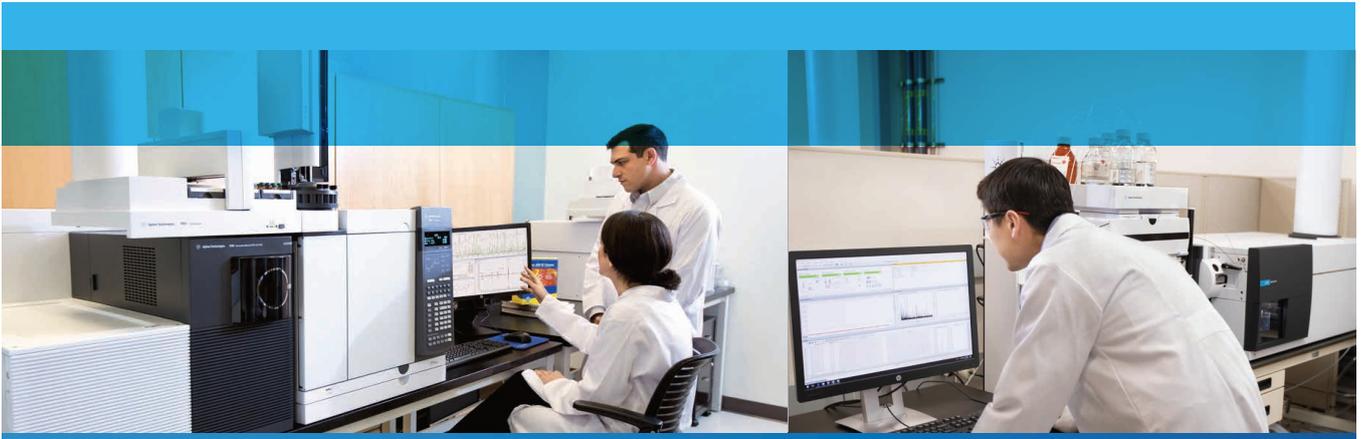


分析対象物を確実に同定

Agilent ChemVista ソフトウェアと
広範かつ包括的な統合型ライブラリ



List: Pesticides Targeted Screening List

Name	Formula	MW	Retention Time	Library Name	Library Count
Prochloraz	C ₁₂ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	266.16	10.1	AGENTS/AGENTS/AGENTS/AGENTS	1
Prochloraz	C ₁₂ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	266.16	10.1	AGENTS/AGENTS/AGENTS/AGENTS	1
Prochloraz	C ₁₂ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	266.16	10.1	AGENTS/AGENTS/AGENTS/AGENTS	1
Prochloraz	C ₁₂ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	266.16	10.1	AGENTS/AGENTS/AGENTS/AGENTS	1
Prochloraz	C ₁₂ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	266.16	10.1	AGENTS/AGENTS/AGENTS/AGENTS	1

Prochloraz

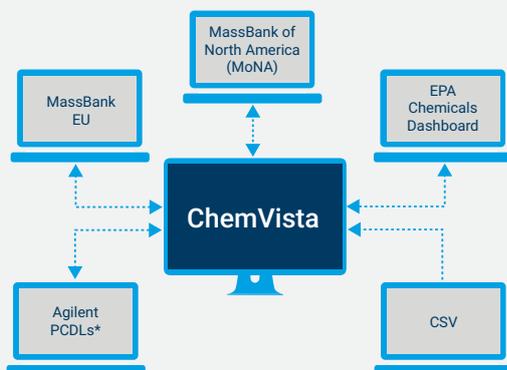
Chemical Structure: C1=CN(C=C1)C(=O)N(C)CC2=CC=C(Cl)C(Cl)=C2

CAS: 8701-09-5
Formula: C₁₂H₁₀Cl₂N₂O
MW: 266.16
Retention Time: 10.1



複雑な高分解能データで 信頼性の高い同定を実現

構造推定の技術は進歩しているものの、ターゲットスクリーニングとノンターゲット分析による未知化合物の同定においては、実験に基づく精密質量高分解能 MS/MS とフルスキャンスペクトルの比較が、今なお標準の分析手法となっています。しかし、質量スペクトルライブラリは作成に莫大なコストと時間を要します。完成しても、簡単には活用できない場合が多く、ワークフロー内で同定した未知化合物の範囲が限定されることになります。



*PCDL：精査済みのパーソナル化合物データベースライブラリ

Agilent ChemVista は、LC/Q-TOF および GC/Q-TOF 質量分析で作成したスペクトルライブラリを管理するスタンドアロンのソフトウェアです。化合物の詳細、リテンションタイム、スペクトルの情報を複数のソースから統合します。これらの機能では次のことが可能です。

- 複数の公開データベースと精査済みのライブラリにアクセス
- スペクトルの整理、管理、編集、作成
- MassHunter データ解析アプリケーションなどでの同定ワークフローの効率化
- 化合物を高い信頼性で同定

さらに、ChemVista には膨大な量のライブラリおよびデータベースコンテンツがあらかじめ含まれています。

化合物中心の構造により、スペクトルを簡単に整理、管理、編集

Agilent ChemVista ソフトウェアのユニークな特長の 1 つが、複数のソースのライブラリデータを管理できる柔軟な設計です。また、リテンションタイム (RT) とリテンションインデックス (RI) を含めることができ、化合物の同定における信頼性が向上します。メソッド情報とカスタマイズ可能なメソッドラベルによってこれらを体系化できるため、化合物ごとに複数の詳細情報を便利に保存できます。

ChemVista では、特定の分析に関連付けたリストがワークフローの中心となります。複数のソースからスペクトルと化合物の情報を組み合わせて、スクリーニングリストを簡単に作成できます。分類と統合のプロトコルによってデータを効率化し、重複を排除して、概要画面を整理することができます。カスタマイズ可能なリストには、Agilent ID、MassBank と PCDL の質量スペクトル、さまざまなソースから収集した同義語を含めることができます。

ワークフローは特定の分析に関連付けたリストを中心にしています。

リストは整理ツールとして機能し、1つの化合物を複数のスペクトルを持つ複数のリストに登録できます。

高度なケモインフォマティクスは構造や ID を生成し、重複を排除し、ダウンストリームのワークフローをサポートします。

自動化された化学物質クラスタグが、人の手で精査された PCDL から割り当てられます。

ChemVista でのデータのインポート/エクスポートは、複数のファイル形式 (SDF、MassBank Text、PCDL、CSV) で可能です。これらのプロセスではフィルタやカスタマイズオプションによって、変換する情報から不要な部分を除外することができます。

高分解能質量分析 (HRMS) スペクトル管理の効率と生産性を向上する ChemVista の詳細については、技術概要を[ダウンロード](#)してご覧ください。

組み込まれた広範な低分子データベースが未知化合物の確実な同定をサポート

Agilent ChemVista には、複数のスペクトル付きの化合物が 20,000 化合物以上、スペクトルなしの化合物が 250,000 化合物以上登録されています。これらのライブラリとデータベースにより、次のような分野で未知化合物の確実な LC/Q-TOF および GC/Q-TOF 同定が可能になります。



食品安全性
および品質



環境



抽出物と浸出物



法中毒学



メタロミクスと
METLIN

「見えない価値」を「目に見える成果」へ

Agilent CrossLab は、サービスと消耗品を統合することで、お客様のワークフローをサポートし、生産性や運用効率の向上を実現するためのお手伝いをさせていただきます。あらゆる場面で「見えない価値」を提供し、お客様の目標達成を支援します。

Agilent CrossLab の詳細については、[ホームページ](#)をご覧ください



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

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っていません。本文書に記載の情報、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。

DE11788104

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2023
Printed in Japan, May 24, 2023
5994-5965JAJP

