

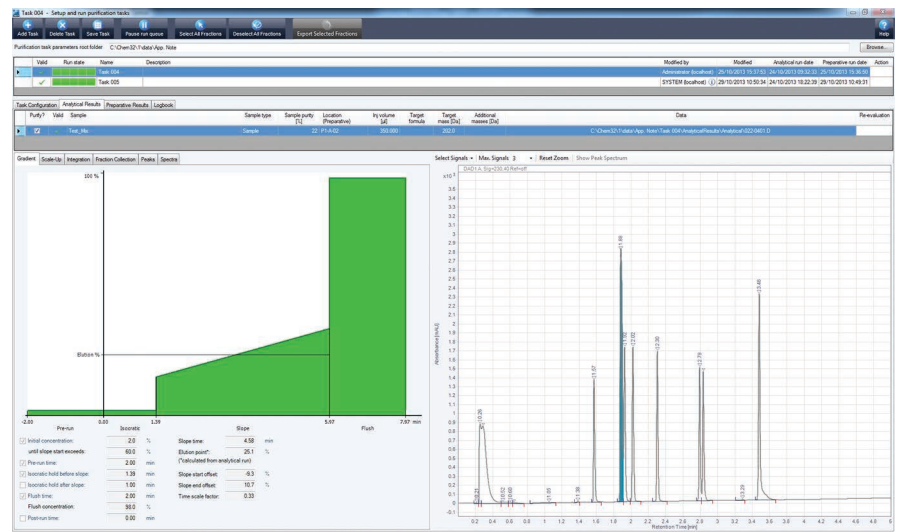
用于 Agilent OpenLAB CDS 的自动纯化软件

产品说明

前言

Agilent 1260 Infinity 液相色谱和液质联用纯化系统为微克到克级样品的纯化提供了灵活且简便易用的解决方案，可实现最高水平的回收率与纯度。通过配置用于满足您实验室通量需求的组合或专用分析型和制备型系统，安捷伦自动纯化软件能够自动在处理步骤之间转移数据，并简化您的工作流程以获得极高工作效率。

安捷伦自动纯化软件是一款易于安装的 OpenLAB CDS 软件插件，有助于将纯化方法由分析型自动转换为制备型。算法将实时计算每种目标化合物的聚焦梯度，确保在制备型纯化运行过程中收集到最高纯度的馏分。



主要优势

- 通过数学算法实现从分析型到制备型的真正“自动放大”
- 可针对每个样品实时生成最优“聚焦”制备型梯度
- 无限数量的聚焦梯度可确保获得最高纯度和回收率
- 通过聚焦梯度可实现最高样品通量和最低溶剂消耗
- 适用于各种粒径、流速或色谱柱尺寸的自动化放大工具
- 紫外和质谱信号的自动布尔逻辑运算，用于馏分触发

- 支持基于紫外的纯化系统
- 馏分结果浏览器以概览方式显示所收集的馏分、紫外与质谱数据
- 序列生成器可在查看结果后快速进行样品再分析
- 无人值守模式与专家模式

简化工作流程

安捷伦自动纯化软件简单易用。简单制备 (EasyPrep) 模式提供了临时纯化任务所需的一切。用户只需轻点几下即可设置分析柱与制备柱的所需组合、上传并处理分析结果、启动纯化运行以及审核纯化结果。通过专家模式可完全访问完整功能，该模式还为临时用户提供了预设的方法配置。

安捷伦自动纯化软件支持一个全自动化的纯化工作流程，该流程从导入 *.txt 或 *.CSV 格式的样品数据开始。它可以加快用于分析方法筛选的序列表的生成。该软件能够实现自动目标化合物确证并针对纯化步骤实时计算聚焦梯度，从而确保分离度最佳、运行时间最短。馏分结果浏览器可快速清晰地显示所收集馏分的位置。通过查看浏览器界面中的紫外和质谱数据还可检查每个所收集馏分的纯度。只需点击几次鼠标即可利用馏分选择工具将纯馏分导出至液体处理系统或生成新序列表以进行馏分再分析。

图 1 展示的典型纯化工作流程可通过采用安捷伦自动纯化软件与基于紫外或质谱检测的分析型与制备型组合系统实现自动化。

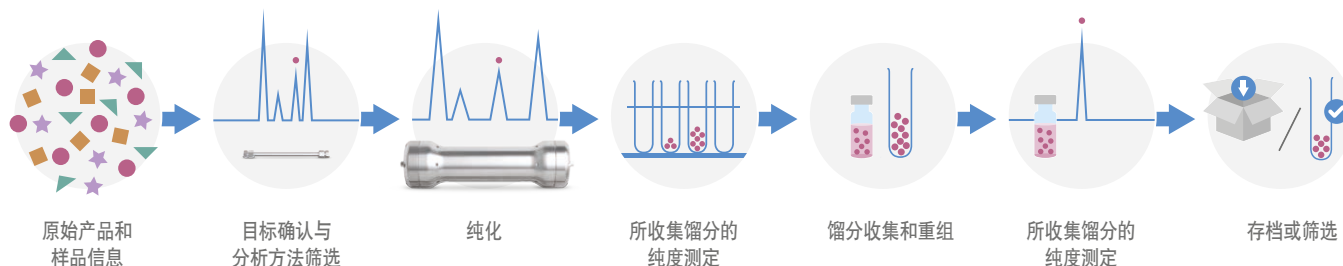


图 1. 采用安捷伦纯化软件实现自动化的典型纯化工作流程

从 UHPLC 分析柱放大至制备柱

从亚 2 μm UHPLC 分析柱放大至制备柱对经验丰富的色谱工作者而言始终是一项挑战，对非专家用户而言则几乎无法实现。而使用安捷伦自动纯化软件时，只需点击几次鼠标即可使放大过程成为日常工作的一部分。

Agilent 1290 或 1260 Infinity 分析型系统采用具有 MassHunter Walk-Up 软件插件的 OpenLAB CDS ChemStation 进行控制，其简化的样品提交流程实现了最高水平的分析效率。向 1260 Infinity 制备型纯化系统的数据转移以及分析结果查看均直观而简单。独立的分析型与制备型系统是所有日样品量超过 30 的高通量实验室以及所有无人值守纯化实验室的最佳选择。

专家模式 — 配置分析型与制备型系统

放大流程的第一步是决定分析型与制备型系统中各自的流路配置。以专家模式登录系统后，可配置放大流程中的所有相关系统参数（图 2）。

需要配置滞后体积以及分析柱与制备柱尺寸，以确保实现从亚 2 μm UHPLC 分析柱到制备柱尺寸的正确放大（图 3）。

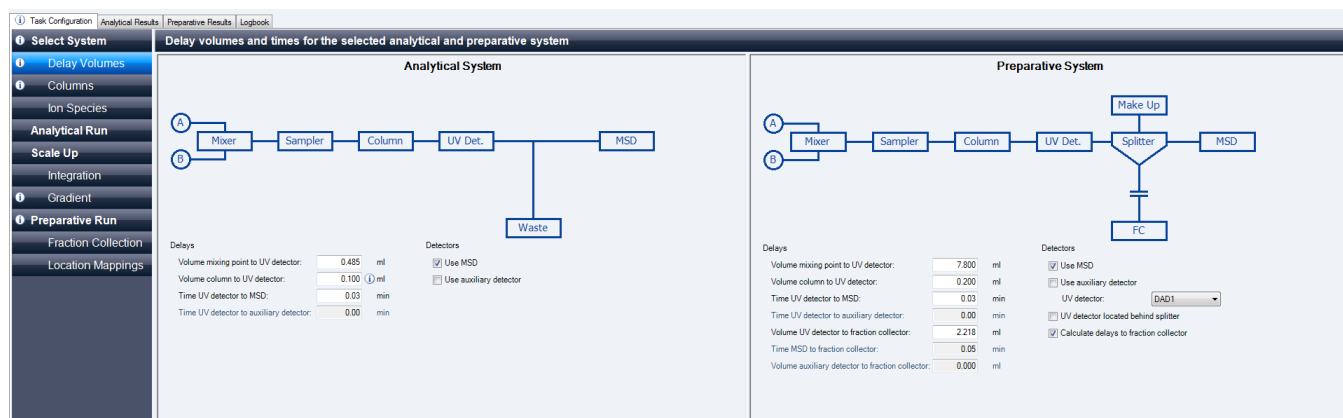


图 2. 分析型与制备型液相系统硬件特性图示

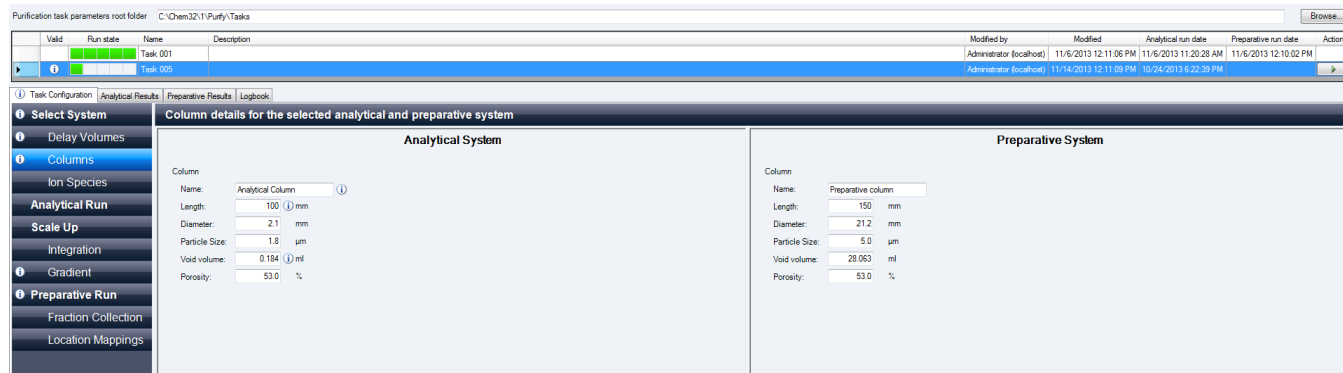


图 3. 分析柱与制备柱的尺寸和特性图示

在组合系统中实现分析方法筛选与制备性能

在分析到制备组合系统中通过流速高于 1 mL/min 的有限分析性能也可实现从分析柱到制备柱的放大。4.6 × 50 mm 色谱柱上的快速分析方法筛选运行可获得每日最多 20 个样品的样品通量。

专家用户可在配置页面的一系列选项卡中修改所有相关参数，例如色谱柱尺寸、离子种类、放大过滤参数、积分参数以及所提供的梯度曲线。修改后的设置和梯度曲线可应用为常规设置以纯化整个批次的样品（图 4）。

在手动审查流程中，可校正目标质量数或输入更多的触发化合物质量。通过鼠标点击即可手动分配目标峰（图 5）。

在分析结果页面中对梯度或积分参数的任何更改仅适用于所选样品。这可使用户针对每个宝贵样品分别优化常规设置。

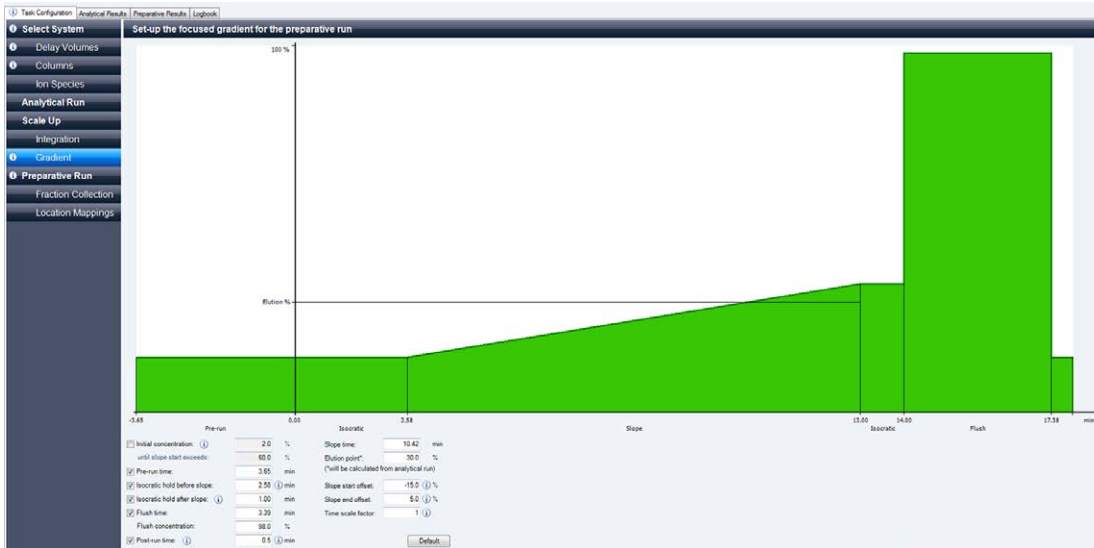


图 4. 每个目标化合物梯度曲线的自动测定。为优化分离度和效率，所有默认参数均可由用户进行修改

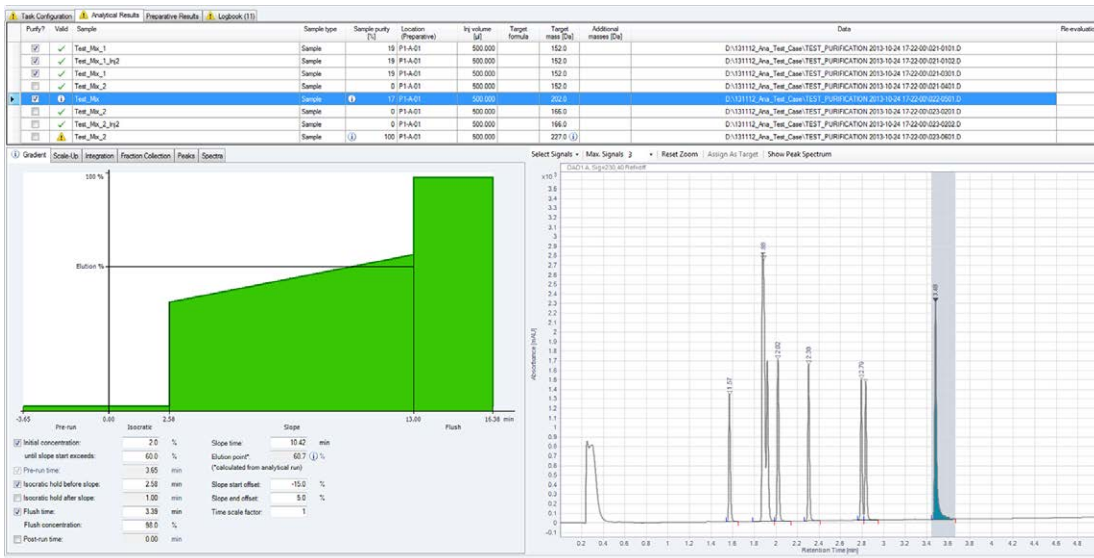


图 5. 分析色谱图中突出显示了所检测目标化合物的梯度曲线计算结果

EasyPrep 用户模式

无人值守用户通常是临时用户，他们倾向于使用更简洁的用户界面视图。适当数量的选项卡可用于完善自动纯化工作流程。只需点击几次鼠标即可选定分析柱与制备柱的必需组合（图 6）。

然后再点击几次鼠标，即可上传并处理用于纯化步骤的分析结果。为上传分析结果，需要选择已用于存储分析结果的文件夹（图 7）。

下载结果文件或执行手动审查步骤（如果需要）之后，纯化过程将自动开始（图 8）。

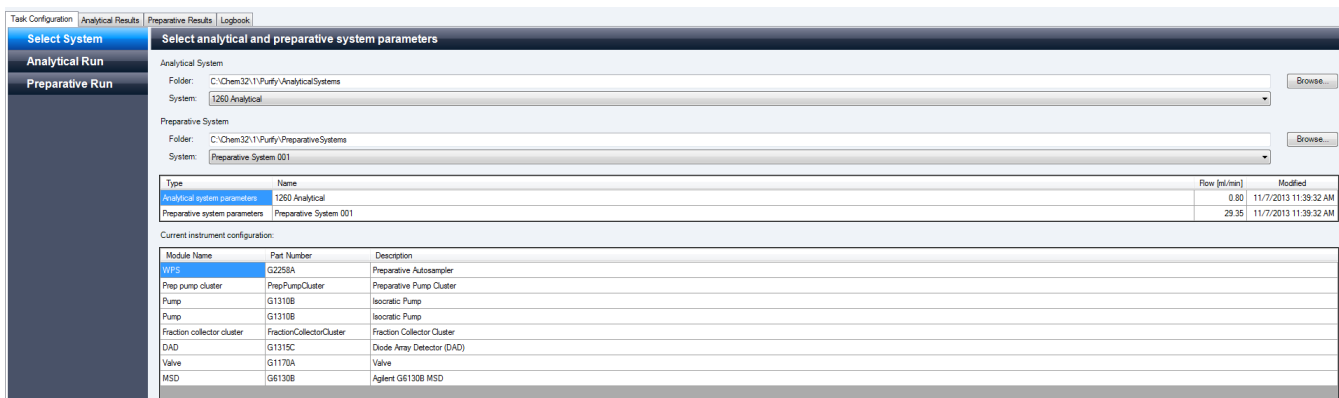


图 6. EasyPrep 模式的选项卡数量更少，可简化临时用户的操作

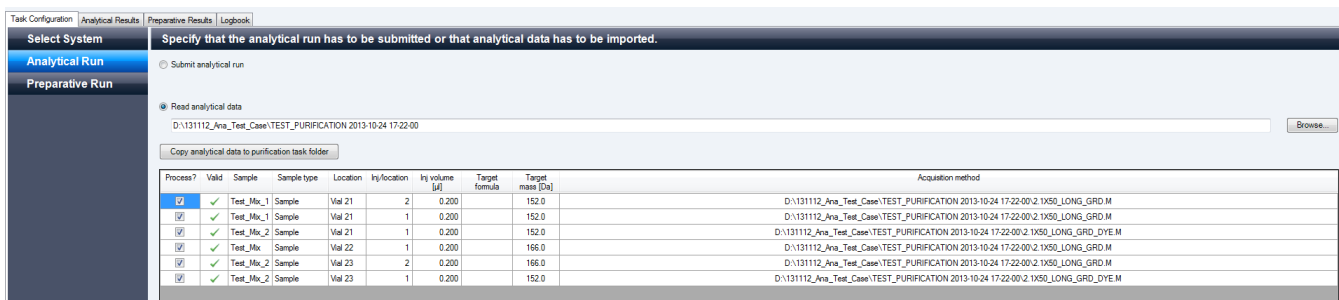


图 7. 在 EasyPrep 模式中，无人值守用户可以选择系统并从一个源文件夹中下载结果组

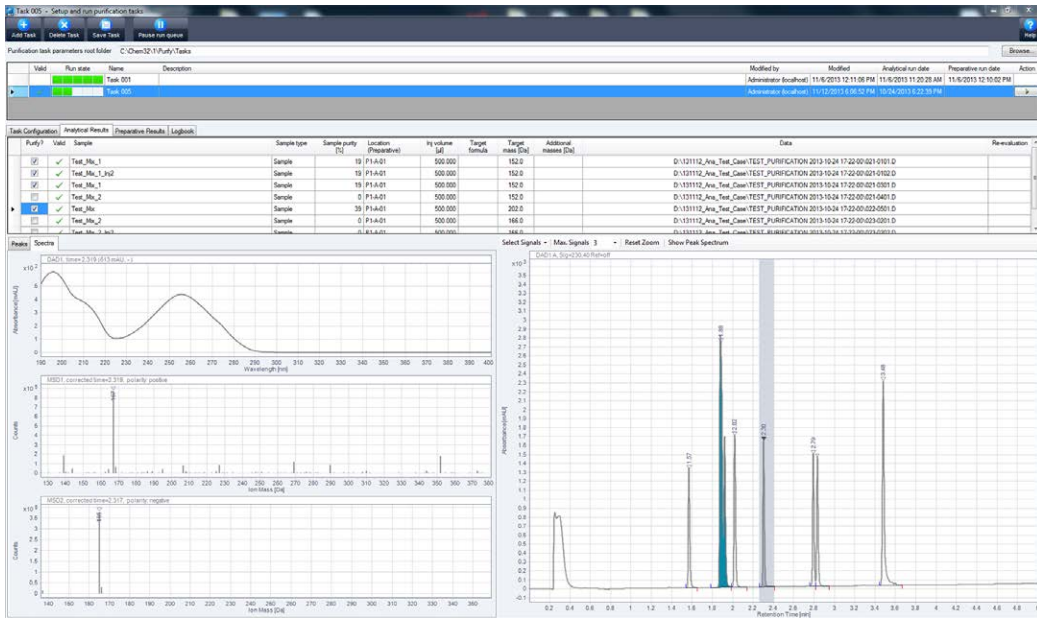


图 8. 仅需点击色谱图即可显示每个峰的质谱数据

软件将显示来自紫外和质谱检测器的质谱数据，用于目标化合物的明确鉴定。在常规工作流程中，目标化合物由一种算法自动鉴定。

而目标质量数的后续校正、用于馏分收集的化合物添加以及目标化合物的手动选择也可通过鼠标点击实现。

馏分结果浏览器可清晰显示进样后的样品在馏分收集器中的位置、相应的收集馏分以及所有质谱数据（图 9）。

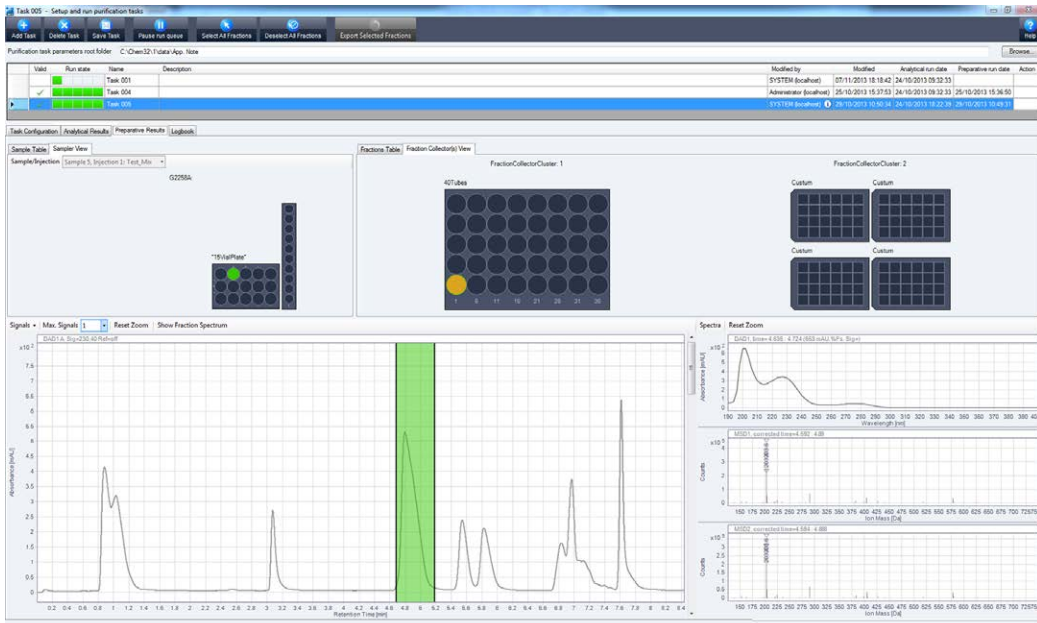


图 9. 馏分结果浏览器是一种交互式图形展示工具，可显示所有进样样品和收集馏分管的位置。点击每个收集馏分管可显示该馏分在色谱图中的位置以及所有采集的质谱信息

可将选定馏分重新提交至 Agilent 1290 或 1260 Infinity 液质联用系统以测定其纯度。在馏分结果浏览器中使用导出工具可轻松生成序列列表。导出工具可将所选馏分信息以 *.txt 或 *.CSV 格式导出至第三方液体处理器以执

行自动收集流程。为减少处理错误，整个过程仅需极少人工干预（图 10）。

用户可在办公桌前使用离线版自动纯化软件离线监测分析和制备结果组与纯化结果，

此时需要一个附加的 OpenLAB CDS ChemStation 许可版本。

在对所需目标化合物进行纯度确认与定量分析后，一个纯化工作周期即成功完成（图 11）。

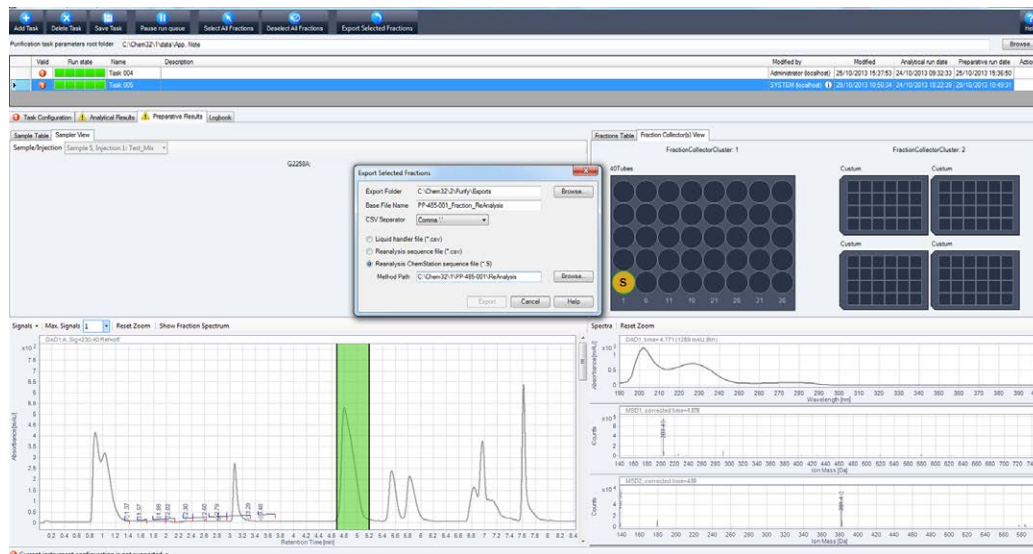


图 10. 馏分导出工具收集了所有相关信息，以便采用液体处理器进行样品再分析。只需几次点击即可轻松导出数据

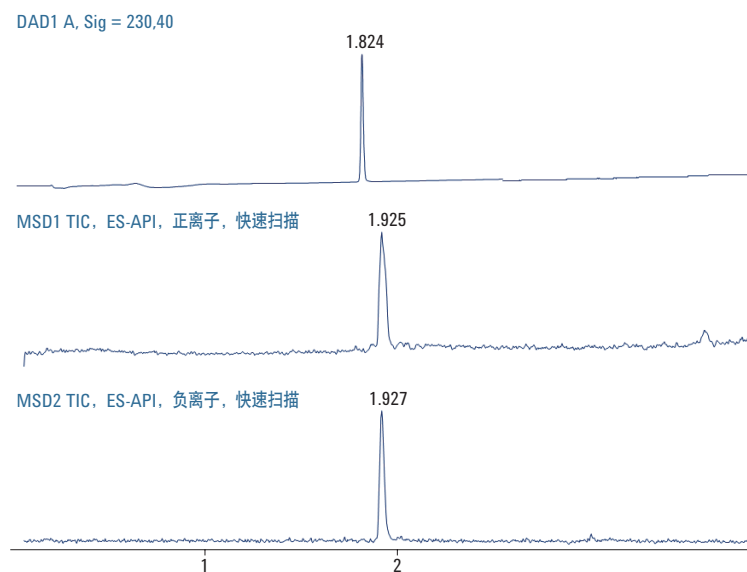


图 11. 所收集馏分的再分析展示了高纯度和高回收率的结果。安捷伦馏分收集器中的集成馏分延迟传感器通过精确测定制备型流路中的毛细管延迟体积，确保所收集馏分达到最高纯度

订购信息

| 描述 | 订单号 |
|------------------------------------------------------|---------|
| Agilent OpenLAB CDS ChemStation 版软件插件, C.01.05 或更高版本 | |
| 自动纯化软件在线许可证 | M8368AA |
| 自动纯化软件离线许可证 | M8369AA |
| 附加软件 | |
| MassHunter Walk-Up 软件 | G2725CA |
| 实验室顾问基本版 | M8555AA |

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn

安捷伦科技大学:

<http://www.lscachina.com.cn/agilent>

浏览和订阅 Access Agilent 电子期刊:

www.agilent.com/chem/accessagilent-cn

www.agilent.com/chem/purification

本文中的信息、说明和指标如有变更,恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2014

2014年3月1日, 中国出版

5991-3870CHCN



Agilent Technologies