Fiehn GC/MS 代谢组学 RTL 谱库

鉴定更多代谢产物

The Measure of Confidence



Agilent Technologies



用于代谢产物鉴定的全面 GC/MS 解决方案

为了通过非靶向代谢组学进一步简化已知代谢产物的鉴定，安捷伦科技公司现推出 Fiehn GC/MS 代谢组学 RTL 谱库（2013 版）。这一更新的保留时间锁定 (RTL) 代谢组学谱库是与 Oliver Fiehn 博士实验室合作开发的。它包含 1400 项可检索的 GC/MS EI 谱图和保留时间指数，比 2008 版多出大约 40%。

Fiehn GC/MS 谱库的重要特点包括：

鉴定能力更强 — 采用改进的色谱方法以及改善的硬件配置，能够鉴定更多的化合物

谱库内容进一步扩展 — 包含 900 种常见代谢产物的 1400 多项 GC/MS EI 谱图和保留时间指数

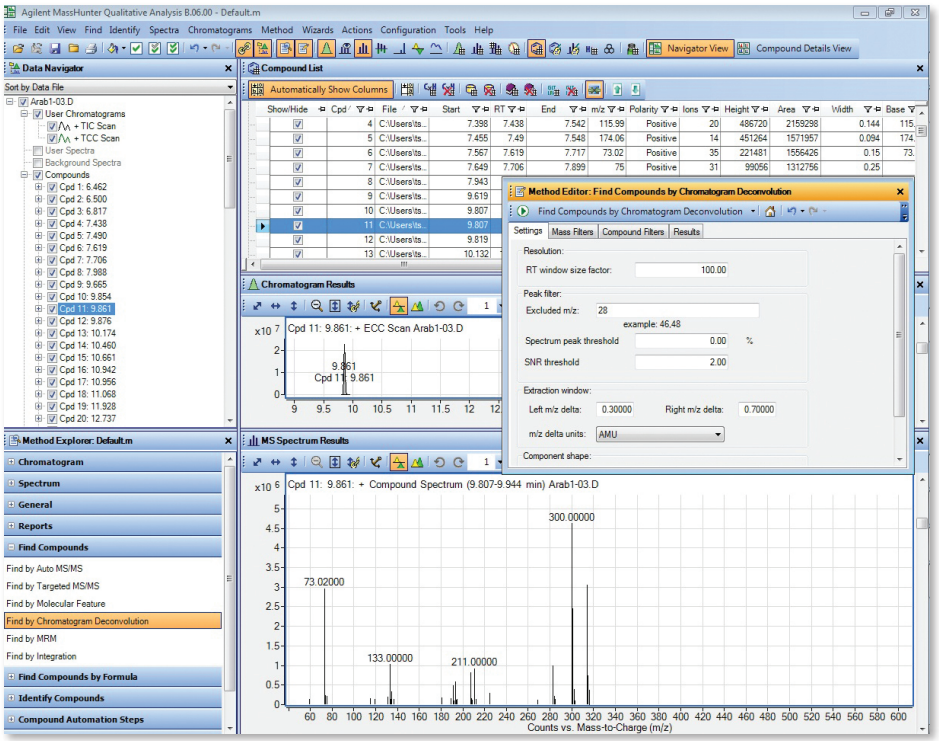
简便易用的工作流程 — 提供完整、预编程的 GC/MS 分析方法和说明文档，最大程度提高研究效率

软件功能强大 — 全面支持 MassHunter 软件、ChemStation 数据分析软件和 AMDIS 软件

最全面的代谢组学 GC/MS 谱库

扩展的谱库可鉴定更多化合物

Fiehn GC/MS 代谢组学 RTL 谱库（2013 版）是市面上最全面的代谢组学 GC/MS 谱库。这一不断扩展的谱库目前包含大约 900 种常见代谢产物的 1400 多项数据，包括那些并不总是完全衍生的部分衍生化代谢产物。其中每一项都包括可检索的 EI 谱图和保留指数。还包括天然分子的名称和 CAS 号，以便于更快识别化合物及进行后续的资料或软件检索。



Agilent MassHunter 定性分析软件支持 GC/MS 数据文件的峰查找，然后通过谱库匹配鉴定化合物

利用气相色谱反吹获得更高质量的数据

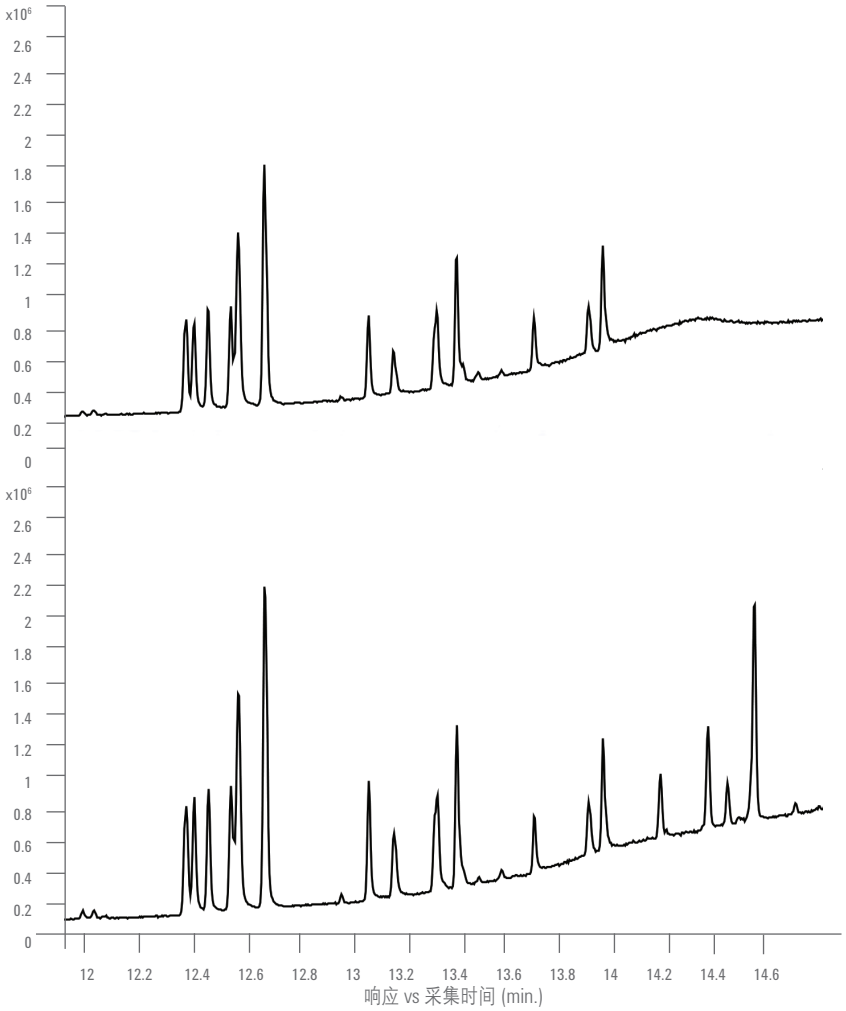
利用反吹功能提高数据采集的分析完整性

安装压力控制三通 (PCT) 能够获得更高的分析效率、更高质量的数据，还能简单快速地维护关键的气相色谱组件。例如，对于高沸点组分（如甘油三酯、胆固醇、大分子脂类）等后流出的化合物，通过“反吹”能够将这些化合物从色谱柱里除去，以免其损伤质谱离子源或是与下次分析产生交叉污染。这样可以保护色谱柱固定相和质谱离子源，从而使数据采集具有更高的分析完整性。

- 稳定的保留时间
- 易于维护；进样口维护无需放真空
- 减少运行之间的交叉污染

稳定耐用的方法

Fiehn GC/MS 谱库利用保留时间指数和 RTL，使您对检索结果充满信心。通过保留时间指数和使用保留阶梯化合物（即保留时间间隔较大的混合内标物），即便对方法做出重大更改，也可以将色谱保留时间作为独立的判断标准。将 RTL 纳入方法能够减少运行之间的保留时间差异，还可降低使用保留时间阶梯化合物（诸如 FAMES）的频率。

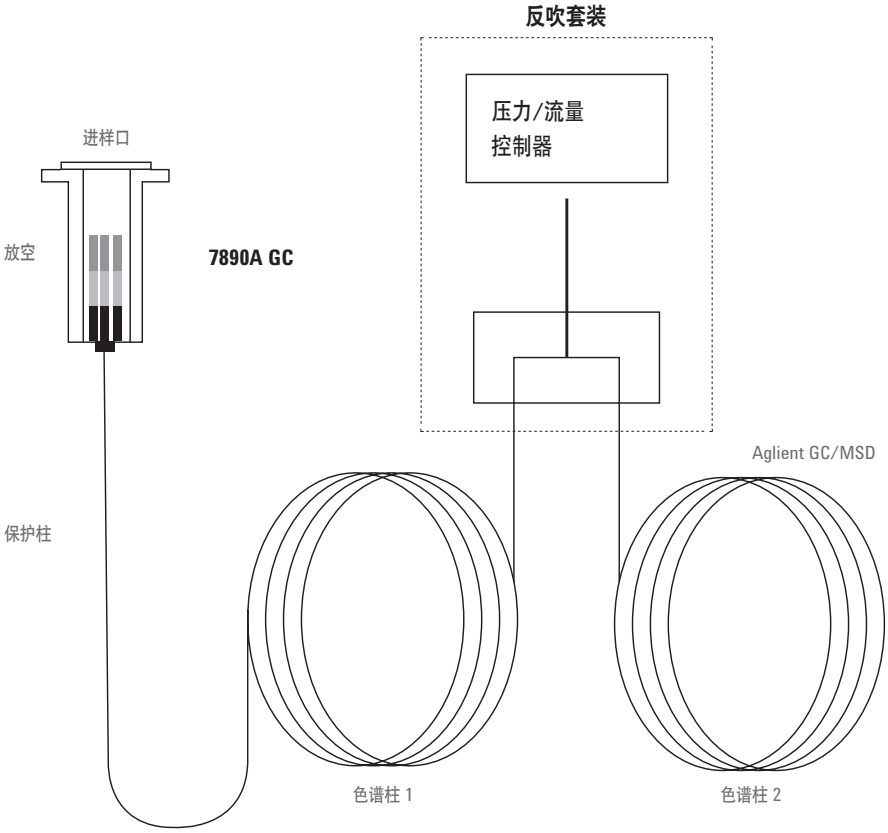


全新的“反吹”方法便于选择性去除后流出的化合物。色谱图显示了采用该技术的两次运行结果，其中上图通过参数优化选择性去除了胆固醇

安捷伦全面的 GC/MS 代谢组学解决方案套装

安捷伦出品了各种套件、色谱柱和专用连接部件，可帮助您高效快速地完成代谢组学工作流程：

- 带压力控制三通的快速通用 GC/MS 反吹套装（部件号 G1472A）
- 保护柱：经脱活，内径 0.32 mm，长约 1.5 m（部件号 160-2325-10）
- 色谱柱 1 和 2： DB-5ms UI 柱，15 m x 0.25 mm（内径）x 0.25 µm（部件号 122-5512UI）
- Agilent Fiehn GC/MS 代谢组学标准品套装（部件号 400505）

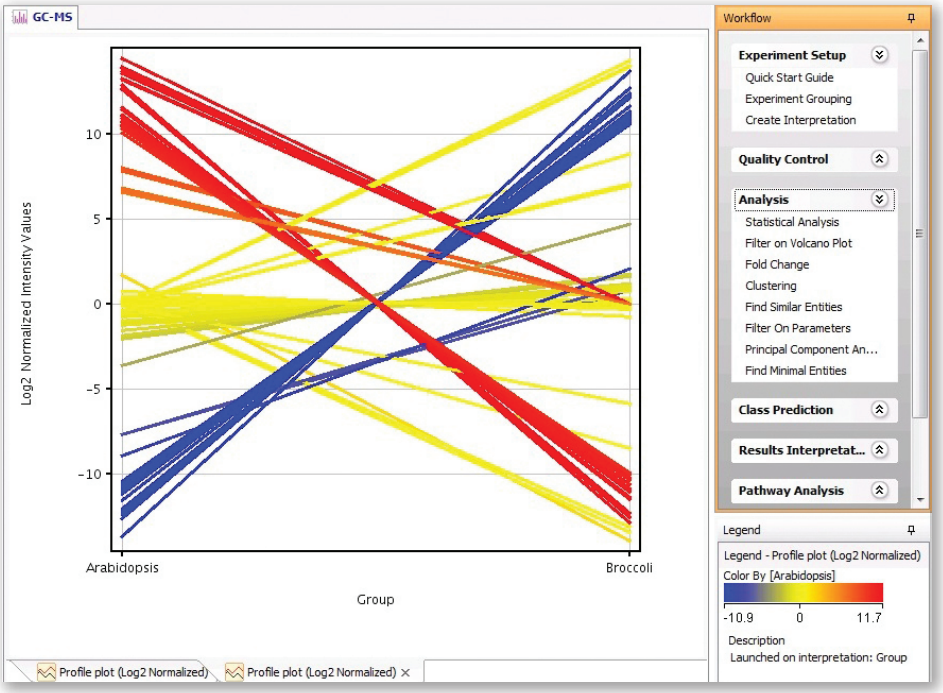


通过压力控制三通 (PCT) 将两根气相色谱柱分开以实现反吹控制

通过 MASS PROFILER PROFESSIONAL 软件轻松分析并查看 GC/MS 结果

完整的工作流程助推研究成功

除了可以通过谱库检索来查找和鉴定代谢产物以外，Fiehn GC/MS 谱库的其他特性还能够助您完成非靶向代谢组学研究的整个工作流程。借助 MassHunter 定性分析软件的特征寻找功能，可以保存 .xml 格式的文件并将其轻松导入 MPP 以进行差异分析。



可将 GC/MS 分析结果导入 MPP。图形清楚显示了拟南芥与花椰菜代谢物之间的丰度差异

通路分析助力生物学解析

将安捷伦通路构建模块与 MPP 配合使用时，可构建单实验分析 (SEA) 或多组学分析 (MOA) 工作流程，用于找到与您实验的目标分子列表匹配的化合物作用通路。

强大的数据分析能力和快速、灵活、高通量的检索功能

直观且强大的数据分析能力

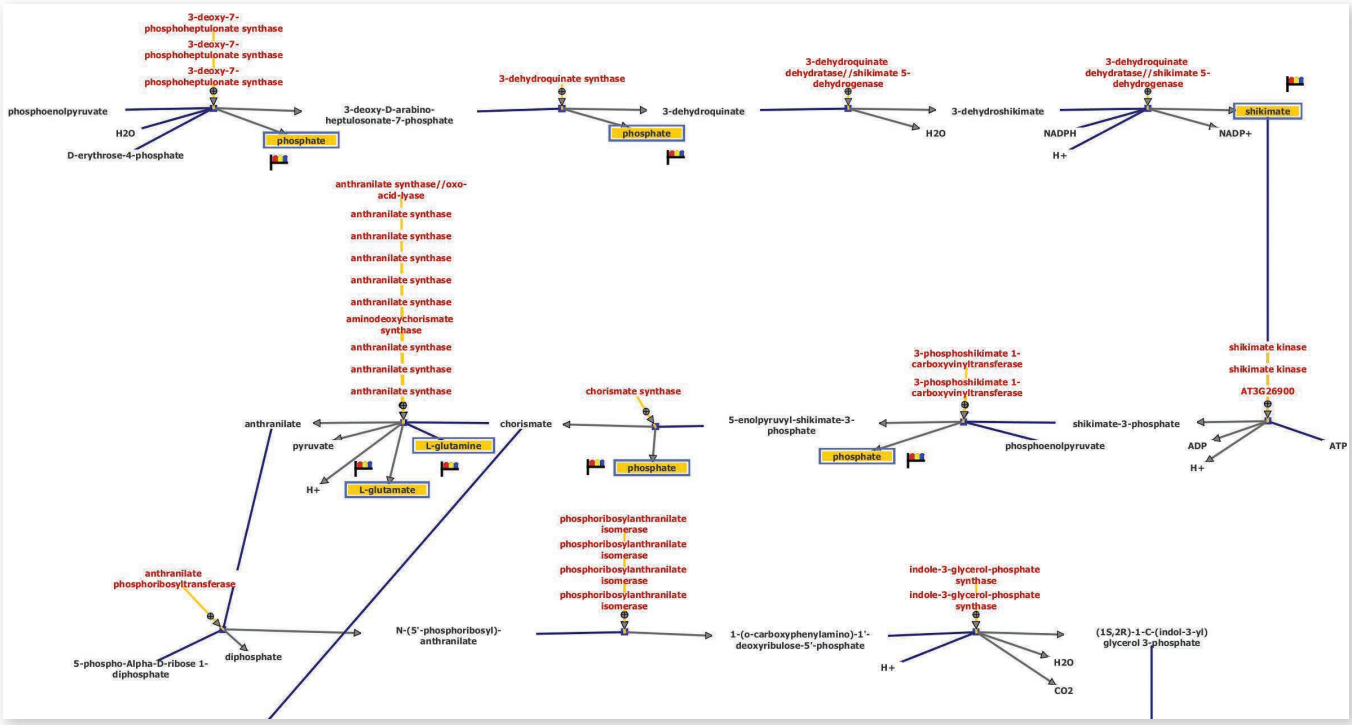
Fiehn GC/MS 代谢组学 RTL 谱库（2013 版）与最新版的 Agilent MassHunter 定性分析软件兼容。专利算法“根据色谱解卷积进行查找”常规用于色谱峰查找。找到的所有特征随后被载入并匹配最新版 Fiehn GC/MS 代谢组学 RTL 谱库，从而鉴定化合物。

全新的 2013 版谱库随附了著名的 AMDIS 软件（美国国家标准技术研究院开发的自动化 GC/MS 鉴定程序）。内含的 GC/MS 数据分析方法可自动调用 AMDIS 对重叠的色谱峰进行解卷积，然后鉴定代谢产物。

还可将 AMDIS 结果导入 MassHunter Mass Profiler Professional (MPP) 软件，利用该软件强大的统计分析和数据可视化功能对结果进行解析。

数据分析筛查和谱库检索更加简单

全新的 2013 版谱库还可通过 Agilent MSD Productivity ChemStation 软件自带的基于概率的匹配功能进行检索，还提供了用于定量数据分析和定性筛查的 ChemStation 方法。



MPP 中的通路构建模块显示了将多种代谢产物丰度特征映射到 MetaCyc 的生物体特异性生物通路所得到的结果

了解详细信息

www.metabolomics-lab.com

在线购买

www.agilent.com/chem/store

查找当地的安捷伦客户中心

www.agilent.com/chem/contactus:cn

安捷伦客户服务中心：

免费专线：800-820-3278

400-820-3278（手机用户）

联系我们：

info_agilent@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/quote:cn

仅供研究使用。本文中的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

© 安捷伦科技公司，版权所有 2014

2014 年 3 月 3 日，中国出版

5991-2747CHCN

Agilent Technologies