



# アジレントの製薬向け LC/MS ソリューション

## アプリケーション



### 概要

LC/MS は、創薬や薬剤開発のプロセスで重要な役割を果たしています。エレクトロスプレーイオン化法の導入以来、化合物の同定や定量など、さまざまな製薬向け LC/MS アプリケーションが開発されてきました。アジレントでは、医薬品開発プロセスのあらゆる段階に対応するソリューションを提供しています。この資料では、現代の医薬品開発ラボに重要な項目に注目しながら、Agilent LC/MS 機器を用いた製薬向けアプリケーションの概要を紹介します。

## ウォークアップ分析 — 化合物同定

創薬、合成化学部門で作られた医薬品化合物候補の同定や化合物ライブラリのスクリーニングには、ハイスループット分析と得られた情報の品質が高いことが求められます。サンプル管理が簡単に行え、自動 e-メールレポート作成機能があれば、専門知識のないユーザーでも、質量分析を簡単に行えるようになります。

Easy Access ソフトウェアを備えた  
Agilent シングル四重極 LC/MS と TOF LC/MS

### 最適なソリューション

- 創薬でのウォークアップ分析を実現
- Analytical Studio Reviewer によるデータレビュー
- Agilent 6200 Accurate Mass TOF LC/MS システム
- Agilent 6100 シングル四重極 LC/MS システム



### アプリケーションノート

Agilent 1200 シリーズ LC メソッド開発ソリューションと  
Agilent Easy Access ソフトウェアを組み合わせた  
ウォークアップ方式の LC システム

5990-3358JAJP

LC/MS 用 Analytical Studio Reviewer ソフトウェア

5989-8027EN

初期段階の創薬を最大限効率化するマルチモードイオンソース

5989-4873EN

\*資料番号が EN で終わっているものは英文版のみ

アプリケーションノートは  
アジレントの Web サイト  
([www.agilent.com/chem/lcmsapps](http://www.agilent.com/chem/lcmsapps))  
からダウンロードできます。

化合物同定

ハイスループット  
スクリーニング

代謝物同定

生物学的分析

有機不純物

## ハイスループット ADME

LC/MS は代謝安定性分析、膜透過性試験、薬剤間相互作用分析、薬剤候補の初期毒性スクリーニングなどの ADME アッセイを行う上で、重要な役割を果たします。

すべての Agilent 1200 Infinity シリーズ LC は Agilent MS システムに対応しています。

### 最適なソリューション

- RapidFire を用いた超ハイスループット
- 代謝安定性および PAMPA 分析
- Agilent 6400 シリーズトリプル四重極 LC/MS システム
- Agilent 6200 TOF システム
- Agilent 1200 シリーズ Infinity LC システム
- Agilent MassHunter Optimizer ソフトウェア



### アプリケーションノート

超高速液体クロマトグラフィ (UHPLC) とトリプル四重極 LC/MS システムによるカセット分析とポジ/ネガ切り替え方を併用した代謝安定性評価 5990-4469JAJP

Agilent 1200 シリーズ RRLC システムと Agilent 6460 トリプル四重極 LC/MS システムを用いた PAMPA サンプルの分析 5990-4878EN

ハイスループット in vitro ADME アッセイにおけるサーマルグラジエントフォーカシング ESI のイオン化性能の向上 5990-4932EN

Agilent 1200 シリーズ Rapid Resolution LC システムと Agilent 6210 TOF MS – 最高のデータコンテンツとスループットを実現 5989-4505EN

製薬研究用 Agilent 6410 トリプル四重極質量分析計と BioTrove の RapidFire システムによる in vitro 生物学アッセイのハイスループット前処理および分析- アジレントと BioTrove (現 Biocious Life Sciences) のパートナーソリューション 5989-7707EN

質量分析による CYP450 酵素阻害の超ハイスループット測定- ミクロソーム酵素を用いた Agilent 6410 トリプル四重極質量分析計と RapidFire RF-MS 注入システムとの組み合わせにより、蛍光ベースアッセイ並みのスループットを実現 5989-7759EN

自動化による In Vitro ADME/毒性スクリーニングのスループット向上 5989-9779EN

\*資料番号が EN で終わっているものは英文版のみ

アプリケーションノートはアジレントの Web サイト ([www.agilent.com/chem/lcmsapps](http://www.agilent.com/chem/lcmsapps)) からダウンロードできます。

化合物同定

ハイスループット  
スクリーニング

代謝物同定

生物学的分析

有機不純物

## 代謝物同定

代謝物の高速同定によって、望ましい代謝特性をもつ医薬品化合物候補をスクリーニングでき、望ましくない代謝安定性特性や毒性をもつ化合物を排除することができます。データの取り込みや処理を自動化すれば、分析と代謝データのレポート作成の両方を効率化できます。

MassHunter Metabolite ID ソフトウェアは、複数のアルゴリズムによって、代謝物同定の信頼性を高めます。

分解能40,000、20 スペクトル/毎秒を実現する  
新しい Agilent 6540 Ultra High Definition Q-TOF

### 最適なソリューション

- 高感度
- 構造解析を可能にする高分解能な精密質量分析
- 代謝物同定を支援する自動データ処理機能
- Agilent 6500 Accurate Mass Q-TOF LC/MS システム
- Agilent 1290 Infinity LC システム
- Metabolite Identification ソフトウェア



### アプリケーションノート

Agilent 1290 Infinity LC システムと Agilent 6530 Q-TOF MS システム、エキスパート予測システム Meteor を用いたソフトウェアによる医薬品代謝物の同定

5990-4583JAJP

コンピュータによる医薬品代謝物同定

パート 1：ネファドゾンの予測代謝物の同定

5990-3606EN

パート 2：ネファドゾンの非予測代謝物の同定

5990-3607EN

複雑な医薬品およびその代謝物のソフトウェアによる構造解析

5989-9814EN

\*資料番号が EN で終わっているものは英文版のみ

アプリケーションノートは  
アジレントの Web サイト  
([www.agilent.com/chem/lcmsapps](http://www.agilent.com/chem/lcmsapps))  
からダウンロードできます。

化合物同定

ハイスループット  
スクリーニング

代謝物同定

生物学的分析

有機不純物

## 生物学的分析

生物学的な医薬品化合物の定量には、生産性の高い LC/MS/MS メソッドの開発と、大量のサンプルを優れた直線性で分析できる堅牢な手法が求められます。Agilent 6400 シリーズトリプル四重極 LC/MS システムと MassHunter ソフトウェアを組み合わせれば、規制を遵守しながら、LC/MS/MS 本体と IT インフラを完全に統合させることができます。

感度を高める新しい Agilent 6490 QQQ  
iFunnel 技術

### 最適なソリューション

- 高速 LC/MS メソッド開発
- MassHunter Quantitative ソフトウェア
- 高感度
- 直線性
- 堅牢性
- 乾燥血斑分析
- Agilent 6400 シリーズトリプル四重極 LC/MS システム



### アプリケーションノート

UHPLC/トリプル四重極質量分析を用いたハイスループットな生物学的分析メソッドの開発 5990-4933JAJP

Rapid Resolution LC およびトリプル四重極 MS を用いた各種医薬品化合物の血漿安定性試験のための高速メソッド開発 5990-4603EN

Agilent 6410 トリプル四重極 LC/MS システムを用いた LC/ESI/MS/MS によるヒト血漿中ロバスタチンの定量 5990-3261EN

Agilent 6410B トリプル四重極 LC/MS システムと Agilent 1200 シリーズ Rapid Resolution LC システムを用いた血漿中フルバスタチンの測定 5989-9751JAJP

HPLC-Chip/トリプル四重極 MS を用いた少量血液中薬剤の定量 5989-9896EN

血漿中医薬品の定量に求められる高スピード、超高感度、堅牢性 5990-3823EN

UHPLC および拡張イオン生成 ESI と組み合わせた乾燥血斑による薬物動態アッセイの能率化 5990-4705EN

\*資料番号が EN で終わっているものは英文版のみ

アプリケーションノートはアジレントの Web サイト ([www.agilent.com/chem/lcmsapps](http://www.agilent.com/chem/lcmsapps)) からダウンロードできます。

化合物同定

ハイスループット  
スクリーニング

代謝物同定

生物学的分析

有機不純物

## 不純物分析

不純物分析は、医薬品開発のさまざまな段階で必要です。分析する不純物は、天然混合物中の微量化合物から製剤の分解生成物まで、多岐にわたります。こうした分析には、シングル四重極 LC/MS や高分解能精密質量 QTOF 機器などの機器が使用されます。

柔軟性、スキャンスピード、高速ポジ/ネガ切り替え機能を備えた Agilent 6150 シングル四重極

### 最適なソリューション

- ・ 不純物同定
- ・ 構造解析
- ・ 高感度
- ・ Agilent 6100 シリーズシングル四重極 LC/MS システム
- ・ Agilent 6200 TOF システム
- ・ Agilent 6400 シリーズトリプル四重極 LC/MS/MS システム
- ・ Agilent 6500 シリーズ QTOF LC/MS/MS システム



### アプリケーションノート

ダイオードアレイ検出器、シングル四重極 MS、蒸発光散乱検出器を用いた RRLC 不純物プロファイリングによる非 UV 吸収化合物の検出 5990-4980EN

Agilent 1200 シリーズ RRLC および 6410B トリプル四重極 LC/MS システムを用いた LC/ESI/MS/MS によるアテノロール中の遺伝毒性「不純物 D」の定量 5990-4460JAJP

コンピュータを利用した複雑な天然抽出物の分析– Agilent MassHunter Metabolite ID ソフトウェアによる Q-TOF 質量分析の既知化合物検出と未知化合物同定 5990-3234JAJP

UV および四重極 MS を用いた Rapid Resolution LC によるハーブ系減量薬中混和物のスクリーニングと同定 5989-9912EN

医薬品有効成分中の遺伝毒性が疑われるアリールアミンおよびアミノピリジン不純物の分析 5990-5732JAJP

\*資料番号が EN で終わっているものは英文版のみ

アプリケーションノートはアジレントの Web サイト ([www.agilent.com/chem/lcmsapps](http://www.agilent.com/chem/lcmsapps)) からダウンロードできます。(英文版)

化合物同定

ハイスループットスクリーニング

代謝物同定

生物学的分析

有機不純物

# LC/MS ソフトウェア — 製薬アプリケーション用

アジレントは、医薬品開発プロセスのあらゆる段階で生産性を高める各種ソフトウェアツールを提供しています。使いやすい設計、厳密なテスト、アプリケーション重視といった特徴を持つアジレントのソフトウェアは、Agilent LC/MS システムのユーザーに大きなアドバンテージを提供します。

医薬品開発用の幅広いソフトウェア製品

- ChemStation ソフトウェア — シングル四重極データ取り込み
- Easy Access ソフトウェア — ウォークアップ LC/MS アクセス
- Analytical Studio Reviewer ソフトウェア — 分析結果のブラウジング
- MassHunter Optimizer ソフトウェア — 生産性の高い LC/MS メソッド開発
- MassHunter Metabolite ID ソフトウェア — 自動代謝物同定
- MassHunter Compliance ソフトウェア — データ取り込みおよびデータ処理
- MassHunter Quantitative Analysis ソフトウェア — 生産性の高い定量
- MassHunter Study Manager — ワークフロー管理
- MassHunter LIMS connectivity — LC/MS とラポインフォマティクスのシームレスな統合



MassHunter Quantitative Analysis ソフトウェア

MassHunter Metabolite ID ソフトウェア

本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は  
予告なしに変更されることがあります。また、  
掲載されている機器類は薬事法に基づく登録を  
行っておりません。

---

**[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)**  
**カスタムコンタクトセンタ**  
**0120-477-111**

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies Inc., 2011

Printed in Japan July 31, 2011  
Publication Number 5990-5854JAJP