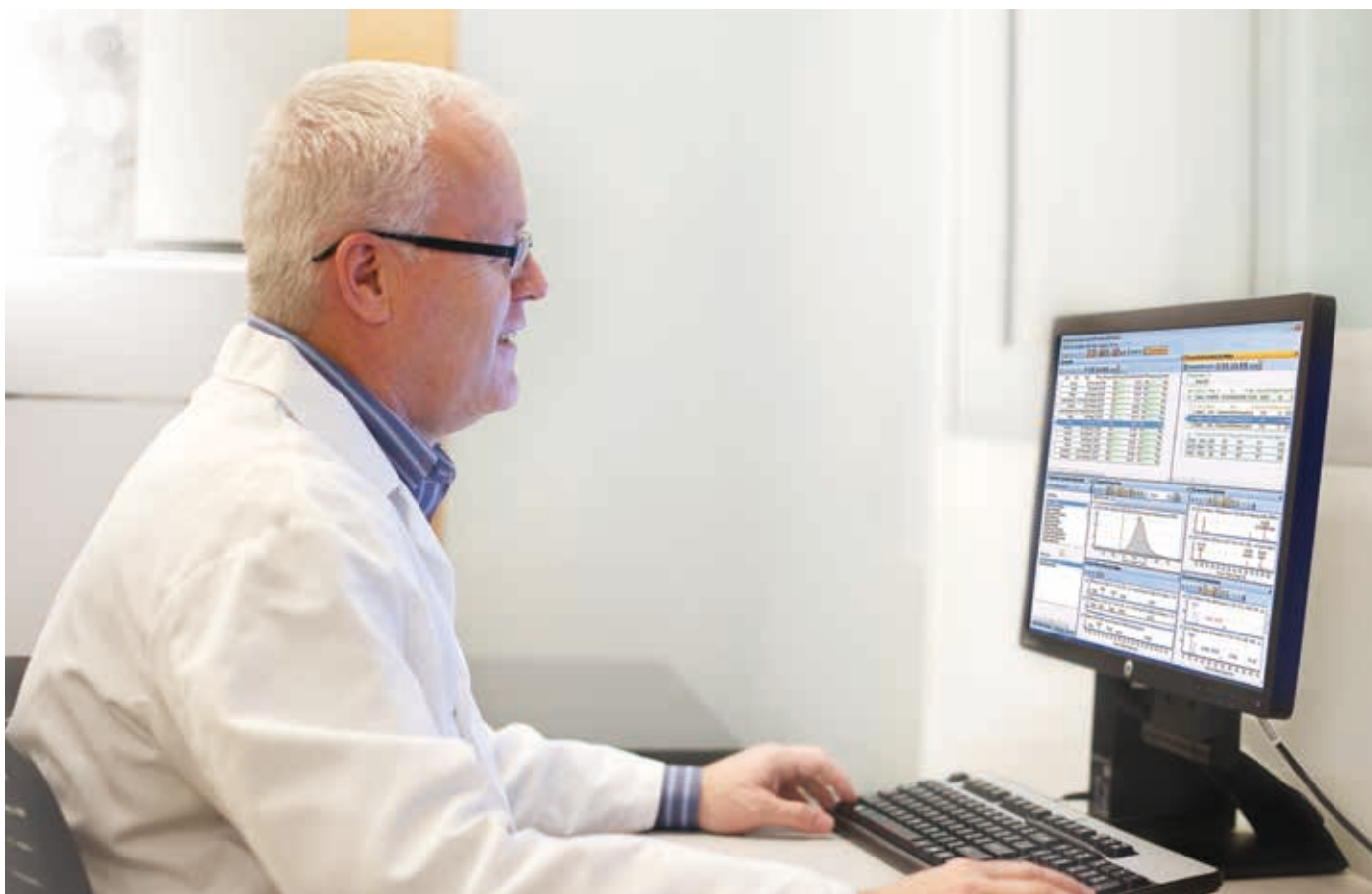


代謝物の同定に無類の信頼性を実現

Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリ

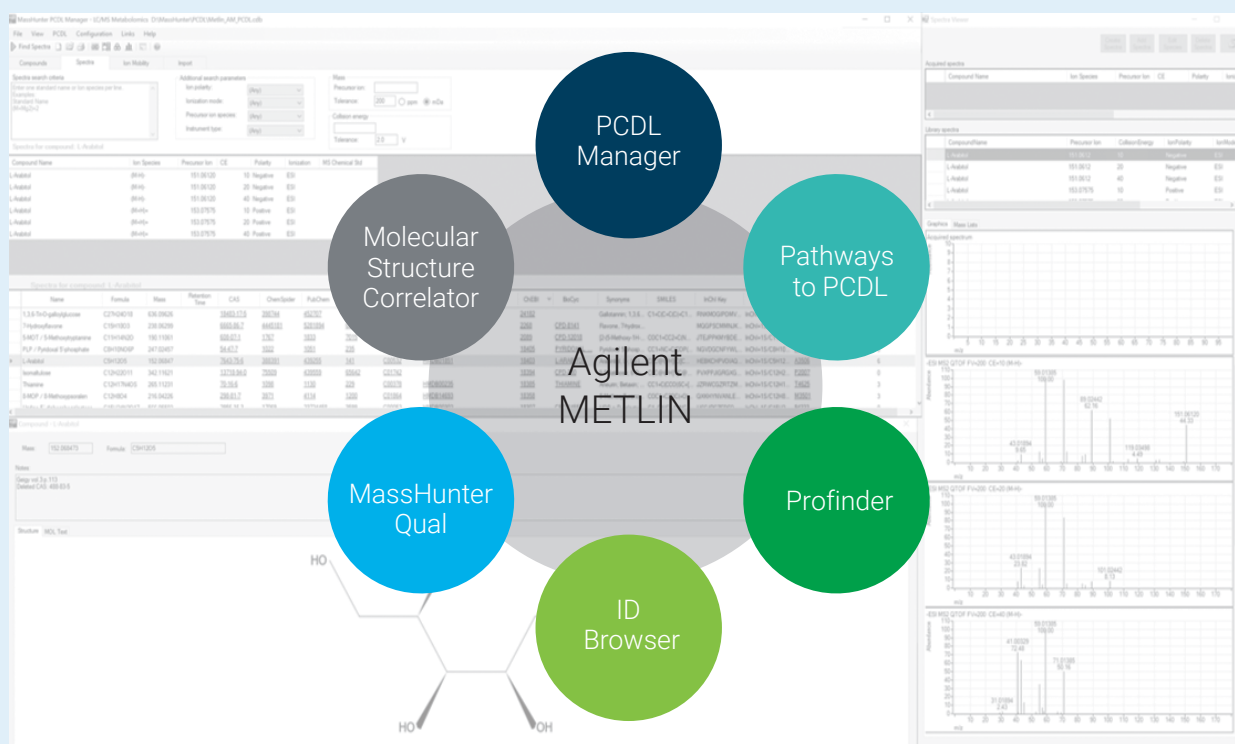


メタボロミクスのために開発された Agilent METLIN



生物系で見られる包括的な代謝変化の解明を目指す探索メタボロミクスでは、代謝物を正確に同定することがきわめて重要になります。その同定結果の信頼性を決定付ける直接的な要因となるのが、同定に用いるデータベースの品質です。Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリは、綿密な精査によって非常に高い信頼性を実現し、最も広く使用される代謝物データベースの1つとなっています。アジレントの幅広いソフトウェアポートフォリオの重要ツールとして、探索メタボロミクスのニーズを支えます。

代謝物同定の統合ワークフロー



MassHunter MSC (Molecular Structure Correlator) — 精密質量 MS/MS フラグメントイオンに分子構造を関連付けます。

PCDL Manager — リテンションタイム、代謝物、衝突断面積、MS/MS スペクトルを追加してデータベースをカスタマイズします。

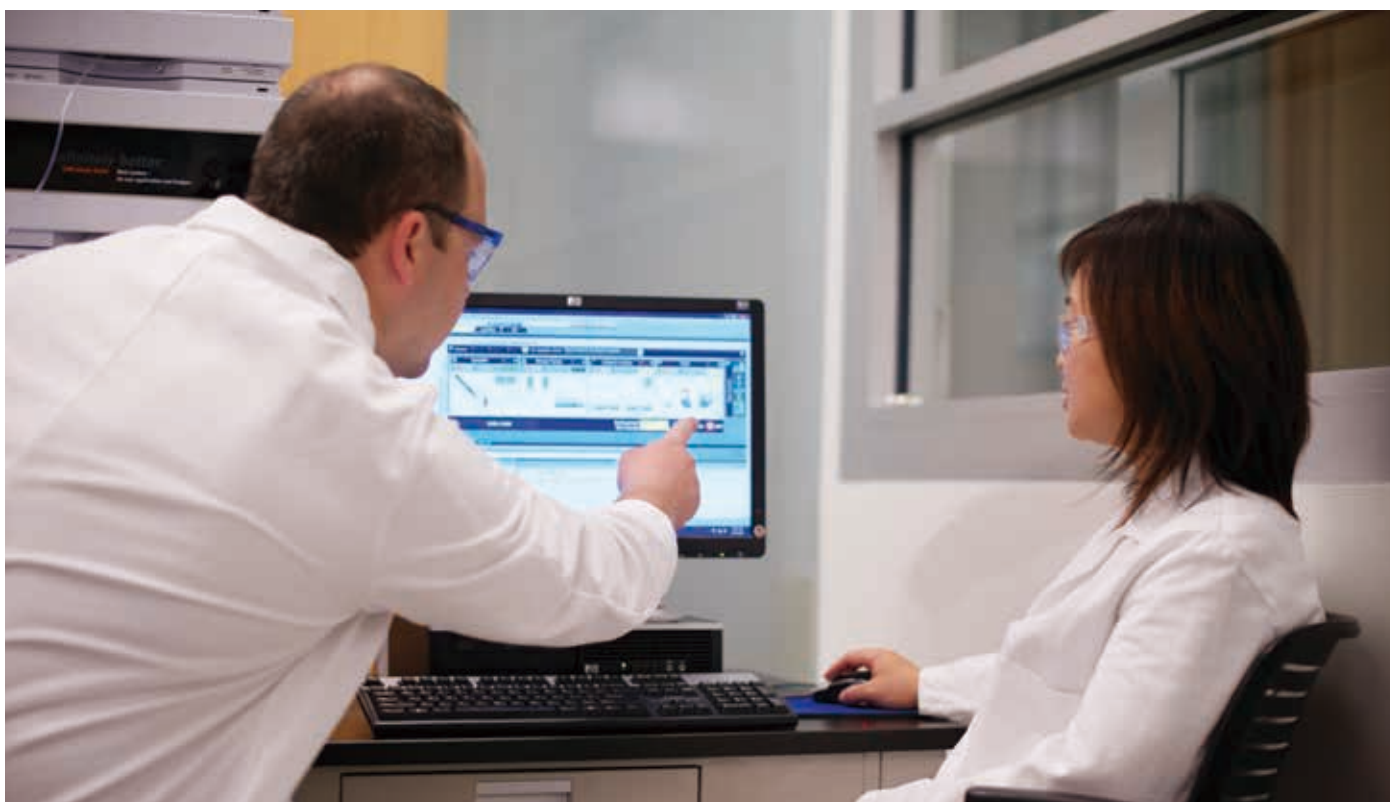
Agilent Pathways to PCDL — 目的の代謝パスウェイをターゲットとするパスウェイ固有のデータベースを作成します。

Profinder (VistaFlux を含む) — ターゲット解析およびフラックス解析ワークフロー用に目的の代謝物を抽出します。

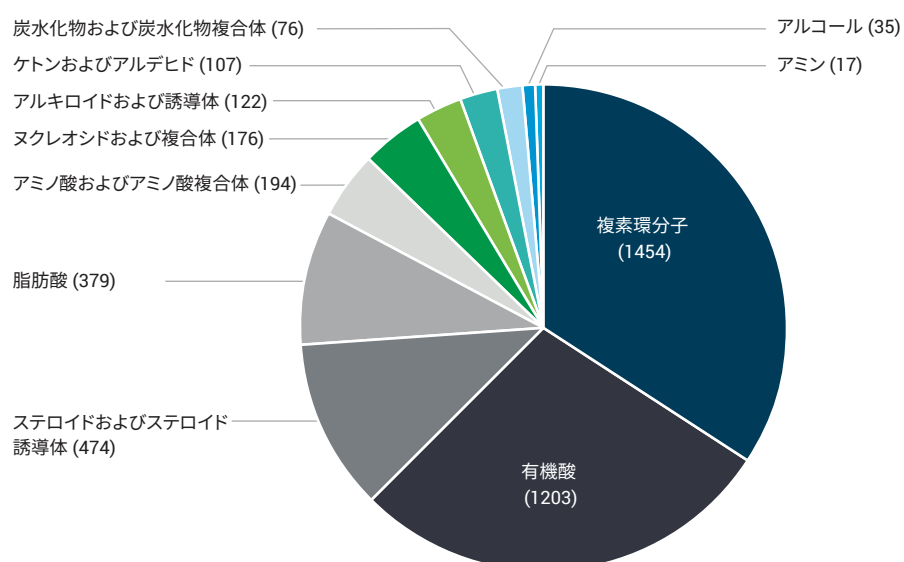
ID Browser — 差分析後に Agilent METLIN メタボロミクスデータベースで精密質量、リテンションタイム、同位体パターン、衝突断面積、または MS/MS スペクトルを照合して、代謝物を同定します。

MassHunter Qualitative Analysis — Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリで精密質量、リテンションタイム、同位体パターン、または MS/MS スペクトルを照合して、代謝物を同定します。ユーザーが採取したカスタム MS/MS スペクトルを Agilent METLIN メタボロミクスライブラリに追加することもできます。

信頼性の高い結果を導き出す高品質のコンテンツ



Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリは、包括的な MassHunter ポートフォリオの重要ツールとして、研究に関連する多様な代謝物の同定に高い信頼性をもたらします。



Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリには、幅広い代謝物が登録されています。上記の円グラフは、データベースに含まれる脂質以外の代謝物の割合を HMDB の分類スキームに従って示したものです。このグラフでは、Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリに含まれる脂質 38,000 種は除外されています。

信頼性の高い同定

化合物同定データの信頼性が向上

精密質量
(AM)

AM +
同位体パターン
(IP)

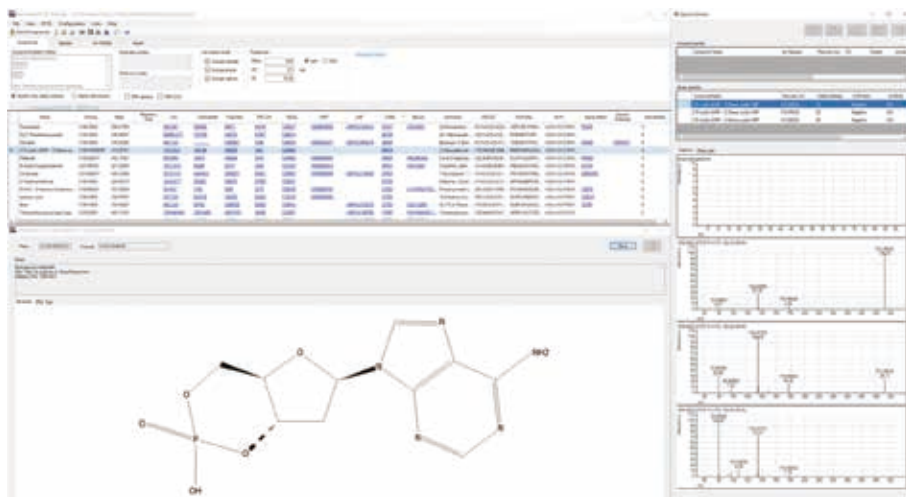
AM +
リテンションタイム
(AMRT) + IP

MS/MS

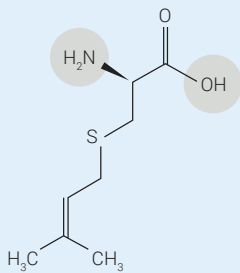
AMRT +
MS/MS

オーソゴナルな情報が増えるほど、化合物同定の信頼性が高まります。

高品質のデータベースライブラリなら、さまざまな信頼性レベルでの同定が可能です。Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリは、代謝物の研究ニーズに応じて、包括的な代謝物データベース (PCD) として、または MS/MS スペクトルを含むデータベースライブラリ (PCDL) として活用できます。精密質量、同位体パターン、リテンションタイムに MS/MS スペクトルの照合を組み合わせることで、同定の信頼性がさらに高まります。



Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリでのデータベース検索による化合物同定結果を示す Agilent MassHunter Qualitative Analysis Workflows の画面。分子構造、代謝物識別子、CAS、注釈などの情報が表示されています。Agilent METLIN メタボロミクスデータベースライブラリと ID Browser でも同様に高品質の結果が得られます。



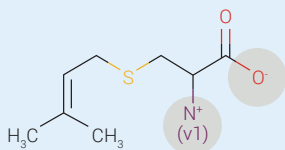
Agilent METLIN PCDL

METLIN ID: 62914

質量数 189.082349

分子式: $C_8H_{15}NO_2S$

HMDB12286



公開データベースの情報

METLIN ID: 62914

質量数 186.058874323

分子式: $C_8H_{12}NO_2S$

HMDB12286

公開データベースの正確な分子式では代謝物を正しく同定できません。

正確で高品質の代謝物データベース

研究の成否は、代謝物を正しく同定できるかどうかにかかっています。Agilent METLIN 代謝物データベースは、綿密な精査により、不正確な同定につながる要因が排除されています。精査プロセスの一環として、データベースの分子式項目は、観察された ESI データに合わせて補正されています。

精査済みの MS/MS スペクトルライブラリ

MS/MS スペクトルの照合によって代謝物を同定するには、まず観察された質量をデータベースと比較し、次に MS/MS フラグメンテーションパターンを比較する必要があります。Agilent METLIN メタボロミクスライブラリのスペクトルは、理論的な精密質量に合わせて補正されているため、より狭い質量許容範囲での同定が可能です。質量許容範囲を狭めることにより過剰な同定を制限できるため、無関係なデータに惑わされずに済みます。

Agilent METLIN*	公開データベース	公開データベースの誤差 (ppm)
41.00329	41.0017	38.74
43.01894	43.0190	-1.43
71.01385	欠落	
89.02442	89.0205	44.01

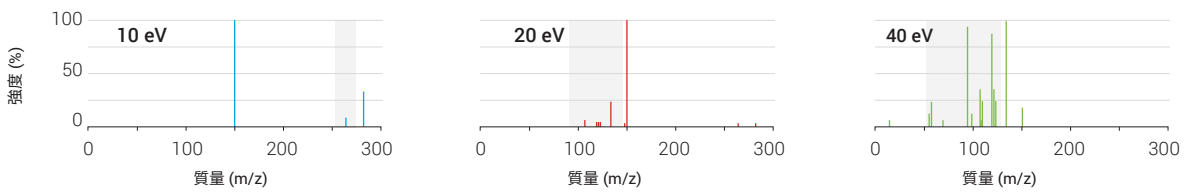
*Agilent METLIN の質量誤差は 0

アジレントの精査プロセスでは、MS/MS スペクトルの適格性も評価されます。このとき、主フラグメントイオンに十分な強度があることが条件となり、低アバンドンスのフラグメントイオンが確実に MS/MS スペクトルに取り込まれます。多くの代謝物から生成されるフラグメントイオンは数種類のみのため、低強度のフラグメントイオンについて信頼性の高いデータが含まれていることが重要になります。D-乳酸に関する上記の表に示すように、公開データベースは、質量誤差が大きだけでなく、3 つのフラグメントイオンのうち 1 つが欠落しています (89.02442 はプリカーサイオン)。

同定の信頼性を高める真正の MS/MS スペクトル

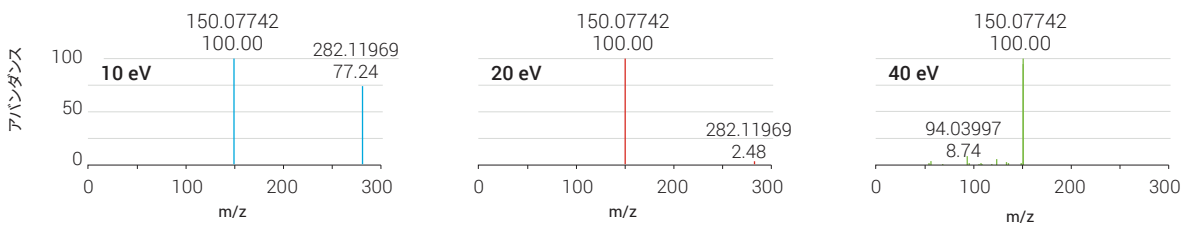
Agilent METLIN メタボロミクスライブラリには、高純度の標準物質を使用して採取した高品質の MS/MS スペクトルが含まれており、コンピュータによる MS/MS スペクトルのライブラリよりも信頼性の高い同定結果が得られます。推測スペクトルと観察スペクトルでは、フラグメントイオンの相対アブダンスの微妙な差異がまったく異なる形で現れることもあります。

コンピュータによる MS/MS 1-メチルアデノシン MID: 6888 コンピュータによる推測スペクトル



Agilent METLIN – 真正 MS/MS

ライブラリスペクトル



上図は、Agilent METLIN データベースに含まれる 1-メチルアデノシンの真正 MS/MS スペクトルと、広く使用されている公開データベースの推測 MS/MS を比較したものです。コンピュータによる MS/MS スペクトルの影付きの領域は、推測スペクトルと観察スペクトルが大きく異なっている領域を示しています。

ホームページ

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

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。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2018
Printed in Japan, April 3, 2018
5990-7854JAJP
Rev 1.0