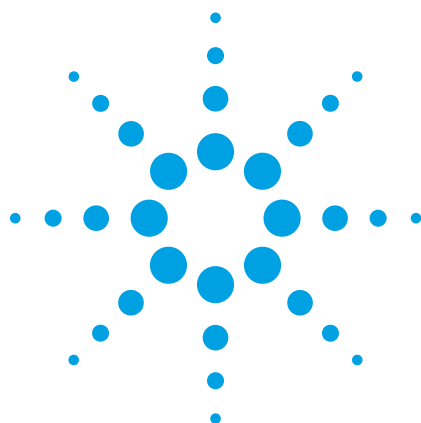




Agilent METLINパーソナル代謝物データベース

代謝物の同定を容易にする強力なデータベース

代謝物の同定は、非標的メタボロミクス実験の重要なステップです。精密質量情報を使用した代謝物データベース検索により、候補となる物質のリストを大幅に絞り込み、代謝物の同定を著しく向上させることができます。スクリップス研究所のマススペクトルセンターで収集されているMETLIN代謝物データベースは、現在、世界で最も広範なデータを含む代謝物データベースです。このデータベースには、15,000種類を超える内因性代謝物、外因性代謝物、ジペプチドやトリペプチドの質量、化学式、構造が収録されています。アジレント・テクノロジーは、METLINパーソナル代謝物データベースの唯一のプロバイダです。このデータベースはローカルPCに常駐させることが可能であり、大規模研究における迅速かつ容易な複数化合物の検索に役立ちます。検索では機密性が保持され、新たに独自の化合物をMETLINパーソナルデータベースに追加することもできます。データベースソフトウェアは、LC/MSメタボロミクスによって代謝物サンプルの情報を拡張することができるよう、アジレントの他のソフトウェアツールとシームレスに統合されています。

豊富な代謝物情報

METLIN代謝物データベースは、現在、世界で最も広範なデータを含む代謝物データベースです。このデータベースには、15,000種類を超える内因性代謝物、外因性代謝物、ジペプチドやトリペプチドの質量、化学式、構造が収録されています。大部分の化合物には、化学式と構造の両方のコメントが付いています。多くの化合物エントリには、CAS番号、HMD番号、またはKEGG番号、さらにはそれぞれのPubChem、Human Metabolome Database、およびKyoto Encyclopedia of Genes and Genomesのデータベースエントリへのウェブリンクが含まれており、追加情報を容易に検索できます。

データベースのパーソナルコピーにより得られる高い性能と安全性

METLIN代謝物データベースは、インターネット(<http://metlin.scripps.edu>)で利用できますが、ご使用のローカルPCにMETLINパーソナル代謝物データベースをインストールすることにより、以下のような多くの利点が得られます。

- 高速検索
- ほぼ無制限の数の化合物の同時検索
- データベースのエントリへのリテンションタイムの追加、およびリテンションタイムを検索条件として使用

- データベースへの新たな化合物の追加
- 安定同位体で標識された代謝物のエントリの作成
- 一致しない質量のデータベースへの追加、および実験間でのこれらの未知代謝物の追跡

Our measure is your success.



高速、強力、かつ便利な検索

METLINパーソナル代謝物データベースを用いて、容易に化合物を検索することができます。単一の化合物、または、ほぼ無制限の数の化合物をバッチモードで検索できます。以下の基準で検索を実行できます。

- 質量のみ
- 質量およびリテンションタイム
- リテンションタイムのみ

以下に基づく情報検索も実行できます。

- キーワード
- 分子式
- 化合物名
- KEGG、CAS、HMP、またはMETLIN番号

柔軟性の高い単一化合物検索

単一化合物検索は、通常、分析中に観測されるイオンの同定に使用されます。質量検索は、精密質量測定の特異性のため、最もよく使用されます。ただし、データベース内の代謝物と質量が一致しても、必ずしも決定的な同定となるわけではありません。標準試料のLCリテンションタイムをデータベース内のエントリに追加する機能、および質量とリテンションタイムの両パラメータを使用した検索によって、より信頼性の高い同定を行うことができます。

生産性の高いバッチ検索およびサマリ

METLINパーソナル代謝物データベースには、ほぼ無制限の数の化合物を自動的に同時検索する機能があります。1つ1つの質量の手動検索と比較すると生産性が著しく向上するため、高速、高生産性を必要とする検索には不可欠です。

バッチ検索が完了すると、エクスポート可能なバッチサマリレポートが作成されます。各質量に合う最適なデータベースの一覧が表示され、結果を経路探索などの追加分析用に印刷したり、保存したりすることができます。また、化合物の割り当ての後に、リテンションタイムを設定してデータベースを更新できます。

The screenshot displays the Agilent METLIN Personal Metabolite Database interface. The top menu includes File, Database, Edit Metabolites, View, Metabolomics Links, and Help. The main window is divided into several sections:

- Report comments:** Metabolite extract from malaria-infected erythrocytes
- Mass list search parameters:** Mass list file: C:\MassHunter\Metlin\Mass List Files\VBBC_Metabolites_Neg.xls; Masses: +/- 10 ppm Neutral; Search: Neutrals
- Retention time parameters:** RTs: +/- 0.1 min (Optional); Apply Retention Times
- Best mass match results:** Total Matches: 58 of 179 (22.3%); Single Matches: 30 (16.8%); Redundant Matches: 0
- Molecule:** Structure MOL Text. The structure shown is Idebenone, a long-chain ketone with multiple hydroxyl groups.
- Notes:** Treatment of mental symptoms associated with old age and cerebrovascular disease. Metabolite of Idebenone

Batch Summary Results: 40 matches (58 total matched, 30 single matches, 179 submitted)

Mass Submitted	Mass	Delta Mass (ppm)	RT Submitted	RT (min)	Delta RT	Name	Formula	CAS	METLIN	KEGG	HMP
268.0732	268.07291	-1.08	1.98			Homolanthionine	C8H16N2O6S		5449		HMDB02034
270.2565	270.25588	-2.29	23.12			Margaric acid	C17H34O2		4206		
280.2409	280.24023	-2.39	22.01			Linoleic acid	C18H32O2	60-33-3	191		
282.2565	282.25588	-2.20	22.96			Oleic acid	C18H34O2	112-80-1	190		
284.2723	284.27153	-2.71	24.12			Stearic acid	C18H36O2	57-11-4	189		
294.187	294.18648	-1.76	21.63			Sodium tetradecyl sulfate	C14H30O4S	139-88-8	2453		
298.1425	298.14164	-2.88	9.99			Idebenone Metabolite (Benzenehexanoic acid, 2,5-di...	C15H22O6	58185-92-5	772		
302.1741	302.17562	5.03	18.94			3-Oxa-9-azoniacyclo[3.3.1.02.4]nonane, 9-ethyl-9-m...	C18H24N3O3	752160-28-4	1678		
306.0315	306.02950	-6.53	0.91			Pelargonidin	C15H11ClO5		6868		HMDB03263
338.2441	338.24571	4.76	22.61			(+/-)-5,6-DiHETE	C20H34O4		3832		
340.2081	340.21106	8.69	23.47			Pro Lys Pro	C16H28N4O4		19795		
341.2938	341.29299	-2.36	22.98			N-Acetylsphingosine	C20H39N3O3	3102-57-6	411		
354.0576	354.05767	0.19	12.19			5-Amino-6-(5'-phosphoribosylamino)uracil	C9H15N4O9P		3497	C01268	
358.1645	358.16411	-1.10	9.22			Pro Gly Trp	C18H22N4O4		15856		
388.1741	388.17467	1.47	9.22			Ser Trp Pro	C19H24N4O5		16639		
410.3195	410.31848	-2.49	25.12			3,3',5,5'-Tetra-tert-butyl-4,4'-dihydroxybiphenyl	C28H42O2	128-38-1	2100		

バッチ検索によって生産性が向上し、バッチサマリレポートによって結果のレビュー、保存、およびエクスポートが容易になります。

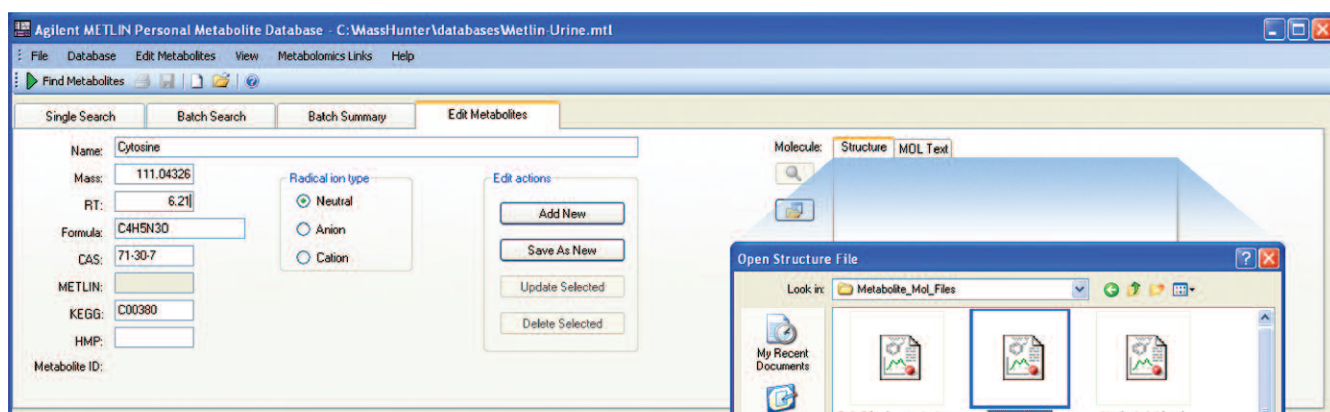
生産性向上のためのデータベースのカスタマイズ

最高の効率を得るため、お客様のニーズに合わせてMETLINパーソナル代謝物データベースを以下のようにカスタマイズすることができます。

- 独自の化合物の追加。その化合物のMolfile形式の分子構造ファイルを登録することもできます。

- 同位体の数と種類を指定することによる同位体標識の代謝物のカスタムエントリの作成
- 研究に無関係なエントリを削除したデータベースのサブセットを作成できるため、検索の高速化が可能
- 特異性および信頼性を高めるため、それぞれの代謝物に対し、クロマトグラフィのリテンションタイムの割り当てが可能

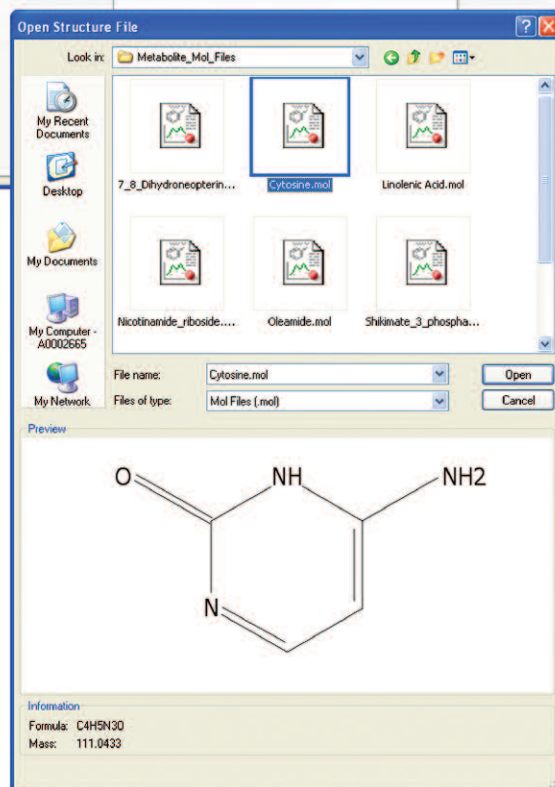
METLINデータベースへの追加では機密性が保持されるので、独自の化合物および知的所有権に関する問題はありません。

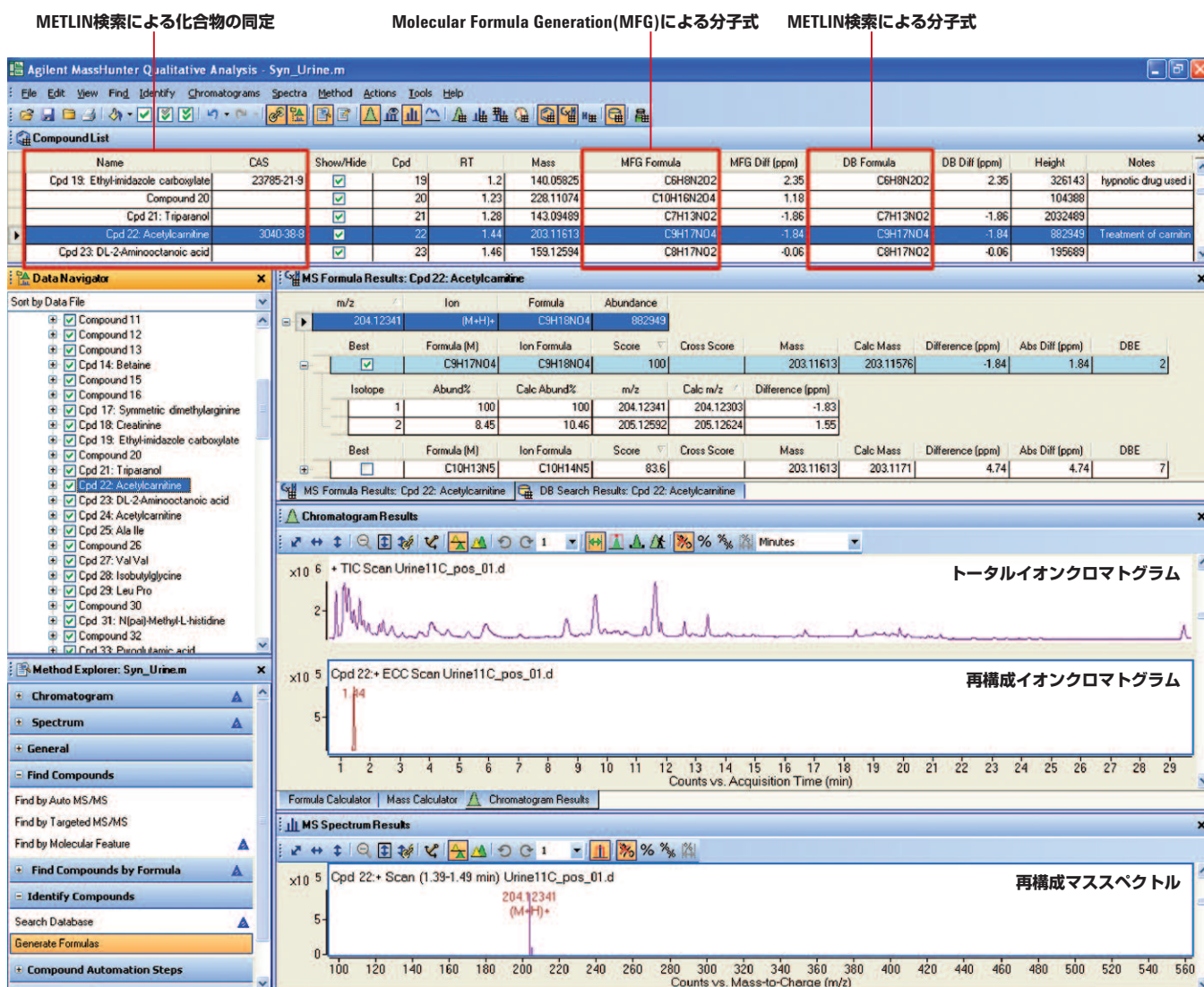


現在のエントリへのクロマトグラフィのリテンションタイムなどの情報の追加や、リテンションタイムやMolfileからの構造式を含むような新しい情報を追加することにより、METLINパーソナル代謝物データベースをカスタマイズできます。

他のソフトウェアとの統合によるスループットと使いやすさの向上

Agilentソフトウェアパッケージには、METLINデータベースの単一化合物またはバッチ検索を直接開始できるソフトウェアもあります。MassHunter定性分析ソフトウェアでは、インタラクティブにまたは自動的に検索を実行し、検索結果をその他のサンプルデータと自動的に統合できます(4ページの図を参照)。また、MassHunter Profilingソフトウェアでは、検索、結果の保存、編集、およびエクスポートを行うことができます。統計的に有意な変化を示した化合物のバッチ検索を行うために、アジレントのGeneSpring MS統計解析ソフトウェアからMETLINソフトウェアに結果をインポートすることができます。METLINデータベース検索の結果は、代謝経路ソフトウェアなどの他のデータ解析パッケージに容易にエクスポートすることができます。





METLIN/パーソナル代謝物データベースの検索は、MassHunter定性分析ソフトウェアから直接開始できます。ここに示すように、検索結果は、クロマトグラフ、マススペクトル、Molecular Formula Generation (MFG)結果などの他の定性的な情報と自動的に統合できます。このように結果を統合すると、データのレビューが大幅に単純化されます。

アジレント・テクノロジーについて

アジレント・テクノロジーは、複雑な生物学的過程の理解、病気のメカニズムの特定、および創薬の高速化を可能にするライフサイエンス検索システムを提供するサプライヤとして業界をリードしています。アジレントのライフサイエンスソリューションは、感度、再現性、およびワークフローの生産性を高めるように設計されており、装置、マイクロフルイディクス、ソフトウェア、マイクロアレイ、消耗品、さらには、ゲノミクス、プロテオミクス、およびメタボロミクスアプリケーション用のサービスを提供します。

詳細情報

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンター

フリーダイヤル：0120-477-111

本文書記載の製品は研究専用です。本書に含まれる情報、記述、および仕様は、予告なく変更されることがあります。

アジレント・テクノロジーは、この文書の内容の誤り、あるいは本品の設置、性能、使用に関する偶発的または間接的な損害に関して責任を負うものではありません。

© Agilent Technologies, Inc. 2007
Printed in Japan December 31, 2007
5989-7712JAJP



Agilent Technologies