

Agilent Ultivo トリプル四重極 LC/MS による 投資対効果、利益、生産性の向上

著者

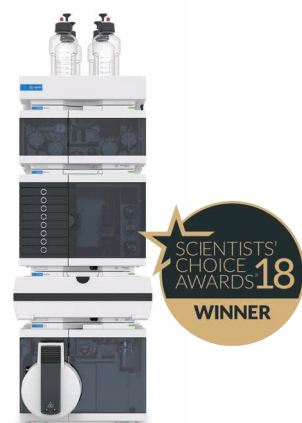
Patrick Batoon, PhD
Triple Quadrupole LC/MS
Product Manager
Agilent Technologies Inc.
Santa Clara, CA

はじめに

Agilent Ultivo トリプル四重極 LC/MS (Ultivo LC/TQ) は質量分析の可能性を広げる革新的な製品であり、LC/MS 分析の投資対効果 (ROI) を大幅に高めることができます。Ultivo は標準的なトリプル四重極の性能と機能を維持しながら、省スペース、使いやすさの向上、メンテナンスの簡便さを重視して設計されています。アジレントが独自に開発した革新的なハードウェアとソフトウェアを組み合わせることで、メンテナンスと導入を容易にし、スペース効率を向上させつつ、高い信頼性を維持することができます。*

このホワイトペーパーでは、ラボ運用における Ultivo LC/TQ の実用的な機能と利点について説明します。

*Agilent 6410、6420、6430、および 6460 トリプル四重極 LC/MS と比較した場合



ラボスペースの有効活用

コンパクトな形状と高いスループット

Ultivo LC/TQ の特筆すべき利点は、その驚くほどコンパクトなサイズです。Ultivo は従来の装置と比べて、ラボの占有スペースを最大 70 % 削減できます。そのため、限りあるラボのスペースで設置台数を増やしたり、サンプル前処理のスペースを拡張したりすることができます。

装置サイズ（表 1）を比較するために並べてみると、同等機能を持つ LC/TQ 1 台分のスペースに約 3 台の Ultivo を設置できます（図 1）。つまり、最大限のスループットが必要な場合には、すべての装置を同時に使用して分析すれば、生産性が 3 倍にできるということになります。

表 1. 同等の機能を持つ従来のトリプル四重極との大きさの比較

装置モデル	寸法 (高さ×奥行き×幅)	設置面積 (奥行き×幅)	設置寸法 (高さ×奥行き×幅)
Ultivo LC/TQ	32 × 88 × 39.5 cm	3,476 cm ²	111,232 cm ³
6410 LC/TQ	47 × 66 × 111 cm	7,326 cm ²	344,322 cm ³
6420 LC/TQ	47 × 66 × 111 cm	7,326 cm ²	344,322 cm ³
6430 LC/TQ	47 × 66 × 111 cm	7,326 cm ²	344,322 cm ³
6460 LC/TQ	48 × 66 × 111 cm	7,326 cm ²	351,648 cm ³

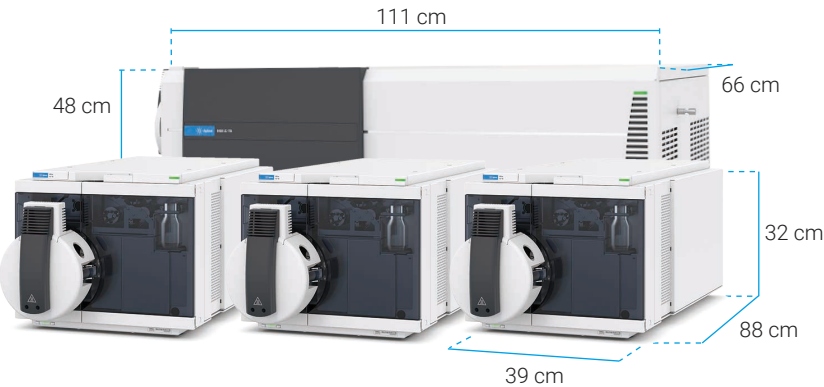


図 1. Ultivo と、同等の機能を持つ従来の Agilent トリプル四重極のサイズ比較

MSの上に積み重ね可能な LC モジュール

一般的な LC モジュールは、質量分析計の横や別のカート上に設置されるため、LC および MS 分析に必要な設置スペースが広がってしまいます。Ultivo はコンパクトな形状でありながらも安定性と強度を兼ね備えており、InfinityLab LC シリーズモジュールと縦に積み重ねて配置できます。LC モジュールを Ultivo の上に重ねて設置すれば、ベンチトップの面積は変わらずに、従来利用されていなかった MS 上の縦の空間を有効に活用できます (図 2)。



図 2. InfinityLab フレックスベンチ MS に設置された Ultivo と 1260 Infinity II Prime LC システム

InfinityLab フレックスベンチ MS による移動性とメンテナンス性の向上

分析システム (Ultivo + LC) をラボ内で頻繁に移動したい場合は、InfinityLab フレックスベンチ MS (G6015A/G6015B) の利用をお勧めします。InfinityLab フレックスベンチ MS (図 3) なら、LC モジュール (高圧ポンプ、オートサンブラ、サーマルカラムコンパートメント、溶媒トレイ) と Ultivo を可動ユニットにシームレスにまとめて搭載できます。LC/MS 機能の使用頻度が低い場合や、1 台の可動ユニットでラボを運用したい場合は、装置をラボ内で移動できると便利です。

InfinityLab フレックスベンチ MS のもう 1 つの特長は、収納可能な底部のトレイです (図 4)。このトレイは Ultivo を手前側にスライドできるため、メンテナンスや修理がすばやく行えます。Ultivo 本体のほとんどの修理やメンテナンスは、上部からではなく Ultivo のサイドパネルから簡単に実行できるように、アクセス性を考えて設計されています。Ultivo をフレックスベンチから引き出すことで、フィールドサービスエンジニアが動きやすく、すばやく簡単に作業できるため、ダウンタイムを短縮できます。



図 3. InfinityLab フレックスベンチ MS に設置された Ultivo と 1260 Infinity II Prime LC システム



図 4. Ultivo を簡単に引き出せる InfinityLab フレックスベンチ MS の底部トレイ

装置のメンテナンスコストの削減

VacShield によるベント不要なイオンインジェクタ・キャピラリのメンテナンス

装置の感度低下の多くは、大気圧サンプル導入部分でマトリックス成分が蓄積することが原因です。この蓄積による影響を最も受けやすいのは、大気圧から質量分析計の高真空へ脱溶媒をしたイオンを導くことを促進するイオンインジェクタ・キャピリです。従来は、イオンインジェクタ・キャピリを取り外して洗浄するのにシステムの真空開放が必要であり、数時間かけて多くの手順を実施する必要がありました。

Ultivo では VacShield によって装置シャットダウンと大気解放なしでインジェクタ・キャピリを簡単に取り外し、洗浄することができます（図 5）。キャピリを取り外すときはシーリングメカニズムが自動的に作動するため、ユーザーは単にキャピリを引き抜くだけです。装置は必要な温度と真空レベルを維持したまま「スタンバイ」状態となるため、すぐに使用を開始できます。

イオンインジェクタを取り外して数分間超音波処理するだけで、蓄積したマトリックス堆積物を除去できます。洗浄が完了したらイオンインジェクタ・キャピリを再度挿入するだけで、作業を続行できます。この機能によって、最大 14 時間かかっていたメンテナンス手順を約 30 分まで大幅に短縮できます（表 2）。このメンテナンスプロセスは初心者でも簡単に実行できます。

SWARM 手法によるスケジュールオートチューンとチェックチューン

Ultivo には SWARM チューンとスケジュールオートチューンという 2 つの独自のチューニング機能が追加されているため、他の装置より迅速に使用を開始できます。

- SWARM は LC/Q-TOF プラットフォームではじめて実装された手法であり、堅牢な多次元統計アプローチにより、MS 内部の各部分のパラメータの最適化と設定にかかる時間を大幅に短縮できます。**装置のオートチューン時間を、最大 40 分から 15 分に短縮できます。**
- スケジュールオートチューンとチェックチューンにより、チューン機能を定期的に実行できます。図 6 を参照してください。チューン機能のスケジュールを設定すれば、ユーザーが操作しなくても自動的にチューニングが実行されます。このため週の初めや長いシーケンス分析の終了時でも、すぐに装置の使用を開始できます。

表 2. キャピラリを取り外しと洗浄メンテナンスの概算時間

手順	VacShield なし	VacShield あり
冷却時間	15 分	不要
MS の真空解放とエア漏れ	15 分	不要
イオンインジェクタ・キャピラリの取り外しと洗浄	20 分	20 分
電源オンとポンプダウン	300 分（5 時間）	不要
装置のチェックチューンまたはオートチューン	8 分（チェックチューン） 15 分（オートチューン）	8 分（チェックチューン） 15 分（オートチューン）
合計時間	358 ~ 365 分 (5.9 ~ 6.1 時間)	28 ~ 35 分



図 5. VacShield メカニズムの使用

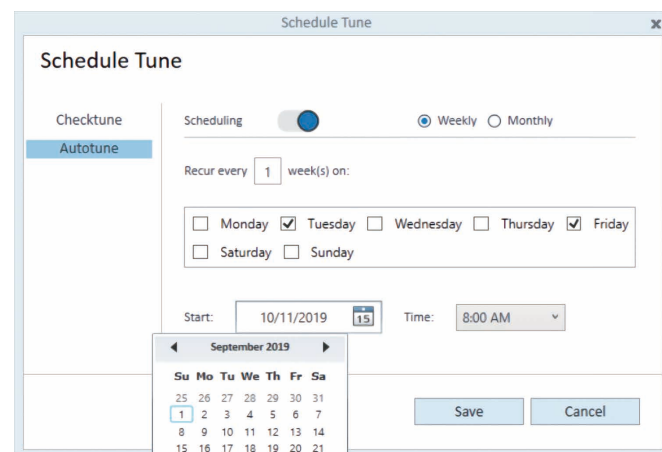


図 6. スケジュール Tune ウィンドウのプレビュー

アーリーメンテナンスフィードバック機能 (EMF) による迅速なメンテナンス

サンプルの分析時間が重要な組織にとっては特に、予定外のダウンタイムはラボの運用に大きく影響します。Ultivo では、MS に内蔵された多くのセンサーとカウンタからのフィードバックがアーリーメンテナンスフィードバック (EMF) ウィンドウに表示されます (図 7)。スマートフォンのバッテリー表示のように、このウィンドウでは Ultivo の状態をリアルタイムで確認できます。それにより、発生しうる潜在的な問題と故障が起こる可能性のある場所と必要なメンテナンスを、トラブルが発生する前にユーザーは把握できます。

メソッド開発とデータ解析のコストの削減

MRM オプティマイザによるトリプル四重極メソッドの開発

MRM オプティマイザ (図 8) は、メソッドの新規開発や既存メソッドの最適化に役立つ高機能な半自動化ツールです。このソフトウェアでは、目的サンプルの MRM トランジションや最適なパラメータを迅速に設定できます。

目的化合物の分子式とプロダクトイオン数を入力すれば、各種のプリカーサイオン、プロダクトイオン、MRM トランジション、コリジョンエネルギー、およびフラグメント電圧を調べるワークリストが作成されます。化合物の MRM 条件が最適化されると、その結果はレポートに出力され、ユーザーの MRM データベースとしても保存されます。最適化の結果は MRM データベースから分析メソッドに直接インポートすることができます。

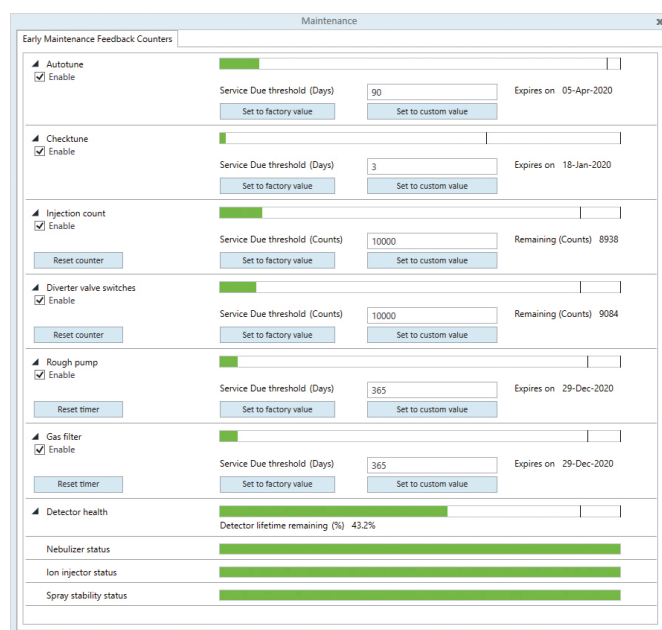


図 7. EMF カウンタのプレビュー

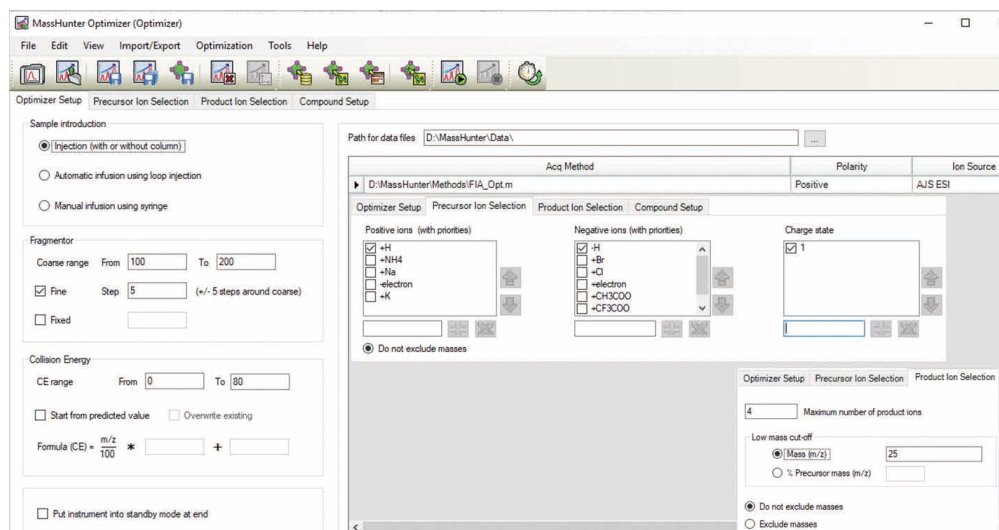


図 8. MassHunter Optimizer の各種機能のスクリーンショット

tMRM データベースからの最適化済 MRM トランジションのインポート

トリプル四重極のメソッド開発では、ターゲット成分に適したプリカーサイオンとプロダクトイオンの MRM トランジションの最適化に時間がかかります。アジレントは特定のアプリケーション向けにエキスパートが精査した化合物の tMRM データベースを利用するため、一からメソッドを開発する必要はありません。

- ー 農薬 (G1733CA)
- ー 法中毒学 (G1734CA)
- ー 動物用医薬品 (G1735CA)
- ー メタボロミクス (G6412AA)

各 tMRM データベースには、推奨される主要な MRM トランジションと、より幅広い化合物の特性に合わせた二次的なトランジションが含まれます。データベースは MassHunter データ測定ソフトウェアにシームレスに統合されており、測定メソッドに直接インポートできます。また、データベースの情報を元にして、調整や確認を行う場合、MRM オプティマイザによってフラグメントおよびコリジョンエネルギー電圧をさらに最適化することができます。

Source Optimizer による適切な最適化メソッドの構築

一般的に LC/MS においてイオン源の設定条件の最適化はメソッド最適化の最終ステップと見なされており、手作業では非常に時間がかかります。ヒーターパラメータについては、取り込みを行う前にイオン源全体を平衡化するための待ち時間が必要です。Source Optimizer (図 9) を使用することで、すべてのソースパラメータの最適化でパラメータを振る範囲とステップサイズを設定することができます。準備ができると、適切な熱平衡化時間のメソッドシーケンスが作成され、各温度ステップで温度平衡化時間が自動で挿入されます。このため、イオン源パラメータ最適化のシーケンスを夜間に実行することで、ソースパラメータが適切に平衡化された状態での最適化を翌朝までに完了することができます。

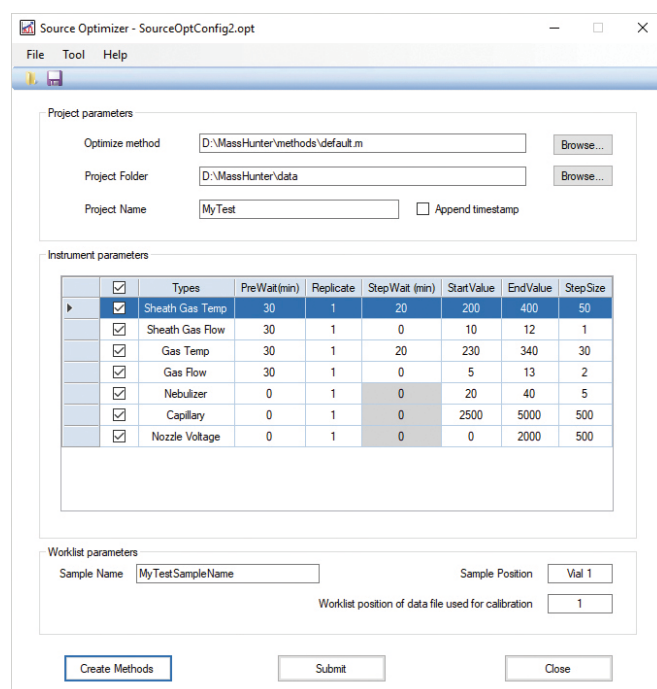


図 9. Source Optimizer アプリケーションのプレビュー

データ解析効率の向上

Quant-My-Way によるフォーカスされたユーザーインターフェース

MassHunter 定量分析ソフトウェアには、Agilent トリプル四重極 LC/MS の定量分析に必要な機能がまとめて搭載されています。熟練したエキスパートユーザーなら、このツールのあらゆる機能を自由に選択して利用できます。ただし、それらすべての機能を利用することは初心者にとって困難であり、混乱を招く場合もあります。Quant-My-Way では、エキスパートユーザーがユーザーインターフェースを簡素化して、ラボのオペレータにとって特に重要な機能だけを表示することができます (図 10)。必要な機能のみに絞ることで、ユーザーの効率性と生産性を高めることができます。

結論

ラボ全体の成功を目指すならば、感度や性能以外にも考慮すべき要素があります。高いサンプルスループットで優れた結果を得るには、ラボのスペース/規模、移動性、使いやすさ、メンテナンス頻度、ワークフロー支援ツールなどの要素が重要になります。Ultivo LC/TQ はこれらの要素を重視して設計されており、小さく高機能なパッケージで高性能、堅牢性、コンパクトな形状、移動性、使いやすさ、メンテナンスのしやすさをすべて実現しています。数々の受賞歴が示すとおり、Ultivo トリプル四重極 LC/MS はコンパクトさと高性能を両立し、革新的機能を備えた製品です。

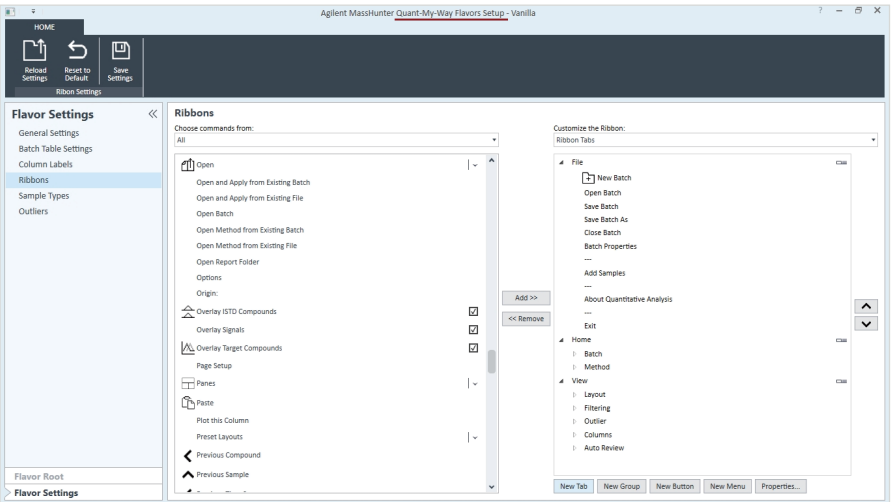
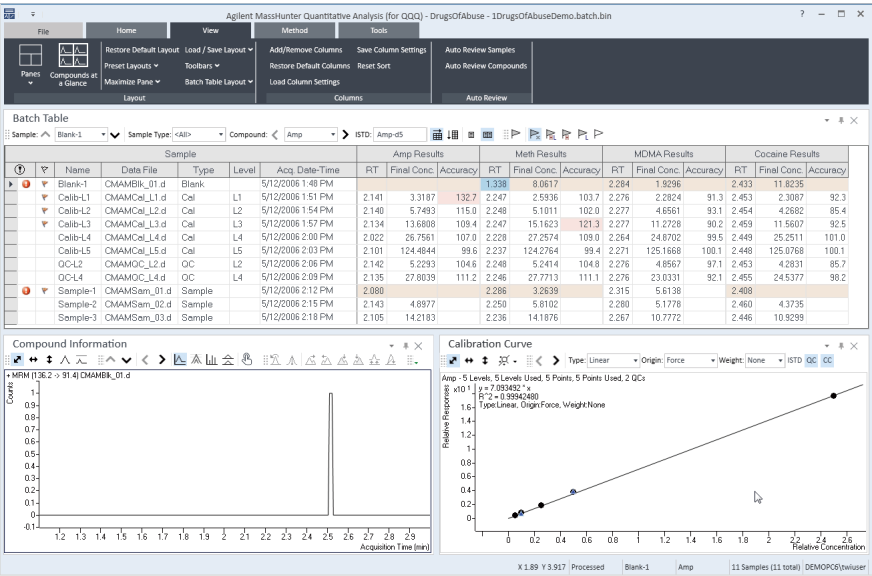


図 10. MassHunter Quant-My-Way のプレビュー。定量分析用にソフトウェア上部のリボンをカスタマイズできます。

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。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2020
Printed in Japan, April 1, 2020
5994-1857JAJP
DE.5177893518