

Автоматизация обработки и анализа метаболомных данных

Мартюшев Алексей Антонович

Физический факультет. Электромагнитный практикум. Курсовая работа.

Группа № 18345, 3 семестр, 2019 год.

Научный руководитель:

к. ф.-м. н. **Яньшолё Вадим Владимирович**

Аннотация

Целью данной работы является обработка и анализ метаболомных данных, полученных с помощью метода высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС). Исследуемыми образцами были эмбриональные стволовые клетки (ESC), индуцированные плюрипотентные стволовые клетки (iPSC) и эмбриональные фибробласты (EF). Для разделения смеси метаболитов в образцах использовали ВЭЖХ систему Dionex UltiMate 3000RS. Детектирование фракций ВЭЖХ осуществляли на масс-спектрометре Bruker Daltonics Maxis 4G с ионизацией ESI и времяпролетным анализатором. В результате детектирования ионов, были получены значения отношения массы к заряду, а также значения интенсивностей ионного тока и времен удержания на хроматографической колонке. С помощью программного пакета XCMS был произведен поиск и интегрирование площадей пиков для каждого иона. Для сравнения групп образцов применяли U-критерий Манна-Уитни, также учитывали средние значения интенсивностей между группами. В итоге были определены метаболиты, концентрации которых различаются между образцами.

Ключевые слова: масс-спектрометрия, высокоэффективная жидкостная хроматография, интенсивность ионного тока, метаболиты.