

## 非靶代谢常见问题

### 1.为什么要分正负离子模式？

由于代谢物的性质不同，离子化后，有的代谢物容易带正电荷，有的代谢物容易带负电荷。为了能够检测到更多的代谢物，所以一般分为正、负离子两个模式分别去检测。有些物质属于两性物质，在正负模式下都会被检测出。

### 2.同一样本中不同物质的定量值能不能进行比较？

答：不能，由于不同物质具有不同的分子结构和化学性质，故不同物质在质谱中的离子化效率、信号响应强度会差异很大，导致最终的结果是不同物质的质谱检测效率不同。即使是相同含量的不同物质，可能也会出现一个能检测到而另一个则检测不到的情况。非靶向代谢组学主要是通过比较不同条件下代谢水平的差异，进而解释现象或机制，也即非靶向代谢组得到的代谢物的定量结果，仅适用于同一物质在不同状态（实验/对照）间的比较，而不是不同物质在同一实验状态下的比较。因此非靶向代谢组也不能用来计算某一代谢物在样本中的相对含量（代谢物在样本中所占的百分比）。

### 3.非靶向代谢的定量值是如何计算的？单位是什么？

非靶向代谢定量值的计算是对每个代谢物对应的色谱峰进行积分计算峰曲线下面积而得到的结果。质谱图纵坐标 AU 表示相对强度，横坐标 min 表示保留时间，非靶向代谢使用 CD 软件（类靶向代谢使用 OS 软件）对曲线下面积进行计算就得到了峰面积值，单位一般是  $\text{mAU} \cdot \text{min}$ 、 $\text{AU} \cdot \text{min}$  或  $\text{mV} \cdot \text{min}$ ；由于代表相对含量，只用作不同样本间同一代谢物含量多少的比较，故实际单位并没有实际意义。

### 4.非靶向代谢是否可以分批次送样？

不建议分批次送样

不同批次上机得到的代谢组数据是会有批次效应，主要是因为不同时期仪器的稳

定性和状态以及色谱柱等的实际情况是不同的,即使是同一样本使用同一仪器在不同时间上机,最终得到的代谢物鉴定数目以及相应代谢物定量值也会有所不同,另外两次上机的人员操作和样本本身状态都是不同的,因此不同批次得到的代谢物的定量结果不能进行比较。

## 5.关注某个物质,但检测结果中却没有,是什么原因?

- 1) 非靶向代谢物提取方法需要尽可能多的提取到大多数代谢,对于特定代谢物来说,该方法并非最优的提取方法;
- 2) 非靶代谢扫描模式是 DDA (数据依赖性),在特定物质出峰处有其它物质干扰,因此未采集到该物质的谱图信息;
- 3) 搜库过程,由于低于设置的阈值(质量偏差 5ppm、信号强度 100000、信噪比 3)而被过滤掉;

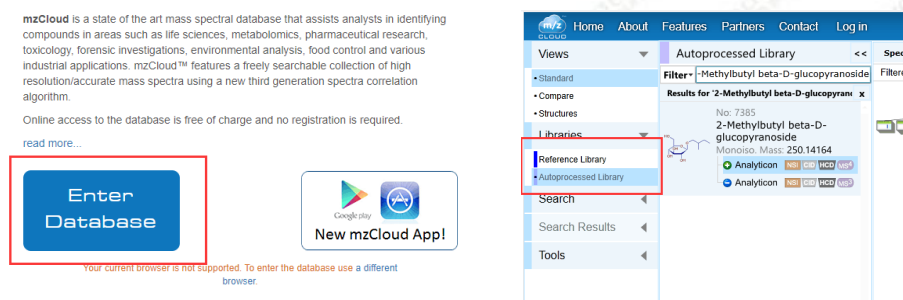
## 6.非靶代谢鉴定结果中 PC ( 20:5/16:1 )、PA ( 12:0/18:0 ) 代表什么?

由于非靶代谢使用蛋白沉淀的方法进行提取,也可以提取到部分脂质类的物质,因此在鉴定结果中会出现部分脂质类化合物,由于脂质的命名与脂质结构紧密相关,一大类脂质都具有统一结构,以 PC (20:5e/16:1) 为例右侧的支链不同亚类不同,PC (20:5e/16:1): 20:5 和 16:1 分别代表一个碳链,20:5 表示碳链有 20 个 C, 5 个双键,16:1 代表这条碳链上有 16 个 C 原子,1 个双键,e 没有实质意义(在脂质命名的情况里,e 表示醚键,o 表示氧化,p 表示醚双键)



## 7. 鉴定到的结果来源于 mzCloud 数据库,但是在 mzCloud 官网查询不到如何解决?

查不到的原因是因为 mzCloud 有两个库,在页面上搜不到。点击截图标红框的数据库进去,安装插件之后重启浏览器才能进另外的数据库中查找代谢物。



## 8. HMDB 是人类代谢物数据库,为什么用来注释其它样本类型的代谢物?

代谢物都是小分子代谢物,其所属分类不会因为所处的物种或者环境不同而改变,因此也并不存在针对某个物种进行注释分析。HMDB 注释的作用主要用于化合物的分类进行注释,后续分析并没有针对 HMDB 注释的结果进行有针对性的筛选之后再进行分析。

## 9. 质谱相关参数及单位说明

SprayVoltage 喷雾电压; Sheathgasflowrate 鞘气流速, arb 为流速单位;  
AuxGasflowrate 辅助气流速, Aux Gas 中文意思是辅助气, 全称是 Auxiliary Gas;  
CapillaryTemp 离子传输管温度; data-dependentscans 数据依赖型扫描。

## 10.代谢数据可以上传的网站

MetaboLights (<https://www.ebi.ac.uk/metabolights/>) 是欧洲生物信息学研究所 (EMBL-EBI) 第一个用于跨平台和跨物种代谢组学研究的通用、开放存取的数据库。

MetaboLights 也是众多期刊推荐的代谢组学原始数据上传的数据库。

该数据库主页中有详细的原始数据上传步骤视频

(<https://www.ebi.ac.uk/metabolights/help>)，可根据视频要求进行代谢原始数据上传。

### Online Study Submission

Please checkout the video below for step by step guide to create a MetaboLights study online.

