

---

# 中科院大连化物所开发N-糖肽质谱谱图解析新软件

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/17925.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！

中科院大连化物所开发N-糖肽质谱谱图解析新软件。



封面图片由中国科学报社科学可视化中心制作

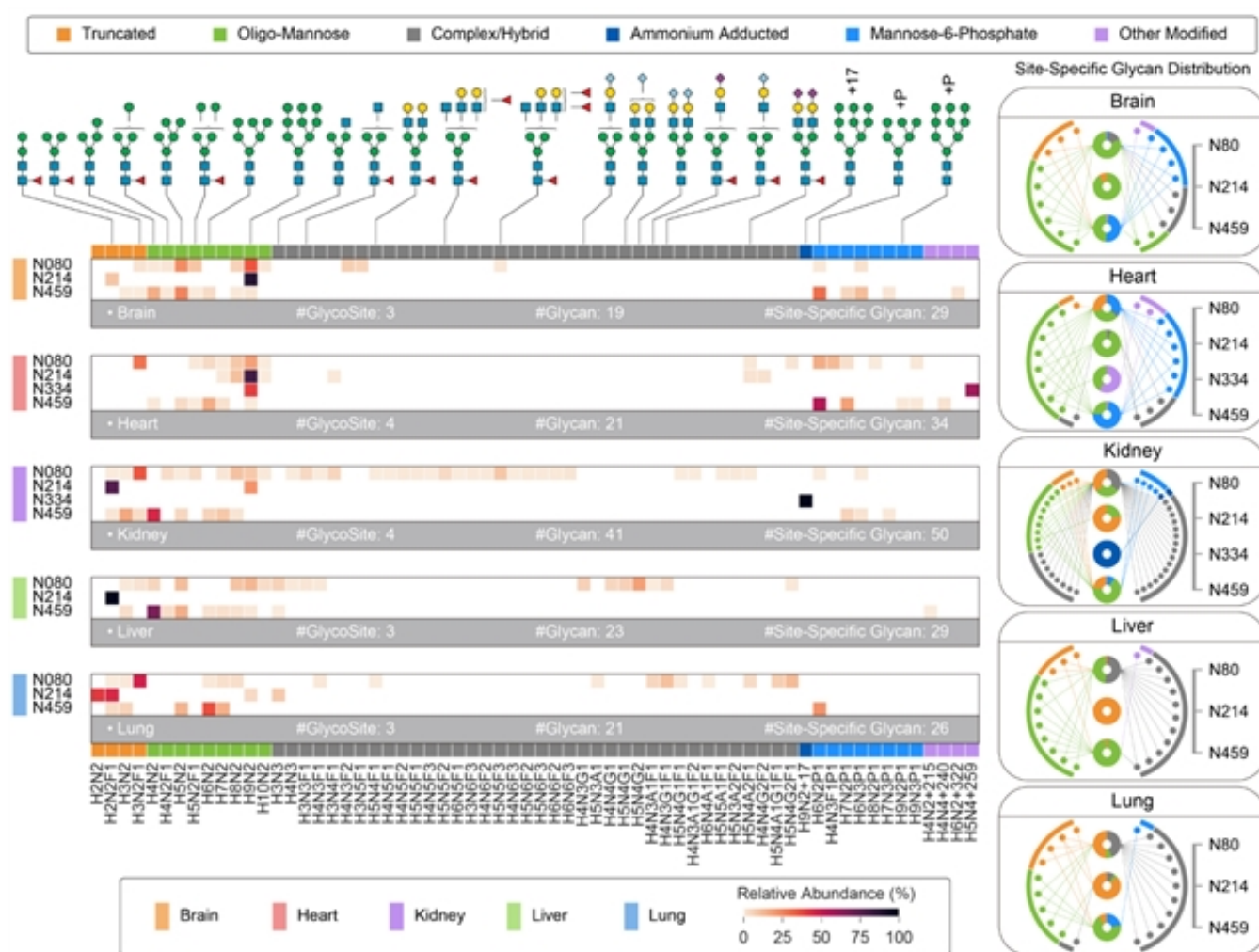
近日，中国科学院大连化学物理研究所叶明亮研究员团队开发了一款具有高灵敏度的N-糖肽质谱谱图解析新软件——Glyco-Decipher。

2022年4月7日，该研究以Glyco-Decipher enables glycan database-independent peptide matching and in-depth characterization of site-specific N-glycosylation为题，发表在Nature Communications上。该工作的共同第一作者是大连化物所博士研究生方正和秦洪强研究员。

叶明亮研究员团队开发的高灵敏度N-糖肽质谱谱图解析新软件（Glyco-Decipher）可实现在解析谱图的过程中不依赖糖库，利用不同糖肽的同一肽段骨架具有相似碎裂规律的特点，发展出基于模式识别的肽段序列鉴定新方法，实现谱图拓展，从而提高完整糖肽的鉴定灵敏度，并且可发现未知的糖链及糖链修饰。Glyco-Decipher为深度解析位点特异性糖型，揭示糖基化修饰的微观不均一性，以及研究糖生物学功能等提供了新工具。

蛋白质糖基化与疾病的发生发展密切相关，临床上使用的大多数肿瘤标志物是糖基化蛋白质。在组学层次上进行位点特异性糖型的分析对发现新型疾病标志物，提高基于蛋白质糖基化的精准医学研究水平等具有重要作用。

N-糖肽质谱谱图高度复杂，谱图解析率低，且常规N-糖肽解析软件依赖糖库，无法实现未知糖链及修饰糖的鉴定。为解决上述问题，本工作开发了非糖库依赖的肽段序列鉴定方法，实现了未知糖链肽段及其上可能带有的修饰基团的鉴定。为解决N-糖肽质谱谱图解析率低的问题，团队系统研究了糖肽的碎裂规律，发现糖链的种类、组成、母离子价态等对肽段骨架的碎裂模式没有显著的影响，建立了肽段序列相同的完整糖肽谱图之间的联系，发展了基于模式识别的肽段序列鉴定策略，实现了完整糖肽的谱图拓展，在原有基础上将完整糖肽的解析率提升了31%。



本工作还以蛋白Prosaposin为例，展示了蛋白Prosaposin在老鼠的五个不同的组织中糖基化差异，进一步揭示了该蛋白上各个位点特异性糖型的丰度分布，展示了Glyco-Decipher在蛋白糖基化分析领域的应用潜力。通过对同一个N-糖肽质谱数据进行对比分析，发现Glyco-Decipher的谱图解析效率比其它软件提升了34-179%。该软件具有友好的用户界面和较好的定量比较功能，学术界可以免费使用（软件可从github）。

叶明亮团队长期致力于位点特异性糖型分析方法的发展，包括糖肽的富集方法和谱图的解析方法

---

：在O-GlcNAc糖肽的富集方面发展了酶促标记结合化学氧化法（Anal. Chem., 2021）、可逆酶促化学标记法（Angew. Chem. Int. Edit., 2022）等方法；在O-GalNac糖肽的富集方面发展了酶解辅助的亲水作用色谱法（Anal. Chem., 2017）、酶化学方法（Anal. Chem., 2018）、Ti-IMAC富集方法（Anal. Chem. 2021）等；在N糖肽的富集方面发展了适合大样本分析的自动化富集方法（Anal. Chem., 2021）；在O-GalNac糖肽的谱图解析方面，发展了O-search检索策略（Anal. Chem., 2019），有效地减小了检索空间，提高了鉴定灵敏度。最近，上述检索策略被集成于一款具有自主知识产权的谱图检索软件——MS-Decipher（Bioinformatics, 2022）中。

上述工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、大连化物所创新基金等项目的支持。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-022-29530-y>

作者：叶明亮等 来源：《自然-通讯》

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](https://www.iikx.com)转发