
大连化物所提出并发展的拟靶向代谢组学方法形成范本发表

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10246.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所高分辨分离分析及代谢组学研究组研究员许国旺团队对前期提出并发展的拟靶向代谢组学方法进行系统总结和提升，相关结果形成范本在《[自然-实验手册](#)》上发表。

代谢组学是研究内源性代谢物的科学，超高效液相色谱-质谱是广泛使用的分析工具。代谢组学分析策略主要有非靶向和靶向两种，前者一般使用高分辨质谱获得丰富的代谢物信息，但存在数据复杂、重复性差、线性范围窄等缺点；后者一般使用三重四极杆质谱，数据质量有很大提高，但通常只检测已知代谢物，覆盖度低。

针对上述特点，该研究团队于2012年首次提出拟靶向代谢组学的概念（[JChromatogr](#)

[A](#)，2012，1255：228-36）。其创新之处在于，提出了一种定量离子选择算法，用于对所有检测到的代谢物进行定量离子选择，通过保留时间锁定气相色谱-质谱选择离子监测方式，样品中已知和未知的代谢物均可被测量，该方法兼具非靶向和靶向代谢组学的优点。2013年，该方法被延伸到液相色谱-质谱领域（[Anal](#)

[Chem](#)，2013，85：8326-33），在方法建立时用高分辨质谱获取代谢物的离子对信息，而在实际样品分析时采用靶向的多反应检测（MRM）方式测量代谢物的丰度，方法覆盖度高、线性和重复性良好，且不需要标样来限定检测的代谢物。为提高方法建立的效率，该研究团队进一步开发自动挑选离子对的软件（[Anal](#)

[Chem](#)，2015，87：5050-5），并建立针对大规模临床样本分析的数据校正方法，对超千个样品的分析也获得了较好的重复性（[Anal Chem.](#)，2016，88：2234-42；[JChromatogr](#)

[A](#)，2016，1437：127-136）。在此基础上，为提高方法中包含的离子对个数，提高覆盖度，该研究团队发展了基于SWATH技术的拟靶向代谢组学方法，在正离子下即可在血浆中获得1373个离子对（[Anal](#)

[Chem.](#)，2018，90：11401-11408）。在研究脂质结构-质谱特征规律、色谱保留规律的基础上，该研究团队建立了高覆盖度拟靶向脂质组学分析新方法，涵盖19个脂类、3377个脂质离子对，覆盖7000多种脂质分子结构（[Anal Chem.](#)，2018，90：7608-7616）。

在近期的工作中，为进一步提高覆盖度，该研究团队在高峰容量的二维液相色谱-

质谱系统上建立拟靶向方法 ([Anal. Chem](#)

. , 2020 , 92 : 6043-6050) , 正离子模式和负离子模式分别检测到1294和687个离子对 , 建立的二维液相色谱-质谱拟靶向代谢组学方法可用于分离分析氨基酸、胆汁酸、肉碱、溶血磷脂、鞘脂、磷脂和甘油三酯等。这些方法已在恶性肿瘤 (肝癌、肺癌) 和糖尿病等代谢性疾病的研究中发挥积极作用。

目前 , 高覆盖度的 (半) 定量代谢组学方法在生命科学各领域均受到重视 , 拟靶向方法将会起到越来越重要的作用。为促进更多的同行使用拟靶向方法 , 基于上述前期工作 , 以血清/血浆为例 , 该研究团队进一步优化拟靶向代谢组学建立流程 , 升级并提供开放式软件和工具 , 形成方法范本。

相关工作得到国家自然科学基金项目、国家重点研究开发计划项目、大连化物所科研创新计划项目的资助。

大连化物所提出并发展的拟靶向代谢组学方法形成范本发表

研究团队单位 : 大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有 , 请勿用于商业用途 , [爱科学iikx.com](#)转发