

# シンプルな TOF MSで ワンクラス上の化合物推定を簡単に。

Agilent 6230 Accurate-Mass LC/TOF システム





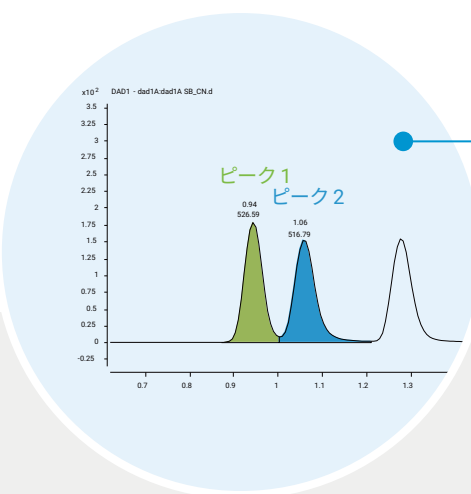
# より詳細な化合物推定ができる 飛行時間型 LC/MS

HPLC によるスクリーニング分析では、化合物を迅速に検出できます。また、UV および四重極 MS 検出では、混合物の組成に関する優れた考察を得られます。一方、より高い選択性が求められるのであれば、使いやすい精密質量による化合物推定により、さらなる確信を持つことができます。

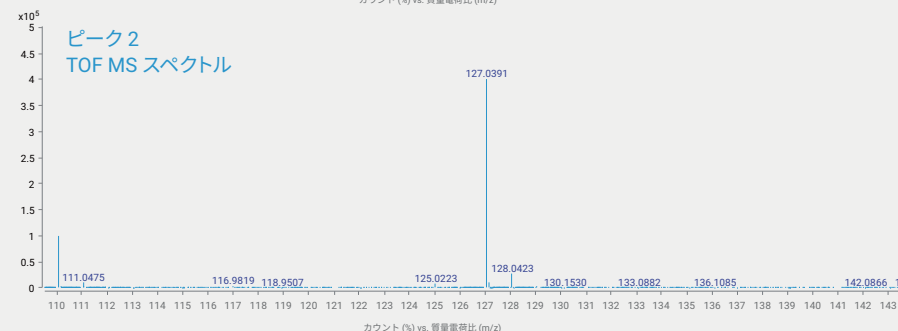
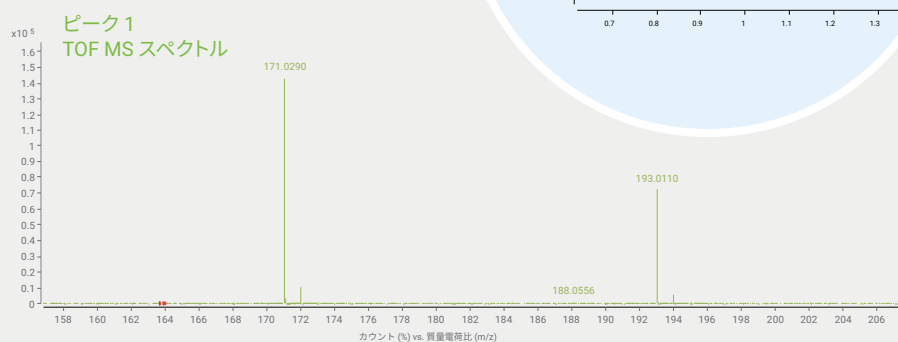


**スクリーニングワークフローは単に化合物を検出することが目的ではありません。アジレントの飛行時間型 LC/MS (LC/TOF) もまた、単なる分析装置ではありません。**

Agilent 6230 Accurate-Mass TOF LC/MS システムでは高い質量分解能による精密質量測定が可能で、従来の HPLC の UV などの LC 検出器に比べて確実に化合物の推定が行えます。Agilent 6230 LC/TOF なら、サンプルに含まれる化合物の全体像を把握できます。



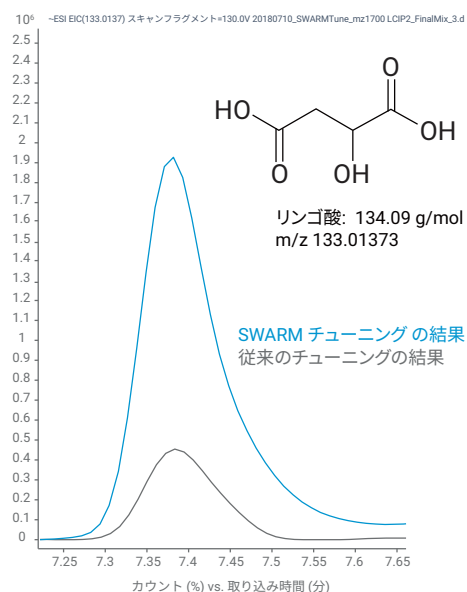
UV 検出器や従来の シングル四重極 MS では、化合物の存在や種類が不明であったり、ノミナル質量の情報しかわからない場合があります。



**LC/TOF による一歩進んだ分析:**  
検出された化合物の推定に役立つ精密質量情報が得られます。

# スキルレベルに関係なく信頼性の高い結果が得られます

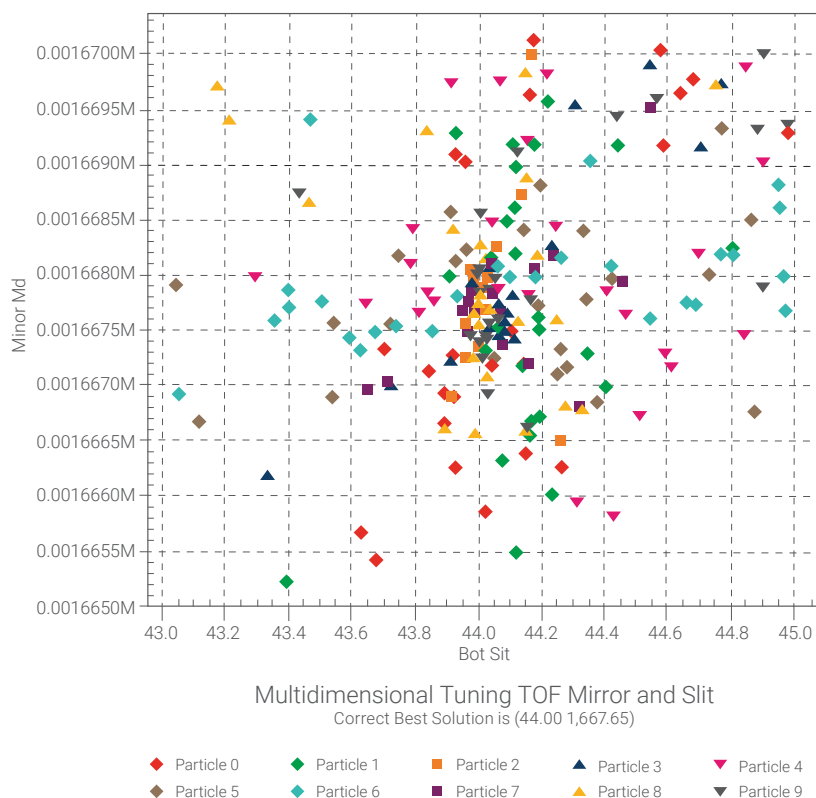
低質量代謝物のリンゴ酸における従来のチューニングと SWARM チューニングの結果の比較



Agilent 6230 LC/TOF システムなら、専門家レベルのトレーニングを受けなくても、専門家レベルの結果が得られます。

- 最新の使いやすい SWARM オートチューンにより、1 回のクリックで TOF の性能を最大限に引き出します。
- MassHunter Walkup ソフトウェアは、ラボの誰もが化合物の推定を簡単に行うことができるユーザーインターフェースを提供します。
- フルスペクトルの高分解能 TOF データによって、UV 検出や四重極 MS を上回る成果を出すことができます。

Agilent SWARM オートチューンは、TOF MS の幅広い範囲のパラメータの最適値を迅速に見つけ、非常に優れた結果をもたらします。



MassHunter Walkup ソフトウェアを用いた LC/MS システムの管理により、作業効率や測定結果の一貫性、スループットが向上します。  
また、多種多様なワークフローの管理に伴うエラーを最小限に抑えることができます。

### インタクトプロテイン分析



サンプル前処理

シーケンスのアップロード

MS スペクトルの  
デコンボリューション

ゼロ電荷  
質量の決定

シーケンスマッチング

翻訳後修飾 (PTM) の決定

オプションの ADC DAR 計算

### ペプチドマッピング



酵素消化

サンプル前処理

シーケンスのアップロード

データ測定

化合物抽出

シーケンスマッチング

翻訳後修飾 (PTM) の決定

シーケンスカバレッジ

### 化合物の確認と 純度評価



サンプル前処理

予想される分子式または  
分子量のアップロード

クロマトグラフィーによる  
分離

ピーク検出

ピーク MS スペクトルの評価

予想されるモノアイソトピック質量と  
観測された  $m/z$  を、  
付加体を考慮した上で比較

Analytical Studio Reviewer による  
ハイスループットな化合物の  
純度評価 (オプション)



レポート作成



メールの通知などによ  
る分析結果の提供

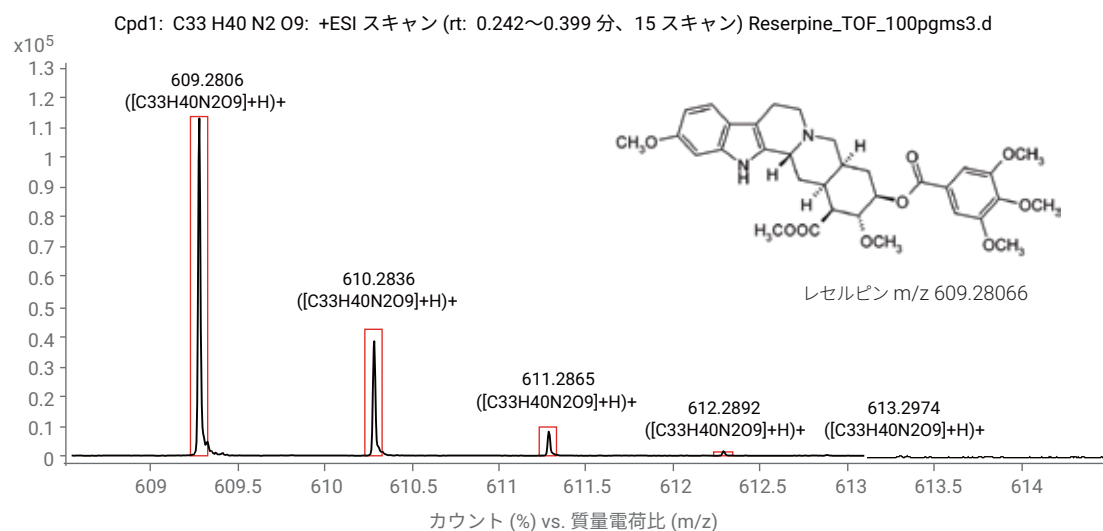
## UV 検出を上回る信頼性

All Ion モードによる測定によって、簡単にメソッドの設定や高度なデータ処理によって、ターゲット化合物をより確実に同定できます。

- 高い同位体比の再現性、高分解能、精密質量スペクトルによって、化合物推定の不確実性を低減
- 化合物の選択性が向上イオンソース CID 測定によって、スペクトルライブラリを用いた分子関連イオンおよびフラグメントイオン検索が可能
- Agilent Jet Stream 技術により、微量濃度の成分を高感度で検出

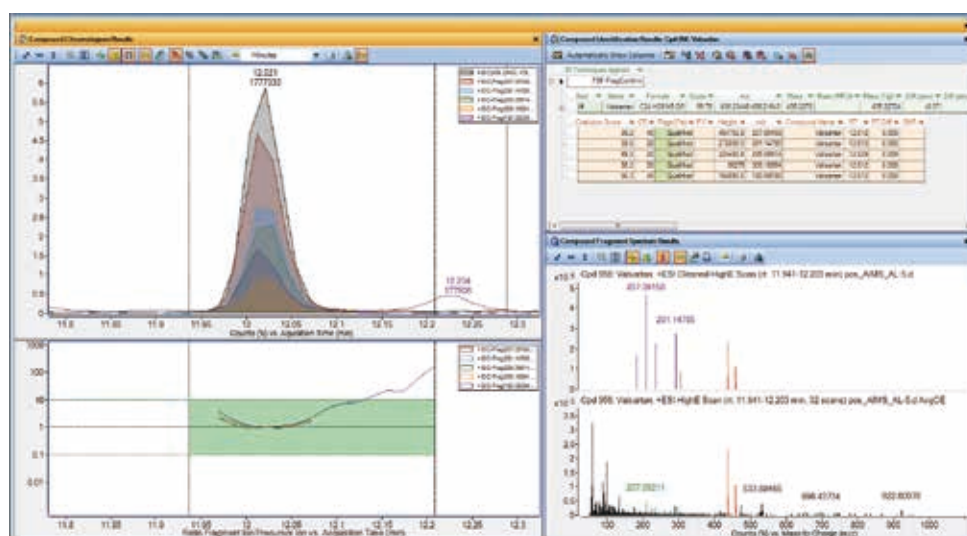
### C、H、N、O で構成される、分子量が 609.28066 m/z の理論上の化学式の数

| 質量精度 (mDa)    | 質量精度 (ppm) | 一致する組成式の数 | 質量分析技術                       |
|---------------|------------|-----------|------------------------------|
| 0.1005        | 165        | 209       | ノミナル質量 (四重極など)               |
| 0.0061        | 10         | 13        | ...                          |
| 0.0030        | 5          | 7         | ...                          |
| 0.0018        | 3          | 4         | ...                          |
| <b>0.0012</b> | <b>2</b>   | <b>2</b>  | <b>精密質量 (6230 LC/TOF など)</b> |



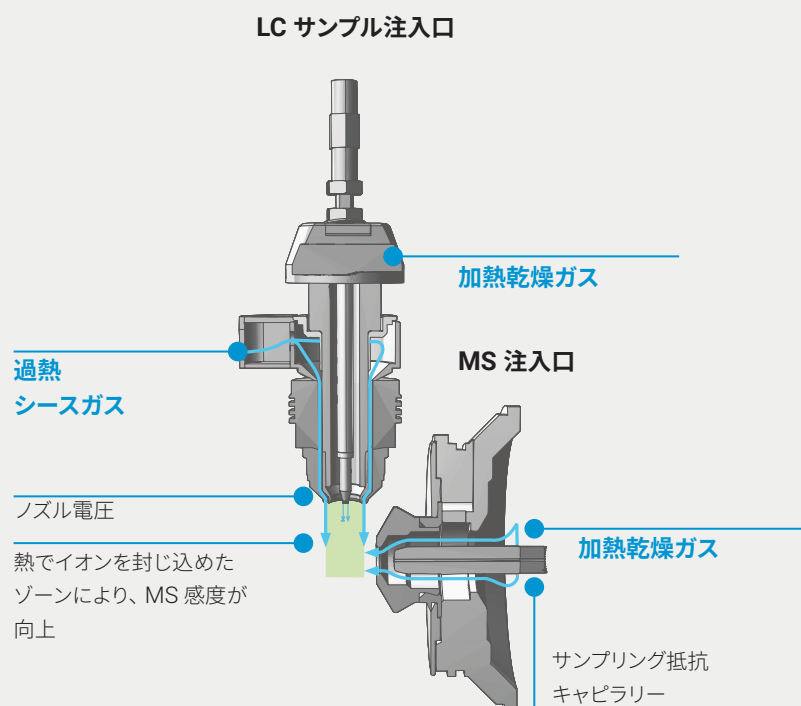
レセルピンの同位体比マッチング (C33H40N2O9)。赤い長方形は理論上の同位体アバンドンスと位置を示しています。

MassHunter Qualitative Analysis (定性分析) ソフトウェアでは、測定された質量精度、クロマトグラフィー共溶出、リテンションタイムなどの情報を、プリカーサおよびプロダクトイオンスペクトルが含まれる高分解能スペクトルライブラリと比較することで、確実な化合物推定が行えます。



## LC/MS の感度が 5 倍に向上

Agilent Jet Stream のサーマルフォーカシング技術により、エレクトロスプレー液滴の空間フォーカシングを高めることができ、LC/MS の感度を大幅に向上させます。フォーカス後のイオン密度と脱溶媒が促進され、MS シグナルの強度が上がり、結果として S/N 比が向上します。

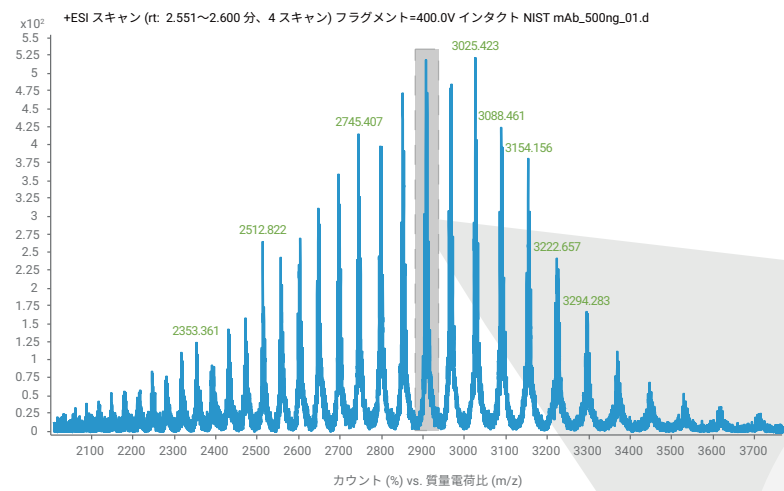




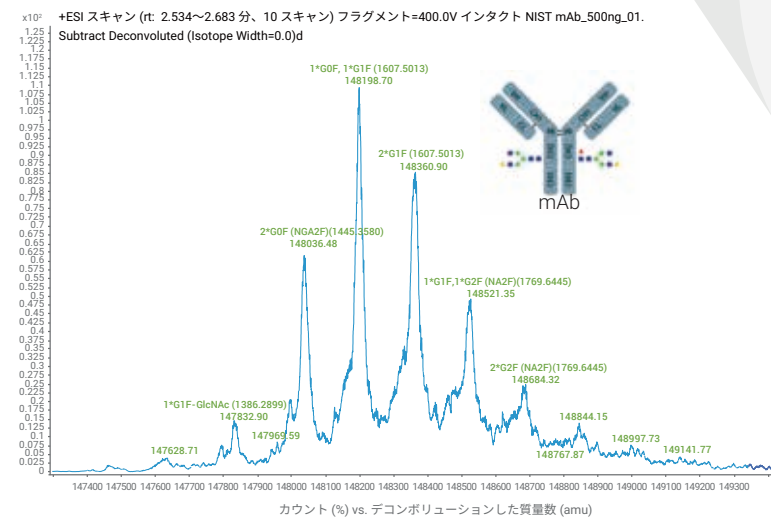
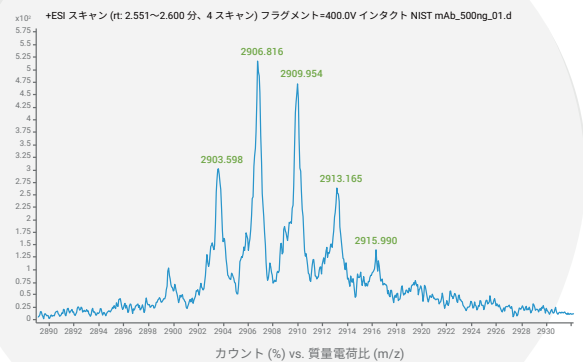
# 高分子にも低分子にも対応可能なシステム

高分解能の精密質量データをえられる Agilent 6230 LC/TOF システムなら、低分子化合物でも高分子生体化合物でも化合物推定が行えます。

- － MassHunter BioConfirm ソフトウェアと高真空・幅広い質量範囲の TOF によって、インタクトプロテインやその他の高分子を確実に検出
- － さまざまな種類のイオン源から選択することで、低分子の感度を最適化
- － 優れたスペクトル内ダイナミックレンジにより、共溶出が存在していても微量濃度の化合物を検出可能



これらの 3 つのスペクトルは、インタクト NIST mAb の最新の分析例を示します。TOF の高い真空によって、他の質量分析計の実用範囲を超える高分子でも、効率的に検出器まで移送できます。スペクトルを拡大すると、プロテオフォーム間の違いが明らかです。デコンボリュートしたスペクトルでも、この高い選択性が維持されています。

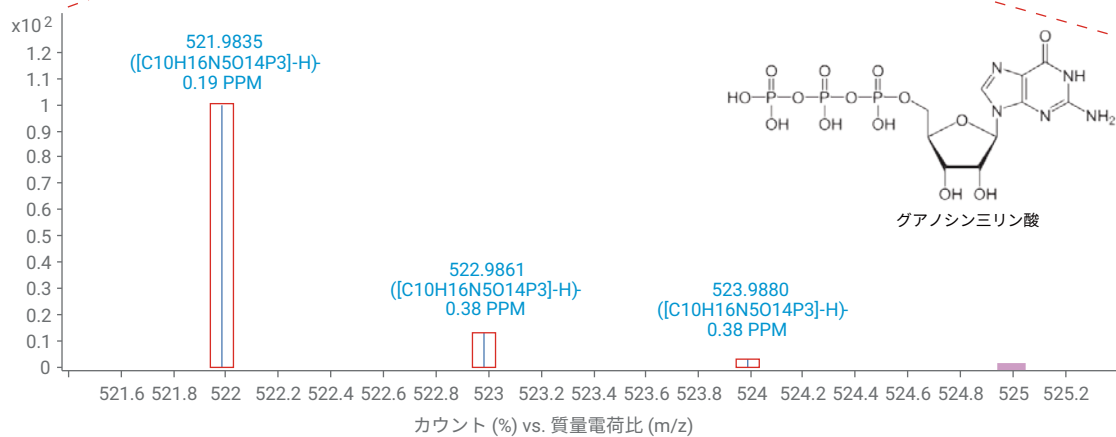
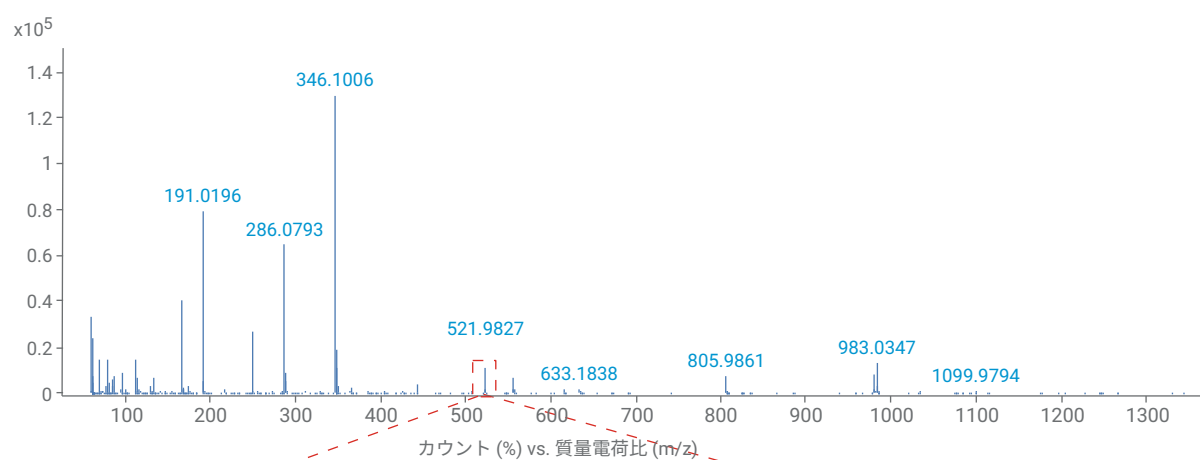




## 微量濃度の予想外の成分も検出可能

6230 LC/TOF では多様なイオン源を使用してさまざまな極性や質量の化合物を分析できるため、あるイオン源で検出限界付近の困難な化合物であっても、フルスペクトルで他のイオン源で検出できることもあります。

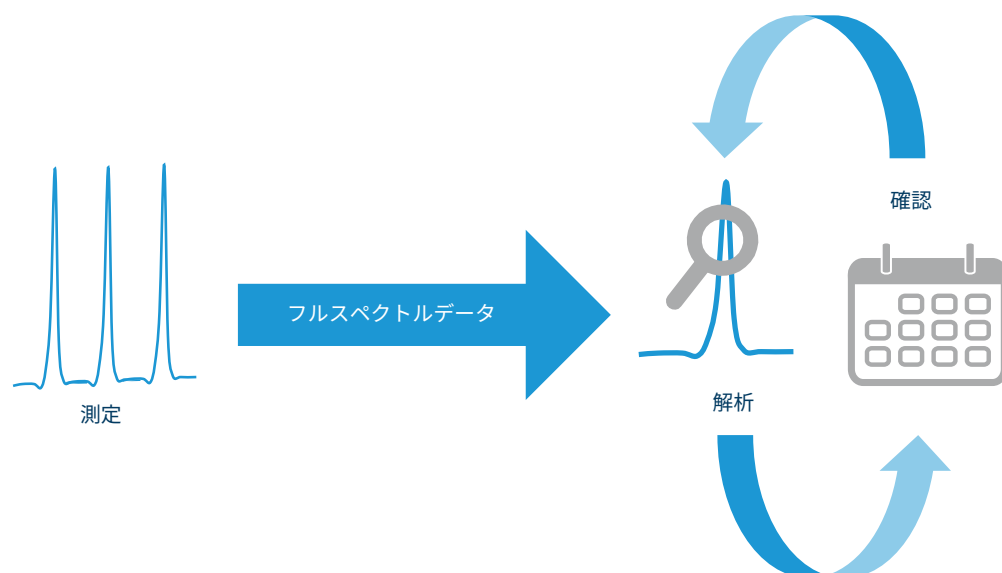
スペクトル内ダイナミックレンジが広いため、共溶出の条件でも微量成分の化合物の分子イオンとその同位体を正確に検出できます。



## 将来的な拡張性

6230 LC/TOF システムは他のアジレント機器と同様に、一貫性のある信頼性の高い測定結果をもたらします。

- － フルタイムのフルスペクトル採取によって、再注入をしなくてもレトロスペクティブ分析が可能
- － 高機能で柔軟性の高いプラットフォームであるため、将来の分析の要求事項に対応する技術的な進化にも対応
- － HPLC/UHPLC、SFC、CE、GC など、アジレントの最先端クロマトグラフィーシステムと組み合わせて、世界最高クラスの検出および分離性能を実現
- － 製造終了後も 10 年間の耐用年数、7 年間のサポート保証で装置に対する投資を保護



1 回注入すれば、フルスペクトルデータで測定を行うことができるため、必要に応じて再分析可能で、完全なレトロスペクティブ分析が行えます。

Agilent 6230 LC/TOF システムは、再分析なしでいつでもデータを確認することができます。

# Agilent InfinityLab LC シリーズシステム: Agilent 6230 LC/TOF システムに完全対応



## 1220 Infinity II LC

### 手頃な価格で効率化を実現

短期間での分析の効率化と最大限のコストパフォーマンスを実現する、高品質な一体型システムです。



## 1260 Infinity II LC

### 日々の分析作業を効率化

豊富なラインアップを取り揃えた信頼性の高いプラットフォームです。高い運用効率と信頼性により、日々のルーチン分析に適しています。



## 1290 Infinity II LC

### 高い効率のスタンダード

超高性能/効率の標準を打ち立てる次世代の液体クロマトグラフィー機器です。



### 誰でも簡単に LC/MS を使えるためのソフトウェア

**Agilent MassHunter Walkup** ソフトウェアはスキルレベルを問わず、自動化されたワークフローに従って LC および LC/MS 分析をルーチンで分析できます。必要な操作は、基本的なサンプル情報を入力し、メソッドを選択して、指示された LC のポジションにサンプルを配置するだけです。さらに、測定結果が自動的にメールで送信されます。



### プロテインのルーチン解析が可能

**Agilent MassHunter BioConfirm** ソフトウェアは、LC/MS または LC/MS/MS の精密質量データによって、高価な測定を実施する前に、分析対象物と異性体の確認を行うことができます。また、薬物抗体比 (DAR) カリキュレータにより、モノクローナル抗体などのバイオ医薬品を解析できます。

ホームページ

**[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**

**[email\\_japan@agilent.com](mailto: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。

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2018  
Printed in Japan, October 31, 2018  
5994-0207JAJP