

Agilent 6210 Time-of-Flight LC/MS
未知化合物同定の強力なツール



Agilent Technologies

未知化合物の同定に

Agilent 6210 Time-of-Flight LC/MS は創薬、環境、タンパク質または合成ペプチド分析など、さまざまなアプリケーションにおいて卓越した性能を発揮します。アプリケーションに特化したソフトウェア、使い勝手のよさを備え、未知化合物の同定を強力にサポートする装置です。

業界標準を超える高性能

Agilent 6210 Time-of-Flight LC/MS には研究者が必要とする優れた性能が備わっています。

- 2 ppm の質量正確さ：高い分析信頼性を提供
- 複雑な混合物から対象化合物を同定
- 幅広いダイナミックレンジにより、高濃度から低濃度化合物を同時に同定
- 超高速データ取込により、狭いピーク幅でも、未知の化合物を同定
- 卓越した感度により極低濃度化合物も検出
- マルチモードイオン源と組み合わせることで、スペクトルごとに極性切り換えができるため、未知化合物からより多くの情報を採取可能

同定を容易に

Agilent 6210 TOF の操作は非常にシンプルです。オートチューニングと内部リファレンス用質量スタンダードの完全自動送液により、最小限の労力で最大限の性能が確保されます。アプリケーション固有のソフトウェアにより、高分子量から低分子量までの両方のアプリケーションに対する結果が最適化されるため、生産性が最大限に高まります。またウォークアップオペレーションとリモートデータレビューを可能にするソフトウェアにより、さらに操作が容易になります。

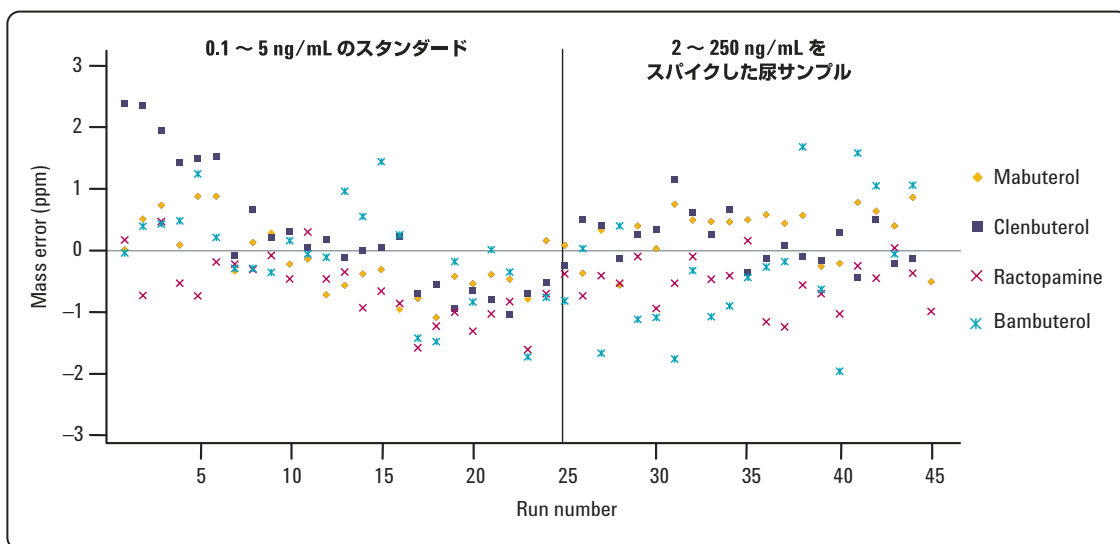
優れた質量正確さと高分解能による信頼性の向上

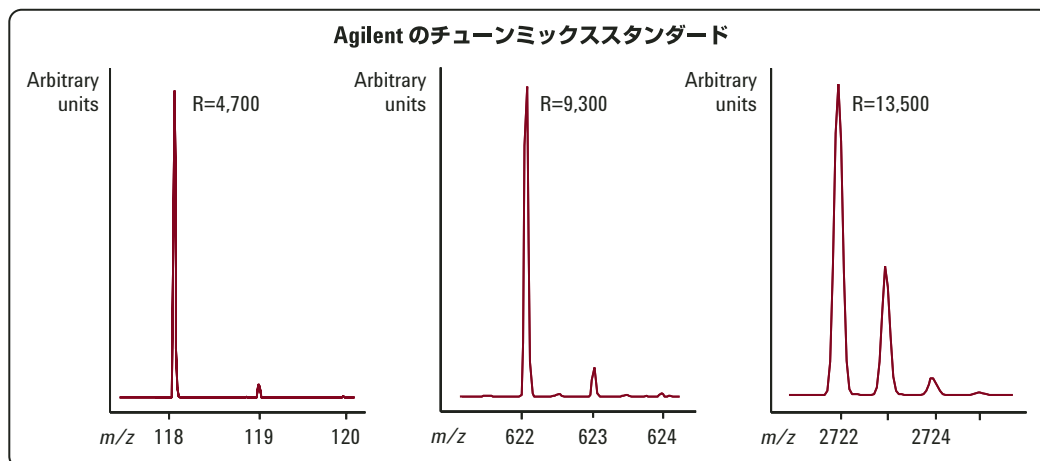
6210 TOF は、優れた設計により、高い質量正確さと分解能、広いダイナミックレンジ、高速スペクトル採取を同時に可能としました。

2 ppm の質量正確さにより、元素組成の確認と未知化合物の同定を確実に行えます。候補物質の数を劇的に減らすことが可能なため、測定された質量と補足情報の組み合わせにより、確実な同定を行えます。

さらに、6210 TOF はその卓越した分解能により、近い質量を有する多くの化合物を区別し、また対象化合物のピークがバックグラウンドのイオンに干渉される可能性を最小限に抑えます。

6210 TOF は 1 ~ 2 ppm の正確さでのルーチン分析が可能です。下図は β_2 作動薬標準とスパイクされた尿サンプルの 18 時間のシーケンスの結果を示しています。





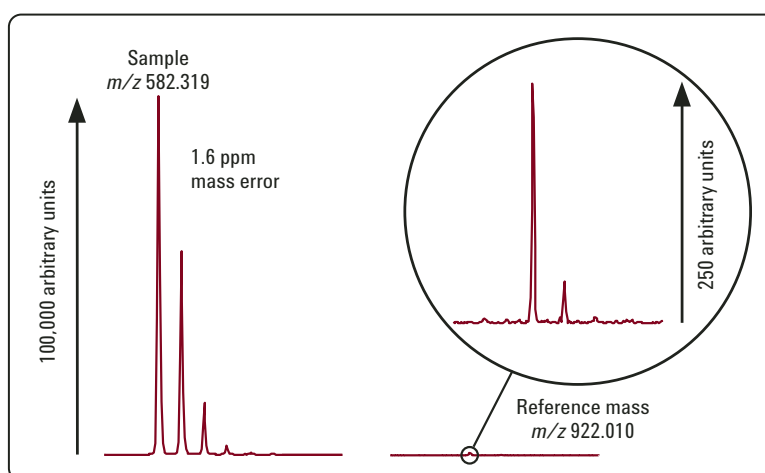
6210 TOF の高分解能により、サンプルを確実に同定します。

微量化合物の同定と操作を簡素化する 幅広いダイナミックレンジ

Agilent 6210 TOF は、TOF の感度を損なうビームアテネーションを用いずに、3 桁以上のダイナミックレンジを提供します。このダイナミックレンジにより、単一スペクトルでも、また高濃度化合物が存在する中でも、低濃度化合物を同定できます。サンプル濃度を装置の検出範囲に正確に合わせる必要がないため、無人の「ウォークアップ」アクセスも容易になります。

生産性を高める高速スキャン

6210 TOF は、1 秒あたり 40 スペクトルの採取が可能で、高速クロマトグラフを使用する際にも信頼性の高い定性および定量に十分なデータを取ることができます。1 秒か 2 秒の幅の狭いピークでも、未知化合物を同定できます。高速スキャンにより、ピーク面積測定も正確に行われ、より精度の高い定量が可能です。



幅広いダイナミックレンジにより、主要成分と微量な成分の両方が同定され、内部標準の使用が容易になります。

さまざまなアプリケーションに対応

適切な Agilent LC、イオン源、ソフトウェアを使用することで、Agilent 6210 Time-of-Flight LC/MS は、合成化学の製品の定性から複雑なタンパク質サンプルの発現プロファイリングまで、多くの分析対象を幅広くカバーします。

さまざまなアプリケーションに対応するイオン源

6210 TOF では、デュアルネブライザイオン源など、アプリケーションに対応したイオン源を選択することができます。内部リファレンス質量スタンダードサンプル導入のために設けられた 2 つめのネブライザにより、デュアルネブライザイオン源は、質量正確さと使い易さの両方を可能にしています。TOF ではカスタマイズしたオートチューニングも可能です。

- 幅広いアプリケーションに対応するデュアルネブライザエレクトロスプレー (ESI)
- デュアルネブライザナノスプレーによりさらに高感度を提供
- エレクトロスプレーでイオン化しない低極性サンプルには APCI
- ESI や APCI ではイオン化しない化合物用に適した APPI
- CE の高分離能を利用するための CE-TOF インタフェース
- ハイスループットプロテオミクス用の PDF-MALDI*
- マルチモードイオン源は、生産性を高める ESI と APCI の同時データ採取可能
- 分離および感度で究極の HPLC-Chips と HPLC-Chip Cube MS インタフェース



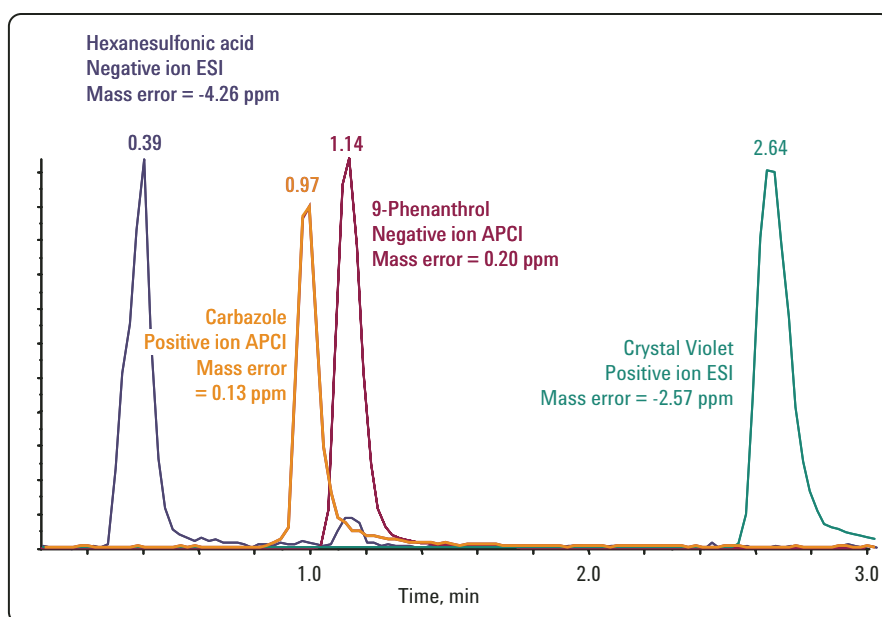
デュアルネブライザ ESI イオン源は最小限の労力で質量精度を最大限に引き出します



HPLC-Chip Cube MS インタフェースは最大の感度と利便性を両立しました



マルチモードイオン源により、処理量と生産性を倍増できます



スペクトルごとの極性切り換えとマルチモードイオン源を備えた 6210 TOF では、異なるイオン化メソッドとイオン化極性の組み合わせにより一度の分析で 4 つの化合物を同定できました。

* PDF-MALDI イオン源はクラス I のレーザー製品です

低分子量の化合物も簡単に分析

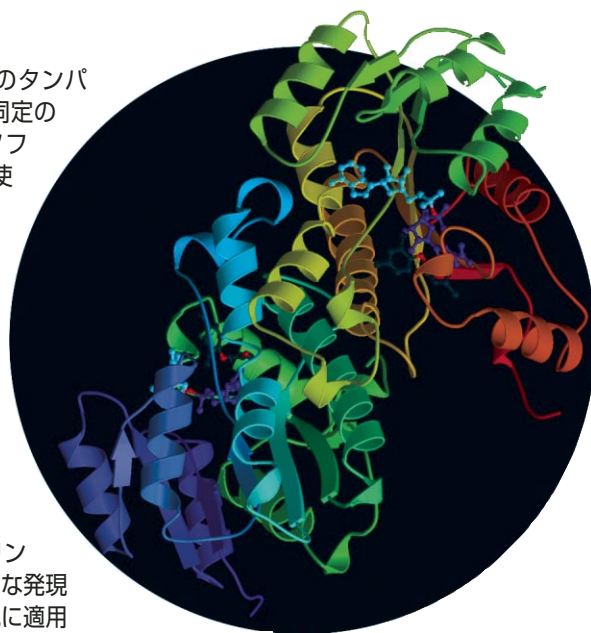
ハイスループットスクリーニング、不純物分析、環境または法医学分析を行う場合、6210 TOF は以下の機能を提供します。

- 予想される化合物を高速で確実に確認するための組成式確認ソフトウェア
- 不純物とその他の未知化合物を同定するための、正確な質量測定を利用した組成式作成ソフトウェア
- 組成式判定とデータベース検索を向上する特徴のある抽出法と相関アルゴリズム

向上した生体分子分析

天然または合成のいずれかのタンパク質またはペプチドを含む同定の場合、6210 TOF を下記のソフトウェアとに組み合わせて使用することで、よりよい結果を得ることができます。

- MassHunter Bioconfirmation ソフトウェア：タンパク質とペプチドの独自性を正確に確認し、予想しない変異体と目的の未知化合物の両方を同定
- MassHunter プロファイリングソフトウェア：さまざまな発現研究とバイオマーカー発見に適用するため、化合物配置とデータの視覚化のための最適化ツール



より向上した生産性と操作性

多くの研究者がより簡単にTOFの能力を利用し、データ解析を簡素化するためのアドオンソフトウェアも提供しています。

- MassHunter Easy Access software は、シンプルなウォークアップオペレーションが可能で、装置の共有、マルチユーザー環境に最適
- データブラウザソフトウェアは、TOF のソフトウェアを用いずに、リモート PC からデータのレビューを実行

これらのパッケージは、低分子アプリケーション、生体分子アプリケーションとソフトウェアの両方との組み合わせが可能です。

低分子の未知化合物の同定も容易に

6210 TOF の 2 ppm の質量正確さは、化合物の同定と未知化合物の同定の両方に卓越した性能を発揮します。多くの場合、精密質量測定だけで十分に結果を導くことができ、そうでない場合も候補となる物質を絞ることができるため、確認または同定は簡単になります。

容易な低分子量化合物の同一性、未知化合物の同定確認

6210 TOF の 2ppm の質量正確さは、化合物の同一性、未知化合物の同定確認に大きな能力を発揮します。多くのケースでは、単に精密質量測定で十分です。他のケースでは、可能な候補を十分に絞ることができ、確認や同定がはるかに容易になります。

化合物を速やかに同定確認

組成式確認ソフトウェアにより、目的の化合物を速やかに、そして容易に検証できます。予想したスペクトルをレビューする組成式から始め、予想質量を探します。ニュートラルロス、付加物、そしてその他の一般的な修飾を計算します。プログラムは、各対象化合物に対して 1 ページの確認レポートを作成します。

組成式作成ソフトウェアを使用して未知化合物を同定

質量リストの結果から、各未知化合物に対する適当な組成式のリストを作成できます。次のパラメータを変更することで、式の作成をカスタマイズできます。

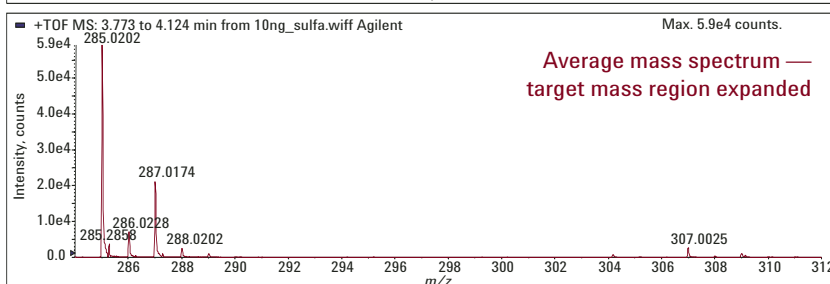
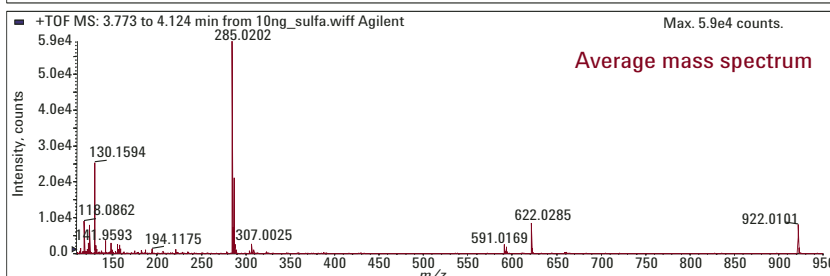
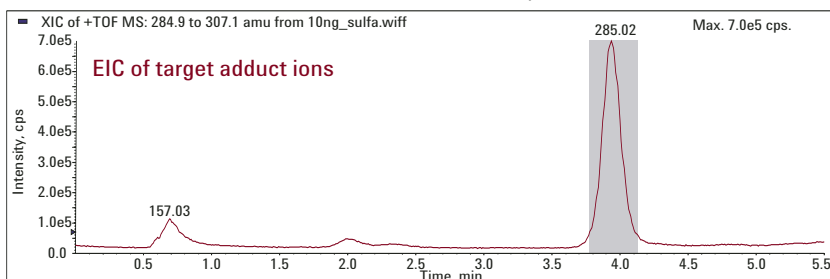
- 質量許容範囲
- 考えられる元素のリスト
- 各元素の最小値と最大値
- 電子状態 (奇数または偶数)
- 荷電状態
- エラーの許容範囲
- ヒットの許容範囲

同位体比率または質量誤差による分類により、結果を保存できます。

Empirical Formula Confirmation Report

Page 1 of 1

Empirical Formula: **C₁₀H₉CIN₄O₂S** tExact Mass: **284.01347** tSample Name: **10 ng sulfa** tSample ID:
Data File Name: **p:\Projects\sulfa 2\Data\10ng_sulfa.wiff** tAcq Time: **May 08 2005, 12:05:38 PM**



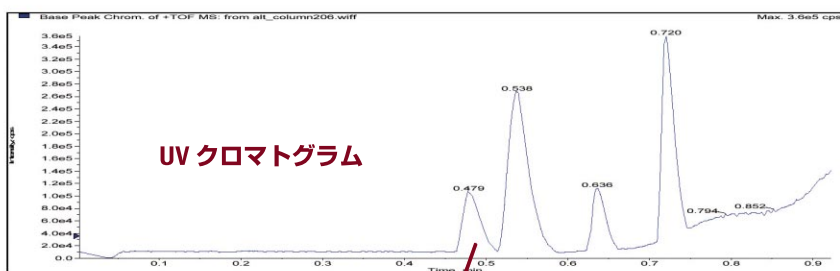
Species	Abundance (counts)	Target Mass (amu)	Measured Mass (amu)	Mass Error (m/z)	Mass Error (ppm)
[M+H] ⁺	59329.42	285.02075	285.02019	-.00056	-1.97
[M+Na] ⁺	2799.10	307.00270	307.00248	-.00021	-.70

Page 1 of 1

Thursday, May 8, 2005

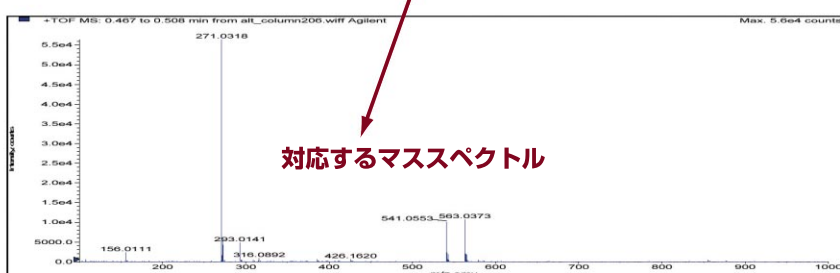
レポートには各対象化合物に対して同定に必要な情報が表示されます。

Sample#: sulfa_mix Sample Location: Sample Id: Operator:
 Data File Name: d:\pe.scie\data\Projects\report app note\Data\alt_column206.wiff Acq Time: November 19 2003, 04:44:23 PM
 Method: D:\TOF_Data\damethods\EZX_EFG.anm\mass_list.xml



Period#: 1 Experiment#: 1

Peak#	Experiment#	Time	Area	Most Abundant	Masses/scan
1	1	0.48	1.41327 E5		271.03181
2	1	0.54	4.38872 E5		279.09140
3	1	0.64	1.12099 E5		285.02057
4	1	0.72	3.52979 E5		311.08153



Peak#: 1 Experiment#: 1 Retention Time: 0.48 min

Mass Value = 271.03181							
#	Formula (+1)	Calculated m/z	Error (mDa)	* Error (ppm)	DBE	Isotope Match	Intensity Match
1	C9H11N4O2S2	271.03180	0.01	0.1	6.5	997	66290
2	C10H17O2SCI2	271.03208	-0.27	-1.0	1.5	732	66290
3	C9H3N8O3	271.03226	-0.45	-1.7	12.5	998	62049
4	C17H7N2S	271.03245	-0.64	-2.3	15.5	0	0
5	C4H12N8S2Cl	271.03094	0.87	3.2	2.5	846	56655
6	C8H7N4O7	271.03093	0.88	3.3	7.5	999	62049
7	C19H8Cl	271.03090	0.91	3.3	15.5	937	66290
8	C7H12N2O7Cl	271.03276	-0.95	-3.5	2.5	0	0

可能性の
ある
化学式

組成式作成プログラムにより、精密質量データとサンプル情報と優先度に基づいた大部分の候補物質のリストが作成されます

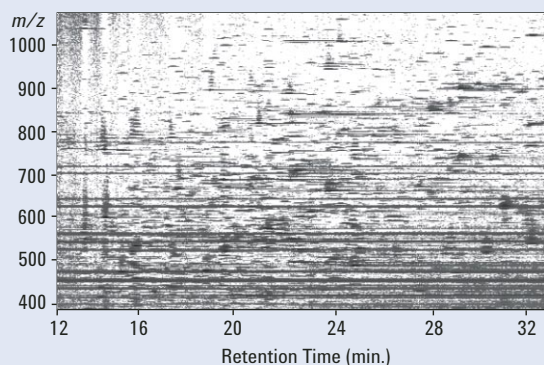
生データを実用的なデータに変える

新しい構造抽出と相関アルゴリズムにより、ペプチドまたは低分子の複雑な混合物の定性的な解析が強化されます。生データの関連情報を同定することで、二次的な組成式測定またはデータベース検索の精度が向上されます。

構造抽出と相関アルゴリズムにより、クロマトグラム中の共変異イオンのグループが配置されます。これらのグループそれぞれは、独自の化合物を現します。そのためアルゴリズムにより、複数の成分を隠している可能性のあるクロマトグラムのピークを単に同定する代わりに、クロマトグラム中のすべての成分を同定します。これにより、化学的バックグラウンドデータを効率的に排除することが容易になります。

化合物の同定とバックグラウンドの排除後、アルゴリズムにより荷電状態が割り当てられます。付加化合物も同定するため、分子イオンと付加イオンを単一の化合物として処理できます。さらにアルゴリズムにより同位体が同定され、さらに正確な組成式測定とデータベース検索のためのモノアイソトープ質量だけがレポートされます。

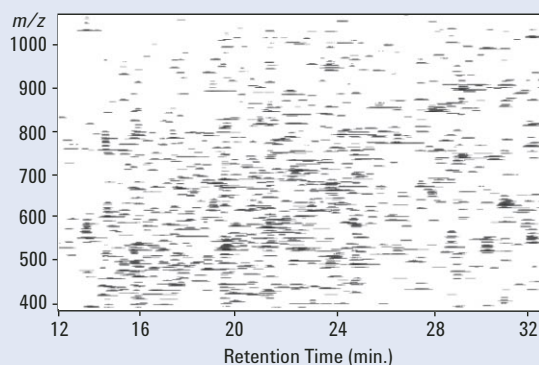
1億7000万個のデータポイント



構造抽出と相関
アルゴリズムを
適用



1,600 のデータポイント



構造抽出と相関アルゴリズムを使用して生データを処理することで、ミオグロビンでスパイクされた BSA のサンプルの 1 億 7000 万個のデータポイントの中から約 1,600 種の化合物を同定します。これらの例では、全体のデータ表示の小さな領域を拡大しています。

プロテオミクスデータを答えに変える

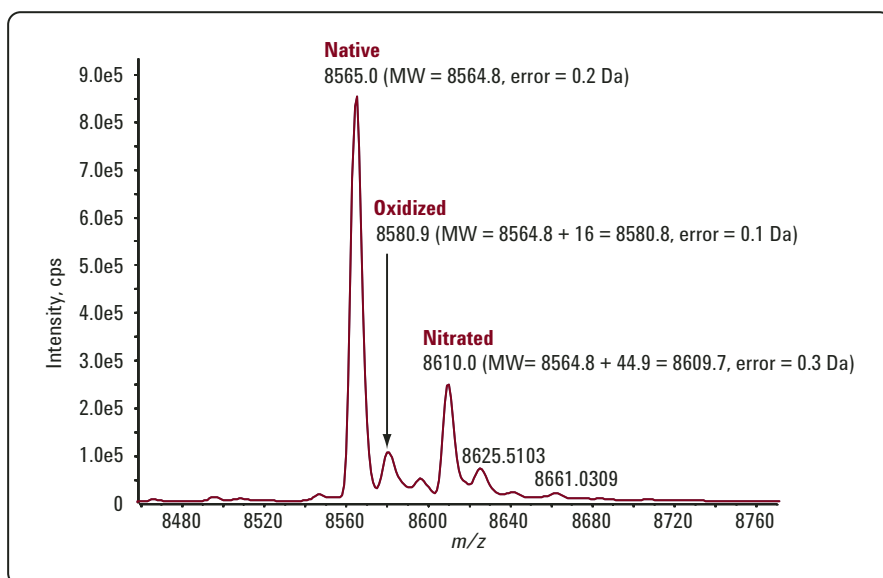
6210 TOF はその優れた質量正確さ、分解能、そして再現性により、タンパク質研究にも非常に有用なツールとなります。タンパク質確認と発現プロファイリングのためのソフトウェアパッケージにより、データから結果が導かれます。

Bioconfirmation ソフトウェアを用いて同一性を確認し変異体を同定

組み換えタンパク質またはペプチドの合成を必要とする場合、Agilent MassHunter Bioconfirmation ソフトウェアを用いると、費用の掛かるテストを開始する前に同一性を確認して変異体を同定するのに役立ちます。

最適化されたデコンボリューションによる正確な結果

タンパク質とペプチドの両方のスペクトルの分析は、デコンボリューションで始めます。他の類似ソフトウェアと異なり、この Bioconfirmation ソフトウェアには、タンパク質およびペプチドに対して最適化されたスペクトルデコンボリューションアルゴリズムが備わっています。



MassHunter Bioconfirmation ソフトウェアにより、ペルオキシ亜硝酸処理されたユビキチンサンプル中の3つの主要な生成物のデコンボリューションされたスペクトル。変更されたタンパク質の形状の差異が識別されます。

Sample Name: Beta-Lac-2pmol Method Name: F:\TOF\data\method\protein_small_toi_25.nm
Data File Name: F:\TOF\data\BetaLac.wiff Acq Time: March 16 2004, 09:52:16 AM

Target Proteins

Protein	Target Mass Average (Da)	Measured Mass Average (Da)	Measured Mass Apex (Da)	Area	+/- (Da)
	18277.1700	18277.1391	18277.0266	1238472.6971	-0.0309
	18363.2600	18363.2551	18363.0266	1298021.2043	-0.0049

A と B の
変異体

Other Proteins

Measured Mass Average (Da)	Measured Mass Apex (Da)	Area	Time (min)
18363.2551	18363.0266	1298021.2043	3.76
18277.1391	18277.0266	1238472.6971	3.76
18362.9925	18376.0266	922081.2178	3.76
18410.6222	18410.0266	265030.2922	3.76
18297.0366	18297.0266	258021.0757	3.76
18461.2824	18461.0266	187922.8999	3.76
18324.1605	18324.0266	163183.0441	3.76
18396.7208	18396.0266	118587.3214	3.76

それ以外の
タンパク質

良好な分子構造抽出によるペプチド同定

MassHunter Bioconfirmation ソフトウェアでは構造抽出と相関アルゴリズムを使用して、複雑なペプチド混合物中のすべてのピークだけでなく、すべての化合物を正確に同定します。ペプチド質量により高速同定するために、結果の質量リストを MassHunter ソフトウェア用の Agilent のスペクトルミルなどのデータベース検索プログラムにインポートできます。

組み換えタンパク質の迅速で効率的な確認

Bioconfirmation ソフトウェアは、損なわれていない組み換えタンパク質の同一性を迅速かつ効率的に確認するのに役立ちます。各サンプルに対して、予想したタンパク質を検証して、予想しなかった変異体と不純物の分子量とその他のデータを一覧表示するタンパク質確認レポートを作成します。

β-ラクトグロブリンの分析からのタンパク質確認レポート (抜粋)。
低 ppm の質量誤差で確認された対象タンパク質 (A と B 異性体) を示します。

予期しなかった変異体の同定

同一性確認により予期しなかった変異体を発見した場合、Bioconfirmation ソフトウェアのペプチド質量マッピング機能を使用したタンパク分解と再分析により、予想した配列と一致する部分と異なる部分を明らかにすることができます。変異位置と種類について情報を提供します。

バイオマーカー発見のための 発現プロファイリングソフトウェア

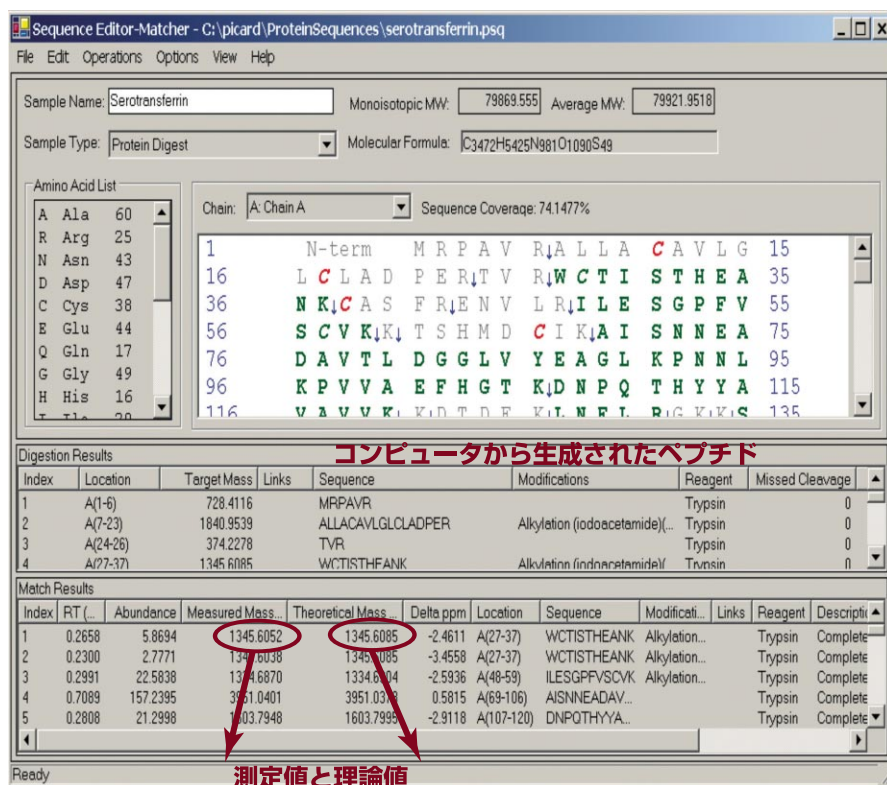
最適な組み合わせの Agilent LC とイオン源を選択することで、6210 TOF は高速で効率の良い発現プロファイリングのための卓越したツールとなります。化合物の配置とデータの視覚化を提供する Agilent の MassHunter プロファイリングソフトウェアを組み合わせると、システムはさらに最適化されます。遊離グリカンの発現プロファイリングを介した糖タンパク質の QA/QC 用のアプリケーションも提供しています。

化合物の優れた割り当て

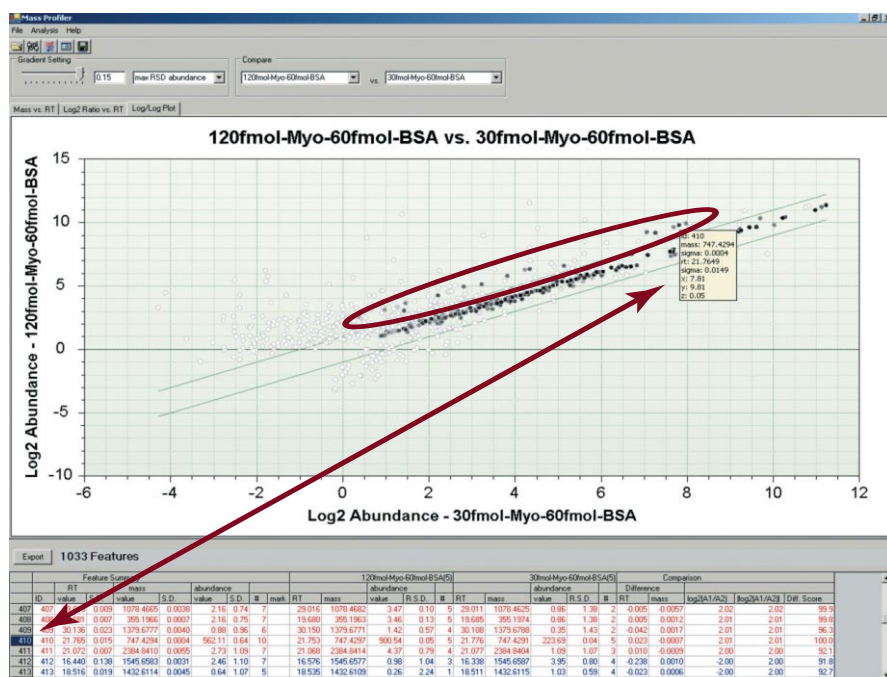
MassHunter プロファイリングソフトウェアは構造抽出と相関アルゴリズムを使用して、非常に複雑なペプチド混合物中でもすべての成分を配置します。

強力な統計的比較と視覚化

MassHunter プロファイリングソフトウェアは、2 つのサンプルからの結果を統計的に比較して、質量、リテンションタイム、アバンダンスなどの複数の変数を表またはグラフに表示します。



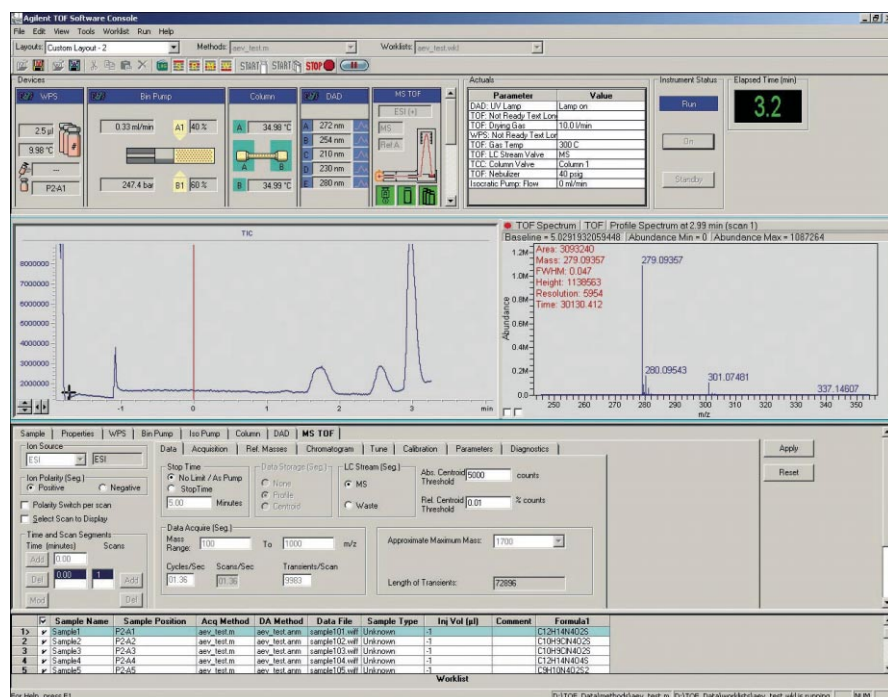
組み換えタンパク質の分析により誤ったタンパク質が作成されたことが示された場合、対話式シーケンスエディタ/マッチャーは異性体の位置を探すのに役立ちます。



2 つの異なる濃度のミオグロビンでスパイクされた BSA は、違った形で現れたタンパク質を使用して生物学的サンプルをシミュレートします。MassHunter プロファイリングソフトウェアにより、異なる「発現量」でミオグロビンイオンの存在が同定されます。各構造についての特定の情報が構造テーブルに表示され、個別のポップアップボックスに表示できます。

生産性を最大限に引き出すソフトウェア

6210 TOF では Agilent 製 MassHunter ワークステーションデータ取込ソフトウェアを使用すると、セットアップと操作が簡素化され、またアプリケーションに関係なく処理量を最大のスループットが可能になります。追加のソフトウェアを用いると、複数ユーザーがリモートからデータレビューを行うことも可能になります。



使いやすく、必要な装置コントロールとデータ取込をすべて可能にするソフトウェアでTOFデータをスクリーンからコントロールできます。

高速で容易な設定とデータ取込

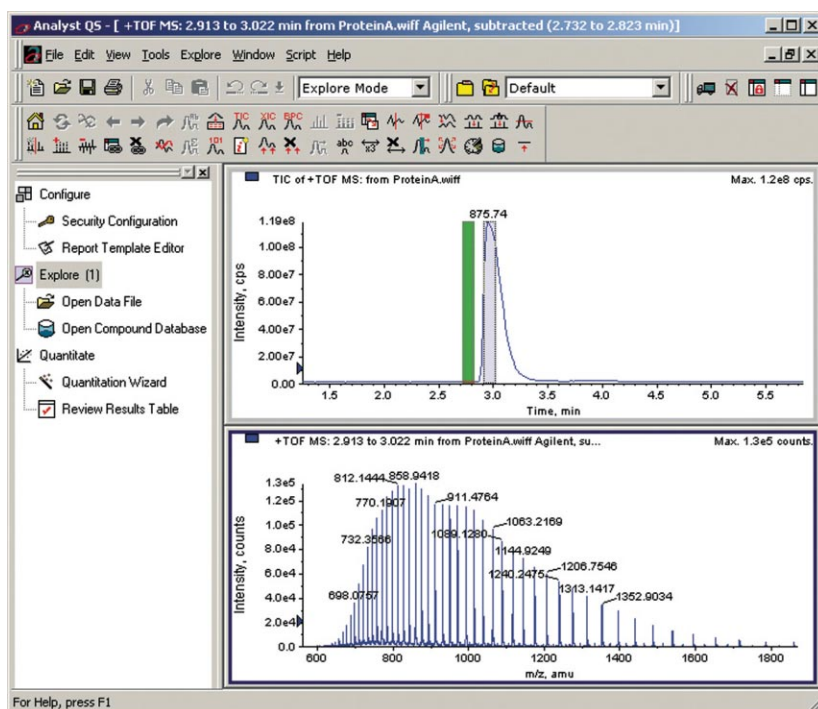
MassHunter ワークステーションソフトウェアにより LC/MS システムの操作は非常に簡素化されるため、LC/MSの初心者でも簡単に操作することができます。

- ・オートチューニング - 信頼性の高いオートチューニングプログラムにより、性能を最大限に引き出し、労力を最小限に抑えられます。
- ・設定時間の短縮 - Microsoft® Excel などの表計算ソフトウェアから作業リストを直接インポートします。
- ・単一のユーザーインターフェース - LC と MS の両方用の単一のインターフェースを設定して、必要な情報だけを表示できます。

強力なデータ解析

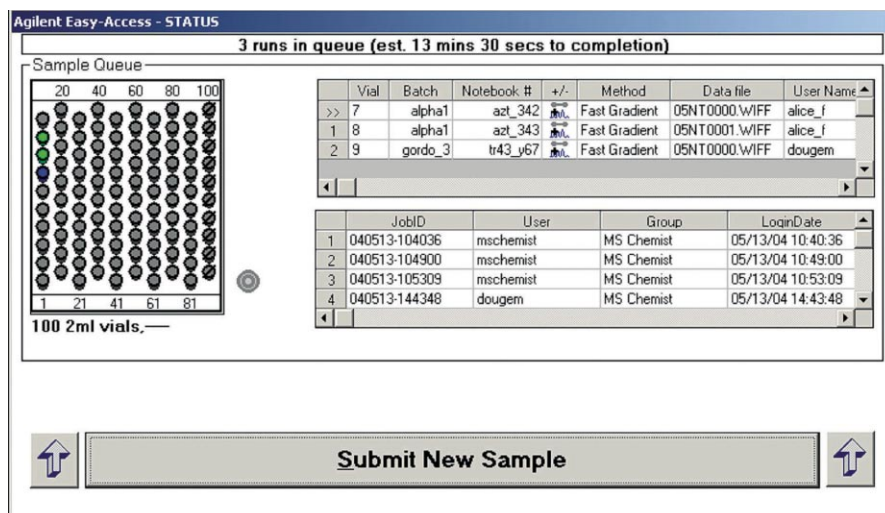
データ解析ソフトウェアにより、定性結果と定量結果の両方が提示されます。アプリケーション固有のソフトウェアパッケージを使用すれば、低分子量化合物の確認と同定、タンパク質確認と発現プロファイリングも可能です。

データ解析ソフトウェアには、
効率的に定性的分析および
定量的分析するための
豊富なツールが備わっています

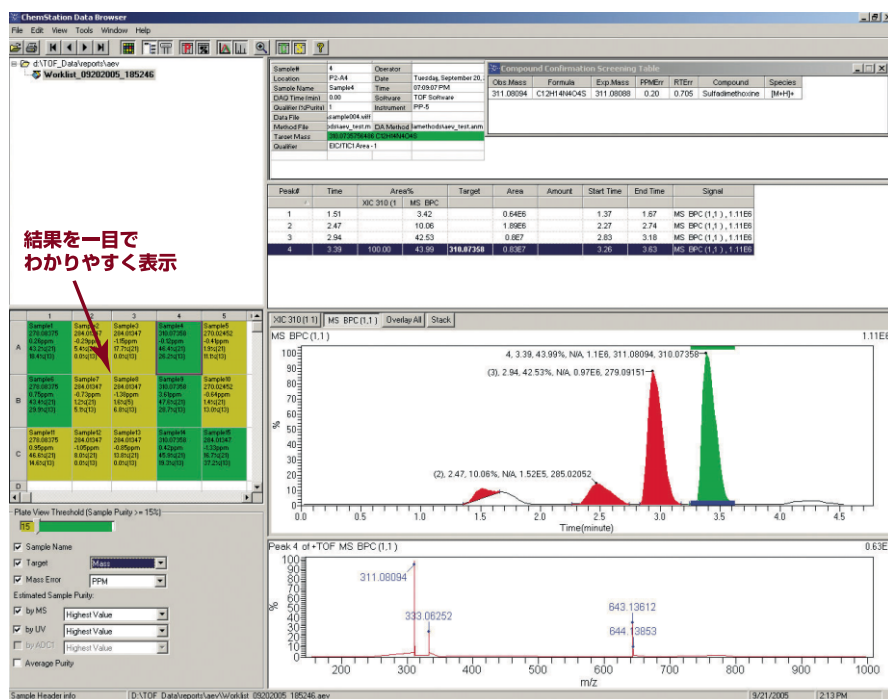


2 ppm の精密質量測定への容易なウォークアップアクセス

Agilent MassHunter Easy Access ソフトウェアにより、かつてのウォークアップシステムよりはるかに高い質量精度を得ることが可能になります。MassHunter Easy Access ソフトウェアにより、基本サンプル情報の入力、そしてリストからの分析メソッドの選択が簡単になり、TOF操作は簡単になります。ソフトウェアはサンプルバイアルを置く場所まで表示してくれます。結果は電子メールで配信され、必要な情報だけが含まれるように設定できます。



Easy Access ソフトウェアのわかりやすいユーザーインターフェースにより、専門家から初心者まで、研究者を問わず合成生成物の確認または未知化合物の同定を簡単に行うことができます。



アプリケーションを問わず、データブラウザソフトウェアによりTOF データのリモートレビューを行うことができます。

データブラウザソフトウェアによりリモートデータレビューも容易

ご使用の PC に TOF ソフトウェアが読み込まれていなくても、Agilent データブラウザソフトウェアにより TOF の結果のすべてを机上でレビューできます。これは Easy Access ソフトウェアのウォークアップ能力を補完するものです。Easy Access ソフトウェアでデータファイルを事務所でお使いの PC に電子メールで自動的に送信し、データブラウザソフトウェアで高速かつ簡単にデータレビューが可能です。

ハイスループット分析では、1つの画面の上にウェルプレート全体の結果が表示されます。便利な色分けにより、どの合成が成功したかが一目でわかります。質量誤差とサンプル純度情報も提供できます。

未知化合物の分析では、組成式またはデータベース検索の結果がデータブラウザソフトウェアにより提供されます。

詳しくは、 www.agilent.com/chem/tof
をご参照ください。

Agilent ホームページ:
www.agilent.com/chem/jp

仕様

質量範囲

m/z 50 - 12,000

質量正確さ

< 2 ppm、RMS、内部質量リファレンス
を使用してレセルピン (m/z 609.2807) の
(M + H)⁺ イオンで測定

分解能

13,000 以上 (m/z 2722 で測定)

スキャン速度

20 スペクトル/秒、m/z 100 ~ 3,000

40 スペクトル/秒、m/z 100 ~ 1,000

感度

> 10:1 S/N 比 (peak to peak)
m/z 609.2807 の (M + H)⁺ イオンで
カラムへのレセルピン 10 pg の LC/MS
注入に対して

条件

カラム - ZORBAX Rapid Resolution
SB-C18 2.1-30 mm 3.5 μm

移動相 - 水 25%
メタノール 75% 5 mM 酢酸アンモニウム

流量 - 400 μL/min

極性切り換え

スペクトルごとの極性切り替え可能

世界的なサービスとサポート

Agilent は、ライフサイエンスおよび化学
分析業界で最も優れたサービスおよびサ
ポート組織を有する企業として評価を得て
きました。Agilent の装置は 40 ヶ国以上の
国において、優れたサポートのもとに稼動
しています。常にお客様のご要望にお応え
するサポートを全世界で展開しています。

お問い合わせは

カスタムコンタクトセンター
0120-477-111

アジレント・テクノロジー株式会社
〒192-0033 東京都八王子市高倉町9-1

本資料に記載の情報、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。
このカタログに記載している機器類は、薬事法に基づく登録を行っていません。

著作権法で許されている場合を除き、書面による事前の許可なく、本資料を複製、翻案、翻訳することは禁じられています。

© Agilent Technologies, Inc. 2006
Printed in Japan November 1, 2006
5989-3600JAJP



Agilent Technologies