

# **Nutzerordnung der Core Unit**

## **Metabolomics (METAB)**

### **der Medizinischen Fakultät der FAU**

(Stand 02.02.2023)

#### **Leistungsumfang**

Die Core Unit "Metabolomics (METAB)" steht allen Arbeitsgruppen der FAU Erlangen-Nürnberg und des Universitätsklinikums Erlangen zur Verfügung.

Die Core Unit führt Untargeted Metabolomics Untersuchungen mittels hochauflösender Massenspektrometrie (Q Exactive Focus Hybrid Quadrupol-Orbitrap, Thermo Fisher) durch. Moleküle in Proben werden mit einer standardisierten Methode mittels zweier verschiedener Prinzipien flüssigchromatographisch aufgetrennt und in negativer und positiver Ionisierung im Massenspektrometer analysiert.

Bei Untargeted Metabolomics werden Moleküle mit einem Molekulargewicht bis zu 1000 Da erfasst. Größere Moleküle (z.B. Peptide) sind nicht zugänglich. Üblicherweise ist die Probenanzahl niedrig, die Analysezeiten im Massenspektrometer jedoch relativ lang (ca. 100 h für 15 Proben). Die Signalintensitäten in unterschiedlichen Gruppen (z.B. Behandlung vs. Placebo oder Knock-Out vs. Wildtyp) werden verglichen und relative Unterschiede statistisch ausgewertet. Die Auswertung durch eine/n wissenschaftlichen Mitarbeiter/in der Core Unit ist der zeitintensivste Teil einer Untargeted Metabolomics Untersuchung. Der tatsächliche Zeitaufwand variiert je nach Fragestellung, Probenmatrix und -anzahl.

Die Ergebnisse umfassen keine absoluten Konzentrationsangaben für einzelne Moleküle. Solche Targeted Metabolomics sind nicht im Leistungsumfang der Core Unit beinhaltet, können jedoch bei Bedarf in separaten wissenschaftlichen Kooperationen mit der Massenspektrometrie-Einheit des Lehrstuhls für Klinische Pharmakologie und Klinische Toxikologie durchgeführt werden.

#### **Kosten**

Die Core Unit wird durch die Medizinische Fakultät der FAU und den Lehrstuhl für Klinische Pharmakologie und Klinische Toxikologie finanziert. Die Kosten für die Inanspruchnahme der angebotenen Leistungen werden anhand der aktuellen Preisliste berechnet. Die Rechnungsstellung erfolgt nach Übermittlung der vorläufigen Ergebnisse (s. auch „Auswertung der Daten“). Für die Erstellung von Drittmittelansuchen o.ä. können auf Anfrage Kostenvoranschläge erstellt werden.

#### **Versuchsplanung und Proben-Management**

Zur Inanspruchnahme der Leistungen der Core Unit muss zunächst das Anfrageformular ausgefüllt werden (siehe Homepage).

Vor Beginn jeglicher Experimente ist eine enge Absprache mit der Leitung der Core Unit notwendig. Eine Untargeted Metabolomics Untersuchung beginnt lange vor der massenspektrometrischen Untersuchung bereits mit dem Design der Experimente.

Die Koordination der zur Verfügung stehenden Messzeiten wird durch die Leitung der Core Unit übernommen. Primär werden Projekte in der Reihenfolge des Eingangs bearbeitet.

### **Auswertung der Daten**

Die Rohdaten eines Projekts werden sowohl lokal als auch serverbasiert doppelt gesichert.

Die durch die massenspektrometrische Analyse der Proben erhaltenen Rohdaten werden mittels der Software Compound Discoverer™ von einer/m wissenschaftlichen Mitarbeiter/in der Core Unit ausgewertet. U.a. erfolgt ein Vergleich der Signalintensitäten verschiedener detektierter Moleküle zwischen den zu untersuchenden Gruppen und es werden Vorschläge zu möglichen Identitäten gemacht. Nach eingehender Prüfung und Datenbereinigung werden dem Nutzer die vorläufigen Ergebnisse in einer tabellarischen Übersicht (Excel) mitgeteilt. Auf Wunsch kann eine ausführliche Besprechung der Ergebnisse mit der/dem verantwortlichen wissenschaftlichen Mitarbeiter/in erfolgen.

Aufgrund der Komplexität von Untargeted Metabolomics Analysen, insbesondere bei der Versuchsplanung und den sehr aufwändigen Auswertungen der großen Datensätze durch Wissenschaftler/innen mit eingehenden Kenntnissen in den Bereichen Metabolismus/Chemie/Pharmazie, handelt es sich nicht um eine reine Serviceleistung, sondern die Zusammenarbeit ist als eine wissenschaftliche Kooperation zu verstehen.

Die Beteiligung der Core Unit an den Projekten sollte bei wissenschaftlichen Veröffentlichungen berücksichtigt werden. Rechtfertigt der Umfang der Beteiligung eine Co-Autorenschaft, so sind der/die beteiligten Wissenschaftler/innen bei der Erstellung der Publikation zu beteiligen. Jede andere Form der Beteiligung ist im Acknowledgement der Publikation zu erwähnen.

### **Ansprechpartner**

Nach Anmeldung wird die Planung von Projekten von der Leitung der Massenspektrometrie-Einheit des Lehrstuhls für Klinische Pharmakologie und Klinische Toxikologie gemeinsam mit den Kooperationspartnern durchgeführt. Wenden Sie sich dazu bitte an Frau Dr. Nora Vogg ([nora.vogg@fau.de](mailto:nora.vogg@fau.de)) oder Herrn Dr. Arne Gessner ([arne.gessner@fau.de](mailto:arne.gessner@fau.de)). Wichtige Informationen zum Projekt sollten in das Antragsformular (siehe Homepage) eingetragen werden. Bei Bedarf können Sie sich sehr gerne auch an Herr Prof. Dr. Martin Fromm wenden.