

# LC、LC/MS 向けのオープンアクセスソフトウェア Agilent MassHunter WalkUp ソフトウェア

医薬品やペプチド/タンパク研究、  
生物学に最適な信頼性の高い LC/MS を実現





## 1つのユーザーインターフェースによる 堅牢なオープンアクセス LC と LC/MS 分析

お客様のニーズに応える、LC および LC/MS ユーザー向けのオープンアクセスソフトウェアがリリースされました。

Agilent MassHunter WalkUp ソフトウェアは、Agilent OpenLab CDS ChemStation Edition、OpenLab CDS 2.X、MassHunter が制御する LC と LC/MS (LC/MSD、TOF、Q-TOF) にアクセスして、管理するためのソフトウェアです。

次のようなアプリケーションにする機能を備えています。

- サンプル純度の測定、化合物の確認、化学反応結果の確認、組成式の生成または確認、低分子またはペプチドの高分解能精密質量測定
- ペプチドおよび高分子治療薬の特性解析。インタクトタンパク質、ペプチド、抗体薬の複合体 (ADC) の分析、ペプチド/ADC/インタクトタンパク質の相対定量の実行、分子量とシーケンスカバレッジの確認、ADC の薬物抗体比 (DAR) の計算など
- UV や MS のシグナルをベースにしたフラクション (分取) のコレクション

### MassHunter WalkUp 対応機器：

|                                        | OpenLab<br>CDS 2.X | OpenLab<br>ChemStation<br>Edition | MassHunter |
|----------------------------------------|--------------------|-----------------------------------|------------|
| WalkUp 4.0 によるターゲット確認                  | •                  | •                                 | •          |
| WalkUp 4.0 による純度確認                     | •                  | •                                 |            |
| WalkUp 4.0 による MS ベースの<br>フラクションコレクション |                    | •                                 |            |
| WalkUp 4.0 と BioConfirm の関係            |                    |                                   | •          |
| WalkUp 4.0 による ASR ファイルの<br>エクスポート     |                    | •                                 | •          |

# シンプルで便利なサンプルサブミット

MassHunter WalkUp ソフトウェアを使用すれば、  
次の 4 ステップの操作で簡単にサンプルをサブミットすることができます。

## 1.ログイン

ユーザー名、パスワード（オプション）、  
ワークフロー、サンプル数を入力します。

## 2.メソッドの選択

サンプルの詳細を入力し、リストから  
メソッドを選択します。

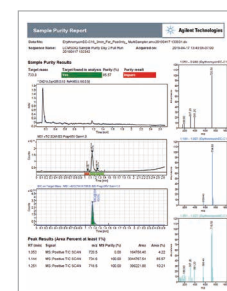
## 3.サンプルのセット

サンプルを所定の場所に  
配置します。

従来のオープンアクセス画面も引き  
続き使用できます。表示する画面の  
形式はシステムごとに設定できます。

## 4.レポートの受信

PDF、ASR、Excel などの形式を  
選択します。

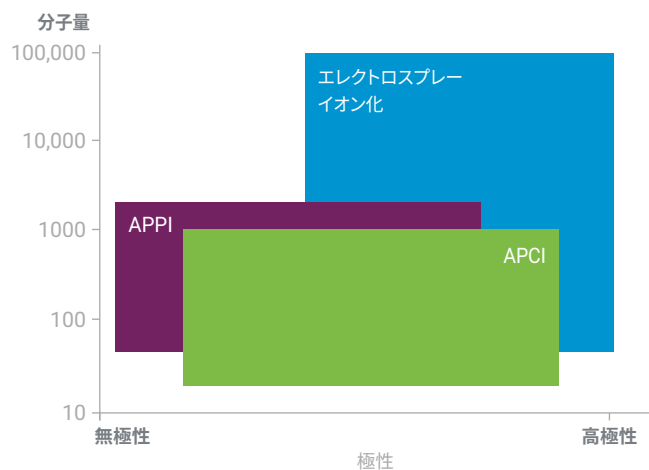


# サンプル中の化合物を より多く検出

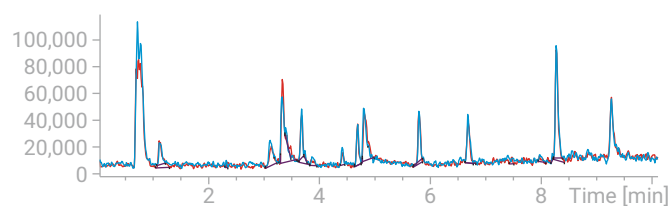
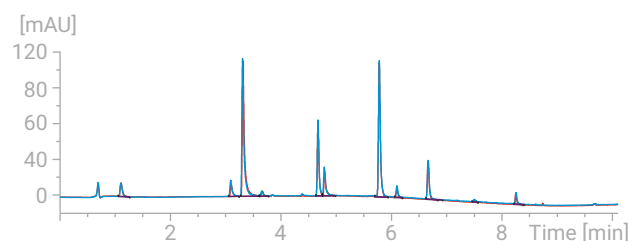


## アジレントの充実した LC/MS ポートフォリオにより、 不確定な分析対象物のワークフローにも対応できます。

- － イオン源の種類：ESI、APCI、APPI、またはマルチモード（APCI+ESI）
- － 高速ポジティブ/ネガティブ切り替えにより、シャープな UHPLC ピークを実現
- － 低濃度化合物の高感度検出
- － 切り替えバルブにより汚染を低減
- － サンプルサブミットと使用済みバイアルの自動廃棄用の外部トレイ
- － 質量ベースのフラクションコレクション
- － 日本語および中国語対応のサンプルサブミット画面



分析対象物の種類に合わせて複数のイオン化技法を選択できます。



アジレントの LC/MS は、リテンションタイム、ピーク面積、ピーク分離、質量精度などの再現性に優れています。ここでは、シングル四重極 LC/MS システムでの繰り返し注入の結果を表示しています。



# MassHunter WalkUp の利点



## MassHunter WalkUp はサンプルサブミットが容易で、LC/MS の経験に関係なく誰でもすぐに LC/MS 機能を使用できます

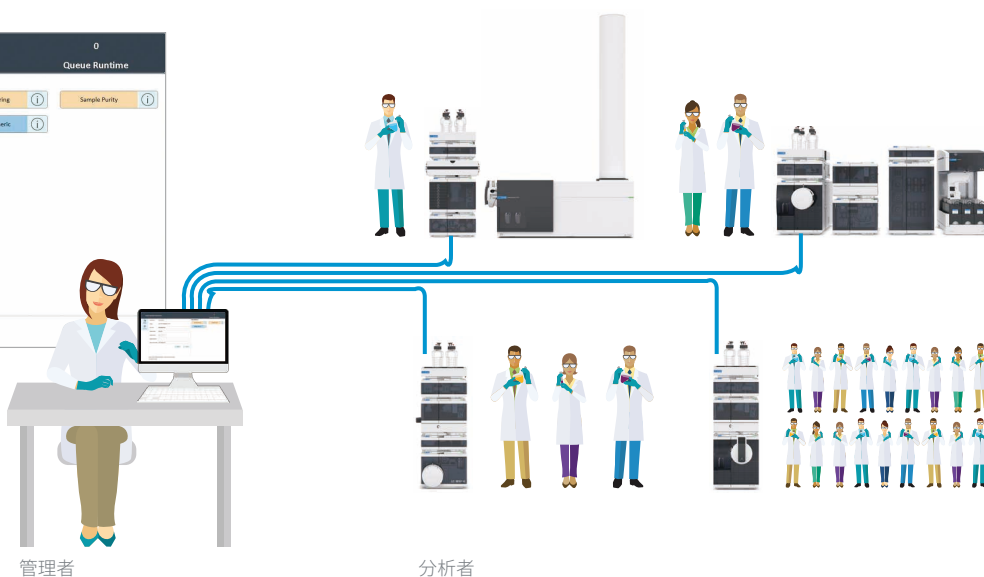
初心者でも次の機能が使用できます。

- － サンプルの前処理、処理、保管のコントロール
- － 幅広いアプリケーションの利用：
  - － サンプル純度
  - － 化合物の確認
  - － クローンの選択
  - － 成分の最適化
  - － 共有結合的阻害剤の調査
  - － MS ベースのフラクションコレクション
- － サンプルサブミット時の、プロテインのシーケンスおよび薬剤-リンカー質量の受け取り
- － データ測定の一貫性を確保し、スペクトルデコンボリューション（疑 1 次速度定数など）を実行して、信頼性の高い比較研究を実施

## 生体分子分析における オープンアクセス LC/MS 導入の 課題を克服

MassHunter WalkUp と MassHunter BioConfirm を統合すれば、TOF および Q-TOF による高分解能測定の特長を十分に研究へ活用できます。以前は低分子分析のみに使用されていたオープンアクセス環境を生物学にも使用できます。このため、リスクを低減するとともに効率性が向上し、測定結果を自動的に解釈できるようになりました。

複数のユーザーと機器が共存する環境で、オープンアクセス施設を簡単に管理できます。

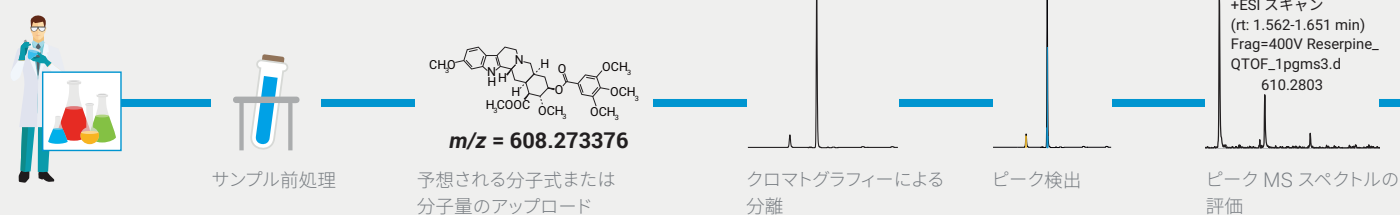


# 多数のアプリケーションを 1つのソリューションで一元管理

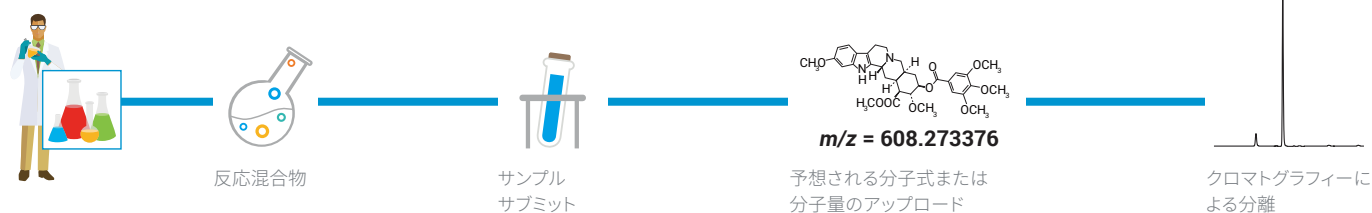


MassHunter WalkUp で LC アプリケーションや LC/MS アプリケーションを管理すると、完全自動化ソリューションによって効率性、一貫性、スループットが向上します。また、さまざまなワークフローの管理に伴うエラーを最小限に抑えることができます。

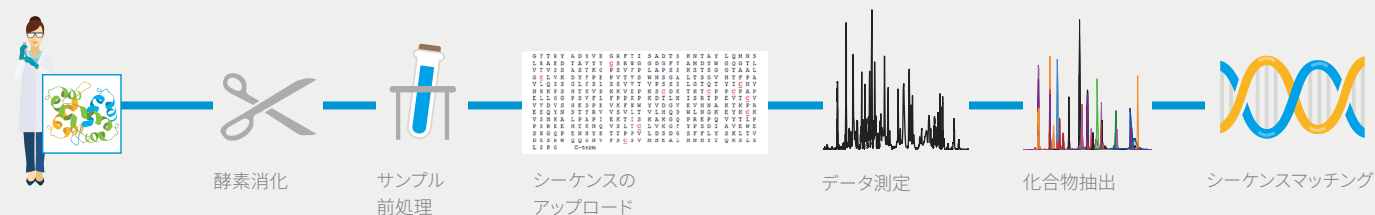
## 化合物の確認と純度評価



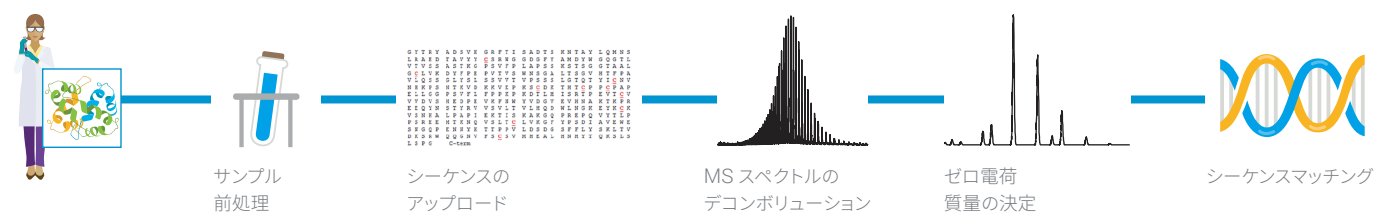
## 質量ベースのフラクションコレクション



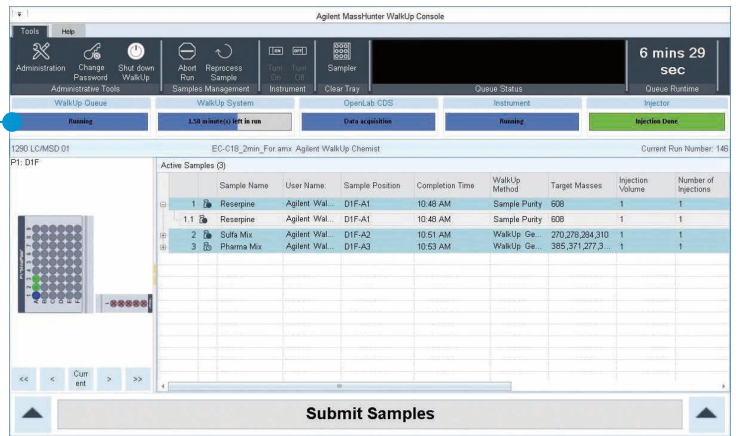
## ペプチドマッピング



## インタクトプロテイン分析



新しい MassHunter Walkup のユーザー  
インタフェースから、機器のキューの状況を  
常に把握できます。

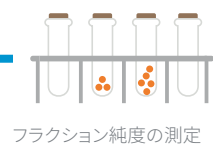


608.273376 + 1  
v.  
609.2771

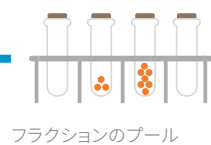
予想されるモノアイソトピック  
質量と観測された  $m/z$  を、  
付加体を考慮した上で比較



Analytical Studio Reviewer  
ソフトウェアによるハイスルー  
プットな化合物の純度評価



フラクション純度の測定



フラクションのプール

2\*G0F (NGA2F)  
(+1445.3580)  
2\*G1F  
(+1607.5013)  
1\*G1F/G2F  
(+3377.1458)

翻訳後修飾 (PTM) の決定

|     |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |     |
|-----|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|-----|
| 176 | T | E | S | S | Y | T | T | P | S | E | S | G | 190 |
| 191 | T | T | L | C | H | S | S | I | P | S | T |   | 205 |
| 206 | T | R | H | E | T | R | E | K | A | C | H | E | 220 |
| 223 | T | C | P | P | C | P | A | P | S | L | L | G | 235 |
| 236 | T | F | L | P | P | P | R | K | S | T | L | M | 250 |
| 251 | T | T | P | P | T | C | V | V | P | D | T | S | 265 |
| 266 | D | P | R | E | T | P | H | E | T | P | D | T | 280 |
| 281 | S | H | A | K | T | P | P | S | S | E | Q | T | 295 |
| 296 | T | R | V | S | Y | L | S | V | L | H | Q | D | 310 |
| 311 | H | O | R | E | T | E | C | T | V | H | A | L | 325 |
| 326 | A | P | T | I | E | T | L | I | S | A | H | O | 340 |
| 341 | E | P | O | V | T | L | P | P | A | R | R | O | 355 |

シーケンスカバレッジ

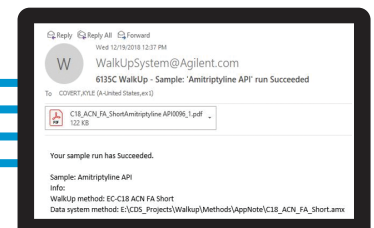
2\*G0F (NGA2F)  
(+1445.3580)  
2\*G1F  
(+1607.5013)  
1\*G1F/G2F  
(+3377.1458)

翻訳後修飾 (PTM) の決定



オプションの ADC  
DAR 計算

メールの通知などによる分析結果の送付



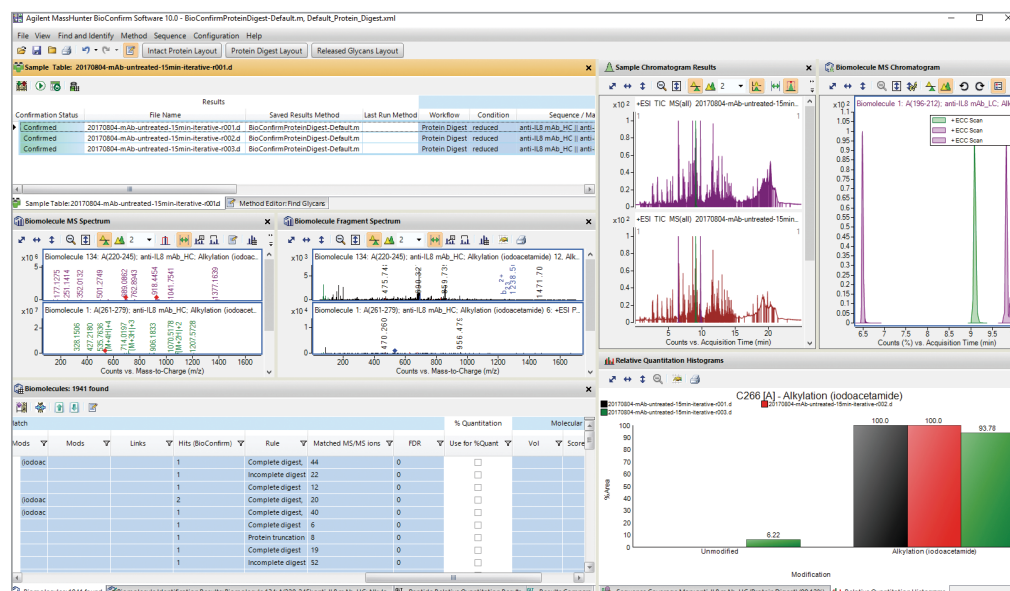
レポート作成

# LC/MS を使いこなすための ソフトウェア



## オプションの BioConfirm および ADC DAR カリキュレータ

LC/MS をあらゆる生物学や化学のサンプルの研究に適用することができます。MassHunter WalkUp は BioConfirm および ADC DAR カリキュレータとシームレスに連係して、タンパク質確認、ADC DAR 計算、ペプチドマッピングと PTM (翻訳後修飾) 同定を実行します。



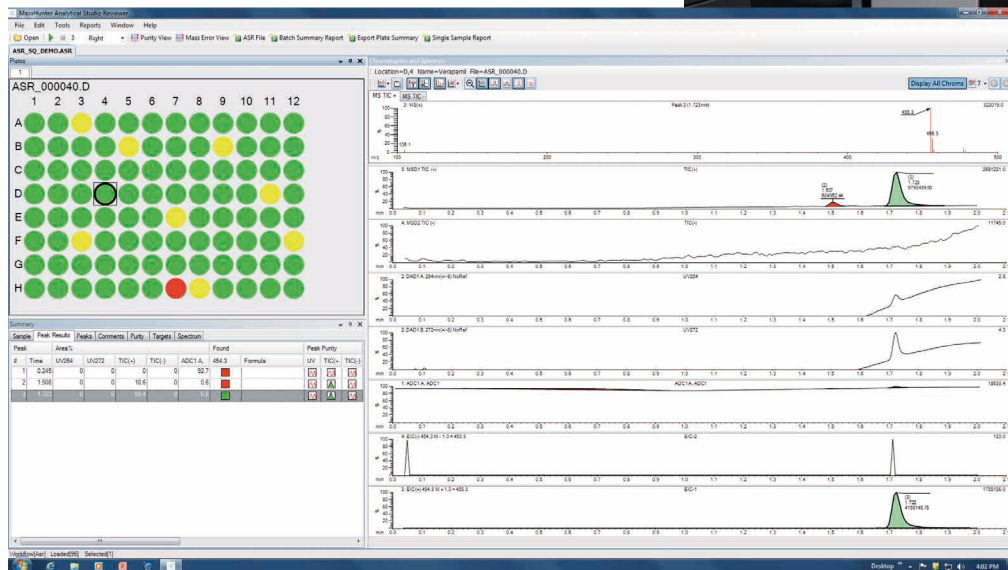
MassHunter BioConfirm は、治療用タンパク質のデータ処理を効率化します。



## Analytical Studio Reviewer

結果を迅速に視覚化し、選択的にデータをレビューできるため、特にプレート全体のような大規模なサンプルセットに適しています。Analytical Studio Reviewer では、分析結果のファイルをユーザーにメールで送信できます。ユーザーはこれらのファイルをビューアで開いて結果を確認し、問題が発生したサンプルに対してすぐに対処できます。

Analytical Studio Reviewer を利用すれば、研究者が個別にデータ解析ソフトウェアを用意する必要がないため、大規模な設置環境のコストを大幅に削減できます。



Analytical Studio Reviewer では、データを即座に表示して確認できます。



# MassHunter WalkUp の 管理上の利点



MassHunter WalkUp は、多様なユーザーニーズに対応できる高性能でシンプルなシステム管理機能を備えています。このため、ラボの稼働時間を最大化し、トレーニングコストを最小限に抑えることができます。

MassHunter WalkUp なら、1 人の管理者で次のすべての操作を実行できます。

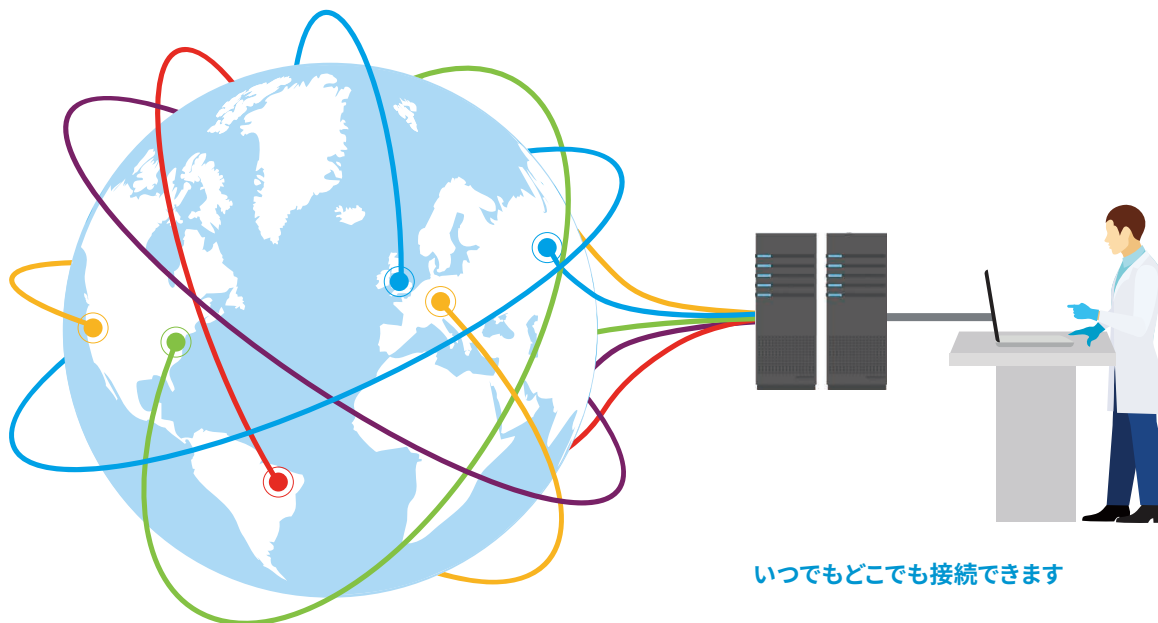
- － 簡単に多くのシステムとワークフローを管理
- － システムごとにサンプルサブミット画面をカスタマイズ
- － 機器のステータスをリモートで監視
- － ユーザープロフィールおよびメソッドの追加、変更、削除
- － システムエラー通知をテキストメッセージやメールで受信

またメンテナンス時には機器をリモートでオフラインにできるため、影響を最小限に抑えることができます。サンプルキューが終了すると画面がロックされるため、新しいサンプルがサブミットされることはありません。

## お客様の声

「MassHunter WalkUp により、機器が『使いやすく、壊れにくく』になりました。MassHunter WalkUp は操作性が優れているため、通常ならエキスパートが行う複雑な分析も、WalkUp メソッドとして実行できます。」

大手製薬会社のオープンアクセス管理者からいただいたコメントです。この企業では医薬品の開発時に、医薬品研究者が低分子の LC/MS 分析を実施しています。



いつでもどこでも接続できます

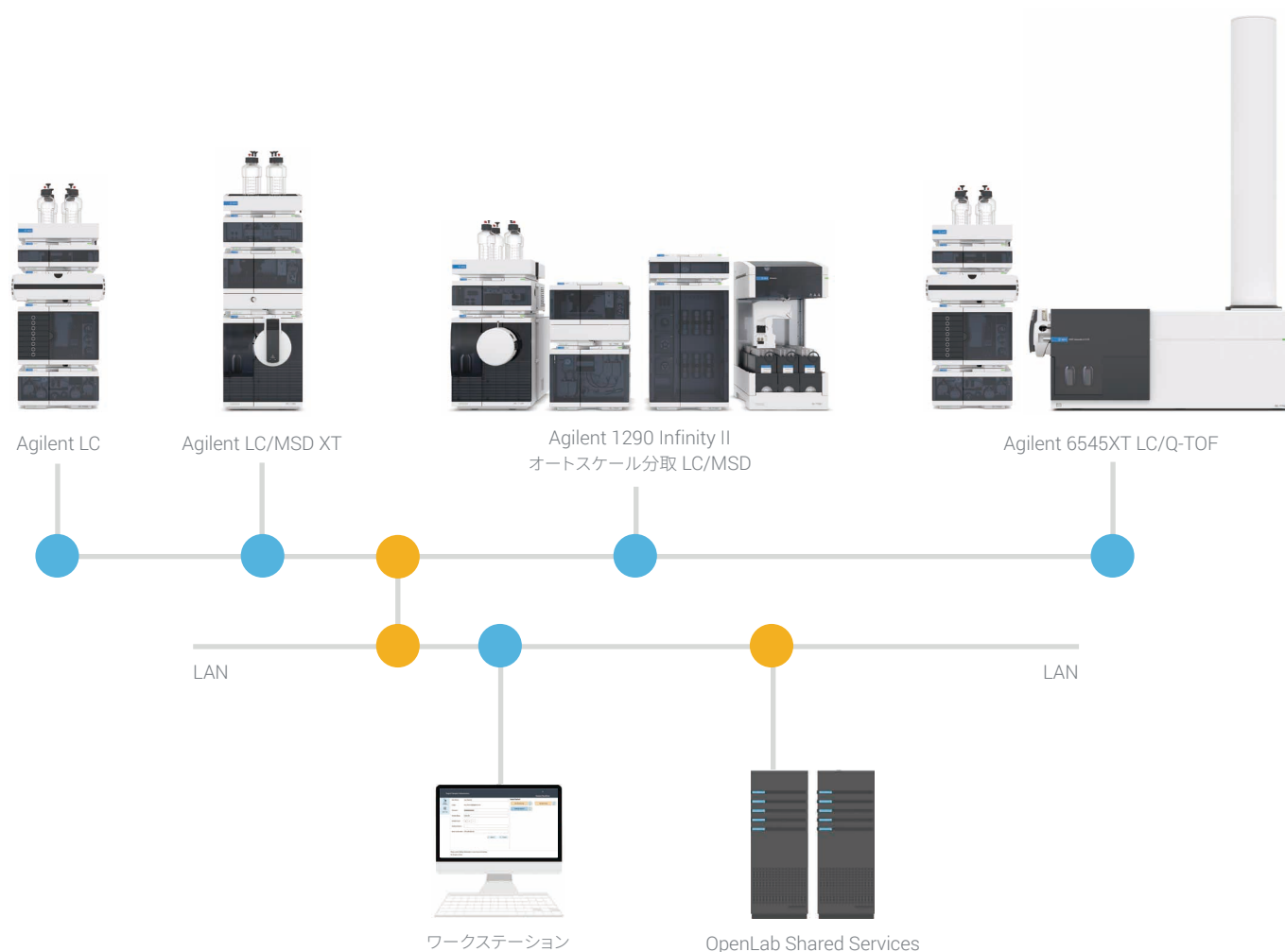
# MassHunter と OpenLab が 制御する機器の管理



OpenLab Shared Services により、MassHunter WalkUp を用いてネットワークのどこからでもラボを管理できます。

Agilent  
**OpenLab**

中央サーバーに設定内容が保存されているため、データシステム（OpenLab CDS ChemStation Edition または MassHunter）およびアップデートをすぐに実行できます。このため機器の接続は不要です。



## Agilent CrossLab サービス

Agilent CrossLab は、サービスと消耗品を統合してワークフローをサポートし、お客様の生産性の向上や運用の効率化などの重要な成果を実現するための機能です。アジレントは CrossLab を通じてあらゆる場面で「見えない価値」を提供し、お客様の目標達成を支援します。CrossLab サービスには、メソッドの最適化、柔軟なサービスプラン、あらゆるスキルレベル向けのトレーニングが含まれています。またお客様が機器やラボを管理して最高の性能を実現できるように、その他の製品やサービスも多数ご用意しています。

Agilent CrossLab の詳細と、見えない価値から優れた成果を生み出す例については、ホームページをご覧ください。



ホームページ

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

カスタムコンタクトセンタ

**0120-477-111**

**[email\\_japan@agilent.com](mailto:email_japan@agilent.com)**

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2020  
Printed in Japan, January 16, 2020  
5991-6708JAJP- Rev. 2.0  
DE.6051967593

