[VION IMS QTOF]

分解能を超越して

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

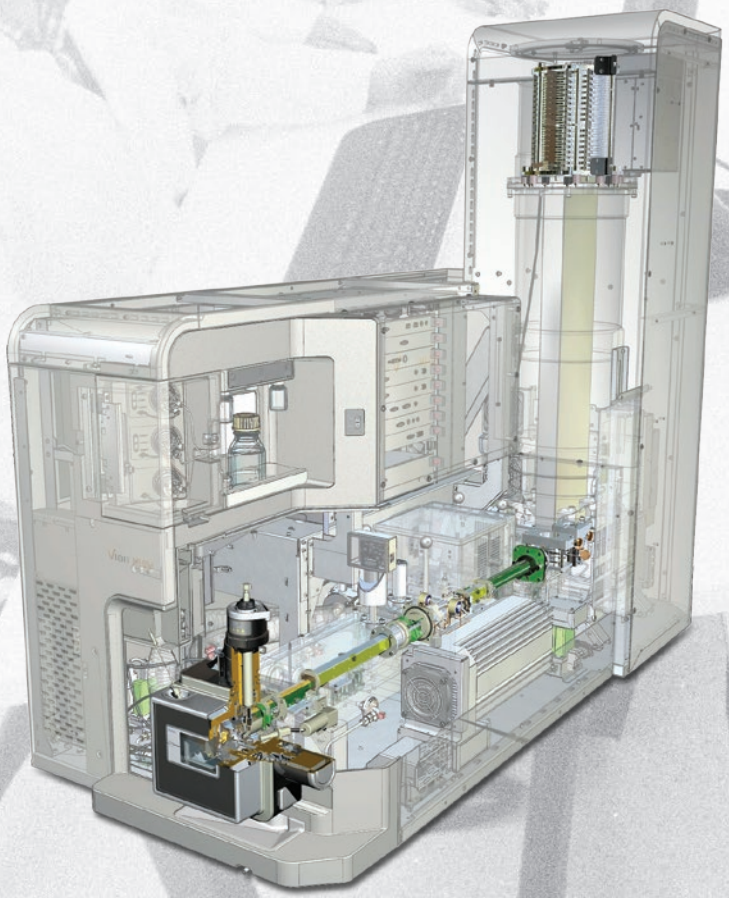
Vion

優位性は明確、汎用的に使用でき、シームレスに

多成分から構成されるサンプル分析では、複数成分のピークが重なり、バックグラウンドである干渉成分が含まれる複雑なデータしか得られないことがあります。この場合、化合物の同定は困難で、分析法開発にもコストと時間がかかります。 十分なピーク分離が得られないために精密質量精度が犠牲になり、成分同定できないこともあります。追加実験が必要となる場合には、汎用的な同定分析の所要時間が増加し、作業効率はさらに低下します。

Vion™ IMS QTof は、研究用途に特化していたイオンモビリティー質量分析法を汎用化します。イオンモビリティー分離により各ピークのスペクトル純度が向上し、シンプルに対象データが解析しやすくなります。 分析対象を確実に検出、同定、定量することによって、分析法開発の期間が短縮され、サンプルスループットも向上します。

イオンモビリティーに対するイノベーションとコミットメントを通じ、ウォーターズのベンチトッププラットホームは大きな進化を遂げました。 Vion IMS QTof は、あらゆる科学者に、そしてあらゆる分析に対してイオンモビリティー選択性を提供する、高分解能ベンチトップ型 QTof 質量分析計です。



Vion IMS QTof のイオンモビリティー機能には T-Wave™ テクノロジーが適用され、他のどのタイプのイオンモビリティーよりも高いイオン透過率を実現しています。
QuanTof2™ テクノロジーが生み出すダイナミックレンジによってイオンモビリティーモードにおいてワイドレンジでの定量が可能となり、その汎用性をより高めています。

サンプルから答えを導き出せる

スタートをクリックするだけ

無駄な作業をなくし、それによって生じた時間を、より重要な作業に費やすことができます。 スタートをクリックだけの簡単操作。Vion IMS QTof では、キャリブレーションを実行し、データ取得の準備を完了します。

シンプルなデータ取得

Vion IMS QTof は、高分解能、高感度、1 ppm 未満の高い精密質量精度、一切妥協のない優れた定量性能を有しています。 データ取得にはイオンモビリティーが標準装備され、分析法の設定はシンプルです。 必要な測定準備は Vion IMS QTof では自動化されていますので、作業時間を有効に活用できます。

迅速な意思決定

UNIFI® 科学情報システム はデータ処理を自動化すると同時に、結果を視覚化し、レポートを作成します。出力されたデータをもとに、必要とされる答えを迅速かつシンプルに取得できます。

Vion
分解能を超越して

サンプルの変化や複雑性によって分析が困難になることは日常的な課題です。保持時間のズレ、同一のノミナル質量による干渉、スペクトル干渉などに対処するためには、高い質量分解能だけでは不十分な場合があります。イオンモビリティー分析が汎用化されることで、こうした課題を確実に克服することが可能となります。

化合物を検出における網羅性の向上

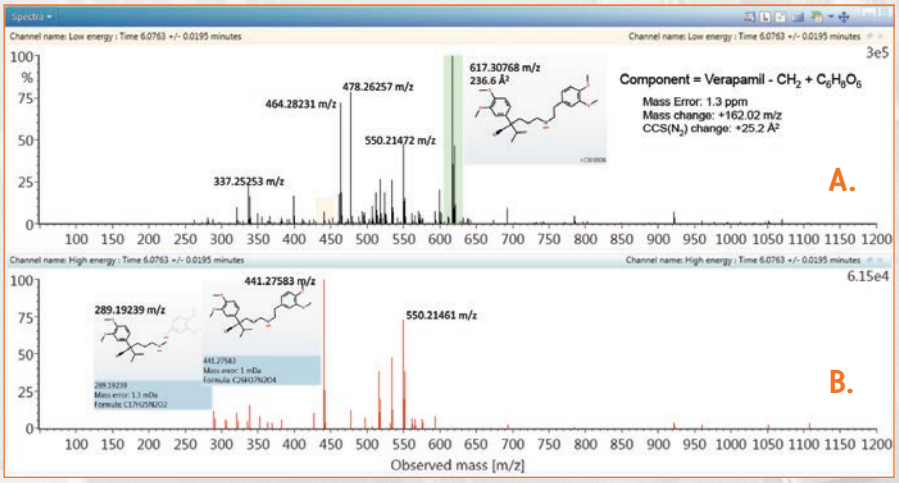
イオンモビリティーによって、スペクトル純度が向上し、サンプルに含まれるあらゆる化合物の同定がシンプルになります。 今まで、含有されていることが確認できていなかった成分の検出も容易になります。高い信頼性でのサンプルの網羅検出が可能となり、高品質な特性解析によって、正確な意思決定を行えます。

高い信頼性のトリプル同定

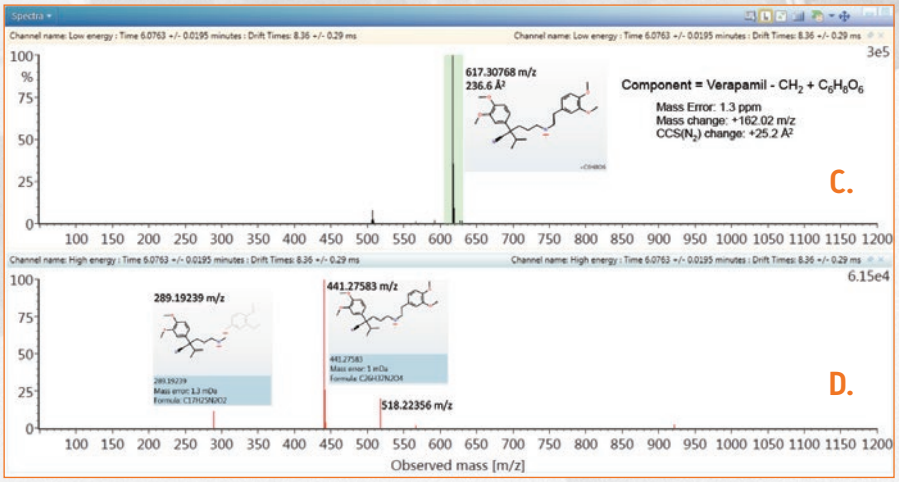
あらゆるイオンの CCS 値が各測定で得られ、より確実な物質の同定が行えます。保持時間は、クロマトグラフィー条件の相違やマトリックスの変化に応じて変動することがありますが、物質固有の値である CCS と *m/z* に基づいた同定はより信頼性が高く、ピーク同定では 1 回目から正確な結果を得ることができます。

LC 分析（分）	マトリックス	測定値 (*m/z*)	質量誤差 (mDa)	質量誤差 (ppm)	測定保持時間（分）	測定 CCS (Å²)
3	溶媒	609.2808	0.2	0.32	1.17	248.38
10	血漿	609.2807	0.1	0.15	3.18	248.15
30	尿	609.2803	-0.3	-0.56	7.64	247.69
RMS ppm 誤差 = 0.38			%RSD 観測 CCS = 0.14			

レセルピンの CCS 測定値が、マトリックスまたは、保持時間に依存せず、物質固有の値であることをこのデータから確認できます。



保持時間によりアラインメントした LC-MS^E データ。ラットにベラパミルを投与した後、胆汁から検出されたプロトン化したデスメチルグルクロニド代謝物を検出。(A) プリカーサーイオンの MS スペクトルで、(B) コリジョンセルに高エネルギーを印加し、フラグメンテーションさせた MS スペクトル。



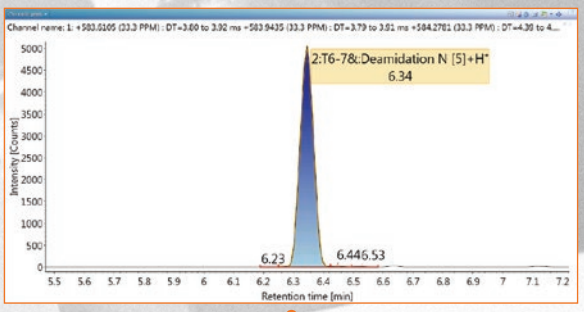
HDMS^E 測定によるデータ品質向上と明確化。ドリフトタイムによるアラインメントを加えることで、(C) と (D) の検出が可能になる。(C) は、ベラパミルの投与後ラットの胆汁から検出されたプロトン化デスメチルグルクロニド代謝物の単一成分でのプリカーサーイオンの MS スペクトル、(D) ドリフトタイムによるアライメントを加え、コリジョンセルに高エネルギーを印加したフラグメンテーションさせた MS スペクトル。質量分解能を高めても得ることのできない高品質な MS スペクトル。

HDMS^E：制限のないプロダクトイオン測定

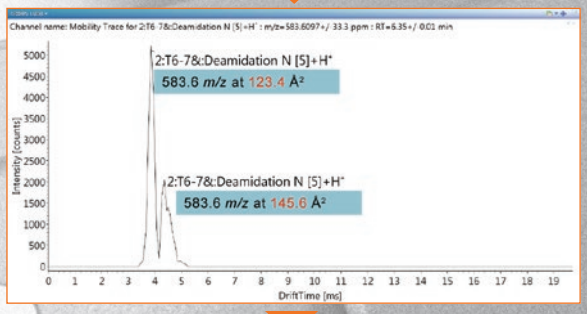
データの信頼性および品質をより高めるテクノロジー。HDMS^E は、イオンモビリティーによる分離選択性と、データ非依存型の測定法を組み合わせた高分解能 MS/MS 情報取得法です。

イオンモビリティー分離のメリットは、共溶出化合物だけでなく構造異性体もクロマトグラフィーで分離できることです。 イオンモビリティーによって、プロダクトイオンとそのプリカーサーに対してドリフトタイムと保持時間によるアラインメントが可能となるため、単一成分のプリカーサー / プロダクトイオンのスペクトルを抽出することができます。 このようなデータ非依存型分析法では、他の測定法では得ることのできない優位性があります。

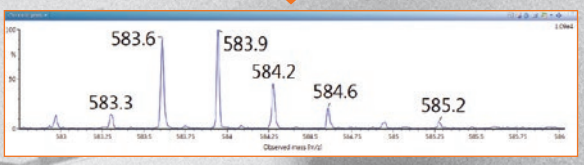
保持時間が同じであるにもかかわらずドリフトタイムの異なる 2 つの成分が含有されていた場合であっても、プロダクトイオンのスペクトルが完全に分離できるので、MS スペクトル抽出が自動化され、データ解析が実行しやすくなります。 取得データは網羅的で、プリカーサーとプロダクトイオンのスペクトルに対し、保持時間とドリフトタイムによるアラインメントがすべてのイオンについて適用されます。 さらに詳細な情報が必要な場合であっても、再測定の必要はなく再解析で十分対応可能です。

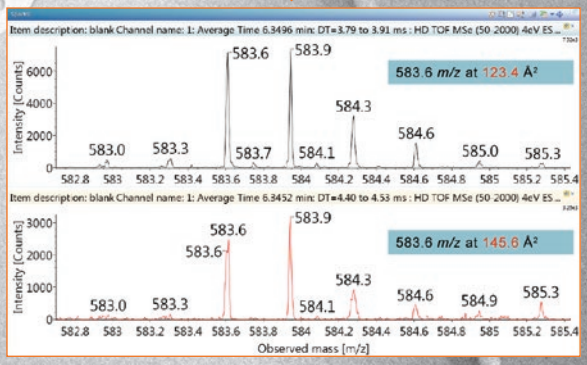


高分解能 IMS 対応 LC-HDMS スペクトルには、CCS の測定値だけが異なる 2 種のペプチド ID が現れている



高分解能 LC-MS スペクトルに現れているペプチド ID は 1 種



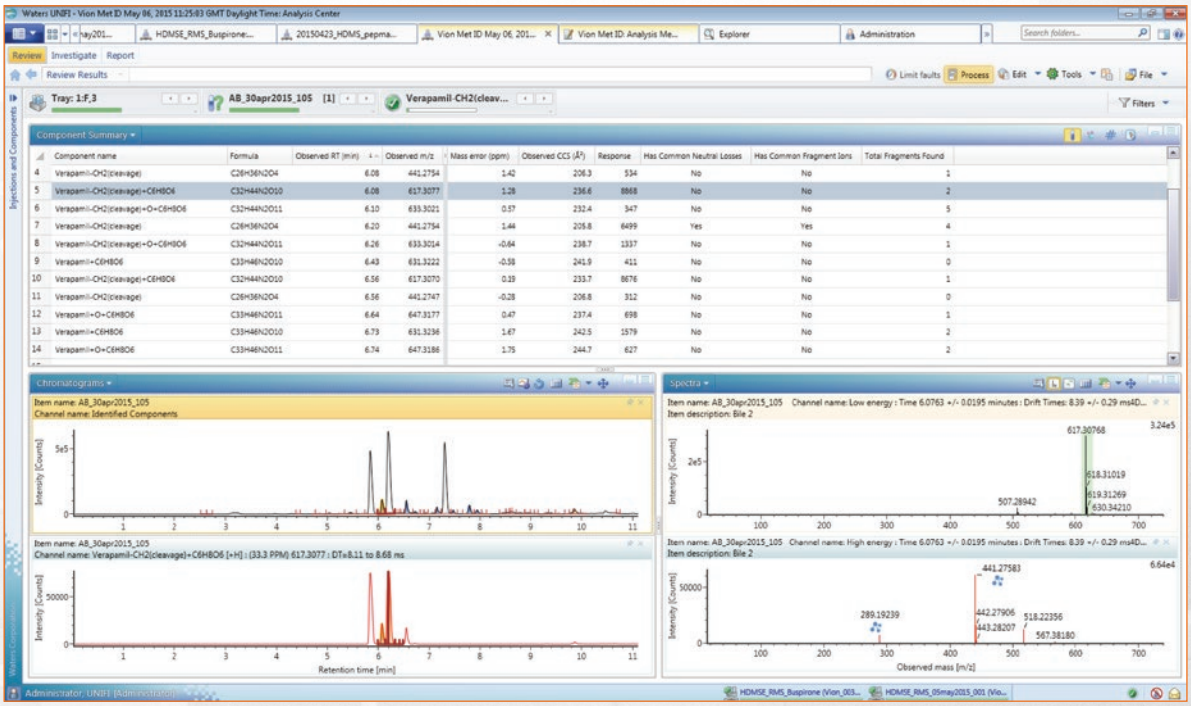


分解能が高ければ、必ず得られる情報量が多くなるとは限りません。
サンプル中の全成分を網羅できるのは、イオンモビリティーを使用した方が有利であることを、このデータが示しています。

Vion
UNIFI データから得る知見

UNIFI 科学情報システムは、きわめて包括的な分析ワークフローを Vion IMS QTof にもたらします。

幅広い用途で分析結果の信頼性を高める合理化された分析ワークフローによって、ターゲットの絞り込み、同定、定量、評価、レポート作成を行うことができます。 ワークフローに CCS 値を取り入れ、的確な意思決定を迅速に行うことで、擬陽性と偽陰性の双方を減らし、スループットを高めるとともに、ラボの生産性を飛躍的に向上させることが可能です。



ワークフローをシンプル化。最新バージョンの UNIFI には、薬物代謝物同定を効率化、高品質化するために必要な解析機能があります。UNIFI におけるデータ処理には IMS/CCS データフィルターが組み込まれているため、汎用的な HDMS^{E} 測定法の有効活用が容易となり、代謝物同定の効率化、高品質データ取得、解析を実現します。

安心のサポート体制。Waters グローバルサービス。

ウォーターズのグローバルサービスは、優れたサービス、サポート、トレーニング、アップグレード、および、Waters Quality Parts® によって、お客様がお持ちのウォーターズ製品を最適な状態に保ちます。

実証済みの顧客満足度

ウォーターズのグローバルサービスは、専門的な技術知識、システムの問題の迅速な解決、プロセスのサポートを提供する点で、独立系品質オーディット企業からクラス最高の評価を 14 年連続で獲得しました。[1]

1. Achievement in Customer Excellence Award, Comfirmit/CustomerSat, Inc., 2007-2014; NorthFace ScoreBoard Awards;℠ Omega Management Group Corporation, 2001-2003.

VION お客様のために

スクリーニング

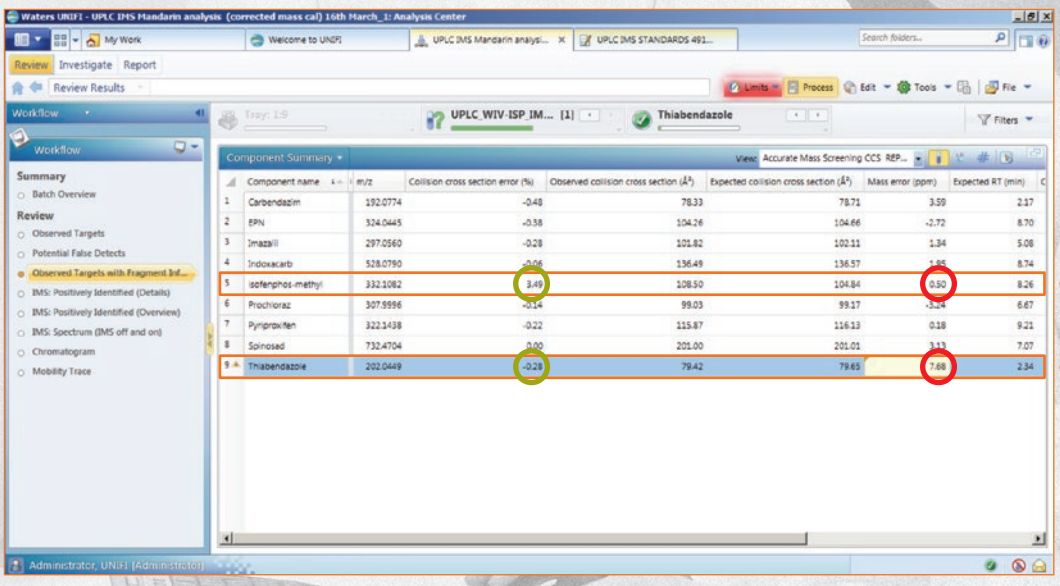
科学的専門分野に関係なく、スクリーニングと定量は多くの研究者が日常的に行う分析です。 法規制上の要件を満たすためには、データ信頼性が何よりも重要となります。UNIFI のインフォマティクスワークフローは CCS のメリットを活かして擬陽性と偽陰性を削減し、ラボの効率向上に貢献します。

医薬品

医薬品業界の使命は、人々の健康と生活の質の向上です。UNIFI と Vion IMS QTof の連携は、創薬研究にイオンモビリティーのメリットをもたらすとともに、日常的な代謝物同定プロセスを支援し効率化します。 CCS を活用し、より高品質なプロダクトイオンスペクトルに基づく成分の同定と構造解析を行うことでデータの信頼性を高めることができます。

オミクス

生体内作用をより深く知るというニーズの高まりによって、生命健康科学のオミクス研究に用いられる分析的アプローチは急速に進化しています。 これらのオミクス研究では、代謝物、脂質、ペプチドといった分析対象の同定および構造解析における課題に妥協はありません。Vion IMS QTof をワークフローに取り入れることで、各成分の CCS データが得られることに加え、成分分離における分解能を高めることができます。 結果、情報量が増加することで、従来分析法によるアプローチと比較して同定精度が向上します。



既知の農薬スクリーニングに CCS を活用。 分子同定のフィルターとして CCS 値を追加することによって、擬陽性と偽陰性の同定結果を最小限に抑え、分析の信頼性と効率を高めることが可能になります。 CCS 測定による新たな次元での同定が加わることによって、m/z または 保持時間 の許容幅を大きく設定することができ、偽陰性を最小限に抑制できます。

世界のウォーターズ

Austria 43 1 877 18 07

Australia 61 2 9933 1777

Belgium and Luxembourg 32 2 726 1000

Brazil 55 11 4134 3788

Canada 1 800 252 4752

China 86 21 6156 2666

Czech Republic 420 2 617 11384

Denmark 45 46 59 8080

Finland 358 9 5659 6288

France 33 1 30 48 72 00

Germany 49 6196 400 600

Hong Kong 852 2964 1800

Hungary 36 1 350 5086

India 91 080 49292200 03

Ireland 353 1 448 1500

Israel 9723 3731391

Italy 39 02 265 0983

Japan 81 3 3471 7191

Korea 82 2 6300 9200

Malaysia 603 7841 1688

Mexico 52 55 52 00 1860

The Netherlands 31 76 508 7200

Norway 47 6 384 6050

Poland 48 22 101 5900

Portugal 351 21 893 61 77

Puerto Rico 1 787 747 8445

Singapore 65 6593 7100

Spain 34 93 600 9300

Sweden 46 8 555 115 00

Switzerland 41 56 676 7000

Taiwan 886 02 2508 5500

UAE 971 4 214 62 38

UK 44 208 238 6100

US 1 800 252 4752

www.waters.com/Vion

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

日本ウォーターズ株式会社 www.waters.com

東京本社 〒140-0001 東京都品川区北品川1-3-12 第5小池ビル TEL 03-3471-7191 FAX 03-3471-7118

大阪支社 〒532-0011 大阪市淀川区西中島5-14-10 新大阪トヨタビル11F TEL 06-6304-8888 FAX 06-6300-1734

ショールーム 東京 大阪

サービス拠点 東京 大阪 札幌 福島 静岡 富山 名古屋 徳島 福岡

Waters、The Science of What's Possible、UNIFI および Waters Quality Parts は Waters Corporation の登録商標です。
Vion、T-Wave および QuanTof2 は Waters Corporation の商標です。その他すべての商標はそれぞれの所有者に帰属します。

©2015 Waters Corporation. 2015 年10 月 720005373JA 10A PDF

適用規格:JISQ9001:2008(ISO9001:2008)
登録番号:JMAQA-331 登録日:1999年05月31日