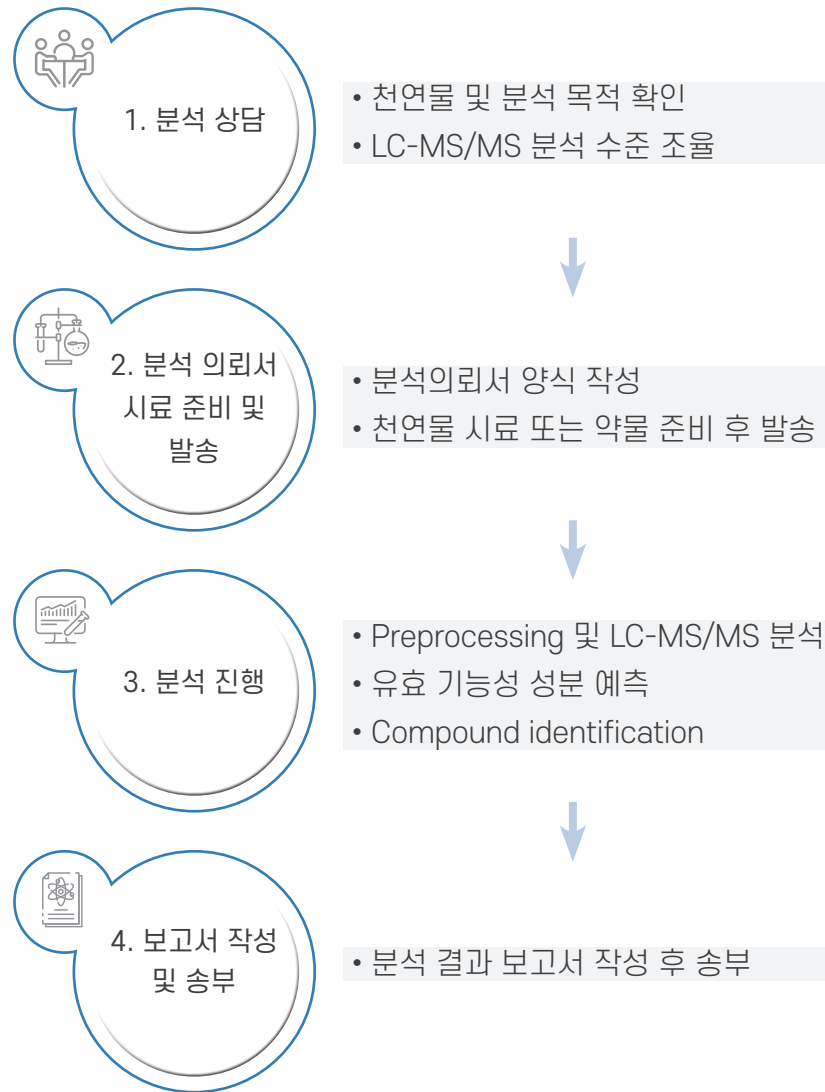


서비스 이용 절차 및 수수료

분석 이용 절차



분석 수수료

항목	소요일	비고	분석 수수료
Preprocessing (추출, 농축, 동결건조)	10일	추가 작업 견적 협의	협의
Separation condition	20일	연구소 프로토콜 외 신규 조건 개발 시	협의
LC-MS/MS 스펙트럼 분석	10일	추가 작업 견적 협의	협의
Metabolic stability (시료 1개 당 4 point)	30일	LC-MS/MS 분석포함	협의

* 자세한 분석 항목 및 수수료, 소요일 등은 상담을 통해 협의



바이오 소재 데이터 플랫폼 천연물 질량 분석 서비스



분자설계연구소

인천시 연수구 송도과학로 85
연세대학교 국제캠퍼스 진리관 A동 209호
Homepage: www.bmdrc.org
TEL: 032-212-9550
e-Mail: service_manager@bmdrc.org



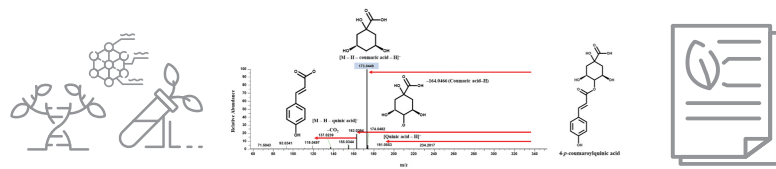
더 자세한 사항은 QR Code를 참조하세요.



질량 분석 서비스 소개

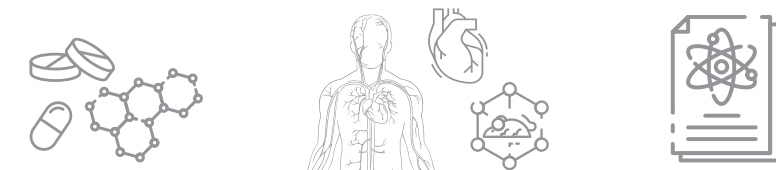
- UHPLC-Orbitrap-HRMS system을 이용하여 정확한 질량 값의 측정과 자체 데이터베이스 (BMDRC), 상용 데이터베이스 (mzCloud, Pubchem, Chempider 등)를 통한 천연물 유래 미지분자 예측 및 분석, 약물의 Metabolic stability 서비스를 제공하고 있습니다.

천연물 분석



- UHPLC-Orbitrap-HRMS system을 이용하여 천연물 내 다양한 기능성 성분 분석
- HCD (Higher-energy collisional dissociation), CID (Collision-induced dissociation) 등의 단편화 기술 등을 이용하여 최대 MS_n (n=10)까지 수행 가능
- 기능성 성분들의 질량, 구조와 함량을 파악하여 보고서 제공

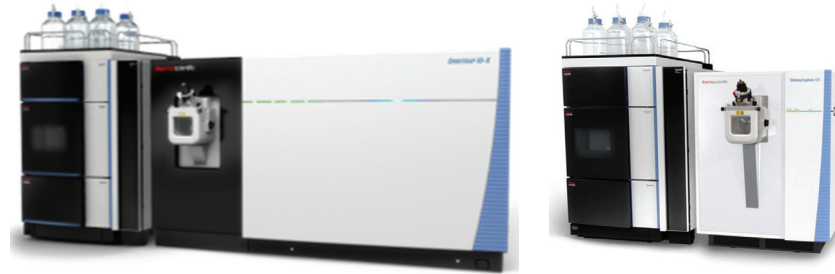
Metabolic stability 분석



- In vitro ADME screening 중 Microsomal stability assay를 수행
- Liver microsomes는 간세포가 약물 대사의 주요 장소 중 하나
- CYP에서 안정한 물질 선정을 위해 대사 안정성 시험 진행
- Liver microsomes를 이용한 metabolic stability를 통해 약물 대사 안정성 평가 후 보고서 제공

보유 장비

UHPLC-Orbitrap High-Resolution MS



Orbitrap ID-X Tribrid mass spectrometer

Orbitrap Exploris 120

Mass spectrometer	Resolution
Orbitrap Exploris 120	< 120,000
Orbitrap ID-X	< 500,000

- ✓ High-End 분석 장비 보유 (총 3대)
- ✓ 2,000Da 이하 Small molecule 화합물 식별 및 분석에 특화
- ✓ Molecular weight이 비슷한 물질 구별 가능
- ✓ 바이오 소재 내 기능성 물질 확인 및 Unknown 물질 예측

MPLC (Medium pressure liquid chromatography)



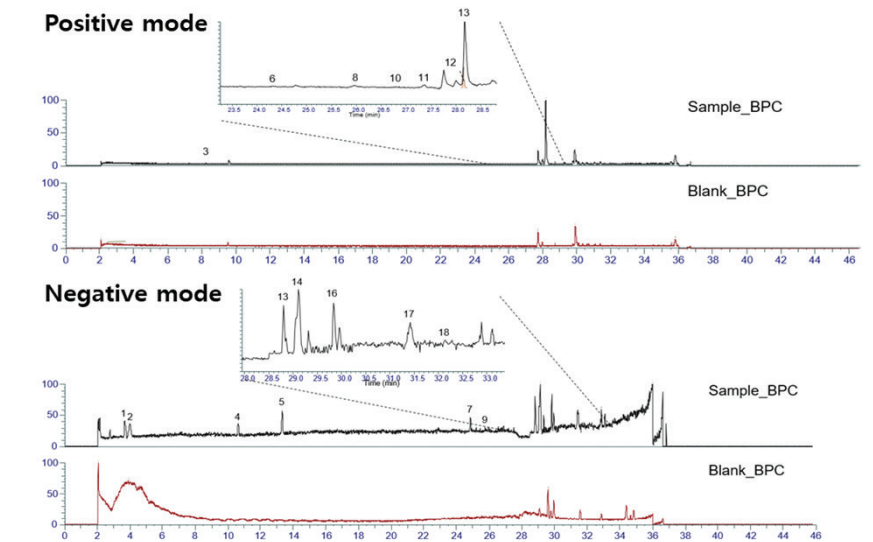
- ✓ 천연물 연구에서 시료를 대량으로 분리 정제
- ✓ 높은 유속과 압력으로 사용이 가능
- ✓ 천연물 추출물의 단일 물질 분리 정제에 적합

Rotary evaporator & Freeze dryer [EYELA]

- ✓ Rotary evaporator
 - 감압하여 낮은 온도에서 용매를 비등 시킴
 - 대량 추출물의 유효 기능성 성분의 농축, 건조 및 회수 장비
- ✓ Freeze dryer
 - 수용액이나 물을 포함하는 시료를 열에 의한 성분 변화를 최소화
 - 물질을 비활성화함으로써 시료의 장기간 보존과 저장 가능

제공 가능한 분석 결과

천연물 분석



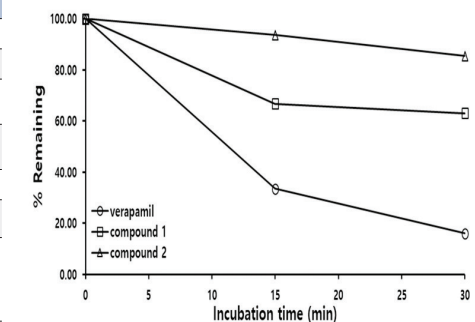
- Base peak chromatogram(BPC) of Sample A using LC-MS in positive and negative ion mode

No.	Mode	m/z	RT	Name	MS ²
1	NEG	191.0556	3.72	Quinic acid	127.0393, 109.0287, 93.0337
2	NEG	290.0871	4.05	Pyroglutamic acid hexoside	200.0557, 128.0345
3	POS	265.1536	8.31	N-(4-aminobutyl)-3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)prop-2-enamide	177.0542
4	NEG	163.0397	10.66	Hydroxycinnamic acid	119.0501
5	NEG	237.0761	13.32	Glyceryl coumarate	163.0390, 119.0493
6	POS	494.2371	24.31	N-[3-[[[E]-3-(3,4-dimethoxyphenyl)prop-2-enoyl]amino]propyl]-2-methylprop-2-enamide hexoside	209.0798, 177.0542, 181.0852
7	NEG	282.1125	24.85	Coumaroyltyramine	174.0556, 162.0550, 132.0573
8	POS	314.1377	25.94	N-feruloyltyramine	194.0808, 186.0542, 177.0542, 121.0643
9	NEG	312.1233	26.05	Feruloyltyramine	190.0499, 178.0501, 148.0521
10	POS	411.1902	26.75	Coumaroyl feruloylputrescine	265.1529, 235.1436, 177.0542

- Tentatively identified compounds in Sample A using LC-MS

Metabolic stability 분석

Microsomal stability	
Assay matrix	Liver microsomes
Species	Human, Mouse
Test compound concentration	1uM (or custom)
Protein concentration	0.5 mg/mL
Time point	0, 15, 30, 60 minutes
Cofactor	NADPH
Controls	0 μm (Blank) Minus cofactor Positive control compounds with known activity



- Validation was conducted including items of specificity, linearity, and precision to increase the reliability of analysis.