



青岛农业大学
QINGDAO AGRICULTURAL UNIVERSITY

基于质谱的组学分析测试

高端质谱团队

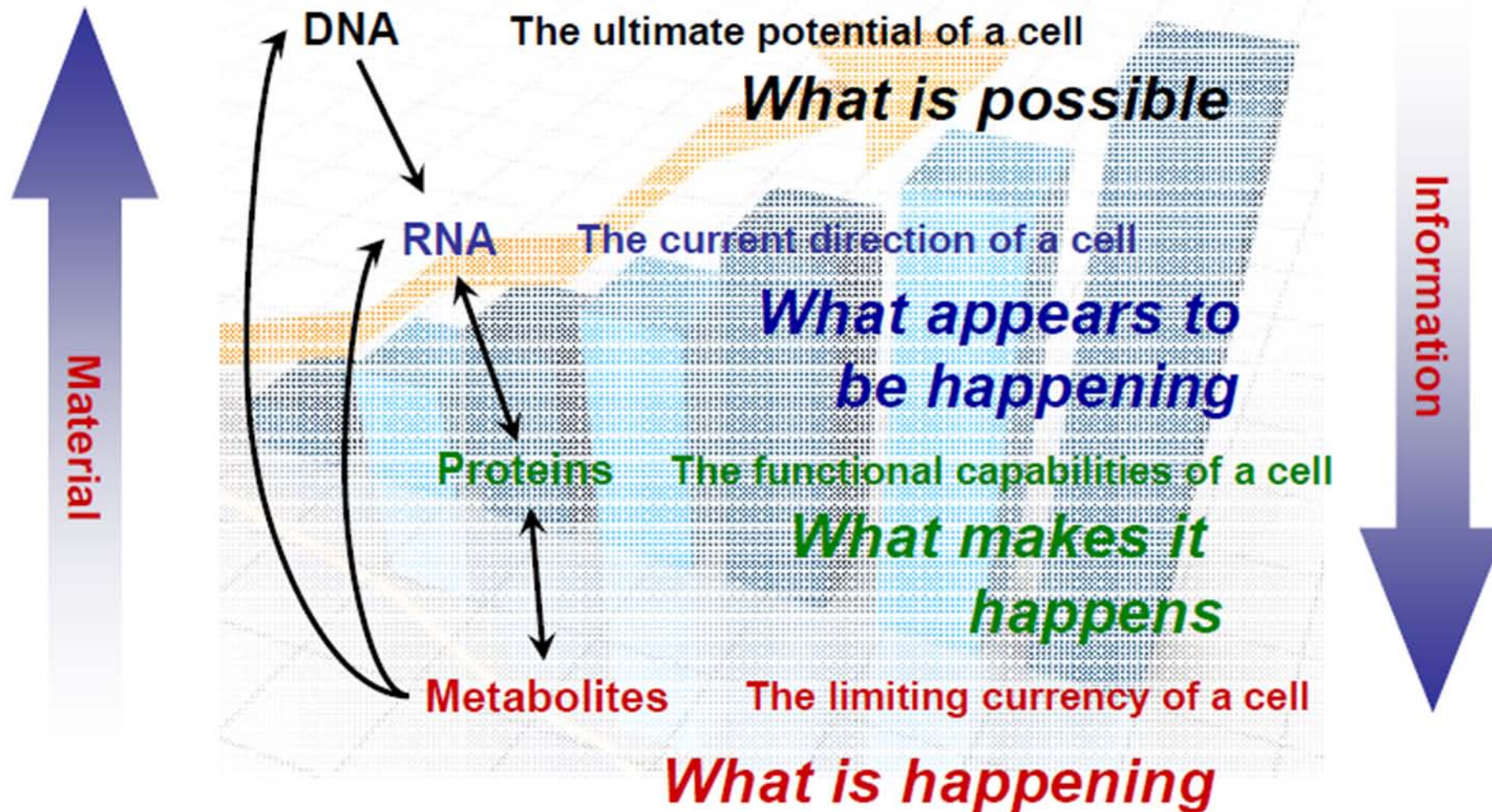
成员：徐坤 周远明 胡春辉 王倩文 陈贵兰

地址：科技楼1008

联系方式：0532-58957614

-omics :

Proteomics , Metabolomics , Foodomics.....

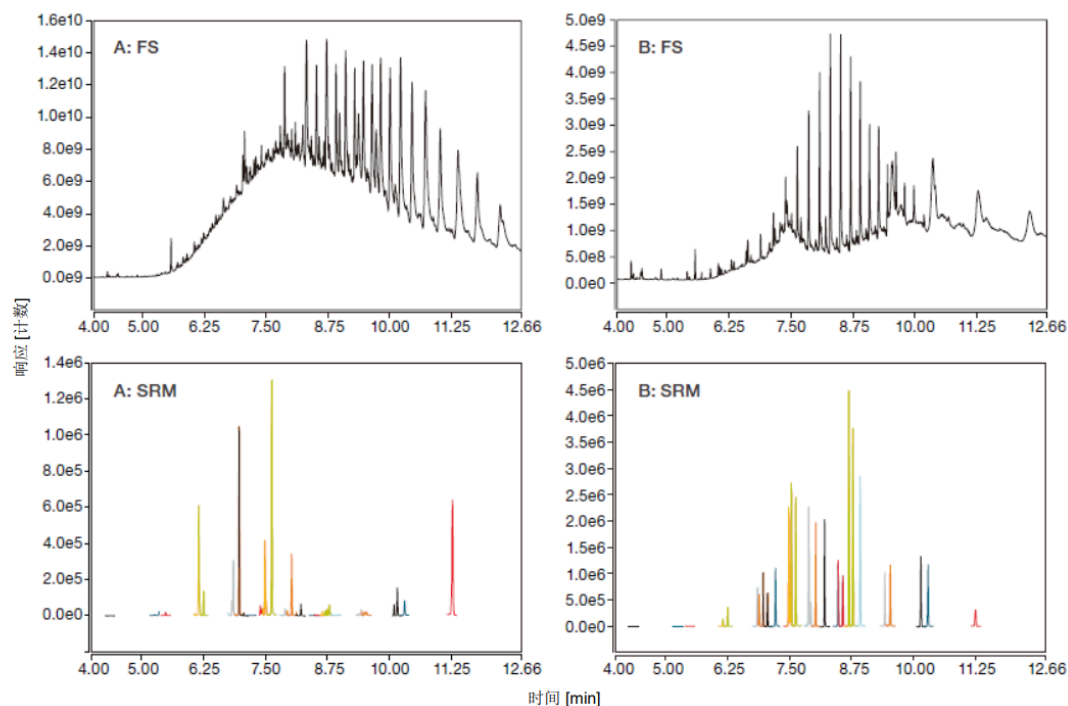


组学主要技术平台

方法	优点	缺点
NMR（核磁共振）	非破坏性，无偏向性 样本需求量小 特异性强，分辨率高	检测动态范围有限； 灵敏度和分辨率较MS低； 能检测的峰少（200个左右）。
GC-MS（气-质联用仪）	有较高的灵敏度和分辨率 有可参考的标准图谱数据库，易于定性	样品前处理复杂，需衍生化，引入差异； 不适用于难挥发或半挥发性物质的分析； 化合物数据量少，~500峰； 不适合分析稳定性差的化合物，如核苷、核苷酸等化合物。
LC-MS（液-质联用仪）	高分辨率、灵敏度； 检测动态范围宽； 样品处理简单，不需要衍生化；	有自建数据库和网络数据库，有一定限制~20000峰； 以基因组为基础的自下而上的蛋白质组学研究。

中心实验室组学相关设备-GC-MS

- 液体进样
- 气体顶空进样
- 顶空固相微萃取进样

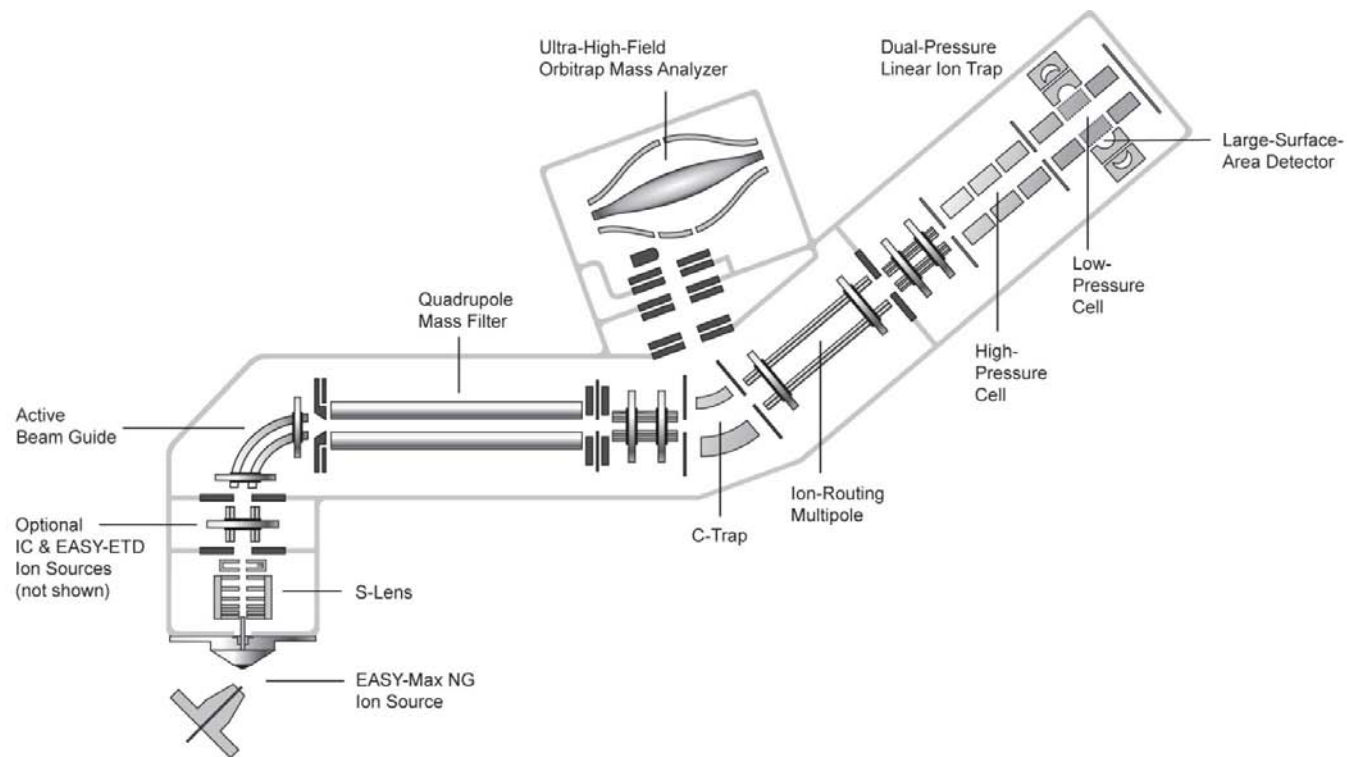


- 定性分析-Xcalibur-NIST谱库
- 定量分析-TraceFinder

中心实验室组学相关设备-LC-MS

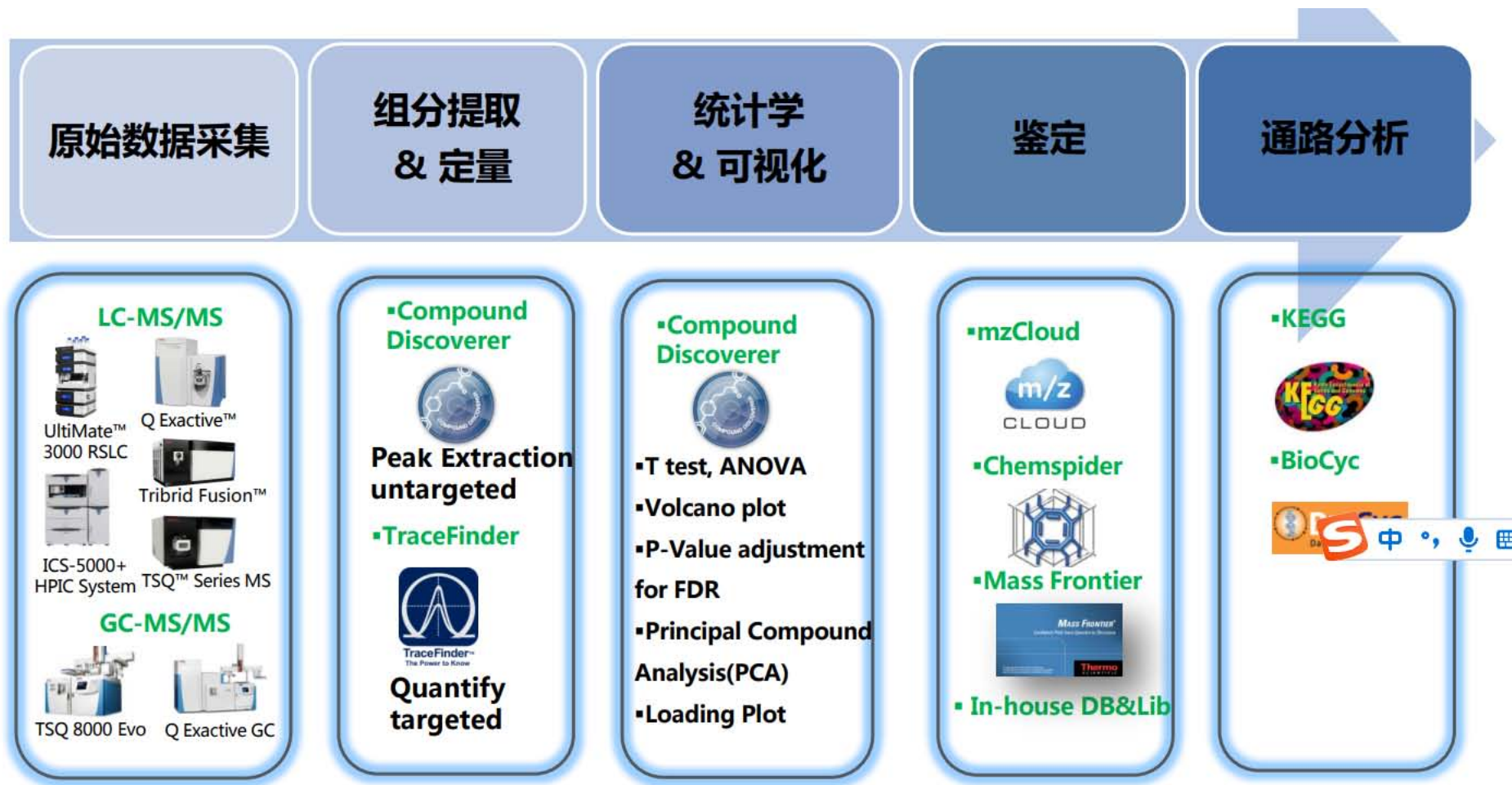


- 1000K at m/z 200
- Mass range: 50-6000
- 质量精度：1 ppm



领域	具体描述
代谢物靶标分析 (Metabolite target analysis)	对某个或某几个特定组分分析。在这个层次上，需要采取一定的预处理技术，除掉干扰物，以提高检测灵敏度。
代谢轮廓分析 (Metabolite profiling analysis)	对少数预设的一些代谢产物的定量分析。如某一类结构、性质相关的化合物、某一代谢途径的所有中间产物或多条代谢途径的标志性组分。进行代谢轮廓分析时，可以充分利用这一类化合物特有的理化性质，在样品前处理和检测过程中，采用特定技术来完成。
代谢组学 (Metabonomics, Metabolomics)	限定条件下特定生物样品中所有内源性代谢组分的定性和定量。进行代谢组学研究时，样品的预处理和检测技术必须满足对所有代谢组分具有高灵敏度、高选择性、高通量的要求，且机体干扰小。代谢组学涉及的数据量大，需要有能对数据进行解析的化学计量学技术。
代谢指纹分析 (Metabolic fingerprinting analysis)	不具体鉴定单一成分，而是通过比较代谢物指纹图谱的差异对样品进行快速分类（如表型的快速鉴定）。
定量蛋白质组学 (Quantification Proteomics)	对一个基因组表达的全部蛋白质或一个复杂混合体系内所有蛋白质进行精确鉴定和定量。可用于筛选和寻找任何因素引起的样本之间的差异表达蛋白，结合生物信息学揭示细胞生理病理功能，同时也可对某些关键蛋白进行定性和定量分析。

组学分析流程



中心实验室组学相关软件-CD

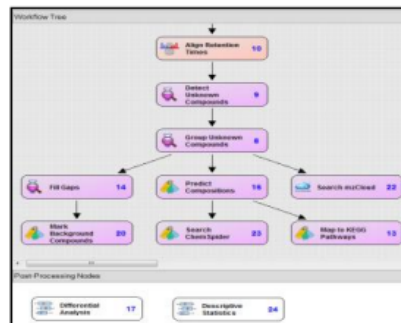
Compound Discoverer 软件提供了强大的非靶向和靶向性的工作流程。用于多种应用，包括代谢组学、药物代谢、环境、食品和毒理学研究等，此外，软件提供差异分析、互动统计数据分析和通路分析等大型数据集的可视化工具。

Data Analysis

- ✓ 自动化处理方法编辑，简单易操作;
- ✓ 模块化设计，可灵活组合的数据处理流程;
- ✓ 多种不同数据库供选择搜索，根据一级及其**二级质量精度**、同位素丰度比和库中质谱图，自动匹配最佳结果，给出分子式构成和化合物名称;
- ✓ **Heat map-like** tables for Peak Areas, Ratios, Fold Change, etc.
- ✓ 提供PCA、火山图，PLS-DA，S-plot等多种多维统计分析工具;
- ✓ 直接连接**KEGG, BioCyc等工具**进行代谢通路分析.



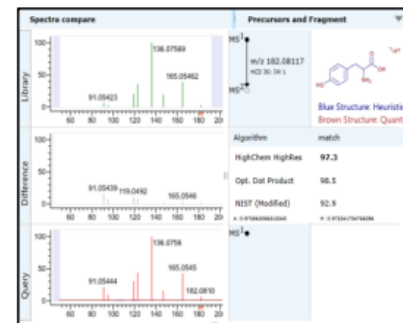
Workflow Selection



Statistic Analysis



Metabolite Identification



Pathway Mapping



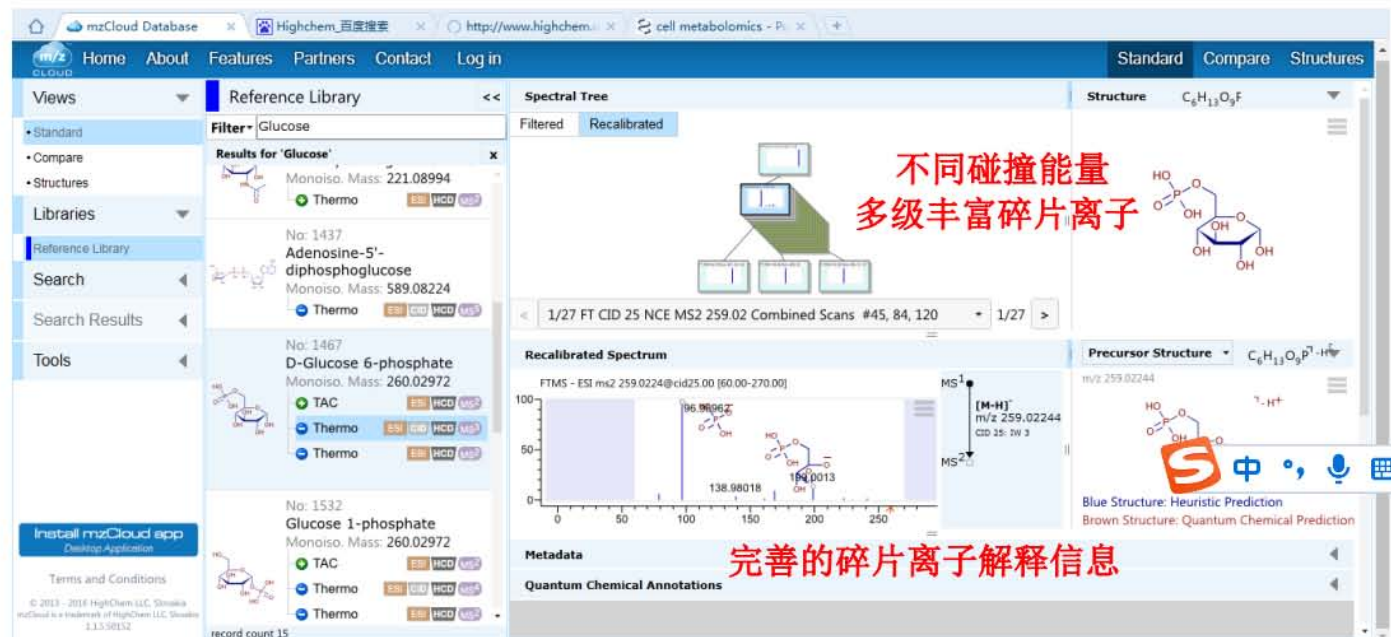
中心实验室组学相关软件-mzCloud



内源性代谢物数据库 (4400种)



Chemspider



Spectrum Search

Tree Search

m/z Search

Structure Search

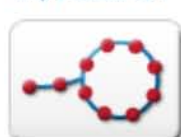
检索方式



Name Search



Isotope Search

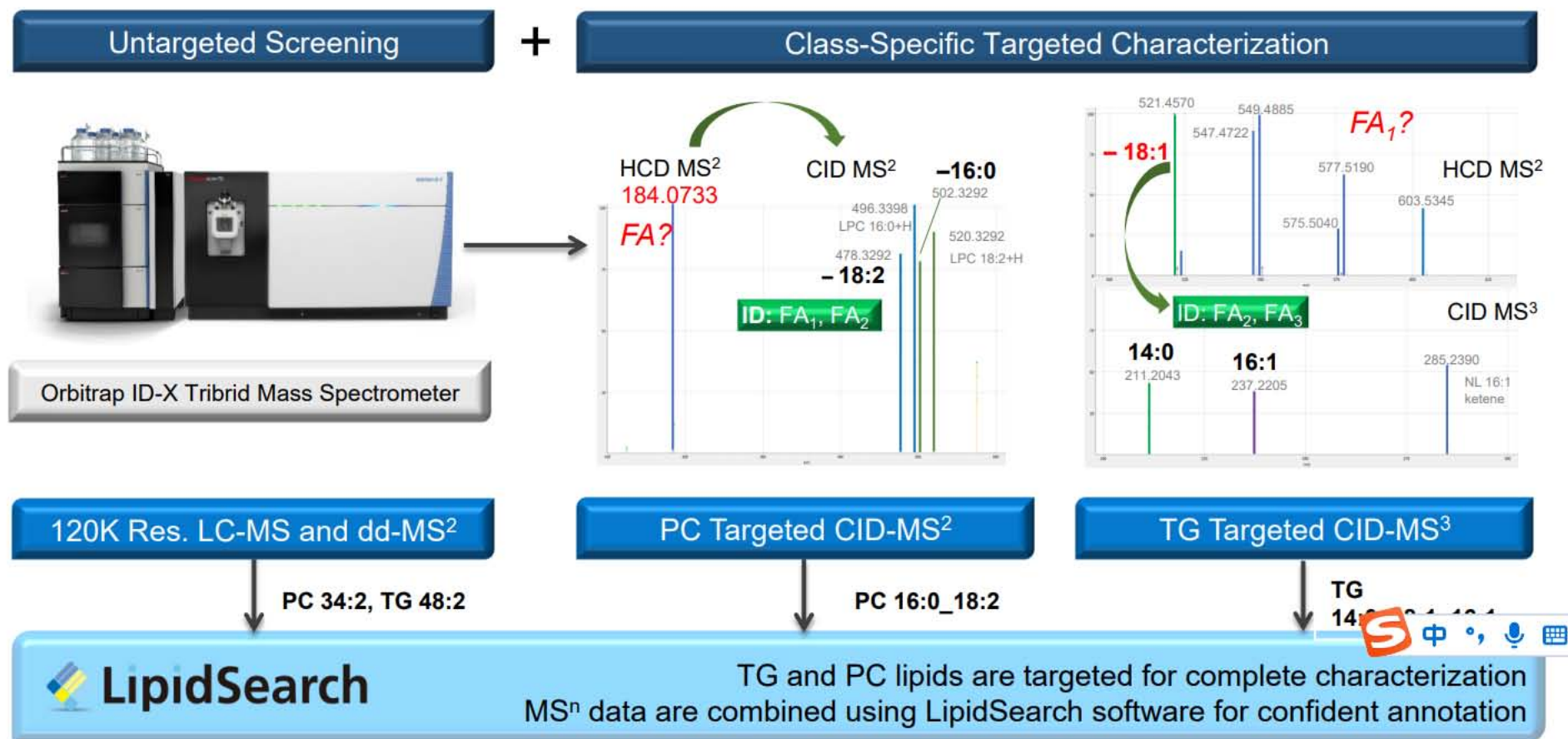


Pathway Search



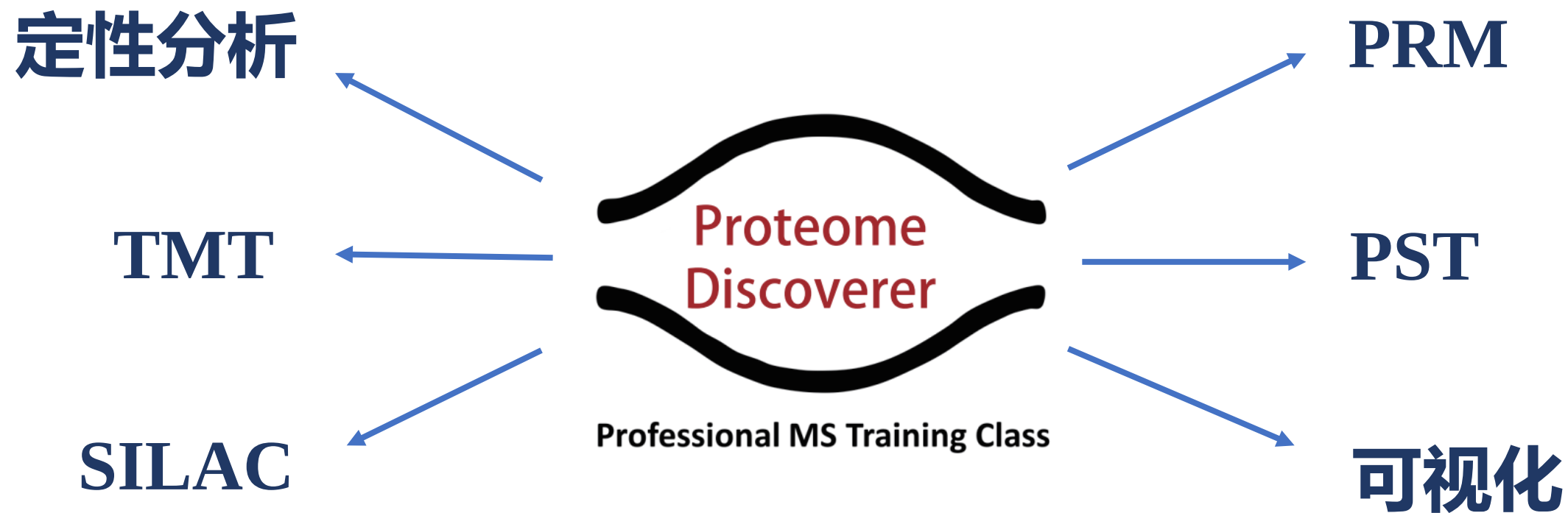
Substructure Search

中心实验室组学相关软件-LipidSearch



- 包含170万种脂质信息，只需原始数据导入即可完成脂质组学从峰提取、脂质鉴定、定量到统计学分析的全流程分析需求。

中心实验室组学相关软件-PD



不足之处

样本制备

质谱检测

数据分析

- 缺少前处理相关设备
- 亟待建立不同样本的组学样本提取方法

- GC高分辨检测器
- LC-MS离子源：-MALDI
- LC-MS检测器：TOF

- GC数据分析软件
- CD软件升级
- PD软件升级
- 肽图分析软件

- 谢谢大家！
- 请各位专家批评指正！