SCIEX 7500システムの測定例と DI対応を含めたSCIEX OSソフトウェアの機能紹介

SCIEX質量分析システムを支えるソフトウェア

2024年02月

SCIEX
The Power of Precision

SCIEX製品ラインナップ

SCIEX
The Power of Precision

ハイブリッド　トリプル四重極＋リニアーイオントラップ

QTRAP® 4500

Triple Quad™ 5500+
システムーQTRAP Activated

QTRAP® 6500+

Triple Quad™ 7500
システムーQTRAP® Activated

トリプル四重極

Triple Quad™3500

Triple Quad™ 4500

Triple Quad™ 5500+
システムーQTRAP Ready

Triple Quad™ 6500+

Triple Quad™ 7500
システムーQTRAP® Ready

定性分析

定量感度

キャピラリー電気泳動システム

BioPhase 8800

PA 800 Plus

CESI 8000 Plus

P/ACE™ MDQ Plus

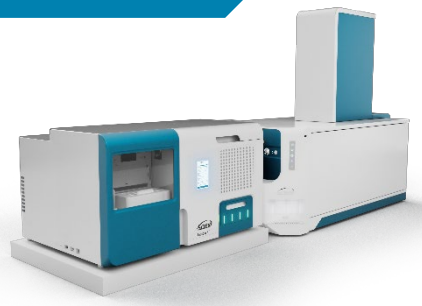
QTOFシステム

ZenoTOF 7600

X500 QTOF

Echo®MS

Intabio ZT



新しいレベルの定量

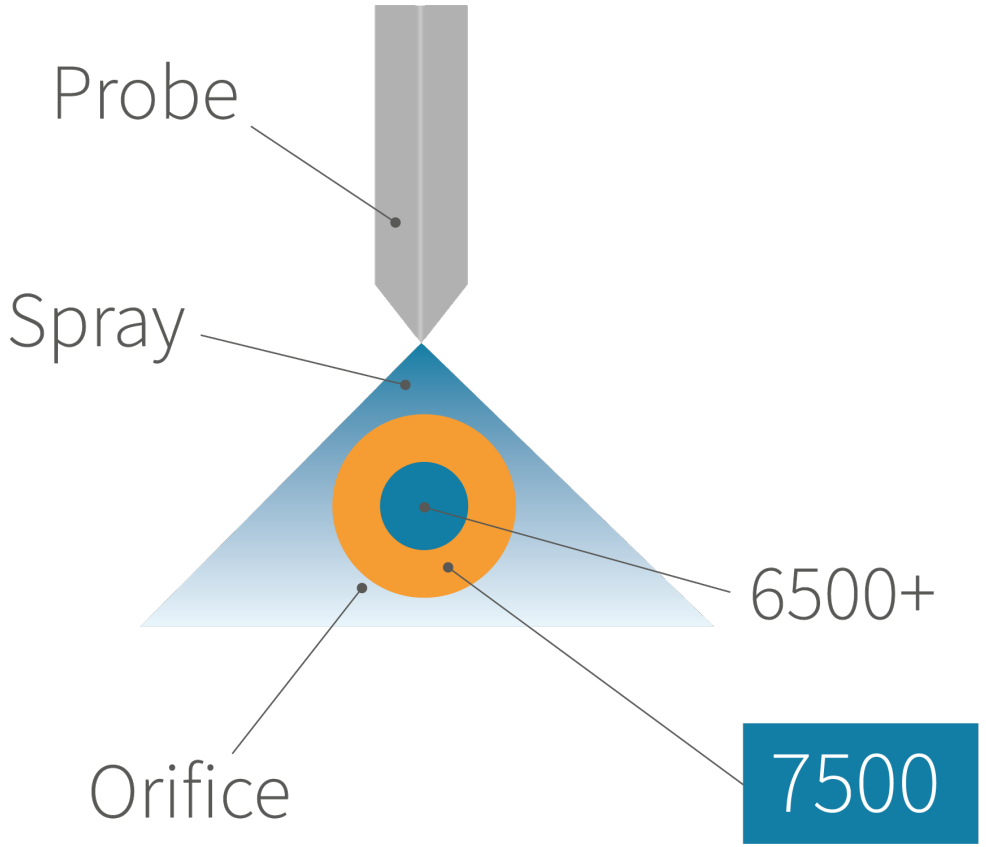
新しいソフトウェア、新しいイオン導入部、新しいイオンソース

- SCIEX 7500 System
  - 様々なサンプル、ワークフローに
    新しいレベルの定量をもたらします。
- SCIEX OS Software
  - 最新の質量分析制御/解析ソフトウェアは、
    最良の分析結果を簡単に導き出します

感度を上げるために

- 感度向上は、次の3点を改善することで達成されます
  1. **イオンの生成量**
  2. **イオンの捕捉と受け渡し**
  3. **イオンの検出効率**
  - ➢ **SCIEX Triple Quad 6500+ system の IonDrive™においても、これらのキーポイントが改善されました**

- SCIEX 7500 System では、イオンの捕捉と受け渡しにおいて更なる飛躍を遂げました
- 7500 のサンプリングエリアは、6500の4.3倍に広がりました



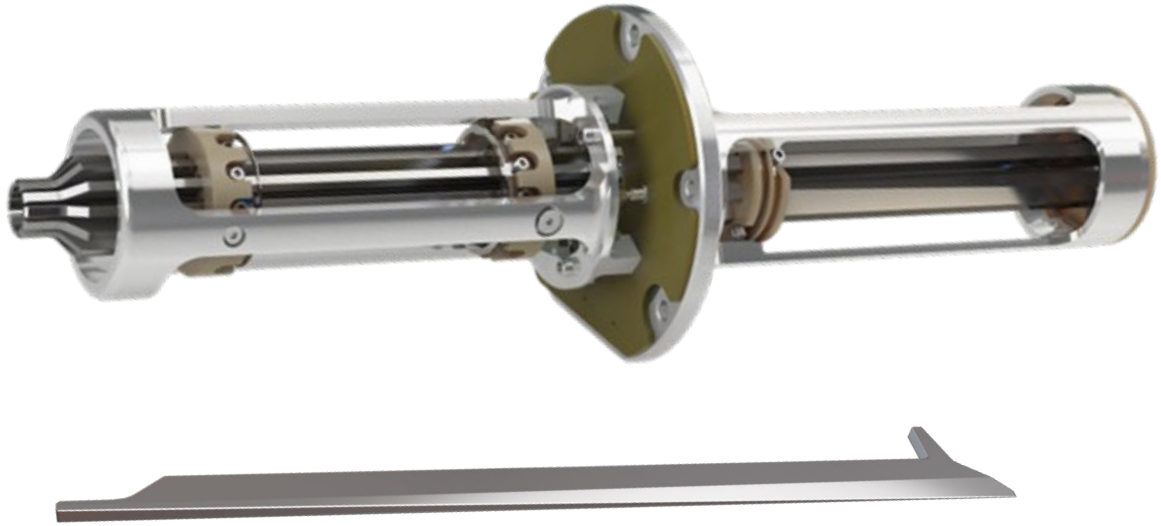
新技術
– D Jet イオンガイド

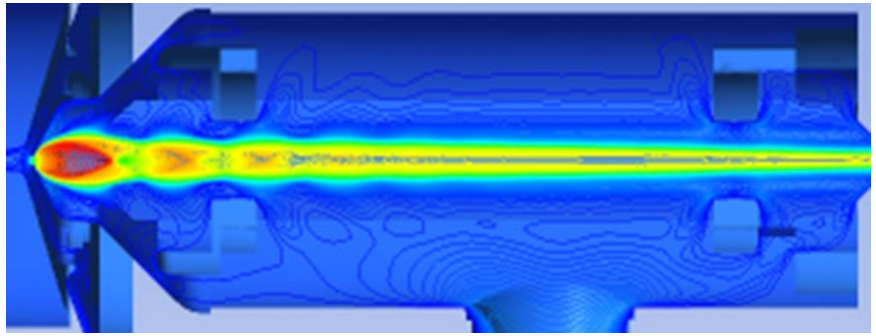
イオン導入部

D Jet イオンガイド

Dual Stage RF Ion Guide

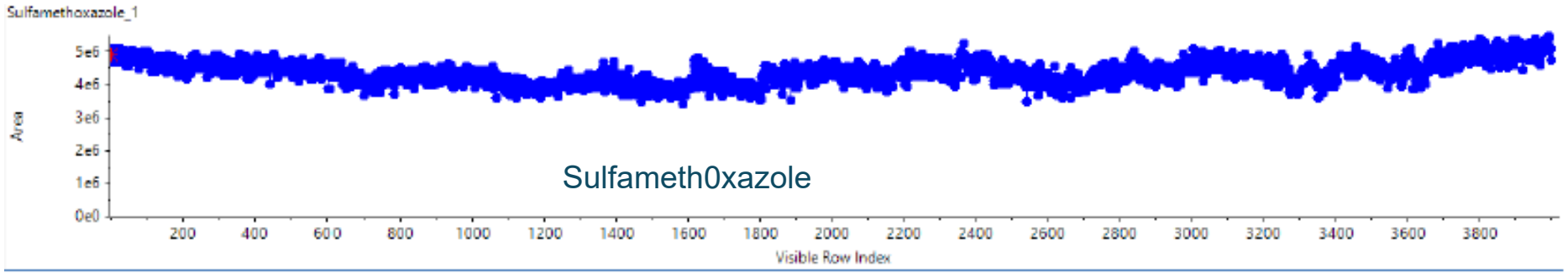
- D Jet Ion Guideは、オリフィス後の高ガスフロー域でのイオンの透過効率を向上させます
- 先が細くなった12極(Dodeca-pole) で構成されたD Jet Ion Guideを通じて、イオンは収束され、Q Jetへと導入されます
- Curtain Gasインターフェイスのガス量は、最大26 L/min に増強されました(18 L/min QTRAP 6500+ System)

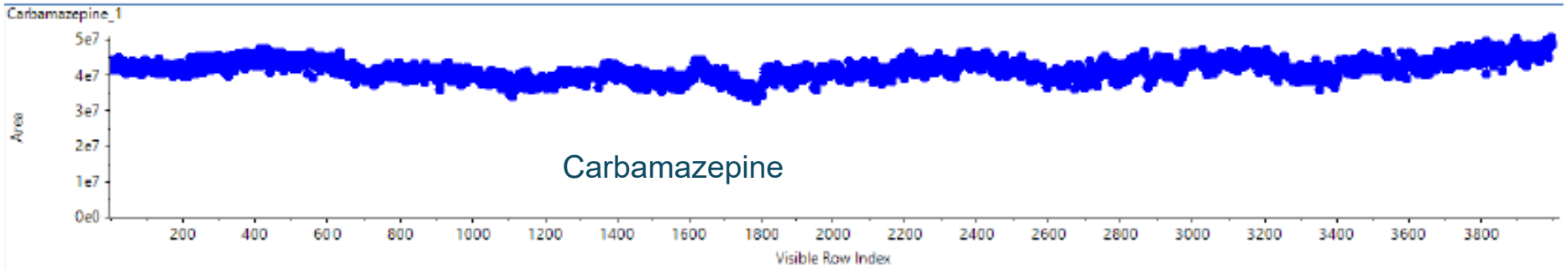




堅牢性について

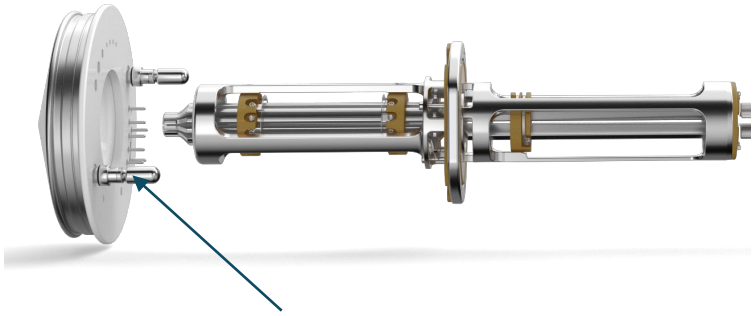
Injection volume : 3 uL



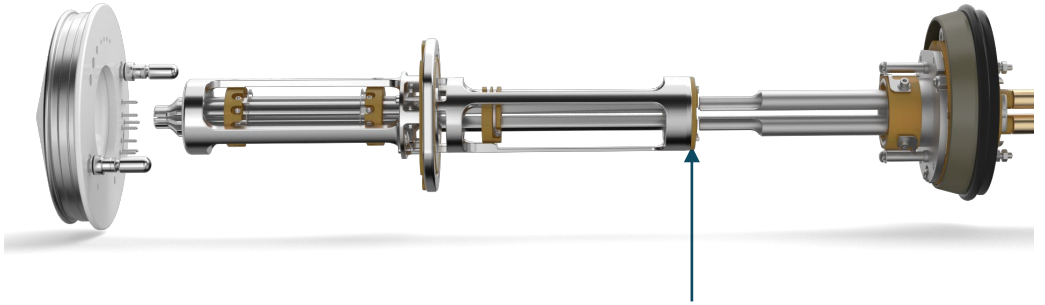


D Jet イオンガイド

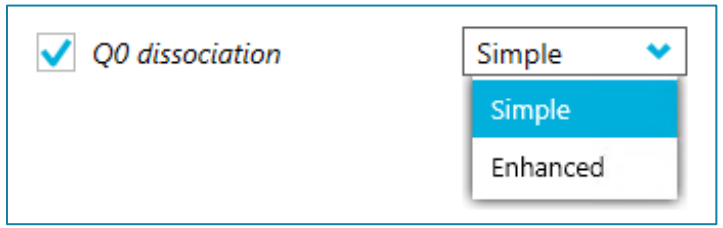
取り込み電圧 (DP)について



- 6500+以前の装置では、オリフィスの電圧(DP)により、デクラスタリングを制御
- 7500では、DPはフラットとなり、最適化が不要となったため、MSパラメーターから削除



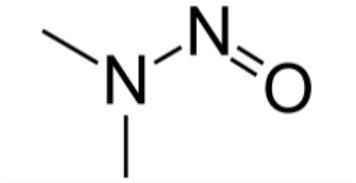
- 7500では、 QJet® Ion GuideとIQ0 lens、もしくはIQ0 とQ0 lensの電位差により、デクラスタリングを制御(どちらも設定可能)
- 電位差を増減することにより(**Q0D**)、予期しないフラグメンテーションの抑制や、**夾雑イオンの分解・除去により、S/Nの向上に役立ちます**
- 規定値を入れて最適化項目から外すことも可能



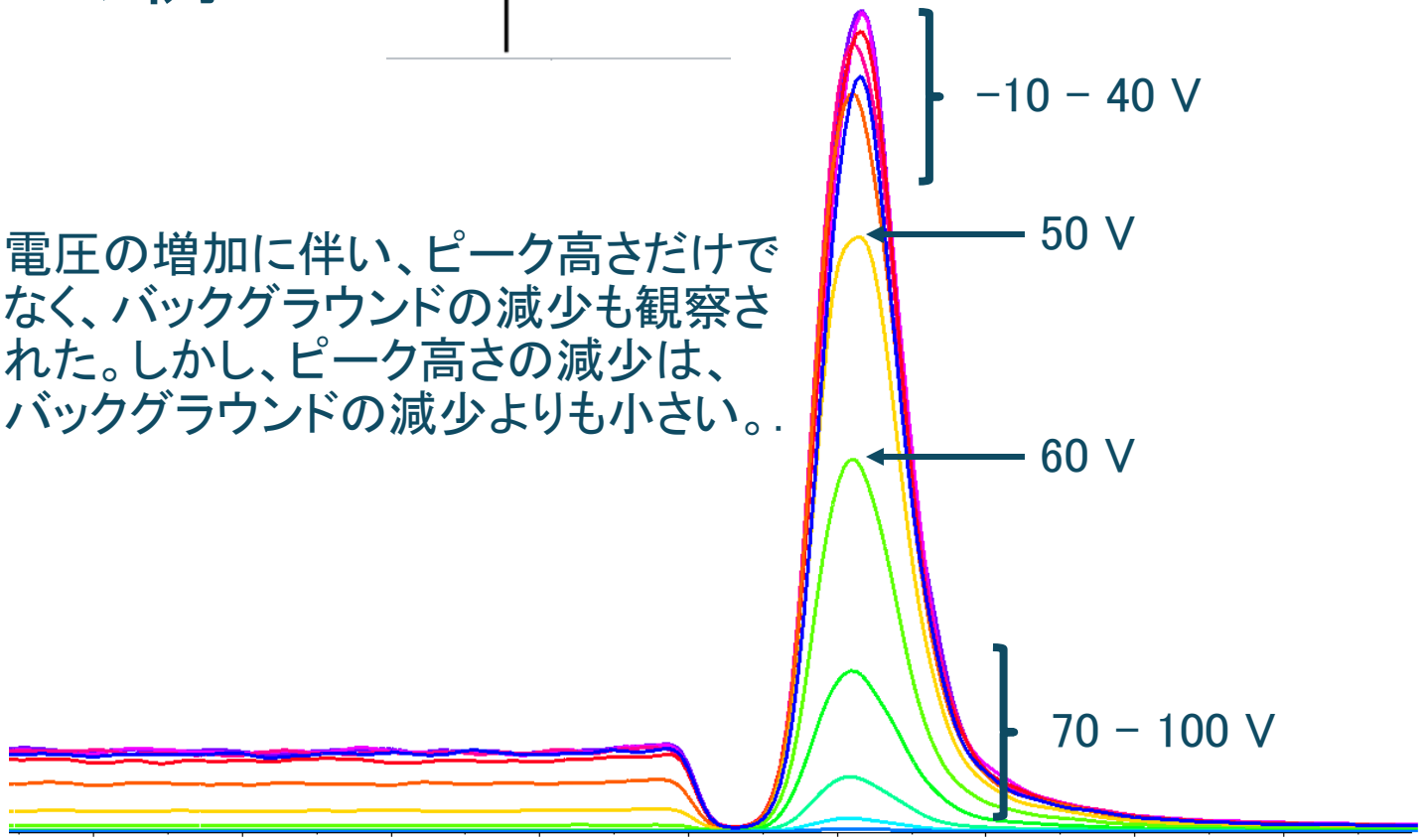
Q0D optimization

Q0Dの感度への影響

NDMAの例



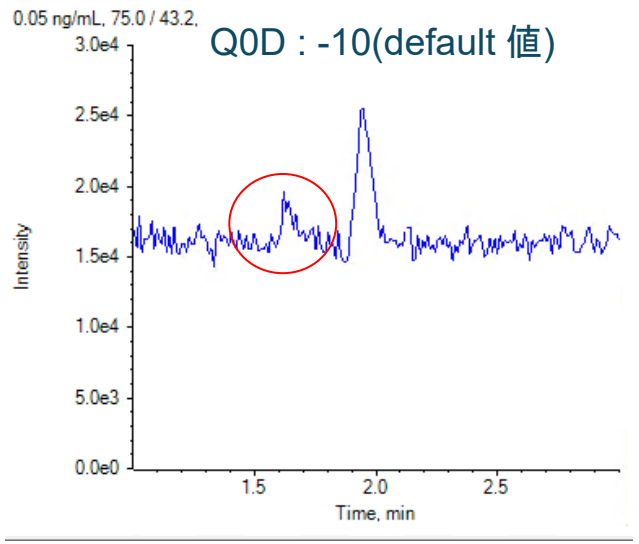
電圧の増加に伴い、ピーク高さだけでなく、バックグラウンドの減少も観察された。しかし、ピーク高さの減少は、バックグラウンドの減少よりも小さい。.



Q0D (simple) setting (V)	Signal to noise
−10	105
0	106
10	103
20	118
30	133
40	201
50	284
60	744
70	639
80	376
90	109
100	75

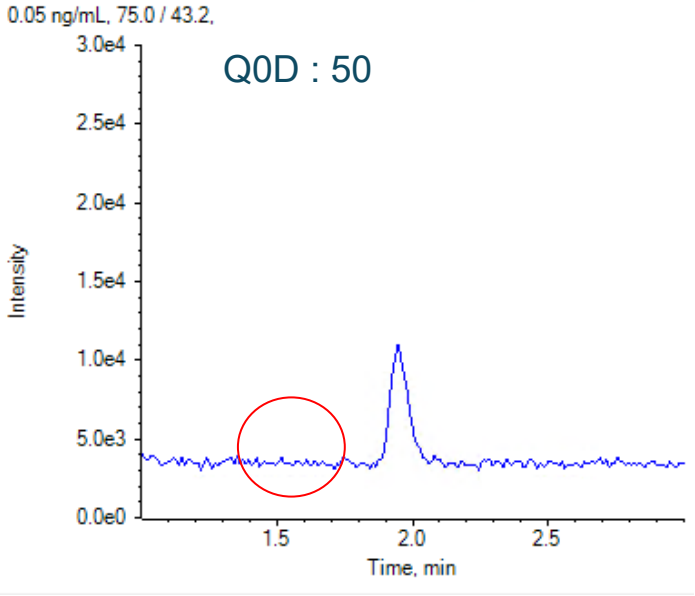
Q0Dを使った測定例　NDMA

Injection Volume 15 uL



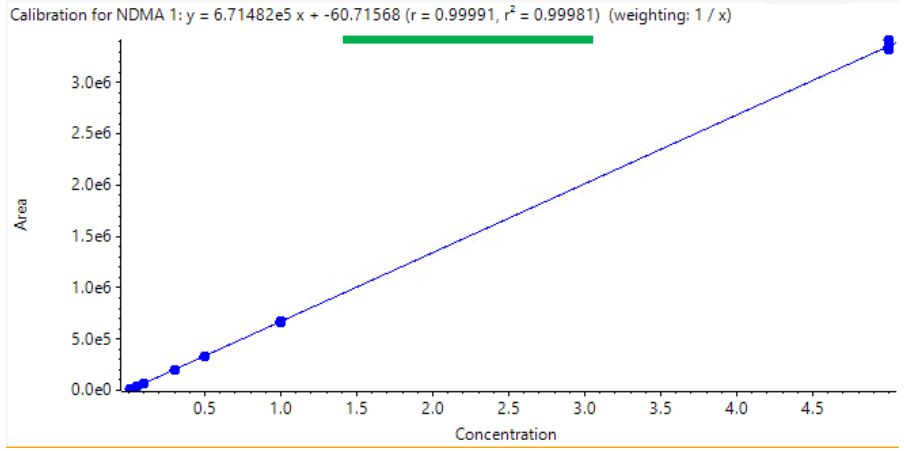
Q0Dを50に設定

妨害ピークが消失。
Baseline も大幅に減少



0.01ng/mLから再現性の高い直線性が引くことが可能に

Component Name	Actual Concentrati...	Num. Values	Mean	Standard De..	Percent CV	Average A...	Value #1	Value #2	Value #3
NDMA 1	0.01	3 of 3	0.010	0.000	4.76	104.28	0.011	0.010	0.010
NDMA 1	0.03	3 of 3	0.028	0.000	1.39	94.12	0.029	0.028	0.028
NDMA 1	0.05	3 of 3	0.051	0.002	3.31	102.54	0.053	0.051	0.050
NDMA 1	0.10	3 of 3	0.100	0.004	4.39	99.98	0.099	0.105	0.096
NDMA 1	0.30	3 of 3	0.302	0.003	1.10	100.65	0.298	0.304	0.304
NDMA 1	0.50	3 of 3	0.495	0.006	1.27	98.91	0.489	0.493	0.501
NDMA 1	1.00	3 of 3	0.993	0.009	0.93	99.31	0.999	0.983	0.998
NDMA 1	5.00	3 of 3	5.010	0.068	1.36	100.21	5.087	4.956	4.989



新技術
– OptiFlow Pro Ion Source

イオンソース

Turbo V イオンソースの進化

Turbo V Ion Source

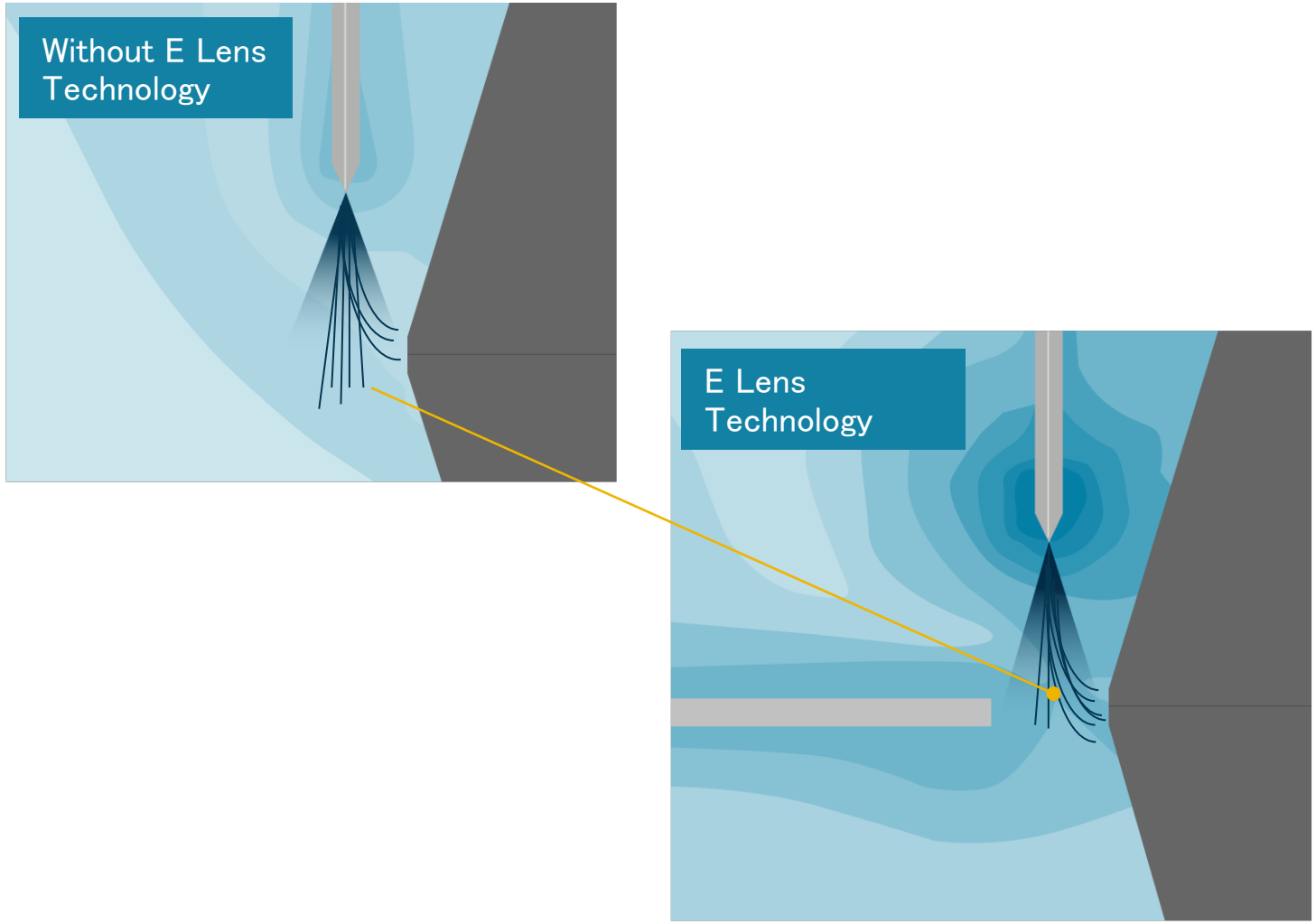
IonDrive™ Turbo V Ion Source

OptiFlow® Ion Source

OptiFlow® Pro Ion Source

信頼性と頑丈さのために

E Lens テクノロジー



- E Lens™テクノロジーは、イオンをオリフィスへと動かす役割をします
- E Lensは液滴が横断する空間に強い電場を発生させ、液滴を壊すことにより、イオンの液滴からの蒸発を推進します
- E Lens による感度向上は最大2倍となり、マイクロフローでより効果が期待できます

OptiFlow Pro イオンソース

- **プローブ位置はあらかじめ最適な位置に設定済**
- Ion spray voltage(ISV：エレクトロード電圧)とGas1（ネブライザーガス）の最適化が必要
  - エレクトロードの位置などの細かいアナログな設定は不必要になりました
- Gas2（脱溶媒ガス）の最適化は今までと同じ

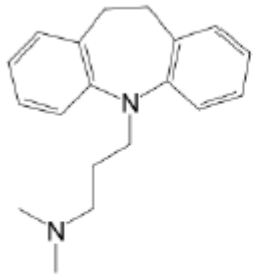
新しいレベルの定量

新しいソフトウェア、新しいイオン導入部、新しいイオンソース

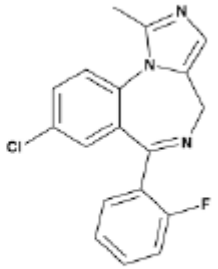
- SCIEX 7500 System
  - 様々なサンプル、ワークフローに
    新しいレベルの定量をもたらします。
- SCIEX OS Software
  - 最新の質量分析制御/解析ソフトウェアは、
    最良の分析結果を簡単に導き出します

測定例の紹介

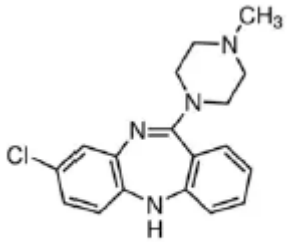
Imipramine, Midazolam and Clozapine



Imipramine



Midazolam



Clozapine

Name	Q1/Q3 (*m/z*)	Q0D	CE (V)
Imipramine	*281.2/86.0*	*30*	*22*
Midazolam	*326.1/291.2*	*90*	*36*
Clozapine	*327.2/270.2*	*70*	*32*

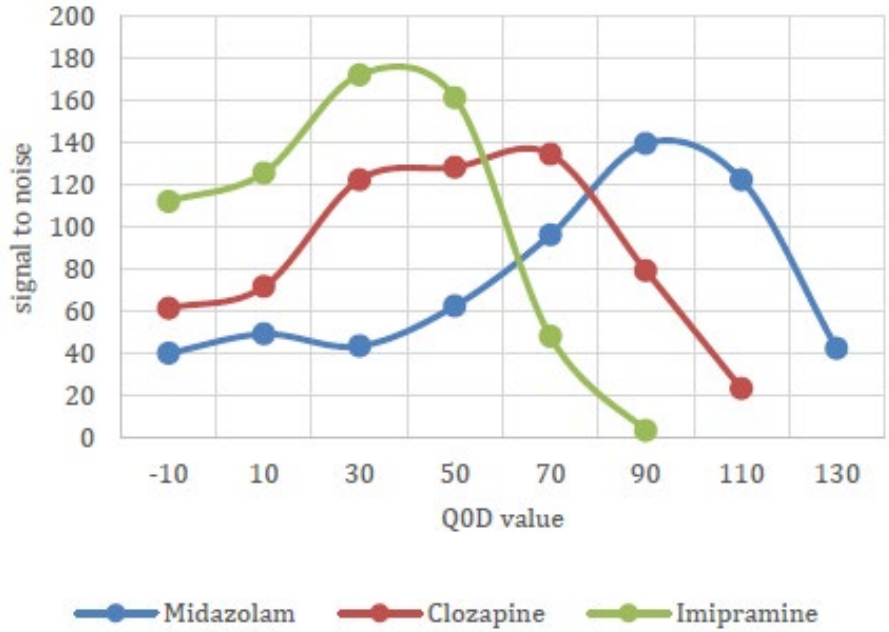
スパイク血漿　100uL（0.05～1000pg/mL）

アセトニトリル 300uL 添加

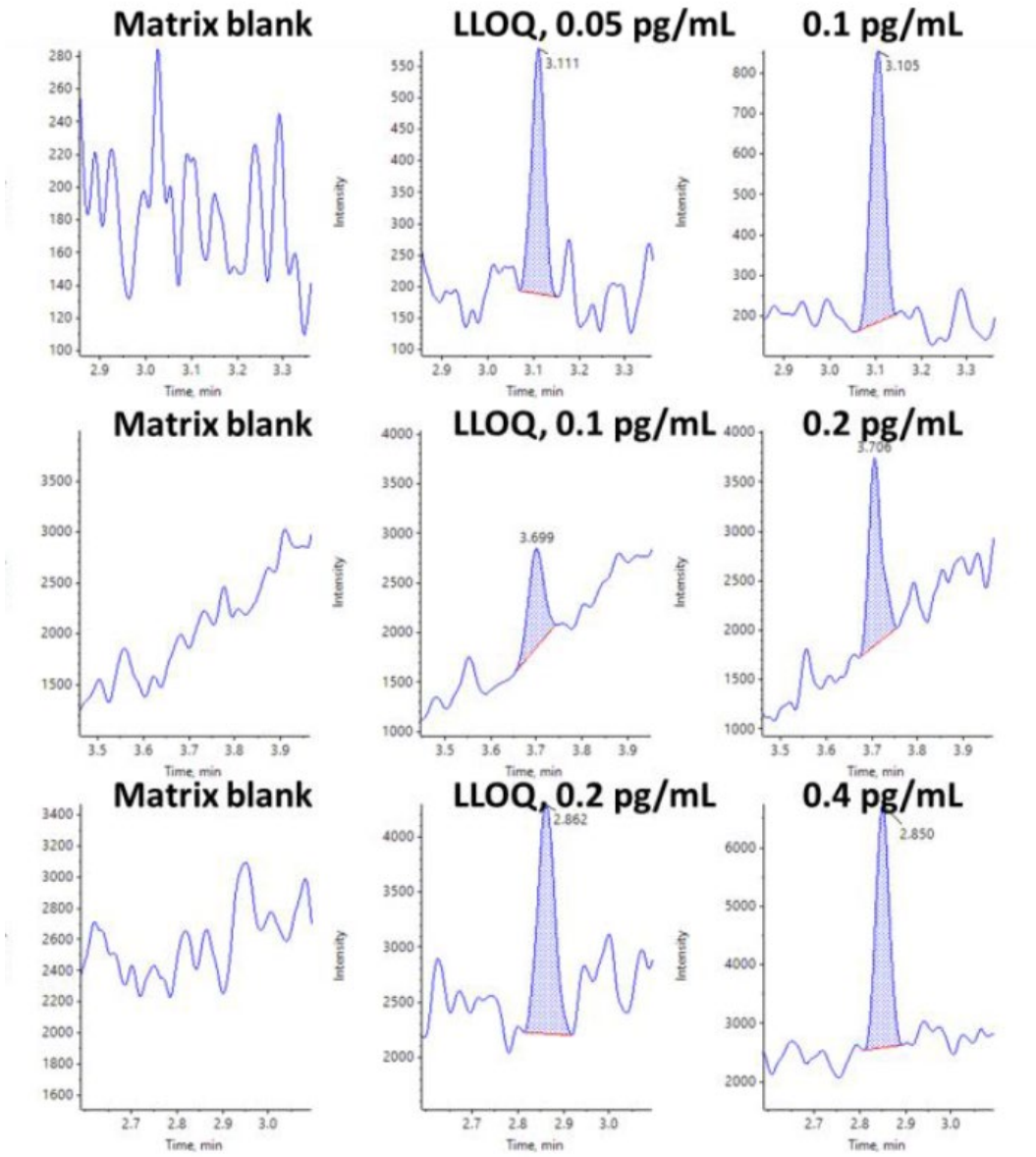
遠沈

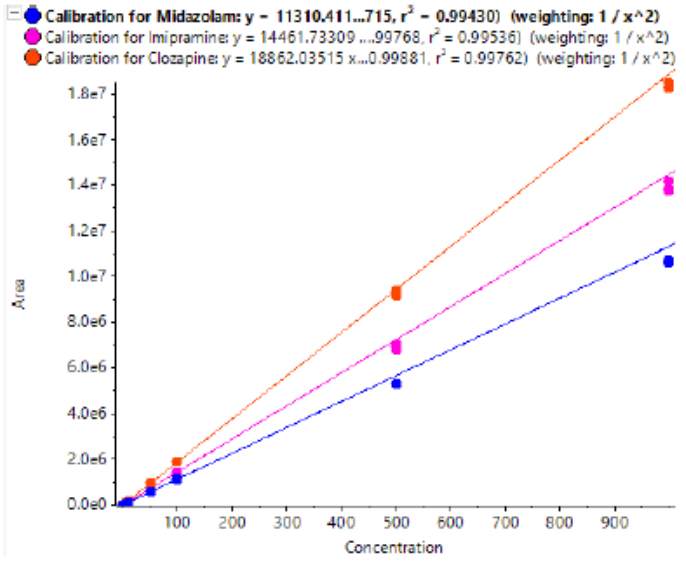
上清を回収し、等量の水を添加

10uL 注入



Imipramine, midazolam and clozapine



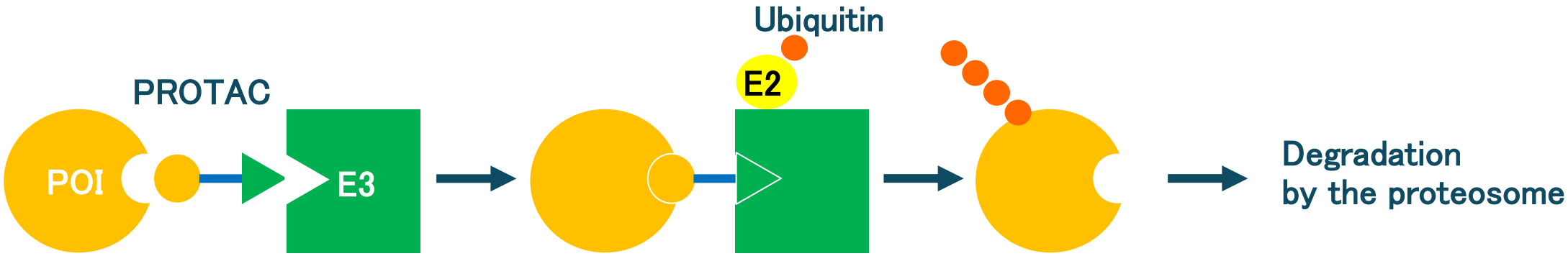


	Midazolam		Imipramine		Clozapine	
Actual concentration (pg/mL)	Average accuracy (%)	CV (%)	Average accuracy (%)	CV (%)	Average accuracy (%)	CV (%)
0.05	*96.6*	*12.6*	*N/A*	*N/A*	*N/A*	*N/A*
0.1	*106*	*6.08*	*98.8*	*5.68*	*N/A*	*N/A*
0.2	*98.2*	*12.6*	*101.8*	*13.4*	*102*	*10.0*
0.4	*104*	*6.53*	*99.3*	*12.5*	*95.8*	*4.64*
1	*101*	*6.53*	*104*	*2.24*	*99.3*	*3.06*
5	*105*	*1.10*	*104*	*1.10*	*104.9*	*1.25*
10	*102*	*1.91*	*100*	*0.94*	*99.5*	*1.19*
50	*99.0*	*0.48*	*102*	*0.91*	*103*	*0.42*
100	*99.1*	*0.79*	*98.1*	*1.17*	*101*	*0.52*
500	*93.9*	*0.52*	*95.5*	*1.94*	*97.9*	*1.34*
1000	*94.3*	*0.35*	*96.2*	*1.49*	*97.3*	*0.64*

標的型タンパク質分解：PROTAC

PROTEOLYSIS TARGETING CHIMERIC

TPDS



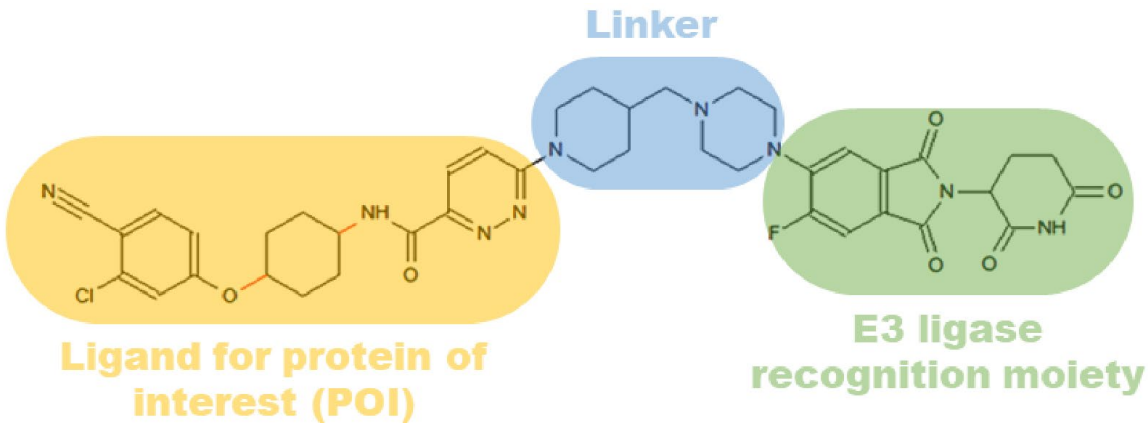
- ARV-110:転移性去勢抵抗性前立腺がん患者において、引き続き臨床的有用性を示す
- ARV-471:エストロゲン受容体を分解する経口投与可能なプロタック®の乳がん患者への投与

POI:標的たんぱく質
E3: E3 ligase

POI：標的タンパク質　E3：ユビキチンリガーゼ

PROTACの高感度な定量化

SCIEX 7500 System



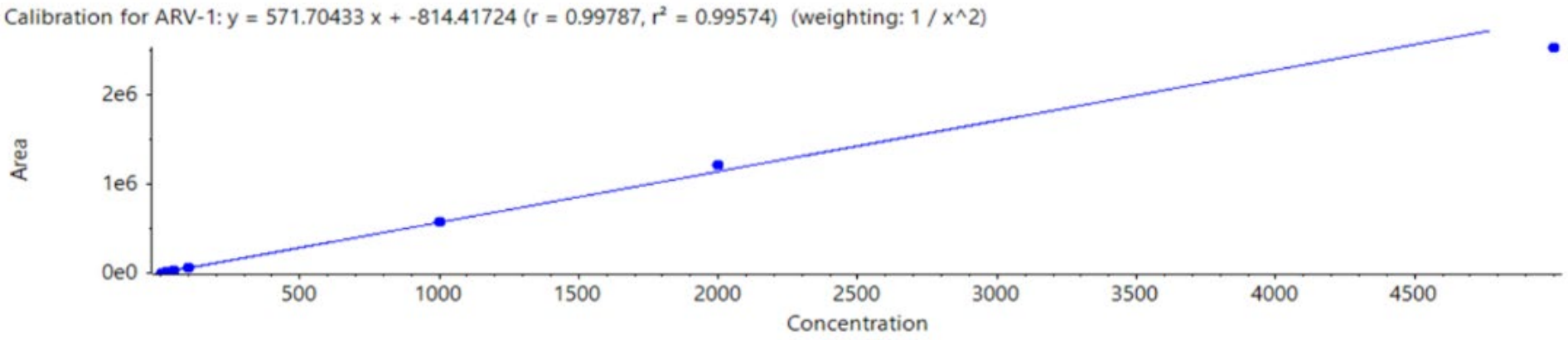
Structure of ARV-110 (bavdegalutamide)
POIに対するリガンドと、E3ユビキチンリガーゼに対するリガンドが、リンカーで接続されたもの

Parameter	Value
Scan mode	*MRM*
Polarity	*Positive*
Ion source gas 1	*40 psi*
Ion source gas 2	*60 psi*
Curtain gas	*42 psi*
Source temperature	*550°C*
Ion spray voltage	*4000 V*
Declustering potential	*40 V*
CAD gas	*8*

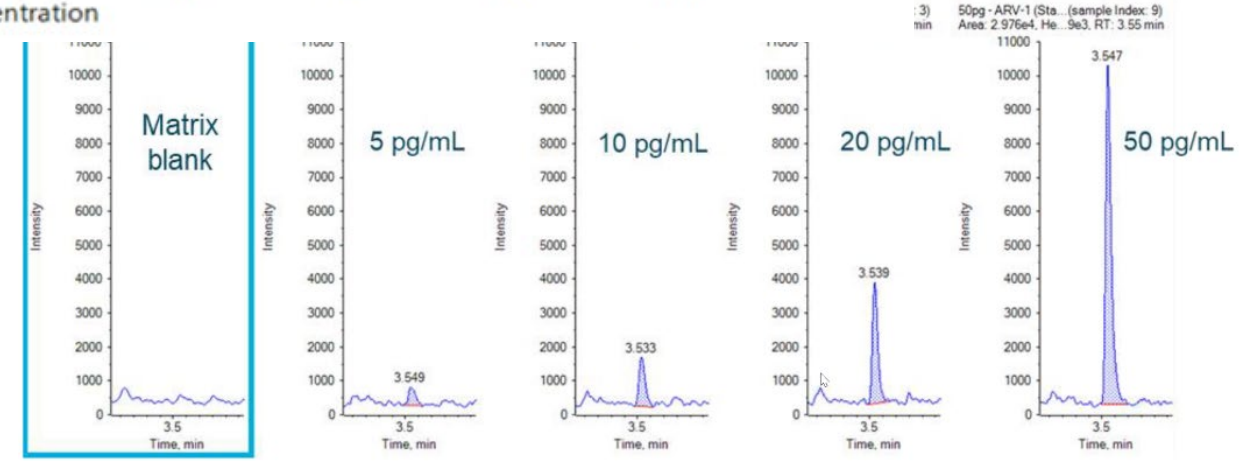
ID	Precursor ion (m/z)	Fragment ion (m/z)	CE (V)	CXP (V)
ARV-110_1	*812.4*	*452.2*	*53*	*15*
ARV-110_2	*812.4*	*562.2*	*55*	*15*

PROTACの高感度な定量化

ARV-110のLLOQは5 pg/mLを達成しました。ブランクではマトリックスとの干渉は認められませんでした。



Concentration (pg/mL)	Accuracy (%)
5	*100*
10	*99.1*
20	*98.9*
50	*107*
100	*99.0*
1000	*100*
2000	*107*
5000	*88.8*



SCIEX OS ソフトウエアの基本機能の紹介

SCIEX OS ソフトウェア

ラボのすべてのシステムに使いやすさ、高い効率、優れたインテグリティを実現

すべての SCIEX の LC-MS/MS システムのワークフローを単一のソフトウェアプラットフォームでパワーアップできます。
高度な自動化アルゴリズムが、より多くの情報に基づいた迅速なデータ解釈を可能にします。完全なデータインテグリティにより、正確性、精度および一貫性を強化します。

SCIEX OS ソフトウェア

新しい操作画面・より使いやすく

Acquisition

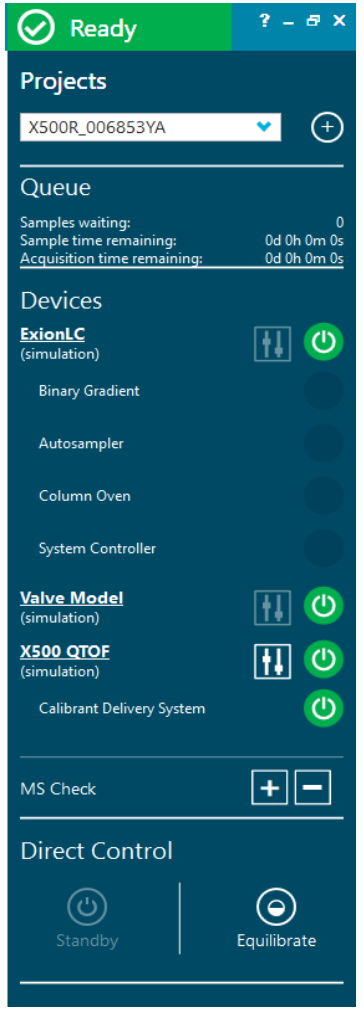
- Batch
- Queue
- MS Method
- LC Method
- MS Tune

Processing

- Explorer
- Analytics

Management

- Configuration
- Library
- Event Log
- Users



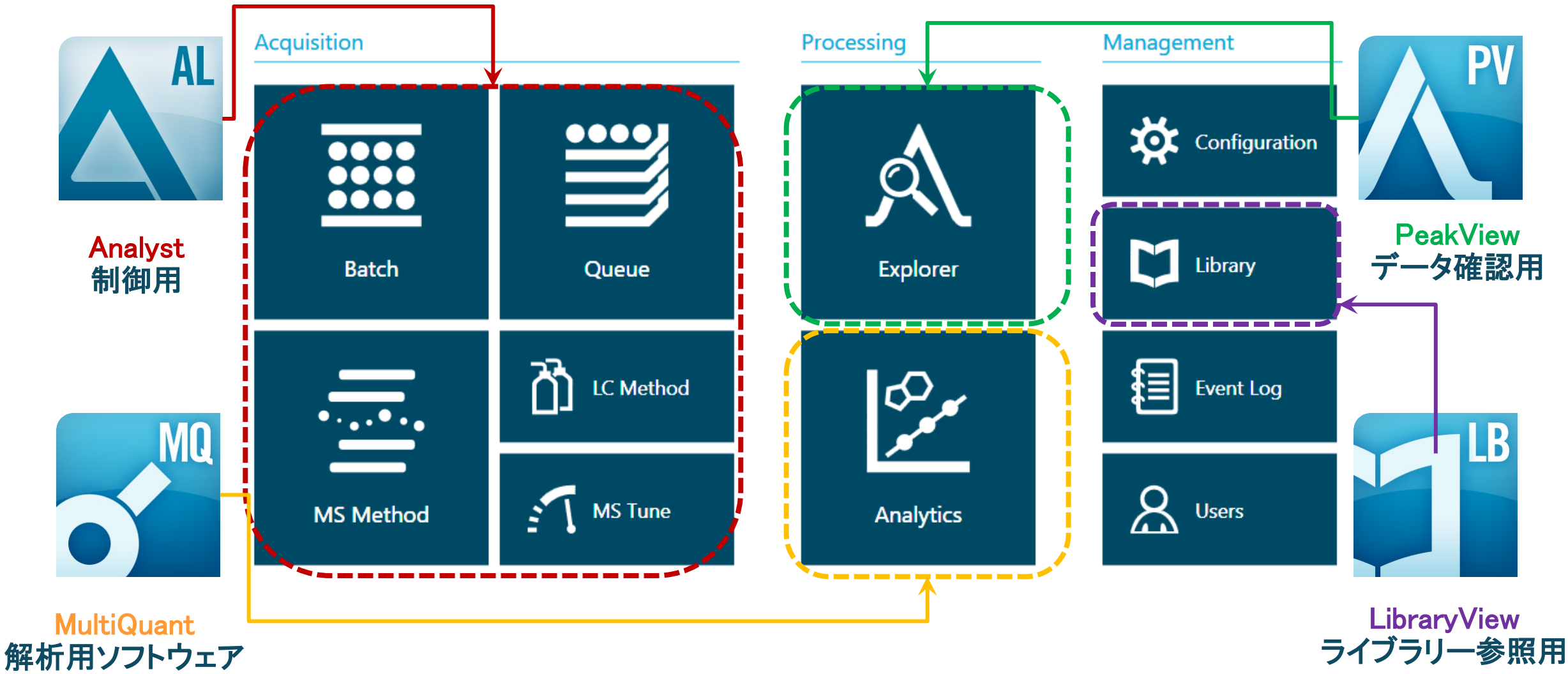
Acquisition
メソッド作成・データ測定

Processing
定量、定性解析

Management
コンフィグ、その他

Status Panel
装置の状態、簡易チェック
装置平衡化・停止

SCIEX OS ソフトウェア



SCIEX OS ソフトウェア（四重極）

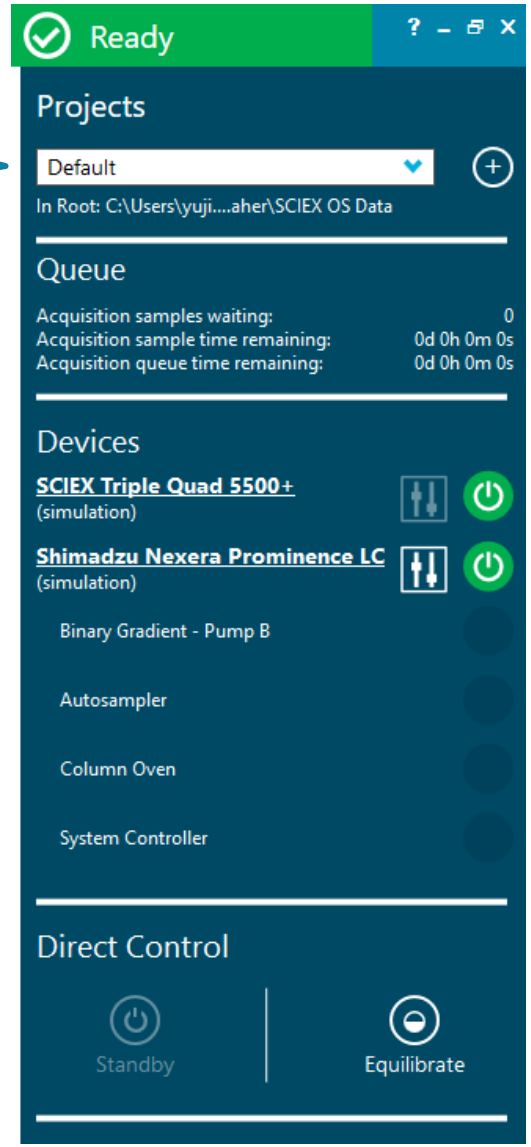
新しい操作画面・より使いやすく

プロジェクト

- プルダウンでプロジェクトの切り替え
- 新規プロジェクトの作成

各機器のステータス
装置状況確認
ポンプ圧を記録可能

- Analyst では Status Bar に該当
- 各デバイスを選択することでステータスの確認やパージが可能



測定待ち数
測定時間
トータル測定時間

- 測定状況の表示
（残りのサンプル数や終了までの時間など）

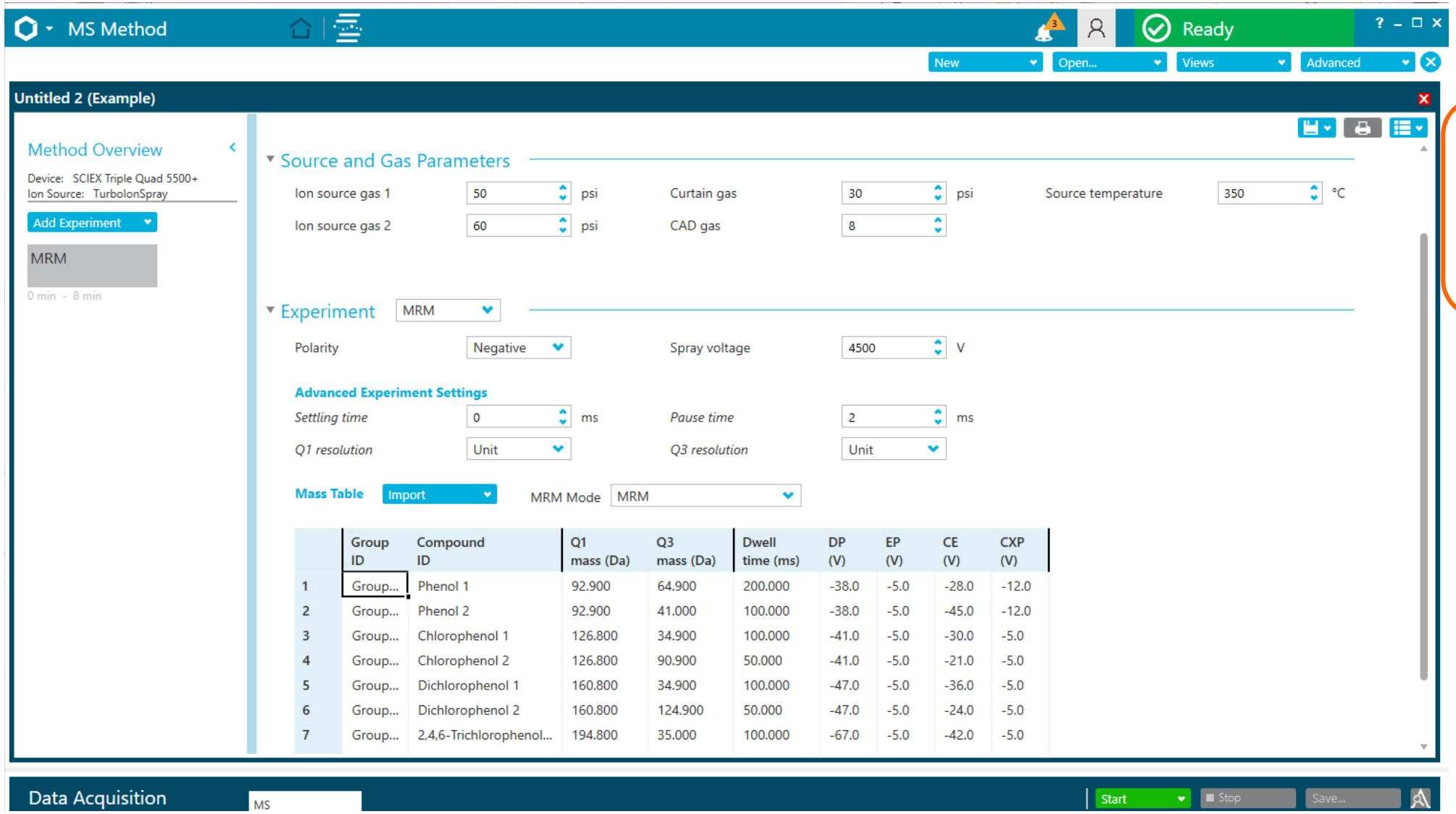
機器平衡化

- 平衡化とスタンバイの操作

MS Tune Calibration の簡便化

✓ 簡略化され、簡単に素早くキャリブレーションが出来るようになりました。

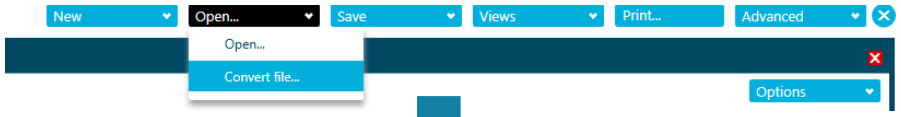
MSメソッド

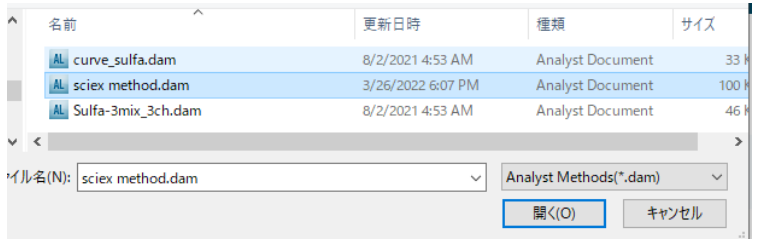


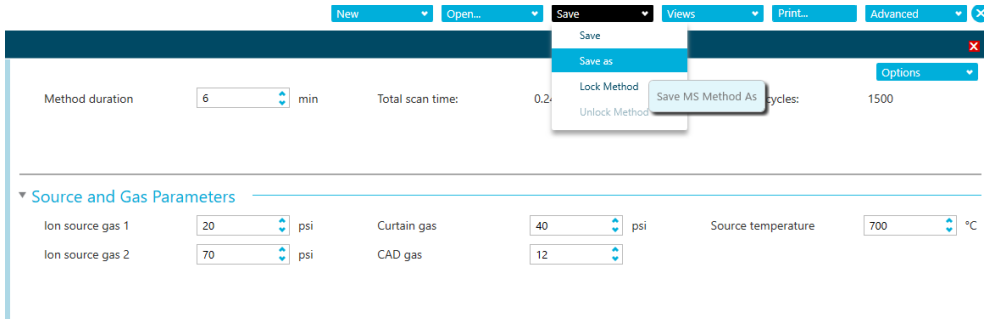
	Group ID	Compound ID	Q1 mass (Da)	Q3 mass (Da)	Dwell time (ms)	DP (V)	EP (V)	CE (V)	CXP (V)
1	Group...	Phenol 1	92.900	64.900	200.000	-38.0	-5.0	-28.0	-12.0
2	Group...	Phenol 2	92.900	41.000	100.000	-38.0	-5.0	-45.0	-12.0
3	Group...	Chlorophenol 1	126.800	34.900	100.000	-41.0	-5.0	-30.0	-5.0
4	Group...	Chlorophenol 2	126.800	90.900	50.000	-41.0	-5.0	-21.0	-5.0
5	Group...	Dichlorophenol 1	160.800	34.900	100.000	-47.0	-5.0	-36.0	-5.0
6	Group...	Dichlorophenol 2	160.800	124.900	50.000	-47.0	-5.0	-24.0	-5.0
7	Group...	2,4,6-Trichlorophenol...	194.800	35.000	100.000	-67.0	-5.0	-42.0	-5.0

- 見開きでイオンソースのパラメーター等が確認可能
- メソッドを並べて比較可能

MSメソッド　コンバート(Analyst methodのコンバート)

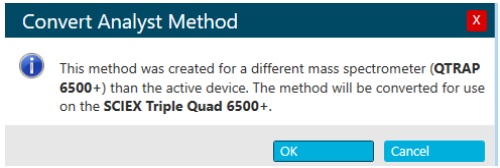


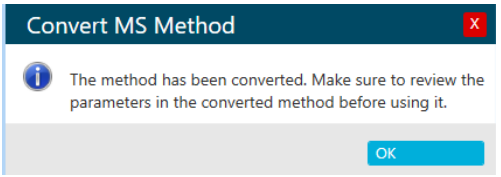




①Open の▼をクリックしてConvert file･･･を選択

②Convertしたいファイルを選択

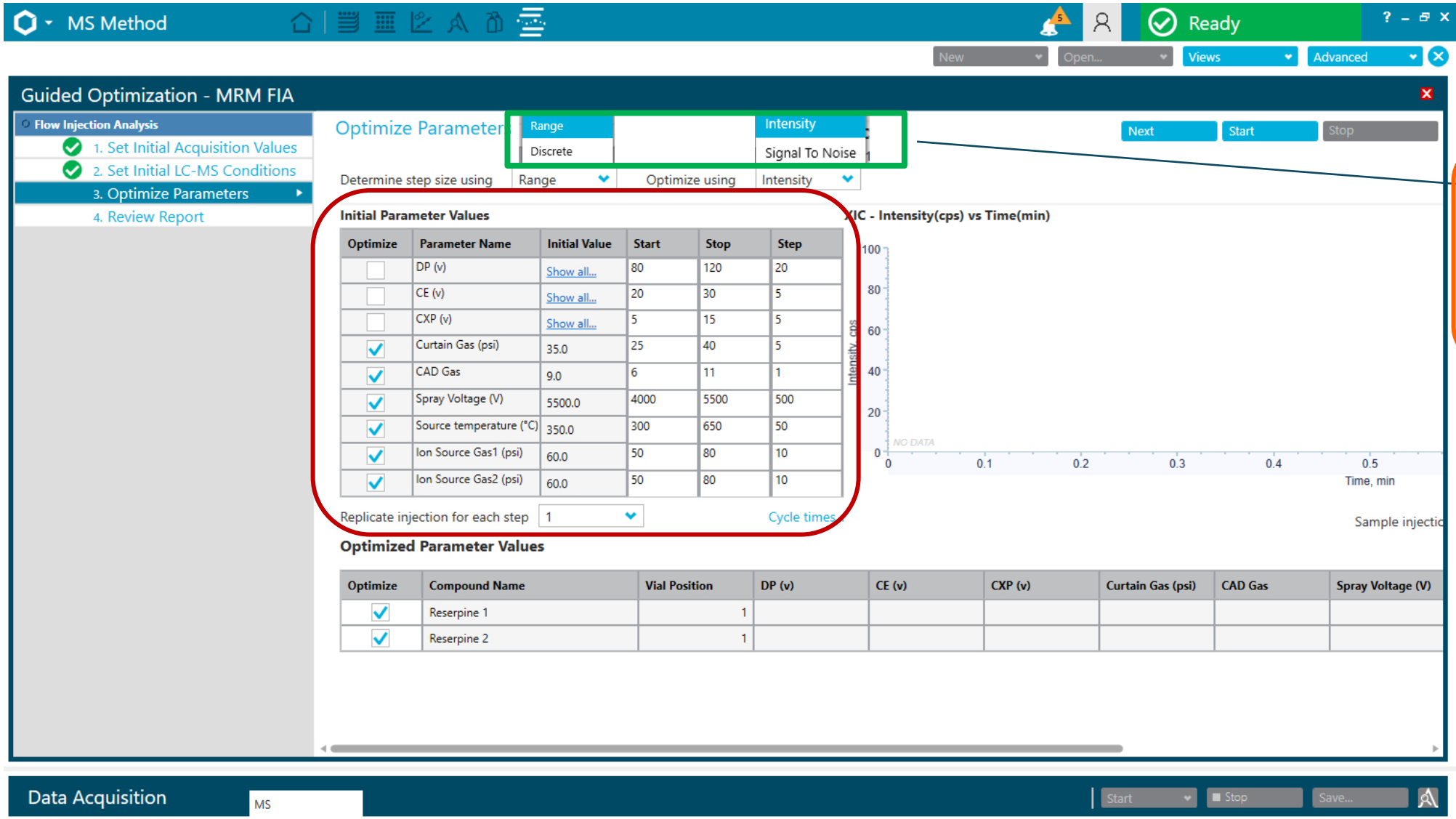




③OKを選択してコンバート完了

※ Acquisition Method からコンバートできるのは MS 条件のみになります

MS メソッド　条件の最適化



→ Modeの追加

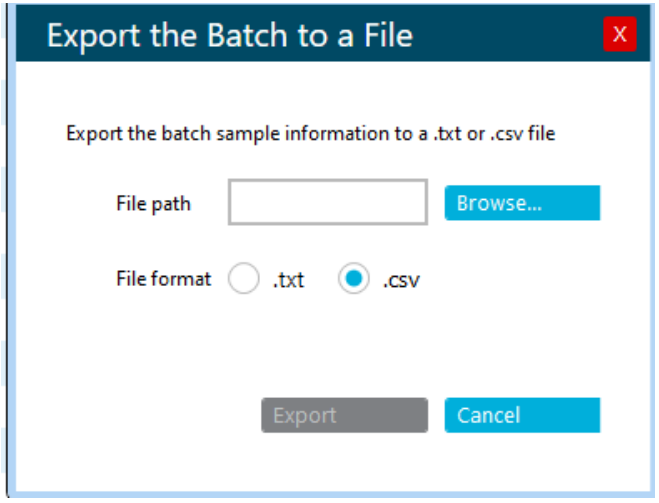
・最適化範囲のStep入力が可能

・SN比での最適化が可能

Batch 自動解析

時間の節約：手動でデータを処理するために待つ必要はありません。
TextもしくはCSV形式でExport及びImportが可能です。
Excelの表をバッチに貼り付けることも可能です。

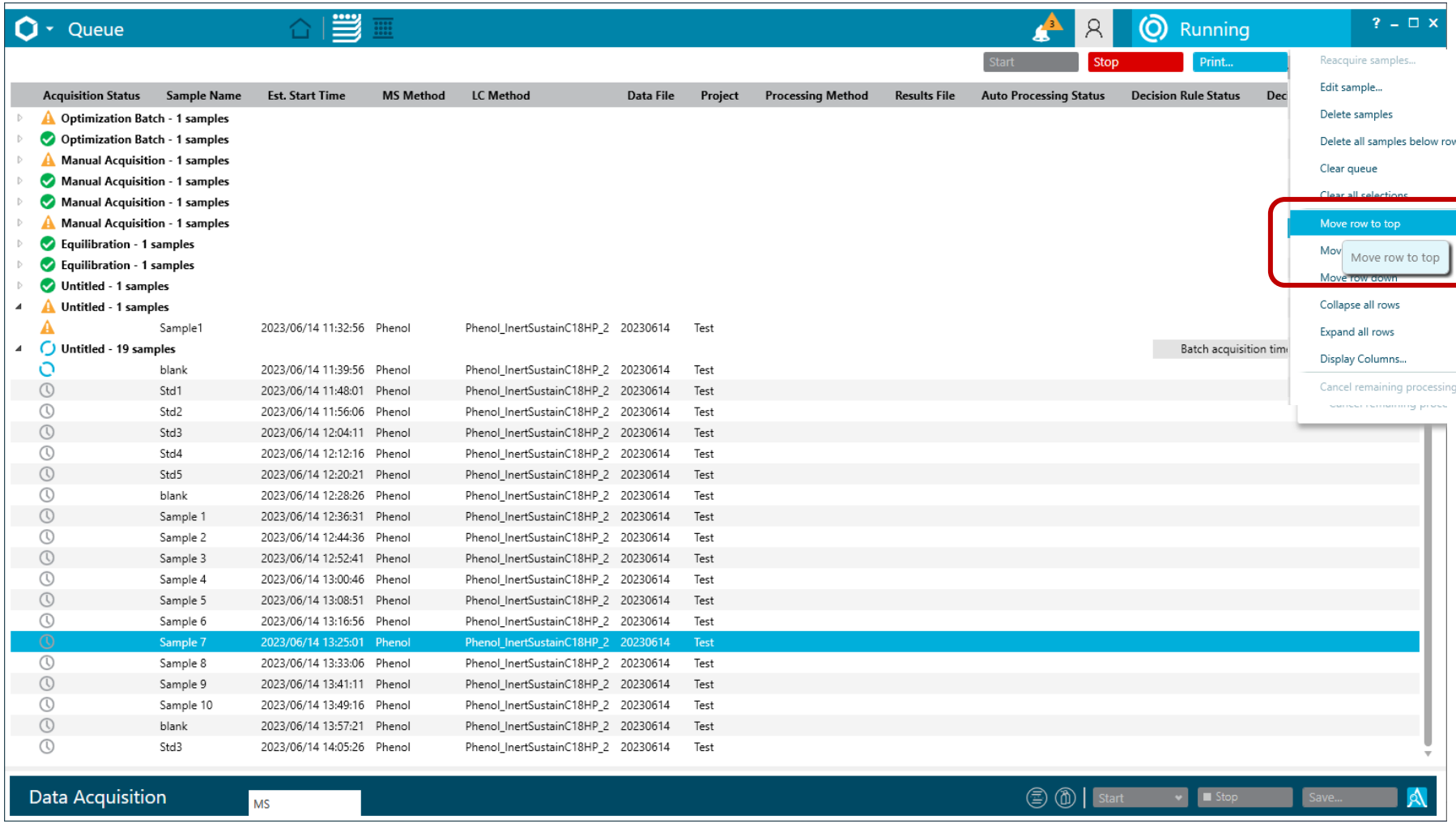
Sample Name	MS Method	LC Method	Rack Type	Plate Type	Vial Position	Injection Volum...	Sample Type	Data File	Processing Method	Results File
wash	DEMO MS Method	DEMO	Vial Rack	1.5mL (105 vial)	1	10.0	Solvent	demo240110	240110	Demo reuslut 240110
Blak	DEMO MS Method	DEMO	Vial Rack	1.5mL (105 vial)	2	10.0	Blank	demo240110	240110	Demo reuslut 240110
1	DEMO MS Method	DEMO	Vial Rack	1.5mL (105 vial)	3	10.0	Standard	demo240110	240110	Demo reuslut 240110
3	DEMO MS Method	DEMO	Vial Rack	1.5mL (105 vial)	4	10.0	Standard	demo240110	240110	Demo reuslut 240110
10	DEMO MS Method	DEMO	Vial Rack	1.5mL (105 vial)	5	10.0	Standard	demo240110	240110	Demo reuslut 240110
100	DEMO MS Method	DEMO	Vial Rack	1.5mL (105 vial)	6	10.0	Standard	demo240110	240110	Demo reuslut 240110



Batchで
解析メソッドを選択

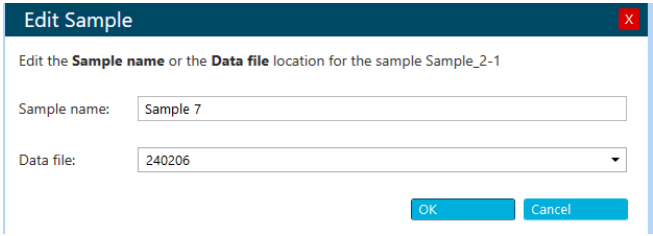
Batchで
結果ファイル名を入力

Queue 測定開始後の測定順番の入れ替え、サンプル名の変更



異なるBatchでもSampleの順番の入れ替えが可能

測定前であればSample名、Data file名の変更が可能



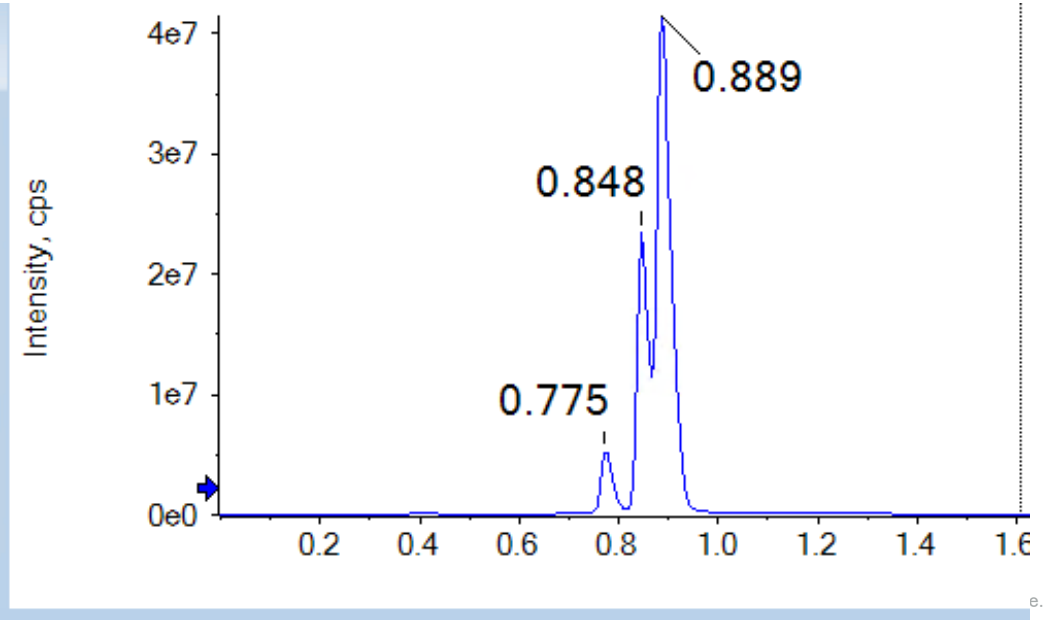
Queue　Exploreでのクロマト確認を容易に

Queue

Acquisition Status	Sample Name	Est. Start Time	Acquisition Time	Rack Code	Rack Position	Plate Code	Plat
✓	w	2024/01/10 10:28:58	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
✓	w	2024/01/10 11:00:51	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
✓	NC	2024/01/10 11:32:37	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
✓	BL	2024/01/10 12:04:23	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
↻	Sample_2-1	2024/01/10 12:36:08	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
🕒	Sample_2-2	2024/01/10 13:07:55	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
🕒	Sample_2-3	2024/01/10 13:39:43	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
🕒	Sample_1-1	2024/01/10 14:11:30	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
🕒	Sample_1-2	2024/01/10 14:43:17	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	
🕒	Sample_1-3	2024/01/10 15:15:04	00:31:00	Vial Rack		1.5mL (105 vial)	

ダブルクリック

Exploreでファイルを選択しなくても開きます。

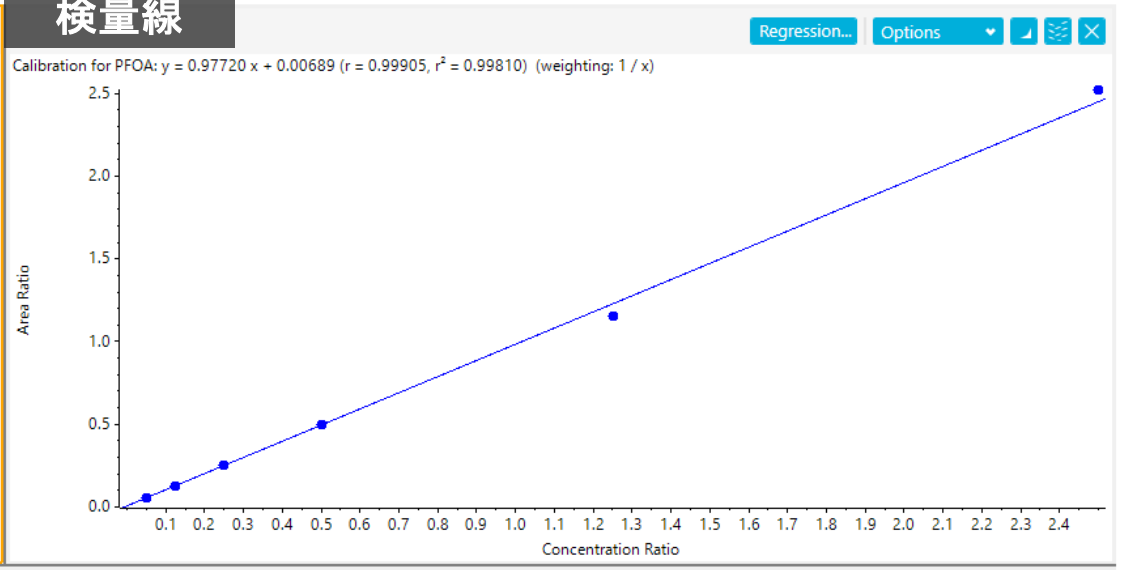


Analytics 定量結果の表示

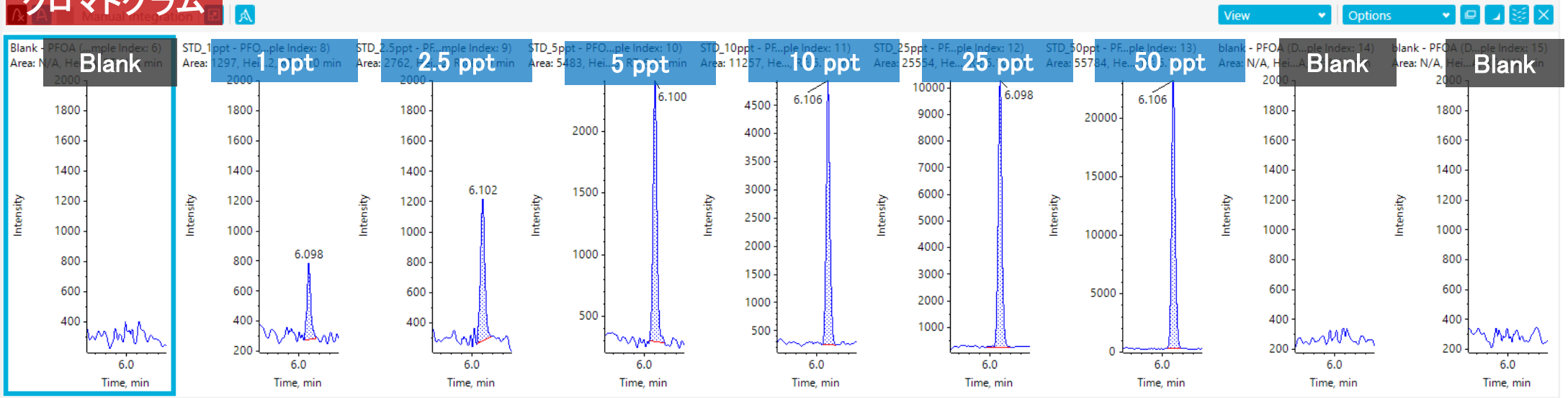
結果表

Sample Name	Sample Type	Actual Concentration	Area	IS Area	Retention Time	Calculated Concentration	Accuracy	Used
Blank	Double Blank	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	☑
STD_1ppt	Standard	1.00	1297	22443	6.10	1.0423	104.23	☑
STD_2.5ppt	Standard	2.50	2762	21958	6.10	2.4331	97.32	☑
STD_5ppt	Standard	5.00	5483	21507	6.10	5.0771	101.54	☑
STD_10ppt	Standard	10.00	11257	22708	6.11	10.0049	100.05	☑
STD_25ppt	Standard	25.00	25554	22136	6.10	23.4858	93.94	☑
STD_50ppt	Standard	50.00	55784	22127	6.11	51.4568	102.91	☑
blank	Double Blank	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	☑
blank	Double Blank	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	☑

検量線

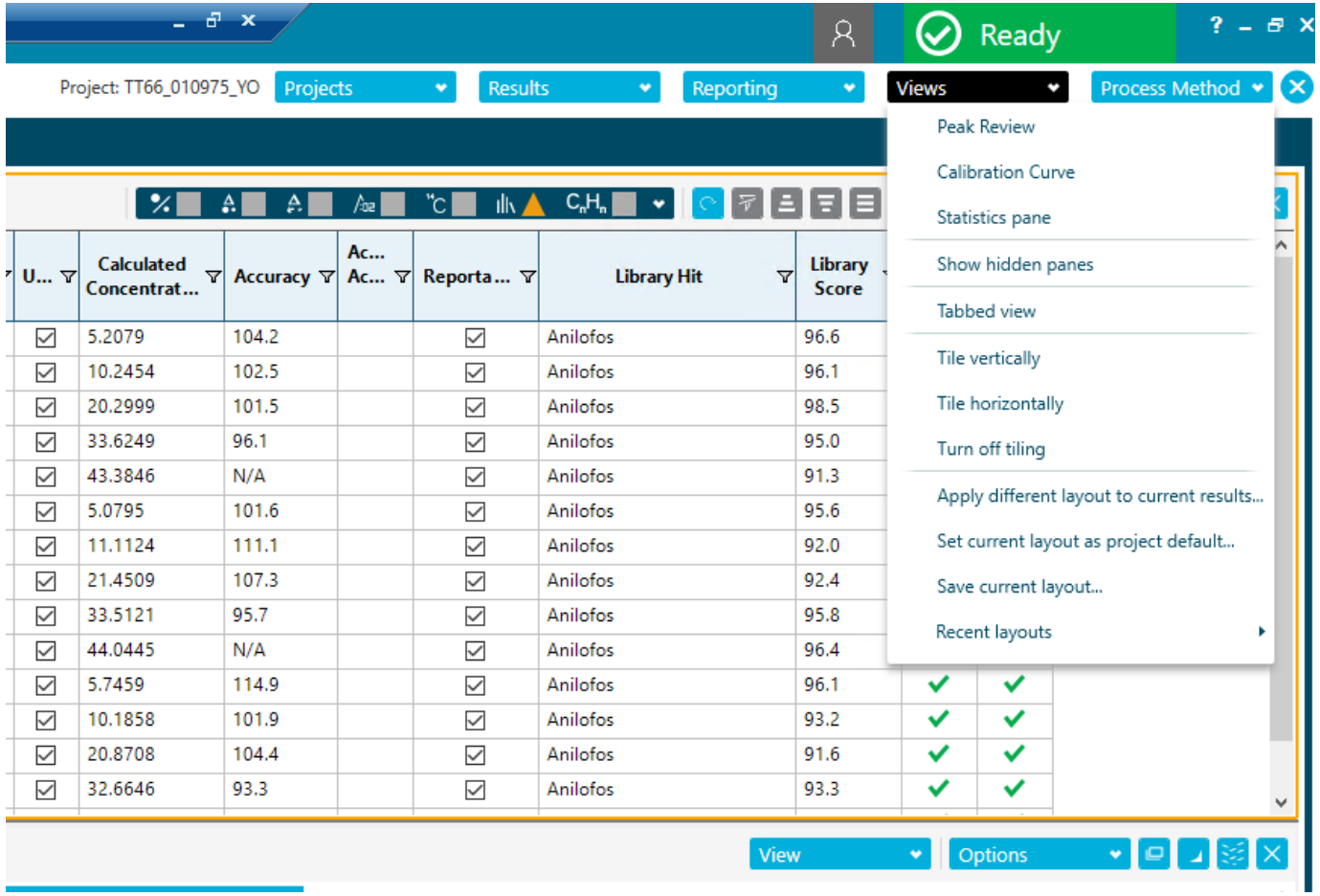


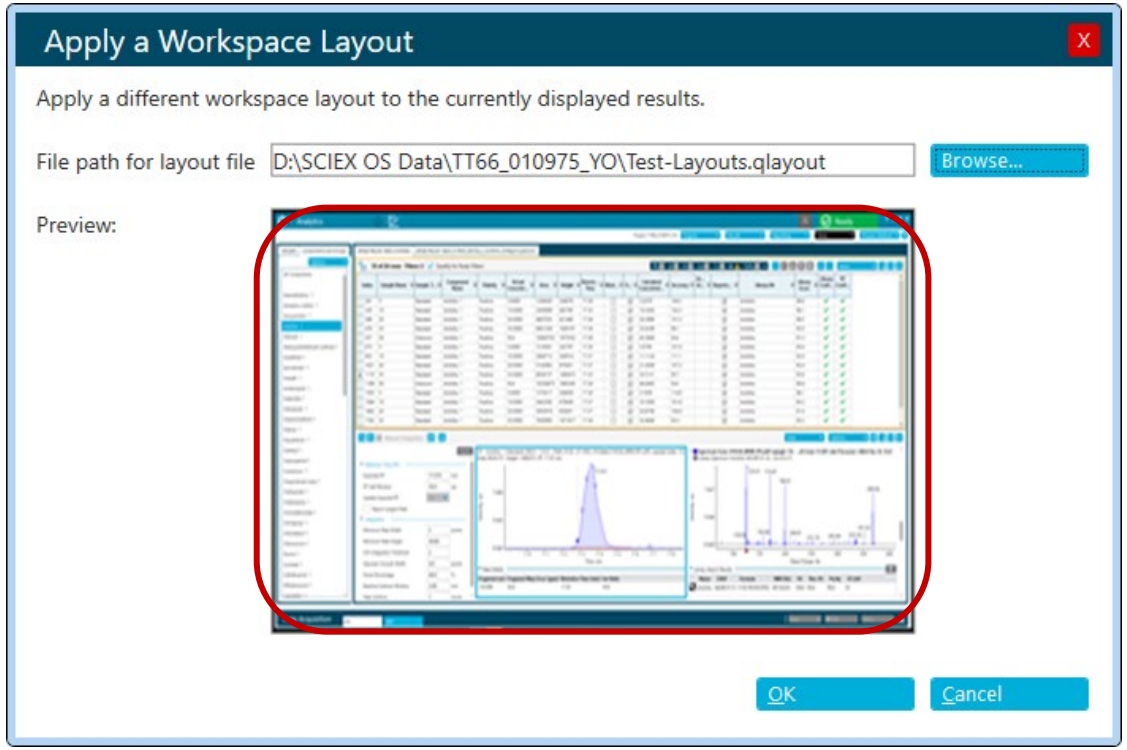
クロマトグラム

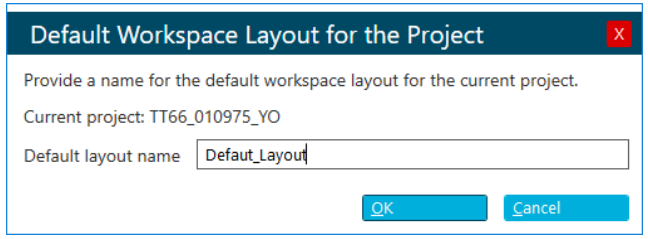


Analytics レイアウトの保存

結果画面のレイアウトを保存できます（別プロジェクトでも使用可能）

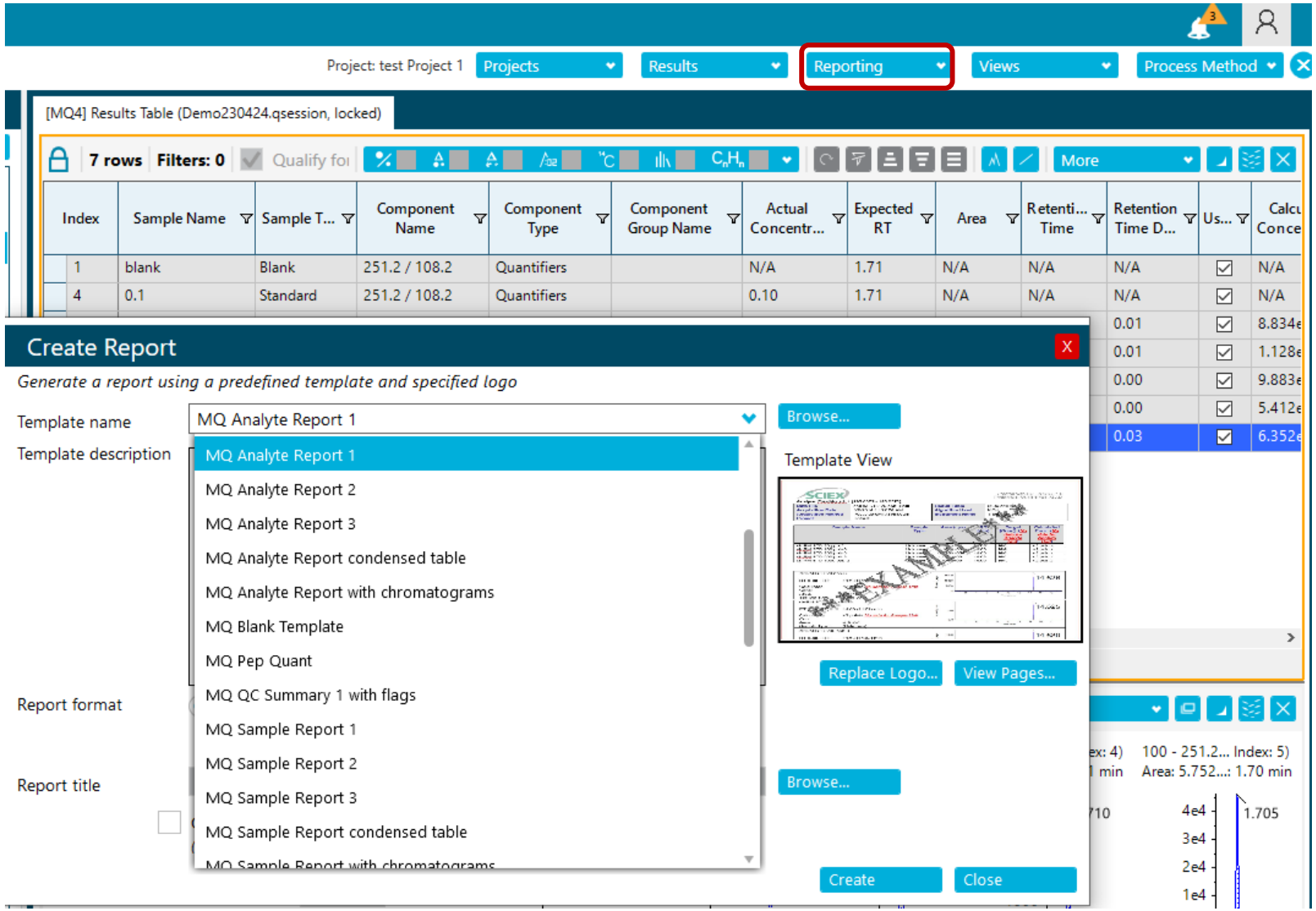






Analytics Reporter機能によるレポート作成

PDF（Secure PDFの形式も選択可）でレポート作成可能です。



Print Templates　Result table

SCIEX OSで解析したResult Tableで表示されたカラム、クロマトグラムをそのまま印刷可能です。

Print Preview

Print | Quick Print | Page Setup | Scale | Select Template | First Page | Previous Page | Next Page | Last Page | Navigation Pane | Zoom Out | Zoom | Zoom In | Page Layout | Enable Continuous Scrolling

Printing Date: 10/23/2023
Printing Time: 11:45:52 AM

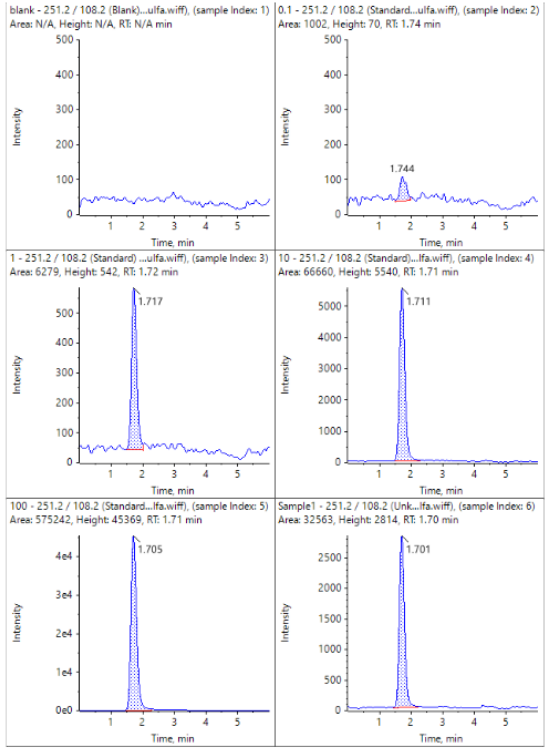
Results Table

Cell Shading Legend

Result	Cell Colour
Passed	
Failed or Above Threshold	
Below Threshold	

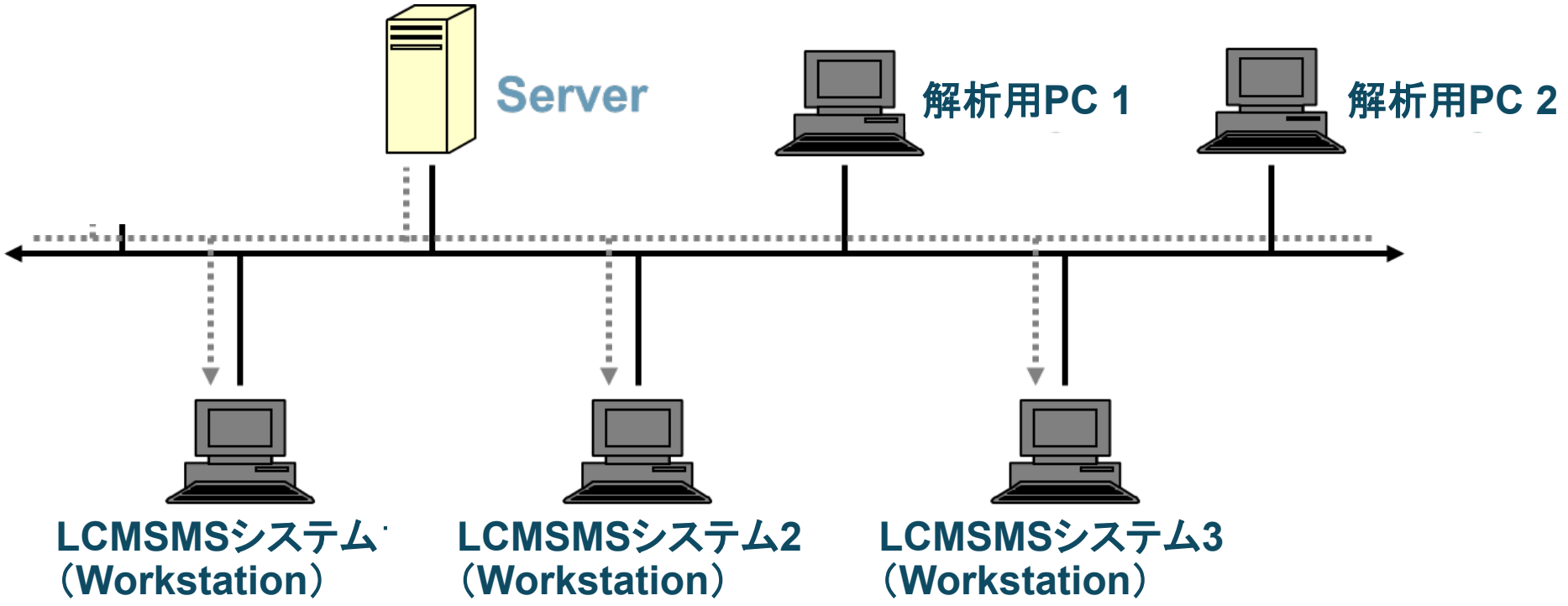
Index	Sample Name	Sample Type	Component Name	Actual Concentration	Area	IS Area	Area Ratio	Height	Retention Time	Signal / Noise	Modified	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	blank	Blank	251.2 / 108.2	N/A	N/A	2152	N/A	N/A	N/A	N/A	☐	☑	N/A	N/A
4	0.1	Standard	251.2 / 108.2	0.10	1002	13186	0.076	70	1.74	105	☑	☑	0.096	96.31
7	1	Standard	251.2 / 108.2	1.00	6279	12014	0.523	542	1.72	815	☐	☑	1.002	100.23
10	10	Standard	251.2 / 108.2	10.00	66660	12948	5.148	5540	1.71	7072	☐	☑	10.385	103.85
13	100	Standard	251.2 / 108.2	100.00	575242	11707	49.139	45369	1.71	18274	☐	☑	99.616	99.62
16	Sample1	Unknown	251.2 / 108.2	N/A	32563	161379	0.202	2814	1.70	3692	☐	☑	0.351	N/A

Printing Date: 10/23/2023
Printing Time: 11:45:52 AM



データの一括管理

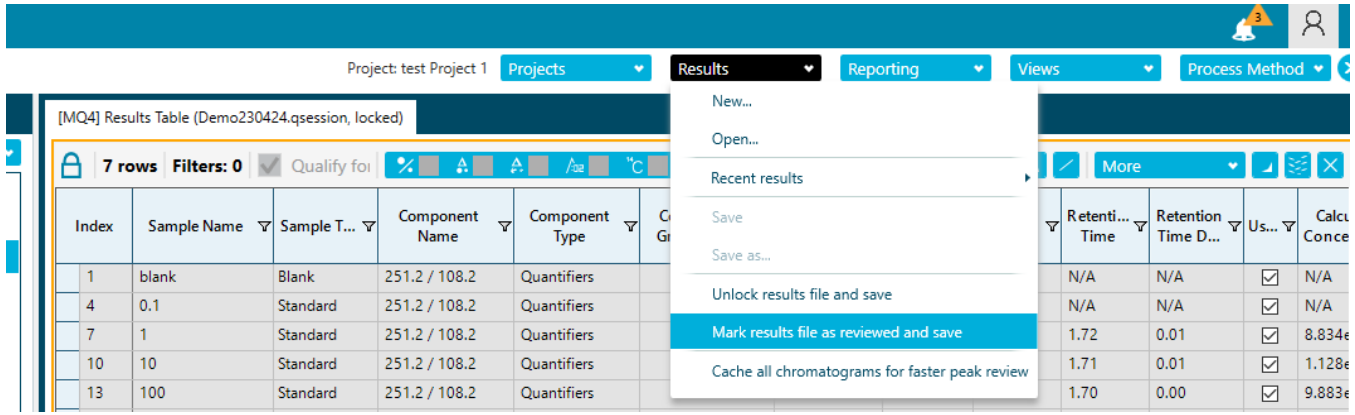
- MS (SCIEX OS)に付属する制御末端の測定データを、ネットワークを介して自動で転送することができます。
- ストレージ先を選んで、データを集約することができます。
- 転送後は端末側にデータは残りません。
- ネットワークがダウンした場合、制御末端側にバックアップされています。



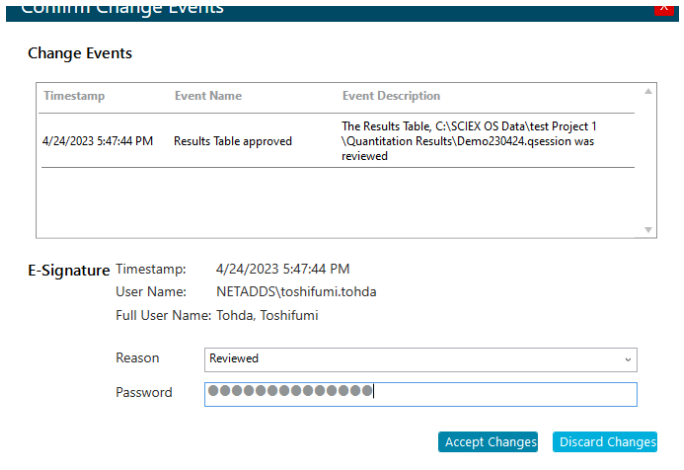
Data Integrityの機能紹介

追加機能：承認機能

Reviewerは”Mark results as reviewed and save”を選択します



理由とパスワードを入力します。



E-signatureにチェックが入り、Event NameにResult Table approvedと表示されます。

Timestamp	Event Name	Description	Reason	E-Signature	Full User Name	User
4/24/2023 5:48:52 PM	File saved	The Results Table, 'C:\SCIEX OS Data\test Project 1\Quantitation Results\Demo230424.qsession', was saved.	Saved	✓	Tohda, Toshifumi	NETADDS\tos
4/24/2023 5:48:53 PM	Results Table approved	The Results Table, C:\SCIEX OS Data\test Project 1\Quantitation Results\Demo230424.qsession was reviewed	Reviewed	✓	Tohda, Toshifumi	NETADDS\tos

メソッド：ロック機能

- ロック機能が追加されました。
- 重要なメソッドを保護できます。

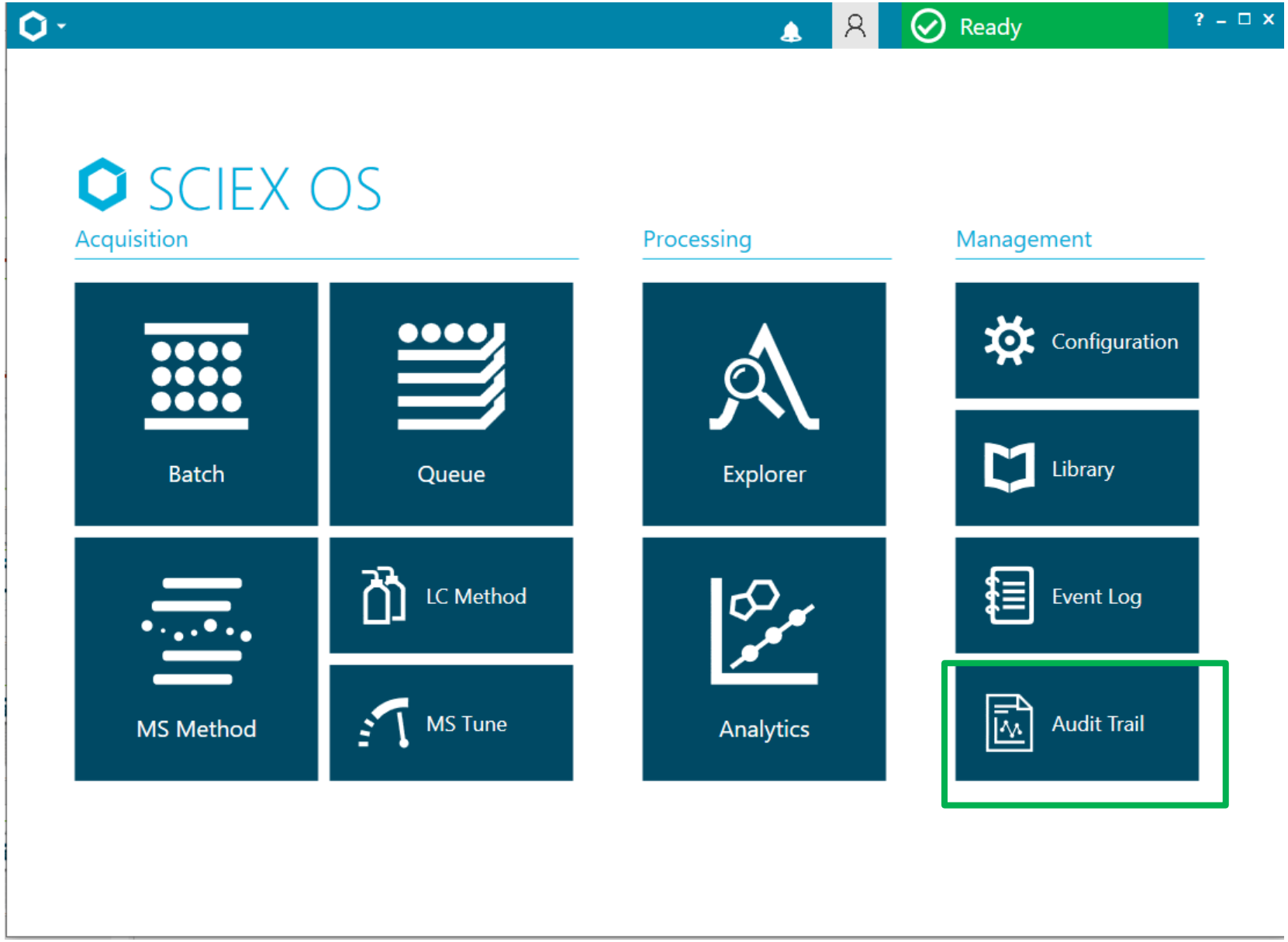
Audit Event の追加

監査証跡イベントがAnalyst　に追加され強化されております。
アーカイブ作成はAnalystでは1000件でしたが20000件と大幅強化されております

Analytics　workspace の例

SCIEX OS or CAC	Analyst Software
Analytics Workspace	
Actual Concentration changed	Quantitation Events: **'Concentration' has been changed**
Auto-Processing File saved	—
Barcode ID changed	—
Comparison sample changed in non-targeted workflow	—
Custom columns modified	Quantitation Events: **'Custom Title' has changed**
Data exploration opened	Project Events: **Data File has been opened**
Data exported	—
Data transferred to LIMS	—
Dilution Factor changed	Quantitation Events: **'Dilution Factor' has been changed**
External calibration changed	—
External calibration exported	—

Audit Trailの確認



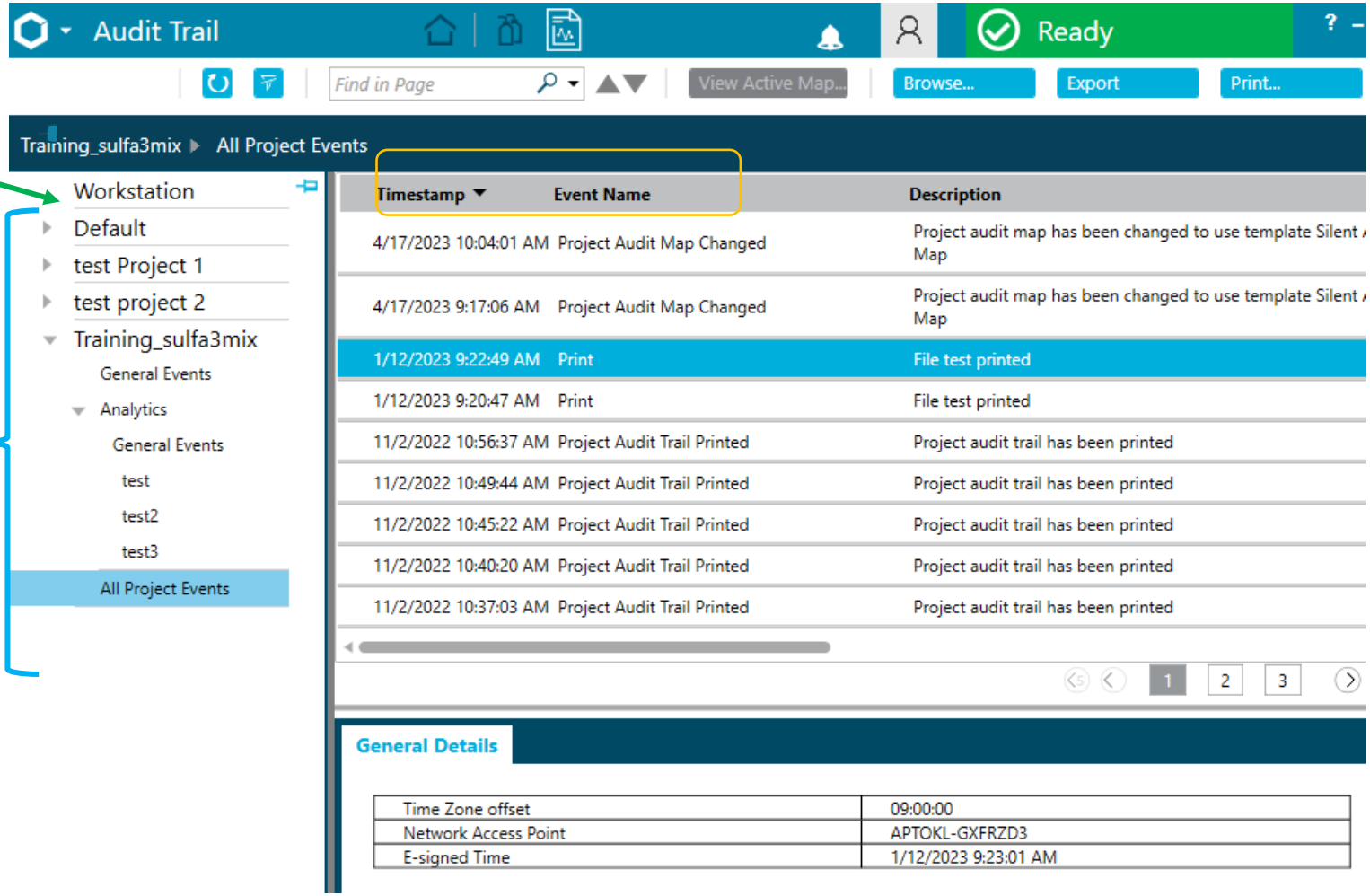
ホーム画面から容易にアクセス可能
（閲覧権限が無い場合は表示されません）

Audit Trail

Workstation*はProject 横断的に記録され、Projectに関してはProjectごとに記録されます。

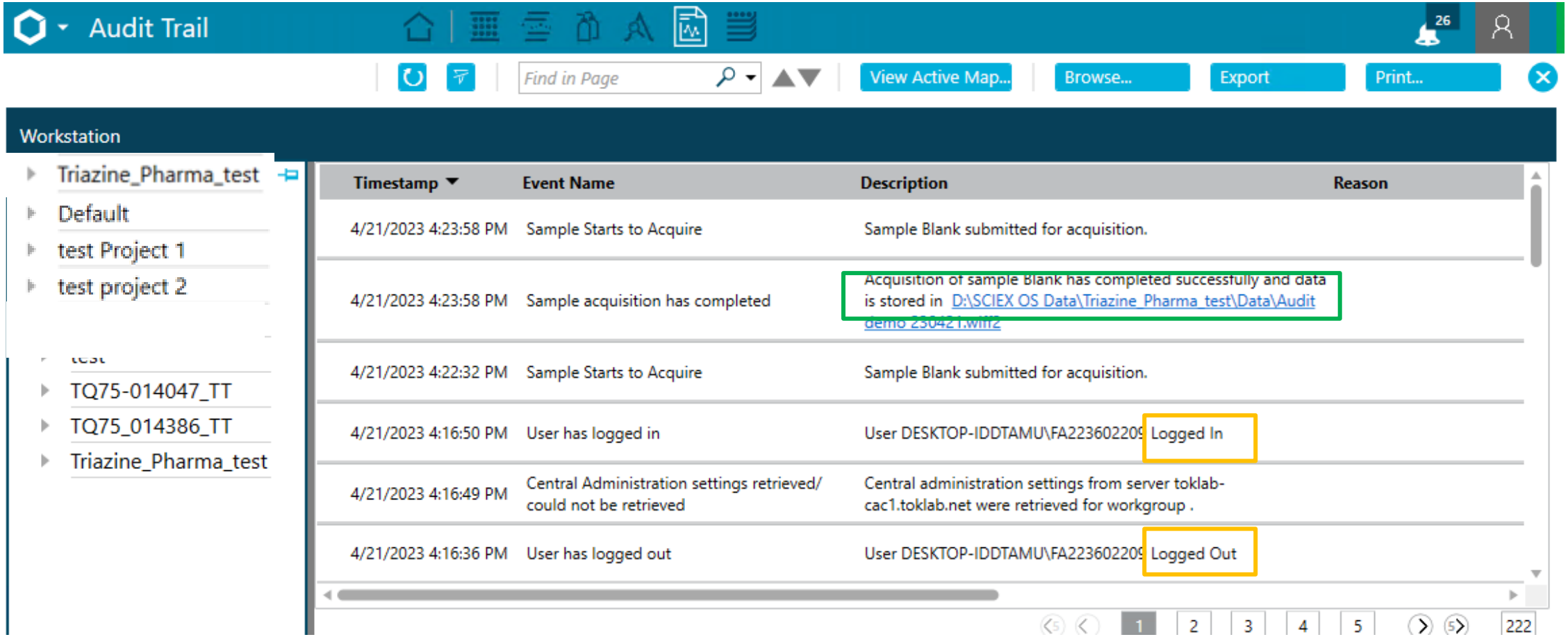
Workstation

Project



Audit Trail Workstation の例

ログイン、ログアウトや測定の記録等、装置全般に関わる記録が保存されます。



Audit Trail Projectの例（MS Method）

・Methodの変更履歴がAudit Trail上で確認できます。
・変更前はピンクの、変更後は緑で表示されます。

Timestamp	Event Name	Description	Reason	E-Signature
10/19/2023 2:33:36 PM	MS method saved	MS method changed test.msm		n/a

1

Change Details | General Details

Side By Side View | Difference View

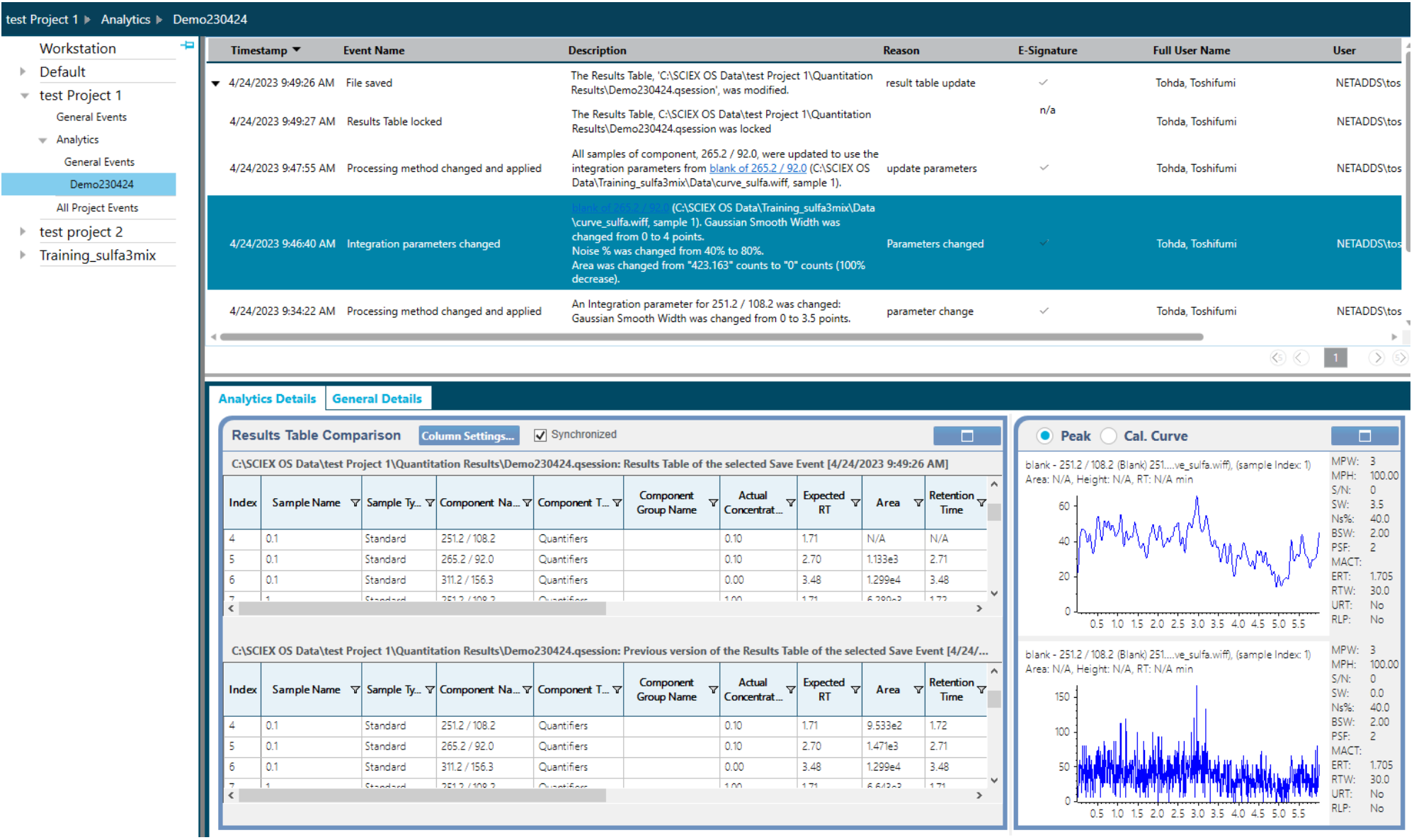
Experiment

Scan type: MRM
Polarity: Positive
Spray voltage (V): 5500
Q1 resolution: Unit
CAD gas: 9
Q3 resolution: Unit
Pause time (ms): 5
Settling time (ms): 0
Q0 dissociation: False
MRM Mode: MRM
InterQuad1 offset (V): -0.5
Q1 stubbies (V): -10

Mass Table

Group ID	*Compound ID*	*Q1 mass (Da)*	*Q3 mass (Da)*	*Dwell time (ms)*	*EP (V)*	*CE (V)*	*CXP (V)*
Group 1	Compound 1	500	100**900**	100	10	30	15

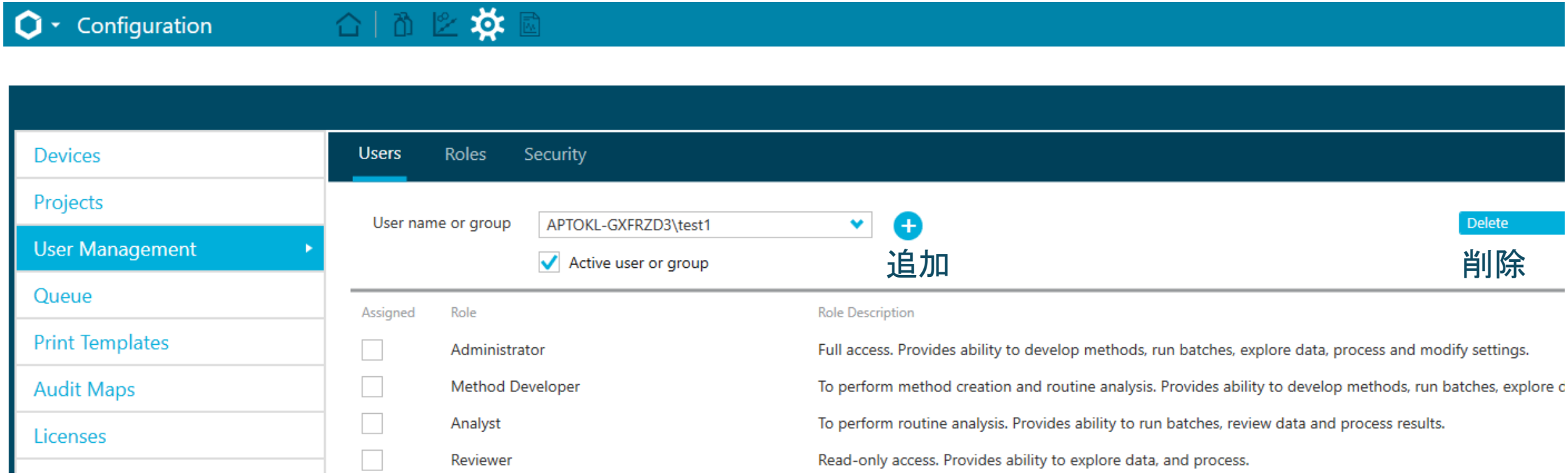
Audit Trail Projectの例（Result tableの例）



パラメーターの変更をクロマトグラムの変化で確認できます。

Userの管理

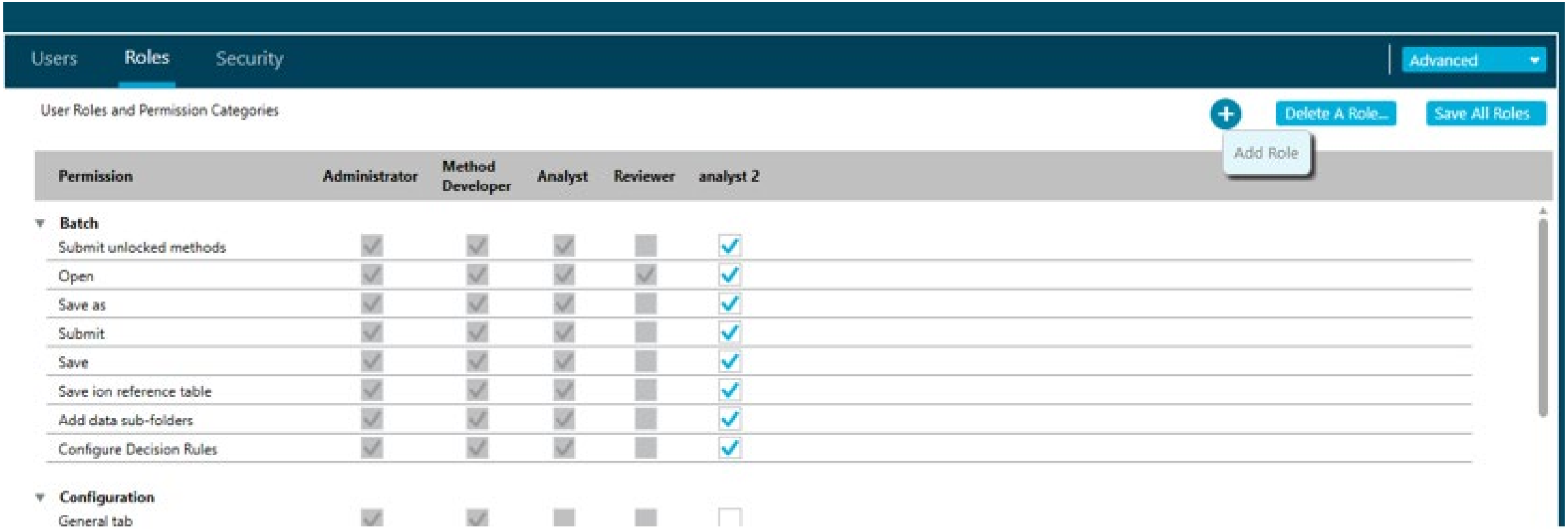
Configuration＞User ManagementでUserの追加や削除が可能です。



Rolesの設定

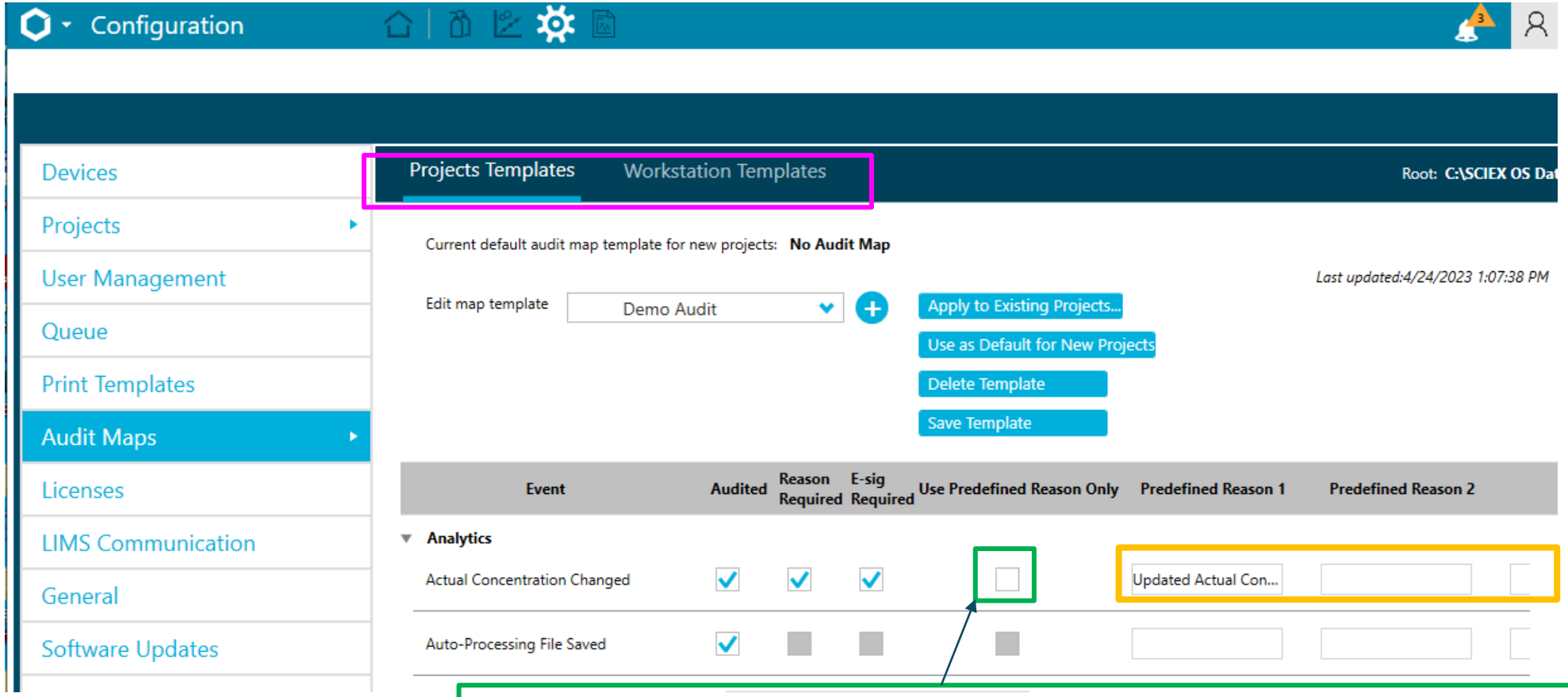
お客様の使用法に合わせたRolesの作成が可能（Permissionの追加はできません）

＊作成する際は既にあるRolesを元に作成することが可能です



Audit Maps

・Configuration＞Audit Mapsで設定できます。
・Projects Templates とWorkstation Templatesそれぞれの設定が必要です。



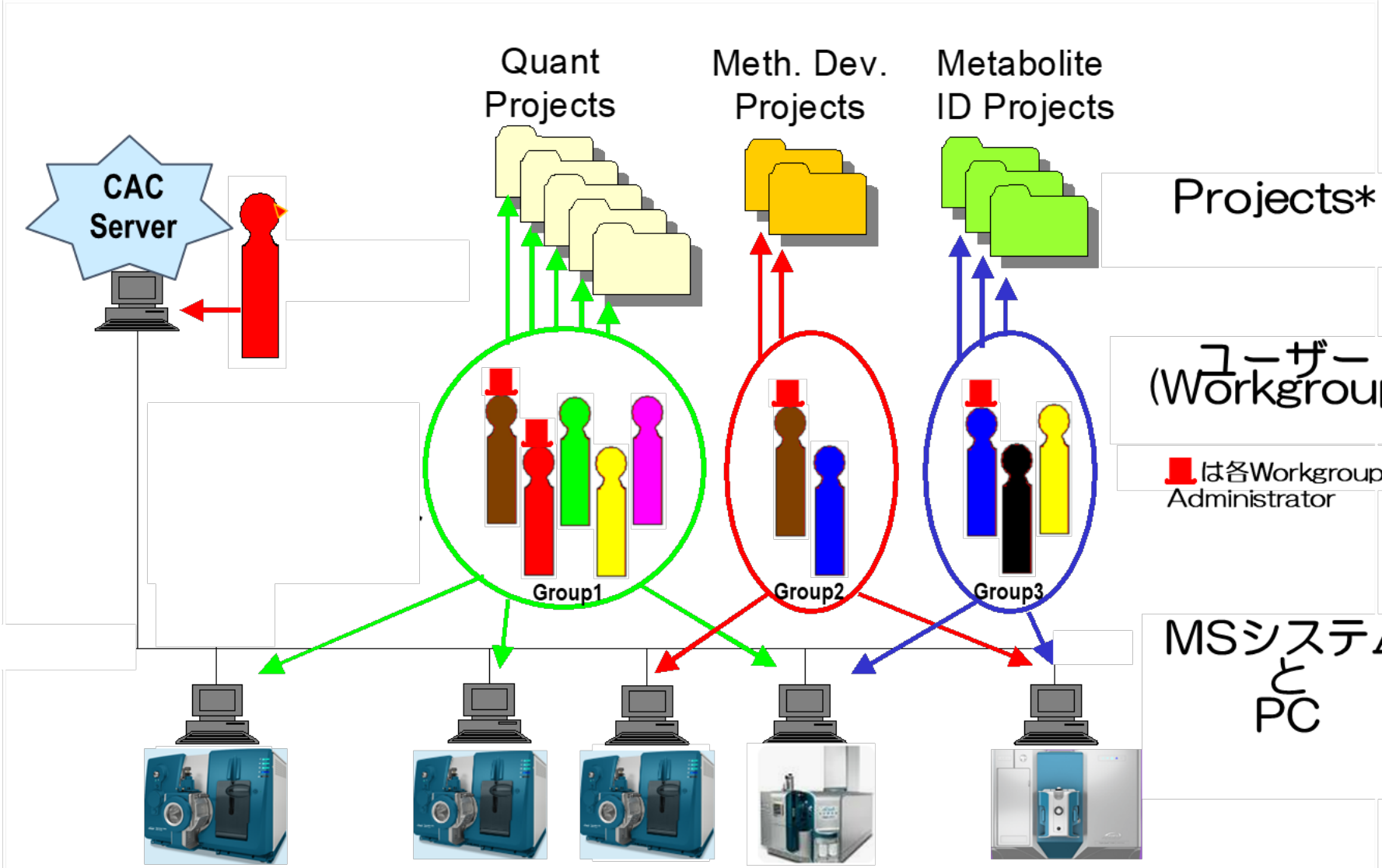
入力いただいたコメントがプルダウンで理由として選択可能になります。

チェックを入れると事前設定したコメントのみ反映可能になります。

Central Administrator Console

Central Administrator Console（CAC）概要

SCIEX OSで制御する装置をCAC Serverを介して管理するソフトウェアです。

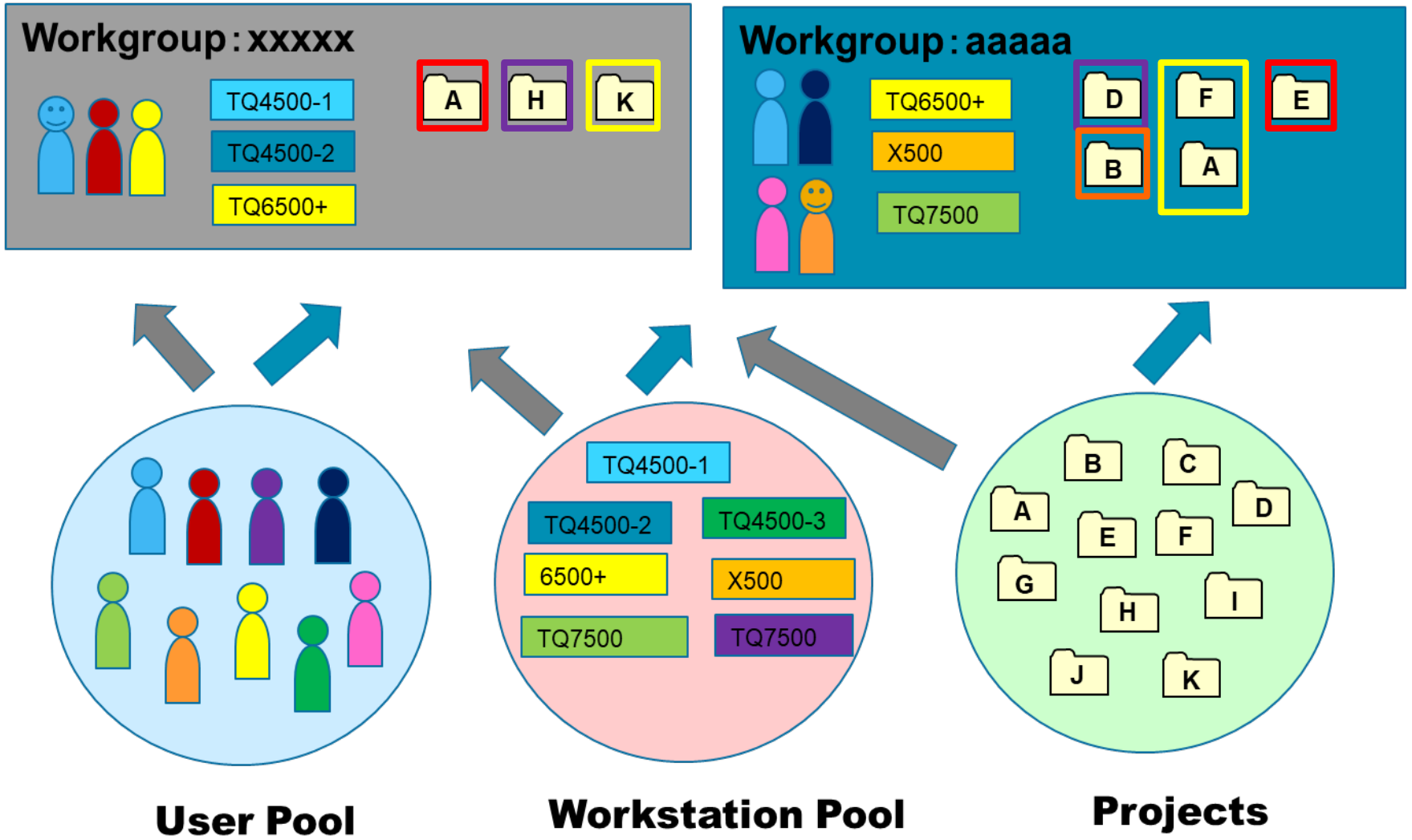


ProjectsはData serverで一括管理可能です。

QTOF型も管理可能です。

PoolとWorkgroupのイメージ

Work groupを設定することで、Projectごとにユーザーを指定し、Roleを設定できます



Administrator

Method developer

Analyst

Reviewer