

LCMS-9030用 LabSolutions™ LCMS  
Exact Mass Database for Endogenous Metabolites

# 代謝物精密質量データベース



## 「Ready to Use Method」でメタボロミクス

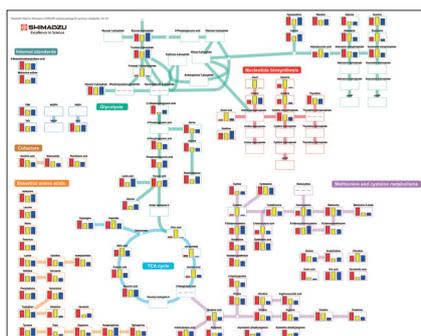
メタボロミクスで対象となる代謝物は幅広い物性を持ちます。そのため、代謝物を網羅的に測定するためには、対象代謝物に合った分析メソッドが必要となります。

本データベースには、幅広い物性の代謝物を網羅的解析するための「Ready to Use」メソッドが複数含まれており、LCやMSの分析条件を検討する必要がありません。また、それぞれの代謝物・サンプルに合った前処理例も収録されているため、煩雑な条件検討を行うことなくメタボロミクスをはじめいただけます。

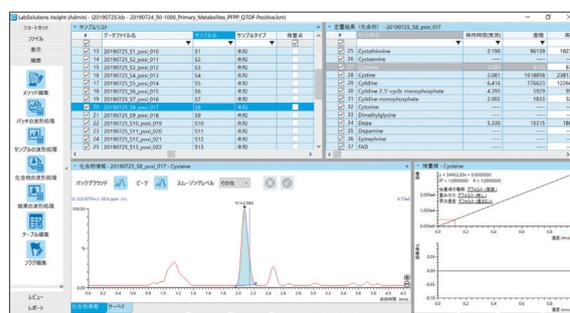
## 470成分の代謝物情報が登録

本データベースは、LC/MS/MSメソッドパッケージシリーズで実績のある一次代謝物、細胞培養プロファイリング、脂質メディエーター、短鎖脂肪酸、胆汁酸をベースに開発された精密質量データベースです。のべ470成分（内部標準物質を含む）の代謝物の保持時間、精密質量情報が含まれます。

本データベースは、マルチオミクス解析パッケージ（別売り）に対応しています。分析結果をマルチオミクス解析パッケージで解析することで、「代謝物マッピング」、「ネットワーク解析」、「代謝物マップへの投影」が簡単にできます。



メソッド名	登録化合物数
一次代謝物	99
培地成分	96
脂質メディエーター	214
短鎖脂肪酸	23
胆汁酸	38



## 登録化合物一覧

化合物分類	化合物名	P.M.	C.C.	L.M.	S.C.	B.A.
アミノ酸	4-Hydroxyproline	○				
	5-Oxoproline		○			
	Acetylcarnitine	○				
	Alanine	○	○			
	Alanyl-glutamine		○			
	Arginine	○	○			
	Asparagine	○	○			
	Aspartic acid	○	○			
	Asymmetric dimethylarginine	○				
	Citrulline	○	○			
	Cystathionine	○	○			
	Cysteine	○	○			
	Cystine	○	○			
	Cytosine	○				
	Dimethylglycine	○				
	Glutamic acid	○	○			
	Glutamine	○	○			
	Glycine	○	○			
	Glycyl-glutamine		○			
	Histidine	○	○			
Homocysteine	○					
Homocystine	○					
Isoleucine	○	○				
Leucine	○	○				
Lysine	○	○				

化合物分類	化合物名	P.M.	C.C.	L.M.	S.C.	B.A.
アミノ酸	Methionine	○	○			
	Methionine sulfoxide	○	○			
	N-Acetylaspartic acid		○			
	N-Acetylcysteine		○			
	Ornithine	○	○			
	Phenylalanine	○	○			
	Pipecolic acid		○			
	Proline	○	○			
	Serine	○	○			
	Symmetric dimethylarginine	○				
有機酸	Threonine	○	○			
	Tryptophan	○	○			
	Tyrosine	○	○			
	Valine	○	○			
	2-Aminobutyric acid	○	○			
	2-Ethylbutyric acid				○	
	2-Hydroxyglutaric acid					○
	2-Isopropylmalic acid			○		
	2-Ketoglutaric acid	○			○	
	2-Ketoisovaleric acid		○			
2-Oxobutyric acid					○	
4-Aminobutyric acid	○	○				
Acetic acid					○	
Aconitic acid	○					
Adenylsuccinic acid	○					

化合物分類	化合物名	P.M.	C.C.	L.M.	S.C.	B.A	
有機酸	Argininosuccinic acid	○					
	beta-Hydroxybutyric acid				○		
	Butyric acid				○		
	Citric acid	○	○		○		
	Creatine	○					
	Fumaric acid	○	○		○		
	Gluconic acid		○				
	Glycolic acid				○		
	Glyoxylic acid				○		
	Isobutyric acid				○		
	Isocitric acid	○	○		○		
	Isovaleric acid				○		
	Lactic acid	○	○		○		
	Maleic acid				○		
	Malic acid	○	○		○		
	Malonic acid				○		
	Methionine sulfone	○					
	Nicotinic acid	○	○				
	Ophthalmic acid	○					
	Orotic acid	○					
	Oxaloacetic acid				○		
	Pantothenic acid	○	○				
	Propionic acid				○		
	Pyruvic acid	○	○		○		
	Succinic acid	○	○		○		
	Threonic acid		○				
	Uric acid	○	○				
	Valeric acid				○		
	胆汁酸	12-keto-Deoxycholic acid					○
		7-keto-Deoxycholic acid					○
7-keto-Lithocholic acid						○	
allo-Chenodeoxycholic acid						○	
allo-Lithocholic acid						○	
Chenodeoxycholic acid						○	
Cholic acid		○				○	
Deoxycholic acid						○	
Glychenodeoxycholic acid						○	
Glycocholic acid						○	
Glycodeoxycholic acid						○	
Glycohyodeoxycholic acid						○	
Glycolithocholic acid						○	
Glycoursodeoxycholic acid						○	
Hyodeoxycholic acid						○	
Lithocholic acid						○	
Tauro-a-muricholic acid						○	
Tauro-b-muricholic acid						○	
Taurochenodeoxycholic acid						○	
Taurocholic acid		○				○	
Taurodeoxycholic acid					○		
Taurohyodeoxycholic acid					○		
Tauroolithocholic acid					○		
Taurooursodeoxycholic acid					○		
Ursodeoxycholic acid					○		
α-Muricholic acid					○		
β-Muricholic acid					○		
ω-Muricholic acid					○		
核酸関連化合物	Adenine	○	○				
	Adenosine	○	○				
	Adenosine 3',5'-cyclic monophosphate	○					
	Adenosine monophosphate	○	○				
	Citicoline	○					
	Cytidine	○	○				
	Cytidine 3',5'-cyclic monophosphate	○					
	Cytidine monophosphate	○	○				
	Deoxycytidine		○				
	Guanine	○	○				
	Guanosine	○	○				
	Guanosine 3',5'-cyclic monophosphate	○					
	Guanosine monophosphate	○	○				
	Inosine	○	○				
	Thymidine	○	○				
	Thymidine monophosphate	○					
	Thymine	○	○				
Uracil	○	○					
Uridine	○	○					

化合物分類	化合物名	P.M.	C.C.	L.M.	S.C.	B.A
核酸関連化合物	Xanthine	○	○			
	Xanthosine		○			
ビタミン	4-Aminobenzoic acid		○			
	4-Hydroxyphenyllactic acid	○	○			
	Ascorbic acid		○			
	Ascorbic acid 2-phosphate		○			
	Biotin		○			
	Cyanocobalamin		○			
	Ergocalciferol		○			
	Folic acid		○			
	Folinic acid		○			
	Lipoic acid		○			
	Niacinamide	○	○			
	Pyridoxal		○			
	Pyridoxine		○			
Riboflavin		○				
Tocopherol acetate		○				
脂質 メディエーター	11(S)-HETE				○	
	11-trans LTC4				○	
	11-trans LTD4				○	
	11-trans LTE4				○	
	11β-Prostaglandin E2				○	
	11β-Prostaglandin F2α				○	
	12(S)-HETE				○	
	12(S)-HHTe				○	
	12-oxo LTB4				○	
	15(S)-HETE				○	
	15(S)-HpETE				○	
	15-keto Prostaglandin E2				○	
	15-keto Prostaglandin F1α				○	
	15-keto Prostaglandin F2α				○	
	15-OxoETE				○	
	18-carboxy dinor LTB4				○	
	19(S)-HETE				○	
	20-carboxy arachidonic acid				○	
	20-carboxy leukotriene B4				○	
	20-HETE				○	
	20-hydroxy leukotriene B4				○	
	20-hydroxy Prostaglandin E2				○	
	20-hydroxy Prostaglandin F2α				○	
	5(S),14(R)-LXB4				○	
	5(S)-HEPE				○	
	5(S)-HETE				○	
	5(S)-HETe				○	
	5(S)-HpEPE				○	
	5(S)-HpETE				○	
	5-OxoETE				○	
	6-keto Prostaglandin E1				○	
	6-keto-Prostaglandin F1α				○	
	6-trans LTB4				○	
	7(R)-Maresin 1				○	
	8(S),15(S)-DiHETE				○	
	8(S)-HEPE				○	
	8(S)-HETE				○	
	8(S)-HETe				○	
	8-iso Prostaglandin A1				○	
	8-iso Prostaglandin A2				○	
8-iso Prostaglandin E1				○		
8-iso Prostaglandin E2				○		
9(S)-HEPE				○		
Arachidonic Acid (AA)				○		
Arachidonoyl ethanamide				○		
Azelaoyl PAF				○		
Docosahexaenoic Acid (DHA)				○		
Eicosapentaenoic Acid (EPA)				○		
iPF2α-IV				○		
Leukotriene B3				○		
Leukotriene B4				○		
Leukotriene B5				○		
Leukotriene C4				○		
Leukotriene D4				○		
Leukotriene E4				○		
Leukotriene F4				○		
Lipoxin A5				○		
LTB4 ethanamide				○		

P.M.: 一次代謝物分析メソッド、C.C.: 培地成分分析メソッド、L.M.: 脂質メディエーター分析メソッド、S.C.: 短鎖脂肪酸分析メソッド、B.A.: 胆汁酸分析メソッド  
 本データベースには、上記代謝物を含む 470 成分の代謝物および内部標準物質の保持時間、精密質量情報が登録されています。  
 ※対応機種: LCMS-9030

## 登録化合物一覧

化合物分類	化合物名	P.M.	C.C.	L.M.	S.C.	B.A.
脂質 メディエーター	N-acetyl LTE4			○		
	OEA (oleoyl ethanolamide)			○		
	PAF C-16			○		
	Prostaglandin A1			○		
	Prostaglandin A2			○		
	Prostaglandin D1			○		
	Prostaglandin D2			○		
	Prostaglandin D3			○		
	Prostaglandin E1			○		
	Prostaglandin E2			○		
	Prostaglandin E3			○		
	Prostaglandin F1α			○		
	Prostaglandin F2α			○		
	Prostaglandin F3α			○		
	Prostaglandin J2			○		
	Prostaglandin K2			○		
	Prostaglandin D2 Ethanolamide			○		
	Prostaglandin E1 ethanolamide			○		
	Prostaglandin E2 Ethanolamide			○		
	Prostaglandin F2α Ethanolamide			○		
	Resolvin D1			○		
	Resolvin D2			○		
	Resolvin D3			○		
	Resolvin D4			○		
	Resolvin D5			○		
	Resolvin E1			○		
	tetranor-12(S)-HETE			○		
	tetranor-PGAM			○		
	tetranor-PGDM			○		
	tetranor-PGEM			○		
	tetranor-PGFM			○		
	tetranor-PGJM			○		
	Thromboxane B1			○		
	Thromboxane B2			○		

化合物分類	化合物名	P.M.	C.C.	L.M.	S.C.	B.A.
その他	2-Aminoethanol		○			
	2-Morpholinoethanesulfonic acid	○				
	3-Methyl-2-oxovaleric acid		○			
	5-Glutamylcysteine	○	○			
	Acetylcholine	○				
	Allantoin	○				
	Carnitine	○				
	Carnosine	○				
	Choline	○	○			
	Creatinine	○				
	Cysteamine	○				
	Dopa	○				
	Dopamine	○				
	Epinephrine	○				
	Ethylenediamine		○			
	FAD	○				
	FMN	○				
	Glucosamine		○			
	Glutathione	○	○			
	Glyceric acid		○			
	Hexose (Glucose)		○			
	Histamine	○	○			
	Hypoxanthine	○	○			
	Kynurenine	○	○			
	NAD	○				
	Norepinephrine	○				
	O-Phosphoethanolamine		○			
	Oxidized glutathione	○	○			
	Penicillin G		○			
	Putrescine		○			
	S-Adenosylhomocysteine	○				
	S-Adenosylmethionine	○				
	Serotonin	○				
	Sucrose		○			

P.M.: 一次代謝物分析メソッド, C.C.: 培地成分分析メソッド, L.M.: 脂質メディエーター分析メソッド, S.C.: 短鎖脂肪酸分析メソッド, B.A.: 胆汁酸分析メソッド  
 本データベースには、上記代謝物を含む470成分の代謝物および内部標準物質の保持時間、精密質量情報が登録されています。  
 ※対応機種: LCMS-9030

### 注意事項

1. LabSolutions LCMSは、Ver.5.97以降が必要です。
2. 本メソッドパッケージは研究用です。臨床診断用途で使用することはできません。

LCMSおよびLabSolutionsは、株式会社島津製作所の商標です。  
 GARUDAは、システム・バイオロジー研究機構の商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。  
 なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。  
 本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証を受けておりません。  
 治療目的およびその手続き上での使用はできません。  
 トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。  
 外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

# 株式会社 島津製作所

分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

東京支社 101-8448 東京都千代田区神田錦町1丁目3  
 (03)3219-(官公庁担当) 5631・(大学担当) 5616・(会社担当) 5685  
 関西支社 530-0012 大阪市北区芝田1丁目1-4 阪急ターミナルビル14階  
 (06)6373-(官公庁・大学担当) 6541・(会社担当) 6556  
 札幌支店 060-0807 札幌市北区北七条西2丁目8-1 札幌北ビル9階 (011)700-6605  
 東北支店 980-0021 仙台市青葉区中央2丁目9-27 プライムスクエア広瀬通12階 (022)221-6231  
 郡山営業所 963-8877 郡山市堂前町6-7 郡山フコク生命ビル2階 (024)939-3790  
 つくば支店 305-0031 つくば市吾妻3丁目17-1  
 (029)851-(官公庁・大学担当) 8511・(会社担当) 8515  
 北関東支店 330-0843 さいたま市大宮区吉敷町1-41 明治安田生命大宮吉敷町ビル8階  
 (048)646-(官公庁・大学担当) 0095・(会社担当) 0081  
 横浜支店 220-0004 横浜市西区北幸2丁目8-29 東武横浜第3ビル7階  
 (045)311-(官公庁・大学担当) 4106・(会社担当) 4615  
 静岡支店 422-8062 静岡市駿河区稲川1丁目1-1 伊伝静岡駅前ビル2階 (054)285-0124

名古屋支店 450-0001 名古屋市中村区那古野1丁目47-1 名古屋国際センタービル19階  
 (052)565-(官公庁・大学担当) 7521・(会社担当) 7531  
 京都支店 604-8445 京都市中京区西ノ京徳大寺町1  
 (075)823-(官公庁・大学担当) 1604・(会社担当) 1603  
 神戸支店 650-0033 神戸市中央区江戸町9-3 栄光ビル9階 (078)331-9665  
 岡山営業所 700-0826 岡山市北区磨屋町3-10 岡山ニューシティビル6階 (086)221-2511  
 四国支店 760-0017 高松市番町1丁目6-1 高松NKビル9階 (087)823-6623  
 広島支店 732-0057 広島市東区二葉の里3丁目5-7 GRANODE広島5階 (082)236-9652  
 九州支店 812-0039 福岡市博多区冷泉町4-20 島津博多ビル4階  
 (092)283-(官公庁・大学担当) 3332・(会社担当) 3334

島津コールセンター(操作・分析に関する電話相談窓口)  0120-131691  
 IP電話等: (075)813-1691

<https://www.an.shimadzu.co.jp/>