



Agilent 6545 Q-TOF LC/MS システム

**迅速かつ簡単に
求める結果が得られる
Q-TOF LC/MSシステム**

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

AGILENT 6545 Q-TOF LC/MS システム

優れた測定結果を 今までよりも 迅速かつ簡単に得るために

最新技術を搭載した Agilent 6545 Q-TOF は、ハードウェアおよびソフトウェアの能力が革新的に高まり、機器の堅牢性と全体の性能が大幅に向上しています。

その結果、堅牢性、高い生産性、高感度などミドルレンジ定性質量分析装置の新たな基準を打ち立てています。

MassHunter ソフトウェアの最先端機能は、高度なデータマイニングおよびデータ処理機能を統合し、サンプル内の化合物から利用可能な情報を迅速かつ正確に抽出します。ピークやデータポイントだけではなく、「答え」を得ることができます。Agilent 6545 Q-TOF は、医薬品研究、食品安全分析、法医学/毒物学、環境分析、メタボロミクス、リポミクスなどのさまざまな分野において、生産性の高い MS 分析を高速かつ容易に実現するシステムです。

現状の課題

微量化合物の定量が正確でない、
またはどれも定量できない

複雑なサンプル分析では、かなりの時間と
専門知識が必要となる

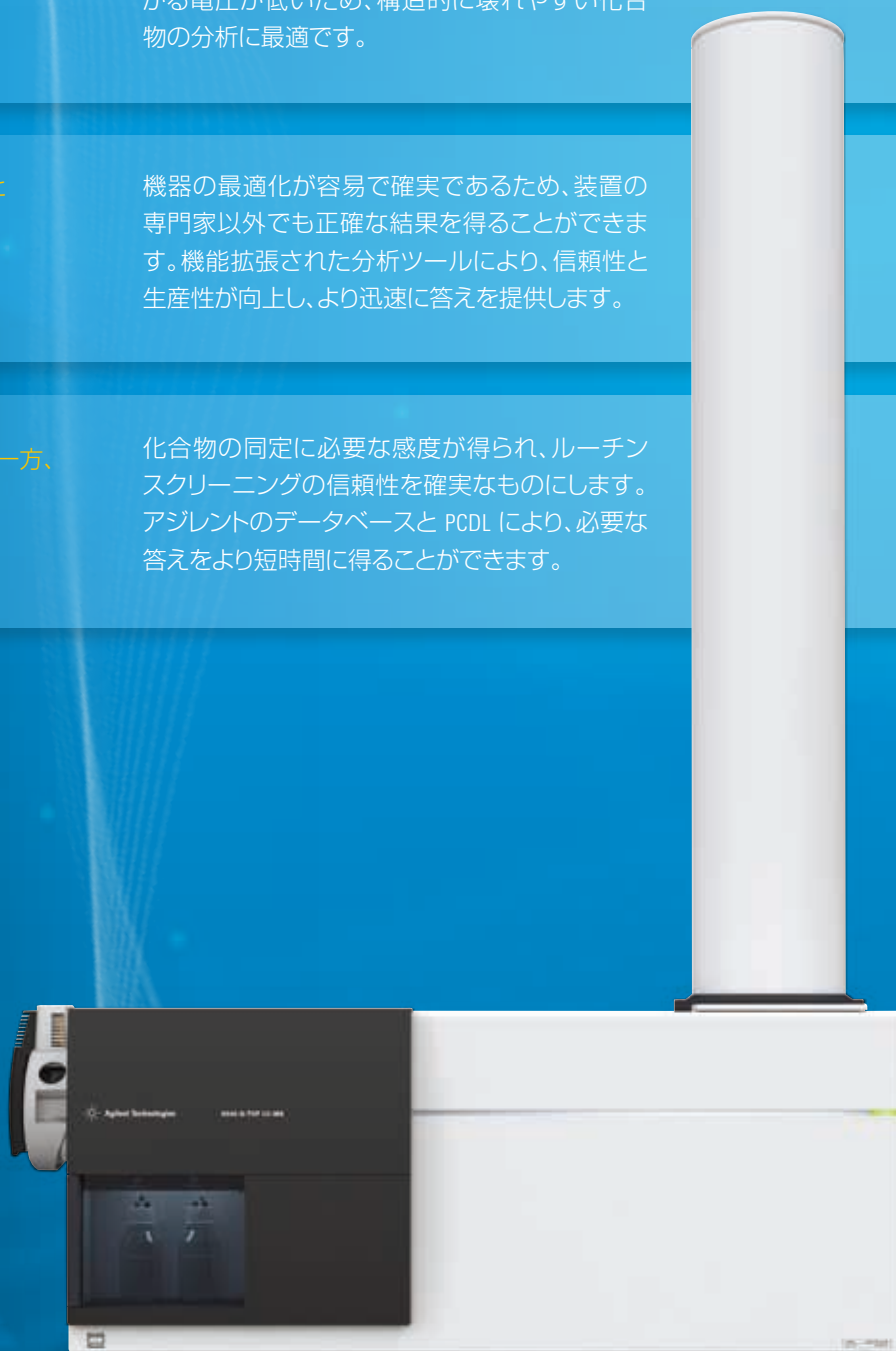
より多くのメソッドを開発する必要がある一方、
作業負荷の低減を図る必要がある

6545 Q-TOF の答え

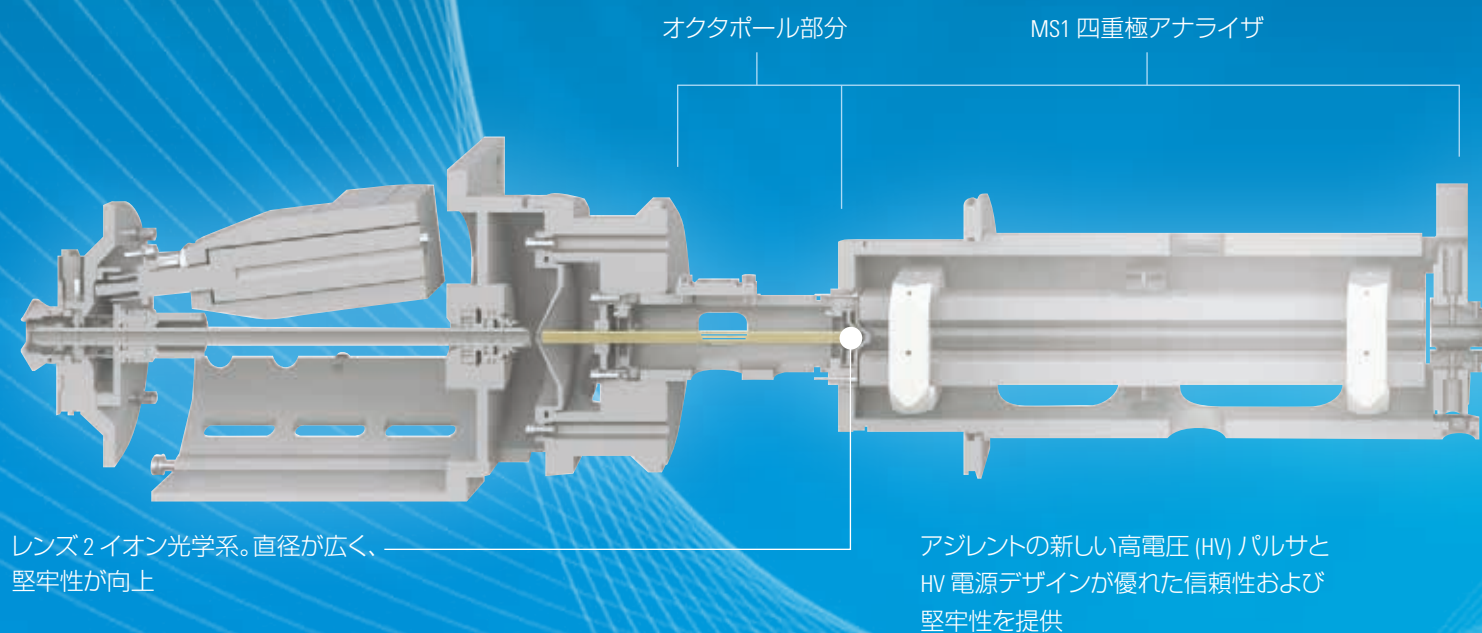
最新の「Swarm」オートチューンの最適化機能が、
より信頼性の高い答えを導き、低分子化合物に対
する感度を大幅に向上します。イオン光学系にか
かる電圧が低いいため、構造的に壊れやすい化
合物の分析に最適です。

機器の最適化が容易で確実であるため、装置の
専門家以外でも正確な結果を得ることができます。
機能拡張された分析ツールにより、信頼性と
生産性が向上し、より迅速に答えを提供します。

化合物の同定に必要な感度が得られ、ルーチン
スクリーニングの信頼性を確実なものにします。
アジレントのデータベースと PCDL により、必要な
答えをより短時間に得ることができます。



優れた結果獲得に欠かせない、信頼性と堅牢性



従来の装置よりも優れた堅牢性

新製品 Agilent 6545 Q-TOF は、分解能の改善、感度の向上に加え、従来の装置と比べて堅牢性がさらに高まっています。

6545 Q-TOF では、高エネルギー部分の光学系に加え、優れた結果を得るうえで重要な要素である検出器とエレクトロニクスの堅牢性と信頼性が大幅に向上しています。

- 新世代の検出器は、高感度でダイナミックレンジが広いだけでなく、寿命が大幅に改善されています。
- 次世代のエレクトロニクスサブシステムにより、高速 TOF エレクトロニクスの堅牢性が大幅に向上しています。

ヘキサポールコリジョンセル

新しい光学系

イオンビーム形成光学およびスライサの位置の最適化により、信頼性が2倍以上向上。より一貫性のある結果が得られ、長い間洗浄が不要

新たに機能拡張されたゲインシフト検出器。寿命が3倍長く、信頼性が向上し、コストが低減

既存技術の改良と新技術の採用による性能向上

イオンビーム圧縮形成

イオンビーム圧縮形成 (IBCS) 技術は **45,000 以上の質量分解能および 1 ppm 以下の質量精度**を維持した状態で優れた感度を提供します。機能拡張されたエレクトロニクスおよびソフトウェアアルゴリズムにより、最高 50 スペクトル/秒の極めて高速なデータ取り込み速度を実現します。

Agilent JetStream サーマルグラジエントフォーカシング

精密なマイクロマシンズプレーは、ESI の液滴を過熱ガスソースにより取り囲み、MS 注入口の近くのイオンを脱溶媒化し濃縮してより効率的なサンプリングを実現します。

自動化されたスライサアセンブリ

イオン光学系設計の継続的な改良により、**要求の厳しい定性および定量アプリケーションに対応できる堅牢な性能が実現しています。**

フライトチューブ電源

フライトチューブを制御する3つの主電源をそれぞれ設計し直し、**質量精度と質量分解能の安定度**を大幅に改善しています。

より迅速な最適化: 粒子群最適化による SWARM オートチューン

今までよりも簡単に優れた結果が得られます。

「カメラのオートフォーカスのように、簡単に機器最適化ができれば…。」
使いやすさと自動最適化に対するお客様のニーズに応えるため、アジレントは
開発を続けてきました。Agilent 6545 Q-ToF は、粒子群最適化 (PSO: Particle Swarm
Optimization) を組み込んだ革新的なオートチューンによって、最適化プロセスを
革新しました。

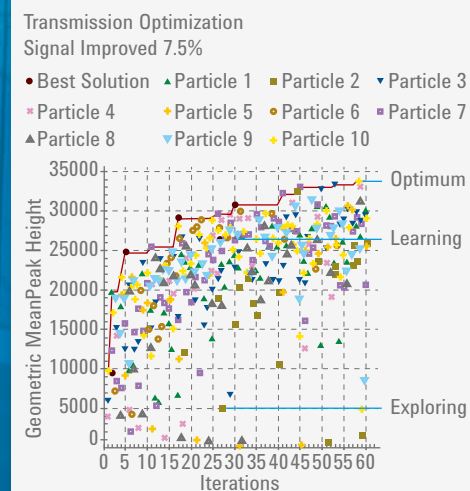
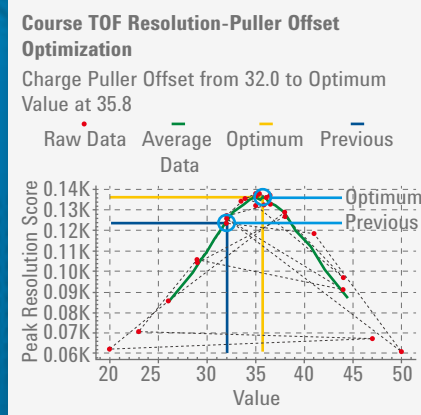
Swarm オートチューンは以下の性能を備えています。

- ・ オートチューンの大幅な高速化 – 旧世代の装置に比べ速度が 4 倍高速に
- ・ 低分子のための最適化オプション – 最高の低分子領域測定を実現するために、自動で感度を拡張。

☒ ポジティブ	☐ 四重極	☐ 質量キャリブレーション/チェック	☐ 50-1700 m/z
☐ ネガティブ	☒ TOF	☒ 標準チューン	☐ 50-750 m/z
☐ 高速極性切り替え	☐ 両方	☐ 検出器ゲイン設定	☒ 50-250 m/z
		☐ 初期チューン	☒ 不安定イオン

粒子群最適化

PSO は、初期信号が存在しなくても、**最大 21 個のパラメータを同時に最適化できる柔軟で堅牢な多次元最適化アルゴリズム**です。特徴は局所的な最適条件とならないよう装置が調整されることです。「チューン開始」ボタンをクリックするだけで、分解能、フラグメンテーションの強度や最大感度を得るための要素を最適化することができます。新しい Swarm オートチューンは、複数の機器パラメータの最適化を簡素化し、より高いイオン透過率、高速化、壊れやすい分子の損失低減に対応できるように調整します。

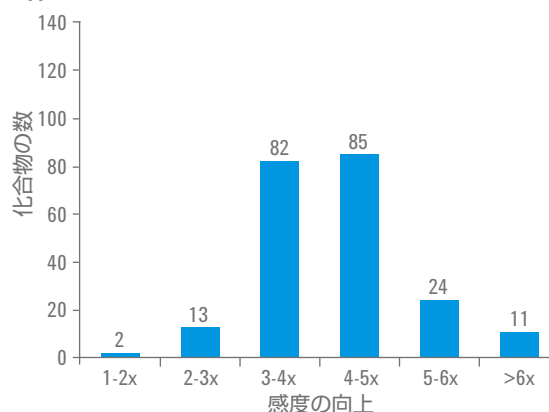


アプリケーション: 食品および水質分析

高速かつ高感度な、残留農薬スクリーニングと同定を実現

質量および同位体比を優れた精度で得られるため、Q-TOF LC/MS システムは、農薬の検出と同定に威力を発揮します。優れたシステム感度により、微量化合物の検出、定量が可能です。食品分析において厳しさを増す規制に対応し、新たな汚染物質を高い信頼性で同定することができます。

2 ppb の紅茶での農薬に対する 6545 Q-TOF の感度向上



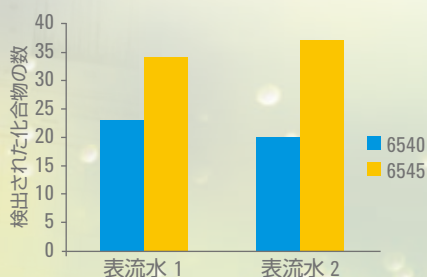
検出化合物の 80% 超で 4~5 倍の感度向上が確認できました。

水質汚染物質

6545 Q-TOF LC/MS システムの優れた感度は測定条件を選びません。

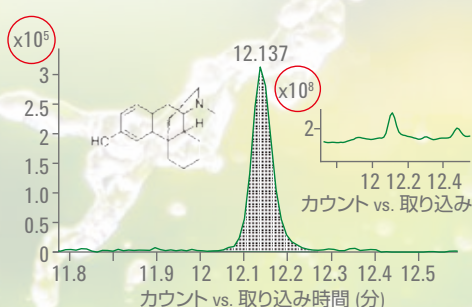
ターゲットおよびノンターゲット手法での PPCP 化合物の検出と定量に最適です。

表流水分析 - 6545 vs. 6540



6545 は 6540 Q-TOF よりも表流水サンプル中の汚染物質を多く検出できました。

汚染表流水中のデキストロルファン同定



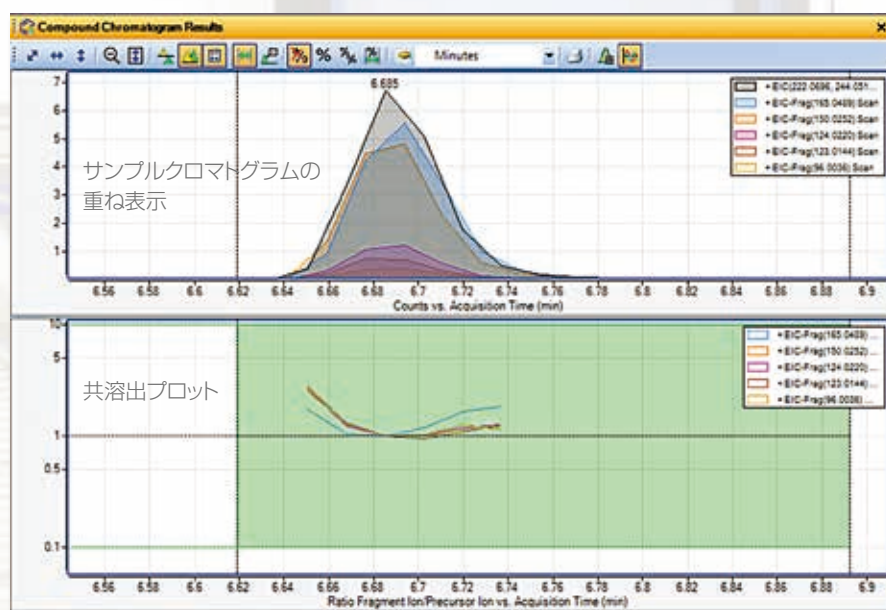
アジレントの分子式生成アルゴリズムによって共溶出イオンを 1000 倍にすることで、デキストロルファンを検出できます。

ALL IONS MS/MS

高い信頼の同定と定量

All Ions MS/MS 分析法は、食品、環境、法医学/毒物学アプリケーションにおける対象化合物スクリーニングのための優れたソリューションです。アジレントは、化合物の確認、定量のために開発された All Ions MS/MS ワークフローを提供します。特徴は次のとおりです。

- 取り込みメソッドの容易なセットアップ – 複数化合物のスクリーニングでも簡単に実行可能
 - PCDL のナレッジバンクへのリンク (スクリーニングにおけるすべての化合物に対する MS/MS 断片化の特性を抽出)
 - ヒットの確認に使用される、診断用フラグメントイオンの独自の共溶出スコア
 - 経時的に継続してスクリーニング範囲を拡張するため、新しいターゲットの PCDL への追加が容易
 - 分子イオンのフルスペクトルとその主要フラグメントが常に収集されるため、これらの新しいターゲットの追加時にデータを遡及的に再測定することが可能
- 各化合物について 2 つの高品質なプロダクトイオンを自動的に選択する高速定量メソッド開発

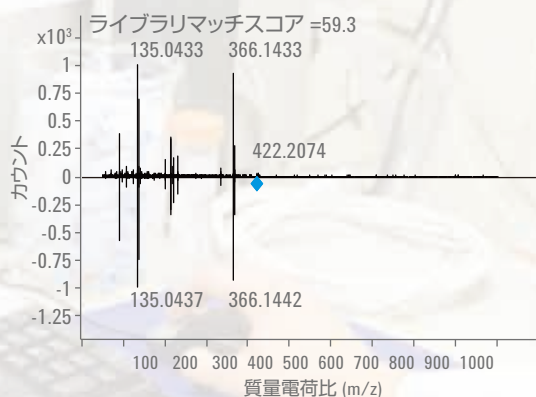
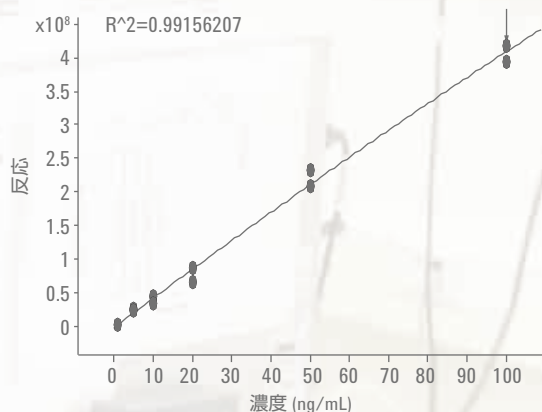


ターゲット MS/MS

ターゲット MS/MS、データベース、PCDL を使用した、化合物の迅速な検出、同定、定量

ターゲット MS/MS および農薬 PCDL を組み合わせると、サンプル中の未知汚染物質を迅速に検出、同定、定量することができます。6545 Q-TOF は、スクリーニングアプリケーションの定量要件と、正確な質量および PCDL MS/MS ライブラリ検索をベースとする化合物同定の定性要件を備えています。

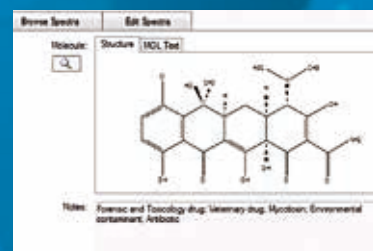
ターゲット MS/MS によるアボカドマトリックス中のジメトエートの定量および構造確認



検量線は 6 段階で 1 ng/g から 100 ng/g まで表しています。ほとんどの農薬が、複雑なマトリックスにおいて最大残留基準値 (MRL) の 10 ng/g 以下で検出でき、アジレントのパーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) に一致します。

より簡単に、より正確に 結果が得られる新しい PCDL

アジレントは、各データベースおよび各パーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) の開発によって、研究および管理されたラボで、より容易かつ正確な結果をサポートすることに全力で取り組んでいます。一例として、オーストリア、ウィーンのウィーン天然資源大学 (BOKU) と共同開発し、今後登場する**マイコトキシンデータベース**が挙げられます。何百種類ものマイコトキシンがデータベースに追加され、それらの菌代謝物に対して高分解能 MS/MS スペクトルが得られています。このマイコトキシンライブラリを使用すれば、標準化合物がなくても、食品科学者は数百種類の潜在的に有害な汚染物質の存在を明確に検索して確認することができます。このデータにより、研究者や政府の研究機関は、詳細な情報を得たうえで、定量のために購入すべき分析基準について判断することができます。



効率と信頼性を向上させる アジレントの装置と消耗品

Agilent 1290 Infinity II LC

Agilent 1290 Infinity II LC は新しいマルチサンプルラ、各種のポンプ構成、高速注入サイクルにより、比類のない分離と検出性能による最高レベルのデータ獲得を実現します。

Agilent Poroshell 120 カラムと ZORBAX RRHD カラム

Poroshell 120 ファミリーは、UHPLC アプリケーションで再現性と信頼性の高い性能を提供します。最高の性能を得るためには、EC-C18 をまずお試しください。高い pH 条件で堅牢な性能を得るためにデザインされた Poroshell HPH を含む 13 種の充填剤ケミストリにより、最高水準の LC/MS 感度および化合物同定をサポートするメソッドを改良することができます。



「Q-TOF は、豊富なデータを提供し、安定した高精度な質量測定により、非常に狭い範囲で抽出イオンスペクトルが得られ、ノイズをゼロに近い値まで低減できます。また、未知化合物の分子式を精密分子量から求めることができます。MS および MS/MS のいずれのモードでも優れたリニアリティおよびダイナミックレンジを有し、定量分析が可能です。また、付属ソフトウェアを使用すれば、データベースやライブラリ検索を容易に実行できます。文献やメディアで報告された新しい化合物を、検索可能なデータベースに追加するだけで、古いデータでレトロスペクティブ検索することもできます。」



データ処理を効率アップするソフトウェア

Agilent MassHunter ワークステーションソフトウェア

Agilent MassHunter ワークステーションソフトウェアを使用すると、迅速で容易な生産性の高い MS 分析を実現できます。データ取り込みや Agilent LC/MS、GC/MS、ICP-MS の機器制御だけでなく、高度なデータマイニングおよびデータ処理ツールも統合しています。

Agilent MassHunter ワークステーションソフトウェアのデータマイニング機能は、アジレントのパーソナル化合物データベースライブラリ (PCDL) と統合することができます。これにより、スクリーニングに対する正確な質量 MS/MS ライブラリの使用、信頼性の高い対象の化合物の同定が可能になるのに加えて、カスタマイズされた PCDL を作成できる柔軟性が得られます。

- 精密質量農薬 PCDL
- メタボロミクス用 PCDL (METLIN)
- 法医学/毒物学関連用 PCDL (Broecker, Herre & Pragst)
- マイコトキシン/菌代謝物用 PCDL
- 動物用医薬品用 PCDL

MassHunter ソフトウェア

MassHunter ソフトウェアは、GLP/GMP および 21 CFR Part 11 コンプライアンスのすべての要件に対処できる包括的ツールを提供します。アジレントは、据付時および稼働性能適格性評価サービスも提供しており、据付から重要なサンプルの分析までの時間を短縮します。

OpenLAB CDS

OpenLAB CDS ソフトウェアは、データの処理、確認、およびレポート作成に費やす時間を短縮することによって、ラボの効率を向上させます。OpenLAB CDS を使用すると、強力な直感的な「ドラッグアンドドロップ」機能を使用して簡単にレポートを作成し、大規模なデータセットを最大 40 倍高速に処理できます。1 台の機器からラボ全体のネットワークまで拡張でき、システム管理を一元化できます。また、どこからでも仕事ができます。21 CFR Part 11 および EU Annex 11 コンプライアンスに対応しています。



アジレントバリュープロミス: 10 年間の性能を保証

アジレントは絶えず進化する製品に加えて、業界で唯一の 10 年間保証を提供しています。アジレントバリュープロミスは、ご購入の日から 10 年間、製品の性能を保証し、アップグレードの際には、製品の残存価値に見合った導入プランを提供します。

アジレントはご購入時の安心を保証するだけでなく、将来にわたってその投資の価値を確信していただけるよう努めております。

詳細情報：
ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタマコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

研究目的にのみ使用できます。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。アジレントは、本文書に誤りが発見された場合、また、本文書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。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2015

Printed in Japan, February 13, 2015

5991-5468.JAJP



Agilent Technologies