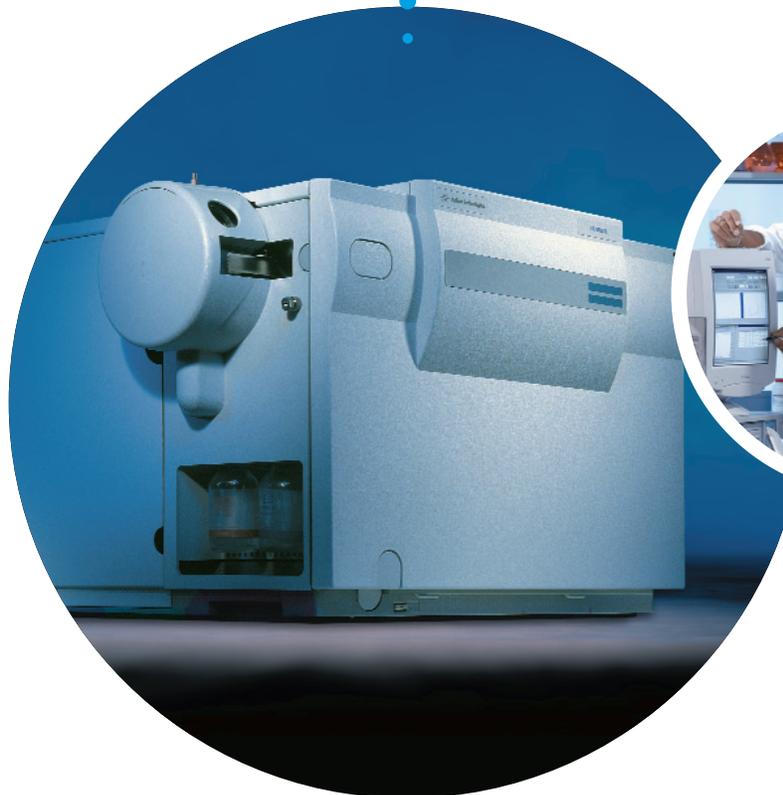
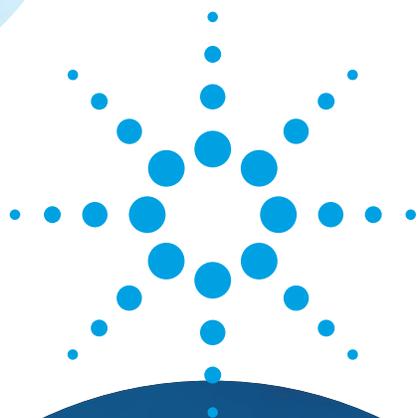


Agilent 1100 シリーズ LC/MSD

バリューとパフォーマンスの
新しいスタンダード



Agilent Technologies

他の追隨を許さない性能と頑健さ、そして使い易さ

Agilent 1100 シリーズ LC/MSD は何世代にもわたって改良を続けてきた四重極 LC/MS の究極の姿です。

このシリーズは他の追隨を許さない性能ばかりでなく、実績のある頑健さと使い易さを兼ね備えています。

アプリケーションの期待に応える性能レベル

経済性に優れた VL タイプと最高の性能と柔軟性を追求した SL タイプ：2 種類の LC/MSD モデルから自由に選択していただけます。VL モデルは多くのアプリケーションには十分過ぎるほどの卓越した性能を備えながら、より多くのラボでご利用いただけるように価格設定されています。SL モデルはさらに広い質量範囲をカバーし、比類ない感度と一回の分析の中でスキャンごとにマルチデータ採取サイクルを実行する機能を備えています。

最先端の分析を可能にする完備したシステム、しかもトラブルフリー

VL と SL タイプの LC/MSD は Agilent 1100 シリーズ LC モジュールとシームレスに接続されます。Agilent ChemStation データシステムからすべてのモジュールを一括コントロールして従来とは比較にならないレベルの自動化と無人分析を実現して生産性向上に寄与することができ、しかも信頼性が損なわれることはありません。

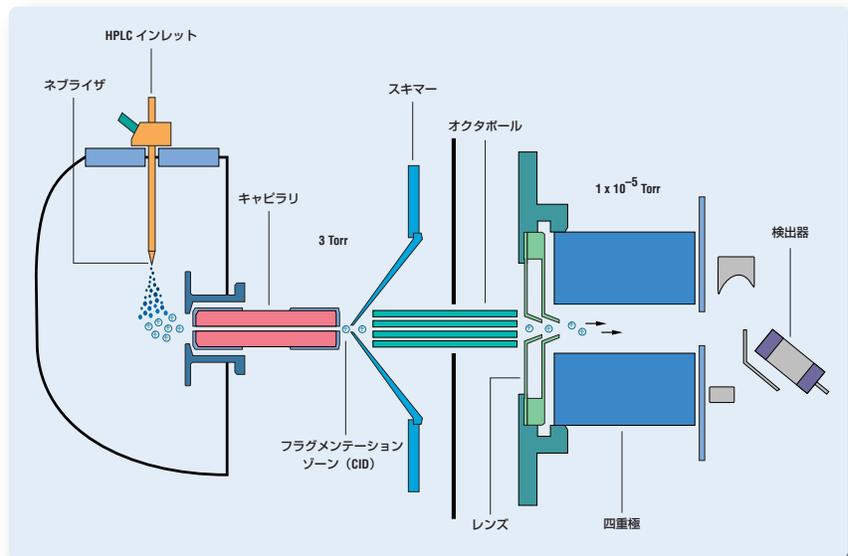
LC/MSD は、コンビナトリアルライブラリを利用して候補となる薬物から真の物質を同定したり、水溶液サンプル中の殺虫剤や除草剤を定量する等の多様なアプリケーションに対応します。



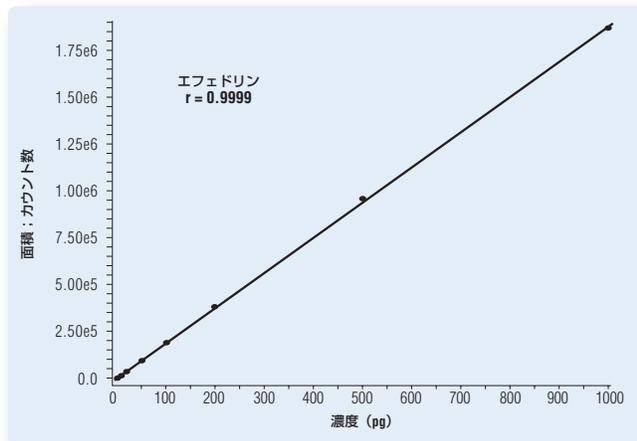
最先端の性能を...

LC/MSD は卓越した感度ばかりでなく再現性とリニアリティにも優れています。したがって、得られた結果を完全に信頼できます。

- ESI (electrospray ionization) と APCI (Atmospheric Pressure Chemical Ionization) の両方に対応して低ピコグラム領域でも十分な感度を持ちます
- 最も難しい分析でも優れた定量精度を保証するリニアリティ



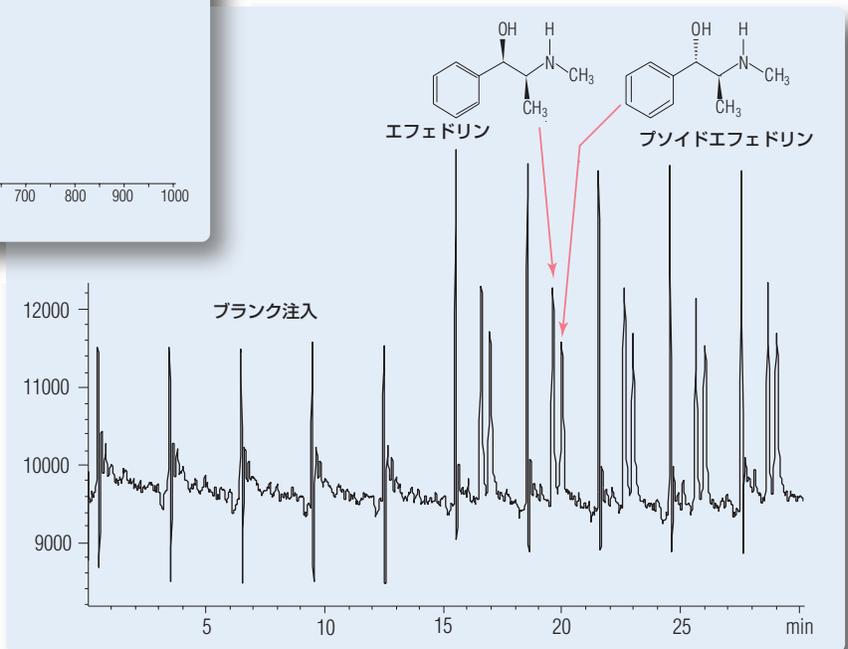
卓越した性能を発揮する LC/MSD のイオン光学系と真空システム



綿密に練り上げられたシステム

この LC/MSD のイオン源とイオン光学系、そしてシングルターボポンプ真空システムは相互に精密にマッチングして最適化され、最高の性能を発揮します。

- 大容量のドライビングガスを持つ直交型スプレーイオン源が溶媒クラスタと移動相アダクト由来のバックグラウンドを大幅に減少します。
- 通常は分析が困難とされる低分子量サンプルに対しても、大口径のスキマオリフィスが優れた検出限界を可能にします。
- 最適化されたイオン光学系が質量範囲全体にわたる広いイオン透過性を実現するばかりでなくチューニングも簡単になります。



エフェドリンとプソイドエフェドリンを各 1pg 含むサンプルを繰り返し注入：非常に優れた感度と再現性を示しています。最も厳しい分析のニーズでも満足するリニアリティを示しています。

- 精密加工された四重極型マスフィルタと高速かつ安定なエレクトロニクスが信頼できる質量アサインメントと良好な質量分解能を実現します。
- 低ノイズでしかも卓越した信号増幅機能を持つ高感度検出器は手順に従って誰でも確実にチューニングができます。

多様で困難な分析に迅速に適應

LC/MSD の柔軟性に富むハードウェアとソフトウェアがあなたをサポートします。イオン源は交換可能ですから、サンプルに最も適したイオン化法を自由に選択することができます。LC/MSD SL が提供するマルチシグナル機能を使用すれば 1 つのサンプルから得られる情報の量が格段に増大します。

広い選択肢を提供するイオン化

Agilent は LC/MSD で考えられるあらゆるタイプのイオン化法を提供しています。あなたのアプリケーションに適用して最高の感度が得られる方法を選択してください。極性の強い化合物ならば ESI、比較的極性の弱い化合物ならば APCI または APPI (Atmospheric Pressure Photoionization) が適しています。マウント方法は全てのイオン源に共通ですから、5 分以内で簡単に交換することができます。

優れたイオン源デザイン

Agilent 独自の設計である直交型スプレーイオン源 (特許取得) はイオン光学系に対してネブライザを直交方向の固定位置に置く方式を採用した最初の例です。この設計は次のような特長を持っています：

- 脱溶媒とイオン輸送を独立してコントロールできることによる感度向上
- 装置バックグラウンドノイズの減少
- キャピラリとイオン源をより長期間清浄に保持
- 移動相の流れと組成変化があってもネブライザの調節が不要
- 不揮発成分を許容できる範囲が増大
- 既存 LC メソッドの LC/MSD への流用が容易

これらのカルバメート系殺虫剤とフェニル尿素系殺草剤の分析例が複数のイオン源 (サンプルの特性にマッチしたイオン源を選択) を使用する利点をよく示しています。



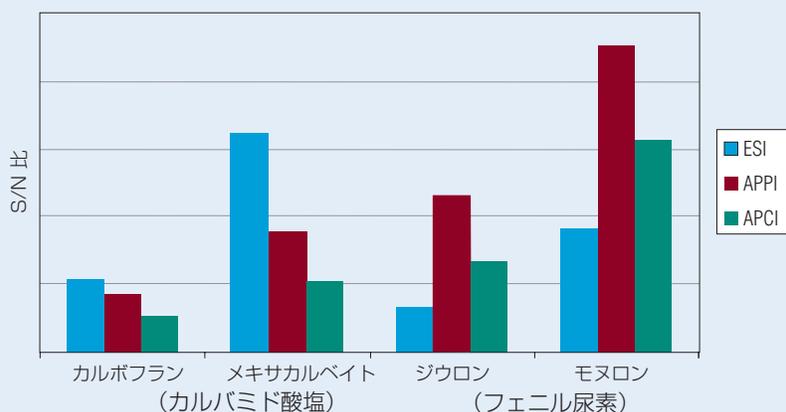
高極性から中極性分子の分析には、エレクトロスプレーイオン源 (ESI) を使用します



中極性から低極性の分析には大気圧化学イオン源 (APCI) を使用します



APCI と ESI に対して小さい応答しか示さない (あるいは全く応答しない) 極性の低い分子には APPI イオン源を使用します

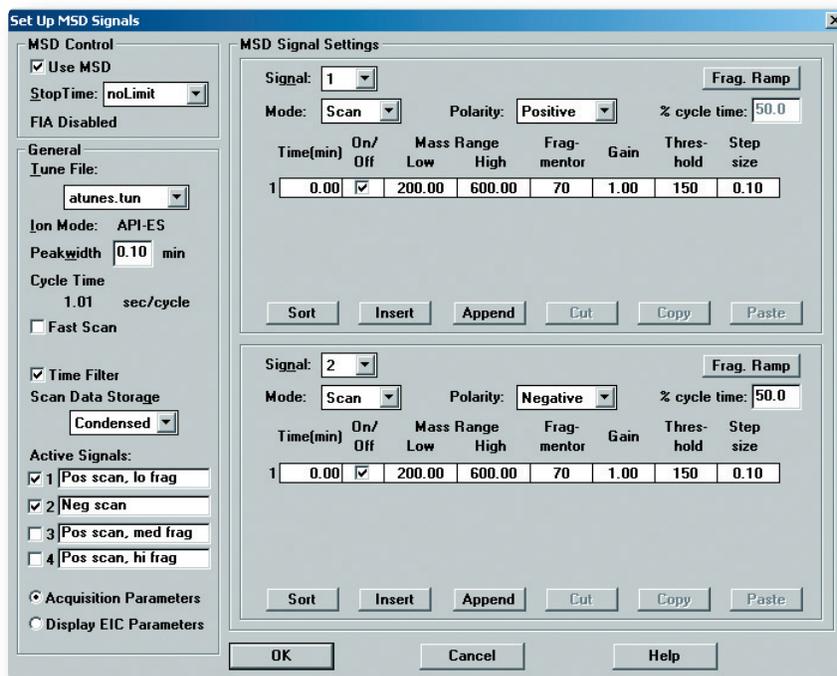


1回の分析でより多くの化合物の分析を可能にするマルチシグナル

質量分析計の最良の分析条件は化合物ごとに異なります。メソッド開発、あるいはサンプルのスクリーニングでも、LC/MSD SL のマルチシグナル機能を活用すれば 1 回の注入でより多くの化合物を分析することができます。この機能を使用すれば 1 回の分析でイオン化の極性をポジティブとネガティブに交互に切り換えが可能であるばかりでなく、イオン源内で高/低エネルギー衝突を交互に切り換え可能な CID (Collision-Induced Dissociation) を使用でき、さらに SIM (Selected Ion Monitoring) とスキャンモードを交互に選択することができます。この方法では 1 回の分析で最高 4 種類までのデータ採取条件を使用することができます。

生産性向上に直結するポジティブ/ネガティブスイッチングモード

LC/MSD SL ではスキャンごとにイオン化の極性をポジティブとネガティブに切り換えることができます。切り換えは非常に高速ですから、これによってクロマトグラムの整合性が失われることはありません。イオン化極性の切り換えができることにより、予め時間をかけて最適イオン化モードを決定するという煩雑な作業を行うことなく未知サンプルを迅速にスクリーニングすることができます。ポジティブイオンスペクトルとネガティブイオンスペクトルを同時に 1 回の注入で採取できることから、どちらのモードでもイオン化しない化合物についても確信の持てる実験結果を得ることができます。



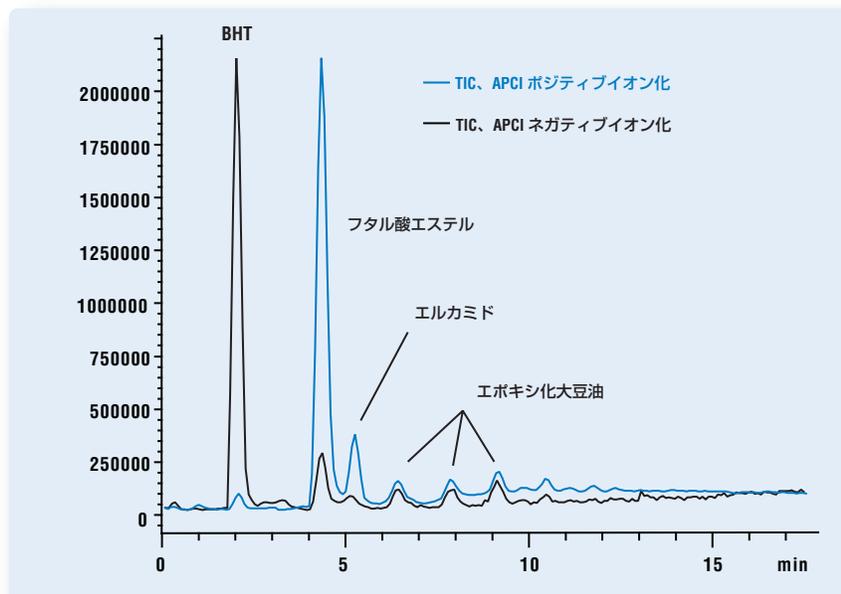
最高 4 種類の異なるデータ取得モードを使用して 1 回の分析から最大限の情報を引き出します

分子量と構造情報が 1 回の注入で

CID エネルギーをスキャンごとに変化させてより詳細なスペクトル情報を得ることができます。低エネルギー CID (低いフラグメンター電圧) を使用して分子イオンの応答を高め、高エネルギー CID (高いフラグメンター電圧) でより多くのフラグメントを発生させて構造情報を豊富にします。

目的化合物と未知化合物を 1 回のランで分析

LC/MSD ならば、SIM モードによる目的化合物の正確な定量とスキャンモードによるサーベイ分析の両方を 1 回の分析だけで実行できます。また、濃度レベルの低い化合物や微弱な応答しか示さない化合物を SIM モードで分析し、容易にイオン化する化合物をスキャンモードで分析するという方法も可能です。



ポジティブとネガティブイオンスキャンを交互に切り換えることにより、1 回の分析から樹脂添加物を確実に同定することができます。単一の極性のイオン化だけからこのような情報を得ることはできません。

強力でありながら親しみやすいソフトウェアが 操作を容易に

強力な LC/MS ChemStation ソフトウェアがチューニングとセットアップからデータの取り込み、定性・定量データの処理に至るすべての面で操作を簡単にしてくれます。高度なネットワーク機能を備えていますから、離れた場所からでも装置をコントロールして結果を表示させることができます。

貴重な時間を節約する自動チューニング

自動化されたチューニング機能 (Autotune) と校正プログラム、そして内蔵された校正サンプル注入システムが LC/MSD の迅速かつ簡単なセットアップを可能にしてくれます。校正サンプルはプレミックス済みですからばらつきのない校正を約束してくれます。もちろん、特殊な分析に対応するための対話操作によるチューニング機能も備えています。



内蔵された
キャリブレーションシステムと
キャリブレーションを使用して
簡単に自動チューニングを行えます

ピーク純度ソフトウェアが不純なピークを赤色で表示します。個々の成分を抽出したクロマトグラムを下に表示して構成成分を明らかにします。

メソッド開発を短時間に

LC/MSD のフローインジェクション機能を使用すれば短時間でメソッド開発を行えます。LC/MSD SL のマルチシグナル機能を用いてデータ取り込みを行えばメソッド開発はさらに簡単になります。

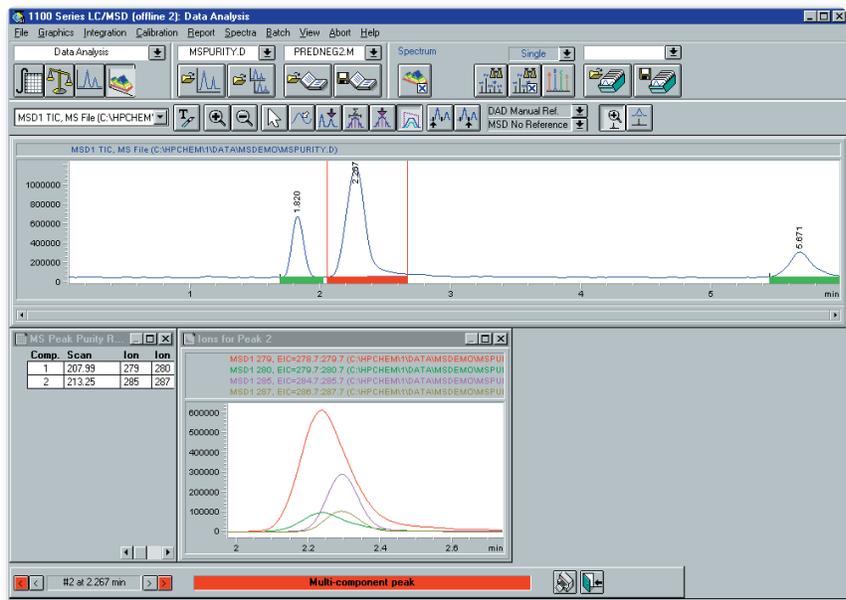
高速化されたセットアップシーケンス

ChemStation ソフトウェアを使用すれば無人分析のためのシーケンスを短時間で作成変更することができます。シーケンスインポートウィザードの指示に従って操作すれば簡単に表計算ソフトやテキストファイルからシーケンスがインポートできてしまいます。ハイパーシーケンス機能と Agilent 1100 シリーズのサンプル容量拡張機能を併用すればシーケンスのシーケンスを設定することも可能です。ハイパーシーケンスの機能を使用すれば実験の途中であってもプレートやサンプル群の追加/順序変更を行えます。

重なったピークの化合物を素早く確認

ピーク純度ソフトウェアは UV データまたはマススペクトル (または両方) を利用して分離が不完全なクロマトグラムピークを見つけ出します。この機能は分離メソッドの開発、あるいは更なる分離の改善に労力をかけることなく定量イオンを指定したい場合などに役立ちます。

- トグルボタンを押すと1つの不純物ピークから次の不純物ピークへ、クロマトグラフ全体にわたって次々とジャンプして移動することができます。
- ピークの純度レポートには不純物ピークの保持時間、含まれている可能性のある成分数、およびクロマトグラフ中の各ピークの特異イオン一覧が表示されます。



Meas. RetTime [min]	Library RetTime [min]	CalTbl RetTime [min]	Sig	Area %	Purity Factor	Library # Match	Name
2.584	2.589	-	1	1.32737e-3	-	1 1000	Sulfamethizole
2.819	2.815	-	1	1.49818e-3	-	1 1000	Sulfamethazine
3.410	3.415	-	1	1.11062e-3	-	1 1000	Sulfachlorpyridazine
5.971	5.975	-	1	1.40215e-3	-	1 1000	Sulfadimethoxine

NIST MS library search mode: Automatic library search

NIST MS library file No. : 1
NIST MS library file name : msdemo

RetTime [min]	Sig	MW	Library #	Library Id	Match	Formula
2.746	2	270	1	3	967	C9H10N4
2.987	2	278	1	4	915	C12H14N
3.571	2	284	1	5	938	C10H9Cl
6.143	2	310	1	6	978	C12H14N

ライブラリ検索ソフトウェア
(オプション) 化合物を
迅速に同定

The screenshot shows the NIST MS Search application window. The main window displays search results for Sulfamethazine. The 'Text Info' pane shows the formula C₁₂H₁₄N₄O₂S, MW: 278, CAS#: 57-68-1, NIST#: NA, ID#: 4, and DB: msdemo. The '10 Masses and Abundances' table shows peaks at m/z 108, 124, 156, 186, 172, 187, 213, 279, 280, 301, and 310. The 'Expanded Plot' shows a mass spectrum with peaks at 124, 186, 279, and 301. The 'Structure' pane shows the chemical structure of Sulfamethazine. The 'Clipboard, 1 spectrum' pane shows the selected spectrum.

化合物の迅速同定

オプションとして提供される NIST マススペクトルライブラリ検索ソフトウェアが MS スペクトルとユーザーが作成したライブラリスペクトルをマッチングさせて素早く検索してくれます。UV とマススペクトルの両方から検索とレポート作成を行うことができます。このソフトウェアは ESI と APCI データ両方に対応します。

The screenshot shows the 1100 Series LC/MSD software interface. The main window displays a chromatogram with a peak at 1.75 minutes. The 'MSD1 TIC, MS File (BUFF0808006-0702.D) APCI Positive' plot shows the total ion chromatogram. The 'List of Compounds' table shows the results of the search.

Sample	Vial	Sample Type	Run	Data File	RT sulfa	Area sulfa	Amount sul	RT sulfa	Area sulfa	Amount sul
* sulfa + HBS:	6	Sample	52	006-0701.D	1.930	192.520	68.963	2.003	679410.000	39.297
* sulfa + HBS:	6	Sample	53	006-0702.D	1.771	204.410	73.224	1.845	659300.000	38.077
* sulfa + HBS:	6	Sample	54	006-0703.D	1.727	234.570	84.062	1.803	677430.000	38.951
* sulfa + HBS:	6	Sample	55	006-0704.D	1.705	215.890	77.334	1.777	675240.000	39.057
* sulfa + HBS:	6	Sample	56	006-0705.D	1.688	197.560	70.769	1.761	659590.000	38.155
* sulfa + HBS:	6	Sample	57	006-0706.D	1.670	198.940	71.265	1.744	646390.000	37.388
* sulfa + HBS:	6	Sample	58	006-0707.D	1.655	193.630	69.363	1.728	647470.000	37.450
* sulfa + HBS:	6	Sample	59	006-0708.D	1.647	187.100	67.022	1.718	662820.000	38.338
* sulfa + HBS:	6	Sample	60	006-0709.D	1.638	184.470	66.080	1.708	639990.000	37.017

評価作業を簡単にしてくれるバッチレビューソフトウェアは、多数のバッチサンプルの結果を再処理する機能も備えています

自動化による迅速定量

装置のコントロールとデータ解析、さらにレポート作成を自動化してメソッドに組み込むことができます。

- 1つのキャリブレーションテーブルの中で UV と MS 両方のシグナルを利用して定量を行います
- 一般的に使用されている各種定量メソッド (ピーク面積/高さ、内部/外部標準、ピークレシオ、多点検量線カーブなど) から任意に選択できます
- バッチレビューソフトウェアを使用すれば、多数のサンプルバッチを素早く評価して結果を更新することができます
- 何通りものデフォルトレポートを利用できるほか、ユーザーがドラッグ&ドロップでカスタムレポートを作成することもできます

スループット向上につながるソフトウェアとソリューション

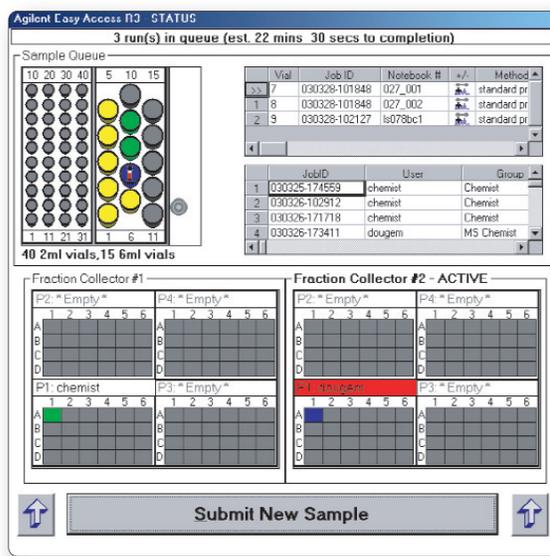
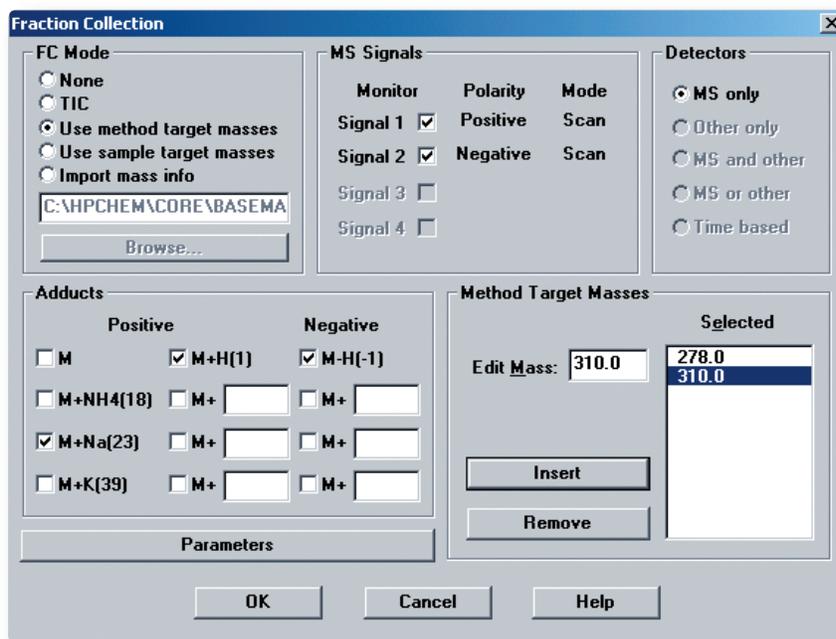
サンプル精製から分子量の決定、ハイスループット分析までを網羅する Agilent のソリューションは質量分析の特長である完璧な情報を分析のエキスパートから初心者まで同様に提供してくれます。Agilent 1100 シリーズ LC モジュールと LC/MSD、そしてアプリケーションに特化した使い易いソフトウェアが全体でシームレスなソリューションを提供してくれます。取り扱う対象が単一の合成生成物であってもコンビナトリアルライブラリであっても、Agilent はそれぞれの生産性向上につながるソリューションを提供します。

マスベースのフラクションコレクションソフトウェアもソフトウェア上で簡単にセットアップできます

信頼のおける高い収率の精製に役立つマスベースフラクションコレクション

LC/MSD は Agilent 1100 シリーズピュリフィケーションプラットフォームを用いた分析/分取スケールでの質量に基づく化合物の分離の信頼性をはるかに高めてくれます。

Agilent のマスベースフラクションコレクションは使い易く、再現性と信頼性に優れています。このコレクション方法で使用するスプリッタはアクティブに動作するように設計されていますから、メソッドごとに配管をつなぎ換える必要がありません。このシステムが装備するディレイセンサーとソフトウェアが検出器通過後フラクションコレクタに至るまでのディレイボリュームを正確に計算しますから、貴重なフラクション成分を途中で失うことはありません。さらに、Easy Access ソフトウェア (オプション) が複数のユーザーで使用する際のウォークアップ機能を提供してくれます。



スケジューリングからサンプル処理、さらにレポートの自動作成まで、グラフィカルユーザーインターフェイスを使用するすべての作業を簡単に実行できます

簡単に誰にでもできる分子量の確認と精製

LC/MS Easy Access ソフトウェアは複数の合成化学者が煩雑な操作なしに分子量の確認と精製を行うことを可能にしてくれます。簡単に操作できるのがこのソフトウェアの特長であり、ユーザーが実行しなければならない作業は名前とパスワード、サンプル識別名を入力してからメソッドを選択し、合成した化合物の分子式または予想分子量を入力することだけです。Easy Access ソフトウェアはサンプルの状態を報告し、分析スケジュールを決定して分子量決定/サンプル分画を実行します。

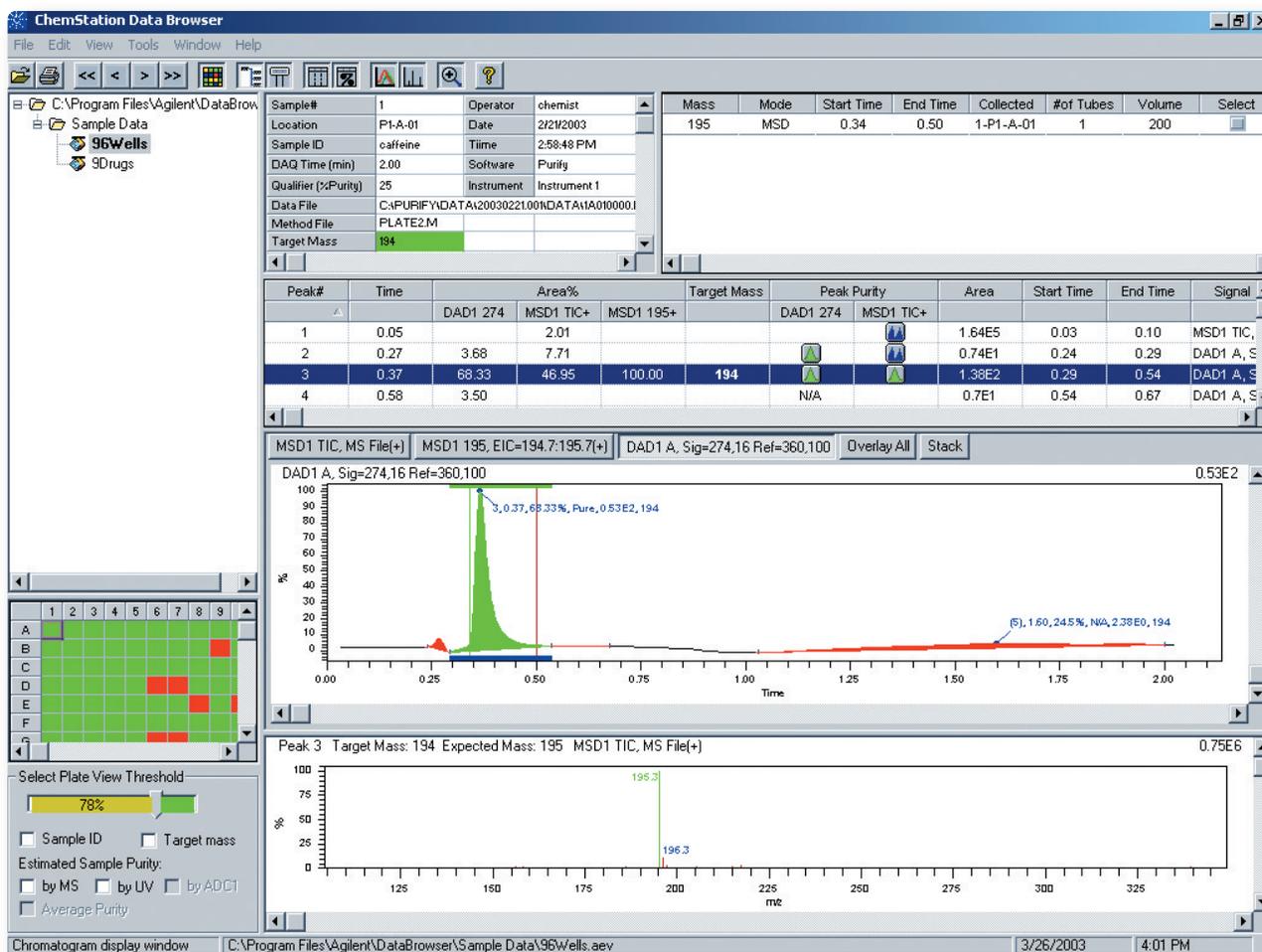
離れた場所からでも簡単にデータのレビューを可能にしてくれる ChemStation データブラウザ

Agilent ChemStation データブラウザは分析や精製の結果を離れた場所から素早く簡単にチェックすることを可能にして LC/MS Easy Access のウォークアップ機能を理想的に補完してくれます。このブラウザはドラッグディスカバリを目的として開発されたものですが、LC または LC/MS ChemStation データシステムで作成したものであれば任意のデータファイルの表示と評価に使用できます。

このデータブラウザはウェルプレート全体の結果を表示できる能力を持ち、合成が成功したかどうかを見やすいカラーコードで分類して表示してくれます。サンプルの純度評価には MS、UV、光散乱、あるいはそ

の他の検出器シグナルも利用することができます。スライダーを使用して純度の合格判定しきい値を任意に調節できますから、様々な仮定での検討に最適です。化合物合成に問題が残っておりその対処が必要であるとき、このソフトウェアを使用すれば簡単にサンプルを比較して必要な項目を網羅したカスタムレポートを作成することができます。

ChemStation データブラウザは結果を自動的に電子メールで知らせてくれるほか、ラボのデータネットワークを介してサーバー上の分析結果に簡単にアクセスすることができます。



ChemStation データブラウザではディスプレイに表示する内容をユーザーが選択します。カラーコード分類されたプレート/サンプルビューを見ればどの合成が成功したかを一目で判断することができます

完璧なソリューションがハイスループット 定性・定量分析を実現

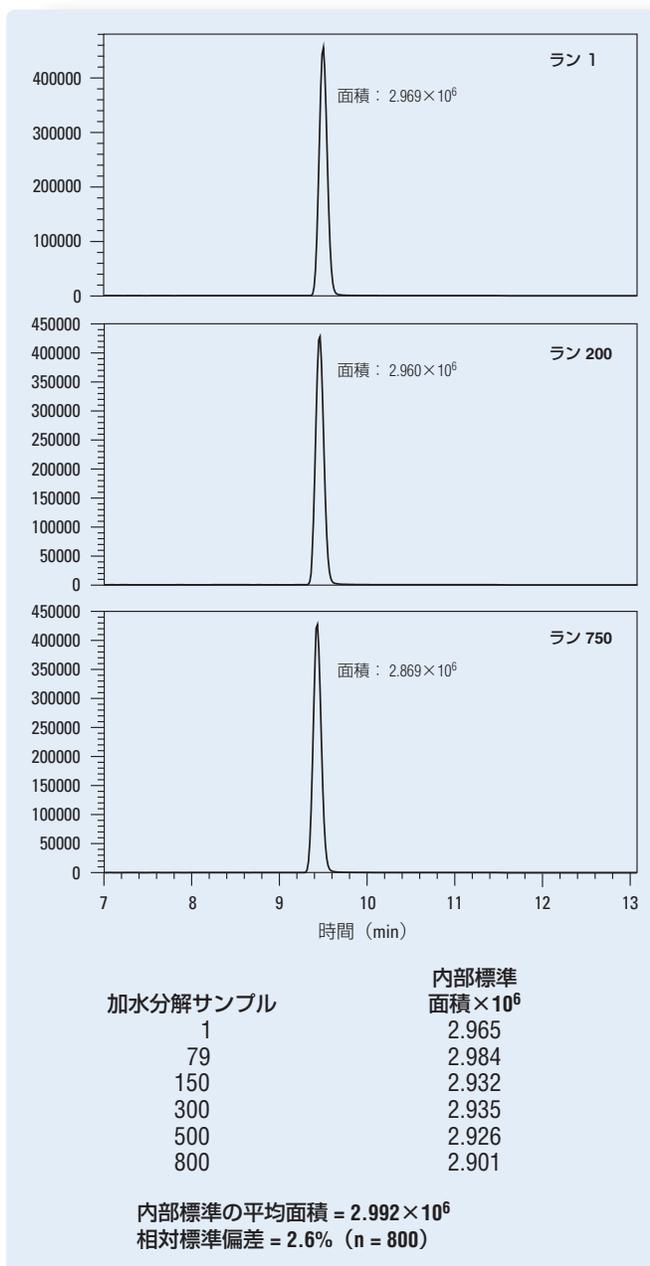
無人でハイスループット処理を行うアプリケーションを実現するためには究極のスピードと性能、さらに頑健さが要求されます。Agilent は多検体の同定、定量、純度測定に対応するスケーラブルなモジュール化システムである Agilent 1100 シリーズハイスループット LC/MS システムでこの困難な問題を解決します。

- 短いサイクルタイム、オーバーラップインジェクション、卓越したリニアリティと精度、最小のキャリーオーバーを実現するウェルプレート LC システム
- 統合化された装置全体のコントロール、完全自動化、システムバリデーション、高度なデータ処理を行う ChemStation ソフトウェア
- 多検体、ウォークアップ、バーコードなどに対応するサンプル拡張機能
- カラムの再生、カラムと溶媒の切換え、自動サンプルクリーンアップと濃縮を効率化するバルブソリューション
- 広範囲の規格・規制への準拠とサポートサービス

さらに高速化されたスキャン...

LC/MSD SL の 5250 u/sec 高速スキャンモードを使用すれば LC/MS のスループットを大幅に向上させることができます。高速スキャンは次のようなメリットをもたらします：

- クロマトグラフが高速化され、ピークに含まれるデータポイント数が増えるので定量の再現性が向上します
- 極性をポジティブ/ネガティブに切換えることにより、クロマトグラフの整合性を損なうことなく両方のイオン化モードでの解析を行えます



内部標準の EIC と、カリウム塩分解反応のカイネティクスを追跡して得られたデータから明らかなように、ハイスループット LC/MS 分析が必要となる安定性、再現性、頑健さを満たしています

... 様々な利点

巧みに設計された通信と自動化機能を備えた LC/MSD はマルチサンプルの迅速分析にさらに多くの利点をもたらします：

- 1 回のランが完了後わずか 5 から 10 秒で次の測定準備が整いますから、注入から注入までの時間を極限まで短縮できます

- オフラインでデータ解析を行えますから、次の測定実行中に前回のデータを解析できます
- オーバーラップインジェクションが可能ですから、前回のサンプルがまだ分析中に次のサンプルの引き抜きを開始できます
- 他のカラムで分析実行中にカラム再生溶液を流して平衡化させることができます

業界のリーダーとして広く認められた Agilent ならでの優れたバリデーションとサポートを提供

Agilent のシステムは規格・規制への準拠機能が最初から組み込まれているという点で他の追随を許しません。したがって、低コストかつ短時間でハードウェア、ソフトウェア、メソッド、およびデータのバリデーションが可能です。Agilent 1100 シリーズのモジュール 1 台ごとにシステムバリデーション証明書が添付され、さらに据付時適格性確認稼働性能適格性/性能確認、稼働時適格性確認を迅速化するソフトウェアも付属します。

規格に対応した製品とサービスは時間と経費削減に寄与します

ChemStation のソフトウェアの標準機能に加えて、Agilent は各種規格の厳格な要求に適應するための完備したソフトウェアをセットで提供しています。

- ChemStation Plus メソッドバリデーションパックは 21 CFR Part 11、ICH、および USP、EP の要求に合わせて自動化メソッドのバリデーションを行います
- ChemStation Plus セキュリティパックは 21 CFR Part 11 の要求に準拠して確実な結果の見直しと認証を行います
- 中央で安全確実にデータを保管する ChemStore

Agilent はこの他にも次の項目を含む包括的なサービスを提供します：

- ハードウェアの適格性再確認
- 修理適格性確認
- マルチベンダーシステムのバリデーションサービス
- 規格準拠に関する e-セミナー

バリデーション実行に必要な項目の削減に役立つマルチシグナル出力アクセサリ

Agilent は、複数の LC/MSD を備えたラボの複数のデータシステムのバリデーションの代替として使用できるマルチシグナル出力アクセサリを提供しています。このアクセサリは LC/MSD からの未処理のデジタル MS シグナルをアナログ形式へ変換し、以後の処理のために直接ラボの LIMS (Laboratory Information Management System) へ伝送します。計算処理が LIMS 上で行われることからバリデーションの対象を 1 台の LIMS へ集約することができ、個々の質量分析計データシステムのバリデーションを行う必要がなくなります。



広い範囲をカバーするサポート体制とランニングコストの低減

LC/MSD は最小のサービスで運用できるように設計されていますが、万が一サービスの必要が生じた場合であっても Agilent が提供する第一級のサービス網 (World-Wide Support Organization) を活用していただけます。Agilent が提供するサービス：

- 保守部品を 7 年間保管
- 様々なサービス契約
- 産業分野に特化したサポートパッケージ
- 1100 シリーズ LC モジュールと LC/MSD に関するあらゆるサポートを Agilent 一社が提供します

仕様

質量範囲

VL—m/z 50 - 1500
SL—m/z 50 - 3000

質量精度

スキャンモードでの質量校正範囲内において
± 0.13 u

マス軸安定性

8 時間以上の時間幅にわたって ± 0.13 u

スキャンスピード

VL—2500 u/s
SL—2500 u/s 標準モード
5250 u/s 高速スキャンモード

SIM 感度

- ESI (400 µL/min)、または
APCI (1000 µL/min)
- m/z 609.3 の選択イオンモニタリング
- 正イオン化

	量	S/N 比
VL	10 pg レセルピン	100:1 RMS (20:1 peak-to-peak)
SL	1 pg レセルピン	100:1 RMS (20:1 peak-to-peak)

スキャン感度

- ESI (400 µL/min) または
APCI (1000 µL/min)
- スキャン範囲 m/z 100~650
- スキャン速度 2500 u/s
- 抽出イオン (m/z 609.3)
- 正イオン

	量	S/N 比
SL	50 pg レセルピン	100:1 RMS (20:1 peak-to-peak)

マルチシグナル採取 (SL モデルのみ)

単一ランの毎回のスキャンごとに 4 種類の異なるモードでデータを採取可能。

さらに詳しくは...

Agilent LC/MSD または他の Agilent 生命科学/化学分析用装置およびサービスについて更に詳細な情報をご希望のお客様は次の無料電話をご利用ください:

横河アナリティカルシステムズ株式会社

本社/〒192-0033 東京都八王子市高倉町9-1
カスタムコンタクトセンター Tel. 0120-477-111

<http://www.agilent.co.jp/chem/yan>

Agilent Technologies がお届けする生命科学分野の機器は ISO 9001 認証を取得した品質管理システムの管理下で設計、製造されています。



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。

© Agilent Technologies, Inc. 2003
Printed in India December 16, 2003
5988-9975JAJP