研究展报

ASMS 2019
ThP349

使用 MassHunter WalkUp 开放式软件简化质谱分析并实现自动化

Kyle Covert，Robert Ley

安捷伦科技有限公司，美国加利福尼亚州圣克拉拉市

前言

在活性药物成分 (API) 的合成过程中，需要对许多反应步骤进行监测。必须测试每个步骤的整体纯度和产率，以确保建立可靠而经济的合成途径。快速获得结果，是为下一步做出恰当决策的关键基础。药物发现、工艺开发和质量控制也是如此，快速获取分析结果在节省时间和金钱之余，能够加快决策速度。满足这些需求的理想方法，是采用简便易用并能快速提供高质量结果的开放式分析仪器。配备 MassHunter WalkUp 软件的 Agilent InfinityLab LC/MSD iQ 提供了这样的解决方案。

在开放式系统中，有两种用户类型：管理员和提交者。管理员是负责管理系统的专家。他们创建方法供提交者用于分析样品。系统被“保护”后，提交者只能与样品提交界面进行交互（图 1）。

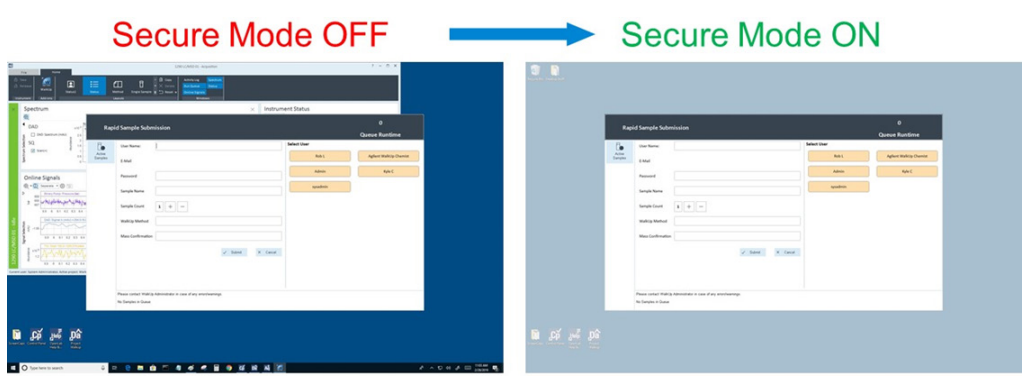

图 1. WalkUp 的安全模式功能

- 关闭 *Secure Mode*（安全模式）后，提交者可以访问计算机上的 OpenLab CDS 及其他程序
- 启用 *Secure Mode*（安全模式）后，提交者只能访问 Walkup 样品提交。所有其他程序和操作系统命令都会被锁定

对于提交者而言，他们不需要具备任何 Agilent OpenLab CDS 知识，甚至不需要了解如何操作仪器。使用 WalkUp 时，提交者只需走到仪器前，提交样品，然后返回办公桌，即可接收包含分析结果的电子邮件报告（图 2）。这使实验室可以缩短培训时间并提高运行效率。

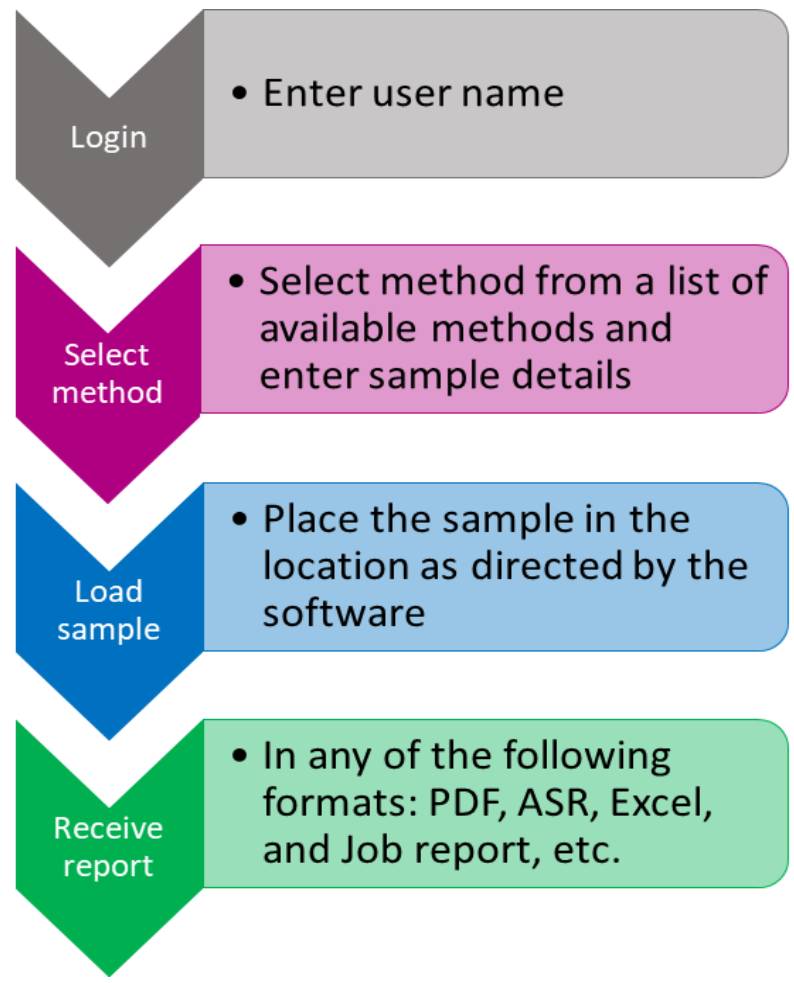

图 2. 安捷伦 LC/MSD iQ WalkUp 系统的典型用户工作流程

实验部分

典型 WalkUp 仪器

Agilent InfinityLab LC/MSD iQ WalkUp 系统包括如下模块：

- Agilent 1290 Infinity II 高速泵 (G7120A)
- Agilent 1290 Infinity II Multisampler (G7167B) 或 Agilent 1290 Infinity II 样品瓶进样器 (G7129B)
- Agilent 1290 Infinity II 高容量柱温箱 (G7116B)
- Agilent 1290 Infinity II 二极管阵列检测器 (G7117B)
- 安捷伦 LC/MSD iQ (G6160AA)

图 3. 与 InfinityLab II Prime HPLC 堆栈配套的安捷伦 LC/MSD iQ

任何背景的用户均可轻松提交样品

根据实验室中 WalkUp 系统预期用途的不同，提交样品的方法有两种。*Rapid Sample Submission*（快速样品提交）专门设计用于 *Sample Purity*（样品纯度）或 *Target Mass Confirmation*（目标质量确认）工作流程（图 4）。或者，*Classic Sample Submission*（经典样品提交）用于需要多种方法的更复杂的工作流程，或用于基于质量的馏分收集（图 5）。两种样品提交工作流程都需要提交者遵循相同的步骤：

- 在 WalkUp 系统中录入其身份并输入密码（可选）
- 输入简单的样品信息
- 从分析方法列表中进行选择
- 输入目标质量数（可选）
- 按照系统指示，将样品加载到进样器中
- 通过电子邮件接收结果报告

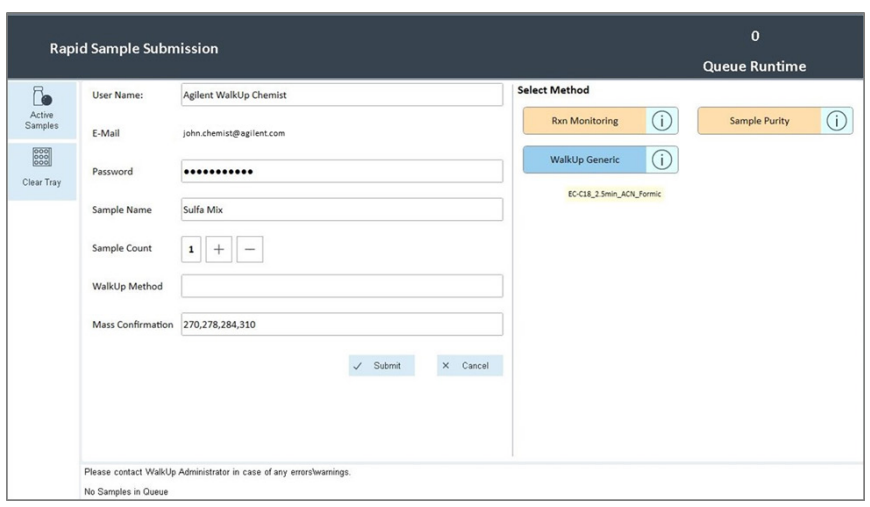

图 4. 快速样品提交：所有输入均通过这一个界面完成。右侧显示了提交者可用的方法，并提供了供触摸屏使用的方法选择“按钮”

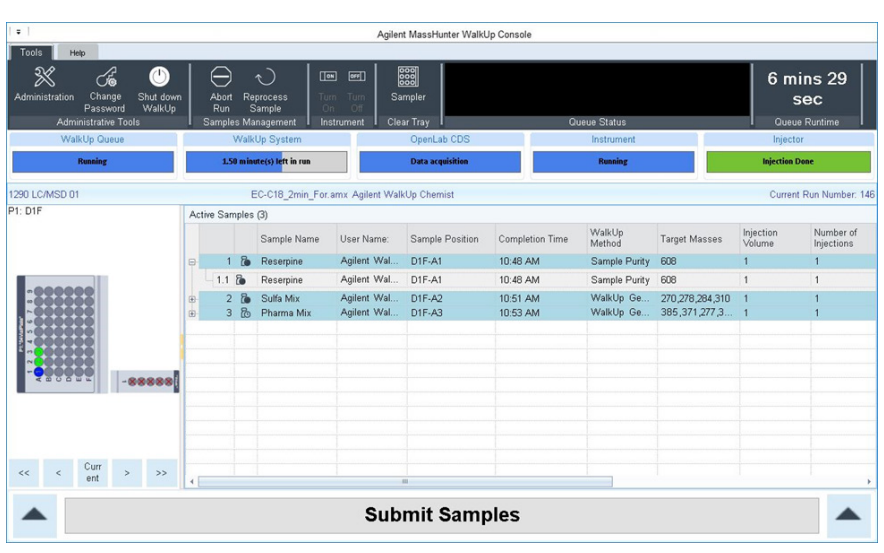

图 5. 经典样品提交：可以一次提交多个样品，且针对每个样品设置特定方法。活动样品队列显示当前分析的样品

为实验室经理带来的优势和益处

对于系统管理员，WalkUp 的一些主要益处包括：

- 使用快速样品提交的触摸屏功能
- 控制组和用户权限（图 6）
- 能够使用经典样品提交导入确定的工作列表
- 外部样品盘，适用于不间断的样品提交
- 在小型或大型实验室中，实时获取样品队列和仪器状态
- 在大型实验室配置中，使用 OpenLab CDS 共享服务管理多个系统
- 经过更改后，验证系统配置
- 在系统出现问题时，发送电子邮件或短信提醒

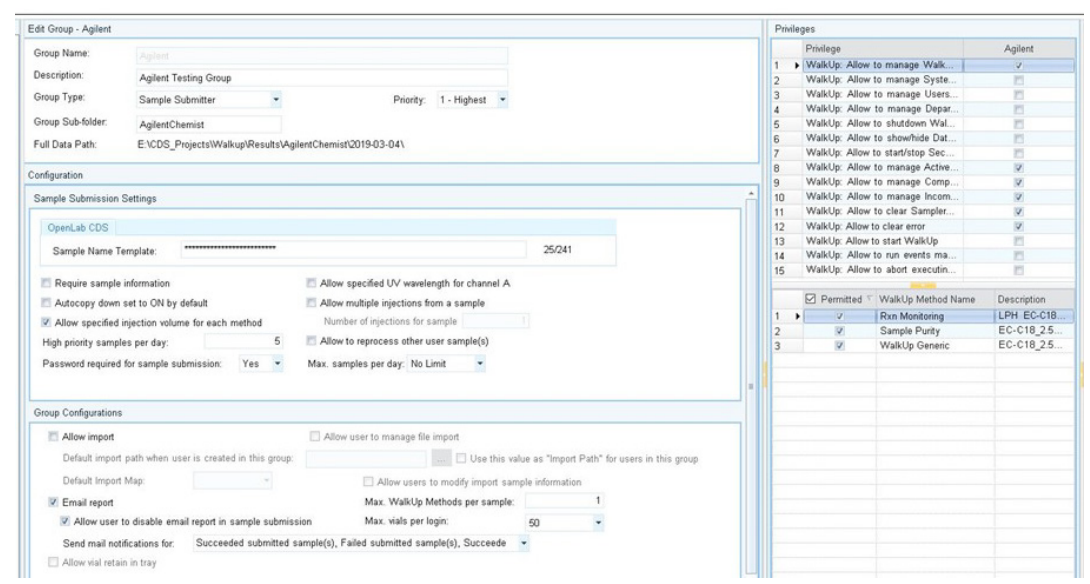

图 6. “组权限”选项卡包含所有组及其用户的列表。可以为每个组设定一套权限和可以使用的和方法

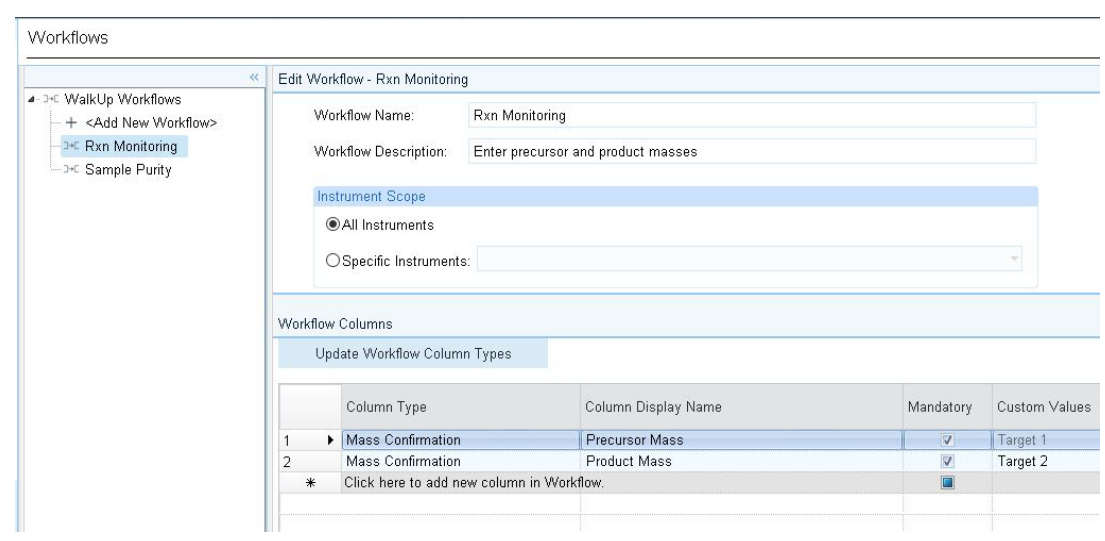

图 7. 反应监测工作流程。将两列添加到样品提交界面中，分别用于录入母离子目标质量数和子离子目标质量数

自动安排重要系统事件

可基于时间（如每天、每周、工作日）或样品提交（如完成样品板分析后、N 次运行后）安排关键事件（图 8）。可选择任意数量的 WalkUp 方法。样品瓶可以储存在不用于样品队列的参考位置。可以执行的一些事件示例如下：

- 在整个工作日内运行参比标样
- 校准标样，用于确保报告的含量满足目标要求
- 关于仪器和色谱柱稳定性的系统适用性检查
- 空白运行，用于检查残留或污染
- LC/MSD iQ 提供计划的自动调谐或校验调谐

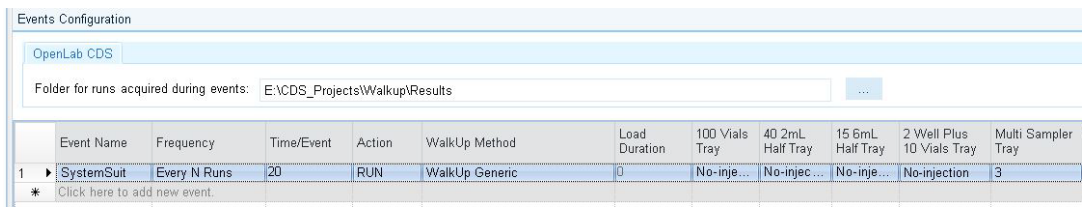

图 8. OL CDS 数据采集界面

通过电子邮件将报告和数据直接发送到提交者的收件箱

采集的数据由数据分析方法自动处理，该方法会创建数据分析报告。然后管理员配置发送给提交者的内容（图 9）。提交者在其收件箱中接收管理员所创建的报告（图 10）。

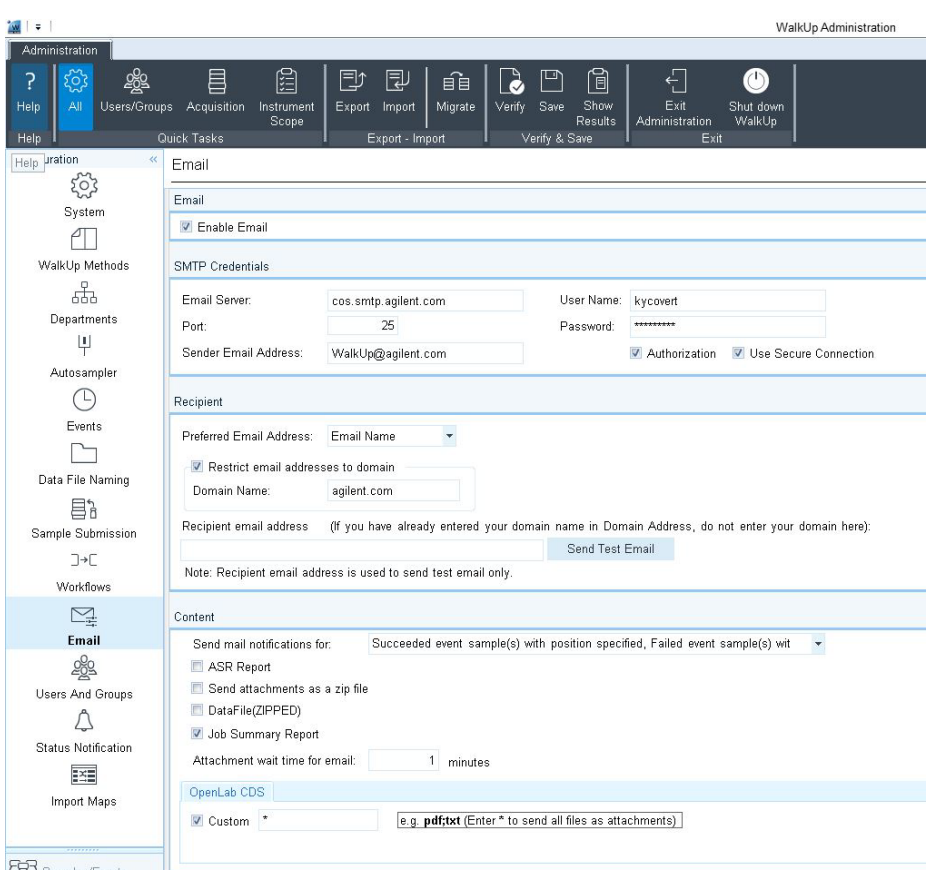

图 9. 数据文件、数据分析报告和 ASR 文件可通过电子邮件发送给提交者

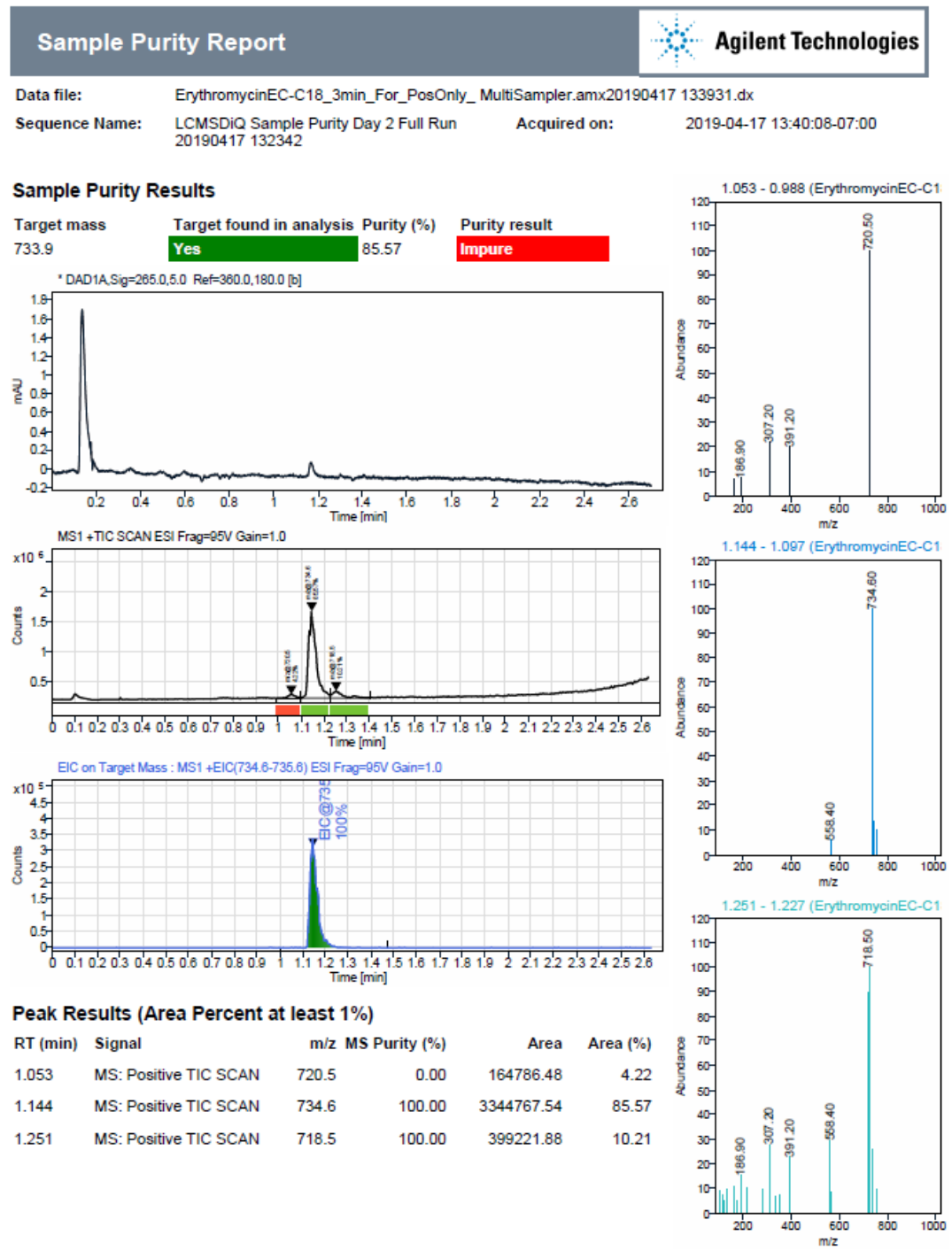

图 10. 通过电子邮件发送给提交者的样品纯度 WalkUp 报告，显示目标质量数 m/z 733.9（红霉素）的样品纯度以及 UV 色谱图和 MS 总离子流色谱图。TIC 峰下方的彩色条显示 MS 峰纯（绿色）还是不纯（红色）

结论

- 凭借快速、灵活、直观的样品提交功能以及灵活的报告生成选项，MassHunter WalkUp 提供了易于使用的开放式体验，并为样品提交者和管理员提供了丰富的功能
- 与 InfinityLab LC/MSD iQ 相结合，提交者可以获得质谱信息，从而实现更明确的鉴定
- 先进的管理工具使系统管理员能将工作流程配置为适合未经培训的人员使用

仅限研究使用。不可用于诊断目的。

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，2019
2019 年 6 月，中国出版
5994-1070ZHCN

Agilent
Trusted Answers