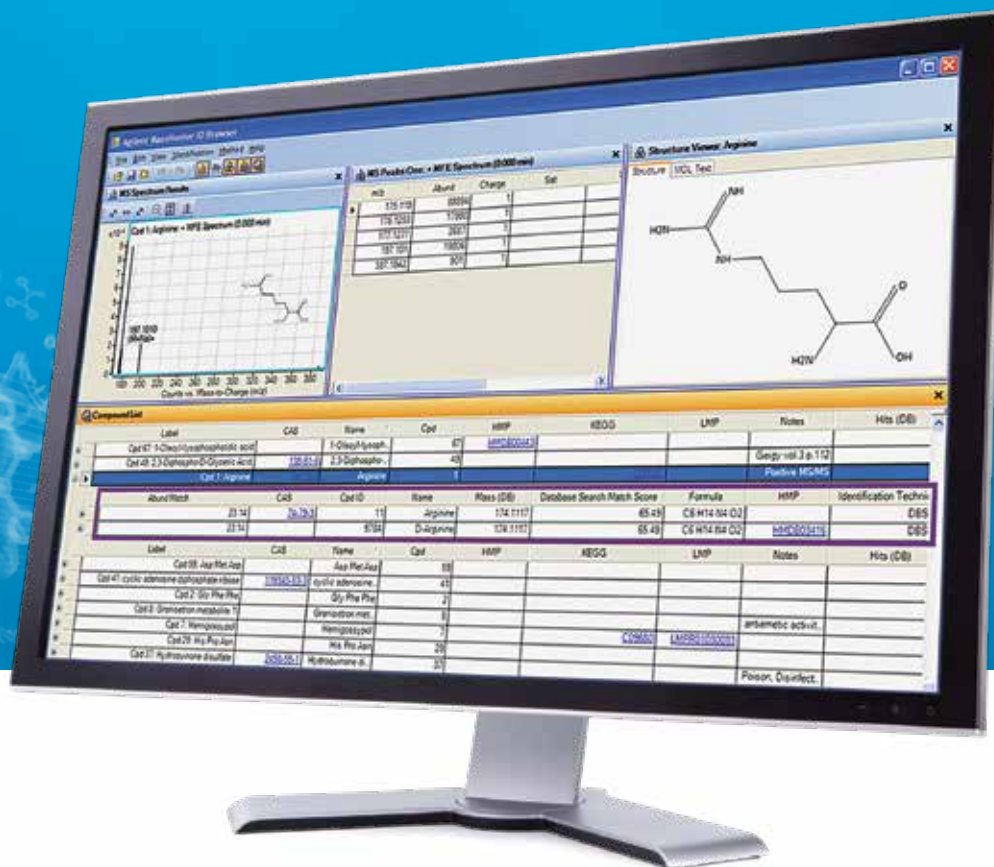


화합물 식별의 정확성을 향상시키는

Agilent METLIN Personal 대사체 데이터베이스와 라이브러리

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

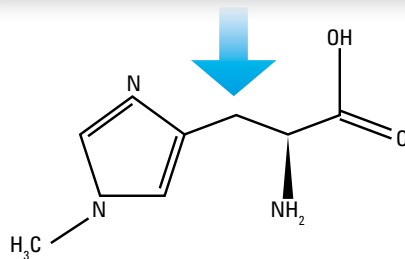
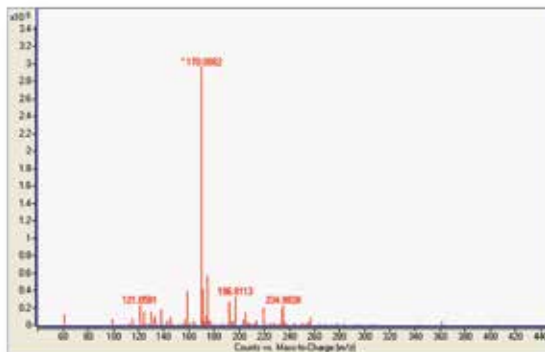
METLIN PCD 및 PCDL을 사용한 간편한 화합물 식별

Untargeted Metabolomics 실험의 핵심 요소인 화합물 식별을 통해 생물학적 시스템에서 발생하는 대사체 변화를 전체적으로 파악할 수 있습니다. 우수한 품질의 데이터베이스를 사용하여 분석하면 화합물 식별의 정확성을 향상시킬 수 있습니다. Gary Siuzdak 박사가 개발한 METLIN 대사체 데이터베이스는 현재 세계에서 가장 포괄적이고 일반적으로 사용하는 대사체 데이터베이스 중 하나입니다. METLIN 대사체 데이터베이스는 25,000개가 넘는 내인성 및 외인성 대사체, 지질, 디펩타이드(di-peptide) 및 트리펩타이드(tri-peptide)의 질량, 화학식 및 구조를 포함하고 있습니다.

Agilent Technologies는 **METLIN 대사체 Personal 화합물 데이터베이스 (Personal Compound Database, PCD)** 및 **METLIN 대사체 Personal 화합물 데이터베이스와 라이브러리(Personal Compound Database and Library, PCDL)**의 독점 공급 업체입니다. PC에서 PCD 및 PCDL을 사용하면 Metabolomics 연구 시, 더욱 신속하고 간편하게 다성분을 검색할 수 있습니다.

최신 METLIN PCD 버전은 머무름 시간을 포함한 679개의 화합물 데이터를 제공하여 정밀 질량과 머무름 시간 (AMRT)의 매칭을 통해 식별의 정확성을 높일 수 있습니다. METLIN PCDL은 Agilent Technologies와 Gary Siuzdak 박사의 협력 작업을 통해 개발된 2,278개 화합물의 Accurate Mass Q-TOF MS/MS 기준 스펙트럼을 포함하고 있습니다. 이렇게 제공된 MS/MS 라이브러리 스펙트럼 매칭을 통해 더욱 정확하게 화합물을 식별할 수 있습니다.

Glutamine
NAD⁺ Pyruvate CoA
cis-Aconitate Glutamate
GDP Acetyl CoA
Citrate Histidine α-Ketoglutarate GTP
Arginine Alanine Oxaloacetate
FAD NADH FADH₂
Isocitrate Proline



METLIN 대사체 Personal 화합물 데이터베이스(PCD) 및 METLIN 대사체 Personal 화합물 데이터베이스와 라이브러리 (PCDL)를 사용하면 Metabolomics 연구 시, 더욱 신속하고 간편하게 다성분을 검색할 수 있습니다.

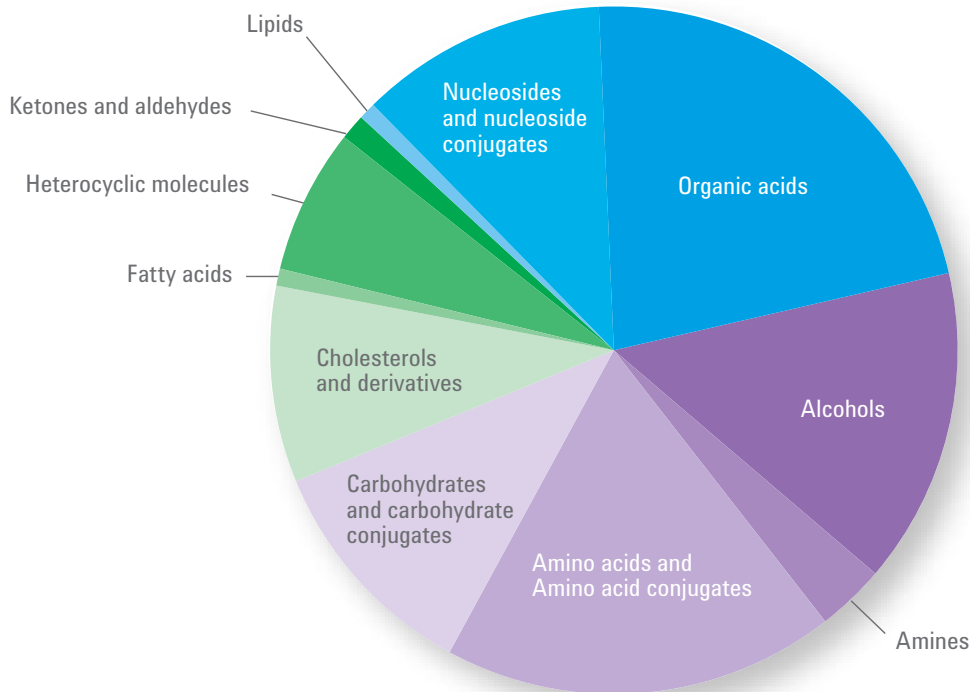
정밀 질량과 머무름 시간 매칭을 통한 식별의 정확성 향상

정밀 질량 매칭(Accurate Mass Matching)은 Metabolomics 연구에서 화합물을 식별하기 위한 가장 일반적인 분석법입니다. 하지만 이러한 질량 정보만으로는 화합물을 정확하게 식별할 수 없습니다. 따라서 정밀 질량과 머무름 시간 매칭을 결합하면 더욱 정확하게 화합물을 식별할 수 있습니다.

METLIN 대사체 PCD에는 표준화된 크로마토그래피 조건을 사용하여 세밀하게 측정된 679개의 화합물에 대한 머무름 시간이 포함되어 있습니다. 여기에 사용된 표준화 분석법에는 대부분의 대사체에 적용되는 단순 선형 그레디언트와 역상 분리 방식이 사용되었습니다.

역상 분석법은 양이온 모드 및 음이온 모드 이온화뿐만 아니라 전자 분무 이온화(ESI) 및 대기압 화학 이온화(APCI)에도 사용됩니다. 여기서 주목할 만한 점은 동종의 서로 다른 3개의 LC/MS 시스템 및 동종의 서로 다른 3개의 컬럼을 사용하여 각각의 화합물에서 추출한 이온 크로마토그램을 화학자가 검증한 뒤, 머무름 시간을 METLIN PCD에 추가했다는 사실입니다. 다양한 시료 유형에 대한 응용성을 검증하기 위해 다양한 시료 매트릭스를 대상으로 여러 가지 분석법으로 테스트했습니다.

METLIN PCD에 등록된 대부분의 화합물은 화학식과 구조가 모두 목록화되어 있으므로 간편하게 추가 정보를 찾을 수 있습니다. 등록된 화합물 항목에는 CAS, HMDB, LMP 및 KEGG 식별자를 포함하고 있을 뿐 아니라 PubChem, Human Metabolome Database, Lipid Maps, Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes 데이터베이스 항목의 웹 링크를 포함하고 있습니다. 또한 특정 화합물, 머무름 시간 및 MS/MS 스펙트럼을 추가하여 METLIN PCD를 맞춤형으로 제작할 수 있습니다. 실험 전반을 트래킹하기 위해 안정 동위 원소로 표시되어 있는 대사체의 항목을 생성하고, 데이터베이스에 등록되지 않은 질량을 추가합니다.



HMDB 분류법을 사용한 METLIN PCD 데이터베이스의 대사체 분류

MS/MS 매칭을 통한 식별의 정확성 향상

정밀 질량값과 머무름 시간 매칭만으로도 대부분의 화합물을 매우 정확하게 식별할 수 있지만, MS/MS 라이브러리 검색 기능을 추가하면 크로마토그래피의 사용 없이 더욱 정확한 화합물 식별이 가능합니다. 따라서 대사체를 더욱 정확하게 식별하기 위해 METLIN 대사체 Personal 화합물 데이터베이스(PCD)에 2,278개의 화합물 MS/MS 스펙트럼을 추가하여 METLIN 대사체 Personal 화합물 데이터베이스와 라이브러리(PCDL)를 개발하였습니다. METLIN PCDL에는 정밀 질량 MS/MS 라이브러리 검색 기능을 추가하여 대사체를 식별합니다. METLIN PCDL에서 미지 성분과 고품질의 스펙트럼을 매칭시키면 다른 공개 데이터베이스 사용 시 매칭되지 않았던 화합물 식별의 정확성이 일정 수준 이상으로 높아집니다.

METLIN PCDL의 경우 Metabolomics 분야에서 발생하는 문제를 해결할 수 있는 MS/MS 스펙트럼 라이브러리를 만들기 위해 포괄적인 접근법을 사용합니다. 재현성을 향상시키기 위해 여러 대의 Agilent Q-TOF LC/MS 기기에 ESI 소스를 사용하여 화합물로부터 라이브러리 항목을 생성합니다. 일반적으로 대부분의 대사체는 하나의 모드에서만 이온화되거나, 하나의 극성에서 약하게 이온화되고 다른 극성에서는 강하게 이온화되므로 양이온과 음이온 모드에서 스펙트럼을 수집하였습니다. 쉽게 조각화되는 화합물도 있지만 일부 화합물의 경우 식별에 필요한 충분한 조각 이온을 생성하려면 더 많은 조각화 에너지가 요구되므로 10 eV, 20 eV 및 40 eV의 세 가지 충돌 에너지로 스펙트럼을 수집합니다.

METLIN PCDL의 모든 스펙트럼 데이터는 엄격한 품질 관리를 통해 유용하고 우수한 품질의 스펙트럼만 포함하고 있습니다. 따라서 이 스펙트럼 라이브러리를 사용하면 매우 정확한 대사체 식별을 할 수 있습니다. 측정된 각 조각 이온은 화합물의 MS/MS 라이브러리에 할당되기 전에 맞춤형 소프트웨어를 사용하여 테스트되었고, 스펙트럼에 추가되기 전에 이론 질량에 따라 수정되었습니다. 그리고 라이브러리에서 원래 MS/MS 스펙트럼을 검색하여 예상되는 대사체와의 매칭 여부를 확인합니다. 마지막으로 라이브러리에서 불량 MS/MS 스펙트럼을 제거하기 위해 화학자가 검색 결과를 검토합니다.

식별의 정확성 증가

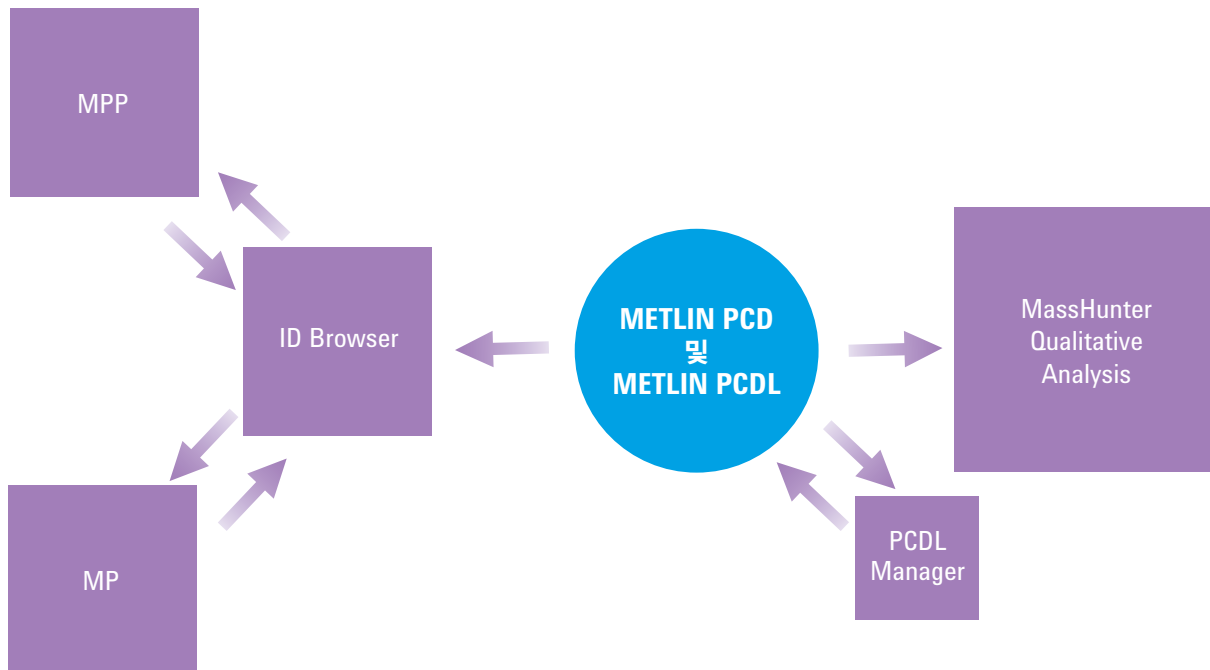


직교 정보(orthogonal information)를 추가하면 화합물을 더욱 정확하게 식별할 수 있습니다.

METLIN 대사체 PCD 및 PCDL의 뛰어난 기능이 내장된 소프트웨어

대사체 데이터베이스 정보는 대사체 식별의 정확성 향상에 매우 중요한 역할을 하고 있습니다. 애질런트의 소프트웨어를 사용하면 타사의 소프트웨어 도구와는 비교할 수 없는 간편한 방법으로 Metabolomics 화합물을 간편하게 식별할 수 있습니다. Agilent LC/MS 소프트웨어 도구는 METLIN 대사체 PCD 및 PCDL의 콘텐츠와 완벽하게 통합되어 단일 및 배치 (batch) 모드에서 쉽고 빠르게 화합물을

매칭하여 화합물 중심으로 데이터를 검토하므로 화합물 식별을 신속하게 할 수 있습니다. 또한 효율적인 데이터베이스 관리 도구를 사용하여 맞춤형 데이터베이스와 라이브러리를 편집하고 실험실에서 작업한 내용을 추가할 수 있습니다. 데이터베이스 검색으로 표시된 KEGG, CAS, HMDB, LMP 및 METLIN 번호와 연결된 하이퍼링크를 클릭하면 웹 기반 데이터베이스에서 추가 정보를 확인할 수 있습니다.



소프트웨어 도구에는 METLIN PCD 및 PCDL의 뛰어난 기능이 내장되어 있습니다.

Agilent LC/MS 소프트웨어 도구는 METLIN PCD 및 PCDL 콘텐츠와 완벽하게 통합되어 신속하고 간편하게 화합물을 매칭할 수 있습니다.

MPP: Mass Profiler Professional 소프트웨어, MP: Mass Profiler 소프트웨어. 화살표는 콘텐츠 플로우를 표시

데이터 관리와 검색 기능에 적합하게 설계된 도구

MassHunter Qualitative Analysis

MassHunter Qualitative Analysis는 화합물 식별에 일반적으로 사용되는 MassHunter Workstation 소프트웨어 제품군의 구성요소 중 하나로 Untargeted Metabolomics 데이터 분석에 필요한 주요 도구입니다.

MassHunter Qualitative Analysis를 사용하면 화합물과 MS/MS 스펙트럼 정보를 추출할 수 있습니다. 정밀 질량, 머무름 시간, 동위 원소 패턴 및 MS/MS 데이터를 사용하여 화합물을 검색하면 최고의 정확성으로 대사체를 식별할 수 있습니다. 그리고 다성분 화합물 자동 검색과 단일 스펙트럼 및 화합물 수동 검색이 모두 가능합니다.

PCD 데이터베이스나 PCDL MS/MS 라이브러리를 사용하여 검색할 때에도 스펙트럼에 식별된 화합물의 구조가 적혀 있는 주석이 포함됩니다. MassHunter Qualitative Analysis는 MS/MS 식별 시 최적의 도구로, 사용하기 편리할 뿐만 아니라 화합물 중심의 데이터를 제공하므로 신속하게 검토 작업을 수행할 수 있습니다.



화합물 식별에 일반적으로 사용되는 MassHunter Workstation 소프트웨어 제품군의 구성요소 중 하나인 MassHunter Qualitative Analysis는 정밀 질량, 머무름 시간, 동위 원소 패턴 및 MS/MS 데이터를 사용하여 최고의 대사체 식별 정확성을 제공합니다.

ID Browser

ID Browser는 널리 사용되는 Agilent Mass Profiler(MP) 및 Mass Profiler Professional(MPP) 소프트웨어 패키지의 구성품입니다. ID Browser는 신속하고 효율적인 Metabolomics 연구를 위해 단일 및 배치 검색 모드로 정밀 질량, 머무름 시간 및 동위 원소 패턴 매칭을 사용하여 화합물을 식별합니다. ID Browser로 검색된 각 질량에 대해 가장 적합한 데이터베이스 매칭을 나열한 후, 다양한 가능성을 검토할 수 있으며 필요할 경우 검색 결과를 다시 정의합니다. ID Browser는 MP와 MPP 소프트웨어에 검색 결과를 입력하는 경우 머무름 시간 및 질량 목록을 자동으로 주석의 형태로 포함시킵니다.

PCDL Manager

PCDL Manager를 사용하면 METLIN 대사체 PCD 및 PCD의 큐레이트 또는 수정을 통해 연구 목적을 달성할 수 있습니다. METLIN PCD 또는 PCD를 PCDL Manager와 함께 사용하면 데이터베이스 콘텐츠의 완벽한 관리와 함께, 작업 내용을 철저히 보안하여 실험실에서 지적 재산권을 보호할 수 있습니다. 또한 고유 화합물, 머무름 시간 및 MS/MS 스펙트럼을 추가하여 METLIN PCD

및 PCDL을 맞춤형으로도 구성할 수 있습니다. PCDL Manager는 PCD 및 PCDL 모두에서 텍스트, 화학식, 정밀 질량 및 머무름 시간으로 화합물 검색 범위를 제한합니다. PCDL 환경에서 MS/MS 스펙트럼을 검색, 브라우징 및 클린업할 수 있으며, 웹 사이트에 연결된 링크를 클릭하여 화합물에 대한 더욱 자세한 정보를 검색할 수 있습니다.

MS 스펙트럼 결과
MS 항목
구조 뷰어

The screenshot displays the Agilent MassHunter ID Browser interface. It features three main panels at the top: 'MS Spectrum Results' showing a mass spectrum for Arginine with a peak at m/z 197.1010, 'MS Peaks One: MFE Spectrum (0.000 min)' listing peaks with their m/z, abundance, and charge, and 'Structure Viewer: Arginine' showing the chemical structure of Arginine. Below these is a 'Compound List' table with columns for Label, CAS, Name, Cpd, HMP, KEGG, LMP, Notes, and Hits (DB). A specific entry for Arginine is highlighted, showing its CAS number (26-78-3) and other identifiers.

Label	CAS	Name	Cpd	HMP	KEGG	LMP	Notes	Hits (DB)
Cpd 67: 1-Oleoyl-Hyosphosphoric acid		1-Oleoyl-Hyosph.	67	NM000043				
Cpd 49: 2,3-Diphospho-D-Glycemic Acid	128-81-8	2,3-Diphospho-	49				Geigy vol. 3 p. 112	
Cpd 1: Arginine		Arginine	1				Positive MS/MS	
Abund Match	CAS	Cpd ID	Name	Mass (DB)	Database Search Match Score	Formula	HMP	Identification Techni
23.14	26-78-3	11	Arginine	174.1117	65.43	C6 H14 N4 O2		DBS
23.14		5784	D-Arginine	174.1117	65.43	C6 H14 N4 O2	NM000043	DBS
Label	CAS	Name	Cpd	HMP	KEGG	LMP	Notes	Hits (DB)
Cpd 59: Asp Met Asp		Asp Met Asp	59					
Cpd 41: cyclic adenosine diphosphate ribose	119340-53-3	cyclic adenosine..	41					
Cpd 2: Gly Phe Phe		Gly Phe Phe	2					
Cpd 8: Granisetron metabolite 1		Granisetron met.	8				antibiotic activit..	
Cpd 7: Hemigossypol		Hemigossypol	7	C06630	LMFB0103003			
Cpd 28: His Pro Aan		His Pro Aan	28					
Cpd 37: Hydroquinone disulfate	2458-56-1	Hydroquinone d..	37				Poison, Disinfect.	

화합물 목록

ID Browser는 신속하고 효율적인 Metabolomics 연구를 위해 단일 및 배치 검색 모드로 정밀 질량, 머무름 시간 및 동위 원소 패턴 매칭을 사용하여 화합물을 식별합니다.

추가 정보

www.metabolomics-lab.com

온라인 구매

www.agilent.com/chem/store

국가별 애질런트 고객 센터 찾기

www.agilent.com/chem/contactus

미국 및 캐나다

1-800-227-9770

agilent_inquiries@agilent.com

유럽

info_agilent@agilent.com

아시아 태평양

inquiry_lsca@agilent.com

이 발간물은 연구용으로만 사용하십시오.
이 발간물에 포함된 정보, 설명 및 제품 사양은
사전 공지 없이 변경될 수 있습니다.

애질런트 테크놀로지스는 이 발간물에 포함된
오류, 이 발간물의 제공, 이행 또는 사용과
관련하여 발생한 부수적인 또는 결과적인
손해에 대해 책임을 지지 않습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2012
2013년 6월 한국에서 인쇄
5990-7854K0

서울 강남구 역삼로 542 신사제2빌딩 2층 우)135-848
경기도 수원시 영통구 권광로 511 나노소자특화팹센터(KANC) 9층 우)443-270
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부
고객지원센터 080-004-5090 www.agilent.co.kr



Agilent Technologies