

Multi-Analyte Screening Software

[illegible]

LabSolutions Insight Explore™

定性解析のワークフローを 強力にサポート

LabSolutions Insight Explore は、精密質量分析における定性解析から定量解析までをサポートするソフトウェアです。高分解能・高質量精度質量分析計データを用いた精度の高い成分検出、組成推定、構造解析、ライブラリ検索、多価イオン解析が可能です。

成分検出、組成推定、ライブラリ検索で、総合的に未知成分の同定をサポート。精密質量情報もしくは組成式を使って構造を検索し、MS/MSスペクトルに対するフラグメント帰属も実施できます。さらに、定性解析をまとめてバッチ処理、レポート出力する機能を搭載し、農薬や違法薬物の分析など、大量のデータを効率よく定性解析することが可能です。

このように、未知化合物の定性・構造解析までを簡単かつ効率的に実行できます。



POINT 01

製薬

既知および未知の不純物を
微量の検体から確実に検出したい



POINT 02

環境

水や土壌の汚染物質を確実に
検出したい



POINT 03

法薬毒

既知の化合物に似ている未知化合物
を微量の検体から検出したい

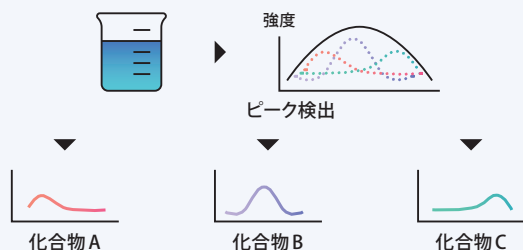
シンプルな未知化合物 同定ワークフロー

LabSolutions Insight Explore は、基本的な未知化合物の同定ワークフローを効率的に実現する機能を搭載しています。

STEP 01

化合物候補の検出

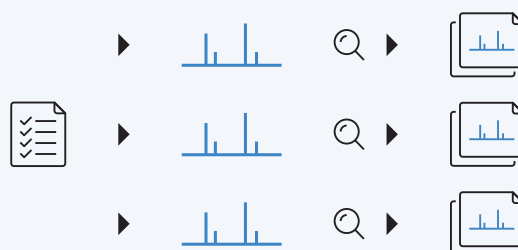
クロマトグラムに潜む、複数の化合物候補のピークを検出します。

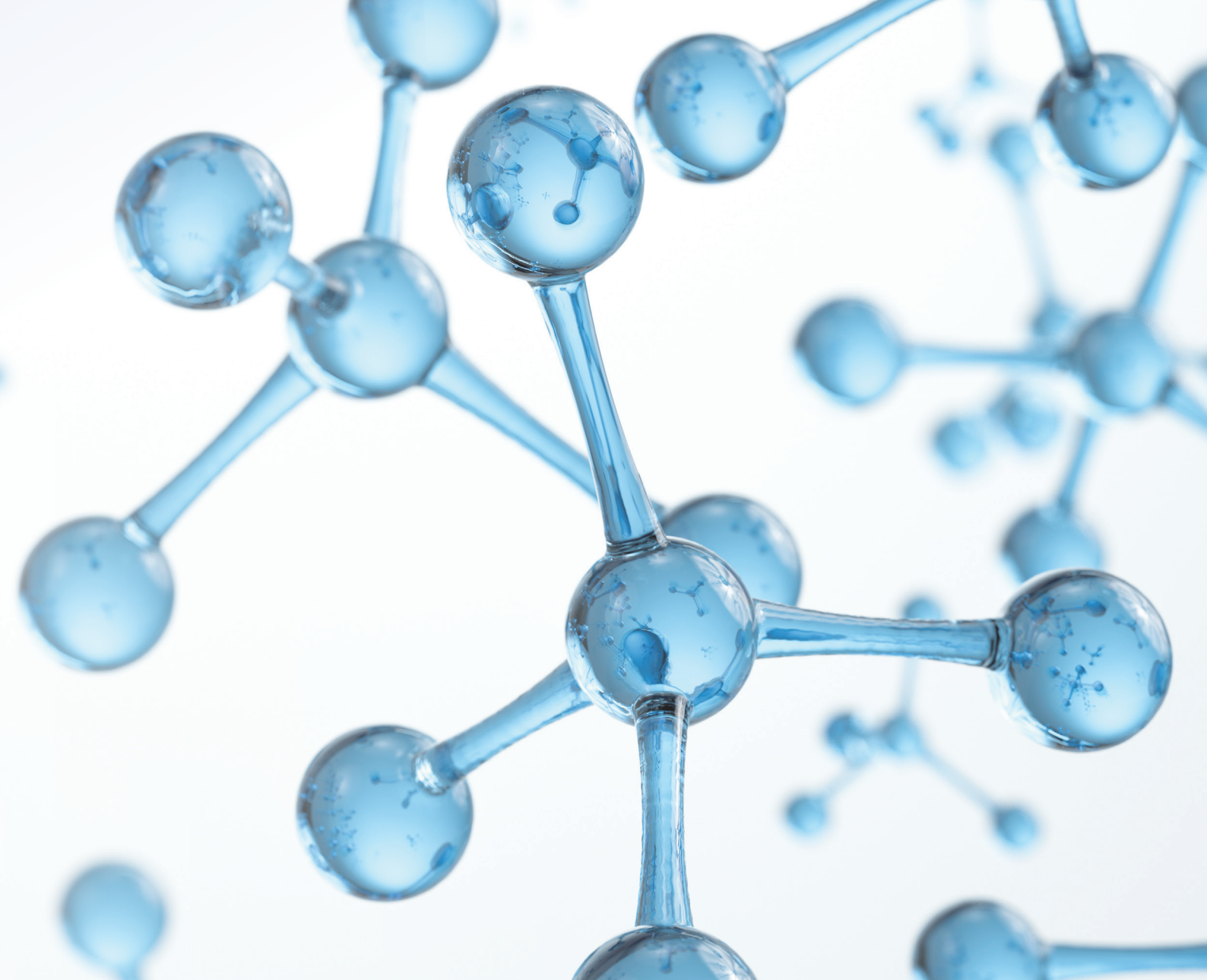


STEP 02

スクリーニング

検出されたピークから、既知の化合物を探索し、同定します。

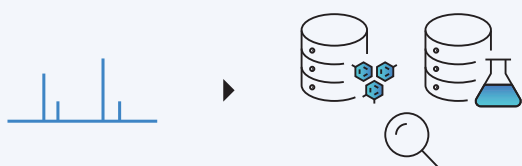




STEP 03

未知化合物の同定

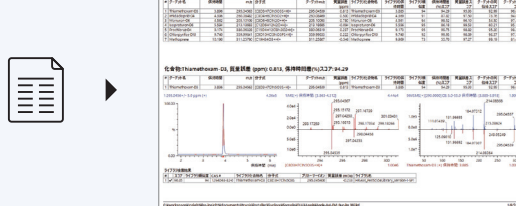
未知ピークのクロマトグラム/スペクトルを確認し、ライブラリ検索やフラグメント帰属で化合物を同定します。



STEP 04

レポートの出力

同定された化合物の一覧と各化合物をまとめてレポートで出力します。



効率的な定性解析を実現する解析プラットフォーム



ANALYZE

解析ワークフローを支える中核機能

化合物候補の検出

スクリーニング

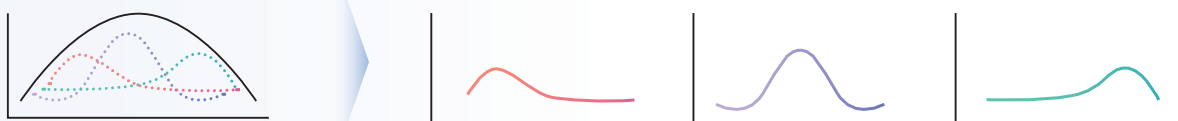
未知化合物の同定

高分解能・高質量精度質量分析計からは膨大なデータが生成され、ピークの同定、定性、定量解析も複雑です。LabSolutions Insight Exploreはシンプルなワークフローで、定性から定量解析をサポートします。AnalyzeはLabSolutions Insight Exploreの基盤となるアプリケーションで、島津独自のアルゴリズムを使っ

て、採取されたデータに含まれる未知の成分のピークを網羅的に検出します。

Analyzeを起点に、組成推定、ライブラリ検索などのアプリケーションと連携し、未知成分の精度を上げ、化合物同定、定量解析へのワークフローをサポートします。

未知化合物の絞り込み



化合物候補の検索

検出時間 (min)	質量 (m/z)	検出強度	検出確率 (%)	検出結果	検出条件	検出モード	検出パラメータ	検出結果
10.0	6.980	246.18000	0.480	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.1	6.980	246.17980	0.475	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.2	6.980	246.17960	0.470	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.3	6.980	246.17940	0.465	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.4	6.980	246.17920	0.460	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.5	6.980	246.17900	0.455	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.6	6.980	246.17880	0.450	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.7	6.980	246.17860	0.445	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.8	6.980	246.17840	0.440	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.9	6.980	246.17820	0.435	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.0	6.980	246.17800	0.430	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.1	6.980	246.17780	0.425	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.2	6.980	246.17760	0.420	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.3	6.980	246.17740	0.415	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.4	6.980	246.17720	0.410	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.5	6.980	246.17700	0.405	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.6	6.980	246.17680	0.400	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.7	6.980	246.17660	0.395	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.8	6.980	246.17640	0.390	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.9	6.980	246.17620	0.385	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
12.0	6.980	246.17600	0.380	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...

検出時間 (min)	質量 (m/z)	検出強度	検出確率 (%)	検出結果	検出条件	検出モード	検出パラメータ	検出結果
10.0	6.980	246.18000	0.480	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.1	6.980	246.17980	0.475	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.2	6.980	246.17960	0.470	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.3	6.980	246.17940	0.465	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.4	6.980	246.17920	0.460	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.5	6.980	246.17900	0.455	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.6	6.980	246.17880	0.450	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.7	6.980	246.17860	0.445	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.8	6.980	246.17840	0.440	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
10.9	6.980	246.17820	0.435	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.0	6.980	246.17800	0.430	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.1	6.980	246.17780	0.425	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.2	6.980	246.17760	0.420	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.3	6.980	246.17740	0.415	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.4	6.980	246.17720	0.410	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.5	6.980	246.17700	0.405	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.6	6.980	246.17680	0.400	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.7	6.980	246.17660	0.395	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.8	6.980	246.17640	0.390	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
11.9	6.980	246.17620	0.385	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...
12.0	6.980	246.17600	0.380	[C10H15O6PS+NH4]	...	...	...	...

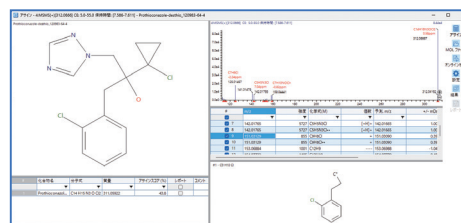
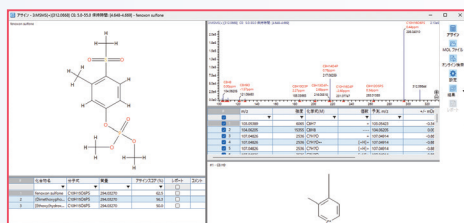
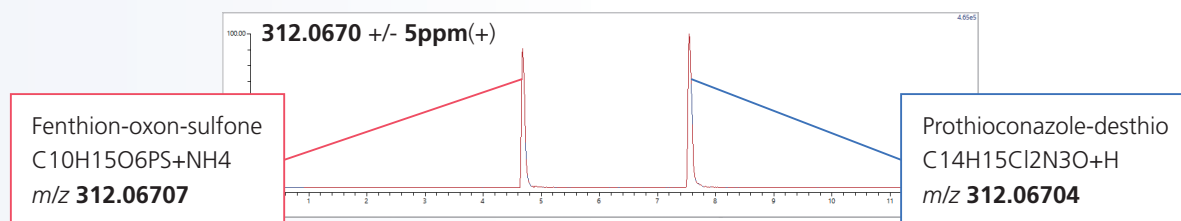


ASSIGN

フラグメント情報で簡単に構造解析

未知化合物の同定

得られた精密質量のスペクトルに対し、オンラインデータベースから該当する化合物の構造式の候補を取得、分子構造のフラグメントパターンを算出し、スペクトルピークに対して各フラグメントを帰属します。データベース検索で得られた化合物情報を候補リストとして出力でき、フラグメント帰属の一致度によって異性体の判別を支援することも可能です。



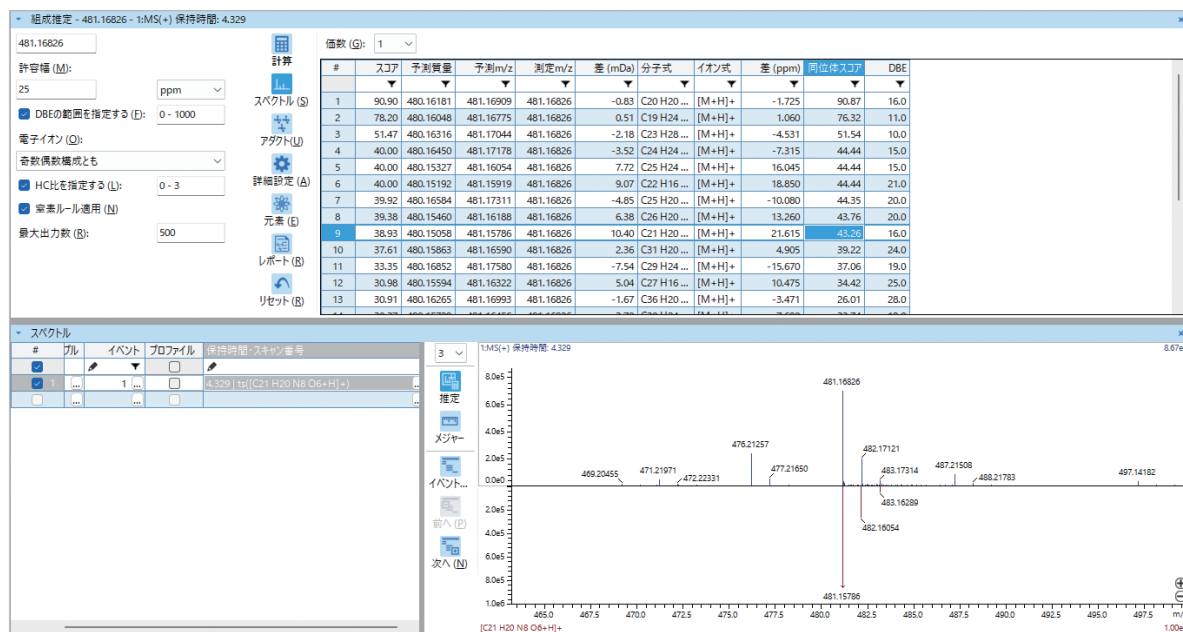


PREDICT

スペクトル情報で未知化合物の組成推定

未知化合物の同定

質量電荷比 (m/z) から元素の組み合わせを推定。サンプルの実スペクトルと化合物候補の理論スペクトルを比較し、同位体パターンも考慮したスコアを計算します。これらの情報で、スペクトルの組成情報を検討できます。

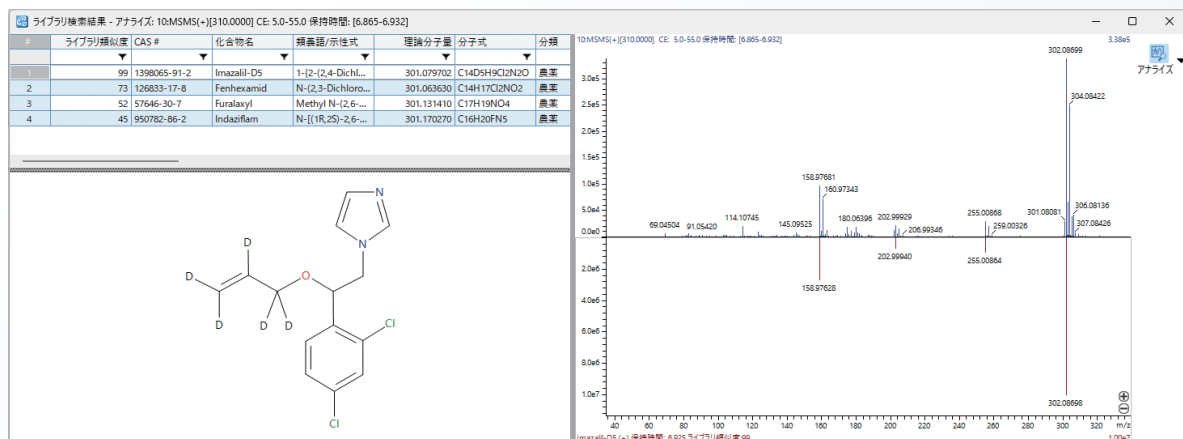


LIBRARY SEARCH

高速・高性能なライブラリ検索 & 編集

未知化合物の同定

MS/MSスペクトルでライブラリ検索を実行。高速かつ高性能のInsightアルゴリズムで、論理スペクトルや構造式を高速で検索、一つの画面で同時に確認できます。表形式のライブラリエディタで、簡単に編集も可能です。



多様な定性解析をサポート

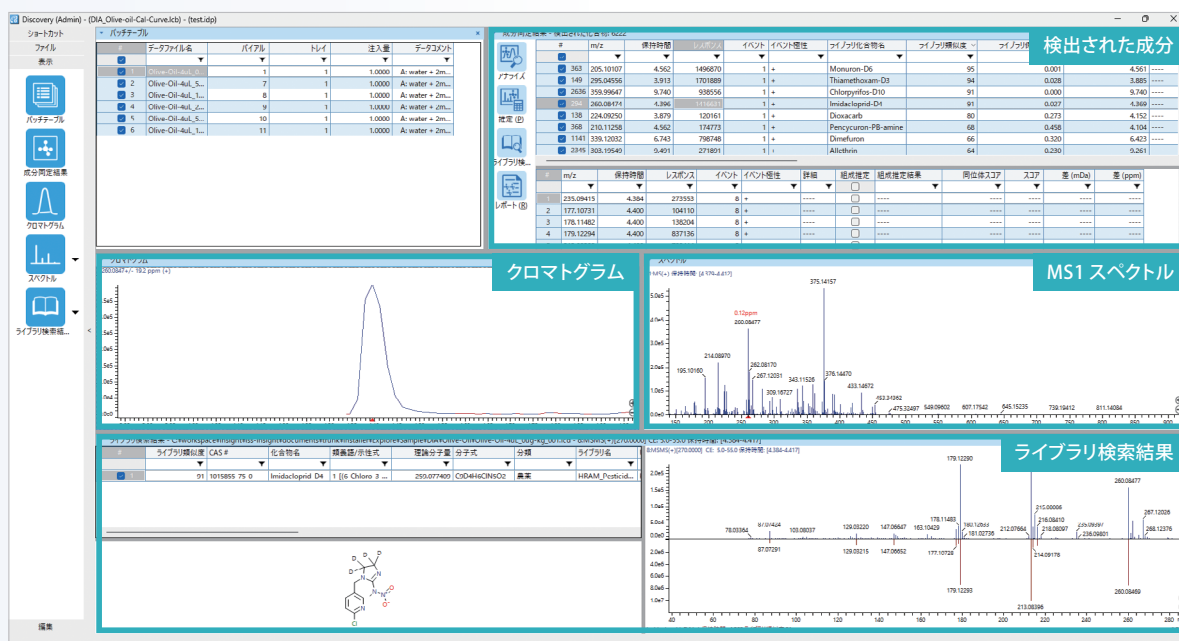


わずか4ステップで大量サンプルの定性バッチ解析を実現

薬物動態の分析や、違法薬物、残留農薬の分析は、大量のサンプルを同じ条件で定性解析や、決められた物質をスクリーニング、成分検出結果のレポートの作成が必要です。LabSolutions Insight™ Discovery は、定性解析を効率的に行えるアプリケーションです。わずか4つのステップで、数百サンプルのデータの定性解析からレポート出力までを実行します。

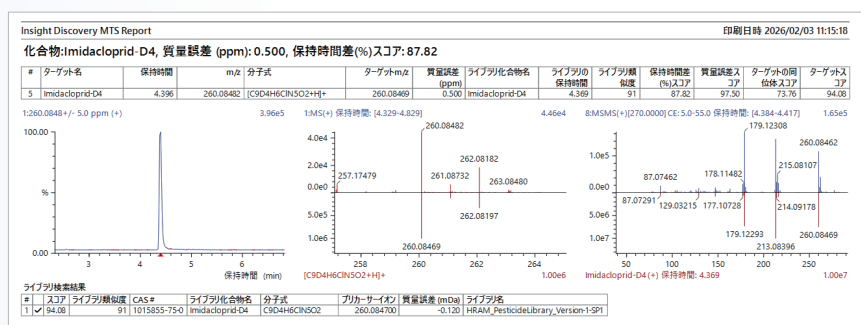
4ステップで定性解析をまとめて実行

- STEP 01 Configure** 定性バッチ解析の設定をします。
成分の検出以外にも、スクリーニングやライブラリ検索の設定が可能です。
- STEP 02 Load** 解析したいデータと関連するファイルを読み込みます。
データファイルは後から追加できます。
- STEP 03 Run** 1クリックで、すべての検体の定性解析が開始します。
- STEP 04 Report** 1クリックで、すべての検体の定性解析結果をMTS形式でレポート出力。
成分検出結果のエビデンスとして、報告書をご利用いただけます。



同定結果をサポートするエビデンスをMTS形式のレポートとして出力できます。

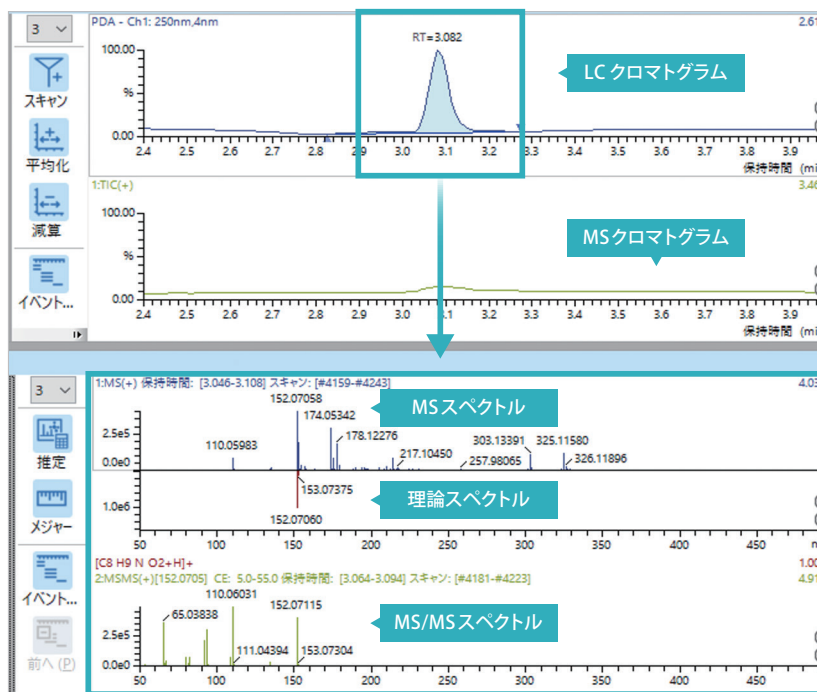
※LabSolutions Insight Discovery はファイル管理版のみご利用いただけます。





MSスペクトルとLCクロマトグラムを組み合わせ、 不純物解析をサポート

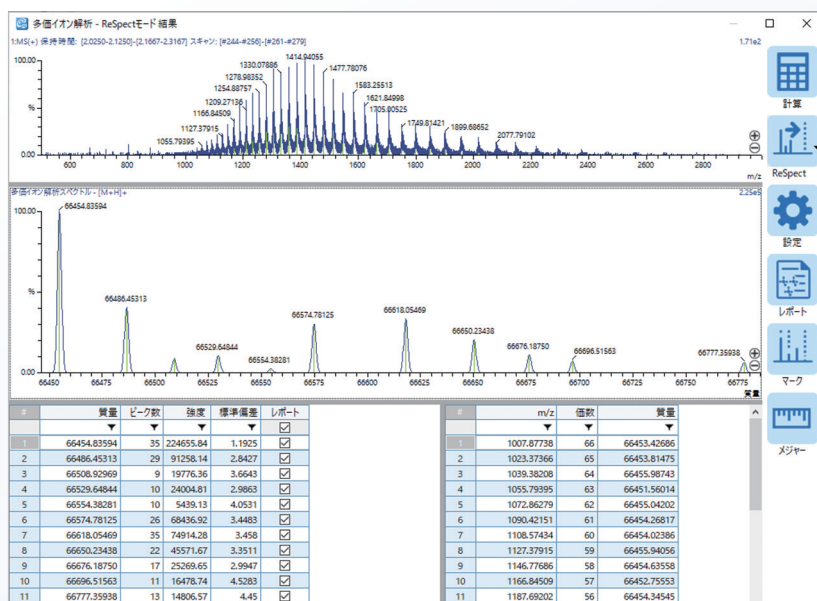
LCおよびMS情報を自在に配置、MSクロマトグラム、MSスペクトルに加えてLCおよびPDAクロマトグラムも表示でき、LC検出器との組み合わせで不純物の構造解析が可能です。例えば、医薬品などで、UVやPDAの検出器で検出された不純物ピークに対して、MSスペクトルで構造を解析することができます。



多価イオン解析アルゴリズムによる 高分子化合物解析

LabSolutions Insight Explore CSD(Charge State Deconvolution)は、高分子化合物の多価イオン解析に対応しています。高価数まで解析可能な、Positive Probability Limitedの多価イオン解析アルゴリズムを採用しています。ペプチドなどの高分子化合物解析を行う場合に有用です。

※LabSolutions Insight Explore CSDはLabSolutions Insight Exploreのオプションソフトウェアです。



ラインナップ

LabSolutions Insight Explore	LabSolutions InsightのLCMS向け定性解析オプションソフトウェアです。
LabSolutions Insight Explore CSD	LabSolutions InsightのLCMS多価イオン解析用オプションソフトウェアです。

LabSolutions InsightおよびLabSolutions Insight Exploreは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

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・認証等を受けておりません。

治療診断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

製品情報



価格お問合せ



東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631
(大学担当) (03) 3219-5616
(会社担当) (03) 3219-5622

関西支社 (06) 4797-7230

札幌支店 (011) 700-6605

東北支店 (022) 221-6231

郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511
(会社担当) (029) 851-8515

北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095
(会社担当) (048) 646-0081

横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106

(会社担当) (045) 311-4615

静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521
(会社担当) (052) 565-7531

京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604
(会社担当) (075) 823-1603

神戸支店 (078) 331-9665

岡山営業所 (086) 221-2511

四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652

九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332
(会社担当) (092) 283-3334

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