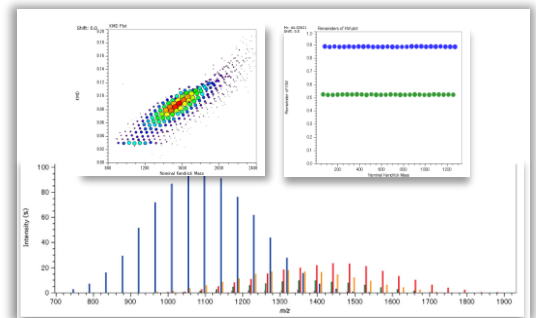


高分子解析向け 製品ラインナップ

① msRepeatFinder

ポリマー解析ソフトウェア

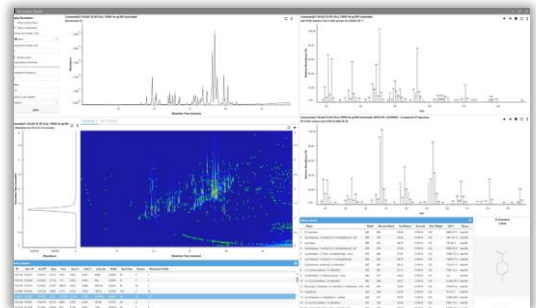
KMD法により、繰り返し構造をもつ複雑なポリマーのマススペクトルデータをピークの帰属をせずに可視化・分類します。Fb-KMD法、RKM法の追加により、対応機種も増えました。



② AnalyzerPro XD

MSデータ解析ソフトウェア

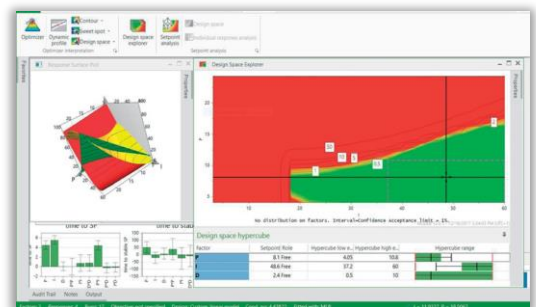
GC,LC/MSデータの成分抽出から多変量解析までを行える統合解析ソフトウェアです。デコンボリューション、NISTライブラリ検索、独自ターゲットライブラリ検索などが可能です。



③ MODDE

実験計画法ソフトウェア

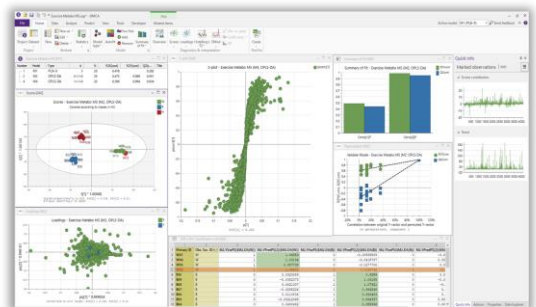
最適条件の発見・可視化と先進的多変量技術により Quality by Designの取り組みをサポートします。ポリマーの合成条件や費用対効果の検討に有効です。



④ SIMCA

多変量解析ソフトウェア

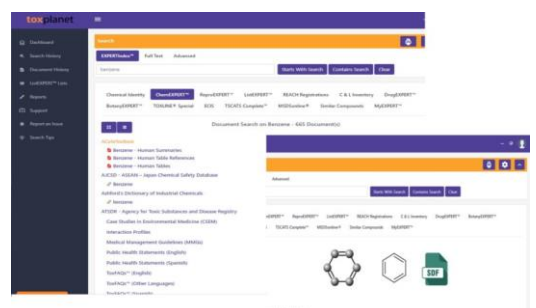
PLS回帰の改良版OPLSや、マーカー探索に最適な S-plot、マルチブロックデータ解析MOCAを搭載。MSやNMRなど各種実験データの解析をサポートします。



⑤ ToxPlanet

化学物質毒性情報データベース

世界的に散らばって存在する毒性・有害性情報のデータベースに対して、横串で情報を一括検索するというデータベースシステムです。

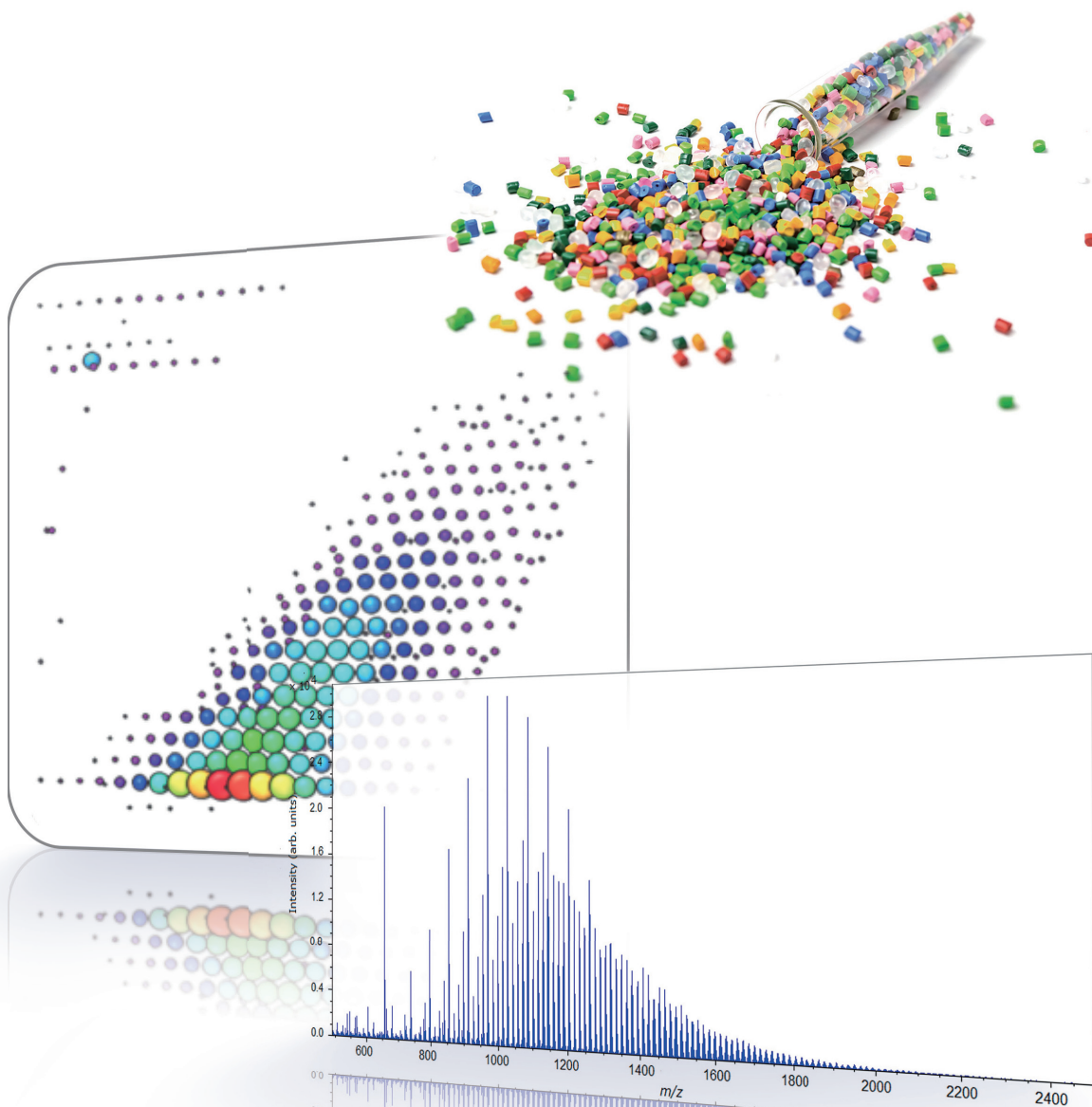




Scientific / Metrology Instruments
ポリマー解析用ソフトウェア

Solutions for Innovation

msRepeatFinder



JEOL Ltd.
日本電子株式会社

ポリマー解析ソフトウェアの決定版！！

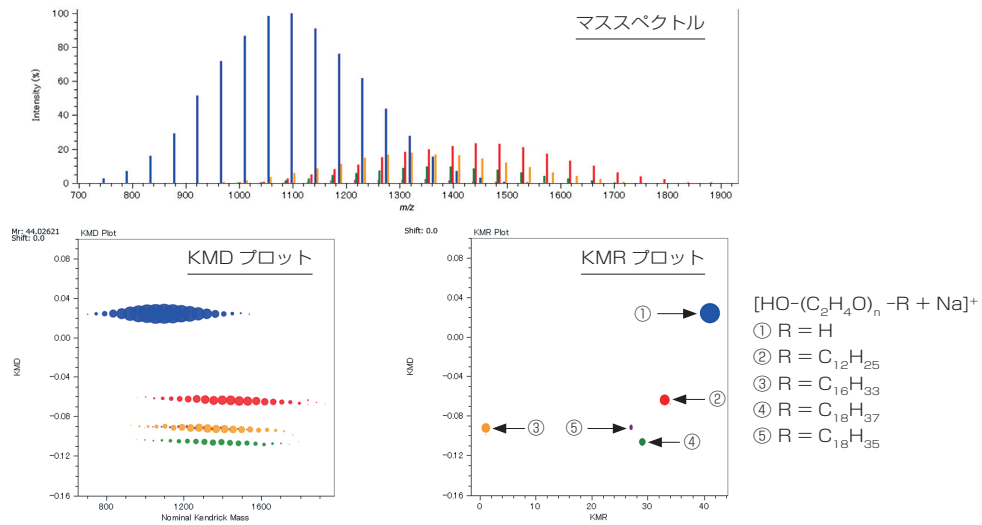
複雑なマスペクトルを可視化し、情報共有を加速します！



末端基の異なるポリマーの組成分布解析

Kendrick Mass Defect (KMD) プロットと Kendrick Mass Remainder (KMR) プロットを組み合わせることで、末端基の異なるホモポリマーの組成分布を可視化することができます。各ポリマーシリーズをグループ化することで、色分けするとともに、分子量分布に関連する数値も計算可能です。

末端基の異なるポリエチレンオキシドの混合物マスペクトル



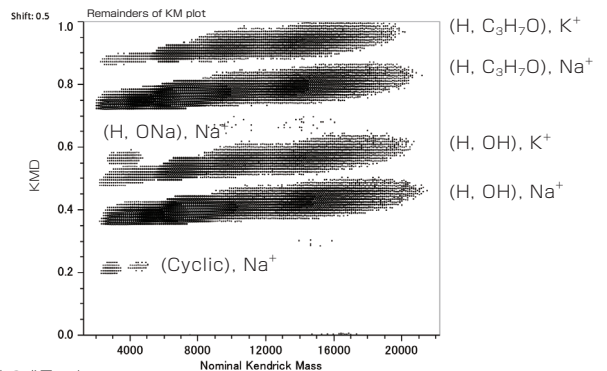
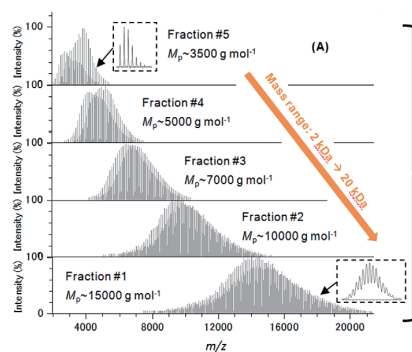
	全イオン強度	KMD 値の重心	NKM 値の重心	数平均分子量	重量平均分子量	多分散度
①	826378	0.0245	1092.1	1092.8	1109.3	1.015
②	239802	-0.0635	1433.7	1434.5	1453.0	1.013
③	175311	-0.0920	1347.5	1348.3	1366.1	1.013
④	90119	-0.1060	1371.1	1371.9	1387.5	1.011
⑤	17689	-0.0912	1279.8	1280.5	1291.2	1.008

ゲル浸透クロマトグラフィー (GPC) と高精度 MALDI-TOFMS を組み合わせた解析 *

多分散度の大きいポリマーの分析には、GPC による分画と高精度 MALDI-TOFMS を組み合わせた分析が有効です。各フラクションのマスペクトルを Remainder of Kendrick Mass (RKM) プロット上に同時に表示することで、組成分布を可視化することができます。

多分散度の大きいポリカプロラク톤の GPC 分取後のマスペクトル

全フラクションのマスペクトルの RKM プロットの重ね書き



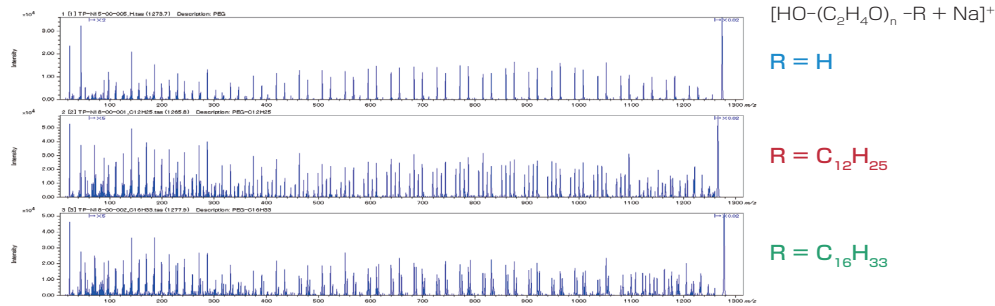
* 本データは、日本電子株式会社と国立研究開発法人産業技術総合研究所との共同研究の成果です。

このページのデータは全て日本電子株式会社製超高分解能 MALDI-TOFMS、JMS-S3000 SpiralTOF™ で測定されたものです。

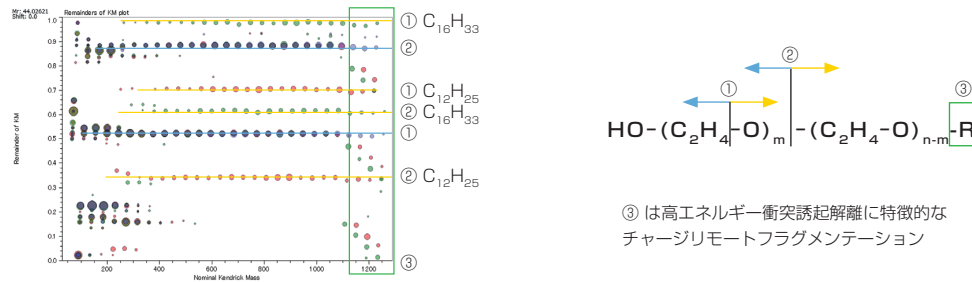
末端基の異なるポリマーの MS/MS による構造解析

高エネルギー衝突誘起解離は、MALDI-TOF-TOF 特有の開裂方式で多くの構造情報がえられます。RKM プロットを使用することで、その豊富な構造情報を可視化することができます。

末端基の異なるポリエチレンオキシドのプロダクトイオンスペクトル



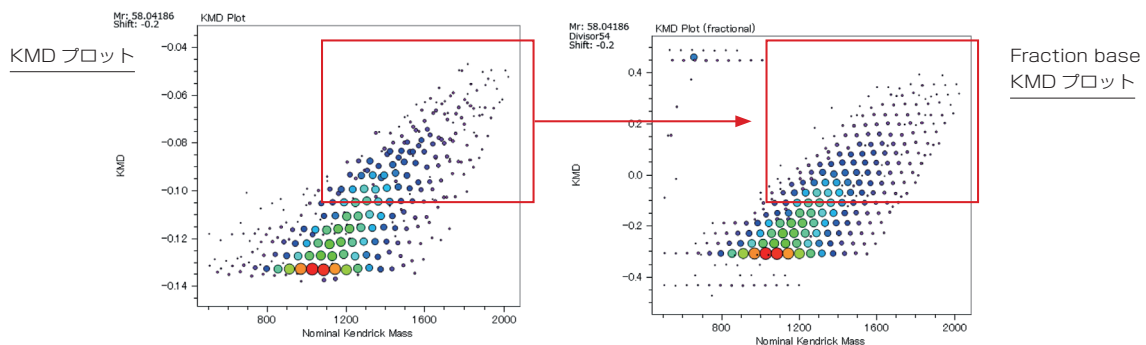
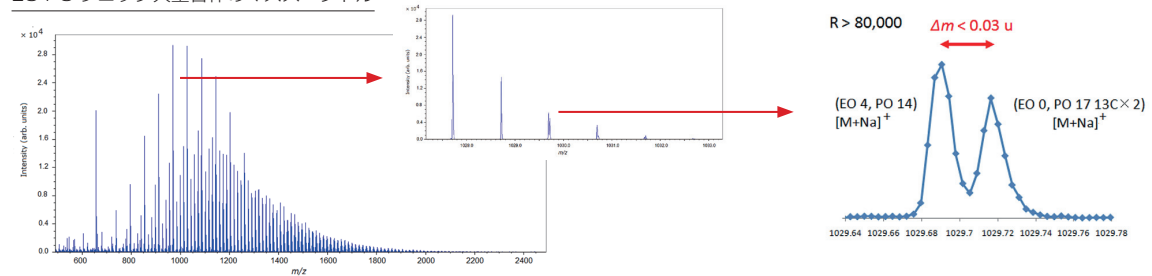
3つのプロダクトイオンスペクトルのRKMプロットの重ね書き



共重合ポリマーの分析

共重合ポリマーなどのマスペクトルでは、質量差の小さいピークが多く観測されます。その場合、Fraction Base KMD プロットを使用することで、従来のKMDプロットよりも明確にポリマーのシリーズを可視化することができます。

EO-PO ブロック共重合体のマスペクトル

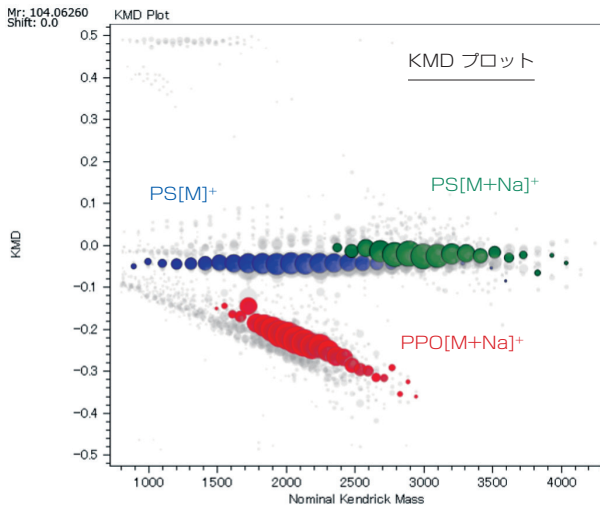
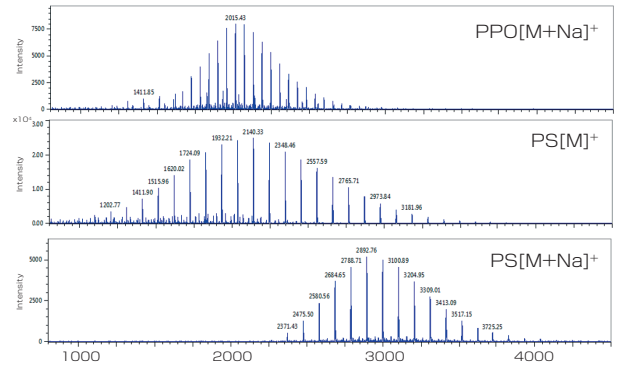
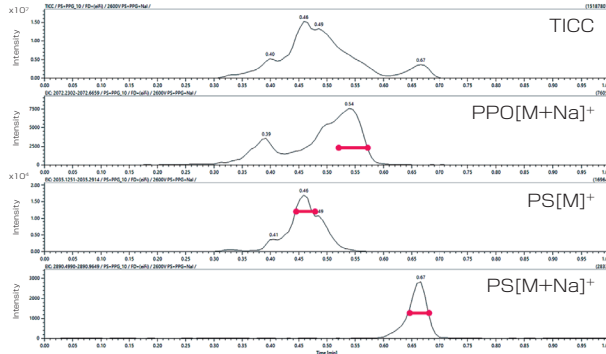


このページのデータは全て日本電子株式会社製超高分解能 MALDI-TOFMS、JMS-S3000 SpiralTOF™ で測定されたものです。

電界脱離イオン化 (FD) でのポリマー分析

FD は、エミッターへの電流量を増加させることで、脱離イオン化するポリマー種が時間により変化します。KMD プロットでは、時間変化により分離したポリマーを重ねがきで可視化することもできます。

ポリプロピレンオキシド、ポリスチレンの混合物の測定結果



このページのデータは全て日本電子株式会社製高分解能 GC-TOFMS、JMS-T200GC AccuTOF™ GCx-plus で測定されたものです。

機能

- ・ピークリストの入力 (最大 10 まで重ね合わせ可能)
- ・KMD/KMR プロット作成
- ・Fraction base KMD プロット作成
- ・Remainder of KM(RKM) プロット作成
- ・ホモポリマーの末端基予測の作成 (KMR プロット上) のみ
- ・グループ化
 - ・グループ化による色づけ
 - ・グループ化したシリーズの表示 / 非表示切り替え
 - ・グループの平均分子量・多分散度計算
 - ・グループ化したポリマーシリーズのエクスポート

特記事項

- ・入力形式は、 m/z 、イオン強度の 2 列のピークリストです。
- ・処理結果の有用性は、与えたピークリストの測定質量精度に強く依存します。

本製品は、Microsoft® Windows® 7 Service Pack 1 (64bit)、Microsoft® Windows® 10 (64bit) がインストールされたPC上で動作します。
RAM 4GB 以上、CPU 1 GHz 以上が必要です。
.NET Framework 4.5.2 以上が必要です。
.NET Framework 4.5.2 以上がインストールされていない PC に本ソフトウェアをインストールすると、.NET Framework 4.5.2 が合わせてインストールされます。
Microsoft、Windows、PowerPoint、Microsoft Office は米国 Microsoft Corporation の米国およびその他の国における登録商標または商標です。
Microsoft Word は、米国 Microsoft Corporation の商品名称です。

* 外観・仕様は改良のため予告なく変更することがあります。

このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせ下さい。



本社・島島製作所 〒196-8558 東京都昭島市武蔵野3-1-2 TEL: 042-543-1111(大代表) FAX: 042-546-3353
www.jeol.co.jp ISO 9001・ISO 14001 認証取得

- 東京事務所 〒100-0004 東京都千代田区大手町2丁目1番1号 大手町野村ビル
業務統括センター TEL: 03-6262-3564 FAX: 03-6262-3589
ブランドコミュニケーション本部 TEL: 03-6262-3560 FAX: 03-6262-3577
SI営業本部 SI販売部 TEL: 03-6262-3567 FAX: 03-6262-3577
ソリューション推進室 TEL: 03-6262-3566 産業機器営業部 TEL: 03-6262-3570
SE営業部 TEL: 03-6262-3569 MEソリューション販売部 TEL: 03-6262-3571
- 東京支店 〒100-0004 東京都千代田区大手町2丁目1番1号 大手町野村ビル TEL: 03-6262-3588
東京 S11グループ TEL: 03-6262-3581 東京 S12グループ TEL: 03-6262-3582
東京 S13グループ TEL: 03-6262-5586 ME営業グループ TEL: 03-6262-3583
- 東京第二事務所 〒190-0012 東京都立川市曙町2丁目6番3号
ソリューションビジネス部 TEL: 042-526-5098 FAX: 042-526-5099
- 横浜事務所 〒222-0033 神奈川県横浜市港北区新横浜3丁目6番4号 新横浜千歳ビル6階 TEL: 045-474-2181 FAX: 045-474-2180
- 札幌支店 〒060-0809 北海道札幌市北区北9条3丁目19番地 ノルテプラザ5階 TEL: 011-726-9680 FAX: 011-717-7305
- 仙台支店 〒980-0021 宮城県仙台市青葉区中央2丁目2番1号 仙台三菱ビル6階 TEL: 022-222-3324 FAX: 022-265-0202
- 筑波支店 〒305-0033 茨城県つくば市東新井18番1 TEL: 029-856-3220 FAX: 029-856-1639
- 名古屋支店 〒450-0001 愛知県名古屋市中区那古野1丁目47番1号 名古屋国際センタービル14階 TEL: 052-581-1406 FAX: 052-581-2887
- 大阪支店 〒532-0011 大阪府大阪市西区西中島5丁目14番5号 ニッセイ新大阪南口ビル11階 TEL: 06-6304-3941 FAX: 06-6304-7377
- 西日本ソリューションセンター
〒532-0011 大阪府大阪市西区西中島5丁目14番5号 ニッセイ新大阪南口ビル1階 TEL: 06-6305-0121 FAX: 06-6305-0105
〒730-0015 広島県広島市中区橋本町10番6号 広島 NSビル5階 TEL: 082-221-2500 FAX: 082-221-3611
高松支店 〒760-0023 香川県高松市寿町1-1-12 パシフィックシティ高松5階 TEL: 087-821-0053 FAX: 087-822-0709
福岡支店 〒812-0011 福岡県福岡市博多区博多駅前2丁目1番1号 福岡朝日ビル5階 TEL: 092-411-2381 FAX: 092-473-1649
- 海外事業所・営業所 Boston, Paris, London, Amsterdam, Stockholm, Sydney, Milan, Singapore, Munich, Beijing, Moscow, Sao Paulo ほか

国内販売代理店

インフォコム株式会社 ヘルスケアサービス部
電話: 03-6866-3860
メール: info-science@infocom.co.jp

〒150-0001
東京都渋谷区神宮前2-34-17 住友不動産原宿ビル

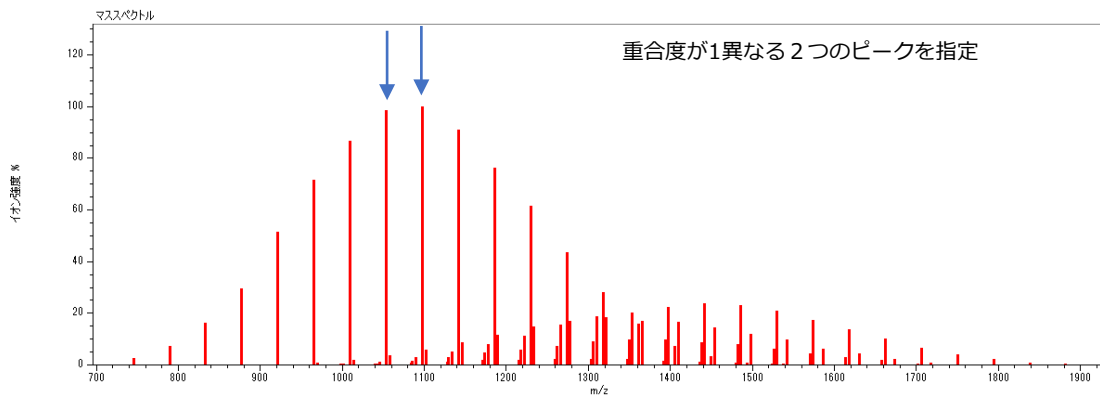
msRepeatFinder Version 4

ご好評をいただいているポリマー解析ソフトウェア msRepeatFinder が Version 4 へと進化しました。
従来の機能に元素組成推定や2検体比較機能を追加し、複雑なスペクトルの更なる情報共有を加速します。



ポリマーの元素組成推定

重合度が1異なる2つのピークを指定することで、モノマーと末端基の元素組成が推定可能です。



組成推定

選択したm/z
m/z ピーク1 1053.60273
ピーク2 1097.62899
Δm 44.02621 モノマーに適用

2ピークの差分計算 (KMDプロットのモノマーに指定可能)

キャンセル

モノマーの推定

質量範囲 5.00 (mDa)
電子数 奇数
電荷数 0
DBE -0.5 - 20.0
表示結果数(最大) 100

元素推定

元素記号	最小	最大
C	0	100
H	0	200
N	0	10
O	0	10

実行

結果

番号	組成式	質量	DBE	質量誤差(絶対値)(mDa)	質量誤差(mDa)	質量誤差(絶対値)(ppm)	質量誤差(ppm)
1	C2 H4 O	44.02621	0.0	0.1448	-0.1448	3.2878	-3.2878

モノマー組成推定結果

実行 末接各推定 出力 クリップボードへコピー

末端基推定

モノマー組成式 C2 H4 O
モノマー質量 44.02621
質量範囲 3.00 (mDa)
質量範囲 最小 0.00000 最大 250.00000
電子数 偶数
電荷数 +1
DBE -0.5 - 20.0
表示結果数(最大) 100

元素推定

元素記号	最小	最大
C	0	100
H	0	200
N	0	10
O	0	10
Na	1	1

実行

結果

番号	末端基組成式	モノマー	n	質量	DBE	質量誤差(絶対値)(m)	質量誤差(mDa)	質量誤差(絶対値)(p)	質量誤差(ppm)
1	H2 Na O	C2 H4 O	23	1053.60273	-0.5	0.1950	0.1950	0.1850	0.1850
2	C2 H6 Na O2	C2 H4 O	22	1053.60273	-0.5	0.1950	0.1950	0.1850	0.1850
3	C4 H10 Na O3	C2 H4 O	21	1053.60273	-0.5	0.1950	0.1950	0.1850	0.1850
4	H6 Na O	C2 H4 O	21	1053.60004	0.5	2.8802	2.8802	2.7338	2.7338
5	C6 H14 Na O4	C2 H4 O	20	1053.60273	-0.5	0.1950	0.1950	0.1850	0.1850
6	C7 H10 Na O5	C2 H4 O	20	1053.60406	4.5	1.1424	-1.1424	1.0643	-1.0643
7	C2 H10 Na O2	C2 H4 O	20	1053.60004	0.5	2.8802	2.8802	2.7338	2.7338
8	C8 H18 Na O5	C2 H4 O	19	1053.60273	-0.5	0.1950	0.1950	0.1850	0.1850
9	C9 H14 Na O	C2 H4 O	19	1053.60406	4.5	1.1424	-1.1424	1.0643	-1.0643
10	C4 H14 Na O3	C2 H4 O	19	1053.60004	0.5	2.8802	2.8802	2.7338	2.7338

末端基組成推定結果

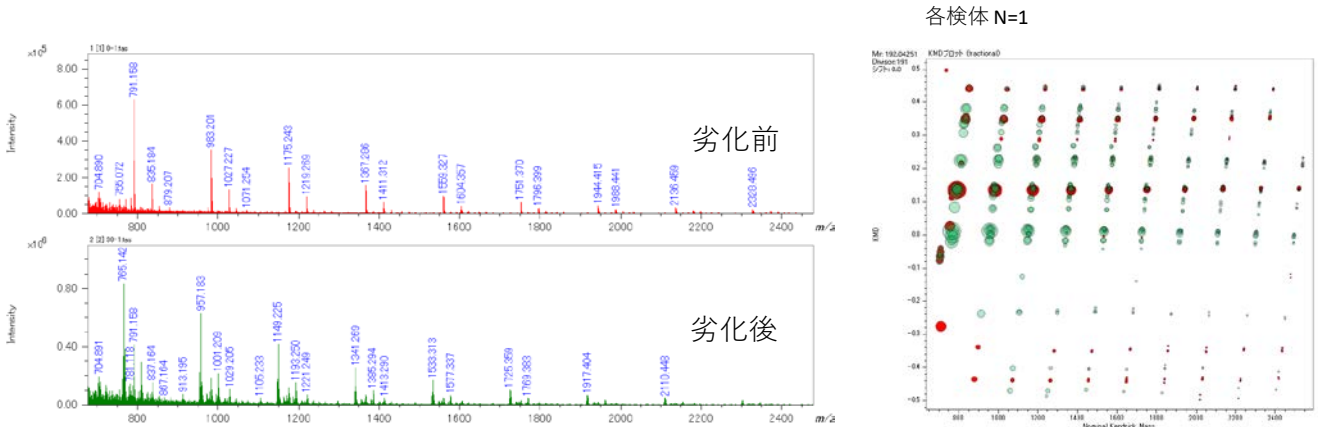
出力 クリップボードへコピー



2検体間の差異分析

2検体間での統計解析が可能な差異分析機能を追加しました。

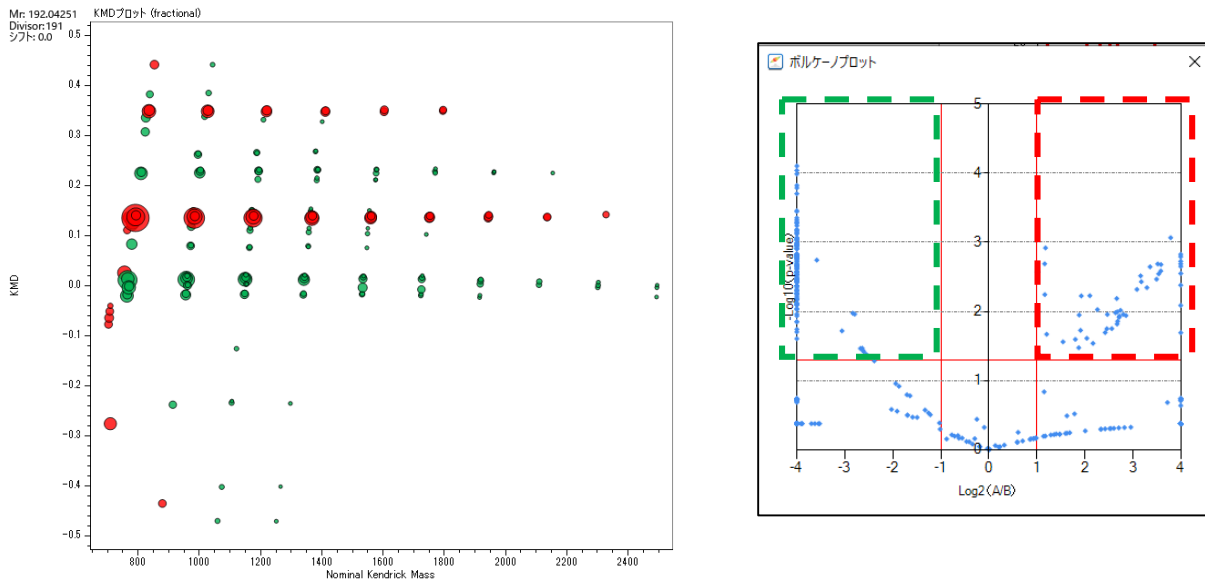
ポリマー分析において劣化解析, ロット間比較など2検体間の比較を行いたい場面が多くあります。しかしKMDプロットの単純な重ね合わせ(下図右)ではその差異を直感的に判別することは困難でした。



msRepeatFinderに新たに搭載された差異分析機能を用いて、2検体各3個ずつのマススペクトルから解析を行いました。イオン強度の合計で規格化し、差分表示を行いました(下図左)。劣化前の方が優勢なイオンを赤、劣化後の方が優勢なイオンを緑の円で表示しています。また、ボルケーノプロット(下図右)を作成し、ボルケーノプロット上で統計的有意差があるイオンのみを選択してKMDプロット上に表示することも可能です。

このように差異分析機能により劣化前後で有意な差があるポリマーシリーズを選択的に可視化することが可能となりました。

各検体 N=3・差分表示・イオン強度合計で規格化



ユーザーインターフェースの2か国語対応

ユーザーインターフェース言語がインストール時に英語と日本語から選択できるようになりました。

このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせください。



GC-MS および LC-MS データ処理ソフトウェア

AnalyzerPro XD

AnalyzerPro XD は、主要メーカーの GC-MS および LC-MS のデータ形式をサポートし、データ読み込み、デコンボリューションによる成分抽出、ライブラリ検索、ターゲット / 非ターゲット解析、統計 / 多変量解析による可視化までを行う MS データ処理ソフトウェアです。さらにオプションとして、GCxGC や LCxLC の 2 次元クロマトデータ解析、Direct MS (DART) データ解析もサポートしています。



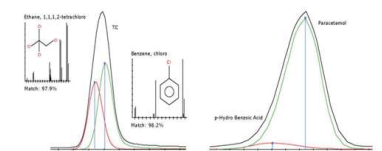
主要 MS メーカーのフォーマットに対応

下記を中心とする主要 MS メーカーのデータを直接 AnalyzerPro XD に読み込むことが可能です。複数データを一括読み込み・データ処理できます。(詳細なファイルフォーマットについてはお問い合わせください。)

- SHIMADZU
- Agilent Technology
- NetCDF
- JEOL
- Waters
- JCamp
- Bruker
- Advion
- CSV
- Thermo Fisher Scientific
- DANI
- mzXML
- SCIEX
- VARIAN
- Text

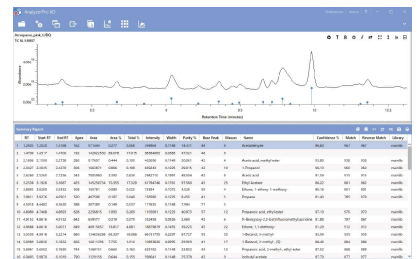
デコンボリューション

AnalyzerPro XD のデコンボリューションでは、独自の 3D パターン認識により共溶出成分を分離し、各イオンがどの成分に属するかを判断できます。高濃度成分のすぐそばの目立たない微量成分でも抽出することができます。



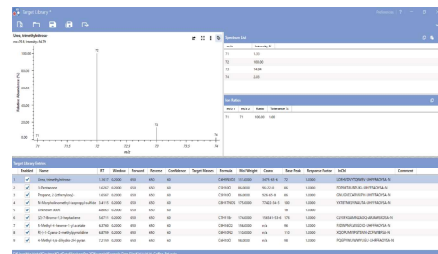
ライブラリ検索

デコンボリューションで得られた成分ごとの高品質スペクトルを、NIST 形式のマスマスペクトルライブラリを対象として検索することが可能です。NIST 形式であれば、ユーザー定義のライブラリでも検索できます。



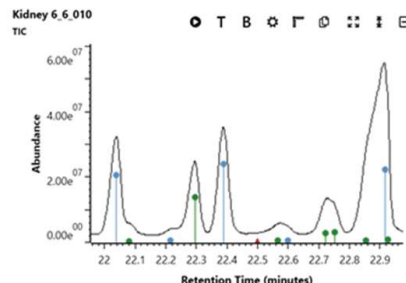
XD ターゲット成分リストの作成

ターゲット成分解析によるサンプルプロファイリングは、複雑な混合物に存在するターゲット物質の相対量を決定したり、サンプルの特徴的な成分を検索したりするのに便利なツールです。ターゲット成分リストはデコンボリューションで見つかった成分から作成することができます。すべての成分を含む自動ライブラリ構築も可能です。



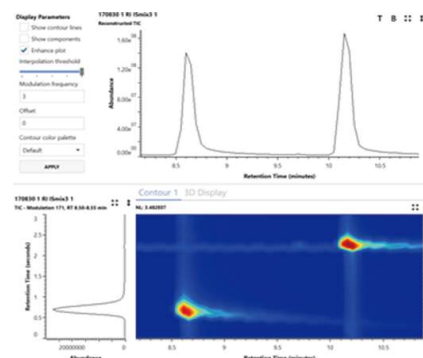
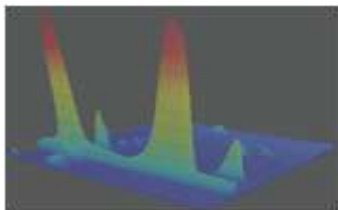
XD ターゲット成分解析

ターゲット成分リストには、保持時間、スペクトル、NIST形式のライブラリ一致、およびメタデータは全てコンポーネントごとにキャプチャできます。コンポーネントの指定イオン比を使用した追加の確認基準も設定できます。見つかったターゲット成分は緑色、ノンターゲット成分は青色で表示されます。見つからないターゲット成分は、ベースライン上に赤色で示されます。



XD 2次元プロット表示 (オプション)

生の1次元のTICから、モジュレーション時間の情報を基に2次元等高線プロットを再構成できます。上部には第1カラムでの分離、左側には第2カラムでの分離を表示します。3D表示も可能です。



出力フォーマット

- CSV
- PDF
- 画像 (*.png/*.jpeg/*.bmp/*.xps)

稼働環境

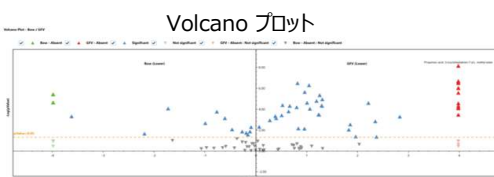
- OS : Windows 8、10 (64bit版、日本語/英語)
- CPU : Core i / 互換シリーズ (ベンチマークの高いもの eg. PassMark、4コア以上※1)
- メモリ : 4GB 以上の空き (読み込むデータ量に依存 2Dデータはより多くを使用します)
- ストレージ : SSD 10GB 以上の空き (HDDも可)
- ディスプレイ : フルHD(1920×1080)以上
- NIST形式マススペクトル・ライブラリ※2 (C:\NIST20\MSSSEARCHの下に NIST形式でインストールされていること)
- NIST MS Search Program (米国 NIST 提供のマススペクトル検索ソフトウェア)
- インターネット接続 : 必須ではありません (手動ライセンス認証が必要です)

※1
AnalyzerPro XD はマルチスレッド対応のため、コアの数が多いほど高速に実行されます

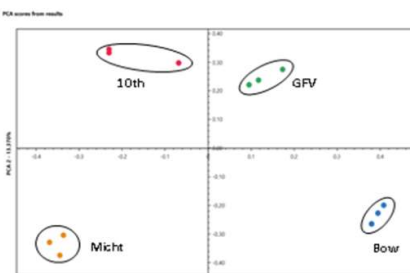
※2
ライブラリは別途購入が必要です
弊社からも購入可能です

XD 統計 / 多変量解析による可視化と特徴成分探し

複数サンプルに関する、ターゲット解析やノンターゲット解析の結果は、主成分分析 (PCA) や Volcano プロットで可視化し、特徴成分を探すことができます。

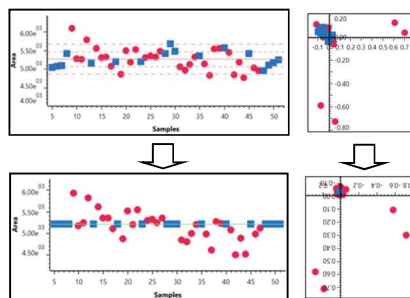


主成分分析 (PCA)



XD QC 補正

MS メタボロミクス研究では、一定期間およびサンプルの複数バッチにわたって実施されます。AnalyzerPro XD では、分析プロセスでのバラツキを、QC サンプルを利用して補正することが可能です。これにより、良好な PCA スコアプロットを得ることができます。



製品に関するお問い合わせ先

infocom

インフォコム株式会社

〒150-0001 東京都渋谷区神宮前2-34-17 住友不動産原宿ビル

TEL : 03-6866-3860 FAX : 03-6866-3055

Email : info-science@infocom.co.jp Web : https://www.infocom-science.jp/

- 本ソフトウェアは、SpectralWorks社の登録商標です。
- 記載の商品名などは各社の登録商標、または商品場合があります。
- 本カタログの仕様は、予告なく変更する場合があります。
- 本カタログ記載の情報は、2021年9月1日現在のものです。

SIMCA 17

Analytical

多変量データ解析で分析分野を強力にサポート

SIMCAは、多変量データ解析のツールとして研究・開発・製造の現場で利用されていますが、分析研究分野においても幅広く使われています。

各種分析機器(MS/NMR/IR/NIR/Raman など)のスペクトルデータを読み込み、PCA・(O)PLS・(O)PLS-DA・SIMCA法などを用いた多変量解析やクラスター解析により、成分分析、要因解析、キャリブレーション、キャラクタリゼーションが行え、さらに混合物などにおける各種マーカー候補の絞り込みにも応用できます。スペクトルデータに特有の大量変数(ピーク数)も、無制限で取り扱いが可能で、時系列データの取り扱いも可能です。



■ Key Words

- データ前処理
MSC, SNV, 一次・二次微分など
- 各種分析スペクトル
- 混合物のスペクトル
- 多変量解析: PCA, (O)PLS, (O)PLS-DA, SIMCA など
- クラスター解析
HCA (階層的クラスター解析)
PLS-TREE
デンドログラム
- マルチブロック解析: MOCA
- S-plot, S-line plot
- 成分分析、要因解析
- キャリブレーション
- データの圧縮
- クラス分け、判別分析
- 外れ値解析
- What-If分析
- Pythonスクリプトによる、
定型作業の自動化
- Noteによる作業メモ
- Spectroscopyプロジェクト

SIMCAの主な解析手法と特性

PCA(主成分分析)

データマップの作成(多様性/グループ/異常値の有無を概観)、マーカー候補の推測
Score PlotとLoading Plotを比較し、スペクトルの傾向を解釈

OPLS-DA(PLS判別分析)

マーカー候補の選択(どの変数がグループの分離に寄与しているのかを定量的に判断)

OPLS(Orthogonal PLS)

通常のPLS法を改良したもので、マーカー候補の選択に特に効果的な手法
データに関連するスペクトルと不要なスペクトルの変動を見抜く

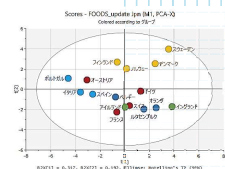
SIMCA法

グループの識別(新規データがグループに所属するかどうかの判断)
モデルを既知の系から作成し、未知サンプルを分類・帰属、Cooman's plotによる可視化

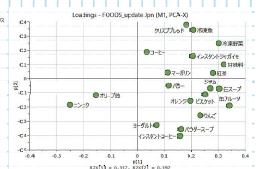
Batch PLS/OPLS

バッチプロセスをリアルタイムに監視するためのモデルを作成
逸脱したバッチプロセスの原因究明も可能

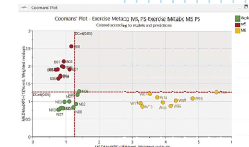
Score Plot



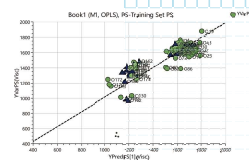
Loading Plot



Cooman's plot



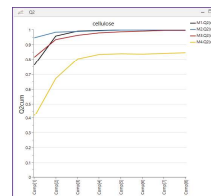
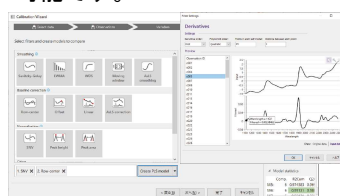
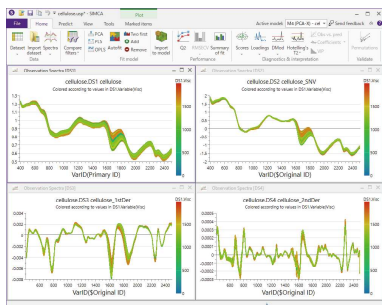
多変量キャリブレーション



Spectroscopy Project

スペクトルデータ解析向けにデータの前処理、モデリング、プロット、比較、実行を容易にするために、すべての機能を1つのリボンタブに集めたシンプルなインターフェースが利用可能なプロジェクトです。

1次・2次微分、MSC、SNVなどの一般的な前処理操作がウィザード形式で簡単に実施できます。複数前処理を一括実施し、その結果得られたモデルの比較検討が可能です。

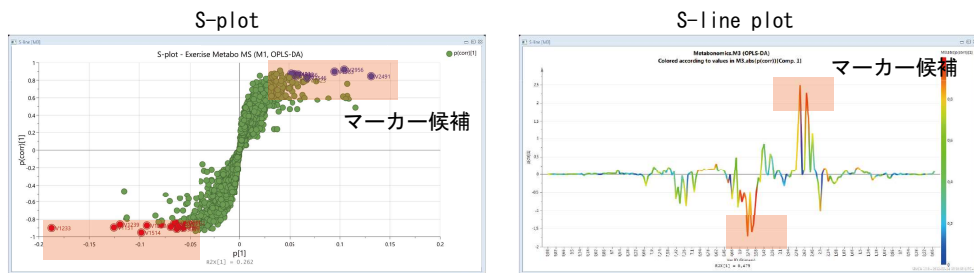


Value from Data

Bio science Solution

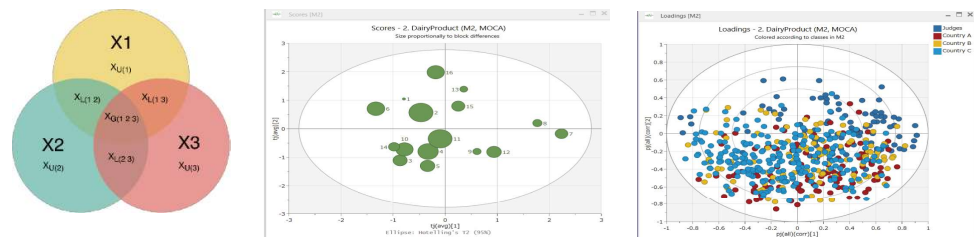
マーカー候補の探索 ～S-plot、S-line plot

OPLS-DAモデルを使った「S-plot」では、膨大な変数の中からマーカー候補となるスペクトルを効率良く可視化します。「S-line plot」では、重要なスペクトルをケミカルシフトなどのスペクトル領域として確認することが出来ます。



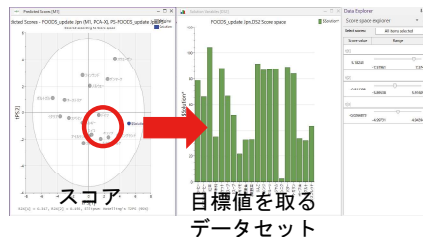
MOCA (マルチブロック直交成分分析)

共通のサンプルに対する複数のデータセットを統合的に解析します。プロセス信号/分光データ/原料組成データなど、ソースの異なるデータセット間の相関関係を見ることが出来ます。



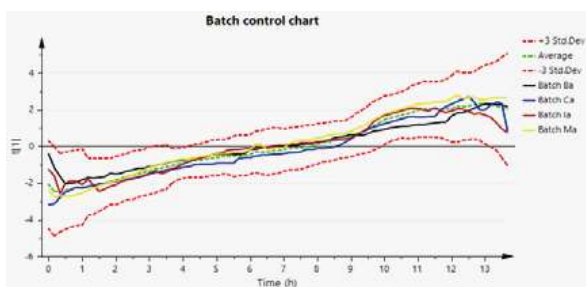
スコアスペース探索 (PCA) と多変量ソルバー (PLS/OPLS)

既存のPCA/PLSモデルのスコア平面上において、希望する場所にサンプルが射影されるような典型的なデータセット(X変数の行列)を提示します。



PAT/QbD ～製造プロセスの品質管理に～

理想的なPAT (Process Analytical Technology) かつQbD (Quality by Design) のツールを搭載し、大量のデータから重要な情報を引き出します。



・プロセスモニタリング

コントロール・チャート (Shewhart, CuSum, EWMA等) による、バッチプロセスや連続プロセスのモニタリングにより、エラーの見逃しを最小化し逸脱した品質の早期発見に役立ちます。

・多変量キャリブレーション (ソフトセンサー)

多変量キャリブレーションによって信頼性の高いモデルを得ることができ、リアルタイムで測定できないような製造プロセスにおける成分濃度や物性値の予測が可能です。

無料トライアルリクエストはこちら info-science@infocom.co.jp

本製品に関するお問い合わせ先

- 本ソフトウェアは、Sartorius Stedim Biotech社の開発製品です。
- 記載の商品名等は各社の登録商標、または商品場合があります。
- 本カタログの仕様は予告なく変更する場合があります。
- 本カタログの仕様は2021年8月1日現在のものです。

infocom インフォコム株式会社

ヘルスケアサービス部
〒150-0001 東京都渋谷区神宮前2丁目34番17号 住友不動産原宿ビル
TEL. 03-6866-3860 FAX. 03-6866-3055
Email. info-science@infocom.co.jp <https://www.infocom-science.jp/>

■ ファイルフォーマットへの対応 詳細はお問合せ下さい。

- ・SIMCA : *.usp
- ・MODDE : *.mip, *.dat
- ・Brimrose NIR : *.dat
- ・Brookside : *.trn, *.pkg
- ・Brookside v2.6 XML : *.xml
- ・Bruker OPUS/Interpolated
- ・HPLC ChemStation : *.ch, *.uv
(注: 例外あり)
- ・CSV : *.csv
- ・DIF : *.dif
- ・DIF (OEM) : *.dif
- ・Excel workbook : *.xlsx, *.xlsb
- ・Excel 97-2003 : *.xls*
- ・Galactic SPC : *.spc
- ・JCAMP-DX : *.jcm, *.dx, *.jdx
- ・Matlab : *.mat
- ・LOTUS 123 : *.wks, *.wk1
- ・NetCDF : *.nc, *.cd (MVACDF, ANDI)
- ・NSAS : *.da
- ・Text : *.txt, *.dat
- ・Thermo SIEVE : *.txt
- ・Unscrambler : *.uns, *.inp
- ・User defined format

■ 動作環境

- ・OS: Windows 8、10 (64bit版)
- ・CPU: Core i / 互換シリーズ (ベンチマークの高いもの eg. PassMark)
- ・メモリ: 4GB以上の空き (読み込むデータ量に依存します)
- ・ストレージ: SSD 400MB以上の空き (HDD可)
- ・ディスプレイ: フルHD (1920x1080) 以上
- ・インターネット接続: 必須ではありません (手動ライセンス認証が必要です)

Value from Data

Bio science Solution



MODDE pro 13

製薬、化学、バイオ分野の実験を強力にサポートします

MODDEは、デザイン(実験計画)とモデリング(多変量モデリング)を行い、実験の最適化、効率化、結果の予測を実現するツールとして、研究・開発・製造の現場で利用されています。実験を行なう分野で幅広くお使いいただけますが、ここでは製薬・化学・バイオ分野における利用例をご紹介します。



合成反応の最適化

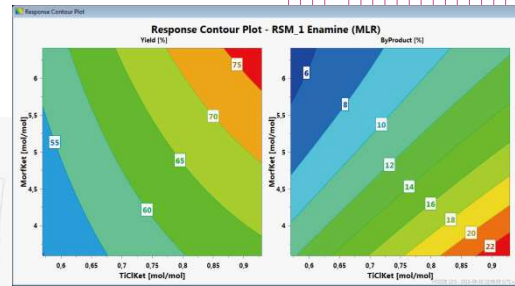
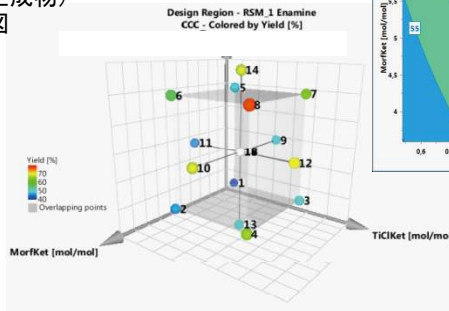
合成反応のファクター(条件)を実験空間にデザインし、収量等のレスポンス(結果)から反応をモデリング(統計モデルの作成)します。収率↑、副生成物↓となる最適条件を探索できます。

[CCCデザイン使用 (RSM)]

図) 下左: ファクター(原料、触媒など)及びレスポンス(収率、副生成物)
下中央: 実験空間とデザイン図
右: 各レスポンスの等高線図

Factors					
Name	Abbr.	Units	Type	Use	
MorKet	MK	mol/mol	Quantitative	Controlled	
TiCKet	TiK				
Temp	Te				

Responses					
Name	Abbr.	Units			
Yield	Y	%			
Biprodukt	BIP				



Key Words

- ◎ リボン・インターフェース
- ◎ Design
 - ファクター
 - レスポンス
 - Objective
 - Screening, Optimization, Robustness testing
- デザイン
 - Full Fac(2 or 3 level), Frac Fac, Box Behken, CCC, CCF, Plackett Buman, D-Optimal, Onion D-Optimal, Mixture, Rechtschaffner, Doehlert, RED-MUP, Stabirity, Reduced combinatorial, Generalized Subset, Definitive Screening, etc.

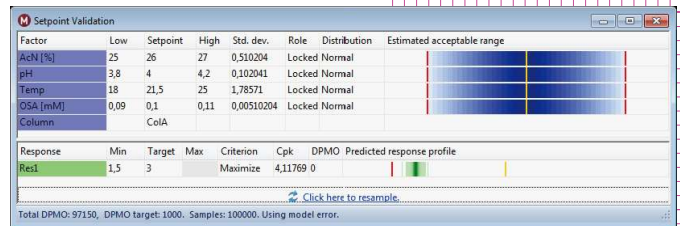
HPLC運転条件の検証(頑健性(ロバスト)の評価)

HPLC(液クロ)の運転条件に対するデザインとモデリングから、条件の頑健性を評価できます。

図) 下左: ファクター(カラム、温度、pHなど)
下右: レスポンス(ピークの解像度)
右: 条件のロバストネス解析(モンテカルロ・シミュレーションから値の分布を評価)

Factor					
Name	Abbr.	Units	Type	Use	Settings
AcN	Ac	%	Quantitative	Controlled	25 to 27
pH	pH		Quantitative	Controlled	3.8 to 4.2
Temp	Te	°C	Quantitative	Controlled	18 to 25
OSA	OS	mM	Quantitative	Controlled	0.09 to 0.11
Column	Co		Qualitative	Controlled	CoA,CoB

Responses		
Name	Abbr.	Units
k1	k1	-
k2	k2	-
Res1	Re1	-



回歸モデル

- Screening: Linear, Interaction
- RSM: Quadratic
- デザインウイザード
 - One Click Analysis機能
 - アドバイス機能
- Power Design
 - 実験デザインの検出力推定

生物学的アッセイ

ウェルプレート形式のデザインとモデリングで、レポート・アッセイのRLUを最大にした例です。

[RED-MUPデザイン使用(2つのデザインを統合ウェルプレートに展開)
ファクターA: (MgCl₂、デカナルなど)→プレート横
ファクターB: (光学密度、大腸菌株)→プレート縦
レスポンス: RLU(相対発光強度)

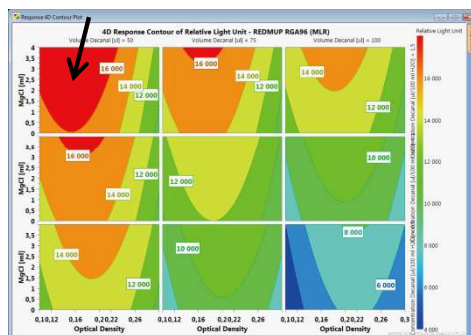
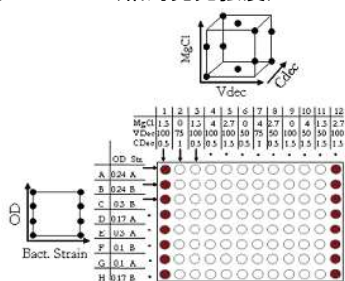


図) 左: RED-MUPデザインの例
上: 4D-Contourを用いたRLUのマップ
左上矢印が最大値領域

ワークシート上での基礎解析

- 散布プロット
- ヒストグラム
- 記述統計
- 相関行列 etc.

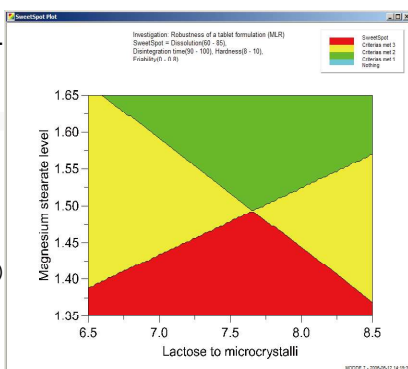
解析アドバイス

- 解析時のプロットと結果を説明し、次に行なう操作をアドバイス

製剤開発I：デザインスペース対応による品質設計

ICH*Q8(製剤開発のガイドライン)では、開発における品質設計にデザインスペースの概念が重要視されています。
MODDEにおける「Sweet Spot」機能がデザインスペースに対応しており、品質設計に利用できます。

図) 下左:ファクター(圧力、速度、ステアリン酸Mg量など)
下中:レスポンス(難溶性、崩壊時間、硬度/摩損度など)
下右: Optimizerによるレスポンス値の最良値検索
右: Sweet Spot解析(デザインスペース対応)
→目的の品質が得られる領域の図示(赤色部分)



*ICH: 日米EU医薬品規制調和国際会議

Factors	Name	Abbr.	Units
1	Lactose to microcrystalli ratio	LAR	ratio
2	Magnesium stearate level	MGS	mg
3	Number of mixing revoluti	MXR	rev
4	Compressional force	CPF	
5	Tablet press speed	RPM	rpm

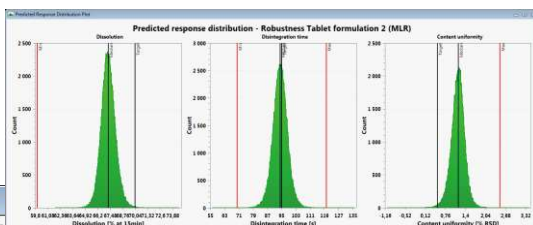
Responses	Name	Abbr.	Units
1	Dissolution	SOCL	% at 15min
2	Disintegration time	DSNT	s
3	Hardness	HRDN	SCU
4	Friability	FRSA	%
5	Thickness	THCK	in.
6	Weight variation	WTVR	% RSD
7	Content uniformity	UNIF	% RSD
8	Break free ejection force	BFEF	lbs

Response	Value	Low	High	Unit	Target
Dissolution	4.1	4.0	4.2	%	4.1
Disintegration time	1.18	1.15	1.21	s	1.18
Hardness	2.94	2.82	3.06	SCU	2.94
Friability	1.01	0.95	1.07	%	1.01
Thickness	1.01	0.95	1.07	in.	1.01
Weight variation	1.01	0.95	1.07	% RSD	1.01
Content uniformity	1.01	0.95	1.07	% RSD	1.01
Break free ejection force	1.01	0.95	1.07	lbs	1.01

製剤開発II：タブレットデザイン (ロバストネス・テスト)

製剤開発において、複数のレスポンスの目標値を同時に満足するデザインスペース(ファクター一の領域)を求め、かつレスポンスのロバストネスを評価することが出来ます。

図) 下: デザインスペースの評価
青:ファクター(成分、圧力、速度など)
黄緑:レスポンス(分解性など)
右:各レスポンスの分布状況
→良好なロバストネスが示されています。



Factor	Low	Setpoint	High	Std. dev.	Role	Distribution	Estimated a
ActV [%]	25	26	27	0.510204	Locked	Normal	
pH	3.8	4	4.2	0.102041	Locked	Normal	
Temp	18	21.5	25	1.78571	Locked	Normal	
OSA [mM]	0.09	0.1	0.11	0.00510204	Locked	Normal	
Column		CoLa					

Response	Min	Target	Max	Criterion	Cpk	DPMO	Predicted response profile
Res1	1.5	3		Maximize	4.11769	0	

製剤開発III：タブレットデザイン (ミクスチャ・デザイン)

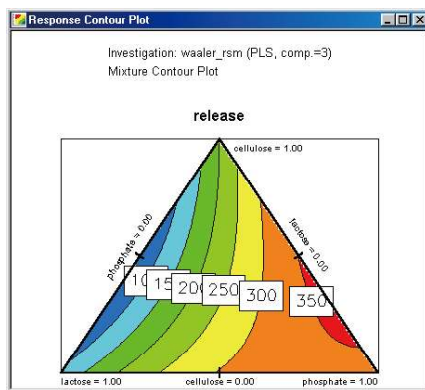
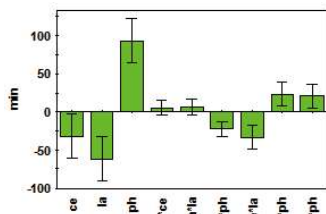
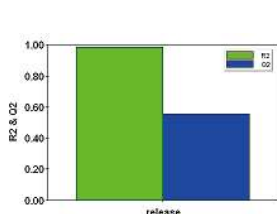
混合物の最適配合条件を求めるデザイン機能により、リリース速度を最大にする製剤のプロセス条件と配合条件を同時に求めることが出来ます。

[ミクスチャ・デザイン使用]

ミクスチャファクター:セルロース、ラクトース、フォスフェート

レスポンス:リリース速度

図) 下左:モデルのフィット情報
下中:モデルにおける各ファクターの寄与
下右:mixture contourによるレスポンス値のマッピング



MODDE ホームページはこちら
無料トライアルリクエストはこちら

<http://infocom-science.jp/product/detail/modde.html>
info-science@infocom.co.jp

本製品に関するお問い合わせ先

- 本ソフトウェアは、Sartorius Stedim Biotech社の開発製品です。
- 記載の商品名等は各社の登録商標、または商品場合があります。
- 本カタログの仕様は予告なく変更する場合があります。
- 本カタログの仕様は2021年4月1日現在のものです。

infocom

インフォコム株式会社 ヘルスケアサービス部

〒150-0001 東京都渋谷区神宮前2丁目34番17号 住友不動産原宿ビル

TEL. 03-6866-3860 FAX. 03-6866-3055

Email. info-science@infocom.co.jp URL. <https://www.infocom-science.jp/>

infocom

Analysis

- Analysisウィザード
- フィッティング
MLR, PLS
- Summary
- 残差解析
- Observed vs. Predicted
- ANOVA
- Coefficients
- Effects
- Distance to Model
- VIP

Prediction

- Contour plot
Contour 2D, 4D
Response Surface
- Prediction plot
- Interaction
- Sweet Spot plot (Surface)
- Design Space Validation
Optimizer, Robust Setpoint
Design space explorer拡張
(Inscribed hypercube)
- プロット拡張機能

Design Region表示

レポートジェネレーター

FDA規制に準拠した監査証跡 (電子記録/電子署名)

動作環境

- ・ OS: Windows 8, 10 (64bit版)
- ・ CPU: 目安として下記以上のもの
Intel Core i5-4460, AMD FX-6300
- ・ RAM: 4GB 以上 (8GB以上を推奨)
- ・ ストレージ: 400MB 以上の空き
(SSD推奨)
- ・ ビデオカード:
目安として下記以上のもの
Nvidia GeForce GTX 460, ATI Radeon HD 4850, Intel HD Graphics 4400
- ・ ディスプレイ: 1920x1080以上を推奨
- ・ インターネット接続: 必須ではありません(手動アクチベーションが必要でず)

Bio science Solution



New name.
New look.
Same great service.

化学物質の毒性情報検索プラットフォーム

ToxPlanetは化学物質の毒性情報を包括した統合検索プラットフォームです。直感的なインターフェースを持ち、500種類以上のデータベース、940万以上の文献、データシート、アドバイザリーリスト等の様々な領域をカバーします。1つの検索キーから化学物質の生体内や環境における毒性情報、規制情報及び関連事項を網羅的に入手することで、調査に要する時間と作業量を削減します。データベースは継続的に更新されていて、常に最新情報を入手することが可能です。また、タブレットやスマートフォンでのご利用も可能です。

Title	Author(s)	Source	Collection
"BIOAV THERM" BIOLOGICAL TREATMENT FOR LOW-LEVEL ORGANIC CONTAMINATED GROUNDWATER AND INDUSTRIAL WASTE	Sullivan RM	Sanford, G. Bennett, J., eds. Superfund '87. Proceedings of the 8th National Conference, November 16-18, Washington, DC. The Hazardous Materials Control Research Institute, 1987:208-212.	HMTCC
(A study of carcinogenic activity of soot of airplane engines in animal experiments.)	LINNIKAS	BYULLI EXP BIOL MED; 71 (2), 1971 83-87	HEEP
(Alterations of the chromosome count and structure of industrial workers exposed to benzene.)	HABERLANDT W	ZENTRALBL ARBEITSSCHUTZ; 21 (11), 1971 338-341	HEEP
(Biological exposure tests.)	Tesinger JR	Fraccini Letari; 21(9): 387-89 1969; (REF 96)	HAFAB
(Chromatographic separation and determination of benzene and toluene in water.)	BOLDRA ZN	GIG SANIT; 36 (9); 1971 69-70	HEEP
(Clinical picture and prognosis of changes in the nervous system following chronic benzene poisoning.)	DROGICHA EA	GIG TR PROF ZABOL; 15 (5); 1971 18-21	HEEP
(Comparative value of determining phenol, glucuronides and sulphates in urine following the action of benzene and toluene.)	KANNER NL	GIG TR PROF ZABOL; 15 (10); 1971 60-62	HEEP
(Dynamics of changes in the peripheral blood in the late period of chronic benzene poisoning.)	GRIOVA IA	GIG TR PROF ZABOL; 15 (6); 1971 39-43	HEEP

ToxPlanet Contents

ChemEXPERT

世界中に存在する250種類以上の毒性データベースを基にしたコンテンツが収録されており、随時情報の更新がされています。ChemEXPERTでは直感的な操作で必要な情報を直ちに検索、保存、共有することが可能です。

【収録コンテンツ】

- U.S. Environmental Protection Agency
- National Toxicology Program (NTP)
- National Library of Medicine
- Agency for Toxic Substances and Disease Registry
- European Chemicals Agency
- International Agency for Research on Cancer
- European Union
- U.S. Department of Defense
- World Health Organization
- RTECS
- CPDB 他多数

ListEXPERT

ListEXPERTは600以上の規制当局上の公開情報やアドバイザリーリストを収録し、10万件を超える化学物質の情報を提供します。データは定期的に更新されています。この情報へのアクセスはEH&Sの専門家にとっても不可欠です。検索結果の要約を出力することが可能です。

ReproEXPERT

ReproEXPERTはヒトの生殖リスクに焦点を当てたりソースへのアクセスを提供します。ReproEXPERTは現場の専門家に職場の安全基準の開発、評価、製品のラベリングや化学物質を直接使用する際に必要な情報を提供します。

【収録コンテンツ】

- REPROTOX®
- Shepard's Catalog of Teratogenic Agents
- TERIS - The Teratogen Information System
- Center for the Evaluation of Risks to Human Reproduction (CERHR)
- Department of Defense (DOD) - Teratogenic, Mutagenic, and Genotoxicity Studies and Reports
- Food and Drug Administration (FDA) - Teratologic Evaluations
- National Toxicology Program (NTP)

Similar Compounds

Similar Compounds(類似化合物)機能は、構造的に類似した化合物を素早く特定し、最大かつ最も包括的な情報リソースから文献へのアクセスを即座に提供します。



無料トライアル実施中！！

Environmental Chemistry Information

Environmental Chemistry Information (ECIS) は医薬品、環境汚染物質などの化学物質に関する薬理学的、生化学的、生理学および毒性学的影響を説明する7つのコレクションを収録しています。

【収録コンテンツ】

- Biodegradation of Substances in the Environment (BIODEG)
- Biodegradation Literature References (BIOLOG)
- Gastrointestinal Absorption Database (GIABS)
- Information System for Hazardous Organics In Water (ISHOW)
- DATALOG
- ENVIROFATE
- Structure and Nomenclature Search System (SANSS)

TSCATS

TSCATSは毒性物質管理法(TSCA)のセクション下で米国産業界からEPAに提出された健康及び生態系に対する化学物質の試験結果及び化学物質の有害影響に関するデータへのインデックスを提供します。

【収録コンテンツ】

- Section 4 chemical testing results
- Section 8(d) health and safety studies
- Section 8(e) substantial risk of injury to health or the environment notices
- Voluntary documents submitted to the EPA known as a For Your Information (FYI) notice

DrugEXPERT

DrugEXPERT™は数千種類の医薬品に関する最新のEH&Sデータを提供します。

【収録コンテンツ】

- European Directorate for the Quality of Medicines (EDQM)
- European Medicines Agency (EMA)
- U.S. National Cancer Institute (NCI) Investigational Drugs – Chemical Information
- U.S. National Library of Medicine (NLM) – DailyMed

REACH Registrations

REACH RegistrationsはECHA REACH登録データベースへのアクセスを提供します。

【収録コンテンツ】

- CAS number and other identifiers
- Composition
- Classification and labeling
- Physical/chemical properties
- Toxicological properties
- Eco-toxicological properties

TOXLINE Special

TOXLINE® SpecialはNational Library of Medicine (NLM)誌データベースの一部であり、薬物や一般化学物質の生化学、薬理学、生理学、毒性学的影響に関する書誌情報を提供します。

【収録コンテンツ】

- Aneuploidy (ANEUPL)
- Environmental Mutagen Information Center File (EMIC)
- Environmental Teratology Information Center File (ETIC)
- Epidemiology Information System (EPIDEM)
- Hazardous Materials Technical Center (HMTCC)
- Health Aspects of Pesticides Abstract Bulletin (HAPAB)
- NIOSHTIC (NIOSH)
- Pesticides Abstracts (PESTAB)
- Poisonous Plants Bibliography (PPBIB)
- Swedish National Chemicals Inspectorate (RISKLINE)

MSDSonline

MSDSonline®は新規化学物質を職場に導入することによる影響を理解し、管理するために不可欠な情報を専門家に提供します。研究開発プロセスをサポートするMSDSonlineは化学物質の認証業務や代替品の発見を支援します。

【収録コンテンツ】

- Millions of indexed MSDS in PDF format
- More than 27,000 different vendors
- 10,000+ new or updated MSDS files added every week
- Information searchable by Chemical Abstract Service (CAS) number, product name or synonym, or manufacturer name
- Robust filters to help broaden or narrow search results

C&L Inventory

C&L Inventoryには製造業者及び輸入業者から届出された登録物質に関する分類及びラベル情報が収録されています。またHarmonised classificationリストが含まれています。このデータベースは定期的にアップデートされます。

【収録コンテンツ】

- Harmonised classification – Annex VI of Regulation (EC) No 1272/2008 (CLP Regulation)
- DSD Classification (Table 3.2)
- Seveso III data
- Notified classification and labeling

Botany EXPERT

BotanyEXPERTは、世界の主要な植物情報ソースの多くから最新かつ詳細なデータを提供します。

お問い合わせ先

ヘルスケアサービス部 ライフサイエンスグループ
〒150-0001 東京都渋谷区神宮前二丁目
34番17号住友不動産原宿ビル
TEL: 03-6866-3860 FAX: 03-6866-3055
EMAIL: info-science@infocom.co.jp
HP: <https://www.infocom-science.jp/>

infocom
インフォコム株式会社



15日間無料トライアルをご希望の方はお問い合わせください。