

# 統合 OpenLab CDS システムによる 高分解能質量分析のデータ取り込み

## 著者

Ruojing Luo, Ph.D. and  
Ailin Li, Ph.D.  
Agilent Technologies, Inc.

## 概要

高分解能質量分析 (HRMS) は、精度、再現性、コンプライアンスが絶対条件となるバイオ医薬品業界において、開発の後期段階や QA/QC ラボにとって非常に重要な機能です。Agilent OpenLab CDS ソフトウェアの最新リリース (バージョン 3.0) は、その対象範囲を拡大して、Agilent 液体クロマトグラフィー / 飛行時間型 (LC/TOF) および液体クロマトグラフィー / 四重極飛行時間型 (LC/Q-TOF) 質量分析 (MS) 機器をサポートすることにより、クロマトグラフィーと質量分析の両方のワークフローを単一の一体型プラットフォームに統合します。

OpenLab CDS は、クロマトグラフィーと MS の両方のデータ取り込みを統合して、一貫したデータフォーマットを備えた、使いやすく習得しやすい標準化されたユーザーエクスペリエンスを提供することにより、トレーニングの必要性を低減して、操作ミスを最小限に抑えます<sup>1</sup>。拡張可能なクライアントサーバーアーキテクチャにより、一元管理、安全なデータアクセス、および拠点が異なるチーム間でのシームレスなコラボレーションが保証されます。

この技術概要では、OpenLab エコシステムの一般的な利点を説明するとともに、エコシステム内で高分解能質量分析を実施する新機能をご紹介します。これには次の内容が含まれます。

- 性能の最適化とダウンタイムの短縮を実現する、設定済みの定期的な機器チューニング。
- 幅広いターゲットおよびノンターゲットの分析戦略を支援する、7種類の取り込みモード。
- 堅牢なシグナルバッファサービスによる、複数のクライアントでのリアルタイムのスペクトル表示。
- ワークフローの柔軟性を向上させるための、新しいタスクアクションおよび待機アクションを備えた高度なシーケンス管理。
- サンプルカスタムパラメータ、自動データ解析、自動エラー処理、スナップショット表示、バッチデータ再処理など、取り込みから解析までを統合したツール。

## OpenLab エコシステム

OpenLab CDS は、GC、GC/MSD、LC、LC/MSD、さらに新しい LC/TOF および LC/Q-TOF に対して単一のソフトウェアプラットフォームを提供することで、特定のクロマトグラフィーおよび MS ワークフロー全体において、一貫したユーザーエクスペリエンスを保証します (図 1)。この包括的なソリューションは、ラボのライフサイクル全体をサポートします。

- 機器およびユーザー管理
- データ取り込み、解析、レポート作成
- 高度なデータインテグリティ管理機能を備えた、一元化されたデータ管理

組み込みのコンプライアンス機能により、データインテグリティとセキュリティの保護、ロールベースのアクセスの管理、データ作成の全ステップの追跡、および監査証跡のレビューの効率化が可能になり、厳格な規制要件に適合できます<sup>2</sup>。

## クライアントサーバー構成

OpenLab CDS クライアントサーバー構成 (図 2) は、単一のワークステーション配置とは異なり、機器、ワークステーション、およびユーザーを統合された環境に接続することにより、以下の機能を提供します<sup>3</sup>。

- 安全でネットワーク接続されたサーバーを介して、データを一元的に保存および共有。
- ユーザー、ロール、および機器の構成の一元管理を実現。
- メソッド、シーケンス、およびテンプレートを一元管理。
- 柔軟でハイブリッドな作業形態を実現するためのリモートアクセスを提供。
- 拠点が異なるチーム間のリアルタイムのコラボレーションをサポート。
- 進行中の取り込みおよび機器のステータスの一元的なモニタリングを支援。

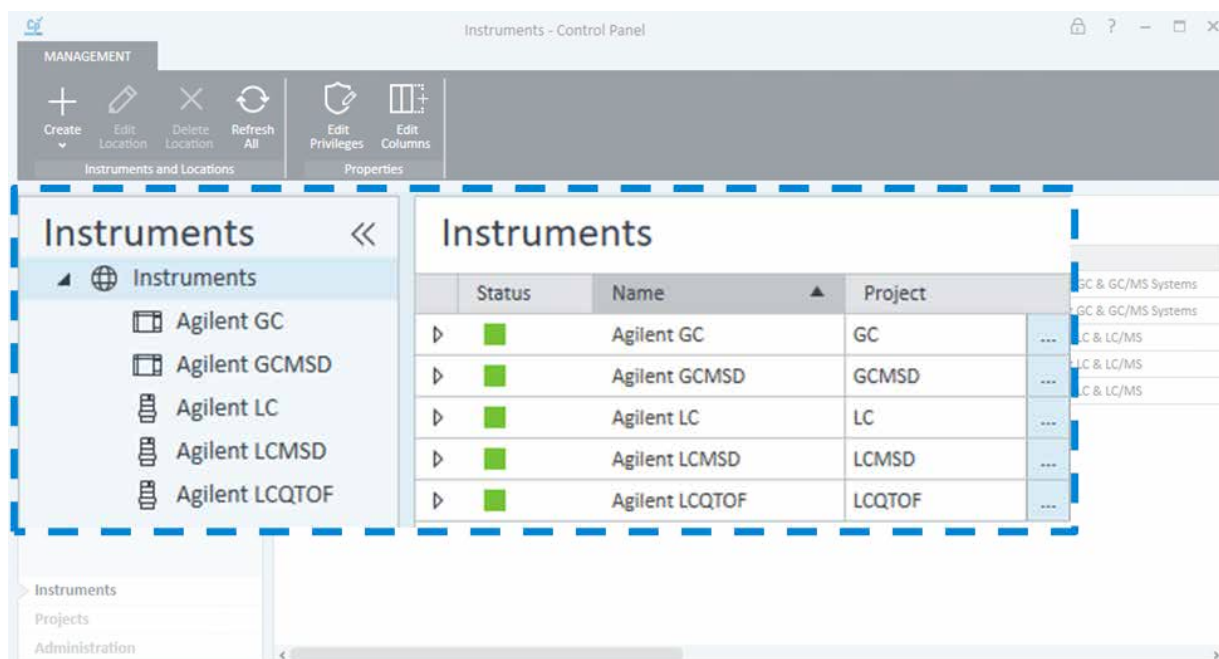


図 1. OpenLab CDS ソフトウェアで設定された機器

高度な機能として、バリデーション済みの取り込みメソッド、タンパク質またはオリゴヌクレオチドの配列、および化学データディレクトリの一元的な共有が含まれており、すべての分析者が信頼できる 1 つの情報源に基づいて確実に作業できます。

OpenLab CDS クライアントサーバー配置では、サーバー接続が一時的に中断された場合でも、機器がデータ取り込みを継続して実行し、新しい分析タスクを送信する機能（つまり、LC/(Q-)TOF のフェールオーバー）により、オペレーショナルレジリエンスも確保しています（図 3）。

**注記：** LC/TOF および LC/Q-TOF の場合、フェールオーバーモードでは自動データ解析は利用できません。LC/TOF および LC/Q-TOF 以外の機器におけるこのモードの詳細については、対応するユーザーガイドを参照してください<sup>4</sup>。

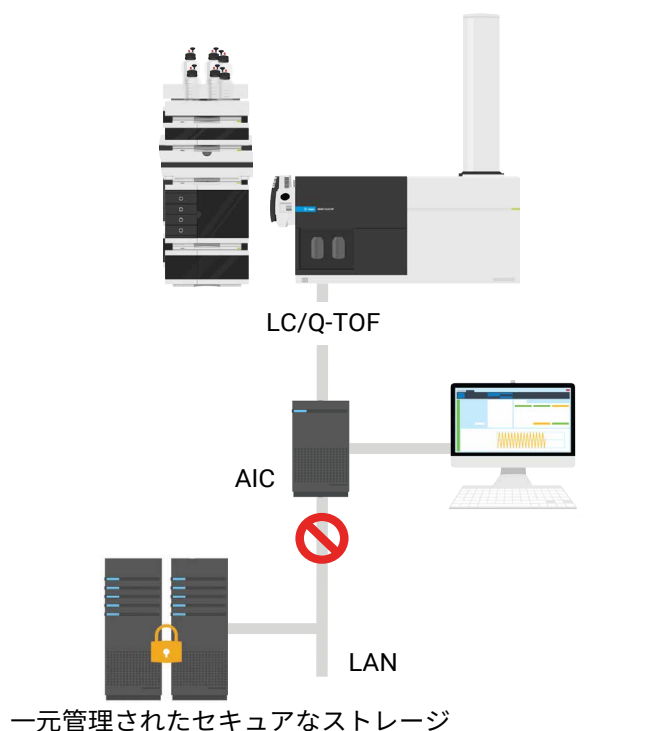


図 3. フェールオーバーモードの大まかなスキーマ（図 2 に示す通常の操作と比較した場合）

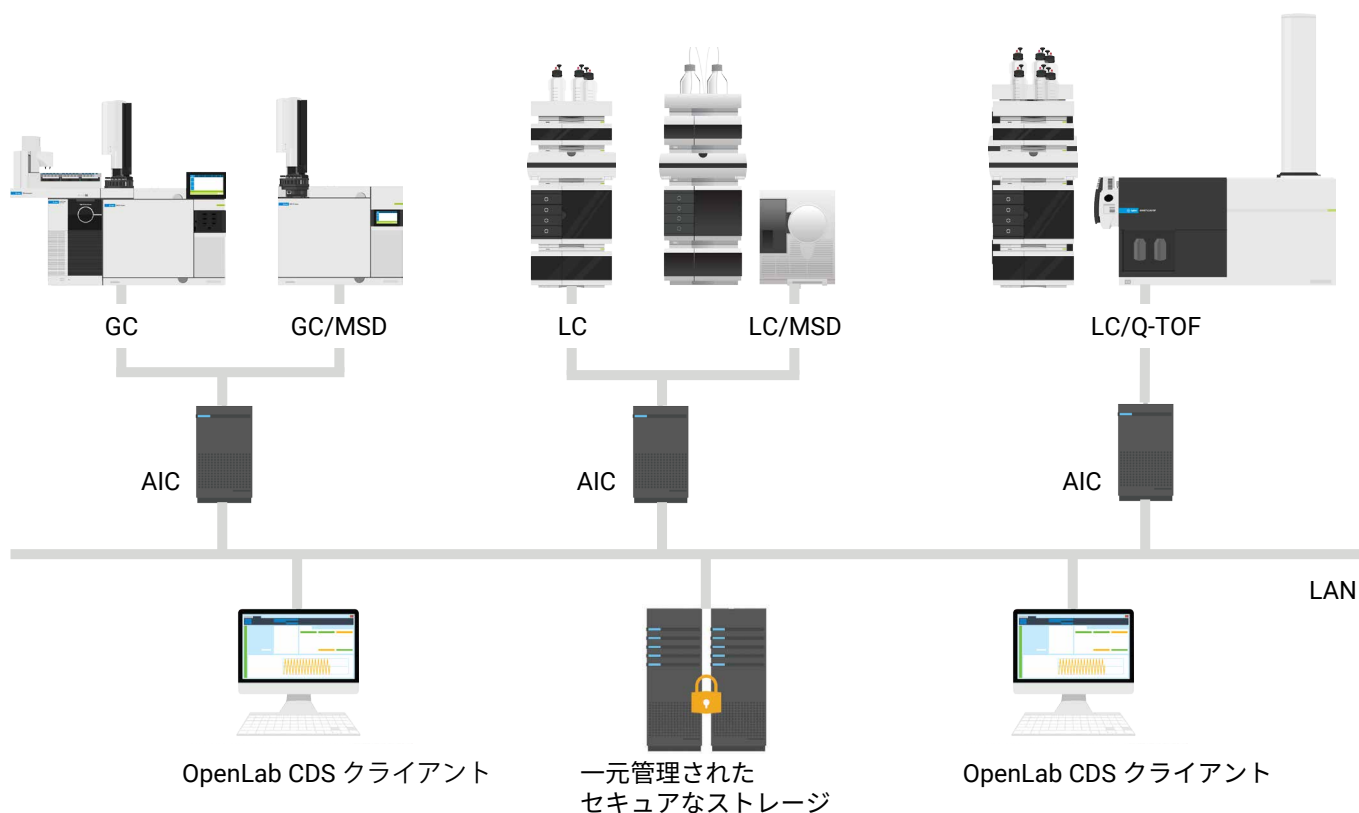


図 2. ラボ間で異なる機器を接続する、クライアントサーバー構成

## OpenLab CDS での LC/(Q-)TOF の使用

OpenLab CDS で LC/(Q-)TOF を使用するには、以下の機能を含む、最新の取り込み機能を利用できます。

- 機器のステータスの表示。
- アプリケーションベースの LC/(Q-)TOF のチューニングおよびキャリブレーションの実行。
- 機器の取り込みパラメータの編集。
- 分析用サンプルのサブミット。
- MassHunter Qualitative Analysis、MassHunter BioConfirm (オプション)、または MAM for OpenLab CDS (オプション) によるデータの自動処理。

図 4 に、ステータス情報、リアルタイムのクロマトグラム (シグナル) とスペクトル表示、および機器のランキューなどを含むシステム全体の一部である LC/(Q-)TOF を示します。

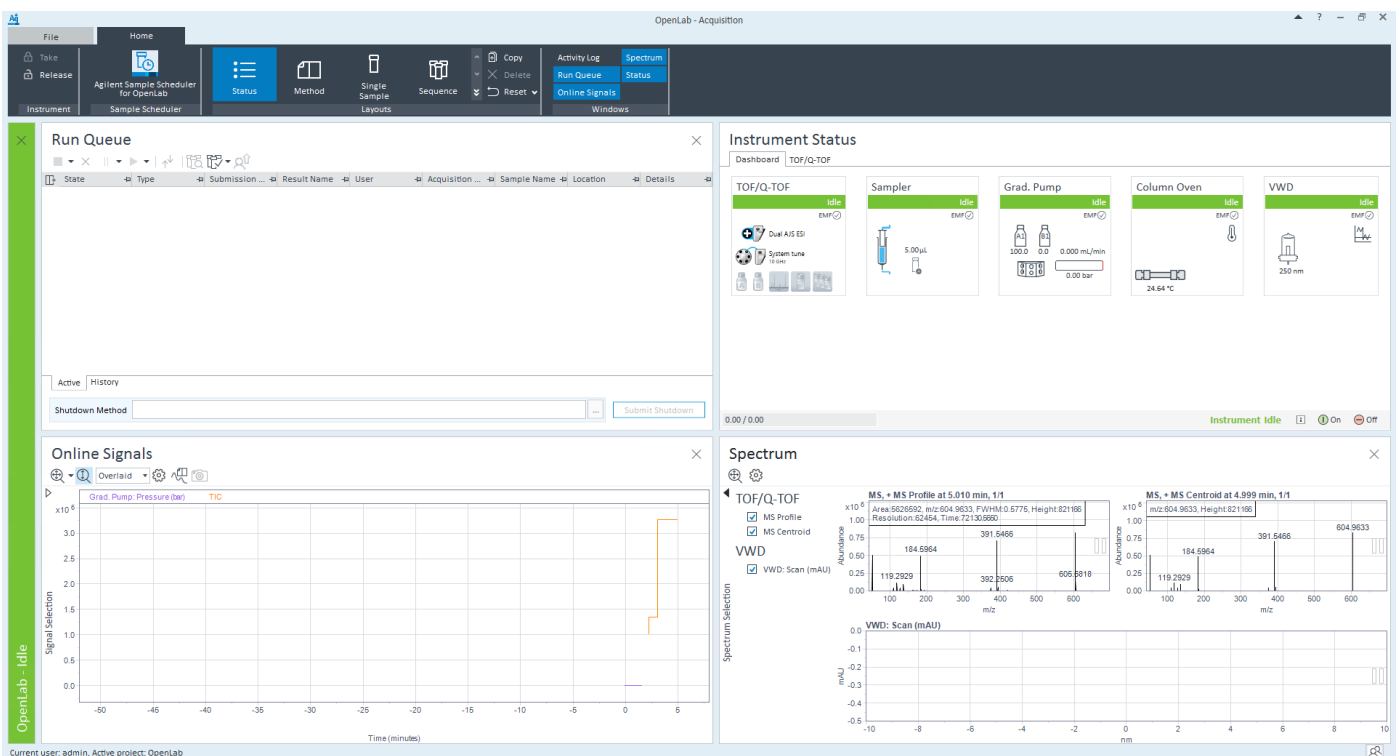


図 4. OpenLab CDS での LC/Q-TOF - ステータスのレイアウト

## LC/(Q-)TOF のステータス

OpenLab CDS では、LC/(Q-)TOF により、機器のステータスを包括的に可視化できるほか、機器をエコスタンバイモードに切り替えたり、キャリブレーションフローを管理したりするなど、特定の機能を直接制御することができます (図 5)。

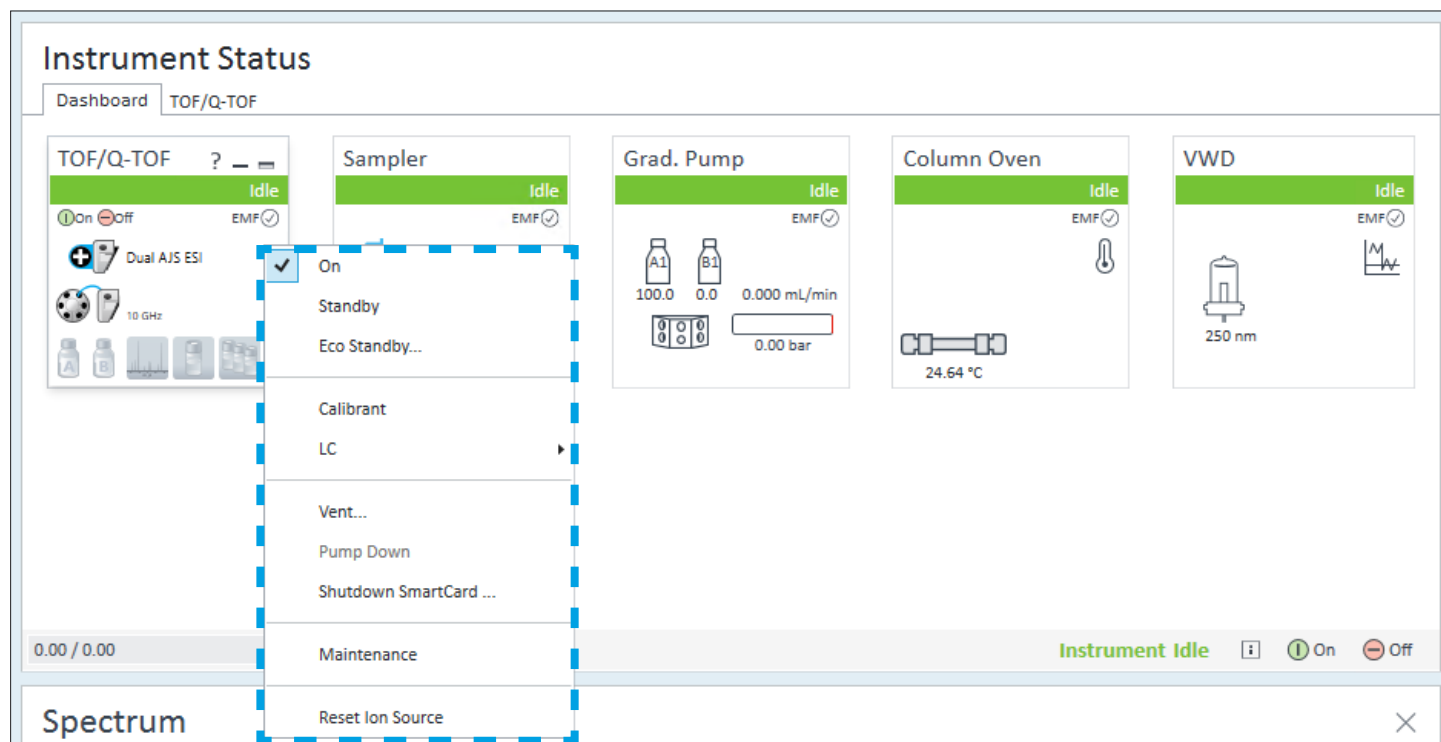


図 5. LC/(Q-)TOF 機器を示す、OpenLab CDS 機器のステータスウィンドウ

## リアルタイムのデータ表示

クライアントサーバー構成では、複数のクライアントが、スペクトルウィンドウでの取り込み性能に影響を与えることなく、実際の HRMS スペクトルを個別に表示、拡大、および調整することができます。また、クライアントは、オンラインシグナルウィンドウにおいて、トータルイオンクロマトグラム (TIC) やポンプ圧力など、その他の機器シグナルを表示することもできます。異なるクライアントウィンドウから同じ分析を表示している 2 名のユーザーは、HRMS スペクトル表示を個別に制御することができます (図 6)。

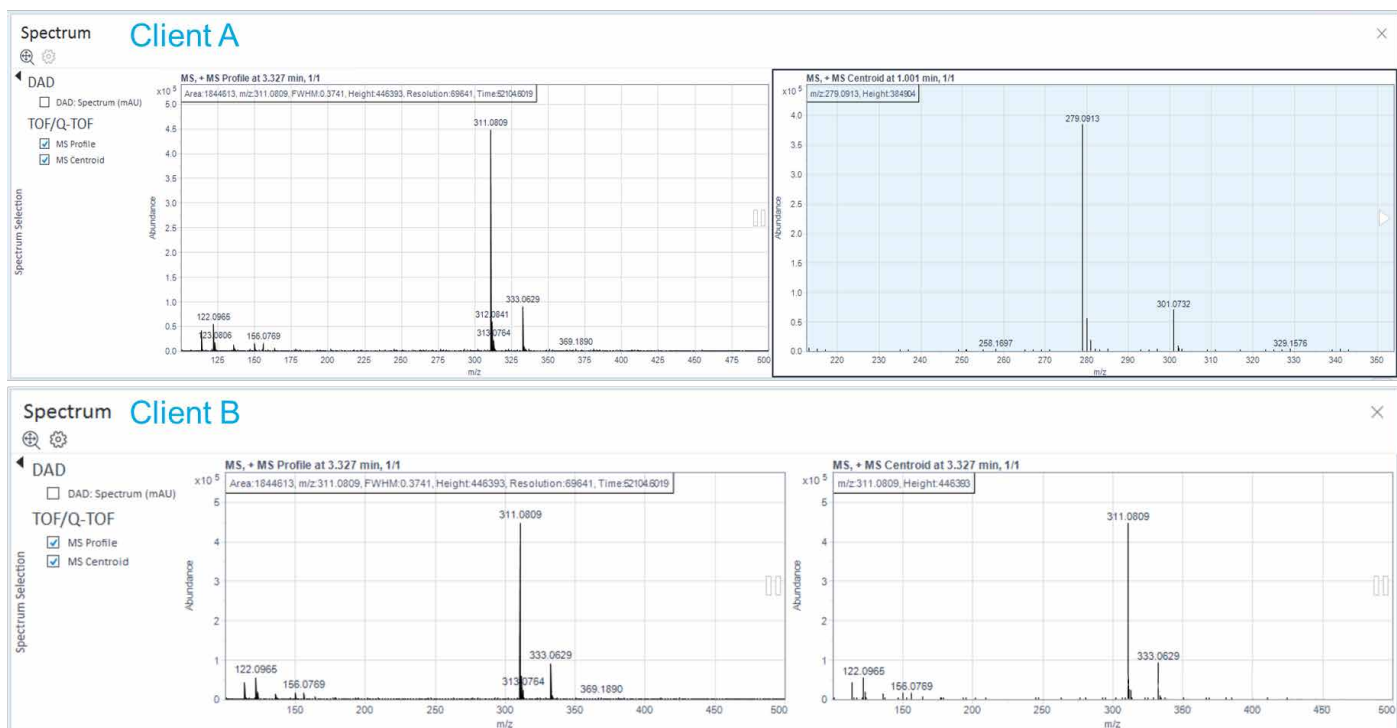


図 6. クライアント A (上) とクライアント B (下) から同時に取り込まれた、分析中のサンプルのリアルタイム質量スペクトル。クライアント A では、セントロイドスペクトルで一時的に拡大しているのに対し、クライアント B では、スペクトル全体を引き続きリアルタイムで表示しています。

## アプリケーションベースの最適化された機器チューニング

LC/Q-TOF 機器では、特に設置、メンテナンス、ポンプダウン、または再起動の後、最適な性能を実現するために精密なチューニングが必要になります。OpenLab CDS は、取り込みソフトウェアで次の複数のチューニングオプションを提供します。

- 完全な自動最適化のためのオートチューン。
- 迅速で正確な質量割り当てを保証する質量補正。
- 極性（ポジティブ/ネガティブ）や  $m/z$  範囲など、アプリケーション固有の設定を選択するためのチューニングの設定。
- エキスパートレベルの性能調整を実施するための高度なチューニング。
- トラブルシューティングや性能評価のための診断チューニング。

アプリケーションベースで設定済みのチューニングとスケジューリング機能（Agilent Revident LC/Q-TOF で利用可能）を組み合わせることにより、図 7 に示すように、ラボではユーザー間で一貫性を維持しながら、ダウンタイムを最小限に抑えて性能を最適化することができます。また、これにより、ラボマネージャは、さまざまなレベルの権限を持つすべてのユーザーに対して、機器を適切に設定することができます。

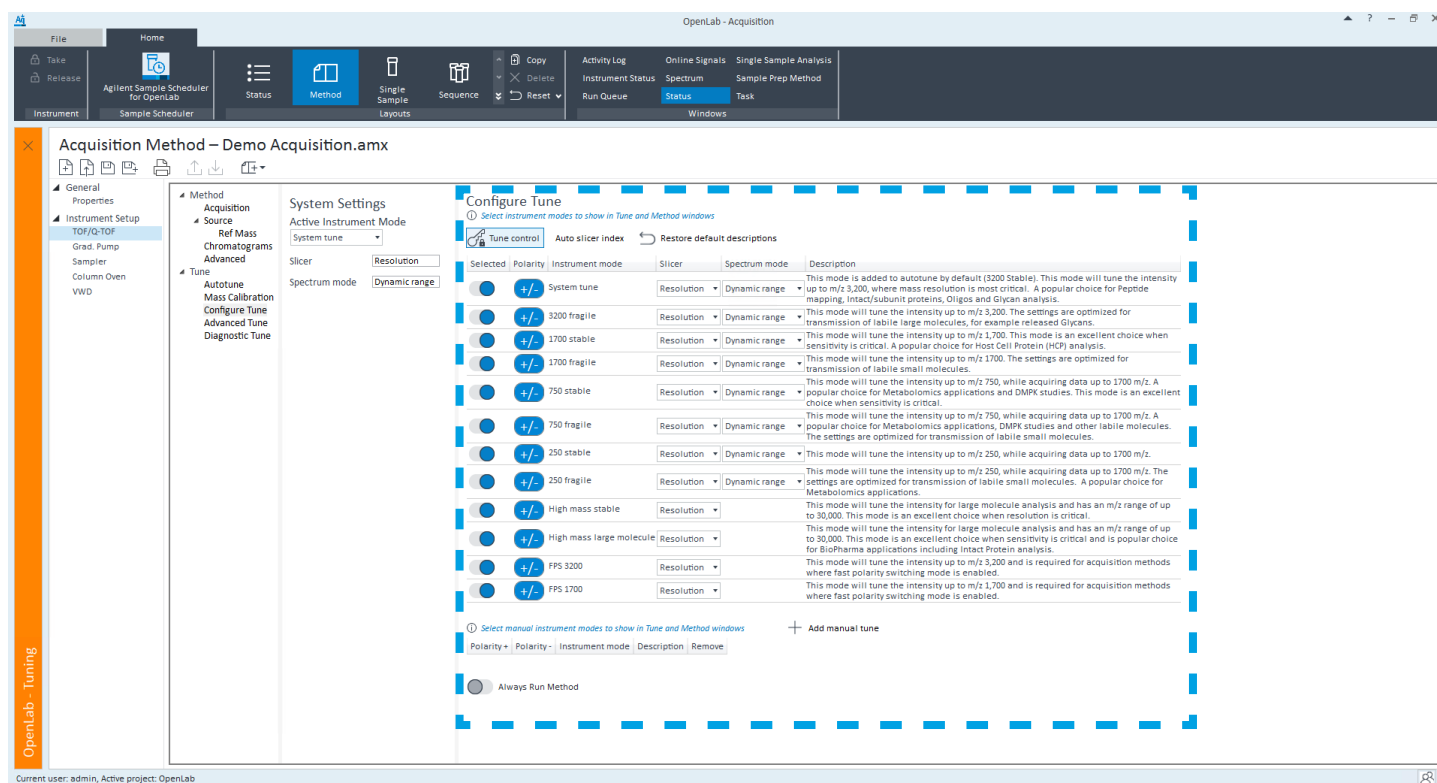


図 7. Agilent LC/Q-TOF 機器のチューニングオプション

## サポートされる取り込みモード

OpenLab CDS の LC/(Q)-TOF は、多様な分析ワークフローに合わせて調整された 7 種類の取り込みモードをサポートしています。

- **MS** : イオン単離なしのフルスペクトル取り込み
- **高速極性切り替え** : 極性を迅速に切り替えるためのレジスティブキャピラリで利用可能

LC/Q-TOF のみ :

- **すべてのイオン** : 四重極単離なしで、定義されたコリジョンエネルギーにおいて、すべてのフラグメントイオンを収集
- **Quadrupole Resolved All Ions (Q-RAI)** : 広い  $m/z$  バンドを単離することにより、レトロスペクティブ分析を可能にし、共溶出フラグメントからのノイズを低減 (ハードウェアに依存)

- **Auto MS/MS** : MS と MS/MS を交互に実施するデータ依存型取り込みにより、プリカーサイオンを動的に選択
- **Directed MS/MS** : データ依存型で、推奨イオンリストに限定
- **ターゲット MS/MS** : 特定のイオンに対する、ユーザー定義の再現性の高い単離およびフラグメンテーション

これらは、探索的アプリケーションと高度にターゲットを絞ったアプリケーションの両方に対応しており、分析者は変化するプロジェクト要件に柔軟に適応することができます。高速極性切り替えモードを除くすべてのモードを図 9 に示します。高速極性切り替えモードは、イオン源にレジスティブキャピラリが取り付けられている場合のみ利用可能です。

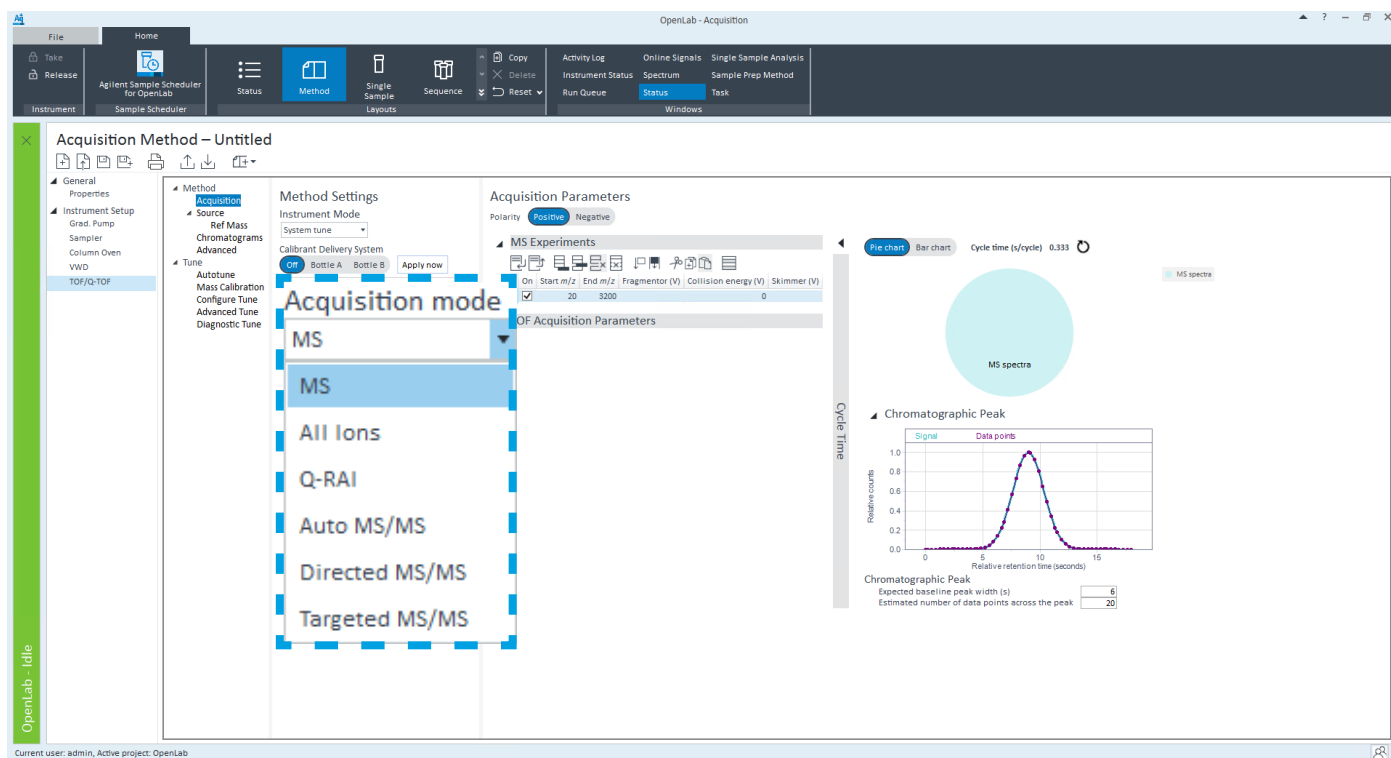


図 8. Agilent LC/Q-TOF 機器の取り込みモード

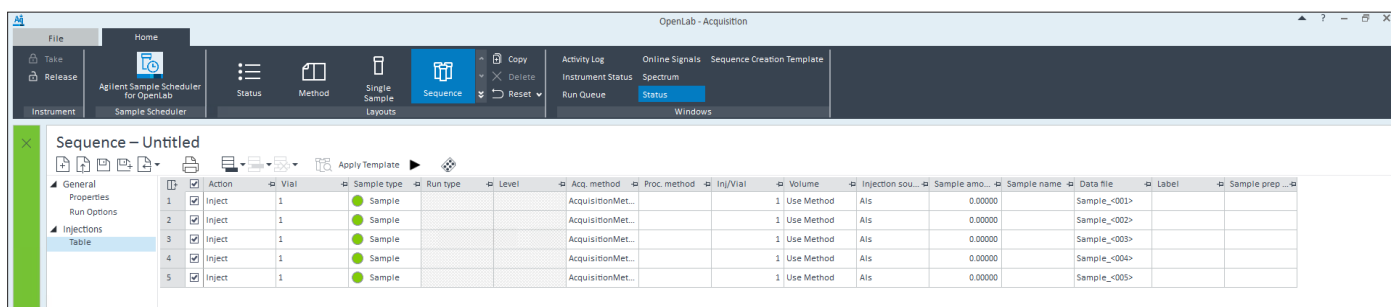


図 9. OpenLab CDS シーケンステーブル

## データの取り込み

OpenLab CDS は、Agilent LC、GC、シングル四重極 LC/MSD、GC/MSD 機器、および LC/(Q-)TOF を制御するための単一のユーザーインターフェースを提供します。OpenLab CDS シーケンステーブル(図 9) により、以下の操作を実行できます。

- **アクションの定義**：サンプルの注入、待機、タスク、または iterative MS/MS
- **サンプル情報の入力**：バイアル番号、サンプルタイプ、および繰り返し分析（注入/バイアル）
- **指定**：取り込みメソッドおよびデータ処理メソッド
- **追加のサンプルカスタムパラメータの入力**：MassHunter Qualitative Analysis および BioConfirm のためのサンプルカスタムパラメータ

### 強化されたシーケンス管理

OpenLab CDS には、LC/(Q-)TOF ワークフローをサポートするために、次の強化されたシーケンス機能が備わっています。

- **待機アクション**：分析ごとに、(定義された時間の経過後、またはその時間まで) シーケンスを手動または自動で保持および再開します。
- **タスクアクション**：シーケンスの途中で、キャリブレーションやシャットダウンなど、事前定義された機器タスクを実行します。

- **Iterative MS/MS (LC/Q-TOF のみ)**：サンプルの特性解析を向上させるために使用される高度な MS/MS ワークフローです<sup>5</sup>。
- **シャットダウンメソッド**：すべてのサンプルの処理が完了した際に実行するシャットダウンアクションを定義します。

待機アクションを使用すると、分析ごとにシーケンス内に、定義された待機時間を追加することができます。待機アクションの設定方法は 4 種類あります（図 10 参照）。

タスクアクションにより、シーケンス内の任意の時点において、機器タスクを定義および実行することができます。図 10 に示すように、マス軸キャリブレーションや機器の電源オン/オフなどのタスクを、シーケンステーブルに追加することができます。

iterative MS/MS ワークフロー(図 10) は、低濃度のプリカーサを取り込みながら、高アバンドランスのプリカーサを反復的に除外することにより、同定を促進します<sup>6</sup>。

シャットダウンメソッドはランキューに送信することができ、最後の分析として配置されます。シャットダウンメソッドがランキューに追加された場合、ランキュー内の他のすべての分析が完了した後、LC 機器を自動的にシャットダウンします。例えば、ポンプをスタンバイモードに設定し、オープンと UV ランプをオフにします。

The screenshot shows the OpenLab CDS software interface. The main window displays a 'Sequence - Untitled' table with columns for Action, Vial #, Sample type, Acq. method, TOF/Q-TOF: It..., Inj/Vial, Volume, Injection so..., Level, Run type, Sample am..., Proc. method, and Data file. The table contains 8 rows of data, including 'Task', 'Inject', 'Wait', and 'Iterative MS/MS' actions. Below the table, there are two sections: 'Wait' and 'Task'. The 'Wait' section is labeled '待機アクション' and includes options like 'Wait until manually resumed', 'Automatically resume after', and 'Automatically resume at'. The 'Task' section is labeled 'タスクアクション' and includes a dropdown menu for 'Task' with 'EcoStandby.tmx' selected. At the bottom, there are fields for 'Result path', 'Result name', and buttons for 'Validate' and 'Run'.

図 10. シーケンステーブルには、サンプル、タスク行、および待機行が表示されており、上の領域で強調表示されています。1 つのサンプルが、iterative MS/MS ワークフローで分析されている様子が表示されています。左下と右下の領域では、それぞれ待機アクションとタスクアクションが強調表示されています。

## シーケンス作成

シーケンス作成テンプレートは、新しいシーケンスを生成するための柔軟なパターンを定義するのに使用される優れたツールであり、10回の注入ごとのQCサンプルといった、繰り返し要素を含むシーケンスの作成に特に有用です(図 11)。

OpenLab CDS では、トークンを使用して、サンプル情報や、サンプル名、注入回数、注入日時などのその他のフィールドに基づいて、サンプル名やファイル名を動的に生成することができます。

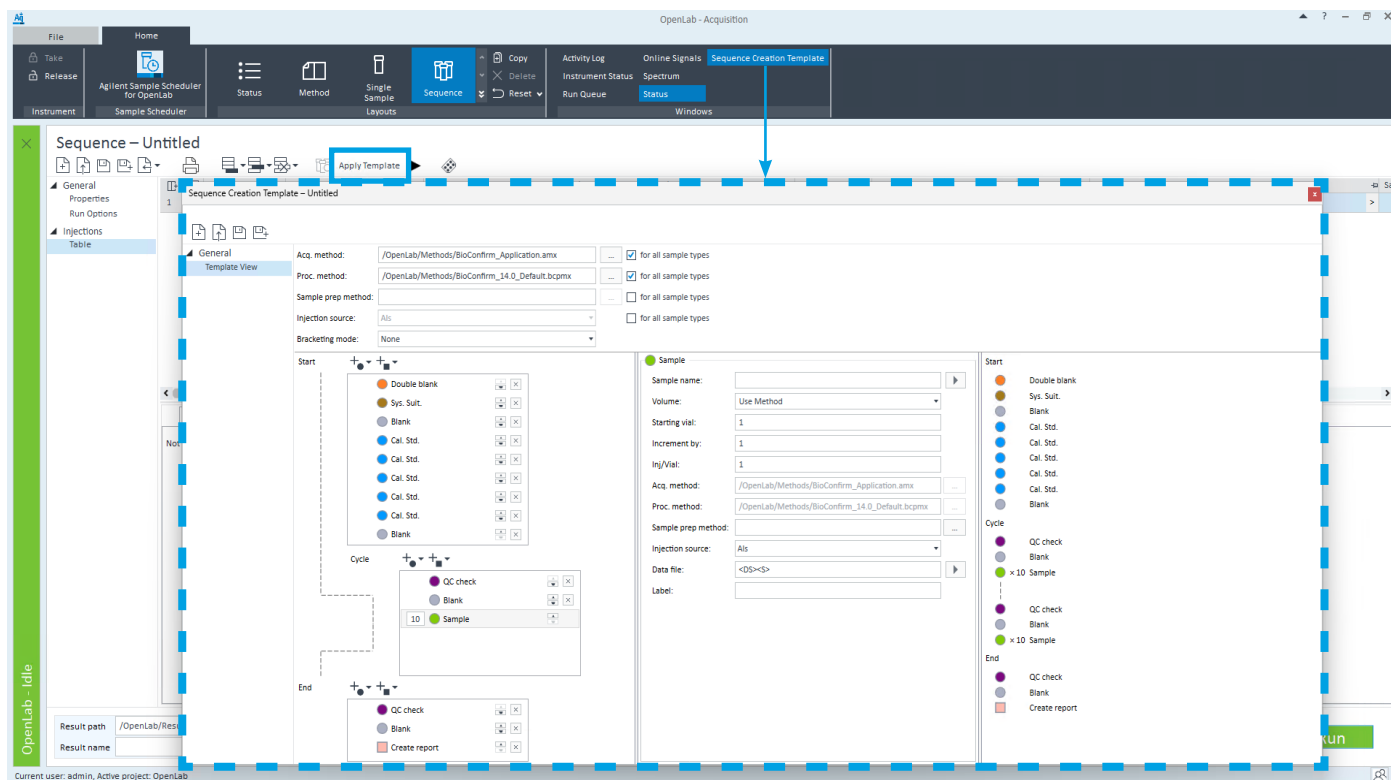


図 11. 複数ポイントのキャリブレーションの後に、10 サンプルごとに繰り返し QC チェックを実施する、シーケンス作成テンプレートエディタ

## 取り込みとデータ処理の橋渡し

OpenLab CDS は、以下を通して、MassHunter Qualitative Analysis および BioConfirm とシームレスに統合されます。

- 取り込み段階で処理パラメータを定義するためのサンプルカスタムパラメータ。
- 非同期のデータ取り込みおよび処理のための自動データ解析。
- 処理が失敗した場合に、取り込みを一時停止または継続するためのエラー処理ルール。
- 早期に知見を得るために部分的に取り込まれたデータのスナップショット表示。
- 手動での介入を必要としないバッチ再処理用のリプロセッサ。

サンプルカスタムパラメータにより、特定のサンプルの処理メソッドのパラメータを変更することができます。MassHunter Qualitative Analysis および BioConfirm には、ユーザー定義のパラメータに加え、高度な DA オプションで設定可能な事前定義されたセットが用意されています。ラボでは、使用可能なパラメータ、そのパラメータが必須であるかどうか、およびシーケンステーブルでの表示方法を定義することができます(図 12)。

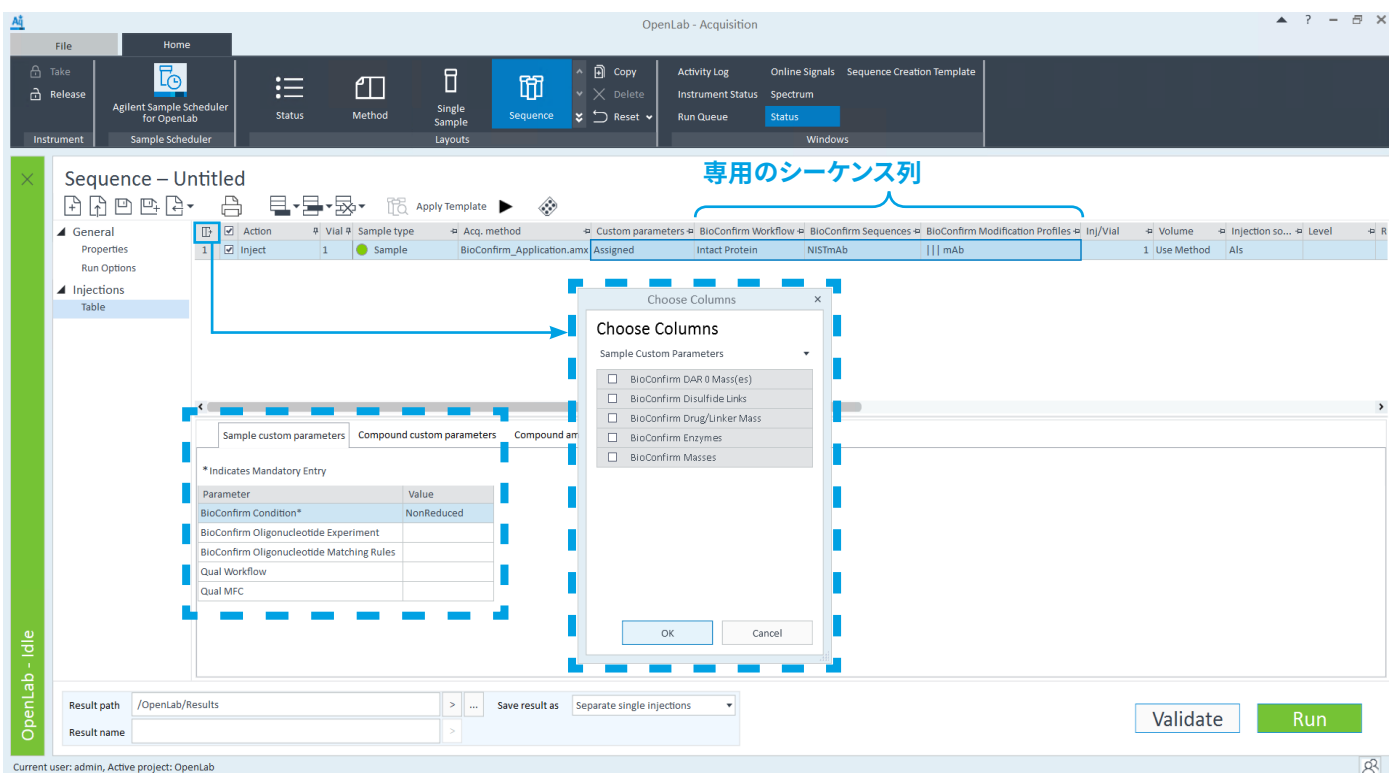


図 12. MassHunter Qualitative Analysis および BioConfirm におけるサンプルカスタムパラメータの表示オプション：サンプルカスタムパラメータ列内に表示するか、または別のシーケンス列として表示するかを選択できます。

自動データ解析により、シーケンス内のサンプルは、各分析の完了直後に、事前定義された MassHunter Qualitative Analysis、BioConfirm、または MAM 処理メソッドを使用して処理することができます(図 13)。

**注記：**シーケンス中に発生する可能性のあるエラーを処理する方法とし

て、**On error, pause after current injection (エラー発生時、現在の注入後に一時停止)** を選択する機能を含め、いくつかのオプションが用意されています。

スナップショット機能(図 14) により、MassHunter Qualitative Analysis ソフトウェアを使用して、実際に取り込み中のサンプルからデータを抽出して表示することができます。

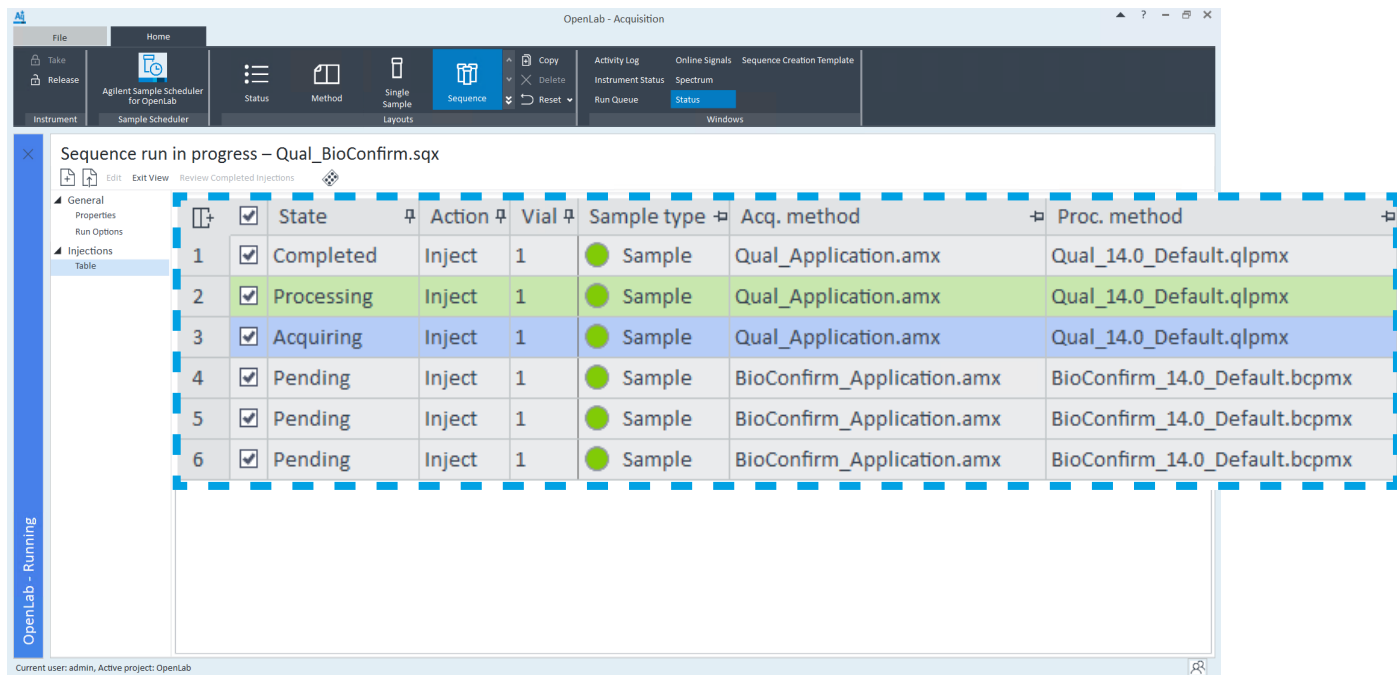


図 13. MassHunter Qualitative Analysis と BioConfirm 処理メソッドの組み合わせを示す OpenLab シーケンス

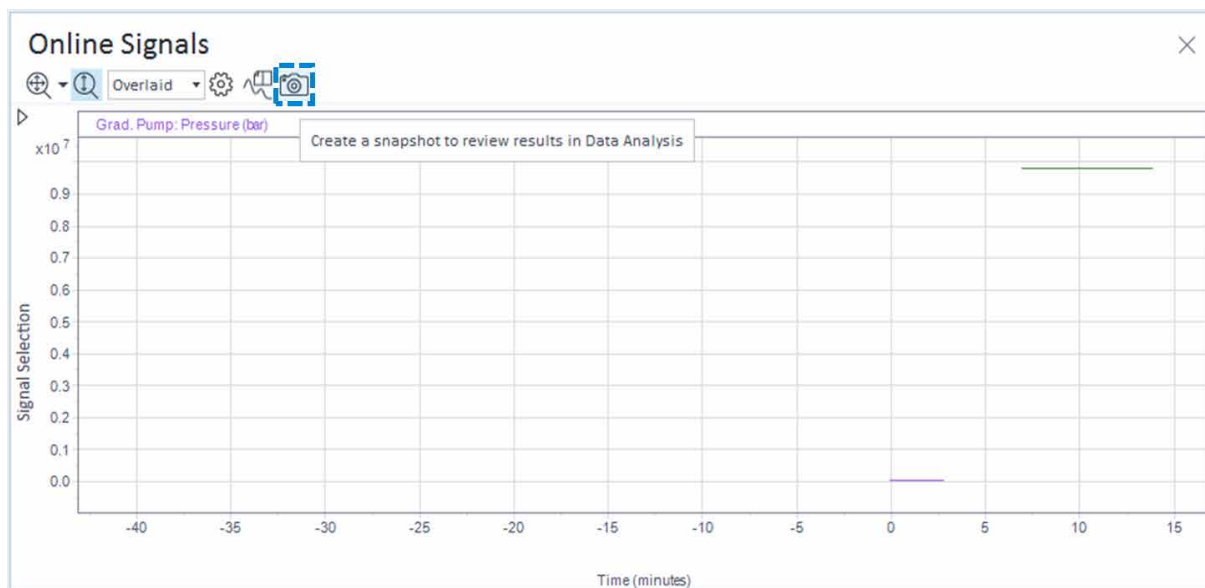


図 14. オンラインシグナルウィンドウのスナップショットボタン

リプロセッサを使用すると、MassHunter Qualitative Analysis または BioConfirm ソフトウェア(図 15) とやりとりしなくても、複数の単一の注入データファイル (.sirslt) を自動的に再処理することができます。これらの機能により、手動での介入が削減されて、データターンアラウンドが迅速化され、取り込みから結果までの一貫した自動化パイプラインが確保されます。

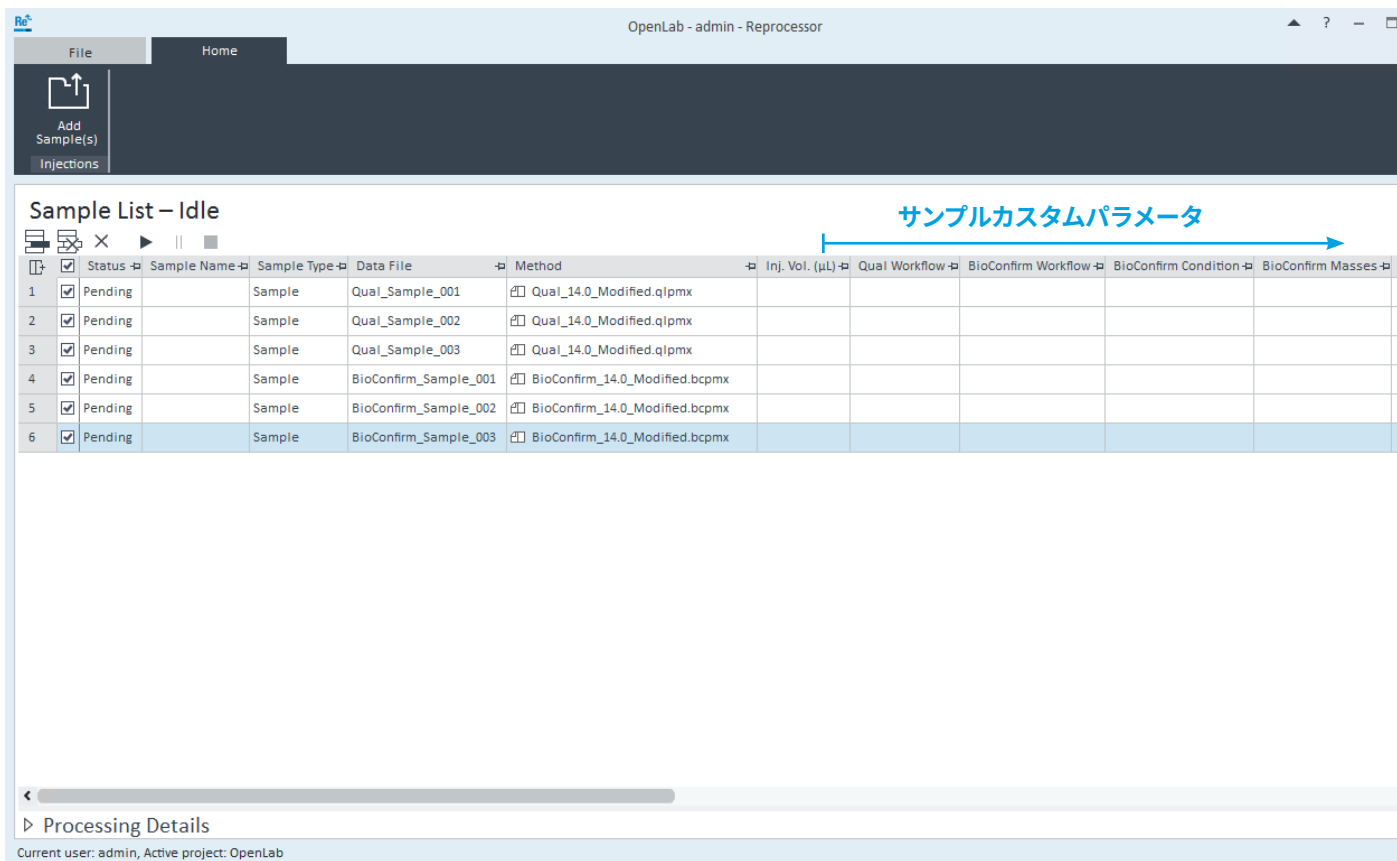


図 15. リプロセッサの表示

## 結論

Agilent OpenLab エコシステムでは、LC/TOF および LC/Q-TOF 機器をサポートする機能が拡張されています。この新しいエコシステムは、以下を提供します。

- クロマトグラフィーと質量分析のための、単一で一貫性のあるプラットフォーム。
- 世界中のラボネットワーク全体にわたる、拡張可能で協力的な接続性。
- 管理の簡略化と互換性を実現する、統一されたデータフォーマット。
- 規制要件に適合するための堅牢なコンプライアンス機能。
- 取り込みからデータ解析およびレポート作成に至るまでの効率化されたワークフロー。

## 参考文献

1. OpenLab Help & Learning
2. 21 CFR Part 11 および Annex 11 コンプライアンスのサポート : Agilent OpenLab CDS, Agilent Technologies white paper, publication number 5994-3659JAJP, **2024**.
3. ネットワークでつながるラボのビジネスバリュー , Agilent Technologies white paper, publication number 5994-8021JAJP, **2025**.
4. OpenLab CDS v2.8 Acquisition Failover Users Guide, Agilent Technologies, publication number D0028026 Rev. B, **2025**.
5. In-depth Peptide Mapping with Iterative MS/MS Acquisition on the Agilent 6545XT AdvanceBio LC/QTOF, Agilent Technologies application note, publication number 5991-8633EN, **2020**.
6. Boost Efficiency and Productivity with Instrument Intelligence and Workflow Automation, Agilent Technologies technical overview, publication number 5994-7430EN, **2024**.

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ー

**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。

DE-013843

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2026  
Printed in Japan, May 7, 2026  
5994-9138JAJP