



サンプルから生物学までを網羅した 効率的なリポドミクスワークフロー

主な利点

- 反復 MS/MS、自動 MS/MS、IM All Ions MS/MS など、複数のデータ取り込みをサポート
- MS/MS ワークフローの基盤となる修正済みの LipidBlast データベースを使った最新の理論的脂質アノテーションツール、Agilent MassHunter Lipid Annotator
- 既存の MS ワークフローを Agilent MassHunter Profinder と Mass Profiler Professional (MPP) で補完
- 質量欠損プロット、リテンションタイム (RT) 対質量プロット、脂質マトリックスなどの独自のデータ視覚化メソッドで、大量の脂質データセットにおける傾向の解明を支援

Agilent MassHunter Lipid Annotator ソフトウェアは、各脂質クラスの脂質標準からモデル化された、Q-TOF CID 断片化のための最新 *in silico* MS/MS データベースに基づいて、脂質のアノテーションに適した確率論と最小二乗法を用いたアルゴリズムの上に構築されています。Lipid Annotator ソフトウェアは、反復 MS/MS データを使用して、高速かつ正確に脂質アノテーションを作成し、RT 情報の入った PCDL スペクトルライブラリを自動的に生成します。リポドミクスワークフローには、MassHunter Profinder と Mass Profiler Professional (MPP)、パーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) マネージャも含まれます。

MPP の脂質分析ワークフローには、内部標準に基づいた脂質クラスの正規化が含まれ、脂質のマトリックス、Kendrick 質量欠損プロット、脂質クラスに基づいて色分けした散布図などの視覚化機能が追加されています。

Lipid Annotator と MPP の間を補完するデータの視覚化も行われます。Lipid Annotator で生成される円グラフは色分けされており、同定された脂質クラスの概要を表します (図 1)。これに付随するのが、同様に色分けされた散布図で、同定された脂質の質量と RT が表示されます。これらのグラフから、各サンプルの重要な脂質クラスについての考察を深めることができます。MPP では、さらに詳しく視覚化されたマトリックス形式のプロットが作成されます。これにより、複数のサンプルセットの間で、脂質がどのように変化したかを統計的に評価できます (図 2)。

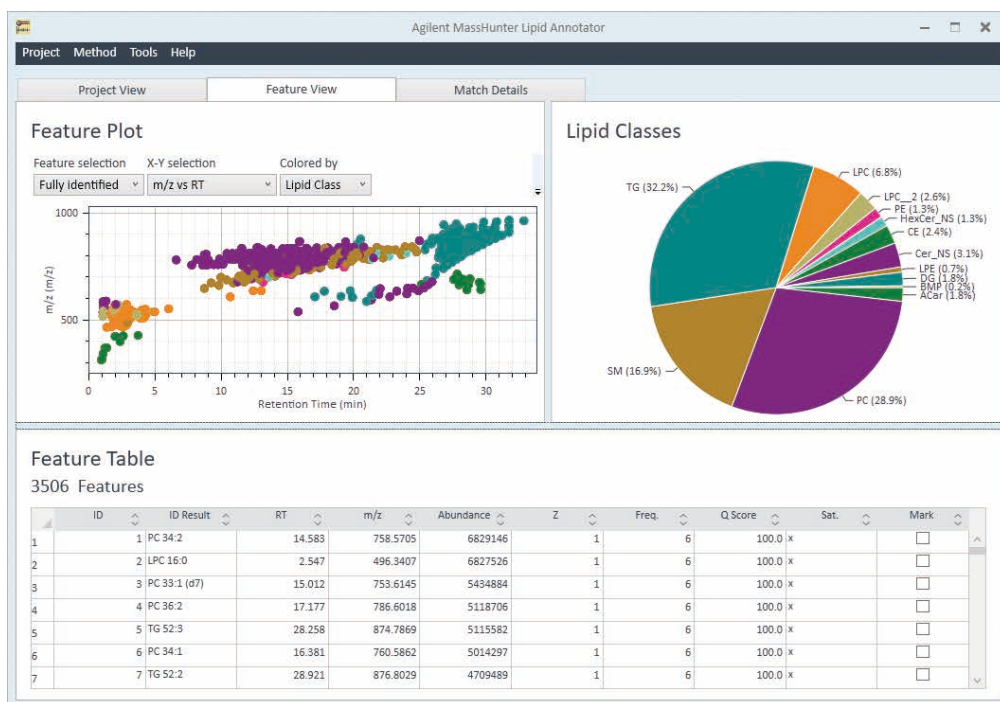
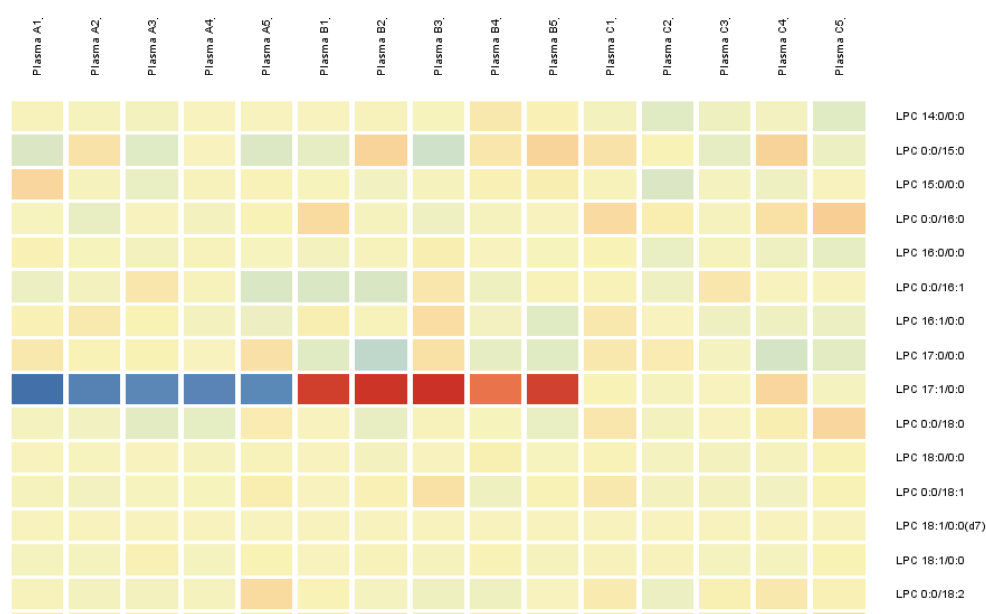


図 1. Lipid Annotator ソフトウェアにより、6 つのプール血漿反復 MS/MS ファイルから、461 種類の脂質を同定。全組成脂質名と、可能な限り、より具体的な成分の脂質レベル名が、PCDL 形式で自動的にエクスポートされます。



... さらに 16 個の LPC

図 2. LPC 脂質クラスのサンプルグループ間での相対アブダンスの差異を示す脂質マトリックスプロット。LPC 17:1 のスパイクした標準は、予測された上昇 (赤) と下降 (青) の規定パターンを示します。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンタ

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おりません。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. 2019
Printed in Japan, March 26, 2019
5994-0725JAJP