



The power of

# Accurate Mass

MS と MS/MS の新たな境地へ



Agilent 6520 Accurate-Mass Q-TOF LC/MS

Our measure is your success.



## Q-TOF 性能の向上

Agilent 6520 Accurate-Mass Q-TOF LC/MS は、Q-TOF のパフォーマンスを飛躍的に向上させました。32 ギガビット/秒のデータサンプリング、高効率イオン光学系、温度安定化 ADC (Analog to Digital Convert) 飛行時間型エレクトロニクスなどの技術革新により、6520 Q-TOF は、他の Q-TOF システムやトラップ型 LC/MS システムをはるかに超える、質量精度と分解能、感度、ダイナミックレンジを実現します。6520 Accurate-Mass Q-TOF は、医薬品不純物、代謝物、タンパク質バイオマーカーなどの多様なサンプルについて、プロファイリング、同定、キャラクタライゼーション、定量に必要な能力を提供します。

### 妥協のないパフォーマンスで、あらゆる難題に対処します

Agilent 6520 Accurate-Mass Q-TOF LC/MS は、以下の点において、Q-TOF 性能を向上させました。

- 1 ~ 2 ppm MS と 2 ~ 4 ppm MS/MS の質量精度
- 質量分解能の向上、低質量でのスペクトル、取り込み速度の低下なし
- 高フェムトグラムから低ピコグラム(アトムから低フェムトモル)レンジのオンカラム感度
- 最高 5 桁のダイナミックレンジ
- 最高 10 MS/MS スペクトル/秒のスペクトル取込速度
- $m/z$  25 ~ 20,000 の幅広い TOF 質量範囲

他社 Q-TOF やトラップ型システムとは異なり、6520 Q-TOF は、特定の性能を犠牲にすることなく、必要な性能のすべてを実現します。

### データを結果に変えるソフトウェア

6520 Q-TOF には、以下の機能を含む拡張データ取込とデータ解析能力を持つ、強力な MassHunter Workstation ソフトウェアが搭載されています。

- 最新の特徴抽出およびデータマイニング
- 組成式確認および組成式作成
- デコンボリューションおよび正確なインタクトタンパク質質量測定
- バッチ一覧データ確認など、便利な機能を用いた定量

さらに、以下のアプリケーション固有の拡張ソフトウェアパッケージにより、MassHunter ソフトウェアを強化することが可能です。

- 潜在的なバイオマーカーを検出するための示差質量プロファイリング
- 代謝物同定および代謝物データベース検索
- データベース検索および *de novo* シーケンシングによるタンパク質同定

### LC/MS の成功を確実にするための完全なソリューション

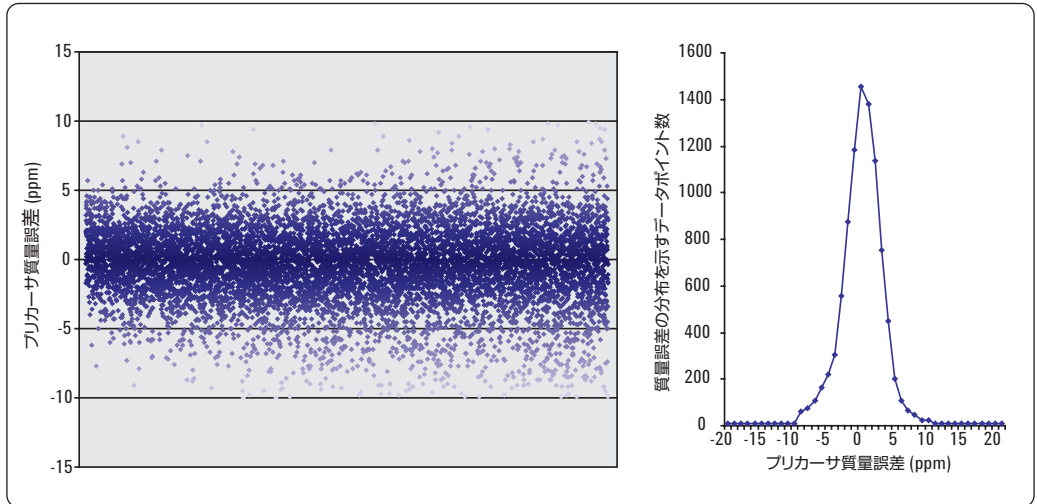
アジレントは、サンプル前処理からデータ解析まで、サンプル分析のための完全なソリューションを提供します。

- 高濃度血漿タンパク質の OFFGEL 電気泳動やマルチプルアフィニティ除去システムなどの革新的なサンプル前処理技術
- 画期的な HPLC-Chip/MS 技術を含む、さまざまな流量とアプリケーションに対応する業界有数の LC システム
- ESI、APCI、マルチモード、APPI、MALDI を含む、豊富なイオン化法ラインアップ
- Accurate-Mass Q-TOF システムの生産性を常に高めるサービスとサポート
- 知識豊富なアプリケーションコンサルティング

**良好な同定と  
高い信頼性のための  
精密質量測定**

6520 Q-TOF は、MS では 1 ~ 2 ppm、MS/MS では 2 ~ 4 ppm の卓越した Q-TOF 質量精度を誇ります。困難な条件下でも、分析結果に対する信頼性を得るために必要な質量精度を提供します。

6520 Q-TOF は、2 秒の狭いピークからも、質量精度を落とさずに、多くの高品質の MS および MS/MS スペクトルを取り込むことが可能です。この高速スペクトル取り込みにより、複雑な混合物のサンプリングを高い品質で行うことができます。

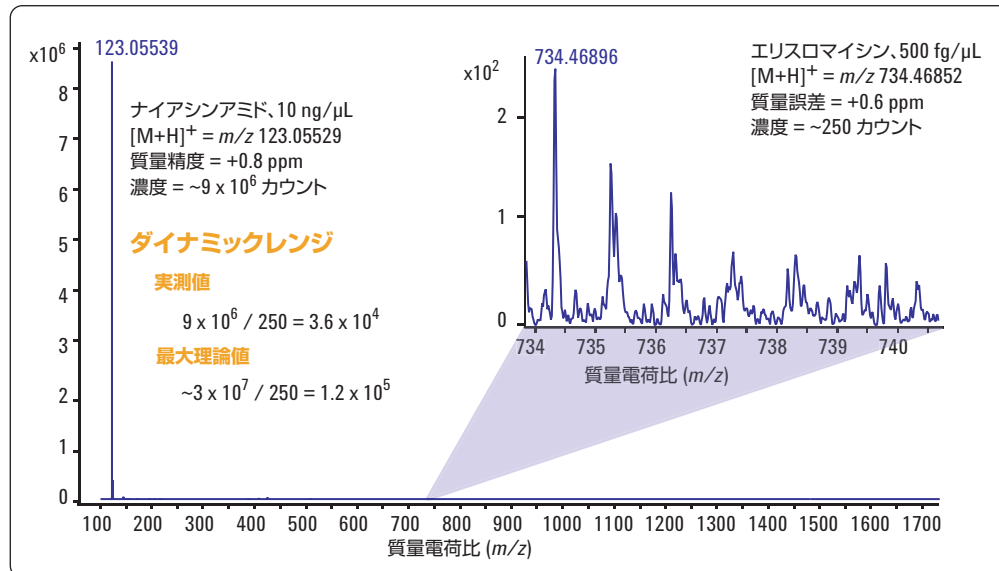


E. coli サンプルの消化により、さまざまな組成と濃度の数千のペプチド断片が生成されました。極めて困難な条件下でも、6520 Accurate-Mass Q-TOF は、データ依存取込を用いて、数千の真陽性ペプチドの一致の検索において、卓越した質量精度を発揮します。

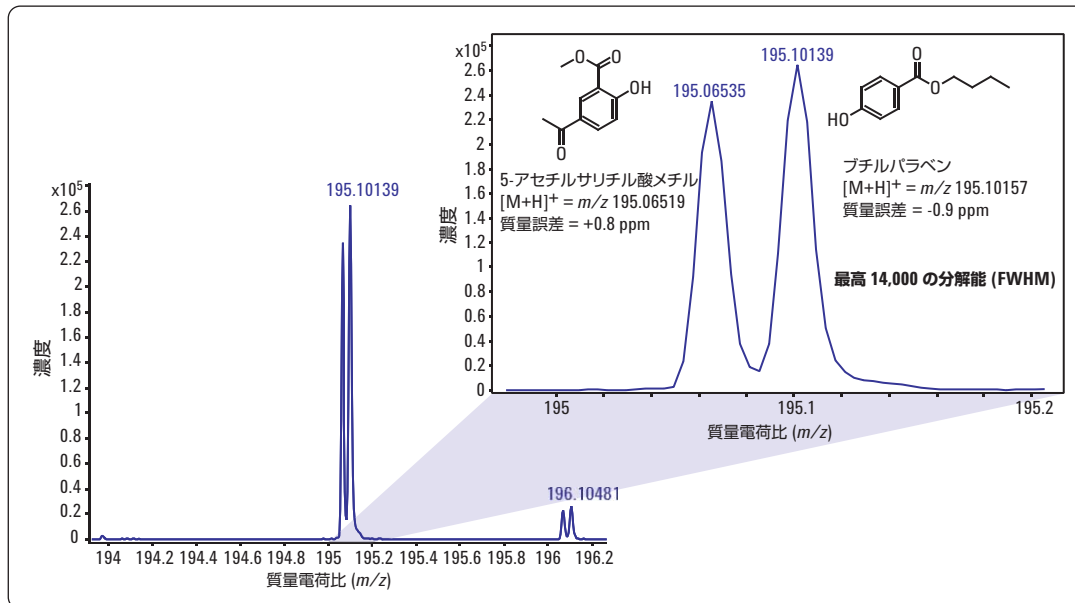
**卓越した感度と幅広いダイナミックレンジで微量成分も検出**

低濃度不純物や低濃度のタンパク質の同定などのアプリケーションには、感度とダイナミックレンジの両方が重要になります。6520 Q-TOF は、高濃度フェムトグラムから低濃度ピコグラム (アトモルからフェムトモル) までの範囲に及びオンカラム感度を実現します。

また、6520 Q-TOF の高速データ取込システムは、最高 5 桁のダイナミックレンジを示します。これにより、濃度の高い化合物を含むサンプル中の低濃度化合物の検出および同定が容易になります。TDC (Time to Digital Convert) 検出器を搭載した TOF/Q-TOF ではビームアテネーションにより感度低下が見られますが、6520 Q-TOF は感度も分解能も犠牲にしません。ダイナミックレンジは、他の Q-TOF や、イオントラップのキャパシティ制限のあるトラップ型システムのダイナミックレンジを上回ります。



分子量が大幅に異なる化合物を含む混合物の分析でも、6520 Q-TOF は 5 桁を超えるダイナミックレンジを示しています。



6520 Q-TOF は、正確な質量がわずか 0.03638 u だけ異なる整数質量 195 u の 2 つの化合物を正確に分離します。

### スペクトル取込速度を犠牲にせず、 近接した質量を分離する能力

6520 Accurate-Mass Q-TOF は、特に低質量側の質量分解能を大幅に高める、32 ギガビット/秒のデータ取込システムを搭載しています。6520 Q-TOF の卓越した高分解能により、対象質量ピークがサンプルやバックグラウンドの干渉イオンにより隠される可能性を最小限に抑えます。6520 Q-TOF は、同一の整数質量を持つ低分子量化合物を区別することが可能です。

トラップ型システムとは異なり、6520 Q-TOF はデータ取込速度を犠牲にせずに、卓越した質量分解能を実現します。20 MS スペクトル/秒、10 MS/MS スペクトル/秒、あるいはより一般的には多くの MS および MS/MS スペクトル/秒の組み合わせで、取り込むことが可能です。高速スペクトル取込により、6520 Q-TOF はラピッドレゾリューション (高速高分離) クロマトグラフィーを求めるハイスループットアプリケーションにも使用できます。

### 複雑なプロテオームサンプルを分析するための幅広い質量範囲

6520 Q-TOF は、低分子量化合物または断片とインタクトタンパク質の両方を検出することが可能な、 $m/z$  25 ~ 20,000 の幅広い TOF 質量範囲を有します。トラップ型システムは、質量範囲の上下限に制限があるため、*de novo* シーケンシングや翻訳後修飾分析に不可欠な断片データを見逃す可能性があります。また、抗体などの大きなインタクトのタンパク質には対応できない場合もあります。

## 答えを簡単に見つけられるソフトウェア

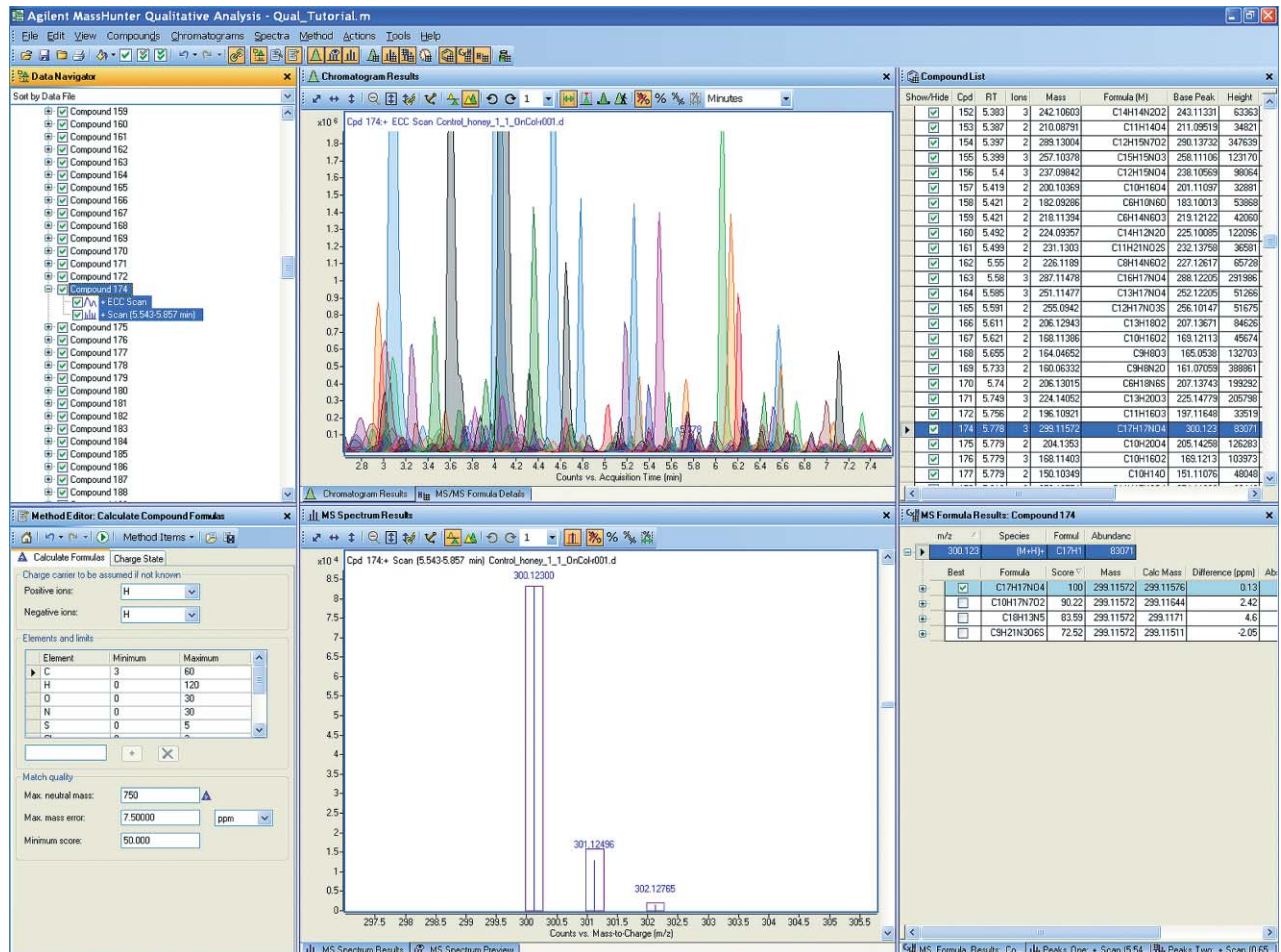
6520 Accurate-Mass Q-TOF 型質量分析計は、直感的かつ強力な機器コントロール、データ取込、定性/定量データ解析を行う、Agilent MassHunter Workstation を使用します。MassHunter ソフトウェアには、複雑な混合物中の個々の化合物の同定を強化する、強力な Molecular Feature Extraction (MFE) と組成式作成アルゴリズムを含む、独自のデータマイニング機能があります。

タンパク質分析用に、MassHunter ソフトウェアには、ペプチドやタンパク質個々に対して最適化された個別のデコンボリューションアルゴリズムが搭載されています。

以下のオプションのソフトウェアパッケージを用いて、MassHunter ソフトウェアを強化することが可能です。

- **MassHunter プロファイリングソフトウェア** - 2つのサンプルやサンプルグループの統計的に大きな偏差を迅速かつ簡単に同定します
- **MassHunter Metabolite ID ソフトウェア** - 医薬品前駆物質や代謝物から MS/MS スペクトルを自動的に関連付け、スコアと色分けされた結果を作成します
- **METLIN 代謝物データベース** - 15,000 を超える内因性代謝物の検索可能なデータベースを用いて、メタボロミクスを支援します

- **Spectrum Mill** - データベース検索や *de novo* シーケンシングを通じてタンパク質を素早く正確に同定する翻訳後修飾解析用ツールを含んでいます
- **GeneSpring MS** - 非常に多くのサンプルの統計プロファイリングや関連データマイニングのための強力なツールを提供します



MassHunter ソフトウェアは MFE 機能と組成式作成機能により、複雑なサンプルの分析を簡素化します。蜂蜜サンプルの分析では、すべての濃度で数百の化合物を検出し、簡単に確認できるようにデータを整理し、実験値と一致する組成式が提示されます。6520 Q-TOF の高い能力を示しています。

## 低分子量化合物分析の信頼性向上

Agilent 6520 Accurate-Mass Q-TOF LC/MS システムは、低分子量化合物の分析に対して、極めて汎用性の高いプラットフォームです。代謝物プロファイリングから医薬品の不純物分析まで、医薬品代謝物の同定から標的定量まで、精密質量 MS および MS/MS スペクトルの特異性により、信頼性の高い結果を提供します。

### 迅速かつ信頼性の高い、代謝物バイオマーカーのプロファイリングと同定

LC/MS は GC/MS 手法を補完し、内因性代謝物の総合的なプロファイリングを実現します。6520 Accurate-Mass Q-TOF は汎用性の高い装置で、代謝物のプロファイリングとバイオマーカー探索に最適であり、メタボロミクスに以下の利点をもたらします。

- 必要となるサンプル複製数を最小限に抑える再現性の高い結果
- より多くのバイオマーカーを検出するための、高速スペクトル取込および優れた Molecular Feature Extraction (MFE) 機能
- GeneSpring MS プロファイリングソフトウェアによる、データ比較および視覚化のための優れたツール (オプション)
- 包括的代謝物データベースである METLIN との連動 (オプション)
- 同定の信頼性を高める精密質量 MS および MS/MS スペクトル

### 卓越した再現性によりサンプルの必要量を最小限に抑えます

変動幅を統計的に判断するのに必要な分析サンプル数は、系統誤差と測定誤差の両方に依存します。Agilent LC/MS システムの卓越した再現性により、測定誤差が減少し、代謝物プロファイリング中に分析する必要のあるサンプル数を最小限に抑えることができます。

### 優れたスループットとデータ品質を得るための高速スペクトル取込

6520 Q-TOF は、ハイスループットラピッドレゾリューションクロマトグラフィ (高速高分離 LC) に対応し、多くの高品質データを取り込むために、最高 10 MS/MS スペクトル/秒でのデータ取り込みが可能です。

### Molecular Feature Extraction (MFE) により発見される代謝物数を増やします

バイオマーカーの発見は、できるだけ多くの代謝物を検出することから始まります。MassHunter ソフトウェア独自の MFE アルゴリズムにより、化合物が明らかなピークに一致しない場合でも、クロマトグラム中の化合物を検出します。

### GeneSpring MS は、プロファイリングと視覚化のための優れたツールです

GeneSpring MS ソフトウェアは、複数のサンプルやデータをクラスタリングするための強力なソリューションです。これには、統計分析、データマイニング、視覚化のための総合的なツールが含まれています。

### METLIN 代謝物データベースは代謝物同定を支援します

推定代謝物バイオマーカーが発見された後、同定する必要があります。METLIN データベースは、15,000 を超える内因性および外因性代謝物の他、ジペプチドやトリペプチドも含む、現在入手可能な最も総合的な代謝物データベースです。精密質量 MS データを METLIN データベースで検索することで、見込まれる代謝物 ID 数を大幅に減らすことが可能です。METLIN データベースのコピーは個人用ですので、さらに良い検索結果を得るために独自の化合物を追加することが可能です。

### 精密質量 MS および MS/MS スペクトルが信頼性を向上させます

精密質量 MS プリカーサデータはよりフォーカスしたデータベース検索を容易にする一方、精密質量 MS/MS 断片データは、データベース検索により提供される見込みのある ID を論理的に選別するのに役立ちます。データベース中に見込みのあるバイオマーカーが検出されない場合、6520 で提供される精密質量 MS および MS/MS スペクトルは、代謝物同定に不可欠です。

## METLIN Metabolite Database

Home | About | Metabolites | MS/MS | FTMS | LC/MS | Help



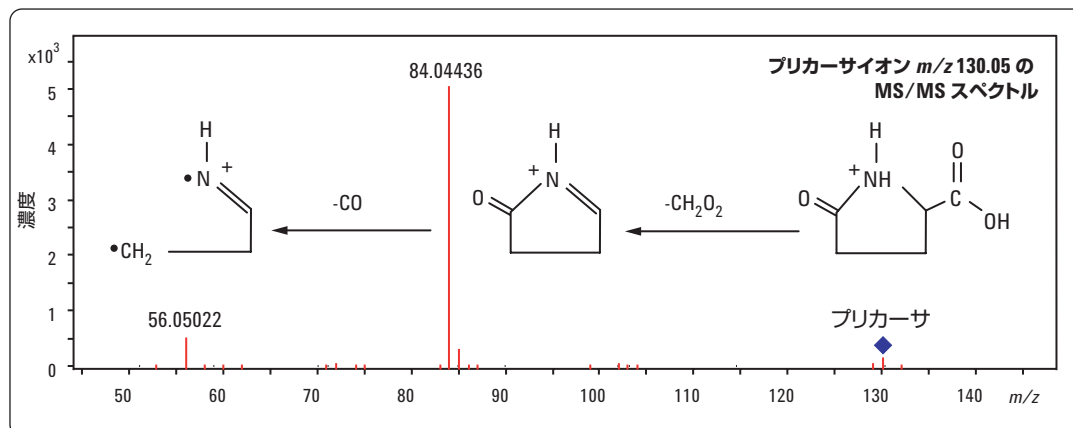
## Metabolites

(Metabolites 1-6 of 6)

Change Query

MID	Mass	Name	Formula	CAS	KEGG	Structure
284	129.0426	1-Pyrroline-5-carboxylic acid, 3-hydroxy-	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	22573-88-2		
3251	129.0426	Pyroglutamic acid	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	98-79-3	C01879	
5769	129.0426	Pyrrolidonecarboxylic acid	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>			
6196	129.0426	Pyrroline hydroxycarboxylic acid	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>			
6343	129.0426	N-Acryloylglycine	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>			
6564	129.0426	1-Pyrroline-4-hydroxy-2-carboxylate	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>			

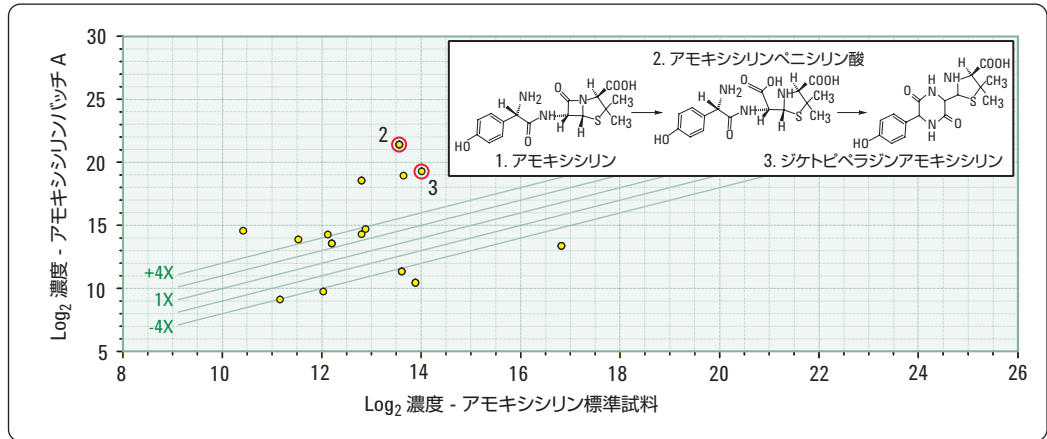
METLIN 代謝物データベースを検索するために精密質量データを使用することで、可能性のある代謝物 ID の数を大幅に減らすことが可能です。



バイオマーカーの構造式に関する MS/MS スペクトルの評価は、代謝物バイオマーカーの同定の最終段階になります。

## 不純物のプロファイリング、同定、定量

安全性研究で分解生成物などの不純物を探している場合、Accurate-Mass Q-TOFは非常に優れたソリューションです。サンプルのプロファイリング、不純物の検出や同定、天然化合物と不純物両方の定量も、すべて1台の装置で可能です。



- 高速データ取り込みは高速クロマトグラフィーに対応し、スループットを増加します

- MFE (Molecular Feature Extraction) により、さらに多くの化合物を検出します
- MassHunter プロファイリングソフトウェアにより、統計上大きな変動を特定するのが容易になります
- より簡単に信頼性の高い同定を行うための精密質量 MS および MS/MS スペクトル
- 簡単な相対的・絶対的定量

## 高速データ取り込みによりスループットを増やします

Agilent 1200 シリーズ RRLC を用いた高速で再現性の高いクロマトグラフィーと、6520 Q-TOF の高速データ取込により、サンプル分析時間が短縮されるため、データ品質を犠牲にせず、多数のサンプルを処理することが可能です。独自のマルチモードイオン源は、ESI および APCI スペクトルを同時に取り込むことで、さらに生産性を上げることが可能です。

MassHunter プロファイリングソフトウェアを用いて、アモキシシリンとアモキシシリン標準試料を比較することにより、アモキシシリンベニシリン酸 (2) とジケトピペラジニアモキシシリン (3) の2つの不純物 (分解物) が同定されました。

## MFE は分解生成物の検出を行います

MFE は明らかなクロマトグラフピークを検出するだけではありません。共溶出する場合でも、サンプル中のできるだけ多くの化合物を同定するための共変イオンを分析します。6520 Q-TOF の幅広いダイナミックレンジと優れた感度により、天然化合物が多量に存在する場合にでも、微量な不純物を検出することが可能です。

## ソフトウェアツールによりプロファイリングを簡素化します

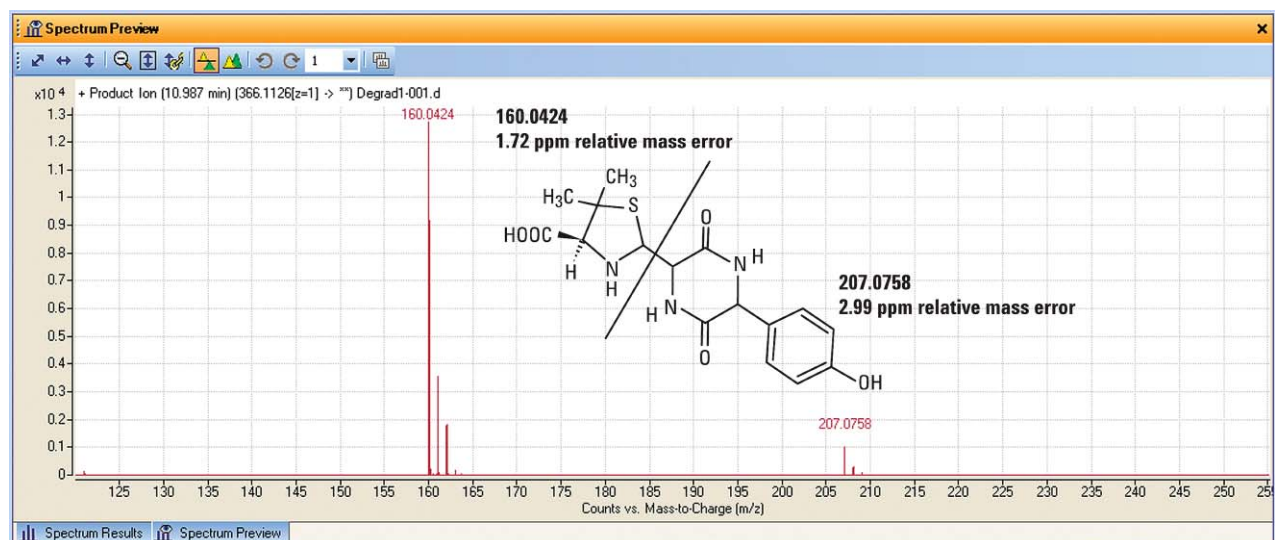
MassHunter プロファイリングソフトウェアは、サンプル間の統計上重要な差を同定する視覚化ツールを提供します。これにより、存在量比を計算し、差次的に発現した特徴をはっきりと同定します。

## 明確に同定するための精密質量 MS および MS/MS データ

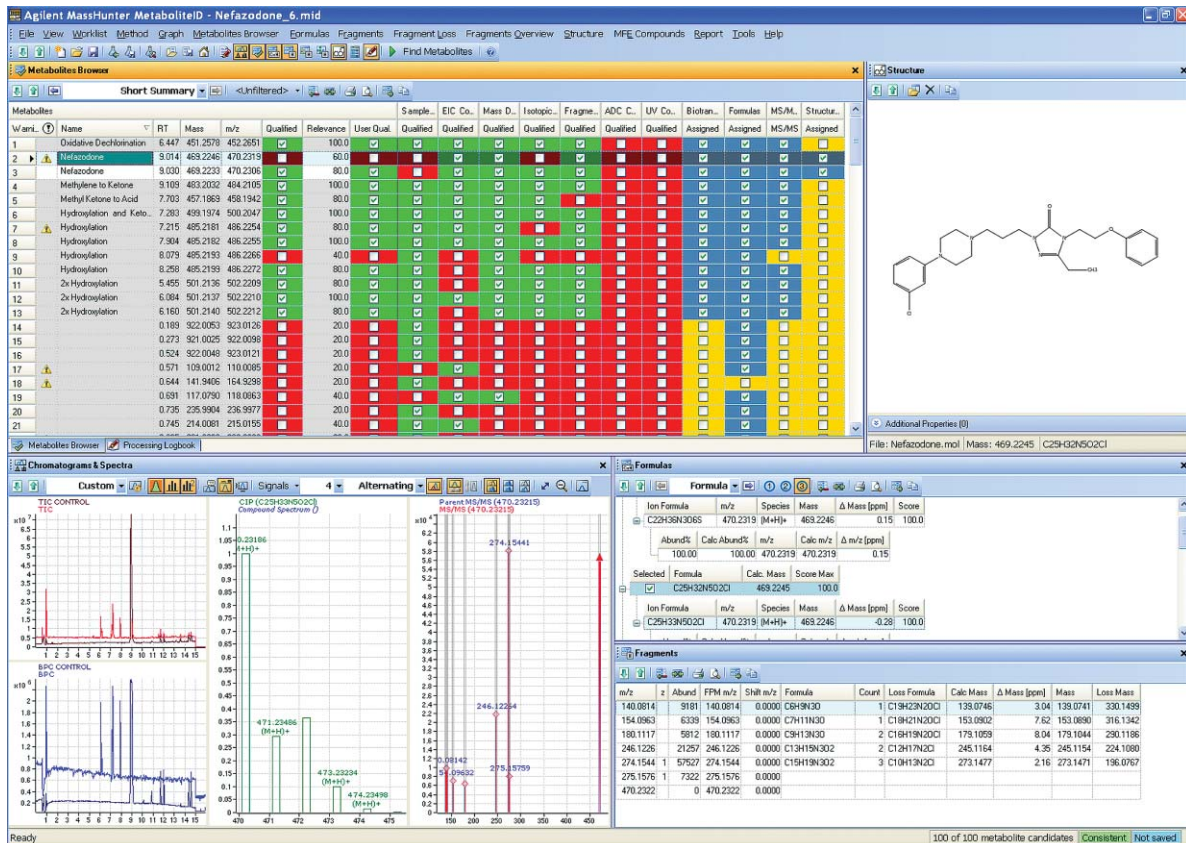
不純物を同定する必要がある場合、アジレントの分子式作成プログラムでは精密質量 MS/MS スペクトルを利用し、同定をさらに確実にします。

## ソフトウェアを用いた直接的な定量

MassHunter ソフトウェアの定量分析プログラムでは、同定した不純物の相対的または絶対的な定量測定値を非常に容易に得ることができます。このソフトウェアは、自動化されたパラメータレス積分、検量線アシスタント、ピークが再積分されると検量線が自動的に更新されるダイナミックリンク、外れ値を自動的にフラグ付けするバッチ一覧結果確認など、生産性の向上が図られています。



不純物 3 (プリカーサ  $m/z$  366.1126) の分析により、ジケトピペラジニアモキシシリンの構造式に一致する生成物イオンが示されました。



MassHunter Metabolite ID ソフトウェアは、ハイスループット代謝物同定を容易にします。また、最終スコアを決定する際にバイオトランスフォーメーションにより生じる可能性のある質量数のシフトを検討する Auto-Shift アルゴリズムなどの拡張機能を搭載しています。

## シンプルで代謝物同定

外因性代謝物のハイスループット同定には、作業を簡素化するソフトウェアを搭載した高速で信頼性の高い LC/MS システムが必要です。6520 Accurate-Mass Q-TOF は、シングル四重極や TOF のような使いやすさに加え、高い信頼性を備えたリサーチグレードの質量分析計として、MS および MS/MS データを提供します。また、新しい MassHunter Metabolite ID ソフトウェアは、代謝物同定を簡素化します。

- 優れた精密質量 MS および MS/MS データにより、良質で正確な同定結果を得られます
- 幅広いダイナミックレンジと卓越した Q-TOF の感度が、より高濃度の化合物の存在下で、低濃度代謝物を検出するのに役立ちます
- 独自の MFE アルゴリズムにより、代謝物検出を効率的に行います
- 代謝物 ID ソフトウェアが生産性とスループットを高めます

## 精密質量データにより、さらに確実な代謝物の同定が可能になります

精密質量データは、より多くの確実な同定を可能にします。6520 Q-TOF は、データ取込速度や感度を犠牲にせずに、精密質量 MS および MS/MS データを取得します。代謝物同定によく使用される高速ハイスループットクロマトグラフィーに完全対応します。

## 幅広いダイナミックレンジと優れた感度により、低濃度代謝物を見つけ出します

TDC 検出器を搭載した TOF、Q-TOF は、一般的にダイナミックレンジは非常に狭いです。このため、より高濃度の化合物を含むサンプル中の低濃度化合物の検出は、非常に困難であり、場合によっては不可能です。Accurate-Mass Q-TOF は、ADC 検出器と 32 ギガビット/秒のデータ取込システムにより、最高 5 桁のダイナミックレンジを実現します。

## MFEにより多くの化合物を検出します

幅広いダイナミックレンジは、MassHunter ソフトウェアの MFE アルゴリズムにより補完されます。結果として、より多くの代謝物が検出されます。

## Metabolite ID ソフトウェアは代謝物を素早く容易に検出します

これまでにない Metabolite ID ソフトウェアは、Novatia 社製の有名な Auto-Shift アルゴリズムを使用し、代謝物同定を向上させます。アルゴリズムにより、親薬物からの MS/MS スペクトルとサンプルからのスペクトルを関連付け、相関のスコアを作成します。最終スコアの決定では、個々および複数のバイオトランスフォーメーションにより生じると見込まれる質量数のシフトを検討します。色分けされた結果により確認が容易で、結果を承認したり、設定画面に戻ってフィルタリング基準を調整することが可能です。結果は Excel 形式でエクスポートできます。

## 精密質量データによるフルスペクトルと特異性をを用いた目的物質の定量

Q-TOF は定性分析に頻繁に使用されますが、精密質量測定と MS/MS スペクトルの特異性により、定量アプリケーションにも役立ちます。汎用性の高い 6520 Accurate-Mass Q-TOF により、事前に同定した代謝物バイオマーカーと他の多くの化合物を簡単に定量することが可能です。6520 Q-TOF を用いた定量の利点は以下のとおりです。

- 精密質量、フルスペクトル MS および MS/MS による大きな特異性
- ターゲットリストにより、6520 Q-TOF はターゲット化合物群からできるだけ多くのデータを取り込めるようになります
- リテンションタイムウィンドウにより、取り込まれるスペクトルの品質を向上させます
- 強力で、使いやすい定量ソフトウェア

## 精密質量、フルスペクトルの MS と MS/MS の特異性

フルスペクトル、精密質量の MS と MS/MS データを取得できる 6520 Q-TOF は、目的物質の信頼性を高めます。精密質量スペクトルにより、確実に目的化合物を定量できます。

## ターゲットマストリストによりデータディペンデントを排除します

6520 Q-TOF のターゲットマストリストを用いると、MS/MSを行う際に設定するイオン強度のしきい値やイオンの最大数に依らず、MS/MSデータが取り込まれます。これにより、対象化合物からできるだけ多くのデータが取り込まれるようになります。

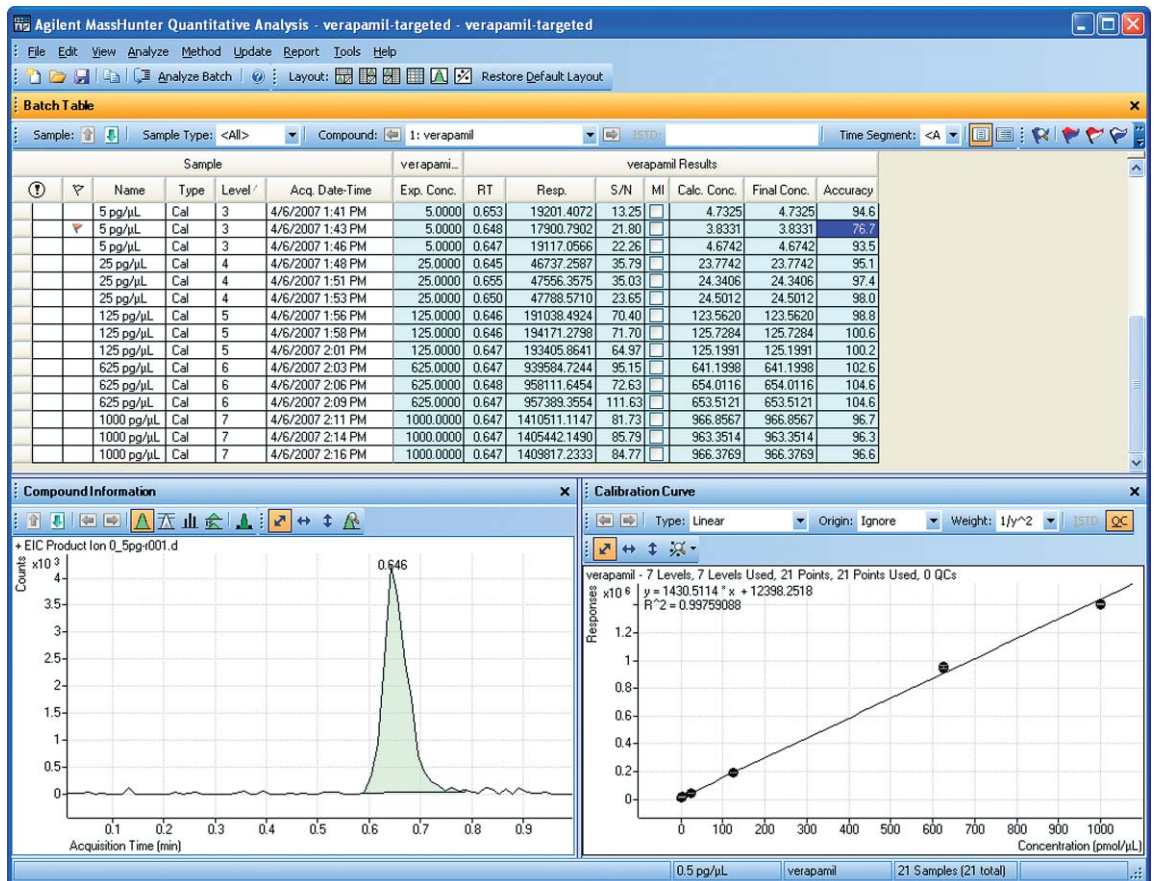
## リテンションタイムウィンドウによりスペクトルの品質を向上させます

各ターゲットイオンに個別のリテンションタイムを指定できるため、MS/MS スペクトルの品質を向上させます。所定時間内で、1つのイオンまたは数個のイオンだけに集中することで、6520 Q-TOF はより高い感度とスペクトルの品質を得ます。ターゲットイオンから多くの MS/MS スペクトルを取り込み、平均化することが可能です。複雑なサンプル中の複数の化合物の定量を試みる場合、これが特に役立ちます。

## 使いやすい定量ソフトウェア

MassHunter 定量ソフトウェアには、高速で正確な定量を実現するのに役立つ多くの機能が含まれています。

- 新しいパラメータレス積分を含むインテグレータの選択
- 検量線アシスタント
- 動的に関連付けられた結果
- 異常値フラッグ付加を用いたバッチ一覧結果確認



MassHunter ソフトウェアの定量パッケージは定量を簡単にし、MS または MS/MS データを用いた目的化合物の定量を行うことが可能です。

## 1台の装置で、生体分子のプロファイリング、同定、キャラクタライゼーション、定量が可能です

Q-TOF 質量分析計はタンパク質同定に頻繁に使用される装置です。精密質量測定と MS/MS スペクトルの組み合わせにより、信頼性の高い同定が容易になります。Agilent 6520 Accurate-Mass Q-TOF LC/MS は同定のためのソリューションにとどまりません。プロファイリングや探索、同定やキャラクタライゼーション、そして対象タンパク質の定量確認も行うことが可能です。

### より多くのタンパク質バイオマーカーを発見します

タンパク質バイオマーカー探索は、多くの分析上の困難を伴う複雑な仕事です。6520 Q-TOF は以下の能力により、この難題に対処します。

- より多くのバイオマーカーを検出可能な感度とダイナミックレンジ
- より特徴的な化合物を検出し、より信頼性が高く、効率的なプロファイリングを行うソフトウェア
- 確実に同定するための精密質量 MS および MS/MS 構造式情報
- 偽陽性の数を減らし、必要なサンプルの測定回数を最小限に抑えるトータルシステムでの再現性

### サンプル前処理能力の向上により、分析結果も改善されます

アジレントのマルチプルアフィニティ除去カラムと mRP-C18 高回収率タンパク質カラムは、干渉する高濃度のタンパク質と塩類と一緒に除去します。6520 Q-TOF の卓越した感度とダイナミックレンジにより、ng/mL の濃度でも、より重要なタンパク質を検出することが可能です。

### Molecular Feature Extraction は、より多くのバイオマーカー候補を見つけ出します

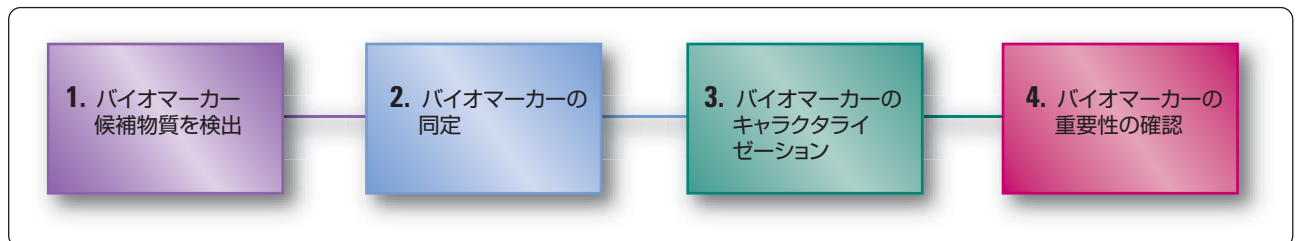
MassHunter ソフトウェア独自の MFE アルゴリズムは、より多くの見込みのバイオマーカーの候補を検出するのに役立ちます。クロマトグラム中の共変イオンを探すことで、クロマトグラフで分離されない場合にも、存在する化合物を検出します。

### 優れたプロファイリングを行うソフトウェアツール

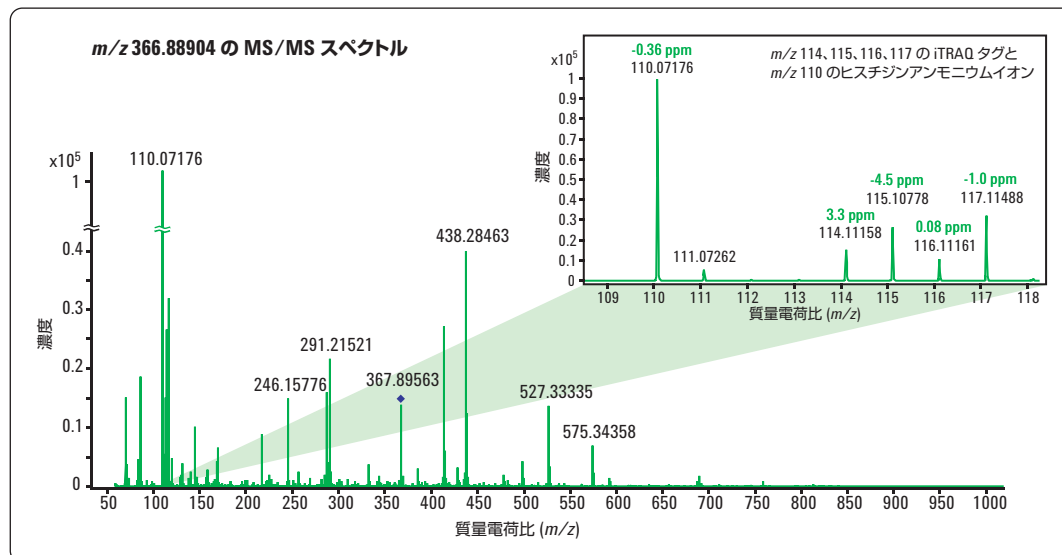
MassHunter プロファイリングソフトウェアと GeneSpring MS ソフトウェアは、プロファイリングに必要な、洗練された統計比較と視覚化ツールを含み、複数のサンプルを同時に解析できます。

### 卓越した分析再現性によりサンプルの必要数を減らします

HPLC-Chip による分離と 6520 Q-TOF による分析の優れた再現性により、サンプルや種類間の差が統計上重要だと判断するために必要なサンプルの測定回数を最小限に抑えます。同じ Q-TOF 装置でプロファイリングと同定の両方を行うことで、分析変動をさらに減らすことが可能です。



6520 Accurate-Mass Q-TOF は、バイオマーカー探索ワークフローの各段階で、その性能を発揮します。



6520 Q-TOF は iTRAQ などのタグ試薬を用いた定量方法にも対応しており、高い精密質量精度と分解能を提供します。

### 標識したタンパク質の精密質量データを用いた迅速な定量分析

iTRAQ、SILAC、 $^{18}\text{O}$  などの標識試薬は、タンパク質の定量分析に幅広く使用されています。HPLC-Chip/MS 技術を搭載した 6520 Accurate-Mass Q-TOF は、タンパク質の定量分析に最適なプラットフォームで、以下の特長を提供します。

- ワールドクラスの安定性、再現性
- 優れた分解能
- 最高レベルの質量精度
- 高速分析
- 定量解析と同定解析に優れたソフトウェア
- 容易なメソッド設定機能

### 高い安定性により低い RSD 値を実現し、信頼性を高めます

LC/MS システムがスペクトル間やサンプル間で高い再現性を有している時、標識定量の値は大幅に高められます。6520 Q-TOF の MS/MS 測定は極めて安定しており、一貫したイオン比再現性を有しています。結果として、RSD は小さく、必要十分な信頼性を得るために要するサンプル量は少量で済みます。

### タグ試薬との干渉を識別するための高い分解能と精度

タグ試薬/ペプチドと干渉イオンを識別する能力は、正確な存在比を得るために不可欠です。6520 Accurate-Mass Q-TOF の 32 ギガビット/秒データ取込システムは、イオントラップよりも高い質量分解能を提供し、分解能を高めるためにスペクトル取込速度を落とす必要はありません。

### 信頼性の高いタンパク同定のための最高レベルの MS/MS スペクトル質量精度

6520 Q-TOF のコリジョンセルとイオン光学系の革新的な設計により、同じ標準物質で分子量キャリブレーションを MS や MS/MS スペクトルに使用することが可能です。結果として、MS/MS スペクトルを高い質量精度 (2 ~ 4 ppm 程度) で測定可能になり、タンパク質データベース検索において、偽陽性率を大幅に下げることが可能になりました。

### 高速分離、高速分析

アジレントの画期的な HPLC-Chip/MS 技術は、従来のナノカラムによる分離よりも分離能と再現性が高く、より高速な分離が可能です。クロマトグラフィーの性能を犠牲にせず、高いスループットが得られます。また、HPLC-Chip はサンプル消費が少ないため、微量サンプルの測定や追加分析に威力を発揮します。

### Spectrum Mill ソフトウェアは MS/MS スペクトルの質量精度を効果的に利用します

Spectrum Mill ソフトウェアは Q-TOF の MS/MS スペクトルの高い質量精度を利用し、確からしさの高いタンパク質検索結果の候補範囲を絞り込み、偽陽性を排除します。iTRAQ 試薬の補正係数が必要な場合、補正係数を用いて自動的に計算できます。

### 簡単な機器セットアップとメソッド設定

6520 Q-TOF の測定パラメータの大部分は、最適化できる範囲が広く、機器の最適化やメソッドの設定は迅速かつ容易に行えます。また、汎用性の高いメソッドを作成できます。

## 低濃度のタンパク質も同定可能な分析能力

6520 Accurate-Mass Q-TOF はタンパク質の正確な同定に必要な性能を提供します。

- データベース検索結果を改善し、偽陽性を少なくするための MS および MS/MS の精密質量測定
- 低濃度のタンパク質を同定する優れた MS および MS/MS 感度
- 高濃度の化合物の存在下での低濃度の成分検出を向上させる、幅広いダイナミックレンジ
- クロマトグラフピークからの重要な MS/MS データ抽出に必要な、速いデータ取込設定
- 偽陽性の少ない高速データベース検索

## 感度や取込速度を犠牲にしない精密質量測定

イオントラップ型システムと一部の Q-TOF 型質量分析装置には原理的な制限があり、精密 MS/MS 測定を実現するために、データ取込速度を減らしたり、感度を犠牲にしたり、またはその両方を必要とする場合があります。これらの機器は、高速クロマトグラフィーに適合する速度で精密質量データを取り込むことができません。対照的に、6520 Q-TOF は最高 10 MS/MS スペクトル/秒で取り込むことが可能で、ご使用の RRLC (ラピッドレゾリューション LC) やナノフロークロマトグラフィーに十分に対応します。

精密質量 MS および MS/MS データを用いると、データベース検索での偽陽性の数を劇的に減らすことができますが、評価試験により明らかになっています。タンパク質がデータベース中に見つからず、*de novo* 解析を適用する場合も、精密質量データは大きな利点を持っています。

通常用いる設定範囲内の取込速度で得られる高い質量精度と同時に、6520 Q-TOF は高濃度タンパク質の存在下に同時に存在する重要な低濃度タンパク質を同定するのに必要な、卓越した感度とダイナミックレンジを提供します。

## タンパク質同定のための総合的なソフトウェア

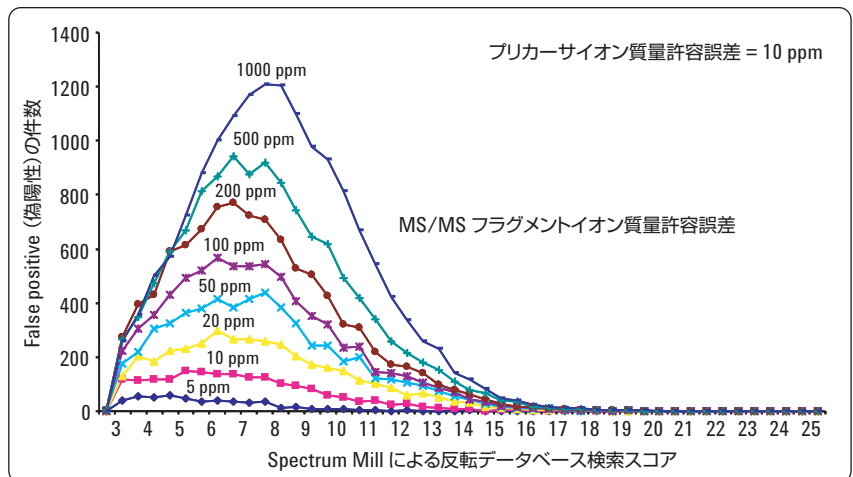
Agilent Spectrum Mill ソフトウェアは、精密質量 MS および MS/MS データを上手く利用し、さらに信頼性の高いタンパク質同定を行います。データベース検索や *de novo* シーケンシング手法を用い、タンパク質の同定に使用することが可能です。Spectrum Mill ソフトウェアには以下の機能が搭載されています。

- データベース検索を加速し、偽陽性の数を減らすインテリジェントスペクトル抽出
- 未修飾ペプチドと修飾ペプチド両方用の MS/MS 検索モード
- 同定したタンパク質の相対的定量
- iCAT、iTRAQ 等、安定同位体標識化技術をサポート

## MASCOT との互換

お客様のラボが MASCOT タンパク質データベース検索エンジンでデータベース検索プロセスを標準化されている場合でも、ご心配はいりません。MassHunter ソフトウェアは、MASCOT と互換性のある形式でデータをエクスポートすることが可能です。

E. coli サンプルの分析により、6520 Accurate-Mass Q-TOF を用いて得られる精密質量 MS/MS データを使用することで、タンパク質データベース検索からの偽陽性一致の率を大幅に減らした結果を提示します。



## 翻訳後修飾の簡単な同定と解析

生体中のタンパク質の大部分は、リン酸化や糖鎖付加などの翻訳後修飾 (PTM) を受けるため、同定や解析がより困難になります。6520 Q-TOF の測定結果を Spectrum Mill ソフトウェアで解析することにより、PTM を容易に同定および解析することができます。

- 精密質量測定を安定して行うことで、偽陽性を少なくするためにデータベース検索の際に設定するパラメータ許容範囲を狭めることが可能です
- 比類なき Q-TOF 感度により、より多くの低濃度タンパク質を検出します
- 高速の IDA 分析 (データ依存 MS/MS) により、翻訳後修飾部位の可能性のある質量範囲を抽出します
- アプリケーション固有のソフトウェアにより、プロセスを簡略化し、より高品質な結果を作成します

## 精密質量データにより偽陽性を減らします

精密質量データにより、データベース検索時に質量精度の誤差許容範囲を狭めることが可能なため、偽陽性の高いタンパク質同定の数を減らします。Spectrum Mill ソフトウェアは、6520 Q-TOF の MS/MS データの 5 ppm 未満の精密質量を活用し、検索精度をさらに向上させます。

特に効率的な方法は、未修飾タンパク質をまず検索して結果を保存し、修飾に関してこのサブセットを再検索することです。結果として、修飾に関してデータベース全体を 1 回検索するよりも速く、偽陽性は少なくなります。

## より多くのタンパク質を検出するのに必要な感度

修飾タンパク質は、低濃度で存在している可能性が高くなります。6520 Q-TOF の優れたダイナミックレンジと感度は、高濃度タンパク質の存在下で、同時に存在する低濃度タンパク質を検出するのに役立ちます。

HPLC-Chip/MS 技術により感度をさらに高めることが可能で、これにより、クロマトグラフィー分解能と質量分析の測定感度の両方が向上します。

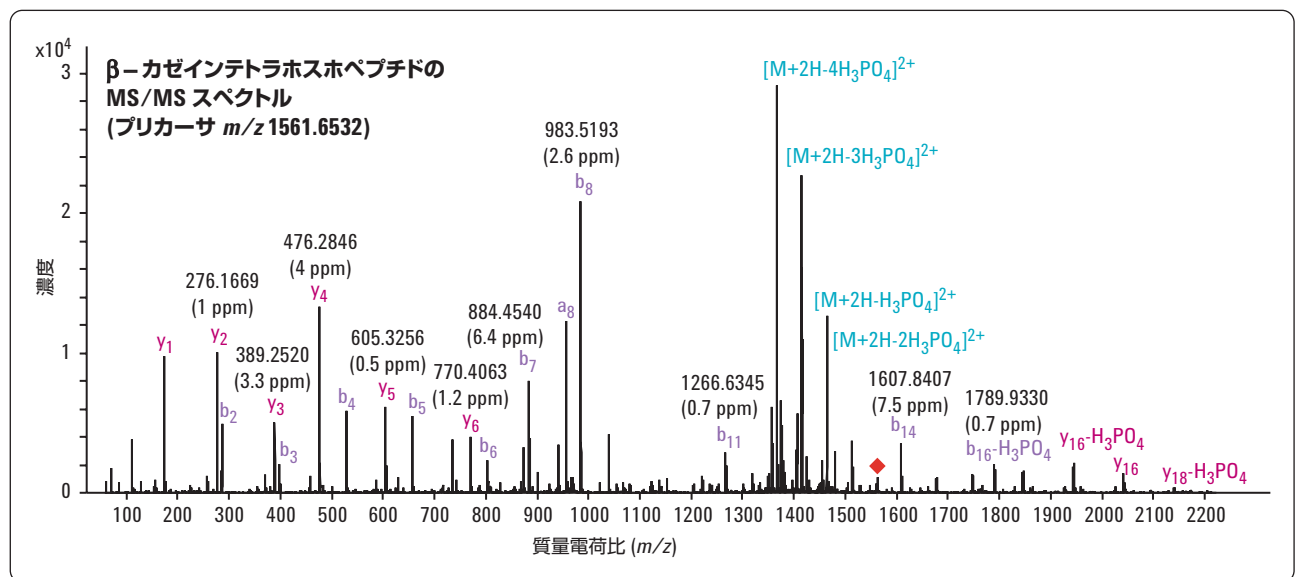
## IDA (データ依存 MS/MS) 機能により、確実な同定を行います

広い測定レンジは、PTM の同定と検出に不可欠です。6520 Q-TOF の高速データ依存 MS/MS 測定により、広範囲の修飾および未修飾タンパク質に対応する広い解析レンジを提供します。

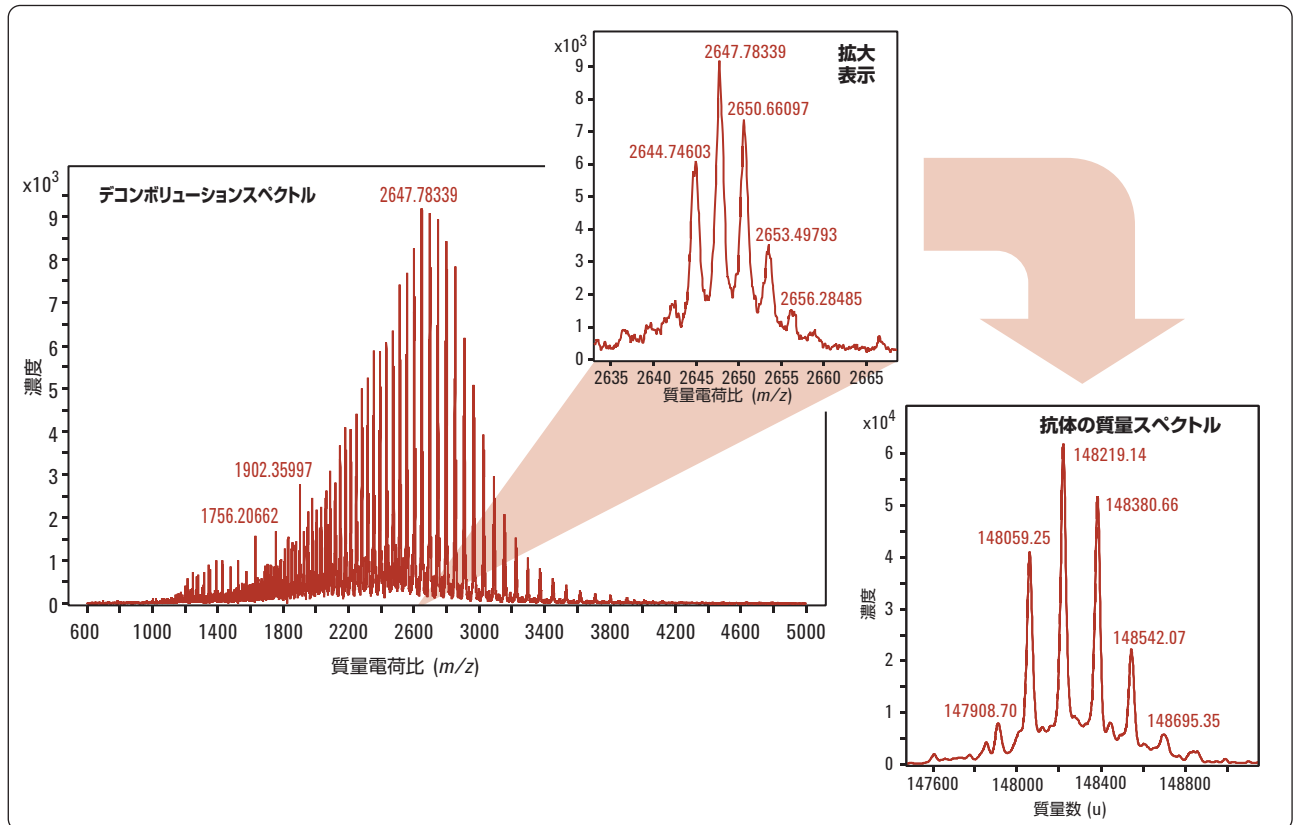
## PTM (翻訳後修飾) の同定と位置を明らかにするソフトウェア

適切なデータ解析は、PTM の位置決定と同定に不可欠です。Spectrum Mill ソフトウェアは、データベース検索や *de novo* シーケンシング中に、一般的な翻訳後修飾を明らかにすることが可能です。カスタム修飾を入力することも可能です。Spectrum Mill ソフトウェアは、6520 Q-TOF の優れた MS/MS 質量精度を活用し、データベース検索と *de novo* シーケンシングの解析結果両方の精度を高めます。

MassHunter ソフトウェアは、MASCOT タンパク質データベース検索エンジンと互換性のある形式で、データをエクスポートすることも可能です。



牛乳からのベータカゼインの Q-TOF 分析により、テトラホスホペプチドのリン酸ニュートラルロスその他、シーケンス情報も明示します。



抗体の構造を壊さずに分析した結果から、6520 Q-TOF の優れた質量精度と抗体内のさまざまな糖種を分離する能力が実証されています。

### 組み換え抗体とその他のタンパク質のより正確な QA/QC

翻訳後修飾と化学的分解は、抗体やその他の組み換えタンパク質の性質と有効性に大きく影響を及ぼす可能性があります。効率的な品質保証と品質管理のためには、タンパク質活性と薬物安全性を保証することが必要です。タンパク質同定結果の検証と変化した部分の解析の両方を可能にする必要があります。アジレントの優れたサンプル前処理と分離技術を組み合わせた 6520 Accurate-Mass Q-TOF は、タンパク質 QA/QC にも最適なプラットフォームです。

- インタクトタンパク質の正確な分子量測定
- シーケンスカバレッジを向上させ、PTM 解析を向上させる、優れた LC 分離
- カバレッジを向上させる革新的な分離

### インタクトタンパク質のより正確な測定

タンパク質の正確な分子量測定は、QA/QC で不可欠な要素です。6520 Q-TOF が有する高分解能と高質量精度により、タンパク質の分子量を正確に測定し、QA/QC 測定の信頼性を劇的に高めます。アジレントの MassHunter Workstation ソフトウェアにより、インタクトタンパク質の解析には、MS データ用に最適化されたアルゴリズムを用いて、簡単に効率的なデコンボリューション操作を行います。

### 優れた LC 分離により、修飾の確認作業を向上させます

インタクトタンパク質の修飾を解析する場合、タンパク質消化の後、ペプチドの再分析を行い、修飾の種類や性質を確認することも可能です。Agilent 1200 LC システムにより提供される卓越したクロマトグラフィ分解能は、PTM を完全に解析するために必要な良好なシーケンス範囲を可能にします。6520 Q-TOF の高速 MS/MS 取込は、シーケンスカバレッジも向上させます。

### 革新的な分離をさらに可能にする分離方法

分離技術でリーダーシップを誇るアジレントは、組み換えタンパク質の QA/QC を高める方法を提供します。独自の OFFGEL 電気泳動技術は、pI 変動に基づき、グリコシル化およびリン酸化タンパク質を容易に分離できます。これにより、その後の LC 分離を向上させ、シーケンスカバレッジを向上させることが可能です。

## サービスおよびサポート

アジレントは、ライフサイエンスおよび化学分析業界において、最も優れたサービスとサポートを提供しています。洗練された通信技術とインフラストラクチャにより、40ヶ国以上でグローバルな事業を展開しています。ラボの所在地にかかわらず、迅速な対応と充実のサポートで、お客様に万全のサポートサービスを提供します。

## 詳細情報

詳細はウェブサイトをご覧ください。  
[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

## コールセンター

フリーダイヤル 0120-477-111

本製品は研究専用です。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。また、本資料掲載の機器類は薬事法に基づく登録を行っておりません。

アジレントは、本資料に誤りが発見された場合、また、本資料の使用により付随的または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。また、本資料掲載の機器類は薬事法に基づく登録を行っておりません。

© Agilent Technologies, Inc. 2007  
Printed in Japan October 31, 2007  
5989-6826JAJP



Agilent Technologies