

オミクスデータ科学を支えるMS-DIALワークベンチの開発

津川 裕司（東京農工大学・グローバルイノベーション研究院）

共同発表者

松沢 佑紀（東京農工大学・グローバルイノベーション研究院）

西田 孝三（東京農工大学・グローバルイノベーション研究院）

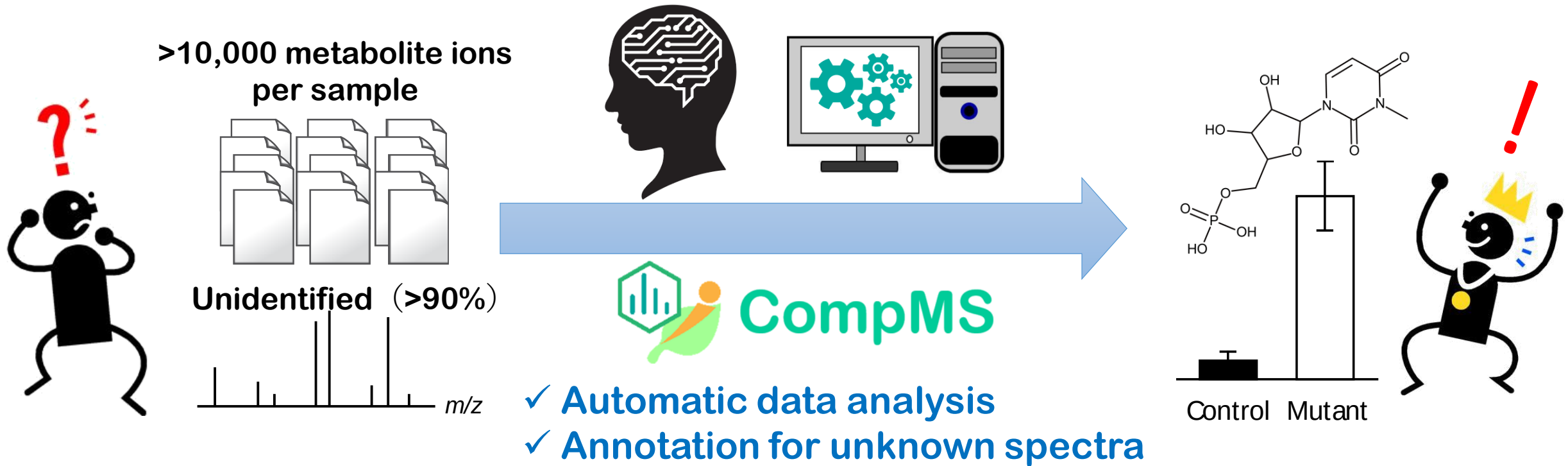
竹田 浩章（東京農工大学・グローバルイノベーション研究院）

Licensed under a Creative Commons 表示 4.0 国際ライセンス
(c)2022 津川裕司（東京農工大学）



Innovation of Computational Mass Spectrometry

From Mass To Structure to understand metabolisms

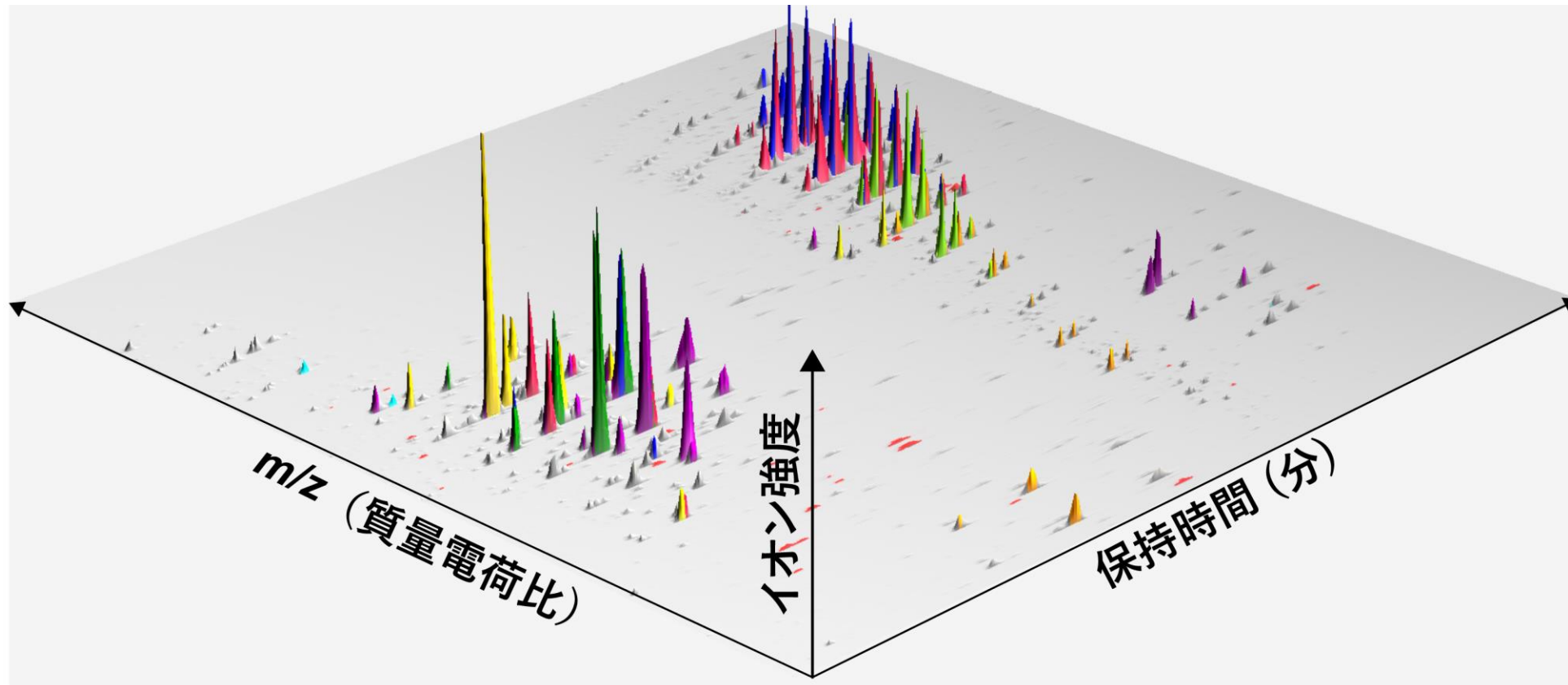


Licensed under a Creative Commons 表示 4.0 国際ライセンス
(c)2022 津川裕司(東京農工大学)



質量分析による代謝物構造推定（アノテーション）

液体クロマトグラフィータンデム質量分析(LC-MS/MS)のデータ例



Licensed under a Creative Commons 表示 4.0 国際ライセンス
(c)2022 津川裕司(東京農工大学)

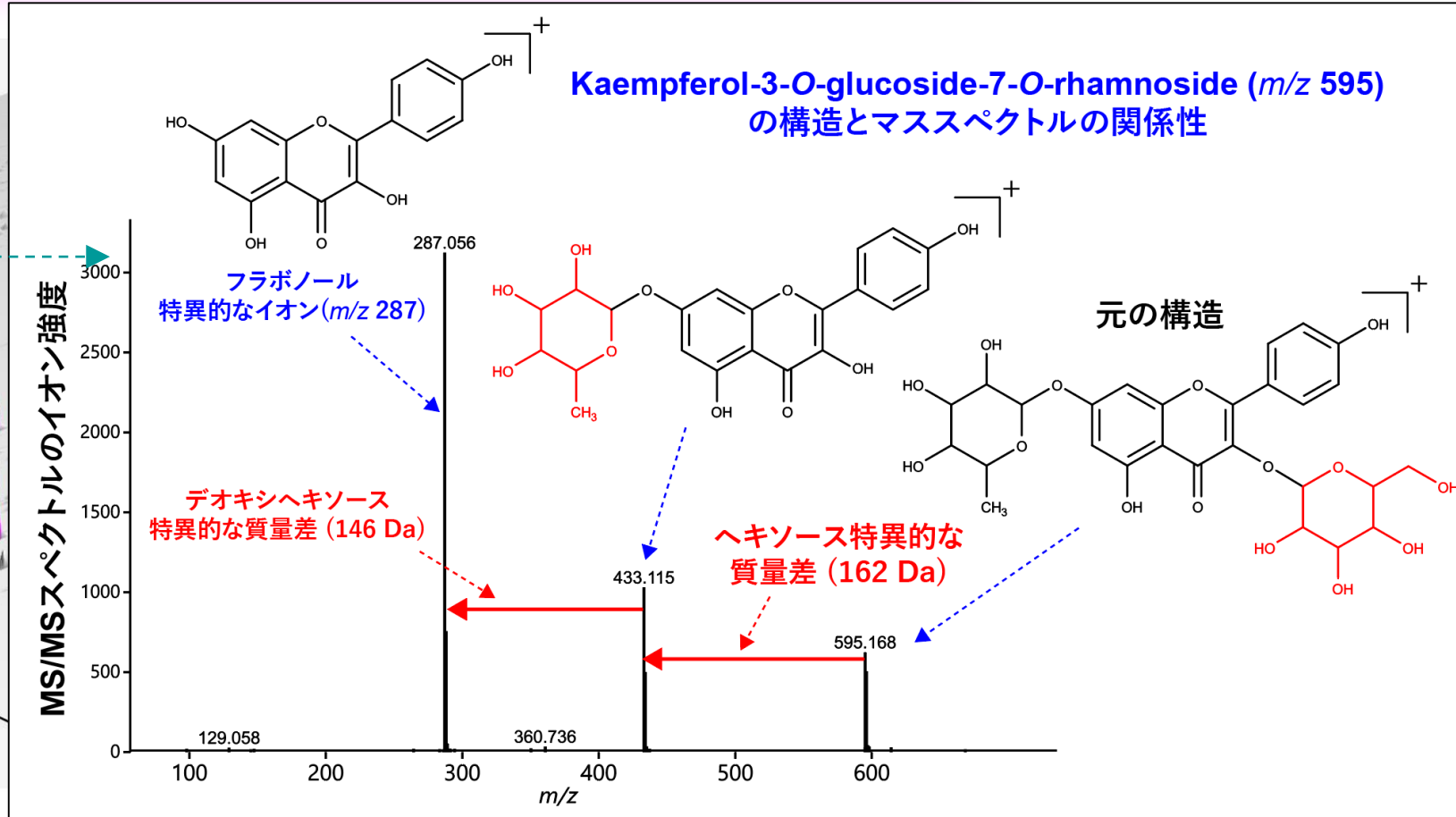


質量分析による代謝物構造推定 (アノテーション)

液体クロマトグラフィータンデム質量分析(LC-MS/MS)のデータ例

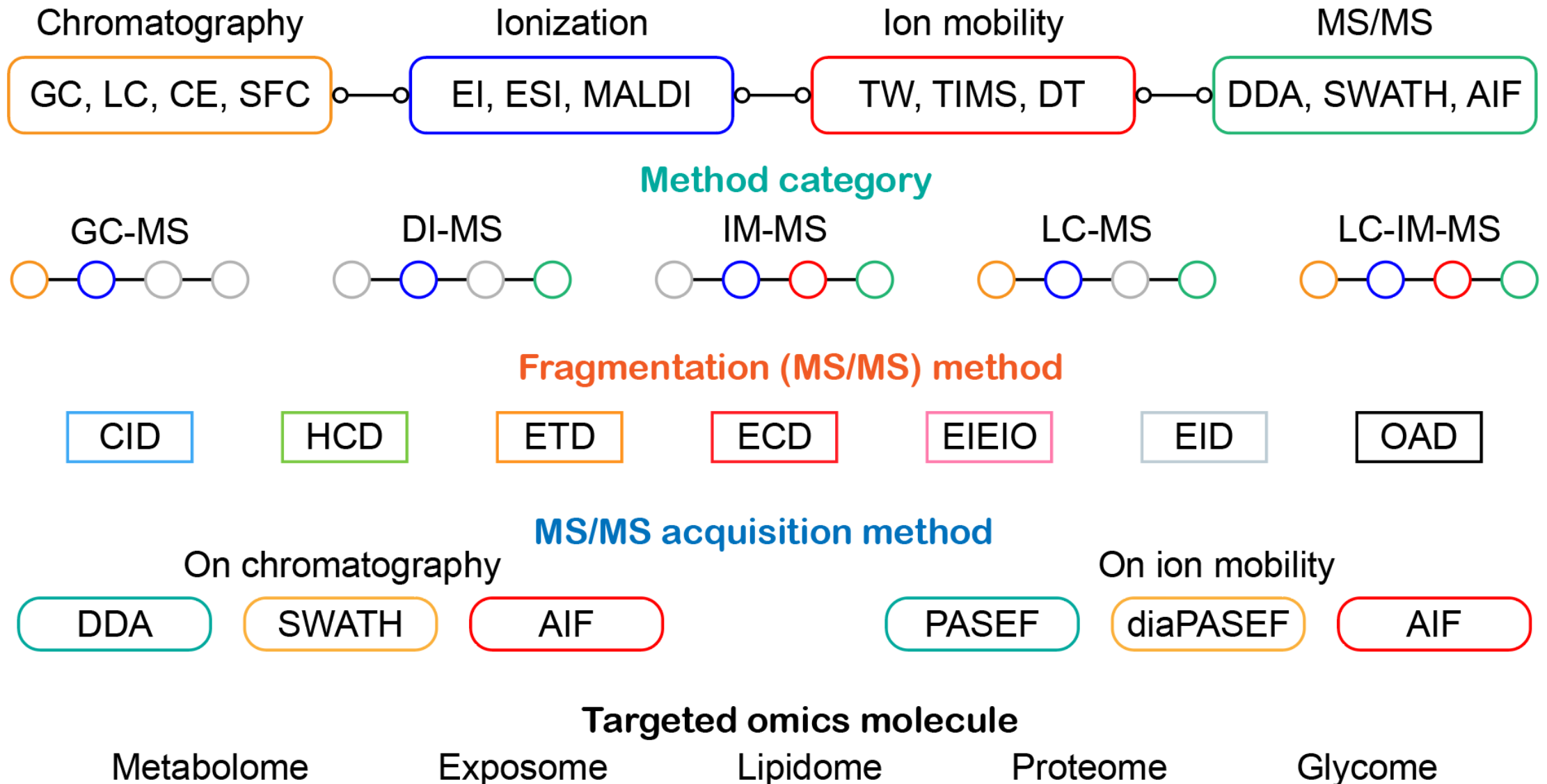
フラグメンテーション

m/z (質量電荷比)



昨今の質量分析駆動型オミクスは、様々な計測手法が存在し、それに特化したデータ処理を必要とする。

MS-DIAL 5.0 for handling the diverse techniques of MS

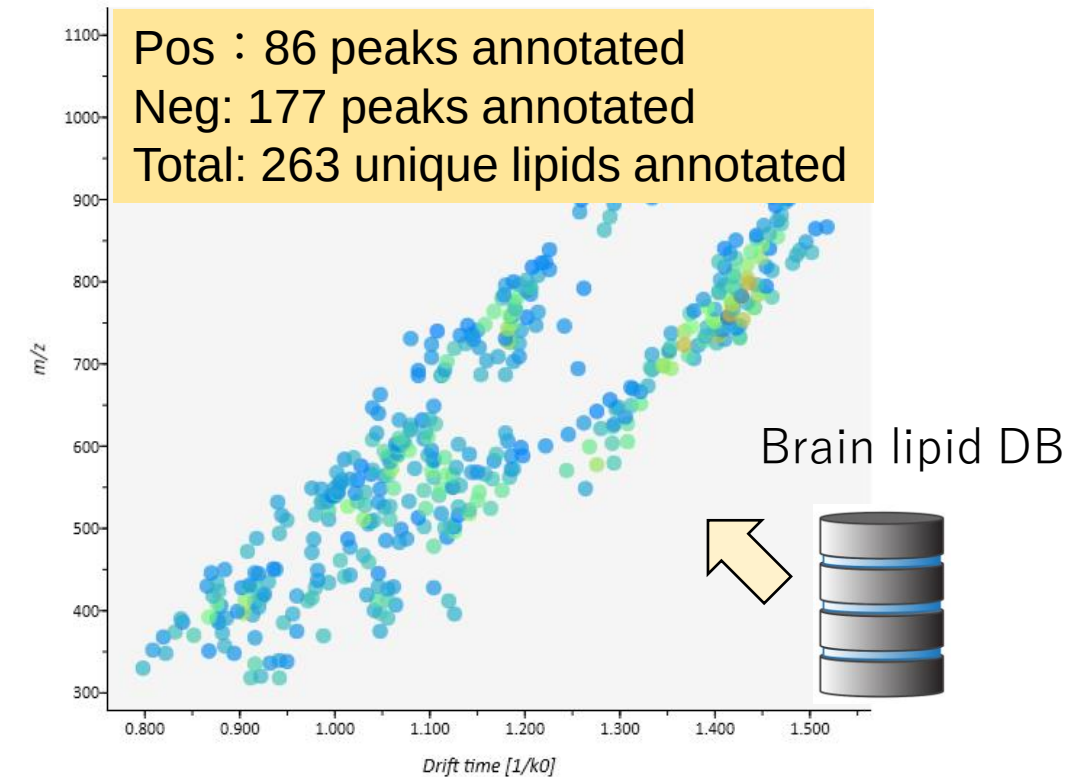
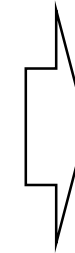
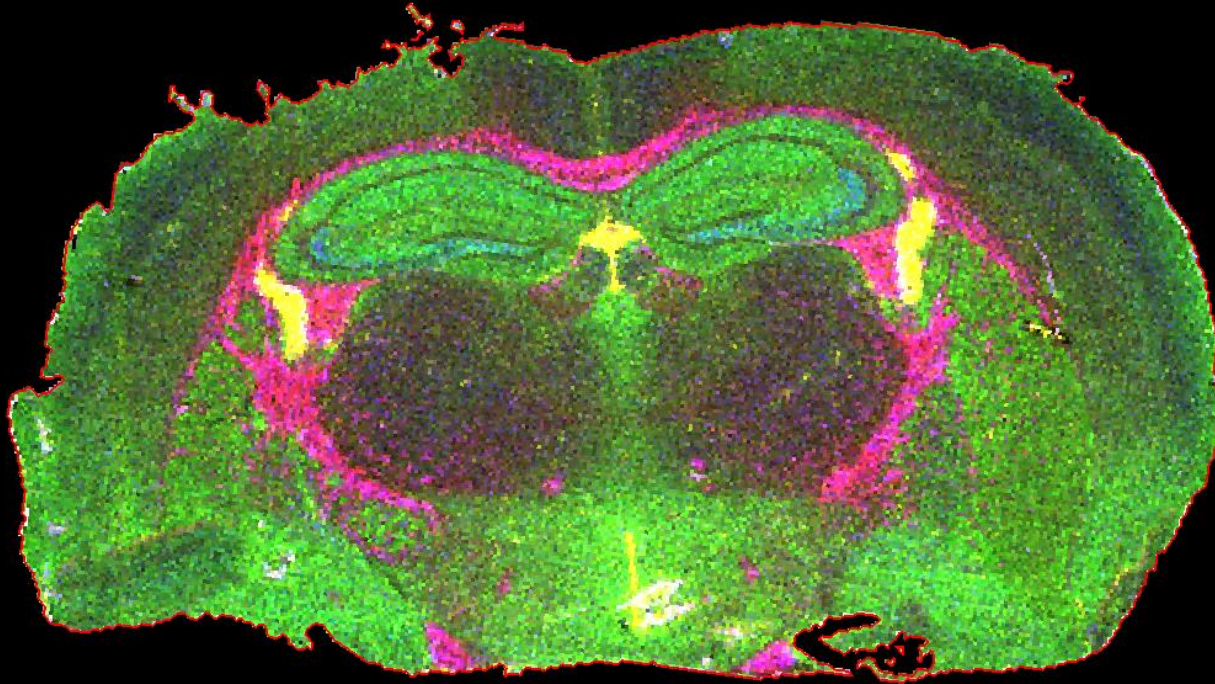


Lipid imaging using Bruker timsTOF (ion mobility)

PC 18:0_20:4

PE P-18:0_20:3

LPC 16:0



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Name	RT	Adduct	InChIKey	Formula	SMILES	Ontology	CCS	[M+H] ⁺	[M+Na] ⁺	[M+K] ⁺	[M-H] ⁻
2	FA 12:0	0.703	[M-H] ⁻	POULHZVOKOAJMA-UHFFFAOYSA-N	C12H24O2	CCCCCCCCCCCC(O)=O	FA	150.3428	201.185	223.167	239.141	199.17
3	FA 13:0	0.7193	[M-H] ⁻	SZHOJFHSIKHZHA-UHFFFAOYSA-N	C13H26O2	CCCCCCCCCCCC(O)=O	FA	153.2154	215.201	237.183	253.156	213.186
4	FA 14:1	0.7269	[M-H] ⁻	YWVWVXASSLXIJU-WAYWQWQTSA-N	C14H26O2	CCCC\C=C/CCCCCCCC(O)=O	FA	154.3501	227.201	249.183	265.156	225.186
5	FA 14:1	0.7271	[M-H] ⁻	YWVWVXASSLXIJU-WAYWQWQTSA-N	C14H26O2	CCCC\C=C/CCCCCCCC(O)=O	FA	154.388	227.201	249.183	265.156	225.186
6	FA 14:0	0.7373	[M-H] ⁻	TUNFSRHOTWDNC-UHFFFAOYSA-N	C14H28O2	CCCCCCCCCCCC(O)=O	FA	156.489	229.216	251.198	267.172	227.202
7	FA 15:1	0.7481	[M-H] ⁻	DJCQJZKZUCHHAL-SREVVHEPSA-N	C15H28O2	CCCCC\C=C/CCCCCCCC(O)=O	FA	158.3325	241.216	263.198	279.172	239.202
8	FA 15:0	0.7552	[M-H] ⁻	WQEPLUUGTLDZIJ-UHFFFAOYSA-N	C15H30O2	CCCCCCCCCCCC(O)=O	FA	159.7656	243.232	265.214	281.188	241.217
9	FA 15:0	0.7555	[M-H] ⁻	WQEPLUUGTLDZIJ-UHFFFAOYSA-N	C15H30O2	CCCCCCCCCCCC(O)=O	FA	159.8411	243.232	265.214	281.188	241.217

Licensed under a Creative Commons 表示 4.0 国際ライセンス
(c)2022 津川裕司(東京農工大学)



Welcome to our CompMS webpage



► Software

► Database

Contact

Licence

riken prime



≡ CompMS

Innovative data science in biology.



4.80

Latest version (Windows x64)

Download



5.00 (alpha version)

Latest version (Windows x64)

Download



Tutorial

 [mtbinfo-team.github.io](https://github.com/mtbinfo-team)

Link



Forum

 www.metabolomics-forum.com

Link

Licensed under a Creative Commons 表示 4.0 国際ライセンス
(c)2022 津川裕司(東京農工大学)

