许国旺课题组提出非靶向代谢组数据处理和代谢物鉴定新方法

来源：分析化学 阅读数:90 时间：2022-06-08 17:12:23

近日，许国旺课题组在非靶向代谢组学数据处理和代谢物鉴定中取得新进展，构建了系统性的液相色谱-质谱联用的代谢物数据库，通过保留时间校正，靶向提取，自动峰识别，二级质谱相似性计算等步骤，完成从原始数据到代谢物定性的数据处理流程，为代谢物的大规模鉴定提供了帮助。

图片

非靶向代谢组学数据处理和代谢物鉴定是一个被广泛关注的问题，数据处理质量和代谢物鉴定的准确性和覆盖度直接影响后续分析和利用。经典的非靶向代谢组学数据处理流程常常基于一些峰匹配软件（XCMS，MS-DIAL，MZmine2）获得峰表，然后搜索数据库进行代谢物的鉴定。由于目前常用数据库中保留时间信息很少，并且在峰匹配过程中会丢失一些代谢物的信息，使得代谢物鉴定的准确性和覆盖度亟需改进。

针对上述问题，许国旺课题组构建了一个包含保留时间，一级质谱，二级质谱信息的代谢物数据库MetExDB，开发了基于此数据库的非靶向代谢组学数据的代谢物靶向提取和鉴定的软件MetEx。MetEx整合了保留时间校正、代谢物靶向提取、自动峰识别、二级质谱相似性计算等模块，实现了从原始数据出发的自动化、高覆盖的代谢物规模化鉴定。将数据库和软件用于人类血浆、尿液、HepG2细胞、小鼠肝脏和粪便样本，可鉴定出900~ 1800种的代谢物。

相关研究成果以“MetEx:a Targeted Extraction Strategy for Improving the Coverage andAccuracy of Metabolite Annotation in Liquid Chromatography-HighResolution Mass Spectrometry Data”为题，发表在《分析化学》（AnalyticalChemistry）上。该工作的第一作者是课题组博士研究生郑福建，通讯作者为赵欣捷副研究员和许国旺研究员。上述工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、大连化物所创新基金等项目的资助。

文章链接

图片

https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.analchem.1c04783

来源：化物所

版权所有：Copyright © 2008. All rights reserved

本系统由北京仁和汇智信息技术有限公司设计开发 技术支持：info@rhhz.net