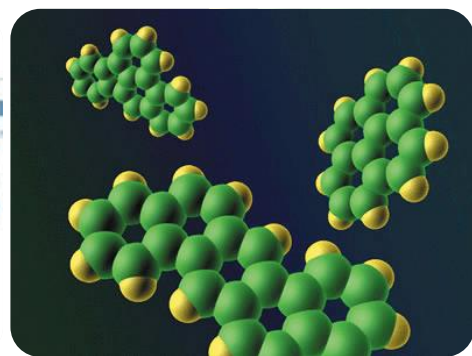
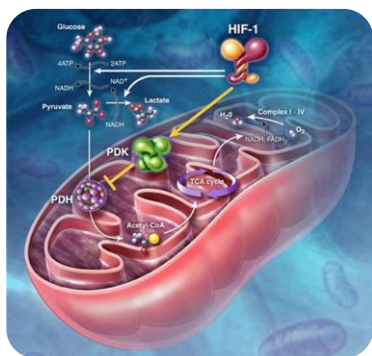


上海鹿明生物科技有限公司

靶向代谢组学检测物 汇总表

12 大类 200 种代谢物标准品



鹿明生物 · 代谢部

2018-11

目录

靶向代谢组学检测物汇总表.....	2
1. 胆汁酸 (15 种) -LCMS.....	2
2. 胆固醇类物质-LCMS (12 种)	2
3. 神经递质类物质-LCMS (27 种)	3
4. 常见氨基酸-GCMS (20 种)	4
5. 羧酸类物质-LCMS (7 种)	4
6. 植物次级代谢物-LCMS (27 种)	5
7. 短链脂肪酸-GCMS (7 种)	6
8. 嘌呤代谢相关物质-LCMS 或者 GCMS (13 种)	6
9. 木质素代谢途径化合物-LCMS (9 种)	7
10. 糖类-GCMS (单糖或二糖,6 种)	7
11. TMAO 及相关代谢物-LCMS (TMAO 等,6 种)	7
12. 能量代谢相关代谢物-LCMS 拟靶向 (44 种)	8
13. 鹿明生物靶向数据库不断更新中。。。。	9

靶向代谢组学检测物汇总表

1. 胆汁酸 (15 种) -LCMS

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
胆酸	Cholic acid	81-25-4	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	408.6
鹅去氧胆酸	Chenodeoxycholic acid	474-25-9	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	392.6
去氧胆酸	Deoxycholic acid	83-44-3	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	392.6
石胆酸	Lithocholic acid	434-13-9	C ₂₄ H ₄₀ O ₃	376.6
熊脱氧胆酸	Ursodeoxycholic acid	128-13-2	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	392.6
甘氨酸胆酸	Glycocholic acid	475-31-0	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	465.6
甘氨酸鹅脱氧胆酸	Glycochenodeoxycholic acid	640-79-9	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	449.6
甘氨酸去氧胆酸	Glycodeoxycholic acid	360-65-6	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	449.6
甘氨酸石胆酸	Glycocholic acid	475-31-0	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	465.6
甘氨酸熊脱氧胆酸	Glycoursodeoxycholic acid	64480-66-6	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	449.6
牛磺胆酸	Taurocholic acid	81-24-3	C ₂₆ H ₄₅ NO ₇ S	515.7
牛磺鹅脱氧胆酸	Taurochenodeoxycholic acid	516-35-8	C ₂₆ H ₄₅ NO ₆ S	499.7
牛磺去氧胆酸	Tauroursodeoxycholic acid	14605-22-2	C ₂₆ H ₄₅ NO ₆ S	499.7
牛磺石胆酸	Taurolithocholic acid	516-90-5	C ₂₆ H ₄₅ NO ₅ S	483.7
牛磺熊脱氧胆酸	Tauroursodeoxycholic acid	14605-22-2	C ₂₆ H ₄₅ NO ₆ S	499.7

2. 胆固醇类物质-LCMS (12 种)

英文名	CAS 号	分子式	分子量
Cholesterol	57-88-5	C ₂₇ H ₄₆ O	386.7
25-hydroxycholesterol-3-sulfate	884905-07-1	C ₂₇ H ₄₆ O ₅ S	482.7
22R-Hydroxycholesterol	17711-16-9	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
25-hydroxycholesterol	2140-46-7	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
27-hydroxycholesterol	20380-11-4	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
24-Hydroxycholesterol	474-73-7	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
24,25-Epoxy-cholesterol	77058-74-3	C ₂₇ H ₄₄ O ₂	400.6
7beta-hydroxycholesterol	566-27-8	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
4beta-hydroxycholesterol	17320-10-4	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
7-ketcholesterol	566-28-9	C ₂₇ H ₄₄ O ₂	400.6
7alpha-hydroxycholesterol	566-26-7	C ₂₇ H ₄₆ O ₂	402.7
cholesterol 3-sulfate	2864-50-8	C ₂₇ H ₄₈ NaO ₄ S	491.7

3. 神经递质类物质-LCMS (27 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
3,4-二羟基苯基乙酸	3,4-dihydroxyphenylacetic acid	102-32-9	C ₈ H ₈ O ₄	168.1
3-羟基邻氨基苯甲酸	3-hydroxyanthranilic acid	548-93-6	C ₇ H ₇ NO ₃	153.1
5-羟色胺	5-hydroxytryptamine	50-67-9	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O	176.2
5-羟基吲哚乙酸	5-hydroxyindoleacetic acid	54-16-0	C ₁₀ H ₉ NO ₃	191.2
5-羟色氨酸	5-hydroxytryptophan	56-69-9	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₃	220.2
α-酮戊二酸	Alpha-ketoglutaric acid	328-50-7	C ₅ H ₆ O ₅	146.1
多巴胺	Dopamine	51-61-6	C ₈ H ₁₁ NO ₂	153.2
γ-氨基丁酸	Gamma-aminobutyric acid	56-12-2	C ₄ H ₉ NO ₂	103.1
谷氨酸	Glutamic acid	56-86-0	C ₅ H ₉ NO ₄	147.1
谷氨酰胺	Glutamine	61348-28-5	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₅	246.3
谷胱甘肽	Glutathione	70-18-8	C ₁₀ H ₁₇ N ₃ O ₆ S	307.3
犬尿酸	Kynurenic acid	492-27-3	C ₁₀ H ₇ NO ₃	189.2
犬尿氨酸	Kynurenine	343-65-7	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O ₃	208.2
左旋多巴	Levodopa	59-92-7	C ₉ H ₁₁ NO ₄	197.2
L-苯丙氨酸	L-phenylalanine	673-31-4	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.2
L-酪氨酸	L-tyrosine	70642-86-3	C ₁₄ H ₁₉ NO ₅	281.3
N-乙酰 5-羟色胺	N-acetyl serotonin	1210-83-9	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	218.3
鸟氨酸	Ornithine	70-26-8	C ₅ H ₁₂ N ₂ O ₂	132.2
苯乙胺	Phenylethylamine	64-04-0	C ₈ H ₁₁ N	121.2
琥珀酸	Succinic acid	110-15-6	C ₄ H ₆ O ₄	118.1
色胺	Tryptamine	61-54-1	C ₁₀ H ₁₂ N ₂	160.2
色氨酸	Tryptophan	5241-64-5	C ₁₆ H ₂₀ N ₂ O ₄	304.3
色醇	Tryptophol	526-55-6	C ₁₀ H ₁₁ NO	161.2
酪胺	Tyramine	51-67-2	C ₈ H ₁₁ NO	137.2
香草扁桃酸	Vanillylmandelic acid	55-10-7	C ₉ H ₁₀ O ₅	198.2
去甲肾上腺素	Norepinephrine	51-41-2	C ₈ H ₁₁ NO ₃	169.2
吲哚-3-甲醛	Indole-3-carboxaldehyde	487-89-8	C ₉ H ₇ NO	145.2

4. 常见氨基酸-GCMS (20 种)

中文名	英文名	CAS 号	缩写	分子式	分子量
酪氨酸	Tyrosine	70642-86-3	Tyr	C ₁₄ H ₁₉ NO ₅	281.3
缬氨酸	Valine	7004-03-7	Val	C ₅ H ₁₁ NO ₂	117.1
苯丙氨酸	Phenprobamate	673-31-4	Phe	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.2
丝氨酸	Serine	302-84-1	Ser	C ₃ H ₇ NO ₃	105.1
谷氨酰胺	Glutamine	61348-28-5	Gln	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₅	246.3
亮氨酸	Leucine	3588-60-1	Leu	C ₁₄ H ₁₉ NO ₄	265.3
天冬酰胺	Asparagine	70-47-3	Asn	C ₄ H ₈ N ₂ O ₃	132.1
组氨酸	Histidine	71-00-1	His	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂	155.2
脯氨酸	Dl-proline	609-36-9	Pro	C ₅ H ₉ NO ₂	115.1
半胱氨酸	Cysteine	52-90-4	Gys	C ₃ H ₇ NO ₂ S	121.2
异亮氨酸	Isoleucine	7004-09-3	Ile	C ₆ H ₁₃ NO ₂	131.2
谷氨酸	Glutamic acid	56-86-0	Glu	C ₅ H ₉ NO ₄	147.1
苏氨酸	Threonine	72-19-5	Thr	C ₄ H ₉ NO ₃	119.1
天冬氨酸	Aspartic acid	6899-03-2	Asp	C ₄ H ₇ NO ₄	133.1
色氨酸	Tryptophan	5241-64-5	Try	C ₁₆ H ₂₀ N ₂ O ₄	304.3
赖氨酸	Lysine	56-87-1	Lys	C ₆ H ₁₄ N ₂ O ₂	146.2
甘氨酸	Glycine	56-40-6	Gly	C ₂ H ₅ NO ₂	75.1
甲硫氨酸	Methionine	59-51-8	Met	C ₅ H ₁₁ NO ₂ S	149.2
丙氨酸	Alanine	338-69-2	Ala	C ₃ H ₇ NO ₂	89.1
精氨酸	Arginine	74-79-3	Arg	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	174.2

5. 羧酸类物质-LCMS (7 种)

中文名	英文名	CAS 号	缩写	分子式	分子量
草酸	Oxalic acid	144-62-7	OA	C ₂ H ₂ O ₄	90.0
丙酮酸	Pyruvic acid	127-17-3	PA	C ₃ H ₄ O ₃	88.1
棕榈酸	Palmitic acid	57-10-3	Pal	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.4
油酸	Oleic acid	112-80-1	Ole	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	282.5
亚油酸	Linoleic acid	60-33-3	Lin	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	280.5
愈伤酸	Traumatic Acid	6402-36-4	Tra	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	228.3
亚麻酸	Linolenic acid	463-40-1	Lino	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	278.4

6. 植物次级代谢物-LCMS (27 种)

类别	中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
植物激素 Phytohormones	茉莉酸	(+/-)-Jasmonic acid	3572-66-5	C ₁₂ H ₁₈ O ₃	210.3
	水杨酸	Salicylic acid	69-72-7	C ₇ H ₆ O ₃	138.1
	生长素	Indoleacetic acid	87-51-4	C ₁₀ H ₉ NO ₂	175.2
	脱落酸	Abscisic acid	14375-45-2	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	264.3
	反式玉米素	Trans-Zeatin	1637-39-4	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O	219.24
	N-(3-吲哚乙酰基)-L-丙氨酸	N-(3-Indolylacetyl)-L-alanine	57105-39-2	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O ₃	246.266
	1-氨基环丙烷-1-羧酸	1-Aminocyclopropanecarboxylic Acid	22059-21-8	C ₄ H ₇ NO ₂	101.105
生物碱 Alkaloids	加兰他敏	Galanthamine	357-70-0	C ₁₇ H ₂₁ NO ₃	287.4
	石蒜胺	Lycoramine	21133-52-8	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	289.4
	石蒜碱	Lycorine	476-28-8	C ₁₆ H ₁₇ NO ₄	287.3
	降孤挺花啶	Norbelladine		C ₁₅ H ₁₇ NO ₃	259.3
		4'-o-methylnorbelladine	4579-60-6	C ₁₆ H ₁₉ NO ₃	273.3
类黄酮 Flavonoids	大豆黄素	Daidzein	486-66-8	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	254.2
	白杨素	Chrysin	480-40-0	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	254.2
	异甘草素	Isoliquiritigenin	961-29-5	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	256.3
	乔松素	Pinocembrin	480-39-7	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	256.3
	芒丙花素	Formononetin	485-72-3	C ₁₆ H ₁₂ O ₄	268.3
	芹菜素	Apigenin	520-36-5	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	270.2
	高良姜素	Galangin	548-83-4	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	270.2
	染料木素	Genistein	446-72-0	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	270.2
	木犀草素	Luteolin	491-70-3	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	286.2
	表儿茶素	(-)-Epicatechin	490-46-0	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	290.3
	儿茶素	(+)-Catechin	154-23-4	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	290.3
	桑色素	Morin	480-16-0	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	302.2
	异鼠李素	Isorhamnetin	480-19-3	C ₁₆ H ₁₂ O ₇	316.3
	牡荆素	Vitexin	3681-93-4	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	432.4
	芦丁	Rutin	153-18-4	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	610.5

7. 短链脂肪酸-GCMS (7 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
乙酸	Acetic Acid	97-67-6	C ₂ H ₄ O ₂	60.05
丙酸	Propionic acid	69-93-2	C ₃ H ₆ O ₂	74
丁酸	Butyric Acid	68-94-0	C ₄ H ₈ O ₂	88.11
戊酸	Pentanoic acid	70-18-8	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.13
己酸	Hexanoic Acid	58-63-9	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16
异丁酸	Isobutyric acid	58-96-8	C ₄ H ₈ O ₂	88.11
异戊酸	Isovaleric acid	3868-31-3	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.13

8. 嘌呤代谢相关物质-LCMS 或者 GCMS (13 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量	检测平台
L-苹果酸	L-Malic acid	97-67-6	C ₄ H ₆ O ₅	134.1	GCMS 同时检测
尿酸	Uric acid	69-93-2	C ₅ H ₄ N ₄ O ₃	168.1	
黄嘌呤	Xanthine	69-89-6	C ₅ H ₄ N ₄ O ₂	152.1	
胞嘧啶	Cytosine	71-30-7	C ₄ H ₅ N ₃ O	111.1	
吲哚-3-乳酸	Indole-3-lactic acid	1821-52-9	C ₁₁ H ₁₁ NO ₃	205.2	
次黄嘌呤	Hypoxanthine	68-94-0	C ₅ H ₄ N ₄ O	136.1	
肌苷	Inosine	58-63-9	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₅	268.2	LCMS
尿苷	Uridine	58-96-8	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₆	244.2	LCMS
8-羟基鸟苷	8-Hydroxyguanosine	3868-31-3	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₆	299.2	LCMS
8-羟基-2'-脱氧鸟苷	8-Hydroxy-2'-deoxyguanosine	88847-89-6	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₅	283.2	LCMS
鞘氨醇	D-erythro-Sphingosine	123-78-4	C ₁₈ H ₃₇ NO ₂	299.5	LCMS
腺苷	Adenosine	58-61-7	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₄	267.2	LCMS
5'-一磷酸腺苷	Adenosine 5'-monophosphate	61-19-8	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₇ P	347.2	LCMS

9. 木质素代谢途径化合物-LCMS (9 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
肉桂酸	Cinnamic acid	140-10-3	C ₉ H ₈ O ₂	148.161
咖啡酸	Caffeic acid	331-39-5	C ₉ H ₈ O ₄	180.159
阿魏酸	Ferulic acid	1135-24-6	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	194.186
芥子酸	Sinapic acid	7362-37-0	C ₁₁ H ₁₂ O ₅	224.212
松柏醇	Coniferyl alcohol	438-35-5	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	180.203
芥子醇	Sinapyl alcohol	537-33-7	C ₁₁ H ₁₄ O ₄	210.229
松柏醛	Coniferyl aldehyde	458-36-6	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	178.187
芥子醛	Sinapaldehyde	4206-58-0	C ₁₁ H ₁₂ O ₄	208.213
对香豆酸	P-coumaric acid	501-98-4	C ₉ H ₈ O ₃	164.16

10. 糖类-GCMS (单糖或二糖,6 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
葡萄糖	glucose	50-99-7	C ₆ H ₁₂ O ₆	180.16
果糖	fructose	57-48-7	C ₆ H ₁₂ O ₆	180.16
半乳糖	Galactose	10257-28-0	C ₆ H ₁₂ O ₆	180.16
乳糖	lactose	14641-93-1	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	342.3
麦芽糖	maltose	69-79-4	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	342.3
海藻糖	Trehalose	99-20-7	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	342.3

11. TMAO 及相关代谢物-LCMS (TMAO 等,6 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
三甲胺 N-氧化物 (TMAO)	Trimethylamine N-oxide	1184-78-7	(CH ₃) ₃ N(O)	75.11
三甲胺 (TMA)	Trimethylamine	593-81-7	CH ₃) ₃ N	59.07
胆碱	Choline	67-48-1	C ₅ H ₁₄ CLNO	139.62
甜菜碱	Betaine	590-46-5	C ₅ H ₁₂ CLNO ₂	153.6
肌酐	Creatinine	60-27-5	C ₄ H ₇ N ₃ O	113.11788
左旋肉碱	L-Carnitine	541-15-1	C ₇ H ₁₅ NO ₃	161.1989

12. 能量代谢相关代谢物-LCMS 拟靶向 (44 种)

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
丙酮酸	Pyruvic acid	127-17-3	C ₃ H ₄ O ₃	88.06
苯丙氨酸	Phenylalanine	673-31-4	C ₉ H ₁₁ NO ₂	165.19
异亮氨酸	Isoleucine	7004-09-3	C ₆ H ₁₃ NO ₂	131.17
色氨酸	Tryptophan	5241-64-5	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	204.23
延胡索酸	Fumaric acid	110-17-8	C ₄ H ₄ O ₄	116.07
酪氨酸	Tyrosine	70642-86-3	C ₉ H ₁₁ NO ₃	181.19
琥珀酸	Succinic acid	110-15-6	C ₄ H ₆ O ₄	118.09
苏氨酸	Threonine	72-19-5	C ₄ H ₉ NO ₃	119.12
α-酮戊二酸	Alpha-ketoglutaric acid	328-50-7	C ₅ H ₆ O ₅	146.11
5-磷酸核糖	ribose 5-phosphate	34980-65-9	C ₅ H ₁₁ O ₈ P	230.11
谷氨酰胺	Glutamine	61348-28-5	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₃	146.15
天冬酰胺	Asparagine	70-47-3	C ₄ H ₈ N ₂ O ₃	132.12
谷氨酸	Glutamic acid	56-86-0	C ₅ H ₉ NO ₄	147.13
苹果酸	Malic acid	6915-15-7	C ₄ H ₆ O ₅	134.09
甘油-1-磷酸	glycerophosphoric acid	57-03-4	C ₃ H ₉ O ₆ P	172.07
1-磷酸葡萄糖	glucose 1-phosphate	59-56-3	C ₆ H ₁₃ O ₉ P	260.14
半胱氨酸	Cysteine	52-90-4	C ₃ H ₇ NO ₂ S	121.16
柠檬酸	Citric acid	77-92-9	C ₆ H ₈ O ₇	192.14
赖氨酸	Lysine	56-87-1	C ₆ H ₁₄ N ₂ O ₂	146.19
丙氨酸	Alanine	338-69-2	C ₃ H ₇ NO ₂	89.09
丝氨酸	Serine	302-84-1	C ₃ H ₇ NO ₃	105.09
缬氨酸	Valine	72-18-4	C ₅ H ₁₁ NO ₂	117.15
色胺	Tryptamine	61-54-1	C ₁₀ H ₁₂ N ₂	160.22
苯丙酮酸	Phenylpyruvic acid	156-06-9	C ₉ H ₈ O ₃	164.16
3-吲哚-乳酸	3-Indole-lactic Acid	1821-52-9	C ₁₁ H ₁₁ NO ₃	205.21
精氨酸	Arginine	74-79-3	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	174.2
天冬氨酸	Aspartic acid	6899-03-2	C ₄ H ₇ NO ₄	133.1
亮氨酸	Leucine	3588-60-1	C ₆ H ₁₃ NO ₂	131.17
甲硫氨酸	DL-Methionine	59-51-8	C ₅ H ₁₁ NO ₂ S	149.21
6-磷酸葡萄糖	Glucose 6-phosphate	56-73-5	C ₆ H ₁₃ O ₉ P	260.14
6-磷酸果糖	fructose-6-phosphate	643-13-0	C ₆ H ₁₃ O ₉ P	262.1535
磷酸烯醇式丙酮酸	Phosphoenolpyruvic acid	138-08-9	C ₃ H ₅ O ₆ P	168.041

1, 6-二磷酸果糖	1,6 Fructose Diphosphate	488-69-7	C6H14O12P2	340.114
莽草酸	Shikimic Acid	138-59-0	C7H10O5	174.15
磷酸二羟丙酮	Dihydroxyacetone Phosphate	57-04-5	C3H7O6P	170.057
3-磷酸甘油酸	3-phosphoglycerate	820-11-1	C3H7O7P	186.056
乙酰辅酶 A	Acetyl coenzymeA	72-89-9	C23H38N7O17P3S	809.57
AMP	AMP	61-19-8	C10H14N5O7P	347.22
ATP	Adenosine triphosphate	56-65-59000-83-3	C10H16N5O13P3	507.18
ADP	adenosine diphosphate	58-64-0	C10H15N5O10P2	427.2
NADPH	nicotinamide adenine dinucleotide phosphate	53-59-8	C21H28N7O17P3	744.42
NADH	Nicotinamide adenine dinucleotide	606-68-8	C21H27N7O14P2	663.43
NAD+	Dihyronicotinamide Adenine Dinucleotide	53-84-9	C21H27N7O14P2+	663.43
NADP+	Nicotinamide adenine dinucleotide phosphate	53-59-8	C21H29N7O17P3+	744.416

13. 鹿明生物靶向数据库不断更新中。。。。