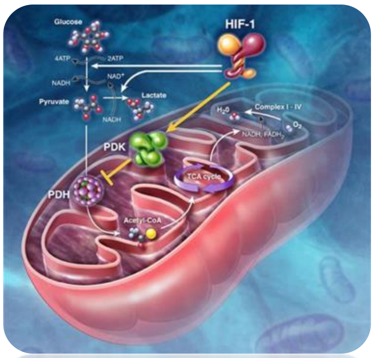
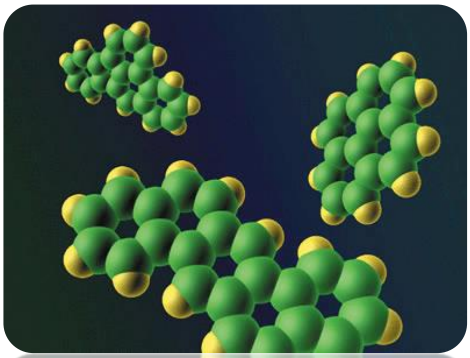
上海鹿明生物科技有限公司

靶向代谢组学检测物汇总表

11 大类 近 200 种代谢物标准品





鹿明生物 · 代谢部

2019-3-1

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,12 种） 7
11. TMAO 及相关代谢物-LCMS（TMAO 等,6 种） 8
12. 鹿明生物靶向数据库不断更新中。。。。 8

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
甘氨胆酸	Glycocholic acid	475-31-0	$C_{26}H_{43}NO_6$	465.6
甘氨鹅脱氧胆酸	Glycochenodeoxycholic acid	640-79-9	$C_{26}H_{43}NO_5$	449.6
甘氨脱氧胆酸	Glycodeoxycholic acid	360-65-6	$C_{26}H_{43}NO_5$	449.6
甘氨石胆酸	Glycocholic acid	475-31-0	$C_{26}H_{43}NO_6$	465.6
甘氨熊脱氧胆酸	Glycoursodeoxycholic acid	64480-66-6	$C_{26}H_{43}NO_5$	449.6
牛磺胆酸	Taurocholic acid	81-24-3	$C_{26}H_{45}NO_7S$	515.7
牛磺鹅脱氧胆酸	Taurochenodeoxycholic acid	516-35-8	$C_{26}H_{45}NO_6S$	499.7
牛磺脱氧胆酸	Tauroursodeoxycholic acid	14605-22-2	$C_{26}H_{45}NO_6S$	499.7
牛磺石胆酸	Taurolithocholic acid	516-90-5	$C_{26}H_{45}NO_5S$	483.7
牛磺熊脱氧胆酸	Tauroursodeoxycholic acid	14605-22-2	$C_{26}H_{45}NO_6S$	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	$C_{27}H_{46}O_5S$	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-ketocholesterol	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	$C_{27}H_{48}NaO_4S$	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	$C_8H_8O_4$	168.1
3-羟基邻氨基苯甲酸	3-hydroxyanthranilic acid	548-93-6	$C_7H_7NO_3$	153.1
5-羟色胺	5-hydroxytryptamine	50-67-9	$C_{10}H_{12}N_2O$	176.2
5-羟基吲哚乙酸	5-hydroxyindoleacetic acid	54-16-0	$C_{10}H_9NO_3$	191.2
5-羟色氨酸	5-hydroxytryptophan	56-69-9	$C_{11}H_{12}N_2O_3$	220.2
α-酮戊二酸	Alpha-ketoglutaric acid	328-50-7	$C_5H_6O_5$	146.1
多巴胺	Dopamine	51-61-6	$C_8H_{11}NO_2$	153.2
γ-氨基丁酸	Gamma-aminobutyric acid	56-12-2	$C_4H_9NO_2$	103.1
谷氨酸	Glutamic acid	56-86-0	$C_5H_9NO_4$	147.1
谷氨酰胺	Glutamine	61348-28-5	$C_{10}H_{18}N_2O_5$	246.3
谷胱甘肽	Glutathione	70-18-8	$C_{10}H_{17}N_3O_6S$	307.3
犬尿酸	Kynurenic acid	492-27-3	$C_{10}H_7NO_3$	189.2
犬尿氨酸	Kynurenine	343-65-7	$C_{10}H_{12}N_2O_3$	208.2
左旋多巴	Levodopa	59-92-7	$C_9H_{11}NO_4$	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	$C_{12}H_{14}N_2O_2$	218.3
鸟氨酸	Ornithine	70-26-8	$C_5H_{12}N_2O_2$	132.2
苯乙胺	Phenylethylamine	64-04-0	$C_8H_{11}N$	121.2
琥珀酸	Succinic acid	110-15-6	$C_4H_6O_4$	118.1
色胺	Tryptamine	61-54-1	$C_{10}H_{12}N_2$	160.2
色氨酸	Tryptophan	5241-64-5	$C_{16}H_{20}N_2O_4$	304.3
色醇	Tryptophol	526-55-6	$C_{10}H_{11}NO$	161.2
酪胺	Tyramine	51-67-2	$C_8H_{11}NO$	137.2
香草扁桃酸	Vanillylmandelic acid	55-10-7	$C_9H_{10}O_5$	198.2
去甲肾上腺素	Norepinephrine	51-41-2	$C_8H_{11}NO_3$	169.2
吲哚-3-甲醛	Indole-3-carboxaldehyde	487-89-8	C_9H_7NO	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	$C_5H_{11}NO_2$	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	$C_3H_7NO_3$	105.1
谷氨酰胺	Glutamine	61348-28-5	Gln	$C_{10}H_{18}N_2O_5$	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	$C_4H_8N_2O_3$	132.1
组氨酸	Histidine	71-00-1	His	$C_6H_9N_3O_2$	155.2
脯氨酸	Dl-proline	609-36-9	Pro	$C_5H_9NO_2$	115.1
半胱氨酸	Cysteine	52-90-4	Gys	$C_3H_7NO_2S$	121.2
异亮氨酸	Isoleucine	7004-09-3	Ile	$C_6H_{13}NO_2$	131.2
谷氨酸	Glutamic acid	56-86-0	Glu	$C_5H_9NO_4$	147.1
苏氨酸	Threonine	72-19-5	Thr	$C_4H_9NO_3$	119.1
天冬氨酸	Aspartic acid	6899-03-2	Asp	$C_4H_7NO_4$	133.1
色氨酸	Tryptophan	5241-64-5	Try	$C_{16}H_{20}N_2O_4$	304.3
赖氨酸	Lysine	56-87-1	Lys	$C_6H_{14}N_2O_2$	146.2
甘氨酸	Glycine	56-40-6	Gly	$C_2H_5NO_2$	75.1
甲硫氨酸	Methionine	59-51-8	Met	$C_5H_{11}NO_2S$	149.2
丙氨酸	Alanine	338-69-2	Ala	$C_3H_7NO_2$	89.1
精氨酸	Arginine	74-79-3	Arg	$C_6H_{14}N_4O_2$	174.2

5. 羧酸类物质-LCMS（7 种）

A 类．短链羧酸

中文名	英文名	CAS 号	缩写	分子式	分子量
草酸	Oxalic acid	144-62-7	OA	$C_2H_2O_4$	90.0
丙酮酸	Pyruvic acid	127-17-3	PA	$C_3H_4O_3$	88.1

B 类．长链羧酸

中文名	英文名	CAS 号	缩写	分子式	分子量
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	$C_7H_6O_3$	138.1
	生长素	Indoleacetic acid	87-51-4	$C_{10}H_9NO_2$	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	$C_{10}H_{13}N_5O$	219.24
	N-(3-吲哚乙酰基)-L-丙氨酸	N-(3-Indolylacetyl)-L-alanine	57105-39-2	$C_{13}H_{14}N_2O_3$	246.266
	1-氨基环丙烷-1-羧酸	1-Aminocyclopropanecarboxylic Acid	22059-21-8	$C_4H_7NO_2$	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	$C_2H_4O_2$	60.05
丙酸	Propionic acid	69-93-2	$C_3H_6O_2$	74
丁酸	Butyric Acid	68-94-0	$C_4H_8O_2$	88.11
戊酸	Pentanoic acid	70-18-8	$C_5H_{10}O_2$	102.13
己酸	Hexanoic Acid	58-63-9	$C_6H_{12}O_2$	116.16
异丁酸	Isobutyric acid	58-96-8	$C_4H_8O_2$	88.11
异戊酸	Isovaleric acid	3868-31-3	$C_5H_{10}O_2$	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	$C_4H_6O_5$	134.1	GCMS 同时检测
尿酸	Uric acid	69-93-2	C5H4N4O3	168.1	
黄嘌呤	Xanthine	69-89-6	C5H4N4O2	152.1	
胞嘧啶	Cytosine	71-30-7	C4H5N3O	111.1	
吲哚-3-乳酸	Indole-3-lactic acid	1821-52-9	C11H11NO3	205.2	
次黄嘌呤	Hypoxanthine	68-94-0	C5H4N4O	136.1	

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量	检测平台
肌苷	Inosine	58-63-9	$C_{10}H_{12}N_4O_5$	268.2	LCMS 同时检测
尿苷	Uridine	58-96-8	$C_9H_{12}N_2O_6$	244.2	
8-羟基鸟苷	8-Hydroxyguanosine	3868-31-3	$C_{10}H_{13}N_5O_6$	299.2	
8-羟基-2'-脱氧鸟苷	8-Hydroxy-2′-deoxyguanosine	88847-89-6	$C_{10}H_{13}N_5O_5$	283.2	
鞘氨醇	Sphinganine	764-22-7	$C_{18}H_{39}NO_2$	301.3	
腺苷	Adenosine	58-61-7	$C_{10}H_{13}N_5O_4$	267.2	
5'-一磷酸腺苷	Adenosine 5'-monophosphate	61-19-8	$C_{10}H_{14}N_5O_7P$	347.2	

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	$C_9H_8O_2$	148.161
咖啡酸	Caffeic acid	331-39-5	$C_9H_8O_4$	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	$C_9H_8O_3$	164.16

10. 糖类-GCMS（单糖或二糖,12 种）

中文名	英文名	CAS 号	分子式	分子量
阿拉伯糖醇	Arabitol	488-82-4	C5H12O5	152.15
核糖醇	adonitol	488-81-3	C5H12O5	152.15
木糖醇	Xylitol	87-99-0	C5H12O5	152.15
海藻糖	Trehalose	99-20-7	$C_{12}H_{22}O_{11}$	342.30
麦芽糖	Maltose	69-79-4	C12H22O11·H2O	360.32
无水葡萄糖	D-Glucose	50-99-7	$C_6H_{12}O_6$	180.16
半乳糖	D-Galactose	10257-28-0	$C_6H_{12}O_6$	180.16
果糖	Fructose	57-48-7	$C_6H_{12}O_6$	180.16
葡萄糖-6-磷酸	Glucose 6-phosphate	56-73-5	$C_6H_{13}O_9P$	260.14
蜜二糖	Melibiose	585-99-9	C12H22O11	342.30
甘露醇	D-mannitol	69-65-8	C6H14O6	182.17
乳糖	Lactose	63-42-3	$C_{12}H_{22}O_{11}$	342.30

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	(CH3)3N(O)	75.11
三甲胺（TMA）	Trimethylamine	593-81-7	CH3)3N	59.07
胆碱	Choline	67-48-1	C5H14CLNO	139.62
甜菜碱	Betaine	590-46-5	C5H12CLNO2	153.6
肌酐	Creatinine	60-27-5	C4H7N3O	113.11788
左旋肉碱	L-Carnitine	541-15-1	$C_7H_{15}NO_3$	161.1989

12. 鹿明生物靶向数据库不断更新中。。。。

说明：如您关注的物质不在这个表格内，请及时咨询我们，感谢支持！

上海鹿明生物科技有限公司

咨询电话：400-889-0037

地址：上海市闵行区新骏环路 138 号漕河泾浦江科技园 3 号楼 5 层

公司：Shanghai Lu-Ming Biotech Co.,Ltd., Shanghai, China

上海鹿明：www.lumingbio.com