

Agilent MassHunter BioConfirm ソフトウェア



Agilent MassHunter BioConfirm は、アジレントの Q-TOF や TOF ベースの LC/MS データと連動して使用できる、最先端のソフトウェアパッケージです。組み換え抗体のキャラクタリゼーション、合成ペプチドの確認など、生物工学ラボでの重要性が高いタンパク質/ペプチドのキャラクタリゼーションに適しています。新しい BioConfirm ソフトウェア (バージョン B.04.00) は、より正確なペプチドマッピングキャラクタリゼーション、視覚的な差異解析、修飾の同定などを可能にします。こうした分析は、大型のタンパク質の分析をおこなう生物工学ラボで重要となります。

### MassHunter BioConfirm の特長

各種の研究には、ペプチドマッピング分析のデータ処理を高速かつ効率よく、効果的におこなうことのできる、使いやすいソフトウェアが求められます。生物工学的に合成されたタンパク質のバッチ間の違いを確認するためには、視覚的に比較する必要があります。アジレントでは、こうした機能を新しい BioConfirm で提供しています。この新バージョンのソフトウェアと、アジレントの最先端の MS/MS 精密質量分析機能を組み合わせれば、生物工学サンプルのキャラクタリゼーションに対応する、業界最高の完璧なソリューションが実現します。

### 生物工学分析に対応した新機能

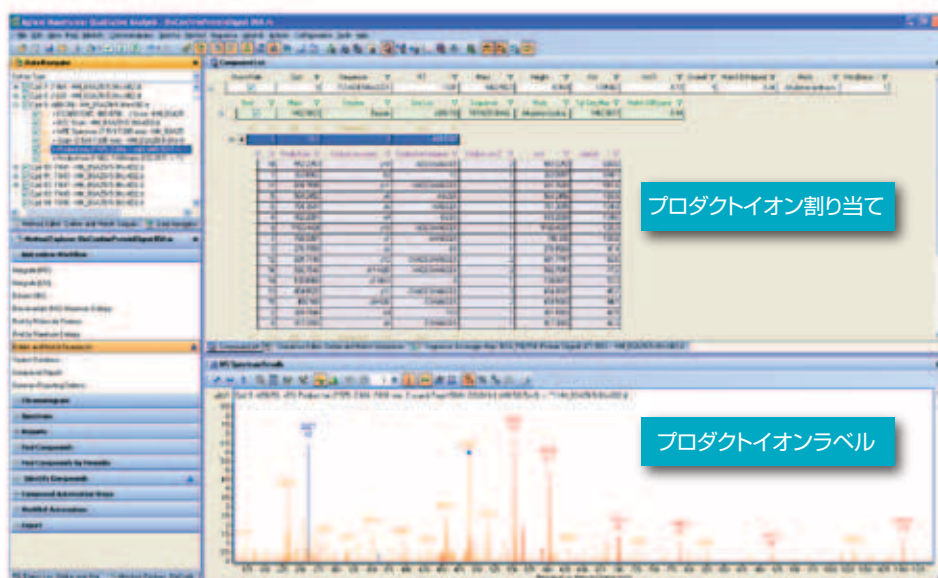
新しい MassHunter BioConfirm B.04.00 ソフトウェアでは、これまで以上に包括的なペプチドマップのキャラクタリゼーションが可能で、ペプチドの MS/MS スペクトルを用いてアミノ酸配列カバレッジを確認することができます。既存の BioConfirm 機能の詳細については、別の資料 (資料番号 5990-5096JAJP、「Agilent MassHunter BioConfirm ソフトウェアを用いたペプチドおよびタンパク質特性解析の効率化と精度の向上」) で紹介しています。この資料で

は、既知の修飾のシーケンスや定義を簡単に設定できる Sequence Editor (シーケンスエディター) や、予想されるタンパク質修飾の確認や未知のシーケンス修飾の同定に使用する Sequence Matcher (シーケンスマッチャー) といったペプチドマッピング機能を説明しています。また、ペプチドマッピングに役立つその他のツールも紹介しています。この文献では今後、BioConfirm B.04.00 に導入された新機能も取り上げる予定です。

### 高速データ操作を可能にする パワフルなキャラクタリゼーション機能

ペプチド MS/MS スペクトルプロダクトイオンアサインメント (以下のスクリーンショット参照) が導入されました。これをアジレントの MS/MS モードの Q-TOF 精密質量分析データと組み合わせると、パワフルなキャラクタリゼーション機能が実現します。この専用ソフトウェアモジュールを使えば、理論上のペプチドとのマッチの近似性を判断し、ペプチド MS/MS スペクトルプロダクトイオン (b、y、イミニウムイオン) を割り当てることができます。この BioConfirm 機能の拡張により、共通のソフトウェアパッケージでペプチドマッピングの MS/MS データを処理することが可能になるため、データの操作が高速化します。

同定されたペプチドは、MS/MS スペクトルにおいてマッチするすべての b、y、イミニウムイオンとともに、化合物テーブルに表示されます。MS/MS スペクトルは、割り当てられた b (青)、y (赤)、イミニウムイオン (緑) により、自動的にラベリングされます。



## 複数のサンプルのマッチと対比を容易にする 視覚的なデータ比較

MassHunter BioConfirm の新しい Comparative Analysis (比較分析) 機能は、合成タンパク質の 2 つのバッチなど、2 種類のサンプルの分析に役立ちます。こうした分析は、生物工学分析には欠かせません。この新機能を使えば、2 つのサンプルから得られた複数の LC/MS 分析結果を視覚的に

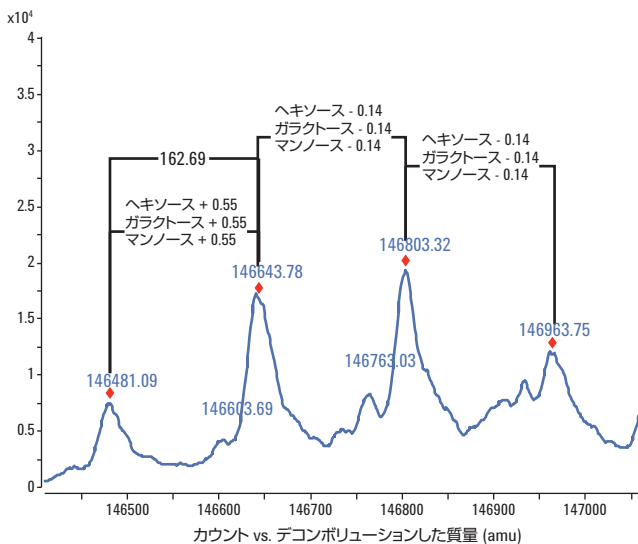
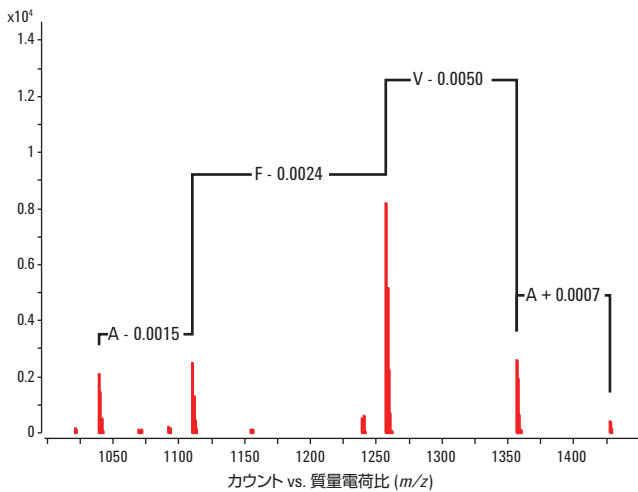
に直接比較できます。ミラープロットや表による比較を用いれば、サンプルを視覚的に簡単に比較できます。ペプチドマッピングワークフローでは、化合物をターゲットタンパク質消化物シーケンスとマッチングし、ペプチドを同定したのちにサンプルファイルと比較します。以下の表は、2 サンプル (リファレンス (R) とサンプル (S)) 間の化合物中心の比較を示しています。クロマトグラムのミラープロットを左下に示しています。



比較表は、3 つのセクションに分かれた見やすいレイアウトになっています。1 つ目のセクション (紫) は、両方のサンプルに共通する特徴を示しています。各列がひとつひとつの特徴を表しています。両方のサンプルに見られる特徴については、相対アブダンス比、フォールドチェンジの増減、RT 差、質量差が示されています。残りの 2 つのセクション (ピンクと青) は、各サンプルで特異的に検出された化合物の特性を示しています。この表画面では、2 つのサンプルの分析結果を一目で比較することができます。Chromatogram Compare (クロマトグラム比較) ウィンドウでは、各化合物の TIC、BPC、TCC (トータル化合物クロマトグラム)、ECC (抽出化合物クロマトグラム)、EIC のミラープロットが表示されます。これにより、サンプルレベルでも、化合物レベルでも、視覚的な比較が可能です。MS および MS/MS Spectrum Compare Results (スペクトル比較結果) ウィンドウでは、それぞれのスペクトルを視覚的に比較できます。

## タンパク質修飾を簡単に特定

Delta Mass Ruler (デルタ質量ルーラー) は、ゼロ電荷スペクトルにおけるピーク間のデルタ質量、アミノ酸、修飾を表示します。これらの質量差は、割り当てや特定が容易です。こうした差については、下のスクリーンショットで注釈がつけられます。修飾は、ユーザーのニーズに応じて、プロフィールスペクトルの「ピーク間」または「ポイント間」で表示できます。色や大きさといったテキストラベルのプロパティを変更し、変化を強調することもできます。この使いやすいツールにより、ペプチドおよびタンパク質修飾の迅速なキャラクター化やアノテーションが実現します。



Delta Mass Ruler は、ピーク間の差を質量、アミノ酸、修飾としてラベリングします。これにより、2つのピーク間の関連性を迅速に解釈することが可能です。

## 信頼性を高めるアジレントのソフトウェア

Agilent MassHunter BioConfirm ソフトウェアは、LC/MS 機器を操作し、パワフルな分析機能を提供するアジレントの包括的な統合型ソフトウェア製品群の一部です。アジレントは、きわめて困難な科学分析を支援する使いやすいソフトウェアを提供し、分析の信頼性を高めることに尽力しています。アジレントの目標は、機器の耐用年数全体をつうじてお客様をサポートし、つねに変化する分析上の問題への対応を支援することです。

### 詳細

#### ホームページ:

[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

#### カスタムコンタクトセンタ:

フリーダイヤル 0120-477-111

または、アジレント営業担当あるいは販売店までお問い合わせください。

アジレントは、本文書に誤りが発見された場合、また、本文書の使用により付随的または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。本文書に記載されている情報は、予告なく変更されることがあります。また、本文書掲載の機器類は薬事法に基づく登録を行っておりません。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2011

Published in Japan, February 18, 2011

5990-7414JAJP



Agilent Technologies