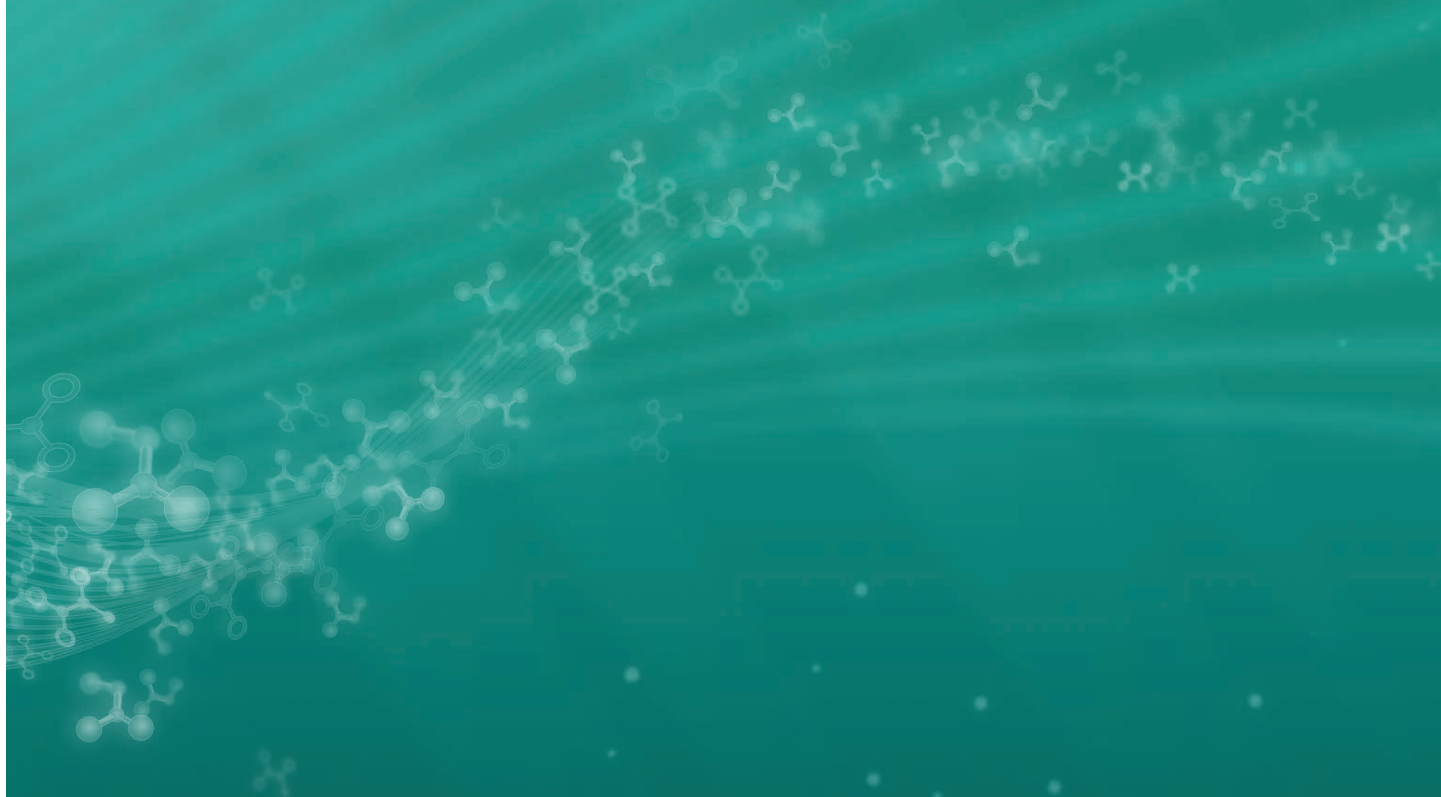


您的成功之路

安捷伦代谢组学
解决方案



Agilent Technologies

了解代谢组学

安捷伦作为独特的代谢组学解决方案供应商，可为研究者提供各种出色仪器与创新型信息学解决方案。

什么是代谢组学？

代谢组学是针对内源性代谢物（又称为代谢组）的研究，而代谢组则是多种物理化学性质不同的低分子量 (50-1500 Da) 化合物的集合。代谢组测量提供了生物系统功能状态的相关重要信息。代谢组与生物体表型的密切联系可为基因组学和蛋白质组学提供补充信息。

什么是定性代谢流分析？

代谢组学是一种通过测量代谢物丰度了解生物系统的强大技术，但是由于缺乏动态信息，理解起来通常很复杂。通过某一通路的代谢流的显著改变可能并不会导致代谢物中间体丰度的改变。代谢流动改变是酶数量（如转录水平）或酶活性（如抑制剂或突变）差异造成的结果。定性代谢流分析着重反映使用稳定同位素示踪（通常含 ^{13}C 、 ^{15}N 、或 ^2H ）的相对反应速率以及下游代谢物天然同位素模式的结果变化。

安捷伦代谢组学解决方案

安捷伦的创新型代谢组学解决方案可以提供功能强大的仪器和信息学工具组合。通用软件平台将多种分析技术获得的结果相结合，有助于更迅速地解决充满挑战的生物学难题。安捷伦与出色的代谢组学科学家合作开发新一代解决方案和工作流程，以加快您的研究进程。

适用于各种研究应用的代谢组学工具

功能强大的生物学研究手段

基础与临床研究

对与疾病相关的代谢生物标记物进行鉴定与验证，同时可有助于对生物学的基本了解

农业

确定并了解代谢途径以优化农作物开发，提高产量及杀虫剂/除草剂抗性

食品与营养

鉴定与食品质量、真伪、风味和营养价值等主要特性相关的代谢物是否存在，并辅助保健品的开发

制药

鉴定药物研发中的代谢物与毒性标记物

环境

鉴定与影响生物系统的化学物质和环境其他刺激因子相关的代谢物

生物燃料与合成生物学

鉴定代谢物图谱以优化发酵过程和生物燃料生产

系统毒理学

寻找血浆和尿液中可作为药物和环境污染物接触水平替代评估指标的毒性预测性标记

“安捷伦质谱系统兼具鉴定与定量各种细胞代谢物所需的高采集速率和宽动态范围。我们能够同时实现‘大海捞针’般的高灵敏度与测量‘大海’的宽覆盖范围。”

AMY A. CAUDY 博士

唐纳利细胞和生物医学研究中心
多伦多大学



发现代谢组学

发现代谢组学通常包括利用质谱联用技术进行代谢物全局分析。对化合物进行分离与检测之后，在所有数据文件中查找特征。对结果进行统计分析并识别差异特征。鉴定的代谢物可在生物通路上实现可视化，以帮助进行解析。



安捷伦发现代谢组学工作流程

安捷伦已开发出通过 LC/MS、GC/MS、CE/MS 和 SFC/MS 对代谢物进行全局代谢物分析的稳定工作流程。通常可采集到两种离子极性的数据，而且可用的离子源种类多样。发现代谢组学通常采用安捷伦 GC/MSD、GC/Q-TOF、LC/TOF 或 LC/Q-TOF 系统。

特征查找基于质谱和色谱特征提取数据，生成包括分子量、保留时间、 m/z 和丰度的化合物完整列表。MassHunter Profinder 专为处理批量数据而设计，具有用于处理丢失特征的递归模式。Profinder 结果的导出文件格式专用于 Mass Profiler Professional (MPP)，这款软件专为质谱数据的统计分析而开发。

MPP 结合了先进的处理功能以及强大的统计和数学模型对复杂的质谱数据集进行分析。在 MPP 软件中，可使用安捷伦 METLIN PCDL 或安捷伦 Fiehn 谱库对特征进行标注。Pathway Architect 是 MPP 中的一种可视化工具，可将结果（代谢物、蛋白和基因）投射到注释通路上。

靶向代谢组学

靶向代谢组学实验专注于测定特定代谢物。三重四极杆质谱仪提供化合物确认所需的宽动态范围、高灵敏度以及出色选择性，是执行这一任务的理想选择。



安捷伦靶向代谢组学研究工作流程

安捷伦的三重四极杆 LC/MS 和 GC/MS 系统可实现宽动态范围内的灵敏检测，并可提供处理大样品组所需的重现性与稳定性。

代谢组学 dMRM 数据库和方法

安捷伦代谢组学 dMRM 数据库和方法可简便地实现有机酸、糖、磷酸糖和核苷酸等 215 种中心碳代谢物的出色 LC/MS/MS 分析。为获得可生成高质量结果的稳定方法，安捷伦与多伦多大学的 Adam Rosebrock 博士合作进行分析方法的开发。解决方案包括含保留时间和理想 MS/MS 采集参数的优化数据库，以及数据采集和分析方法。

dMRM 数据库和方法是安捷伦完整代谢组学工作流程的一部分，结果受到安捷伦出色软件工作流程的支持。导出的结果包括代谢物名称、积分峰丰度以及化学标识符 (CAS)，可轻松导入至 Mass Profiler Professional 和 Pathway Architect 进行多变量样品的比较和通路分析。

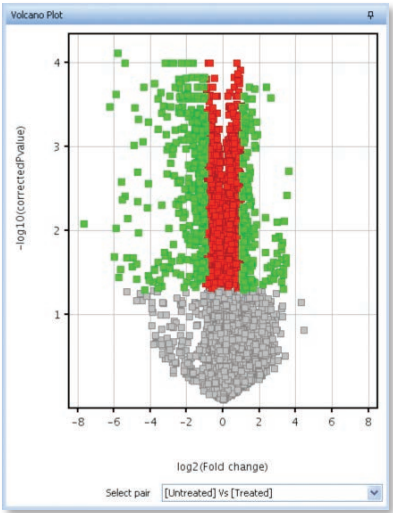
为您的代谢组学研究需求度身定做的软件

代谢组学研究人员正面临着分析越来越大、越来越复杂的数据组的严峻挑战。多变量统计通常用于寻找样品组之间的差异。仅了解哪些代谢物存在差异远远不够，理解其生物学意义才是关键。将处理后的数据集投射到代谢通路上并使其可视化，这一过程运用了现有知识并且有助于获得生物学理解。安捷伦提供用于处理和解析复杂代谢物数据的高级分析软件。

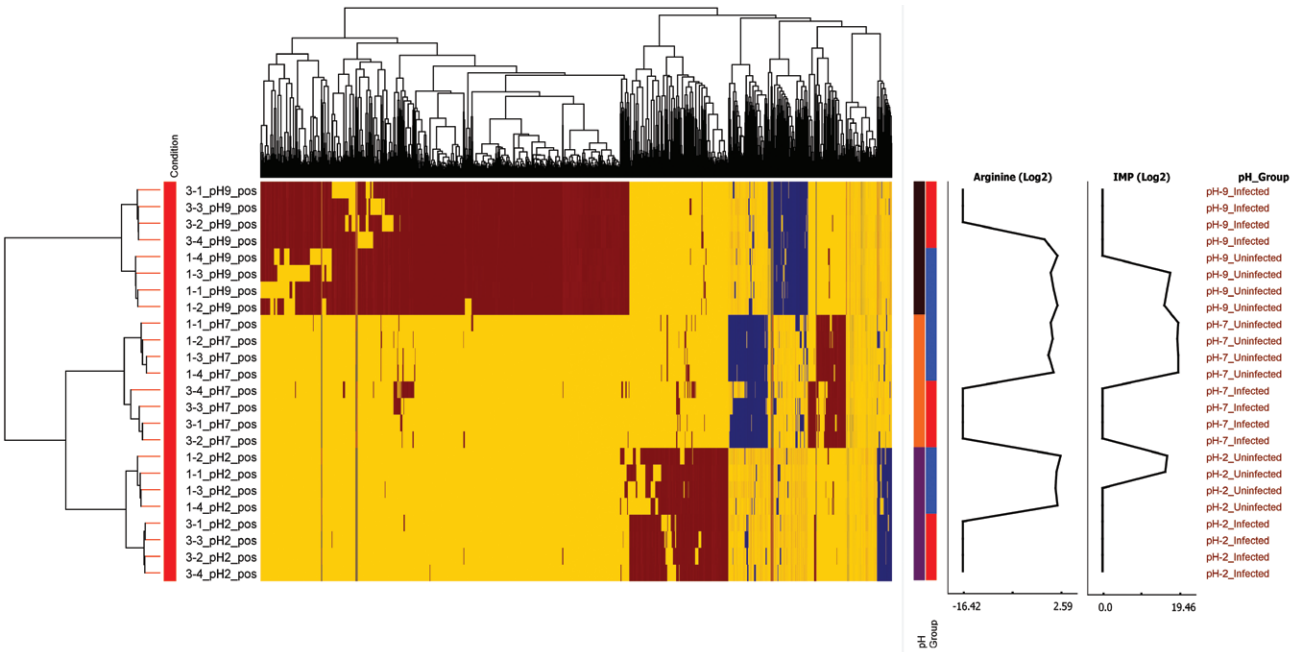
在发现代谢组学中，非目标或目标数据挖掘是软件工作流程的第一步。MassHunter Profinder 为质谱数据提供了非目标 and 目标特征的批量提取功能。这款软件支持来自安捷伦多种质谱仪的单纯质谱数据，其中质谱仪包括 TOF 型仪器和标称质量 GC/MS 系统。Profinder 为后续统计分析提供了重复数据文件的分组、归类和对齐、色谱叠加、化合物手动重新积分以及结果轻松导出等功能。

Agilent Mass Profiler Professional 软件为发现代谢组学和靶向代谢组学提供了多变量分析工具，其中包括主成分分析、ANOVA、聚类算法、相关性分析与分类预测等，可将大样品集有效转化为有意义的信息。还可以将元数据加入到分析中以帮助寻找复杂样品数据中的关系。

在 MPP 软件中，可使用内置 ID 浏览器功能对特征进行标注。ID 浏览器根据与高度优化的安捷伦 METLIN LC/MS 数据库或安捷伦 Fiehn GC/MS 谱库进行比较的保留时间和谱图进行特征匹配。这些代谢组学特定的数据库中包括的化合物标识符可用于后续投射到通路上。



Mass Profiler Professional 软件包括火山图功能，可同时计算各质量实体的丰度倍数变化及 p 值显著性。这些设置可通过交互方式发生改变，结果可以图和表的形式呈现。



Mass Profiler Professional 软件中包括相关性分析工具，可测定任意两个变量间成对关系的强度和方向性。此 heatmap 显示分层聚类分析后的质谱丰度数据，其中相关代谢物（Arg 和 IMP）显示在右侧。

“在代谢组学研究中，化合物鉴定是一个主要瓶颈。为应对这一挑战，我很荣幸能与安捷伦科技公司合作协助其开发 METLIN 数据库以及 MS/MS 质谱库，我更期待能继续与安捷伦合作开发出有益于代谢组学界的全新工具。”

GARY SIUZDAK 博士
SCRIPPS 质谱中心高级主管

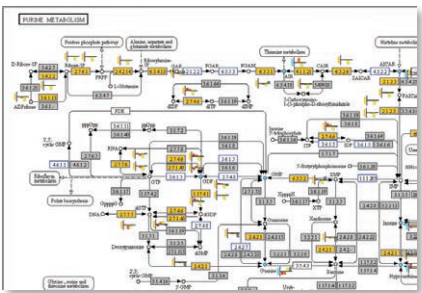
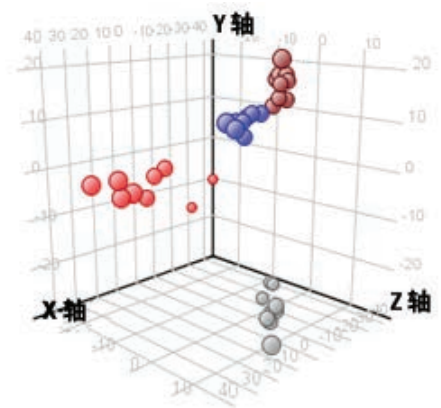
通路分析

通过将以通路为中心的工作流程融入组学实验，科学家们能够在专注于分析的同时推动从发现到生物学见解的研究进程。MPP 的 Pathway Architect 模块可采用 KEGG、BioCyc 和 Wikipathways 等公开通路数据，在生物学通路上对数据进行交互式筛选、映射和可视化。软件可将代谢物、蛋白质和基因投射到人工注释的通路中，并将数据以图形形式投射于通路中以便进行交互式分析。

来自 MPP 的实验结果将投射到上述通路中，用户可在通路中对数据进行筛选、放大或选择。用户还可以选择某一通路并导出代谢物、蛋白质、转录本和基因的列表，然后将其应用于其他程序以创建新的“通路导向实验”。例如，可将给定通路的蛋白质标识导出用于创建靶向多肽分析。这一以通路为中心的工作流程加速了从发现到理解的进程，可实现后续实验的有效规划与执行。

实现代谢组学与其他组学的整合

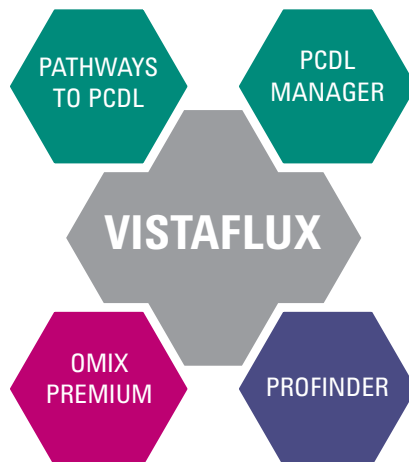
虽然基因组学、转录组学、蛋白质组学、代谢组学在产业和学术中应用广泛，但这些实验单独进行时往往不足以在组学实验中通常产生的高水平噪音之中揭示有意义的相关性。多组学数据在整合分析后可达到足够的限制条件，从而大大提高分析信噪比。Mass Profiler Professional 的 Pathway Architect 模块可进行单组学分析或多组学联合分析，从而使您能够发现通常受影响的通路并帮助您更快速地找到可靠答案。



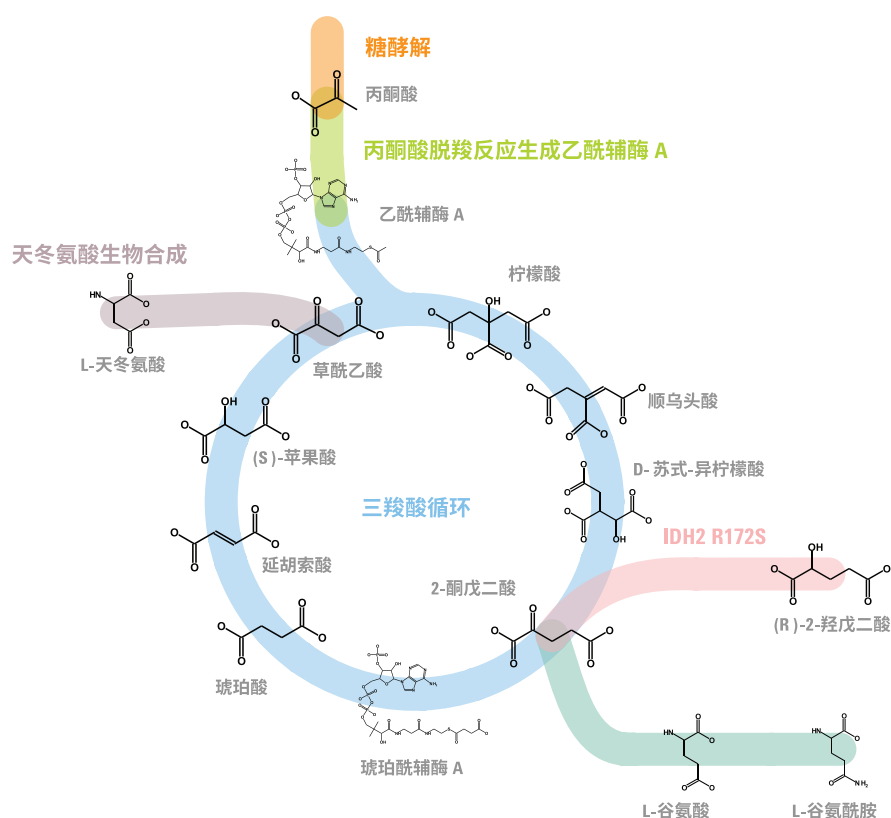
嘌呤代谢 KEGG 通路中的节点（青色）代表代谢物；与节点相连的是“HeatStrip”，用于总结不同条件下的平均丰度差异值。HeatStrip 上的青色色条表示代谢物；黄色色条表示基因表达的结果

为您的代谢组学研究需求度身定做的软件

定性代谢流分析采用稳定同位素标记示踪和质谱分析使研究人员快速获得与所选通路和代谢流相关的信息。定性代谢流分析存在多项分析挑战，例如挖掘目标代谢物、解释同位素体、针对天然存在的同位素进行校正，并在生物学背景下实现结果可视化。MassHunter VistaFlux 是一款专为应对这些挑战而设计的软件，是针对来源于安捷伦基于 TOF 的高分辨率液质联用系统的单纯质谱数据的定性代谢流分析解决方案。



VistaFlux 由 4 个协助实施工作流程的软件包组成：创建并编辑目标代谢物列表（Pathways to PCDL 和 PCDL Manager），提取代谢物同位素体数据 (Profinder)，以及在通路中实现结果可视化 (Omix Premium)。



在定性代谢流分析中，将稳定同位素标记示踪物 (^{13}C 、 ^{15}N 或 ^2H) 引入生物系统，导致下游代谢物的天然同位素模式发生改变。在 LC/MS 分析之后，在 Profinder 使用来源于已知代谢通路的目标列表挖掘数据。测量每种目标化合物仅同位素组成不同的代谢物（同位素体），并使用该信息追踪代谢流。

Profinder 可将批处理结果 (.pfa 格式) 轻松导出到 Omix Premium，以实现通路可视化和生物学解析。使用静态和动画通路可视化功能轻松实现实验结果交流，易于导出图片以便发表和展示。

三羧酸循环的 Omix Premium 可视化结果经过修改后可用于 IDH2 突变细胞系研究。

功能强大的生物学研究手段

研究代谢的创新方法

活细胞中功能代谢的测量以及代谢表型的确定为代谢组学实验设计提供了有力的指导。

Agilent Seahorse XF 分析仪提供了一种用于测量细胞生物能量学的下游方法，可以对多种情况下的活细胞代谢功能进行快速评估。

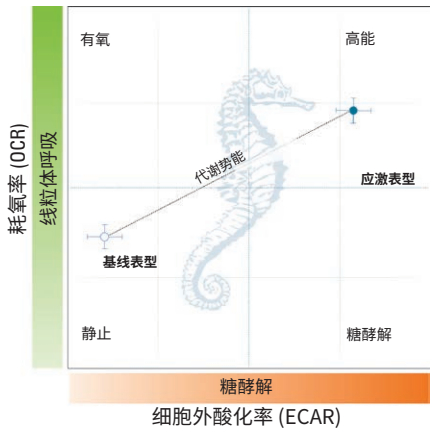
测定化学影响或基因对细胞代谢功能的操控有助于快速轻松地获得补充数据，提高代谢研究的效率，并为其指明方向。

以分钟计算的代谢速率

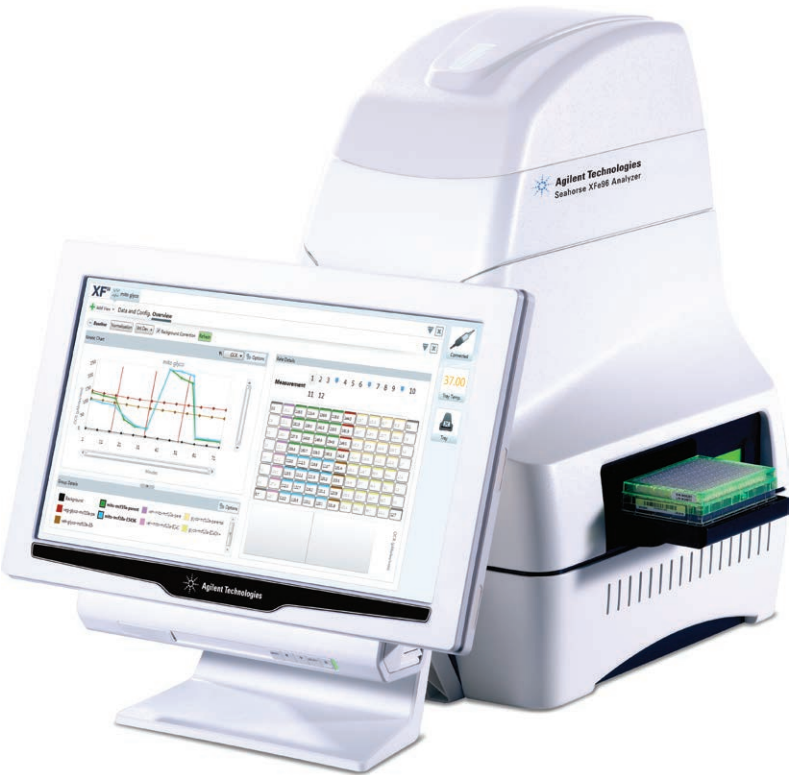
Seahorse XF 分析仪可实时测量活细胞中的线粒体呼吸和糖酵解两个主要细胞产能途径的活性。

Seahorse XF 分析仪具有化合物自动添加功能、一次性微量板小柱中的固态荧光传感器以及自动计算并分析代谢参数的软件。

Seahorse XF 分析试剂盒和试剂专为氧化磷酸化、糖酵解和脂肪酸氧化等通路开发，允许研究人员使用当日结果进一步查看并分析细胞功能。



Seahorse XF 细胞能量表型检测可高水平评估代谢状态和通路参照物，一小时内即可得出结果。



Seahorse XF 分析仪有 96 孔、24 孔和 8 孔的形式，适用于各种通量和样品需求：粘附和悬浮细胞、培养样品或体外样品、模式生物以及分离线粒体。

GC/MS 仪器和数据库

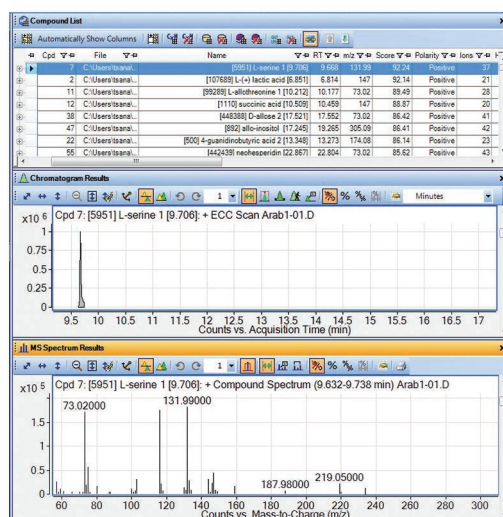


Agilent 7000 和 7010 系列三重四极杆 GC/MS 系统可提供较低的检测限、稳定的性能以及轻松实现方法优化的软件工具。



Agilent 7200B GC/Q-TOF 系统为结构确认、未知化合物鉴定和非靶向筛选功能提供优异的灵敏度和选择性，以及精确质量和高分辨率数据带来的附加价值。

这一不断增加的代谢组学谱库是与 Oliver Fiehn 博士合作研发的，包含约 1437 种常见代谢物的 GC/MS EI 谱图和保留时间索引供检索，是非常大的商用代谢组学数据库。谱库提供预编程的完整 GC/MS 分析方法以及 GC/MS 代谢组学分析文档，可大幅提高研究效率。



MassHunter 定性软件支持利用“根据色谱解卷积进行查找”算法对安捷伦 GC/MSD 文件进行特征提取。将提取到的特征峰与安捷伦 Fiehn GC/MS 代谢组学谱库对比以进行鉴定。

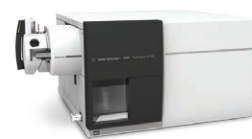
LC/MS 仪器和数据库



Agilent 6200 系列精确质量数 TOF LC/MS 系统具备同时鉴定小分子和生物大分子的能力，获得的高分辨率准确质量数分析数据可在定性分析中发挥极大价值。



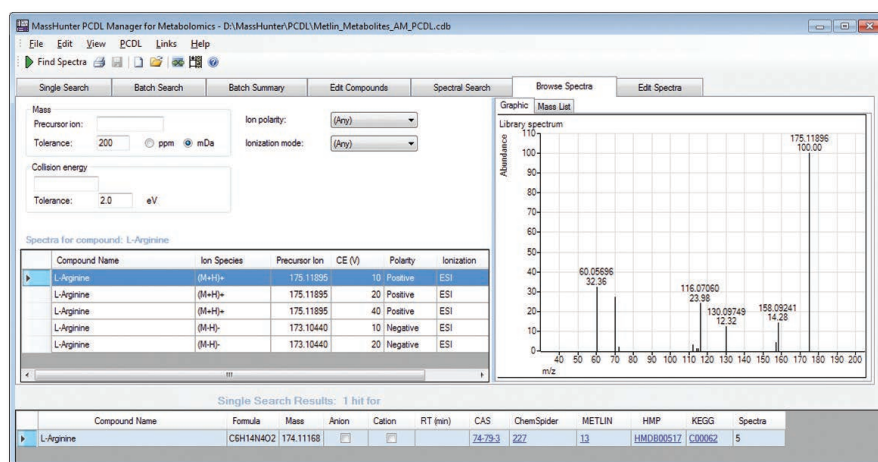
Agilent 6500 系列精确质量数 Q-TOF LC/MS 具备精确质量数 MS/MS 功能，可对复杂样品进行高度可靠的鉴定、筛查、分析或定量分析。



Agilent 6400 系列三重四极杆 LC/MS 系统拥有具备超高灵敏度、公认的可靠性以及整体系统稳定性的三重四极杆性能。

METLIN 个人化合物数据库与谱库

含大约 80000 个化合物，其中包括 39000 个脂类以及 9500 个带 MS/MS 标注谱图的代谢物。应用 TOF 和 Q-TOF 数据，可以通过精确质量和/或保留时间数据库检索进行鉴定。将 MS/MS 数据与谱库进行匹配能够更可靠地实现代谢物鉴定。



了解更多信息

www.agilent.com/chem/metabolomics

查找当地的安捷伦客户服务中心：

www.agilent.com/chem/contact-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

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，2016
2016年8月16日，中国出版
5991-7069CHCN