



使用 NMR 的 IVDr 研究

- 专为生物样本库设计的创新型分析方案

Innovation with Integrity

NMR

生物样本库行业内的 NMR

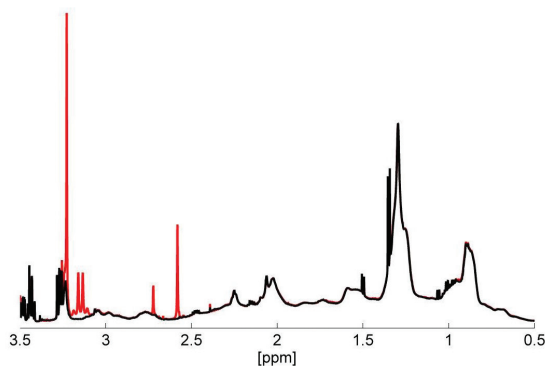
高分辨率 NMR 已快速发展成为体液和组织分析中的主要工具。它可用于高通量且一键式全自动化地生成谱图数据，从这些数据中可自动定量生物标志物的含量，或与健康或疾病状态的统计模型相比较。由于其卓越的重现性和在不同实验室间的可转移性，它还可用于大规模流行病学研究。这些优点，加上标准操作流程和标准化工具平台，可将世界各地生成的数据与来自生物样本库网络的数据整合在一起。

NMR 与生物样本库及其日常工作的关系怎样？

NMR 可用于样本纳入生物样本库时的质量控制，同步产生的测量数据还可作为额外产生的分析数据而增加样本存储的附加价值：

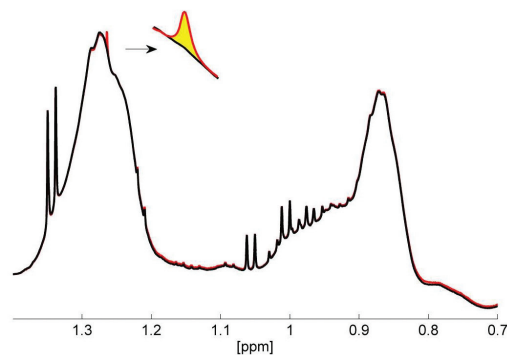
- 验证样本的类型，例如判定 EDTA（乙二胺四乙酸）血浆（见图 1）、枸橼酸盐血浆，以及质量控制、检查污染和杂质（见图 2）
- 生成每个样本的 NMR 谱图，用于输入生物样本库信息，其中 NMR 谱图在标准条件下生成，可用于世界范围内不同生物样本库的整合波谱库
- 同步生成包含 114 个参数的血清/血浆的脂蛋白亚分析数据
- 增加一系列尿液定量数据，包括每个代谢物的参考浓度范围

图1



EDTA 血浆的鉴别——见红色信号

图2



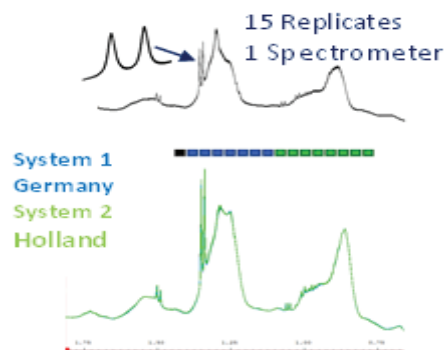
鉴别消毒材料的污染情况，见带标记的黄色峰值



NMR 用于波谱数据库应用和数据交换的适合性

同样 SOP 下、使用标准化 NMR 平台的 NMR 分析的重现性和可转移性见图 3。血清样本的等分样已经过制备和检测，使用同一仪器单独制备和检测的 15 次重复测定之谱图叠图显示在上部，而下部叠图显示的是在同样 SOP 下、使用同一型号仪器在两个实验室分别采集的 8 个谱图数据的叠图。可以看出，所有谱图都完美重叠。这证明来自不同生物样本库的谱图数据可用于综合统计分析。因此，对于新的研究，可使用谱图数据来代替取自生物样本库的新等分样。

图3

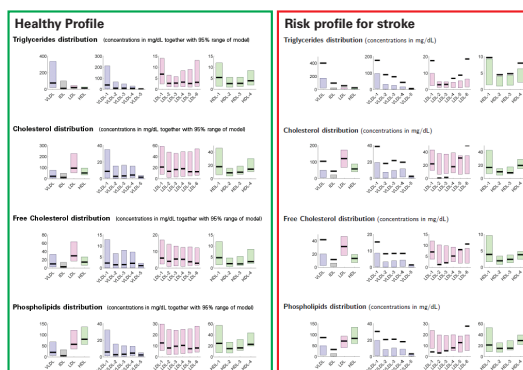


1600 Mhz 时的血清高分辨率 NMR

使用分析数据给生物样本库增加价值

无论是哪个生物样本库，与样本有关的元数据都很重要。这些数据可以是患者数据、生活方式信息，也可以是分析数据，例如血浆/血清中的脂蛋白（包括亚类）浓度，尿液中内源性代谢产物的浓度等。通过直接使用质控时获得的谱图，可自动生成分析结果，包括从所有生物样本库测试样品所得到的各代谢物浓度的参考范围。因为生物样本库测试的样本量非常大，因而可以定义所研究的人群队列的正常参考范围。4 显示的是节选的、来自 2 个样本的脂蛋白亚类分析，一个样本来自健康受试者，一个样本来自取样 3 天后出现卒中的病人，两张图有明显的区别，后者显示出存在风险。图 5 是内源性代谢产物定量分析结果节选，包括该人群队列中各代谢物的浓度分布，图中实际检测样品的结果显示为竖条状。可应要求提供更多的解析分析信息。

图4



健康状态（左）和风险状态（右）的脂蛋白亚类比较分析

图5

Compound	Concentration ¹		LOD	Reference Distribution
	mmol/L	mmol/mol Crea		
Creatinine	6.9			
Creatine	2.51	361	90	≤ 90
D-Glucose-beta	≤ LOD	≤ LOD	100	≤ 100
D-Galactose-alpha	≤ LOD	≤ LOD	50	≤ 50
D-Lactose	≤ LOD	≤ LOD	275	≤ 275
Alanine	≤ LOD	≤ LOD	110	≤ 110
Lactic Acid	≤ LOD	≤ LOD	100	≤ 100
Acetic Acid	≤ LOD	≤ LOD	90	≤ 90
Succinic Acid	0.51	74	20	≤ 20
Citric Acid	6.08	876	490	≤ 490
Dimethylamine	0.43	63	20	≤ 20
Trimethylamine	≤ LOD	≤ LOD	35	≤ 35

尿液内源性复合物报告节选

布鲁克 BioSpin

为代谢组学提供 NMR 方案

NMR 是一种代谢组学研究中的高级技术，它的优点包括高度重现性、简单的样本制备以及可同时检测不同的小分子代谢产物。今天，软硬件平台的新进展使 NMR 变得更有效、更易用、更具成本效益比。使用它，您可以自己探索 MNR 怎样帮助诠释代谢网络。

● 布鲁克 BioSpin

info@bruker.com
www.bruker.com