

# 靶向代谢组学检测物质列表

## 目 录

目 录.....	1
(一) 7 种短链脂肪酸.....	2
(二) TMAO 及相关代谢物.....	2
(三) 22 种氨基酸类.....	3
(四) 34 种脂肪酸类.....	4
(五) 35 种黄酮类.....	5
(六) 23 种神经递质.....	6
(七) 40 种胆汁酸.....	7

### (一) 7 种短链脂肪酸

编号	英文名称	中文名称
1	Acetic acid	乙酸
2	Propionic acid	丙酸
3	Butyric acid	丁酸
4	Isobutyric acid	异丁酸
5	Pentanoic acid	戊酸
6	Isovaleric acid	异戊酸
7	Hexanoic acid	己酸

### (二) TMAO 及相关代谢物

编号	英文名称	中文名称
1	Trimethylamine N-oxide	氧化三甲胺
2	Choline	胆碱
3	Betaine	甜菜碱
4	Creatinine	肌酸酐
5	L-Carnitine	左旋肉碱

### (三) 22 种氨基酸类

编号	英文名	中文名	CAS
1	L-Asparagine	天冬酰胺	70-47-3
2	L-Phenylalanine	苯丙氨酸	63-91-2
3	L-Valine	缬氨酸	72-18-4
4	L-Lysine	赖氨酸	56-87-1
5	L-Alanine	丙氨酸	56-41-7
6	L-Tyrosine	酪氨酸	60-18-4
7	L-Histidine	组氨酸	71-00-1
8	L-Tryptophan	色氨酸	73-22-3
9	L-Serine	丝氨酸	56-45-1
10	L-Aspartic acid	天冬氨酸	56-84-8
11	L-Methionine	甲硫氨酸	63-68-3
12	L-Glutamic acid	谷氨酸	56-86-0
13	L-Proline	脯氨酸	147-85-3
14	Glycine	甘氨酸	56-40-6
15	L-Isoleucine	异亮氨酸	73-32-5
16	L-Leucine	亮氨酸	61-90-5
17	L-Arginine	精氨酸	74-79-3
18	L-Threonine	苏氨酸	72-19-5
19	L-Glutamine	谷氨酰胺	56-85-9
20	4-Aminobutyric acid	$\gamma$ -氨基丁酸	56-12-2
21	L-Ornithine hydrochloride	鸟氨酸盐酸盐	3184-13-2
22	DL-Homocysteine	高半胱氨酸	454-29-5

## (四) 34 种脂肪酸类

编号	英文名称	中文名称	碳数/双键
1	Methyl hexanoate	己酸甲酯	C6:0
2	Methyl octanoate	辛酸甲酯	C8:0
3	Methyl decanoate	癸酸甲酯	C10:0
4	Methyl undecanoate	十一烷酸甲酯	C11:0
5	Methyl dodecanoate	月桂酸甲酯	C12:0
6	Methyl tridecanoate	十三烷酸甲酯	C13:0
7	Methyl myristate	肉豆蔻酸甲酯	C14:0
8	Methyl myristoleate	肉豆蔻烯酸甲酯	C14:1
9	Methyl pentadecanoate	十五烷酸甲酯	C15:0
10	Methyl cis-10-pentadecenoate	十五碳烯酸甲酯	C15:1
11	Methyl palmitate	棕榈酸甲酯	C16:0
12	Methyl palmitoleate	棕榈油酸甲酯	C16:1
13	Methyl heptadecanoate	十七烷酸甲酯	C17:0
14	Methyl cis-10-heptadecenoate	十七碳烯酸甲酯	C17:1
15	Methyl stearate	硬脂酸甲酯	C18:0
16	Methyl oleate	油酸甲酯	C18:1
17	Methyl linoleate	亚油酸甲酯	C18:2
18	Methyl $\gamma$ -linolenate	$\gamma$ -亚麻酸甲酯	C18:3n6
19	Methyl linolenate	亚麻酸甲酯	C18:3n3
20	Methyl arachidate	花生酸甲酯	C20:0
21	cis-11-Eicosenoic acid methyl ester	二十碳烯酸甲酯	C20:1
22	cis-11,14,17-Eicosatrienoic acid methyl ester	二十碳三烯酸甲酯	C20:3n3
23	cis-8,11,14-Eicosatrienoic acid methyl ester	二十碳三烯酸甲酯	C20:3n6
24	Methyl arachidonate	花生四烯酸甲酯	C20:4n6
25	cis-5,8,11,14,17-Eicosapentaenoic acid methyl ester	二十碳五烯酸甲酯 (EPA-M)	C20:5n3
26	Methyl heneicosanoate	二十一烷酸甲酯	C21:0
27	cis-11,14-Eicosadienoic acid methyl ester	二十碳二烯酸甲酯	C20:2
28	Methyl behenate	二十二烷酸甲酯	C22:0
29	Methyl erucate	芥酸甲酯	C22:1n9
30	cis-13,16-Docosadienoic acid methyl ester	二十二碳二烯酸甲酯	C22:2
31	cis-4,7,10,13,16,19-Docosahexaenoic acid methyl ester	二十二碳六烯酸甲酯 (DHA-M)	C22:6n3
32	Methyl tricosanoate	二十三烷酸甲酯	C23:0
33	Methyl tetracosanoate	二十四烷酸甲酯	C24:0
34	Methyl cis-15-tetracosenoate	二十四碳烯酸甲酯	C24:1

**(五) 35 种黄酮类**

编号	英文名称	中文名称
1	Catechin	儿茶素
2	Genistein	染料木素
3	Puerarin	葛根素
4	Baicalin	黄芩苷
5	Diosmin	地奥司明
6	Kaempferol	山奈酚
7	Luteolin	木樨草素
8	Rutin	芦丁
9	Daidzein	大豆苷元
10	Naringin	柚皮苷
11	Icariin	淫羊藿苷
12	Chrysin	白杨素
13	Silybin	水飞蓟宾
14	Quercetin 3-glucoside	异槲皮苷
15	Fisetin	漆黄素
16	Isovitexin	异牡荆素
17	Cynaroside	木樨草苷
18	Apigenin	芹菜素
19	Astragalin	黄芪苷
20	Biochanin A	鹰嘴豆芽素A
21	Daidzin	大豆苷
22	Taxifolin	二氢槲皮素
23	L-Epicatechin	表儿茶素
24	Formononetin	芒柄花黄素
25	Genistin	染料木苷
26	Glycitein	黄豆黄素
27	Glycitin	黄豆黄苷
28	Liquiritigenin	甘草素
29	Quercitrin	槲皮苷
30	Vitexin	牡荆素
31	Dihydromyricetin	二氢杨梅素
32	Naringenin	柚皮素
33	Quercetin	槲皮素
34	Kaempferide	山奈素
35	Myricetin	杨梅素

## (六) 23种神经递质

编号	英文名	中文名	CAS
1	Noradrenaline hydrochloride	去甲肾上腺素盐酸盐	55-27-6
2	3-Hydroxytyramine hydrochloride	多巴胺盐酸盐	62-31-7
3	Serotonin hydrochloride	5-羟色胺盐酸盐	153-98-0
4	Acetylcholine chloride	氯化乙酰胆碱	60-31-1
5	Histamine	组胺	51-45-6
6	Tyramine	酪胺	51-67-2
7	Levodopa	左旋多巴	59-92-7
8	Adrenaline hydrochloride	肾上腺素盐酸盐	329-63-5
9	5-Hydroxyindole-3-Acetic acid	5-羟吲哚乙酸	54-16-0
10	Glutamine	谷氨酰胺	56-85-9
11	Tryptamine	色胺	61-54-1
12	Melatonine	褪黑素	73-31-4
13	Kynurenic acid	犬尿喹啉酸	492-27-3
14	5-Hydroxytryptophan	5-羟基色氨酸	4350-09-8
15	Histidine	组氨酸	71-00-1
16	Tryptophan	色氨酸	73-22-3
17	DL-Kynurenine	犬尿氨酸	343-65-7
18	Tyrosine	酪氨酸	60-18-4
19	Glutamic acid	谷氨酸	56-86-0
20	4-Aminobutyric acid	4-氨基丁酸	56-12-2
21	Xanthurenic acid	黄尿酸	59-00-7
22	4-Hydroxy-3-methoxymandelic acid	香草扁桃酸	55-10-7
23	Picolinic acid	吡啶甲酸	98-98-6

## (七)40种胆汁酸

编号	胆汁酸	中文名	英文名	CAS
1	alloLCA	别胆石酸	Allolithocholic acid	2276-93-9
2	LCA	石胆酸	Lithocholic acid	434-13-9
3	isoLCA	异石胆酸	Isolithocholic acid	1534-35-6
4	NorDCA	23-脱甲脱氧胆酸	23-Nordeoxycholic acid	53608-86-9
5	6-ketoLCA	6-酮基石胆酸乙酯	6-ketolithocholic acid acetate	NA
6	12-ketoLCA	12-酮基石胆酸	12-ketolithocholic acid	5130-29-0
7	7-ketoLCA	7-酮基石胆酸	7-ketolithocholic acid	4651-67-6
8	$\beta$ -UDCA	3 $\beta$ -熊去氧胆酸	3 $\beta$ -Ursodeoxycholic acid	78919-26-3
9	DCA	去氧胆酸	Deoxycholic acid	83-44-3
10	CDCA	鹅去氧胆酸	Chenodeoxycholic acid	474-25-9
11	UDCA	熊去氧胆酸	Ursodeoxycholic acid	128-13-2
12	HDCA	猪去氧胆酸	Hyodeoxycholic acid	83-49-8
13	NorCA	正胆酸	Norcholic acid	60692-62-0
14	DHCA	脱氢胆酸	Dehydrocholic acid	81-23-2
15	7,12-diketoLCA	7,12-二酮石胆酸	7,12-diketolithocholic acid	517-33-9
16	6,7-diketoLCA	6,7-二酮石胆酸	6,7-diketolithocholic acid	NA
17	$\alpha$ -MCA	$\alpha$ -鼠胆酸	$\alpha$ -Muricholic acid	2393-58-0
18	UCA	熊果胆酸	Ursocholic acid	2955-27-3
19	$\beta$ -MCA	$\beta$ -鼠胆酸	$\beta$ -Muricholic acid	2393-59-1
20	CA	胆酸	Cholic acid	81-25-4
21	ACA	别胆酸	Allocholic acid	2464-18-8
22	$\beta$ CA	3 $\beta$ -胆酸	3 $\beta$ -Cholic acid	3338-16-7
23	GUCA	甘氨酸熊胆酸钠盐	Glycoursocholic acid Sodium Salt	NA
24	GLCA	甘氨酸石胆酸钠盐	Glycolithocholic acid Sodium Salt	24404-83-9
25	GHDCA	甘氨酸猪去氧胆酸	Glycohyodeoxycholic acid	13042-33-6
26	GCDCA	甘氨酸鹅脱氧胆酸钠盐	Glycochenodeoxycholic acid Sodium Salt	16564-43-5
27	GUDCA	甘氨酸熊脱氧胆酸	Glycoursodeoxycholic acid	64480-66-6
28	GDCA	甘氨酸脱氧胆酸钠盐	Glycodeoxycholic acid Sodium Salt	16409-34-0
29	LCA-3S	硫酸化石胆酸钠盐	Lithocholic acid 3-sulfate Sodium Salt	34669-57-3
30	GCA	甘氨酸胆酸	Sodium	863-57-0

			Glycocholate Hydrate	
31	TLCA	牛磺石胆酸钠盐	Taurolithocholic acid Sodium Salt	6042-32-6
32	THDCA	牛磺猪去氧胆酸钠盐	Taurohyodeoxycholic acid Sodium Salt	38411-85-7
33	TUDCA	牛磺熊去氧胆酸钠盐	Tauroursodeoxycholic acid Sodium Salt	35807-85-3
34	TDCA	牛磺脱氧胆酸钠盐	Taurodeoxycholic acid Sodium Salt	1180-95-6
35	TCDC	牛磺鹅去氧胆酸	Taurochenodeoxycholic acid	6009-98-9
36	TCA	牛磺胆酸钠盐	Taurocholic acid Sodium Salt	145-42-6
37	T- $\alpha$ -MCA	牛磺- $\alpha$ -鼠胆酸钠盐	Tauro- $\alpha$ -muricholic acid Sodium Salt	25696-60-0
38	THCA	牛磺猪胆酸钠盐	Taurohyocholic acid Sodium Salt	NA
39	T- $\beta$ -MCA	牛磺- $\beta$ -鼠胆酸钠盐	Tauro- $\beta$ -muricholic acid Sodium Salt	145022-92-0
40	CDCA-G	鹅去氧胆酸-葡萄糖醛酸结 合物		
40-1	CDCA-3G	鹅去氧胆酸-3- $\beta$ -D-葡萄糖 醛酸	Chenodeoxycholic acid-3- $\beta$ -D-glucuronide	58814-71-4
40-2	CDCA-24G	鹅去氧胆酸-24-酰基- $\beta$ -D- 葡萄糖醛酸	Chenodeoxycholic acid 24-Acyl- $\beta$ -D-glucuronide	208038-27-1