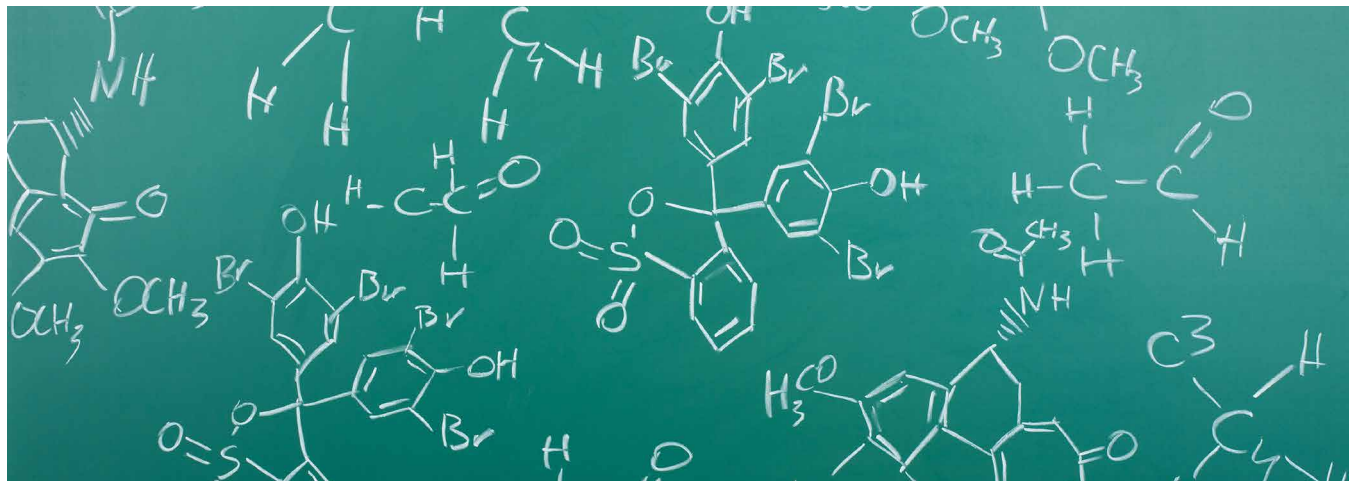


新たな次元へ 研究を導く

Agilent 6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF





これまでにない詳細な情報が得られます

研究の目的が低分子やプロテインの特性解析であれ、代謝物検出量の向上であれ、食品安全性の確保であれ、Agilent 6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF なら、新しい次元の情報が手に入ります。

イオンモビリティ質量分析により、LC/MS 分析にオーソゴナルな分離次元が加わります。比類のない選択性と感度を備えた 6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF なら、きわめて複雑なサンプルでも、確実な検出と同定を行い、精度の高い特性分析を行うことが可能です。

高感度な LC/MS Agilent 6560 は、以下の分析で威力を発揮します。

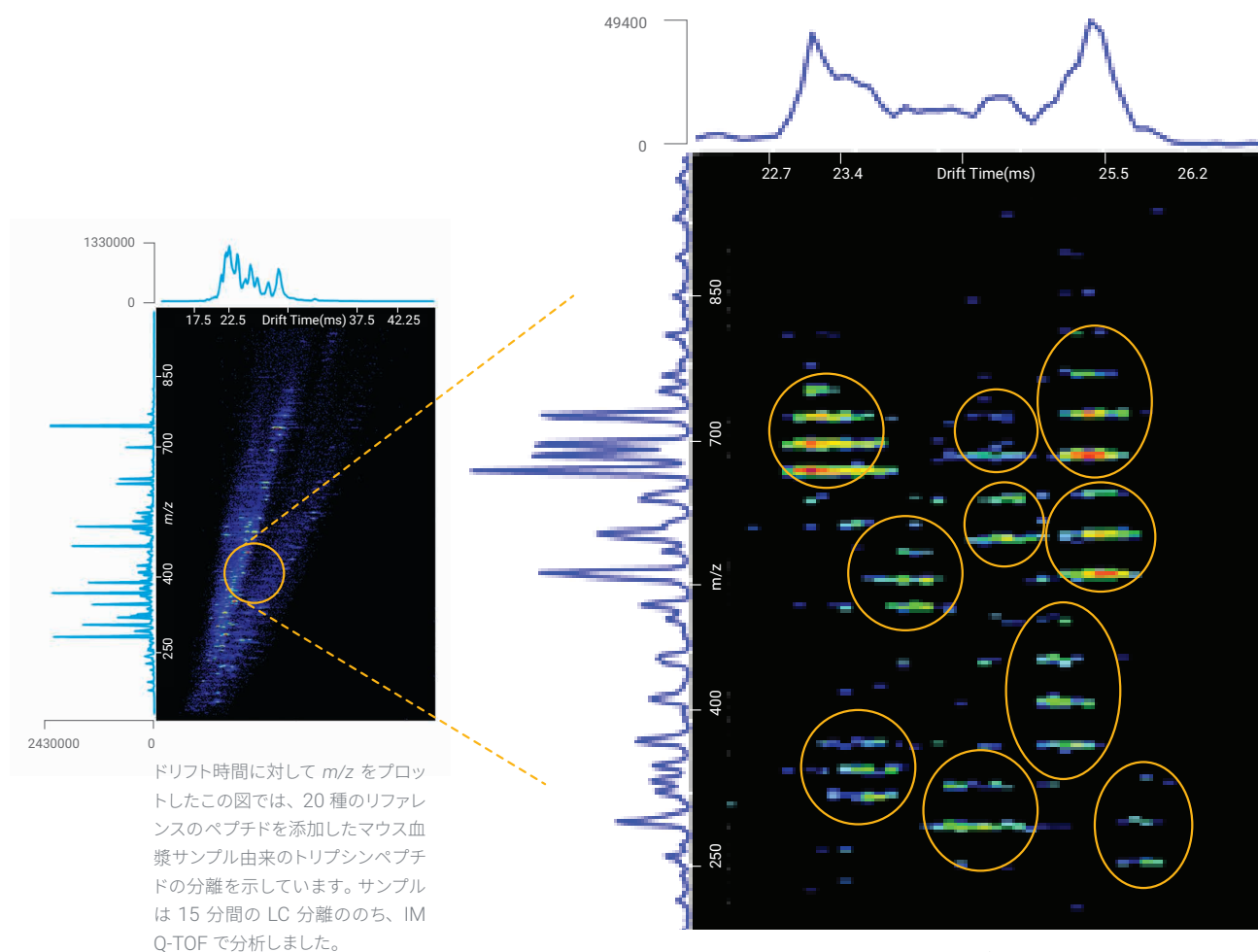
- サイズ、形状、電荷にもとづく分子と異性体の確実な分離
- 衝突誘起アンフォールディング (CIU) によるプロテインやその他の分子の構造における変化の観察
- 標準試料なしで第 1 原理測定による衝突断面積 (CCS) の計算
- 低エネルギーのドリフトチューブデザインを使用した、ガス相での分子の未変性状態の維持
- 感度とダイナミックレンジを大幅に向上させるマルチプレクス (多重処理)
- 取り込みスピードに関係ない最大 250 のイオンモビリティ分解能

研究者たちは、これらの課題に 6560 高分解能質量分析計で取り組んでいます。

未解明の課題を解明する

イオンモビリティにより、複雑なサンプルの全容が明らかに

生体マトリックスには多くの化合物が含まれており、それらはオーバーラップしています。特に広範囲にわたる存在量で、高分解能質量分析でこれらの化合物を必ず分離できるわけではありません。イオンモビリティは別の次元の情報を追加することができ、他の方法では不可能なイオンの分離に有用です。



細部を明らかにする感度により、分離困難な分析対象成分を分離

6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF の特徴

この機器では、液体クロマトグラフィーと質量分析にイオンモビリティが組み合わされています。イオンモビリティ研究の第一人者で、ASMS Bieman メダリストである Erin Baker 博士がアジレントと共同でこのシステムに取り組みました。

「わからないことが、結局は最も重要なことだった、という事例は多くあります。

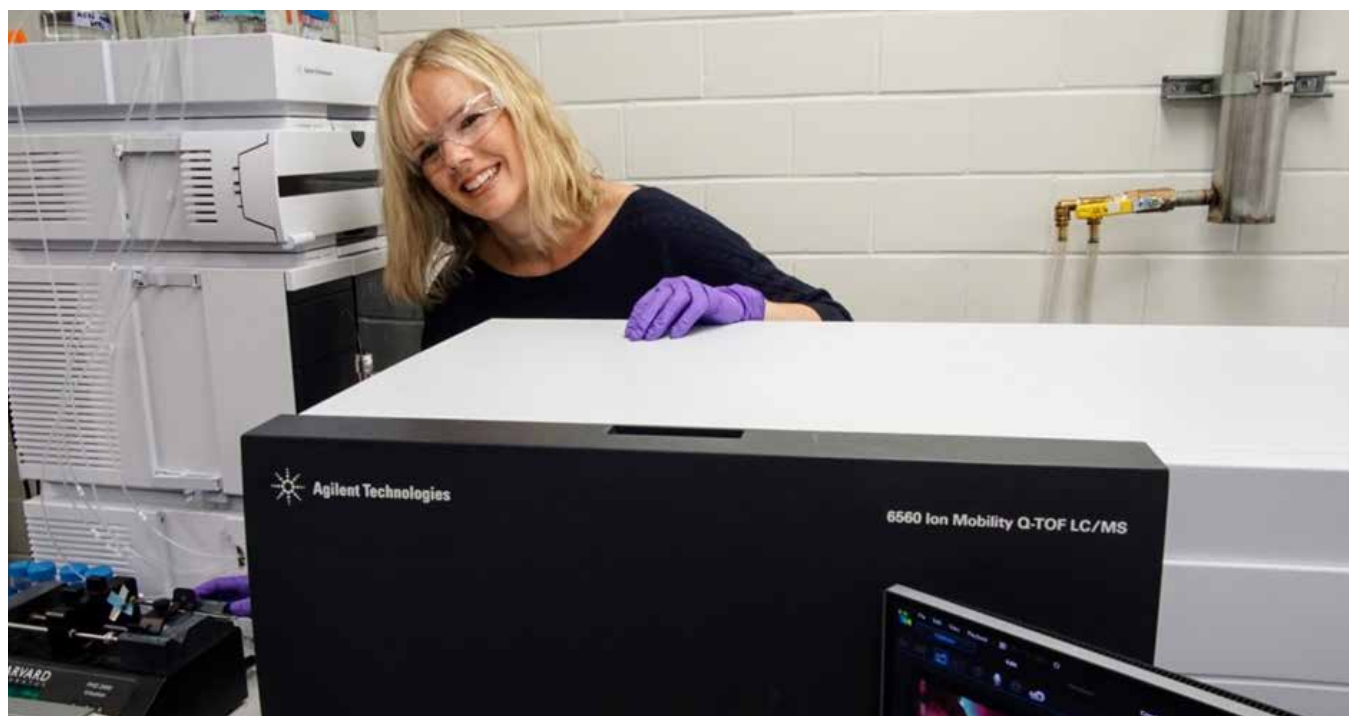
このシステムなら、サンプルの持つあらゆる情報を明らかにすることができます」と Baker 博士は語っています。

ある分子と別の分子と同じ質量電荷比を持ち、きわめて低濃度で存在する場合、このシステム以外のテクニックで検出するのはほぼ不可能です。

低濃度ペプチドの検出は、Baker 博士をはじめとする科学者が「干し草の山から 1 本の針を見つける」と表現するほど難しい分析です。そうした分析では、感度が重要となります。多数の事例において、タンパク質の形状と確認が、臨床研究において重要な手がかりとなります。

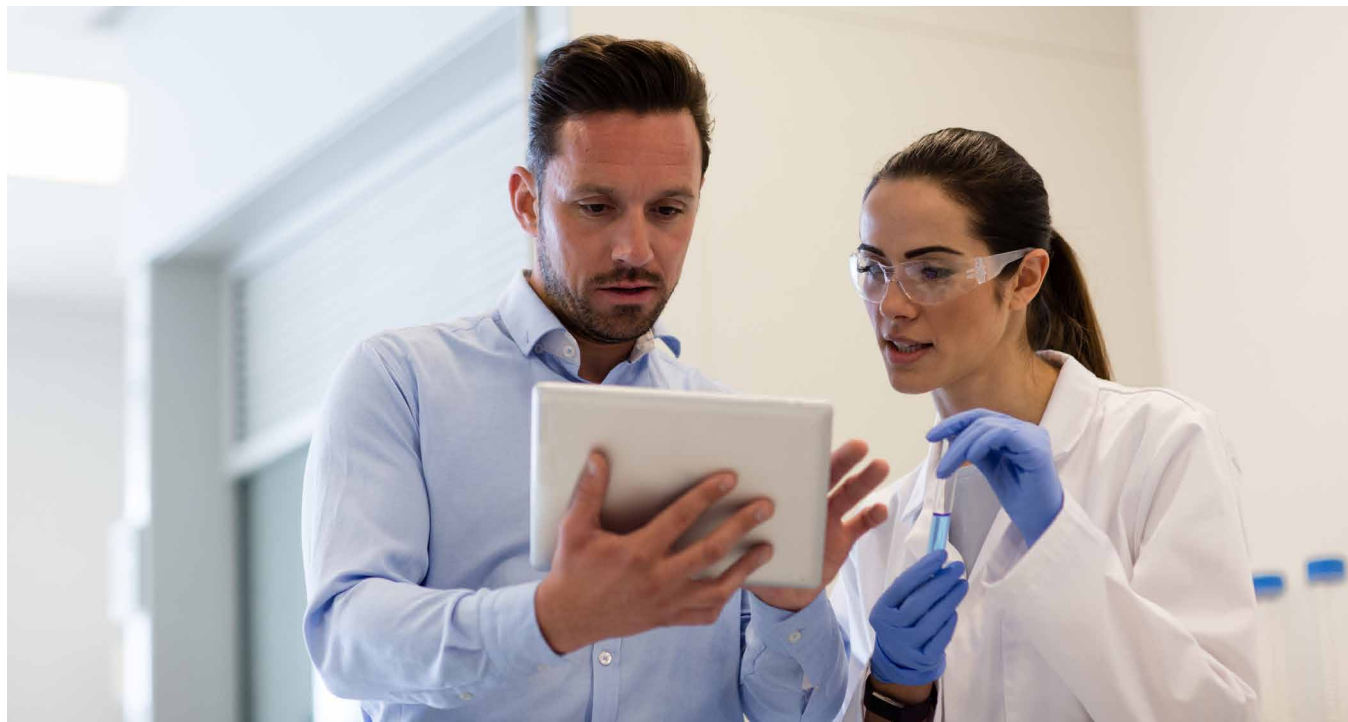
質量分析では、存在するタンパク質の種類はわかっても、形状まではわかりません。「イオンモビリティを用いれば、タンパク質がもつれた形状になっているのか、広がっているのか、あるいは何らかの形で変形しているのかがわかります」と Baker 博士は述べています。「これはきわめて重要な情報です」

アジレントの新しい LC/MS を使えば、多くの詳細情報をきわめて短時間で得ることができます。



「このシステムなら、サンプルの持つあらゆる情報を明らかにすることができます。イオンモビリティを用いれば、きわめて低濃度の分子でも検出できます。以前は ng/mL の濃度レベルで分析していましたが、いまでは高 pg/mL の濃度レベルで分析しています」

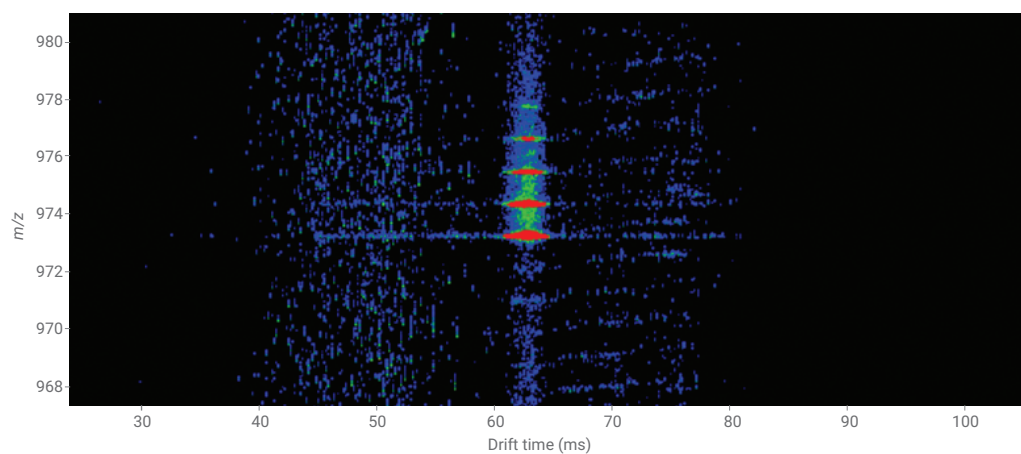
— Erin Baker、ノースカロライナ大学チャペルヒル校、
准教授



精密さが新たな研究の可能性を広げます

「Agilent 6560 のおかげで、以前は困難に思えた課題でも解決できる能力が得られています」

メリーランド州ベセスダにある米国立衛生研究所の名誉研究員を務める Alfred Yergey 博士は、Agilent 6560 イオンモビリティ Q-TOF LC/MS システムを高く評価しています。



シクロデキストリンのポジティブモードのスペクトル、測定時の CCS 値やスタンダードは不明。

信頼性と操作性に優れた確かな機器

6560 イオンモビリティ LC/QTOF は、第 1 原理測定により、構造に関する非常に根本的な疑問に対応できる、初の市販機器です。確実かつ簡単に、複雑な生物系の機能と仕組みを、より深く理解することができます。

Yergey 博士は精度の高さについて、次のように評価しています。「この装置で衝突断面積 (CCS) を計算すると、信頼性の高い数値が得られます」

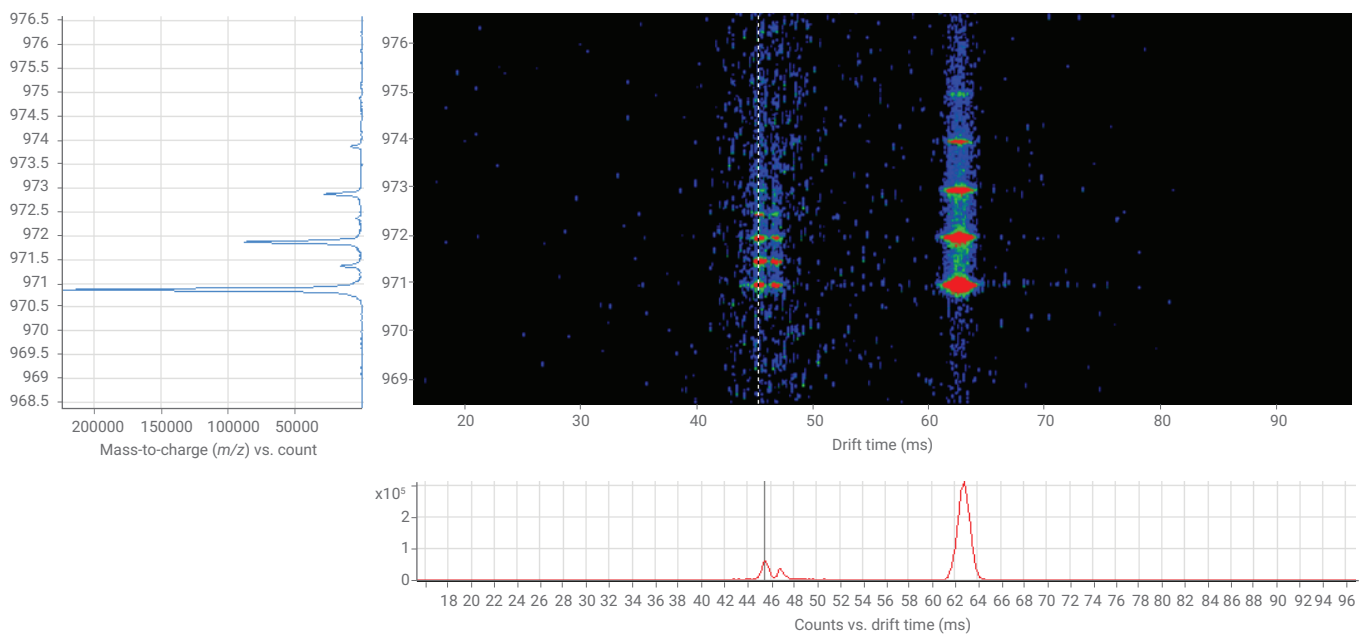
他のイオンモビリティシステムの場合、科学文献などで確立されている同様の化合物の CCS と比較して、測定で得られた結果を校正する必要があります。確立された CCS がまだ存在しない分子の場合には、その点が大きな障害になります。

「このツールで得られた分析結果は、第一原理をもとに正当性を裏づけることができます」。「この装置の挙動は、ガス相イオンケミストリの長い歴史を踏まえて予想される挙動とまったく同じです」



「この装置は、新たなさまざまな種類の実験のアイデアを想像することが可能なツールです。これは基本的にこの装置が出てくる前では想像さえできなかった形で、ガス相イオンケミストリを詳しく調べることが可能になりました」

— **Alfred Yergey 博士**、名誉研究員、
国立衛生研究所、
メリーランド州ベセスダ



同じ化合物（シクロデキストリン）のプロトン化した形状と脱プロトン化した形状の陽イオンおよび陰イオンの窒素ドリフトデータ。ポジティブおよびネガティブモードのCCS 計算で精度 2 % 以内の CCS 値が示されています。A) ポジティブモードにおいて良好に分離された 1 つのドリフトピーク。B) ネガティブモードの 2 種類のピーク（1 価単量体と 2 価二量体）。下の強度ピークには 2 種類の配座異性体が含まれています。二量体が 2 つの配座異性体として存在することを示していると考えられます。

未知を探索：複数の「オミクス」の発見ツール



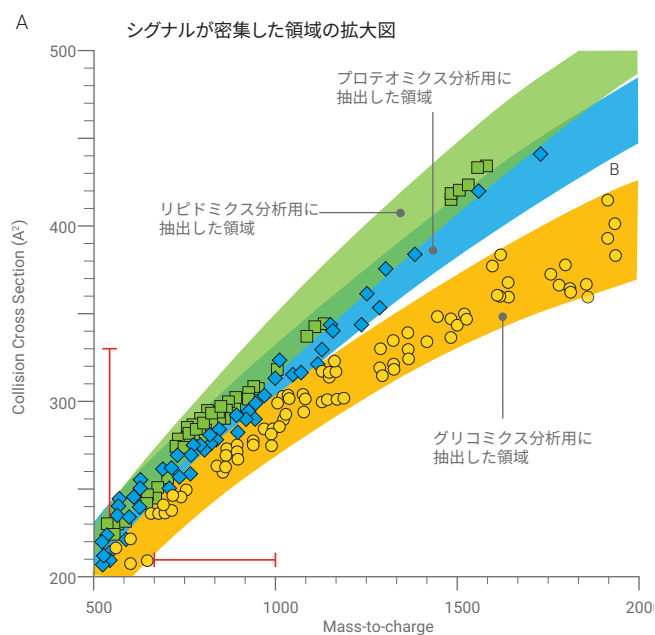
遺伝子やタンパク質、代謝物の相互作用を研究している生物学者にとって、Agilent 6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF は、研究を強力にサポートするツールとなります。

テネシー州ナッシュビルにあるバンダービルト大学の John McLean 博士にお話をうかがいました。博士は、同大学の構造質量分析研究所の所長を務めています。この研究所では、生物学、免疫学、病理学などの科学分野の実験を行っています。

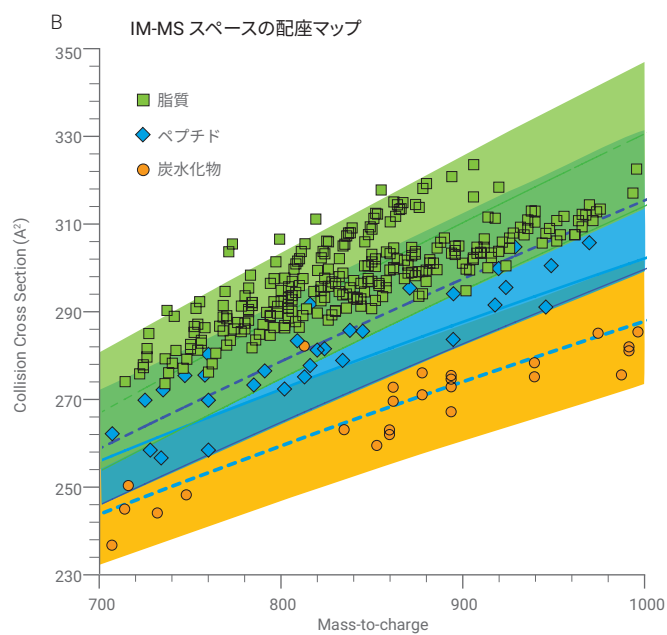
「システム生物学の大きな問題は、生物学の小さな事象、小さなネットワークを解明するために、無数の実験をしなければならないということです」と博士は述べ、次のように説明しています。「プロテオミクスでは、タンパク質の発現レベルの変化を検出するために、何時間も待つ必要があります。一方、メタボロミクスでは、生物学的状態の有効な指標となりうる生物学的反応を迅速に反映した分析結果が得られます。例えば、病態を解明しようとする場合には、そうした条件と一緒に発現する分子を調べる必要があります」

このような点において、6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF は真価を発揮するのです。

複数のオミクスをまたぐ実験データのマッピング

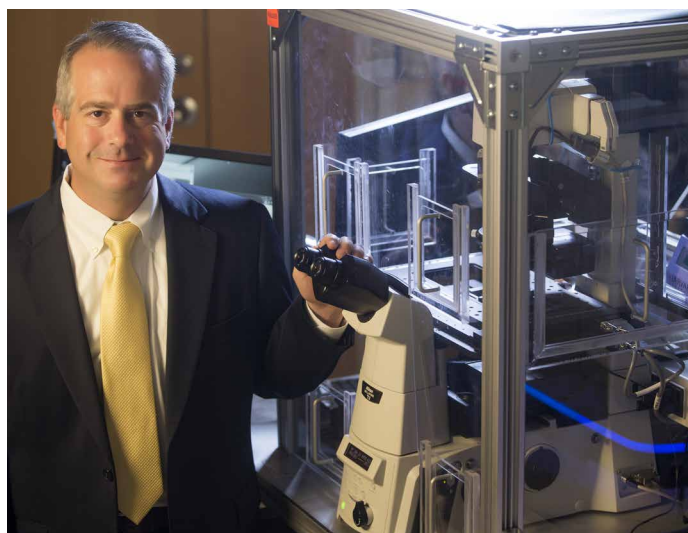


A) 脂質、ペプチド、炭水化物を含むサンプルを MS に直接導入し、衝突断面積と m/z を用いて 2-D IM Q-TOF 分析により識別しました。配座空間マップにより、生体分子クラスの違いをもとに複雑な混合物を分離することができます。フロントエンドでのサンプル解析はほとんど必要ありません。*



B) 高密度のシグナルが得られた領域の拡大図。 m/z 測定のみで各イオンシグナルを識別するのは困難です。しかし、IM Q-TOF の構造分離機能を組み合わせれば、データを化学クラス固有の領域に割り当てることができます。*

* May, J.C., et al. Anal Chem 2014 (Feb 18, 2014; 2107-2116). Conformational Ordering of Biomolecules in the Gas-Phase: Nitrogen Collision Cross-Sections Measured on a Prototype High Resolution Drift Tube Ion Mobility-Mass Spectrometer.



「イオンモビリティと質量分析を組み合わせることで、プロテオミクス研究やゲノミクス研究——あらゆる「オミクス」研究——の枠が打ち破られ、ターゲットを定めず、先入観にとらわれない分子群の研究が可能になりました」

— **John A. McLean, Stevenson**
化学教授、
バンダービルト大学、
ナッシュビル

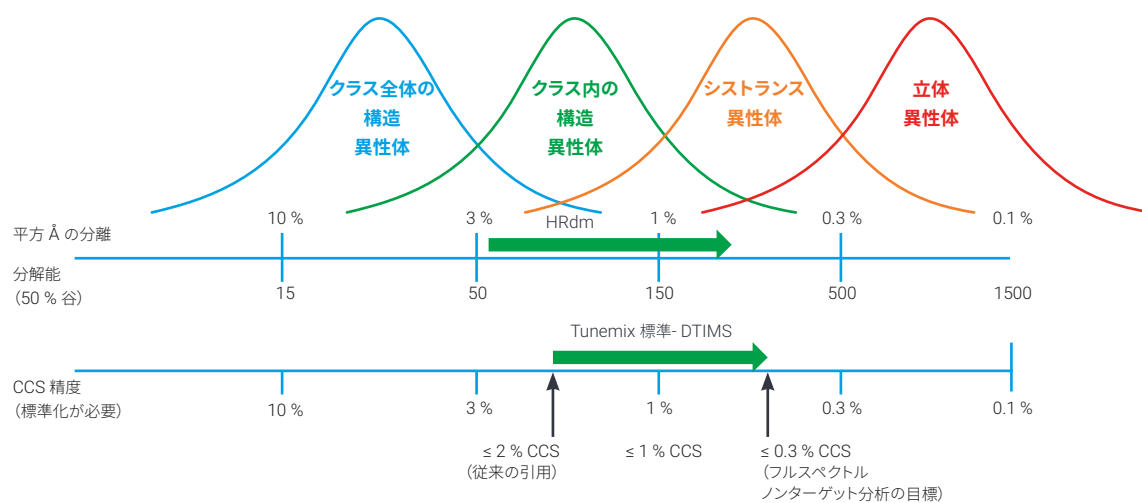
バンダービルト大学の McLean 博士のチームは、複数の研究テクニックを組み合わせることで、目覚ましい成果を上げています。チームは、長年にわたって独自のシステムを構築しています。そのシステムにおいて、さまざまな種類の分子を識別する際の鍵となる指標が、分解能です。

「私たちの経験からいえば、配座空間の化学物質群を識別するためには、20 を超える分解能が必要ですが、アジレントのプラットフォームでは、場合によっては 80 の分解能が得られます。そのため、分子分布に含まれる微細構造を識別し、分子クラスを正確に割り当てることができます。例えば、スフィンゴ脂質とグリセロリン脂質といった分子のサブクラスを識別することが可能です」と、McLean 博士は述べています。

クラス全体の構造異性体は、分解能が最大 50 ～ 60 の従来のドリフトチューブで分離できます。クラス内で構造異性体を分離するには、150 ～ 200 のさらに高い IM 分解能が必要で、これは高分解能の逆多重化により得ることができます。シス / トランス異性体と立体異性体を分離するには、さらに高い IM 分解能が必要になります。CCS の精度はドリフトチューブイオンモビリティシステムで実証されており、近接して溶出する異性体を分離する場合にその重要度がさらに高まります。多くの場合にこれらの化合物は、互いに 1 ～ 3 % に収まる CCS 値をもっているからです。フルスペクトルに対しては、CCS 精度 0.3 % 未満のノンターゲット分析ワークフローが推奨されます。感度と分解能の向上により、複雑な混合物からより多くの化合物を見つけられるようになります。

McLean 博士によれば、複数のオミクスをまたぐこの技術は、ほかの研究者をしばしば驚かせているそうです。「この技術は、生物学分野で大きな注目を集めることになるでしょう」

CCS スケールの調査



異なるタイプの異性体には、より高い IM 分解能が必要になります。同じことが、CCS 精度が非常に重要な同定の場合にも当てはまります。





バイオ医薬品の特性解析

不可能へのアプローチ—迅速で信頼性の高いバイオ医薬品開発

長年にわたり、創薬プロセスは継続的に洗練化されてきました。しかし、多くの技術的進歩にもかかわらず、基本的な手法はほぼ変化していません。したがって、「新たな医薬品の開発の手法を根本的に変える時期ではないか？」という声が上がっています。

ミシガン大学の Brandon Ruotolo 化学教授のチームも同様の考えをもっており、そのための適切なツールである新しい Agilent 6560C イオンモビリティ LC/Q-TOF を所有しています。衝突誘起アンフォールディング（CIU）は、タンパク質医薬品やターゲットの安定性を迅速に評価できます。一般的に、タンパク質ベースの医薬品は、効能と安全性を保つために可能な限り安定的でなければなりません。CIU の大きな利点は、精製されたタンパク質を大量に消費することなく、安定性の情報を入手できることにあります。CIU により、数分で安定性を評価でき、従来の技術とは桁違いに迅速にプロセスを完了することが可能です。数千のタンパク質ベースの新薬候補物質を簡単にスクリーニングし、情報量が豊富なデータが得られます。それにより、創薬パイプラインが改善され、迅速化されます。

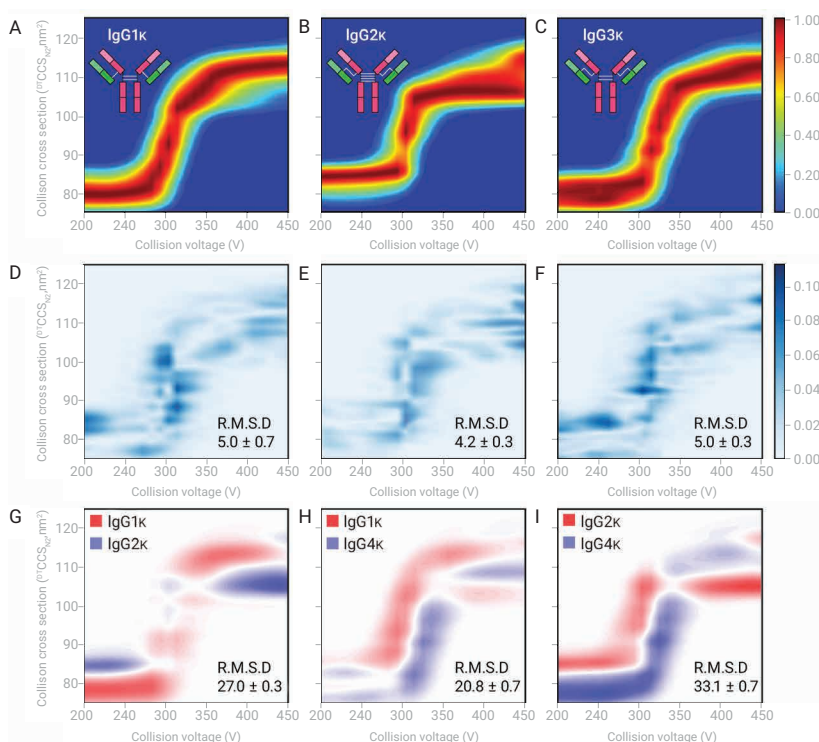
CIU の実験は続けられ、Ruotolo 教授は初期のデータをタンパク質構造の「フィンガープリンティング」と表現しています。「当初、ほとんどのデータは、特定の構造的特徴と結び付けることはできませんでした。実験を通じて、内部温度の変化により、タンパク質のサイズが増加することを知っていただけでした」Ruotolo 教授は続けて、次のように述べています。「しかし現在は、一部の構造的情報を得ることが可能です」

6560C は、広範な質量と構造状態において各種タンパク質とタンパク質複合体を調査できるパワフルなプラットフォームであることが実証されています。CIU アッセイは非常に感度が高く、ジスルフィド結合、アンフォールディング、共有結合の変化に基づきバイオシミラーとタンパク質を識別します。高い信頼性で、さまざまな IgG サブクラスのジスルフィド結合の箇所を識別できます。IgGs は生物製剤タンパク質を作るためのスキヤフォールドとして使用されるため、これは医薬品の開発に有用となるでしょう。

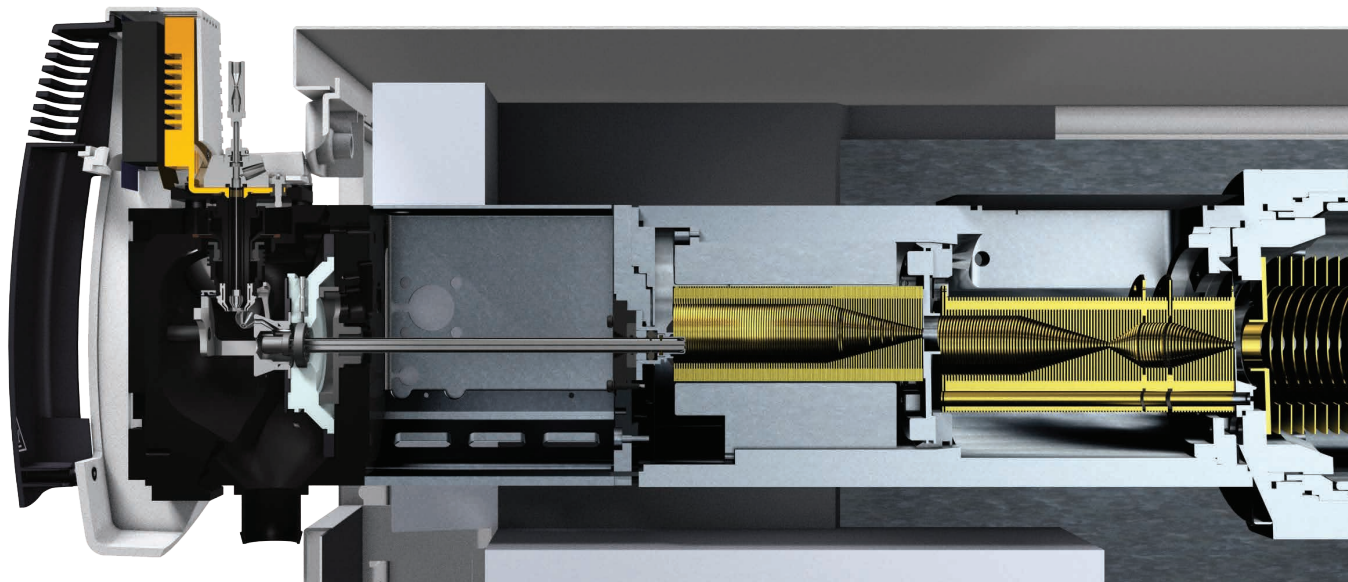


「構造変化のパターンを加えられたエネルギーの関数として記録しました。次に、細胞ストレスやリガンドとの結合を経た他のサンプルと比較し、これら 2 つの間におけるデータの変化を確認しました。CIU データ解析は多くの場合に、サンプル間で多くの参照を行います。標準的なタンパク質のデータは未知化合物から結論を導くため、非常に高い再現性が求められます。6560C はこの点において優れています」

— **Brandon Ruotolo**、化学教授、
ミシガン大学



CIU 実験の結果図 A ~ C : IgG1 Kappa、IgG2 Kappa、IgG3 Kappa の CIU カーブ。図 D ~ F : IgG1-3 Kappa の複数回の繰り返し分析の CIU カーブ平均二乗平均平方偏差 (RMSD) 値。図 G ~ I : IgG1 Kappa と IgG2-4 Kappa を比較した CIU カーブ平均 RMSD 値。図は縦 IgG の Kappa の比較プロットを示しています。



画期的な技術をベースにした設計

100 年以上前からある分離テクニックが注目されているのはなぜでしょうか。最近になってからようやく、多くの革新技術により、その真の潜在能力が明らかになりはじめています。

均一電場ドリフトチューブと組み合わせた最新のイオンファネル技術は、パシフィック・ノースウェスト国立研究所（PNNL）の Richard Smith 博士により開発されました。高分解能質量分析計と組み合わせたイオンモビリティで、50 倍以上の感度向上を実現しました。

6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF システムでは、独自のイオンファネル設計により、この技術がさらに進化しています。デュアルファネルアセンブリは、サンプル濃縮用のフロントファネル、トラッピングイオンファネル、ドリフトチューブ、集束用のリアーファネルで構成されています。これらはすべて、イオン源から Q-TOF 高分解能マスアナライザまでのイオン透過率を高めるように設計されています。

均一電場イオンモビリティ設計は何年も前からあります。しかし電気力学的ファネルが採用されておらず、イオンロス率がきわめて高くなってしまう（> 99.9 %）という欠点がありました。

アジレントの設計したドリフトファネルは、光路の各セグメントで確実にイオンを保持します。その方法とは？電気力学的イオンファネルのあらゆるセグメントで注意深くイオンを集束させるのです。この設計により、スタンドアロン型の高分解能 Q-TOF LC/MS 機器と比較し、イオンシグナルのロスが 2 分の 1 に抑えられます。

さらに、厳密なオーソゴナル（直交型）エレクトロスプレーの Agilent JetStream イオン源を組み合わせた Agilent iFunnel 技術により、他のデュアルファネル設計を凌駕する堅牢性が実現しています。このような設計により、荷電していない種やイオンクラスタの透過が最小限に抑えられ、バックグラウンドノイズが減少します。



「イオンファネル技術は、API の導入以降で最も重要な MS の革新技術となる可能性があります。基本的な感度と検出下限に画期的な進化をもたらすことで、従来の質量分析計をはるかに上回る性能が実現します」

— Richard Smith 博士、イオンファネルの発明者

一台のシステムで、3 つの分離次元をすべて活用

6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF は、1200 Infinity シリーズ HPLC、イオンモビリティ、高分解能の精密質量 Q-TOF LC/MS システムのパワーを兼ね備えています。そのため、科学研究の対応力を簡単に広げることができます。

VacShield

- 真空を開放することなくキャピラリの取り外しが可能。

CIU

- 構造特性解析のための衝突誘起アンフォールディング。

多重化（マルチプレクス）

- 高いダイナミックレンジと感度、大幅に向上した IM 分離能、および後処理アルゴリズム。

構造異性体の分離

- 高分解能イオンモビリティ分離により、分子構造やペプチドおよびタンパク質の立体配座の研究が容易に。
- リファレンススタンダードまたはキャリブレーションテーブルを用いない、分子サイズの直接測定（衝突断面積による測定）。

ピークキャパシティの向上

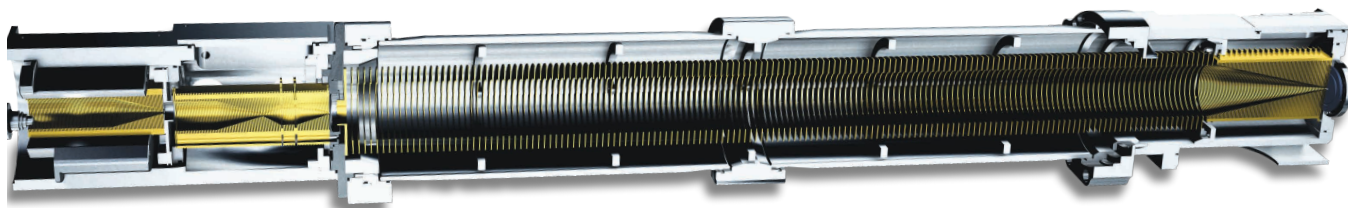
- UHPLC、イオンモビリティ、質量分析の複合的な威力を用いた、複雑な混合物中の各成分の分離。
- ダブルグリッドトラッピング技術による最適なイオンモビリティ分離。
- 高分解能逆多重化による、感度、ダイナミックレンジ、分解能を向上するための多重化処理。

微量成分の検出および確認

- 電気力学的ファネル技術を用いた、複雑なマトリックス中の低フェムトグラム域成分の容易な検出。
- All Ions MS/MS による確実な化合物確認。

タンパク質構造の保存

- ガス相ペプチドおよびタンパク質構造の分析が容易。
- イオン加熱効果を最小限に抑えて、分子構造を保存。





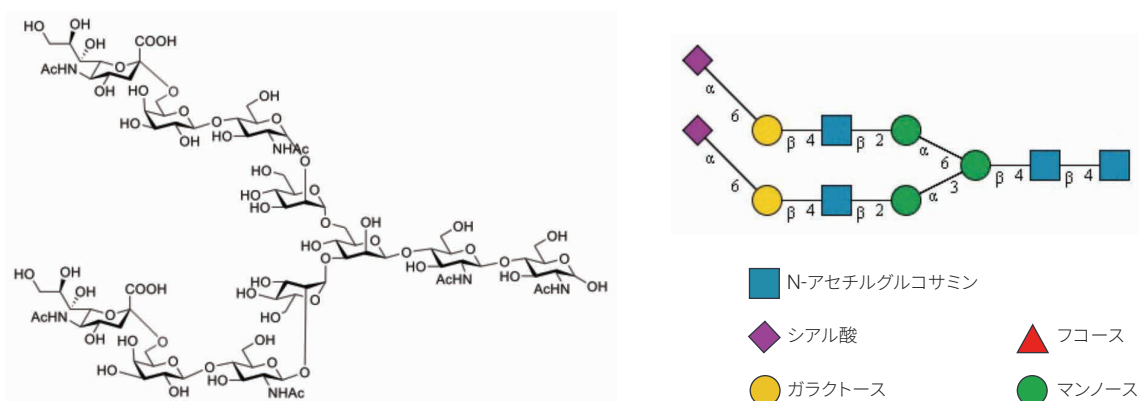
ピークキャパシティが大幅に向上

液体クロマトグラフィー、質量検出、イオンモビリティというオーソゴナル（直交的）な分離テクニックを組み合わせることで、全体のピークキャパシティが大幅に向上します。したがって、さまざまな種類の分子をより効率的に分析することが可能です。

複雑なサンプルの詳細分析の場合、液体クロマトグラフィーだけでは、多数の化合物を完全に分離できないこともあります。その後に高分解能質量分析を実施しても、同重体化合物を十分に分離および同定できないケースもあります。6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF を使えば、ガス相イオンモビリティ分離が追加されるため、分析のピークキャパシティが劇的に向上します。つまり、かつてないほど多くの化合物や成分を分離し、検出することができるのです。

複雑なグリカンの正確な構造解析

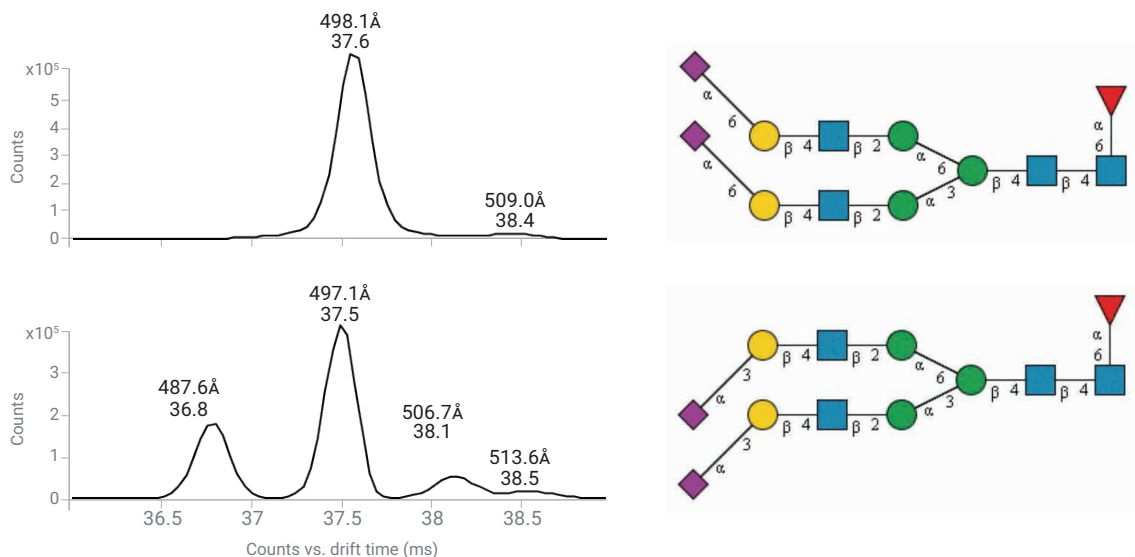
グリカンの MS 分析に大きな関心が集まっています。これらの生体分子は生物学的および疾患のプロセスに関与しており、バイオマーカーとして機能します。バイオ医薬品の重要な成分であり、幼児の栄養に影響を及ぼします。その構造的な複雑さのため、TOF-MS により正確なグリカン構造を同定することは困難です。TOF-MS および DTIMS に多重処理と HR-逆多重化を組み合わせることで、より速く、より簡単な代替手法となります。



N-グリカンの構成要素の単糖類はさまざまな配列や架橋に結合でき（左）、多くの異性体を含む、多数のグリカン構造の候補を生成できます。通常、分子構造の図は、構成要素と結合のアノテーションの記号を使用することで単純化して示されます（右）。¹

高分解能グリカン配座異性体分布フィンガープリンティング

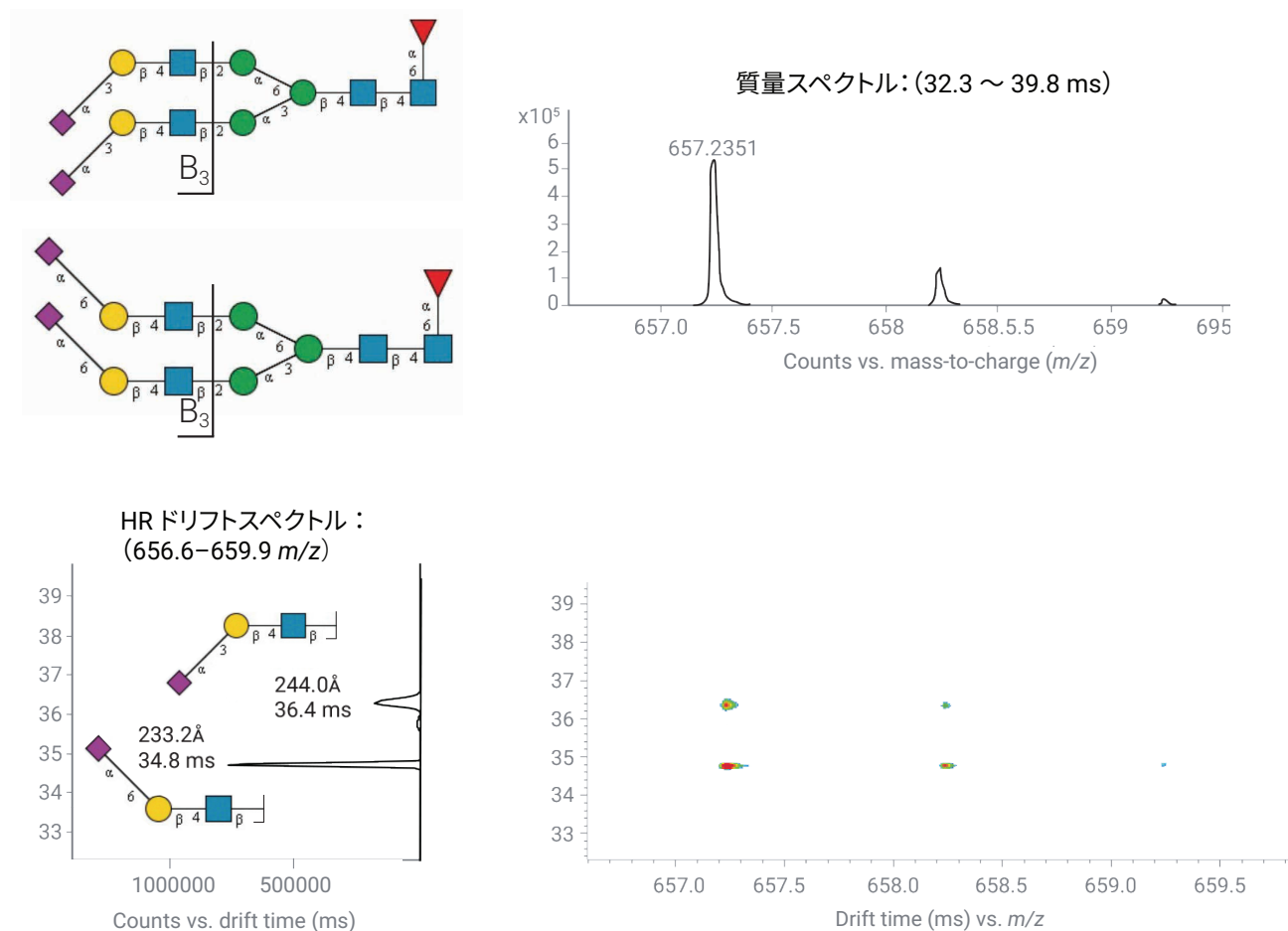
炭水化物の構成成分の柔軟性により、グリカンは複数の安定的なガス相立体配座となることができ、これは DTIMS により分離できます。これらの再現性の高い配座異性体分布は、各グリカンに対して固有のフィンガープリントを示します。² これらのフィンガープリントを含むデータベース、精密質量測定、CCS 値を組み合わせ使用し、多段階 MS 実験を行うことなくグリカン構造を同定することが可能です。



HR 配座異性体分布フィンガープリントおよび CCS 値による、異性体 N-グリカンの識別。N-グリカンの還元末端を 2-アミノ安息香酸により誘導体化し、 $[M-2H]^{2-}$ イオンとしてネガティブイオンモードで測定しました。

インソース活性化および HR-DTIMS

インソース活性化の後に形成される、糖鎖断片の DTIMS により、正確なフコスの位置³ やシアル酸結合の種類など、詳細な構造情報を取得できる可能性があります。フラグメントイオンの CCS 値を測定し、これらを参照データと比較することにより、MS³ 測定の必要なく、異性体フラグメントイオンを識別できます。



シアル酸結合のみが異なっている ($\alpha 2,3$ または $\alpha 2,6$ 、挿入図の構造を参照)、2つの混合異性体 *N*-グリカンのインソース活性化後に取得された (HR ドリフトスペクトルの 34.8 と 36.4 ms における) B_3 フラグメントイオンの分離。 *N*-グリカンの還元末端を 4-アミノ-N-2- (ジエチルアミノ) エチルベンズアミドにより誘導体化し、インソース活性化し、ポジティブイオンモードで測定しました。2つの B_3 フラグメントイオンの m/z 値は同じですが (m/z 657.24 で $[M+H]^+$)、これらはドリフトチューブでの移動度により分離でき、CCS 値によってシアル酸結合の様式を識別することが可能です。

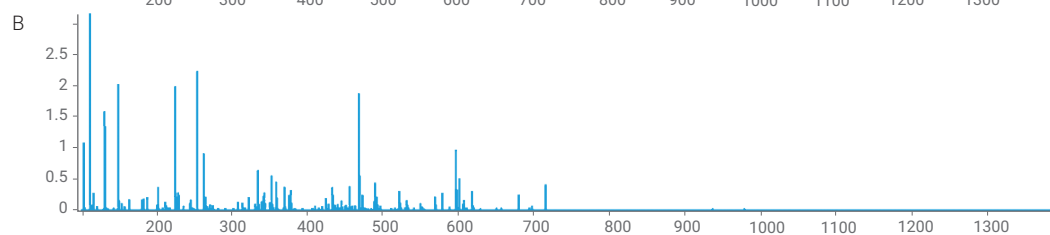
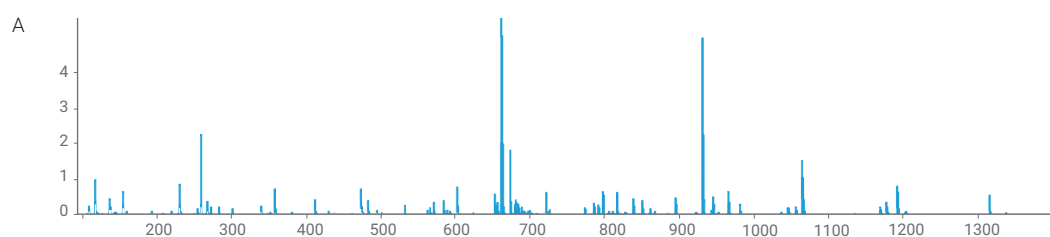
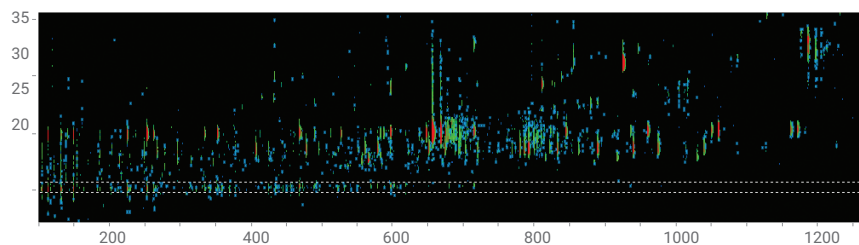
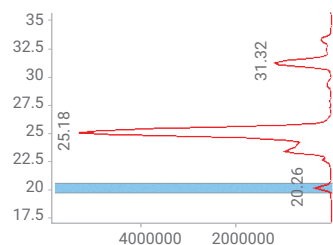
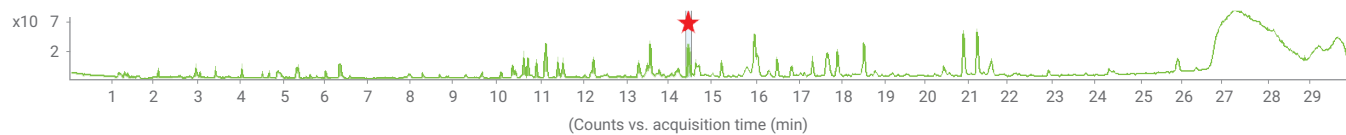
1. Damerell, D. et al. The GlycanBuilder and GlycoWorkbench Glycoinformatics Tools: Updates and New Developments. *Biol. Chem.* **2012**, 393 (11), 1357-62.
2. Sastre Torano, J. et al. Identification of Isomeric N-Glycans by Conformer Distribution Fingerprinting Using Ion Mobility Mass Spectrometry. *Chem. Eur. J.* **2021**, 27 (6), 2149-2154.
3. Sastre Torano, J. et al. Ion-Mobility Spectrometry Can Assign Exact Fucosyl Positions In Glycans and Prevent Misinterpretation of Mass-Spectrometry Data After Gas-Phase Rearrangement. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **2019**, 58 (49), 17616-17620.



All Ions 測定: 低濃度化合物を迅速に検出

All Ions フラグメンテーションはアジレントのすべての高分解能 LC/Q-TOF 機器で使用できます。この All Ions 技術とアジレントのパーソナル化合物データベースおよびライブラリ (PCDL) と組み合わせることで、複雑な混合物に含まれる化合物のスクリーニング分析で高い信頼性をもたらします。

従来のデータ依存型 MS/MS 分析では、しばしば低いアバンダンスのピークが見落とされてしまいますが、All Ions フラグメンテーション分析では、イオン源で生成されるすべてのイオンが直接コリジョンセルへ入り、フラグメンテーションされます。その後、データ解析ソフトウェアが PCDL の MS/MS スペクトルを用いて、サンプル中に存在する化合物を確実に抽出します。イオンモビリティと組み合わせると、Agilent All Ions フラグメンテーションはさらにパワフルになります。イオンドリフト時間が新たな分離次元をもたらし、サンプルの複雑さが低減され、低濃度化合物の検出が強化されるからです。それにより、化合物同定の不確実性が低減されるとともに、微量化合物の検出下限が向上します。



Agilent All Ions フラグメンテーションを使用して、タンパク質消化における低濃度ペプチドを測定しました。LC 分離マップの星印のついたピークに存在する 6～7 種 ペプチド成分が、ドリフトタイムヒートマップで分離されています（挿入図）。これらの化合物は、LC および MS のみでは検出し同定することはできませんでした。

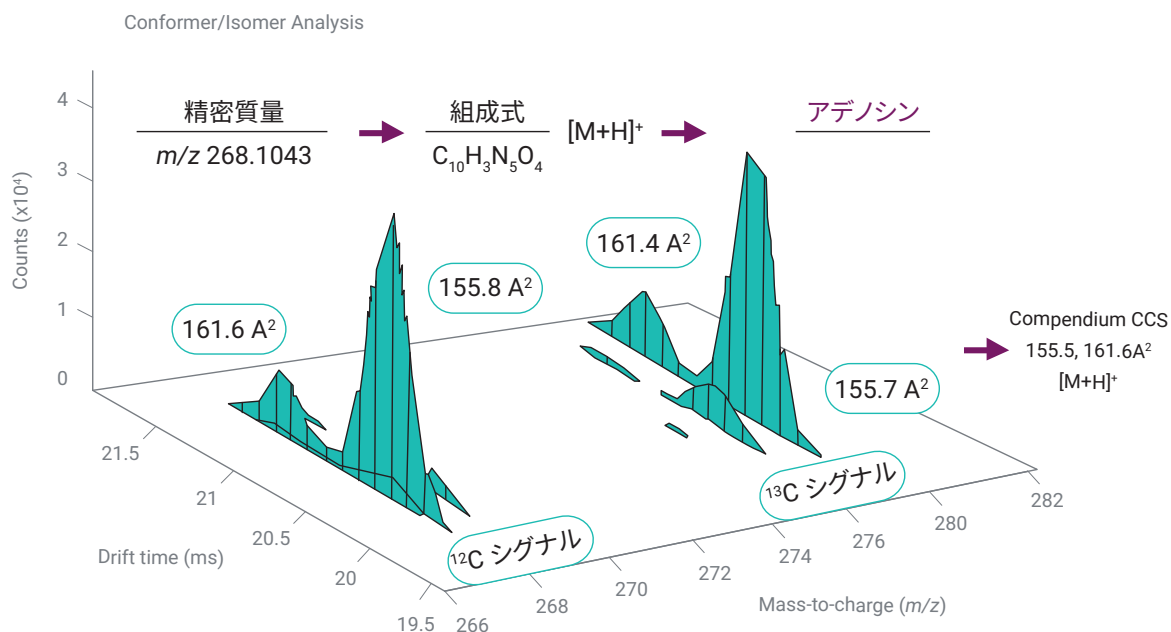
A：星印のついたピークの 30 V におけるフラグメントイオンスペクトルの概要。B：20.26 ms における三重電荷 HLVDEPQNLIK ペプチドのドリフト分離フラグメントイオンスペクトル。

ノンターゲットメタボロミクスCCS 値による分子アノテーションの向上

ノンターゲットメタボロミクス研究における最大の分析課題の 1 つは、どのように未知化合物の分子アノテーションの信頼性を向上させることができるか、ということです。現在の方法では、精密質量、同位体パターン、MS/MS スペクトルなどの分子記述子により、一定の分析確度で暫定的に分子を識別します。イオンモビリティ質量分析 (IMS) と、文献に記載の衝突断面積 (CCS) 値を用いて、未知化合物の構造特性解析に役立つ新たな形態の分子アノテーションを提供します。

Agilent 6560 プラットフォームの均一電場ドリフトチューブによって生成された CCS 値により、ラボ間で、優れた精度でこれらの分子記述子を翻訳できます。この場合、アデノシンはノンターゲットプロファイリングの実験で算出された精密質量と CCS 値のみをベースとしているため、未知の代謝物をアノテーションすることができました。2 つの配座異性体は、プリン核酸塩基の複数のプロトン化部位を起因とする可能性が高いです。ノースカロライナ州立大学の Erin Baker のラボで算出された CCS 値は、バンダービルト大学の John McLean ラボが公開した参照値との一致を示しました (差異 0.2 % 未満)。

内因性代謝物 (黄色の境界線内の値) と比較して、重同位体標識代謝物 (ピンク色の境界線内の値) の CCS と配座異性体分布はほぼ同じであり、それにより分子帰属の信頼性が向上しています。



データ出典：Erin Baker、ノースカロライナ州立大学

サイズと形状による分子の分離

ポリマー、タンパク質、ペプチド、脂質、バイオ医薬などの特性分析では、化合物のサイズと形状の尺度となる衝突断面積（CCS）の値が重要になります。そうした分析では、CCS 値により、形状の異なる異性体や同じ構造を持つ分子と複合体を識別できるケースもあります。

CCS 値はイオンモビリティ測定により得られるものです。アジレントが採用した独自の設計により、均一電場ドリフトチューブを用いて直接計算することが可能になっています。

Agilent 6560 イオンモビリティ LC/Q-TOF を使えば、精度 <2 % 以内の CCS 測定がルーチンで行えます。このシステムの均一電場ドリフトチューブでは、分析パラメータ（圧力、温度、電場）が精密に制御され、イオンモビリティ分析全体で維持されます。



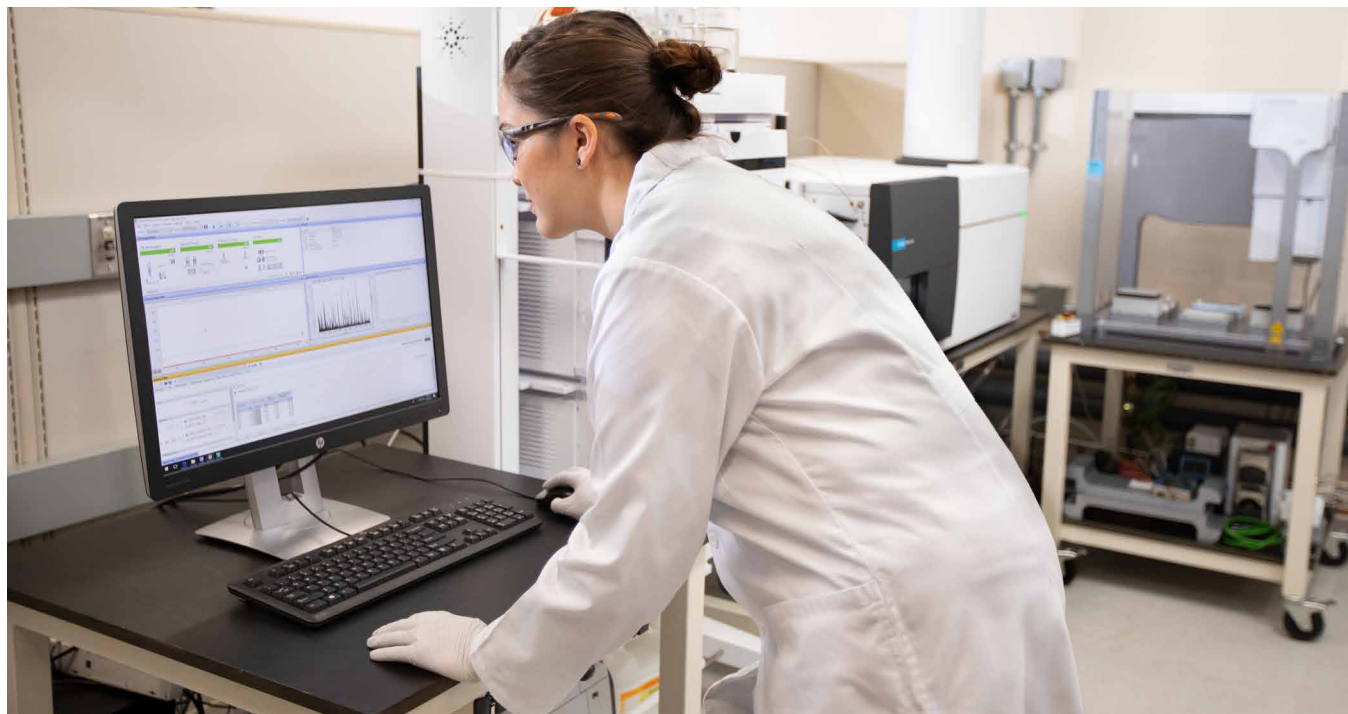
CCS リファレンススタンダードの作成

アジレントのチューニング混合試料を使用した CCS リファレンススタンダード

混合試料の タイプ	CCS	% RSD	チューニング 混合試料	CCS	%RSD
118	121.30 ± 0.20	0.17 %	112	108.23 ± 0.20	0.19 %
322	153.73 ± 0.23	0.15 %	301	140.04 ± 0.29	0.21 %
622	202.96 ± 0.27	0.14 %	601	180.77 ± 0.21	0.12 %
922	243.64 ± 0.30	0.12 %	1033	255.34 ± 0.32	0.13 %
1221	282.20 ± 0.47	0.17 %	1333	284.76 ± 0.31	0.11 %
1521	316.96 ± 0.60	0.19 %	1633	319.03 ± 0.70	0.22 %
1821	351.25 ± 0.62	0.18 %	1933	352.55 ± 0.27	0.08 %
2121	383.03 ± 0.64	0.17 %	2233	380.74 ± 0.31	0.08 %
2421	412.96 ± 0.58	0.14 %	2533	412.99 ± 0.31	0.07 %
2721	441.21 ± 0.59	0.13 %	2833	432.62 ± 0.35	0.08 %

アジレントのチューニング混合液をベースとした CCS 参照標準の作成は、参照システムを使用したラボ間の調査と、追加のラボにおける他の 3 つのシステムにより行いました。ポジティブおよびネガティブモードの両方で、3 日間にわたって 4 つのチューンモードを使用して、すべてのラボでデータを取得しました。参照システムで、測定の再現性条件の下で取得された CCS 値に対応する RSD は、すべてのチューニング混合液のイオンに対して 0.22 % 未満であることが確認されました。この包括的な評価は、これらの参照 CCS 値を、汎用的な単一フィールド測定のためのキャリブラントとして使用し、広範な CCS 標準化に対応する参照値として提示する目的で実施されています。

イオンモビリティデータの可視化： 分析結果の解析を容易にする MassHunter ソフトウェア



Agilent MassHunter ソフトウェア、IM-MS ブラウザ および Mass Profiler を使えば、モビリティ/質量ドメインデータを解析し、精密な衝突断面積を簡単に測定することができます。

MassHunter ソフトウェアの特長：

- **ハイクオリティな画像。**データを明確に提示します。
- **直観的、双方向的にリンクされたナビゲーション。**細部の解析も容易です。
- **すべての 3 つの次元の分離を同時に表示。**状況に応じてデータを明確に提示し、多次元空間の視覚化を支援します。
- **あらゆる次元のデータを簡単にフィルタリング。**双方向的なデータ閲覧や自動処理が簡単になります。
- **動的なデータ表示。**データファイルのあらゆる場所のデータ、または各データファイル間のデータを比較することができます。
- **簡単に直接的な衝突断面積計算。**化合物種に応じたキャリブレーションは必要ありません。

10 年間の価値を保証

アジレントは、品質システム設計および製造に関して、比類のない業界水準を誇っています。アジレントバリュープロミスには、その信頼性の高さが反映されています。アジレントバリュープロミスは、アジレントのクロマトグラフィー、質量分析計、分光光度計などの製品のご購入日から 10 年間、製品の性能を保証するもので、アップグレードの際には、製品の残存価値に見合った導入プランをご提案します。投資による利益を最大限に高めながら、システムを変わらぬ価値で末永くご利用いただけます。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。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。

RA44952.3760648148

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2023
Printed in Japan, March 29, 2023
5991-3640JAJP