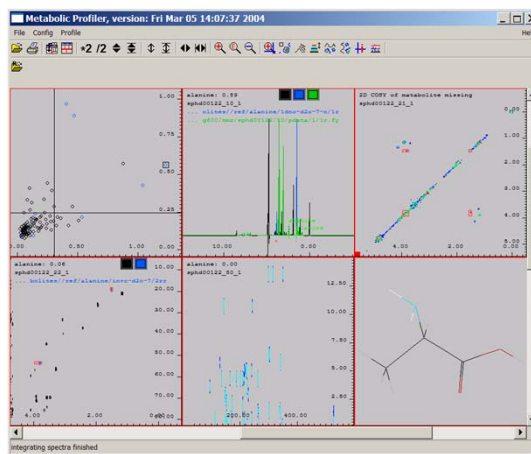
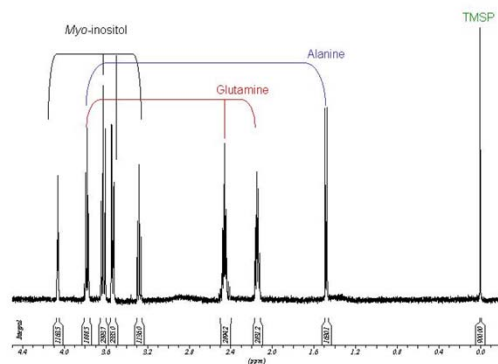


Metabolite Identification



INTEGRATION



$$Cx = \frac{Ix : Nx \times C}{I : 9} \times V : M$$

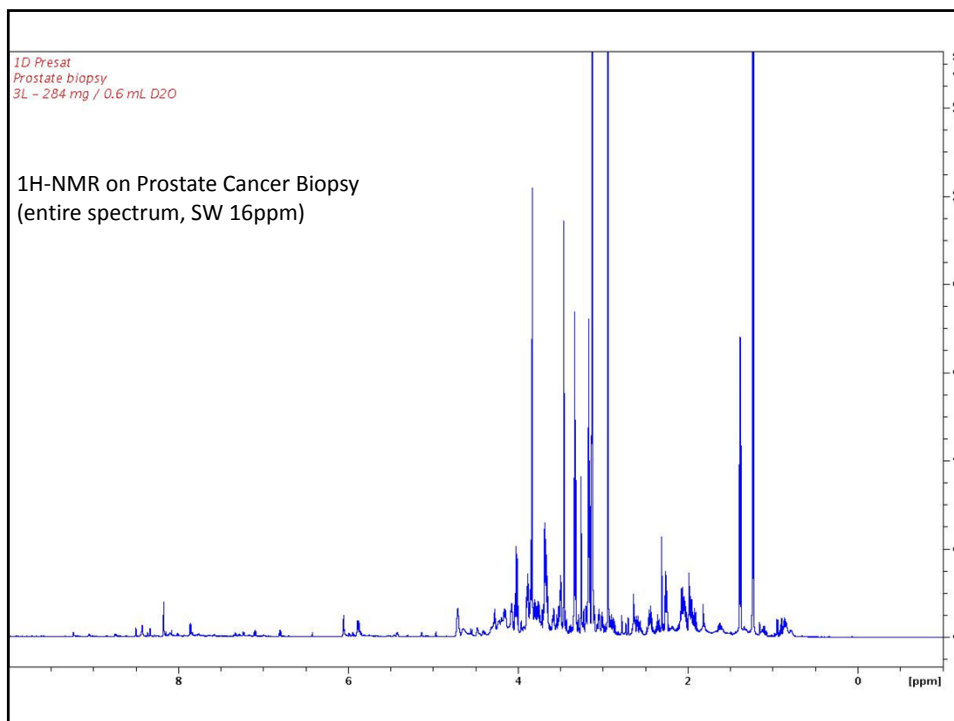
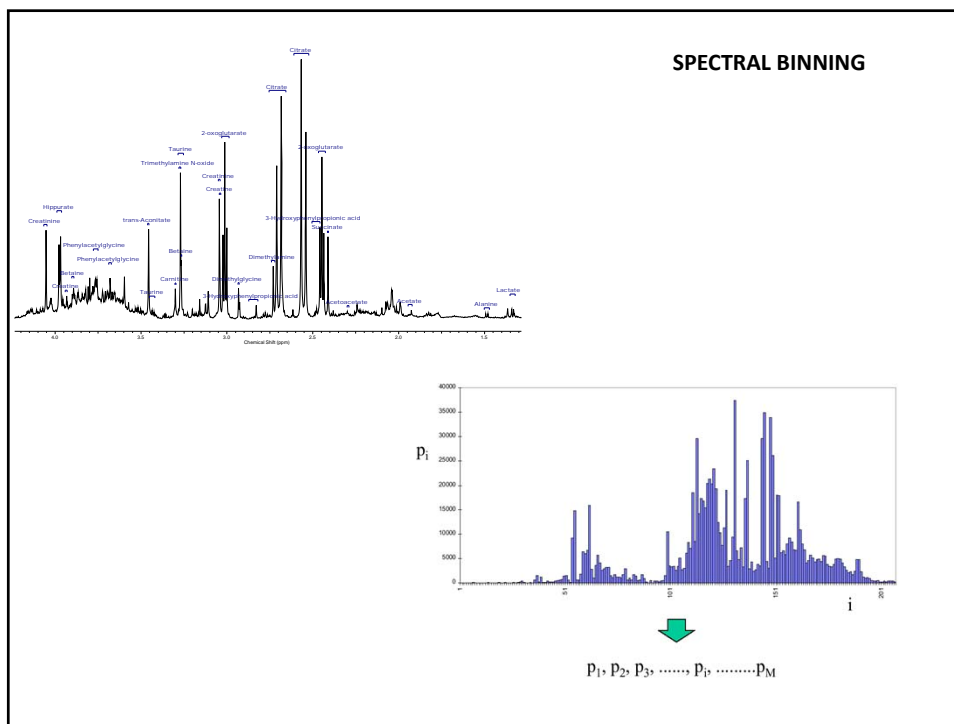
TSP Calculation

Integral List
 File Name: e:\standa-1\1305n2a\1\FID.1R
 Date: 29.05.2013 Time: 16:20
 Integration regions saved in File: -

600 MHz, N2

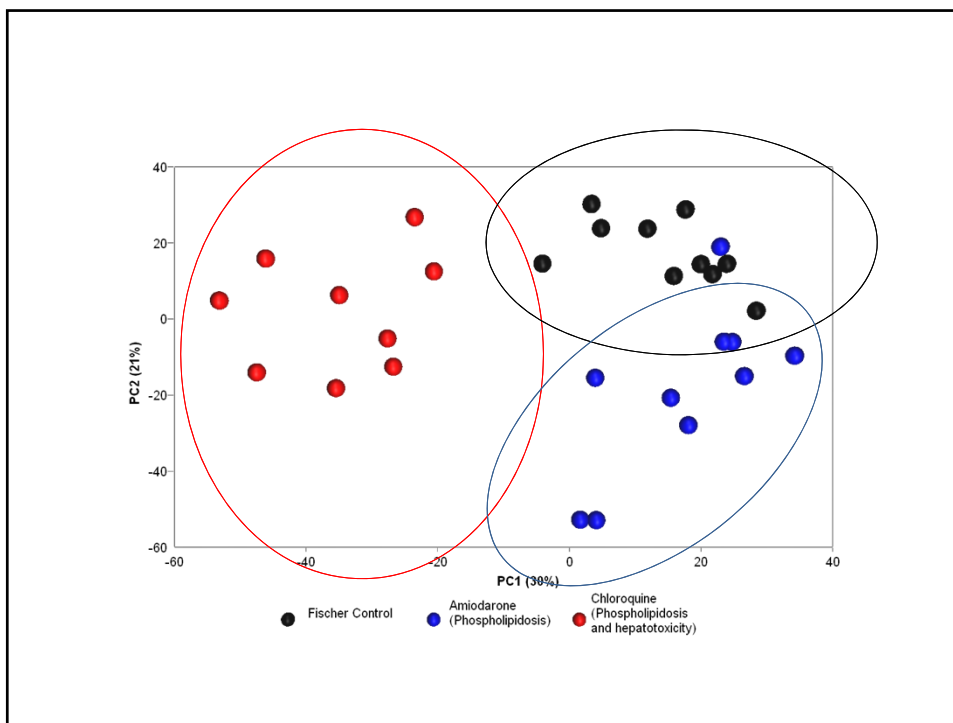
Metabolite	Protons	Start(ppm)	Start(Hz)	End(ppm)	End(Hz)	Integral(nor m)	Integral(ab s)	C of TSP
Myo-Inositol	1	4.1112	1233.89	4.0126	1204.3	979.93	2.68E+06	0.5102405
Creatine	2	3.9841	1195.75	3.8855	1166.15	1838.74	5.03E+06	0.5438506
Alanine	2	3.8409	1152.78	3.7116	1113.97	1963.78	5.37E+06	0.5092220
Myo-Inositol	2	3.6736	1102.57	3.5648	1069.9	2265.92	6.20E+06	0.4413219
Myo-Inositol	2	3.5619	1069.03	3.464	1039.65	2109.94	5.77E+06	0.4739471
Myo-Inositol	1	3.3471	1004.57	3.201	960.72	1232.1	3.37E+06	0.4058112
Creatine	3	3.1426	943.19	2.96	888.38	2987.35	8.18E+06	0.5021172
Glutamine	2	2.5706	771.52	2.3537	706.41	2370.92	6.49E+06	0.4217772
Glutamine	2	2.258	677.69	2.0571	617.4	2348.64	6.43E+06	0.4257783
Alanine	3	1.6517	495.73	1.3953	418.77	3225.3	8.83E+06	0.4650730
TSP	9	0.0987	29.63	-0.0437	-13.12	900	2.46E+06	0.470

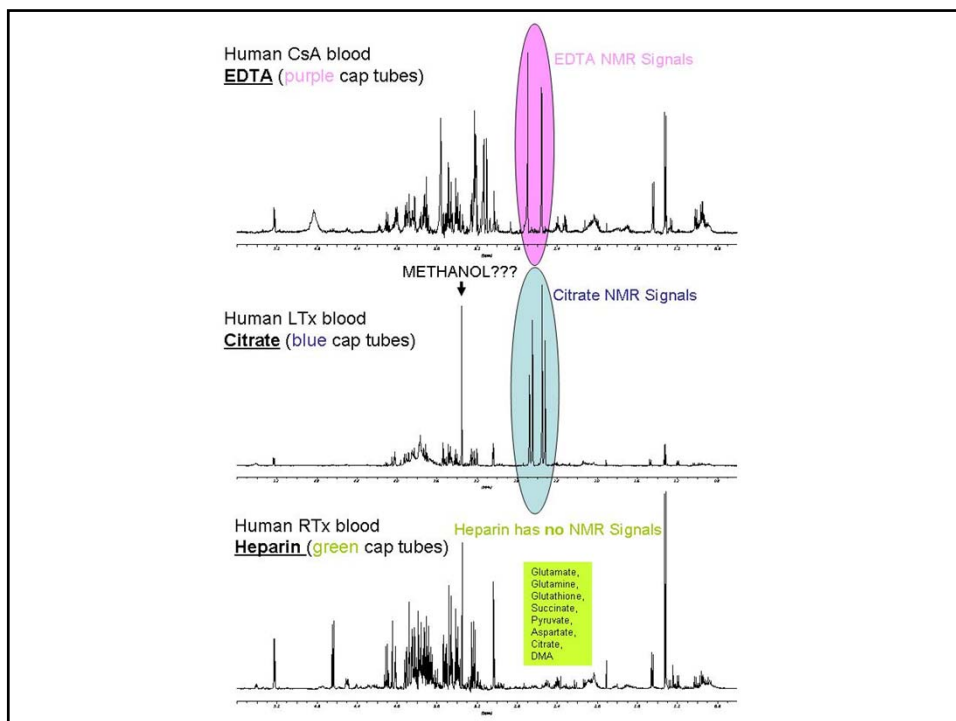
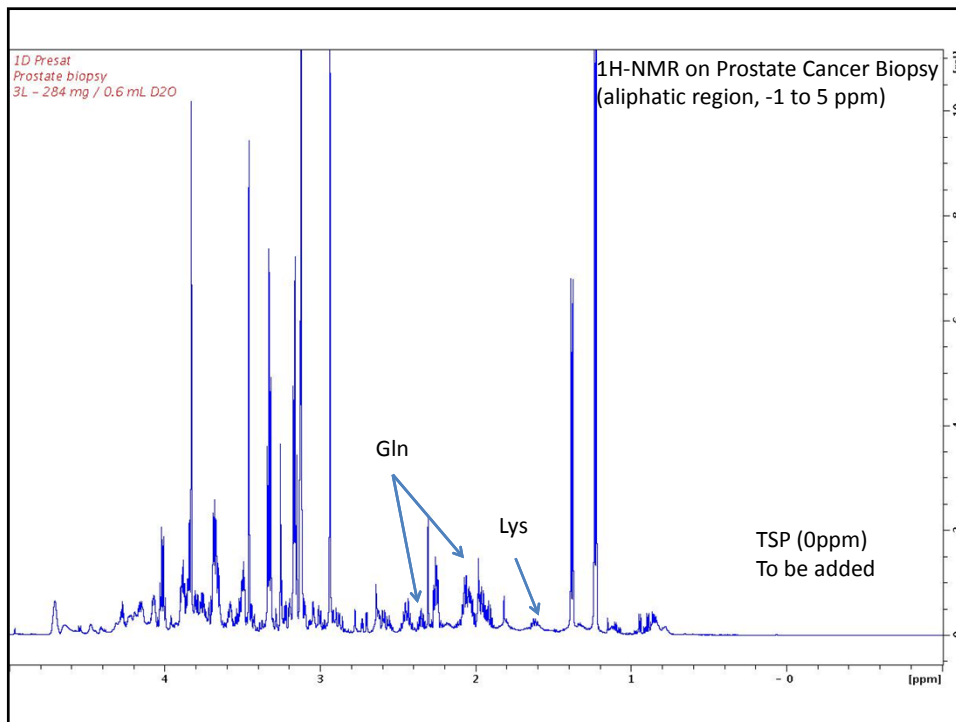
0.0458336
61 mM

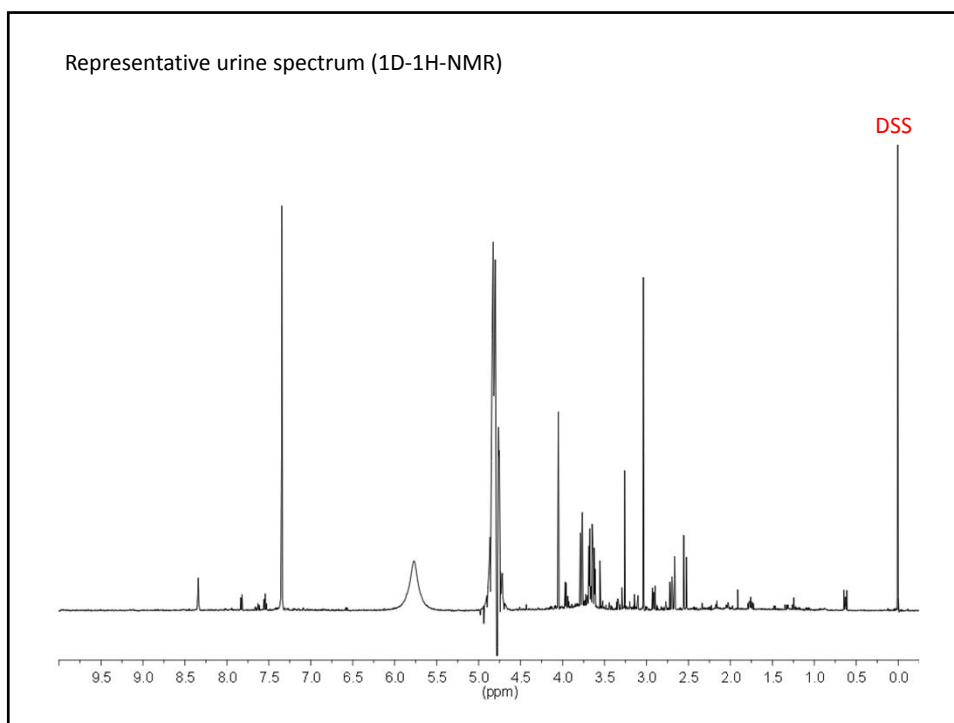
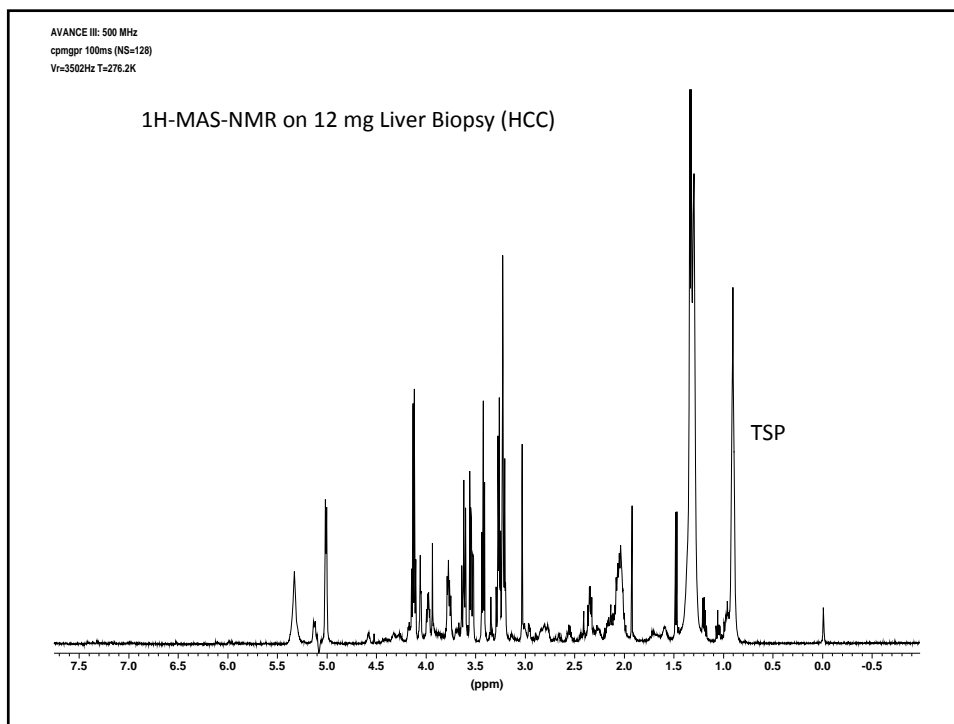


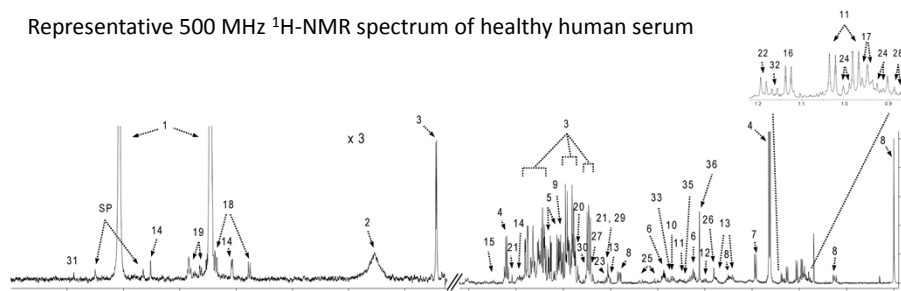
SPECTRAL BINS

Bin	Start	End	Center	Width	Area	Height	Volume
1	0.000	0.005	0.0025	0.005	0.000	0.000	0.000
2	0.005	0.010	0.0075	0.005	0.000	0.000	0.000
3	0.010	0.015	0.0125	0.005	0.000	0.000	0.000
4	0.015	0.020	0.0175	0.005	0.000	0.000	0.000
5	0.020	0.025	0.0225	0.005	0.000	0.000	0.000
6	0.025	0.030	0.0275	0.005	0.000	0.000	0.000
7	0.030	0.035	0.0325	0.005	0.000	0.000	0.000
8	0.035	0.040	0.0375	0.005	0.000	0.000	0.000
9	0.040	0.045	0.0425	0.005	0.000	0.000	0.000
10	0.045	0.050	0.0475	0.005	0.000	0.000	0.000
11	0.050	0.055	0.0525	0.005	0.000	0.000	0.000
12	0.055	0.060	0.0575	0.005	0.000	0.000	0.000
13	0.060	0.065	0.0625	0.005	0.000	0.000	0.000
14	0.065	0.070	0.0675	0.005	0.000	0.000	0.000
15	0.070	0.075	0.0725	0.005	0.000	0.000	0.000
16	0.075	0.080	0.0775	0.005	0.000	0.000	0.000
17	0.080	0.085	0.0825	0.005	0.000	0.000	0.000
18	0.085	0.090	0.0875	0.005	0.000	0.000	0.000
19	0.090	0.095	0.0925	0.005	0.000	0.000	0.000
20	0.095	0.100	0.0975	0.005	0.000	0.000	0.000
21	0.100	0.105	0.1025	0.005	0.000	0.000	0.000
22	0.105	0.110	0.1075	0.005	0.000	0.000	0.000
23	0.110	0.115	0.1125	0.005	0.000	0.000	0.000
24	0.115	0.120	0.1175	0.005	0.000	0.000	0.000
25	0.120	0.125	0.1225	0.005	0.000	0.000	0.000
26	0.125	0.130	0.1275	0.005	0.000	0.000	0.000
27	0.130	0.135	0.1325	0.005	0.000	0.000	0.000
28	0.135	0.140	0.1375	0.005	0.000	0.000	0.000
29	0.140	0.145	0.1425	0.005	0.000	0.000	0.000
30	0.145	0.150	0.1475	0.005	0.000	0.000	0.000
31	0.150	0.155	0.1525	0.005	0.000	0.000	0.000
32	0.155	0.160	0.1575	0.005	0.000	0.000	0.000
33	0.160	0.165	0.1625	0.005	0.000	0.000	0.000
34	0.165	0.170	0.1675	0.005	0.000	0.000	0.000
35	0.170	0.175	0.1725	0.005	0.000	0.000	0.000
36	0.175	0.180	0.1775	0.005	0.000	0.000	0.000
37	0.180	0.185	0.1825	0.005	0.000	0.000	0.000
38	0.185	0.190	0.1875	0.005	0.000	0.000	0.000
39	0.190	0.195	0.1925	0.005	0.000	0.000	0.000
40	0.195	0.200	0.1975	0.005	0.000	0.000	0.000
41	0.200	0.205	0.2025	0.005	0.000	0.000	0.000
42	0.205	0.210	0.2075	0.005	0.000	0.000	0.000
43	0.210	0.215	0.2125	0.005	0.000	0.000	0.000
44	0.215	0.220	0.2175	0.005	0.000	0.000	0.000
45	0.220	0.225	0.2225	0.005	0.000	0.000	0.000
46	0.225	0.230	0.2275	0.005	0.000	0.000	0.000
47	0.230	0.235	0.2325	0.005	0.000	0.000	0.000
48	0.235	0.240	0.2375	0.005	0.000	0.000	0.000
49	0.240	0.245	0.2425	0.005	0.000	0.000	0.000
50	0.245	0.250	0.2475	0.005	0.000	0.000	0.000
51	0.250	0.255	0.2525	0.005	0.000	0.000	0.000
52	0.255	0.260	0.2575	0.005	0.000	0.000	0.000
53	0.260	0.265	0.2625	0.005	0.000	0.000	0.000
54	0.265	0.270	0.2675	0.005	0.000	0.000	0.000
55	0.270	0.275	0.2725	0.005	0.000	0.000	0.000
56	0.275	0.280	0.2775	0.005	0.000	0.000	0.000
57	0.280	0.285	0.2825	0.005	0.000	0.000	0.000
58	0.285	0.290	0.2875	0.005	0.000	0.000	0.000
59	0.290	0.295	0.2925	0.005	0.000	0.000	0.000
60	0.295	0.300	0.2975	0.005	0.000	0.000	0.000
61	0.300	0.305	0.3025	0.005	0.000	0.000	0.000
62	0.305	0.310	0.3075	0.005	0.000	0.000	0.000
63	0.310	0.315	0.3125	0.005	0.000	0.000	0.000
64	0.315	0.320	0.3175	0.005	0.000	0.000	0.000
65	0.320	0.325	0.3225	0.005	0.000	0.000	0.000
66	0.325	0.330	0.3275	0.005	0.000	0.000	0.000
67	0.330	0.335	0.3325	0.005	0.000	0.000	0.000
68	0.335	0.340	0.3375	0.005	0.000	0.000	0.000
69	0.340	0.345	0.3425	0.005	0.000	0.000	0.000
70	0.345	0.350	0.3475	0.005	0.000	0.000	0.000
71	0.350	0.355	0.3525	0.005	0.000	0.000	0.000
72	0.355	0.360	0.3575	0.005	0.000	0.000	0.000
73	0.360	0.365	0.3625	0.005	0.000	0.000	0.000
74	0.365	0.370	0.3675	0.005	0.000	0.000	0.000
75	0.370	0.375	0.3725	0.005	0.000	0.000	0.000
76	0.375	0.380	0.3775	0.005	0.000	0.000	0.000
77	0.380	0.385	0.3825	0.005	0.000	0.000	0.000
78	0.385	0.390	0.3875	0.005	0.000	0.000	0.000
79	0.390	0.395	0.3925	0.005	0.000	0.000	0.000
80	0.395	0.400	0.3975	0.005	0.000	0.000	0.000
81	0.400	0.405	0.4025	0.005	0.000	0.000	0.000
82	0.405	0.410	0.4075	0.005	0.000	0.000	0.000
83	0.410	0.415	0.4125	0.005	0.000	0.000	0.000
84	0.415	0.420	0.4175	0.005	0.000	0.000	0.000
85	0.420	0.425	0.4225	0.005	0.000	0.000	0.000
86	0.425	0.430	0.4275	0.005	0.000	0.000	0.000
87	0.430	0.435	0.4325	0.005	0.000	0.000	0.000
88	0.435	0.440	0.4375	0.005	0.000	0.000	0.000
89	0.440	0.445	0.4425	0.005	0.000	0.000	0.000
90	0.445	0.450	0.4475	0.005	0.000	0.000	0.000
91	0.450	0.455	0.4525	0.005	0.000	0.000	0.000
92	0.455	0.460	0.4575	0.005	0.000	0.000	0.000
93	0.460	0.465	0.4625	0.005	0.000	0.000	0.000
94	0.465	0.470	0.4675	0.005	0.000	0.000	0.000
95	0.470	0.475	0.4725	0.005	0.000	0.000	0.000
96	0.475	0.480	0.4775	0.005	0.000	0.000	0.000
97	0.480	0.485	0.4825	0.005	0.000	0.000	0.000
98	0.485	0.490	0.4875	0.005	0.000	0.000	0.000
99	0.490	0.495	0.4925	0.005	0.000	0.000	0.000
100	0.495	0.500	0.4975	0.005	0.000	0.000	0.000

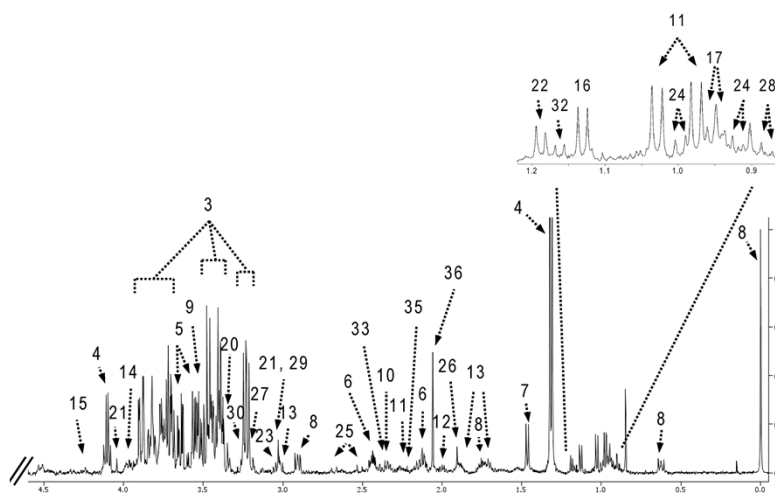






Representative 500 MHz $^1\text{H-NMR}$ spectrum of healthy human serum

Numbers indicate the following metabolites: 1, imidazole; 2, urea; 3, D-glucose; 4, L-lactic acid; 5, glycerol; 6, L-glutamine; 7, L-alanine; 8, DSS; 9, glycine; 10, L-glutamic acid; 11, L-valine; 12, L-proline; 13, L-lysine; 14, L-histidine; 15, L-threonine; 16, propylene glycol; 17, L-leucine; 18, L-tyrosine; 19, L-phenylalanine; 20, methanol; 21, creatinine; 22, 3-hydroxybutyric acid; 23, ornithine; 24, L-isoleucine; 25, citric acid; 26, acetic acid; 27, carnitine; 28, 2-hydroxybutyric acid; 29, creatine; 30, betaine; 31, formic acid; 32, isopropyl alcohol; 33, pyruvic acid; 34, choline; 35, acetone; 36, glycerol.



Numbers indicate the following metabolites: 1, imidazole; 2, urea; 3, D-glucose; 4, L-lactic acid; 5, glycerol; 6, L-glutamine; 7, L-alanine; 8, DSS; 9, glycine; 10, L-glutamic acid; 11, L-valine; 12, L-proline; 13, L-lysine; 14, L-histidine; 15, L-threonine; 16, propylene glycol; 17, L-leucine; 18, L-tyrosine; 19, L-phenylalanine; 20, methanol; 21, creatinine; 22, 3-hydroxybutyric acid; 23, ornithine; 24, L-isoleucine; 25, citric acid; 26, acetic acid; 27, carnitine; 28, 2-hydroxybutyric acid; 29, creatine; 30, betaine; 31, formic acid; 32, isopropyl alcohol; 33, pyruvic acid; 34, choline; 35, acetone; 36, glycerol.

