

Fiehn GC/MS メタボロミクス RTL ライブラリ

より多くの代謝物を同定

The Measure of Confidence



Agilent Technologies



代謝物同定のための 包括的な GC/MS ソリューション

アジレントは、メタボロミクス分野でターゲット化合物以外の既知代謝物の同定を容易にするために Fiehn GC/MS メタボロミクス RTL ライブラリ (2013 年版) の提供を開始しました。この新しい、リテンションタイムロッキング (RTL) メタボロミクスライブラリは、Oliver Fiehn 博士の研究室との協力によって開発されました。ライブラリには、2008 年版ライブラリよりも約 40 % 増えた 1400 スペクトルの GC/MS EI スペクトルとリテンションタイムインデックス収録されています。

Fiehn GC/MS ライブラリの主な特長：

さらに確実な代謝物の同定：リテンションタイムが安定したアジレント GC と、正確なマススペクトルのアジレント質量分析装置のデータにより、さらに多くの化合物をライブラリ検索で同定できるようになりました。

ライブラリの拡張：900 の一般的な代謝物とその誘導体化した 1400 以上の GC/MS EI スペクトルおよびリテンションタイムインデックスが含まれます。

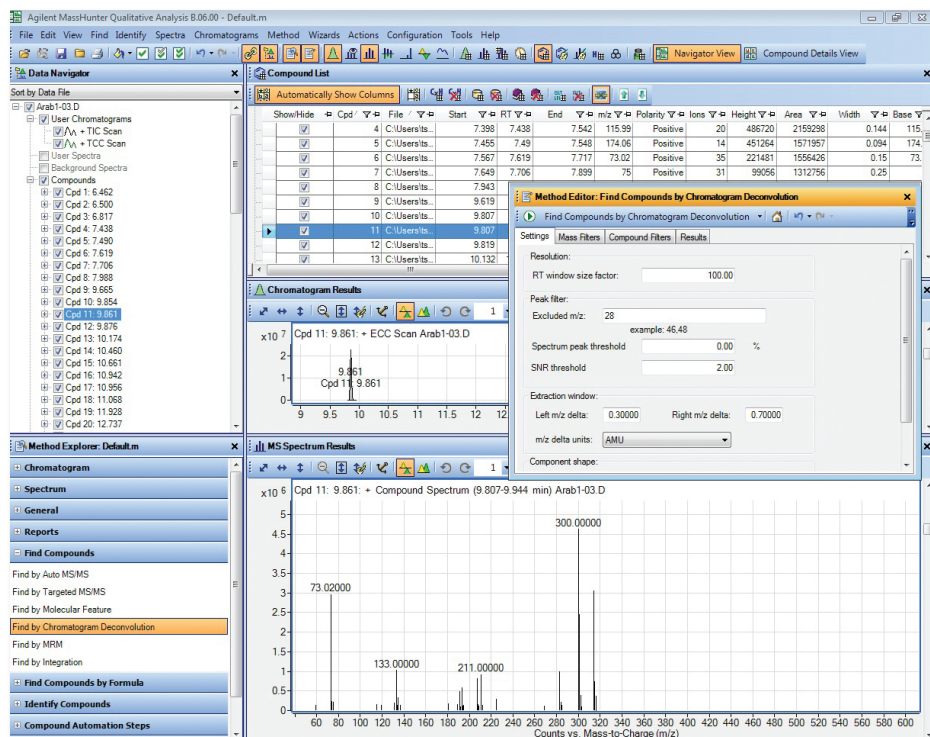
使いやすいワークフロー：GC/MS の測定に最適化された推奨 GC/MS 分析メソッドや解析を説明したマニュアルが収録されています。マトリクスが多いサンプルに威力を発揮する GC/MS のバックフラッシュにも対応します。

パワフルなソフトウェア：MassHunter、ChemStation Data Analysis、および AMDIS で完全にサポートされています。

最も包括的なメタボロミクス GC/MS スペクトルライブラリ

拡張されたライブラリにより、さらに多くの化合物同定に対応

Fiehn GC/MS メタボロミクス RTL ライブラリ (2013 年版) は、最も包括的な市販の代謝物 GC/MS スペクトルライブラリです。この進化し続けるライブラリは、現時点で約 900 の一般的な代謝物だけでなく、必ずしも完全には誘導体化されない代謝物のために、一部が誘導体化された代謝物の 1400 を超える EI マススペクトルを収録しています。各マススペクトルには検索可能な EI スペクトルとリテンションインデックスの情報が含まれます。さらに、化合物の同定や、その後の文献やソフトウェアの検索がしやすいようにオリジナルの化合物名と CAS 番号も含まれます。



Agilent MassHunter Qualitative Analysis ソフトウェアは、GC/MS データファイルのピーク検出とライブラリマッチングを使用した化合物の同定をサポートしています。

GC バックフラッシュによる高品質のデータ

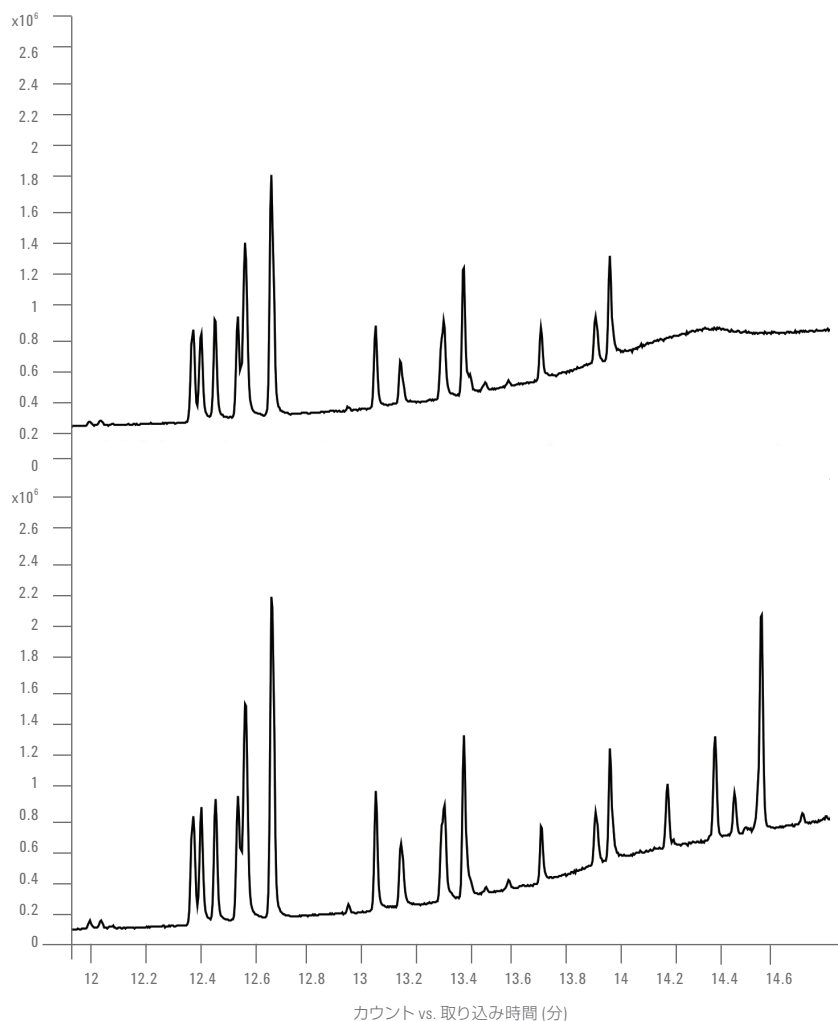
「バックフラッシュ」によりデータ解析結果を向上

アジレントのキャピラリー・フロー・テクノロジーのデバイスである PCT を取り付けてバックフラッシュを行うことで、従来よりも優れた生産性の GC/MS システムを構築し、高品質なデータを得ることができます。たとえば、高沸点成分などの溶出の遅い化合物 (トリグリセリド、コレステロール、分子量の大きい脂質など) は、キャリアオーバーによって MS イオン源や次の分析に影響を与えないように「バックフラッシュ」によりカラムから除去されます。この結果、カラムの液相と MS イオン源が保護され、データの生産性や信頼性が向上します。

- 安定したリテンションタイム
- 容易に行えるメンテナンス、
ベントせずにプレカラムが交換可能
- 分析間のキャリアオーバーの減少

厳格で堅牢なメソッド

Fiehn GC/MS ライブラリではリテンションインデックス (RI) とリテンションタイムロッキング (RTL) をライブラリサーチの検索条件に利用することで検索結果の信頼性を向上させます。RI と RI 確認用の標準サンプル (リテンションタイムの間隔が十分に空いた内部標準) により、メソッドを大きく変更した後も RI を固有の定性情報として使用することができます。メソッドに RTL を使用することで、分析間のリテンションタイムの変動を抑えて、RI 確認のために脂肪酸メチルエステル (FAMES) をサンプルに含める頻度を下げることができ、RI による他の代謝物への干渉を抑えることができます。

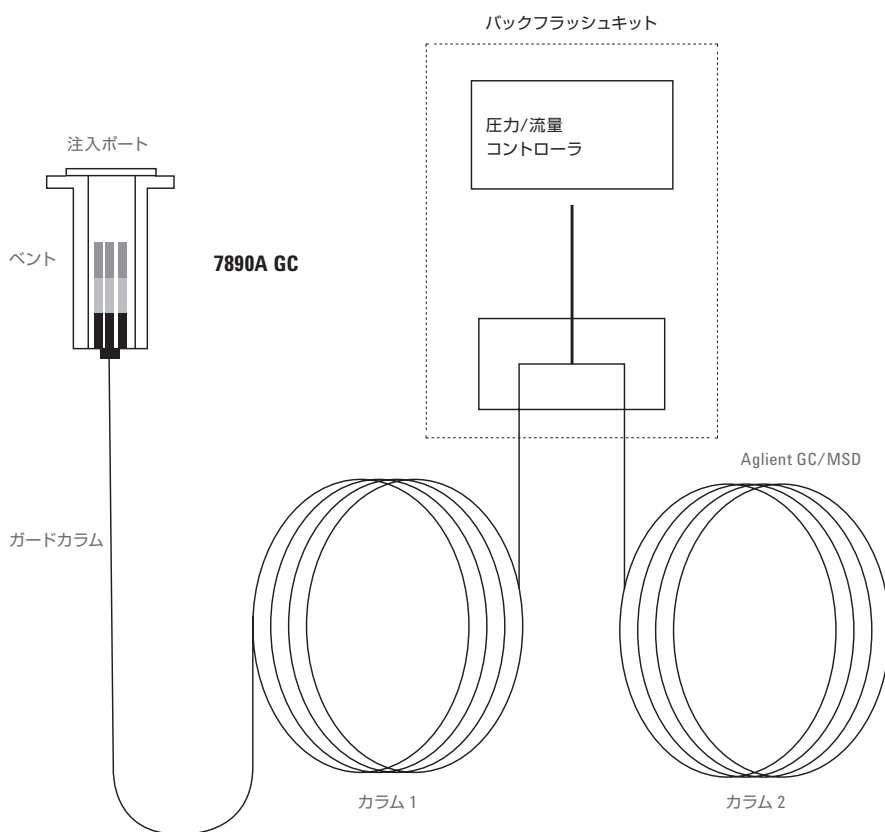


新しいバックフラッシュメソッドにより溶出の遅い化合物を容易かつ選択的に除去することができます。このクロマトグラムは、バックフラッシュメソッドを用いた 2 回の分析を示しています。上のクロマトグラムでは、パラメータの最適化によってコレステロールを選択的に除去できています。

アジレントの包括的な GC/MS メタボロミクスソリューションパッケージ

アジレントは、メタボロミクスで信頼性のある結果を得るために、以下のキット類を開発しました。

- PCT 付き GC/MS バックフラッシュキット (部品番号 G1472A)
- ガードカラム : 不活性化処理済み、内径 0.32 mm x 約 1.5 m (部品番号 160-2325-10)
- カラム 1 および 2 : DB-5msUI 15 m x 内径 0.25 mm x 0.25 μm (部品番号 122-5512UI)
- Agilent Fiehn GC/MS メタボロミクス標準試薬キット (部品番号 400505)

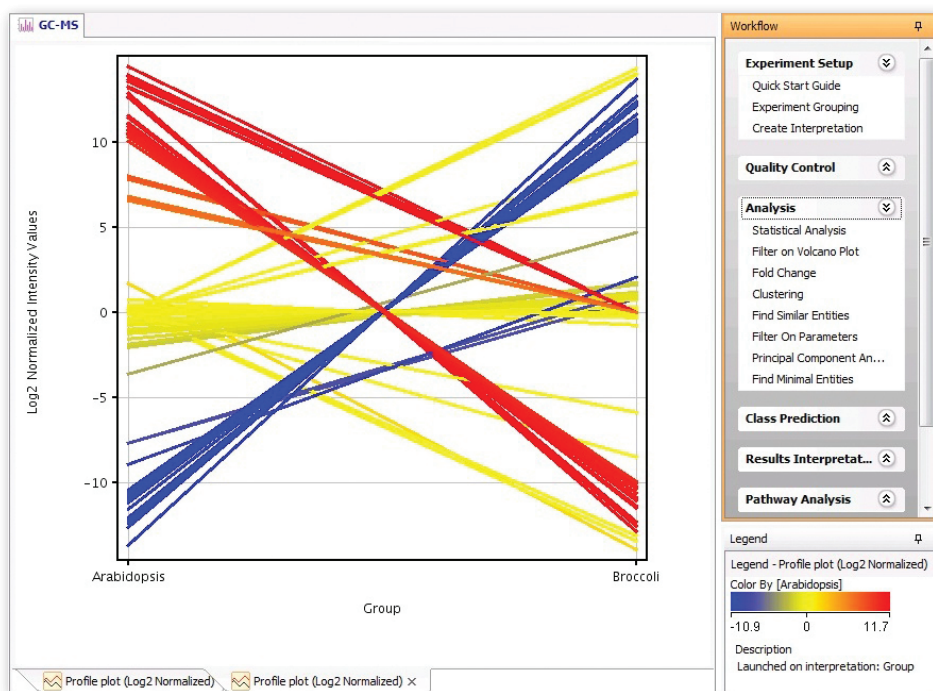


バックフラッシュは、2つのGCカラムの間にPCTを入れて行われます。

GC/MS の結果を容易に解析し、視覚化する Mass Profiler Professional (MPP)

完全なワークフローが可能にする、優れた検索

ライブラリ検索による代謝物の検出と同定に加えて、Fiehn GC/MS ライブラリには、ワークフローを通じてターゲット化合物以外のメタボロミクス分析を行うこともできます。MassHunter Qualitative Analysis ソフトウェアで検索を行った後に、.xml フォーマットのファイルを Mass Profiler Professional (MPP) へ簡単に読み込むことができます。



GC/MS の測定結果を MPP にインポートすることができます。プロファイルのプロットは、ナスナおよびブロッコリ代謝物の差分のピーク強度を分かりやすく表示しています。

パスウェイ解析による生物学的解釈の簡略化

Agilent Pathway Architect モジュールを MPP とともに使用すると、SEA (Single Experiment Analysis) または MOA (Multi-Omic Analysis) ワークフローを構築し、パスウェイを見つけることができます。このパスウェイには、測定で検出された多くの化合物が含まれています。

パワフルなデータ解析と 迅速で柔軟性の高いハイスループット検索

直感的でパワフルなデータ解析

最新版の Agilent MassHunter Qualitative Analysis ソフトウェアでは、Fiehn GC/MS 代謝物 RTL ライブラリ (2013 年版) がサポートされるようになりました。独自のアルゴリズムである「クロマトグラフィーデコンボリューションによる検索」が常にピーク検出に使用されます。ピーク検出後、最新の Fiehn GC/MS 代謝物 RTL ライブラリで検索され、代謝物が同定されます。

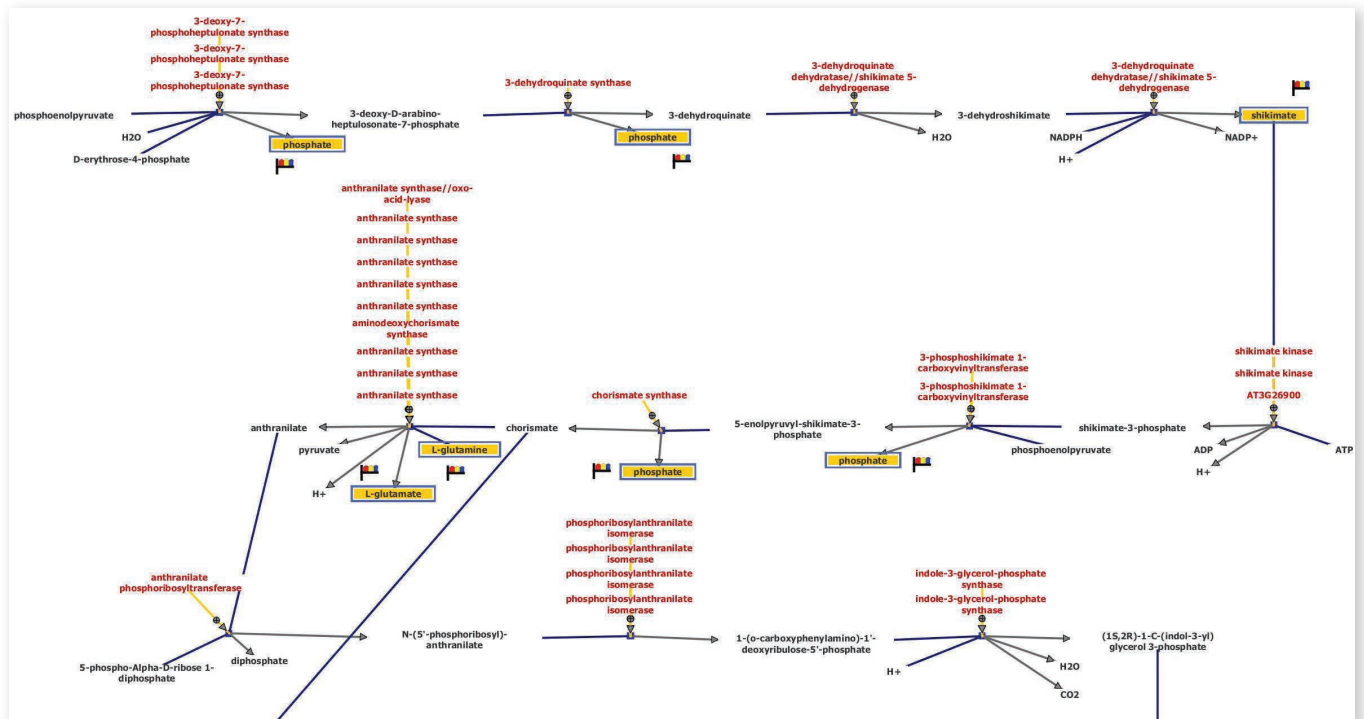
新しい 2013 年版ライブラリには、広く用いられている AMDIS (NIST の自動 GC/MS

同定プログラム) も付属しています。読み込まれた GC/MS データが AMDIS でデコンボリューションして代謝物のマススペクトルから干渉イオンを除去した、コンポーネントというマススペクトルに再構築します。

AMDIS で作成されたコンポーネント結果は、アジレントの MassHunter Mass Profiler Professional (MPP) ソフトウェアへ読み込むことで、そのパワフルな統計解析およびデータ視覚化機能によって、マーカー探索や、サンプル間の傾向とその原因の推定などを行うことができます。

データ解析のスクリーニング およびライブラリ検索の簡略化

新しい 2013 年版ライブラリは、Agilent MSD Productivity ChemStation ソフトウェアの PBM 検索を使用して検索することもできます。定量データ解析および定性スクリーニング用の MSD ChemStation 用のメソッドも収録しています。



MPP の Pathway Architect モジュールには、複数の代謝物アバンドンスプロファイルを MetaCyc から得られた有機物固有の生物学的経路に投影した結果が表示されます。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタマコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

研究目的にのみ使用できます。本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

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。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc.2013

Published in Japan, December 19, 2013

5991-2747JAJP



Agilent Technologies