

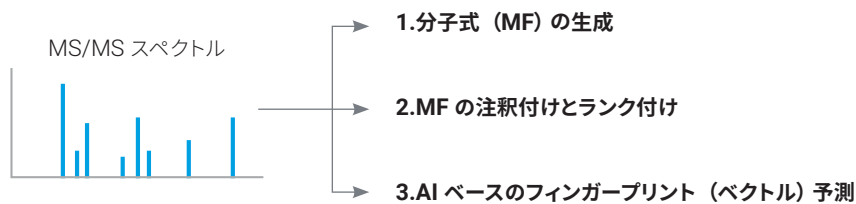


# SIRIUS と MassHunter Explorer による 新しいステージの未知化合物同定

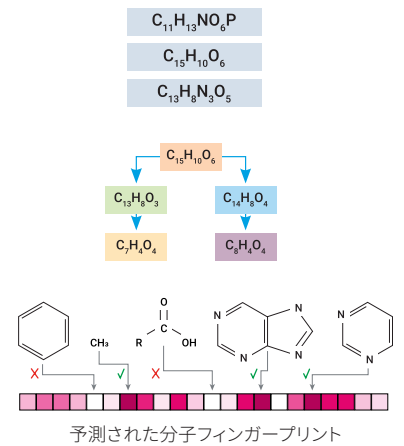
参照スペクトル、RT 不要、無料の CSI:FingerID 対応

SIRIUS と CSI:FingerID を用いれば、同定ワークフローを拡張できます。CSI:FingerID は、質量分析データから隠れた情報を存分に引き出すために設計された高度な AI ベースのツールです。深層カーネル学習と教師あり学習モデルを活用して、高分解能タンデム質量スペクトルから未知化合物の構造的特徴（分子フィンガープリント）を予測します。これにより、スペクトルと分子構造を直接関連付けることが可能になります。従来のスペクトルライブラリ検索には限界がありますが、CSI:FingerID は、広範囲にわたる構造データベースを活用することにより未知化合物同定の可能性を広げます。アジレントは、CSI:FingerID を支える AI モデルのトレーニングに向けて 10,000 以上のスペクトルを提供してきました。

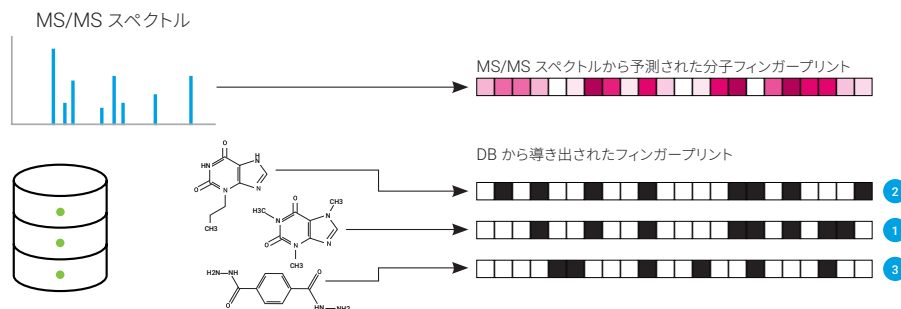
## 分子フィンガープリントの予測



分子式は、未知化合物の高分解能 MS/MS スペクトルをもとに de novo、データベースのみ (PubChem など)、またはボトムアップのいずれかの方法で生成されます。また、分子「フィンガープリント」(ベクトル) は、高度な AI アルゴリズムにより構造候補ごとに予測されます。



## 参照スペクトルなしでの同定



予測された未知化合物の分子フィンガープリントは構造 DB から導き出された構造の分子フィンガープリントと比較され、同定のため候補にランク付けされます。

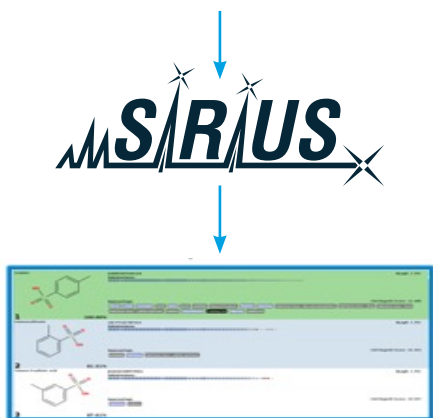
CSI:FingerID は、未知化合物の自動かつ迅速な優れた同定機能を備えています。年 1 回開催される名誉ある Critical Assessment of Small Molecule Identification (CASMI) コンテストでは常に上位に入っています。

Bright Giant 社がホストする SIRIUS には、CSI:FingerID によって予測された分子フィンガープリントから化合物クラスを予測する CANOPUS が含まれています。その際、データベース検索は行われません。

## MassHunter Explorer から SIRIUS と CSI:FingerID の威力を無料で直接活用

Agilent MassHunter Explorer ソフトウェアに CSI:FingerID を組み合わせることで、未知化合物の同定に多大な技術的利点をもたらされます。企業などの Explorer ユーザーは、年間最大 100,000 件の CSI:FingerID 照会を無料で利用できるという実質的な経済的利点も得られます。

### MassHunter Explorer から SIRIUS に直接アクセス



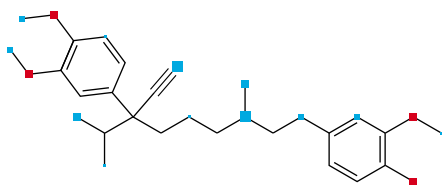
SIRIUS CSI:FingerID でデータベース検索によって  
未知化合物を同定

CANAPUS によりデータベース参照なしで化合物クラスを  
予測

年間 **100,000 件の無料照会**、企業では年間数千ドルもの  
コスト削減が可能

以下の図は、肝ミクロソームでインキュベートしたペラパミルの薬物代謝物の同定結果です。未知化合物の同定に対する CSI:FingerID の有効性は明らかです。この代謝物に対応する MS/MS スペクトルは NIST23、MassBank、HMDB にありませんが、CSI:FingerID は、分子フィンガープリンティングと構造のデータベース検索により、類似構造を持つ第 2 候補化合物を超える第 1 候補として、この化合物が p-O-デスメチルペラパミルであると予測しています。

#### p-O-デスメチルペラパミル



部分構造:

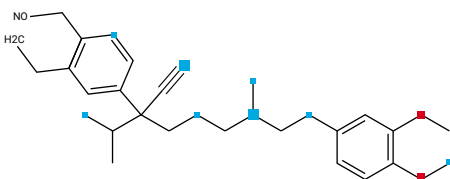


出典:  
Blood Exposome, DSSTex, HMOB, MeSH, NORMAN, PubChem, PubChem bio and metabolites  
PubChem drug, PubMed, SuperNatural

C<sub>26</sub>H<sub>36</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

-25.464

ベンゼンアセトニトリル、アルファ-(3-(2-(3,4-ジメトキシフェニル)エチル)メチルアミノ)プロピル)-4-ヒドロキシ-3-メトキシ-アルファ-(1-メチルエチル)-、(R)-



部分構造:



出典:  
Blood Exposome, CHEBI, DSSTex, HMOB, MeSH, NORMAN, PubChem, PubChem bio and metabolites  
PubChem drug, PubMed

-38.790

Dührkop, K., Fleischauer, M., Ludwig, M. et al. SIRIUS 4: a rapid tool for turning tandem mass spectra into metabolite structure information. Nat Methods 16, 299–302 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0344-8>

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ー

0120-477-111

[email\\_japan@agilent.com](mailto: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。

DE-010882

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2025  
Printed in Japan, October 2, 2025  
5994-8701JAJP