



Agilent 6200 シリーズ Accurate-Mass TOF LC/MS

# confident results

True High-Definition 技術がもたらす  
高いクオリティと分析結果への確信

Our measure is your success.

products | applications | software | services



**Agilent Technologies**



## True High-Definition TOF技術の ゆるぎない信頼性

True Hi-Def TOF テクノロジーのパワーと信頼性を実感してください。Agilent 6200 シリーズ Accurate-Mass Time-of-Flight LC/MSは、高品質のデータと、分析結果への確信をお届けします。

合成化合物の確認やバイオマーカーのプロファイリング、不純物の同定や農薬のスクリーニング、インタクトプロテインのキャラクタライゼーションなど、幅広いアプリケーションに対応する性能とスピードを有しています。

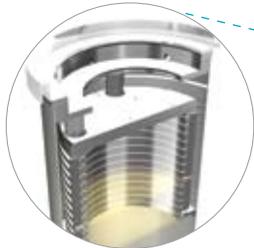
### あらゆる点でクラス最高の性能

True Hi-Def TOF 技術を導入した 6200 シリーズシステムでは、データ取り込みスピードやダイナミックレンジ、質量範囲、感度を犠牲にすることなく、業界最高のTOF質量分解能と質量精度を実現しています。他社製TOFシステムでは、質量精度を高めることにより、スピードや感度などが犠牲になるのが一般的で、高価なオービトラップ質量分析計でさえ、そうした犠牲はやむをえないものとされています。6200 シリーズシステムには超高速高分離LC (RRLC) の恩恵を享受するのに必要なスピードと、複雑な実サンプルから最大限の情報を集めるのに必要な性能がそろっています。

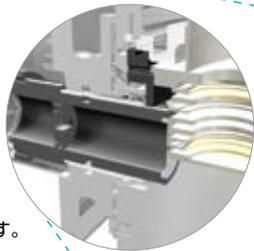
- 1-ppm以下の標準質量精度により、信頼性が高まり、偽陽性データが減少します。
- 20,000の質量分解能により、分析対象の化合物を干渉から分離します。
- 最高40スペクトル/秒のデータ取り込みスピードにより、最高のデータ品質を確保し、高速クロマトグラフィーやハイスループットワークフローに対応します。
- 最大5桁のスペクトル内ダイナミックレンジにより、他の夾雑物が高濃度で存在する場合でも、微量の分析対象物を検出します。
- 低ピコグラムレベルのオンカラム感度により、きわめて低濃度の不純物やバイオマーカーを検出します。
- 高速スキャン間の極性切り替えにより、1回の注入で陽イオンと陰イオンの両方を分析できます。
- 自動チューニングと手間のかからない内部標準物質導入により、幅広い濃度と  $m/z$  で一貫した質量精度と信頼性の高い分子量確認を実現します。
- 最先端の MassHunter ソフトウェアファミリーが高度な解析をサポートします。

# 最高のTOF性能

デュアルステージのイオンミラーにより、二次タイムフォーカスが向上し、最高の質量分解能が実現します。



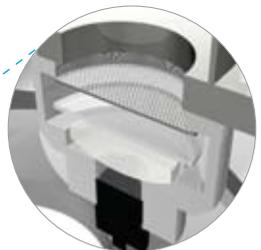
スライサー、イオンフォーカス、オクタポール光学系により、幅広い質量範囲で最大のイオン輸送効率を実現し、イオンビームの形状を整え、質量分解能を最大化します。



独自の直交型スプレーをはじめとするイオン源の改良により、イオン生成効率を最大化し、ノイズを低減すると同時に、内部標準物質の自動導入により優れた質量精度を維持します。

真空断熱シエル内に密封された独自のINVARフライトチューブにより、温度変化に起因する熱質量ドリフトを防ぎ、常に優れた質量精度を維持します。

単一のイオン到達時間を記録するタイムデジタル変換 (TDC) 検出器とは異なり、アナログデジタル変換 (ADC) は複数のイオン到達時間を記録し、幅広い質量範囲と濃度範囲できわめて正確な質量割り当てを可能にします。



高サンプリングレート (32 Gbit/sec) を可能にする4GHzアナログデジタル変換 (ADC) エレクトロニクスにより、イオン強度の小さい分析対象物でも分解能、質量精度、感度が向上します。低ゲインおよび高ゲインチャンネルの両方で検出器信号を同時に処理するデュアルゲインアンプにより、ダイナミックレンジが $10^6$ にまで拡大します。

Agilent 6200 シリーズ Accurate-Mass TOFのTrue Hi-Def TOF技術は、相補的な各種の技術と独自の技術革新をひとつにまとめることで、他のTOFシステムよりもはるかに優れたTOF性能を実現します。

# 優れた性能がもたらす確実な同定

低分子を分析する場合でも、生体高分子を分析する場合でも、6200 シリーズ TOFの精密質量測定なら、スクリーニングや目的化合物の同定確認の確実性が高まります。超高速アナログデジタル変換 (ADC) 取り込みや自動標準物質導入など、すべてのAgilent LC/MSに共通するハードウェアの技術革新により、旧世代のTOF装置を劇的に上回る性能を示しています。

## 優れた質量分解能で、より多くの化合物を検出

True Hi-Def TOF技術とハイスループット32 Gbit/secデータ取り込み機構を組み合わせることで、とりわけ低質量域での質量分解能が高まります。これにより、近隣の干渉要素から目的化合物の質量を分離し、未分離のピークから複数の化合物を同定することが可能になります。

## 高速データ取り込みにより、データ品質と高速クロマトグラフィーへの対応力が向上

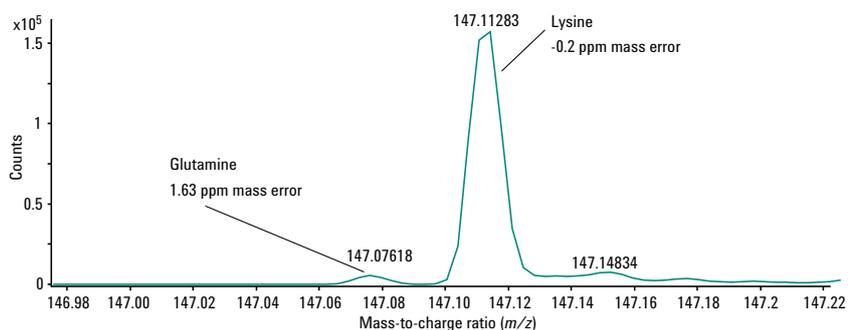
6200 シリーズシステムは、Agilent 1200シリーズRapid Resolution LCと Agilent ZORBAX Rapid Resolution High Throughput (RRHT) カラムを利用しています。フーリエ変換質量分析 (FT-MS) やオービトラップ技術とは異なり、6200 シリーズのTrue Hi-Def TOF技術は、データ取り込みスピードを犠牲にすることなく、質量精度と質量分解能を高めます。1-ppm以下の質量精度を保ちながら、最高40スペクトル/秒でデータを取り込むことが可能です。

## 分析の信頼性を向上させる一貫した質量精度

最先端の装置仕様に、継続的な標準物質導入という機能が組み合わせられることにより、高い正確性と再現性を得られるため、分析結果に絶対の自信を持つことができます。

## 低ピコグラム域の感度と、10倍も向上したダイナミックレンジにより微量化合物を検出

6200 シリーズ Accurate-Mass TOFは、夾雑物の多いサンプルでも、低ピコグラム域のオンカラム感度を実現します。同時に、True Hi-Def TOF技術と新しいデュアルゲインADC検出器により、他のTOF装置でしばしば見られるビーム減衰に起因する感度低下を生じることなく、最大5桁のスペクトル内ダイナミックレンジを実現します。



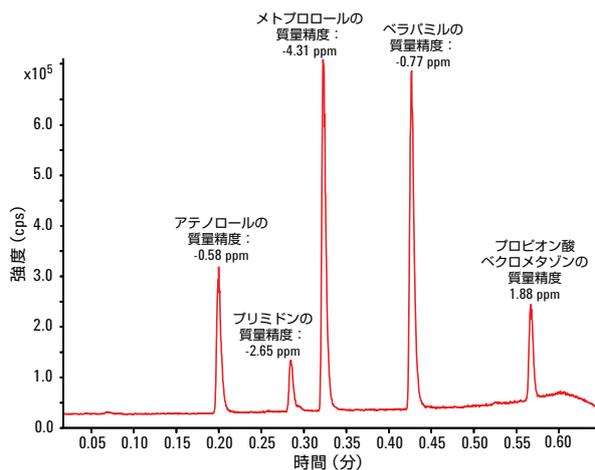
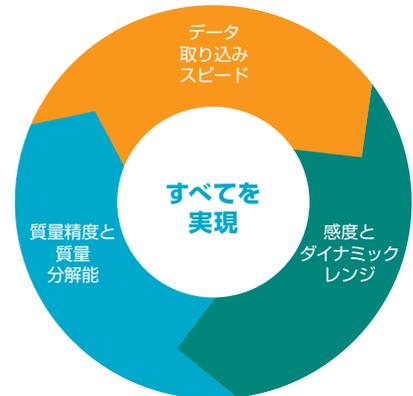
**最高の質量分解能。**6200 シリーズシステムでは、理論上のイオン質量の差が0.03638 uしかない2種類のアミノ酸（グルタミンとリジン）でも容易に分離できます。これらの化合物の濃度はきわめて低いものですが、6200 シリーズは優れた質量精度を維持しています。

# 妥協なき性能改善

True Hi-Def TOF技術を搭載したAgilent 6200 シリーズ Accurate-Mass TOFは、以下を実現する唯一のシステムです。

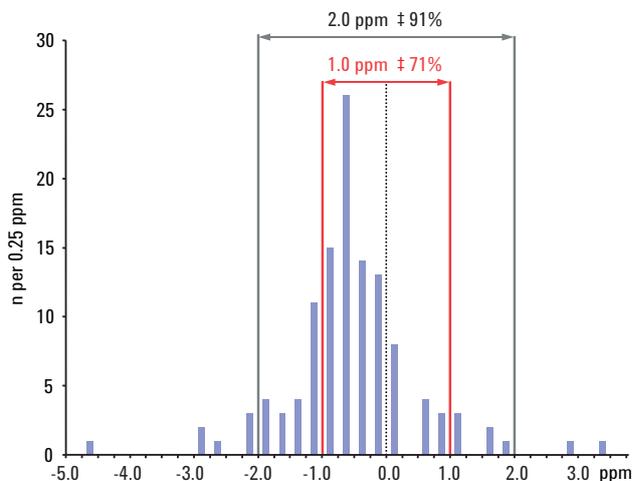
- 広い  $m/z$  範囲、濃度範囲における優れた質量精度 (<1 ppm MS)
- 高分解能 (>20,000)
- 優れた感度 (低pg)
- 広いスペクトル内ダイナミックレンジ ( $10^5$ )
- 高速データ取り込み (40スペクトル/秒)

他のTOFシステムやトラップ型質量分析計のような妥協点はありません。



## 高速分離に対応できる データ取り込みスピード

900 uの質量範囲において40スペクトル/秒でデータを取り込める 6200 シリーズでは、優れた質量精度を保ちながら、ピーク幅0.5秒未満のクロマトグラフィピーク (FWHM) を容易に検出できます。



2つの異常値は示さず。16種類の化合物はESI+ではイオン化できません。

## ハイスループットスクリーニングを 可能にする一貫性の高い質量精度。

最高速度のデータ取り込みスピードでも、質量精度は損なわれません。90秒ごとに1つのサンプルを注入し、140種類の化合物を含むライブラリをスクリーニングしたこの例では、化合物の70%以上が1 ppm以内の質量精度で測定されました。また、40スペクトル/秒というデータ取り込みスピードで、90%以上が2 ppm以内で測定されました。

# 生産性を向上させるソフトウェア

Agilent MassHunter Workstationソフトウェアは、機器のチューニングから最終レポートまで、MS分析のあらゆる手順をより速く、より容易に、より生産的に実施できるように設計されています。化合物を重視したデータ構成とナビゲーションにより、複雑なMSデータのレビューと解析が容易です。

MassHunter Qualitative Analysis (定性分析) ソフトウェアでは、全自動で抽出されたスペクトルおよびクロマトグラムがナビゲーションツリー内に入力値として整理され、化合物ごとに操作できます。

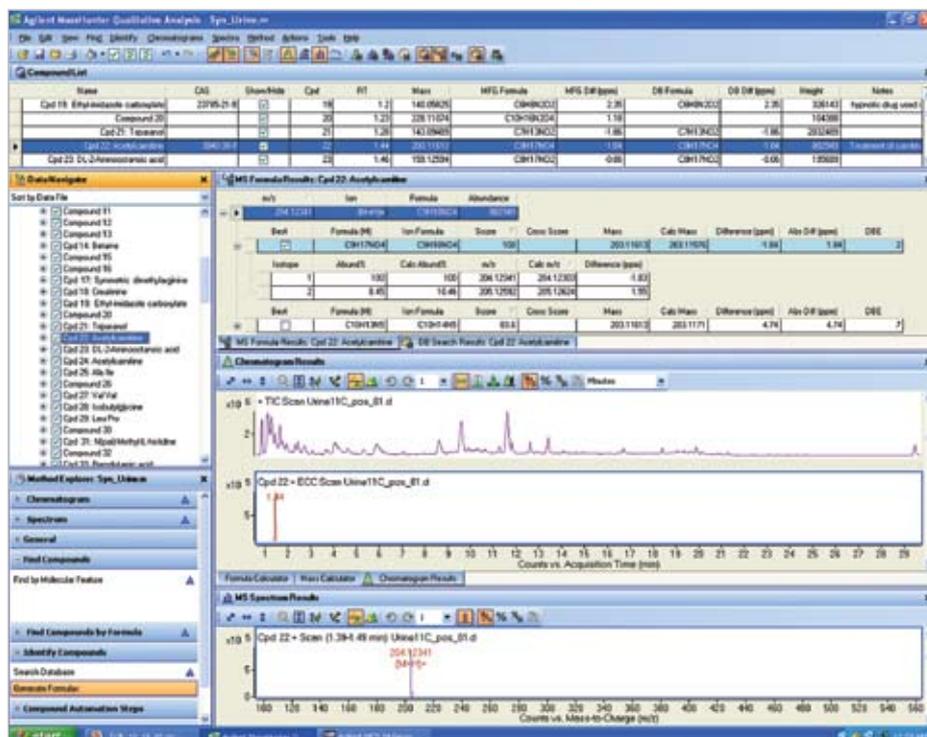
習得と操作が容易なMassHunter Quantitative Analysis (定量分析) ソフトウェアは、複数化合物の大規模バッチでこれまでにない生産性を実現します。内蔵のピークバリデーション機能を備えたパラメータ設定不要のインテグレータにより、分析対象のピークのみ集中することができます。

MassHunterソフトウェアでは、すべての処理データが化合物ごとに保存されます。カスタマイズしたレポート機能やあらかじめ設定されたテンプレート、またはMicrosoft® Excelのマクロアドインを使って、化合物ごとにデータをレポートすることが可能です。

## 必要な情報の抽出を支援するパワフルなツール

MassHunterソフトウェアを使えば、精密質量MSデータから最大限の情報を引き出すことが可能です。総合的なデータマイニングを可能にする独自のアルゴリズムにより、未知化合物の確認や同定で最高レベルの確信が得られます。MassHunterソフトウェアがあれば、未知化合物の検出、同定、定量が可能になります。

MassHunterソフトウェアに搭載された高度なモレキュラーフィーチャー抽出 (Molecular Feature Extraction) アルゴリズムは、すべてのサンプル構成成分を最低レベルのアバンダンスまで自動的に検出し、すべての関連スペクトルとクロマトグラムを抽出し、リテンションタイムや $m/z$ 、アバンダンスに応じて整理することで、分析時間を数時間単位で短縮します。また、組成式生成 (Molecular Formula Generator)、データベースおよびライブラリ検索、デコンボリューション、同位体パターンマッチング、荷電状態判定といった追加の処理手順を実行することもできます。



**MassHunterソフトウェアのモレキュラーフィーチャー抽出および組成式生成機能は、**  
サンプル構成成分を自動的に検出し、スペクトルとクロマトグラフィ情報を抽出し、分子式を提示することで、分析時間を数時間単位で短縮します。

MicrosoftはMicrosoft Corporationの商標として米国で登録されています。

## 統合型のアプリケーション主導データベースおよびライブラリ検索

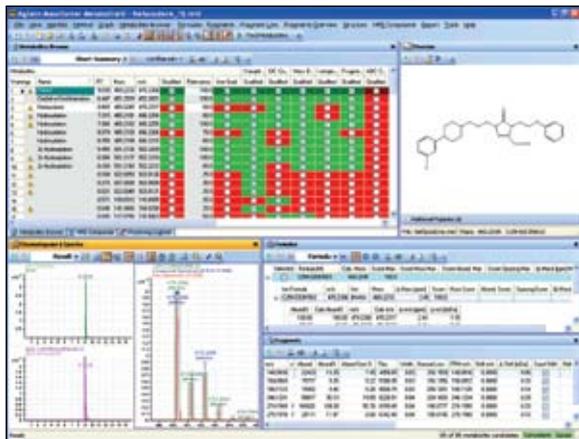
生産性を高め、化合物同定を容易にするために、MassHunterワークステーションソフトウェアでは、METLINをはじめとする公共およびプライベートデータベースに照らして、自動的に精密質量検索を実行することができます。精密質量および保持時間 (AMRT=Accurate-Mass and Retention Time) を用いたデータベース検索や、精密質量MSデータからの分子式の生成により、化合物を同定することが可能です。

## お客様のアプリケーションやワークフローと完全に統合

Agilent MassHunterソフトウェアは、お客様のワークフローを中心に設計されています。使いやすいインターフェース1つで、基本的な定性および定量分析タスクを処理できます。アプリケーションに特化したソフトウェアにシームレスに統合することもできます。

### MassHunter Metabolite IDソフトウェア

業界でもっとも幅広いアルゴリズムを備えるMassHunter Metabolite IDを使えば、精密質量、同位体パターン、フラグメントパターンなどをもとに、予想される代謝物を検出および確認することができます。また、精密質量MSデータから算出した分子式をもとに、想定していなかった代謝物を同定することも可能です。



### MassHunter BioConfirmソフトウェア

MassHunter BioConfirmソフトウェアは、インタクトプロテインやペプチドのマッピングデータを効率的かつ双方向的にバッチ処理し、合成ペプチドやタンパク変異体の同定を支援します。

### MassHunter Mass Profilerソフトウェア

MassHunter Mass Profilerソフトウェアは、使いやすい統計および視覚化ツールを搭載しています。これらのツールを使えば、データセットの単純な比較や、サンプル群間における統計的に有意な差異の同定が可能です。Mass Profilerソフトウェアでは、バイオマーカー特定、不純物テスト、環境および農業分析ワークフローもサポートされています。

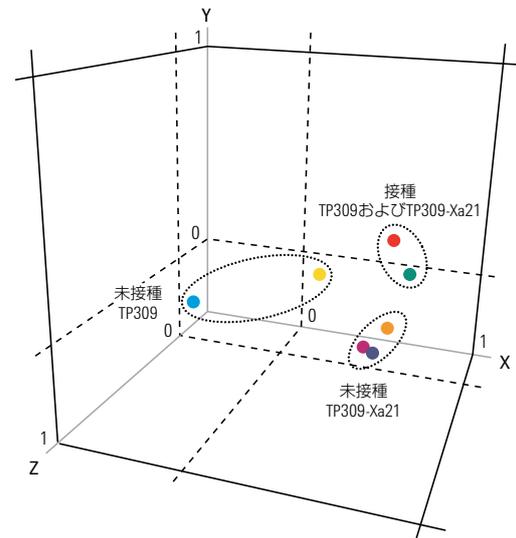
### METLIN パーソナル代謝物データベースソフトウェア

METLINデータベースは世界最大の代謝物データベースで、1万5000種類を超える外因性および内因性代謝物、ジペプチド、トリペプチドを網羅しています。Agilentのパーソナルデータベースでは、検索内容の秘密が完全に保たれます。自由に化合物やリテンションタイムを追加し、データベースをカスタマイズすることもできます。

### GeneSpring MSソフトウェア\*

GeneSpring MSソフトウェアは、差異解析用の使いやすい統合型プラットフォームで、メタボロミクスおよびプロテオミクス研究で提起される複雑な生物学的な疑問解決のサポートを行います。このパワフルな多変量解析ソフトウェアを使えば、大量のサンプルセットや複雑な実験のLC-TOFおよびCE-TOFデータを容易にインポート、規格化、比較、表示することが可能です。

\*2009年夏にMass Profiler Professionalとして一新されます。



## 不純物や分解産物の検出と定量をより簡単に

不純物の分析でも、安定性研究における分解産物の検出でも、6200 シリーズ Accurate-Mass TOFを使えば、作業をより迅速かつ容易にし、分析回数を減らすことが可能です。広いスペクトル内ダイナミックレンジにより、ネイティブの化合物が多量に存在する場合でも、微量の不純物の検出および精密質量測定が可能です。ほとんどのサンプルでは、希釈や再分析の必要がありません。MassHunterソフトウェアのモレキュラーフィーチャー抽出アルゴリズムなら、クロマトグラフィーで共溶出する場合でも、複数の化合物を容易に区別することができます。時間のかかる手動のデータ検証で低濃度の不純物を見つけだす必要がなくなります。

### 信頼性の高い同定を実現する 高度な分子式生成機能

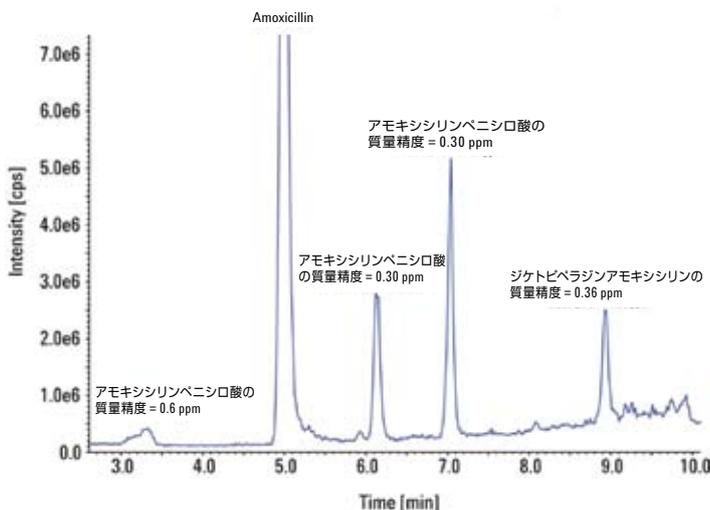
アジレント独自の組成式生成アルゴリズムでは、精密質量測定、同位体パターンマッチング、ユーザーの設定するパラメータを用いて、組成式候補のスコア付きリストを自動的に生成することで、不純物を同定します。

### 最適化されたプロファイリングソフトウェアが 統計的な差異を迅速に検出

Agilent MassHunter Mass Profilerソフトウェアは、分解産物のなどの不純物検出をスピードアップする統計および視覚化ツールを提供します。このオプションパッケージは、サンプル全体の特徴について、リテンションタイムおよび  $m/z$  で整理します。レスポンスを規格化し、統計テストを利用することで、サンプル間の有意な差異を明確に同定します。

### 少ない労力でデータが得られる 優れた定量パッケージ

MassHunterソフトウェアの統合型定量分析ツールを使えば、他のパッケージでは手動で実行していたタスクを自動化することができます。積分パラメータを設定せずにクロマトグラフィピーク面積を計算することが可能で、検量線フィッティングアシスタントが自動的にテスト検量線を適合させます。データは動的にリンクされ、迅速なレビューが可能です。これらすべての機能に、フレキシブルな化合物中心またはサンプル中心のナビゲーションが備わっています。



### 不純物分析をより速く、より簡単に

分解されたアモキシシリンサンプルのベースピーククロマトグラム。

1-ppm以下の質量精度により、組成式生成 (MFG) アルゴリズムを用いて、複数のアモキシシリン分解産物の正確な組成式を容易に生成することが可能になっています。

# 目的化合物を迅速にスクリーニング

フルスペクトルの超高速取り込みと優れた質量精度および分解能により、きわめて複雑な夾雑物が含まれている場合でも、数百種類もの農薬残留物や薬物を確実にスクリーニングすることが可能です。アジレントのMassHunterソフトウェアが自動的にサンプル構成成分を特定し、目的化合物をデータベースで検索するので、数分で結果を得ることができます。

## 高精度のフルスペクトルにより 同定の信頼性が向上

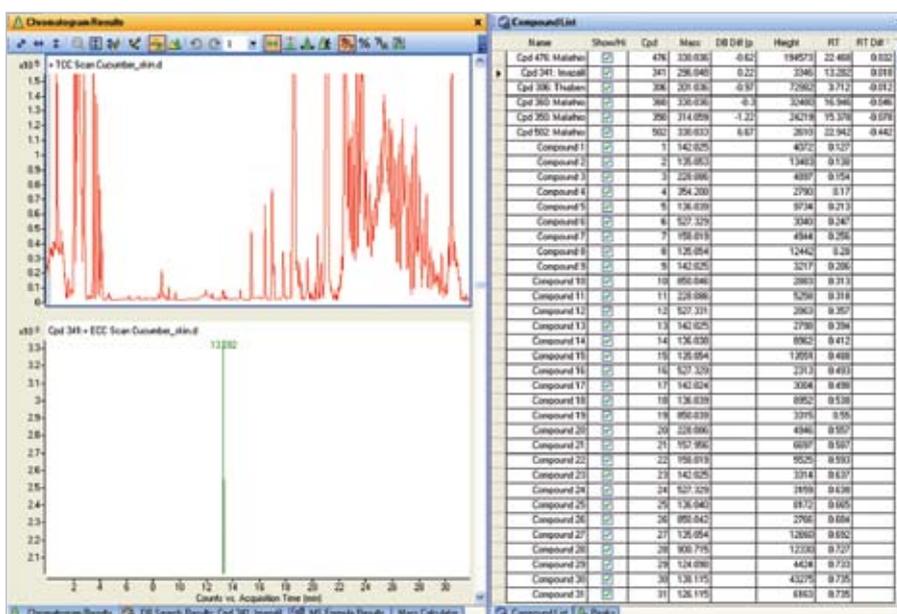
フルスペクトルの高速取り込み機能を備えた 6200 シリーズ Accurate-Mass TOFは、1回の分析で数百種類の化合物を分析するスクリーニングに最適なシステムです。1 ppm以下の標準質量精度により、フォールスポジティブ (偽陽性) の可能性を最小限に抑えられます。未知の化合物に遭遇した場合は、精密質量情報が同定に大きな威力を発揮します。

## 使いやすいソフトウェアにより 精密質量データベースの設定を単純化

MassHunterソフトウェアを使えば、スクリーニング用の化合物データベースを迅速かつ簡単に設定することができます。組成式をスプレッドシートにロードすれば、ソフトウェアが自動的に精密質量を計算し、データをデータベースに追加します。

## 自動データ処理によりデータ解析時間を短縮

データ処理が完全に自動化され、飛躍的に高速化されます。モレキュラーフィーチャー抽出アルゴリズムにより、クロマトグラフィー分析中のすべての化合物を特定し、精密質量と保持時間のリストを作成します。その後、ユーザーの指定する質量許容枠とオプションの保持時間枠を用いて、ソフトウェアが自動的に目的化合物をデータベースで検索します。すべてのプロセスが数分で完了します。



## パワフルなハイスループット 化合物スクリーニング。

キュウリ外皮抽出物の分析では、他の化合物よりも濃度がきわめて低いイマザリルを含む目的農薬が検出されました。質量および保持時間の測定値はデータベースの値にきわめて近く、結果の信頼性が高いことを示しています。

# より多くのバイオマーカーを迅速に発見

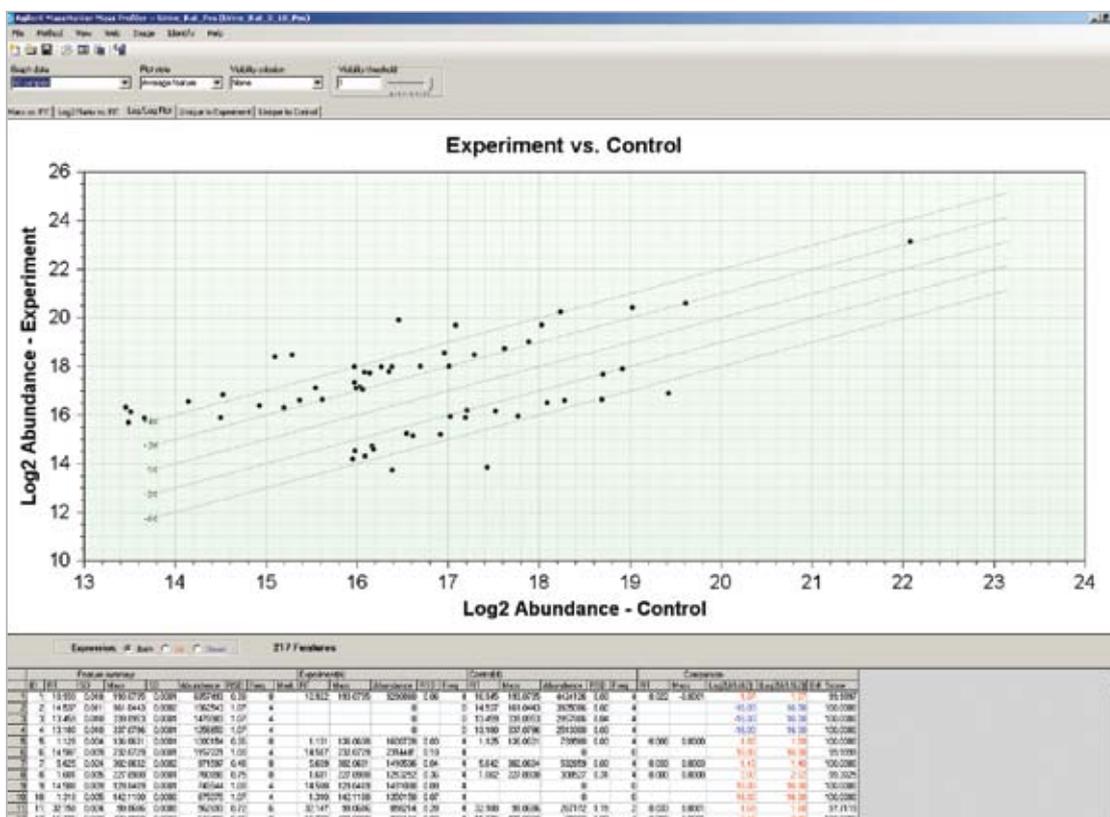
Agilent 6200 シリーズ Accurate-Mass TOFは、疾病や毒性のマーカー候補を見つけるための代謝物やタンパク質のプロファイリングに最適なMSプラットフォームです。コンスタントに高い精度を出すことができる6200 シリーズでは、差異がMSレベルで確実に測定され、広範囲のMS/MSデータベース検索に要する時間と手間が省かれます。その後、Agilent Accurate-Mass Q-TOFでの目的を絞ったMS/MS分析により、効率的かつ高感度の同定が可能になります。

## アプリケーションに特化したソフトウェアにより、採取データを「結果」に変えるプロセスを短縮

サンプル群間における発現レベルの差異を迅速に検出し、精密質量LC/MSデータからバイオマーカー候補を見つけるために、アジレントは統合型のソフトウェアパッケージを提供しています。

- **MassHunterソフトウェアに搭載されたモレキュラーフィーチャー抽出機能では**、複雑なサンプルにおいて化合物情報を効率的に抽出し、相互に関連付けるアルゴリズムが使用されています。これにより、明快かつ総合的な質量リストを作成し、より優れたプロファイリングデータを提供します。
- **Mass Profilerソフトウェアを使えば**、1つまたは2つの実験間で容易に比較を行ない、統計的に有意な強度差を示す共通化合物を見つけることができます。組成式生成、代謝物データベース検索、質量リスト検証といった内蔵機能を使えば、プロファイリングから同定への切り替えも容易です。
- **GeneSpring MSソフトウェア\*** は、きわめて複雑な実験から複数のサンプルセットをプロファイリングし、データを解析するのに必要な高度な統計比較および視覚化ツールを提供します。この多変量解析ソフトウェアにより、様々なスタディーから最大限の情報を引き出すことができます。

\*2009年夏にMass Profiler Professionalとして一新されます。



MassHunter Mass Profilerソフトウェアは、サンプルを比較し、バイオマーカー候補を見つけるための迅速かつ手軽な方法を提供します。2種類のヒト尿サンプルを比較したこの例では、強度に2倍以上の差がある化合物のみを表示するように設定されています。

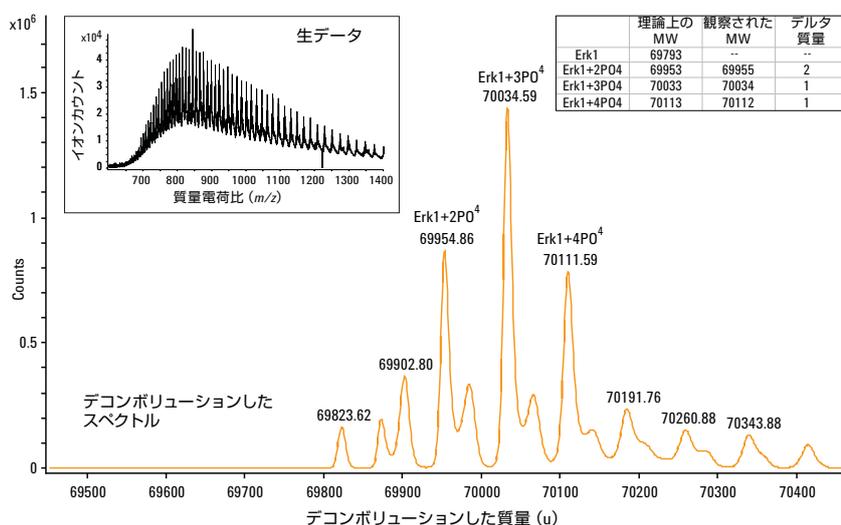
# インタクトプロテインを確実に同定

高分子インタクトプロテインを 6200 シリーズ Accurate-Mass TOFで分析した場合、ほとんどがインタクトのままに保たれ、他の質量分析計で生じがちな分解はほぼ見られません。明確なスペクトルと正確性の高い結果が得られます。高い質量分解能と質量精度を備える 6200 シリーズ Accurate-Mass TOFは、タンパク質品質管理やその他の重要な組み換えタンパク質アプリケーションに最適なプラットフォームです。優れた分解能により、翻訳後修飾、化学分解、組み換えなどに起因する構造の微細な変化をピンポイントで突き止めることができます。

MassHunter BioConfirmソフトウェアを使えば、合成ペプチドや組み換えタンパク質の質量と強度を容易に測定することができます。高度なアルゴリズムツールにより、タンパク質同定やタンパク質アイソフォーム分析の自動（または双方向的）確認が可能になります。

このソフトウェアは、以下の機能を備えています：

- タンパク質やペプチドスペクトルを正確にデコンボリューションし、インタクトな分子量を精密に測定します。
- 想定外の差異が見られた場合に、タンパク質の分子量を確認し、差異の原因と考えられる修飾を提示します。
- タンパク質配列エディター／マッチャーを用いて、ペプチドレベルの質量の差異を特定します。
- タンパク質の一次配列および修飾を示すすべてのスペクトル情報を用いて、高速かつ高精度のペプチド質量フィンガープリント分析を実行します。



## インタクトプロテインの確認

70 kDaまでの細胞外シグナル調節キナーゼ1 (Erk1) タンパク質サンプルの分析例。6200 シリーズの優れた質量分解能により、3種類のリン酸化状態が容易に分離され、他のアイソフォームの存在も示されました。

## True Hi-Def TOF技術により、ラボの化合物スクリーニングと確認分析の確実性が向上します。

合成化合物確認、バイオマーカーのプロファイリング、不純物同定、農薬のスクリーニング、インタクトプロテインのキャラクタライゼーションなどにおいて、Agilent 6200 シリーズ Accurate-Mass TOF LC/MSの比類のないデータ品質とスピードがあれば、より多くの化合物をより迅速かつ正確に分析できるようになります。

### 詳細情報

詳細については、以下をご覧ください。

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

**コールセンター**

0120-477-111

本文書記載の製品は研究専用です。  
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。  
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。  
また、本文書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・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2008  
Printed in Japan May 19, 2009  
5989-7872JAJP



**Agilent Technologies**