

安捷伦案例研究：助力研究者

## 洞悉未知世界 安捷伦帮助研究者理解 错综复杂的代谢组学



**Oliver Fiehn 博士**

分子和细胞生物学系及基因组中心教授  
美国西海岸代谢组学中心主任  
加州大学戴维斯分校

代谢组学领域在许多方面仍然是未被开发的处女地。思考一下，比如大肠杆菌，它也许是世界上被研究得最为透彻的生物体。

“即使对于这种微生物，我们仍然不清楚其体内 50% 的酶的功能。” Oliver Fiehn 博士说。“我们知道它们对新陈代谢发挥了作用，但我们不了解它们的具体作用方式。”

作为加州大学戴维斯分校的美国西海岸代谢组学中心的主任，Fiehn 知道还有许多工作在等待着他和他在全世界的同事们去完成。

“那么对于人类呢？”他问道。“有数万亿个微生物细胞与我们共存，当然，还有我们自身的新陈代谢。”

**Fiehn 和他在加州大学戴维斯分校的团队正在借助安捷伦的仪器寻找答案，其中包括最先进的质谱仪以及与之联用的尖端的气相和液相色谱系统。**

“我们的实验室致力于对新陈代谢进行全面了解。” Fiehn 说，“通过开发信息学工具并应用新型分离技术和质谱仪器，我们正在努力全方位地了解生物系统的代谢过程。”

他介绍，最终结果将实现双重目的。一方面是理解其自然机制；另一方面是将这些知识转化为各种人类疾病的早期诊断测试手段。

“安捷伦质谱仪（GC/MS 和 LC/MS 系统）具有更高的灵敏度，能够检测到应用于生物医学研究的多种信号，例如帮助我们预测未来两年或两个月内谁可能会患上心脏病。”他说。

Fiehn 坚信，他和同事们的研究成果总有一天会转化为专一性的早期诊断方法。

Fiehn 和他的同事正在通过收集尽量多的质谱数据，然后将它们输入科学界可以访问的数据库（可以是免费访问的政府资助研究数据库，也可以是需要收取一定费用才能进入的公司赞助数据库，如 Fiehn-Agilent GC/MS 谱库）来奠定这一工作的基础。



**Agilent Technologies**

“实现这个目标的唯一途径就是要理解您在生物样品（例如血浆）中所发现的每种成分的复杂性。永远不会简单到只需关注一种生物标记物。只分析一种分子不可能十分明确地指示出某一特定类型的癌症，而通常会表现为一种模式，并且需要进行模式识别。”

“去年，我们推出了 LipidBlast，它是一个包含代表了 29 种脂类的 200000 个复合脂类和中性脂类质谱图的数据库。”他说。

然而 Fiehn 表示，这只是一个开始。

“虽然存在初级代谢物，即许多物种中常见的糖类、氨基酸和羟基酸等，但小分子真正的多样性来自于大量萜类、脂类、黄酮类或酚类衍生的化合物，它们是如此地丰富多彩，以致单独的实验室和数据库无法囊括其所有。” Fiehn 说。

“所以我们需要预测谱图。如果确实想要了解本质，我们就必须能够预测质谱图。这是一项长期的事业，需要我们与整个学界的共同努力。我们非常感谢安捷伦及其他公司对这项努力提供的有力支持。”

为能作出这种预测，科学家们需要利用现有数据和物理学基本原理。

“一旦掌握了特定分子的裂解方式，您就可以在计算机上构建其化学结构，并说，‘好，现在我们可以想象用更长的一条酰基链取代这条酰基链，或用其甲基化产物取代这个分子。这将会对现有离子和丰度产生何种影响？’”他说。“我们拥有的已知化合物的质谱越多，这一模型的建立就会越完善。”

## 相关信息

Kind T, Liu KH, Lee do Y, DeFelice B, Meissen JK, Fiehn O. **LipidBlast in silico tandem mass spectrometry database for lipid identification.** *Nat Methods.* 2013 Aug;10(8):755-8

Fiehn O, Kim J. **Metabolomics insights into pathophysiological mechanisms of interstitial cystitis.** *Int Neurourol J.* 2014 Sep;18(3):106-14

Kind T, Meissen JK, Yang D, Nocito F, Vaniya A, Cheng YS, Vandergeheynst JS, Fiehn O. **Qualitative analysis of algal secretions with multiple mass spectrometric platforms.** *J Chromatogr A.* 2012 Jun 29;1244:139-47

Barupal DK, Haldiya PK, Wohlgemuth G, Kind T, Kothari SL, Pinkerton KE, Fiehn O. **MetaMapp: mapping and visualizing metabolomic data by integrating information from biochemical pathways and chemical and mass spectral similarity.** *BMC Bioinformatics.* 2012 May 16;13:99

了解更多有关安捷伦如何努力满足全球科学家和研究者的复杂需求的信息，请访问 [www.agilent.com/chem/academia](http://www.agilent.com/chem/academia)

仅限研究使用。  
不可用于诊断目的。  
本文中的信息、说明和性能指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2014  
2014 年 12 月 1 日，中国出版  
5991-5379CHCN



Agilent Technologies