

Scaffold Elements



質量分析データから低分子化合物を同定するとともに、定量解析を行う事ができるソフトウェアです

[主な特徴・機能]

- MS1,MS2 スペクトルデータから低分子化合物を同定・定量
- 各実験の関係性を定義する Experimental Design Wizard [定量値計算に利用]
- Metabolic flux 解析に対応 (¹³C, ¹⁵N, ¹⁸O, ²H)
- NIST, METLIN, HMDB, Lipid Maps などに対する検索 [一部オプション]
- ProteoWizard msconvert の利用により、主要メーカーの raw データ読み込みに対応
- 様々な統計解析とグラフ表示が可能
- XLS フォーマットで結果内容を出力
- 無償 Viewer ソフトウェアを使って結果のシェアが容易に

同定・定量結果を表示

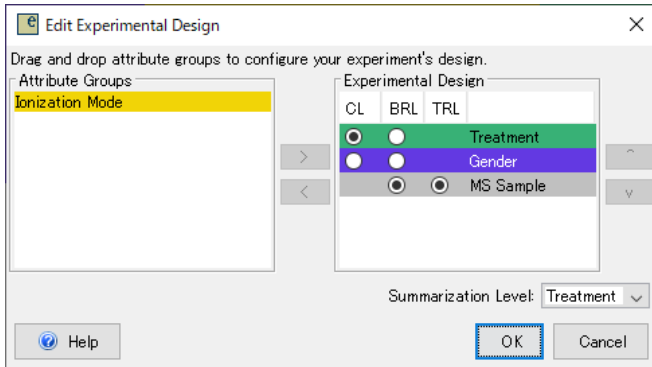
#	Visible	Star	ID Score	Mass Accuracy Score	Biologic Distribution Score	MS/MS Score	XIC Score	Analyte Name	Accession Number	Molecular Formula	Molecular Weight	Retention Time (min)	Control	High
1	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.899	0.99	1.00	1.00	0.92	Taurine	CASNO:107-35-7	C ₂ H ₇ NO ₃ S	125.0	4.41	5.99	5.95
2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.899	1.00	1.00	1.00	0.96	Cluster of Decylbenzenesulfonic acid	CASNO:149-60-3				5.71	5.70
2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.855	0.97	0.95	0.91	0.98	Decylbenzenesulfonic acid	CASNO:149-60-3	C ₁₈ H ₃₃ O ₂ S	298.2	24.25	(4.15)	(3.46)
2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.855	0.97	0.95	0.91	0.98	KDdiA-PC	CASNO:439904-34-4	C ₃₆ H ₆₆ NO ₁₁ P	719.4	24.25		
3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.897	0.99	1.00	0.92	0.92	Cluster of Ala-Gly	CASNO:887-69-4				5.89	5.99
3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.897	0.99	1.00	0.92	0.92	Ala-Gly (+3)	CASNO:887-69-4	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₃	146.1	4.46	5.08	5.15
3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.897	0.99	1.00	0.92	0.92	5-Methyl-5,6-Dihydroacil (+1)	CASNO:695-04-0	C ₉ H ₁₄ O ₂	128.1	4.46	5.62	5.72
4	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.897	0.99	1.00	0.94	0.95	3-Amino-3-(4-hydroxyphenyl)propanoate (+2)	HMDB:HMDB05881	C ₉ H ₁₁ NO ₃	191.1	6.12	6.71	6.48
5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.894	0.96	1.00	1.00	0.95	Uric acid_RT1	CASNO:69-09-2	C ₅ H ₄ N ₂ O ₃	168.0	5.65	5.60	5.64
6	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.894	0.96	1.00	1.00	0.98	Dodecanoic acid	CASNO:151-41-7	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	200.3	23.78	5.44	5.44
7	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.893	0.97	1.00	1.00	0.92	2-Methyl-2-butanol	CASNO:149-30-4	C ₅ H ₁₂ O	88.1	22.60	4.49	4.49
8	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.891	0.96	1.00	1.00	0.96	Xanthine	CASNO:146-80-5	C ₅ H ₄ N ₄ O ₆	284.1	7.91	5.55	5.55
9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.889	0.98	1.00	1.00	0.98	1,11-Dichloroethane	CASNO:505-52-2	C ₂ H ₂ Cl ₂	244.2	23.55	5.22	5.20
10	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.888	0.99	1.00	1.00	0.96	p-Tolyl Sulfate	CASNO:91978-69-7	C ₇ H ₇ O ₂ S	188.0	15.29	6.21	6.33
11	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.887	0.97	1.00	1.00	0.95	L-Tryptophan (+1)	CASNO:73-22-3	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	204.1	12.00	6.01	6.18
12	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.885	1.00	1.00	1.00	0.94	Cholic acid (+1)	CASNO:81-25-4	C ₂₆ H ₄₆ O ₆	408.3	24.80	6.63	6.88
13	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.885	0.99	1.00	1.00	0.99	cholesterol sulfate_RT1	HMDB:HMDB00653	C ₂₇ H ₄₆ O ₆ S	466.3	29.74	5.78	5.85
14	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.885	0.91	1.00	1.00	0.92	DL-Phenylalanine (+1)	CASNO:1508-30-1	C ₉ H ₉ NO ₂	165.1	9.59	5.48	5.07
15	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.883	0.99	1.00	1.00	0.95	Gluconic acid (+1)	CASNO:526-95-4	C ₆ H ₁₂ O ₇	196.1	4.55	6.32	6.40
16	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.882	1.00	1.00	1.00	0.95	1-Stearoyl-2-hydroxy-sn-glycero-3-phosphoethanolamine	CASNO:69747-55-3	C ₃₂ H ₆₂ NO ₇ P	481.3	25.30	4.87	(4.57)
17	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.882	0.91	1.00	1.00	0.92	1H-Benzimidazole-7-carboxamide, 2-[[2R)-2-(2-oxo-2-phenylethyl)propanoate	CASNO:912444-00-9	C ₁₇ H ₁₄ N ₂ O ₄	244.1	22.27	5.79	5.84
18	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.881	0.99	1.00	1.00	0.95	PE(16:0/0:0)	CASNO:89576-29-4	C ₃₂ H ₆₂ NO ₇ P	479.3	25.11	Missing Value	Missing Value
19	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.880	0.97	0.92	1.00	0.91	Hypoxanthine (+1)	CASNO:68-94-0	C ₉ H ₈ N ₂ O ₄	196.0	8.36	(4.57)	Missing Value
20	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.880	0.98	1.00	1.00	0.95	cholesterol sulfate_RT2	HMDB:HMDB00653	C ₂₇ H ₄₆ O ₆ S	466.3	34.30	5.82	(4.16)
21	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.880	0.99	0.99	0.95	0.74	16-Hydroxyhexadecanoic acid	CASNO:506-13-8	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	272.2	24.63	6.19	6.36
22	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.880	0.99	0.91	1.00	0.93	PE(16:0/0:0)	INCHIKEY:VYVMBNSKX...	C ₃₂ H ₆₂ NO ₇ P	453.3	24.83	5.72	5.75
23	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.880	1.00	1.00	1.00	0.94	L-Glutamate	CASNO:56-86-0	C ₅ H ₉ NO ₄	147.1	4.48	4.95	5.08
24	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.879	0.96	1.00	1.00	0.95	2,2'-Methylene-bis(6-tert-butyl-4-methylphenol)	CASNO:119-47-1	C ₂₃ H ₃₆ O ₂	340.2	26.69	Missing Value	Missing Value
25	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.878	0.97	0.93	1.00	0.94	Deoxyinosine	CASNO:890-38-0	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O ₄	252.1	10.10	(4.36)	(2.85)
26	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.877	0.98	0.94	1.00	0.78	5-Hydroxyindoleacetic acid (+1)	CASNO:54-16-0	C ₉ H ₈ NO ₃	191.1	20.57	4.57	(3.95)
27	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.876	0.98	0.99	0.94	0.74	1-Stearoyl-2-arachidonoyl-sn-glycero-3-phosphoethanolamine	CASNO:132014-80-3	C ₄₄ H ₇₈ NO ₈ P	811.5	27.76	(4.92)	Missing Value
28	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0.875	0.95	0.99	1.00	0.94	Lumichrome	CASNO:1086-80-2	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₂	242.1	22.26		

対応フォーマット

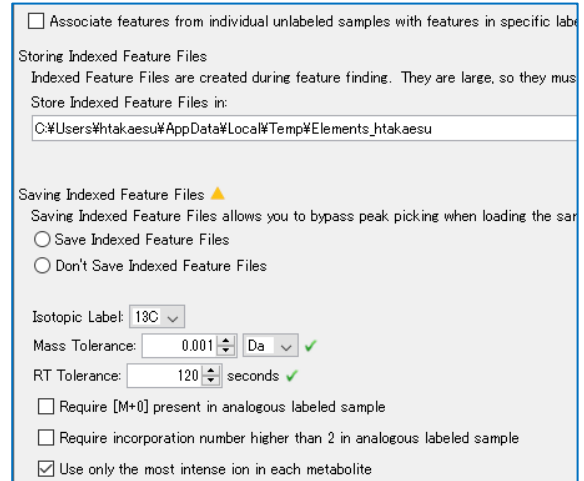
ProteoWizard msconvert で読み込み可能な各社装置データを読み込み可能

Sciex [t2d, .dat, .wiff], Agilent [.d ディレクトリ], Bruker [.d ディレクトリ], Thermo (.raw), Waters (.raw ディレクトリ), その他 mzML フォーマットのファイル

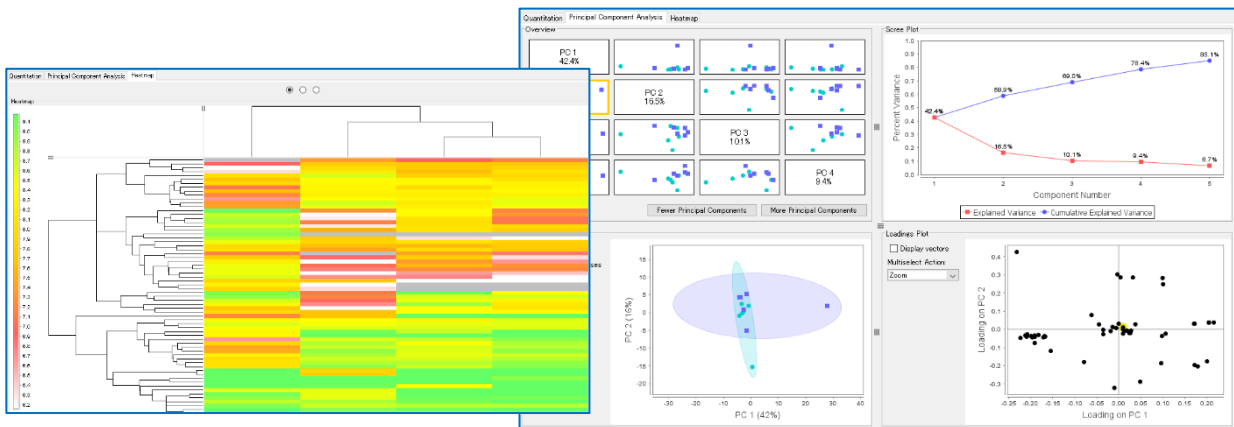
Experimental Design Wizard



Metabolic flux 解析に対応



統計解析とグラフ表示



インストールするコンピュータの推奨スペック

OS : Windows 10 メモリ : 32 GB 以上 ディスク : SSD (HDD とトータルで 1TB 以上)

* 同じコンピュータに ProteoWizard msconvert.exe をインストールする必要があります

国内販売代理店

マトリックスサイエンス株式会社



住所 : 〒110-0015 東京都台東区東上野 1-6-10 ART ビル 1F
TEL : 03-5807-7895 FAX : 03-5807-7896
URL : <http://www.matrixscience.co.jp> Email : info-jp@matrixscience.com