

複雑なデータから 重要な情報を可視化

ノンターゲット LC/Q-TOF データ用
Agilent MassHunter Explorer ソフトウェア





LC/Q-TOF に最適なソフトウェアで 高速・高信頼性のシンプルな ノンターゲットデータ解析を実現

高分解能 Agilent LC/Q-TOFは、優れた精度、真度、ダイナミックレンジにより豊富な情報を含むノンターゲットデータが得られます。情報を豊富に含んだ Q-TOF のデータからは、詳細で包括的な知見を得られる一方で、対象化合物を検出し、同定することは容易ではありません。

MassHunter Explorer はノンターゲットデータ解析をより簡単に、より迅速に、よりスマートに実行できるように設計されています。搭載されたユーザーインターフェースでは、正規化、統計解析、視覚化による進化したデータ抽出がシームレスに統合されています。これらを組み合わせることで、単一の使いやすいアプリケーションによってこれらのツールを使用し、迅速にデータから確かな知見を引き出して、研究の生産性を向上することが可能です。

Agilent MassHunter ソフトウェアスイートに含まれている MassHunter Explorer は、異なる条件のサンプル間またはサンプルグループ間で異なる化合物を検出する、Q-TOF LC/MS ノンターゲットスクリーニングアプリケーションに最適なソフトウェアです。



食品



環境



抽出物



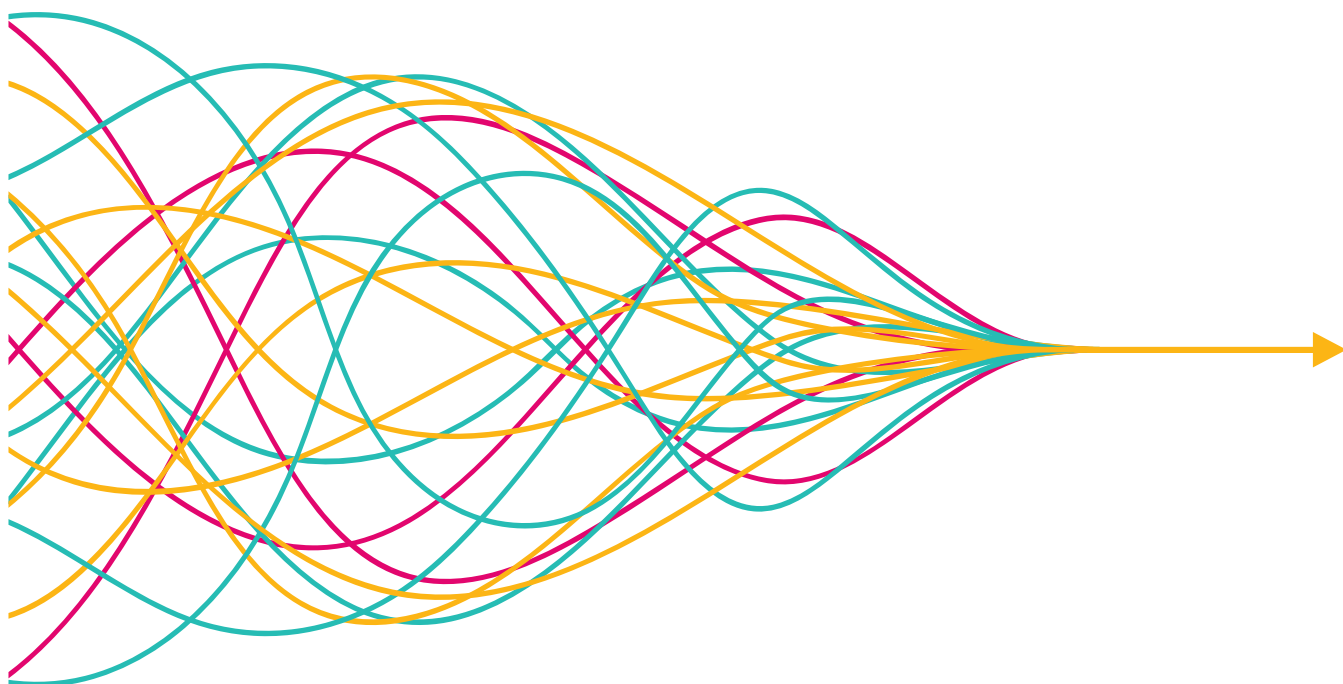
法中毒学



オミクス



天然物



複雑なデータを解明するまでのシンプルで効率的な道

MassHunter Explorer は新規ユーザーでも熟練ユーザーでも、1つのパッケージで包括的な分析と視覚化を行うことができるツールです。ワークフローに沿った直感的なインターフェースでは、ガイドに従って実験の設定やデータの抽出を行い、差分解析を使用して対象化合物を検出し、同定します。

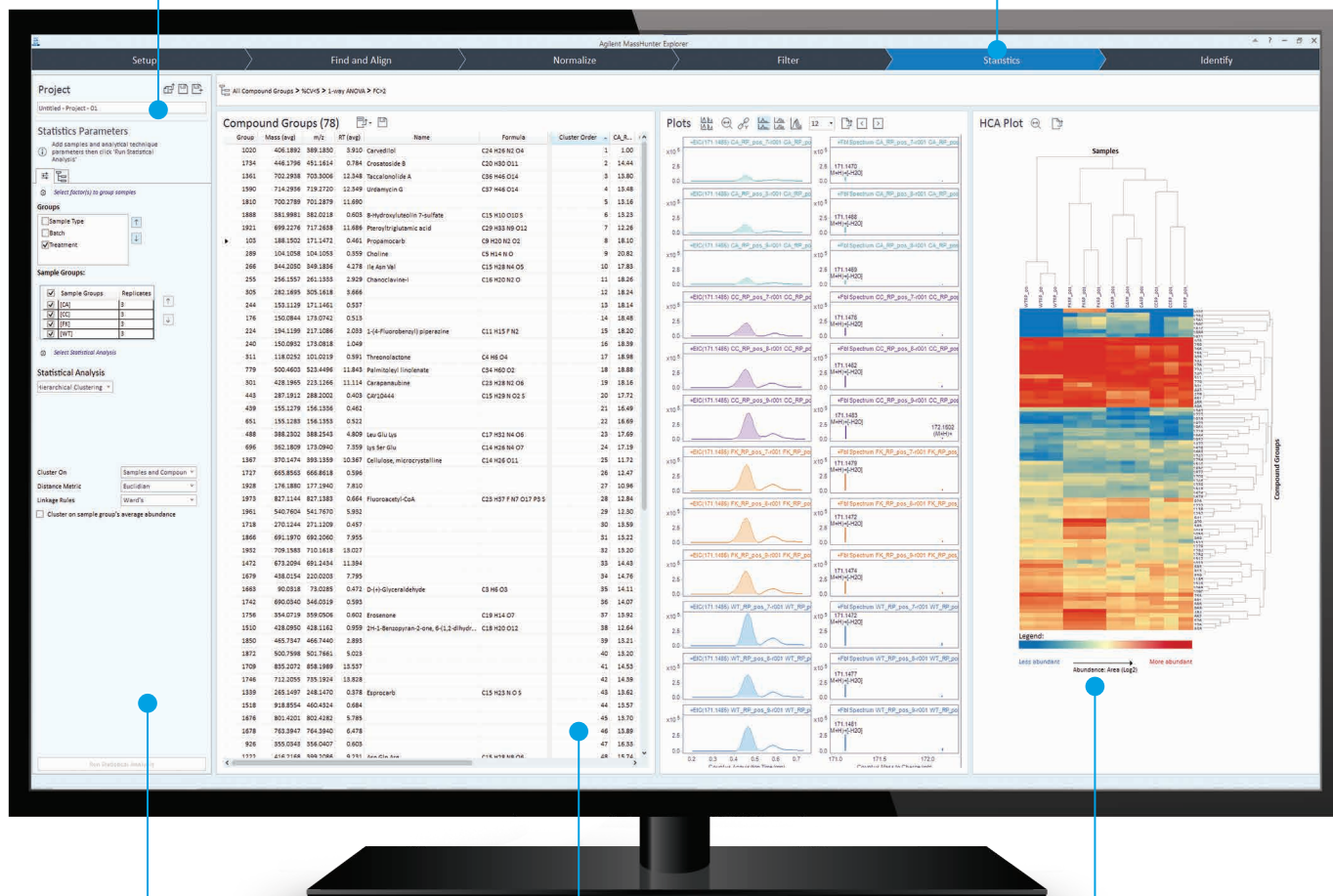
大幅に強化された性能と、シンプルな分析結果の表示により、ノンターゲットワークフローの経験の程度にかかわらず、簡単にデータを扱い、情報を抽出することが可能です。新規ユーザーは事前に搭載された、最適化済みの設定を使用したデータで解析を行うことができ、一方で上級ユーザーは設定をカスタマイズしてさまざまなアプリケーションで 사용할 ことができます。

必要に応じて、MassHunter Qualitative および Quantitative データ解析ソフトウェアへ解析結果を簡単に出力できます。Mass Profiler Professional、R、Python などのより高度な統計解析プログラムへエクスポートすることも可能です。

Agilent MassHunter Explorer : 統合された直感的なワークフロー

プロジェクトベースのワークフローにより、初心者からエキスパートまで、簡単に設定やデータのやり取りが行えます。

効率的で統合された手順により、シンプルなナビゲーションです。



複数の統計アルゴリズムにより、入力されたデータに対して適切なツールを使用できます。

データを適切に前処理して、データ処理を高速化します。

クロマトグラム、スペクトル、統計データを可視化して、すばやく確認できます。

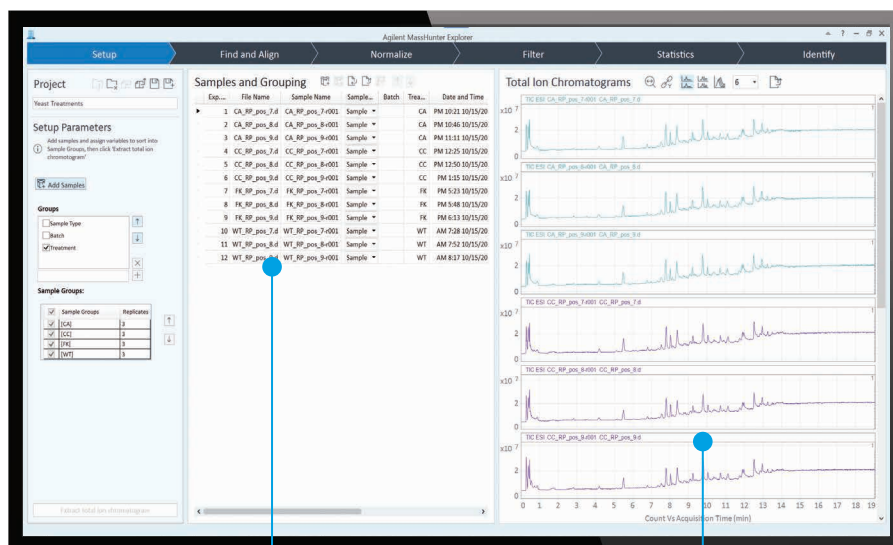
MassHunter Explorer ではガイドに従い、ノンターゲットスクリーニングに必要な条件設定、データ抽出、正規化、フィルタリング、統計解析、化合物の推定を一連の流れで実行できます。新規ユーザーはエキスパートがあらかじめ作成したメソッドを使用できるため、学習期間が短くなります。組織全体でメソッドを共有し、結果の一貫性を確保して、ミスを大幅に低減できます。



結果を明らかにして集中して取り組むための 簡単なステップ

実験計画の設定

最初に、取得したデータを追加し、各サンプルの種類（新しい Pooled QC オプションを含む）、バッチ、カスタムグルーピング変数を定義します。色付けされたクロマトグラムが生成され、次のステップに取り組む前に重ね書き表示で再現性を確認することができます。

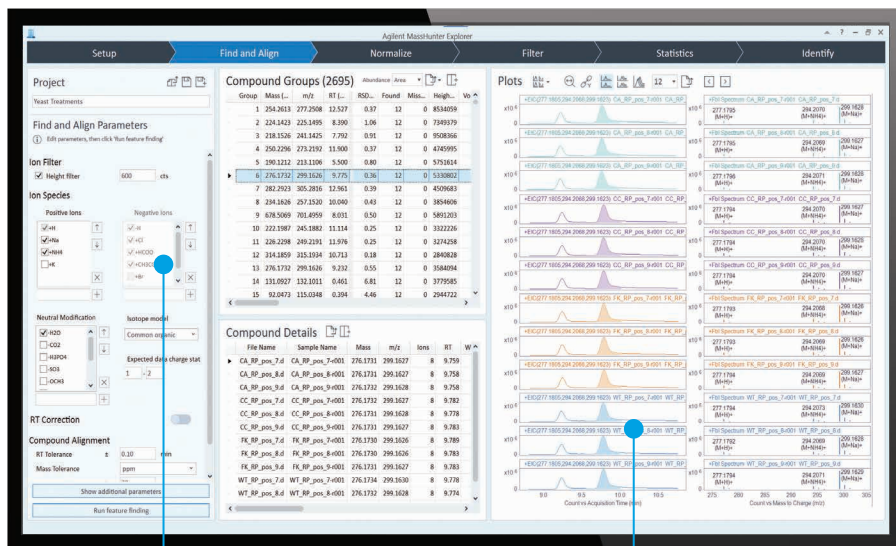


サンプルを読み込んで、
各サンプルに関連付けられた
グループを定義します。

クロマトグラムによって
再現性を確認します。

すべてのサンプルで化合物を検出 およびアラインメント

Find and Align ステップでは、ノンターゲットアルゴリズムを使用して各サンプルから化合物を抽出し、質量とリテンションタイムによりすべてのサンプルで化合物のアラインメントを行います。

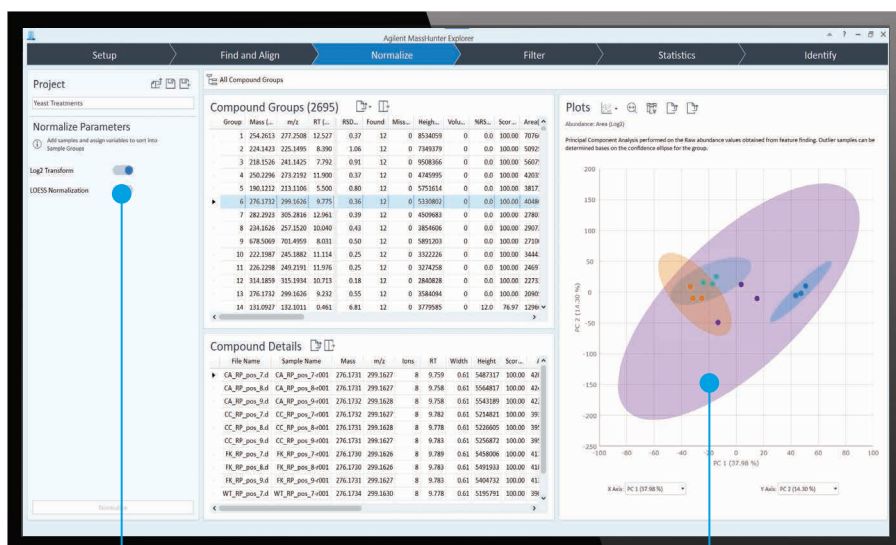


サンプルの化学特性に基づき
パラメータを評価します。

抽出イオンクロマトグラムと
スペクトルを確認します。

データの正規化とフィルタリングに より、不要な変動を除外

サンプル前処理や機器の違いによりシステムエラーが生じることがあり、バッチ間のばらつきにつながる可能性があります。これらのエラーは、LOESS (locally estimated scatterplot smoothing) 正規化手法によって軽減できます。特定のサンプルグループにおけるアバundance、再現性、または化合物の有無に対するフィルタリングが、対象化合物を確認するうえで役立つことがあります。これらのステップを通じて、正規化とフィルタリングプロセスの適用時に、PCAによりデータ品質を確認することができます。



正規化オプションを
選択します。

主成分分析 (PCA) によりサ
ンプルグループを確認
します。

重要な化合物にフォーカス

統計解析手法は、サンプルのグループ間で大きく異なった化合物や、共通する化合物を見つけるのに役立ちます。t検定、倍率変化分析 (Fold change 分析)、ボルケーノプロット、一元または二元配置分散分析、階層的クラスター分析 (HCA) は、対象化合物を見つけるための有用なツールです。これらの手法による結果と機器データを組み合わせて確認することで、すばやく視覚化し、検証できます。



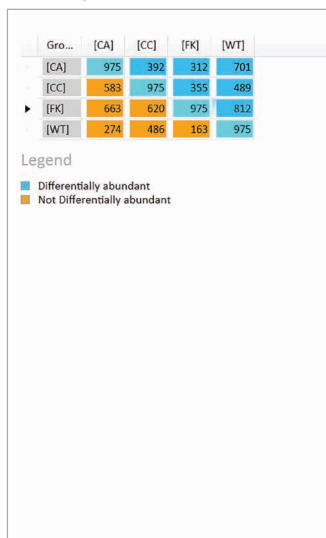
統計解析手法をリストから選択し、重要な対象化合物を確認します。

化合物リストをどのようにフィルタリングして重要な化合物にフォーカスしたかを履歴として表示します。

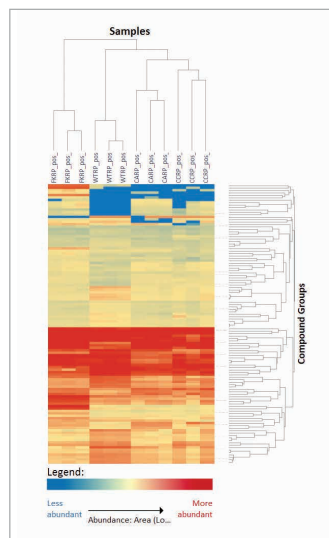
統計解析結果とリンクされたEICとスペクトルを確認します。

リンクされたナビゲーションにより、表またはプロット (クロマトグラム、スペクトル、または統計プロットなど) のいずれかでインタラクティブに化合物を選択できるため、容易に結果の解釈が行えます。すべてのプロットと化合物のリストは簡単にエクスポートできます。

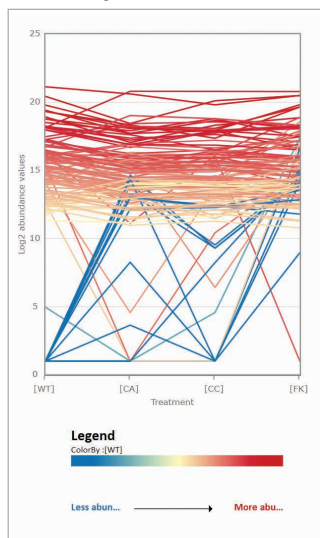
ANOVA post hoc 結果



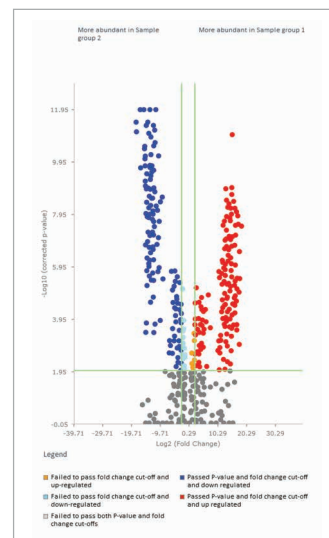
HCA プロット



Fold change プロット



ボルケーノプロット

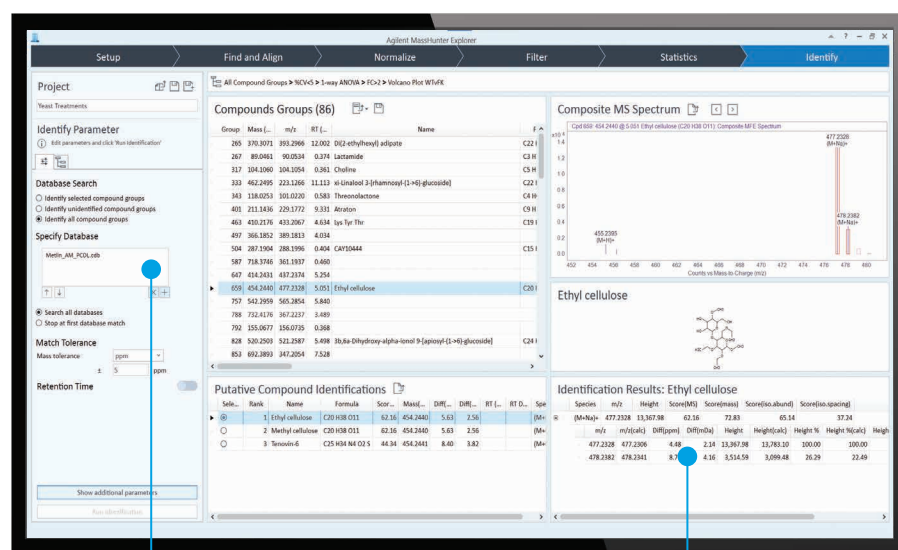


対象化合物の同定

対象化合物が確認されたら、Identify ステップで化合物推定を行います。化合物推定のアルゴリズムは、測定データを理論上の精密質量および同位体パターン、化合物データベースのリテンションタイム（オプション）と適合させる方法に最適化されています。

アジレントの精査された化合物データベースを直接 MassHunter Explorer で使用できます。これらのデータベースには、食品、環境、法医学、医薬品、抽出物、水スクリーニング、メタボロミクス、リポミクスなどの分野の対象化合物が含まれています。

MassBank や MoNA など、オープンアクセスのパブリックライブラリやデータベースのデータは、Agilent ChemVista ソフトウェアで使用可能です。



分析対象物とデータベース
の化合物をマッチさせます。

化合物推定の結果を
確認します。



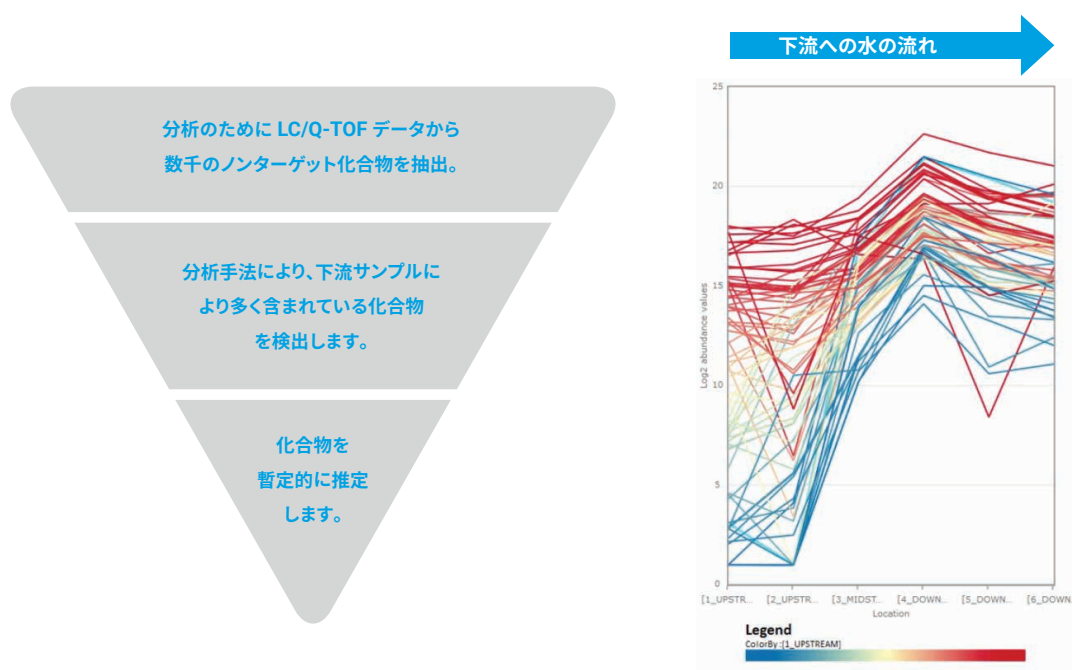
環境アプリケーション

河川水に含まれる新規汚染物質の検出と同定

LC/Q-TOF システムは、環境汚染の原因である新規汚染物質、代謝物、微生物分解生成物の検出に優れているツールです。標準物質がほとんど入手できず、サンプルごとに数千のピークが検出される可能性があるため、これらの検出と同定は容易ではありません。

この事例では、河川水サンプルとして、天然の源流（コントロール）と都市中心部の下流から収集しました。目的は、水質に対する廃水の影響を測定することでした。LC/Q-TOF と MassHunter Explorer データ解析とを組み合わせた精密質量分析により、下流の場所から収集したサンプルに含まれる、環境に重大な影響を及ぼす化合物を検出し、暫定的に化合物推定が行えました。

可能性のあるピークを数千も辛抱強く評価する代わりに、環境に影響を及ぼす懸念のある重要な化合物に絞り込むことができました。結果として、廃水の影響をシンプルな手順で迅速に特性解析し、既知および未知の汚染物質を推定することができました。





メタボロミクスアプリケーション

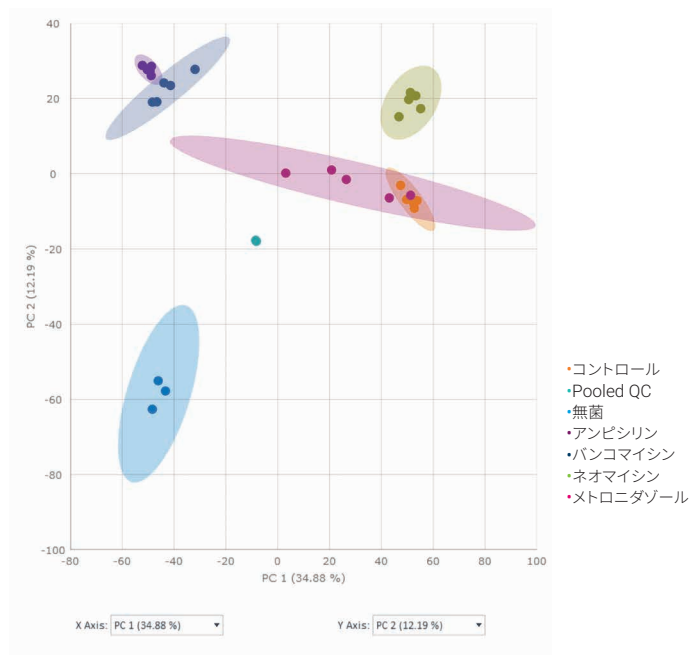
メタボロームに対する腸内微生物叢の影響を解明

基礎研究、トランスレーショナル、臨床研究に及ぶ幅広いアプリケーションで、Q-TOF LC/MS は複雑なサンプルマトリックス中の数千の代謝物をプロファイリングし、化合物を検出できます。

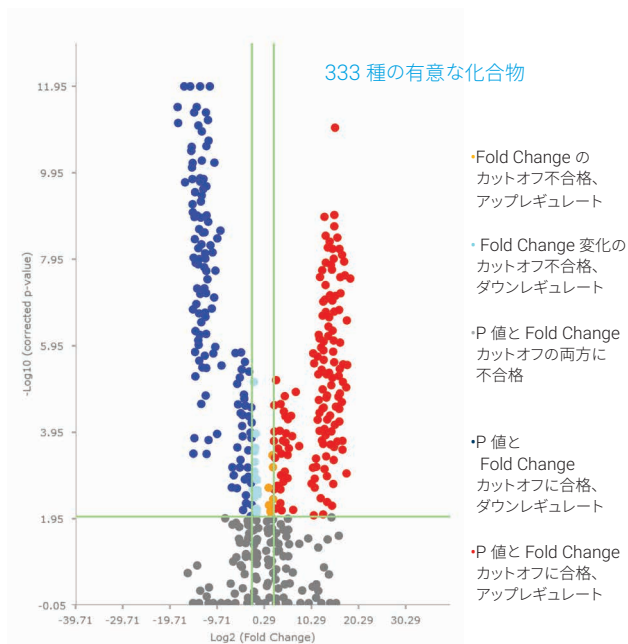
この事例では、盲腸メタボロームに対する抗生物質治療の影響を調査しました。新しい Agilent Revident LC/Q-TOF を使用して、4 種類の抗生物質で治療したマウスと、微生物叢のない無菌のマウス由来の盲腸内容物を抽出し、測定しました。

MassHunter Explorer のデータ解析では、さらなるフィルタリングと統計を行わなくても明確なサンプルが表示されました。333 種の可能性のある微生物叢由来代謝物、および/または微生物叢改変代謝物を引き出すために、ボルケーノプロットを使用しました。

5,067 種の化合物を示す 35 サンプルの PCA



コントロール群と GF マウスのボルケーノプロット



数千もの可能性のあるピークを一つ一つ評価する代わりに、PCA によってサンプルグループを迅速に同定し、ボルケーノプロットにより重要な種に絞り込むことができました。多様なサンプルを迅速かつ簡単に特性解析し、個別の分析対象物が解明されました。

インテリジェンスがもたらすひらめき

次世代の Agilent LC/Q-TOF 機器およびソフトウェアは、継続的な技術革新を基盤に、ラボの運用を最適化します。その範囲は機器に留まらず、時間を短縮するインテリジェンス、効率的なワークフロー、信頼できるパートナーによるサービスにまで及びます。そのため、より熟考を要する高度なタスクに注力でき、ワークフロープロセスにおけるさまざまな課題に対処できます。

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。

DE72621435

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2023
Printed in Japan, June 5, 2023
5994-6107JAJP