

权 利 要 求 书

1、一种基于UPLC/HRMS的代谢组学相对定量分析方法，其包括下列步骤：

1) 基于多种同位素内标，配制同位素内标混合溶液；

2) 基于代谢组学样本，确定与之匹配的相对定量校正样本，并利用所述相对定量校正样本和步骤1)中所述同位素内标混合溶液，配制一系列浓度梯度的相对定量标准曲线校正溶液；

3) 利用步骤2)中所述代谢组学样本和步骤1)中所述同位素内标混合溶液，配制代谢组学样本溶液；

4) 利用UPLC/HRMS平台，采集步骤3)中所述代谢组学样本溶液和步骤2)中所述一系列浓度梯度的相对定量标准曲线校正溶液的原始质谱数据；

5) 基于步骤4)中所述原始质谱数据，获得一级质谱转置数据和二级质谱转置数据，并基于所述一级质谱转置数据，获得包括多种一级变量信息的解卷积结果；

6) 结合步骤5)中所述一级质谱转置数据的解卷积结果与所述二级质谱转置数据，并参比单个同位素内标的一级变量信息和二级变量信息，鉴定同位素内标，并选择用于线性拟合的最优同位素内标；

7) 利用步骤2)中所述一系列浓度梯度的相对定量标准曲线校正溶液的浓度及其在步骤5)中获得的一级变量信息进行线性拟合，获得线性方程；

8) 基于步骤7)中所述线性方程，得到步骤3)中所述代谢组学样本溶液的相对定量结果，并完成主成分分析和一级变量信息的差异代谢物分析；和

9) 结合步骤5)中所述一级质谱转置数据的解卷积结果与所述二级质谱转置数据，完成代谢物鉴定和差异代谢物鉴定。

2、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤1)中所述同位素内标混合溶液通过下列方法制得：先取适量的多种同位素内标，分别加入溶剂，配制成一定浓度的单一同位素内标母液，再分别取适量的各种单一同位素内标母液，混合并加入溶剂，得到同位素内标混合溶液。

3、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤2)中所述代谢组学样本为血清或血浆样本，所述相对定量校正样本为NIST血清。

4、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤2) 中所述一系列浓度梯度的相对定量标准曲线校正溶液通过下列方法制得：
取一系列体积的相对定量校正样本，分别加入同位素内标和蛋白沉淀试剂，混合，离心，
取上清液，浓缩，向残渣中加入复溶溶剂，混合，取上清液，得到一系列浓度梯度的相
对定量标准曲线校正溶液。

5

5、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤3) 中所述代谢组学样本溶液通过下列方法制得：取代谢组学样本，分别加入
同位素内标和蛋白沉淀试剂，混合，离心，取上清液，浓缩，向残渣中加入复溶溶剂，
混合，取上清液，得到代谢组学样本溶液。

10

6、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤5) 中所述一级质谱转置数据和二级质谱转置数据通过数据转置的方式获得，
所述数据转置通过软件或算法平台来完成。

15

7、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤5) 中所述解卷积结果通过解卷积的方式获得，所述解卷积通过软件或算法平
台来完成。

8、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

20

步骤6) 中所述同位素内标鉴定和所述最优同位素内标的选择通过自研算法来完成。

9、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤8) 中所述主成分分析通过自适应换算来完成；

步骤8) 中所述差异代谢物分析通过多元统计分析来完成。

25

10、根据权利要求1所述的代谢组学相对定量分析方法，其特征在于：

步骤9) 中所述代谢物鉴定和差异代谢物鉴定通过软件或算法平台来完成。