



代谢组学文献汇编



目 录

一、疾病和精准医学	03
二、动物代谢组学	16
三、微生物代谢组学	22
四、中药和药物代谢组学.....	37
五、植物农业食品	55
六、环境生态毒理	77
七、脂质组学.....	89
八、代谢组学方法学研究.....	104

mTORC1 Couples Nucleotide Synthesis to Nucleotide Demand Resulting in a Targetable Metabolic Vulnerability

Alexander J. Valvezan,¹ Marc Turner,¹ Amine Belaid,² Hilaire C. Lam,² Spencer K. Miller,¹ Molly C. McNamara,¹ Christian Baglini,² Benjamin E. Housden,³ Norbert Perrimon,^{3,4} David J. Kwiatkowski,² John M. Asara,⁵ Elizabeth P. Henske,² and Brendan D. Manning^{1,6,*}

作者单位： Harvard T.H. Chan School of Public Health, and Harvard Medical School, USA

中文翻译： 雷帕霉素复合物 1 作用机理是将核苷酸合成与核苷酸需求结合导致目标代谢受损

文献出处： Cancer Cell 2017 (IF = 22.844), doi: 10.1016/j.ccell.2017.09.013

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 利用基于 SCIEX QTRAP 5500 正、负离子切换检测平台对血浆、组织或细胞培养液中的提取代谢物进行检测分析，并对咪唑立宾和代谢物一磷酸咪唑立宾进行准确定量。发现鸟苷酸核苷酸合成的药物抑制剂对有结节性硬化综合征缺陷细胞（包括肿瘤细胞）有选择性的损伤作用。这些发现揭示了由合成代谢失衡触发雷帕霉素复合物 1 下游代谢的脆弱性，因此一些临床上耐受性良好的肌苷一磷酸脱氢酶抑制剂可用于治疗结节性硬化综合征。

标签： 雷帕霉素，结节性硬化综合征，肿瘤细胞，靶向代谢组学

Farnesoid X Receptor Regulation of the NLRP3 Inflammasome Underlies Cholestasis-Associated Sepsis

Haiping Hao,^{1,2} Lijuan Cao,^{1,2} Changtao Jiang,^{2,3,5} Yuan Che,¹ Songyang Zhang,^{2,3} Shogo Takahashi,⁶ Guangji Wang,^{1,2} and Frank J. Gonzalez^{1,4,*}

作者单位：中国药科大学

中文翻译：NLRP3 炎症小体的胆汁酸受体调控是胆汁淤积性败血症的基础

文献出处：Cell Metab 2017 (IF = 20.565), doi: 10.1016/j.cmet.2017.03.007

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：肝功能不全和由此引起的胆汁淤积是败血症的常见并发症。血浆中胆汁酸水平的升高被认为是败血症的预后生物标志物，然而目前尚不清楚这是否是由于胆汁酸分解代谢和转运失调所致，以及是否是败血症的早期或晚期事件。为此，基于高分辨质谱技术对脂多糖诱导的内毒素血症进行了非靶向代谢组学研究。脂多糖激发可在 1 小时内诱导明显的代谢变化，胆汁酸是引起代谢差异的主要化合物之一。结果表明胆汁酸和胆汁酸受体通过控制 NLRP3 炎性体在脓毒症中起关键作用，而靶向胆汁酸受体可能是胆汁淤积性脓毒症的治疗策略。

标签：胆汁酸淤积症，非靶向代谢组学，脂多糖诱导

Gut microbiota and intestinal FXR mediate the clinical benefits of metformin

Lulu Sun^{1,8}, Cen Xie^{2,8}, Guang Wang^{3,8}, Yue Wu^{4,8}, Qing Wu¹, Xuemei Wang¹, Jia Liu³, Yangyang Deng^{1b,4}, Jialin Xia¹, Bo Chen¹, Songyang Zhang¹, Chuyu Yun¹, Guan Lian¹, Xiujuan Zhang¹, Heng Zhang³, William H. Bisson⁵, Jingmin Shi², Xiaoxia Gao², Pupu Ge⁶, Cuihua Liu⁶, Kristopher W. Krausz², Robert G. Nichols⁷, Jingwei Cai⁷, Bipin Rimal⁷, Andrew D. Patterson^{1b,7}, Xian Wang¹, Frank J. Gonzalez^{1b,2} and Changtao Jiang^{1*}

作者单位： 北京大学基础医学院

中文翻译： 肠道微生物菌群和胆汁酸受体介导二甲双胍的临床疗效

文献出处： Nat Med 2018 (IF = 32.621), doi: 10.1038/s41591-018-0222-4

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600, QTRAP 5500

质谱主要用途： 二甲双胍的抗高血糖作用被认为是由其肝细胞信号传导过程的直接作用引起的，从而降低肝糖原异生。最近，二甲双胍被报道改变人类肠道微生物群，这表明该药物的高血糖降低作用可能是调节肠道微生物群数量的结果。然而，与二甲双胍代谢益处相关的关键微生物信号代谢物和宿主靶点仍然难以确定。因此，基于液质联用技术对新诊断的 2 型糖尿病患者的样本进行了元基因组和代谢组学分析，这些患者接受二甲双胍治疗结果显示杆菌减少，胆汁酸糖醛酸增加。高脂饮食喂养的小鼠易患更严重的葡萄糖不耐症，二甲双胍治疗葡萄糖不耐症的代谢益处被取消。二甲双胍部分通过胆汁酸糖醛酸肠道胆汁酸受体改善代谢功能障碍。

标签： 肠道微生物菌群，二甲双胍，糖尿病，代谢组学

Hypothalamic-Pituitary Axis Regulates Hydrogen Sulfide Production

Christopher Hine,^{1,15,16} Hyo-Jeong Kim,^{2,15} Yan Zhu,^{2,15} Eylul Harputlugil,¹ Alban Longchamp,^{1,4} Marina Souza Matos,² Preeti Ramadoss,² Kevin Bauerle,² Lear Brace,¹ John M. Asara,³ C. Keith Ozaki,⁴ Sheue-yann Cheng,⁵ Subhankar Singha,⁶ Kyo Han Ahn,⁶ Alec Kimmelman,⁷ Ffolliott M. Fisher,² Pavlos Pissios,² Dominic J. Withers,⁸ Colin Selman,⁹ Rui Wang,¹⁰ Kelvin Yen,¹¹ Valter D. Longo,¹¹ Pinchas Cohen,¹¹ Andrzej Bartke,¹² John J. Kopchick,¹³ Richard Miller,^{1,4} Anthony N. Hollenberg,^{2,*} and James R. Mitchell^{1,17,*}

作者单位： Harvard T.H. Chan School of Public Health, and Harvard Medical School, USA

中文翻译： 下丘脑垂体调节硫化氢的生成

文献出处： Cell Metab 2017 (IF = 20.565), doi: 10.1016/j.cmet.2017.05.003

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 生长激素和甲状腺激素信号的降低与寿命和代谢适应性有关。这些益处背后的机制尚不清楚，但可能与饮食限制的机制重叠。采用基于 QTRAP 5500 上建立的靶向代谢组学方法对小鼠肝脏中极性代谢物进行代谢组学研究。在生长激素和 / 或甲状腺激素作用降低的长期存活的小鼠中发现肝中硫化氢的量增加。生长激素和甲状腺激素对肝内硫化氢产生的负调控是具有加合的，它们通过不同的机制进行调控，生长激素通过底物水平对硫化氢的量进行调控，而甲状腺激素是通过对能够产生硫化氢的胱硫醚裂合酶的直接转录抑制进行调控。缺乏胱硫醚裂合酶的小鼠未能下调全身 T4 代谢和循环 IGF-1，这揭示了硫化氢在调节寿命相关的关键激素中的重要作用。

标签： 寿命，生长激素，靶向代谢组学，硫化氢

Intestinal microbiota metabolism of L-carnitine, a nutrient in red meat, promotes atherosclerosis

Robert A Koeth^{1,2}, Zeneng Wang^{1,2}, Bruce S Levison^{1,2}, Jennifer A Buffa^{1,2}, Elin Org³, Brendan T Sheehy¹, Earl B Britt^{1,2}, Xiaoming Fu^{1,2}, Yuping Wu⁴, Lin Li^{1,2}, Jonathan D Smith^{1,2,5}, Joseph A DiDonato^{1,2}, Jun Chen⁶, Hongzhe Li⁶, Gary D Wu⁷, James D Lewis^{6,8}, Manya Warriar⁹, J Mark Brown⁹, Ronald M Krauss¹⁰, W H Wilson Tang^{1,2,5}, Frederic D Bushman⁵, Aldons J Lusis³ & Stanley L Hazen^{1,2,5}

作者单位： Department of Cellular & Molecular Medicine, Cleveland Clinic, USA

中文翻译： 红肉营养素左旋肉碱的肠道微生物代谢促进动脉粥样硬化

文献出处： Nat Med 2013 (IF = 32.621), doi:10.1038/nm.3145

质谱平台： SCIEX API 5000

质谱主要用途： 胆碱和磷脂酰胆碱在肠道微生物群中代谢产生三甲胺（TMA），三甲胺进一步代谢为致动脉粥样硬化的物质氧化三甲胺（TMAO）。饮食中 L- 肉碱（红肉中富含的一种三甲胺）在肠道微生物群代谢产物也会产生 TMAO 并加速小鼠动脉粥样硬化。通过微生物群依赖机制摄入左旋肉碱后，杂食的受试者比素食者会产生更多的 TMAO。采用 API 5000 对 2595 例受试者血浆中 L- 肉碱和 TMAO 进行定量检测，高浓度肉碱和 TMAO 预测了心血管疾病和重大心脏不良事件（心肌梗死、中风或死亡）风险的增加。在小鼠中长期补充 L- 肉碱会改变盲肠微生物组成，显著增强 TMA 和 TMAO 的合成，增加动脉粥样硬化，但如果肠道微生物群被抑制，则不会发生这种情况。在具有完整肠道微生物群的小鼠中，添加 TMAO 或肉碱或胆碱的饮食可减少体内胆固醇转运。

标签： TMAO，心血管疾病，靶向代谢组学，动脉粥样硬化

ARTICLE

doi:10.1038/nature09922

Gut flora metabolism of phosphatidylcholine promotes cardiovascular disease

Zeneng Wang^{1,2}, Elizabeth Klipfell^{1,2}, Brian J. Bennett³, Robert Koeth¹, Bruce S. Levison^{1,2}, Brandon DuGar¹, Ariel E. Feldstein^{1,2}, Earl B. Britt^{1,2}, Xiaoming Fu^{1,2}, Yoon-Mi Chung^{1,2}, Yuping Wu⁴, Phil Schauer⁵, Jonathan D. Smith^{1,6}, Hooman Allayee⁷, W. Li, Wilson Tang^{1,2,6}, Joseph A. DiDonato^{1,2}, Aldons J. Lusis³ & Stanley L. Hazen^{1,2,6}

作者单位： Department of Cellular & Molecular Medicine, Cleveland Clinic, USA

中文翻译： 磷脂酰胆碱的肠道菌群代谢导致心血管疾病

文献出处： Nature 2011 (IF = 41.577), doi:10.1038/nature09922

质谱平台： SCIEX API 365

质谱主要用途： 心血管疾病是世界范围内导致发病和死亡的主要原因之一。基于 API 365 液质联用技术的靶向代谢组学方法，以确定可预测心血管疾病的血浆中代谢物，并确定了一种饮食中摄入的脂质同肠道菌群以及动脉粥样硬化相关联的代谢新途径。该代谢途径（膳食磷脂酰胆碱 - 胆碱 - 三甲胺 - 氧化三甲胺）表现了对涉及磷脂酰胆碱和胆碱代谢的心血管发病机制的独特贡献，可预测心血管疾病的风险。

标签： TMAO，肠道菌群，靶向代谢组学，心血管疾病

Untargeted metabolomics identifies trimethyllysine, a TMAO-producing nutrient precursor, as a predictor of incident cardiovascular disease risk

Xinmin S. Li,¹ Zeneng Wang,¹ Tomas Cajka,² Jennifer A. Buffa,¹ Ina Nemet,¹ Alex G. Hurd,¹ Xiaodong Gu,¹ Sarah M. Skye,¹ Adam B. Roberts,¹ Yuping Wu,³ Lin Li,¹ Christopher J. Shahan,¹ Matthew A. Wagner,¹ Jaana A. Hartiala,⁴ Robert L. Kerby,⁵ Kymberleigh A. Romano,⁵ Yi Han,⁴ Slayman Obeid,⁶ Thomas F. Lüscher,^{6,7} Hooman Allayee,⁴ Federico E. Rey,⁵ Joseph A. DiDonato,¹ Oliver Fiehn,^{2,8} W.H. Wilson Tang,^{1,9} and Stanley L. Hazen^{1,9}

作者单位： Department of Cellular & Molecular Medicine, Cleveland Clinic, USA

中文翻译： 非靶向代谢组学确定三甲基赖氨酸（一种产生 TMAO 的前体物质）是心血管疾病风险的预测因子

文献出处： JCI Insight 2018 (IF = NA), doi: 10.1172/jci.insight.99096

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600, API 365

质谱主要用途： 基于 API 365 液质联用平台，采用非靶向代谢组学的方法对最初的 99 名受试者和后续的 1162 名受试者进行研究。发现了与心血管疾病风险相关的血浆代谢物，并采用 TripleTOF 5600 在结构上对其进行鉴定为 N6、N6、N6-三甲基-L-赖氨酸（三甲基赖氨酸）。稳定同位素稀释示踪分析研究证实，三甲基赖氨酸可作为肠道微生物群依赖性三甲胺，是动脉粥样硬化代谢物氧化三甲胺（TMAO）产生的营养前体。尽管其在植物和动物源性食品中含量丰富，但三甲基赖氨酸向三甲胺转化缓慢。因此，虽然三甲基赖氨酸被认为是受试者发生心血管疾病风险的一个强有力的预测因子，但三甲基赖氨酸似乎不是体内 TMAO 生成的主要来源。

标签： TMAO，心血管疾病，非靶向代谢组学

The Lipid Mediator Protectin D1 Inhibits Influenza Virus Replication and Improves Severe Influenza

Masayuki Morita,^{1,14} Keiji Kuba,^{1,14} Akihiko Ichikawa,¹ Mizuho Nakayama,¹ Jun Katahira,² Ryo Iwamoto,^{4,5} Tokiko Watanabe,^{6,8,10} Saori Sakabe,^{6,10} Tomo Daidoji,¹¹ Shota Nakamura,³ Ayumi Kadowaki,¹ Takayo Ohto,¹ Hiroki Nakanishi,⁷ Ryo Taguchi,⁷ Takaaki Nakaya,¹¹ Makoto Murakami,¹² Yoshihiro Yoneda,² Hiroyuki Arai,⁴ Yoshihiro Kawaoka,^{6,8,10} Josef M. Penninger,¹³ Makoto Arita,^{4,9} and Yumiko Imai^{1,*}

作者单位： Graduate School of Medicine, Akita University, Japan

中文翻译： 脂质介质保护素 D1 抑制流感病毒的复制及改善严重流感

文献出处： Cell 2013 (IF = 31.398), doi: 10.1016/j.cell.2013.02.027

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 甲型流感病毒是导致死亡的主要原因，鉴于未来可能发生致命大流行病，需要有效的药物来治疗 H5N1 病毒引起的严重流感。利用基于液质联用技术的脂质组学和生物活性脂质筛选，作者报道了 omega-3 多不饱和脂肪酸 (PUFA) 衍生的脂质介质保护素 D1(PD1) 通过 RNA 输出机制显著抑制流感病毒复制。严重流感期间 PD1 的产生受到抑制，PD1 水平与 H5N1 病毒的致病性呈负相关。PD1 的抑制基因定位于 12/15- 脂氧合酶活性。重要的是，PD1 治疗改善了严重流感小鼠的生存和病理，即使在已知的抗病毒药物无法防止死亡的情况下也是如此。这些结果表明内源性脂质介质 PD1 是流感病毒复制的一种先天抑制因子，可以保护流感病人免受致死性流感病毒感染。

标签： 流行病毒感染，甲型流感病毒，脂质组学，衍生的脂质介质保护素 PD1

Exome-wide analyses identify low-frequency variant in *CYP26B1* and additional coding variants associated with esophageal squamous cell carcinoma

Jiang Chang¹, Rong Zhong¹, Jianbo Tian¹, Jiaoyuan Li¹, Kan Zhai^{2,3}, Juntao Ke¹, Jiao Lou¹, Wei Chen¹, Beibei Zhu¹, Na Shen¹, Yi Zhang¹, Ying Zhu¹, Yajie Gong¹, Yang Yang¹, Danyi Zou¹, Xiating Peng¹, Zhi Zhang⁴, Xuemei Zhang⁵, Kun Huang⁶, Tangchun Wu⁷, Chen Wu^{2*}, Xiaoping Miao^{1*} and Dongxin Lin²

作者单位： 华中科技大学

中文翻译： 外显子分析确定了与食管鳞癌相关的 CYP26B1 基因中的低频突变位点和新的突变基因

文献出处： Nat Genet 2018 (IF = 27.125), doi: 10.1038/s41588-018-0045-8

质谱平台： SCIEX QTRAP 4500

质谱主要用途： 全基因组关联研究已经确定了与食管鳞状细胞癌(ESCC)风险相关的常见变异。然而，这些常见的变异不能解释 ESCC 的所有遗传性。作者在 3714 名 ESCC 患者和 3880 名对照者的 CCHCR1、TCN2、TNXB、LTA、CYP26B1 和 FASN 基因中发现了 6 个新的易突变位点和 3 个低频变异位点的效应相对较高。另外收集了 394 例 RS13847、8634、GG 基因型和 10 例 RS13847、8634、GA 基因型的受试组的血清，用乙腈液-液萃取法从新鲜人血清中提取视黄酸，基于 QTRAP 4500 技术平台测定全反式视黄酸浓度。具有 RS13847、8634、GA 基因型的个体的血清中全反式视黄酸水平显著低于 RS13847、8634、GG 基因型($P = 0.0004$)的个体，最有可能是由于变异的 CYP26B1 增强了全反式视黄酸的分解能力。这些发现强调了罕见的编码变异在 ESCC 发展中的重要作用。

标签： 食管鳞细胞癌，全反式视黄酸，靶向定量



Polyunsaturated fatty acids metabolism, purine metabolism and inosine as potential independent diagnostic biomarkers for major depressive disorder in children and adolescents

Xinyu Zhou¹ · Lanxiang Liu^{1,2} · Xinghui Lan³ · David Cohen⁴ · Yuqing Zhang^{1,2} · Arun V Ravindran⁵ · Shuai Yuan^{1,2} · Peng Zheng^{1,2} · David Coghill⁶ · Lining Yang^{1,2} · Sarah E Hetrick^{7,8} · Xiaofeng Jiang^{1,2} · Jean-Jacques Benoliel⁹ · Andrea Cipriani^{10,11} · Peng Xie^{1,2}

作者单位： 重庆医科大学第一附属医院精神科

中文翻译： 多不饱和脂肪酸代谢、嘌呤代谢和肌苷作为儿童和青少年抑郁症的潜在独立诊断生物标志物

文献出处： Mol Psych 2018 (IF = 11.640), doi: 10.1038/s41380-018-0047-z

质谱平台： SCIEX TripleTOF 6600

质谱主要用途： 儿童和青少年的严重抑郁症（MDD）是一种全球性的复发性和致残性疾病，但其病理生理学仍不清楚，有效治疗有限。作者采用 TripleTOF 6600 对血浆样品进行了代谢谱分析，以探索 MDD 儿童和青少年的潜在生物标志物。作者确定了几个与抑郁症相关的代谢途径，包括脂肪酸代谢，特别是多不饱和脂肪酸代谢，以及与 MDD 相关的嘌呤代谢，此外，肌苷也被认为是 MDD 潜在的独立诊断生物标志物。作者进一步发现儿童和青少年 MDD 的病理生理学与成人 MDD 的病理生理学存在差异，特别是色氨酸代谢。通过代谢组学分析，作者确定了代谢紊乱与儿童和青少年 MDD 的病理生理学和诊断生物标志物之间的联系。

标签： 代谢组学，抑郁症，诊断生物标志物

LETTERS

nature
medicine

Retinal lipid and glucose metabolism dictates angiogenesis through the lipid sensor Ffar1

Jean-Sébastien Joyal¹⁻³, Ye Sun⁴, Marin L Gantner⁵, Zhuo Shao⁴, Lucy P Evans⁴, Nicholas Saba⁴, Thomas Fredrick⁴, Samuel Burnim⁴, Jin Sung Kim³, Gauri Patel², Aimee M Juan⁴, Christian G Hurst⁴, Colman J Hatton⁴, Zhenghao Cui⁴, Kerry A Pierce⁶, Patrick Bherer⁷, Edith Aguilar⁸, Michael B Powner⁹, Kristis Vevis⁹, Michel Boisvert¹⁰, Zhongjie Fu⁴, Emile Levy¹⁰, Marcus Fruttiger⁹, Alan Packard¹¹, Flavio A Rezende¹², Bruno Maranda⁷, Przemyslaw Sapieha¹², Jing Chen⁴, Martin Friedlander⁸, Clary B Clish⁶ & Lois E H Smith⁴

作者单位： Université de Montréal, Montreal, Canada

中文翻译： 视网膜脂质和葡萄糖代谢通过脂质传感器 Ffar1 决定血管生成

文献出处： Nat Med 2016 (IF = 32.621), doi:10.1038/nm.4059

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 本研究基于 QTRAP 5500 技术检测视网膜分离出的代谢物，作者发现脂质摄取和脂质 β -氧化在 Vldlr^{-/-} 视网膜中被抑制。循环脂肪酸水平的增加可激活 Ffar1，导致视网膜葡萄糖摄取减少和 Krebs 循环中 α -KG 水平的降低。因此，Hif1a 是稳定的，血管内皮生长因子由 VLDLR^{-/-} 光感受器分泌，引起病理性 RAP 样新生血管。研究报告了视网膜生理学 and 新生血管 AMD-RAP 的三个新的机制：（i）脂质 β -氧化是视网膜的能量来源；（ii）Ffar1 是控制视网膜葡萄糖进入以匹配线粒体代谢和循环脂质的重要营养传感器；（iii）营养缺乏是视网膜病理性血管生成的驱动因素。因此，这些发现可能有助于发现视网膜疾病的新疗法。

标签： 代谢组学、视网膜、脂质



High-fat diet and FGF21 cooperatively promote aerobic thermogenesis in mtDNA mutator mice

Christopher E. Wall^{a,b}, Jamie Whyte^a, Jae M. Suh^a, Weiwei Fan^a, Brett Collins^a, Christopher Liddle^c, Ruth T. Yu^a, Annette R. Atkins^a, Jane C. Naviaux^d, Kefeng Li^d, Andrew Taylor Bright^d, William A. Alaynick^d, Michael Downes^a, Robert K. Naviaux^{d,e}, and Ronald M. Evans^{a,c,f}

作者单位： Gene Expression Laboratory, Salk Institute, USA

中文翻译： 高脂饮食与 FGF21 协同促进 mtDNA 突变小鼠有氧热生成

文献出处： PNAS 2015 (IF = 9.504), doi: 10.1073/pnas.1509930112

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 线粒体是高度适应性的细胞器，能促进组织间的通讯，以满足机体的能量需求。然而，线粒体非自动传递应激信号的机制仍不清楚。在这里，基于 QTRAP 5500 技术平台，对小鼠的血浆中提取的代谢物进行 LC-MS/MS 分析。用 MultiQuant 软件对色谱峰进行处理之后，对批次间样品的代谢物浓度进行归一化的代谢组学统计分析。年轻的、前驱体多聚酶 γ 突变 (polg) 小鼠的线粒体突变产生了饥饿的代谢状态，这些小鼠表现出代谢失衡的迹象，包括褐色脂肪组织 (BAT) 的热生成缺陷。这种适应性反应的一个意想不到的好处是当 polg 小鼠被置于高脂饮食中时，它对诱导肥胖的饮食具有完全的抵抗力。这些发现确定了 FGF21 (一个已知的线粒体疾病的标志物) 与线粒体应激反应的系统代谢适应之间的机制联系。

标签： 代谢组学，肥胖，小鼠



Selective Mitochondrial Targeting Exerts Anxiolytic Effects *In Vivo*

Markus Nussbaumer¹, John M Asara², Larysa Teplytska¹, Michael P Murphy³, Angela Logan³, Christoph W Turck¹ and Michaela D Filiou^{*,1}

¹Max Planck Institute of Psychiatry, Munich, Germany; ²Division of Signal Transduction, Beth Israel Deaconess Medical Center, Department of Medicine, Harvard Medical School, Boston, MA, USA; ³MRC Mitochondrial Biology Unit, Cambridge, UK

作者单位： Max Planck Institute of Psychiatry, Germany

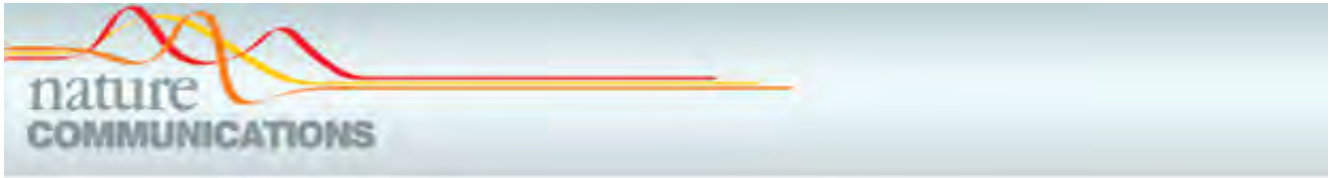
中文翻译： 选择性线粒体靶向在体内发挥抗焦虑作用

文献出处： Neuropsychopharmacol 2015 (IF = 6.403), doi: 10.1038/npp.2015.341

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 目前焦虑症的治疗策略主要是基于症状的。然而，三分之一的焦虑症患者仍然对抗焦虑药物没有反应，这就需要更有效的、基于机制的治疗方法。作者之前已经对高焦虑小鼠和低焦虑小鼠进行了比较，确定了线粒体途径的变化，包括氧化磷酸化和氧化应激。在本研究中，作者发现通过选择性的药理学靶向影响这些线粒体途径可以在体内发挥抗焦虑作用。作者采用一种选择性靶向干预线粒体的抗氧化剂 MitoQ 治疗高度焦虑（Hab）小鼠。服用 MitoQ 可降低 Hab 小鼠焦虑的相关行为。这种抗焦虑作用对高度焦虑具有特异性。此外，作者还研究了由 MitoQ 引起的抗焦虑作用的分子基础。基于 QTRAP 5500 技术的靶向代谢组学研究方法对 MitoQ 治疗的焦虑小鼠和未治疗的小鼠进行研究，靶向检测 286 种代谢物，发现 MitoQ 治疗改变了大脑的代谢组，对 MitoQ 治疗的反应具有明显的分子特征。表明基于选择性线粒体靶向的机制驱动方法有可能在体内减弱高度焦虑的表型，从而为 MitoQ 用于人类高度焦虑症的治疗铺平道路，因为长期 MitoQ 摄入有良好的耐受性，对小鼠和人类没有副作用。

标签： 靶向代谢组学，焦虑，小鼠，MitoQ



ARTICLE

Received 2 Apr 2014 | Accepted 21 Jul 2014 | Published 8 Sep 2014

DOI: 10.1038/ncomms5773

A female gametocyte-specific ABC transporter plays a role in lipid metabolism in the malaria parasite

Phuong N. Tran^{1,2}, Simon H.J. Brown³, Todd W. Mitchell³, Kai Matuschewski⁴, Paul J. McMillan⁵, Kieran Kirk¹, Matthew W.A. Dixon⁵ & Alexander G. Maier¹

作者单位： Research School of Biology, The Australian National University, Australia

中文翻译： 雌性配子细胞特异性 ABC 转运蛋白在疟原虫脂质代谢中的作用

文献出处： Nat Commun 2014 (IF = 12.353), doi: 10.1038/ncomms5773

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： ABC 转运蛋白具有多种生理功能，在耐药过程中起着关键作用。人类恶性疟原虫的基因组编码这个家族的多个成员，其中 gABCG 2 主要在配子细胞阶段转录。本文利用基因缺失和标记技术对 gABCG 2 的表达、定位和功能进行了研究。这种蛋白质存在于雌性（而非雄性）配子细胞内单一类似点的富含脂质的结构中。gABCG 2 基因敲除细胞系能产生更多的两性配子细胞。相反，基于液质联用技术的脂质组学分析发现，胆固醇酯、二酰甘油和三酰甘油在 gABCG 2 基因敲除配子阶段明显降低。作者提出了 gABCG 2 在调节配子细胞数量和积累中性脂质方面的作用，这些在寄生虫生命周期的昆虫阶段对寄生虫的发育可能是很重要的。

标签： 疟原虫，脂质组学，雌性配子细胞



Molecular signatures of plastic phenotypes in two eusocial insect species with simple societies

Solenn Patalano^{a,1}, Anna Vlasova^{b,c}, Chris Wyatt^{b,c,d}, Philip Ewels^{a,e}, Francisco Camara^{b,c}, Pedro G. Ferreira^{b,f,g}, Claire L. Asher^{b,i}, Tomasz P. Jurkowski^j, Anne Segonds-Pichon^a, Martin Bachman^{k,l}, Irene González-Navarrete^{b,c}, André E. Minoche^{b,c,m}, Felix Krueger^a, Ernesto Lowy^{b,c}, Marina Marcet-Houben^{b,c}, Jose Luis Rodriguez-Ales^{b,c}, Fabio S. Nascimentoⁿ, Shankar Balasubramanian^{k,lo}, Toni Gabaldon^{b,c,p}, James E. Tarver^q, Simon Andrews^a, Heinz Himmelbauer^{b,c,r}, William O. H. Hughes^{ls}, Roderic Guigó^{b,c}, Wolf Reik^{a,t,u,v,1}, and Seirian Sumner^{u,h,1}

作者单位： The Babraham Institute, United Kingdom

中文翻译： 两种简单社会群居昆虫塑性表型的分子特征

文献出处： PNAS 2015 (IF = 9.504), doi: 10.1073/pnas.1515937112

质谱平台： SCIEX TripleQuad 6500

质谱主要用途： 表型可塑性在生物的适应和进化过程中起着重要的作用。然而，人们对基因组的哪些方面在促进可塑性方面的重要性知之甚少，缺乏关于塑性表型的分子基础的全面数据。作者对生活在简单社会中的黄蜂和蚂蚁个体的大脑中的基因组、miRNA 以及多个转录组和甲基组进行了测序。在这两个物种中，作者发现转录水平上的表型差异很小，功能不专门化，也没有证据表明表型特异性基因的表达是由 DNA 甲基化或 miRNAs 驱动的。相反，表型分化是由非随机转录网络组织更微妙地定义的，在这些网络中，保守基因和分类限制基因都扮演着重要的角色。在两个物种中普遍缺乏高度甲基化区域或甲基化体模式可能是成年期实现表型间可塑性的重要机制。这些发现定义了先前关于促进可塑性的基因组过程的未知假设，并表明社会行为的分子特征可能与社会复杂性的水平不同。作者基于液质联用技术分析了甲基化胞嘧啶和 5- 羟甲基胞嘧啶的比值。

标签： 黄蜂，蚂蚁，群居昆虫，塑性表型，脱氧核苷酸



Research Paper

Sequestration of polyunsaturated fatty acids in membrane phospholipids of *Caenorhabditis elegans* dauer larva attenuates eicosanoid biosynthesis for prolonged survival



Sin Man Lam¹, Zehua Wang¹, Jie Li¹, Xun Huang, Guanghou Shui*

作者单位：中国科学院遗传学与发育生物学研究所分子发育生物学国家重点实验室

中文翻译：秀丽隐杆线虫耐受态幼虫膜磷脂中多不饱和脂肪酸的隔离来减弱类花生四烯酸类生物合成以延长存活时间

文献出处：Redox Biol 2017 (IF = 7.126), doi: 10.1016/j.redox.2017.05.002

质谱平台：SCIEX QTRAP 6500+

质谱主要用途：线虫的一种不老发育变种耐受态幼虫的极端长寿和发育静止的基本机制尚不清楚。基于液质联用技术，通过脂质组学方法及对不同脂肪酰基基团的多反应监测，作者证明，与其他发育阶段相比，耐受态幼虫膜脂中包含一种独特的多不饱和脂肪酸 (PUFAs)。耐受态磷脂中酯化的 PUFA 在整个过程中呈现时间积累，随后在滞育结束前急剧减少。酯化的多不饱和脂肪酸的减少伴随着未结合的多不饱和脂肪酸及其相应的下游氧化衍生物 (即花生四烯酸) 的增加。完整磷脂组学已经揭示，膜磷脂中的 PUFA 隔离是耐受态休眠的一个重要方面，主要是通过抑制类花生四烯酸物质的产生；而维持膜脂平衡的失败与耐受态耐受性的终止有关。

标签：秀丽隐杆线虫幼虫，靶向脂质组学，花生四烯酸，磷脂



Novel function of vitamin E in regulation of zebrafish (*Danio rerio*) brain lysophospholipids discovered using lipidomics

Jaewoo Choi,^{a,*} Scott W. Leonard,^b Katherine Kasper,^{a,*} Melissa McDougall,^{a,*}
Jan E. Stevens,^{a,†,§,¶} Robert L. Tanguay,^{†,§,¶} and Maret G. Traber^{1,§,¶,||,¶,¶}

作者单位： Oregon State University, USA

中文翻译： 基于脂质组学发现维生素 E 在斑马鱼脑溶血磷脂调节中的新功能

文献出处： J Lipid Res 2015 (IF = 4.505), doi: 10.1194/jlr.M058941

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600, API 3000

质谱主要用途： 作者假设维生素 E 缺乏的斑马鱼的大脑会经历更多的脂质过氧化，因为它们含有高度的多不饱和脂肪酸，因此可以识别易感脂类。作者研究了连续喂养 9 个月的斑马鱼不添加维生素 E- 或添加维生素 E+ 的脑组织。基于高分辨质谱技术的非靶向脂质组学方法分析发现，1- 十六烷基 -2- 二十二碳六烯基 -sn-甘油 -3- 磷酸胆碱 [DHA-PC 38: 6, PC 16: 0/22: 6] 是各组间差异最大的脂类。与 E+ 组相比，E- 组 DHA-PC 浓度约低 1/3。应用脂质组学方法，对脑提取物中的 155 种脂质进行了鉴定。各组间只有 4 种磷脂 (PLs) 存在差异 (P<0.05)，其中 E- 脑组织中 DHA 含量较低，DHA 含量以 DHA-PC 38: 6 最高。此外，羟基 -DHA-PC 38: 6 在 E- 脑中增加 (P=0.0341)，支持 DHA 过氧化的假说。最引人注目的是 19 种不同溶血磷脂 (LysoPLs) 中近 60% 的 E- 脑耗竭 (联合 P=0.0003)，这对膜 PL 的重塑至关重要。因此，E- 脑含有较少的 DHA-pls，更多的羟基 -DHA-PC 和更少的溶菌酶 PLs，表明脂质过氧化耗尽了 DHA-PC 膜和稳态机制，从而修复导致溶菌酶耗竭的损伤。

标签： 斑马鱼，维生素 E 缺乏，脂质组学

Vitamin C Deficiency Activates the Purine Nucleotide Cycle in Zebrafish^{*[5]}

Received for publication, October 21, 2011, and in revised form, December 8, 2011. Published, JBC Papers in Press, December 14, 2011; DOI:10.1074/jbc.M111.316018

Jay S. Kirkwood^{1,5}, Katie M. Lebold^{1,6}, Cristobal L. Miranda^{1,5}, Charlotte L. Wright¹, Galen W. Miller², Robert L. Tanguay¹, Carrie L. Barton¹, Maret G. Traber^{1,6}, and Jan F. Stevens^{1,5,7}

作者单位： Oregon State University, USA

中文翻译： 维生素 C 缺乏激活斑马鱼嘌呤核苷酸循环

文献出处： J Biol Chem 2012 (IF = 4.010), doi: 10.1074/jbc.M111.316018

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 作者基于高分辨质谱平台通过代谢组学方法研究了维生素 C 状态对成年斑马鱼代谢的影响，发现维生素 C 缺乏斑马鱼体内肌苷一磷酸 (IMP) 和腺苷脱氨酶 (AMPD) 活性的提高。得出维生素 C 缺乏激活斑马鱼嘌呤核苷酸循环的结论。

标签： 斑马鱼，维生素 C，发现代谢组学

Articles

Basic Science Investigation

Changes of the plasma metabolome of newly born piglets subjected to postnatal hypoxia and resuscitation with air

Rønnaug Solberg¹, Julia Kuligowski², Leonid Pankratov¹, Javier Escobar², Guillermo Quintás³, Isabel Lliso², Ángel Sánchez-Illana², Ola Didrik Saugstad¹ and Máximo Vento^{2,4}

作者单位： Institute for Surgical Research, University of Oslo, Oslo University Hospital – Rikshospitalet, Norway

中文翻译： 新生仔猪出生后缺氧和空气复苏后血浆代谢产物的变化

文献出处： Pediatric Res 2016 (IF = 2.882), doi: 10.1038/pr.2016.66

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 围产期缺氧缺血性脑损伤是新生儿期发病和死亡的主要原因。目前，可供临床使用评估缺氧强度和持续时间的生化试验范围有限。然而，临床上需要缺氧缺血性脑病的早期诊断，以尽早开始低温治疗，这就需要提供早期可靠的缺氧标志物。作者采用基于高分辨质谱平台的非靶向代谢组学方法，研究了缺氧和复氧后新生仔猪血浆代谢谱的变化。发现缺氧结束时，血浆代谢物浓度升高，反映了机体对长期缺氧的代谢适应。而在复苏后，代谢物水平恢复到起始值。严重缺氧可引起血浆代谢体中特定代谢物的早期、显著和短暂的变化，这是哺乳动物对强缺氧的生化适应的一种快照。这些代谢产物在临床环境下可用于预测缺氧的严重程度。

标签： 新生仔猪，代谢组学，缺氧和空气复苏

Article

Non-lethal Inhibition of Gut Microbial Trimethylamine Production for the Treatment of Atherosclerosis

Zeneng Wang,^{1,*} Adam B. Roberts,¹ Jennifer A. Buffa,¹ Bruce S. Levison,¹ Weifei Zhu,¹ Elin Org,² Xiaodong Gu,¹ Ying Huang,¹ Maryam Zamanian-Daryoush,¹ Miranda K. Culley,¹ Anthony J. DiDonato,¹ Xiaoming Fu,¹ Jennie E. Hazen,¹ Daniel Krajcik,¹ Joseph A. DiDonato,¹ Aldons J. Lusis,² and Stanley L. Hazen^{1,3,*}

作者单位： Department of Cellular and Molecular Medicine, Cleveland Clinic, USA

中文翻译： 非致死性抑制肠道微生物三甲胺产生能抑制动脉粥样硬化

文献出处： Cell 2015 (IF = 31.398), doi: 10.1016/j.cell.2015.11.055

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600, QTRAP 4000, QTRAP 5500

质谱主要用途： N-氧化三甲胺 (TMAO) 是肠道微生物依赖的代谢物，在动物模型中增强动脉粥样硬化，在临床研究中与心血管风险相关。作者研究了靶向抑制 TMAO 产生和共生微生物 TMA 产生第一步反应对饮食诱导的动脉粥样硬化的影响。DMB (胆碱结构类似物) 可非致死性地抑制培养微生物产生 TMA，抑制不同微生物 TMA 裂解酶，并能抑制生理多微生物培养物 (如肠内容物、人粪便) 产生的 TMA，从而降低喂高胆碱或 L-肉碱饮食小鼠的 TMAO 水平。DMB 可抑制载脂蛋白 e^{-/-} 小鼠内源性巨噬细胞泡沫细胞的形成和动脉粥样硬化病变的发展，而不改变循环胆固醇水平。目前的研究表明，靶向肠道微生物，特异性和非致死性地抑制其产生的 TMA 抑制剂一般可以作为一种潜在的治疗方法，以治疗心脏代谢疾病。文中基于高分辨质谱鉴定合成的磷酸化胆碱和 d9-甘油磷酸胆碱，基于 QTRAP 定量 TMAO、TMA、胆碱和甜菜碱。

标签： 肠道微生物，靶向代谢，TMAO，动脉粥样硬化

Pyruvate Kinase Triggers a Metabolic Feedback Loop that Controls Redox Metabolism in Respiring Cells

Nana-Maria Grüning,¹ Mark Rinnerthaler,² Katharina Bluemlein,¹ Michael Müllereder,¹ Mirjam M.C. Wamelink,³ Hans Lehrach,¹ Cornelis Jakobs,³ Michael Breitenbach,² and Markus Ralser^{1,4,5,*}

作者单位：Max Planck Institute for Molecular Genetics, Germany

中文翻译：丙酮酸激酶触发代谢反馈回路控制呼吸细胞的氧化还原代谢

文献出处：Cell Metab 2011 (IF = 20.565), doi: 10.1016/j.cmet.2011.06.017

质谱平台：SCIEX QTRAP 5500, API 3000

质谱主要用途：在增殖细胞中，从有氧代谢向无氧代谢的转变称为 Warburg 效应，其逆转抑制了癌细胞的增殖。通过对酵母中丙酮酸激酶 (PYK) 调节因子的研究，作者发现，当呼吸被激活时，中枢代谢可以自适应地同步氧化还原代谢。PYK 活性低，可激活酵母呼吸。而活性氧 (ROS) 含量没有增加，细胞对氧化剂的抗性增强。这种适应可归因于 PYK 底物磷酸烯醇丙酮酸 (PEP) 的积累。PEP 是糖酵解酶磷酸丙糖异构酶 (TPI) 的反馈抑制剂。TPI 抑制刺激了戊糖磷酸途径，增加了抗氧化代谢，阻止了活性氧的积累。因此，由 PYK 启动的代谢反馈回路由其底物介导并作用于 TPI，刺激呼吸细胞的氧化还原代谢。起源于一个单一的催化步骤，这种自动重组的中心碳代谢防止氧化应激之间的发酵和呼吸之间的转移。基于液质联用技术定量分析磷酸糖代谢和磷酸烯醇丙酮酸以测定 PYK 活性。

标签：磷酸糖代谢，靶向代谢组学，丙酮酸激酶活性，酵母

SF2312 is a natural phosphonate inhibitor of enolase

Paul G Leonard^{1,10}, Nikunj Satani^{2,10}, David Maxwell³, Yu-Hsi Lin², Naima Hammoudi², Zhenghong Peng⁴, Federica Pisaneschi², Todd M Link¹, Gilbert R Lee IV¹, Duoli Sun⁵, Basvoju A Bhanu Prasad⁵, Maria Emilia Di Francesco⁶, Barbara Czako⁶, John M Asara⁷, Y Alan Wang⁸, William Bornmann⁹, Ronald A DePinho⁸ & Florian L Muller^{2*}

作者单位： University of Texas MD Anderson Cancer Center, USA

中文翻译： SF2312 是一种天然的烯醇酶磷酸盐抑制剂

文献出处： Nat Chem Biol 2016 (IF = 13.843), doi:10.1038/nchembio.2195

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 作者通过建立合成抑制剂的模型以及分子对接发现了一种能够抑制烯醇酶糖基化的结构，且发现它与一种天然的磷酸盐抗生素 SF2312 结构非常相似。作者通过多种手段证明 SF2312 抑制烯醇酶的高可能性。通过 LC-MS/MS 技术分析了细胞培养液中 260 多种极性代谢物（300 SRMs），以显示烯醇化反应底物的上游积累和下游代谢产物的耗尽，从而揭示 SF2312 对胶质瘤细胞中烯醇化酶的抑制作用。

标签： 抗生素，靶向代谢组学，胶质瘤

Rhinovirus Uses a Phosphatidylinositol 4-Phosphate/Cholesterol Counter-Current for the Formation of Replication Compartments at the ER-Golgi Interface

Pascal S. Roulin,^{1,2} Mark Lötzerich,¹ Federico Torta,³ Lukas B. Tanner,^{3,5} Frank J.M. van Kuppeveld,⁴ Markus R. Wenk,³ and Urs F. Greber^{1,*}

作者单位： Institute of Molecular Life Sciences, University of Zurich, Switzerland

中文翻译： 鼻病毒用磷脂酰肌醇-4-磷酸 / 胆固醇逆流在内质网 - 高尔基界面形成复制室

文献出处： Cell Host Microbe 2014 (IF = 17.872), doi: 10.1016/j.chom.2014.10.003

质谱平台： SCIEX QTRAP 3200

质谱主要用途： 类似于其他正链 RNA 病毒，鼻病毒是普通感冒的病原体，在由宿主蛋白和脂质组成的细胞质膜上复制。对促进复制膜和复合物的形成和功能的宿主途径的了解甚少。作者发现鼻病毒复制依赖于宿主因素驱动在病毒复制膜上磷脂酰肌醇 4-磷酸 (PI4P)-胆固醇逆流。根据病毒类型的不同，复制需要磷脂酰肌醇 4-激酶类 3 β (PI4K3b)、胆固醇酯酶激素敏感脂肪酶 (HSL) 或与脂质液滴、内体或高尔基体相关的类似于氧甾酮 - 结合蛋白 OSBP 1、2、5、9 或 11。复制总是需要 OSBP 1，它将胆固醇和 PI4P 穿梭于 ER 和 Golgi 膜接触位点之间。感染还需要 ER 相关的 PI4P 磷酸酶 SAC 1 和磷脂酰肌醇 (PI) 转移蛋白 β (PITPb) 在 ER-高尔基体之间转运 PI。基于液质联用技术靶向分析磷脂化合物，以支持鼻病毒复制的 PI4P-胆固醇逆流模型的研究。

标签： 鼻病毒，磷脂，胆固醇逆流，靶向脂质组学

Indoleacrylic Acid Produced by Commensal *Peptostreptococcus* Species Suppresses Inflammation

Marta Wlodarska,^{1,2} Chengwei Luo,^{1,2} Raivo Kolde,³ Eva d'Hennezel,² John W. Annand,² Cortney E. Heim,^{1,2} Philipp Krastel,⁴ Esther K. Schmitt,¹ Abdifatah S. Omar,¹ Elizabeth A. Creasey,² Ashley L. Garner,¹ Sina Mohammadi,² Daniel J. O'Connell,¹ Sahar Abubucker,² Timothy D. Arthur,¹ Eric A. Franzosa,^{1,2} Curtis Huttenhower,^{1,2} Leon O. Murphy,² Henry J. Haiser,² Hera Vlamakis,¹ Jeffrey A. Porter,² and Ramnik J. Xavier^{1,2,6,7,8}

作者单位： The Broad Institute of MIT and Harvard, USA

中文翻译： 共生链球菌属产吲哚丙烯酸对炎症的抑制作用

文献出处： Cell Host Microbe 2017 (IF = 17.872), doi: 10.1016/j.chom.2017.06.007

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 肠道中的宿主因素有助于选择促进健康的细菌。某些共生菌可以利用粘蛋白作为能量来源，从而促进它们的定植。然而，健康状况如炎症性肠病（IBD）与黏液层减少有关，有可能导致与此疾病相关的失调。作者描述了共生菌快速穿过和运输黏蛋白相关单糖的能力，并鉴定了几个利用肠黏蛋白的梭菌成员。其中一种粘蛋白利用者猪链球菌，可以降低小鼠对上皮损伤的易感性。几种肠链球菌含有一个基因簇，可产生色氨酸代谢物吲哚丙烯酸 (IA)，促进肠上皮屏障功能，减轻炎症反应。此外，对人类粪便标本进行的宏基因组分析表明，IBD 患者微生物利用粘蛋白和色氨酸代谢的遗传能力降低。数据表明，刺激 IA 的产生可以促进抗炎反应，并具有治疗作用。通过质谱鉴定了链球菌属的代谢物。

标签： 链球菌属，代谢物，共生菌



ARTICLE

Received 14 Jul 2014 | Accepted 7 Oct 2014 | Published 20 Nov 2014

DOI: 10.1038/ncomms6492

Prediction and quantification of bioactive microbiota metabolites in the mouse gut

Gautham V. Sridharan^{1,*}, Kyungoh Choi^{2,*}, Cory Klemashevich², Charmian Wu¹, Darshan Prabakaran², Long Bin Pan¹, Shelby Steinmeyer³, Carrie Mueller³, Mona Yousofshahi⁴, Robert C. Alaniz^{3,†}, Kyongbum Lee^{1,†} & Arul Jayaraman^{2,3,†}

作者单位： Department of Chemical and Biological Engineering, Tufts University, USA

中文翻译： 小鼠肠道生物活性微生物代谢物的预测与定量

文献出处： Nat Commun 2014 (IF = 12.353), doi: 10.1038/ncomms6492

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+, QTRAP 3200

质谱主要用途： 肠道微生物产生的代谢物是潜在的重要生理调节因子。作者提出了一种将微生物代谢建模为一个反应网络，并利用路径分析来促进微生物代谢物的识别和表征的代谢组学方法。在模型中的 2409 个反应中，53% 不发生在宿主中，而是依赖于微生物的功能。这类反应中最大的一类是氨基酸代谢。针对芳香族氨基酸，作者预测从这些来源得到的代谢产物能同时区分是微生物还是宿主依赖的。作者确认在 49 种预测代谢物中有 26 种存在，并使用两种独立的质谱方法：基于 QTRAP 3200 的靶向代谢组学方法和基于 TripleTOF 5600+ 的非靶向代谢组学方法对其在对照组和无菌小鼠盲肠中的含量进行了定量。作者进一步研究了已证实的代谢产物的生物活性，并鉴定了两种微生物代谢产物 (5- 羟基 -L- 色氨酸和水杨酸) 作为芳基羟受体的激活剂。

标签： 肠道微生物，代谢组学，活性代谢物，小鼠

Polyunsaturated fatty acid saturation by gut lactic acid bacteria affecting host lipid composition

Shigenobu Kishino^{a,b}, Michiki Takeuchi^a, Si-Bum Park^b, Akiko Hirata^a, Nahoko Kitamura^a, Jun Kunisawa^{c,d,e}, Hiroshi Kiyono^{c,d}, Ryo Iwamoto^f, Yosuke Isobe^{f,g}, Makoto Arita^g, Hiroyuki Arai^g, Kazumitsu Ueda^{a,h}, Jun Shimaⁱ, Satomi Takahashi^b, Kenzo Yokozeki^b, Sakayu Shimizu^{a,i}, and Jun Ogawa^{a,i,k,l}

作者单位： Graduate School of Agriculture, Kyoto University, Kyoto, Japan

中文翻译： 肠道乳酸菌多不饱和脂肪酸饱和对宿主脂质组成的影响

文献出处： PNAS 2013 (IF = 9.504), doi: 10.1073/pnas.1312937110

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 在具有代表性的肠道细菌植物乳杆菌中，作者鉴定了编码多不饱和脂肪酸饱和和代谢相关酶的基因，并详细揭示了以羟基脂肪酸、氧化脂肪酸、共轭脂肪酸和部分饱和脂肪酸为中间产物的代谢途径。作者基于液质联用技术开展了脂质组学研究，在宿主器官观察到这些中间产物，特别是羟基脂肪酸。特异性无菌小鼠的羟基脂肪酸水平明显高于无菌小鼠，说明这些脂肪酸是通过胃肠道微生物的多不饱和脂肪酸代谢产生的。这些发现表明，胃肠道微生物的脂代谢通过改变脂肪酸组成而影响宿主的健康。

标签： 肠道细菌，植物乳杆菌，脂质组学

Cell Reports
Article

Microbiota Depletion Impairs Thermogenesis of Brown Adipose Tissue and Browning of White Adipose Tissue

Baoguo Li,^{1,2,6} Li Li,^{1,2,6} Min Li,^{1,2,3,6} Sin Man Lam,^{1,6} Guanlin Wang,^{1,2,3} Yingga Wu,^{1,2,3} Hanlin Zhang,^{2,4} Chaoqun Niu,¹ Xueying Zhang,^{1,2,3} Xue Liu,^{1,2} Catherine Hambly,³ Wanzhu Jin,⁴ Guanghou Shui,⁷ and John R. Speakman^{1,2,5,7,*}

作者单位：中国科学院遗传学与发育生物学研究所分子发育生物学国家重点实验室

中文翻译：微生物群缺失会损害褐色脂肪和米色脂肪组织的适应性生热

文献出处：Cell Rep 2019 (IF = 8.032), doi: 10.1016/j.celrep.2019.02.015

质谱平台：SCIEX QTRAP 6500+

质谱主要用途：肠道微生物与宿主的关系被认为有利于代谢平衡。棕色脂肪组织 (BAT) 和米色脂肪细胞促进了冷暴露下维持宿主核心体温的热发生。然而，肠道微生物群对生热过程的潜在影响是混乱的。作者评估了 BAT 和白色脂肪组织 (WAT) 对缺乏肠道微生物群的小鼠的温度挑战的反应。基于液质联用技术分析了三羧酸循环靶向代谢和短链脂肪酸的变化。作者发现，不同的抗生素 cocktail (ABX) 或无菌小鼠 (GF) 处理后的微生物群耗竭，通过减弱解偶联蛋白 1 (UCP 1) 的表达，减少 WAT 的褐变过程，破坏 BAT 的生热能力。细菌代谢物丁酸酯的灌胃提高了 ABX 处理小鼠的产热能力，逆转了小鼠的致热能力。结果表明，肠道微生物在寒冷的环境中促进了热发生，这可能部分是通过丁酸酯介导的。

标签：肠道微生物群，短链脂肪酸，三羧酸循环，靶向代谢组学，脂质组学

RESEARCH

Open Access



Tolerance and metabolic response of *Pseudomonas taiwanensis* VLB120 towards biomass hydrolysate-derived inhibitors

Gossa G. Wordofa and Mette Kristensen*

作者单位： Novo Nordisk Foundation Center for Biosustainability, Technical University of Denmark, Denmark

中文翻译： 假单胞菌 *P. taiwanensis* VLB 120 对生物质水解产生的抑制剂的耐受性和代谢反应

文献出处： *Biotechnol Biofuels* 2018 (IF = 5.497), doi: 10.1186/s13068-018-1192-y

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 木质纤维素生物质的生物转化为高附加值产品提供许多好处；然而，在预处理过程中产生的化学抑制剂阻碍了它的发展。为更好地了解微生物是如何对这些抑制剂作出反应的，作者以假单胞菌 *P. taiwanensis* VLB 120（一种利用多种碳源包括戊糖和己糖的天然耐药菌株）为例，研究了 *P. taiwanensis* VLB 120 对有机酸、呋喃类和酚类等生物质水解抑制剂的耐受性和代谢反应。基于 QTRAP 5500 的靶向代谢组学方法对 *P. taiwanensis* VLB 120 在不同木质纤维素类抑制剂存在下的主要中间代谢产物和初级代谢产物进行了差异分析，以了解不同抑制剂对 *P. taiwanensis* VLB 120 的抑制作用。

标签： 假单胞菌，*P. taiwanensis*，生物质水解，靶向代谢组学

Heterologous Biosynthesis of Spinosad: An Omics-Guided Large Polyketide Synthase Gene Cluster Reconstitution in *Streptomyces*

Gao-Yi Tan,^{†,§} Kunhua Deng,^{†,‡} Xinhua Liu,^{†,‡} Hui Tao,^{†,‡} Yingying Chang,^{†,‡} Jia Chen,^{†,‡} Kai Chen,^{||} Zhi Sheng,^{||} Zixin Deng,^{†,‡,||} and Tiangang Liu^{*,†,‡} 

作者单位： 武汉大学药学学院

中文翻译： 多杀菌素的异源生物合成：链霉菌中一种多组学引导的大聚酮化合物合成酶基因簇重构

文献出处： ACS Synth Biol 2017 (IF = 5.316), doi: 10.1021/acssynbio. 6b0033010

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途： 天然产物的异源生产往往效率很低，或无法产生靶向的天然产物。且天然产物生物合成的转录和代谢调控复杂，特别是在基因组挖掘的情况下，要合理、系统地构建合成途径以提高天然产物的生物合成效率也是十分困难的。在该研究中，通过不同的策略：从天然产物的异源生产到随后应用组学导向的合成模块，以高效合成具有复杂结构的天然产物。链霉菌已被证明为应用这些方法异源生产杀菌素的一个例子。结合基于质谱技术的靶向代谢组学和蛋白组学方法，揭示几个链霉菌异源产生的速率限制步骤。随后的工程工作克服了选定的三个限速步骤，使杀菌素产量逐步增加，最终达到 1460 $\mu\text{g/L}$ ，比原菌株 Albus J 1074 (C416-M) 高出约 1000 倍。这些结果表明，本研究开发的基于质谱的组学平台是指导链霉菌寄主异源生物合成途径合理重构的有力工具。

标签： 链霉菌属，杀菌素，靶向代谢组学，靶向蛋白组学

Synthetic multispecies microbial communities reveals shifts in secondary metabolism and facilitates cryptic natural product discovery

Yutong Shi,¹ Chengqian Pan,¹ Kuiwu Wang,²
Xuegang Chen,¹ Xiaodan Wu,¹
Chen-Tung Arthur Chen^{1,3} and Bin Wu^{1*}

investigation on chemically mediated interactions in
nature as well as cryptic natural products discovery.

作者单位： 浙江大学海洋学院

中文翻译： 合成的多物种微生物群落揭示了次级代谢的变化，并促进了隐含的天然产物的发现

文献出处： Environ Microbiol 2017 (IF = 4.974), doi: 10.1111/1462-2920.13858

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 化学介导的相互作用已被认为是必不可少的生态系统的功能，因为共生的有机体可以通过代谢手段影响彼此的表现。作者提出了一个共培养装置，允许共培养微生物的物理分离（可以交换化学信号和代谢物）。采用该装置对真菌-细菌群落和放线菌-放线菌群落的次级代谢进行了研究。基于 LC-MS 图谱、多变量数据分析和分子网络技术的代谢组学方法测量显示，这种化学通讯对合成共培养群落的代谢特征有显著影响，使得一组分子在共培养中被诱导或上调。在真菌-细菌群落中发现了一种新的抗生素，该抗生素具有抗肺炎克雷伯菌的抗菌特性。此外，对真菌-细菌相互作用的进一步调查表明，真菌共同培养诱导的二苯醚的产生可能是由于真菌对细菌在交叉应答中分泌表面蛋白的反应所致。本研究表明，目前的共培养装置和代谢组学流程，将有助于研究自然界中化学介导的相互作用以及隐含的天然产物发现。

标签： 次级代谢，代谢组学，微生物，天然产物

**BIOTECHNOLOGY
and
BIOENGINEERING**

Article

Metabolic engineering of isopropyl alcohol-producing *Escherichia coli* strains with ^{13}C -metabolic flux analysis

Nobuyuki Okahashi, Fumio Matsuda, Katsunori Yoshikawa, Tomokazu Shirai, Yoshiko Matsumoto, Mitsufumi Wada, Hiroshi Shimizu ✉

作者单位： Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University

中文翻译： ^{13}C 代谢流分析产异丙醇的代谢工程大肠杆菌

文献出处： Biotechnol Bioeng 2017 (IF = 4.481), doi: 10.1002/bit.26390

质谱平台： SCIEX API 3200

质谱主要用途： 基于 ^{13}C 代谢流分析作者研究了一株表达丙酮和丁醇梭菌 *C. acetobutylicum* ADC 基因和耐盐产氢菌 *C. beijerinckii* IPADH 基因的代谢工程大肠杆菌在好氧间歇培养的指数生长阶段不产生异丙醇的原因，并指导改进培养条件以提高异丙醇产量。基于 API 3200 分析了磷酸化糖的代谢流。文章指出 ^{13}C 代谢流分析是代谢工程研究的有用工具，通过微调辅助性因子比值和浓度，优化代谢途径和培养条件，可以进一步提高大肠杆菌的异丙醇产量

标签： 大肠杆菌，代谢工程，靶向代谢组学，代谢流

Metabolic Profile of 1,5-Diaminopentane Producing *Corynebacterium glutamicum* Under Scale-Down Conditions: Blueprint for Robustness to Bioreactor Inhomogeneities

Michael H. Limberg,¹ Julia Schulte,¹ Tita Aryani,¹ Regina Mahr,¹ Merike Baumgart,¹ Michael Bott,¹ Wolfgang Wiechert,¹ Marco Oldiges^{1,2}

作者单位： Forschungszentrum Jülich GmbH, Institute of Bio- and Geosciences, Germany

中文翻译： 在缩小条件下产生 1,5- 二氨基戊烷的谷氨酸棒状杆菌的代谢特征：非均匀生物反应器的稳健性蓝图

文献出处： Biotechnol Bioeng 2016 (IF = 4.481), doi: 10.1002/bit.26184

质谱平台： SCIEX TripleTOF 6600, API 4000

质谱主要用途： 非均匀培养环境的稳健性是工业生产有机体的重要品质，特别是谷氨酸棒状杆菌对工业规模生物反应器中氧和底物利用率的快速变化具有明显的抵抗力。本研究的重点是识别这种稳健性的代谢关键机制，以获得更深层次的洞察力，并为面向过程的菌株开发提供未来的靶点。利用二室缩尺装置培养生产 1,5-二氨基戊烷的谷氨酸棒状杆菌，以模拟工业规模栽培条件下的短期环境变化。采用多组学方法，包括基于高分辨质谱的蛋白组学和靶向代谢组学研究，表明在短期氧耗和碳源过剩的情况下，中心代谢可以灵活地重新安排，以克服 NAD 循环中的不足。为了平衡氧化还原状态，非氧依赖发酵 NAD 再生的关键酶被显著上调，而部分非必需途径被下调。细胞的转移回到低底物浓度的通气良好区，触发了基因的额外上调，以重新同化先前形成的副产物，表明 L-乳酸的形成和利用反应是同时活跃的。特别是 L-乳酸作为碳和氧化还原等价物的可逆和灵活的外缓冲液，使谷氨酸棒状杆菌处于稳健位置以处理大规模过程中的不均匀性。

标签： 谷氨酸棒状杆菌，蛋白组学，代谢组学，微生物

ARTICLE

BIOTECHNOLOGY
BIOENGINEERING

In Vitro Reconstitution of Mevalonate Pathway and Targeted Engineering of Farnesene Overproduction in *Escherichia coli*

Fayin Zhu,¹ Xiaofang Zhong,¹ Mengzhu Hu,¹ Lei Lu,¹ Zixin Deng,^{1,2} Tiangang Liu^{1,2}

作者单位： 武汉大学药学院

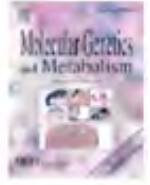
中文翻译： 甲羟戊酸途径的体外重构及大肠杆菌中法尼烯生产过剩的靶向工程

文献出处： Biotechnol Bioeng 2014 (IF = 4.481), doi: 10.1002/bit.25198

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+, QTRAP 4500

质谱主要用途： 利用代谢工程和合成生物学方法在微生物系统中过度产生萜类化合物，如紫杉醇和青蒿素的前体，已经取得了初步的成功。然而，由于缺乏稳态动力学信息和对萜类生物合成途径的不完全理解，一直难以建立一个高效、通用的体系。在此，作者利用纯化的蛋白质组分，重新构建了甲羟戊酸途径，在体外生产法尼烯。从该体外重组体系中得到的信息指导作者通过定量地过度表达各组分，合理地优化法尼烯在大肠杆菌中的生产。用基于液质的靶向蛋白组学分析和代谢物分析方法测定各突变体的代谢状况。通过定向工程，法尼烯产量可逐步提高，在摇瓶规模下诱导 96 h 可达 1.1 g/L (约 2000 倍)。甲羟戊酸途径对萜类物质过度产生的潜力释放策略也应该会在其它多步合成途径中发挥作用。

标签： 大肠杆菌，蛋白组学，代谢组学，微生物



Perturbations of tyrosine metabolism promote the indolepyruvate pathway via tryptophan in host and microbiome

Ilya Gertsman , Jon A. Gangoiti, William L. Nyhan, Bruce A. Barshop

作者单位： Biochemical Genetics and Metabolomics Laboratory, Department of Pediatrics, University of California, San Diego, USA

中文翻译： 寄主和微生物群体酪氨酸代谢扰动通过色氨酸促进吲哚丙酮酸途径

文献出处： Mol Genet Metab 2015 (IF = 3.774) , doi: 10.1016/j.ymgme.2015.01.005

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 尼替西农用于治疗 I 型酪氨酸血症，最近还被用于治疗另一种酪氨酸代谢紊乱，即碱尿症。在研究尼替西农治疗碱尿症的剂量效应时，基于液质联用技术的非靶向代谢组学揭示了完全独立的色氨酸代谢途径的干扰。尼替西农治疗的患者血清中存在与色氨酸代谢吲哚丙酮酸途径相关的吲哚类化合物显著升高，并与酪氨酸代谢中间体的升高有关。这种途径的吲哚化合物一直与共生细菌和植物代谢有关。这些外源的吲哚来源最近被认为是影响哺乳动物细胞功能和疾病的因素。作者研究了这些吲哚化合物在酪氨酸代谢紊乱中的相关性，包括酪氨酸代谢紊乱 I 型和 II 型，以及短暂性酪氨酸血症，并证明 4-羟基苯基丙酮酸 (4-HPP) 直接参与了这一途径的促进。然后，作者进一步研究了吲哚丙酮酸通路的调节和 4-HPP 在哺乳动物细胞和肠道微生物培养中的作用。文章证明，吲哚类产物，包括吲哚丙酮酸和吲哚乙酸，实际上是由人体细胞代谢产生的，而下游的吲哚代谢产物吲哚乙醛则完全由人体肠道菌群产生。本研究描述了与酪氨酸代谢缺陷相关的升高和伴随药物治疗引起的宿主与微生物色氨酸代谢的共生扰动。

标签： 酪氨酸血症，代谢组学，色氨酸代谢，微生物群体

Antibiotic-Induced Changes to the Host Metabolic Environment Inhibit Drug Efficacy and Alter Immune Function

Jason H. Yang,^{1,2,7} Prema Bhargava,^{1,2,7} Douglas McCloskey,^{3,4} Ning Mao,^{1,5,6} Bernhard O. Palsson,^{3,4} and James J. Collins^{1,2,6,8,*}

作者单位： Institute for Medical Engineering and Science and Department of Biological Engineering, Massachusetts Institute of Technology, USA

中文翻译： 抗生素对宿主代谢环境的影响抑制药物疗效及改变免疫功能

文献出处： Cell Host Microbe 2017 (IF = 17.872), doi: 10.1016/j.chom.2017.10.020

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 为了研究存在于感染部位的代谢物是否会影响抗生素治疗效果或免疫功能，作者利用基于 QTRAP 5500 液质联用仪的靶向代谢组学方法，对小鼠腹膜大肠杆菌感染抗生素治疗后宿主微环境的局部代谢变化进行研究，分析了空白和抗生素治疗后小鼠血浆、肺灌洗液和腹腔灌洗液三种样本的差异。对支持细菌生长的 80 多种代谢物进行了绝对定量，包括氨基酸、核酸和抗生素代谢物，证实抗生素治疗会引起非微生物依赖的局部微环境代谢物的变化，并影响治疗效果和免疫功能。这些结果突出了抗生素的免疫调节潜力，揭示了局部代谢微环境是决定感染解决的重要因素

标签： 靶向代谢组学，抗生素，哺乳动物宿主细胞，免疫调节，药物疗效



作者单位： Department of Microbiology and Immunology, University of Minnesota Medical School, USA

中文翻译： 甲氧苄啶与磺胺甲恶唑的相互增强促进协同作用

文献出处： Nat Commun 2018 (IF = 12.353), doi: 10.1038/s41467-018-03447-x

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 甲氧苄啶 (TMP)- 磺胺甲恶唑 (SMX) 是一种广泛应用的协同抗菌组合，其作用机制当前的解释主要是针对四氢叶酸 (THF) 生物合成途径中的顺序步骤，其中 SMX 抑制 THF 前体二氢蝶酸 (DHPte) 的产生，而 TMP 则抑制二氢叶酸 (DHF) 向 THF 的转化。因此，SMX 通过限制 DHF 的产生来增强 TMP。本文证明这个模型不足以解释 TMP-SMX 的强大协同作用。利用遗传和生化方法，作者描述了一个代谢反馈回路，其中 THF 是生产叶酸前体焦磷酸氢蝶呤 (DHPPP) 的关键，并发现 TMP 通过抑制 DHPPP 的合成而增强 SMX 的活性。该研究表明，TMP-SMX 协同作用是由两种药物对另一种药物的相互增强作用所驱动的。作者采用液质联用技术测定了 THF 代谢反馈回路中关键的代谢物 6- 羟甲基 -7,8- 二氢蝶呤，7,8- 二氢蝶呤和对氨基苯酸的含量。

标签： 靶向代谢组学，药物作用机制，甲氧苄啶，磺胺甲恶唑，协同抗菌



2018; 8(7): 1808-1823. doi: 10.7150/thno.23177

Research Paper

Overcoming erlotinib resistance in EGFR mutation-positive lung adenocarcinomas through repression of phosphoglycerate dehydrogenase

Jiang-Kai Dong^{1,2#}, Hui-Min Lei^{1,2#}, Qian Liang^{1,2#}, Ya-Bin Tang^{1,2}, Ye Zhou^{1,2}, Yang Wang^{1,2}, Shengzhe Zhang³, Wen-Bin Li¹, Yunguang Tong^{4,5}, Guanglei Zhuang³, Liang Zhang^{1,2}, Hong-Zhuan Chen^{1,2}, Liang Zhu^{1,2}, Ying Shen^{1,2}

作者单位：上海交通大学医学院药理学与化学生物学系

中文翻译：通过抑制磷酸甘油脱氢酶克服治疗 EGFR 突变阳性肺腺癌中厄洛替尼耐药性

文献出处：Theranostics 2018 (IF = 8.537), doi: 10.7150/thno.23177

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600, TripleQuad 6500, API 4000

质谱主要用途：作者研究了丝氨酸生物合成关键酶磷酸甘油脱氢酶 (PHGDH) 在具有厄洛替尼耐药性的肺腺癌中的作用。通过 RNA-Seq 分析筛选出肺腺癌细胞获得性耐药所需基因。免疫印迹法和 qRT-PCR 法检测耐药细胞中 PHGDH 蛋白和 mRNA 的表达水平。分别用细胞培养法和异种移植瘤小鼠模型观察 PHGDH 抑制或过表达对 erlotinib 耐药的影响。为探讨其作用机制，采用 DCFH-DA 染色法和免疫荧光法检测 γ H2AX 抑制后的 ROS 水平和 DNA 损伤标记物 H2AX 的表达。通过液质联用技术靶向检测氨基酸、丝氨酸、ATP、ADP、GSH、GSSG、NAD、NADH 等关键代谢物的含量。研究表明，PHGDH 抑制对具有 EGFR-TKIs 耐药性的肺腺癌有潜在的治疗价值。

标签：靶向代谢组学，肺腺癌，厄洛替尼耐药性，磷酸甘油脱氢酶



Contents lists available at ScienceDirect

Food Chemistry

journal homepage: www.elsevier.com/locate/foodchem



Analytical Methods

Saffron authentication based on liquid chromatography high resolution tandem mass spectrometry and multivariate data analysis



Josep Rubert, Ondrej Lacina, Milena Zachariasova, Jana Hajslova^{*}

Department of Food Analysis and Nutrition, Faculty of Food and Biochemical Technology, University of Chemistry and Technology, Prague, Technická 3, 166 28 Prague 6, Czech Republic

作者单位： Department of Food Analysis and Nutrition, Faculty of Food and Biochemical Technology, University of Chemistry and Technology, Prague, Czech

中文翻译： 基于液相色谱 - 高分辨串联质谱和多变量数据分析的藏红花鉴别

文献出处： Food Chem 2016 (IF = 4.946), doi: 10.1016/j.foodchem.2016.01.003

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 本研究提出了一种基于代谢指纹的藏红花鉴别新策略。通过固液萃取工艺优化以尽可能最大限度地分离出藏红花中的小分子，然后基于液相高分辨质谱联用的代谢组学研究方法分析不同来源的藏红花样品。经主成分分析 (PCA) 显示在西班牙种植和包装的、受保护的原产地和来源不明的西班牙包装的藏红花三者之间有明显差异。之后，采用正交偏最小二乘判别分析法 (OPLS-DA) 对西班牙藏红花进行了鉴别。初步鉴定表明，甘油磷脂和氧化脂质是其产地来源的重要标记。

标签： 代谢组学，藏红花，产地鉴别

OPEN

Citation: Transl Psychiatry (2014) 4, e481; doi:10.1038/tp.2014.119

© 2014 Macmillan Publishers Limited. All rights reserved 2158-3188/14

www.nature.com/tp



ORIGINAL ARTICLE

Time-dependent metabolomic profiling of Ketamine drug action reveals hippocampal pathway alterations and biomarker candidates

K Weckmann¹, C Labermaier¹, JM Asara², MB Müller^{1,3} and CW Turck¹

作者单位： Department of Translational Research in Psychiatry, Max Planck Institute of Psychiatry, Munich, Germany

中文翻译： 氯胺酮药物作用的时间依赖性代谢谱揭示海马通路改变和潜在生物标志物

文献出处： Transl Psychiatry 2014 (IF = 4.691), doi: 10.1038/tp.2014.119

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 氯胺酮具有快速抗抑郁作用，为了更好地理解氯胺酮的作用方式，本研究基于液质联用技术对氯胺酮处理的小鼠进行了时间依赖的海马通路代谢物谱分析。经过一次注射氯胺酮后，代谢组学数据显示，分别在 2、14、24、72 h 时间点海马体中鉴定到 226、218、227 和 221 个代谢物，2 小时后开始的依赖于时间的代谢物水平变化反映了药物的快速抗抑郁作用。代谢通路分析中发现，糖酵解 / 糖异生、戊糖磷酸途径和柠檬酸循环等几种海马通路都受到影响，这不仅表现为代谢物水平的变化，而且还与关联的代谢物比值水平的变化有关。结果表明，一次注射氯胺酮对主要的能量代谢途径有影响。此外，7 种已鉴定的代谢物可作为氯胺酮药物反应的生物标志物。

标签： 靶向代谢组学，氯胺酮，海马体，时间依赖，药物反应，毒理

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

High-throughput chinmedomics-based prediction of effective components and targets from herbal medicine AS1350

Received: 11 February 2016

Accepted: 09 November 2016

Published: 02 December 2016

Qi Liu^{1,4}, Aihua Zhang^{1,4}, Liang Wang¹, Guangli Yan¹, Hongwei Zhao², Hui Sun^{1,3}, Shiyu Zou², Jinwei Han¹, Chung Wah Ma², Ling Kong¹, Xiaohang Zhou¹, Yang Nan¹ & Xijun Wang^{1,4}

作者单位：黑龙江中医药大学代谢组学实验室国家中医药血清药物化学重点实验室

中文翻译：基于中药组学对中草药 AS 1350 有效成分和靶点的高通量预测

文献出处：Sci Rep 2016 (IF = 4.122), doi: 10.1038/srep38437

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：本研究采用能直接发现和预测中药有效成分和潜在靶标的中药组学策略，探讨中药 AS1350 的有效成分、靶标及其对“肾虚证” (KYDS) 的影响。采用基于高分辨液质联用技术的代谢组学方法和模式识别分析相结合的方法对血清样本进行分析，以确定与治疗效果相关的生物标志物。中药组学方法证实 AS1350 治疗 KYDS 的有效性，能调控代谢紊乱的生物标志物和靶向性。鉴定到 48 种与 α - 亚麻酸代谢、脂肪酸代谢、鞘脂代谢、磷脂代谢、类固醇激素生物合成和氨基酸代谢相关的标记代谢物。用 PCMS 软件计算了体内各成分与标记代谢物变化的相关系数，并确定了 AS1350 的潜在有效成分。采用中药组学技术推断 AS1350 成分通过脂肪酸代谢、脂代谢、类固醇激素生物合成等代谢紊乱的再平衡保护免于 KYDS。从而表明 AS1350 改变 KYDS 代谢的表型特征是多组分、多途径、多靶点和整体调节的。

标签：代谢组学，中药组学，有效成分，靶点预测，肾虚证

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Dose-related liver injury of Geniposide associated with the alteration in bile acid synthesis and transportation

: 2 March 2017

: 17 July 2017

| online: 21 August 2017

Jingzhuo Tian¹, Jingjing Zhu¹, Yan Yi¹, Chunying Li¹, Yushi Zhang¹, Yong Zhao¹, Chen Pan¹, Shixie Xiang¹, Xiaolong Li¹, Guiqin Li¹, John W Newman^{2,3,4}, Xiaoyi Feng¹, Jing Liu¹, Jiayin Han¹, Lianmei Wang¹, Yue Gao⁵, Michael R. La Frano^{2,6} & Aihua Liang¹

作者单位：中国医学科学院中药研究所

中文翻译：梔子苷的剂量相关性肝损伤与胆汁酸合成和转运的改变有关

文献出处：Sci Rep 2017 (IF = 4.122), doi: 10.1038/s41598-017-09131-2

质谱平台：SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途：梔子 (FG) 毒性的临床报告尚未见发布，但动物实验表明 FG 或梔子苷可引起大鼠肝毒性。本实验开展了雄性 SD 大鼠灌胃给药 3 天 100 mg/kg 或 300 mg/kg 梔子苷致肝损伤的研究，并观察肝组织形态学、血清肝酶、血清胆汁酸谱、肝胆汁酸合成及转运基因表达的变化。300 mg/kg 梔子苷可引起肝脏损伤，表现为血清丙氨酸转氨酶、天冬氨酸转氨酶、碱性磷酸酶和谷丙转氨酶升高，肝脏中总胆汁酸增加 75%，以牛磺酸结合胆汁酸的增加为主。300 mg/kg 梔子苷还下调了法尼类 X 受体、小异源二聚体和胆盐输出泵的表达。总之，300 mg/kg 梔子苷可引起肝损伤，引起胆汁酸调节基因的改变，导致牛磺酸结合物在大鼠肝脏中的积累。牛磺胆酸、牛磺酰脱氧胆酸和牛磺- α -鼠胆酸是梔子苷引起肝损伤的潜在标志物。作者通过液质联用技术分别测定了肝脏和血清中的胆汁酸含量。

标签：靶向代谢组学，胆汁酸，梔子苷，肝损伤，毒理

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Renoprotective effect of Zhenwu decoction against renal fibrosis by regulation of oxidative damage and energy metabolism disorder

13 February 2018

2 July 2018

online: 02 October 2018

Shasha Li¹, Xue Xiao², Ling Han¹, Yiming Wang^{1,3} & Guoan Luo^{1,3}

作者单位：广东省中医药医院

中文翻译：真武汤对肾纤维化的保护作用是通过调节氧化损伤和能量代谢紊乱

文献出处：Sci Rep 2018 (IF = 4.122), doi: 10.1038/s41598-018-32115-9

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：真武汤 (ZWD) 是一种抗肾纤维化的中药方剂，为研究其作用机制，作者建立大鼠肾纤维化模型，采用超高效液相色谱结合四极飞行时间高分辨质谱技术，获取对照组、模型组、ZWD 治疗组和马来酸依那普利治疗组各组血清代谢谱。将代谢组学与分子生物学相结合，对不同类群的样品进行了比较研究。共鉴定出 15 种潜在的生物标志物，主要是磷脂和脂肪酸。结果表明，肾纤维化与氧化损伤和能量代谢紊乱有关。组织病理学、生物化学和代谢组学研究结果表明，ZWD 通过减轻氧化应激、增加能量代谢和调节纤维细胞因子，具有有效的肾保护作用。本研究为中药新药的研究与开发提供了科学依据。

标签：代谢组学，真武汤，肾纤维化，作用机制

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Urinary metabolomics reveals the therapeutic effect of HuangQi Injections in cisplatin-induced nephrotoxic rats

Received: 16 February 2017

Accepted: 21 April 2017

Published online: 15 June 2017

Chang-Yin Li¹, Hui-Ting Song¹, Xiao-Xiao Wang¹, Yao-Yao Wan², Xuan-Sheng Ding², Shi-Jia Liu¹, Guo-Liang Dai¹, Yue-Heng Liu³ & Wen-Zheng Ju¹

作者单位：南京中医药大学附属医院临床药理学教研室

中文翻译：尿代谢组学揭示黄芪注射液对顺铂引起的大鼠肾毒性的治疗作用

文献出处：Sci Rep 2017 (IF = 4.122), doi: 10.1038/s41598-017-03249-z

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：顺铂的副作用，尤其是肾毒性，极大地限制了其在临床化疗中的应用。黄芪注射液 (HI) 有望在不影响顺铂抗肿瘤活性的前提下治疗肾毒性。本研究采用液相色谱飞行时间质谱联用技术建立尿代谢组学分析方法，评价了 HI 对顺铂大鼠的毒性 - 衰减效应及其机制。结果表明，连续给药可明显恢复体重下降，降低血清肌酐和尿素的异常升高。HI 部分恢复了顺铂引起的代谢谱改变。筛选并初步鉴定了 43 种潜在毒性衰减生物标志物，它们参与氨基酸代谢、TCA 循环、脂肪酸代谢、维生素 B6 代谢和嘌呤代谢等重要代谢途径。结果表明，HI 能减轻顺铂所致的肾毒性，改善顺铂重复暴露所引起的代谢平衡紊乱，为黄芪注射液对多靶点顺铂诱导毒性的保护作用提供了可靠的证据。

标签：尿代谢组学，顺铂暴露，黄芪注射液，肾毒性，毒性衰减

RESEARCH ARTICLE

Open Access



Enhanced metabolic process to indole alkaloids in *Clematis terniflora* DC. after exposure to high level of UV-B irradiation followed by the dark

Cuixia Gao¹, Bingxian Yang¹, Dandan Zhang¹, Meng Chen¹ and Jingkui Tian^{1,2*}

作者单位：浙江大学生物医学工程与仪器科学学院生物医学工程研究所

中文翻译：暴露于高水平 UV-B 照射和黑暗后铁线莲中吲哚生物碱代谢过程的增强

文献出处：BMC Plant Biol 2016 (IF = 3.930), doi: 10.1186/s12870-016-0920-3

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：在暴露于高水平的 UV-B 辐射和黑暗中的铁线莲中发现了具有细胞毒性的吲哚生物碱 (6-羟基-1H-吲哚-3-基) 羧酸甲酯，但合成机制未明。作者综合运用基于高分辨质谱的代谢组学策略，基于 2DE-MALDI TOF/TOF 蛋白组学技术，以及转录组学方法来阐明此二元胁迫下吲哚生物碱的生物合成机制。分析结果表明：经 UV-B 高强度照射并在黑暗中孵育处理后，吲哚类生物碱 (6-羟基-1H-吲哚-3-基) 羧酸甲酯的含量增加了 7 倍，光合作用和碳水化合物代谢下降，与莽草酸转化为 L-色氨酸代谢通路相关的基因同时上调，促进了吲哚生物合成 (莽草酸代谢) 途径。该途径代谢物 5-羟色氨酸、吲哚和 L-色氨酸的含量分别增加了 2 倍、441 倍和 1 倍，从而可以帮助阐述在高剂量 UV-B 照射后，铁线莲中吲哚生物碱的代谢过程增强机制。

标签：铁线莲，紫外照射，代谢组学，蛋白组学



Journal of Chromatography A

Volume 1416, 16 October 2015, Pages 103-111



Integrative analysis of proteomics and metabolomics of anaphylactoid reaction induced by Xuesaitong injection

Yubin Xu, Deqiang Dou , Xiaoku Ran, Chunyan Liu, Jing Chen

作者单位： 辽宁中医药大学

中文翻译： 血塞通注射液诱导过敏性反应的蛋白质组学和代谢组学综合分析

文献出处： J Chromatogr A 2015 (IF = 3.716), doi: 10.1016/j.chroma.2015.09.019

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 本文以血塞通注射液 (XSTI) 为例，通过基于高分辨液质联用技术的蛋白质组学和代谢组学研究，阐明其过敏反应机理，并寻找检测中药注射液过敏反应的潜在的生物标志物。研究结果鉴定到的 13 种差异蛋白和 28 种代谢产物，分别通过 ELISA 法和标准品验证，可作为检测过敏反应机制的潜在的生物标志物。GPX 1、Sc5b9、C4D 表达上调，F12、Kng1、C2 和 C6 表达下调，提示 XSTI 诱导的过敏性反应是通过直接刺激、补体和激肽激酶途径发生的。此外，诱导过敏反应的物质还包括组胺、LTB 4、尿酸和其它药物，这些化合物已被证实参与精氨酸和脯氨酸代谢、组氨酸代谢、花生四烯酸代谢、嘌呤代谢和 TCA 循环。此外，分离实验表明 XSTI 中 10 kDa 的分子是引起过敏性反应的主要致敏因子。

标签： 代谢组学，蛋白组学，血塞通，过敏性反应，毒理



Article

Variations in Physiology and Multiple Bioactive Constituents under Salt Stress Provide Insight into the Quality Evaluation of Apocyni Veneti Folium

Cuihua Chen ¹ , Chengcheng Wang ¹, Zixiu Liu ¹, Xunhong Liu ^{1,2,3,*}, Lisi Zou ¹, Jingjing Shi ¹, Shuyu Chen ¹, Jiali Chen ¹ and Mengxia Tan ¹

作者单位：南京中医药大学药学院

中文翻译：盐胁迫下植物生理及多种生物活性成分的变化对罗布麻叶品质评价的启示

文献出处：Int J Mol Sci 2018 (IF = 3.687), doi: 10.3390/ijms19103042

质谱平台：SCIEX QTRAP 4500

质谱主要用途： 为了从生理和生物活性成分对不同浓度盐胁迫的响应角度系统地评价罗布麻叶 (AVF) 的质量，本文采用基于 QTRAP 的液质联用技术和多元统计分析，通过监测光合色素、渗透平衡、脂质过氧化产物和抗氧化酶等生理特性，研究 4 种盐浓度 (分别为 0、100、200 和 300 mM NaCl) 下 AVF 的耐盐机理。此外，在盐胁迫下用液质联用技术靶向测定了 AVF 中的 43 种生物活性成分，其中氨基酸 14 种，核苷 9 种，有机酸 6 种，黄酮类 14 种。并采用多变量统计分析分别对样本进行系统聚类、判别和评价。与对照相比，除总有机酸外，200 和 100 mM 盐胁迫对维持光合品质、渗透平衡、抗氧化酶活性和代谢产物积累均有促进作用，两组 AVF 的品质优于其他两组；而在严重的胁迫下，由于清除活性氧 (ROS) 效率低下导致氧化损伤的积累和代谢物的减少，导致品质下降。总之，该方法可为 AVF 等耐盐中药的质量评价提供综合信息。

标签： 靶向代谢组学，盐胁迫，罗布麻叶，品质评价



International Journal of
Molecular Sciences



Article

Transcriptome Profiling of Two Ornamental and Medicinal *Papaver* Herbs

Jaehyeon Oh ^{1,†} , Younhee Shin ^{2,3,†}, In Jin Ha ⁴, Min Young Lee ⁴, Seok-Geun Lee ^{4,5} ,
Byeong-Chul Kang ², Dongsoo Kyeong ² and Dowan Kim ^{1,*}

作者单位： Genomics Division, National Institute of Agricultural Science, Korea

中文翻译： 两种观赏和药用罂粟属药草的转录组分析

文献出处： Int J Mol Sci 2019 (IF = 3.687), doi: 10.3390/ijms19103192

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途： 玉米罂粟和冰岛罂粟是用于分离生物碱类药物的观赏植物和药用植物。在本研究中，采用转录组技术检测了罂粟植株发育三个阶段（30、60 和 90 天）的转录组的表达，鉴定出 137 个差异表达的转录产物。异喹啉生物碱合成通路（BIA）上 69 个转录产物和 22 个不同的生物碱（用 LC-QTOF 定量）被定位到 BIA KEGG 代谢网络。这些转录组数据，连同表达和定量代谢物谱，初步记录了与罂粟植物发育相关的次级代谢物及其表达，还有助于进一步详细说明各种次级代谢物生物合成和罂粟植物发育相关的功能特征。

标签： 代谢组学，转录组，罂粟



A metabolomics approach for authentication of *Ophiocordyceps sinensis* by liquid chromatography coupled with quadrupole time-of-flight mass spectrometry

Jiukai Zhang^a, Ping Wang^a, Xun Wei^b, Li Li^a, Haiyan Cheng^c, Yajun Wu^a, Wenbo Zeng^d, Hong Yu^d, Ying Chen^a



作者单位：中国检验检疫研究院农产品安全研究中心

中文翻译：基于 LC-QTOF 质谱的代谢组学方法鉴别冬虫夏草

文献出处：Food Res Int 2015 (IF = 3.520), doi: 10.1016/j.foodres.2015.07.025

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：本研究中采用基于四极杆飞行时间液质联用技术的代谢组学方法对冬虫夏草（DCXC）进行鉴别。结合获得的代谢物指纹图谱及多元统计分析对真品 DCXC 及其伪品、培养菌丝体和模拟菌进行鉴别。此外，通过代谢物含量分析，筛选出 18 个能有效地区分 DCXC 及其掺假物的特征标记物并对其鉴定。结果表明，基于 UFLC-QTOF 的代谢组学在 DCXC 掺假快速检测中具有很大的应用前景。

标签：代谢组学，冬虫夏草，鉴别，掺假

Assessment of Peeling of *Astragalus* Roots Using ^1H NMR- and UPLC-MS-Based Metabolite Profiling

Jee-Youn Jung,^{†,‡} Youngae Jung,[†] Jin-Sup Kim,^{†,§} Do Hyun Ryu,^{*,†} and Geum-Sook Hwang^{*,†,§}

用户单位： Integrated metabolomics research group, Seoul Center, Korea Basic Science Institute

中文翻译： 利用 ^1H NMR 和基于 UPLC-MS 的代谢物谱评价黄芪根去皮过程

文献出处： J Agric Food Chem 2013 (IF = 3.412), doi: 10.1021/jf4026103

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 文章采用 ^1H -NMR 和基于 UPLC-MS 高分辨质谱的非靶向代谢组学分析方法，对黄芪根部采后加工过程进行了分析，重点研究了去皮过程。主成分分析结果表明，黄芪去皮和未去皮样品有明显差异。分析后发现去皮的黄芪根中乙酸盐，丙氨酸、精氨酸、富马酸盐、谷氨酸、组氨酸、n-乙酰氨基甲酸盐、苹果酸盐、脯氨酸、蔗糖、葫芦巴碱和缬氨酸有明显损失。相比之下，去皮黄芪根中与木质部相关化合物天冬酰胺、天冬氨酸和木糖具有较高水平。此外，去皮黄芪中异黄酮和黄芪总苷的含量显著降低。这些结果表明，基于 ^1H NMR 和 UPLC-MS 分析相结合的代谢物谱可以用来评价中草药采后加工过程中的去皮过程。

标签： 黄芪，加工过程，代谢组学，去皮

Article

Metabolomics Strategy Using High Resolution Mass Spectrometry Reveals Novel Biomarkers and Pain-Relief Effect of Traditional Chinese Medicine Prescription Wu-Zhu-Yu Decoction Acting on Headache Modelling Rats

Ran Liu ¹, Huarong Xu ¹, Xiaowen Zhang ², Xiaotong Wang ¹, Ziyue Yuan ¹, Zhenyu Sui ³, Dong Wang ⁴, Kaishun Bi ¹ and Qing Li ^{1,*}

作者单位：沈阳药科大学药学院中药质量控制关键技术国家与地方联合工程实验室

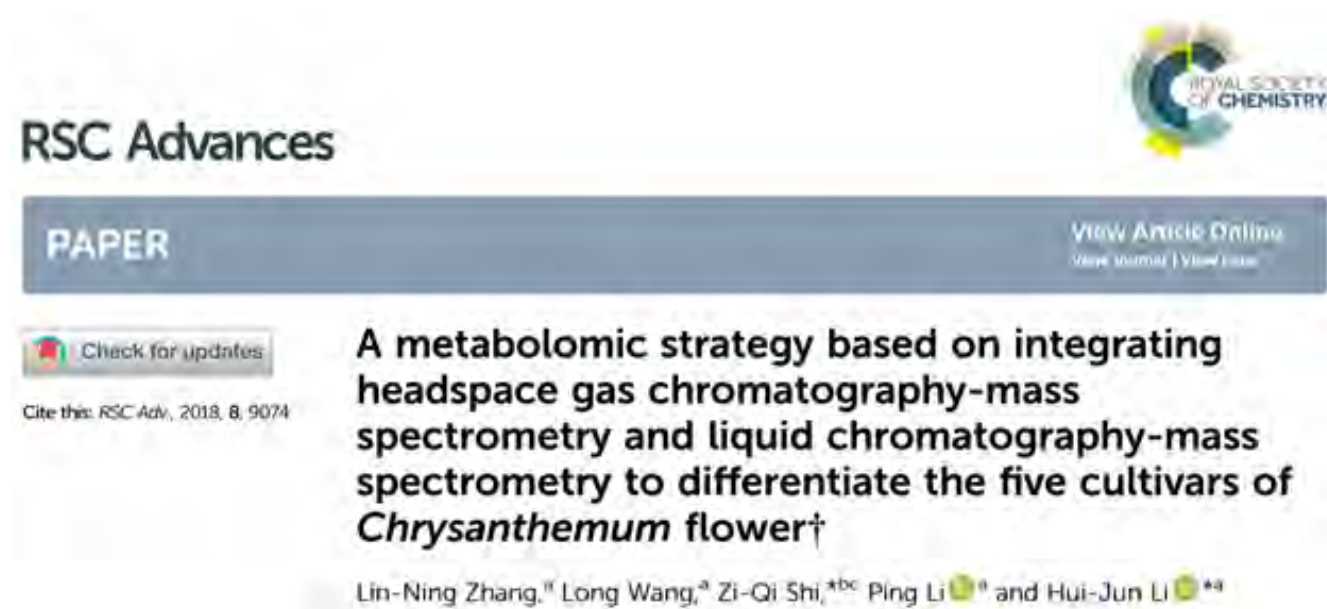
中文翻译：采用高分辨质谱的代谢组学策略揭示了中药方剂吴茱萸汤作用于头痛模型大鼠的新型生物标志物和镇痛作用机理

文献出处：Molecules 2017 (IF = 3.098), doi: 10.3390/molecules22122110

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：为了更深入地了解头痛和吴茱萸汤（WZYD）的止痛机制，文章采用了基于高分辨液质联用技术的代谢组学技术和多元数据处理策略相结合的方法，对吴茱萸汤中候选代谢生物标志物进行鉴定，共鉴定了 17 种潜在的生物标志物，并确定了相关的代谢途径。研究表明，建立的代谢组学策略是研究头痛发作机制和 WZYD 的有力途径。该方法还可突出生物标志物和代谢途径，并可捕捉头痛引起的细微代谢变化，从而提高对中枢神经系统疾病和中医治疗的机制认识。

标签：代谢组学，吴茱萸汤，头痛，生物标志物，止痛机制



作者单位：中国药科大学天然药物国家重点实验室

中文翻译：基于顶空气相色谱 - 质谱和液相色谱 - 质谱相结合的代谢组学策略对 5 个品种的菊花进行鉴别

文献出处：RSC Advance 2018 (IF = 2.936), doi: 10.1039/c7ra13503c

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：植物提取物化学成分极其复杂，需要全面的检测方法来提高代谢组学的研究潜力。本文以 5 个近缘菊花品种为例，尝试开发了一种基于顶空气相色谱 - 质谱和超高效液相色谱 - 四极飞行时间质谱相结合的代谢组学策略，通过多代谢标志物精确将其区分。对 5 个品种 53 批菊花样品进行了比较分析，共鉴定出 21 个潜在标记物（包括 14 个挥发性和 7 个非挥发性代谢物），并利用热图阐明了已鉴定的代谢产物在 5 个品种中的分布情况。结果表明，该集成平台通过对药用和食用中草药的功能成分进行全面监测，为药用和食用中草药的代谢研究提供了补充信息。

标签：气质联用，液质联用，代谢组学，菊花，鉴别



The integration of GC–MS and LC–MS to assay the metabolomics profiling in *Panax ginseng* and *Panax quinquefolius* reveals a tissue- and species-specific connectivity of primary metabolites and ginsenosides accumulation



Jia Liu^{a,1}, Yang Liu^{a,1}, Yu Wang^a, Ann Abozeid^{a,b}, Yuan-Gang Zu^a, Zhong-Hua Tang^{a,*}

用户单位：东北林业大学植物生态学重点实验室

中文翻译：利用 GC-MS 和 LC-MS 分析人参和西洋参代谢组学特征，揭示了其初级代谢物和人参皂苷积累的组织和种属特异性的关联

文献出处：J Pharma Biomed Anal 2017 (IF = 2.831), doi: 10.1016/j.jpba.2016.12.026

质谱平台：SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途：目前在植物整体水平上对人参皂甙合成与初级代谢之间的代谢相互联系的认识不深，作者采用基于 GC-MS 和 LC-MS 的非靶向代谢组学分别对两种不同种类人参中的初级和次级代谢产物进行了组织特异性分析。从人参和西洋参的主根、侧根、茎、叶柄和叶中共鉴定出 149 种初级代谢物和 10 种人参皂苷。PLS-DA 统计显示组织相对与物种有明显的化合物差异，组织特异性代谢变化研究表明，人参皂甙含量与主根和侧根能量代谢有关，而与叶片和叶柄光合作用无关。两种植物的比较表明：高碳同化率与主根和侧根中人参总皂苷的积累密切相关。可见，组织特异性代谢产物谱在人参皂苷生物合成过程中发生了动态变化，为在代谢物水平上研究人参皂苷生物合成机制提供了新的思路。

标签：人参，西洋参，代谢组学，初级代谢物，次级代谢物

Expression of trehalose-6-phosphate phosphatase in maize ears improves yield in well-watered and drought conditions

Michael L Nuccio¹, Jeff Wu², Ron Mowers², Hua-Ping Zhou¹, Moez Meghji², Lucia F Primavesi³, Matthew J Paul³, Xi Chen^{1,5}, Yan Gao¹, Emdadul Haque^{1,5}, Shib Sankar Basu¹ & L Mark Lagrimini⁴

作者单位： Syngenta Crop Protection, LLC., Research Triangle Park, USA

中文翻译： 玉米穗中海藻糖 -6- 磷酸酶的表达在水分充足和干旱条件下提高玉米产量

文献出处： Nat Biotechnol 2015 (IF = 41.667), doi: 10.1038/nbt.3277

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 通过转基因的方法降低农作物体内磷酸化海藻糖的含量以提高农作物的产量，在 QTRAP 平台上基于靶向代谢组学的方法对于转基因和对照组作物体内的磷酸化海藻糖和磷酸化蔗糖等关键代谢物进行准确定量并进行差异分析，结合基因相关数据揭示了过度表达海藻糖 -6- 磷酸酶提高玉米产量的机理。

标签： 转基因作物，靶向代谢组学，农作物产量，玉米

Rewiring of the Fruit Metabolome in Tomato Breeding

Guangtao Zhu,^{1,9} Shouchuang Wang,^{2,9} Zejun Huang,³ Shuaibin Zhang,³ Qinggang Liao,¹ Chunzhi Zhang,¹ Tao Lin,¹ Mao Qin,¹ Meng Peng,² Chenkun Yang,² Xue Cao,³ Xu Han,¹ Xiaoxuan Wang,³ Esther van der Knaap,⁴ Zhonghua Zhang,³ Xia Cui,³ Harry Klee,⁵ Alisdair R. Fernie,^{6,7} Jie Luo,^{2,8,*} and Sanwen Huang^{1,3,10,*}

作者单位： 华中农业大学

中文翻译： 番茄育种过程中果实代谢组重组

文献出处： Cell 2018 (IF = 30.410), doi: 10.1016/j.cell.2017.12.019

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600, QTRAP 4000

质谱主要用途： 本文作者在 TripleTOF 高分辨质谱获得精确的一级分子量，在 QTRAP 上基于 MIM-EPI 的方法建立代谢物的二级库，获得离子对相关信息，最后在 QTRAP 上进行 980 种代谢物的广泛靶向代谢组学的分析。结合基因组和转录组测序，获得基因突变与关键代谢物之间的关联，为番茄育种提供了大数据的支持。

标签： 多组学，广靶代谢组学，番茄育种，风味



ARTICLE

DOI: 10.1038/s41467-017-02168-x

OPEN

Differentially evolved glucosyltransferases determine natural variation of rice flavone accumulation and UV-tolerance

Meng Peng¹, Raheel Shahzad¹, Ambreen Gul¹, Hizar Subthain¹, Shuangqian Shen¹, Long Lei¹, Zhigang Zheng¹, Junjie Zhou¹, Dandan Lu¹, Shouchuang Wang¹, Elsayed Nishawy^{1,2}, Xianqing Liu¹, Takayuki Tohge³, Alisdair R. Fernie⁴ & Jie Luo^{1,5}

作者单位： 华中农业大学

中文翻译： 差异进化的葡糖基转移酶决定了水稻黄酮积累和 UV 耐受性的自然变异

文章来源： Nature Commun 2017 (IF = 12.124), doi: 10.1038/s41467-017-02168-x

质谱平台： SCIEX QTRAP 4000

质谱主要作用： 利用基于 QTRAP 的广靶代谢组学技术，对 14 种代表性植物中的类黄酮化合物进行定性及定量分析，这些植物包括被子植物、单子叶植物和双子叶植物。共检测到 85 种黄酮类化合物，包括黄酮类、黄酮醇类和黄烷酮 3 个亚类。通过聚类分析显示：黄酮类化合物可以清楚地分为六个子簇，反映出三个共同的修饰。随后分析了单子叶植物水稻中黄酮含量的自然变化，结合全基因组关联分析，确定了 4 个控制黄酮氧苷自然变异的位点。揭示了水稻黄酮氧苷自然变异的生化基础及其在紫外耐受方面的作用，为作物遗传改良实践提供了新资源。

标签： 植物，水稻，广靶代谢组学，黄酮类，UV 耐受性



ARTICLE

Received 11 Dec 2015 | Accepted 29 Jul 2016 | Published 4 Oct 2016

DOI: 10.1038/ncomms12767

OPEN

Comparative and parallel genome-wide association studies for metabolic and agronomic traits in cereals

Wei Chen^{1,*}, Wensheng Wang^{1,*}, Meng Peng^{1,*}, Liang Gong¹, Yanqiang Gao¹, Jian Wan¹, Shouchuang Wang¹, Lei Shi¹, Bin Zhou¹, Zongmei Li¹, Xiaoxi Peng¹, Chenkun Yang¹, Lianghuan Qu², Xianqing Liu² & Jie Luo¹

作者单位： 华中农业大学

中文翻译： 谷物代谢和农艺性状的比较和平行全基因组关联研究

文献来源： Nat Commun 2016 (IF = 12.353), doi: 10.1038/ncomms12767

质谱平台： SCIEX QTRAP 4000

质谱主要用途： 作者利用基于液质的广靶代谢组学技术研究了广泛搜集到的 502 个水稻样品中的代谢物变化，以评估水稻籽粒代谢组的自然变异。在鉴定到的 837 个代谢物特征中，有 80 个代谢物通过标准品验证，有 230 个代谢物通过多种策略进行注释。通过研究这些代谢物的广义遗传力和变异系数之间的关系，研究结果表明共同的遗传因素控制了这些代谢产物的含量，并且观察到不同类别的代谢物之间的相关性。两个水稻组织中各种代谢物时空积累的自然变化研究显示：在检测到的 1420 种代谢特征中，439 种和 231 种代谢物仅在其中一种组织中表现出特定或优先积累。随后基于 mGWAS 技术对水稻和玉米进行了比较，研究水稻和玉米重要农艺形状的遗传调控网络机制。

标签： 水稻，玉米，广靶代谢组学，农艺性状

LARGE-SCALE BIOLOGY ARTICLE

Evolutionarily Distinct BAHD N-Acyltransferases Are Responsible for Natural Variation of Aromatic Amine Conjugates in Rice^{OPEN}

Meng Peng,^{a,1} Yanqiang Gao,^{a,1} Wei Chen,^{a,1} Wensheng Wang,^a Shuangqian Shen,^a Jian Shi,^a Cheng Wang,^a Yu Zhang,^a Li Zou,^a Shouchuang Wang,^a Jian Wan,^a Xianqing Liu,^b Liang Gong,^a and Jie Luo^{a,2}

作者单位： 华中农业大学

中文翻译： 进化上不同的 BAHD N- 酰基转移酶与水稻芳香胺结合物的自然变异有关

文献出处： The Plant Cell 2016 (IF = 8.228), doi: 10.1105/tpc.16.00265

质谱平台： SCIEX QTRAP 4000

质谱主要用途： 作者利用基于 QTRAP 的 MIM-EPI 和 MRM 扫描模式开发的广泛靶向代谢组学技术检测水稻五叶期剑叶和成熟期种子中酚胺的类型和含量，共检测到 11 种酚胺。其中，剑叶中检测到 8 种酚胺，种子中检测到 5 种酚胺。结合水稻群体的基因型数据，基于 mGWAS 和 mQTL 分析，定位调控水稻中酚胺合成基因。后续通过生化和遗传等手段验证这些基因的功能。

标签： 水稻，广靶代谢组学，酚胺

Spatiotemporal Distribution of Phenolamides and the Genetics of Natural Variation of Hydroxycinnamoyl Spermidine in Rice

Xuekui Dong¹, Yanqiang Gao¹, Wei Chen¹, Wensheng Wang¹, Liang Gong¹, Xianqing Liu² and Jie Luo^{1,*}

作者单位：华中农业大学

中文翻译：水稻酚胺的时空特异积累和羟基肉桂酰亚精胺自然变异的遗传基础

文献出处：Mol Plant 2015 (IF = 9.326), doi: 10.1016/j.molp. 2014.11.003

质谱平台：SCIEX QTRAP 4000

质谱主要作用：酚胺类化合物是一类广泛存在于植物中的次级代谢物，在植物发育和防御等多种生物过程中发挥着重要作用。但在水稻中酚酰胺的时空积累模式是不可利用的，也没有发现与酚酰胺生物合成有关的基因。本研究采用液相色谱 - 质谱 - 靶向代谢组学方法，对水稻种子中的酚酰胺类化合物进行了综合代谢谱分析和自然变异分析。比较 16 种酚胺在水稻不同组织和不同发育阶段中的相对含量变化，获得酚胺在水稻中的时（不同发育阶段）空（不同组织）分布信息。观察到大多数酚酰胺的时空分布，以及它们在两个主要亚种水稻之间的差异积累。水稻叶片代谢组关联分析研究和转基因植株体内代谢分析表明，OS12g27220 和 OS12g27254 是羟基肉桂酰酰基化的亚精胺物质合成的候选基因。该工作表明，mGWAS 对代谢物的分析和功能基因的鉴定，甚至为基于组学的作物遗传改良提供了一种有用的工具。

标签：水稻，广靶代谢组学，时空分布，酚胺



antioxidants



Article

Profiling of Omega-Polyunsaturated Fatty Acids and Their Oxidized Products in Salmon after Different Cooking Methods

Kin Sum Leung ¹, Jean-Marie Galano ², Thierry Durand ² and Jetty Chung-Yung Lee ^{1,*} 

作者单位： 香港大学

中文翻译： 不同烹调方法对鲑鱼中欧米茄多不饱和脂肪酸及其氧化产物的分析

文献出处： Antioxidants 2018 (IF = 6.530), doi: 10.3390/antiox7080096

质谱平台： SCIEX X500R, QTRAP 3200

质谱主要用途： 为了评价不同烹调方法对鲑鱼中欧米茄多不饱和脂肪酸氧化程度，作者使用 QTRAP 3200 对原材料中的不饱和脂肪酸进行了定量分析，使用 X500R 高分辨质谱对油炸和烘烤等不同烹饪处理后不饱和脂肪酸氧化产物进行了定性和定量分析。证实了高温烹调会造成不饱和脂肪酸的氧化，但是不同烹饪方法氧化途径和氧化产物存在差异。

标签： 不饱和脂肪酸，脂质组学，脂质氧化，烹饪方法

RESEARCH PAPER

Network analysis of the metabolome and transcriptome reveals novel regulation of potato pigmentation

Kyoungwon Cho^{1,†}, Kwang-Soo Cho^{2,*}, Hwang-Bae Sohn², In Jin Ha^{3,‡}, Su-Young Hong², Hyerim Lee¹, Young-Mi Kim⁴ and Myung Hee Nam^{1,*}

作者单位： Environmental Risk and Welfare Research Team, Korea Basic Science Institute, Korea

中文翻译： 转录组和代谢组网络分析揭示马铃薯色素积累的新调控机制

文献出处： J Exp Bot 2016 (IF = 5.354), doi: 10.1093/jxb/erv549

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要作用： 基于 TripleTOF 高分辨质谱的发现代谢组学策略分析三种不同颜色马铃薯品种，通过 PCA 分析，三种马铃薯代谢组得到明显区分。基于 TripleTOF 高质量准确度的 MS1 和 MS2 全谱对这三种马铃薯芽的 22 种花青素代谢物进行定性定量分析，以解析三种马铃薯中不同的花青素积累模式。通过代谢通路分析发现：花青素生物合成途径上的化合物组成因马铃薯品种而异。作者根据代谢组和转录组相关性分析绘制了连接网络，以突出与花青素代谢物相关的调控基因，为土豆花青素生物合成和调控相关的分子机制解析提供支撑。

标签： 马铃薯，发现代谢组学，色素积累

RESEARCH ARTICLE

Arabinoxylan

Molecular Nutrition
Food Research
www.mnf-journal.com

Arabinoxylan Attenuates Type 2 Diabetes by Improvement of Carbohydrate, Lipid, and Amino Acid Metabolism

Qixing Nie, Haihong Chen, Jielun Hu, He Gao, Linlin Fan, Zhimin Long,
and Shaoping Nie*

作者单位： 南昌大学食品科技国家重点实验室

中文翻译： 阿拉伯木聚糖通过改善糖、脂和氨基酸代谢减轻 2 型糖尿病

文献出处： Mol Nutr Food Res 2018 (IF = 5.151), doi: 10.1002/mnfr.201800222

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 在 TripleTOF 高分辨质谱上基于非靶向代谢组学的分析方法和统计学分析，作者找到了 12 种与 2 型糖尿病相关的标志物。对注射阿拉伯木聚糖小鼠的尿液代谢物进行全面分析，发现阿拉伯木聚糖能显著改善糖、脂质和氨基酸的代谢，对于 2 型糖尿病有缓解改善作用。

标签： 非靶向代谢组学，2 型糖尿病，阿拉伯木聚糖

Untargeted Metabolomic Screen Reveals Changes in Human Plasma Metabolite Profiles Following Consumption of Fresh Broccoli Sprouts

*Lauren Housley, Armando Alcazar Magana, Anna Hsu, Laura M. Beaver, Carmen P. Wong, Jan F. Stevens, Jaewoo Choi, Yuan Jiang, Deborah Bella, David E. Williams, Claudia S. Maier, Jackilen Shannon, Roderick H. Dashwood, and Emily Ho**

作者单位： Oregon State University, USA

中文翻译： 食用新鲜花椰菜后人血浆代谢物谱的变化

文献出处： Mol Nutr Food Res 2018 (IF = 5.151), doi: 10.1002/mnfr.201700665

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 为了验证功能食品花椰菜对人体的益处，在 TripleTOF 高分辨质谱平台上基于非靶向代谢组学的方案对使用花椰菜后不同时间点人血浆中的代谢物进行了全面的分析，作者发现了血浆中脂肪酸、谷胱甘肽等代谢物有显著差异。通过非靶向代谢组学方案还鉴定到了多个花椰菜的分子靶标，为研究功能型食品提供了新的思路。

标签： 功能食品，花椰菜，食品代谢组学



Targeted Metabolomics of *Physaria fendleri*, an Industrial Crop Producing Hydroxy Fatty Acids

Jean-Christophe Cocuron^{1,2}, Brooke Anderson¹, Alison Boyd¹ and Ana Paula Alonso^{1,*}

作者单位： The Ohio State University, USA

中文翻译： 生产羟基脂肪酸的经济作物花扁豆的靶向代谢组研究

文献出处： Plant Cell Physiol 2014 (IF = 4.760), doi: 10.1093/pcp/pcu011

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 在 QTRAP 液质联用质谱平台上基于靶向代谢组学的技术路线，作者针对花扁豆花期后不同生长阶段的糖、糖醇、氨基酸、脂肪酸和磷酸化代谢物进行了全面的靶向定量分析，定量下限在 pmol 至 fmol 级别。通过靶向代谢组学的研究，揭示了花扁豆胚芽发育过程中脂肪酸合成的关键代谢通路。

标签： 羟基脂肪酸，靶向代谢组学，经济作物



Contents lists available at ScienceDirect

Food Chemistry

journal homepage: www.elsevier.com/locate/foodchem



A comparative metabolomics study of flavonoids in sweet potato with different flesh colors (*Ipomoea batatas* (L.) Lam)



Aimin Wang^{a,*}, Rensai Li^a, Lei Ren^a, Xiali Gao^a, Yungang Zhang^b, Zhimin Ma^d, Daifu Ma^{a,b,*}, Yonghai Luo^{a,c,*}

作者单位：江苏师范大学

中文翻译：不同颜色甘薯黄酮类化合物的比较代谢组学研究

文献来源：Food Chem 2018 (IF = 4.946), doi: 10.1016/j.foodchem.2018.03.125

质谱平台：SCIEX QTRAP 4500

质谱主要作用：通过基于 QTRAP 的广靶代谢组学技术研究了五个甘薯品种的内源性代谢物，共确定了 213 种代谢物，包括 11 个碳水化合物，35 个氨基酸及其衍生物，8 个维生素、26 个有机酸及其衍生物，29 个黄酮，8 个生物碱和 27 个酚酸。并分析了鉴定到的 27 个酚酸和 29 种黄酮类化合物的含量差异。通过聚类、PCA 和 PLS-DA 分析五种甘薯中黄酮类代谢物，发现不同颜色甘薯其代谢物有明显差异，并归属到不同的代谢通路，同时对黄酮类代谢通路的差异表达基因进行了分析。

标签：甘薯，广靶代谢组学，黄酮，颜色



Regulation of Fig (*Ficus carica* L.) Fruit Color: Metabolomic and Transcriptomic Analyses of the Flavonoid Biosynthetic Pathway

Ziran Wang¹, Yuanyuan Cui¹, Alexander Vainstein², Shangwu Chen³ and Huiqin Ma^{1*}

作者单位： 中国农业大学

中文翻译： 无花果果实颜色的调控：黄酮类生物合成途径的代谢组学和转录组分析

文献出处： Front Plant Sci 2017 (IF = 3.678), doi: 10.3389/fpls.2017.01990

质谱平台： SCIEX QTRAP 4500

质谱主要作用： 无花果果实成熟时，不同品种果实由于花青素的种类和含量变化而呈现出不同颜色。本文基于 QTRAP 液质联用平台的广靶代谢组学技术，探索青皮突变体紫皮中的主要花色素苷，揭示无花果果实紫色变异机理。分别对青果和紫果两个成熟时期的果皮进行广靶代谢组学分析，共检测到 110 种黄酮类代谢产物，并对不同品种和时期中的代谢物含量进行了差异分析，为果皮颜色的形成机制提供了理论支撑。

标签： 无花果，广靶代谢组学，果实颜色，黄酮

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Measurement of metabolite variations and analysis of related gene expression in Chinese liquorice (*Glycyrrhiza uralensis*) plants under UV-B irradiation

Received: 15 March 2017
Accepted: 28 March 2018
Published online: 18 April 2018

Xiao Zhang^{1,2}, Xiaoli Ding^{3,4}, Yaxi Ji^{1,2}, Shouchuang Wang⁵, Yingying Chen^{1,2}, Jie Luo⁵, Yingbai Shen^{1,2} & Li Peng^{3,4}

作者单位：北京林业大学、宁夏大学

中文翻译：UV-B 辐射下甘草代谢物变异的测定及相关基因表达分析

文献出处：Sci Rep 2018 (IF = 4.122), DOI: 10.1038/s41598-018-24284-4

质谱平台：SCIEX QTRAP 4000

质谱主要作用：作者借助于基于 Q-TOF 的发现代谢组学和基于 QTRAP 的靶向代谢组学分析了甘草在 UV-B 和普通光照射下初级及次级代谢物的差异变化，并结合转录组数据进行联合分析，寻找 UV-B 胁迫诱导表达的相关基因。

标签：甘草，靶向代谢组学，UV-B 辐射



Article

Overexpression of *BraLTP2*, a Lipid Transfer Protein of *Brassica napus*, Results in Increased Trichome Density and Altered Concentration of Secondary Metabolites

Nini Tian [†], Fang Liu [†], Pandi Wang, Xiaohong Yan, Hongfei Gao, Xinhua Zeng and Gang Wu ^{*}

作者单位： 中国农科院武汉油料所

中文翻译： 油菜脂质转移蛋白 BRALTP2 的过表达导致毛状体密度增加和次级代谢物浓度的改变

文献出处： Int J Mol Sci 2018 (IF = 3.687), doi: 10.3390/ijms19061733

质谱平台： SCIEX QTRAP 4500

质谱主要作用： 通过基于 QTRAP 液质联用技术的广靶代谢组学，作者解析转基因油菜中次级代谢物的变化。在过表达株和野生株中共鉴定到 494 个代谢物，其中 399 个物质有明确的分类信息，271 个物质属于次级代谢产物。与野生型相比，在转基因株中发现有 89 个差异代谢物，其中 79 个物质属于次级代谢物，同时有 43 个次级代谢物表达量升高，有 30 个次级代谢物的表达量降低。该研究为揭示 Y 类 nsLTPs 这一类蛋白的功能以及这类蛋白在油菜育种中的应用奠定基础。

标签： 油菜，广靶代谢组学，次级代谢

Comparative Analysis of Phenolic Compound Characterization and Their Biosynthesis Genes between Two Diverse Bread Wheat (*Triticum aestivum*) Varieties Differing for Chapatti (Unleavened Flat Bread) Quality

OPEN ACCESS

Edited by:
Ute Roessner,
University of Melbourne, Australia

Monica Sharma^{1,2}, Rajat Sandhir^{2*}, Anuradha Singh¹, Pankaj Kumar¹, Ankita Mishra¹, Sanjay Jachak², Sukhvinder P. Singh¹, Jagdeep Singh¹ and Joy Roy^{1*}

作者单位： National Agri-Food Biotechnology Institute, India

中文翻译： 无酵饼品质不同的两种面包小麦品种酚类化合物特性及其生物合成基因的比较分析

文献出处： Front Plant Sci 2016 (IF = 3.678), doi: 10.3389/fpls.2016.01870

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 多酚化合物（PCs）影响面包品质和其他类型的加工食品如煎饼，目前详细分析影响煎饼品质的面包小麦中的 PCs 及其合成基因的报道还比较少。本文作者采用高分辨液质联用技术鉴定了两种煎饼品质不同的小麦中的 PCs。在这两个品种中 80% 的植物 PCs 被鉴定到，其中，有 9 个 PCs 仅在煎饼品质好的 C306 品种中鉴定到，4 个 PCs 仅在煎饼品质不好的 Sonalika 品种中鉴定到。鉴定到的 PCs 约 20% 在两个品种中是特异性的，其中 14 个 PCs 的含量在两个品种中明显不同。后续又结合基于微阵列和 qRT-PCR 方法的功能基因组学技术研究了多酚合成的基因。本研究产生的信息可扩展到更大的种质资源上，用于小麦育种中的分子标记的开发。

标签： 食品组学，小麦品质，多酚



Untargeted metabolomics of fresh and heat treatment Tiger nut (*Cyperus esculentus* L.) milks reveals further insight into food quality and nutrition ☆

Josep Rubert ^{a, b, *}, Andoni Monforte ^c, Kamila Hurkova ^a, Gaspar Pérez-Martínez ^d, Jesús Blesa ^{a, f}, José L. Navarro ^g, Milena Stranka ^a, José Miguel Soriano ^{a, f}, Jana Hajslova ^a

作者单位： University of Chemistry and Technology, Prague

中文翻译： 非靶向代谢组学研究新鲜和加热的洋地栗（油莎草块茎）奶揭示了对食品质量和营养的影响

文献出处： J Chromatogr A 2017 (IF = 3.716), doi: 10.1016/j.chroma.2017.07.071

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 洋地栗（油莎草块茎）是西班牙巴伦西亚地区和世界上其他温带和热带地区的一种传统作物，其块茎通常被加工成洋地栗奶食用，此产品已开始在国际流通。本研究的主要目的是利用先进的分析方法和化学计量学工具，确定与新鲜产品比较，延长洋地栗乳保质期所需的超高温处理（UHT）是否会影响其营养状况。采用基于高分辨液质联用技术的非靶向代谢组学方法对 UHT 和新鲜洋地栗乳进行分析，比较不同化学模式下二甘油柠檬酸酯和单酰基甘油作为 UHT 乳化剂的差异，以及新鲜产品中生物素、磷脂酸 (PA) 和 L-精氨酸的高含量的影响。结果表明，非靶向代谢组学通过高分辨率串联质谱可以发现食品之间的细微差别，能清楚地看出 UHT 处理所造成的营养损失。

标签： 代谢组学，食品组学，洋地栗奶，食品加工，营养，质量控制

Metabolomic Approach for the Authentication of Berry Fruit Juice by Liquid Chromatography Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry Coupled to Chemometrics

Jiukai Zhang,[†] Qiu hao Yu,^{†,‡} Haiyan Cheng,[§] Yiqiang Ge,^{||} Han Liu,[†] Xingqian Ye,[‡] and Ying Chen^{*,†,‡} 

作者单位：中国检验检疫科学研究院农产品安全研究中心

中文翻译：液相色谱 - 四极飞行时间质谱与化学计量学用于浆果果汁掺假鉴别

文献出处：J Agric Food Chem 2018 (IF = 3.412), doi: 10.1021/acs.jafc.8b01682

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途：作者在 TripleTOF 高分辨质谱平台上对文献中报道的果汁中的 41 中代谢物进行了靶向代谢组学的分析，通过代谢物含量的差异可以实现果汁掺假的鉴别。在此基础上进行了全面的非靶向代谢组学的分析，最终鉴定了 18 种专属于浆果果汁的标志物，展示了靶向和非靶向代谢组学在食品掺假鉴别中的重要作用。

标签：代谢组学，食品组学，果汁掺假，化学计量学

JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY

Article

Ultrafast polyphenol metabolomics of red wines using microLC-MS/MS

Yan Ma, Nobuo Tanaka, Arpana Vaniya, Tobias Kind, and Oliver Fiehn

J. Agric. Food Chem., Just Accepted Manuscript • DOI: 10.1021/acs.jafc.5b04890 • Publication Date (Web): 23 Dec 2015Downloaded from <http://pubs.acs.org> on December 26, 2015

作者单位： UC Davis Genome Center – Metabolomics, University of California, USA

中文翻译： 采用微流 LC-MS/MS 技术研究红酒的超快多酚代谢组学

文献出处： J Agric Food Chem 2016 (IF = 3.412), doi: 10.1021/acs.jafc.5b04890

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 红酒的口感和品质是由多酚类和许多其他代谢物组成的复杂混合物决定的。目前没有一种单一的方法能够完全覆盖整个代谢组，即使是针对多酚和相关化合物的分析，目前的方法也是不够的。作者采用 1 mm 色谱柱和微流液相来改善色谱分离和提高灵敏度，并比较了数据依赖与数据非依赖 (SWATH) 采集二级谱的获取结果。在 Kinetex C18 色谱柱上，基于 TripleTOF 高分辨质谱技术，建立了一种高通量的微流 LC-MS 方法，流速为 0.05 mL/min，梯度为 4 min。结合 MS-DIAL 软件对 6 种商品红葡萄酒中的 264 个化合物进行了结构注释，其中 165 个多酚类化合物有准确的 MS2 匹配。作为概念的证明，作者采用基于多元统计的代谢组学方法揭示了 6 种红葡萄酒代谢物谱的差异，并通过回归分析将多酚含量与红葡萄酒的口感联系起来。

标签： 代谢组学，食品组学，红酒，多酚，SWATH，Micro LC



Article

Combined Analysis of the Fruit Metabolome and Transcriptome Reveals Candidate Genes Involved in Flavonoid Biosynthesis in *Actinidia arguta*

Yukuo Li , Jinbao Fang *, Xiujuan Qi *, Miaomiao Lin, Yunpeng Zhong, Leiming Sun and Wen Cui

作者单位：中国农科院郑州果树研究所

中文翻译：水果代谢组和转录组联合分析揭示猕猴桃黄酮生物合成的候选基因

文献出处：Int J Mol Sci 2018 (IF = 3.687), doi: 10.3390/ijms19051471

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要作用：作者基于 TripleTOF 高分辨质谱的非靶向代谢组学对红色和绿色两种果肉猕猴桃进行差异代谢物研究。正、负离子模式发现的代谢特征经 XCMS 数据库检索分别匹配到 9016 和 4699 个物质，经二级谱图分别鉴定到 1267 和 360 个。在 KEGG 数据库中注释到的分别有 8070 和 4321 个，归属到 18 个代谢途径中。其中分别有 73（正离子模式）和 67 个（负离子模式）代谢物参与了黄酮类和花青素合成途径。不同品种和时期下的样品差异分析发现相应的差异代谢物和差异代谢途径中，黄酮合成途径和半乳糖代谢途径在 3 个差异代谢组中都有变化。联合转录组数据分析，并构建了转录组 - 代谢组调控网络，从而勾勒出猕猴桃中类黄酮的网络代谢图。

标签：猕猴桃，靶向代谢组学，黄酮



Article

Identification of Nutritional Components in Black Sesame Determined by Widely Targeted Metabolomics and Traditional Chinese Medicines

Dandan Wang ^{1,2,†}, Liangxiao Zhang ^{1,3,4,5,6,*,†} , Xiaorong Huang ^{1,2,†}, Xiao Wang ^{1,5}, Ruinan Yang ^{1,2}, Jin Mao ^{1,5}, Xuefang Wang ^{1,5}, Xiupin Wang ^{1,5}, Qi Zhang ^{1,4} and Peiwu Li ^{1,3,4,5,*}

作者单位：中国农科院武汉油料所

中文翻译：广泛靶向代谢组学及中药学鉴定黑芝麻中的营养成分

文献出处：Molecules 2018 (IF = 3.098), doi: 10.3390/molecules23051180

质谱平台：SCIEX QTRAP 4500

质谱主要作用：通过基于 QTRAP 液质联用平台的广靶代谢组学对黑芝麻和白芝麻种子（各 10 个样品）进行代谢物鉴定，作者得到涵盖 30 多个主要代谢途径的 217 个代谢物。含量差异分析发现了黑芝麻中 69 个显著差异代谢物，并成功鉴定到 20 个差异代谢物（潜在的生物标志物），其中吲哚-3-羧酸，橙皮素，2-甲氧基肉桂酸，维生素 B2，松柏醛，根皮素，莨菪碱在黑芝麻种子中含量明显高于白芝麻。作者进一步对差异代谢物进行通路分析，对黑芝麻进行营养品质分析。通过鉴定与黑芝麻特殊营养成分及中药作用相关的代谢物，为黑芝麻分子育种提供理论依据，对指导高品质芝麻遗传育种有较为重要的意义。

标签：黑芝麻，广靶代谢组学，营养成分，中药学



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Plant Physiology

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jplph



Dynamic phytohormone profiling of rice upon *rice black-streaked dwarf virus* invasion

Renyan Huang¹, Yueyue Li¹, Guilin Tang, Shugang Hui, Zeyu Yang, Junwei Zhao, Hongbo Liu, Jianbo Cao, Meng Yuan^{*}

作者单位： 华中农业大学

中文翻译： 水稻黑条矮缩病毒侵染后水稻内源植物激素的动态变化

文献来源： J Plant Physiol 2018 (IF = 2.833), doi: 10.1016/j.jplph.2018.06.001

质谱平台： SCIEX QTRAP 4000

质谱主要作用： 作者报道了基于质谱技术定量检测了水稻黑条矮缩病毒（RBSDV）侵染水稻不同时间后，其内源性植物激素的含量变化。其中脱落酸（ABA）和细胞分裂素（CTKs）的含量增加，而生长素（IAA），赤霉素（GAs），茉莉酸（JA）和水杨酸（SA）的含量减少，该结果说明了RBSDV侵染会对植物体内激素的积累产生影响。随后的检测证明参与这些植物激素代谢和信号通路的基因表达量也发生了变化。通过切片观察感病植物茎的细胞形态和数目，以及外源施加IAA、JA以及GA3对植物表型的影响，发现外源施加GA3能挽救感病植株的矮化表型，同时提前施加SA能显著降低黑条纹矮病对水稻的危害。作者得出RBSDV是通过影响GAs合成造成内源GAs含量减少从而影响细胞伸长使得植株呈现矮化表型的结论。

标签： 水稻，黑条矮缩病毒，植物激素，靶向代谢

Monoethylhexyl Phthalate Elicits an Inflammatory Response in Adipocytes Characterized by Alterations in Lipid and Cytokine Pathways

Sara Manteiga and Kyongbum Lee

作者单位： Department of Chemical and Biological Engineering, Tufts University, USA

中文翻译： 邻苯二甲酸单乙基己酯引起脂肪细胞炎症反应，其特点是脂类和细胞因子通路的改变

文献出处： Environ Health Perspec 2017 (IF = 8.309), doi: 10.1289/EHP464

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+, QTRAP 3200

质谱主要用途： 为了研究内分泌干扰化合物 (EDC) 对脂肪组织的影响，作者采用基于质谱的代谢组学、蛋白质组学方法，并和基因表达分析相结合，研究内分泌干扰化合物邻苯二甲酸乙酯 (MEHP) 对小鼠分化脂肪细胞的影响。基于 QTRAP 靶向分析氨基酸，基于 TripleTOF 5600+ 分析脂肪酸、核苷酸辅助因子、糖酵解中间体、TCA 循环和戊糖磷酸途径。结果表明，连续几天反复接触 MEHP 可引起代谢物和酶水平的变化，提示脂质生成和脂质氧化增加。化学暴露也增加了主要炎症细胞因子的表达，包括趋化因子。蛋白质组学和基因表达分析显示过氧化物酶体增殖物激活受体- γ (PPAR γ) 调控的通路有明显改变。用一种化学拮抗剂抑制核受体的活性，不仅可以抑制 PPAR γ 调节代谢途径的改变，而且还能抑制细胞因子表达的增加。由此可见，MEHP 可诱导分化脂肪细胞出现促炎状态，这种效应至少是部分 PPAR γ 介导的。

标签： 代谢组学，蛋白组学，内分泌干扰化合物，邻苯二甲酸单乙基己酯，肥胖

New Insights into the Cytotoxic Mechanism of Hexabromocyclododecane (HBCD) from a Metabolomic Approach

Feidi Wang, Haijun Zhang, Ningbo Geng, Baoqin Zhang, Xiaoqian Ren, and Jiping Chen

Environ. Sci. Technol., Just Accepted Manuscript • DOI: 10.1021/acs.est.5b03678 • Publication Date (Web): 13 Feb 2016

作者单位：中科院大连化学物理研究所

中文翻译：基于代谢组学方法对六溴环十二烷细胞毒性机理的新认识

文献出处：Environ Sci Technol 2016 (IF = 6.653), doi: 10.1021/acs.est.5b03678

质谱平台：SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途：六溴环十二烷 (HBCD) 的毒性作用复杂，其潜在的毒理机制仍未完全清楚。本研究建立了一种基于 QTRAP 质谱技术的拟靶向代谢组学方法，以评价 HepG 2 细胞在 HBCD 干预下相关代谢的改变。HBCD 暴露明显损害代谢动态平衡，并导致氧化应激，即使在与环境有关的剂量 (0.05 mg/L) 下也是如此。代谢谱和多因素分析表明，HBCD 干扰的主要代谢途径包括氨基酸代谢、蛋白质生物合成、脂肪酸代谢和磷脂代谢。HBCD 主要通过抑制细胞膜转运蛋白 Na⁺/K⁺ 32-ATP 酶的活性，抑制细胞对氨基酸的摄取。HBCD 降低了糖酵解和长链脂肪酸的 β 氧化，导致 ATP 产量大幅度下降，从而进一步抑制了氨基酸的跨膜转运。同时，HBCD 引起总磷脂显著增加，主要是通过增加游离脂肪酸对磷脂进行重塑。这些代谢组学结果也为 HBCD 导致肥胖、糖尿病、神经系统损害和发育障碍的毒理学机制提供了一些新的证据和线索。

标签：拟靶向代谢组学，六溴环十二烷，暴露，HepG 2 细胞，毒理

Novel fluorinated surfactants tentatively identified in firefighters using LC-QTOF-MS/MS and a case-control approach

Anna Rotander, Anna Kärrman, Leisa Toms, Margaret Kay, Jochen F. Mueller, and María José Gómez Ramos

Environ. Sci. Technol., Just Accepted Manuscript • DOI: 10.1021/es503653n • Publication Date (Web): 22 Jan 2015

作者单位： National Research Centre for Environmental Toxicology (Entox), The University of Queensland, Australia

中文翻译： 采用 LC-QTOF-MS/MS 和案例 - 空白对照法，初步鉴定了消防员体内的新型氟化表面活性剂

文献出处： Environ Sci Technol 2015 (IF = 6.653), doi: 10.1021/es503653n

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 水性成膜泡沫 (AFFF) 是由全氟烷基化合物或多氟烷基化合物 (PFAS) 组成，用于扑灭含高度易燃液体的火灾，消防员的接触几率非常高。本研究采用基于案例 - 对照的代谢组学研究思路，利用 TripleTOF 5600 的 TOF IDA 数据采集方式，结合统计学方法来发现和鉴定暴露于 AFFF 消防员的血清中已知和未知的 PFAS 化合物。与对照组相比，在消防员暴露组中频繁检测和鉴定出高浓度氟化物 9 种，包括 2 种目标全氟磺酸化合物 PFOS 和 PFHxS，3 种非目标性全氟酸 PFPeS，PFHpS 和 PFNS，4 种完全未知的全氟磺酸化合物 Cl-PFOS, ketone-PFOS, ether-PFHxS, and Cl-PFHxS。该研究策略可用于快速高效鉴定未报道的全氟化合物，为消防员的氟化物暴露研究提供支撑。

标签： 消防员，未知氟化物鉴定，暴露组学，职业危害因素

Use of Metallomics and Metabolomics to Assess Metal Pollution in Doñana National Park (SW Spain)

M. A. García-Sevillano,[†] T. García-Barrera,^{*,†} E. Navarro,[‡] N. Abril,[§] C. Pueyo,[§] J. López-Barea,[§] and J. L. Gómez-Ariza^{*,†}

作者单位： Huelva University, Spain

中文翻译： 采用金属组学和代谢组学评价西班牙 Doñana 国家公园的金属污染

文献出处： Environ Sci Technol 2014 (IF = 6.653), doi: 10.1021/es4057938

质谱平台： SCIEX QSTAR Q-TOF

质谱主要用途： 在过去几十年中，监测有机体重金属的暴露水平的重要性日益增加。鼠科动物 *M. spretus* 被用于评估在西班牙 Doñana 国家公园 (DNP) 及周边地区其对污染物的生物响应。作者基于尺寸排阻色谱与电感耦合等离子体质谱联用 (SEC-ICP-MS) 的金属组学方法对金属生物分子的表征，基于直接进样的 Q-TOF 高分辨质谱的代谢组学方法 (DI-ESI-QTOF-MS)，结合 PLS-DA 统计学分析，比较了生活在 DNP 及周边共三个地区的 *M. spretus* 的生物学反应。结果表明，金属在生态系统中的存在对金属蛋白水平、膜磷脂的破坏、代谢途径的紊乱、能量代谢和氧化应激等有影响。

标签： 代谢组学，金属组学，重金属污染



Metabolomic analysis to define and compare the effects of PAHs and oxygenated PAHs in developing zebrafish



Marc R. Elie^a, Jaewoo Choi^b, Yasmeen M. Nkrumah-Elie^c, Gregory D. Gonnerman^a, Jan F. Stevens^b, Robert L. Tanguay^{a,*}

作者单位： Sinnhuber Aquatic Research Laboratory, Oregon State University, USA

中文翻译： 通过代谢组学分析来确定和比较多环芳烃和氧化多环芳烃对斑马鱼发育的影响

文献出处： Environ Res 2015 (IF = 4.732), doi: 10.1016/j.envres.2015.05.009

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 氧化多环芳烃（oxy-PAHs）在环境中的可溶性和流动性比 PAHs 更强，但对 oxy-PAHs 的生物学效应以及母体 PAHs 和 oxy-PAHs 暴露的代谢反应的比较研究报告还很少。为了弥补这些空白，作者采用基于高分辨质谱的非靶向代谢组学方法研究了暴露于 4 μ M 的苯并[a]蒽（BAA）或苯并[a]蒽-7,12-二酮（BAQ）的发育中的斑马鱼的体内代谢组学特征。综合多因素、单因素和路径分析，共发现 62 个代谢物在暴露 5 天后发生明显改变。BAA 和 BAQ 均影响蛋白质生物合成、线粒体功能、神经发育、血管发育和心脏功能。作者将先前的转录组和基因组数据也纳入到这一代谢组学研究中，以更全面地研究 PAH 和 oxy-PAH 暴露和脊椎动物发育之间的联系。

标签： 代谢组学，多环芳烃，氧化多环芳烃，暴露，斑马鱼



Stereoselective bioaccumulation of chiral PCB 91 in earthworm and its metabolomic and lipidomic responses[☆]



Zeying He^a, Yuehua Wang^a, Yanwei Zhang^a, Haiyan Cheng^b, Xiaowei Liu^{a,*}

作者单位： 农业环境保护研究所，农业部农产品质量安全环境因素控制重点实验室

中文翻译： 蚯蚓体内手性 PCB 91 的立体选择性生物富集及代谢组学和脂质组学响应

文献出处： Environ Pollut 2018 (IF = 4.358), doi: 10.1016/j.envpol.2018.03.060

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 文章研究了蚯蚓 - 土壤体系中蚯蚓暴露于手性多氯联苯 (PCB) 91 的立体选择性生物蓄积、清除、代谢组学和脂质组学效应。在 50 和 500 mg/kgdwt 接触后，观察到 (-)-PCB 91 优先生物蓄积和 (+)-PCB91 的消除。在摄取和消除期间，对映体分数值随着时间的推移而降低。基于高分辨质谱的代谢组学和脂质组学技术发现，和对照组相比，暴露于 (+)-, (-)-, 和 (±)-PCB 91 的蚯蚓体内有 108 个代谢物发生显著变化。6 种溶血磷脂 (LPC)、6 种溶血磷脂酰乙醇胺 (LPE)、8 种溶血磷脂酰肌醇 (LPI) 和 5 种溶血磷脂酰丝氨酸 (LPS) 在暴露组与对照组之间也有差异表达。代谢产物和脂质水平的变化表明手性 PCB 91 对蚯蚓氨基酸、能量和核苷酸代谢、神经发育和基因表达具有立体选择性作用。总体而言，(+)-PCB 91 的作用比 (-)- 和 (±)-PCB 91 显著。

标签： 代谢组学，脂质组学，PCB 91，手性，暴露，立体选择性，蚯蚓



Effects of low-levels of three hexabromocyclododecane diastereomers on the metabolic profiles of pak choi leaves using high-throughput untargeted metabolomics approach[☆]



Yanwei Zhang, Qiqi Guo, Dongfei Tan, Zeying He, Yuehua Wang, Xiaowei Liu^{*}

作者单位： 农业环境保护研究所，农业部农产品质量安全环境因素控制重点实验室

中文翻译： 基于高通量非靶向代谢组学方法研究三种低水平六溴环十二烷对映体对小白菜叶子的影响

文献出处： Environ Pollut 2018 (IF = 4.358), doi: 10.1016/j.envpol.2018.07.062

质谱平台： SCIEX TripleTOF 6600

质谱主要用途： 六溴环十二烷 (HBCD) 对鱼类、小鼠等动物的生态毒性已有报道，但对植物的影响，特别是毒性机制的研究很少。文章采用基于高分辨质谱的非目标代谢组学方法研究了暴露于微量 HBCD 对映体 30 天内的小白菜叶片代谢谱的变化，结合 OPLS-DA 统计学方法研究了 HBCD 暴露组与对照组之间的差异并对差异代谢物进行了鉴定。结果表明，HBCD 对映体的毒性顺序为： γ -HBCD > α -HBCD > β -HBCD。13 种代谢物被确定为鉴别 HBCD 毒性存在的潜在生物标志。研究发现，HBC 对动物和人类的脂类、碳水化合物、核苷酸和氨基酸代谢途径均有影响，而且 HBCD 还可引起次级代谢途径的干扰。这些结果有利于 HBCD 植物毒性机制的深入了解。

标签： 代谢组学，六溴环十二烷，对映体，暴露，白菜叶子

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Effects of Perfluorooctanoic Acid on Metabolic Profiles in Brain and Liver of Mouse Revealed by a High-throughput Targeted Metabolomics Approach

Received: 24 November 2015

Accepted: 15 March 2016

Published: 01 April 2016

Nanyang Yu¹, Si Wei¹, Meiyang Li¹, Jingping Yang², Kan Li¹, Ling Jin³, Yuwei Xie¹, John P. Giesy^{1,4,5}, Xiaowei Zhang¹ & Hongxia Yu¹

作者单位： 南京大学环境学院

中文翻译： 高通量靶向代谢组学方法研究全氟辛酸对小鼠脑、肝代谢谱的影响

文献出处： Sci Rep 2016 (IF = 4.122), doi: 10.1038/srep23963

质谱平台： SCIEX QTRAP 4000, API 4000

质谱主要用途： 全氟辛酸 (PFOA) 可引起动物的肝毒性和神经行为效应。由于肝毒性和神经毒性过程中代谢谱的变化尚不完全解析，作者采用基于 QTRAP 质谱技术的高通量靶向代谢组学方法研究了 PFOA 暴露 28 天对雄性 Balb/c 小鼠脑和肝脏中 278 种代谢物的影响。多因素统计分析结果表明，PFOA 可引起暴露个体代谢途径的改变。路径分析表明，PFOA 影响氨基酸、脂类、碳水化合物和能量物质的代谢。分别有 10 和 18 种代谢物被确定为脑和肝脏中 PFOA 暴露的独特生物标志物。在大脑中，PFOA 影响脑内的神经递质浓度；在肝脏中，脂质谱显示 β -氧化和饱和、不饱和脂肪酸的生物合成参与了 PFOA 所致的肝毒性，而花生四烯酸代谢的改变表明 PFOA 可能引起肝脏的炎症反应。该结果为深入了解 PFOA 诱导效应机制和生物标志物提供了理论依据。

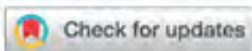
标签： 靶向代谢组学，全氟辛酸，暴露，生物标志物



Metallomics

PAPER

[View Article Online](#)
[View Journal](#)



Cite this: DOI: 10.1039/c7mt00207f

Correlations in the elemental and metabolic profiles of the lichen *Dirinaria picta* after road traffic exposure†

Xulei Huang,^a Lei Wang,^a Anna Karen Carrasco Laserna^a and Sam Fong Yau Li^{a,b}

作者单位： Department of Chemistry, National University of Singapore, Singapore

中文翻译： 道路交通暴露后地衣中元素和代谢谱变化的相关性研究

文献出处： Metallomics 2017 (IF = 4.069), doi: 10.1039/c7mt00207f

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 地衣可作为城市环境中道路交通元素的有效生物监测器，但道路交通有害重金属与地衣代谢物之间的相互作用机制尚不清楚。本研究分析了新加坡城市 9 个地点道路交通暴露 3 个月后地衣的元素和代谢特征，34 种元素的浓度与交通暴露水平呈强相关关系，且总体上呈上升趋势。采用高分辨液质联用、气质和核磁相结合的多平台方法，鉴定了多种代谢产物，即糖醇、糖、氨基酸、低分子质量有机酸、次级代谢产物和核苷类。重金属铁、锌、铜、镉、铅、钴的总量与 21 个代谢物呈显著正相关，9 个代谢产物呈负相关。这些关联关系揭示了重金属通过清除活性氧、渗透调节、与 N 原子和巯基螯合、减少阿拉伯糖醇、抑制某些次级代谢产物如醌类和甾体类化合物的合成而被地衣体内解毒的机理。本研究为探讨重金属暴露下地衣的代谢毒性和解毒机制提供了新的思路。

标签： 代谢组学，道路交通，重金属，暴露，地衣



Metallomics

PAPER

View Article Online



Cite this: DOI: 10.1039/c7mt00007c

UHPLC-Q-TOF/MS based plasma metabolomics reveals the metabolic perturbations by manganese exposure in rat models

Hui Wang,^{ab} Zhiqi Liu,^{ac} Shengyi Wang,^{bc} Dongan Cui,^{bc} Xinke Zhang,^a Yongming Liu^{bc} and Yihua Zhang^{a*}

作者单位：西北农林大学兽医学院

中文翻译：基于 UHPLC-Q-TOF/MS 的血浆代谢组学研究锰暴露对大鼠代谢的影响

文献出处：Metallomics 2017 (IF = 4.069), doi: 10.1039/C7MT00007C

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 锰 (Mn) 是一种必需的作为生物辅助因子的金属离子，但高浓度的锰会引起脑内的积累并导致锰中毒。但由于缺乏客观的生物标志物，没有“金标准”来评估锰中毒。作者假设锰引起的改变与锰中毒的代谢反应有关，并采用基于高分辨液质联用技术的非靶向代谢组学方法对大鼠锰暴露组和对照组的血浆进行分析，以确定高锰暴露条件下的代谢紊乱。与对照组相比，锰暴露显著增加了肝脏中锰的含量，肝组织广泛的坏死和细胞核溶解提示肝脏损伤。主成分分析能够区分锰暴露组和对照组的代谢组，多因素和单因素分析表明，锰暴露组血浆中锰显著改变了 36 种代谢物 (12 种显著增加，24 种显著减少)。变化主要表现为嘌呤代谢、氨基酸代谢和脂肪酸代谢。这些数据为锰引起的血浆代谢改变提供了代谢证据和可能的生物标志物。这些代谢物靶点有潜力提高人们对细胞水平的锰转运和稳态机制的理解。

标签：代谢组学，锰，暴露

Human Metabolic Responses to Chronic Environmental Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Exposure by a Metabolomic Approach

Zhonghua Wang,[†] Yajie Zheng,[†] Baoxin Zhao,[‡] Yanping Zhang,[‡] Zhe Liu,[§] Jing Xu,[†] Yanhua Chen,[†] Zhao Yang,^{||} Fenfen Wang,^{||} Huiqing Wang,[†] Jiuming He,[†] Ruiping Zhang,^{*,†} and Zeper Abliz^{*,†}

作者单位：中国医学科学院和北京协和医学院

中文翻译：通过代谢组学方法研究人类对慢性环境多环芳烃暴露的代谢反应

文献出处：J Proteome Res 2015 (IF = 3.950), doi: 10.1021/acs.jproteome.5b00134

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600, QTRAP 5500

质谱主要用途：采用 QTRAP 质谱技术高灵敏的定量 9 种多环芳烃 (PAH) 尿液代谢物来综合评估每个个体多环芳烃 PAH 的暴露水平，基于 TripleTOF 5600 高分辨质谱进行代谢组学表征。作者研究发现与氨基酸、嘌呤、脂质和葡萄糖醛酸代谢途径相关的代谢物在暴露组中有显著变化，并发现普通人群中潜在的 PAH 暴露产生的敏感性和稳定性生物标记物，为在实际环境中多环芳烃暴露引起的早期分子事件研究提供新的思路。

标签：代谢组学，PAH 暴露，环境流行病学

RESEARCH ARTICLE

Subtoxic and toxic concentrations of benzene and toluene induce Nrf2-mediated antioxidative stress response and affect the central carbon metabolism in lung epithelial cells A549

Kalaimathi Murugesan¹, Sven Baumann², Dirk K. Wissenbach², Stefanie Kliemt¹, Stefan Kalkhof¹, Wolfgang Otto¹, Iljana Mögele³, Tibor Kohajda², Martin von Bergen^{1,2,4} and Janina M. Tomm¹

作者单位： Helmholtz Centre for Environmental Research, Germany

中文翻译： 苯和甲苯亚毒性和毒性浓度诱导 Nrf2 介导的抗氧化应激反应并影响肺上皮细胞 A549 的中心碳代谢

文献出处： Proteomics 2013 (IF = 3.532), doi: 10.1002/pmic.201300126

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 苯和甲苯是室内挥发性有机化合物中含量最高的一类，为了了解它们对代表肺第一道防线的肺上皮细胞 A549 的影响，作者采用蛋白质组学和基于 QTRAP 液质联用技术的靶向代谢组方法来检测苯和甲苯暴露导致不良结果的途径。揭示了 Nrf 2 介导的和氧化应激反应的糖酵解 / 糖异生蛋白富集应激相关蛋白 NQO 1 和 SOD 1 的上调，证实了苯和甲苯在非急性毒性浓度下导致氧化应激的发生。代谢组变化经离子色谱 - 质谱分析证实，葡萄糖 -6- 磷酸、果糖 -6- 磷酸、3- 磷酸甘油酸和 NADPH 均有显著变化。苯和甲苯暴露导致的分子改变显示了非急性毒性浓度对肺上皮细胞的有害影响。

标签： 靶向代谢组学，苯，甲苯，暴露，肺上皮细胞

Science

REPORTS

Cite as: H. Gong *et al.*, *Science*
10.1126/science.aat8923 (2018).

An electron transfer path connects subunits of a mycobacterial respiratory supercomplex

Hongri Gong^{1*}, Jun Li^{1,3*}, Ao Xu^{1,4*}, Yanting Tang¹, Wenxin Ji^{1,5}, Ruogo Gao^{1,5}, Shuhui Wang^{1,6}, Lu Yu¹, Changlin Tian^{3,7}, Jingwen Li⁸, Hsin-Yung Yen^{5,8}, Sin Mao Lam¹⁰, Guanghou Shui¹⁰, Xiana Yang^{1,3}, Yunu Sun¹, Xuemei Li¹, Minze Jia¹, Cheng Yang¹, Biao Jiang¹, Zhiyong Lou¹¹, Carol V. Robinson⁹, Luet-Lok Wong¹⁰, Luke W. Guddat¹⁰, Fei Sun^{4,12}, Qian Wang^{3,7}, Zihao Rao^{1,3,4,5,13}

作者单位：南开大学生命科学学院和医药化学生物学国家重点实验室

中文翻译：一种连接分枝杆菌呼吸超复合物亚基的电子转移路径

文献出处：Science 2018 (IF = 41.058), doi: 10.1126/science.aat8923

质谱平台：SCIEX QTRAP 6500

质谱主要用途：作者从耻垢分枝杆菌中分离了 CIII-CIV 超复合体并利用冷冻电镜获得了 3.5-Å 分辨率的蛋白结构，对了解电子转移的整个通路非常有帮助。而心磷脂在呼吸复合体和超复合体的组装和稳定性上发挥着重要作用。借助 QTRAP 6500 质谱在 SC CIII-IV 复合体跨膜的空间和交界处的结构中发现了磷脂的存在，它们的 16 条脂肪酸链填满了凹槽中大部分的空间，对超复合体的稳定起到了重要的作用。

标签：线粒体超复合体，电子转移，磷脂，分枝杆菌，分枝杆菌酸

LETTER

doi:10.1038/nature11042

Infection regulates pro-resolving mediators that lower antibiotic requirements

Nan Chiang¹, Gabrielle Fredman¹, Fredrik Bäckhed², Sungwhan F. Oh¹, Thad Vickery¹, Birgitta A. Schmidt¹ & Charles N. Serhan¹

作者单位： Brigham and Women's Hospital and Harvard Medical School, USA

中文翻译： 感染调控的催消退介质有助于降低抗生素的需求

文献出处： Nature 2012 (IF = 41.577), doi:10.1038/nature11042

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500, QTRAP 3200

质谱主要用途： 细菌感染如何促进急性炎症的主动解决机制目前还不清楚。作者开展了小鼠腹腔积液大肠杆菌感染的渗出性白细胞运输和基于 QTRAP 的代谢脂质组学研究，并对促炎剂和特定的促消退介质 (SPMs) 进行了鉴定。在皮肤感染中，SPMs 提高了万古霉素对金黄色葡萄球菌清除率。所有这些数据显示，特定的 SPMs 在细菌感染过程中具有时间性和差异性的调节；在细菌清除过程中，SPMs 具有抗炎、加强遏制和减少对抗生素的要求。

标签： 脂质组学，抗生素，感染

The cold-induced lipokine 12,13-diHOME promotes fatty acid transport into brown adipose tissue

Matthew D Lynes¹, Luiz O Leiria¹, Morten Lundh^{1,2}, Alexander Bartelt³, Farnaz Shamsi¹, Tian Lian Huang¹, Hirokazu Takahashi¹, Michael F Hirshman¹, Christian Schlein³, Alexandra Lee³, Lisa A Baer⁴, Francis J May⁴, Fei Gao⁵, Niven R Narain⁵, Emily Y Chen⁵, Michael A Kiebish⁵, Aaron M Cypess⁶, Matthias Blüher⁷, Laurie J Goodyear¹, Gökhan S Hotamisligil³, Kristin I Stanford⁴ & Yu-Hua Tseng^{1,8}

作者单位： Joslin Diabetes Center, Harvard Medical School, USA

中文翻译： 冷诱导脂肪素 12,13- 二羟基 -9Z- 十八烯酸（diHOME）促进脂肪酸向棕色脂肪组织的转运

文献出处： Nat Med 2017 (IF = 32.621), doi: 10.1038/nm.4297

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 由于棕色脂肪组织（BAT）能吸收和燃烧脂质，长期以来被认为是治疗各种代谢疾病，比如肥胖，高血脂和糖尿病的重要目标。作者基于 TripleTOF 5600 高分辨质谱开展全局脂质组学分析，发现了一种脂类分子：12,13- 二羟基 -9Z- 十八烯酸（12,13-diHOME）能够刺激棕色脂肪组织，进一步通过 MRM^{HR} 模式测定了该化合物在血液中的含量，发现 diHOME 在血液中的含量与肥胖指数（BMI）和胰岛素的耐受成负相关关系。通过在体内补充 diHOME，发现体内代谢加速，能够使棕色脂肪组更好的吸收游离脂肪，转化成热量。

标签： 脂质组学，冷诱导，diHOME，MRM^{HR}

Research Articles

Gut Microbiota Promotes Obesity-Associated Liver Cancer through PGE₂-Mediated Suppression of Antitumor Immunity

Tze Mun Loo, Fumitaka Kamachi, Yoshihiro Watanabe, Shin Yoshimoto, Hiroaki Kanda, Yuriko Arai, Yaeko Nakajima-Takagi, Atsushi Iwama, Tomoaki Koga, Yukihiro Sugimoto, Takayuki Ozawa, Masaru Nakamura, Miho Kumagai, Koichi Watashi, Makoto M. Taketo, Tomohiro Aoki, Shuh Narumiya, Masanobu Oshima, Makoto Arita, Eiji Hara, and Naoko Ohtani

作者单位： Faculty of Science and Technology, Tokyo University of Science, Japan

中文翻译： 肠道微生物通过 PGE₂ 介导的抑制抗肿瘤免疫促进肥胖相关肝癌的发生

文献出处： Cancer Discov 2017 (IF = 24.374), doi: 10.1158/2159-8290.CD-16-0932

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 肥胖增加患癌风险，但其促进肝癌发展的分子机制不明。本文借助 QTRAP 5500 发现肥胖诱导的脂磷壁酸 (LTA，一种革兰氏阳性肠道微生物细胞壁成分) 通过建立促进肿瘤增殖的微环境来促进肝癌发展。LTA 与肥胖诱导的肠道微生物代谢物脱氧胆酸协同促进肝星状细胞 (HSC) 的衰老相关分泌表型 (SASP)，通过 Toll 样受体 2 上调 SASP 因子和 COX 2 的表达。COX 2 介导的前列腺素 E₂ (PGE₂) 通过 PTGER 4 受体抑制抗肿瘤免疫，从而促进 HCC 的进展。肠道微生物介导的 COX 2 通路在肿瘤微环境 HSCs 中产生脂质 PGE₂，在抑制抗肿瘤免疫中起着重要作用，提示 PGE₂ 及其受体可能是非肝硬化 NASH 相关肝癌的新的治疗靶点。基于 QTRAP 平台的脂质组学方法系统分析了样本中的脂质含量变化，为该工作提供有力支撑。

标签： 脂质组学，肥胖，肝癌

Functional Lipidomics: Palmitic Acid Impairs Hepatocellular Carcinoma Development by Modulating Membrane Fluidity and Glucose Metabolism

Ling Lin,^{1,2*} Ying Ding,^{1,3*} Yi Wang,^{1,2,4} Zhenxin Wang,¹ Xuefei Yin,^{1,4} Guoquan Yan,⁴ Lei Zhang,² Pengyuan Yang,^{1,2,4} and Huali Shen^{1,2,4}

作者单位：复旦大学基础医学院

中文翻译：功能脂质组学：棕榈酸通过调节膜流动性和葡萄糖代谢而影响肝癌的发展

文献出处：Hepatology 2017 (IF = 14.079), doi: 10.1002/hep.29033

质谱平台：SCIEX QTRAP 6500, QTRAP 4000

质谱主要用途：之前许多研究认为，饱和脂肪酸对正常细胞具有脂毒性作用，最终导致细胞死亡。作者采用 QTRAP 质谱的最新研究发现，肝癌细胞的转移潜能与癌细胞中棕榈酸含量负相关，颠覆了这一传统认知。本文报道在不同转移潜能的肝癌细胞系中共鉴定到 1700 余种脂质分子。通过定量比较发现，随着肝癌细胞转移潜能的升高，含棕榈酸的多种磷脂分子一致下调。这些数据显示了棕榈酸的抑癌作用可能是通过降低细胞膜流动性和葡萄糖摄取能力实现的。

标签：功能脂质组学，肥胖，肝癌

A chemical-genetic screen identifies ABHD12 as an oxidized-phosphatidylserine lipase

Dhanashree S. Kelkar^{1,3}, Govindan Ravikumar^{2,3}, Neelay Mehendale^{1,3}, Shubham Singh^{1,3}, Alaumy Joshi¹, Ajay Kumar Sharma², Amol Mhetre¹, Abinaya Rajendran¹, Harinath Chakrapani² and Siddhesh S. Kamat^{1*}

作者单位： Department of Biology, Indian Institute of Science Education and Research, India

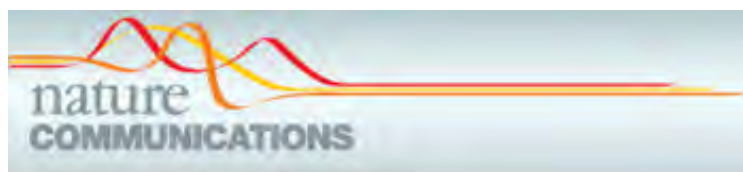
中文翻译： 化学 - 遗传筛选鉴定了 ABHD12 是一种氧化磷脂酰丝氨酸脂肪酶

文献出处： Nat Chem Biol 2019 (IF = 13.843), doi:10.1038/s41589-018-0195-0

质谱平台： SCIEX X500R, TripleTOF 6600

质谱主要用途： 氧化型磷脂酰丝氨酸 (PS) 是一种促凋亡的“来吃我”信号，是对活性氧 (ROS) 升高的反应，但对其化学成分和代谢的研究甚少。作者利用一种在不同哺乳动物细胞中产生 ROS 的小分子来检测，表征和研究哺乳动物细胞中氧化的 PS。通过化学遗传学筛选方法发现脂肪酶 ABHD12 可以水解氧化 PS。作者借助 X500R 高分辨质谱对哺乳动物细胞株中脂质化合物进行了表征和鉴定，并结合 X500R 的 MRM^{HR} 性能，对磷脂进行了靶向定量分析。

标签： 化学遗传筛选，脂质定性，磷脂定量，氧化磷脂酰丝氨酸脂肪酶，MRM^{HR}



ARTICLE

Received 11 Apr 2016 | Accepted 10 Jan 2017 | Published 1 Mar 2017

DOI: 10.1038/ncomms14609

OPEN

PNPLA1 has a crucial role in skin barrier function by directing acylceramide biosynthesis

Tetsuya Hirabayashi^{1,2,*}, Tatsuki Anjo^{1,3,*}, Arisa Kaneko^{1,4}, Yuuya Senoo⁵, Akitaka Shibata⁶, Hiroyuki Takama⁶, Kohei Yokoyama¹, Yasumasa Nishito⁷, Tomio Ono⁷, Choji Taya⁷, Kazuaki Muramatsu³, Kiyoko Fukami⁴, Agustí Muñoz-García⁸, Alan R. Brash⁹, Kazutaka Ikeda⁵, Makoto Arita⁵, Masashi Akiyama⁶ & Makoto Murakami^{1,2}

作者单位： Lipid Metabolism Project, Tokyo Metropolitan Institute of Medical Science, Japan

中文翻译： PNPLA1 通过指导酰基神经酰胺生物合成在皮肤屏障功能中起关键作用

文献出处： Nat Commun 2017 (IF = 12.353), doi: 10.1038/ncomms14609

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+, QTRAP 4000

质谱主要用途： 为研究 PNPLA1 突变引起常染色体隐性先天性鳞癣的机制，本研究基于高分辨质谱的脂质组学技术研究了 *Pnpla1*^{-/-} 和 *Abhd5*^{-/-} 小鼠表皮脂质，并通过 QTRAP 技术分析磷脂。研究发现 PNPLA1 是一种在分化角质细胞中表达的酶，在皮肤屏障所必需的脂质成分 ω -O- 酰基神经酰胺的生物合成中起着至关重要的作用。全局或角质细胞特异性 *Pnpla1* 缺陷新生儿因皮肤通透性屏障缺损而死亡，并伴有严重的经皮失水、角质层细胞间脂质层减少和角质细胞异常分化。此外，补充酰基神经酰胺可部分恢复 *Pnpla1*^{-/-} 角质细胞分化的改变。此结果为了了解皮肤屏障的形成和鳞癣病的发展提供了有价值的见解。

标签： 脂质组学，磷脂，皮肤屏障， 鳞癣，酰基神经酰胺生物合成



ARTICLE

<https://doi.org/10.1038/s41467-018-07963-8>

OPEN

Online photochemical derivatization enables comprehensive mass spectrometric analysis of unsaturated phospholipid isomers

Wenpeng Zhang^{1,2}, Donghui Zhang¹, Qinhua Chen³, Junhan Wu¹, Zheng Ouyang^{1,2} & Yu Xia^{1,2}

作者单位：清华大学精密仪器系精密测量技术与仪器国家重点实验室

中文翻译：在线光化学衍生化实现不饱和磷脂异构体的全面质谱分析

文献出处：Nature Commun 2019 (IF = 12.353), doi: 10.1038/s41467-018-07963-8

质谱平台：SCIEX QTRAP 4500

质谱主要用途：基于质谱的脂组学是脂类结构分析的主要工具，但碳 - 碳双键 (C=C) 在不饱和脂质中的有效定位和 C=C 位置异构体的识别仍具有挑战性。在此，作者通过 Patern-Büchi 反应与液相色谱 - 串联质谱联用，建立了在线 C=C 衍生化的大规模脂类分析平台，提供了关于脂质 C=C 位置异构体的丰富信息。作者应用该技术在牛肝脏中发现了 200 多个不饱和甘油磷脂的 C=C 位置，成功鉴定了 55 组 C=C 位置异构体。通过对乳腺癌和 2 型糖尿病患者组织标本的分析，发现 C=C 异构体的比值受人际关系变化的影响比个体差异小得多，表明异构体比值可用于脂类生物标志物的发现。

标签：PB 反应，脂质 C=C 双键定位，脂质，位置异构体

Angewandte Chemie

10.1002/ange.201900011

Mass Spectrometry

DOI: 10.1002/ange.200((will be filled in by the editorial staff))

Polymer Coating Transfer Enrichment for Direct Mass Spectrometry Analysis of Lipids in Biofluid Samples

Wenpeng Zhang, Spencer Chiang, Zishuai Li, Qinhua Chen, Yu Xia, and Zheng Ouyang*

作者单位：清华大学精密仪器系精密测量技术与仪器国家重点实验室

中文翻译：聚合物涂覆转移富集技术用于生物体液中脂质直接质谱快速分析

文献出处：Angew Chem 2019 (IF = 12.102), doi: 10.1002/ange.201900011

质谱平台：SCIEX QTRAP 4500

质谱主要用途：作者建立了一种用于直接质谱分析的多孔聚合物涂层转移富集方法，能对少量体液样品中脂质进行快速 (1 min) 质谱分析和定量；与基于 PB 反应的光化学衍生法联用，可以快速测定脂质的 C = C 双键位置，并可用于脂质生物标记物分析。

标签：聚合物涂层转移富集，脂质，C=C 双键，PB 反应，直接质谱分析



Structural basis for activity of TRIC counter-ion channels in calcium release

Xiao-hui Wang^{a,b,c,1}, Min Su^{a,b,1}, Feng Gao^{a,b,1}, Wenjun Xie^{d,1}, Yang Zeng^{a,b,c,1}, De-lin Li^{a,b,c,1}, Xue-lei Liu^{a,b,c}, Hong Zhao^{a,b}, Li Qin^{a,b,c}, Fei Li^e, Qun Liu^f, Oliver B. Clarke^g, Sin Man Lam^a, Guang-hou Shui^a, Wayne A. Hendrickson^{g,h,2}, and Yu-hang Chen^{a,b,c,2}

作者单位：中国科学院遗传学与发育生物学研究所分子发育生物学国家重点实验室

中文翻译：在钙释放中 TRIC 反离子通道活性的结构基础

文献出处：PNAS 2019 (IF = 9.504), doi: 10.1073/pnas.1817271116

质谱平台：SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途：新型离子通道 TRIC 家族与高等脊椎动物的高血压、骨发育等密切相关。作者借助 QTRAP 5500 对 TRIC 通道蛋白进行了脂质分析。在三维的蛋白结构中还发现甘油二酯 DAG 的结合，揭示脂类分子可能调控 TRIC 通道的结构 - 功能。这些研究揭示了 TRIC 离子通道具有新颖的调控机制。

标签：TRIC，离子通道蛋白，脂质



Mea6 controls VLDL transport through the coordinated regulation of COPII assembly

Yaqing Wang^{1,*}, Liang Liu^{1,2,*}, Hongsheng Zhang^{1,2}, Junwan Fan^{1,2}, Feng Zhang^{1,2}, Mei Yu³, Lei Shi¹, Lin Yang¹, Sin Man Lam¹, Huimin Wang⁴, Xiaowei Chen⁴, Yingchun Wang¹, Fei Gao⁵, Guanghou Shui¹, Zhiheng Xu^{1,6}

作者单位：中国科学院遗传学与发育生物学研究所分子发育生物学国家重点实验室

中文翻译：Mea6 通过协同调控 COPII 组装来控制 VLDL 的运输

文献出处：Cell Rep 2016 (IF = 8.282), doi: 10.1038/cr.2016.75

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600, QTRAP 4500

质谱主要用途：脂质累积可能是由于肝脏中极低密度脂蛋白 (VLDL) 分泌紊乱所致，可导致脂肪肝的发生。VLDL 是在内质网 (ER) 中合成的，并被转运到高尔基体，分泌到血浆中。然而，VLDL 转运的分子机制目前还不清楚。文章表明肝细胞特异性缺失脑膜瘤表达抗原 6 (Mea6) / 皮肤 T 细胞淋巴瘤相关抗原 5C (CTAGE5C) 可导致小鼠严重脂肪肝和低脂血症。基于 QTRAP 的定量脂质组学和基于高分辨质谱的蛋白质组学分析表明，Mea6/CTAGE5 缺失可抑制肝脏中不同类型的脂质和蛋白质 (包括 VLDL) 的分泌。此外，还发现 Mea6/CTAGE5 与 ER 外壳蛋白复合物 II (COPII) 的组分相互作用，当 COPII 被耗尽时，也会导致肝细胞脂质累积。这些结果不仅揭示了调节脂质运输的几个新的因子，而且还发现 Mea6 在脂质运输中发挥关键作用。

标签：脂肪肝，COPII 组装，脂质组学，蛋白组学，Mea6

SF-1 expression in the hypothalamus is required for beneficial metabolic effects of exercise

Teppei Fujikawa^{1†}, Carlos M Castorena^{1†}, Mackenzie Pearson², Christine M Kusminski², Newaz Ahmed¹, Pavan K Battiprolu³, Ki Woo Kim^{4,5,6}, Syann Lee¹, Joseph A Hill^{3,7}, Philipp E Scherer^{2,8}, William L Holland², Joel K Elmquist^{1,9*}

作者单位： Department of Internal Medicine, Division of Hypothalamic Research, University of Texas Southwestern Medical Center, USA

中文翻译： 下丘脑 SF-1 的表达是运动有益代谢所必需的。

文献出处： eLife 2016 (IF = 7.616), doi: 10.7554/eLife.18206

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 运动有许多有益的代谢效应。中枢神经系统 (CNS) 是调节能量平衡和协调全身代谢的关键。然而，中枢神经系统在运动中调节新陈代谢的作用仍然不太清楚。作者用基因工程小鼠评估了下丘脑腹内侧核 (VMH) 神经元对类固醇生成因子 -1 (SF-1) 表达的需求，基于高分辨质谱的鸟枪脂质组学方法分析了样品中的游离脂肪酸，探讨了运动对代谢的有益作用。作者发现 SF-1 减弱的 VMH 特异性缺失引起 (A) 脂肪量减少，(B) 血糖改善，(C) 与运动训练相关的能量消耗增加。出乎意料的是，作者发现 VMH 中的 SF-1 缺失可以减弱骨骼肌对运动的代谢反应。总之，这些证据表明 VMH 神经元内 SF-1 的表达有助于运动中的新陈代谢。

标签： 鸟枪脂质组学，下丘脑，运动，SF-1

Differential mobility spectrometry as an orthogonal separation to LC-ESI-MS/MS for quantification of isomeric cerebrosides in plasma and cerebrospinal fluid

Hongbin Xu^{1,2*}, Frederic R. Bouchier³, Thao T. Nguyen^{1,2}, Graeme P. Taylor^{1,2}, Julianna Tomlinson^{4,5}, Roberto A. Ortega⁶, Brigitte Simons³, Michael Schlossmacher^{4,5}, Rachel Saunders-Pullman^{6,7}, Walt Shaw⁸, Steffany AL Bennett^{1,2,4,5*}

作者单位： Neural Regeneration Laboratory and India Taylor Lipidomics Research Platform, Ottawa Institute of Systems Biology, Canada

中文翻译： LC/MS 结合 DMS 技术用于血浆和脑脊液中脑苷脂异构体的定量研究

文献出处： J Lipid Res 2019 (IF = 4.505), doi: 10.1194/jlr.D089797

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500, SelexION (DMS)

质谱主要用途： 脑苷脂是动物细胞膜的重要组成部分，准确定量脑苷脂对疾病发病机制以及疾病诊断具有重要作用，但量化脑苷脂异构体非常困难。作者建立了一种基于 LCMS 结合离子淌度的分离方法，可以在一次进样中对脑苷脂同分异构体进行分离和定量，具有快速、重现性好等优点。该方法拓展了 DMS 技术在糖苷脂分析领域的应用，使生物样品中的脑苷脂种类得到明确的分离和量化，从而使生物标志物的发现和药物的筛选成为可能。

标签： 离子淌度，脑苷脂，异构体，脑脊液，分离，定量

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Lipidomics and RNA-Seq Study of Lipid Regulation in *Aphis gossypii* parasitized by *Lysiphlebia japonica*

Received: 8 December 2016
Accepted: 30 March 2017
Published online: 02 May 2017

Gao XueKe, Zhang Shuai, Luo JunYu, Lü LiMin, Zhang LiJuan & Cui JinJie

The cotton-melon aphid, *Aphis gossypii* Glover, is a major insect pest worldwide. *Lysiphlebia japonica* (Ashmead) is an obligate parasitic wasp of *A. gossypii*, and has the ability to regulate lipid metabolism

作者单位： 中国农业科学院棉花研究所

中文翻译： 脂质组学和 RNA 序列研究棉蚜茧蜂寄生的棉蚜脂肪调控

文献出处： Sci Rep 2017 (IF = 4.122), doi: 10.1038/s41598-017-01546-1

质谱平台： SCIEX TripleTOF 6600

质谱主要用途： 利用 TripleTOF 6600 高分辨质谱，结合脂质组学研究技术，对棉铃虫在棉蚜茧蜂寄生前后组织的脂质组进行分析，共鉴定出 34 种甘油酯和 248 种甘油磷脂。结果显示在棉蚜茧蜂寄生 3 天后，棉蚜体内甘油三酯的脂肪链组成和甘油磷脂的含量均发生了显著的变化。该研究通过对棉蚜脂质代谢的研究，对昆虫与拟寄生物体的互作关系进行了深入分析，有助于进一步提高拟寄生物的产量。

标签： 脂质组学，棉蚜，棉蚜茧蜂，寄生

Metabolomics (2018) 14:80
<https://doi.org/10.1007/s11306-018-1375-3>

ORIGINAL ARTICLE



Unbiased lipidomic profiling reveals metabolomic changes during the onset and antipsychotics treatment of schizophrenia disease

Lailai Yan^{1,4} · Juntuo Zhou² · Dongfang Wang¹ · Dandan Si³ · Yaqiong Liu¹ · Lijun Zhong⁴  · Yuxin Yin^{2,4,5,6}

作者单位： 北京大学公共卫生学院疫苗研究中心实验科学技术系

中文翻译： 脂肪组学揭示精神分裂症发病及抗精神病药物治疗过程中代谢组学的变化

文献出处： Metabolomics 2018 (IF = 3.511), doi: 10.1007/s11306-018-1375-3

质谱平台： SCIEX TripleTOF 4600

质谱主要用途： 精神分裂症是一种常见的精神异常病症。作者借助 TripleTOF 4600 高分辨质谱，采用非靶向脂质组学和数据非依赖采集方法（SWATH），对精神分裂症患者在药物治疗前后的脂质组进行了大规模分析，鉴定了 445 种脂质分子。这些脂质分子对进一步了解精神分裂症的发病机理和开发新型抗精神病药物具有重要意义。

标签： 脂质组学，精神分裂症，SWATH，抗精神病药物

Autonomous Metabolomics for Rapid Metabolite Identification in Global Profiling

H. Paul Benton,[†] Julijana Ivanisevic,[†] Nathaniel G. Mahieu,[‡] Michael E. Kurczy,[†] Caroline H. Johnson,[†] Lauren Franco,[§] Duane Rinehart,[†] Elizabeth Valentine,[#] Harsha Gowda,^{†,§} Baljit K. Ubhi,[/] Ralf Tautenhahn,^{†,||} Andrew Gieschen,[⊥] Matthew W. Fields,[§] Gary J. Patti,^{*,‡} and Gary Siuzdak^{*}

作者单位： Scripps Center for Metabolomics and Mass Spectrometry, The Scripps Research Institute, Department of Chemistry, Washington University, USA

中文翻译： 自主代谢组学实现全景的代谢物快速鉴定

文献出处： Anal Chem 2015 (IF = 6.042), doi: 10.1021/ac5025649

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 本文作者证明在代谢组学样本分析中，TripleTOF 高分辨质谱在信息依赖采集模式（IDA）下，动态背景扣除（DBS）功能有效地避免 MS/MS 的冗余采集。即一个前级离子只采集数次 MS/MS 用于定性，避免同一个前级离子过多次的 MS/MS 采集以实现更多代谢物的 MS/MS 覆盖。利用 IDA 采集模式的非靶向代谢组学分析中，作者利用 TripleTOF 5600 一次采样分析，能够同时采集数以千计的 MS 和 MS/MS 质谱图。利用广泛应用的 XCMS 生物信息学统计软件和最大的 METLIN 代谢物二级数据库，能够实现代谢组学样本中化合物的峰匹配、鉴定、相对定量、以及多种统计分析；在数小时内完成样本间差异代谢物的发现和鉴定，显著缩短代谢组学分析流程，提高分析通量。基于 TripleTOF 5600 的 IDA 的代谢数据采集，以及 XCMS 和 METLIN 的数据处理的非靶向代谢组学分析流程，将会在系统生物学层面上整合数据比较分析、代谢物鉴定和代谢通路分析，促进非靶向代谢组学的发展。

标签： 非靶向代谢组学，IDA，XCMS，METLIN

MS-DIAL: data-independent MS/MS deconvolution for comprehensive metabolome analysis

Hiroshi Tsugawa, Tomas Cajka, Tobias Kind, Yan Ma, Brendan Higgins, Kazutaka Ikeda, Mitsuhiro Kanazawa, Jean VanderGheynst, Oliver Fiehn  & Masanori Arita 

作者单位： RIKEN Center for Sustainable Resource Science, Japan; Genome Center, University of California Davis, Davis, California, USA

中文翻译： MS-DIAL：全面代谢组学分析的数据非依赖采集的质谱数据去卷积软件

文献出处： Nat Methods 2015 (IF = 26.919), doi: 10.1038/nmeth.3393

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途： SWATH 技术在蛋白质组学分析中被证明有着优异的表现，但如何将该技术应用于小分子分析还是很大的难题，其中最大的难题在于 SWATH 为数据非依赖采集模式，生成的 MS 和 MS/MS 数据需要通过去卷积而加以归属。作者开发了基于 TripleTOF 系统的数据非依赖采集技术的数据分析软件 MS-DIAL，该软件可以高通量的对小分子化合物的 SWATH 质谱数据进行去卷积和定性分析。他们将该方法应用于藻类植物的分类研究，借助 LipidBlast 数据库，鉴定了超过 1000 种脂质，可以借助该结果对藻类进行化学分类。

标签： MS-DIAL, SWATH, DIA, 代谢组学, 脂质

ARTICLE

<https://doi.org/10.1038/s41467-019-09550-x>

OPEN

Metabolic reaction network-based recursive metabolite annotation for untargeted metabolomics

Xiaotao Shen^{1,2}, Ruohong Wang^{1,2}, Xin Xiong¹, Yandong Yin¹, Yuping Cai^{1,2}, Zaijun Ma^{1,2}, Nan Liu¹ & Zheng-Jiang Zhu¹ 

作者单位：中国科学院上海生物与化学交叉研究中心

中文翻译：以代谢反应网络为基础的递归代谢物鉴定用于非靶向代谢组学数据分析

文献出处：Nat Commun 2019 (IF = 12.353), doi: 10.1038/s41467-019-09550-x

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600+, TripleTOF 6600

质谱主要用途： 为了大规模注释基于液质联用技术的非靶向代谢组学方法获得的代谢物信息，作者开发了全新的 MetDNA 代谢注释策略。其理论支撑在于：在代谢反应网络中，代谢物与其成对反应的相邻代谢物有相似的化学结构，从而其二级质谱图也有一定的相似性。因此可以从有限的代谢物 MS/MS 谱库出发去鉴定未知代谢物，然后将鉴定到的代谢物作为种子，利用代谢反应网络的关联，去注释与它成对反应的相邻代谢物，循序递进，进行递归的注释分析。作者将 MetDNA 的数据算法应用到 TripleTOF 不同数据采集模式（IDA/DIA）采集的各种生物样本的质谱数据解析中，一次实验能够鉴定到大约 2000 个代谢物。MetDNA 数据分析策略为非靶向代谢组学数据解析提供了一个全新的思路。

标签：MetDNA, 非靶向代谢组学，代谢物注解，代谢反应网络

Metabolic Pathway Extension Approach for Metabolomic Biomarker Identification

Lin Wang,[‡] Hui Ye,[‡] Di Sun, Tuo Meng, Lijuan Cao, Mengqiu Wu, Min Zhao, Yun Wang, Baoqiang Chen, Xiaowei Xu, Guangji Wang,^{*} and Haiping Hao^{*‡}

作者单位：中国药科大学

中文翻译：代谢途径延伸法鉴定代谢标志物

文献出处：Anal Chem 2018 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.6b03757

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途： 为了克服目前代谢物数据库中 MS/MS 谱库不充分，未知物鉴定困难的现状，作者开发了代谢途径扩展策略（MPE）。其原理基于：整个生物的代谢组是由有限数量的起始代谢物经过多步的代谢反应而生成的，因此，能够通过起始代谢物和代谢反应加以解析相关化合物。文章以肉碱类化合物为例来验证该方法的可行性。鼠胃部被给予一定剂量的肉碱后，基于 TripleTOF 高分辨质谱采集了处理组和对照组鼠的血浆和组织样本中的代谢物数据。肉碱刺激导致鼠体内 97 个代谢物发生显著变化，利用 MPE 分析方法，作者成功鉴定了其中的 93 个代谢物，显著多于传统数据库检索方法鉴定到的代谢物数量。从而证明了 MPE 方法能够实现快速、可靠的代谢标志物鉴定工作。

标签： 非靶向代谢组学，代谢标志物鉴定，代谢途径延伸，代谢反应

Discovering Regulated Metabolite Families in Untargeted Metabolomics Studies

Hendrik Treutler,[‡] Hiroshi Tsugawa,^{||} Andrea Porzel,[§] Karin Gorzolka,[‡] Alain Tissier,[†] Steffen Neumann,[‡] and Gerd Ulrich Balcke^{*,†}

作者单位： Department of Cell and Metabolic Biology, Leibniz Institute of Plant Biochemistry, Germany

中文翻译： 在非靶向代谢组学研究中发现受调控代谢物家族

文献出处： Anal Chem 2016 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.6b01569

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 基于质谱法的代谢物鉴定是制约代谢组学应用在生物医学或植物研究中的主要瓶颈。作者提出了一种新方法来分析基于 TripleTOF 的非靶向，数据非依赖采集的代谢组学数据。通过 MS 丰度和 MS/MS 谱的综合分析，实现了调控代谢物家族的鉴定。该方法为比较代谢组学中的代谢调控提供了一个全局视角。作者开发了网络应用程序“MetFamily”来实现该方法，MetFamily 提供了基于 MS 信号强度模式与 MS/MS 水平上相应的结构相似性之间的动态连接。结构相关代谢物被标注为代谢物家族，根据检测到的 MS/MS 的层次聚类分析。通过主成分分析对 MS 模式进行联合检验，将此注释保存在加载中，有助于在代谢物家族层面上解释比较代谢组学数据。为了证明这一理论，作者以一种完全不受监督的方式，从野生型番茄属 LA 1777 中鉴定了两个特定于毛状体的代谢物家族，并根据先前的文献和核磁共振证实了文中的发现。

标签： 非靶向，代谢组学，SWATH，调控代谢物家族，MetFamily

Customized Consensus Spectral Library Building for Untargeted Quantitative Metabolomics Analysis with Data Independent Acquisition Mass Spectrometry and MetaboDIA Workflow

Gengbo Chen,^{†,⊗} Scott Walmsley,^{‡,§,⊗} Gemmy C. M. Cheung,^{||,⊥} Liyan Chen,[#] Ching-Yu Cheng,^{⊥,||,×} Roger W. Beuerman,^{⊥,||,×,○} Tien Yin Wong,^{||,⊥,||,×} Lei Zhou,^{*,⊥,||,×} and Hyungwon Choi^{||,†,§}

作者单位： Saw Swee Hock School of Public Health, National University of Singapore, Singapore

中文翻译： 利用数据非依赖采集质谱数据和 MetaboDIA 流程建立非靶向定量代谢组学自定义共识谱库

文献出处： Anal Chem 2017 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.6b05006

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途： 数据非依赖采集质谱 (DIA-MS) 与液相色谱联用是非靶向代谢组学中 MS/MS 数据快速、自动采样的一种很有前景的方法。然而，在 DIA-MS 中，宽隔离窗口产生的谱图包含碎片离子及其母离子的混合图谱。在一个完整的 MS/MS 谱库中，这种母体 - 碎片离子图谱对于碎片离子的相对定量至关重要，碎片离子是每种母离子的唯一代表。然而，现有的参考数据库不足以实现这一目的，因为在不同的仪器中，小分子的碎裂模式可能有所不同。作者开发了 MetaboDIA 软件，使用用户自己的数据依赖采集 (DDA) 数据建立自定义的 MS/MS 谱库，并利用 DIA 数据执行基于 MS/MS 的定量，从而与传统的基于 MS 的定量互补。MetaboDIA 还允许用户直接从 DIA 数据建立一个谱库，用于大样本的研究。利用一个重复的海藻数据集，作者证明了用自定义的 MS/MS 库提取的碎片离子定量可以获得同基于 MS 母离子直接定量一样可靠的定量结果。为了检验其在复杂样品中的适用性，又将 MetaboDIA 应用于临床血清代谢组学数据中，建立了一个包含 1829 种化合物的 DDA 谱库，并基于该谱库利用 DIA 数据进行了碎片离子定量，得到了灵敏的差异表达分析结果。

标签： 非靶向，代谢组学，SWATH，MS/MS 定量，谱库

Comprehensive Strategy to Construct In-House Database for Accurate and Batch Identification of Small Molecular Metabolites

Xinjie Zhao,[†] Zhongda Zeng,^{†,‡} Aiming Chen,[‡] Xin Lu,[†] Chunxia Zhao,[†] Chunxiu Hu,[†] Lina Zhou,[†] Xinyu Liu,[†] Xiaolin Wang,[†] Xiaoli Hou,[†] Yaorui Ye,[†] and Guowang Xu^{*,†,§}

作者单位：大连化学物理研究所

中文翻译：精确和批量鉴定小分子代谢物的本地数据库构建的综合策略

文献出处：Anal Chem 2018 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.8b01482

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途：代谢物鉴定是代谢组学研究中解释病理和生理过程调控机制的重要步骤。然而，由于质谱的复杂性、代谢产物的化学多样性以及标准数据库的不足，基于 LC-MS_n 的代谢物鉴定仍然比较困难。本文提出了一种在非靶向代谢组学研究中准确、批量鉴定代谢物的综合策略。首先，应用定义良好的流程生成可靠和标准的 LC-MS/MS 数据，包括标准操作过程中的保留时间 TR、MS 和 MS/MS 信息。建立了一个包含约 2000 种代谢物的内部数据库，通过内部标准的保留时间校准、母离子对齐和离子融合、自动 -MS/MS 信息提取和选择、数据库批量搜索和评分等方法，对非靶向代谢谱中的代谢产物进行了鉴定。作为应用实例，采用该策略分析了混合血清样本，并在正离子模式下鉴定了 202 种代谢物。这表明该策略对于基于 LC-MS_n 的非靶向代谢组学研究是有用的。

标签：非靶向，代谢组学，代谢物标准品数谱库

PROTOCOL

A positive/negative ion-switching, targeted mass spectrometry-based metabolomics platform for bodily fluids, cells, and fresh and fixed tissue

Min Yuan^{1,3}, Susanne B Breitkopf^{1,3}, Xuemei Yang¹ & John M Asara^{1,2}

作者单位： Harvard Medical School, USA

中文翻译： 一种正负切换用于体液、细胞、新鲜和固定组织分析的质谱靶向代谢组学平台

文献出处： Nat Protoc 2012 (IF = 12.423), doi: 10.1038/nprot.2012.024

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 中心代谢网络和细胞的增殖、生长和存活息息相关，定量分析中心代谢网络的代谢物有助于了解药物、遗传变异、以及环境等因素的刺激对代谢通路的影响；同时也能在代谢层面上，促进对疾病发生机理的研究，为药物研发提供帮助。本文作者基于 QTRAP 5500，开发了一个正负切换的中心代谢物定量分析的靶向代谢组学方法。该方法基于 HILIC 色谱柱分离，利用正负切换的 MRM 扫描模式，能够在 15 分钟的色谱时间内定量分析 258 个主要的中心代谢产物，包括三羧酸循环（TCA），糖酵解途径，磷酸戊糖途径，氨基酸代谢，核苷酸代谢等。该分析方法适用于不同生物样本中极性代谢物的分析，包括新鲜组织、癌细胞、体液和福尔马林 - 石蜡固定的肿瘤组织。通过不依赖于内标的相对定量分析代谢物的含量变化，结合统计分析和代谢通路分析，以解析代谢组变化的生物学意义。利用该平台，从代谢物的提取到每个化合物的色谱峰面积积分，能在 12 个小时内完成 15 个生物样本的代谢组学分析。

标签： 靶向代谢组学，258 内源代谢物，定量

Ion-Pair Selection Method for Pseudotargeted Metabolomics Based on SWATH MS Acquisition and Its Application in Differential Metabolite Discovery of Type 2 Diabetes

Lichao Wang,^{†,§,||} Benzhe Su,[‡] Zhongda Zeng,[†] Chao Li,[‡] Xinjie Zhao,^{†,||} Wangjie Lv,^{†,||} Qiuhui Xuan,^{†,||} Yang Ouyang,^{†,||} Lina Zhou,^{†,||} Peiyuan Yin,^{†,||} Xiaojun Peng,[§] Xin Lu,^{†,||} Xiaohui Lin,[‡] and Guowang Xu^{*,†,||}

作者单位：中国科学院大连化学物理研究所

中文翻译：基于 SWATH 技术采集的拟靶向代谢组学离子对选择方法及其在 2 型糖尿病差异代谢物发现中的应用

文献出处：Anal Chem 2018 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.8b02377

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600+, QTRAP 5500

质谱主要用途：结合非靶向和靶向代谢组学流程的优点，作者开发了全新的拟靶向代谢组学策略。本文中作者利用 TripleTOF 高分辨质谱 SWATH 技术优异的二级质谱数据采集能力高覆盖地采集混合样本中代谢物的一级和二级质谱数据。从中经过优选后的代谢物的离子对信息无缝转接到 QTRAP 质谱上，进而实现一针进样，高灵敏度、高稳定性、宽动态范围和高通量地定量分析上千个代谢物。该拟靶向代谢组学策略应用到糖尿病血浆临床大样本的分析之中，实现了一个方法同时开展 1373 种代谢物的高通量靶向分析，以发掘其潜在的代谢生物标志物。

标签：拟靶向代谢组学, SWATH, 生物标志物, 2 型糖尿病

Multiple Reaction Monitoring-Ion Pair Finder: A Systematic Approach To Transform Nontargeted Mode to Pseudotargeted Mode for Metabolomics Study Based on Liquid Chromatography–Mass Spectrometry

Ping Luo,^{||} Weidong Dai,^{||} Peiyuan Yin, Zhongda Zeng, Hongwei Kong, Lina Zhou, Xiaolin Wang, Shili Chen, Xin Lu, and Guowang Xu*

作者单位：大连化学物理研究所

中文翻译：MRM-Ion Pair Finder: 一种基于液相色谱质谱的可将代谢组学研究中非靶向模式转化为拟靶向模式的系统方法

文献出处：Anal Chem 2015 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.5b00615

质谱平台：SCIEX TripleTOF 5600+, QTRAP 5500

质谱主要用途：拟靶向代谢组学是一种结合了靶向和非靶向方法优点的新策略。该策略通过信息依赖采集 (IDA) 从四极杆飞行时间 (Q-TOF) 质谱中获取代谢物及其产物离子，然后选择目标离子对，并通过多重反应监测 (MRM) 在三重四极杆类质谱上测量它们。从成千上万个离子中挑选离子对是拟靶向策略中最耗时的一步。为此作者开发了一种系统的、自动化的方法和软件 (MRM-Ion Finder)，通过母离子匹配、MS/MS 碎片提取和剔除、特征碎片离子选择和离子融合来获得特征 MRM 离子对。为了检验该方法的可靠性，首先分析了 15 种代谢物标准品混合物，正确地选出了具有代表性的离子对。在此基础上，对混合血清样本进行了进一步的研究，并通过人工选择进行了验证。最后，与商品化的峰对齐软件进行了比较，得到了较好的代谢产物的特征离子覆盖率。作为方法的验证，该方法被应用于肝癌的代谢组学研究，从血清中以正离子模式定义了 854 个代谢物离子对。该方法提供了一种高通量的获得 MRM 离子对的拟靶向代谢组方法，改善代谢物覆盖率，并促进更可靠的生物标记物的发现。

标签：拟靶向，非靶向，代谢组学，MRM ion Finder，MRM

A Novel Integrated Method for Large-Scale Detection, Identification, and Quantification of Widely Targeted Metabolites: Application in the Study of Rice Metabolomics

Wei Chen^a, Liang Gong^a, Zilong Guo^a, Wensheng Wang^a, Hongyan Zhang^b, Xianqing Liu^c, Sibin Yu^a, Lizhong Xiong^a, and Jie Luo^{a,c,1}

作者单位： 华中农业大学

中文翻译： 一种新的大规模检测、鉴定和定量大量靶标代谢物的新方法及在水稻代谢组学研究中的应用

文献出处： Mol Plant 2013 (IF = 9.326), doi:10.1093/mp/sst080

质谱平台： SCIEX QTRAP 4000

质谱主要用途： 本篇文献首次报道在 QTRAP 平台上建立广泛靶向代谢组学分析流程。作者使用 QTRAP 仪器的 MIM-IDA-EPI 的采集模式建立代谢物的二级标签谱图库，共从水稻样本中获得了 698 中代谢物的二级谱图，其中 135 代谢物被成功鉴定。基于建立的二级标签谱图库作者进一步优化 MRM 方法，并在 QTRAP 仪器上对水稻中的 277 种代谢物进行了大规模的定量分析，展示了广泛靶向代谢组技术在水稻代谢组研究中的重要作用。

标签： 水稻，广靶代谢组学，MIM-EPI

Globally Optimized Targeted Mass Spectrometry: Reliable Metabolomics Analysis with Broad Coverage

Haiwei Gu,^{*,†,‡,⊥} Ping Zhang,^{†,§,⊥} Jiangjiang Zhu,[†] and Daniel Raftery^{*,†,||}

作者单位： Northwest Metabolomics Research Center, Department of Anesthesiology and Pain Medicine, University of Washington, USA

中文翻译： 全面优化的靶向质谱：可靠的高覆盖度的代谢组学分析

文献出处： Anal Chem 2015 (IF = 6.042), doi: 10.1021/acs.analchem.5b03812

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 靶向检测是基于质谱的代谢组学最重要的方法之一，但其主要限制是分析中所使用的目标代谢物的数目有限，降低了代谢物覆盖率。鉴于此，作者开发了全局优化目标 (GOT)-MS 的新方法，它结合了代谢组学分析中目标检测和全局谱分析的许多优点，包括检测未知信息的能力、广泛的代谢物覆盖范围和出色的定量。GOT-MS 的关键步骤是利用三重四极杆类液质联用质谱（如 QTRAP）对母离子和产物离子进行全局搜索。以血清代谢物的测定为研究对象，在 60-600 Da 的质量范围内，在正、负电离模式下获得了 595 种母离子和 1890 种 MRMs。对被测试的许多 MRMS 代谢物，GOT-MS 的分析性能优于或至少可与基于 Q-TOF 的非靶向全面分析结果相媲美。以结直肠癌血清代谢物研究为例，GOT-MS 明显优于含有 ~160 生物重要代谢物的大型靶向 MS 分析，并为传统的 Q-TOF 全局分析提供了一种补充方法。因此，GOT-MS 能扩展和优化 QQQ-MS 的检测能力，并具有显著促进基础和临床代谢研究的潜力。

标签： 靶向代谢组学，母离子，产物离子，全局搜索，GOT-MS



Comprehensive MS/MS profiling by UHPLC-ESI-QTOF-MS/MS using SWATH data-independent acquisition for the study of platelet lipidomes in coronary artery disease

Jörg Schlotterbeck^a, Madhumita Chatterjee^b, Meinrad Gawaz^b, Michael Lämmerhofer^a   

作者单位： Institute of Pharmaceutical Sciences, University of Tübingen, Germany

中文翻译： 基于 UHPLC-ESI-QTOF 的 SWATH 数据非依赖采集技术全景采集冠状动脉疾病中血小板脂质组的 MS/MS 质谱图

文献出处： Anal Chim Acta 2019 (IF = 5.123), doi: 10.1016/j.aca.2018.08.060

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600+

质谱主要用途： 本文报道了作者利用超高效液相色谱连接 TripleTOF 5600+ 高分辨质谱仪分析平台，开发了基于全景数据非依赖采集模式 SWATH 技术的非靶向脂质组学分析方法，并应用于不同心血管类病人的血小板脂质组分析。SWATH 技术能够采集每一个生物样本在整个色谱洗脱过程中完整的 MS 和 MS/MS 质谱数据，因此能够基于前级离子或者碎片离子提取相应的色谱图。SWATH 采集的 Q1 隔离窗口是可以动态调整变化的，这个参数的优化可以提高血小板脂质组的覆盖度。当 SWATH 的 Q1 隔离窗口宽度设为 5 Da 时，此时前级离子的选择性就接近于 MRM 方法的选择性，从而实现低丰度的氧化磷脂类的检测。开放性的软件 MS-DIAL 能够自动处理 SWATH 采集的数据，完成脂质的鉴定工作。在这个实验中，作者共检测到了 1971 个特征峰，其中的 611 个实现了结构的解析。

标签： 非靶向脂质组学, SWATH, DIA, MS-DIAL

Differential Mobility Spectrometry-Driven Shotgun Lipidomics

Tuulia P. I. Lintonen,[†] Paul R. S. Baker,[‡] Matti Suoniemi,[†] Baljit K. Ubhi,[§] Kaisa M. Koistinen,[†]
Eva Duchoslav,[‡] J. Larry Campbell,[‡] and Kim Ekroos^{*,†}

作者单位： Zora Biosciences Oy, Finland

中文翻译： 基于差分离子淌度质谱的“鸟枪法”脂质组学分析

文献出处： Anal Chem 2018 (IF = 6.042), doi: 10.1021/ac5021744

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500, QTRAP 6500, SelexION

质谱主要用途： 作者在本文中报道利用差分离子淌度质谱 (DMS) 作为一种快速且能预测的分离技术，结合具有定量定性能力的 QTRAP 质谱开展“鸟枪法”脂质组分析。本文以磷脂类 (PLs) 分析为例，结果表明离子化后的不同类磷脂分子可经过 DMS 的不同的补偿电压得到分离。DMS 的分离受到磷脂离子的质核比、离子的结构、改性剂等多因素的影响。DMS 分离技术能够简化脂质分析，实现复杂提取物中脂质组的高稳定性和高通量的分析。同时不同脂质在 DMS 分离的可预测性有助于实现不同磷脂类之间的同分异构体和同重异构体的正确归属，大幅度减小鉴定的假阳性率，从而解决了这一传统“鸟枪法”脂质学分析面临的最大的技术难点。总之，DMS 技术提供了一个全面的定量脂质组学分析技术，适用于大量复杂样本的高通量脂质分析。

标签： 脂质组学，QTRAP，SelexION，DMS，鸟枪法

Integrated, Step-Wise, Mass-Isotopomeric Flux Analysis of the TCA Cycle

Tiago C. Alves,¹ Rebecca L. Pongratz,¹ Xiaojian Zhao,¹ Orlando Yarborough,¹ Sam Sereda,⁴ Orian Shirihaï,⁴ Gary W. Cline,¹ Graeme Mason,² and Richard G. Kibbey^{1,3*}

作者单位： Yale University School of Medicine, USA

中文翻译： 完整的、步进的质量同位素异构体的 TCA 循环的代谢流分析

文献出处： Cell Metab 2015 (IF = 20.565), doi: 10.1016/j.cmet.2015.08.021

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500, SelexION

质谱主要用途： 三羧酸循环（TCA）是生命体氧化代谢和生物合成代谢的中枢，它是一个氧化代谢途径，其速率被证明与 O₂ 消耗、CO₂ 产生、线粒体膜电位和 ATP 合成相关。然而，TCA 循环的部分代谢物（如参与生物合成、信号或产生能量等途径）的交换、导入、导出或无效地循环路径都导致了 TCA 循环的高度复杂化。代谢流技术正是通过分析代谢网络中代谢物的物质流动规律，解析代谢网络中的流量分布，了解代谢网络的调控规律。作者开发了一个多坐标同位素异构体质谱谱图分析（MIMOSA）平台，能够进行步进式代谢流分析糖酵解和线粒体代谢速率。利用差分离子淌度技术（SelexION）分离和基于 QTRAP 的靶向同位素异构体分析，MIMOSA 平台能够解析 [U-¹³C₆]-葡萄糖代谢产物乙酰辅酶 A、草酰乙酸酯和柠檬酸中的标记位置信息，也能通过 ¹³C 标记位置确定代谢前体和其产物的含量变化信息，从而计算出重要的代谢速率，如丙酮酸脱氢、β-氧化、丙酮酸羧化、异柠檬酸脱氢、PEP/丙酮酸循环等。总之结合离子淌度和 QTRAP 质谱的 MIMOSA 平台能够完整地分析同位素标记的糖酵解和 TCA 循环的代谢流信息，为生物学研究提供直接的技术支撑。

标签： 代谢流，QTRAP，SelexION，DMS，TCA 循环

Personalized Whole-Cell Kinetic Models of Metabolism for Discovery in Genomics and Pharmacodynamics

Aarash Bordbar,^{1,6} Douglas McCloskey,¹ Daniel C. Zielinski,¹ Nikolaus Sonnenschein,² Neema Jamshidi,^{1,3,4,*} and Bernhard O. Palsson^{1,2,4}

作者单位： Department of Bioengineering, University of California, USA

中文翻译： 基因组学和药效学中发现代谢的个体化全细胞动力学模型

文献出处： Cell Systems 2015 (IF = 8.406), doi: 10.1016/j.cels.2015.10.003

质谱平台： SCIEX QTRAP 5500

质谱主要用途： 了解个体差异是个体化医学的基础。然而，在个体基因型数据的背景下解释复杂的表型数据，如多室代谢组学图谱，由于细胞内部和细胞间的相互作用而变得复杂，这仍是一个尚未解决的挑战。作者基于禁食状态血浆和红细胞代谢组学以及全基因组基因分型，建立了 24 名健康人红细胞代谢的多组学、数据驱动、个体化全细胞动力学模型。结果表明，个性化动力学速率常数，而不是代谢物水平，能更好地代表基因型。此外，个体间红细胞动力学的变化发生在循环的时间尺度上，这表明所检测到的差异在生理上起着一定的作用。最后，作者采用这些模型来识别药物副作用（利巴韦林引起的贫血）的危险个体，以及遗传变异（三磷酸酶缺乏）如何防止这种副作用。这项研究证明了个体化动力学模型的可行性，作者预计它们的应用将加速个体代谢变化特征的发现。此研究中代谢谱是基于 QTRAP 技术采集和分析的。

标签： 靶向代谢组学，个体化，药效学，基因组学，动力学模型

Integrated Quantification and Identification of Aldehydes and Ketones in Biological Samples

David Siegel,[†] Anne C. Meinema,[‡] Hjalmar Permentier,[§] Gérard Hopfgartner,[⊥] and Rainer Bischoff^{*,†}

作者单位： Department of Pharmacy, Analytical Biochemistry Group, University of Groningen, the Netherlands

中文翻译： 生物样品中醛酮的综合定量和鉴定

文献出处： Anal Chem 2014 (IF = 6.042), doi: 10.1021/ac500810r

质谱平台： SCIEX TripleTOF 5600

质谱主要用途： 未知物鉴定仍是基于质谱的代谢组学筛选实验的瓶颈。鉴于此，作者提出了一种新方法，通过向质谱数据中添加化学信息，方便生物样品中含有醛和酮基团的分析物的识别和定量。该策略是基于对甲苯磺酰肼 (TSH) 的快速自动针上衍生化。基于超高效液相色谱分离，QTOF 高分辨质谱的 SWATH 采集模式检测得到的 TSH- 腺。衍生化使小的、难电离或难保留的分析物质能够在两种极性下被反相色谱和电喷雾电离。带负电荷的 TSH- 腺离子在碰撞诱导离解时表现出一种简单且可预测的碎裂模式，从而可以通过标记片段离子 (m/z 155.0172) 对未知醛和酮进行化学选择性筛选。基于 SWATH，在 QTOF 工作流程框架内启用了所建议的衍生路线的目标和非目标应用场景。该方法能同时定量和识别含有醛和酮基的分子，使用来自不同化合物类别的 61 个目标分析物和 ^{13}C 标记的酵母基质证明了该方法的能力。以吡哆 -3- 乙醛为例，对生物样品中的未知物进行了详细的鉴定。

标签： 代谢组学，SWATH，醛、酮、代谢物鉴定

您的成功就是我们工作的动力 我们视为己任。

作为SCIEX的客户，您将得到世界一流的售后支持，无论在哪里，我们都将是您最为可靠的伙伴，为您解决难题，提供方案以及最大化提高工作效率。

我们的售后工程师提供全线LC-MS/MS系统支持。无论您的离子源，自动进样器或者实际样品分析需要帮助，您都将得到及时反馈。我们将最大努力保证仪器的正常使用，帮助您完成科研工作。

我们的应用科学家提供可靠的工作流程，帮助您简化样品制备，减少人工操作步骤。帮助您开发方法以提高分析通量。通过提供简单易用的iMethod™方法，帮助您快速开展工作。我们也可以通过电话实现远程支持。

我们的资深专家为您量身订做适合您实验室的培训课程，提高工作效率。您可以到我们的Demo Lab参加LC-MS/MS技术培训及应用课程，也可以通过网络 e-learning工具进行学习。

我们的售后支持团队随时为您提供最新产品信息，软件更新，分析方法及仪器维护，确保您在竞争中独占鳌头。

我们将竭尽所能为您提供高效优质的服务。

更多信息，请访问：www.sciex.com.cn
www.sciex.com



SCIEX
官方微信



SCIEX
客户服务



SCIEX
毛细管电泳

For Research Use Only. Not for use in Diagnostics Procedures.

AB Sciex is operating as SCIEX.

© 2019. AB Sciex. The trademarks mentioned herein are the property of AB Sciex Pte.

Ltd. or their respective owners. AB SCIEX™ is being used under license.

RUO-MKT-02-9811-ZH-A



SCIEX中国公司

北京分公司
地址：北京市朝阳区酒仙桥中路24号院
1号楼5层
电话：010-5808 1388
传真：010-5808 1390

全国免费垂询电话：800 820 3488, 400 821 3897

SCIEXNow™服务热线：800 820 3488, 400 821 3897

上海公司及亚太区应用支持中心
地址：上海市长宁区福泉北路518号
1座502室
电话：021-2419 7200
传真：021-2419 7333

网址：sciex.com.cn

服务邮箱：Service.china@sciex.com

广州分公司
地址：广州市天河区珠江西路15号
珠江城1907室
电话：020-8510 0200
传真：020-3876 0835

微博：@SCIEX