

통합 OpenLab CDS 시스템을 이용한 고분해능 질량 분석 데이터 수집

저자

Ruojie Luo 박사 및
Ailin Li 박사
Agilent Technologies, Inc.

소개

고분해능 질량 분석(HRMS)은 정밀도, 재현성 및 규제 준수가 필수적인 바이오의약품 산업의 후기 개발 단계 및 QA/QC 실험실에서 중요한 역량입니다. 최신 버전의 애질런트 OpenLab CDS 소프트웨어(버전 3.0)는 애질런트 액체 크로마토그래피/Time-of-Flight (LC/TOF) 및 액체 크로마토그래피/Quadrupole Time-of-Flight 질량 분석(LC/Q-TOF) 기기를 지원하도록 범위를 확장하여, 크로마토그래피와 질량 분석 워크플로를 하나의 통합된 플랫폼으로 결합합니다.

OpenLab CDS는 크로마토그래피와 MS 모두의 데이터 수집을 통합함으로써 사용이 쉽고 학습이 용이한 표준화된 사용자 경험과 일관된 데이터 형식을 제공하여 교육 필요성을 줄이고 작업 실수를 최소화합니다.¹ 확장 가능한 클라이언트-서버 아키텍처는 중앙 집중식 제어, 안전한 데이터 접근 및 서로 다른 위치에 있는 팀 간의 원활한 협업을 지원합니다.

이 기술 개요에서는 OpenLab 생태계의 일반적인 이점을 설명하고, 생태계 내에서 고분해능 질량 분석을 수행할 수 있도록 하는 새로운 기능을 소개합니다. 여기에는 다음과 같은 내용이 포함됩니다.

- 최적의 성능 유지와 가동 중단 감소를 위한 사전 구성된 기기 튜닝 예약 기능
- 다양한 표적 및 비표적 분석 전략을 지원하는 7가지 데이터 수집 모드
- 견고한 신호 버퍼 서비스를 통해 여러 클라이언트에서 실시간 스펙트럼 확인 가능
- 새로운 작업 및 대기 동작을 포함한 고급 시퀀스 관리 기능으로 워크플로 유연성 향상
- 시료 사용자 지정 파라미터, 무인 분석 데이터 분석, 자동 오류 처리, 스냅샷 보기 및 배치 데이터 재처리 등 데이터 수집부터 분석까지의 통합 도구 제공

OpenLab 에코시스템

OpenLab CDS는 GC, GC/MSD, LC, LC/MSD는 물론 이제 LC/TOF 및 LC/Q-TOF까지 지원하는 단일 소프트웨어 플랫폼을 제공하여, 다양한 크로마토그래피 및 MS 워크플로 전반에 걸쳐 일관된 사용자 경험을 보장합니다(그림 1). 이 포괄적 솔루션은 실험실의 전체 수명 주기를 지원합니다.

- 기기 및 사용자 관리
- 데이터 수집, 분석 및 보고
- 고급 데이터 무결성 제어를 이용한 중앙 집중식 데이터 관리

내장된 규정 준수 기능은 데이터 무결성과 보안을 보호하고, 역할 기반 접근 권한을 관리하며, 데이터 생성의 모든 단계를 추적하고, 감사 추적 검토를 간소화할 수 있도록 지원하여 실험실이 엄격한 규제 요구 사항을 충족할 수 있도록 돕습니다.²

클라이언트-서버 구성

분산된 개별 워크스테이션 환경과 달리 OpenLab CDS 클라이언트-서버 구성(그림 2)은 기기, 워크스테이션 및 사용자를 하나의 통합된 환경³으로 연결하여 다음과 같은 이점을 제공합니다.

- 안전한 네트워크 연결 서버를 통한 중앙 집중식 데이터 저장 및 공유
- 사용자, 역할 및 기기 구성에 대한 중앙 집중식 관리
- 분석법, 시퀀스 및 템플릿에 대한 중앙 집중식 제어
- 유연한 하이브리드 근무 환경을 위한 원격 접근
- 서로 다른 위치에 있는 팀 간의 실시간 협업 지원
- 진행 중인 데이터 수집 작업 및 기기 상태에 대한 중앙 집중식 모니터링 지원

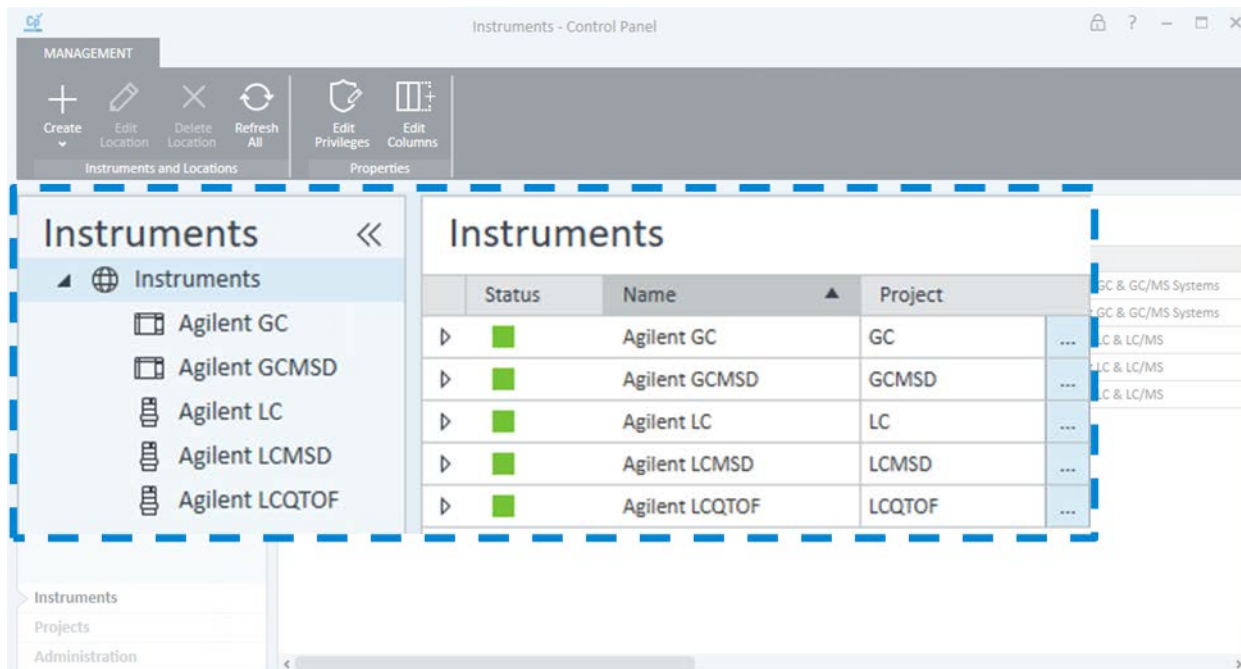


그림 1. OpenLab CDS 소프트웨어에 구성된 기기

고급 기능으로는 검증된 데이터 수집 분석법, 단백질 또는 올리고뉴클레오타이드 시퀀스, 그리고 화학 데이터 사전을 중앙에서 공유할 수 있는 기능이 포함되어 있어 모든 분석자가 단일 정보 소스를 기반으로 작업할 수 있습니다.

또한 OpenLab CDS 클라이언트-서버 배포 환경은 서버 연결이 일시적으로 중단되더라도 기기가 데이터를 계속 수집할 수 있도록 하며, 새로운 분석 작업을 제출할 수 있는 기능(예: LC/(Q-)TOF용 장애 극복)을 제공하여 운영 안정성을 향상시킵니다 (그림 3).

참고: LC/TOF 및 LC/Q-TOF의 경우, 장애 극복 모드에서는 무인 분석 데이터 분석 기능을 사용할 수 없습니다. LC/TOF 및 LC/Q-TOF 이외의 기기에 대한 이 모드의 자세한 정보는 해당 사용자 가이드에서 확인할 수 있습니다.⁴

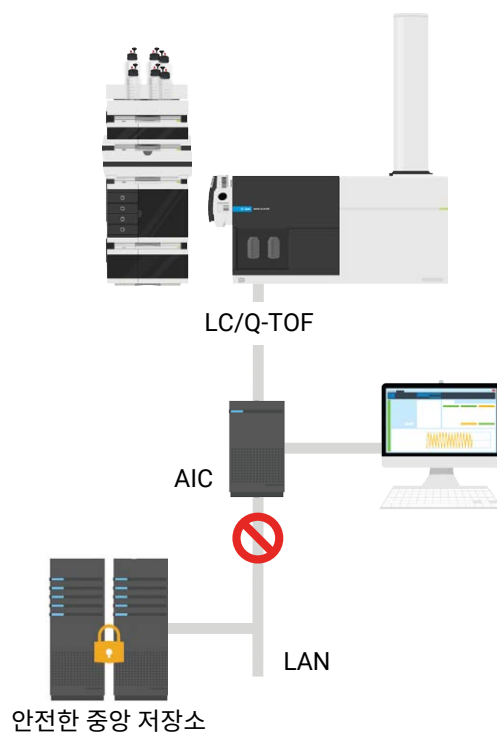


그림 3. 장애 극복 모드의 개략도(그림 2에 표시된 정상 운영 모드와 비교)

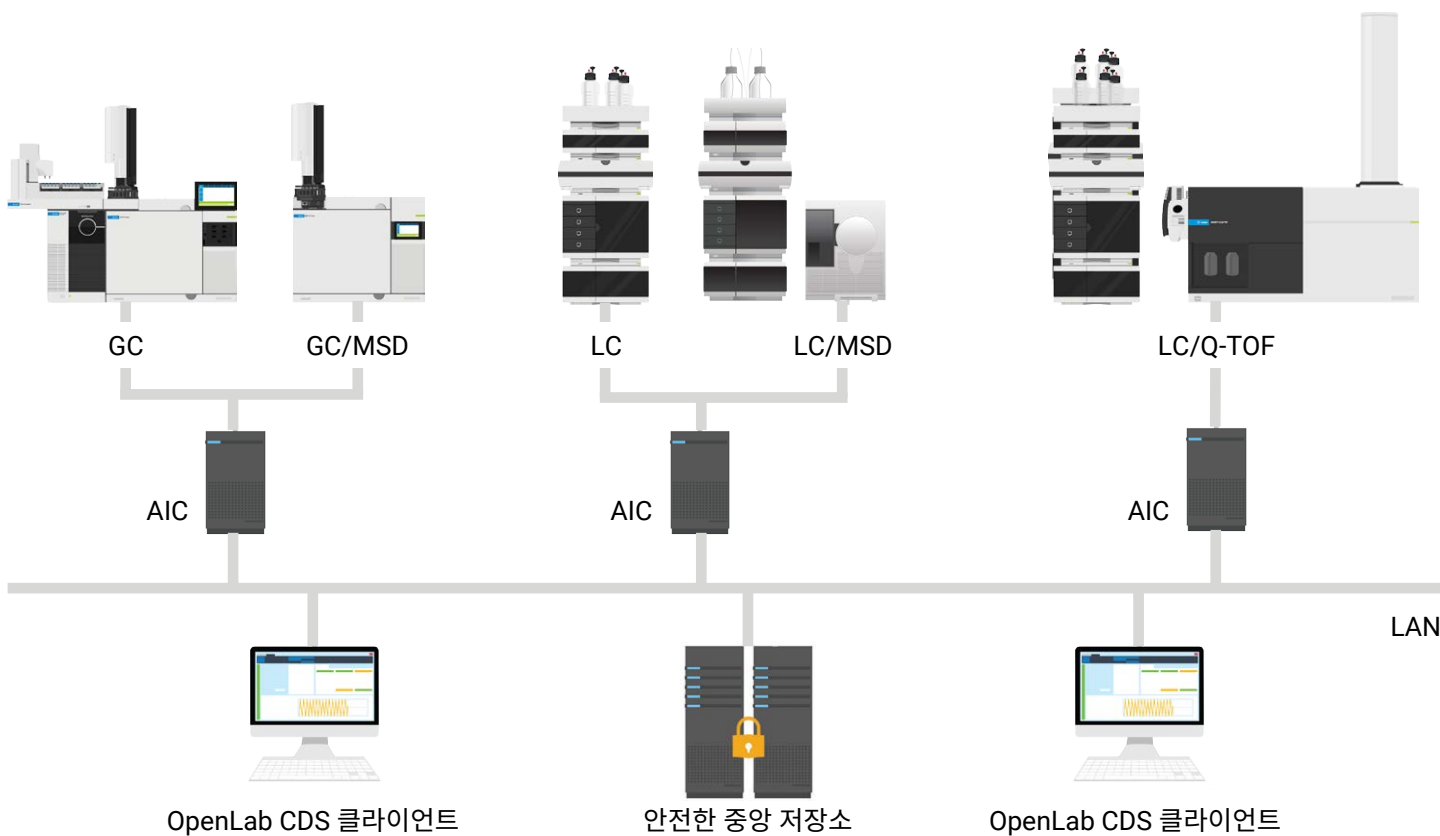


그림 2. 실험실 전반에 걸쳐 서로 다른 기기를 연결하는 클라이언트-서버 구성

OpenLab CDS에서 LC/(Q-)TOF 사용

OpenLab CDS에서 LC/(Q-)TOF를 사용하면 현재 제공되는 데이터 수집 기능을 활용할 수 있으며, 다음이 포함됩니다.

- 기기 상태 보기
- 응용 분야 기반 LC/(Q-)TOF 튜닝 및 검량 수행
- 기기 데이터 수집 파라미터 편집
- 분석용 시료 제출
- MassHunter Qualitative Analysis, MassHunter BioConfirm (옵션) 또는 OpenLab CDS용 MAM(옵션)을 사용하여 데이터를 자동으로 처리

그림 4에서는 상태 정보, 실시간 크로마토그램(신호) 및 스펙트럼 표시, 그리고 기기 실행 대기열을 포함하여 전체 시스템의 일부로 LC/(Q-)TOF를 확인할 수 있습니다.

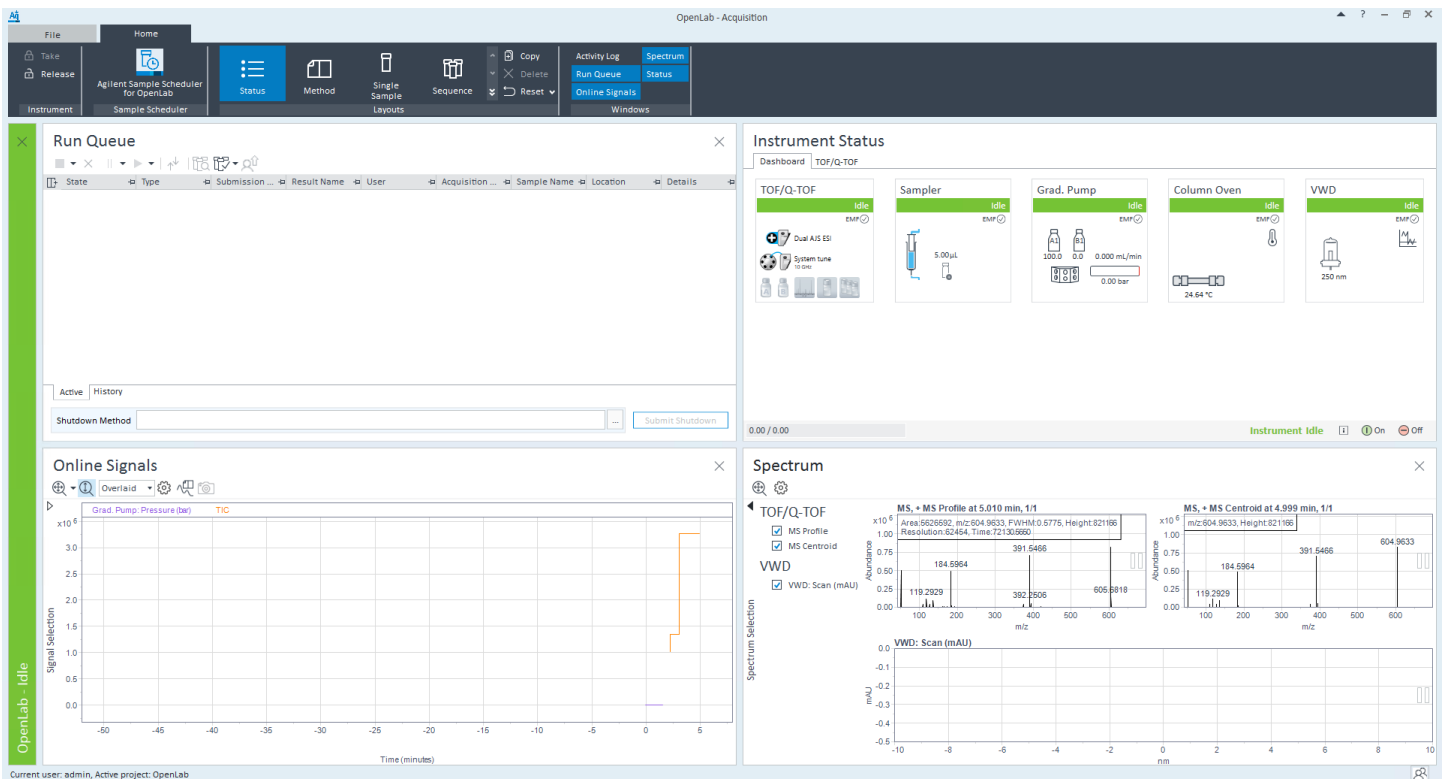


그림 4. OpenLab CDS의 LC/Q-TOF - 상태 레이아웃

LC/(Q-)TOF 상태

OpenLab CDS에서 LC/(Q-)TOF는 기기 상태를 종합적으로 확인할 수 있도록 지원하며, 에코 대기 모드 전환 및 보정액 유량 관리와 같은 일부 기능을 직접 제어할 수 있습니다(그림 5).

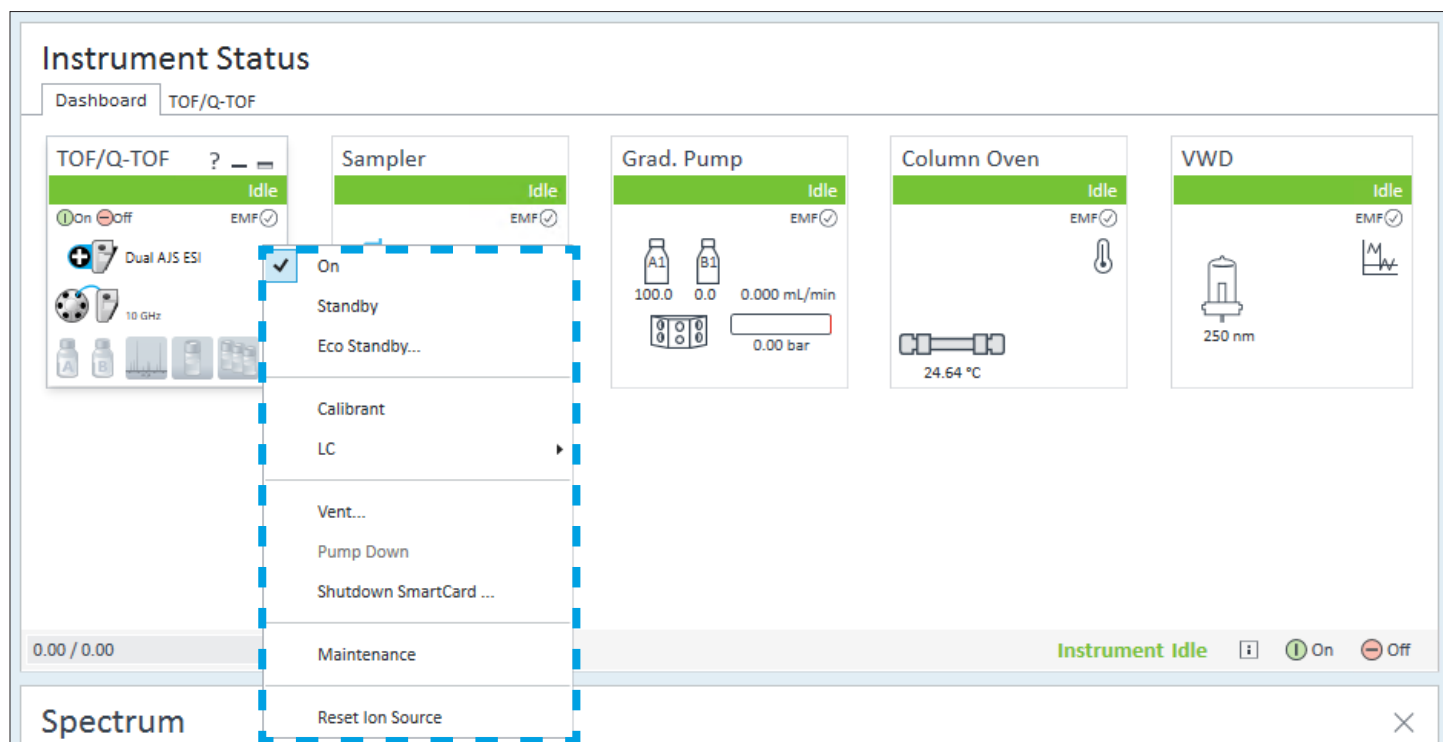


그림 5. OpenLab CDS의 기기 상태 창에 표시된 LC/(Q-)TOF 기기

실시간 데이터 보기

클라이언트-서버 환경에서는 여러 클라이언트가 스펙트럼 창에서 데이터 수집 성능에 영향을 주지 않고 실시간 HRMS 스펙트럼을 독립적으로 확인하고, 확대/축소하며, 표시 설정을 조정할 수 있습니다. 또한 클라이언트는 온라인 신호 창에서 총 이온 크로마토그램(TIC) 및 펌프 압력과 같은 다른 기기 신호도 확인할 수 있습니다. 서로 다른 클라이언트 창에서 동일한 분석 실행을 확인하는 두 사용자는 HRMS 스펙트럼 표시를 각각 독립적으로 제어할 수 있습니다(그림 6).

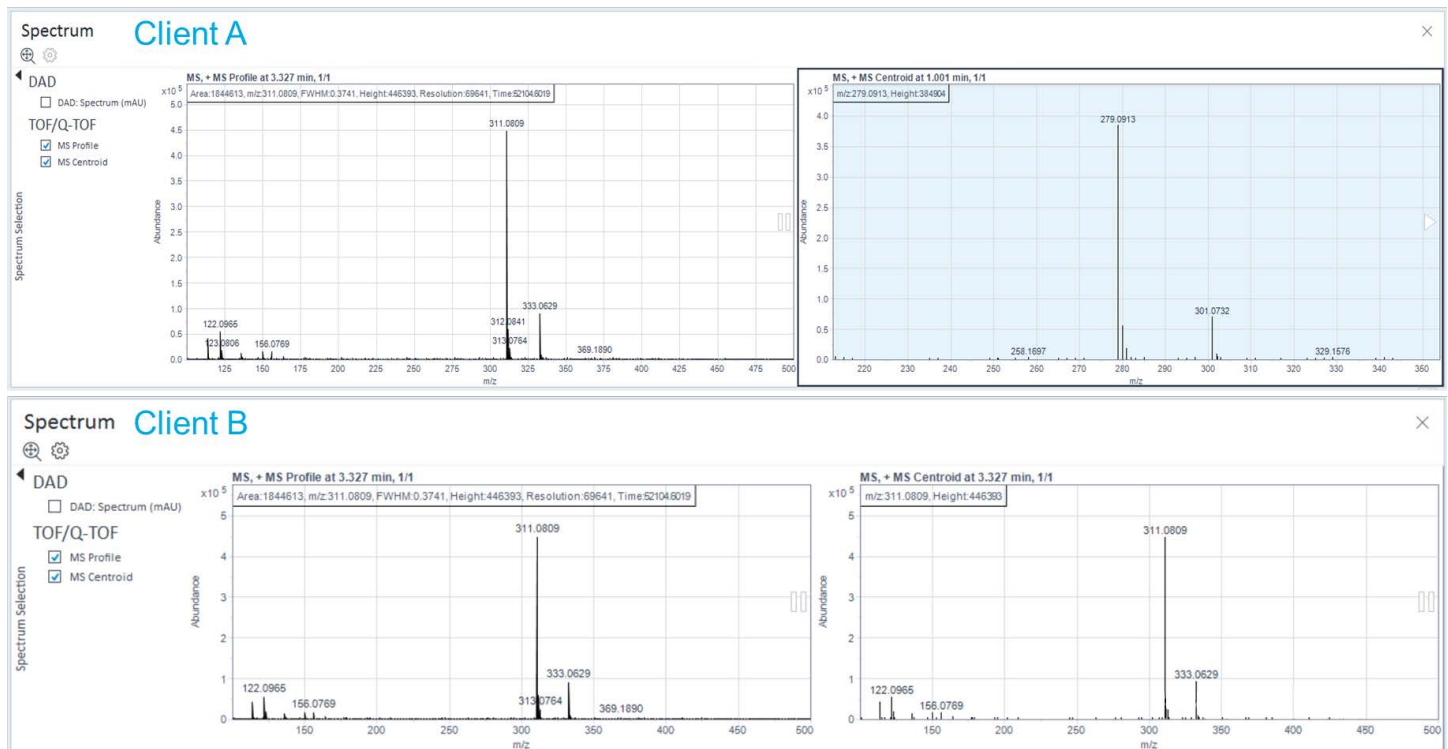


그림 6. 클라이언트 A(상단)와 클라이언트 B(하단)에서 동일한 시점에 캡처한 실행 중 시료의 실시간 질량 스펙트럼. 클라이언트 A는 일시 정지 후 중심 스펙트럼을 확대해서 보고 있는 반면, 클라이언트 B는 전체 스펙트럼을 실시간으로 계속 보고 있습니다.

최적화된 응용 분야 기반 기기 튜닝

LC/Q-TOF 기기는 최적의 성능을 위해 정밀한 튜닝이 필요하며, 특히 설치, 유지보수, 펌프다운 또는 재시작 후에 이러한 튜닝이 중요합니다. OpenLab CDS는 데이터 수집 소프트웨어 내에서 다음과 같은 다양한 튜닝 옵션을 제공합니다.

- 완전 자동 최적화를 위한 autotune
- 신속하고 정확한 질량 할당을 보장하는 질량 검량
- 극성(양이온/음이온) 및 m/z 범위와 같은 응용 분야별 설정을 선택하기 위한 구성 튜닝
- 전문가 수준의 성능 조정을 위한 고급 튜닝
- 문제해결 및 성능 검증을 위한 진단 튜닝

사전 구성된 응용 분야 기반 튜닝은 스케줄링 기능(Agilent Revident LC/Q-TOF에서 사용 가능)과 결합되어, 그림 7에 표시된 것처럼 사용자 간 일관성을 유지하면서 최소한의 가동 중단으로 성능을 최적화할 수 있도록 지원합니다. 또한 실험실 관리자는 서로 다른 권한 수준을 가진 모든 사용자를 위해 기기를 적절하게 구성할 수 있습니다.

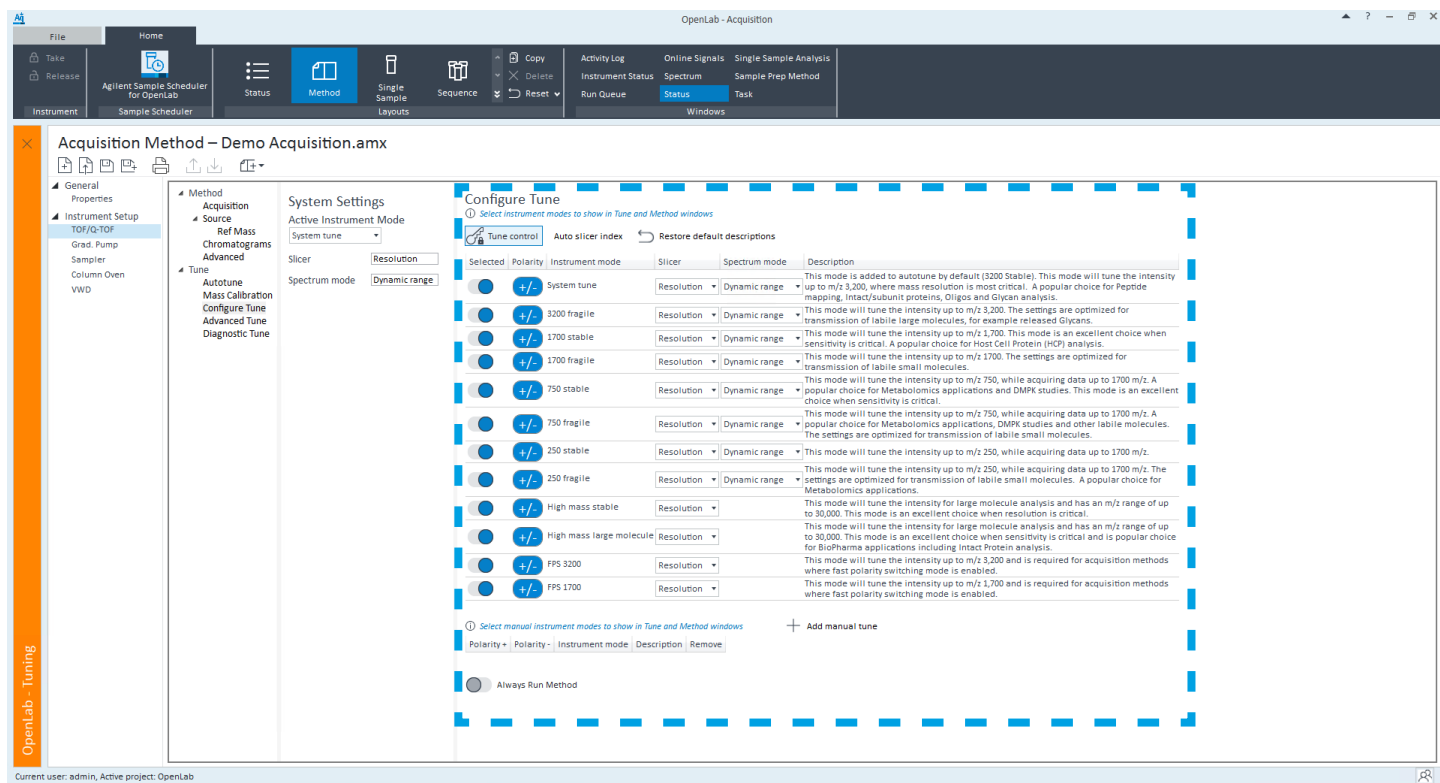


그림 7. 애질런트 LC/Q-TOF 기기의 튜닝 옵션

지원되는 데이터 수집 모드

OpenLab CDS의 LC/(Q-)TOF는 다양한 분석 워크플로에 맞춰 설계된 7가지 데이터 수집 모드를 지원합니다.

- **MS:** 이온 분리 없이 전체 스펙트럼 수집
- **고속 극성 전환:** 서로 다른 극성 간의 빠른 전환을 위해 저항성 캐필러리 사용

LC/Q-TOF만 해당:

- **모든 이온:** 사중극자 분리 없이 설정된 충돌 에너지에서 모든 조각 이온 수집
- **Q-RAI(Quadrupole-Resolved All Ions):** 넓은 m/z 범위를 분리하여 사후 분석을 가능하게 하고 동시용리 조각으로 인한 노이즈를 줄임(하드웨어 종속)

- **Auto MS/MS:** MS와 MS/MS를 번갈아 수행하는 데이터 의존적 획득 방식으로, 전구체 이온을 동적으로 선택
- **Directed MS/MS:** 우선순위 이온 목록으로 제한된 데이터 의존적 획득 방식
- **Targeted MS/MS:** 사용자가 정의한 특정 이온에 대해 재현성 있는 분리 및 파편화 수행

이러한 모드는 탐색적 분석부터 고도로 표적화된 응용까지 모두 지원하여, 분석자가 변화하는 프로젝트 요구 사항에 유연하게 대응할 수 있도록 합니다. 고속 극성 전환 모드를 제외한 모든 모드를 그림 8에 표시되어 있습니다. 고속 극성 전환 모드는 이온화원에 저항성 캐필러리가 설치된 경우에만 사용할 수 있습니다.

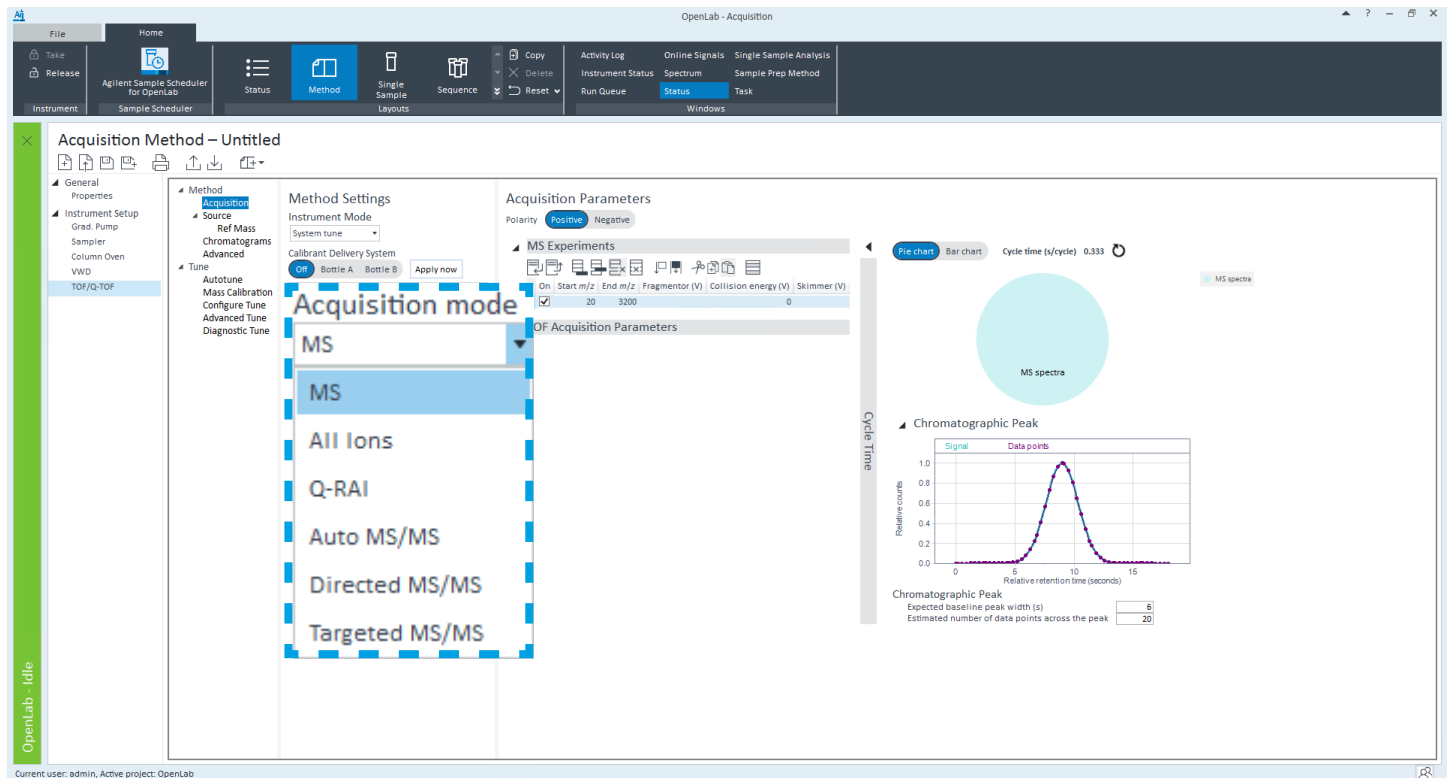


그림 8. 애질런트 LC/Q-TOF 기기의 데이터 수집 모드

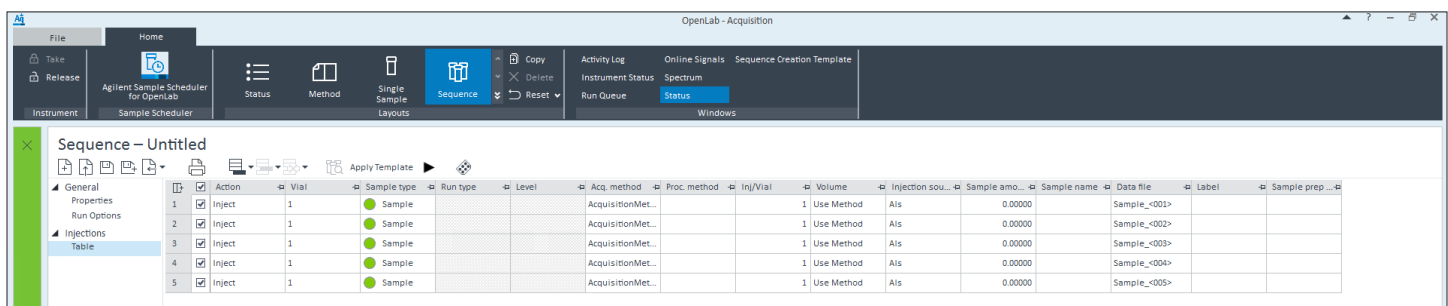


그림 9. OpenLab CDS 시퀀스 테이블

데이터 수집

OpenLab CDS는 애질런트 LC, GC, SQ LC/MSD, GC/MSD 기기 및 LC/(Q-)TOF를 제어할 수 있는 단일 사용자 인터페이스를 제공합니다. OpenLab CDS 시퀀스 테이블 그림 9)을 사용하면 다음 작업을 수행할 수 있습니다.

- **동작 정의:** 시료 주입, 대기, 작업 또는 Iterative(반복) MS/MS
- **시료 정보 입력:** 바이알 번호, 시료 유형 및 반복 횟수(Inj/Vial)
- **지정:** 수집 방법 및 데이터 처리 방법
- **추가 시료 사용자 지정 파라미터 입력:** MassHunter Qualitative Analysis 및 BioConfirm용 시료 사용자 지정 파라미터

향상된 시퀀스 관리

LC/(Q-)TOF 워크플로를 지원하기 위해 OpenLab CDS는 다음과 같은 향상된 시퀀스 기능을 제공합니다.

- **대기 동작:** 실행 간에 시퀀스를 수동 또는 자동으로(지정된 시간 이후 또는 지정된 시간까지) 일시 중지했다가 다시 시작합니다.
- **작업 동작:** 시퀀스 실행 중 검량 또는 종료와 같은 사전 정의된 기기 작업을 수행합니다.

- **Iterative(반복) MS/MS(LC/Q-TOF 전용):** 시료 특성 규명을 향상시키기 위해 사용되는 고급 MS/MS 워크플로입니다.⁵

- **종료 방법:** 모든 시료 분석이 완료된 후 수행할 종료 동작을 정의합니다.

대기 동작을 사용하면 사용자가 시퀀스 내 실행 간에 지정된 대기 시간을 추가할 수 있습니다. 대기 동작은 4가지 방식으로 구성할 수 있습니다(그림 10참조).

작업 동작은 사용자가 시퀀스의 어느 시점에서든 기기 작업을 정의하고 실행할 수 있도록 지원합니다. 질량 측 검량이나 기기 전원 켜기/끄기와 같은 작업을 그림 10에 표시된 것처럼 시퀀스 테이블에 추가할 수 있습니다.

Iterative(반복) MS/MS 워크플로 그림 10)는 고농도 전구체 이온을 반복적으로 제외하면서 저농도 전구체 이온의 데이터 수집을 가능하게 하여 식별 성능을 향상시킵니다.⁶

종료 방법은 실행 대기열에 제출할 수 있으며, 최종 실행 항목으로 배치됩니다. 실행 대기열에 종료 방법이 추가된 경우, 실행 대기열의 다른 모든 실행이 완료된 후 LC 기기가 자동으로 종료됩니다. 예를 들어 펌프를 대기 모드로 전환하고 오븐과 UV 램프를 끄는 작업이 수행됩니다.

The screenshot displays the OpenLab - Acquisition Sequence editor. The main table lists sequence steps with columns for Action, Vial, Sample type, Acq. method, TOF/Q-TOF: It..., Inj/Vial, Volume, Injection so..., Level, Run type, Sample am..., Proc. method, and Data file. The sequence includes an initial Inject, followed by a Wait step, and then four Iterative MS/MS steps. Below the table, the 'Wait' and 'Task' configuration panels are visible. The 'Wait' panel shows options for 'Wait until manually resumed', 'Automatically resume after' (with a time input), and 'Automatically resume at' (with a time and time zone input). The 'Task' panel shows a dropdown menu for selecting a task, currently set to 'EcoStandby.tmx'. At the bottom, there are fields for 'Result path' and 'Result name', a 'Save result as' dropdown, and 'Validate' and 'Run' buttons.

그림 10. 시퀀스 테이블에는 시료, 작업 라인 및 대기 라인이 표시되어 있으며, 상단 영역에서 강조되어 있습니다. 하나의 시료가 Iterative(반복) MS/MS 워크플로를 사용하여 실행 중인 상태로 표시됩니다. 좌측 하단 영역과 우측 하단 영역은 각각 대기 동작과 작업 동작을 강조하여 보여줍니다.

시퀀스 생성

시퀀스 생성 템플릿은 새로운 시퀀스를 생성하기 위한 유연한 패턴을 정의하는 강력한 도구입니다. 특히 10회 주입마다 QC 시료를 배치하는 것과 같이 반복 원소가 포함된 시퀀스를 생성할 때 매우 유용합니다 (그림 11).

OpenLab CDS에서는 토큰을 사용하여 시료 이름, 주입 번호, 주입 날짜 및 시간과 같은 시료 정보 및 기타 필드를 기반으로 시료 또는 파일 이름을 동적으로 생성할 수 있습니다.

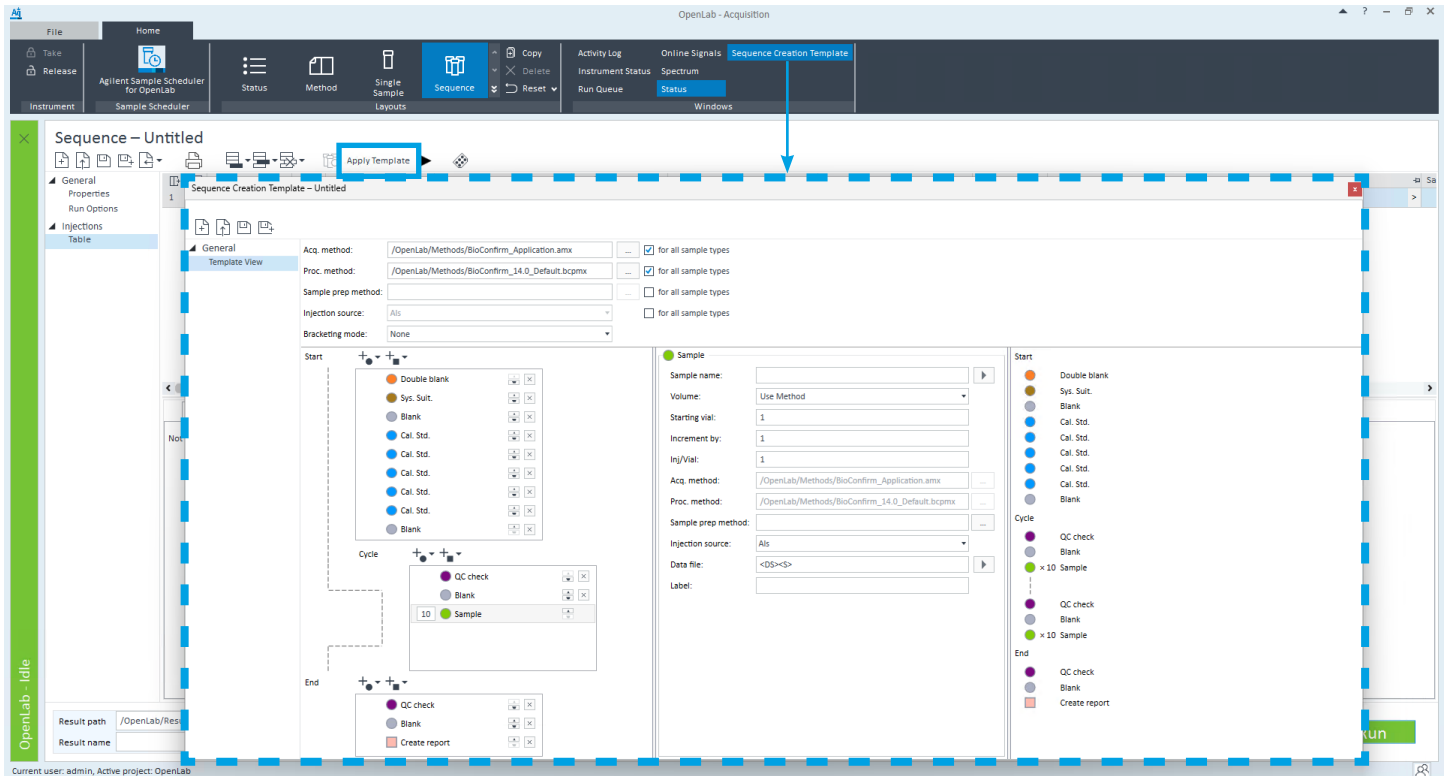


그림 11. 시퀀스 생성 템플릿 편집기. 다점 검량 후 10개 시료마다 반복적으로 수행되는 QC 점검이 표시되어 있습니다.

데이터 수집과 데이터 처리의 연결

OpenLab CDS는 다음을 통해 MassHunter Qualitative Analysis 및 BioConfirm과 원활하게 통합됩니다.

- 데이터 수집 단계에서 처리 파라미터를 정의할 수 있는 시료 사용자 지정 파라미터
- 데이터 수집과 처리를 비동기적으로 수행할 수 있는 무인 분석 데이터 분석
- 처리 실패 시 데이터 수집을 일시 중지하거나 계속 진행할 수 있도록 하는 오류 처리 규칙
- 부분적으로 수집된 데이터를 조기에 확인할 수 있는 스냅샷 보기
- 수동 개입 없이 배치 재처리를 수행할 수 있는 재처리 도구

시료 사용자 지정 파라미터를 사용하면 특정 시료에 대해 처리 분석법의 파라미터를 수정할 수 있습니다. 사용자 정의 파라미터 외에도 MassHunter Qualitative Analysis 및 BioConfirm에는 고급 DA 옵션에서 구성할 수 있는 사전 정의된 파라미터 세트가 제공됩니다. 실험실에서는 어떤 파라미터를 사용할 수 있는지, 해당 파라미터의 입력이 필수인지 여부, 그리고 시퀀스 테이블에서 어떻게 표시할지를 정의할 수 있습니다. (그림 12).

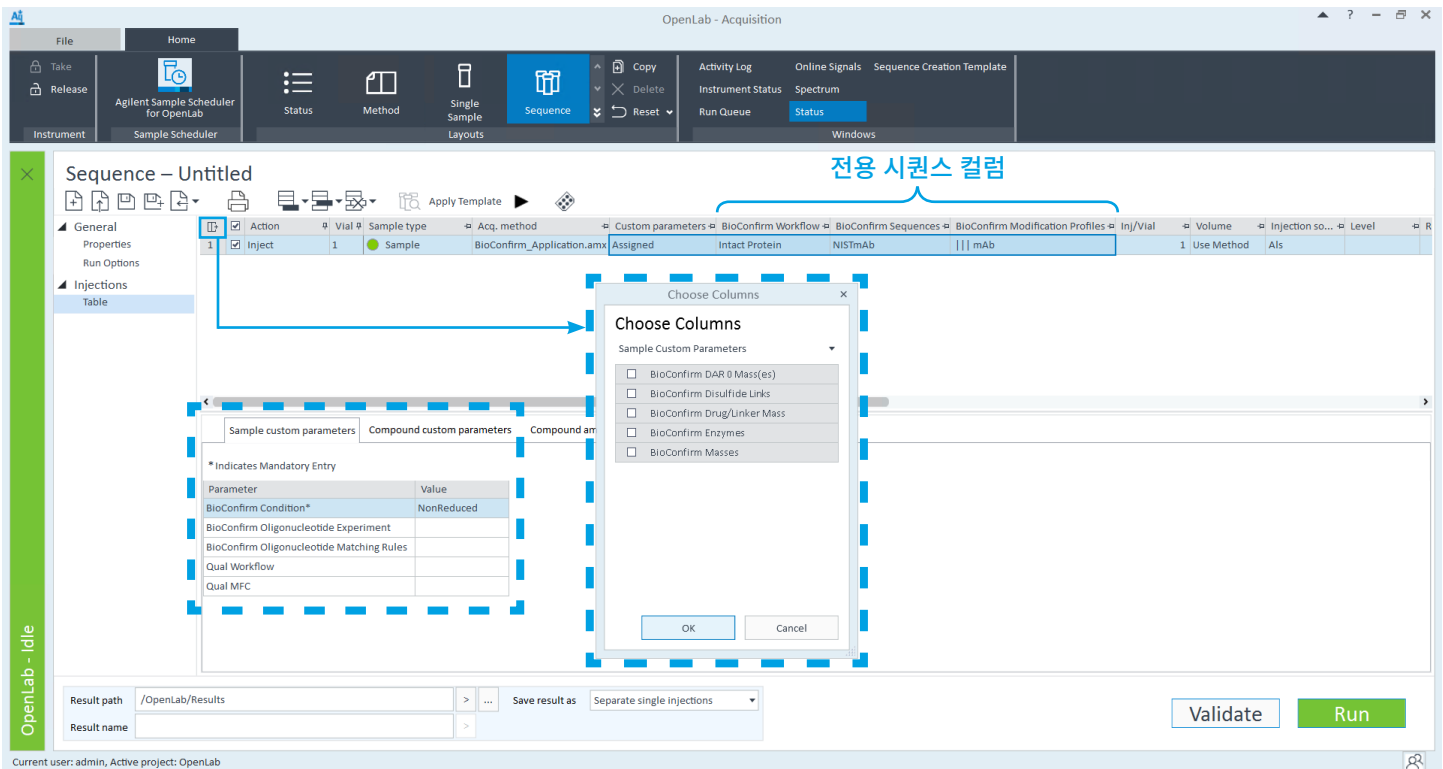


그림 12. MassHunter Qualitative Analysis 및 BioConfirm의 시료 사용자 지정 파라미터 표시 옵션: 시료 사용자 지정 파라미터 컬럼 내에 표시하거나, 별도의 시퀀스 컬럼으로 표시할 수 있습니다.

무인 분석 데이터 분석 기능을 사용하면 시퀀스 내의 각 실행이 완료된 직후, 사전 정의된 MassHunter Qualitative Analysis, BioConfirm 또는 MAM 처리 분석법을 사용하여 시료를 자동으로 처리할 수 있습니다. (그림 13).

참고: 사용자는 시퀀스 실행 중 발생할 수 있는 오류를 처리하기 위해 여러 옵션을 사용할 수 있으며, 그중에는 **On Error, Pause After Current Injection**을 선택하는 기능도 포함됩니다.

스냅샷 기능 (그림 14)을 사용하면 현재 데이터 수집이 진행 중인 시료의 데이터를 추출하여 MassHunter Qualitative Analysis 소프트웨어에서 확인할 수 있습니다.

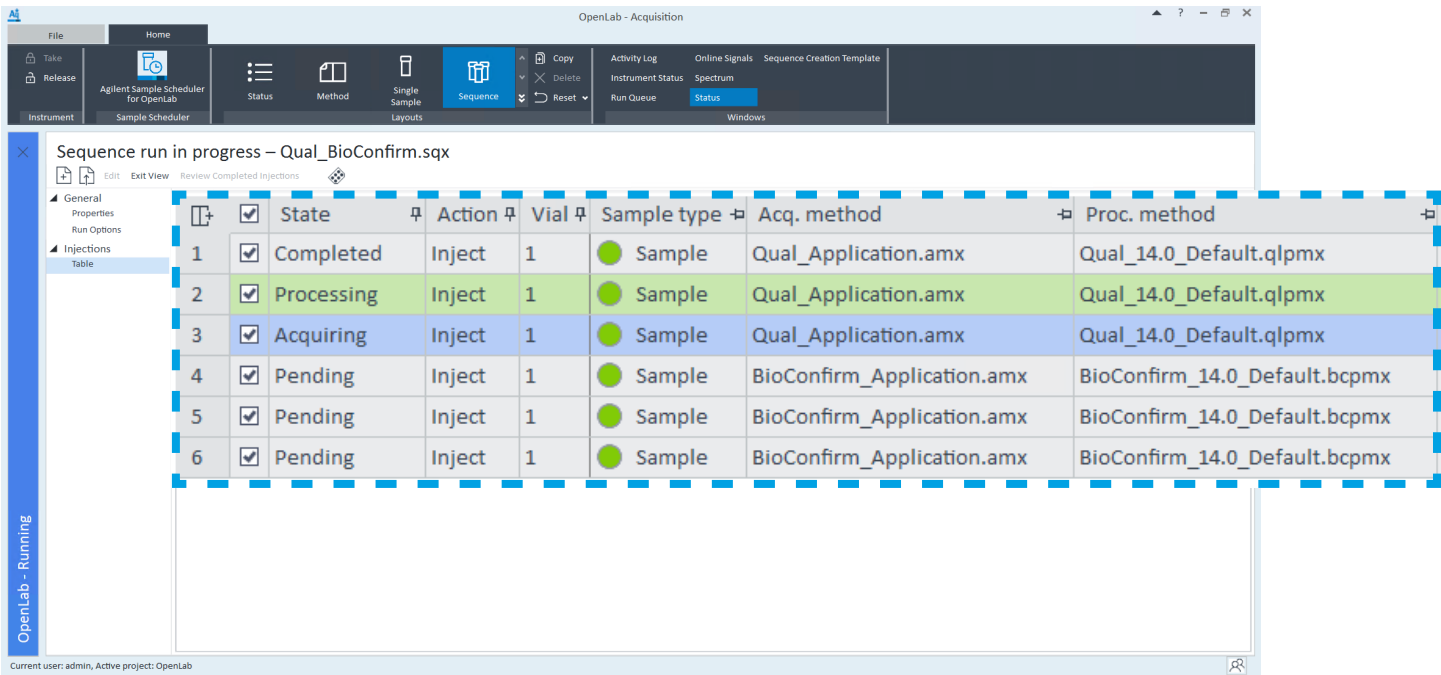


그림 13. MassHunter Qualitative Analysis 및 BioConfirm 처리 분석법이 혼합되어 있는 OpenLab 시퀀스

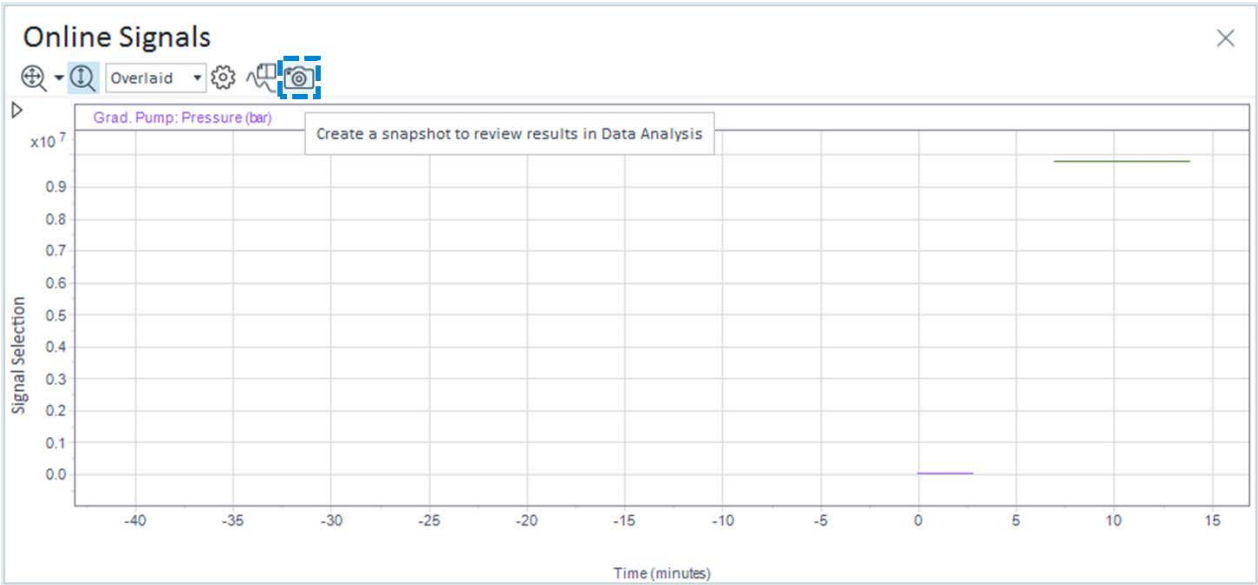


그림 14. 온라인 신호 창 의 스냅샷 버튼

재처리 도구를 사용하면 MassHunter Qualitative Analysis 또는 BioConfirm 소프트웨어와의 상호작용 없이 여러 단일 주입 데이터 파일(.sirslt)을 자동으로 재처리할 수 있습니다 (그림 15). 이러한 기능은 수동 개입을 줄이고, 데이터 처리 소요 시간을 단축하며, 데이터 수집부터 결과 도출까지 일관되고 자동화된 파이프라인을 제공합니다.

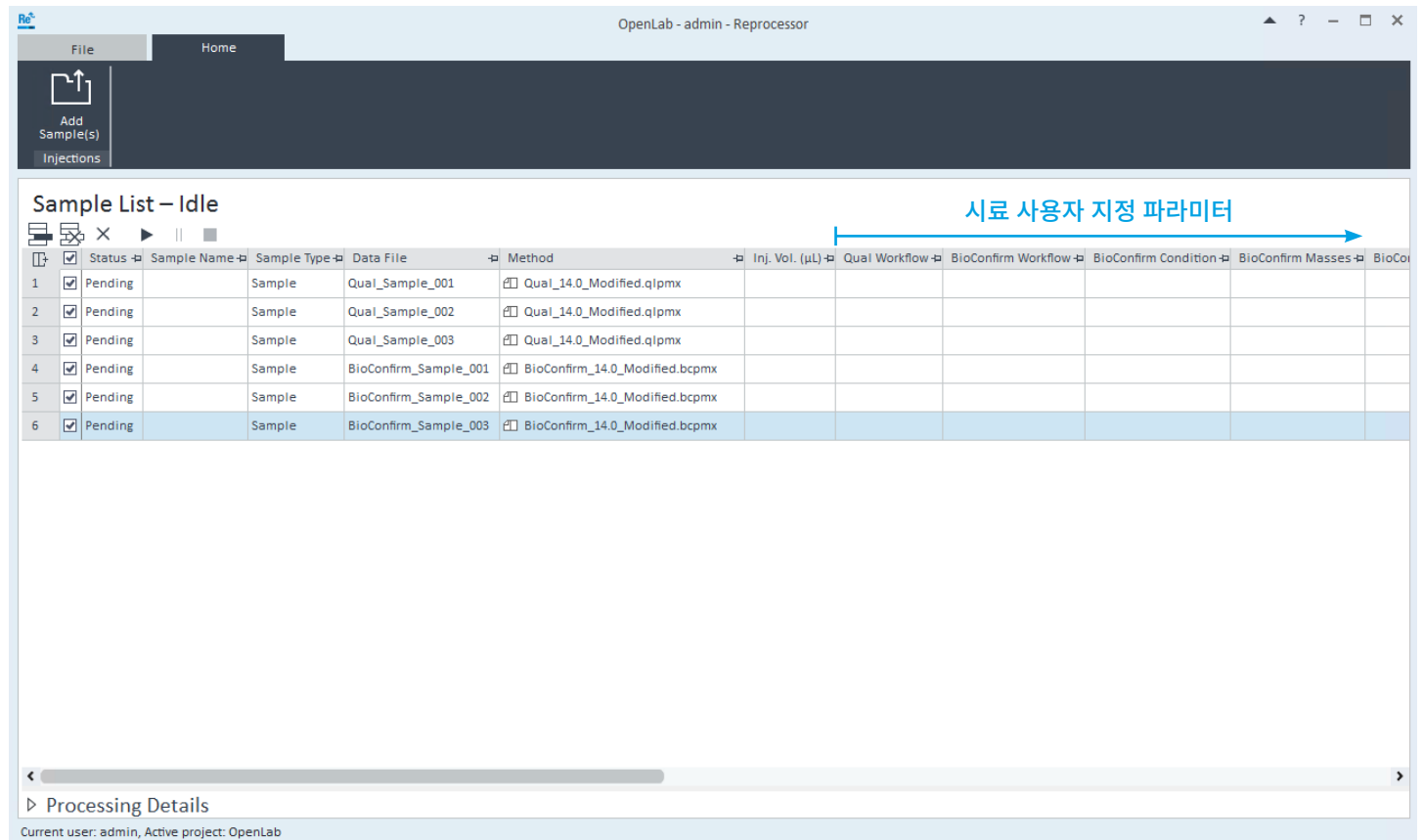


그림 15. 재처리 도구 보기

결론

Agilent OpenLab 에코시스템은 LC/TOF 및 LC/Q-TOF 기기까지 지원 범위를 확장합니다. 이 새로운 에코시스템은 다음과 같은 이점을 제공합니다.

- 크로마토그래피와 질량 분석을 위한 하나의 일관된 플랫폼
- 글로벌 실험실 네트워크 전반에서 확장 가능한 협력적 지원 환경 제공
- 간소화된 관리와 호환성을 위한 통합 데이터 형식
- 규제 요구 사항 충족을 위한 강력한 컴플라이언스 기능
- 데이터 수집부터 분석 및 보고까지 간소화된 워크플로

참고 자료

1. **OpenLab Help & Learning**
2. Support for Title 21 CFR Part 11 and Annex 11 Compliance: Agilent OpenLab CDS, *Agilent Technologies white paper*, publication number 5994-3659EN, **2024**.
3. The Business Value of the Connected Lab, *Agilent Technologies white paper*, publication number 5994-8021EN, **2025**.
4. OpenLab CDS v2.8 Acquisition Failover Users Guide, *Agilent Technologies*, publication number D0028026 Rev. B, **2025**.
5. In-depth Peptide Mapping with Iterative MS/MS Acquisition on the Agilent 6545XT AdvanceBio LC/QTOF, *Agilent Technologies application note*, publication number 5991-8633EN, **2020**.
6. Boost Efficiency and Productivity with Instrument Intelligence and Workflow Automation, *Agilent Technologies technical overview*, publication number 5994-7430EN, **2024**.

www.agilent.com

DE-013843

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2026
2026년 5월 7일, 한국에서 발행
5994-9138KO

한국에질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
DF타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090(고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com