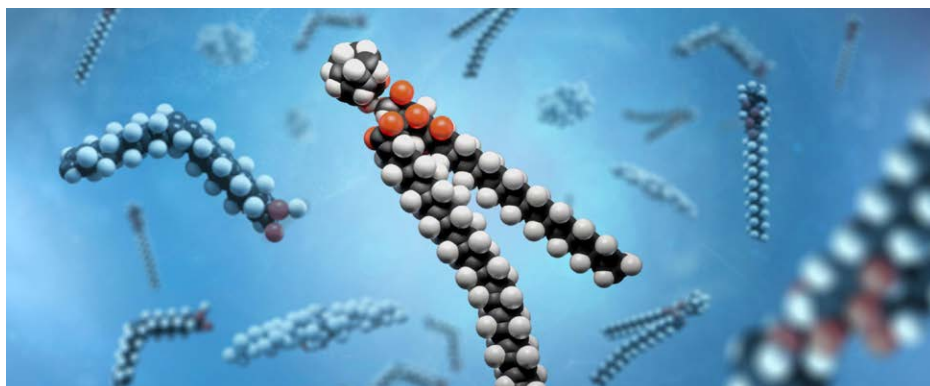


# 비표적 고분해능 지질체학 데이터의 표적화된 데이터 마이닝 및 주석 처리

포괄적이고 신뢰도가 높은 워크플로



## 저자

Sheher Banu Mohsin,  
Layla Cosovic,  
Mark Sartain, Tracy  
Blethen, Pietro Morlacchi 및  
Daniel Cuthbertson  
Agilent Technologies, Inc.

## 개요

지질을 완전하고 명확하게 특성 규명하는 일은 비표적 지질체학 접근 방식에서 여전히 어려운 과제로 남아 있습니다. 이러한 과제를 해결하기 위해, 많은 실험실 환경에서 쉽게 구현할 수 있는 표준화된 분석법을 통해 LC/Q-TOF 및 Ion Mobility LC/Q-TOF에 적합한 고도로 선별된 지질체학 데이터베이스가 구축되었습니다. 이를 위해 모든 주요 지질 종류에 걸쳐 총 763개의 지질을 포괄하는 엄선된 포괄적 LC/TQ 분석법이 사용되었습니다.<sup>1</sup> 이 지질 세트는 머무름 시간(RT), MS/MS 스펙트럼, 충돌 단면을 포함하는 personal compound database and library (PCDL)를 구축하는 출발점이 되었습니다. 이는 더욱 높은 신뢰도의 지질 식별을 보장하는 직교 측정 파라미터의 역할을 합니다. 이 응용 자료에서는 사용자가 지질체학 데이터에서 중요한 생물학적 통찰력을 얻는 데 도움이 되도록 설계된 비표적 지질체학 워크플로 내에서 큐레이션된 PCDL<sup>2</sup>의 사용을 시연합니다.

## 소개

질량 분석 기반의 지질체학 프로파일링에는 단일 분석 과정에서 구조적으로 다양한 많은 지질을 분리하고 그 후에 식별하는 방법이 이용됩니다. 크로마토그래피 기술을 사용하여 지질을 효율적으로 분리하는 것은 특히 복잡한 생물학 추출물에서 지질을 정확하고 명확하게 식별하는 데 매우 중요합니다. 각 지질 클래스 내에 이성질체와 등중원소 종이 풍부하고, 이들의 크로마토그래피 반응이 비슷하기 때문에 지질 분리와 주석 지정은 상당한 어려운 과제로 대두됩니다.

지질 이성질체와 등중합체를 분리하기 위한 액체 크로마토그래피 기술은 지난 몇 년 동안 상당한 발전을 이루었습니다. 역상 및 순상 분석법과 SFC 접근 방식이 모두 사용 가능합니다. 그러나 이러한 상당한 발전에도 불구하고 질량 분석을 통한 지질 식별은 여전히 어려운 문제입니다. 일반적으로, 지질 특성을 완전하고 명확하게 분석(LC/MS를 통해)하려면 지질 종류, 원소 조성, R-기 위치, 이중 결합의 수, 위치, 형태, 그리고 기타 파라미터를 식별해야 합니다. 이러한 구조적 정보의 대부분은 고분해능 질량 분석법(HRMS) tandem MS/MS 실험을 통해 얻을 수 있으며, 이 경우 스펙트럼 데이터를 조각 라이브러리와 대조 분석하여 화합물을 식별합니다. 실제 표준물질을 기반으로 한 소규모 MS/MS 스펙트럼 라이브러리를 사용할 수 있지만, 많은 지질 MS/MS 스펙트럼은 in silico 라이브러리를 사용하여 주석이 달립니다. 이는 지질 종류와 R-기 사슬 길이에 대한 일부 지식을 제공하는 데 도움이 되지만 다른 필수적인 분자 정보를 제공하지 않는 경우가 많아 지질에 대한 완전한 주석 작업이 실현 불가능한 목표가 됩니다.

지질 식별에 대한 신뢰도를 높이고 주석의 모호성을 극복하기 위해, 질량 분석에서는 실제 표준물질을 사용하는 것이 일반적인 관행입니다. 이러한 표준물질은 가능한 경우 RT, accurate mass 및 조각화 패턴을 기반으로 질량 feature를 일치시키는 데 사용됩니다. 안타깝게도 수천 가지 지질에 대한 명확한 표준이 없기 때문에 이러한 접근 방식은 제한적일 수 있습니다. 이러한 과제를 해결하려면 신뢰도가 높은 지질 주석 처리를 위한 대체 전략이 필요합니다.

혈장 내 지질을 프로파일링하는 작업이 높은 수준의 신뢰도로 수행되었습니다. 이 접근법은 먼저 763가지 지질을 사용하는 엄격하게 선별된, 포괄적 LC/TQ 분석법을 사용하는 것이었습니다.<sup>1</sup> 이 분석법은 작은 리소지질부터 큰 비극성 트리아실글리세롤까지 혈장 내 모든 주요 지질 종류를 포괄하도록 설계되었습니다. 이 분석법은 다양한 지질 이성질체의 원활한 주석 지정에 목표를 두고 상당한 수준의 선별 과정을 거쳤으며, 이를 위해 특정 이성질체 특성을 가진 지질 표준물질도 합성해야 했습니다.<sup>3</sup>

이 분석법은 LC/Q-TOF와 Ion Mobility LC/Q-TOF로 전환되었는데, 이를 위해서는 각 전구체/조각 쌍의 단위 질량 분해능 질량을 해당하는 accurate mass로 변환해야 했습니다. 이러한 accurate mass와 해당 RT는 LC/Q-TOF 시스템을 사용하여 수행한 표적 및 비표적 실험 모두에서 전구체 이온으로 사용되었습니다. 이 실험에서 사용된 HPLC 분리 분석법은 원래의 LC/TQ 분석법과 동일했습니다. LC/Q-TOF에서 생성된 MS/MS 스펙트럼은 PCDL을 생성하기 위해 내보내졌으며, PCDL은 accurate mass, RT 및 MS/MS 스펙트럼을 기반으로 추정 지질을 식별하는 데 사용할 수 있습니다.

RT는 높은 신뢰도로 지질의 주석을 지정할 때 가장 중요한 파라미터 중 하나입니다. 4개의 다른 장소에서 진행된 실험실 간 연구에서 얻은 RT의 상대 표준 편차(RSD)를 사용하여 RT의 일일 변동성과 장소 간 변동성을 파악했습니다.<sup>4</sup> 600개 이상의 지질에 대한 RT의 RSD는 < 0.2%인 것으로 나타났습니다. 지질 주석에 대한 신뢰도를 더욱 높이기 위해 Ion Mobility LC/Q-TOF에 대한 충돌 단면적(CCS) 값 세트를 생성했습니다. CCS 값을 포함함으로써 이제 accurate mass, RT, MS/MS 스펙트럼 일치 및 CCS 필터링을 사용하여 ID 검색을 수행할 수 있어 주석에 대한 신뢰도가 높아졌습니다.

높은 신뢰도의 PCDL을 생성하는 프로세스와 높은 수준의 선별을 보장하기 위해 취한 단계는 애질런트 발행물 번호 5994-7627EN에 자세히 설명되어 있습니다.<sup>2</sup>

본 자료에서는 신뢰도 높은 PCDL을 사용하여 지질에 주석을 지정하기 위한 워크플로 구현에 대해 논의합니다. 여기에는 지질 추출 및 데이터 수집부터 신뢰도 높은 데이터베이스를 활용한 최종 지질 주석 지정 단계까지 모든 단계가 포괄됩니다.

### 워크플로 구현

이 워크플로는 10µL 혈장 시료 또는 동일 양의 세포나 조직 균질물에서 44가지 지질 클래스에 속하는 677가지의 다양한 지질 종을 프로파일링하는 방법을 설명합니다. 지질은 역상 액체 크로마토그래피를 통해 분리한 다음 고분해능 질량 분석기로 분석합니다. 총 분석 시간은 단일 컬럼 분석법의 경우 시료당 16분, 이중 컬럼 시스템의 경우 13분이었습니다. 데이터 처리에는 Agilent MassHunter Workstation 소프트웨어가 사용되었습니다.

## 실험

### 시료 전처리

분리를 포함한 시료 전처리 절차는 이전 애질런트 발행물에 설명되어 있습니다.<sup>1</sup> 간략히 말하면, 지질 추출은 폴리프로필렌 양변위 피펫을 사용하여 1.5mL 마이크로 원심분리 튜브에서 수행했습니다. 10µL의 혈장을 10mM 포름산 암모늄을 함유한 butanol:methanol(1:1)과 내부 표준의 혼합물로 구성된 100µL의 추출 용매와 혼합했습니다. 각 시료를 5초 동안 진탕한 후 1시간 동안 수조에서 초음파 처리했으며 온도는 21-25°C 사이로 유지했습니다. 그런 다음 시료를 원심분리(13,000rpm, 10분, 20°C)하고 상층액을 200µL 유리 인서트(제품 번호 5183-2085)가 있는 1.5mL 유리 시료 바이알(제품 번호 5190-9062)로 옮겼습니다. PTFE/S 캡(제품 번호 5185-5820)을 사용하여 시료를 막고 분석 때까지 -80°C에서 보관했습니다.

### LC 기기

애질런트는 최근 모든 질량 분석기 모델에서 대사체, 지질 및 단백질 분석법을 쉽게 구현할 수 있게 해주는 표준 멀티오믹스 LC 구성을 출시했습니다. 이 LC 구성이 분석에 구현되었으며, LC 표준화를 통해 가능한 RT 정렬을 추가적으로 보여주었습니다.

LC는 다음 모듈을 포함한 Agilent 1290 Infinity II LC 시스템으로 구성되었습니다.

- Agilent 1290 Infinity II 고속 펌프(G7120A)
- Agilent 1290 Infinity II 바이알 샘플러, 온도 조절 장치 포함 (G7129B)
- Agilent 1290 Infinity II 다중 컬럼 온도 조절 장치(G7116B)

표적 지질 분석을 위한 LC 구성에는 LC/TOF를 사용했습니다. 비표적 프로파일링 실험의 경우, 질량 스펙트럼 및 이온 이동도 측정을 위해 Agilent Revident LC/Q-TOF와 Agilent 6560 Ion Mobility LC/Q-TOF가 사용되었습니다. 일반적인 크로마토그래피 조건을 표 1에 나타내었습니다.

**표 1.** Agilent Revident LC/Q-TOF와 Agilent 6560 Ion Mobility LC/Q-TOF를 사용한 지질체학 분석의 크로마토그래피 조건.

파라미터	값																						
분석 컬럼	Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18, 2.1 × 100mm, 1.8µm (제품 번호 959758-902)																						
인라인 필터	Agilent 1290 Infinity II 인라인 필터, 0.3µm, 2mm 내경, 1,300bar (제품 번호 5067-6189)																						
컬럼 온도	45°C																						
주입량	1µL(0.1µL 혈장에 해당)																						
자동 시료 주입기 온도	20°C																						
니들 세척	바이알 세척, 3초, 1:1 부탄올:메탄올 또는 1:1 이동상 A:B로 10초 동안 포트를 플러싱합니다.																						
이동상	A) 10mM 포름산 암모늄, 5µM Agilent InfinityLab 비활성화 첨가제(제품 번호 5191-3940)를 넣은 5:3:2 물:아세트ونی트릴:2-프로판올 용액 B) 10mM 포름산 암모늄을 넣은 1:9:90 물:아세트ونی트릴:2-프로판올 용액(참고: 이동상 B에 InfinityLab 비활성화 첨가제를 첨가하지 말 것)																						
유속	0.4mL/분																						
그라디언트 프로그램	<table border="1"> <thead> <tr> <th>시간</th> <th>%B</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>15</td></tr> <tr><td>2.5</td><td>50</td></tr> <tr><td>2.6</td><td>57</td></tr> <tr><td>9</td><td>70</td></tr> <tr><td>9.1</td><td>93</td></tr> <tr><td>11</td><td>96</td></tr> <tr><td>11.1</td><td>100</td></tr> <tr><td>12</td><td>100</td></tr> <tr><td>12.2</td><td>15</td></tr> <tr><td>16</td><td>15</td></tr> </tbody> </table>	시간	%B	0	15	2.5	50	2.6	57	9	70	9.1	93	11	96	11.1	100	12	100	12.2	15	16	15
시간	%B																						
0	15																						
2.5	50																						
2.6	57																						
9	70																						
9.1	93																						
11	96																						
11.1	100																						
12	100																						
12.2	15																						
16	15																						
정지 시간	16분																						
사후 시간	없음																						

## Agilent Revident LC/Q-TOF 수집 분석법

Agilent Jet Stream ESI 이온화원이 장착된 Revident LC/Q-TOF 플랫폼을 사용하여 MS/MS 데이터를 수집했습니다.

데이터는 양이온 모드와 음이온 모드 모두에서 수집했습니다.

크로마토그래피에 대한 자세한 실험 분석법과 Auto MS/MS 질량 분석 파라미터를 표 2에 나타냈습니다.

표 2. Agilent Revident LC/Q-TOF Auto MS/MS 파라미터.

파라미터	값
가스 온도	300°C
가스 유속	10L/분
Nebulizer 압력	25psig
Sheath 가스 온도	300°C
Sheath 가스 유속	12L/분
캐필러리 전압	3,500V (+), 3,000V (-)
노즐 전압	0V
Fragmentor	150V
Skimmer	45V
Octopole RF Vpp	750V
기준 질량	$m/z$ 121.050873, $m/z$ 1,221.990637 (+) $m/z$ 119.03632, $m/z$ 980.016375 (-)
MS 및 MS/MS 범위	$m/z$ 50-3,000 (+)
최소 MS 및 MS/MS 수집 속도	3스펙트럼/초
분리 폭	Narrow(약 1.3m/z)
충돌 에너지	25eV
주기당 최대 전구체	3
Precursor Abundance-Based Scan Speed with Precursor Abundance-Based Acquisition Speed	Yes, target 25,000 counts/spectrum
MS/MS 누적 시간 제한 사용	예
Reject Precursors that Cannot Reach Target TIC	아니요
MS/MS 임계값	5,000카운트, 0.001%
Active Exclusion Enabled	Yes, one repeat, then exclude for 0.05 minutes
순도	엄격성 70%, 컷오프 0%
동위원소 모델	일반 유기 분자
전구체 정렬	1, 2, unknown
Static Exclusion Ranges	$m/z$ 40-151(+) $m/z$ 40-210(-)

## Agilent 6560 Ion Mobility LC/Q-TOF 수집 분석법

Agilent Jet Stream ESI 이온화원이 장착된 Agilent 6560 Ion Mobility LC/Q-TOF 플랫폼을 사용하여 지질의 CCS 값을 결정했습니다. Ion Mobility (IM) 질량 분석 데이터는 스펙트럼당 1초의 주기 시간, 3,800 $\mu$ s의 IM 트랩 채우기 시간, 250 $\mu$ s의 트랩 방출 시간으로  $m/z$  50에서 3,000까지 양이온 모드와 음이온 모드 모두에서 수집했습니다. 4비트 펄싱 시퀀스 길이로 멀티플렉싱이 사용되었습니다. 지질은 데이터 독립형 수집 분석법인 All Ions 분석법과 0-25V 충돌 에너지 사이에서 교대로 프레임을 사용하는 충돌 유도 분리를 통해 조각화되었습니다. IM LC/Q-TOF의 수집 파라미터를 표 3에 나타내었습니다.

표 3. Agilent 6560 Ion Mobility LC/Q-TOF 데이터 독립적 수집 파라미터.

파라미터	값
가스 온도	300°C
가스 유속	10L/분
Nebulizer 압력	25psig
Sheath 가스 온도	350°C
Sheath 가스 유속	11L/분
캐필러리 전압	3,500V (+), 3,000V (-)
노즐 전압	1,000V
Fragmentor	400V
Octopole RF Vpp	750V
기준 질량	$m/z$ 121.050873, $m/z$ 1,221.990637 (+) $m/z$ 119.03632, $m/z$ 980.016375 (-)
MS 및 MS/MS 범위	$m/z$ 50-3,000 (+)
프레임 속도	0.9 프레임/초
IM Transient Rate	17 IM transients/frame
충돌 에너지	25eV
최대 Drift Time	60ms
Drift Tube Entrance Voltage	1,750V

## 데이터 분석을 위한 소프트웨어

Agilent ChemVista 소프트웨어를 지질 라이브러리(PCDL)를 관리하고 편집하는 데 사용했습니다. 데이터 분석법인 Lipids.m을 사용하여 양이온의 경우 (+H)와 (+NH<sub>4</sub>)를 확인하고 음이온의 경우 (-H)와 (+CH<sub>3</sub>COO)<sup>-</sup>를 확인하여 배치별 표적 feature 추출을 수행했습니다.

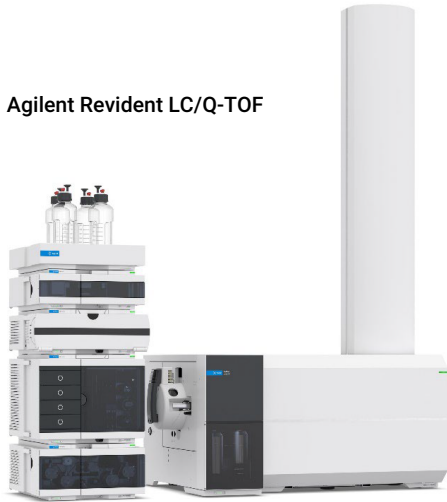
Agilent MassHunter Mass Profiler Professional(MPP) 소프트웨어 버전 15.1이 차등 분석에 사용되었습니다. 지질체학 실험 유형으로 두 가지 실험(양이온 또는 음이온)이 만들어졌습니다. Percentile shift 정규화 알고리즘(75%)을 사용하였으며, 데이터세트의 비교 기준으로 전체 시료의 중앙값(median)을 선택했습니다. Agilent MassHunter Mass Profiler(MP) 소프트웨어와 MPP는 복잡한 지질체학 결과를 조사하고 해석하기 위한 통계 분석 소프트웨어 도구를 제공합니다. MP와 MPP는 시료 간의 feature에 대한 RT 및  $m/z$  정렬, 응답 정규화, 시료 간의 유의미한 차이점을 식별하기 위한 통계 처리를 지원합니다. MPP에는 주석 처리된 지질 분석을 위한 실험 유형이 추가되어 지질 종류 기반의 정규화 및 시각화 도구를 이용할 수 있습니다.

MPP 내에서 Agilent MassHunter ID Browser 버전 10.0을 사용하여 비표적 워크플로에 주석을 달았으며, 필요한 기준으로 질량  $\pm 5$  ppm, RT  $\pm 0.10$ 분을 사용했습니다.

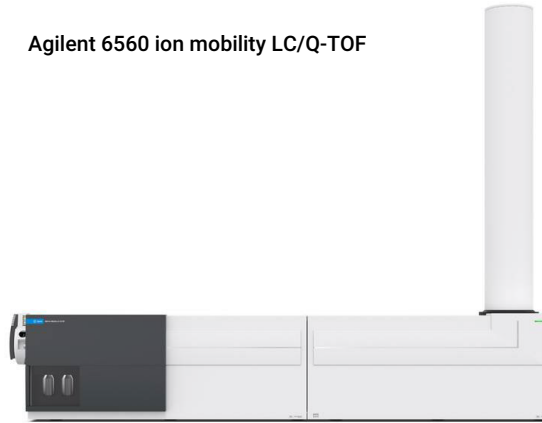
## IM LC/Q-TOF 및 LC/Q-TOF 데이터 파일에 대한 데이터 분석

MP 소프트웨어를 사용하여 파일을 처리했습니다. 다중화된 데이터 파일의 경우, MP를 사용하기 전에 먼저 해당 파일의 다중화를 해제합니다. 간단히 말해, IM LC/Q-TOF의 다중화된 데이터 파일이나 LC/Q-TOF의 .d 파일은 일괄 처리 모드로 MP 또는 MPP로 가져옵니다. Feature 추출 후, 신뢰도가 높은 PCDL을 사용하여 항목을 주석 처리할 수 있습니다. 주석 처리는 accurate mass, RT, MS/MS 스펙트럼 매칭을 기초로 합니다. IM LC/Q-TOF 데이터 파일의 경우, CCS 값도 매칭되어 지질 주석에 대해 높은 수준의 신뢰도를 제공합니다. 데이터 수집 및 데이터 분석을 위한 워크플로의 일반적인 개요를 그림 1에 나타내었습니다. 그림 2는 데이터 분석의 단계와 워크플로를 보여줍니다.

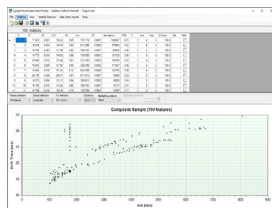
Agilent Revident LC/Q-TOF



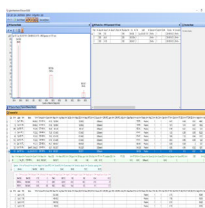
Agilent 6560 ion mobility LC/Q-TOF



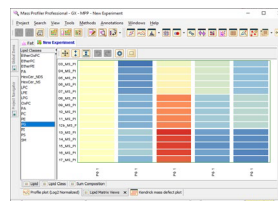
높은 신뢰도의 PCDL을 사용한 프로파일링 및 식별



Agilent Mass Profiler  
소프트웨어



Agilent MassHunter  
ID 브라우저



Agilent Mass Profiler  
Professional 소프트웨어

그림 1. 데이터 수집 및 데이터 처리를 위한 워크플로.

1단계. Agilent Mass Profiler 소프트웨어로 데이터 파일을 처리합니다.

2단계. 1단계에서 내보낸 .cef 파일을 사용하여 Agilent Mass Profiler Professional 소프트웨어로 통계 분석을 수행합니다.

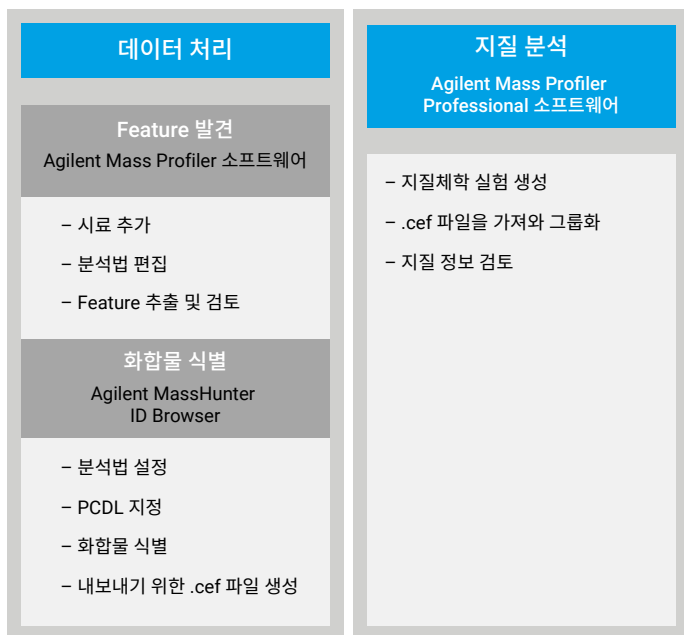


그림 2. 데이터 분석을 위한 워크플로의 개략도.

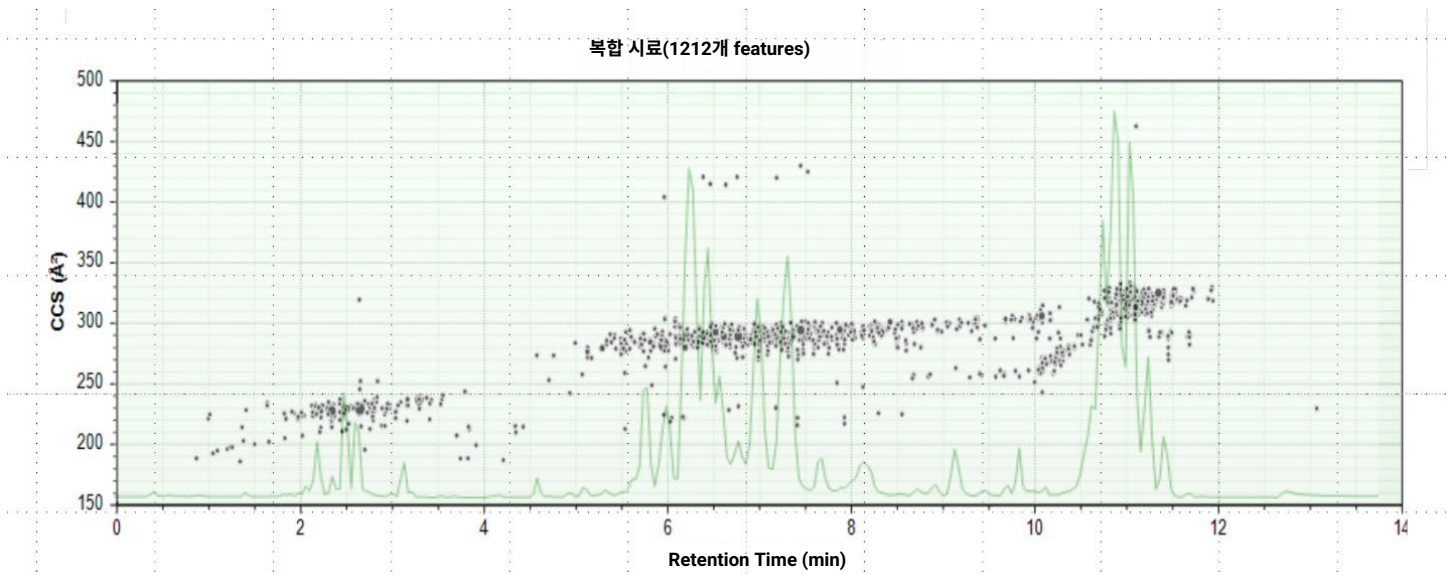
## 결과 및 토의

Feature 찾기와 주석 처리를 포함하는 그림 2의 데이터 처리 단계 1의 결과를 그림 3에 나타내었습니다. 그림 3의 표에 있는 각 행을 더 자세히 살펴보면 추출된 이온 크로마토그램과 선택한 feature의 질량 스펙트럼을 볼 수 있습니다.

지질 매트릭스는 MPP에서 지질 데이터를 보는 데 사용할 수 있는 여러 시각화 도구 중 하나입니다. 그래픽 디스플레이는 PC 계열의 각 지질에 대한 다양한 시료 존재비를 보여줍니다. 파란색은 존재비가 작다는 것을 나타냅니다. 빨간색은 존재비가 높음을 의미하며, 파란색과 빨간색 사이의 색상은 노란색에서 주황색, 빨간색으로 가면서 존재비가 점차 높아짐을 의미합니다. 그림 4와 5는 지질 데이터를 보기 위한 여러 가지 플롯 중 하나를 보여줍니다. 그림 5에는 지질 종류에 따라 색상이 지정된 질량 대 RT를 보여줍니다.

Kendrick mass defect 플롯은 그림 6에서 볼 수 있듯이 동족 계열을 시각화하는 데 탁월한 도구입니다.<sup>5</sup> 헤테로원자의 수와 고리의 수, 이중 결합의 수는 같지만  $\text{CH}_2$ -기 수가 다른 화합물은 Kendrick mass defect가 동일합니다. 이러한 화합물은 플롯에서 수평선으로 정렬됩니다. 잠재적인 데이터베이스 불일치나 누락된 주석을 쉽게 식별할 수 있습니다.





6121 features															
	ID	명칭	화합식	RT(DB)	이온 종	질량(DB)	RT	SD	DT	SD	CCS	SD	m/z	SD	Abundance
1	1	SM (d18:1/16:0)	C39 H79 N2 O...	5.856	(M+H)+	702.5676	5.955	0.008	33.818	0.059	282.42	0.49	703.5746	0.0009	3348672
2	2	LPC (16:0) [sn1]	C24 H50 N O7 P	2.591	(M+H)+	495.3325	2.645	0.007	27.273	0.042	229.55	0.35	496.3407	0.0015	2749995
3	3	PC (18:1_18:1)	C44 H84 N O8 P	7.239	(M+H)+	785.5935	7.523	0.011	34.848	0.039	290.43	0.32	786.5994	0.0011	2521345
4	4	PC (16:0_18:1)	C42 H82 N O8 P	7.055	(M+H)+	759.5778	7.184	0.011	34.331	0.035	286.29	0.29	760.5849	0.0011	2278330
5	5	LPC (18:0) [sn2]	C26 H54 N O7 P	3.111	(M+H)+	523.3638	3.290	0.009	28.224	0.029	237.22	0.25	524.3704	0.0008	2185121
6	6	TG (52:2) [SIM]	C55 H102 O6	11.314	(M+NH4)+	858.7676	11.313	0.003	38.602	0.058	321.16	0.48	876.7991	0.0029	2108318
7	7	PC (18:1_18:2)	C44 H82 N O8 P	6.494	(M+H)+	783.5778	6.766	0.010	34.705	0.045	289.25	0.37	784.5845	0.0008	2080693
8	8	PC (16:0_18:2)	C42 H80 N O8 P	6.355	(M+H)+	757.5622	6.460	0.009	34.044	0.175	283.91	1.46	758.5683	0.0016	2009853
9	9	LPC (18:2) [sn2]	C26 H50 N O7 P	2.174	(M+H)+	519.3325	2.340	0.008	27.095	0.076	227.77	0.64	520.3397	0.0009	1995130
10	10	TG (52:3) [SIM]	C55 H100 O6	11.16	(M+NH4)+	856.7520	11.156	0.006	38.486	0.075	320.21	0.62	874.7841	0.0007	1977839
11	11	PC (15:0_18:1) ...	C41 H73 D7 N ...	6.517	(M+H)+	752.6061	6.634	0.010	34.102	0.191	284.43	1.59	753.6113	0.0012	1967886
12	12		C32 H52 N2 O4		(M+H)+	528.3927	2.774	0.007	27.776	0.091	233.40	0.77	529.3991	0.0005	1943741
13	13	PC (38:6) (a)	C46 H80 N O8 P	5.767	(M+H)+	805.5622	6.206	0.008	34.749	0.043	289.49	0.36	806.5679	0.0019	1915518
14	14	PC (16:0_18:2)	C42 H80 N O8 P	6.355	(M+H)+	757.5622	6.460	0.009	34.319	0.130	286.20	1.09	758.5696	0.0013	1796827

그림 3. 고신뢰도 PCDL을 사용하여 NIST 혈장 추출물을 주석 처리한 결과.

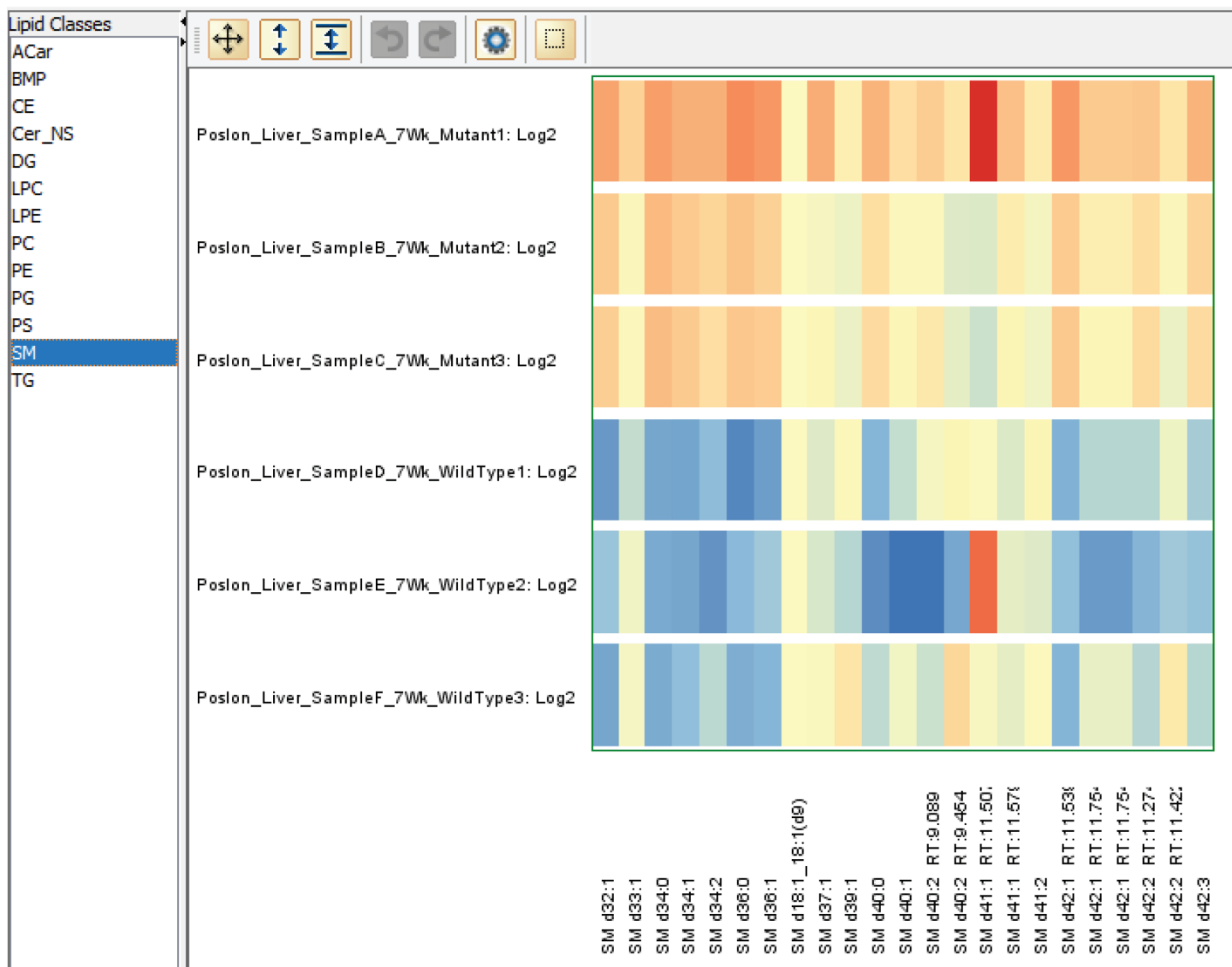


그림 4. 그림 2의 2단계에서 Agilent Mass Profiler Professional 소프트웨어를 사용하여 생성한 지질 매트릭스. PC에 대한 결과를 표시했습니다.



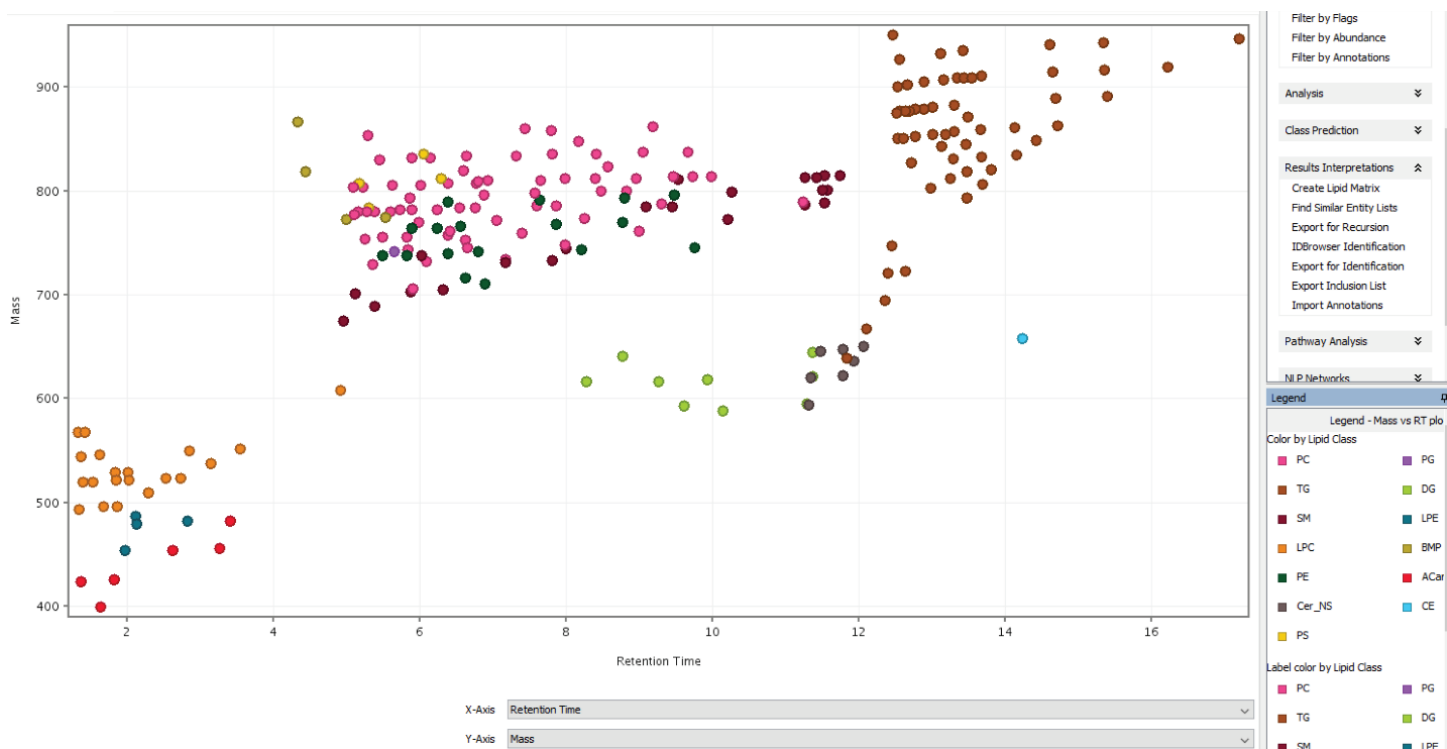


그림 5. 다양한 종류의 지질에 대한 질량 대 RT 그래프.

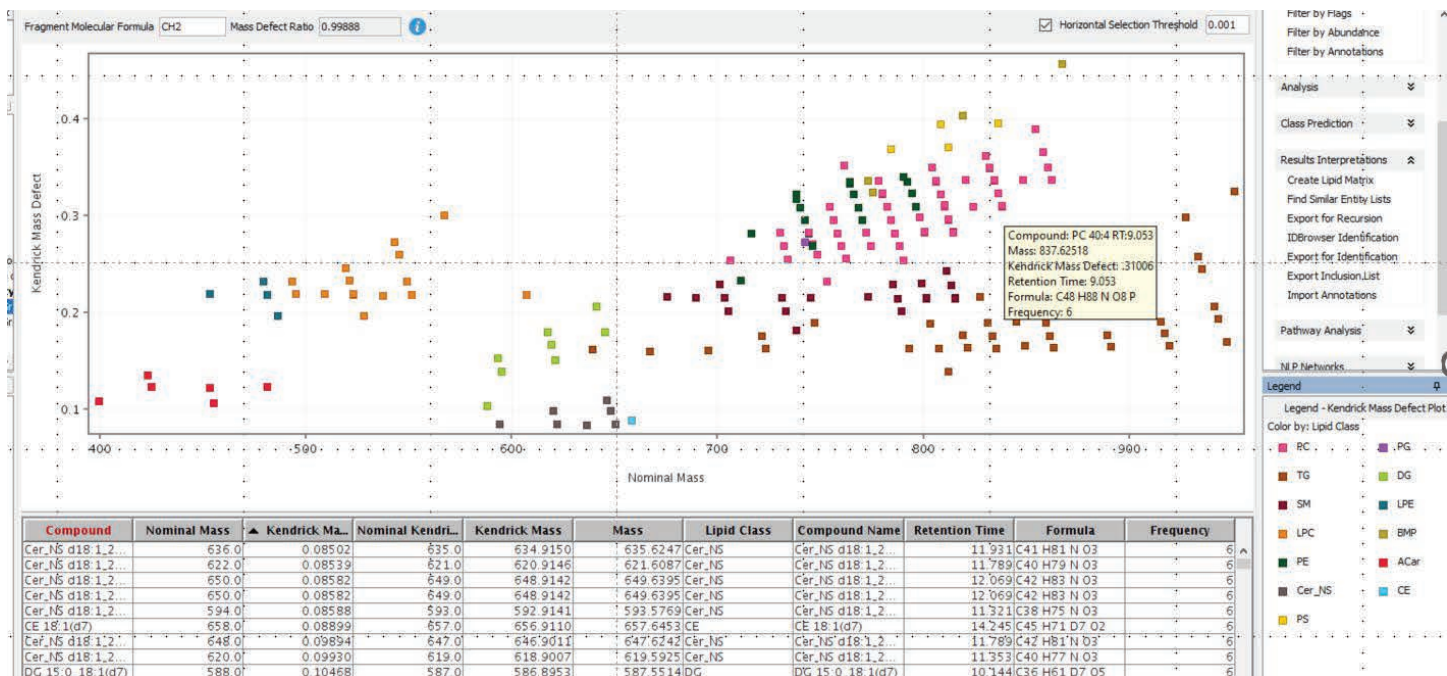


그림 6. CH<sub>2</sub>-기 수에 따라 달라지는 지질을 보여주는 Kendrick mass defect 플롯.

## 결론

- 비표적 LC/Q-TOF 및 IM LC/Q-TOF 데이터로부터 고품질, 고신뢰도의 지질 주석을 생성하는 워크플로를 설명했습니다.
- 모든 주요 지질 클래스를 포괄하는 PCDL이 만들어졌습니다.
- LC/Q-TOF와 IM LC/Q-TOF 워크플로는 accurate mass, RT, MS/MS 및 충돌 단면 항목이 있는 신뢰도 높은 지질 PCDL을 사용합니다.
- 워크플로에는 시료 전처리, 데이터 수집 및 데이터 분석이 포함되며, 이를 통해 비표적 LC/Q-TOF 및 IM LC/Q-TOF 데이터에 대한 높은 신뢰도의 지질 주석이 생성됩니다.

## 참고 문헌

1. Huynh, K.; Sartain, M.; *et al.* 혈장 지질체의 상세한 분석을 위한 종합적이고 선별된 고처리량 분석법. *Agilent Technologies 응용 자료*, 발행 번호 **5994-3747KO**, **2021**.
2. Mohsin, S.; *et al.* Creation of a High-Confidence Lipidomics Personal Compound Database Library – for Targeted Data Mining and Annotation of Untargeted High-Resolution Lipidomics Data. *Agilent Technologies technical overview*, publication number 5994-7627EN, **2024**.
3. Huynh, K.; Barlow, C. K.; Jayawardana, K.S.; Weir, J. M.; Mellett, N. A.; Cinel, M.; Magliano, D. J.; Shaw, J. E.; Drew, B. G.; Meikle, P. J. High-Throughput Plasma Lipidomics: Detailed Mapping of the Associations with Cardiometabolic Risk Factors. *Cell Chem. Biol.* **2019**, 26(1), 71–84. DOI: [10.1016/j.chembiol.2018.10.008](https://doi.org/10.1016/j.chembiol.2018.10.008)
4. Sartain, M.; *et al.* An Interlaboratory Evaluation of a Targeted Lipidomics Method in Plasma. *Agilent Technologies application note*, publication number **5994-6830EN**, **2024**.
5. Korf, A.; Vosse, C.; Schmid, R.; Helmer, P. O.; Jeck, V.; Hayen, H. Three-Dimensional Kendrick Mass Plots as a Tool for Graphical Lipid Identification. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **2018**, 32(12), 981–991. DOI: [10.1002/rcm.8117](https://doi.org/10.1002/rcm.8117)

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

연구용으로만 사용하십시오. 진단 용도로는 사용하지 않습니다.

RA45484.6137962963

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2024  
2024년 8월 12일 한국에서 발행  
5994-7588KO

한국에질런트테크놀로지스(주)  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
A+ 에셋타워 9층, 06621  
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)  
팩스: 82-2-3452-2451  
이메일: [korea-inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:korea-inquiry_lsca@agilent.com)