上海有机所发表基于离子淌度质谱的多维代谢物鉴定技术和数据库

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10962.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！

中国科学院上海有机化学研究所生物与化学交叉研究中心研究员朱正江课题组发展了基于离子淌度质谱的碰撞截面积数据库（AllCCS），并开发出基于离子淌度质谱的多维代谢物分析技术，用于生命体内已知和未知代谢物的化学结构鉴定。

离子淌度质谱（Ion Mobility-Mass Spectrometry）是一类能够根据分析物离子的尺寸、形状和电荷进行气相分离和检测的质谱技术，一次分析能够同时提供多个维度信息，包括精确质量数（MS1）、二级碎片谱图（MS/MS）和碰撞截面积（CCS）数据等，有效提升了对复杂生物样品代谢组的定性和定量分析能力。

基于前期工作，该课题组发展了一个全新的碰撞截面积预测方法和数据库AllCCS。相关研究提供了一个目前最大、最全面的小分子碰撞截面积数据库平台，包含5000多个实验碰撞截面积和1100多万个预测碰撞截面积；发展了新一代的碰撞截面积预测算法，能将预测准确性提升至2%以内，并广泛适用于不同化学结构的小分子化合物；发展了特征结构相似性得分（RSS），实现了对碰撞截面积预测误差的估计；开发了基于离子淌度质谱的多维代谢物分析技术，可提升已知代谢物鉴定的准确性，并能用于未知代谢物鉴定，为未知代谢物的鉴定提供了新方法。

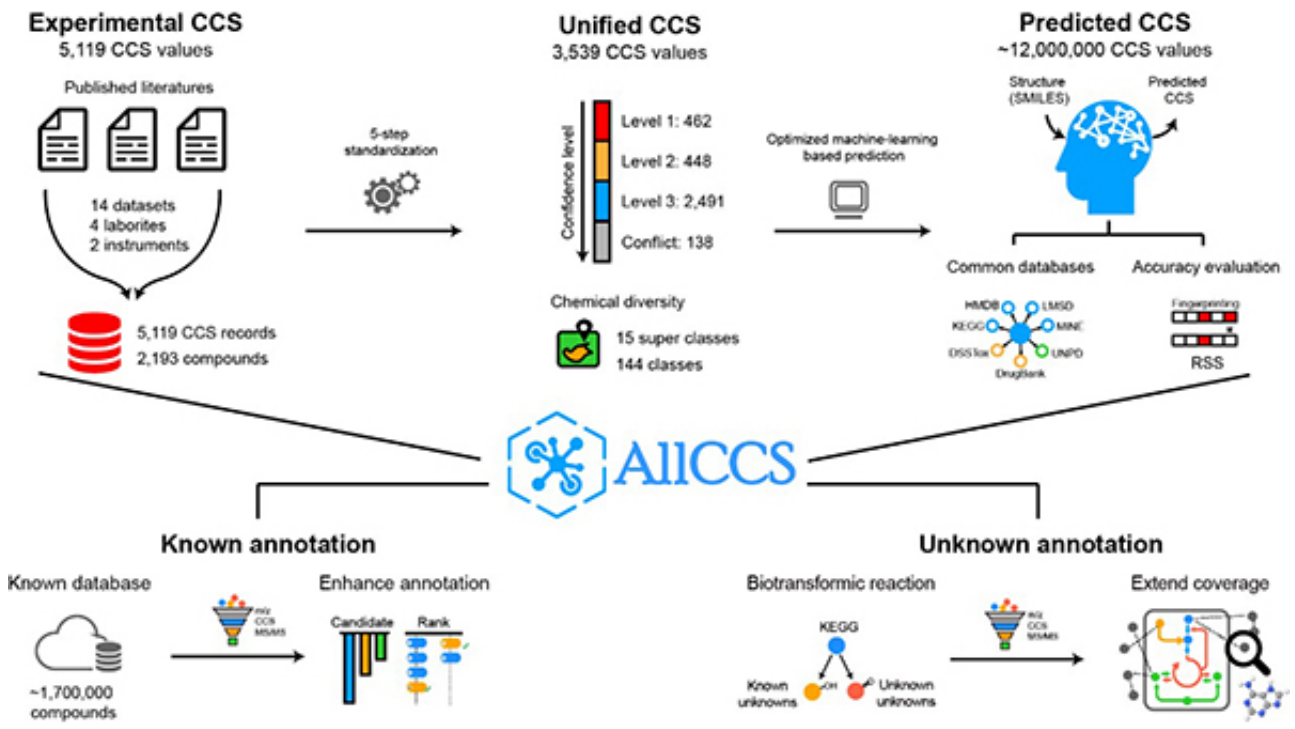
复杂生物样本中的代谢物鉴定是代谢组学研究中面临的挑战。目前，代谢物鉴定主要依赖于二级碎片谱图（MS/MS），其鉴定范围受限于标准谱图的数目，难以注释未知代谢物。PubChem等传统的小分子化合物库，尽管含有多达1亿种小分子，但是大多是非天然化合物、结构冗余度高，难以用于发现生物内源性的新代谢物。

针对未知代谢物鉴定的挑战，该课题组进一步开发了基于离子淌度质谱的多维代谢物鉴定技术。该方法首先基于生命体内普遍存在的178个生物化学反应，从已知代谢物构建新的10万种未知代谢物化学结构。 利用AllCCS及其他MS/MS工具进行多维质谱信息的预测，并通过多维匹配和打分来提升代谢物鉴定的准确性，能够有效地去除假阳性注释，提升了超过80%代谢物的定性分析准确性，进而实现了大规模检测和鉴定未知代谢物。

相关成果以*Ion Mobility Collision Cross-Section Atlas for Known and Unknown Metabolite Annotation in Untargeted Metabolomics*为题，发表在《自然-通讯》上，博士研究生周智伟为第一作者。AllCCS平台已免费向学术用户开放。研究得到国家重点研发专项、国家自然科学基金委、中科院、上海市科委等资助。

论文链接

AllCCS平台链接



基于离子淌度质谱的多维代谢物鉴定和碰撞截面积数据库AllCCS

研究团队单位：上海有机化学研究所

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