

GC-MS/MS 结合代谢物数据库用于纳米农药减轻水稻幼苗药害代谢组学研究

GCMSMS-355

摘要： 本文采用三重四极杆气相色谱质谱联用仪 GCMS-TQ8050 NX 结合代谢物数据库，建立了 467 种代谢物的 MRM 分析方法。用此方法分析对照组、纳米剂型施药组和常规剂型（乳油）施药组的水稻植株，共检出 136 个代谢物衍生产物。在水稻样品制备前加入核糖醇为内标，方便快捷获得鉴定代谢物的半定量结果。数据分析表明，使用偏最小二乘判别分析法可以区分对照、纳米剂型施药和乳油剂型施药样品，并筛选出样品间差异贡献 VIP > 1 且 p 值 < 0.05 的 30 个差异代谢物，为确定与差异代谢物相关的代谢通路提供指导，为阐明纳米农药剂型和常规剂型（乳油）农药的不同作用机理提供参考。

关键词： 三重四极杆气相色谱质谱联用仪 代谢物数据库 纳米农药 水稻幼苗

技术特点：

- ❖ GCMS-TQ8050 NX 结合代谢物数据库，建立了水稻样品中 467 个代谢物衍生物的 MRM 分析方法。
- ❖ 以核糖醇为内标，方便快捷获得鉴定代谢物的半定量结果。

丙环唑属于三唑类杀菌剂，作用机制是抑制病原菌的甾醇 14 α -去甲基酶。因其高效广谱的杀菌活性，被广泛应用于水稻纹枯病、稻曲病和稻瘟病等植物真菌病害防控。但是高浓度丙环唑对水稻幼苗有较高药害风险，会导致植物生长迟缓、矮化、僵化、坏死、干枯和褪绿等。壳聚糖基纳米载药体系可以实现丙环唑的安全和高效利用，有效减轻药害发生。

岛津 GCMS 代谢物数据库（Smart Metabolites Database）中 TMS 衍生方式包含包含 500 余种代谢物衍生物的保留指数、质谱图、化合物信息、MRM 参数以及检测方法，代谢物种类包括有机酸、脂肪酸、氨基酸、糖类等。其中 467 种化合物提供 6 个

MRM 离子对及对应的碰撞电压、离子比率。根据已注册代谢物衍生物的保留指数，应用 AART 功能即可自动创建已优化的 MRM 分析方法，进行高灵敏度、高选择性的代谢物分析。

本文使用 GCMS-TQ8050 NX 和岛津代谢物数据库建立了水稻植株中代谢物的筛查分析方法。实现水稻植株代谢物快速筛查分析，结合偏最小二乘判别分析可有效区分对照、纳米剂型施药和乳油剂型施药样品，并筛选出差异常代谢物。为确定与差异代谢物相关的代谢通路提供指导，为阐明纳米农药剂型和常规剂型（乳油）农药的不同作用机理提供参考。

■ 实验部分

1.1 仪器

GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气相色谱质谱联用仪

1.2 分析条件

色谱柱：DB-5, 30 m×0.25 mm×1.0 μ m

柱温程序：100°C (4 min)_4°C /min_320°C (8 min)

进样口温度：280°C

离子源温度：250°C

载气控制：恒线速度模式，39.0 cm/s

接口温度：280°C

进样方式：分流，分流比 10:1

检测器电压：调谐电压 +0.3 KV

进样量：1 μ L

采集方式：MRM

■ 样品前处理

样品前处理流程如下图所示：

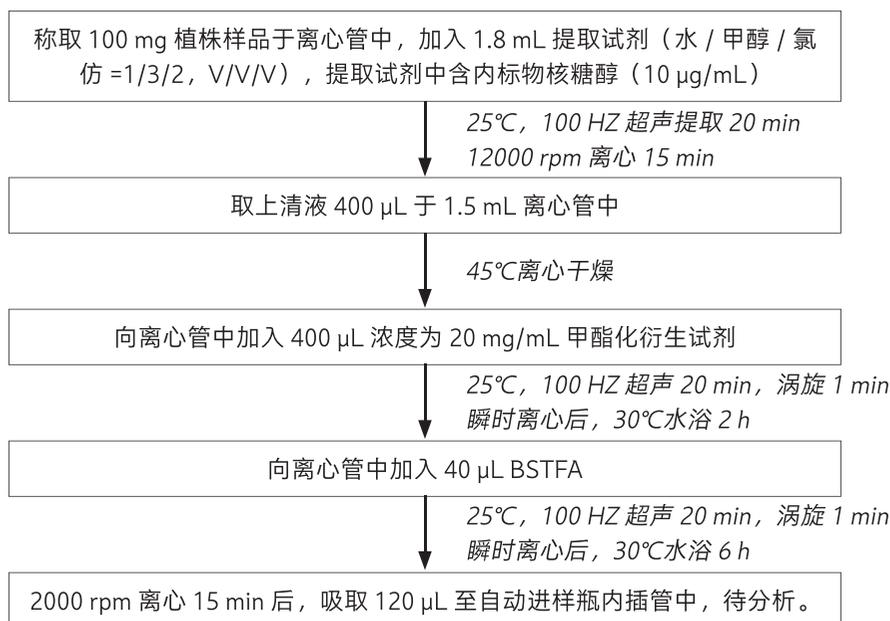


图 1 样品前处理流程图

■ 结果与讨论

3.1 水稻植株样品 TIC 图

岛津 GCMS 代谢物数据库 (Smart Metabolites Database) 中 TMS 衍生方式包含 500 余种代谢物衍生物的保留指数、质谱图、化合物信息、MRM 参数以及检测方法，代谢物种类包括有机酸、脂肪酸、氨基酸、糖类等。其中 467 种化合物提供 6 个 MRM 离子对及对应的碰撞电压、离子比率。根据已注册代谢物衍生物的保留指数，应用 AART 功能即可自动创建已优化的 MRM 分析方法，进行高灵敏度、高选择性的代谢物分析。水稻植株中代谢物 TIC 图如图 2 所示。

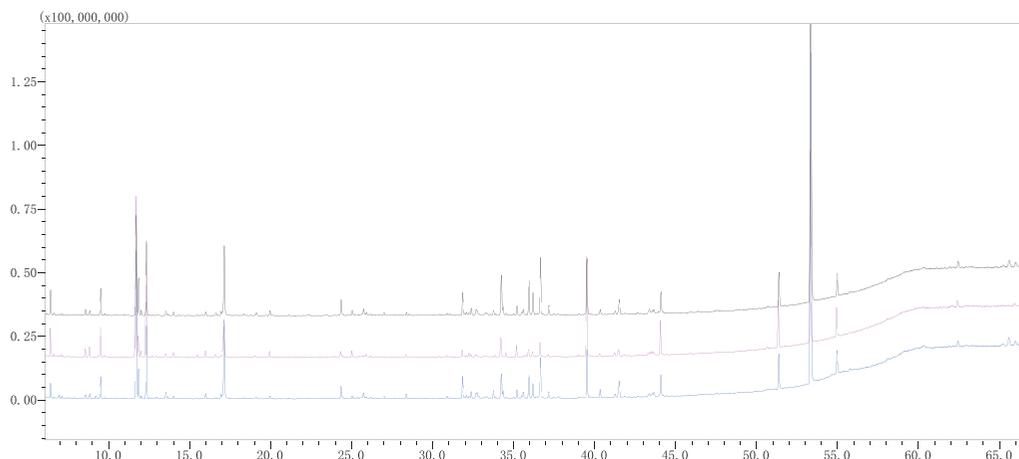


图 2 水稻植株中代谢物 TIC 图
(黑色：对照组 TIC；粉色：乳油剂型施药组 TIC；蓝色：纳米剂型施药组 TIC)

3.2 水稻植株中代谢物鉴定结果

对照组、纳米剂型施药组、乳油剂型施药组水稻植株中共鉴定出 136 个代谢物衍生物，其中对照组鉴定代谢物 129 个，纳米剂型施药组鉴定代谢物 130 个，乳油剂型施药组鉴定代谢物 134 个，鉴定代谢物以氨基酸、有机酸和糖类为主。代谢物种类及半定量的详细信息如表 1 所示。

表 1 水稻植株中代谢物鉴定结果

No.	化合物名称	英文名称	CAS No.	保留时间 (min)	代谢物峰面积 / 内标峰面积		
					CK*	NP*	EC*
1	二甲基甘氨酸 -TMS	Dimethylglycine-TMS	1118-68-9	6.988	0.007	0.006	0.027
2	乙醛酸 -meto-TMS	Glyoxylic acid-meto-TMS	298-12-4	6.988	0.007	0.006	0.028
3	丙酮酸 -meto-TMS	Pyruvic acid-meto-TMS	127-17-3	8.915	0.047	0.029	0.023
4	乳酸 -2TMS	Lactic acid-2TMS	79-33-4	9.370	2.021	2.162	8.203
5	己酸 -TMS	Caproic acid-TMS	142-62-1	9.695	0.062	0.061	0.281
6	乙醇酸 -2TMS	Glycolic acid-2TMS	79-14-1	9.792	0.025	0.025	0.091
7	丙氨酸 -2TMS	Alanine-2TMS	302-72-7	10.871	0.547	0.364	0.796
8	羟胺 -3TMS	Hydroxylamine-3TMS	7803-49-8	11.601	2.722	4.917	11.593
9	乙醛酸 -oxime-2TMS	Glyoxylic acid-oxime-2TMS	298-12-4	11.636	0.021	0.012	0.094
10	草酸 -2TMS	Oxalic acid-2TMS	144-62-7	11.671	0.506	0.460	0.936
11	乙酰乙酸 -meto-TMS	Acetoacetic acid-meto-TMS	541-50-4	11.844	0.069	0.090	0.361
12	肌氨酸 -2TMS	Sarcosine-2TMS	107-97-1	12.088	0.106	0.146	0.495
13	3-羟基丙酸 -2TMS	3-Hydroxypropionic acid-2TMS	503-66-2	12.227	0.017	0.017	0.045
14	丙酮酸 -oxime-2TMS	Pyruvic acid-oxime-2TMS	127-17-3	12.470	0.001	0.001	0.003
15	3-羟基丁酸 -2TMS	3-Hydroxybutyric acid-2TMS	300-85-6	12.818	0.005	0.005	0.014
16	3-羟基异丁酸 -2TMS	3-Hydroxyisobutyric acid-2TMS	2068-83-9	12.887	0.001	0.001	0.003
17	3-羟基异戊酸 -2TMS	2-Hydroxyisovaleric acid-2TMS	4026-18-0	14.663	0.006	0.007	0.018
18	缬氨酸 -2TMS	Valine-2TMS	72-18-4	14.943	0.055	0.104	0.337
19	尿素 -2TMS	Urea-2TMS	57-13-6	15.538	0.122	0.108	2.424
20	乙酰乙酸 -2TMS(2)	Acetoacetic acid-2TMS(2)	541-50-4	15.958	0.001	0.001	0.005
21	苯甲酸(安息香酸) -TMS	Benzoic acid-TMS	65-85-0	16.028	0.100	0.086	0.338
22	辛酸 -TMS	Octanoic acid-TMS	124-07-2	16.413	0.020	0.018	0.100
23	2-氨基乙醇 -3TMS	2-Aminoethanol-3TMS	141-43-5	16.799	2.372	2.344	1.976
24	亮氨酸 -2TMS	Leucine-2TMS	61-90-5	16.939	0.016	0.026	0.232
25	甘油 -3TMS	Glycerol-3TMS	56-81-5	16.974	0.585	0.604	1.015
26	磷酸 -3TMS	Phosphoric acid-3TMS	7664-38-2	17.009	23.296	27.752	27.634
27	烟酸 -TMS	Nicotinic acid-TMS	59-67-6	17.709	0.021	0.024	0.037

28	异亮氨酸 -2TMS	Isoleucine-2TMS	73-32-5	17.744	0.021	0.031	0.168
29	苯乙酸 -TMS	Phenylacetic acid-TMS	103-82-2	17.811	0.004	0.003	0.006
30	脯氨酸 -2TMS	Proline-2TMS	147-85-3	17.947	0.003	0.003	0.073
31	丁二酸 (琥珀酸) -2TMS	Succinic acid-2TMS	110-15-6	18.183	0.068	0.052	0.081
32	甘氨酸 -3TMS	Glycine-3TMS	56-40-6	18.285	0.444	0.226	0.504
33	甲基丁二酸 (甲基琥珀酸) -2TMS	Methylsuccinic acid-2TMS	498-21-5	18.657	0.001	0.001	0.002
34	甘油酸 -3TMS	Glyceric acid-3TMS	473-81-4	19.063	0.431	0.238	0.316
35	富马酸 -2TMS	Fumaric acid-2TMS	110-17-8	19.266	0.015	0.014	0.026
36	尿嘧啶 -2TMS	Uracil-2TMS	66-22-8	19.299	未检出	未检出	0.005
37	壬酸 -TMS	Nonanoic acid-TMS	112-05-0	19.705	0.057	0.058	0.290
38	丝氨酸 -3TMS	Serine-3TMS	56-45-1	20.010	0.058	0.154	0.498
39	苏氨酸 -3TMS	Threonine-3TMS	72-19-5	20.990	0.054	0.101	0.168
40	戊二酸 -2TMS	Glutaric acid-2TMS	110-94-1	21.223	0.001	0.001	0.004
41	对苯二酚 -2TMS	Hydroquinone-2TMS	123-31-9	21.384	0.002	0.002	0.017
42	胸腺嘧啶 -2TMS	Thymine-2TMS	65-71-4	21.417	未检出	未检出	0.001
43	3-氨基丙酸 -3TMS	3-Aminopropanoic acid-3TMS	107-95-9	22.290	0.007	0.013	0.013
44	癸酸 -TMS	Decanoic acid-TMS	334-48-5	22.969	0.018	0.014	0.084
45	赤藓酮糖 -meto-3TMS(1)	Erythrulose-meto-3TMS(1)	533-50-6	23.680	0.004	0.003	未检出
46	柠草酸 -3TMS	Citramalic acid-3TMS	6236-10-8	23.874	0.002	0.002	0.005
47	赤藓酮糖 -meto-3TMS(2)	Erythrulose-meto-3TMS(2)	533-50-6	24.004	0.003	0.002	0.001
48	苹果酸 -3TMS	Malic acid-3TMS	6915-15-7	24.230	0.074	0.062	0.092
49	己二酸 -2TMS	Adipic acid-2TMS	124-04-9	24.574	0.001	0.002	0.006
50	苏糖醇 -4TMS	Threitol-4TMS	2418-52-2	24.728	0.019	0.018	0.019
51	N-乙酰丝氨酸 -2TMS	N-Acetyls erine-2TMS	16354-58-8	24.759	0.001	0.001	0.001
52	内赤藓醇 -4TMS	meso-Erythritol-4TMS	149-32-6	25.004	0.017	0.015	0.021
53	天冬氨酸 -3TMS	Aspartic acid-3TMS	56-84-8	25.250	0.145	0.291	1.019
54	胞嘧啶 -2TMS	Cytosine-2TMS	71-30-7	25.404	0.002	0.002	0.020
55	5-氧脯氨酸 -2TMS	5-Oxoproline-2TMS	98-79-3	25.404	0.164	0.393	0.972
56	4-氨基丁酸 -3TMS	4-Aminobutyric acid-3TMS	56-12-2	25.619	2.667	2.109	1.707
57	苏糖酸 -4TMS	Threonic acid-4TMS	3909-12-4	26.633	0.035	0.033	0.043
58	2-氧代戊二酸 -meto-2TMS	2-Ketoglutaric acid-meto-2TMS	328-50-7	26.848	0.232	0.216	0.223
59	2-羟基戊二酸 -3TMS	2-Hydroxyglutaric acid-3TMS	13095-48-2	26.909	0.005	0.004	0.006
60	磷酸烯醇式丙酮酸 -3TMS	Phosphoenolpyruvic acid-3TMS	138-08-9	27.753	0.003	0.004	0.006

61	3-羟基-3-甲基戊二酸-3TMS	3-Hydroxy-3-methylglutaric acid-3TMS	503-49-1	27.811	0.001	0.001	0.001
62	谷氨酸-3TMS	Glutamic acid-3TMS	56-86-0	28.250	0.565	1.067	1.786
63	三乙醇胺-3TMS	Triethanolamine-3TMS	102-71-6	28.396	0.025	0.026	0.172
64	4-羟基苯甲酸-2TMS	4-Hydroxybenzoic acid-2TMS	99-96-7	28.483	0.006	0.004	0.015
65	苯基丙氨酸-2TMS	Phenylalanine-2TMS	150-30-1	28.659	未检出	0.007	0.056
66	月桂酸; 十二酸-TMS	Lauric acid-TMS	143-07-7	28.980	0.031	0.029	0.118
67	酒石酸-4TMS	Tartaric acid-4TMS	87-69-4	29.009	0.0002	0.0004	0.001
68	阿拉伯糖-meto-4TMS	Arabinose-meto-4TMS	10323-20-3	29.857	0.025	0.024	0.042
69	核酮糖-meto-4TMS	Ribulose-meto-4TMS	488-84-6	30.266	0.006	0.005	0.008
70	核糖-meto-4TMS	Ribose-meto-4TMS	50-69-1	30.295	0.024	0.029	0.033
71	核糖酸内酯-3TMS	Ribonolactone-3TMS	5336-08-3	30.324	0.012	0.009	0.011
72	1,6-无水葡萄糖-3TMS	1,6-Anhydroglucose-3TMS	498-07-7	31.044	0.058	0.058	0.137
73	2-氨基己二酸-3TMS	2-Aminoadipic acid-3TMS	1118-90-7	31.071	未检出	未检出	0.000478
74	鼠李糖-meto-4TMS(1)	Rhamnose-meto-4TMS(1)	10485-94-6	31.541	0.039	0.033	0.049
75	2-磷酸甘油-4TMS	Glycerol 2-phosphate-4TMS	17181-54-3	31.541	0.007	0.007	0.010
76	阿拉伯糖醇-5TMS	Arabitol-5TMS	488-82-4	31.569	0.007	0.008	0.010
77	2-脱氧葡萄糖-4TMS(1)	2-Deoxy-glucose-4TMS(1)	154-17-6	31.596	0.007	0.006	0.008
78	乌头酸-3TMS	Aconitic acid-3TMS	585-84-2	31.845	0.075	0.031	0.053
79	腐胺; 丁二胺-4TMS	Putrescine-4TMS	110-60-1	31.983	0.161	0.189	0.277
80	岩藻糖-meto-4TMS(2)	Fucose-meto-4TMS(2)	3615-37-0	32.231	0.004	0.003	0.007
81	3-甲氧基-4-羟基苯甲酸-2TMS	3-Methoxy-4-hydroxybenzoic acid-2TMS	121-34-6	32.425	0.008	0.011	0.020
82	甘油-3-磷酸-4TMS	Glycerol 3-phosphate-4TMS	57-03-4	32.508	0.455	0.454	0.542
83	3-脱氢莽草酸-meto-3TMS(1)	3-Dehydroshikimic acid-meto-3TMS(1)	2922-42-1	33.005	0.004	0.006	未检出
84	壬二酸-2TMS	Azelaic acid-2TMS	123-99-9	33.088	0.001	0.001	0.005
85	o-磷酸乙醇胺-4TMS	O-Phosphoethanolamine-4TMS	1071-23-4	33.168	0.002	0.003	0.002
86	2-脱氧葡萄糖-4TMS(2)	2-Deoxy-glucose-4TMS(2)	154-17-6	33.539	2.228	3.276	1.489
87	莽草酸-4TMS	Shikimic acid-4TMS	138-59-0	33.618	0.073	0.104	0.044
88	3-磷酸甘油酸-4TMS	3-Phosphoglyceric acid-4TMS	820-11-1	33.777	0.001	0.003	0.005
89	鸟氨酸-4TMS	Ornithine-4TMS	70-26-8	34.067	0.006	0.006	0.026
90	异柠檬酸-4TMS	Isocitric acid-4TMS	320-77-4	34.147	2.004	1.152	3.321
91	柠檬酸-4TMS	Citric acid-4TMS	77-92-9	34.147	1.994	1.283	3.164
92	十四烷酸-TMS	Myristic acid-TMS	544-63-8	34.438	0.206	0.203	1.473
93	阿洛酮糖-meto-5TMS(1)	Psicose-meto-5TMS(1)	23140-52-5	35.389	0.005	0.006	0.006

94	癸二酸 -2TMS	Sebacic acid-2TMS	111-20-6	35.654	未检出	0.002	0.016
95	山梨糖 -meto-5TMS(1)	Sorbose-meto-5TMS(1)	3615-56-3	35.835	2.664	1.731	1.883
96	果糖 -meto-5TMS(1)	Fructose-meto-5TMS(1)	57-48-7	35.860	3.043	1.768	1.892
97	山梨糖 -meto-5TMS(2)	Sorbose-meto-5TMS(2)	3615-56-3	35.961	2.665	1.731	1.876
98	古洛糖酸 -1,5- 内酯 -4TMS	Glucono-1,5-lactone-4TMS	90-80-2	36.011	0.061	0.062	0.077
99	阿洛糖 -meto-5TMS(1)	Allose-meto-5TMS(1)	2595-97-3	36.011	0.045	0.055	0.066
100	果糖 -meto-5TMS(2)	Fructose-meto-5TMS(2)	57-48-7	36.061	1.852	1.270	1.391
101	葡萄糖 -meto-5TMS(1)	Glucose-meto-5TMS(1)	50-99-7	36.514	5.424	3.786	4.306
102	N- 乙酰谷氨酰胺 -3TMS	N-Acetylglutamine-3TMS	2490-97-3	36.539	0.153	0.095	0.112
103	酪胺 -3TMS	Tyramine-3TMS	51-67-2	36.615	0.048	0.057	0.047
104	阿洛糖 -meto-5TMS(2)	Allose-meto-5TMS(2)	2595-97-3	36.690	5.546	3.829	4.354
105	赖氨酸 -4TMS	Lysine-4TMS	56-87-1	36.741	未检出	未检出	0.009
106	半乳糖 -meto-5TMS(2)	Galactose-meto-5TMS(2)	59-23-4	36.967	0.946	0.630	0.715
107	葡萄糖 -meto-5TMS(2)	Glucose-meto-5TMS(2)	50-99-7	37.042	0.940	0.622	0.681
108	酪氨酸 -3TMS	Tyrosine-3TMS	60-18-4	37.219	未检出	未检出	0.009
109	1- 十六醇 -TMS	1-Hexadecanol-TMS	36653-82-4	37.269	0.009	0.010	0.033
110	甘露糖醇 -6TMS	Mannitol-6TMS	69-65-8	37.420	0.107	0.068	0.140
111	葡萄糖醛酸 -meto-5TMS(1)	Glucuronic acid-meto-5TMS(1)	6556-12-3	37.596	0.004	0.005	0.008
112	山梨糖醇 -6TMS	Sorbitol-6TMS	50-70-4	37.671	0.016	0.015	0.035
113	半乳糖醇 -6TMS	Galactitol-6TMS	608-66-2	37.722	0.007	0.008	0.008
114	半乳糖醛酸 -meto-5TMS(1)	Galacturonic acid -meto-5TMS(1)	14982-50-4	37.772	0.004	0.006	0.008
115	泛酸'; 维生素 B5-3TMS	Pantothenic acid-3TMS	79-83-4	38.612	0.006	0.008	0.009
116	棕榈油酸 -TMS	Palmitoleic acid-TMS	373-49-9	38.949	0.002	0.002	0.017
117	棕榈酸; 十六烷酸 -TMS	Palmitic acid-TMS	57-10-3	39.383	6.286	6.533	34.573
118	葡萄糖二酸 -6TMS	Glucaric acid-6TMS	25525-21-7	39.696	0.034	0.052	0.059
119	N- 乙酰甘露糖胺 -meto-4TMS(1)	N-Acetylmannosamine -meto-4TMS(1)	3615-17-6	41.006	0.004	0.004	0.006
120	肌醇 -6TMS(2)	Inositol-6TMS(2)	87-89-8	41.420	1.954	2.175	2.237
121	5- 磷酸核酮糖 -meto-5TMS(1)	Ribulose 5-phosphate -meto-5TMS(1)	4151-19-3	41.535	0.007	0.008	0.019
122	十七酸 -TMS	Margaric acid-TMS	506-12-7	41.742	0.035	0.046	0.135
123	十八醇 -TMS	Octadecanol-TMS	112-92-5	41.972	0.045	0.029	0.121
124	亚油酸 -TMS	Linoleic acid-TMS	60-33-3	43.382	0.043	0.053	0.205
125	油酸 -TMS	Oleic acid-TMS	112-80-1	43.470	0.028	0.041	0.186

126	硬脂酸-TMS	Stearic acid-TMS	57-11-4	43.955	1.806	1.981	9.965
127	色胺-3TMS	Tryptamine-3TMS	61-54-1	44.264	0.002	未检出	0.005
128	6-磷酸甘露糖-meto-6TMS(1)	Mannose 6-phosphate-meto-6TMS(1)	3672-15-9	46.393	0.029	0.049	0.067
129	6-磷酸甘露糖-meto-6TMS(2)	Mannose 6-phosphate-meto-6TMS(2)	3672-15-9	46.816	0.029	0.049	0.065
130	尿苷-3TMS	Uridine-3TMS	58-96-8	48.991	0.033	0.038	0.072
131	二十二碳六烯酸-TMS	Docosahexaenoic acid-TMS	6217-54-5	50.826	0.004	0.005	0.020
132	腺苷-4TMS	Adenosine-4TMS	58-61-7	52.621	0.033	0.043	0.063
133	蔗糖-8TMS	Sucrose-8TMS	57-50-1	53.280	84.920	95.985	177.099
134	单硬脂酸甘油酯-2TMS	Monostearin-2TMS	123-94-4	54.820	1.0318	0.831	3.360
135	海藻糖-8TMS	Trehalose-8TMS	99-20-7	55.213	0.155	0.162	0.239
136	麦芽糖-meto-8TMS(1)	Maltose-meto-8TMS(1)	69-79-4	55.301	0.048	0.050	0.062

*注：CK 表示对照组水稻样品；NP 表示纳米剂型施药组水稻样品；EC 表示乳油剂型施药组水稻样品。

3.3 水稻植株中代谢物统计学分析

在三组样本中共鉴定了 136 个代谢物衍生产物，主要由氨基酸、有机酸和糖类组成。使用 MetaboAnalyst 软件对每组鉴定的代谢物进行偏最小二乘判别分析 (PLS-DA)。PLS-DA 模型显示出强大的预测和分析能力， $R^2Y=0.948$ ， $Q^2=0.772$ ，如图 2 (a) 所示，纳米剂型施药组 NP、乳油剂型施药组 EC 和对照组 CK 之间均观察到明显的聚类，说明 NP 组、EC 组和 CK 组之间存在明显的差异，表明各组间的代谢物组成存在显著差异。

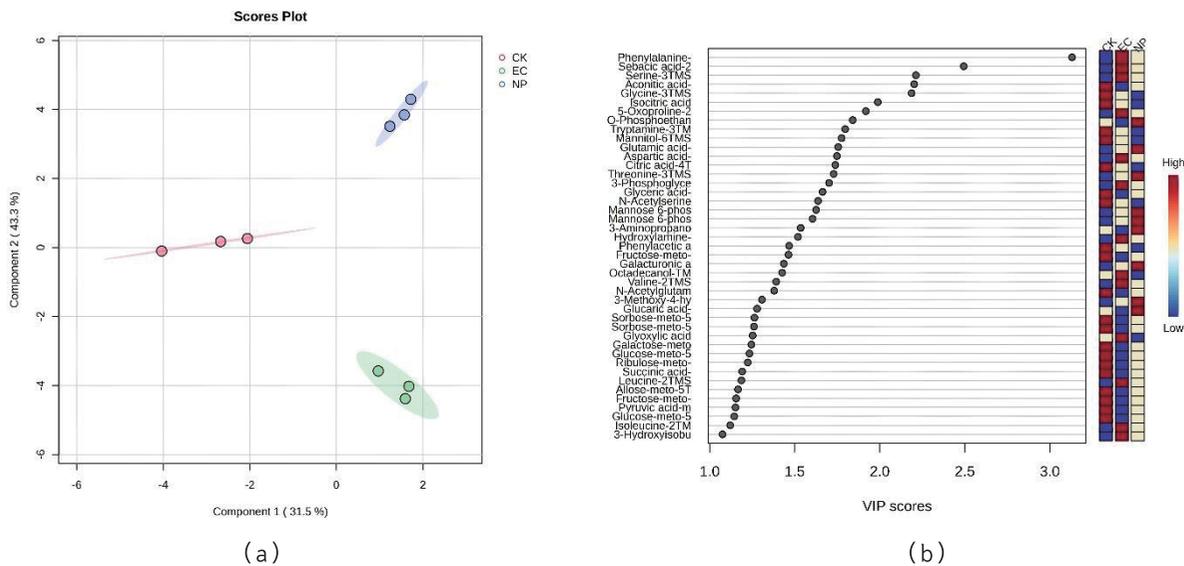


图 3 水稻植株中代谢物 PLS-DA 图 (a) 和 VIP 值图 (b)

基于 PLS-DA 的结果，鉴定代谢物的差异权重贡献值 (VIP) 如图 2 (b) 所示。实验基于 $VIP>1$ 和 p 值 <0.05 的条件筛选差异代谢物 30 个，并绘制差异代谢物热图，如图 3 所示，热图中色块颜色代表对应代谢物含量，红色代表含量高，蓝色代表含量低，由此可直观观察到 NP 组、EC 组和 CK 组之间，差异代谢物的含量发生了明显的变化。

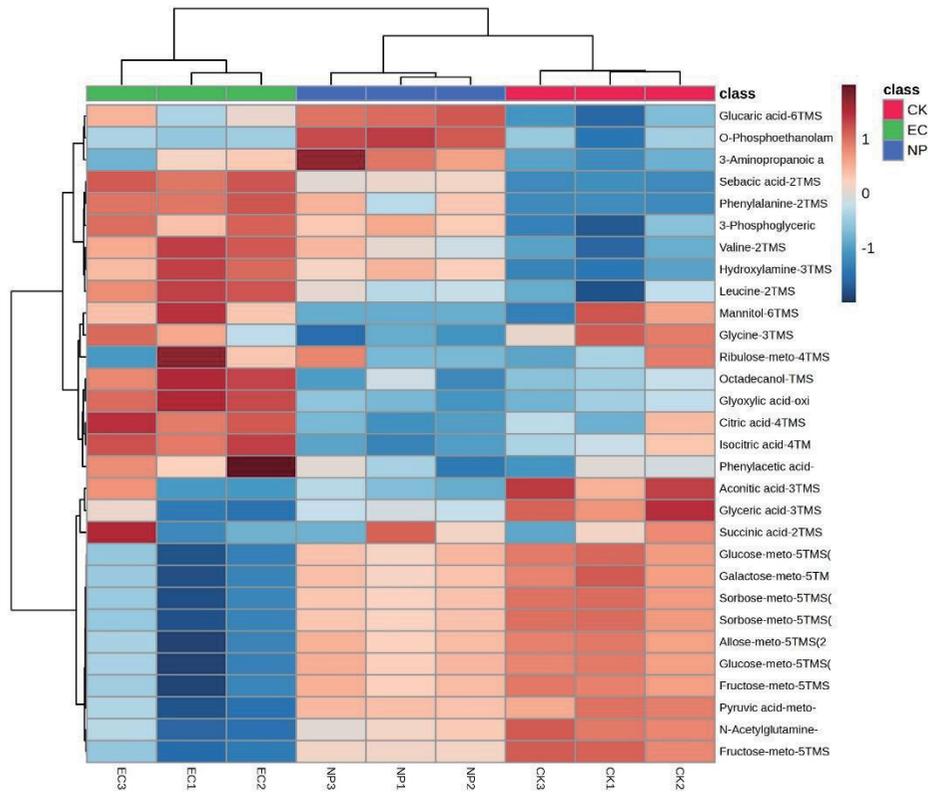


图 4 水稻植株中代谢物聚类热图

■ 结论

本文采用 GCMS-TQ8050 NX 结合代谢物数据库，建立了 467 种代谢物的 MRM 分析方法。对照组、纳米剂型施药组、乳油剂型施药组水稻植株中共鉴定出 136 个代谢物衍生物，其中对照组鉴定代谢物 129 个，纳米剂型施药组鉴定代谢物 130 个，乳油剂型施药组鉴定代谢物 134 个，鉴定代谢物以氨基酸、有机酸和糖类为主。以核糖醇为内标，获得了鉴定代谢物含量，构建 PLS-DA 模型，结果表明，PLS-DA 模型构建良好，施药组和对照组各自处于不同的独立区域；聚类热图可直观观察到差异代谢物在施药组和对照组水稻植株中的变化趋势。本研究可为水稻植株代谢物鉴定提供参考，用以辅助生物信息学分析，阐明代谢通路，继而解析生物代谢机制。

岛津应用云

