

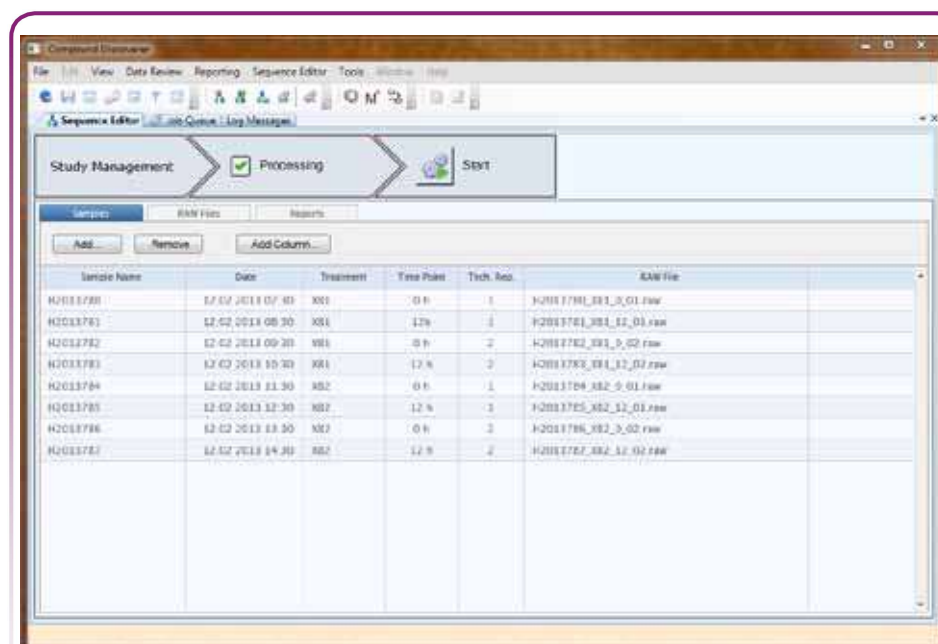
Thermo Scientific
Compound Discoverer Software

信頼性、柔軟性を兼ね備えた
構造解析向け統合ソリューション

多彩な機能を搭載した ソフトウェア

化合物を同定し、構造を解明するための解決策

Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ は、解析データの記録・保存から、解析処理、レポート作成まで低分子化合物同定試験のワークフロー全体を改善し、より簡便に、より素早くアッセイを遂行できる化合物同定・構造解析専用ソフトウェアです。このソフトウェアに搭載される機能は、医薬品の代謝物同定や法中毒試験、環境試験などさまざまなアプリケーションに対応でき、信頼度の高い化合物同定をご提供します。データの収集から記録・保存、解析処理、レポート作成まで、一連の解析ワークフローをお客様ご自身で自由自在に設計できます。また、先進的なアルゴリズムを搭載しているので、複数のサンプルから収集したデータ群をも迅速に解析処理でき、解析データを研究者志向で記録・保存することも可能です。さらに一つにまとめてレポートすることもできます。



サンプルを定義することで、すべてのサンプルをバッチ処理することが可能

目的に応じた実験デザインを構築

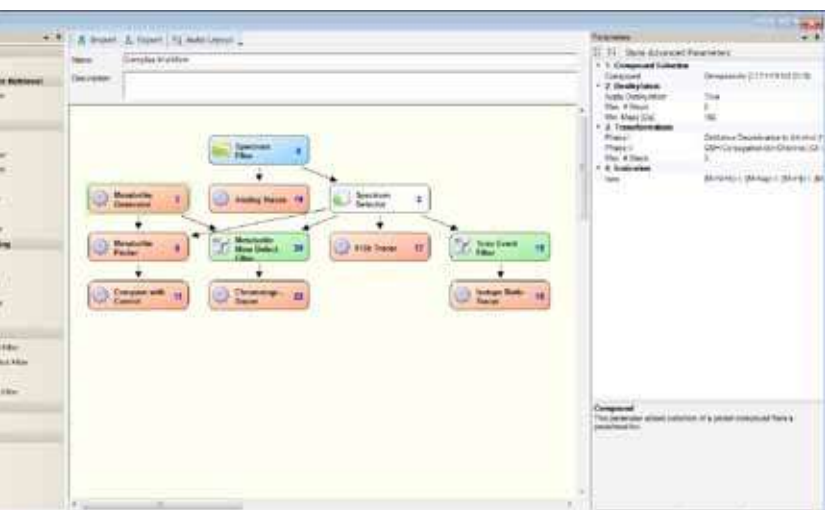
ステップ1：サンプルの定義

複数のサンプルからなるデータ群を短時間で解析処理することが求められています。Compound Discoverer はお客様の目的に応じてサンプルを定義し、実験デザインを構築できます。さらに、バッチ処理から解析結果までデータベースに保存でき、必要に応じてカスタマイズできます。また、最終的なレポートも迅速かつ簡単に作成が可能です。

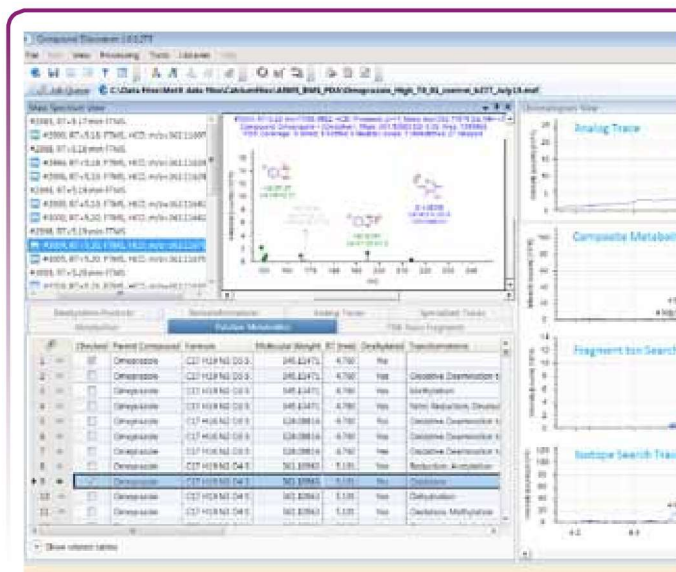
目的に応じた解析処理

ステップ2：カスタマイズできる解析ワークフロー

必要な情報を導き出すためには、より確実で、より適切な方法で解析することが重要です。Compound Discovererは、先進的なアルゴリズムを搭載したモジュール形式の解析処理ツールであり、お客様は思い通りのデータ処理方法を設定できます。ドラッグ＆ドロップによって解析する手順を手元で簡単に編集でき、信頼ある結果を導き出すためのワークフローを構築可能です。



ピーク検出、同位体検索、フラグメント検索、Multiple Mass Defect Filter (MMDF)、およびコントロールとの比較などの解析方法を組み合わせることができ、目的に応じた解析処理ワークフローを構築可能



- アイソトープパターンやフラグメントパターンのようなスペクトルデータと、UVのようなアナログデータを組み合わせることで、より信頼性の高い解釈を導き出すことが可能
- スペクトルツリーの情報をフラグメントに注記し可視化することで、より明確に化合物構造を決定

カスタマイズできるレビュー画面で 確かな判断結果

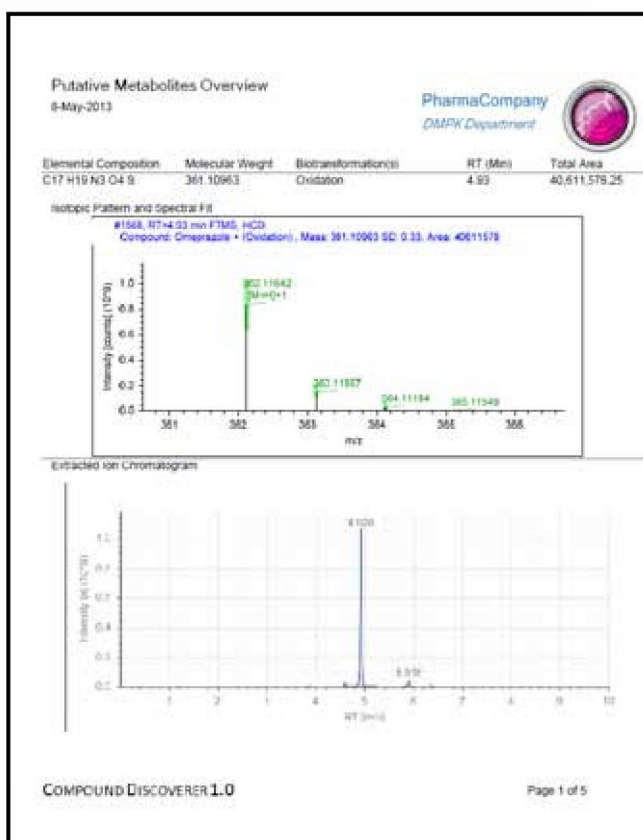
ステップ3：解析データのレビュー、そして同定

確かな同定結果を導き出すためには、多くの解析データをレビューできる機能・性能が求められます。Compound Discovererは、レイアウトをカスタマイズできるので、選択したデータのみをレビューすることも、マルチモニターサポート機能によって必要なデータをすべて一度に確認することも可能です。さらに、クロマトグラムやスペクトルデータを並べたり、重ね合わせたりすることも可能で、お客様は解析データに自信を持って最終的な判断をすることができます。

カスタマイズできるレポート機能を使って 有用な情報をアウトプット

ステップ4：レポート作成

導き出した結果を分かりやすい形でまとめることも重要です。Compound Discovererはレポートをカスタマイズでき、その査証となる情報や補足データなど、適切な情報をレポートに反映させて出力することができます。



目的に応じてレポートテンプレートを設計でき、化合物同定に必要なデータや、検索により適合した同定結果などもレポートに反映させることが可能



低分子化合物同定ツール

広範なアプリケーションに対応

薬物代謝物同定：生体試料中から代謝物を検出し、その構造を決定することは、医薬品研究開発において非常に重要な研究です。Compound Discoverer は、フレキシブルに操作でき、目的の代謝物を簡単に探索・同定できるだけでなく、レポートまで作成できる優れた解析ツールです。

法中毒研究：一般的な乱用薬物のターゲットスクリーニングでは、目的とする薬物を見つけ出すことはできませんが、Compound Discoverer を利用すれば、さらにその代謝物、あるいは脱法ドラッグなど構造的に類似した薬物までも探索し、同定することができます。また、薬物やその代謝物をリスト化して管理することもでき、新たに得られた情報も追加が可能で、常に最新の状態でスクリーニングを実施できます。

環境試験：土壌試験や水質試験において、環境汚染物質だけでなく、その代謝物を見だし、環境中における動態を研究するニーズが高まっています。Compound Discoverer は、環境代謝物や分解物の構造、代謝過程を解明するための最適なソフトウェアです。

Orbitrap 高分解能・精密質量分析計

化合物同定、構造解析に最適



Orbitrap Fusion

- 画期的な分析の深さ
- 革新的な操作性
- 比類なき堅牢性

Thermo Scientific Orbitrap™ Fusion™ は、四重極、Orbitrap とイオントラップの質量分析部を組み合わせた画期的なトライブリッド質量分析計です。これまで分析が困難とされていた複雑な生体サンプルでも、今までにない分析の深さを実現できます。また、革新的なソフトウェアと操作モードにより、お客様は実験の遂行ではなく、科学の解明に集中することができます。



Q Exactive

- ベンチトップ型の優れた性能
- 信頼性の高い定量 / 定性分析
- 卓越した順応性

Thermo Scientific Q Exactive™ は、高性能の四重極によるプリカーサーの選択性と Orbitrap による高分解能・質量精度を組み合わせたベンチトップ型の Orbitrap 質量分析計です。非常に優れた性能と高い汎用性をご提供します。

© 2013 Thermo Fisher Scientific Inc. 無断複写・転載を禁じます。

- ここに掲載されている内容は、予告なく変更することがあります。
- このカタログに記載の各種名称、会社名、製品名などは、各社の登録商標または商標です。

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
分析機器に関するお問い合わせはこちら

 Tel.0120-753-670 Fax.0120-753-671

〒221-0022 横浜市神奈川区守屋町3-9

E-mail : Analyze.jp@thermofisher.com

www.thermoscientific.jp

販売店

K1406 1000

Thermo
SCIENTIFIC

A Thermo Fisher Scientific Brand