

可靠的代谢物鉴定

Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库

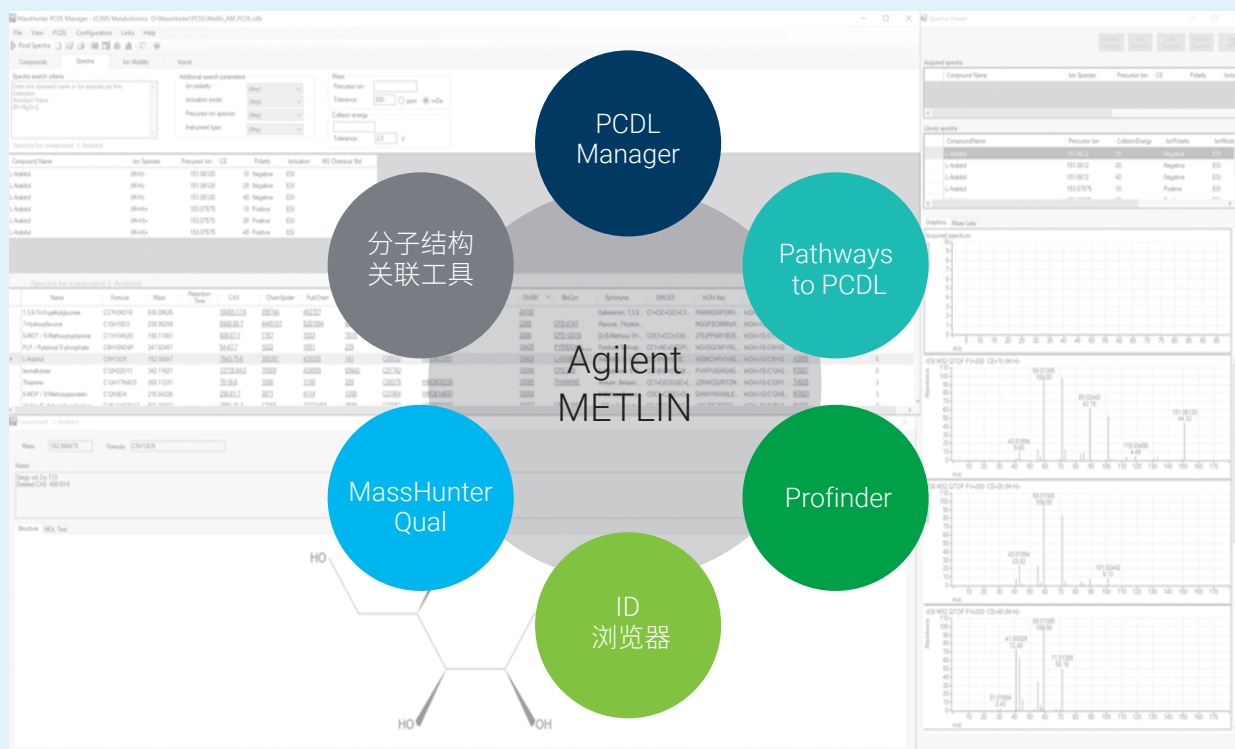


Agilent METLIN — 为研究代谢组学而开发



代谢物鉴定是发现代谢组学实验的关键要素，旨在了解生物系统中可能发生的全局代谢变化。鉴定的可信度直接取决于用于代谢物鉴定的数据库质量。Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库经过高度优化，可提供出色可信度，是使用较多和较广的代谢物数据库。它也是安捷伦广泛的软件工具组合中不可或缺的一员，用以应对发现代谢组学实验的需要。

代谢物鉴定的完整工作流程



MassHunter MSC (分子结构关联工具) — 将精确质量数 MS/MS 碎片离子与分子结构相关联

PCDL Manager — 通过添加保留时间、代谢物、碰撞截面或 MS/MS 谱图来编辑您的个性化数据库

Agilent Pathways to PCDL — 创建通路特异性数据库，以导向目标代谢物通路

Profinder (包括 VistaFlux) — 提取用于目标分析和代谢流分析工作流程的目标代谢物

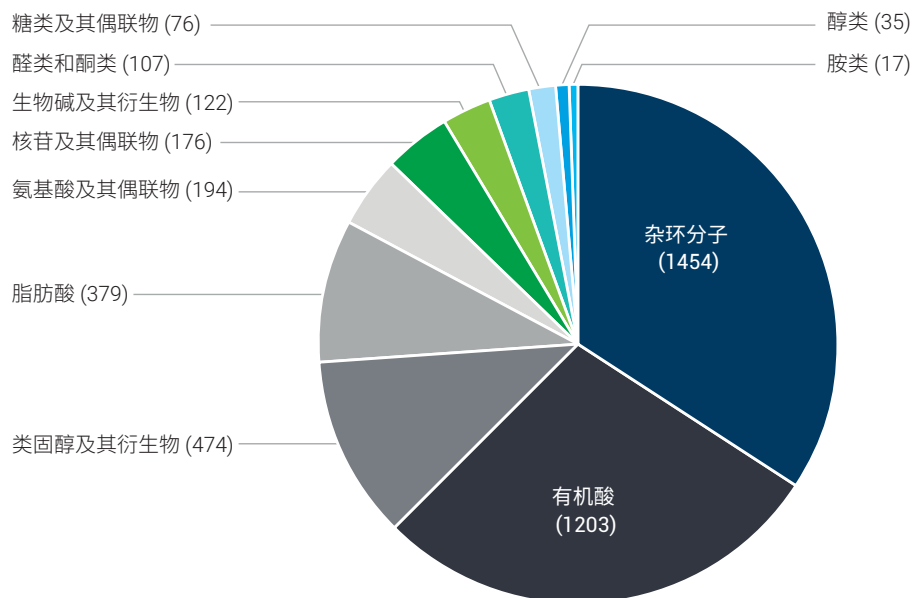
ID 浏览器 — 通过在差异分析后与 Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库进行匹配，并使用精确质量数、保留时间、同位素模式匹配、碰撞截面或 MS/MS 谱图进行代谢物鉴定

MassHunter 定性分析 — 通过与 Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库进行匹配，并使用精确质量数、保留时间、同位素模式匹配或 MS/MS 谱图进行代谢物鉴定。使用从用户采集的数据向 Agilent METLIN 代谢组学谱库添加自定义 MS/MS 谱图

来自高质量内容的可靠结果



Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库是综合 MassHunter 产品组合中不可或缺的一员，可以帮助可靠地鉴定与您研究相关的一系列代谢物。



Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库包含各种代谢物。上面的饼图展示了基于 HMDB 分类方案的数据库中非脂类代谢物的分布。该图中不包含 Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库中的 38000 种脂类

可靠鉴定

提高化合物鉴定数据的可信度

精确质量数
(AM)

AM +
同位素模式
(IP)

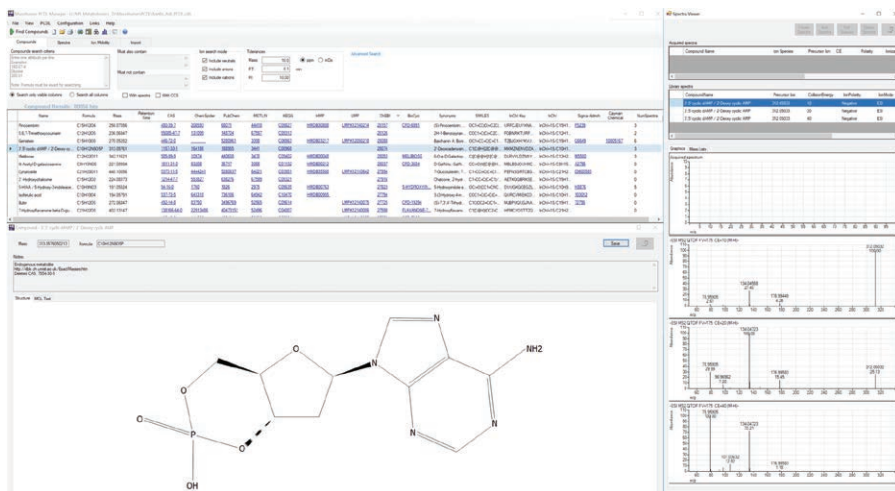
AM +
保留时间
(AMRT) + IP

MS/MS

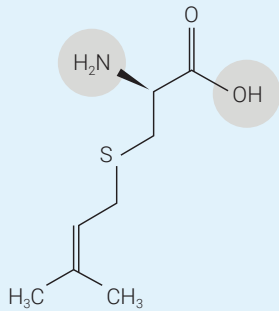
AMRT +
MS/MS

增加的正交信息可提高化合物鉴定的可信度

可利用高质量数据库和谱库为您的代谢物研究提供不同的鉴定可信度。根据您的需要，Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库可作为一个综合代谢物数据库 (PCD)，该数据库可选择包含 MS/MS 谱图 (PCDL)。通过将 MS/MS 谱图匹配与精确质量数、同位素模式和保留时间相结合，可达到更高的可信度。

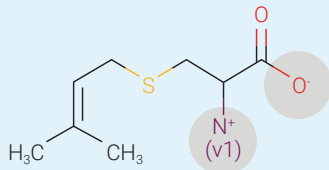


Agilent MassHunter 定性分析工作流程，显示通过数据库搜索获得的化合物鉴定结果，所使用的数据库为包含结构、代谢物标识符、CAS 和注释的 Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库。将 Agilent METLIN 代谢组学数据库和谱库与 ID 浏览器配合使用也同样能获得高质量的结果



Agilent METLIN PCDL

METLIN ID: 62914
 质量数 189.082349
 分子式: $C_8H_{15}NO_2S$
 HMDB12286



公共数据库条目

METLIN ID: 62914
 质量数 186.058874323
 分子式: $C_8H_{12}NO_2S$
 HMDB12286

公共数据库中错误的分子式无法识别正确的代谢物

精确、高质量的代谢物数据库

研究的成功取决于是否正确鉴定代谢物，Agilent METLIN 代谢物数据库经过高度优化，可以避免这些问题。作为优化流程的一部分，数据库分子式条目经过校正以匹配观测到的 ESI 数据。

优化的 MS/MS 谱库

通过 MS/MS 谱图匹配来鉴定代谢物，首先需要将观测到的质量数和数据库进行对比，然后再对比 MS/MS 碎裂模式。将 Agilent METLIN 代谢组学谱库中的谱图校正到它们的理论精确质量数，以使用更窄的质量容差窗口。而更窄的质量容差窗口可以限制不必要的鉴定，使用户获得更成功的结果。

Agilent METLIN*	公共数据库	公共数据库误差 (ppm)
41.00329	41.0017	38.74
43.01894	43.0190	-1.43
71.01385	丢失	
89.02442	89.0205	44.01

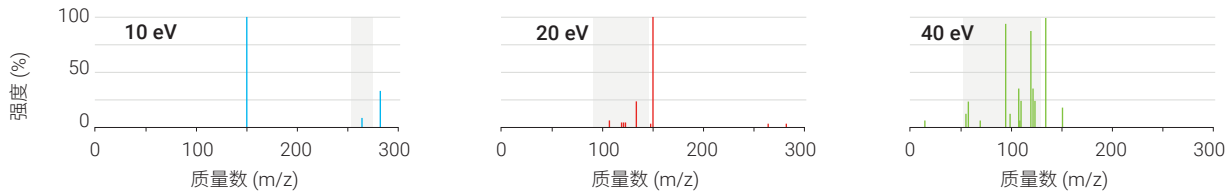
* Agilent METLIN 质量误差为 0

安捷伦的优化流程也要求一级碎片离子要有足够强度，以确保低丰度碎片离子包含在 MS/MS 谱图中，从而确保 MS/MS 谱图质量。鉴于许多代谢物仅产生少量的碎片离子，因此包含可靠的低强度碎片离子显得尤为重要。如上表显示的 D-乳酸，公共数据库条目不仅质量误差大，而且丢失了 3 个碎片离子中的其中 1 个 (89.02442 为母离子)。

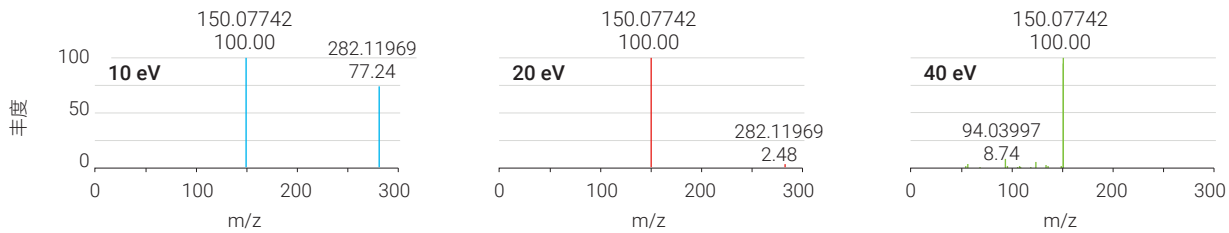
真实 MS/MS 谱图提供更可靠的鉴定

Agilent METLIN 代谢组学谱库包含高质量的真实 MS/MS 谱图，与基于电脑模拟 MS/MS 谱图的谱库对比，可以提供更加可靠的鉴定。碎片离子相对丰度的细微差别可以导致预测谱图和观测谱图间的巨大差异。

电脑模拟 MS/MS 1-甲基腺苷 MID: 6888 电脑模拟预测谱图



Agilent METLIN – 真实 MS/MS 谱库谱图



1-甲基腺苷在 Agilent METLIN 数据库中的真实 MS/MS 谱图和广泛使用的公共数据库中预测的 MS/MS 谱图的对比。电脑模拟 MS/MS 谱图中的阴影区域突出显示了预测谱图和观测谱图之间存在显著差异的部分。

了解更多信息：

www.agilent.com/lifesciences/metabolite

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

仅限研究使用。不可用于诊断目的。

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，2018

2018年4月3日，中国出版

5990-7854ZHCN

1.0 版

