

# 同定、定量を簡略化 精密質量による全体像の把握

Agilent 7250 GC/Q-TOF システム



## より大きな成果を達成するために

サンプルにどんな成分がどの程度含まれているのかを解明できれば、的確な判断を下し、立ちはだかる課題を打開できるようになります。

数々の革新技術を搭載した一体型の Agilent 7250 GC/Q-TOF システムと、豊富な解析機能を備えた Agilent MassHunter ソフトウェアがあれば、きわめて困難な GC/MS アプリケーションでも信頼性の高い結果が迅速に得られます。7250 は、以下のようなアプリケーションをはじめ、きわめて複雑な同定、定量、探索の課題にも対処できる最高レベルの GC/MS システムです。

- 複雑なメタボロミクス研究
- 分析困難なマトリックス中の農薬のスクリーニング
- 多様なマトリックス中の化合物の同定
- 化学工業原料の汚染レベルの確認

7250 GC/Q-TOF システムは、分析現場に求められる性能と堅牢性を考慮して設計されています。お客様が必要とする高品質の結果が確実に得られます。



### ルーチンワークフローから最先端の研究まで、あらゆる分析に究極の信頼性を実現

#### 7250 GC/Q-TOF の特長：

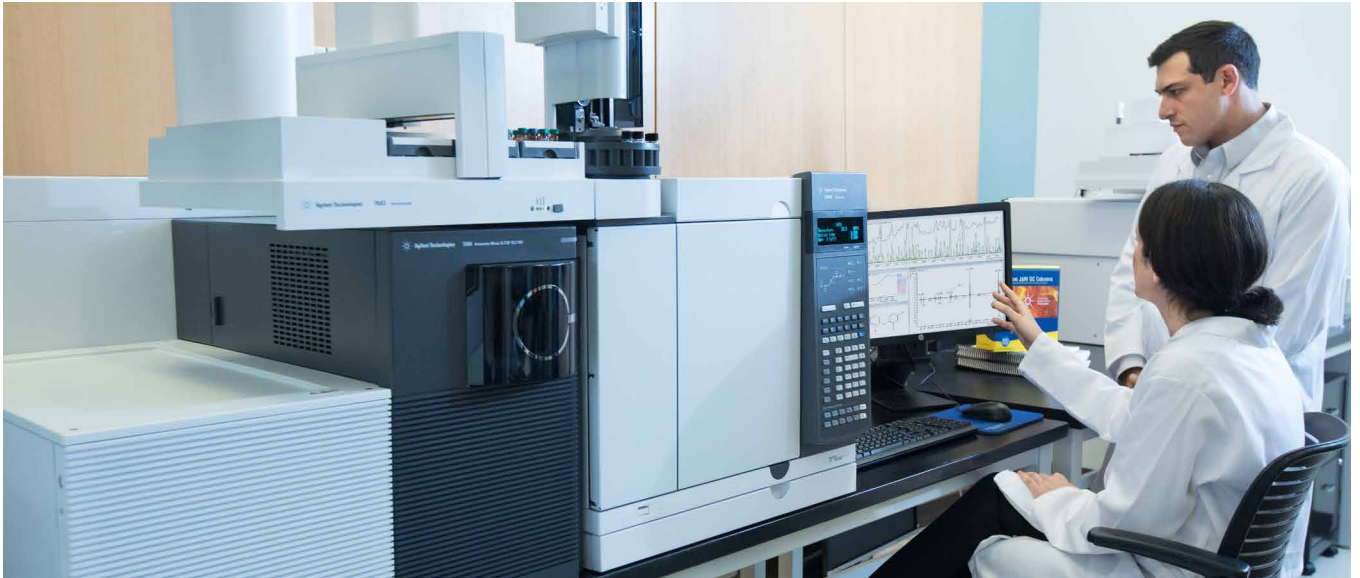
- 高感度の検出
- 正確な定量
- 分子式推定能力
- シンプルなスペクトル
- 再現性のあるデータ
- ダイナミックレンジ

#### お客様のメリット：

- 将来的な規制への対処
- より確かな結果
- 未知化合物の推定
- データ解析の効率化
- 再現性の向上
- 偽陰性と偽陽性の排除

### 複雑化が進む課題の解決に向けた新たなメソッドと画期的なアプローチ

ラボが求める分析レベルは時代とともに進化しています。アジレントは 40 年以上にわたり、お客様のニーズに応える革新技術を通して世界中のラボを支えてきました。7250 は、アジレント最高性能を誇る GC/Q-TOF であり、卓越した性能と堅牢性を発揮します。



## 化合物同定にさらなる確信を

「アジレントの機器が当ラボにとって非常に有用である理由は3つあります。信頼性が高いこと、正確なこと、使いやすいことです。」

– Mike Thurman 博士

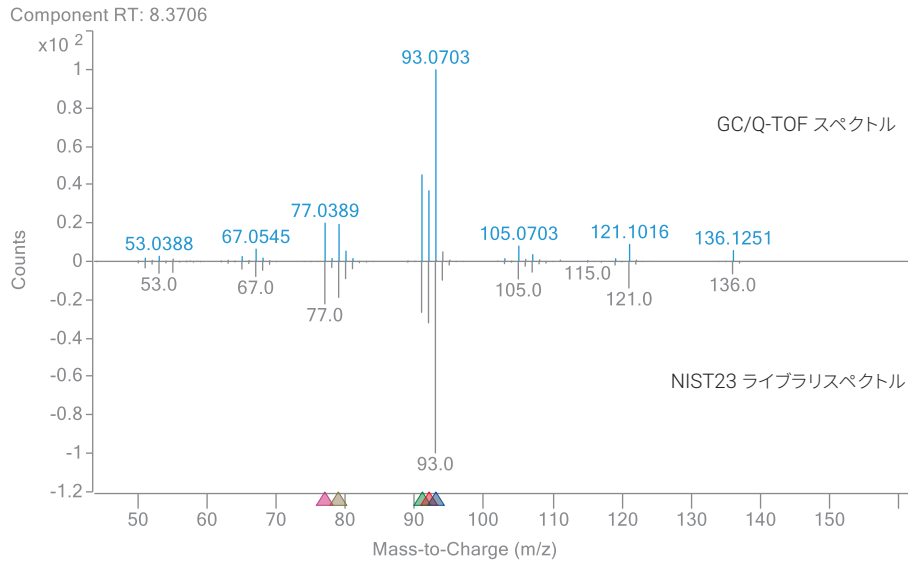
Center for Environmental Mass Spectrometry, University of Colorado

研究、開発、品質管理では、サンプルの全体像を把握することがきわめて重要になります。優れた分析力を備えた Agilent 7250 GC/Q-TOF システムと MassHunter ソフトウェアがあれば、化合物の同定をかつてないほど正確かつ確実に行えます。

- **化合物の確実な同定**：歪みのないライブラリ品質のスペクトルが得られるため、市販ライブラリとの照合により確信をもって化合物を同定できます。
- **確かな情報にもとづく分子式の確認**：正確な同位体パターンにより、高い信頼性での分子式推定が可能です。
- **微量成分の検出**：スペクトル内ダイナミックレンジが広いため、高濃度の共溶出物の存在下でも成分を確実に検出できます。
- **分子構造の解明**：高分解能の精密質量プロダクトイオンスペクトルを含む MS/MS 測定データから分子構造情報が得られます。また、優れた選択性によりマトリックス干渉が排除されます。

## ライブラリヒットの信頼性を高める 忠実なスペクトルと精密質量

市販のライブラリでスペクトルを検索することにより、化合物を簡単に同定できます。7250 GC/Q-TOF では、数十万種類もの化合物ライブラリスペクトルと同等の品質のスペクトルが得られます。実際、ライブラリスペクトルの大半は Agilent 四重極 GC/MS システムで生成されたものです。ライブラリと同等の EI フラグメンテーションパターンと精密質量情報が得られることから、7250 GC/Q-TOF システムは、EI ライブラリを用いた化合物同定に最適なプラットフォームと言えます。



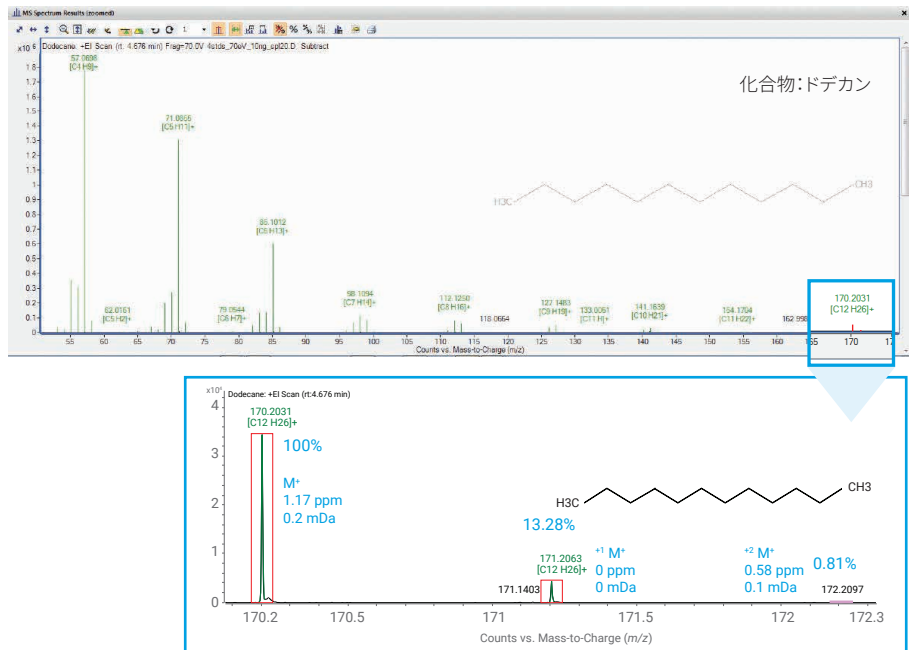
土壌中の  $\alpha$ -ピネン。ライブラリー一致スコア：95.8

Component RT	Compound Name	Match Factor	Best Hit	Formula	Component RI	Library RI	Delta RI
8.3706	(1R)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]...	95.8	<input checked="" type="checkbox"/>	C10H16	932	932	0

## 正確な同位体パターン

信頼性の高い化合物同定に必要なのは、優れた質量精度だけではありません。同位体パターンマッチングなど、各成分の特性を考慮することも不可欠です。

MassHunter Qualitative Analysis では、同位体忠実度を簡単に視覚化できます。また、その情報を特性に基づき精密質量測定データとあわせて使用することで、化合物を確実に同定することが可能です。Agilent 7250 GC/Q-TOF システムでは、微量濃度の同位体も含め、きわめて正確な同位体パターンが得られます。ここに示すドデカンのスペクトルでも、低アバンドンスの  $M+1$  ピーククラスタが検出されているのがわかります。

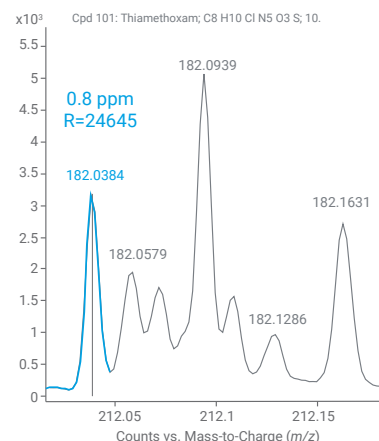
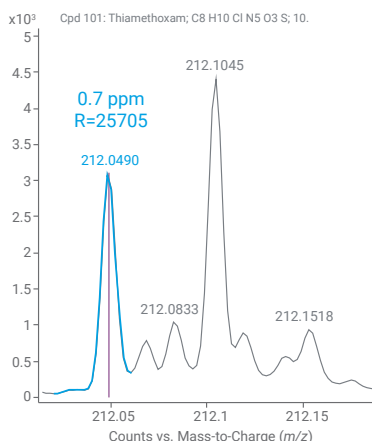


## 農薬に対する高い分離能と質量精度

目的成分を干渉成分から分離するには、高い分解能が必要です。しかも、複雑なマトリクス中の微量成分を分析する際には、広いダイナミックレンジや優れた感度といった性能特性も確保できなければなりません。

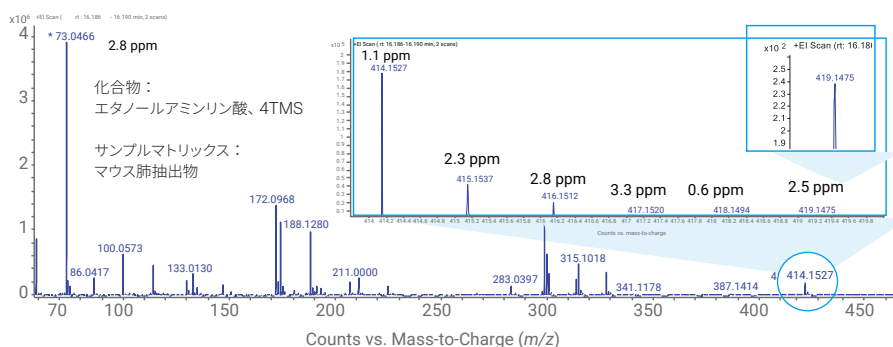
ここに示す例は、7250 を使用して、アボカド中の殺虫剤チアメトキサム 5 ppb を分析した結果です。アボカドはマトリクスが複雑でバックグラウンドが非常に高いサンプルですが、特徴的な質量ピークが、EU SANTE/11945/2015 ガイドラインに準拠した質量精度でバックグラウンドから分離されています。

この優れたスペクトル性能は、取り込みスピードや質量範囲を変えても損なわれることはありません。



## 複雑なマトリクスにも対応できる広いダイナミックレンジ

広いスペクトル内ダイナミックレンジにより、バックグラウンドが高い場合や高濃度の共溶出物が存在する場合でも、微量濃度の目的成分を確実に検出できます。7250 のスペクトル内ダイナミックレンジは通常 4 桁におよび、それは高マトリクス下でも変わりません。この例は、マウス肺から抽出した複雑な生体サンプルの分析結果です。16,000+:1 のダイナミックレンジにより、微量のエタノールアミンリン酸 (4TMS) が検出されています。

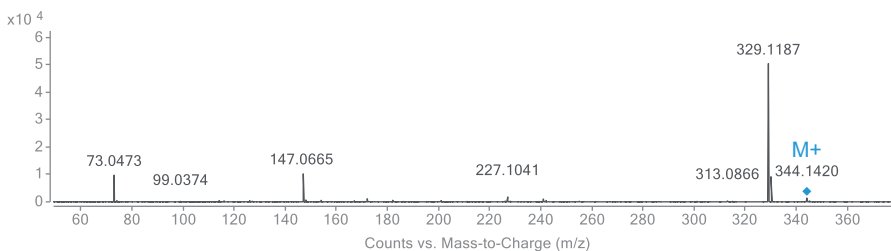


## アジレントバリュープロミス

アジレントは、ご購入日から 10 年間、機器の性能を保証いたします。また、アップグレードの際には、システムの残存価値に見合った導入プランをご提案します。

## 化学構造の解明とさらなる真相の探求

Agilent 7250 GC/Q-TOF は MS/MS 機能を備えた精密質量飛行時間型システムです。Molecular Structure Correlator ソフトウェアでは、推定分子イオンから生成された MS/MS プロダクトイオンスペクトルをもとに、フラグメントイオンの精密質量情報にもとづいて可能性のある化合物がスコア化されてリストアップされます。



**48 structures found for rt=14.408:ce20**

Sort by: # Reference: Show structures for: C13H28N2O3S3

Structure #	Mass	Intensity	Weight(%)	No. of candid.	Best score
1	329.1187	50455.72	78.7	2	90.7
2	147.0665	10204.34	3.2	4	42.2
3	73.0473	9762.28	0.7	1	98.6
4	330.1197	9215.45	14.5	2	55.4
5	227.1041	1790.00	1.3	0	0.0
6	172.0981	1129.09	0.5	0	0.0
7	241.0467	1073.97	0.9	2	95.0
8	148.0672	707.77	0.2	1	66.9

Structure #1 -- elucidated: 75.0% ions, 98.2% Weight

Penalty=1.0 dM=5.9ppm F.D.S.=91.0  
C12H26N2O3S3-H Score=90.7

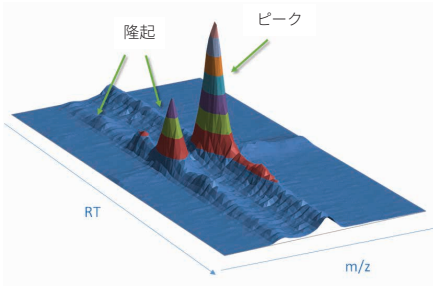
Penalty=9.5 dM=5.9ppm F.D.S.=91.0  
C12H30N2O3S3-5H Score=65.1

Chemical structures shown include:  
 C13H28N2O3S3: 461809  
 C13H28N2O3S3: 481642  
 C13H28N2O3S3: 481658

未知化合物や、構造が未知の化合物の場合は、可能性の範囲をフィルタで絞り込むことが可能です。



## 定量・定性真度を向上



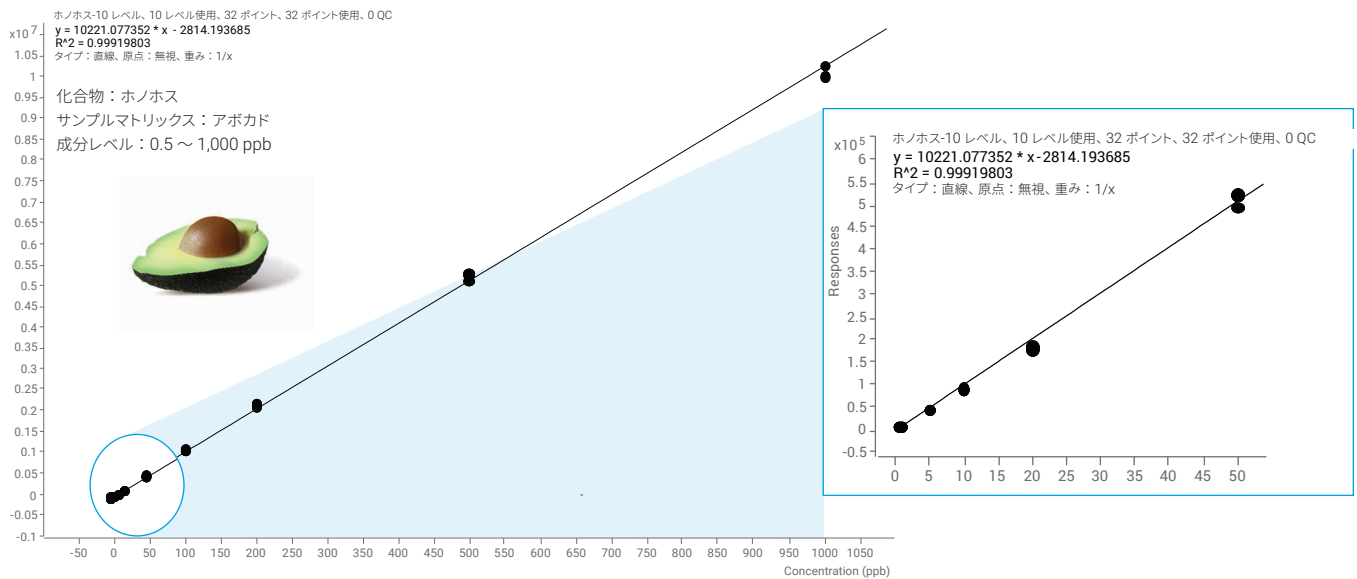
Agilent MassHunter SureMass は、高分解能 MS プロファイルデータ用に設計された化学的特性検出アルゴリズムです。

ターゲットを絞った定量化とターゲットを絞らない取り込みを組み合わせることで、大きな成果を得られます。Agilent 7250 GC/Q-TOF システムは、高い質量分解能と広いダイナミックレンジを兼ね備え、卓越した定量真度をもたらします。また、最先端のエレクトロニクスにより、複雑なマトリックスの微量分析においても、広い濃度範囲にわたってレスポンスの直線性と一貫性を確保します。

高分解能の精密質量データに最適化されたアジレント独自のシグナル処理アルゴリズム SureMass により、ダイナミックレンジの直線範囲はさらに広がります。ノンターゲット分析では、優れた質量精度を達成しながら、高速かつ高感度のクロマトグラフィーデコンボリューションを実行することも可能です。

## 複雑なマトリックスでも正確に定量

広い直線ダイナミックレンジにより、幅広い濃度にわたって優れた定量真度が実現されます。この例は、アボカドマトリックスに含まれる 0.5 ~ 1,000 ppb のホノホスの検量線です。複雑なサンプルであるにも関わらず、低濃度領域までレスポンス係数が一定に保たれています。



# 化合物の同定を加速する Low-Energy EI イオン源

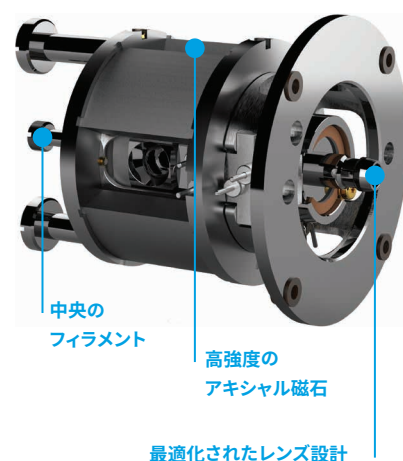
これまで非現実的とされてきたワークフローも、世界唯一の高分解能 GC/Q-TOF、7250 なら可能です。特殊なイオン化法に頼らなくても、幅広い成分に電子イオン化 (EI) を汎用的に適用し、シンプルで明確なスペクトルを生成することができます。

7250 に搭載されている Low-Energy EI イオン源は、Agilent 5977 シングル四重極 GC/MS および 7010 トリプル四重極 GC/MS システムで多くの実績がある超高感度イオン源 (HES) をベースとしています。このイオン源は低エネルギーでの EI に最適化されていますが、従来の 70 eV のイオン化電圧でも優れた性能を発揮します。また、HES の改良により Low-Energy EI の感度が飛躍的に高まり、GC/MS に新たな形のソフトイオン化がもたらされます。

7250 GC/Q-TOF システムでは、このソフトイオン化オプションに加え、PCI および NCI に対応した交換可能な化学イオン化イオン源もご利用いただけるため、1つのシステムでよりシンプルな分析が実現します。

- **高い信頼性での同定**：下流の構造解析に必要な分子イオン情報が得られます。
- **これまでにない汎用性**：幅広い化合物クラスをイオン化できます。他のソフトイオン化法に起こりがちな大幅な感度低下も生じません。
- **効率の向上**：GC/MS のマーケットリーダーが提供する実績あるイオン源技術の優れた性能を活用いただけます。

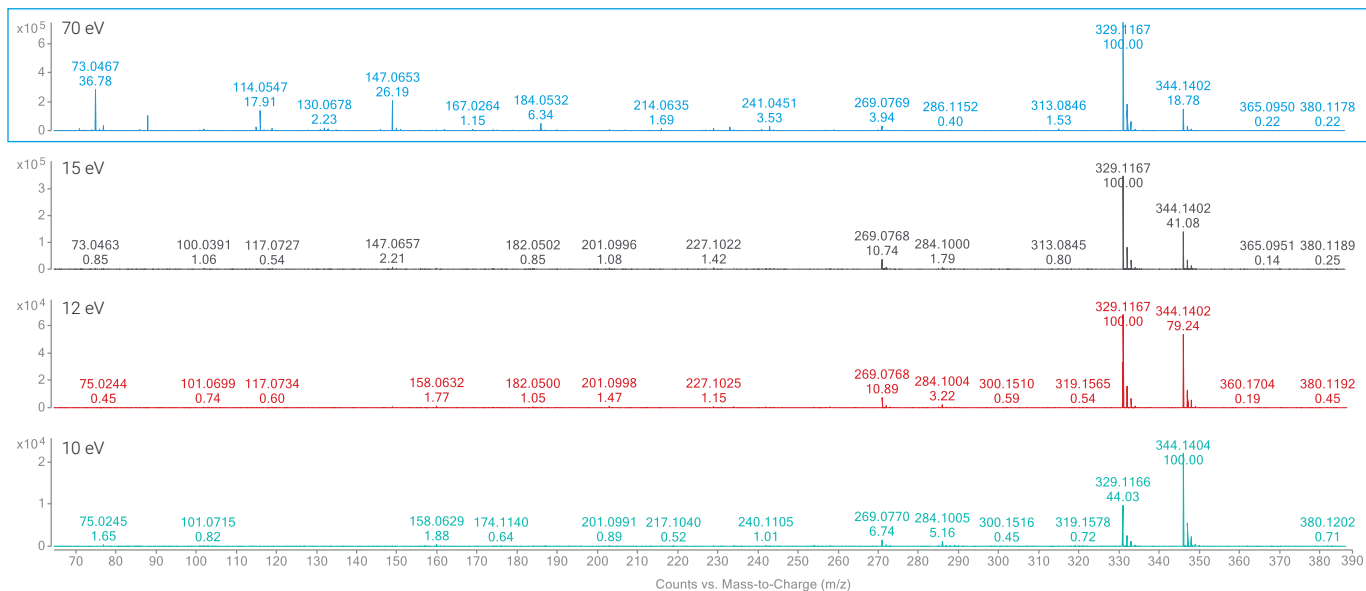
7250 の Low-Energy EI イオン源



## 複雑なマトリックス中の代謝物も確実に同定

イオン源のイオン化エネルギーを下げて測定したスペクトルでは、高  $m/z$  側の分子イオンの信号強度が高くなっています。つまり、電子エネルギーが低いほど、この未知化合物の分子イオンの相対アバンダンスは高くなります。

Low-Energy EI による分子イオンの同定



## 食品の安全を GC/Q-TOF テクノロジーで守る

食品の生産者と消費者は、儀和物混入や偽装表示の脅威にさらされています。また、国際貿易の活発化、規制の厳格化、食品安全性に対する意識の高まりを背景に、食品検査をより頻繁かつ詳細に行うことが急務となっています。

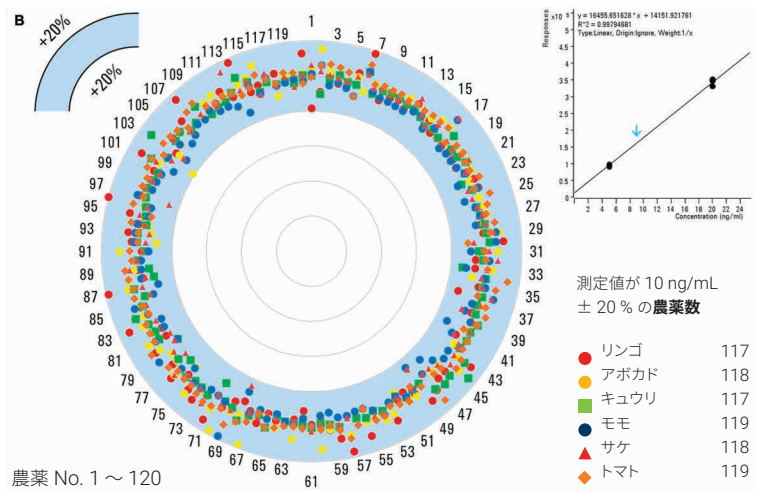
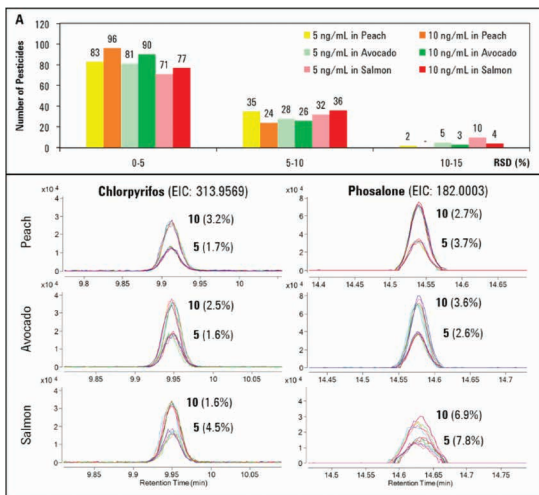
これらの課題を解決へと導く最適なプラットフォームが 7250 GC/Q-TOF システムです。GC/Q-TOF は、食品分析で主に以下のような目的に使用されています。

- 農薬の精密質量 PCDL にもとづくサスペクト化合物のスクリーニングとターゲット化合物の定量
- SureMass によるデコンボリューションと NIST などの広範なユニットマス EI ライブラリを使用したノンターゲットスクリーニング
- 食品分類による偽装の検出



### さまざまな食品のマトリックスに対応

ノンターゲットでの取り込みデータを精密質量スペクトルライブラリと照合することで、食品マトリックス中の農薬を包括的にスクリーニングできます。



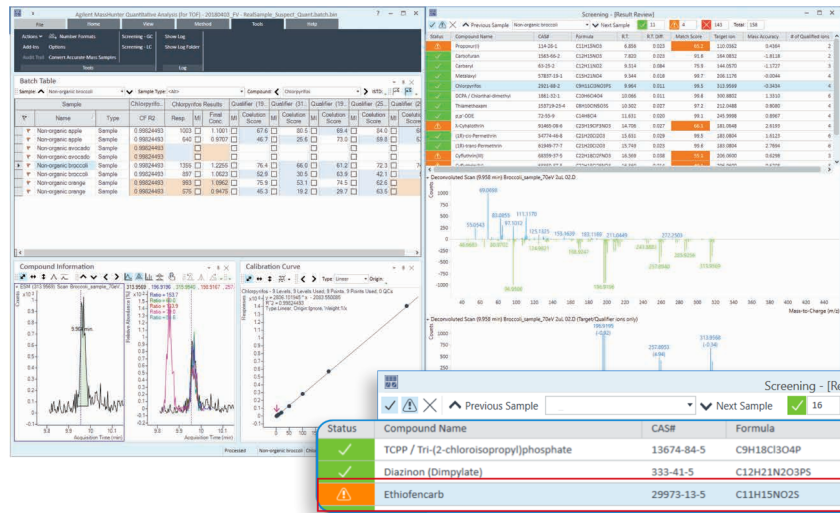
アボカドおよびサケを含む 3 種類の食品マトリックスに、120 種類の農薬を 5 ng/mL および 10 ng/mL でスパイクして分析しました。測定データから求めた再現性 (RSD%) 値により、7250 の優れた分析性能が確認されました。図には、検出された特徴的なイオン 2 種類の繰り返し分析結果も示しています。

最大残留基準値 (MRL) への適合性の迅速な確認に必要な定量真度を評価するために、それぞれ複雑さの異なる 6 種の食品マトリックスに農薬 120 種を 10 ng/mL でスパイクして分析しました。アボカドやサケのような複雑なマトリックスにおいても、テストした農薬/食品の組み合わせの 97% 以上で、EU SANTE/11813/2017 ガイドラインに準拠した定量真度が得られました。

## 偽陽性を容易に排除できる GC/Q-TOF サスペクトスクリーニングワークフロー

1つの分析メソッドにより、大量のサンプルバッチで数百種類のターゲット化合物やサスペクト化合物を簡単に評価できます。MassHunter ソフトウェアでは、ターゲット化合物を同時に定量測定できます。また、標準物質のない存在が疑われる化合物についても、高分解能スペクトライブラリサーチによるスクリーニングが可能です。

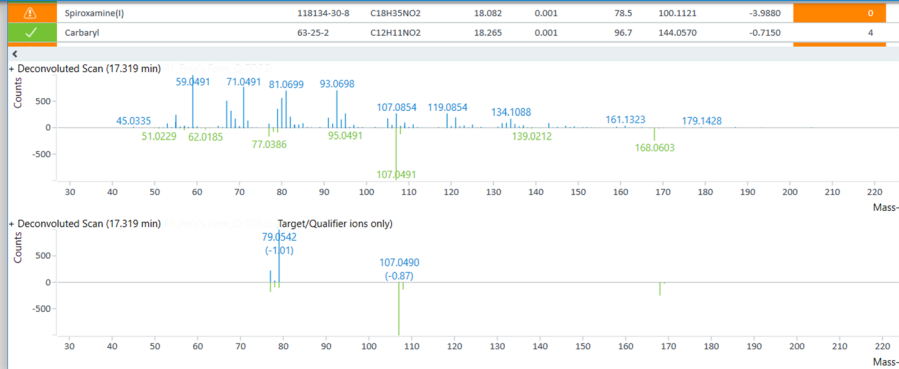
ターゲット化合物とサスペクト化合物を同じデータ解析ツールで同時にスクリーニング



Agilent 7250 GC/Q-TOF システムと、農業および環境汚染物質の GC/Q-TOF パーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) を組み合わせることで、1,000 種類を超える対象化合物の定性スクリーニングを行えます。このスクリーニングに標準物質は必要ありません。PCDL を簡単にカスタマイズし、スクリーニング範囲を広げることも可能です。

「GC/MS Q-TOF システムのおかげで、確実な結果を得ると同時に偽陽性も防げました。」

– Peter Furst 博士  
Department of Central Analytical Services,  
Chemical and Veterinary Analytical Institute,  
Münsterland-Emscher-Lippe

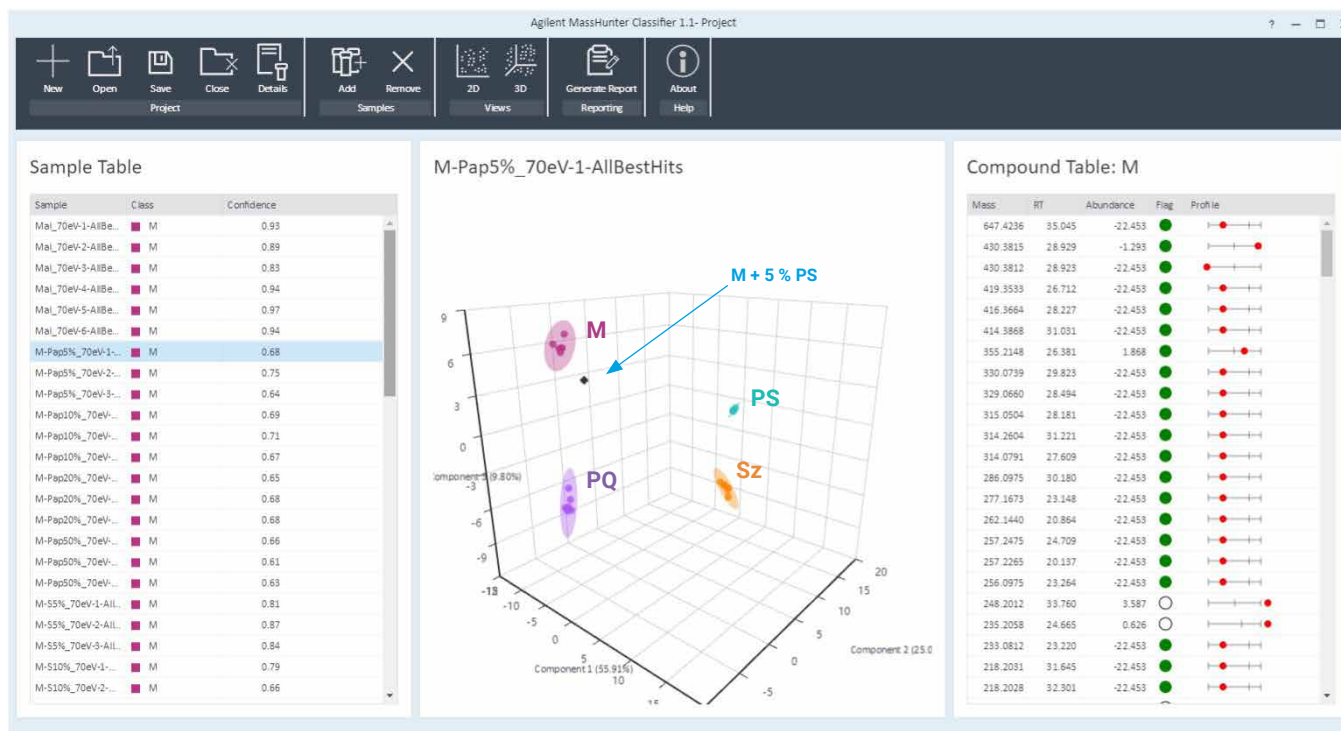


比較対象となる標準物質の分析データがなくても、真のヒットと誤った同定を正しく判別できます。この能力は、7250 GC/Q-TOF システムの高分解能と優れた精密質量性能の現れです。

## 食品真正性の確認と偽装の検出

食品偽装がビジネスとして急速に発展しつつあります。こういった食品偽装や偽和物混入を検出する手段として、飛行時間型 (TOF) 技術とノンターゲット分析を組み合わせたアプローチが脚光を浴びています。Agilent Mass Profiler Professional (MPP) ソフトウェアで分類モデルを作成し、Agilent MassHunter Classifier ソフトウェアで偽装を検出すれば、高分解能 GC/Q-TOF による食品の特性解析をさらに効率化できます。

化合物リストや 3 次元 PCA プロットなどの可視化ツールを備えた MassHunter Classifier ソフトウェア



高分解能の精密質量 GC/Q-TOF データと差分析ソフトウェアにより、分類および食品偽装検出を目的とした食品サンプルのルーチンスクリーニングが実現します。

Application Note  
Food Testing &  
Agriculture

Contaminants Screening Using High-Resolution GC/Q-TOF and an Expanded Accurate Mass Library of Pesticides and Environmental Pollutants

### Q-TOF による偽陽性排除の仕組み

高分解能 GC/Q-TOF と精密質量ライブラリを使用してイチゴ抽出物中の農薬および環境汚染物質をスクリーニングして定量する効率的なワークフローをご確認いただけます。

[アプリケーションノートをダウンロード](#)

## 環境分析

# 既知汚染物質のスクリーニングと未知化合物の同定

人類が環境に与える影響や環境が人類に与える影響を探索する過程で、日々新たな疑問点が生じています。Agilent 7250 GC/Q-TOF システムに搭載されている技術革新は、こうした疑問への意味ある答えが簡単かつ効率的に得られるように設計されています。

既知および未知汚染物質の特性解析の手段として、精密質量高分解能 MS (HRMS) 分析法が普及しつつあります。7250 を以下のような包括的なワークフローで活用すれば、幅広い汚染物質を高感度で分析できます。

- ターゲット定量
- サスペクト化合物のスクリーニング
- 汚染物質のノンターゲットスクリーニング

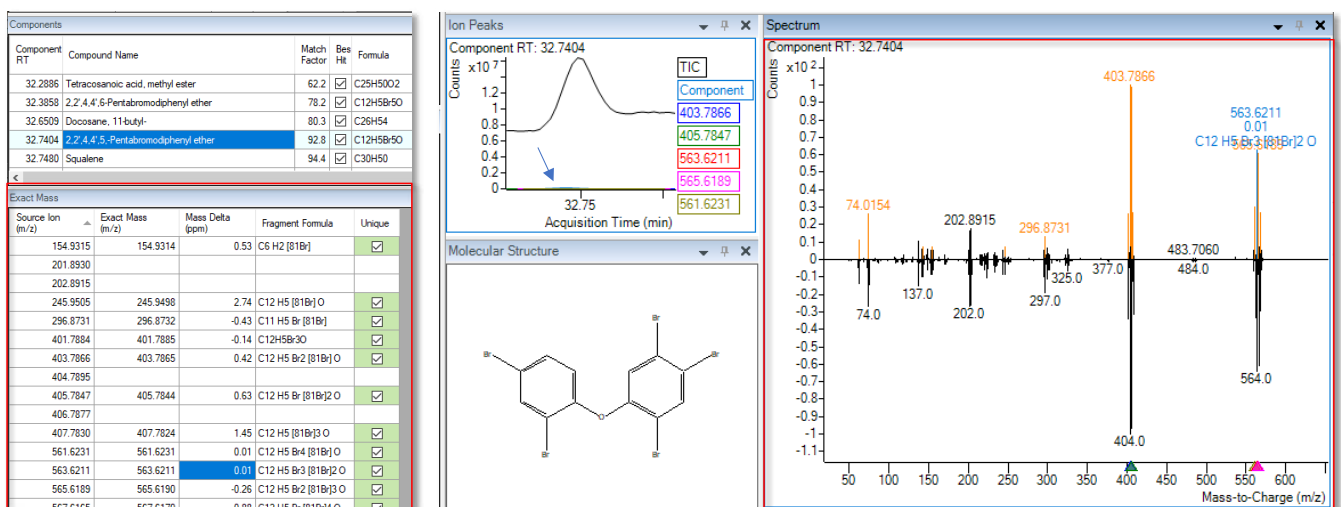
レトロスペクティブ解析では、一度測定したフルスペクトルデータを後から繰り返し処理できるため、将来的なターゲット成分の調査に役立てることができます。



## 確実に同定

MassHunter Unknowns Analysis ソフトウェアでは、SureMass でのシグナル処理と ExactMass ツールにより、従来のデコンボリューション法を凌ぐ効率と感度が得られます。微量の成分も、高いバックグラウンドシグナルの存在下で正確に抽出し、同定できます。

ExactMass 機能によりフラグメント式に従ってイオンへのアノテーションが行われるため、四重極 MS システムで採取した整数質量スペクトルと MS ライブラリを使用する場合も、化合物を高い信頼性で同定することが可能です。



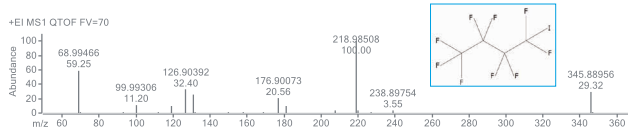
ExactMass ツール (赤い枠内) では、精密質量にもとづいてユニットマスのライブラリヒットを追加確認できます。m/z がライブラリヒットの式と対応している代表的な化合物イオンがミラプロットでハイライト表示されています。青の矢印は、土壌マトリックス中のデコンボリュートした成分を示しています。

## 環境サンプルの PFAS 分析のための精密質量ライブラリ

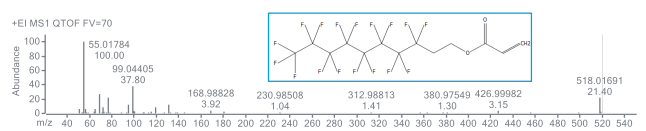
モニタリングできる化合物の範囲を広げ、ターゲット/サスペクト化合物を確実に検出できるようにするには、環境アプリケーション用の精密質量ライブラリを開発することが重要です。これにより、サスペクト化合物に対して、ノンターゲットスクリーニングより高感度で柔軟なスクリーニングアプローチを使用できるようになります。

PFAS PCDL に登録されているさまざまな PFAS 化合物クラスの例

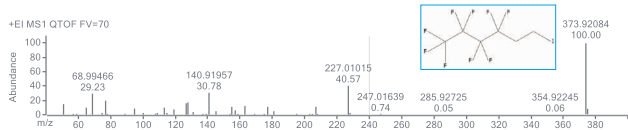
### ノナフルオロ-1-ヨードブタン (PFBI)



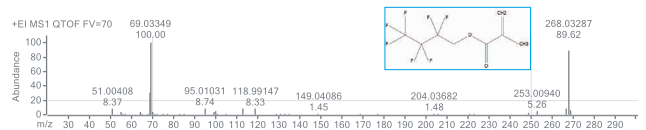
### 8:2 フルオロテロマーアクリレート (8:2 FTAC)



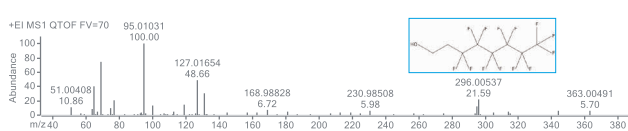
### 1,1,1,2,2,3,3,4,4-ノナフルオロ-6-ヨードヘキサン (6:2 FTI)



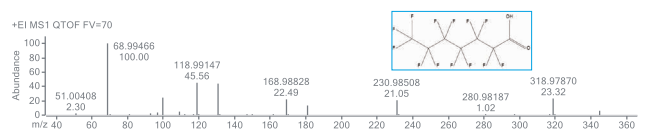
### メタクリル酸 2,2,3,3,4,4,4-ヘptaフルオロブチル (3:1 FTMAC)



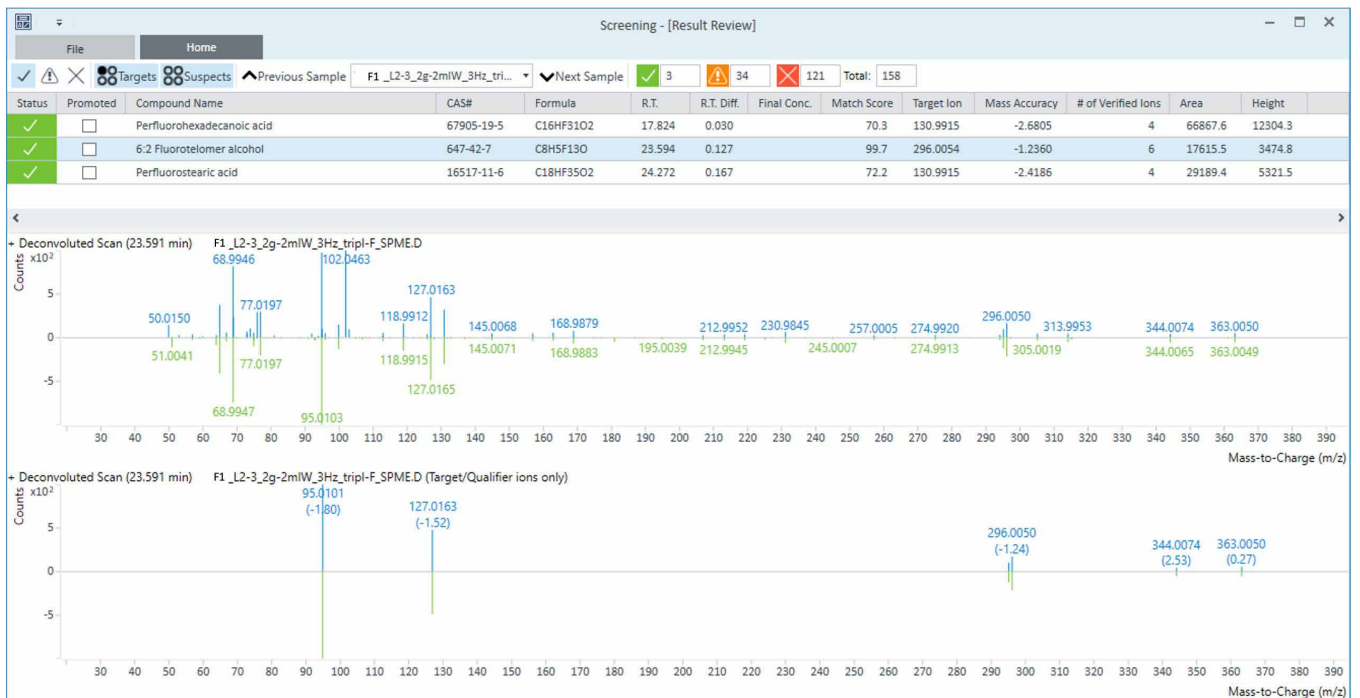
### 6:2 フッ素テロマーアルコール (6:2 FTOH)



### ペルフルオロヘプタン酸 (PFHpA)



GC/Q-TOF Screener と PFAS PCDL により検出された土壤中のフルオロテロマーアルコール



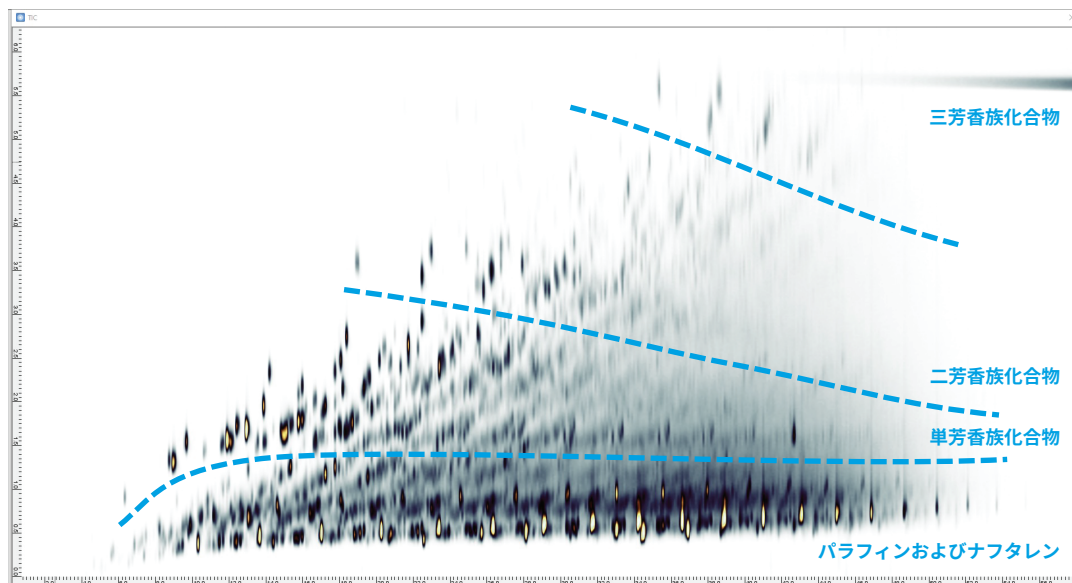
## 生産性を高め高品質を実現

複雑なサンプルの定性分析は簡単ではありません。信頼性の高い結果を引き出すためには、知識と知見に加え、強力な分析機能が必要です。高分解能精密質量測定、Low-Energy EI および化学イオン化オプション、コンプリヘンシブ GC x GC に対応できる高速スペクトル採取、高感度 MS/MS 測定など、高度な機能を備えた Agilent 7250 GC/Q-TOF は、このアプリケーションに最適なシステムです。

- 最大 50 Hz の高速取り込みレートと、スピードに左右されない分解能により、狭い範囲に密集した分離ピークや、さらに密集度の高い 2 次元 GC ピークも確実に解析できます。
- 分子イオンを容易に推定可能なサンプルで明確なスペクトルが得られるため、GC/MS ソフトイオン化オプションを利用できます。
- 高分解能精密質量プロダクトイオンスペクトルをパワフルな Molecular Structure Correlator ソフトウェアで解析することにより、化学構造を突き止めることができます。

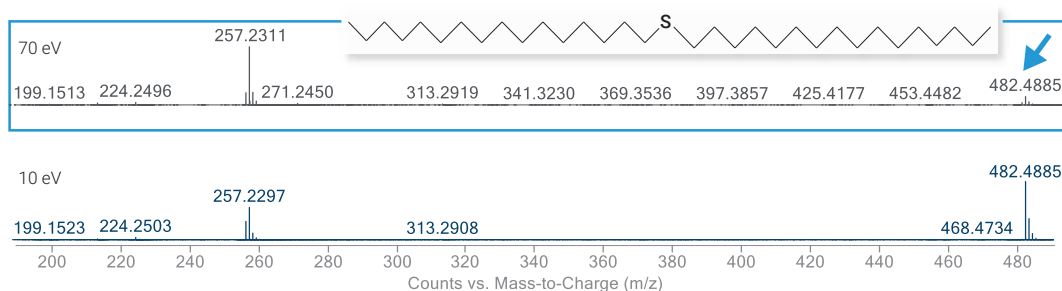


### パラフィンとナフタレン



この図は、Agilent リバースフローモジュレータ (CFT) が信頼性の高い結果の達成にいかにか貢献しているかを示しています。このコンプリヘンシブ 2D GC グラフから、ディーゼル成分が正確に分離していることがわかります。

### ヘキサデシルスルフィド : C32H66S



革新的な Low-Energy EI イオン源により、より明確なスペクトルが得られます。このイオン源は、優れた分析感度を維持しながら、高 m/z 側の分子イオンのスペクトル強度を大幅に高めます。

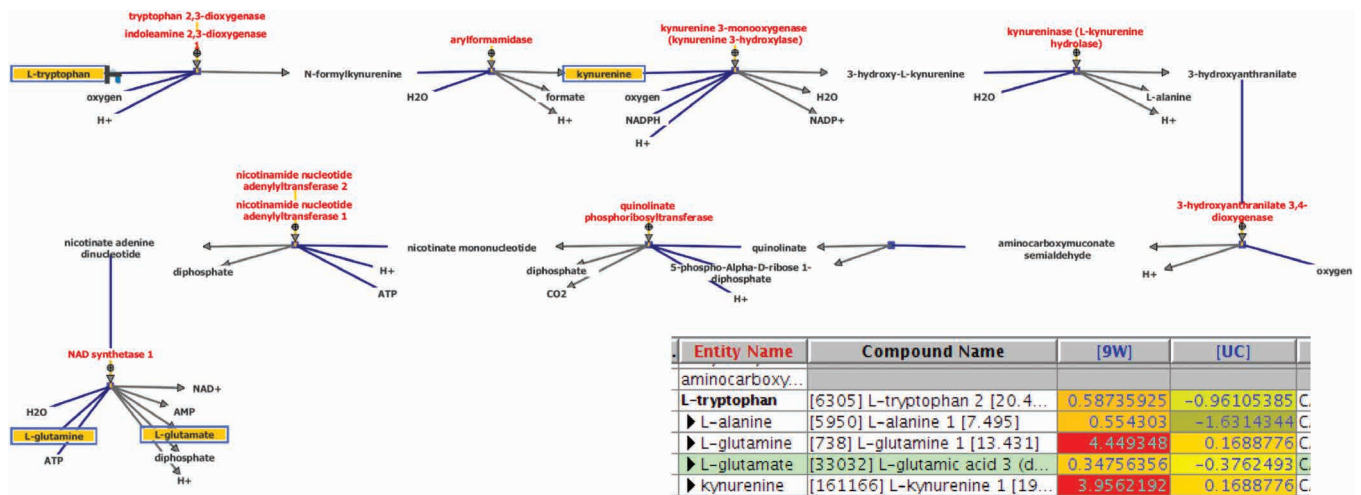
## システム生物学の研究を促進

人の健康、診断、および疾患の理解に向けて、新たな知見が日々もたらされています。このような進歩の原動力となる研究には、綿密な実験計画を立て、その計画を忠実に実施することが求められます。Agilent 7250 GC/Q-TOF システムとソフトウェアで生成される高分解能データを活用すれば、研究は大きく前進します。また、生体マトリクス中のより多くの化合物を同定し、秘められた傾向の解明へとつなげることができます。

### パスウェイ中心のメタボロミクスワークフロー

複雑なメタボロミクス研究では、未知代謝物を体系的に解明するうえで、フルスペクトルの優れた感度と質量精度、および MS/MS 機能を備えた Agilent 7250 GC/Q-TOF システムが大いに役立ちます。このシステムが備える広いダイナミックレンジにより、細胞内に存在する多様な代謝物を一括して正確に定量することが可能です。

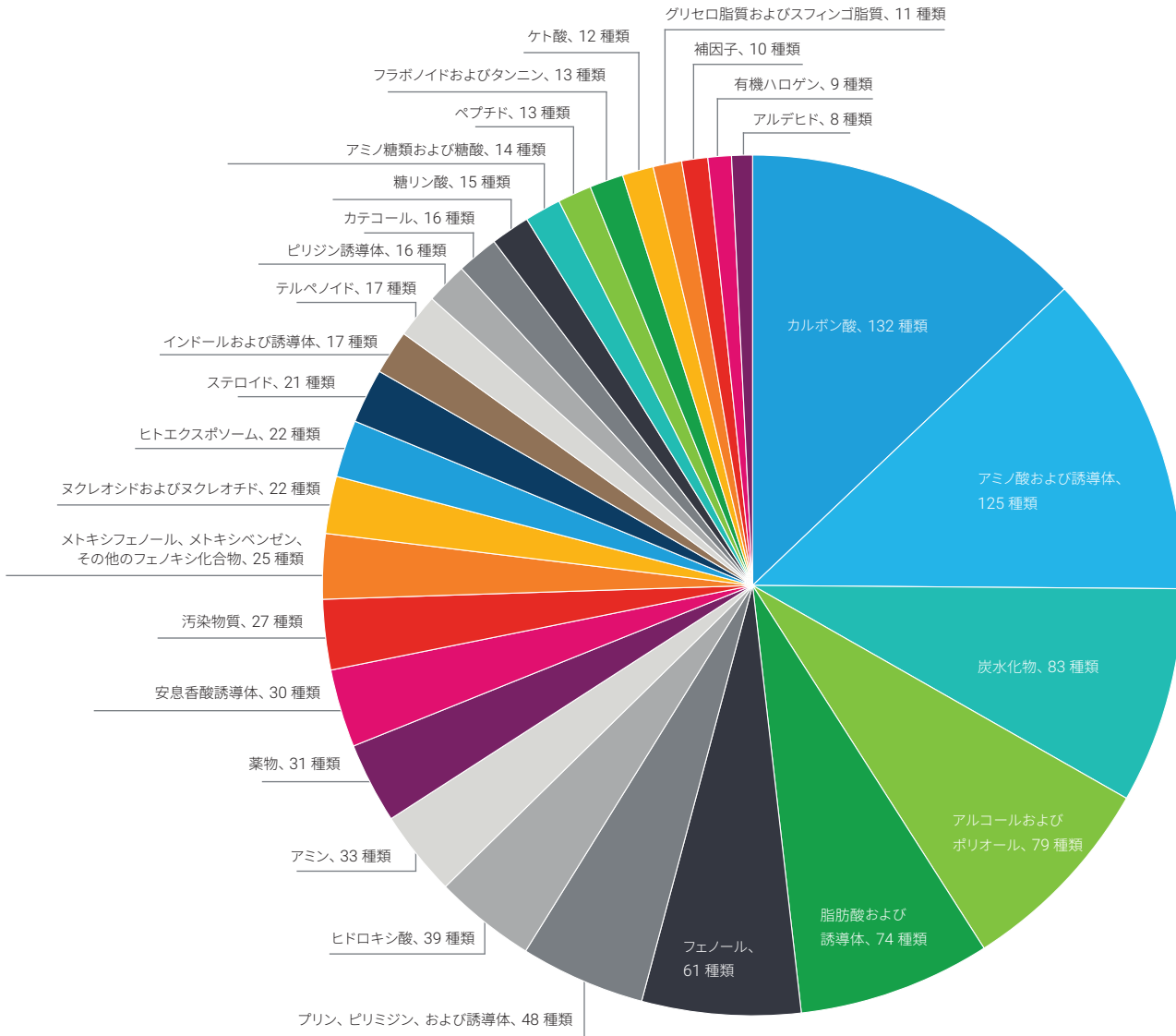
Mass Profiler Professional のオプションモジュールである Pathway Architect では、質量スペクトルデータへの生物学的意味付けが行えます。シングルオミクスまたはマルチオミクスの実験結果を生物学的パスウェイにマッピングできる他、パスウェイ情報の解析、視覚化、解釈を同時に行うことも可能です。このパスウェイ中心のワークフローは、発見や知見からバリデーションにいたるプロセスを加速します。また、後続の一連の実験を効率的に計画し、実施できるようになります。



Pathway Architect の結果例：NAD 合成

## 効率的な代謝物同定を支える精密質量メタボロミクススペクトルライブラリとデータベース

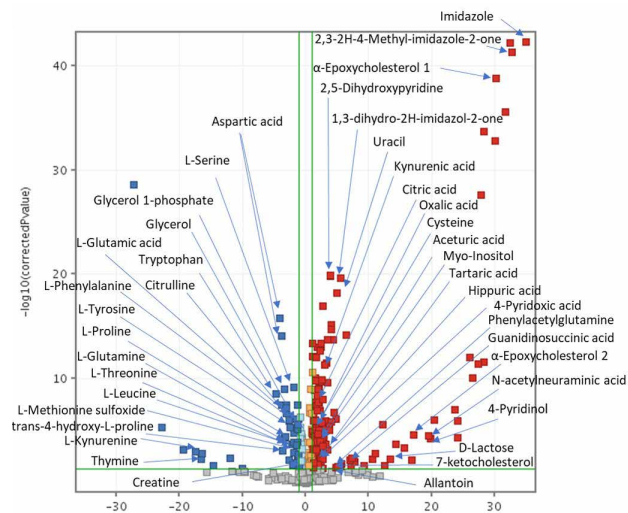
新しい Agilent GC/Q-TOF メタボロミクスパーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) は、900 種類以上の化合物の高分解能スペクトルライブラリで構成され、幅広い代謝物クラスをカバーしています。



## 求める答えを導く豊富なソフトウェア

### 複雑なデータから確かな知見を引き出す Mass Profiler Professional ソフトウェア

比較研究では、サンプルグループ間の差分解析により、統計的有意性を持つものに焦点をあてます。ここに示す図は、健康な個人と心不全の被験者の代謝物の違いを同定して比較したものです。倍率変化解析の結果がボルケーノプロットで表されており、違いが一目でわかります。



「高分解能 Q-TOF MS と Mass Profiler ソフトウェアを組み合わせることで、分析対象農薬と共溶出する、さまざまなマトリックス成分を研究することができました」

– Carmen Ferrer 博士

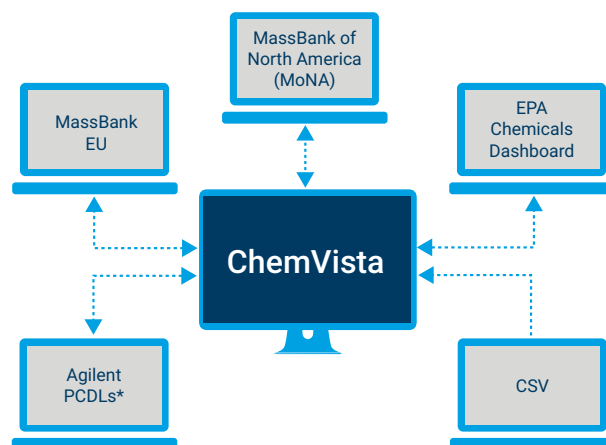
Analytical Department, University of Almeria

### 広範かつ包括的な統合型ライブラリを構築する Agilent ChemVista ソフトウェア

Agilent ChemVista は、LC/Q-TOF および GC/Q-TOF 質量分析で作成したスペクトルライブラリを管理するスタンドアロンのソフトウェアです。化合物の詳細、リテンションタイム、スペクトルの情報を複数のソースから統合します。これにより、次のことが可能です。

- 複数の公開データベースと精査済みのライブラリにアクセス
- スペクトルの整理、管理、編集、作成
- MassHunter データ解析アプリケーションなどでの同定ワークフローの効率化
- 化合物を高い信頼性で同定

さらに、ChemVista には膨大な量のライブラリおよびデータベースコンテンツがあらかじめ含まれています。



\*精選されたパーソナル化合物データベースライブラリ



サービス、消耗品、ラボ全体のリソース管理から構成される CrossLab は、ラボの効率の向上、運用の最適化、機器の稼働時間の延長、ユーザースキルの開発などを支援します。テクノロジーリフレッシュ、アプリケーションコンサルティング、修理、点検、コンプライアンス検証、トレーニングなど、業界最高レベルのサービスを通して、お客様の機器の性能を最高の状態に保ちます。

Agilent CrossLab は、アジレント機器だけでなく主要な他メーカーの機器をサポートしています。また、ワークフローの実現、ラボ解析、コンプライアンス、在庫管理、移設サービスを含めた資産管理のためのコンサルティングサポートを提供しています。

Agilent CrossLab の詳細と、優れた成果へと導くアジレントの具体的な活動を[こちら](#)をご覧ください。

ホームページ

**[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)**

カスタマコンタクトセンタ

**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。

RA45442.6111111

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2024  
Printed in Japan, June 5, 2024  
5991-8109JAJP

