

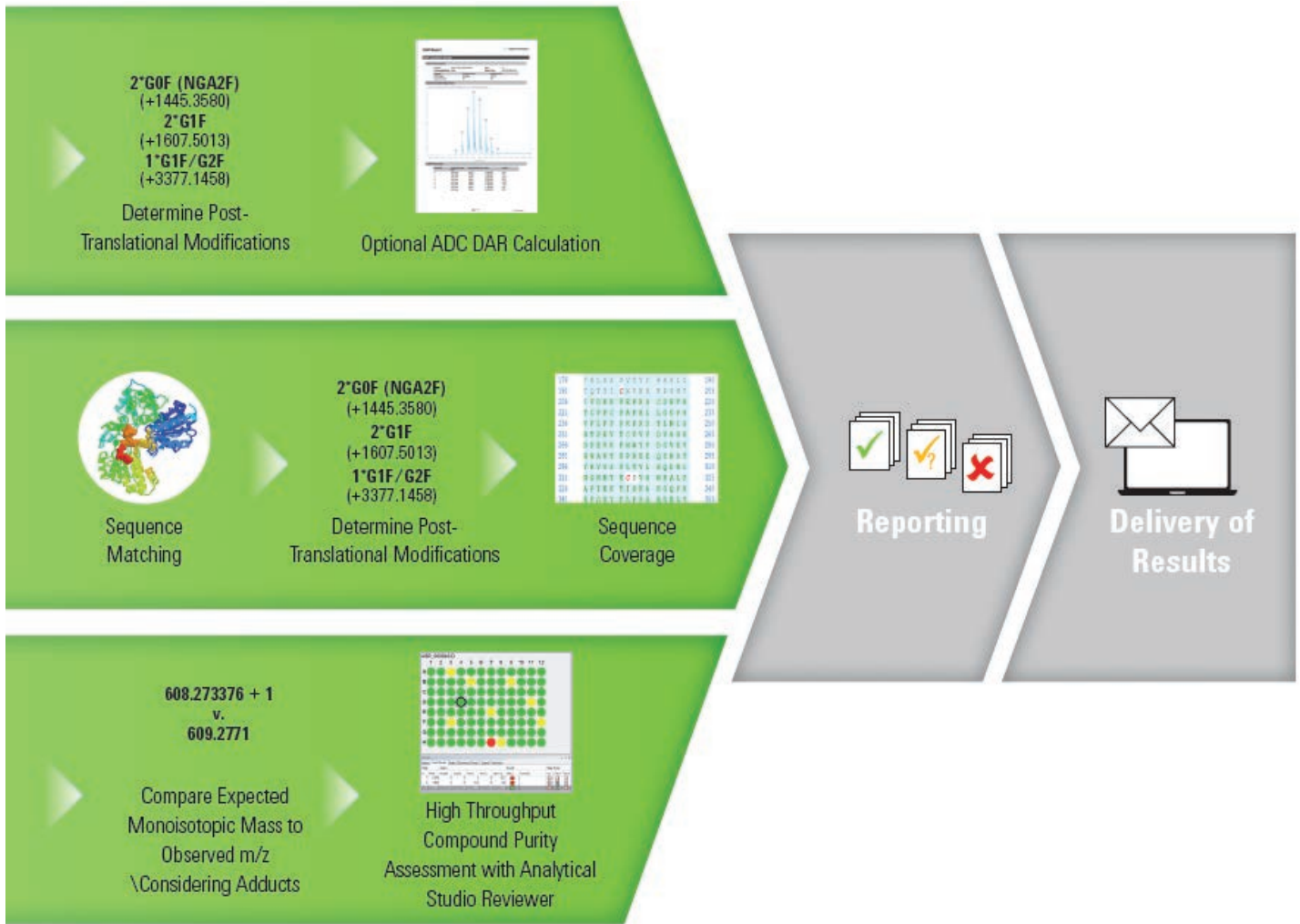
## 애질런트 LC/MS Walkup 솔루션

애질런트 MassHunter Walkup 소프트웨어 - 높은 신뢰도를 통해 신약 개발 과정에서 의사결정 시간 단축

### 소개

신약 개발의 초기 단계에서 합성 물질의 신속하고 정확한 분석은 결정적인 역할을 합니다. 유기합성 및 의약화학 연구자들은 사용이 간편한 Walkup 액체 크로마토그래피 질량 분석(LC/MS) 시스템을 필요로 하며, 간결하고 읽기 쉬운 형식으로 된 결과물에 즉시 접근할 수 있기를 원합니다. 애질런트 MassHunter Walkup 소프트웨어는 성분 확인 또는 저분자나 단백질의 정제에 요구되는 LC/MSD 및 Time-Of-Flight(TOF) 분석을 위한 간소화된 사용자 인터페이스를 제공합니다. Agilent Analytical Studio Reviewer(ASR)는 대량의 데이터 세트를 처리해야 하는 과학자를 위해 빠르고, 유연하며, 정확한 LC/MS 데이터 검토 및 보고서 작성 기능을 제공하여 저분자 화합물의 특성 규명을 지원합니다.

본 기술 개요에서는 MassHunter Walkup 소프트웨어를, 애질런트 발행물 5990-6094EN에서는 Analytical Studio Reviewer를 소개합니다. 이 두 소프트웨어 패키지와 애질런트의 견고한 액체크로마토그래피 및 질량분석기 시스템의 조합으로 고품질 데이터를 더욱 빠르게 얻기 위한 유연하고 강력한 솔루션을 제공하게 됩니다.



현대의 신약 연구 실험실에 근무하는 유기합성 및 의약화학 연구자는 사용이 간편하고 빠르게 결과를 제공하는 분석 워크플로를 필요로 합니다.



InfinityLab 1290 UHPLC와 6230 LC/TOF를 활용한 accurate mass 성분 확인

InfinityLab II Preparative 펌프와 분획 분취기 및 LC/MSD XT를 함께 활용한 질량 분석 기반의 분획 분취

### 간단하고 편리한 시료 제출

MassHunter Walkup 소프트웨어의 사용법은 다음과 같이 단순합니다.

- 시료를 기기로 가져갑니다
- 기본 시료 정보를 입력합니다
- 분석법을 목록에서 선택합니다
- 시스템이 지정해 주는 위치에 시료를 배치합니다
- 실험실로 돌아가 결과 이메일을 기다립니다

MassHunter Walkup 소프트웨어의 주요 이점은 다음과 같습니다.

- 간단한 시료 제출 및 상태 체크
- 원격 컴퓨터를 이용한 편리한 시료 제출
- 분자량 및 표적 이온 존재 여부의 신속한 확인
- 애질런트 단일 사중극자(LC/MSD) 및 Time-Of-Flight(TOF) MS 시스템에 사용되는 단일 사용자 인터페이스
- 분석법 및 용매가 바뀔 때 자동으로 안정화
- Agilent Analytical Studio Reviewer로부터의 보고서를 포함해 데이터 및 보고서를 자동으로 이메일 송신

MassHunter Walkup 소프트웨어는 최신 고처리량 LC/MS 하드웨어의 이점을 활용하도록 설계되었습니다. 호환되는 시스템은 다음과 같습니다.

- 성능의 저하 없이 가장 빠른 LC 분석이 가능한 Agilent Rapid Resolution LC 및 초고성능 액체 크로마토그래피 시스템(Agilent 1290 Infinity LC Injector HTS/HTC 포함)
  - 추가로 지원되는 시료 주입기: CTC Analytics HTS PAL 및 HTC PAL 주입 시스템과 애질런트 자동 시료 주입기
  - 견고한 Agilent 6100 시리즈 Single Quadrupole LC/MS 시스템, InfinityLab LC/MSD 시리즈 시스템, Agilent 6200 시리즈 Accurate-Mass TOF LC/MS 시스템 및 Agilent 6500 시리즈 Q-TOF LC/MS 시스템
  - Agilent InfinityLab 분획 분취기
- 한 시스템 관리자가 여러 유기합성 연구자나 의약화학 연구자들이 시스템을 사용할 수 있도록 설정할 수 있습니다. 간편한 구성을 위해 소프트웨어가 갖춘 특성은 다음과 같습니다.
- 사용자 액세스 권한 설정, 대기열 현황 추적 및 프로젝트 관리를 위한 유연한 관리 도구

- 데이터베이스 공유를 위한 여러 기기의 네트워킹으로 중복 구성의 관리가 필요 없어 관리 업무 감소
- OpenLab Shared Services(OLSS) 서버 하에 관리되는 모든 기기의 원격 모니터링 및 관리

### 연구자들이 합성 연구에 집중하도록 간소화된 워크플로

새로운 화합물을 준비하는 유기합성 유기 연구자들은 종종 질량 분석기 사용 경험이 거의 없는 경우가 있습니다. 이들은 정제 또는 분석을 위해 몇 가지 시료를 제출하고 분석이 완료되면 알림을 받기 원합니다. 또한 표적 화합물 개발의 다음 단계를 위한 적절한 결정을 내리고자 가능한 한 빨리 분획물 또는 결과를 얻으려 합니다. 이들은 올바른 화합물을 합성했는지, 정정한 순도 또는 수율을 얻었는지 확인해야 합니다.

많은 기관들이 고효율 분자량 확인용으로 설치된 다수의 LC/MS 시스템을 보유하고 있습니다. 신속한 결과가 필요한 의약 화학자들은 분석에 사용할 수 있는 여유 기기를 먼저 찾아야 합니다. MassHunter Walkup 소프트웨어를 사용하면 사용자가 네트워크상 어느 위치에서든 각 기기의 상태를 확인할 수 있으며(그림 1), 적합한 기기를 선택할 수 있게 됩니다.

Name	Description	Controller	Data system	Status	Queue Status	Queue Length	Queue RunTime	Last Update Time
LC-1		ptd09661-HP	ChemStation	Available	Standby	0	0	11/10/2017 5:12:25 AM
Instrument 2		V-MHWIN0764-03	LCMS MassHunter	Available	Standby	0	0	11/10/2017 3:53:29 AM
LC-2		V-MHWIN0764-02		Available		0	0	
Instrument 1		PTD9309	LCMS MassHunter	Available	Standby	0	0	11/9/2017 10:35:54 PM

그림 1. 사용자는 자신의 책상에서 편리하게 모든 기기의 상태를 확인할 수 있습니다.

기기의 위치를 확인한 후 연구자는 패스워드 (보안 옵션)를 제공해 로그인한 뒤 시료를 명시하고 목록에서 분석법을 선택합니다. 소프트웨어는 시료 주입기에서 시료를 놓아야 하는 위치를 표시합니다. 그림 2는 상태 화면으로, 시스템의 전반적인 상태를 표시하며 다음의 중요 정보를 포함합니다.

- 현재 처리 중인 시료 및 대기열에 남은 시료의 대략적인 완료 시간
- 사용 중인 분석법 및 마지막 제출자의 이름
- Walkup 및 질량 분석 시스템의 상태(본 예시의 경우 TOF)

화학자는 시료를 제출한 뒤 다른 업무에 임할 수 있으며, 시료 분석이 완료되었다는 이메일 알림을 기다리기만 하면 됩니다.

### 간편한 시스템 관리

소프트웨어는 시스템 관리자를 도와 MassHunter Walkup 시스템을 관리하기 위해 다음의 중요 기능을 제공합니다.

- 사용자 및 그룹 관리: 선택이 가능한 패스워드, 분석법 액세스 및 애질런트 ChemStation 또는 MassHunter의 활용 등 포함
- 시료 대기열의 관리: 우선시 되는 시료를 대기열 맨 앞으로 이동시키는 것 포함
- 분석법 관리: 사용자가 선택할 수 있는 분석법 정의

그림 3은 MassHunter Walkup 소프트웨어의 검증 로그를 보여줍니다. 시스템 관리자가 시스템에 여러 변경을 적용하면, 소프트웨어는 모든 변경 사항의 유효성을 검증합니다. 오류가 발생하면 강조 표시하여 관리자에게 보여줍니다. 관리자가 해당 오류를 클릭하면, 소프트웨어는 즉시 해당 색으로 이동하여 관리자가 빠르게 문제를 해결할 수 있도록 합니다.

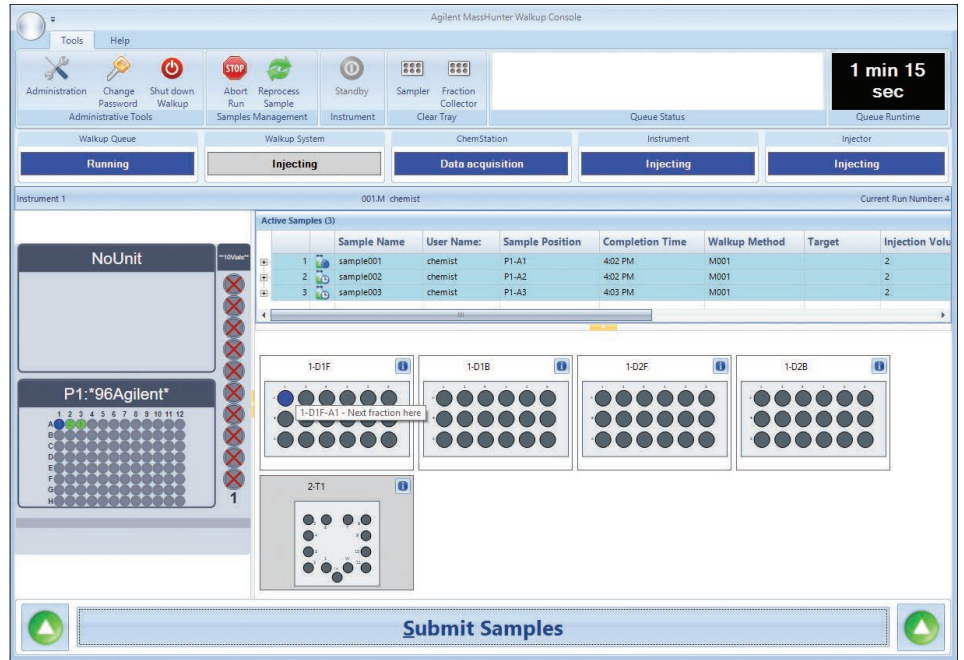


그림 2. 소프트웨어는 현재 처리 중인 시료를 파란 색상으로 보여주며, 대기열에 있는 모든 시료에 대한 대략적인 완료 시간을 제공합니다.

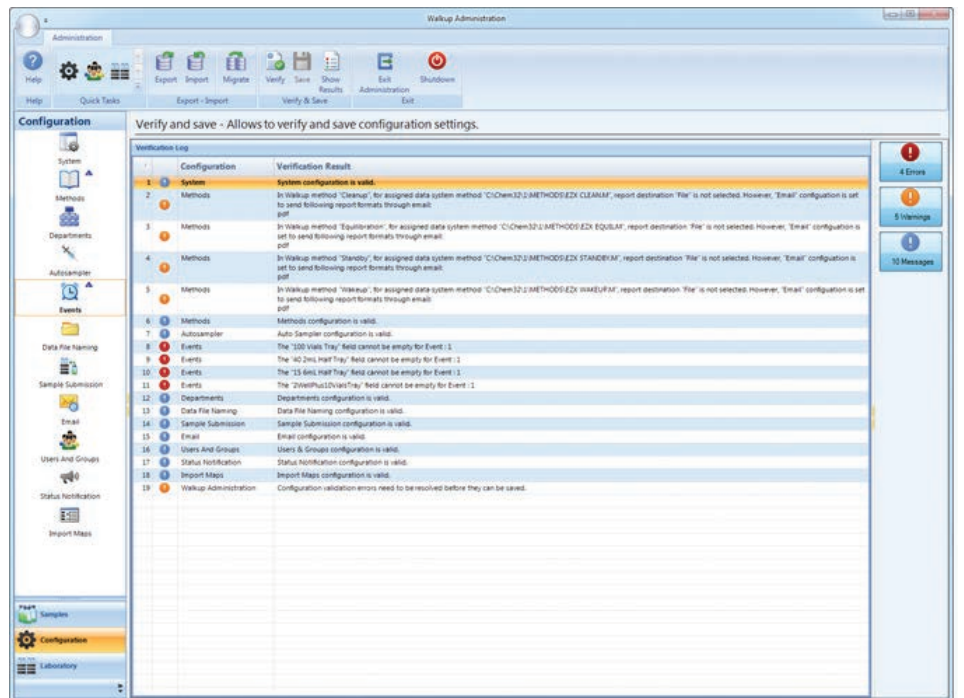


그림 3. MassHunter Walkup 소프트웨어의 검증 로그

## 이메일을 통한 결과 전달

선택된 사용자에게 분석 결과를 이메일로 발송하도록 시스템을 설정할 수 있습니다. 전송 가능한 결과에는 ChemStation 또는 MassHunter 보고서, 원본 데이터 및 Analytical Studio Reviewer 파일이 포함됩니다. 그림 4는 Adobe PDF 형식의 보고서를 포함한 이메일의 예시입니다. 그림 5는 이메일로 보내진 TOF accurate mass 보고서 중 한 페이지를 보여줍니다. 시료 제출자가 제공한 분자식도 보고서에 표시됩니다. 시스템은:

- 예상되는 단일 동위원소 질량을 계산합니다
- 명시된 부가물을 포함하는 추출 이온 크로마토그램(EIC)을 확보합니다
- 부가물의 범위를 포함하는 부분 확대된 스펙트럼을 표시합니다
- MS, UV 또는 기타 검출기로부터 얻은 데이터에 근거해 계산된 질량 오차와 순도를 보여줍니다

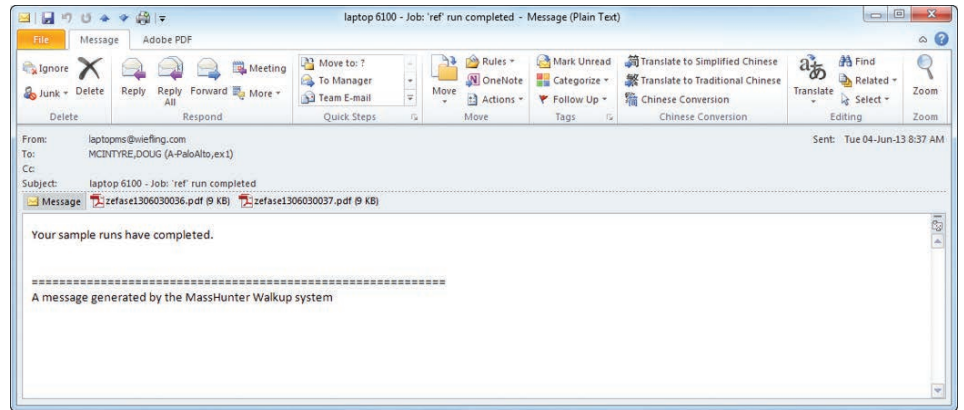


그림 4. 데이터 분석 보고서를 포함한 이메일의 예시

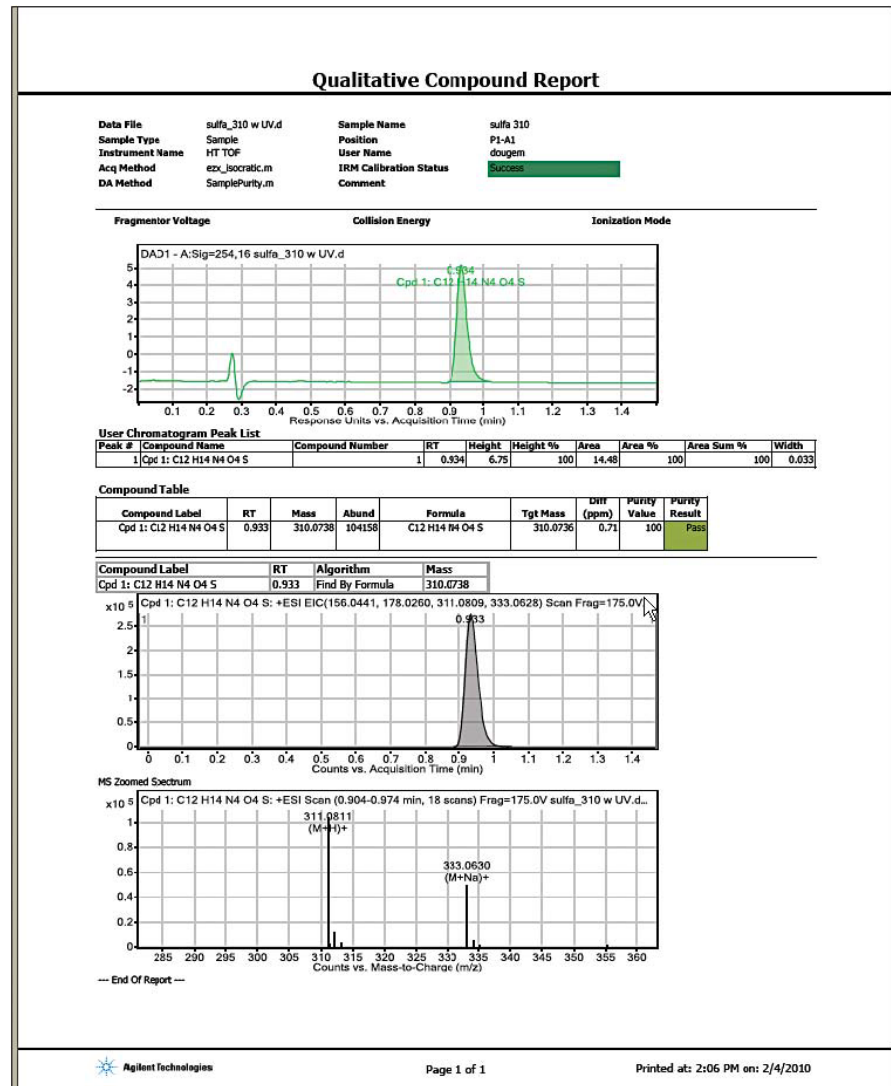


그림 5. 이메일로 송신한 TOF의 accurate mass 보고서

## 대용량 자동 시료 주입기를 통한 높은 처리량

MassHunter Walkup은 Agilent Multisampler, CTC Analytics HTS PAL 및 HTC PAL 주입 시스템과 같은 대용량 자동 시료 주입기를 지원합니다. 높은 처리량을 지닌 이들 주입기는 신속한 주입이 가능해 최대 24개의 microplate 까지 설치할 수 있도록 하며, 플레이트와 바이알의 조합도 가능합니다. MassHunter Walkup 사용자 인터페이스는 현재의 시료가 위치한 플레이트 또는 트레이를 나타내도록 업데이트되었습니다(그림 6). 사용자가 소프트웨어에 로그인한 뒤, 바이알 또는 well plate를 선택하면 시료를 놓기에 적합한 스택 트레이 또는 외부 트레이가 표시됩니다.

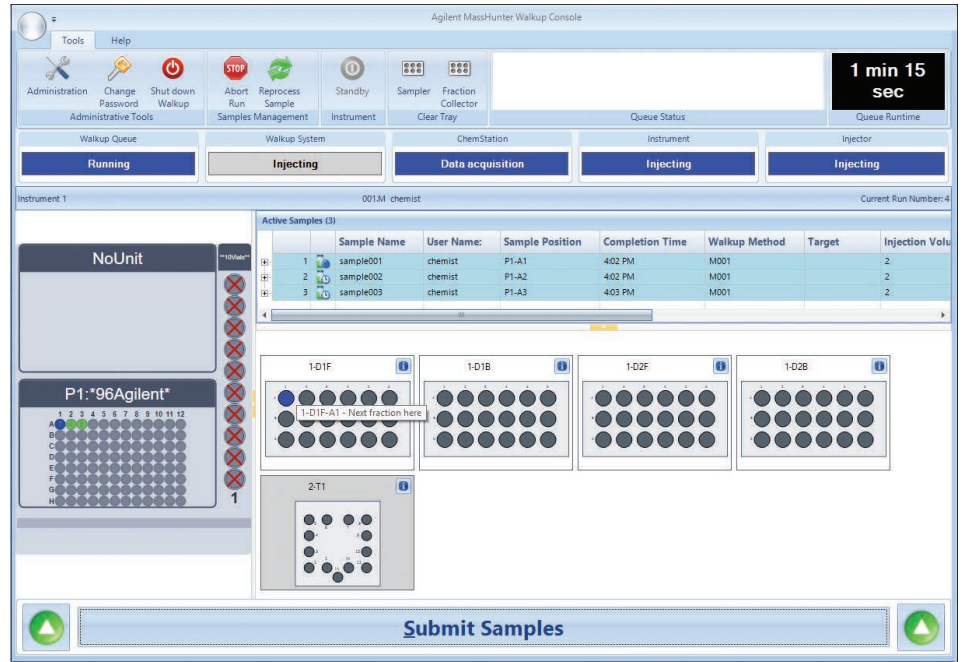


그림 6. 1290 Infinity II Preparative Open-Bed 분획 분취기 및 1260 Infinity II Preparative 밸브 기반 분취기로 분취된 분획물을 보여주는 애질런트 MassHunter Walkup 상태 화면

### 분획 분취의 효율적 관리

높은 처리량을 가진 실험실에서 질량 분석 기반의 분획 분취 수행 시 MassHunter Walkup이 이상적입니다. 시스템이 분획 분취를 하고 있을 때 사용자는 대기열에 여전히 다른 시료가 있어도 분획물을 회수할 수 있습니다. MassHunter Walkup은 실험실 생산성을 극대화하기 위해 사용자가 최대한 빠르게 분획물을 수집할 수 있도록

합니다(그림 7). 시스템은 각 제출자의 시료 사이에 시간 간격을 갖도록 설정할 수 있습니다. 다수의 분획 분취기가 있는 시스템에서는 MassHunter Walkup이 시스템을 각 사용자와 함께 분획 분취기들 사이에서 순환하도록 지정합니다. 연구자들은 이러한 순환을 통해 분획물을 완료 즉시 회수할 수 있게 됩니다.

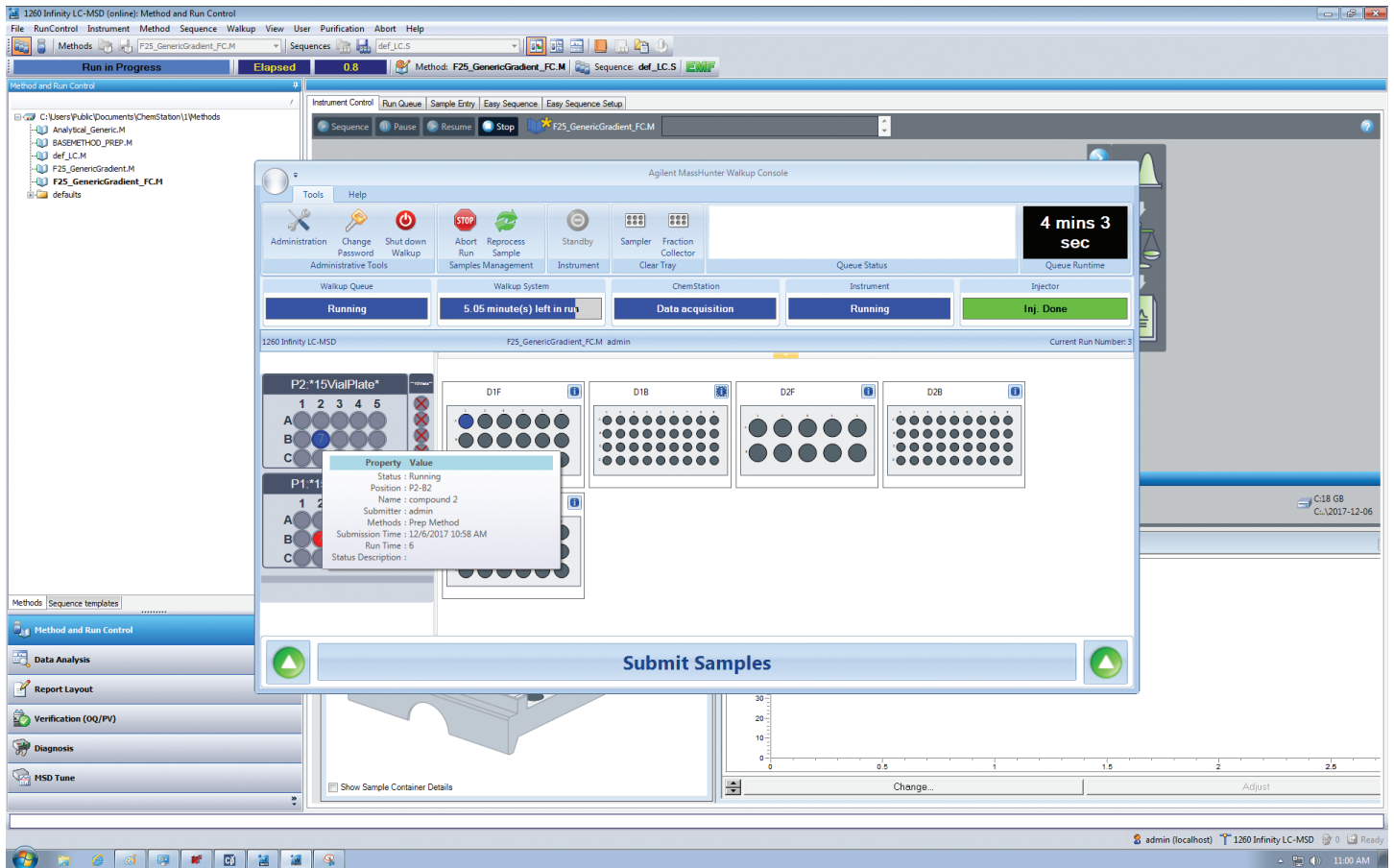


그림 7. 이 상태 화면은 사용자에게 회수할 분획물의 위치를 보여줍니다.

## 결론

빠르고 유연하며 직관적인 시료 제출 기능을 지닌 애질런트 MassHunter Walkup 소프트웨어는 Agilent InfinityLab LC/MSD 시리즈 시스템 및 Agilent 6200 시리즈 Accurate-Mass TOF LC/MS 시스템을 완벽히 보완해 줍니다. 솔루션이 지닌 강력한 화합물 식별 및 순도 평가 기능을 통해 사용자는 신속하게 올바른 결정을 내릴 수 있어 신약 개발 효율성을 향상시킵니다.

## 관련정보

애질런트는 대용량 데이터(예를 들어 96-well plate로 수집한 데이터)를 신속히 검토 및 보고하기 위한 MassHunter Analytical Studio Reviewer 소프트웨어를 제공하고 있습니다. 자세한 사항은 애질런트 발행물 5990-6094EN을 참고하시기 바랍니다.

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

연구 용도만 사용하십시오. 진단 용도로는 사용하지 않습니다.

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2018  
2018년 5월 10일, 한국에서 인쇄  
5990-6095KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 우)04418  
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부  
고객지원센터 080-004-5090 [www.agilent.co.kr](http://www.agilent.co.kr)