




timsMetabo™

Discover MoRE with
Mobility Range Enhanced 4D-Metabolomics™

Innovation with Integrity



スピード、深度、スケールで 4D-メタボロミクスと 4D-リポドミクスを強化する **timsMetabo™**の紹介

最高のパフォーマンスを発揮するリサーチエンジン

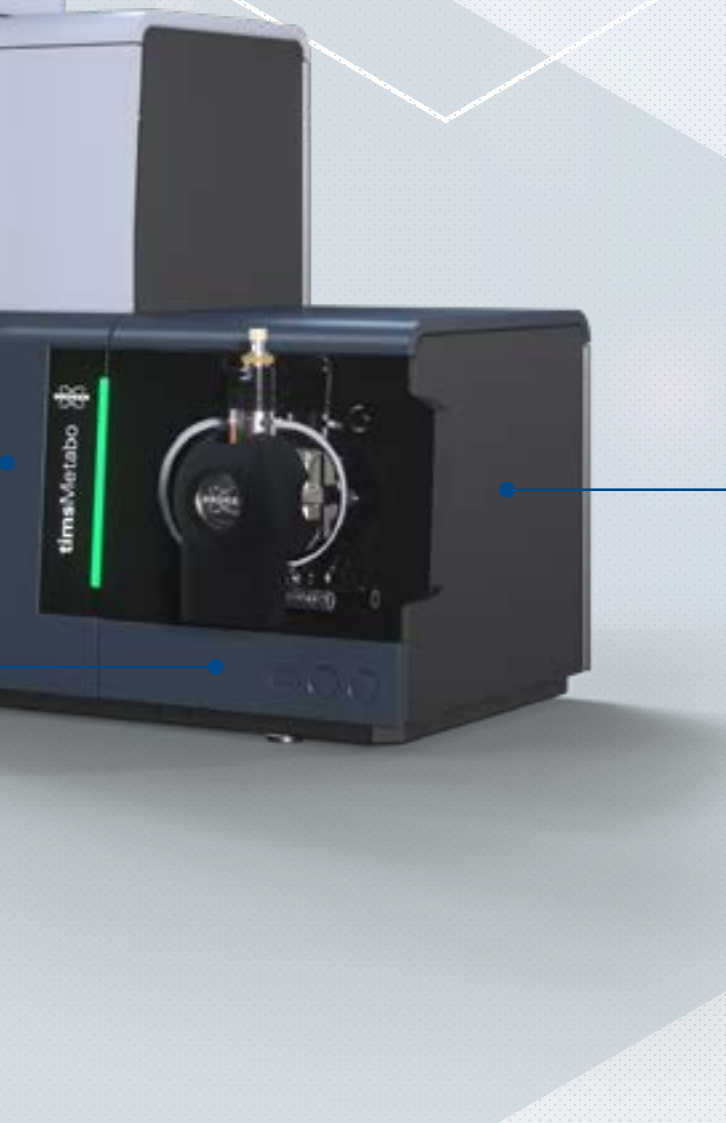
timsMetabo™は数々の革新的技術を
ベンチトップ型システムに集約しました

主な特徴

ハイスループットでラージスケールな
プロファイリングと定量分析が実現可能な
高精度検出器

4D-オミクスにおいてTIMS と相乗的に機能
し、MS および MS/MS の感度を向上させる
Athena Ion Processor (AIP)

シグナル強度と感度を最大化する **VIP-HESI**
イオン源



TIMS-MX アナライザーと Mobility Range Enhancement (MoRE) による 4D-オミクスワークフローにおける低分子分析に 3 つの利点をもたらします：

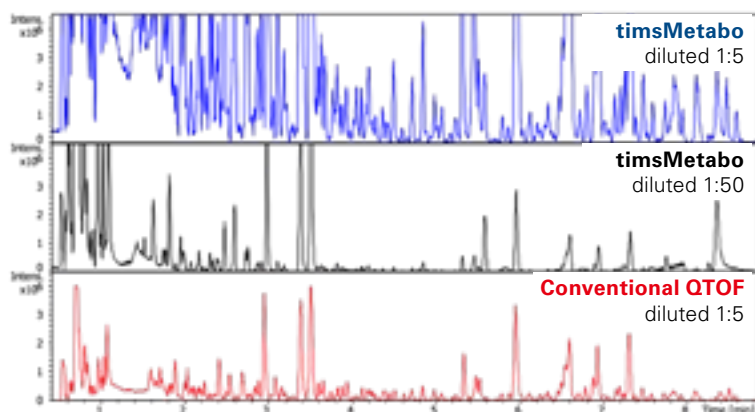
- **イオン分離能**の向上により、異性体、同重体、干渉成分への分解能が向上し、選択性の強化とともにキメラな MS/MS スペクトルを回避します。
- **モビリティベースのイオンソーティング**によってイオンハンドリングの効率化が行われ、MS/MS の感度とスピードが向上します。
- 正確で再現性の高い衝突断面積 (CCS) 測定は、より**確実な代謝物アノテーション**のための追加の分子記述情報を提供します。

The power to see MoRE metabolism

timsMetabo™は、低分子化合物の探索を可能にするために独自に設計されました。ブルカーのテクノロジーとワークフローの革新は、究極のプロファイリングと標的アプリケーションのための分析深度と選択性を兼ね備えています。

感度の向上により、より少ないサンプルでより深く正確なプロファイリングが可能になります。

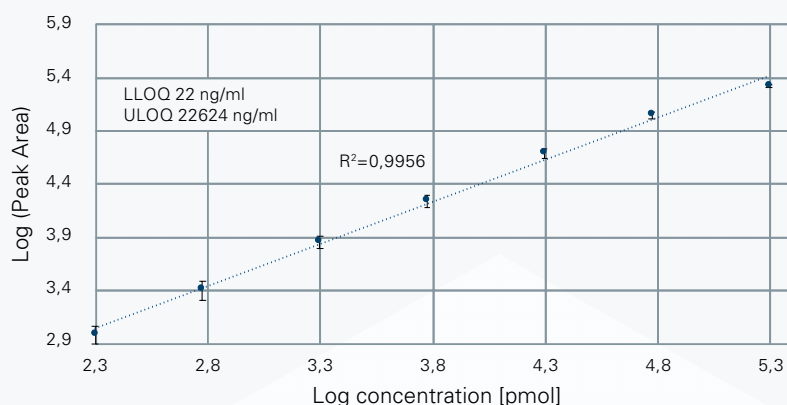
洗練されたイオン光学系は、歴代の timsTOF の設計を基に構築されており、LC の分析スケールに適合しながら、効率的なイオンの検出を可能にし、驚異的な感度を実現します。



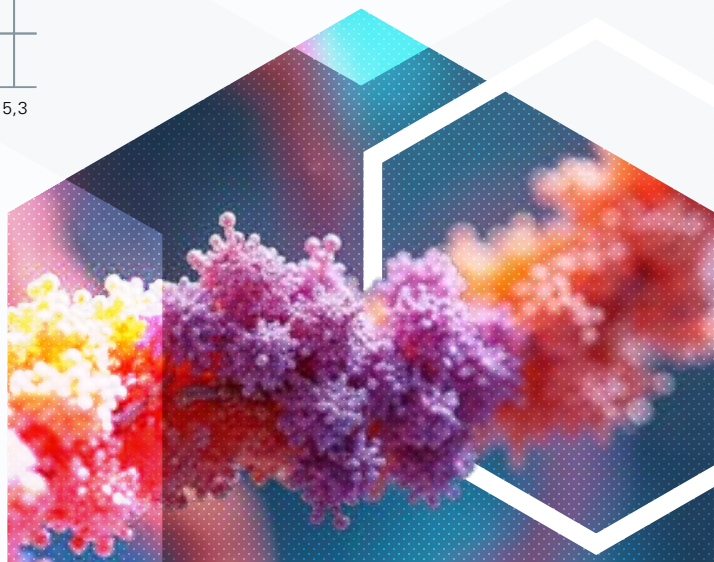
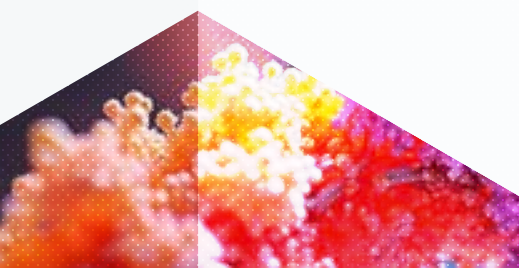
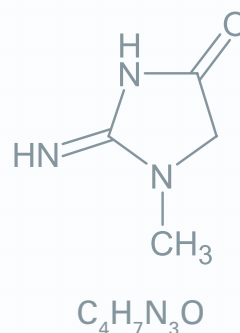
SRM3672 を用いた分析において、timsMetabo™ は従来の QTOF に比べて 10 分の 1 のサンプル量で分析することが可能です。

高い信頼性の代謝物アノテーションのために、正確な m/z と CCS 測定を同時かつ日常的に提供する 4D-Metabolomics ワークフローを使用しながら、低分子化合物の低検出限界で正確な定量を実現します。

クレアチニンの希釈系列分析

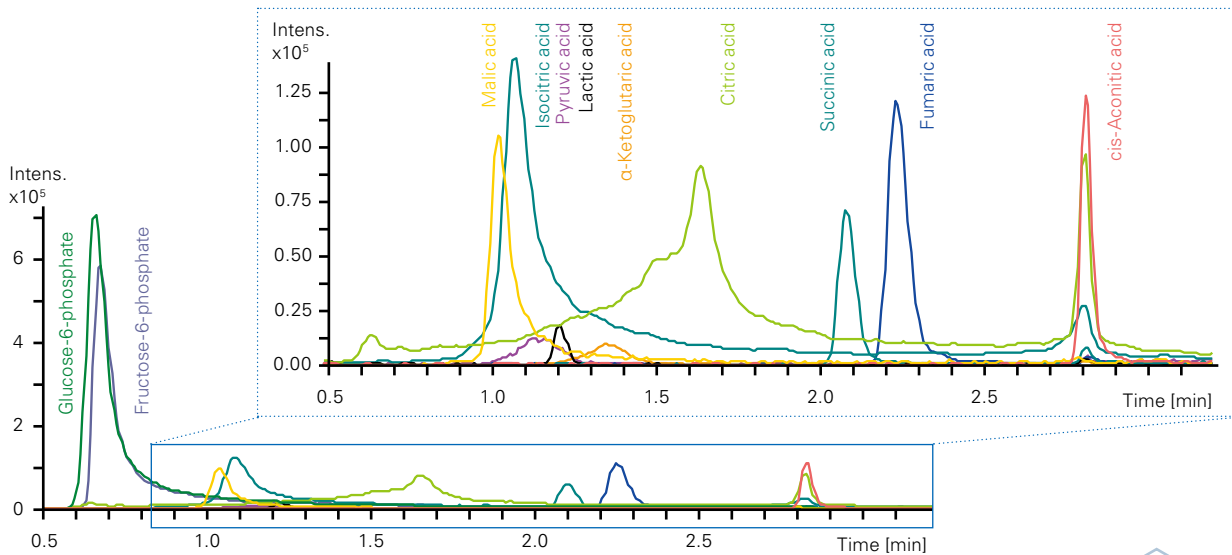


正確なクレアチニンの定量は、臨床および多くのメタボロミクスアプリケーションにおける代謝物プロファイルの正規化の基礎となります。このデータは、4D-Metabolomics ワークフローを使用してクレアチニンの (m/z 114.0662) 希釈系列から取得したもので、timsMetabo™ の極めて高い感度を実証しています。

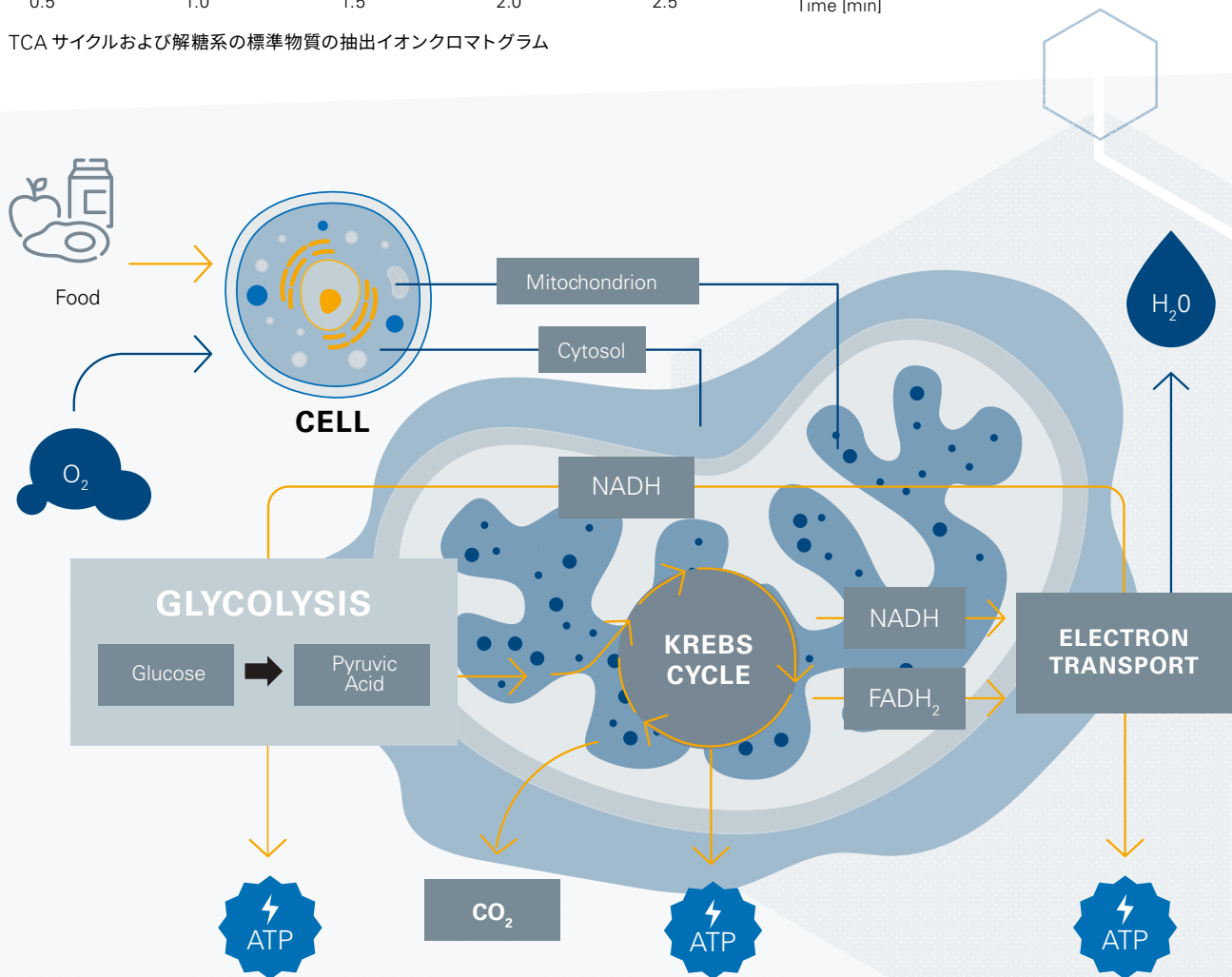


4D-Metabolomics のための拡張モビリティ機能

Mobility Range Enhancement (MoRE) と TIMS-MX アナライザーは、4D-Metabolomics 4D ワークフローにおける幅広いメタボロームのカバレッジのために、低分子の感度を向上させます。



TCA サイクルおよび解糖系の標準物質の抽出イオンクロマトグラム

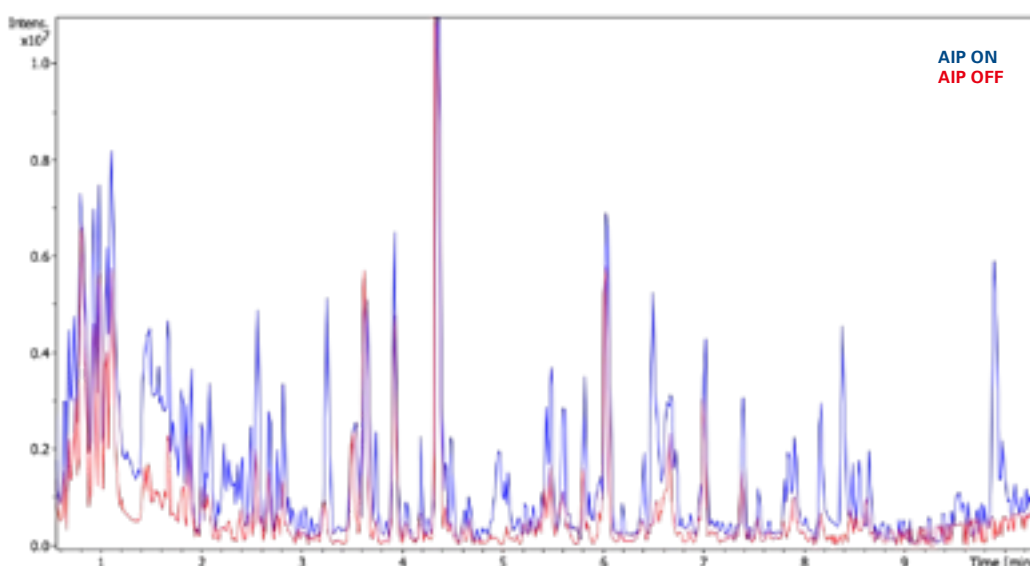


TIMS と Athena Ion Processor の相乗的統合による感度向上

AIP の導入により、MS モードと MS/MS モードの両方で感度が向上し、プロファイリングとターゲット分析の両方のワークフローに利点をもたらされます。TIMS-MX モビリティによるイオンソーティングおよび濃縮と AIP の同調は、4D-Metabolomics および 4D-Lipidomics 分析においてこの効果を最大限に引き出します。

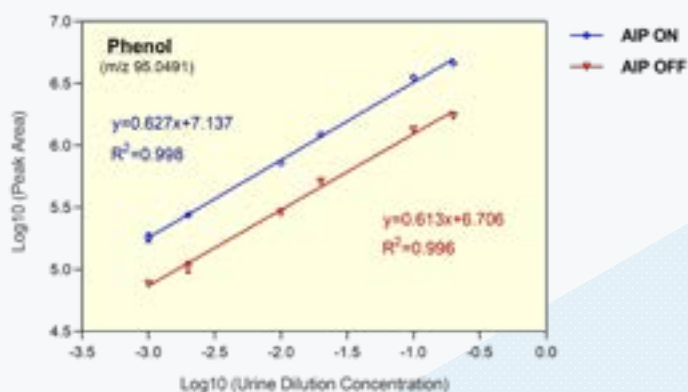
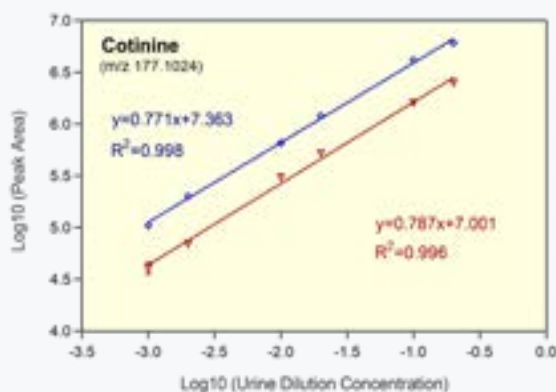
AIP による感度向上は、サンプル量が少ないデータでも MS/MS スペクトルのマッチングを可能にします。

プロファイリング



MoRE を用いた 4D-Metabolomics データにおける AIP オン / オフ時のシグナル強度の違い (尿サンプル 0.2 μ L 相当を分析した場合) AIP のオン / オフによる MoRE データ取得の比較により、AIP による感度向上が明らかになりました。

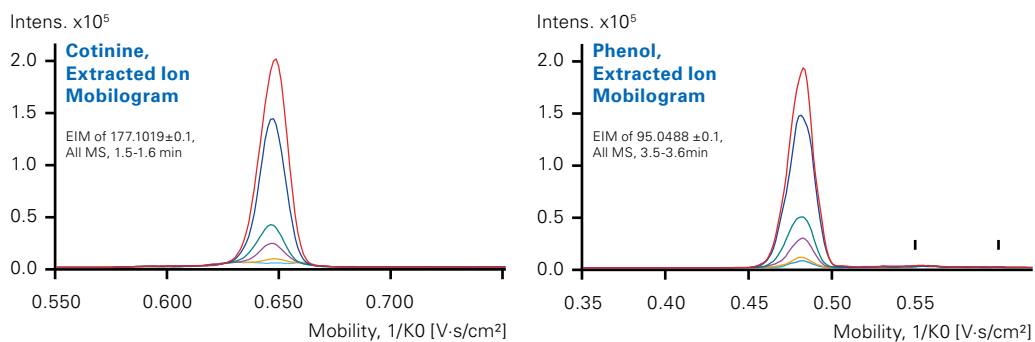
定量



タバコ喫煙者の尿サンプルにおけるバイオマーカーの検出 (NIST SRM3671 の 0.002 μ L から 0.4 μ L 相当量を分析した場合)

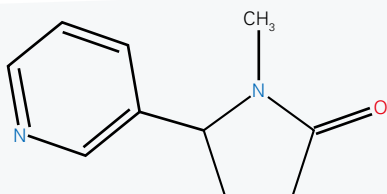
TIMS を用いたモビログラムに基づく定量法

タバコ喫煙者の尿サンプルにおけるバイオマーカーの抽出イオンクロマトグラム
(NIST SRM3671 の 0.002 μL から 0.4 μL 相当量を分析した場合)

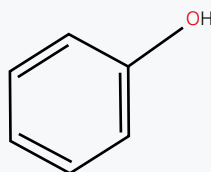


CCS-Predict Pro

リファレンスの測定値または予測値との CCS 値の照合により、アノテーションの信頼性を最大化します。

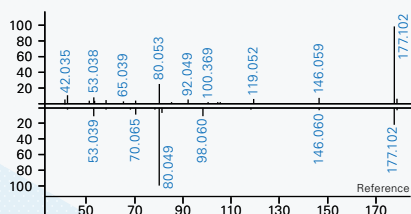


Ion Notation	Measured	Prediction	CCS [%]
[M+H] ⁺	144.3	138.9	3.7

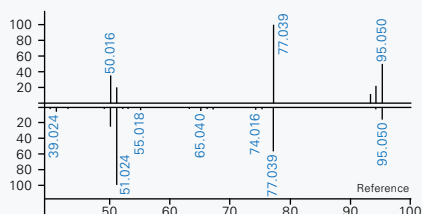


Ion Notation	Measured	Prediction	CCS [%]
[M+H] ⁺	113.4	117.5	-3.6

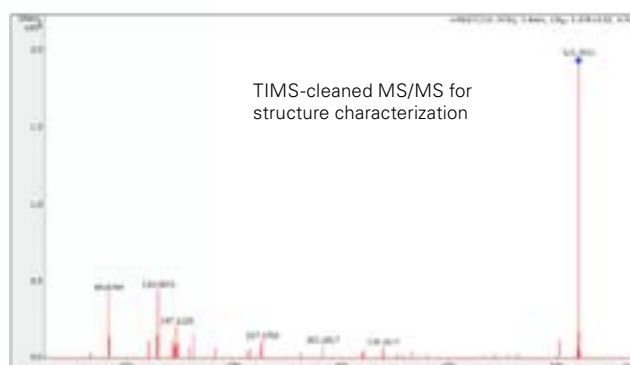
TIMS による高品質 MS/MS



0.004 μL 相当量のヒト尿サンプルから得られた実測スペクトルとリファレンススペクトル (Bruker HMDB Library 2.0) との比較



0.002 μL 相当量のヒト尿サンプルから得られた実測スペクトルとリファレンススペクトル (Bruker MetaboBase Personal Library 3.0) との比較





Prof. Pieter Dorrestein

UC San Diego, California, USA

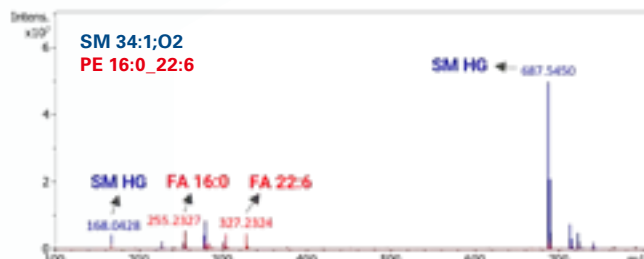
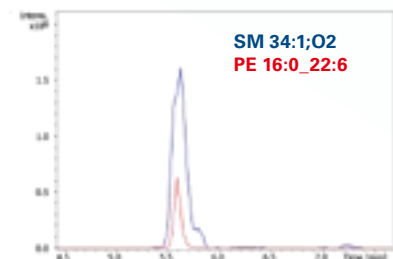
“胆汁酸は多様で生物学的に重要な分子群であり、栄養素の輸送、免疫調節に関与し、薬物、食事、病気に応じて変化します。これまでに発見された微生物による修飾型も含め、何千もの異なる胆汁酸構造が明らかにされつつあります。クロマトグラフィーや MS/MS と並んで CCS 値を出すことのできるイオンモビリティは、隠れた複雑性を解き明かし、胆汁酸の生物学的理解、臨床研究、そして治療法の発見を強力にサポートしてくれます。timsMetabo™の技術は、この生物学的に多様な分子群を日常的に理解するのに役立ちます。”

TIMS-Enhanced MS/MS

TIMS により、異性体、同重体、干渉成分の分解能が向上し、キメラ MS/MS スペクトルによるアノテーションの擬陽性が減少するため、信頼性の高いアノテーションが実現できます。

脂質および代謝物のアノテーションにはクリーンな MS/MS スペクトルが重要となり、スペクトルライブラリや *in-silico* フラグメンテーション (4D-Metabolomics) およびルールベースのアノテーション (4D-Lipidomics) を利用した自動化された下流のワークフローで顕著になります。ここでは、dia-PASEF 4D-Lipidomics を用いて測定された共溶出・共分離脂質がモビリティで分離され、それぞれの脂質に特徴的な MS/MS フラグメンテーションスペクトルが得られました。これらのクリーニングされたスペクトルは、正確なアノテーション、解釈、レポーティングの基礎となります。

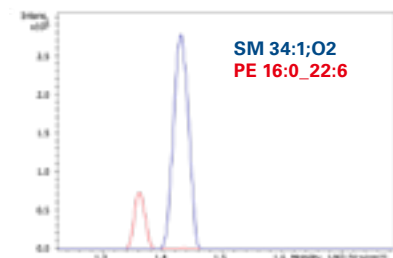
EIC



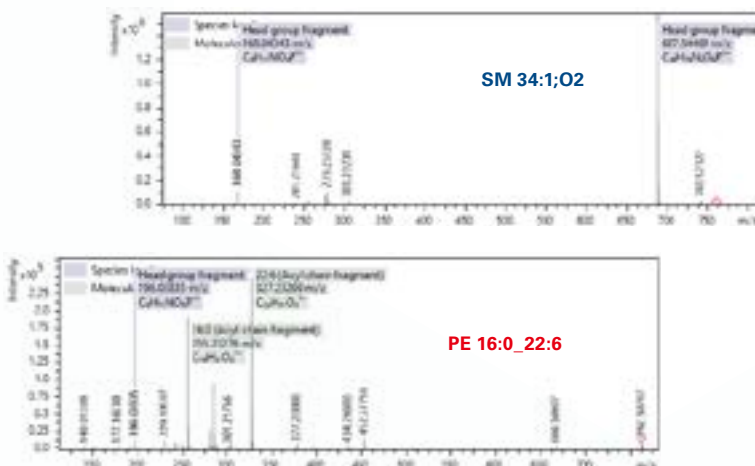
3D-Lipidomics

4D-Lipidomics

EIM



TIMS



成分種は共溶出するが、TIMS で分離可能

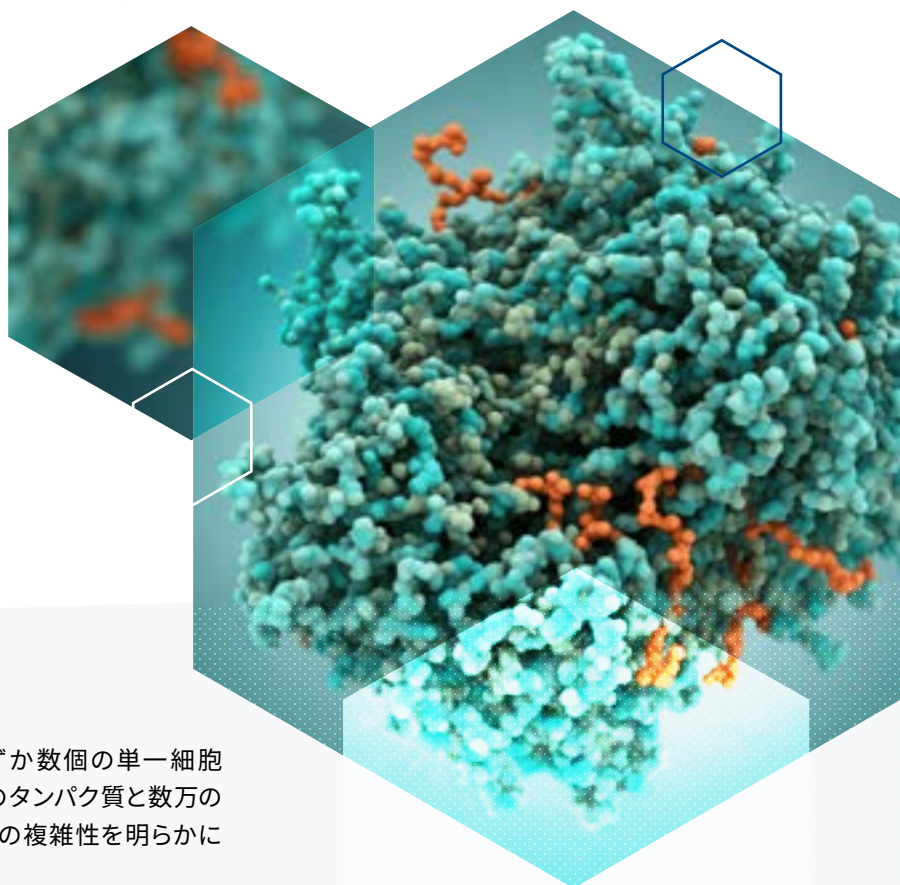
DIA-PASEF はプリカーサーの脂質を分離し、信頼性の高いアノテーションのためのクリーンな MS/MS スペクトルを提供します。

DIA ベースの共分離脂質 PE 16:0_22:6 および SM 34:1;O2 ($\Delta m/z = 0.926$) のネガティブイオンモードでのアノテーション

timsMetabo™を用いた包括的な プロテオミクスの考察を可能にする

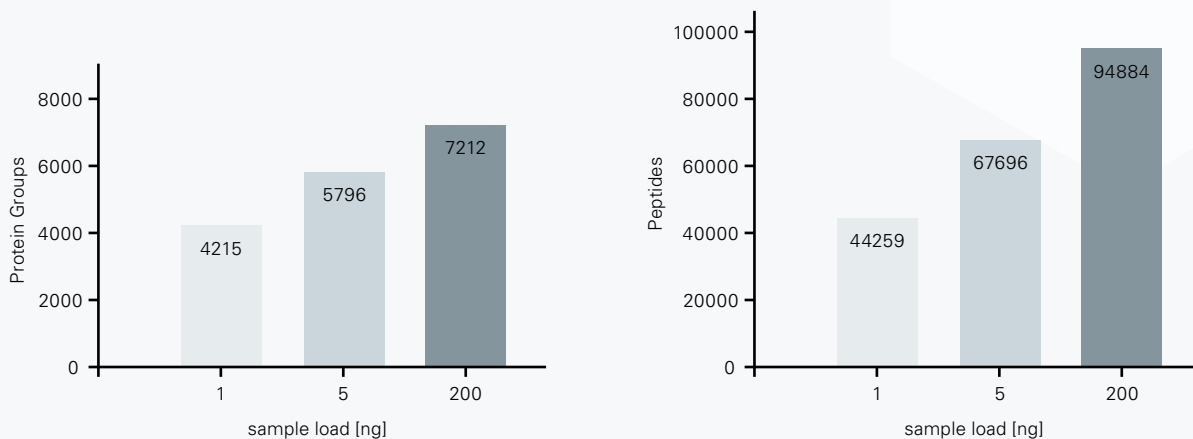
timsMetabo™は、timsTOF ファミリーのユニークなプロテオミクス解析機能を維持しながら、リポミクスとメタボロミクスに優れた性能を発揮するように設計されています。マルチオミクス機能を単一のプラットフォームに統合することで、このシステムは生物学的プロセスに対するユニークで包括的な洞察を提供し、研究者は複雑な分子間相互作用やパスウェイを明らかにすることができます。

timsMetabo™は、脂質、代謝物、タンパク質のいずれを探索する場合でも、包括的かつ正確で精度の高いマルチオミクスの考察を大規模に実現し、生物医学研究と個別化医療の発展を促進します。



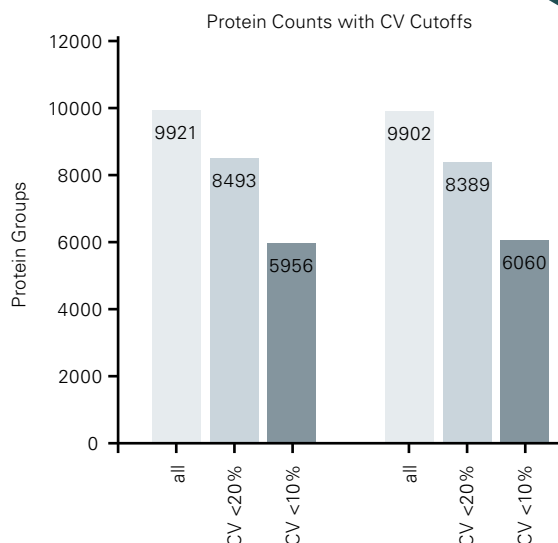
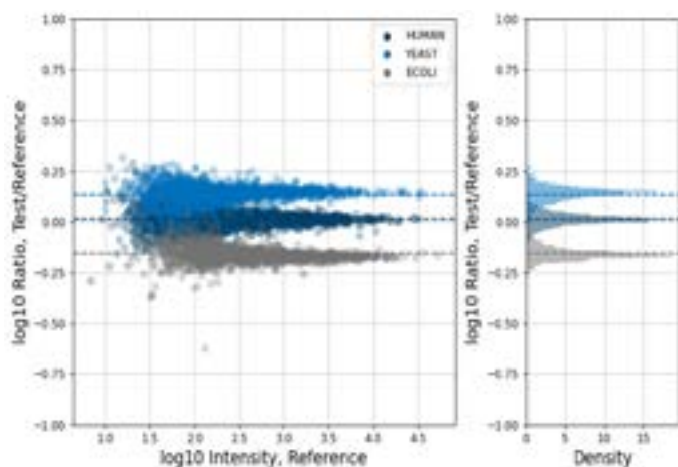
少量のサンプルに至るまで深い考察

分析スケールの拡大に対応できる堅牢性とわずか数個の単一細胞（例：HeLa 細胞株 1 細胞約 250 pg）から数千のタンパク質と数万のペプチドを定量できる感度によってプロテオームの複雑性を明らかにします。



堅牢な定量化により、プロテオームのわずかな違いも識別

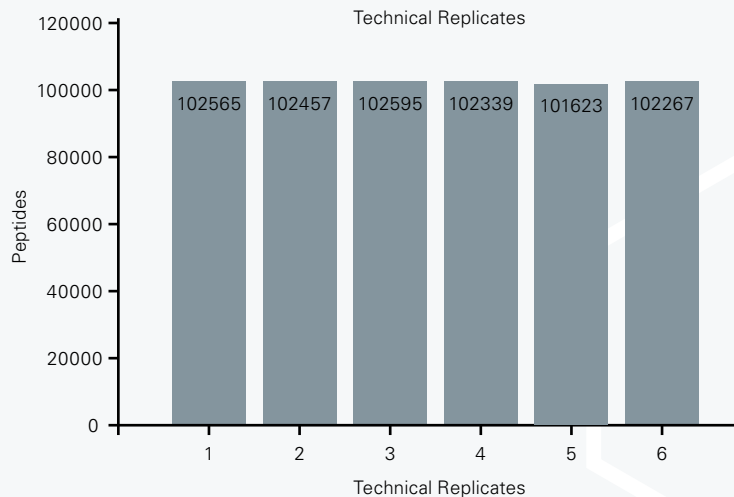
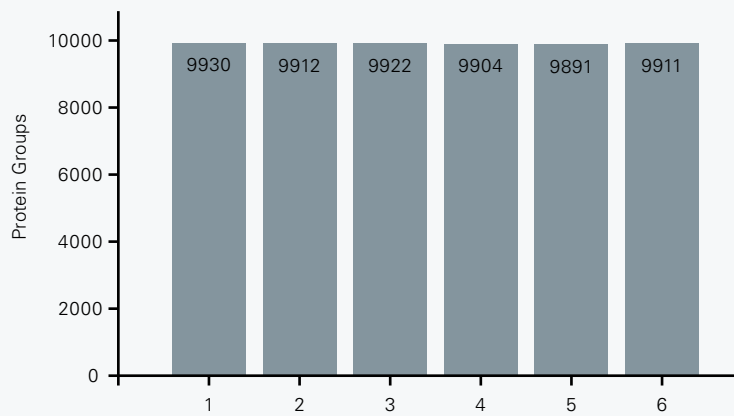
数千のタンパク質およびペプチドを、最高の精度と再現性で定量化することで、生物学的に重要なタンパク質発現の変化を確実に発見します。



わずかな生物学的調整の調査

当社のトリプルプロテオーム研究（酵母、ヒト、大腸菌）における定量性は4桁を超えます。数千ものタンパク質と数万ものペプチドを確実に定量し、生物学に重要な考察を提供します。

- **マルチオミクスの考察**: 複雑な生物学的プロセスや制御をより深く理解することができます。
- **幅広い適用性**: 様々な生物系に適用でき、プロテオミクス研究の幅を拡張することができます。
- **高感度**: 低存在量のタンパク質やペプチドを高い精度で検出・定量することができます。



すべてのサンプル分析の デジタルメタボロームアーカイブ

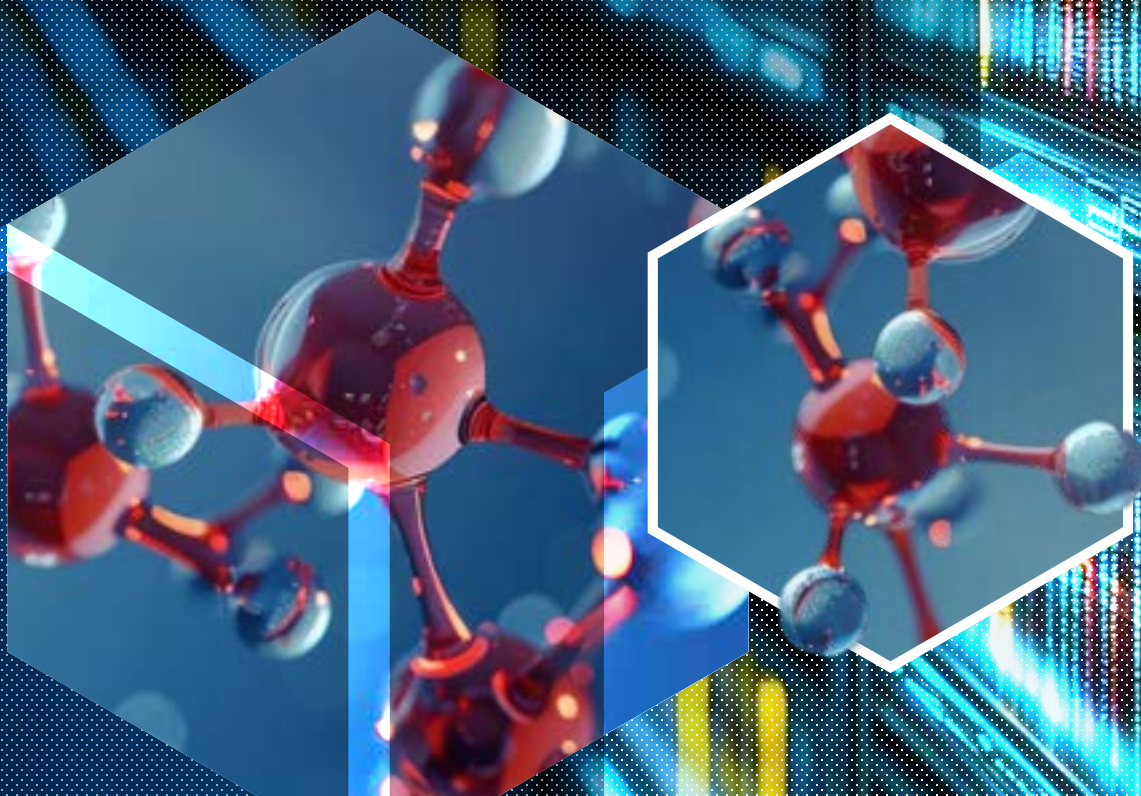
timsMetabo™は、各サンプル分析における分析対象物の定量とアノテーションを同時に行うことができるため、データの再取得の機会を減少させることができ、結果的に研究の効率を上げることができます。timsMetabo™データは、このため、大規模で高品質なデータセットの機械学習によるメタボロミクスの研究に適しています。



Frédéric Vaz, Ph.D.

Associate Professor, Amsterdam UMC, The Netherlands

“timsMetabo™は、先天性代謝異常の研究において、既知のバイオマーカーの測定と新規代謝物の探索を容易にする感度と選択性をユニークに兼ね備えています。”





代謝物の特性評価

TIMS-enhanced MS/MS

移動度と質量の分離されたプリカーサーからの CID フラグメンテーションスペクトルは、上流の TIMS-enhancement により、優れたカバレッジと感度で取得され、自動スペクトルライブラリーマッチングに最適です。

代謝物マッピング

各単離代謝物について、クロマトグラフィーの保持時間、CCS、 m/z 値をマッピングします。

代謝物の分離

LC 分離 (オプション)

複雑な生体液や組織抽出物中の代謝物は、イオン化前にクロマトグラフィーで分離されます。

TIMS による分離

イオン化後、代謝物イオンは濃縮され、測定サイクルごとにイオンモビリティが選別されます。

TIMS と連動した四重極による分離

上流のイオンモビリティに基づくイオンソーティングにより、DDA および DIA モードでの高速かつ効率的なイオンターゲティングが可能になります。

分解能による分離

代謝物イオンは質量電荷比によって高分解能で分離されます。

代謝物の定量

定量

分離された代謝物の量は正確かつ高精度で測定されます。



Quantitation

Retention time

Calibration Data

Accurate mass

CCS

True Isotopic Pattern

Mass and mobility-linked TIMS-enhanced MS/MS

timsMetabo™とMetaboScapeによる 多次元アノテーションの信頼性

BRUKER
MetaboScape®

timsMetabo™によるクリーンな MSMS スペクトルの提供

プリカーサーイオンをTIMSで分離することにより、干渉シグナルのないMS/MSスペクトルが得られます。このため、スペクトルの解釈に集中でき、MS/MS マッチングスコアへの擬陽性が軽減されます。MetaboScapeには、MS/MS スペクトルのアノテーションを行うためのさまざまなツールがありますが、そのどれもが、よりクリーンなスペクトルの恩恵を受けます。

MetFragとSmartFormula 3Dは、MS/MS スペクトルの解明と新規化合物の発見に役立ちます。さまざまなサイズと範囲のスペクトルライブラリにより、測定されたMS/MS スペクトルをリファレンススペクトルと一致させることができます。



NIST Library
BRUKER Daltronics

Bruker NIST 2020 Mass Spectral Library は National Institute of Standards and Technology (NIST) によって作成され、幅広い低分子化合物の電子イオン化 (EI) スペクトル、ガスクロマトグラフィーの保持指標、タンデムマススペクトルが収録されています。



MetaboBASE Personal Library
BRUKER Daltronics

Bruker MetaboBASE® Personal Library 3.0 は、METLIN 化合物ライブラリから得られた 100,000 以上の合成または単離されたスタンダードの MS/MS スペクトルが収録されています。また、233,000 以上の化合物の *in-silico* MS/MS スペクトル、複数のコリジョンエネルギーで測定した MS/MS スペクトルを収録しています。複数のコリジョンエネルギーでポジティブおよびネガティブイオンモードで測定したフィーチャーもあります。



HMDB Metabolite Library
BRUKER Daltronics

Bruker HMDB Metabolite Library 2.0 は、Human Metabolome Database (HMDB) からの 800 以上の標準物質取得された 6,000 以上の MS および MS/MS スペクトルを提供します。整合性が確認されたスペクトルは、尿、血液、その他の生体サンプル、細胞サンプルに含まれる代謝物の高精度なアノテーションを可能にします。



MetaboBASE Plant Library
powered by BRUKER & Sumner

Bruker MetaboBASE® Plant Library は、植物および食品研究用に作成されており、マメ科のモデル植物である *Medicago truncatula* で検出された市販の標準物質および推定同定代謝物の MS/MS スペクトルと CCS 値を提供します。



4D-Metabolomics と MetaboScape で隠れた価値を探索する

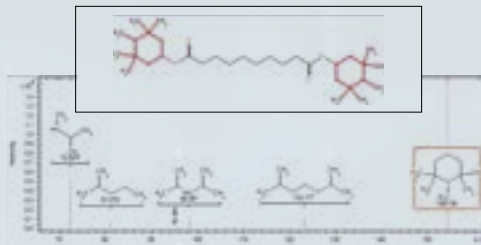
MetaboScape は、MetFrag¹、CCS-Predict Pro、BioTransformer のような先進ツールを統合することにより、探索的メタボロミクスを強化する包括的なソフトウェアプラットフォームです。

MetFrag は、可能性のあるフラグメントイオンを予測してスコアリングし、実測データと比較することで、未知化合物の構造同定を支援します。

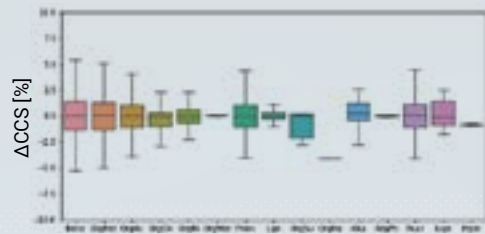
CCS-Predict Pro は、機械学習を用いて衝突断面積 (CCS) 値を予測し、化合物アノテーションのための判断基準を追加し、候補代謝物の識別を向上させます。

BioTransformer は、既知の生体内代謝反応に基づいて代謝物の構造を予測し、薬物および外来生物由来の代謝物の同定を支援し、代謝経路に関する考察を提供します。

これらのツールを組み合わせることで、MetaboScape は大規模なデータセットを効率的に処理し、信頼性の高い代謝物の同定を実現します。この統合されたアプローチは、バイオマーカーの発見や、様々な生物学的背景における代謝変化の理解をサポートします。



高品質で情報量が豊富な MS/MS スペクトルと、強力な自動化ツールおよびアノテーションツールを組み合わせることで、メタボロミクスにおける効率的な探索が加速されます。



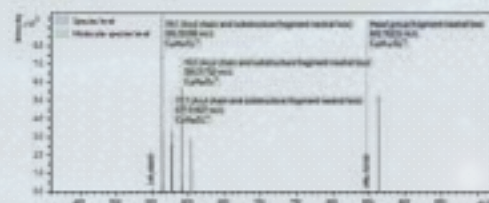
CCS-Predict Pro モデルは、様々なイオンタイプに特化して機械学習が実施され、改良されたモデルが継続的にリリースされています。

¹ Wolf, Sebastian, et al.; BMC bioinformatics; 2010

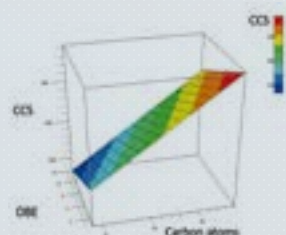
ルールベースのアノテーションによる 4D-Lipidomics

MetaboScape のルールベースの脂質アノテーションは、Lipidomics Standards Initiative (LSI) のガイドラインに従い、脂質種の正確な名前を提供します。選択されたフラグメンテーションおよび開裂様式を適用することで、特徴的なフラグメントから得られたピークをアノテーションして可視化します。本結果を用いることで、生物種レベルと分子種レベルの両方のアノテーションを得ることが可能です。このアプローチは、擬陽性のアノテーションのリスクを最小限に抑え、脂質の自動アノテーションを合理化します。

クラス固有の CCS 値のモデルは、脂質アノテーション候補のイオンモビリティの検証に役立ちます。さらに、CCS と RT の異常値検出が実行され、アノテーションの精度が向上します。



MS/MS フラグメントは、MetaboScape のルールベースの脂質アノテーションによって解釈され、アノテーションされる。

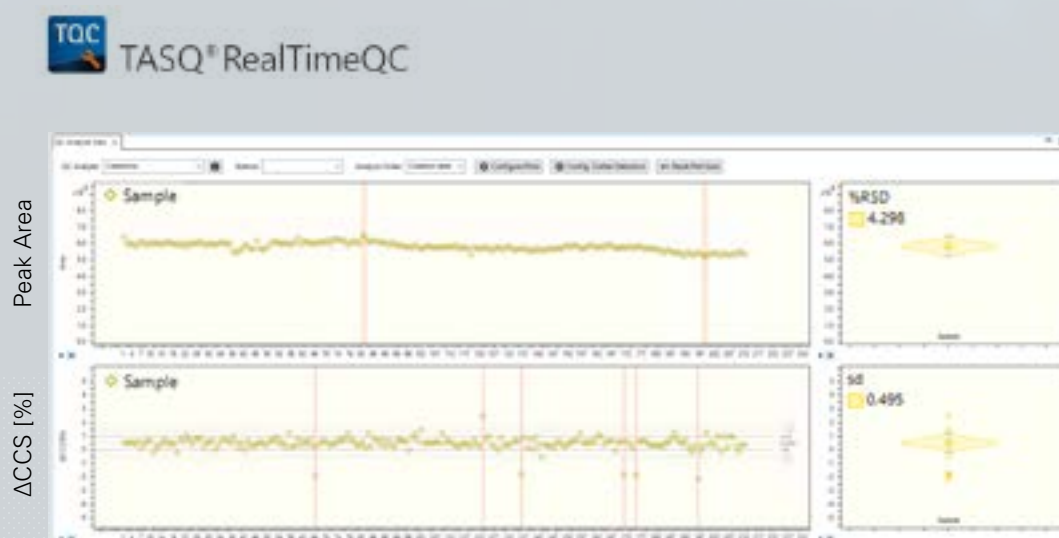


脂質クラスに特異的な CCS 超平面モデルが脂質アノテーション候補を検証

正確な結果を得るための データ品質モニタリング

BRUKER
TASQ®

ブルカーが保証する定量安定性により、最初のサンプルから最後のサンプルまで、比較可能なプロファイリングおよび定量結果を実現し、大規模なコホート研究を正確に実施できます。



- 1 から 50 倍に希釈した 2 μ l の NIST SRM 3672 基準尿を連続分析しました。
- クレアチニンで確認されたように、尿サンプル注入の上記のピーク領域で連続的に 5% 未満の低い %RSD 値が達成されました。
- Bruker TASQ RealTimeQC ソフトウェアにより、200 を超えるサンプルデータにおけるシステム性能のモニタリングが可能となりました。
- デルタ CCS 値 [%] の標準偏差は 0.5% と、シーケンス全体を通して低いままでした。

QSee™ 8-mix、Performance Test & TwinScape™

メタボロミクスとリビドミクスに基づく探索研究の限界に挑戦する場合、データの質の重要性は言うまでもありません。

QSee パフォーマンス・テスト・ソリューションは、使いやすい品質管理ワークフローを提供します。メタボロミクス専用カラムとアプリケーション、

および化合物の混合物は、標準操作手順書とともに、LC-TIMS-MS データの品質評価メソッドを簡素化します。

TwinScape との自動アライメントにより、システム・パフォーマンスの長期的な傾向を把握。装置のパフォーマンスを常に把握することが可能です。



Dr. Christoph Trautwein

University of Tübingen, Director Core Facility Metabolomics

“QSee Performance Testing をラボのルーチンに組み込むことで、各実験の前に LC-TIMS-MS システムの性能を簡単にベンチマークできます。スリムで直感的なワークフローは、このチェックを簡単なものにし、私たちが一貫して高品質のデータを生産していることを保証し、安心感を与えてくれます。

この包括的なソリューションのおかげで、分析結果に対する信頼性はかつてないほど高まりました。私たちのラボにとって、まさに QC のゲームチェンジャーです。”

QSee Performance Test

TwinScape の統合により、ユーザーは機器の性能を経時的に追跡できるようになり、一貫した性能を確保し、システム使用前に保証を得ることができます。

BRUKER
TwinScape™

- Tracking of QSee results
- Visualization of trends
- Long-term surveillance

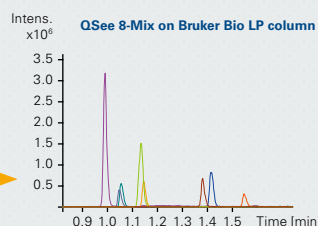


For Long-term surveillance

Longitudinal data can be used for trend analysis

QSee™
Performance Test

- Data acquisition
- Processing
- Reporting



For Performance Testing

Each QSee test returns a report with a pass or fail feedback

発見のための幅広い エコシステム



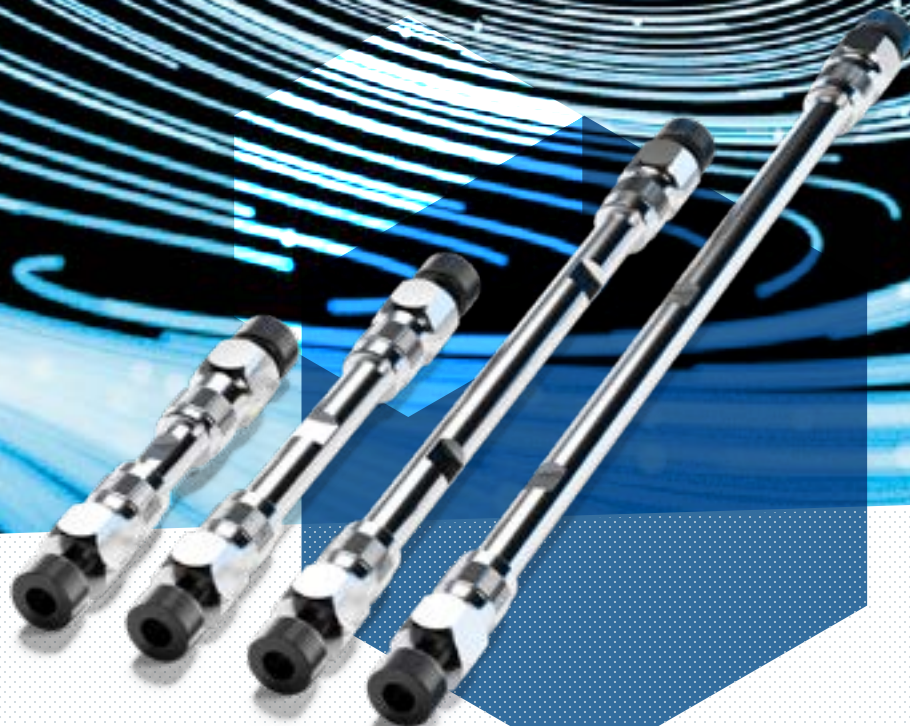
Bio-LP columns

信頼性の高い 4D-Lipidomics ワークフローの実現

製品の特徴：

- Bio-LP カラムは、複雑なマトリックス中の脂質クラスを高速かつ高容量で分離し、リピドームカバレッジを向上させます。
- クロマトグラフィーのピーク形状、ピーク分解能、リテンションタイムの再現性が向上することで、データ解析が簡素化され、脂質アノテーションの信頼性が向上します。
- TIMS テクノロジーにより、LC の極小ピークでさえもその秘密を明らかにし、高感度、堅牢性、そしてピークキャパシティ向上のための一段上の分離を実現します。
- 信頼性の高いパフォーマンスを実現する低システム圧力を提供します。

C8 ベースの担体は、生物流体や組織抽出液に含まれる幅広い脂質種の優れた保持と分離を可能にし、また、粘性の高い溶媒の割合を少なくしてカラムからのきれいな溶出を可能にします。システム全体の圧力が低いことと合わせて、これらの利点は、精密脂質プロファイリングに向けた、より高いピークキャパシティ分離を高い信頼性とともにもたらします。



Bio-AQ columns

多様な低分子を対象とした 4D-Metabolomics ワークフローの実現

製品の特徴：

- Bio-AQ カラムは、メタボロームカバレッジを向上させるために、関連する複雑なマトリックスを高速かつ高容量で分離することができます。
- 極性化合物の保持を向上させるため、100%水系溶媒に適合する極性官能基を内蔵した独自の C18 結合相が担体となっています。
- 信頼性の高いパフォーマンスを実現する低システム圧力を提供します。
- データ解析と信頼性の向上クロマトグラフィーのピーク形状、ピーク分解能を改善し、再現性のあるリテンションタイムを確保することで、低分子アノテーションの信頼性を高めます。
- 超高純度塩基不活性化シリカによる優れた再現性とカラム寿命を提供します。

逆相分離は、その優れた性能特性と実証された信頼性により、メタボロミクスワークフローにおける安定したクロマトグラフィー技術です。しかし、すべての C18 ベースの固定相が、低分子代謝物の保持を最大化するという目的に適しているわけではありません。100% 水系移動相との相溶性により、極性化合物の保持が最大化されます。

Discover MoRE with our next-generation workhorse for 4D-Metabolomics and 4D-Lipidomics



- TIMS を利用した低分子分析の
ゲームチェンジャーとなる感度
- 4D LC-TIMS-MS/MS と
CCS 測定によるかつてない特異性と
アノテーションの信頼性
- 自動分析アノテーションにおける
TIMS の信頼性
- 分析されたすべてのサンプルの
デジタルメタボロームアーカイブ
- パワフルな 4D-Lipidomics および
4D-Proteomics 機能
- 特徴的な 4D-オミクスの品質管理と
確立されたソフトウェア・エコシステムの提供

Bruker Daltonics is continually improving its products and reserves the right to change specifications without notice. © BDAL 05-2025, 1920114

本製品は研究用です。臨床での診断には使用できません。

ブルカージャパン株式会社 ダルトニクス事業部

横浜営業所

〒221-0022

神奈川県横浜市神奈川区守屋町3-9

TEL: 045-440-0471

FAX: 045-453-1827

www.bruker.com

大阪営業所

〒532-0004

大阪府大阪市淀川区西宮原1-8-29

テラサキ第2ビル2F

TEL: 06-6396-8211

FAX: 06-6396-1118

詳細については、
QRコードをスキャン
してください



JP_LS 01_07-2025