

组合洞察力

Thermo Scientific Compound Discoverer 软件

集成了完整的工具组解决了小分子分析挑战

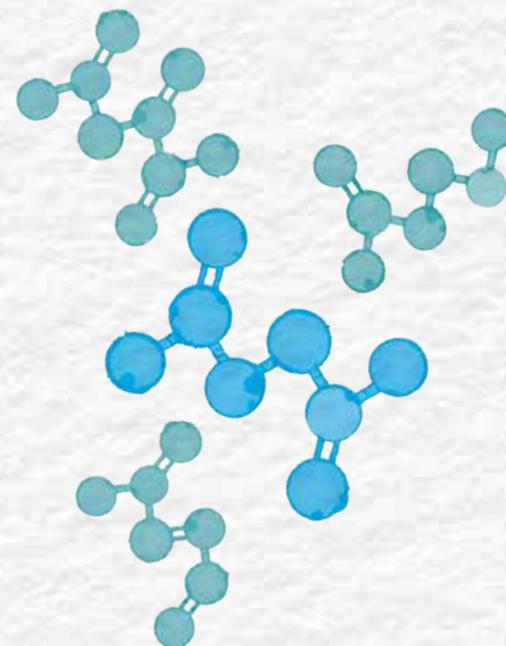
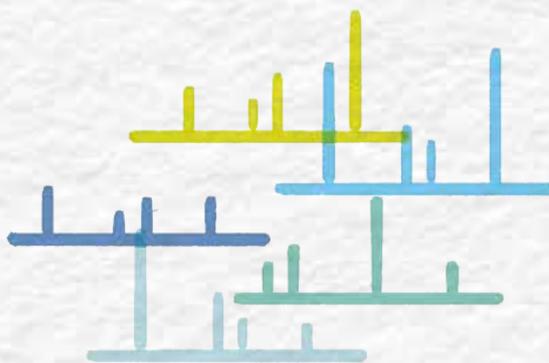
Thermo Scientific™ Orbitrap™ 质谱仪可生成包含丰富信息的数据。小分子分析面临的挑战是有效地从这些全面的数据中提取到高置信度的信息,而无需专家级用户。

Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 软件成功解决了该挑战。通过与可定制工作流程相关联的全套综合库,数据库和统计分析工具,该软件简化了未知物鉴定,确定了样品之间真正的差异,同时阐明了生物通路。





从样品到结构；绝佳的通路洞察力



了解更多未知物

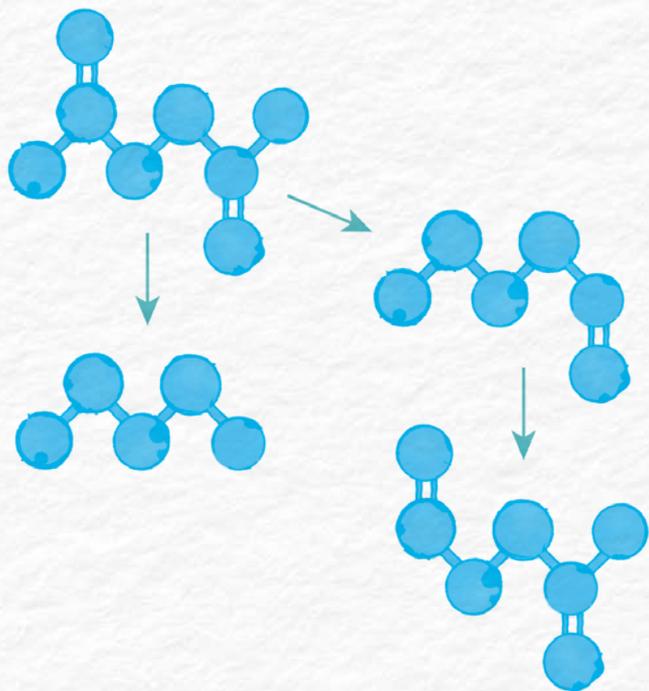
- 采用 MS/MS 数据库识别化合物
- 使用高分辨率 MS 全扫描同位素及 MS/MS 数据确定元素组成
- 实现化学数据库在线检索功能

从化合物识别到结构分析

- 执行质谱库及相似性检索识别化合物
- 为假定的未知物检索化学数据库
- 自动标注预测化合物碎片的质谱图

从化合物识别到结构分析

- 使用 t-tests、ANOVA、PCA、PLS-DA、火山图、箱线图等进行统计和差异化分析
- 查看趋势图来可视化峰面积、各组平均峰面积或编入随时间变化分数标记的平均峰面积
- 查看峰面积的热图，CV 值，调整后的 p 值等



了解生物学通路

- 进行稳定性同位素标记（“metabolic flux”）实验
- 采用 Thermo Scientific™ Metabolika™、KEGG 及 BioCyc 数据库查看通路
- 匹配检测到的化合物、统计数据及编入通路中的分数标记

支持广泛的应用

Impurities and degradants: 杂质与降解产物研究

药品及食品中杂质和降解产物的鉴定是产品安全性测试的关键。Compound Discoverer 软件工具和可自定义的方法可以对复杂样品中的相关组分进行可靠的检测。

Environmental and food safety: 环境与食品安全应用研究

在食品和环境应用研究以及土壤和水质中的污染物分析研究中，通常需要对未知化合物进行鉴定。Compound Discoverer 软件极其适用于代谢分析、食品中未知化合物鉴定、环境中降解产物及污染物的研究。

Metabolite identification: 代谢物鉴定

在生物样本中相关成分的检测及其后续结构的确定是研究的关键。Compound Discoverer 软件能帮您实现对感兴趣代谢物的检索、识别及灵活的应用报告。

Forensic toxicology: 法医毒理学研究

目标物筛查应用只能找到目标。Compound Discoverer 软件能帮助法医毒理学家发现滥用药物的未知代谢物及结构相关的设计药物。这些信息可以传回筛选方法，以帮助您跟上一种不断扩大的新药及其代谢物。

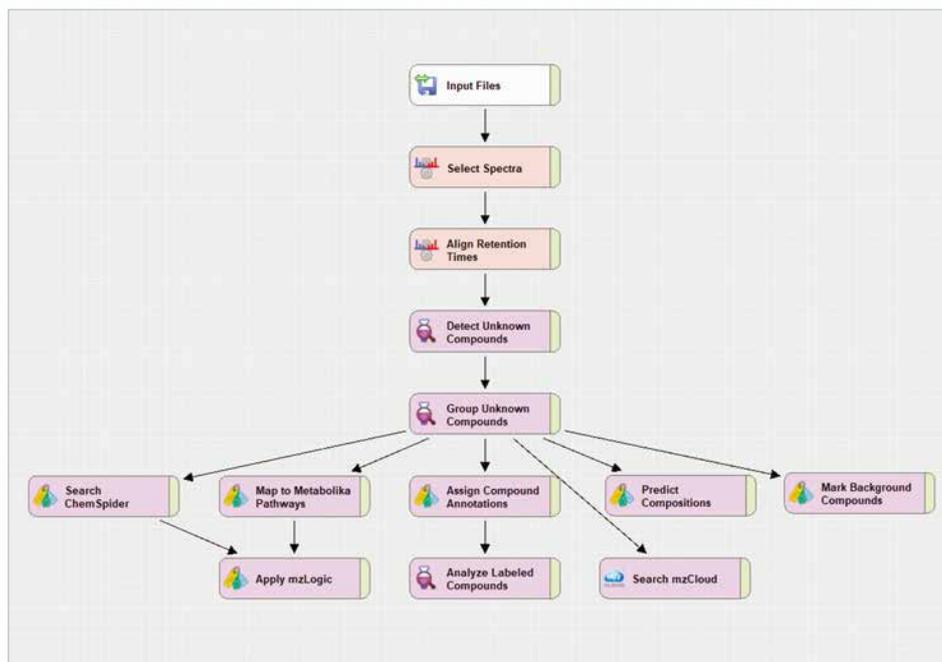
Metabolomics: 代谢组学研究

通过集成确定大型复杂代谢组学数据集中感兴趣组分的必要工具，Compound Discoverer 软件提供了快速检索和识别样品集之间重要的统计学差异的解决方案。Compound Discoverer 软件还提供了在代谢途径上编入的随时间变化的分数标记的简单可视化，排除了定性通量分析过程中用于检查代谢物生产和消耗的手动繁琐步骤。

快速、简单且灵活地满足您的分析要求 轻松定制工作流程

Compound Discoverer 软件通过其可定制的功能实现强大的数据处理工作流程。将工作流程节点从广泛的处理工具列表拖放到树形工作流程中，指定您所需的数据流程。将工作流程另存为模板或从许多预制模板中选择，以简化设置。

使用研究和分析向导快速启动并运行。添加你的数据，定义您的研究组和样品组，选择一个工作流程模板，然后开始处理。如有需要，您还可以通过重新运行部分工作流程来节省时间。



Compound Discoverer 工作流程减少了将质谱数据转换为结果所需的处理点击数，让操作更加简便快捷。

交互式链接结果

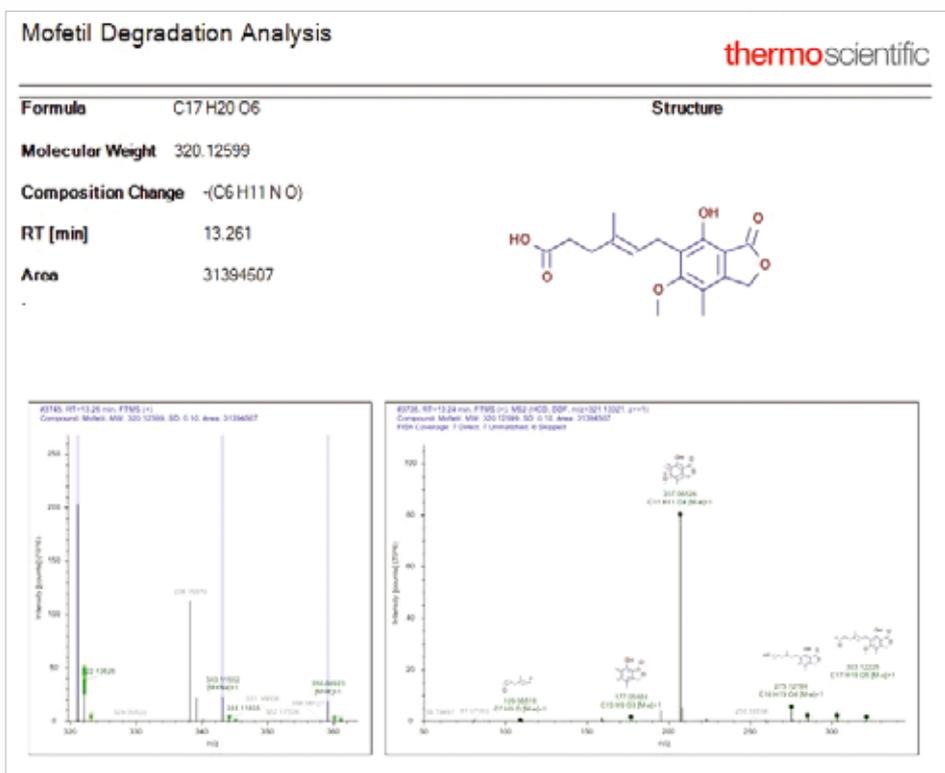
Compound Discoverer 软件可以让您以一种有意义的方式直观地显示结果。可定制的数据可视化让您只查看所选择的数据。可配置的布局可让您在视图之间快速切换。多显示器支持确保您可以一次查看更多数据。

“Compound Discoverer 是一款基于 MS 同位素标记研究解决方案的功能强大、全面且易于使用的软件。该软件功能的实施大大缩短了我们的交付周期并改善了我们的研究影响”。

—Juan Moises Sanchez, Associate
Scientist, Bioanalytical Chemistry, Intrexo

具有量身定制报告的共享结果

强大的数据处理工具可以快速创建有价值的结果，且这些结果和支持信息也必须共享。Compound Discoverer 软件提供可自定义的报告，因此可以将结果轻松传输给其他需要的人员。多种输出格式同样允许您将数据传输到信息学软件上。



量身定制的报告更有助于您实现结果的真正使用。

帮助了解更多的未知物

未知物的识别鉴定是很多小分子分析中最困难的挑战之一。可通过集成多种工具来收集识别信息，Compound Discoverer 软件使您可以鉴定更多的未知物。

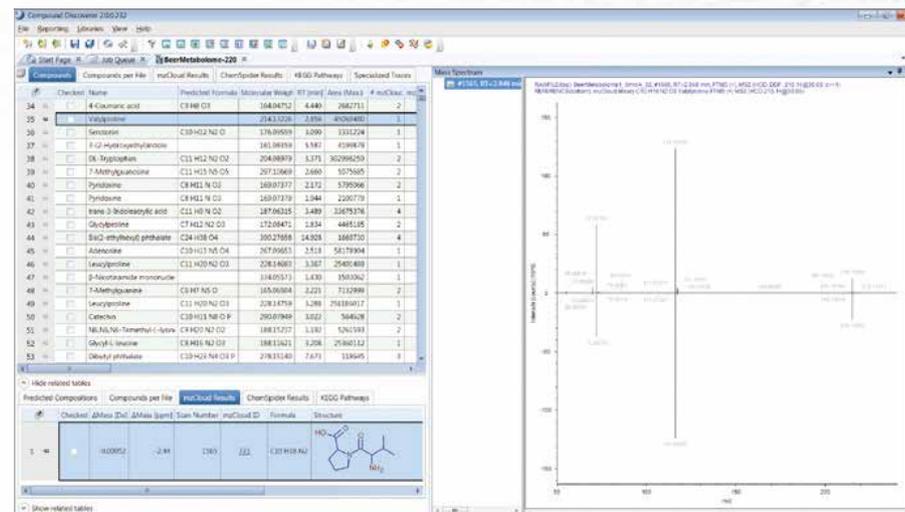
自动鉴定组分

使用在线的 mzCloud™ 质谱库和内部 Thermo Scientific™ mzVault™ 质谱库进行质谱检索，无需离开 Compound Discoverer 软件环境即可快速自动鉴定更多的未知物。质谱裂解库检索可以提供鉴定。此外，mzCloud 可以提供相似性检索结果，为您提供更多未知物识别信息。你甚至可以将有兴趣的质谱图直接从 Compound Discoverer 软件中导出保存在 mzVault 中。

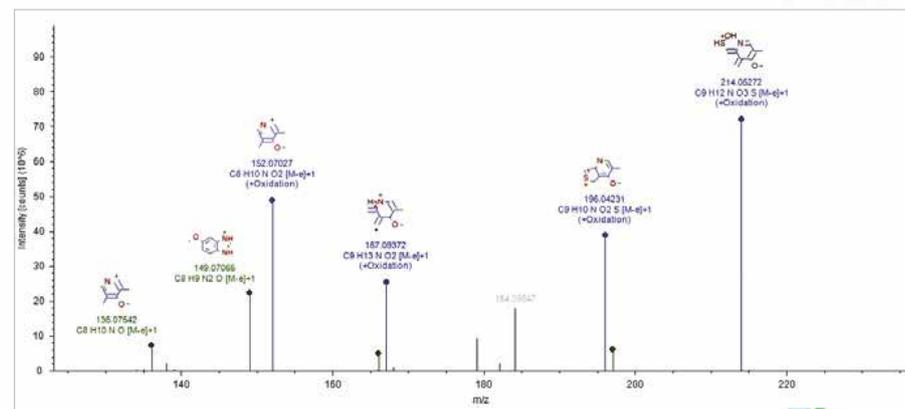
使用高分辨质谱（HRAM）MS 和 MS/MS 数据确定组成元素，包括精细同位素。然后，使用该信息检索多个化学数据库以获取更多注解信息。

阐明结构

Compound Discoverer 软件通过使用内置的参考裂解机理 HighChem Fragmentation Library 预测和显示质谱碎片，从而简化了化合物结构的测定。该功能允许注解预期化合物，如代谢物、杂质或分解产物，以及由化学数据库或用户所提供的其他物质。



使用 mzCloud 质谱库自动识别未知化合物，无需离开 Compound Discoverer 软件。



结构注解的峰提供更为确定的结果，并允许预期化合物的修饰部分可视化。

排序假定结果

数据库检索只能产生假定的识别候选数据。使用新的 mzLogic 算法，您可以使用 mzCloud 中大量的质谱碎片信息对推定的数据库结果进行排序。将 mzCloud 相似度检索与结构相似度匹配相结合可以提供更好的候选排列。

全面的 mzCloud 高级质谱库

mzCloud 是世界上录入最广泛的质谱碎片库。除了用于识别匹配之外，mzCloud 集成的批检索还可以生成相似匹配。检索采用阶梯式碰撞能量扫描，利用质谱库的参考碎片数据的多个能级自动对结果进行建模。

mzCloud

- 广泛精选的在线谱库
- 收录了与所有应用相关的化合物
- 深度精选的高质量数据
- 多能级显示
- 同时支持研究和目标筛查工作流程



将数据转化为知识

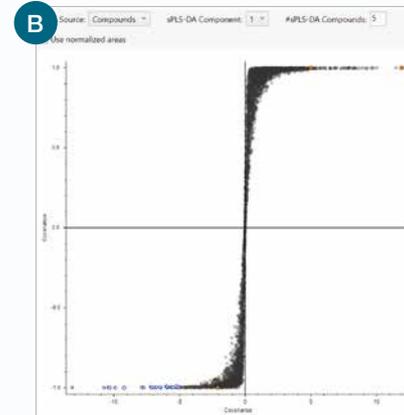
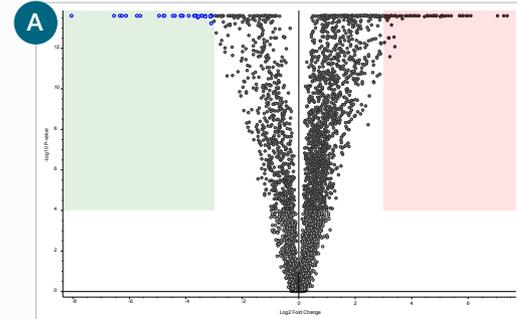
Compound Discoverer 软件提供了一套工具——KEGG 和 BioCyc 以及 Metabolika 生物通路数据库，高级统计数据，假设检验以及复杂数据的灵活可视化—使您远超化合物检测，使您能够了解复杂系统。这些工具建立在 Compound Discoverer 软件的鉴定和结构阐明功能所提供的确定性上，因为对通路分析的置信度取决于对潜在识别的置信度。

查找并将真正的差异可视化

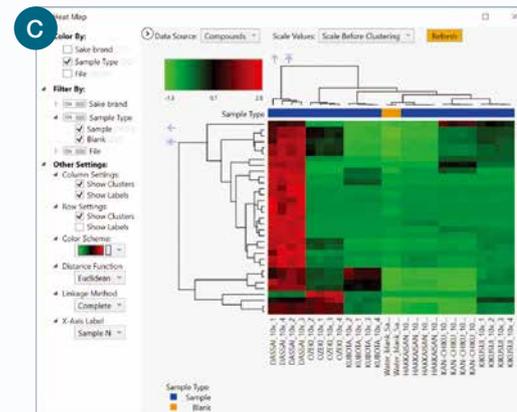
无论您正在进行代谢组学研究还是寻找新出现的环境污染物，强大的 Compound Discoverer 软件工具组都可以让您快速找到样品组之间真正的统计差异—重要差异。快速查看整个研究中组分的趋势，或使用交互式链接显示的确定多个样品组之间的关键组成部分。只需点击一下鼠标，就可以从高级 PCA 可视化快速移动到单个组分。

性能

- 交互式差异分析、PCA、ANOVA、火山图、箱线图及趋势图、PLS-DA 及 t-tests
- 可视化多个样品的分数标记编入(同位素图)及随时间的变化趋势(趋势图)
- 包括用于归一化和原始峰面积、比率、两倍对数变化、CV 值、p 及调整后的 p 值的热图像表
- 使用 Metabolika、KEGG 和 BioCyc 进行途径绘图和可视化
- 分层聚类交互式热点图
- 强大而灵活的结果表格过滤功能，以及自动背景删除功能

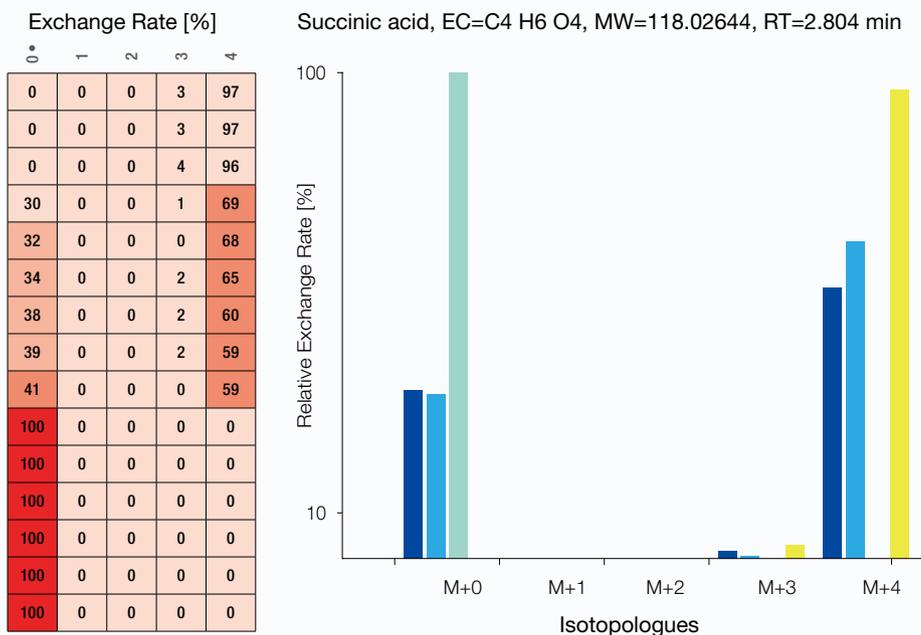


根据 p 值 (ANOVA、Tukey 检验) 和倍数变化 (A)，在 Volcano 图中选择了 33 种化合物 (蓝色)。在 PLS-DA 的 S 图 (B) 和热图 (C) 中，相同的一组化合物自动加亮显示。点击图中的某个点时，Compound Discoverer 将导航到表中相应的化合物并显示 XIC 和质谱图。

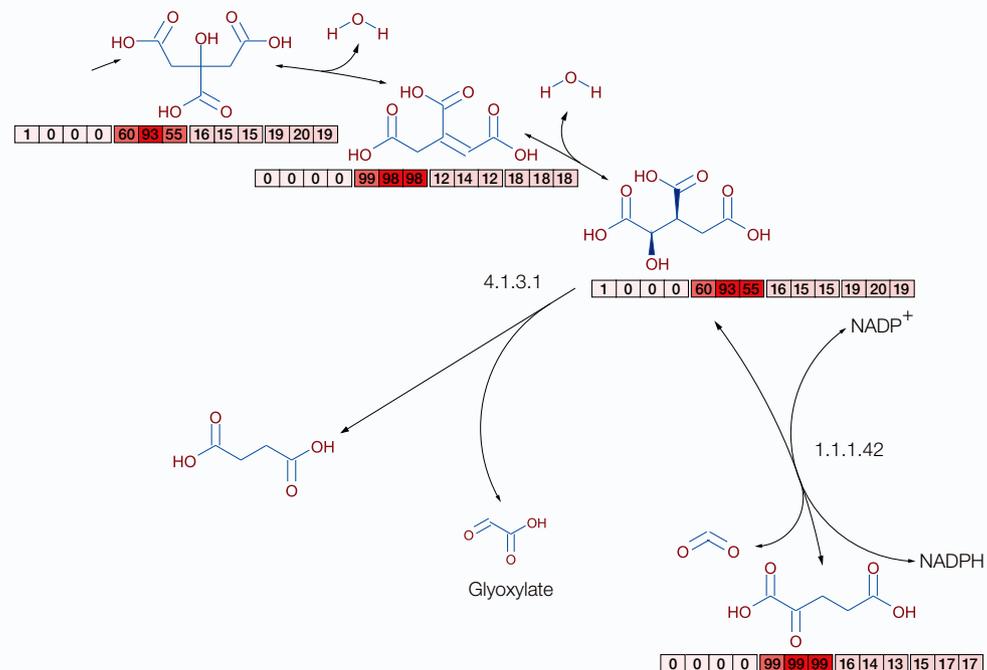


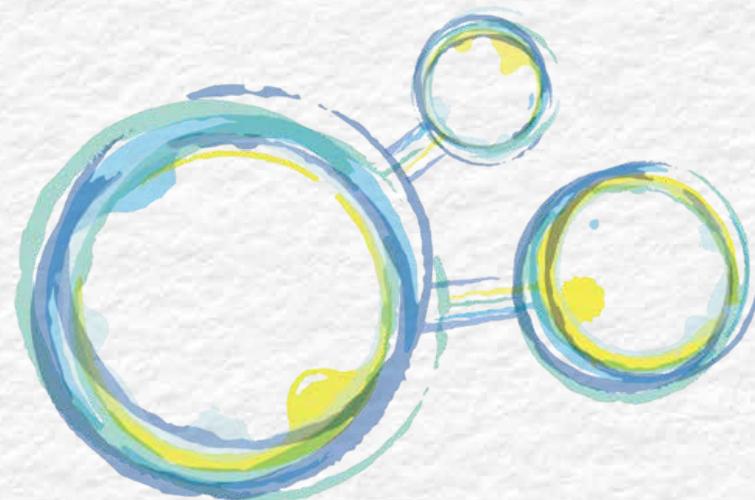
简化稳定同位素标记通量分析

稳定同位素标记实验（定性通量分析）是了解代谢途径和通量的基础。Compound Discoverer 软件充分利用高分辨 Orbitrap 质谱仪数据为稳定同位素标记提供先进、精简的非目标式工作流程。使用未标记的参考样品，Compound Discoverer 软件会自动检测所有化合物，确定其元素组成，并在标记样品中标识其标记的对应物。可以使用任何同位素标记，标记是用于自动同位素检测的唯一用户输入参数。



Compound Discoverer 软件在每种化合物的自然丰度校正后报告分数标记编入（交换率）。使用与 Compound Discoverer 软件集成的 Metabolika 可以将交换率和其他统计数据叠加到通路上。





赛默飞世尔科技

上海

上海市浦东新区新金桥路 27 号 3,6,7 号楼
邮编 201206
电话 021-68654588*2570

生命科学产品和服务业务

上海市长宁区仙霞路 99 号 21-22 楼
邮编 200051
电话 021-61453628 / 021-61453637

成都

成都市临江西路 1 号锦江国际大厦 1406 室
邮编 610041
电话 028-65545388*5300

南京

南京市中央路 201 号南京国际广场南楼 1103 室
邮编 210000
电话 021-68654588*2901

北京

北京市安定门东大街 28 号雍和大厦西楼 F 座 7 层
邮编 100007
电话 010-84193588*3229

生命科学产品和服务业务

北京市朝阳区东三环北路 2 号南银大厦 1711 室
邮编 100027
电话 010-84461802

沈阳

沈阳市沈河区惠工街 10 号卓越大厦 3109 室
邮编 110013
电话 024-31096388*3901

武汉

武汉市东湖高新技术开发区高新大道生物园路
生物医药园 C8 栋 5 楼
邮编 430075
电话 027-59744988*5401

广州

广州国际生物岛寰宇三路 36、38 号合景星辉
广场北塔 204-206 单元
邮编 510000
电话 020-82401600

西安

西安市高新区科技路 38 号林凯国际大厦
1006-08 单元
邮编 710075
电话 029-84500588*3801

昆明

云南省昆明市五华区三市街 6 号柏联广场写字
楼 908 单元
邮编 650021
电话 0871-63118338*7001

欲了解更多信息，请扫描二维码关注我们的微信公众账号

赛默飞世尔科技在全国有共 21 个办事处。本资料中的信息，说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。