



Thermo Scientific LipidSearch 软件
为脂质组学量身定制的工作流程

脂质组 LC/MS

自动化鉴定及相对定量

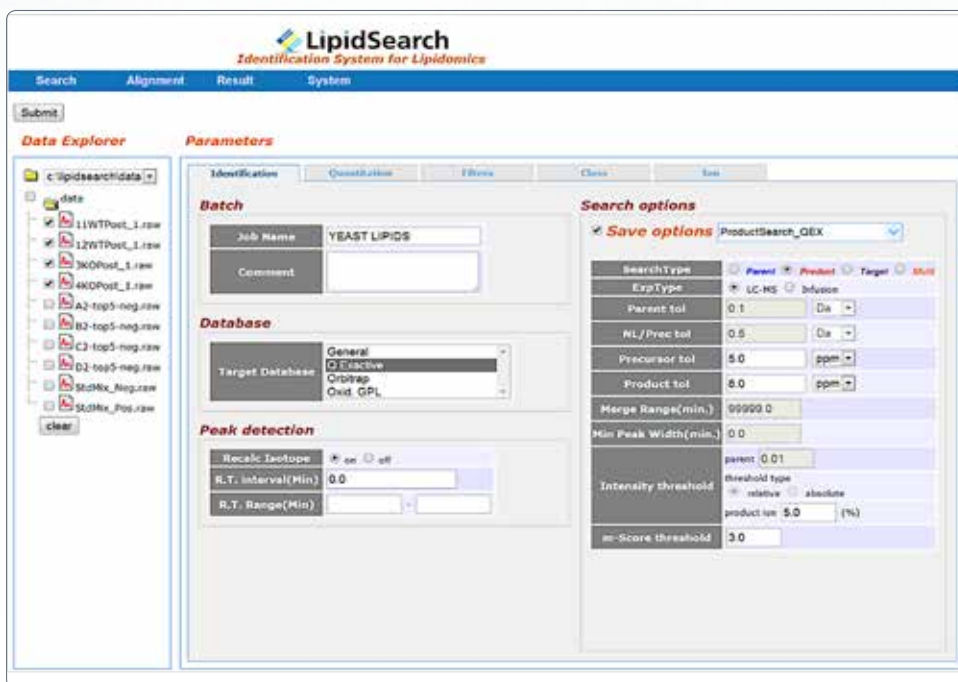
 LipidSearch

Thermo
SCIENTIFIC

脂质组学的前景

脂质组学作为一门新兴的研究学科，其成果对于科学家深入理解细胞生理和病理过程十分重要。脂质轮廓分析在疾病表型研究中的应用正成为转化医学中蓬勃发展的一个方向。通过特异性脂质生物标记物的鉴定，我们有希望区分健康人群与患病风险人群，进行疾病早期诊断、并推动个性化医疗的建立。

液质联用（LC/MS）是脂质组学分析中广泛使用的分析技术。对生物样品中的脂类进行鉴定、相对和绝对定量需要先进的软件及全面完备的数据库。Thermo Scientific™ LipidSearch™ 软件提供 LC/MS 数据精确的脂类鉴定，并自动整合复杂数据输出精简的总结报告。软件操作界面采用网页型设计，简便易用，大大减少了数据分析所需时间。



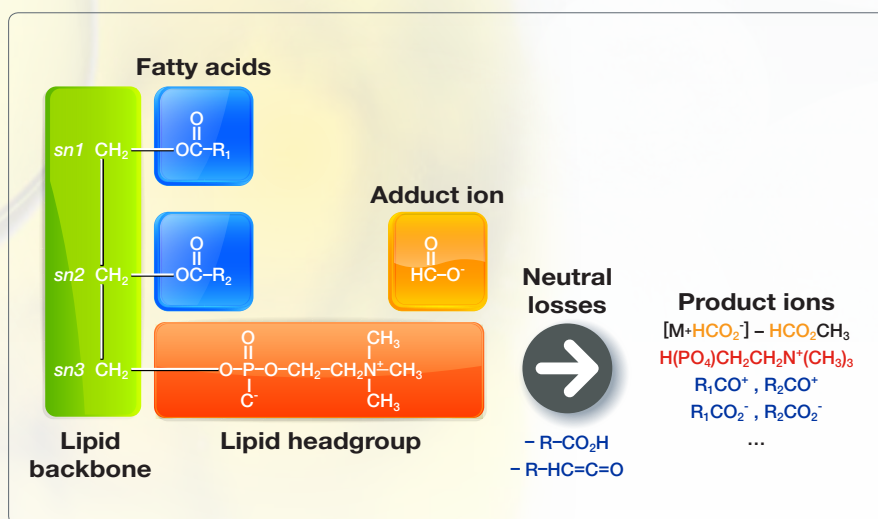
◀ 简便易用的网络浏览器型界面，支持可靠的自动鉴定

LipidSearch 软件实现脂质自动鉴定和相对定量分析

LipidSearch 软件由 Ryo Taguchi 教授和 MKI (日本东京) 联合开发。该软件功能强大, 能够对 nano-infusion 或 LC/MS 实验中采集到的大量数据进行分析, 实现脂质分子的自动鉴定和相对定量。业界领先的高分辨、精确质量质谱仪 Thermo Scientific Orbitrap 与独家 LipidSearch 软件强强联手, 令最准确可靠的脂质轮廓分析和鉴定结果唾手可得。

- 兼容 Thermo Scientific™ 三重串联四极杆、离子阱和 Orbitrap 质谱仪采集的实验数据
- 配有最大的脂质组数据库, 包含超过一百七十万个脂质离子及其预测碎片离子的信息
- 提供子离子、前体离子和中性丢失扫描等不同的脂质鉴定算法
- 能够关联多个 LC/MS 和 MSⁿ 实验中获得的脂质数据
- 能够对 LC/MS 或直接进样实验中鉴定脂质的前体离子进行相对定量

数据库中包含确定的分子结构, 并覆盖了超过**一百七十万个脂质离子及其预测的碎片离子信息**。离子碎裂模式的计算和优化基于实验结果和专业经验进行。数据库中包括了脂质加合物离子和 MSⁿ 的指纹信息。所有数据以 XML 文件格式存储, 支持客户定制。



◀ 对应脂质头、脂肪酸和骨架的碎片离子



LipidSearch 软件为您提供一个易用的自动化工作流程

从峰提取、相对定量到鉴定，LipidSearch 软件为您提供一个轻松易用的自动化工作流程。

数据分析模块

- 原始数据文件读取
- 智能峰提取

脂质数据库

- 脂质结构式
- 脂质加合物离子
- MS² 指纹谱图

鉴定模块

- 特异性脂质类别鉴定
- 全面综合鉴定
- 得分算法

定量模块

- XIC 峰面积积分
- 保留时间对齐
- 相对定量
- 统计分析

第 1 步

数据分析模块 — 峰提取

- 原始数据文件读取
- 智能峰提取

整合于 LipidSearch 软件中的峰提取引擎能够处理不同 MS 实验和仪器平台采集的数据。综合独特的峰提取算法、区分不同实验和仪器类型、整合先进的谱图处理功能，最终确保精确的谱峰提取。

LipidSearch 软件提供两种不同的鉴定及对应的得分算法：

- 特异性脂质类别算法用于分析前体离子扫描和中性丢失扫描的数据，通过极性头类别或脂肪酸信息来实现对脂质的鉴定。

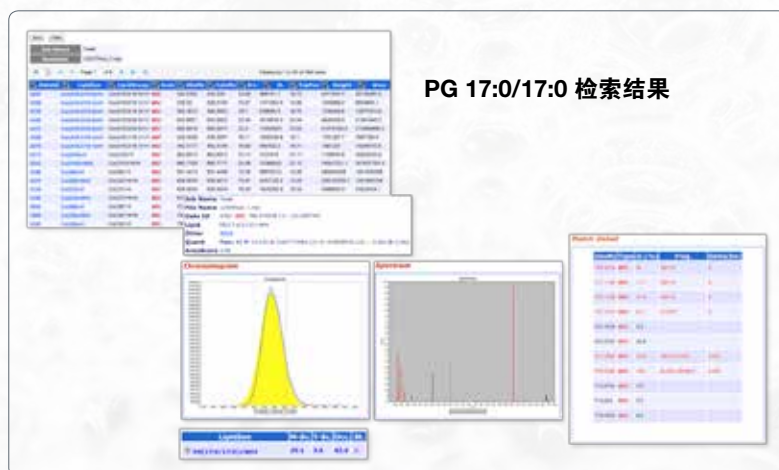
- 全面综合鉴定算法用于分析子离子扫描数据，通过与数据库中预测的脂质碎裂模式进行匹配来实现脂质的鉴定。

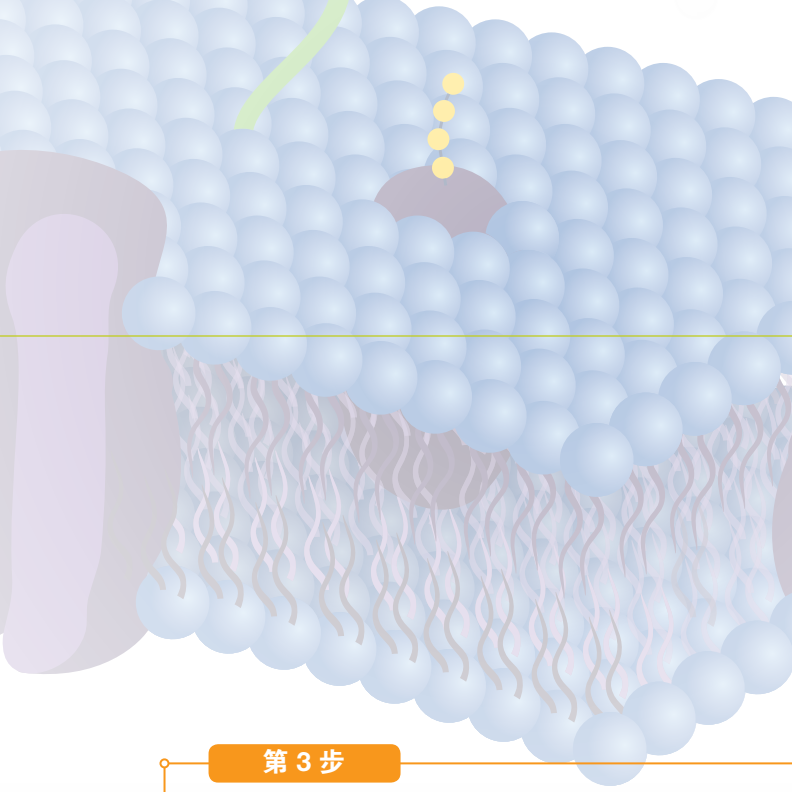
- LipidSearch 软件提供一系列得分算法以获取可靠性的结果。

第 2 步

鉴定模块 — 脂质鉴定

- 特异性脂质类别鉴定（靶向）
- 全面综合鉴定（非靶向）
- 得分算法





第 3 步

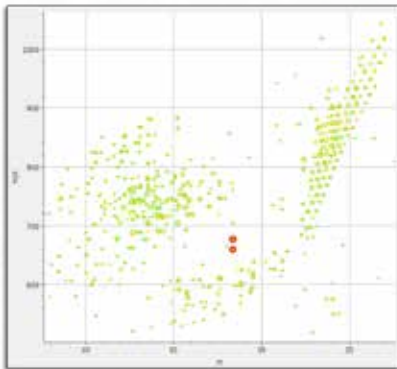
定量模块—对齐及定量

- XIC 峰面积积分
- 保留时间对齐
- 相对定量
- 统计分析

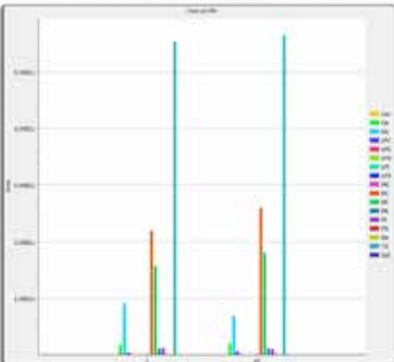
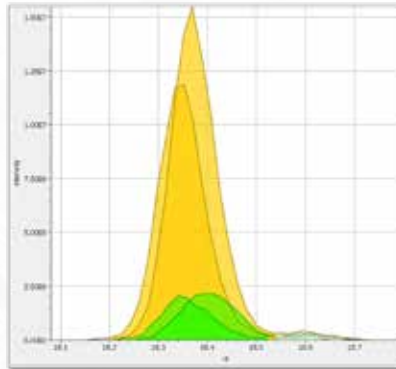
在进行定量分析之前，每个样品的脂质鉴定结果会在一个保留时间偏差窗口内进行对齐。脂质的定量通过对全扫描图中前体离子的提取离子色谱图积分来实现。为精确计算峰面积，会先对色谱

峰进行去噪和平滑，然后再分离部分重叠的峰，最后进行计算。控制组与对照组之间的统计学差异比较通过 t 检验进行，每组峰面积的平均结果用“箱须图”展示。

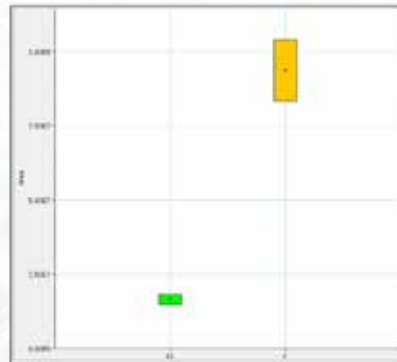
A. “气泡图” - 脂类的保留时间 vs. 质荷比



B. XIC 积分，对齐



C. 脂类类别的相对定量



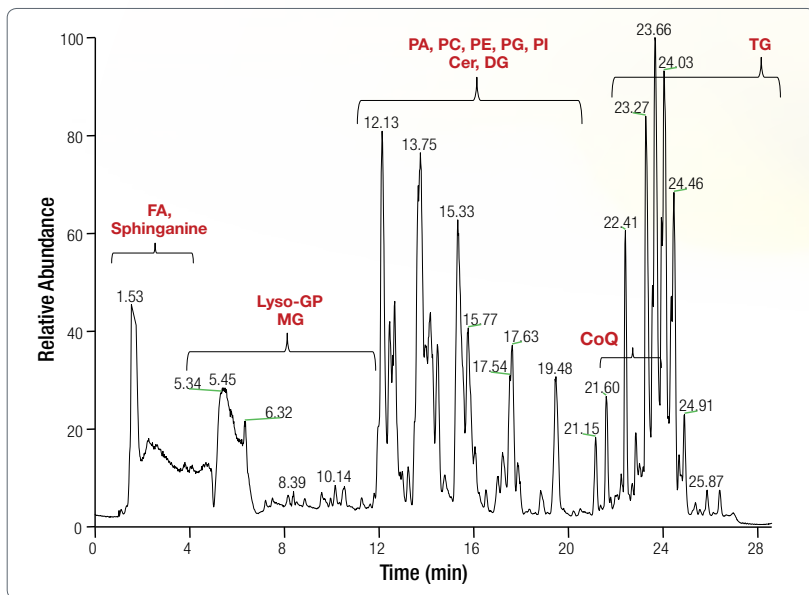
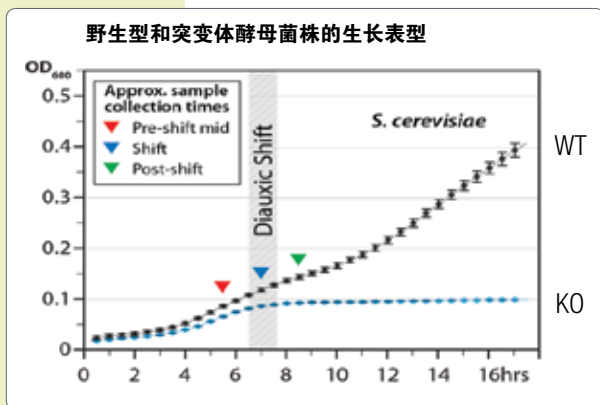
D. 统计分析箱须图

◀ CoQ², [M+NH₄]⁺ 的对齐结果



野生型与突变体酵母菌株脂质轮廓分析 揭示各脂类的细微变化

野生型 (WT) 酵母菌 (*S. cerevisiae*) 在消耗完培养基里的葡萄糖之后 (二相生长点, diauxic shift point) 还能继续生长, 而突变体 (KO) 菌株由于 CoQ 合成有缺陷, 无法继续生长。取二相生长点之后的野生型和突变体菌株样品, 用 Thermo Scientific™ Q Exactive™ 四极杆 - 轨道阱质谱仪在 MS 和数据依赖 MS² 模式下进行脂质组分析。



▲ 酵母菌脂质的 LC/MS 色谱图

第 1 步

数据处理

在包含 MS 和数据依赖 MS² 谱图数据的 LC/MS 原始文件中检索可能的脂类化合物, 包括 FA (脂肪酸)、鞘氨醇、Lyso-GP (溶血甘油磷脂)、MG (单烷基甘油)、GP (PA、PC、PE、PG、PI、PS)、Cer (神经酰胺) 和 CoQ (辅酶) 等。检索质量偏差设置: 前体离子的质量偏差窗口设为 5 ppm, 子离子设为 8 ppm。所有样品鉴定结果在 0.25 min 的保留时间窗口内进行对齐并生成综合报告。在本实验的数据文件中, 共鉴定到 738 个脂质及异构体, 对应 542 种不同的分子式。

LipidSearch Results Summary

Name	RawData	Type	ExpType	Process	Result
Yeast	11WTPost_1.raw	Product	LC	P I Q	322 391
Yeast	12WTPost_1.raw	Product	LC	P I Q	332 389
Yeast	3KOPost_1.raw	Product	LC	P I Q	309 377
Yeast	4KOPost_1.raw	Product	LC	P I Q	306 366

Aligned Results Summary

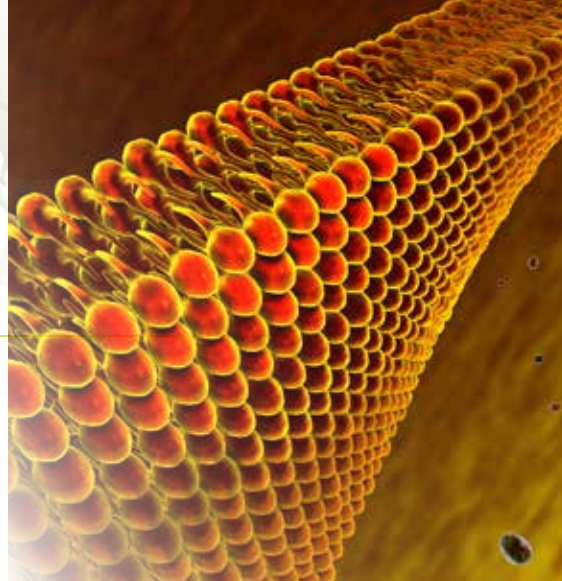
Name	Type	ExpType	Process	Result
Yeast (All)	Product	LC	M	738 814
Yeast (Main)	Product	LC	M	542 607

▲ 搜索和对齐结果的 LipidSearch 状态窗口视图

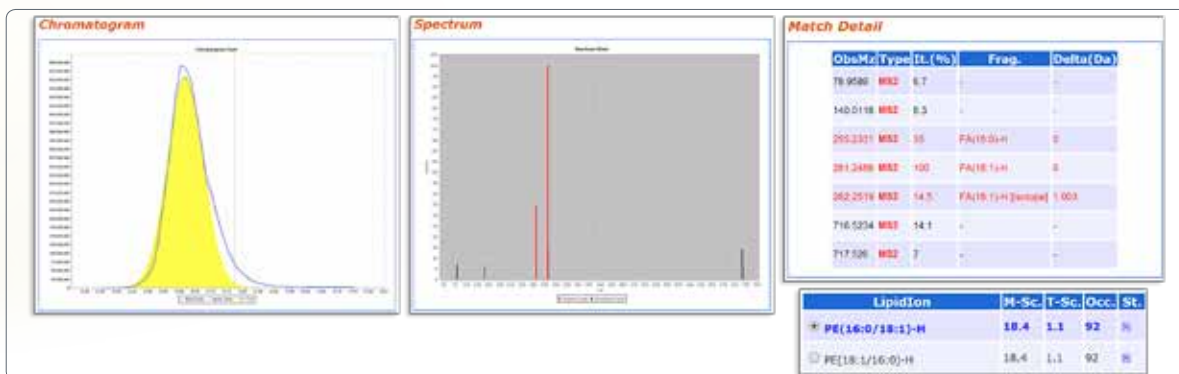
第 2 步

鉴定

总结出每份 MS² 谱图中的检索结果，同时给出与数据库中预测的碎裂模式相匹配的得分。若找到的是多种脂类的混合物，则展示丰度最高的脂质结果。当结果被选中时，用于参与鉴定的碎片离子峰会以红色强调显示。



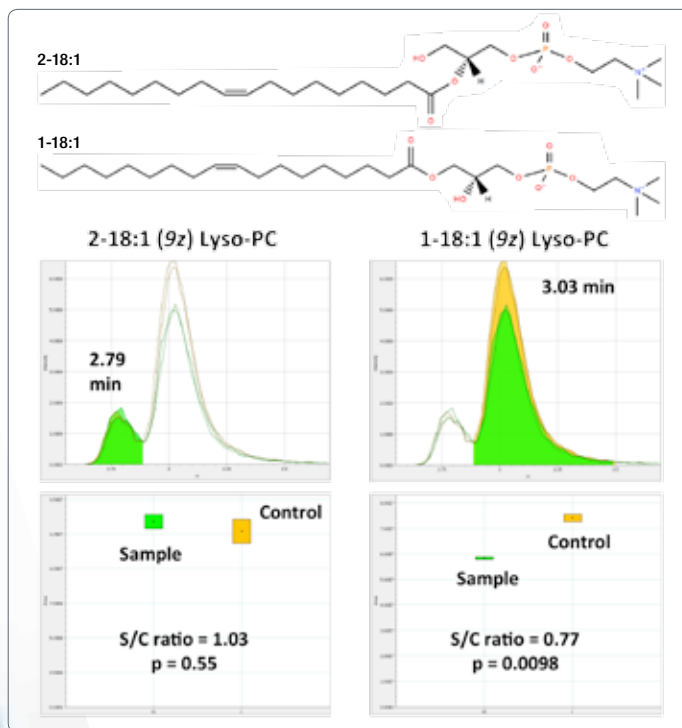
ID of PE 16:0-18:1, MS² of m/z 716.5230 [C₃₉H₇₅NO₈P]-



第 3 步

对齐及定量

对在特定保留时间偏差窗口内洗脱出来的相同脂质进行对齐及总结。报告相对峰面积和 t-test 统计分析结果。两个 Lyso-PC 18:1 异构体的对齐色谱图见右图显示，可以根据溶血磷脂在反相 HPLC 柱上的洗脱顺序确定对应结构。



通过使用业界领先的高分辨、精确质量 Thermo Scientific™ Orbitrap™ 技术结合独有的 LipidSearch 专业软件，您可以轻松地以前所未有的速度实现最准确可靠的脂质轮廓和脂质鉴定分析。LipidSearch 软件同样适用于 Thermo Scientific TSQ 三重串联四极杆质谱系统，支持靶向脂质定量分析。对于这两种脂质组分析工作流程来说，LipidSearch 软件都能实现复杂数据的自动化分析并生成综合报告，助您极大地提高数据分析的工作效率。

Minimum/Recommended PC Requirements

OS: Microsoft® Windows® 7 Professional (x64) or Windows 8 (x64); English language

CPU: Quad - or multi-core CPU, 3 GHz or higher

Memory: 16 GB RAM or higher

HDD: At least 500 GB free space for LipidSearch software and data

At least 2 TB HDD for OS/software or larger for storage

SSD (optional): At least 50 GB free space for LipidSearch software and data

At least 500 GB solid-state drive for OS/software or larger



Orbitrap 组学俱乐部



赛默飞小分子质谱应用技术群

赛默飞世尔科技（中国）有限公司

www.thermofisher.com

全国服务热线：800 810 5118
400 650 5118 (支持手机用户)

Thermo
SCIENTIFIC
A Thermo Fisher Scientific Brand