

포스터 재인쇄

ASMS 2019
ThP349

MassHunter WalkUp 개방형 소프트웨어를 이용한 쉽고 자동화된 질량 분석

Kyle Covert, Robert Ley

Agilent Technologies Inc., Santa Clara, CA

원료 의약품(API)의 합성에서는 많은 반응 단계를 모니터링해야 합니다. 각 단계마다 전반적인 순도 및 수율을 테스트하여 비용 효율적이고 신뢰할 수 있는 합성 경로를 확립해야 합니다. 다음 단계에 대한 적절한 의사결정을 위해서는 빠른 결과를 얻는 것이 매우 중요합니다. 신약 개발, 공정 개발 및 품질 관리에서도 신속하게 분석 결과에 액세스하여 더 빠른 의사결정을 내리면, 시간과 비용을 절약할 수 있습니다. 이와 같은 요건을 충족하는 가장 좋은 방법은 사용이 쉽고 고품질의 빠른 결과를 제공하는 개방형 분석 기기를 사용하는 것입니다. MassHunter WalkUp 소프트웨어를 사용하는 Agilent InfinityLab LC/MSD iQ는 이와 같은 솔루션을 제공합니다.

개방형 시스템에는 2 가지 사용자 유형, 즉 관리자와 제출자가 있습니다. 관리자는 시스템을 관리하는 전문가입니다. 관리자는 분석법을 생성하고, 제출자는 이를 시료 분석에 활용합니다. 제출자가 시료 제출 화면에서만 상호 작용할 수 있도록 시스템을 "보안" 상태로 설정할 수 있습니다(그림 1).

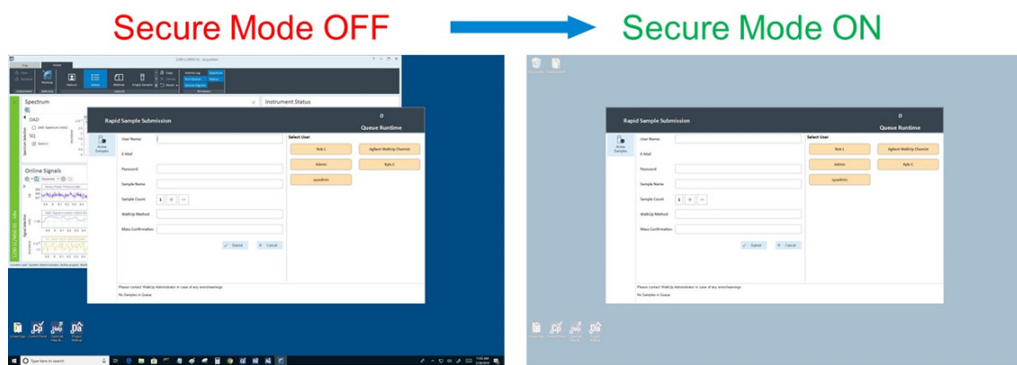


그림 1. WalkUp의 보안 모드 기능

- 보안 모드 해제 상태에서는, 제출자가 컴퓨터상의 OpenLab CDS와 기타 프로그램에 액세스할 수 있습니다.
- 보안 모드 설정 상태에서는, 제출자가 Walkup 시료 제출 화면만을 사용할 수 있으며, 모든 기타 프로그램과 운영 체제 명령은 이용 불가능합니다.

제출자들은 Agilent OpenLab CDS에 관한 지식 또는 기기 작동 방식을 숙지할 필요가 없습니다. WalkUp을 이용하면 제출자는 간편하게 기기에 시료를 제출하고, 책상으로 돌아와 이메일로 전송된 보고서를 통해 분석 결과를 받으면 됩니다(그림 2). 이는 실험실에서 교육 시간을 줄이고 운영 효율성을 향상시킬 수 있습니다.

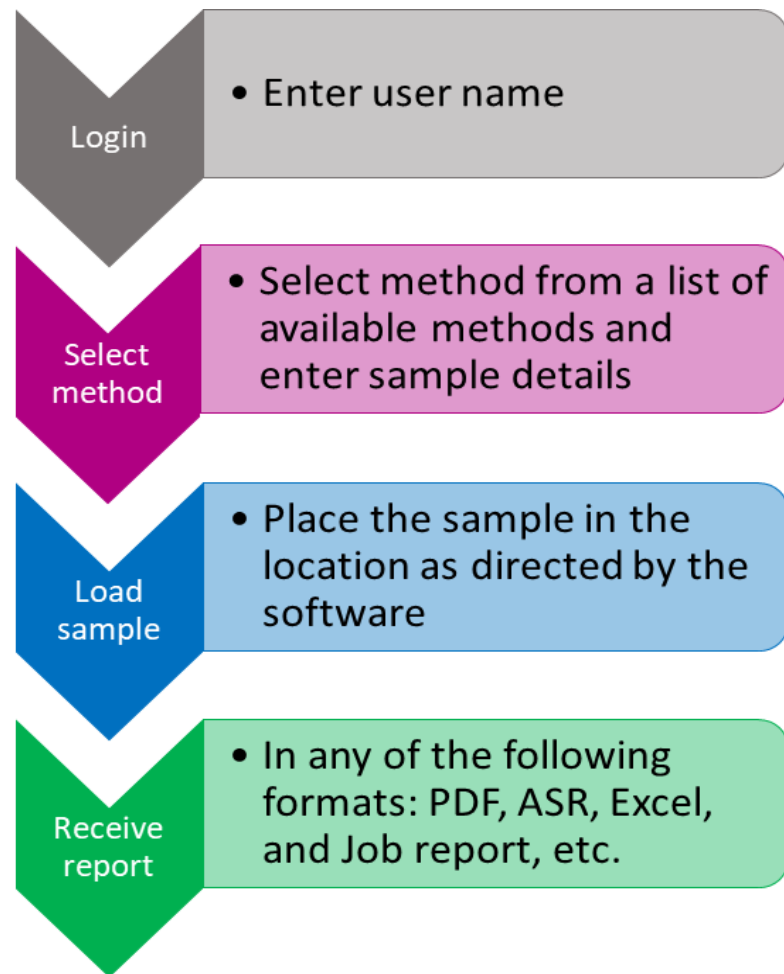


그림 2. Agilent LC/MSD iQ WalkUp 시스템의 일반적 사용자 워크플로.

실험

일반적인 WalkUp 기기구성

Agilent InfinityLab LC/MSD iQ WalkUp 시스템은 다음과 같은 모듈로 구성됩니다.

- Agilent 1290 Infinity II 고속 펌프(G7120A)
- Agilent 1290 Infinity II Multisampler (G7167B) 또는 Agilent 1290 Infinity II Vialsampler (G7129B)
- Agilent 1290 Infinity II 다중 컬럼 온도 조절 장치 (G7116B)
- Agilent 1290 Infinity II 다이오드 어레이 검출기 (G7117B)
- Agilent LC/MSD iQ (G6160AA)

그림 3. InfinityLab II Prime HPLC 스택을 갖춘 Agilent LC/MSD iQ

모든 사용자를 위한 간편 시료 제출

실험실의 WalkUp 시스템 사용 목적에 따라 시료를 제출하는 데에는 2가지 방법이 있습니다. *Rapid Sample Submission* 은 *Sample Purity* 또는 *Target Mass Confirmation* 워크플로(그림 4)와 함께 사용할 수 있도록 특별히 설계되었습니다. 다중 분석법 또는 질량 기반 분획 분취(그림 5)가 필요한 보다 복잡한 워크플로에는 *Classic Sample Submission*을 사용할 수 있습니다. 두 시료 제출 워크플로에서 제출자는 다음과 같은 동일한 제출 단계를 수행합니다.

- WalkUp 시스템에 신원 확인 및 필요 시 비밀번호 입력
- 기본 시료 정보 입력
- 목록에서 분석법 선택
- 표적 질량 입력(필요 시)
- 시스템 지시대로 시료를 시료 주입기에 로드
- 이메일을 통해 보고서 수신

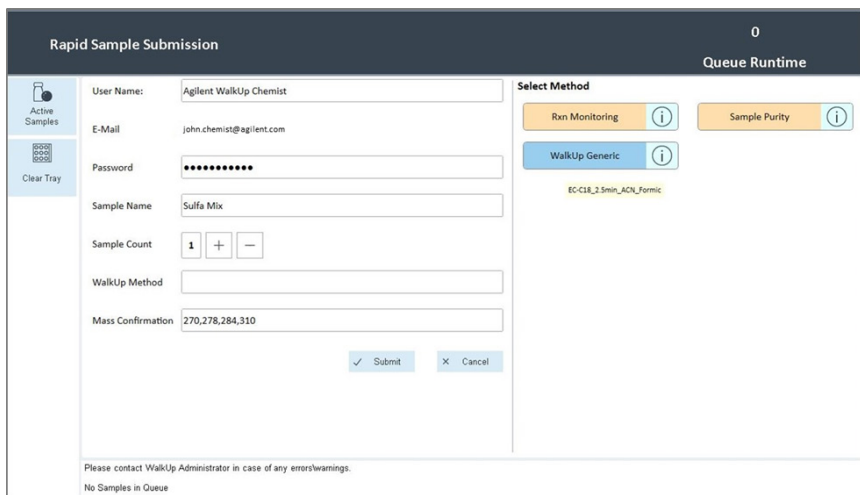


그림 4. Rapid Sample Submission: 모든 입력을 단일 화면에서 완성. 제출자가 사용 가능한 분석법 및 터치 스크린에서 분석법 선택을 위한 "버튼" 표시(오른쪽)

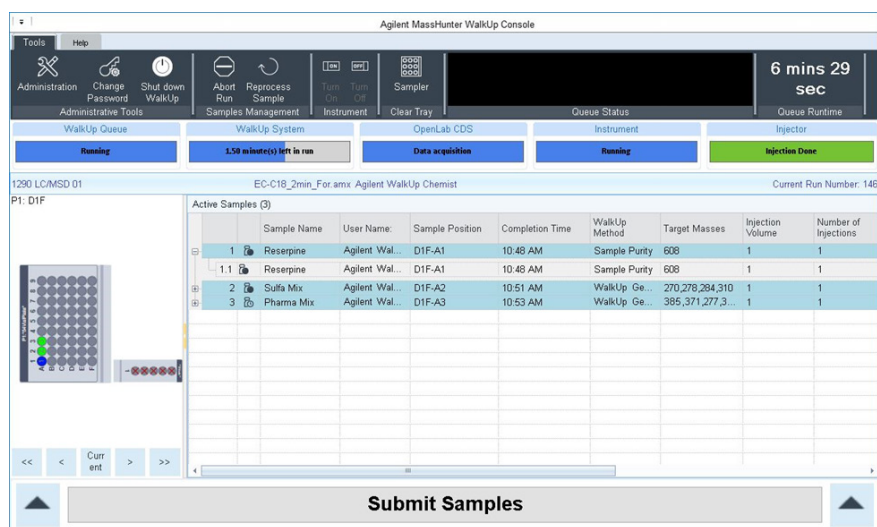


그림 5. Classic Sample Submission: 각 시료에 대해 특정한 분석법으로, 여러 시료를 동시에 제출 가능. 활성 시료 대기열은 현재 분석 중인 시료를 나타냄

실험실 관리자 측면의 장점 및 혜택

시스템 관리자들을 위한 WalkUp의 주요 장점은 다음과 같습니다.

- Rapid Sample Submission을 이용한 터치 스크린 기능
- 그룹 및 사용자 권한 제어(그림 6)
- Classic Sample Submission으로 정의된 워크리스트를 가져오기 가능
- 외부 시료 트레이를 통한 중단 없는 시료 제출
- 소규모 및 대규모 실험실 모두 사용 가능한 실시간 시료 대기열 및 기기 상태
- 대규모 실험실 구성에서는 OpenLab CDS Shared Service를 통해 다중 시스템 관리 가능
- 변경 발생 후 시스템 구성 검증
- 시스템 문제 발생 시 이메일 또는 SMS 알림 발송

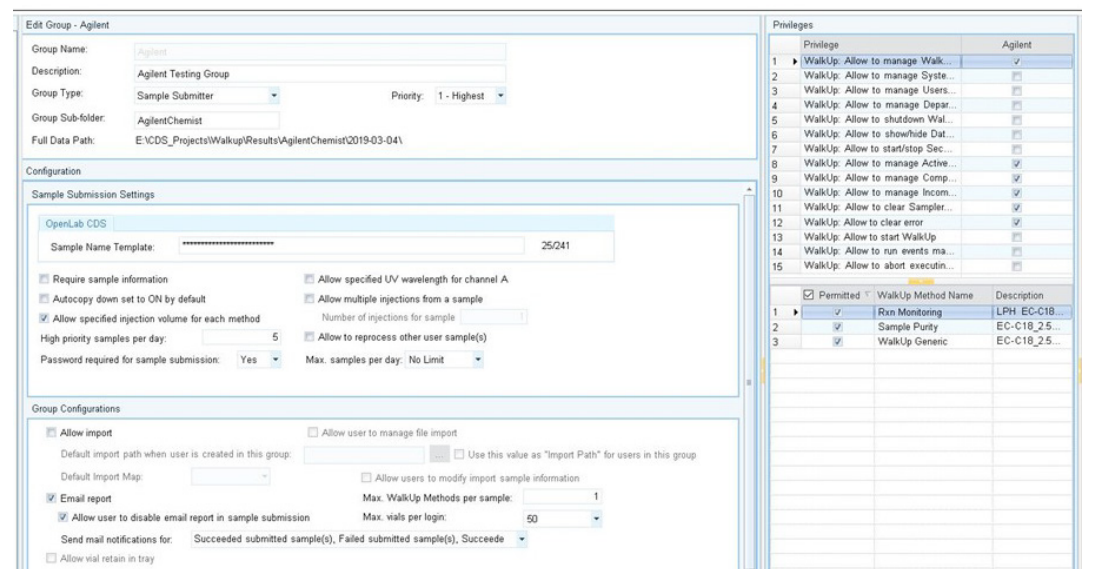


그림 6. 모든 그룹 및 그룹 내 사용자 목록이 포함된 그룹 허가 탭. 각 그룹은 사용 가능한 권한과 분석법을 할당받음

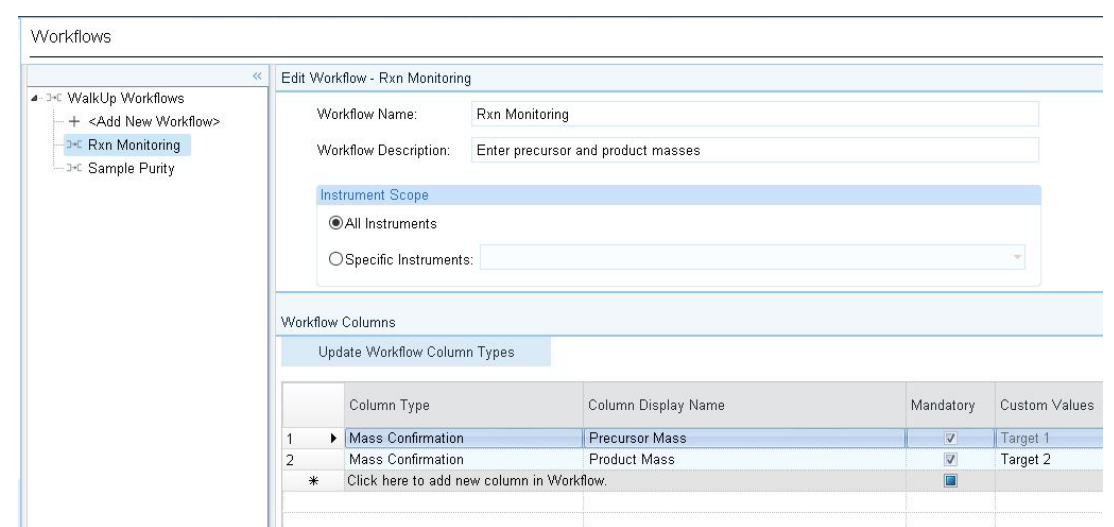


그림 7. 반응 모니터링을 위한 워크플로. 전구(이온) 표적 질량 및 생산(이온) 표적 질량을 위한 2개 열을 시료 제출 화면에 추가

중요 시스템 이벤트에 대한 자동 일정 계획

중요 이벤트는 주기적으로 설정되거나(예를 들어, 매일, 매주, 근무일 등) 또는 시료 제출 기반(예를 들어, 한 플레이트 분석 완료 후, N회 분석 후 등)으로 설정할 수 있습니다(그림 8). WalkUp 분석법 선택에는 개수의 제한이 없습니다. 시료 대기열에서 사용하지 않는 참조 위치에 시료 바이알을 보관할 수 있습니다. 진행할 수 있는 이벤트 예시는 다음과 같습니다.

- 근무일 내내 참조 표준물질 분석
- 보고된 양이 목표와 일치하는지를 확인하기 위한 검량 표준물질
- 기기 및 컬럼 안정성을 위한 시스템 적합성 확인
- 캐리오버 또는 오염을 확인하기 위한 바탕 분석
- LC/MSD iQ로 정기적인 Autotune 또는 Checktune 수행

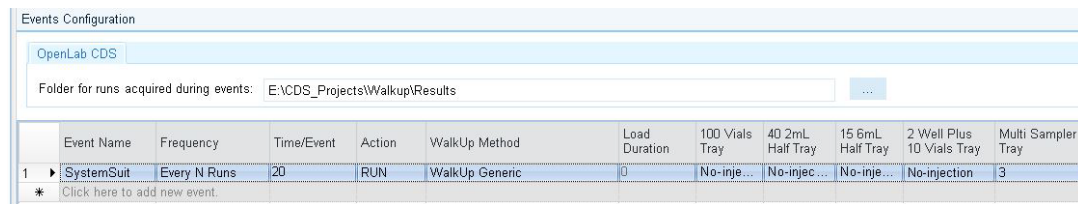


그림 8. OL CDS 데이터 수집 화면

제출자의 이메일함으로 바로 전송되는 보고서 및 데이터

수집된 데이터는 자동으로 데이터 분석법에 의해 처리되며, 데이터 분석 보고서를 생성합니다. 그 후 관리자는 제출자에게 보낼 내용을 구성합니다(그림 9). 제출자는 관리자가 생성한 보고서를 이메일로 직접 수신합니다(그림 10).

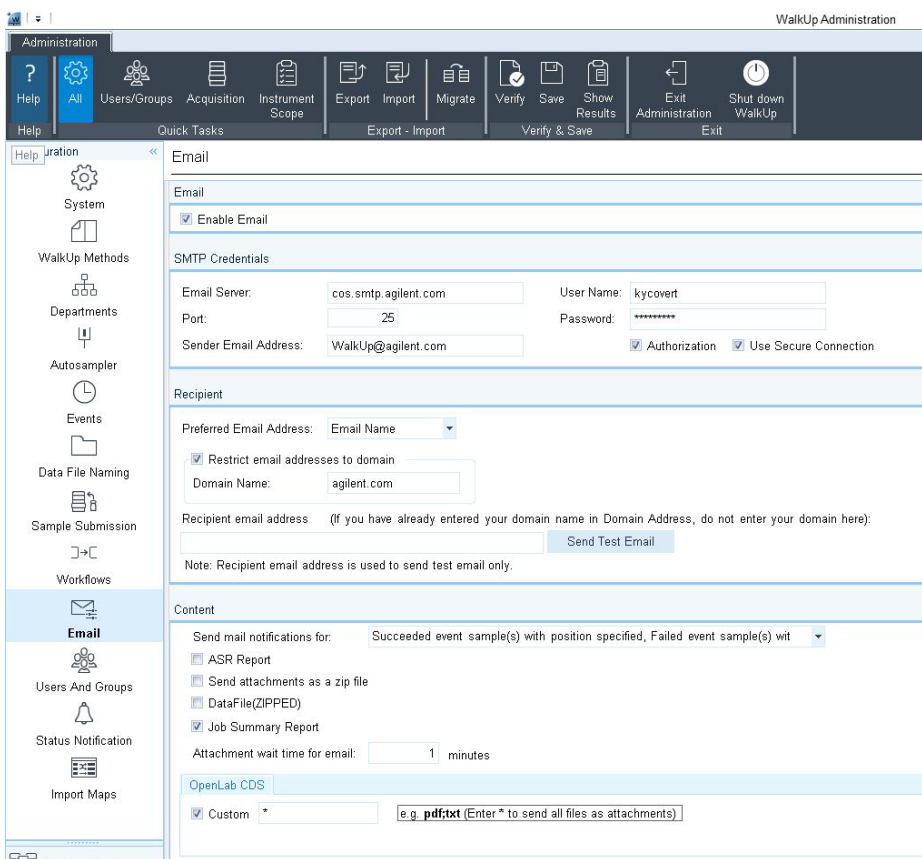


그림 9. 데이터 파일, 데이터 분석 보고서 및 ASR 파일은 제출자에게 이메일로 전송됩니다.

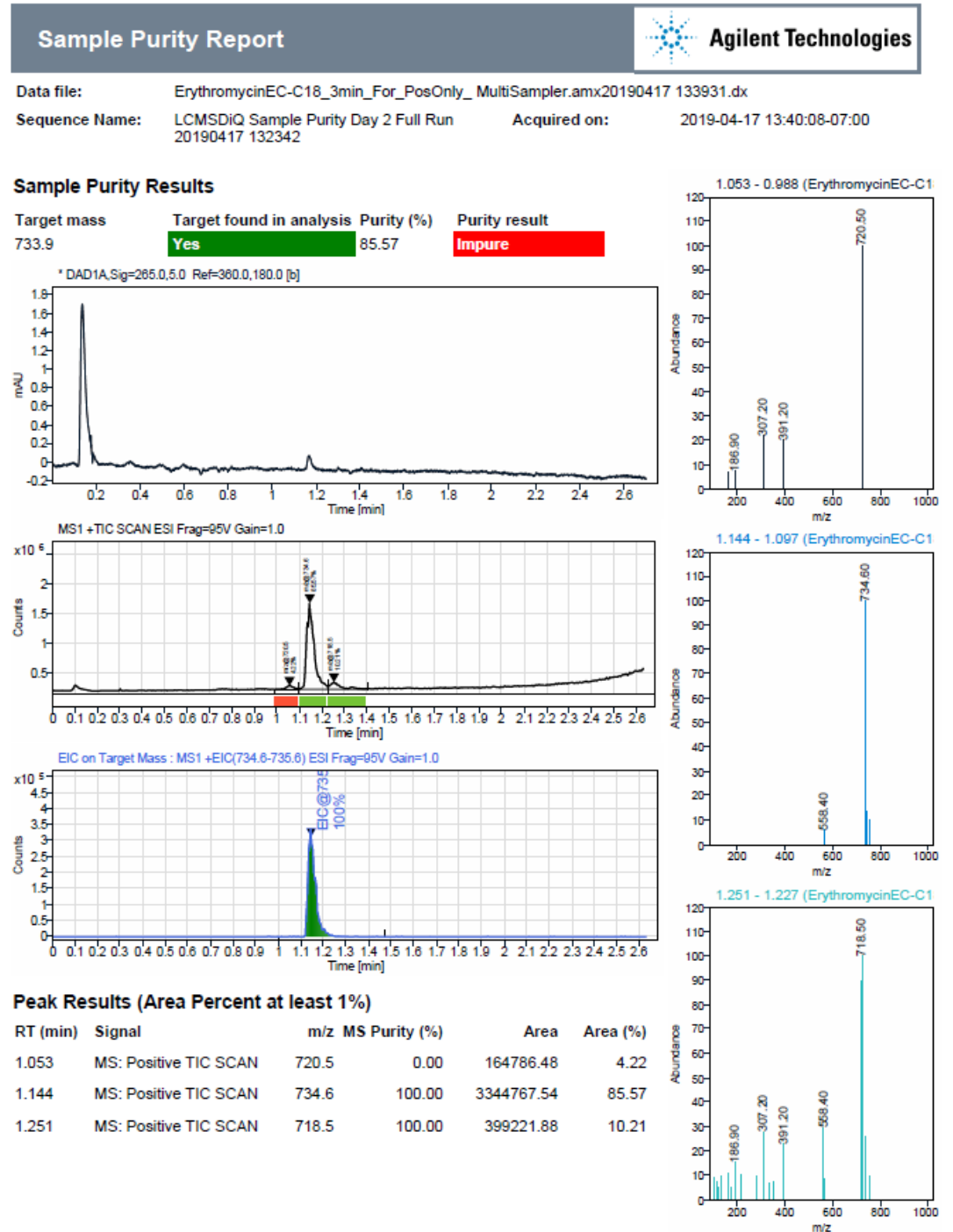


그림 10. 제출자에게 이메일로 전송된 시료 순도 WalkUp 보고서. 표적 질량 m/z 733.9(erythromycin)의 시료 순도를 UV 크로마토그램 및 MS 총 이온 전류(TIC)와 함께 보여줌. TIC 피크 아래의 색상으로 표시된 막대는 MS 피크가 순수한 경우(녹색) 또는 순수하지 않는 경우(빨간색)를 나타냄

결론

- MassHunter WalkUp은 빠르고 다루기 편하며 직관적인 시료 제출 성능과 유연한 보고서 생성 옵션을 결합하여, 쉽게 작업 가능한 개방형 환경을 제공하고, 시료 제출자와 관리자에게 모두 풍부한 기능을 제공합니다.
- InfinityLab LC/MSD iQ와 함께 사용하면, 제출자는 질량 정보를 획득함으로써 보다 명확한 식별 정보를 얻을 수 있습니다.
- 정교한 관리 도구는 시스템 관리자가 교육 필요 없이 워크플로를 구성할 수 있게 합니다.

연구 용도로만 사용하십시오. 진단 용도로는 사용하지 않습니다.

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2019
2019년 6월, 한국어에서 발행
5994-1070KO

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