项目说明及技术部分评分参数

一、采购标的

名称：尿液代谢组学检测

预算金额（万元）：25万

项目联系人：北京胸科医院 细菌免疫学实验室 于佳佳 19801276115

二、采购需求

共650例尿液样本，其中350例进行非靶向代谢组学检测，300例进行靶向代谢组学检测。（本实验为灭菌尿液样本，不具有传染性）

三、技术要求

1、采购内容明细

①样本类型：尿液

②样本数量：350例尿液非靶向代谢组学+300例尿液靶向代谢组学

2、检测标准及指标要求

四、商务要求

服务期限：不超过50个自然日内完成非靶向及靶向代谢组学尿液样本检测，数据分析及生物信息学分析。

五、服务要求

靶向及非靶向代谢组学检测专业技术人员；生物信息学数据分析专业技术人员。

技术参数

一、非靶向及靶向代谢组学技术要求

（一）、非靶向代谢组学技术差异筛选

**1、代谢物提取**

\*1.1 送检样本于4℃解冻，每例样本进行冷冻浓缩干燥，分别加入预冷甲醇/乙腈/水，冰浴中超声60 min，-20℃孵育1h沉淀蛋白，离心，取上清进行真空干燥。

1.2质谱检测时加入乙腈-水溶液复溶，离心，取上清进行进样分析。

\*1.3已处理好的所有样本进行混合，制备成合格的QC样品。

**2、色谱分离**（不满足为废标项）

#2.1 对送检样品采用SHIMADZU Nexera X2 LC-30AD 超高压液相色谱仪进行分离。

\*2.2样本队列中每隔8个实验样本设置1个QC样本，用于检测和评价系统的稳定性及重复性。

**3、质谱条集**（不满足为废标项）

#3.1使用超高效液相色谱-四极杆轨道阱质谱仪（UPLC-Q-Exactive-Orbitrap-MS/MS）在正离子和负离子模式下分别进行质谱检测。

**4、质控分析**

\*4.1 QC样本正离子模式和负离子模式下的质谱总离子流图分别进行谱图叠加比较，同时对QC样本的每个信号峰计算RSD，去除RSD超过30%的信号峰。

**5、数据预处理**

#5.1原始数据采用MSDIAL软件进行峰对齐、保留时间校正和提取峰面积。代谢物结构鉴定采用精确质量数匹配（质量偏差mass tolerance＜20 ppm）和二级谱图匹配（质量偏差mass tolerance＜0.02 Da）的方式，检索HMDB、MassBank等公共数据库及公司自建标准品库，得到包含化合物保留时间、质荷比和峰强度等信息。

\*5.2缺失值处理采用删除组内样本内缺失值大于50%的离子峰；对正负离子数据分别进行总峰面积归一化，整合正负离子峰并应用R软件进行模式识别，数据经UV预处理后进行后续数据分析。

**（二）、 靶向代谢组学技术差异验证**

**1、代谢物提取**

\*1.1送检样本4℃解冻，每例样本进行冷冻浓缩干燥，加入预冷水预冷甲醇/乙腈，冰浴中超声60 min，-20℃孵育1h沉淀蛋白，离心，取上清进行真空干燥。

1.2质谱检测时加入乙腈-水溶液复溶，离，取上清进行进样分析。

\*1.3已处理好的所有样本进行混合，制备成QC样品。

**2、色谱分离**（不满足为废标项）

#2.1对样品采用SHIMADZU Nexera X2 LC-30AD 超高压液相色谱仪进行分离。

\*2.2样本队列中每隔8个实验样本设置1个QC样本，用于检测和评价系统的稳定性及重复性。

**3、质谱条集**（不满足为废标项）

#3.1使用超高效液相色谱-三重四极杆线性离子阱质谱仪（UPLC-Q-trap-MS/MS）在正离子和负离子模式下分别进行质谱检测。

**4、质控分析**

#4.1所有样品等量混合制备成为QC样本，采用QC样本对数据的稳定性和重复性进行评价。计算代测物在QC样本中的RSD，RSD小于30%的代谢物在样本中认为数据稳定可靠。

**5、数据预处理**

#5.1采用Multi Quant软件提取色谱峰面积及保留时间，使用标准品校正保留时间，进行代谢物鉴定，代谢物提取离子峰面积通过内标进行归一化处理。

二、**实验结果数据分析展示及检测周期**

**（一）、非靶向代谢组学差异代谢物实验结果及数据分析**（不满足为废标项）

#1.1包括根据实验及检索结果统计的代谢物列表、差异代谢物列表、差异代谢物统计分析图谱、代谢物通路分析、生物信息分析结果及生物学功能分析结果等本次实验所需所有数据分析，并提供原始数据、展示报告及后续修改报告。

**（二）、靶向代谢组学差异代谢物实验结果及数据分析**（不满足为废标项）

#2.1包括根据实验及检索结果统计的代谢物列表、差异代谢物列表、差异代谢物统计分析图谱、代谢物通路分析、生物信息分析及生物学功能分析结果等本次实验所需所有数据分析，并提供原始数据、展示报告及后续修改报告。

**（三）、检测周期**（不满足为废标项）

# 3.1 350例非靶向代谢组学尿液样本处理、QC样本检测；质谱检测；数据统计学分析和生物信息学分析不超过25个自然日。

# 3.2 300例靶向代谢组学尿液样本处理、QC样本检测；质谱检测；数据统计学分析和生物信息学分析不超过25个自然日。