Si ₂	96.7	99.6
8.78	对甲酚	C ₁₀ H ₁₆ OSi	85.3	99.6
8.85	L-亮氨酸	C ₉ H ₂₁ NO ₂ Si	81.3	98.5
8.85	3-羟基丁酸	C ₁₀ H ₂₄ O ₃ Si ₂	95.6	81.9
8.90	2-羟基-3-甲基丁酸	C ₁₁ H ₂₆ O ₃ Si ₂	92.2	92.6
9.58	2-酮基异己酸 2	C ₁₀ H ₂₁ NO ₃ Si	94.2	97.4
9.85	乙醇胺	C ₁₁ H ₃₁ NOSi ₃	97.6	98.9
10.14	苯甲酸	C ₁₀ H ₁₄ O ₂ Si	96.8	99.6
10.21	L-丝氨酸	C ₉ H ₂₃ NO ₃ Si ₂	98.0	98.8
10.40	磷酸	C ₉ H ₂₇ O ₄ PSi ₃	89.3	98
10.78	L-脯氨酸	C ₁₁ H ₂₅ NO ₂ Si ₂	93.8	99.7
10.89	甘氨酸	C ₁₁ H ₂₉ NO ₂ Si ₃	97.8	99.6
11.59	L-丝氨酸	C ₁₂ H ₃₁ NO ₃ Si ₃	96.0	99.2
11.64	壬酸	C ₁₂ H ₂₆ O ₂ Si	98.2	99.5
12.50	β-丙氨酸	C ₁₂ H ₃₁ NO ₂ Si ₃	94.3	99.3
12.90	羊脂酸	C ₁₃ H ₂₈ O ₂ Si	93.9	99.4
13.55	O-乙酰水杨酸	C ₁₃ H ₂₂ O ₃ Si ₂	87.9	99.5
13.69	L-谷氨酸 (无水)	C ₁₁ H ₂₃ NO ₃ Si ₂	99.1	98.9
13.81	L-谷氨酸	C ₁₁ H ₂₅ NO ₄ Si ₂	87.3	99.1
14.05	L-苯丙氨酸	C ₁₂ H ₁₉ NO ₂ Si	95.6	98.3
14.10	肌酸酐	C ₁₃ H ₃₁ N ₃ OSi ₃	86.3	99.3
14.32	α-羟基戊二酸	C ₁₄ H ₃₂ O ₅ Si ₃	94.9	80
14.64	焦稽酸	C ₁₅ H ₃₀ O ₃ Si ₃	83.3	82.7
14.86	L-谷氨酸	C ₁₄ H ₃₃ NO ₄ Si ₃	90.2	99.7
14.96	L-苯丙氨酸	C ₁₅ H ₂₇ NO ₂ Si ₂	98.1	99.1
14.98	4-羟基苯甲酸	C ₁₅ H ₂₂ O ₃ Si ₂	82.9	95.2
15.27	月桂酸	C ₁₅ H ₃₂ O ₂ Si	96.3	99.5
15.49	阿拉伯糖	C ₁₈ H ₄₅ NO ₅ Si ₄	96.8	85
15.90	3-吡啶硫酸酯	C ₁₄ H ₂₃ NO ₄ SSi ₂	91.5	86
16.13	3-(3-羟基苯基)丙酸	C ₁₅ H ₂₆ O ₃ Si ₂	80.9	99.6
16.38	L-鸟氨酸	C ₁₄ H ₃₆ N ₂ O ₂ Si ₃	96.0	98.1
16.48	核糖酸	C ₂₀ H ₅₀ O ₆ Si ₅	93.5	93.1
16.51	4-羟基-3-甲氧基苯甲酸	C ₁₄ H ₂₄ O ₄ Si ₂	92.7	99.8
16.86	壬二酸	C ₁₅ H ₃₂ O ₄ Si ₂	97.8	94.5
16.96	次黄嘌呤	C ₁₁ H ₂₀ N ₄ OSi ₂	91.1	93.8

RT	化合物名称	衍生物分子式	UA 谱库 匹配得分	筛查谱库得分
17.06	柠檬酸	C ₁₈ H ₄₀ O ₇ Si ₄	99.3	98.2
17.07	L-鸟氨酸	C ₁₇ H ₄₄ N ₂ O ₂ Si ₄	95.7	87.1
17.51	咖啡因	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	88.2	99.6
17.57	D-塔格糖 2	C ₂₂ H ₅₅ NO ₆ Si ₅	94.4	90.4
17.76	甘露糖 1	C ₂₂ H ₅₅ NO ₆ Si ₅	98.8	99.8
17.83	L-酪氨酸 1	C ₁₅ H ₂₇ NO ₃ Si ₂	84.7	84.8
17.87	D-葡萄糖 1	C ₂₂ H ₅₅ NO ₆ Si ₅	83.6	99.8
18.23	D-甘露醇	C ₂₄ H ₆₂ O ₆ Si ₆	98.6	80.8
18.26	葡萄糖醛酸 1	C ₂₁ H ₅₀ O ₇ Si ₅	92.7	82.1
18.34	L-酪氨酸 2	C ₁₈ H ₃₅ NO ₃ Si ₃	95.0	99.5
18.48	黑芥子硫苷酸钾	C ₂₂ H ₄₄ NO ₉ S ₂ Si ₄	87.2	85.1
18.48	肌醇	C ₂₄ H ₆₀ O ₆ Si ₆	88.0	82.5
18.59	吡啶-3-乙酸	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂ Si ₂	88.5	82.9
18.93	葡萄糖酸	C ₂₄ H ₆₀ O ₇ Si ₆	90.9	97.6
19.21	棕榈油酸	C ₁₉ H ₃₈ O ₂ Si	96.0	99.7
19.41	棕榈酸	C ₁₉ H ₄₀ O ₂ Si	97.2	99.9
19.41	环己甲酸	C ₁₀ H ₂₀ O ₂ Si	98.1	85.8
19.76	吡啶-3-丙酸	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂ Si ₂	83.4	84.6
19.80	环己烯四醇-β-环氧化物 2	C ₁₈ H ₃₈ O ₅ Si ₄	93.7	86.8
19.85	尿酸	C ₁₇ H ₃₆ N ₄ O ₃ Si ₄	96.4	99.7
20.58	吡啶-3-乳酸	C ₂₀ H ₃₅ NO ₃ Si ₃	89.0	93.5
20.89	L-色氨酸	C ₁₉ H ₃₀ N ₂ O ₃ Si ₂	80.3	83.9
20.96	N-乙酰基-L-色氨酸	C ₂₀ H ₃₆ N ₂ O ₂ Si ₃	83.4	81.9
21.00	油酸	C ₂₁ H ₄₂ O ₂ Si	97.9	99.9
21.22	硬脂酸	C ₂₁ H ₄₄ O ₂ Si	97.2	99.2
22.31	肾上腺酸	C ₂₅ H ₄₄ O ₂ Si	85.3	92
24.03	1-棕榈酸单甘油酯	C ₂₅ H ₅₄ O ₄ Si ₂	83.7	94.5
24.39	蔗糖	C ₃₆ H ₉₆ O ₁₁ Si ₈	94.5	96
24.46	山萘酸	C ₂₅ H ₅₂ O ₂ Si	82.4	95.7
25.15	麦芽糖 1	C ₃₇ H ₈₉ NO ₁₁ Si ₈	91.4	98.7
25.31	1-甘油单油酸酯	C ₂₇ H ₅₆ O ₄ Si ₂	87.3	96
25.47	单硬脂酸甘油酯	C ₂₇ H ₅₈ O ₄ Si ₂	84.9	97.4
25.79	角鲨烯	C ₃₀ H ₅₀	90.1	98.9
27.03	β-生育酚	C ₃₁ H ₅₆ O ₂ Si	90.6	99.7
27.98	α-生育酚	C ₃₂ H ₅₈ O ₂ Si	95.2	94.7
28.09	胆固醇	C ₃₀ H ₅₄ OSi	88.0	99.8
29.48	β-谷甾醇	C ₃₂ H ₅₈ OSi	92.2	98.6

结论

创建 Agilent Fiehn 精确质量代谢组学 PCDL 库并与 GC/Q-TOF 配套使用，使研究人员能够从代谢组学数据中对生物相关分子进行更可靠的谱图鉴定。本应用简报介绍了全面的精确质量代谢组学 PCDL 的创建和表征，该谱库涵盖一系列参与代谢通路的极性和非极性代谢物，以及一些通常存在于生物基质中的外源性物质。在 PCDL 库的创建过程中使用了 Agilent ChemVista，结合使用 PCDL 和 ChemVista 可以轻松实现进一步的管理和谱图整合。在靶向和非靶向工作流程中，使用通常分析的血浆基质展示了精确质量代谢组学 PCDL 的应用。与单位质量谱库相比，精确质量代谢组学 PCDL 通过结合精确质量碎片谱图和扩展的质量范围，确保更具特异性且更灵敏地检测基质中的代谢物，并实现基于精确质量的疑似物筛查工作流程。现在，通过将精确质量代谢组学 PCDL 整合到工作流程中，研究人员能够获益于更可靠的代谢物鉴定，并进一步提高从实验中得到有意义的生物学结论的能力。

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

仅供科研使用。不用于临床诊断用途。

RA44995.6218171296

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2023
2023 年 3 月 29 日，中国出版
5994-5832ZHCN

参考文献

1. Schauer, N. et al. GC-MS Libraries for the Rapid Identification of Metabolites in Complex Biological Samples. *FEBS Letters*. **2005**, 579(6), 1332-1337. DOI: 10.1016/j.febslet.2005.01.029
2. Stein, S. Mass Spectral Reference Libraries: an Ever-Expanding Resource for Chemical Identification. *Anal. Chem*. **2012**, 84(17), 7274-7282. DOI: 10.1021/ac301205z
3. Beale, D. J. et al. Review of Recent Developments in GC-MS Approaches to Metabolomics-Based Research. *Metabolomics*. **2018**, 14(11), 152. DOI: 10.1007/s11306-018-1449-2
4. Grapp, M.; Maurer, H. H.; Desel, H. Systematic Forensic Toxicological Analysis by GC-MS in Serum Using Automated Mass Spectral Deconvolution and Identification System. *Drug Test Anal*. **2016**, 8(8), 816-25. DOI: 10.1002/dta.1848
5. Mihaleva, V. V.; et al. Automated Procedure for Candidate Compound Selection in GC-MS Metabolomics Based on Prediction of Kovats Retention Index. *Bioinformatics*. **2009**, 25(6), 787-794. DOI: 10.1093/bioinformatics/btp056
6. Nieto, S. 等，使用高分辨率 GC/Q-TOF 和农药与环境污染物的扩展精确质量谱库进行污染物筛查，安捷伦科技公司应用简报，出版号 5994-1346ZHCN
7. Fiehn, O. Metabolomics by Gas Chromatography-Mass Spectrometry: the Combination of Targeted and Untargeted Profiling. *Curr. Protoc. Mol. Biol*. **2016**, 114: 30.4.1-30.4.32. DOI: 10.1002/0471142727.mb3004s114