

Reimpresión de póster

ASMS 2019

ThP349

Cómo facilitar y automatizar el análisis con espectrometría de masas mediante el uso del software de acceso abierto MassHunter Walkup

Kyle Covert, Robert Ley

Agilent Technologies Inc., Santa Clara, CA
(EE. UU.)

Introducción

La síntesis de un ingrediente farmacéutico activo (API) precisa numerosos pasos de reacciones monitorizadas. Es necesario analizar cada paso para comprobar la pureza y el rendimiento globales con el fin de asegurar que se ha establecido una vía sintética fiable y rentable. Obtener resultados rápidos es fundamental para determinar las decisiones apropiadas para el paso siguiente. Esto mismo puede afirmarse para el descubrimiento de fármacos, el desarrollo de procesos y el control de calidad, donde el acceso rápido a los resultados analíticos permite tomar decisiones más rápidas, además de ahorrar tiempo y dinero. La mejor forma de satisfacer estas necesidades es con un instrumento analítico de acceso abierto que resulte sencillo de usar y proporcione resultados rápidos y de alta calidad. El sistema Agilent InfinityLab LC/MSD iQ con software MassHunter Walkup proporciona esta solución.

En un sistema de acceso abierto, hay dos tipos de usuarios: el administrador y el remitente. El administrador es el experto que administra el sistema. Crea los métodos que utiliza el remitente para analizar sus muestras. El sistema se puede proteger de modo que el remitente solo interactúe con las pantallas de remisión de muestras (Figura 1).

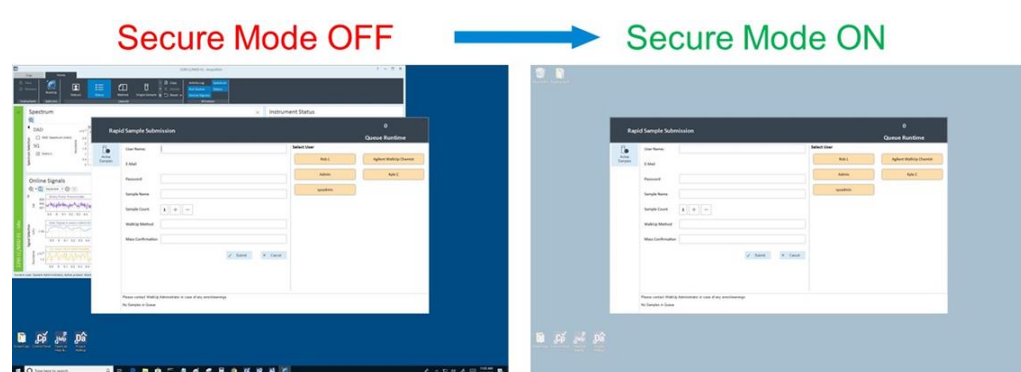


Figura 1. Función de modo protegido de WalkUp

- Con el *Modo protegido* desactivado, un remitente puede acceder a OpenLAB CDS y a otros programas del equipo.
- Con el *Modo protegido* activado, el remitente está restringido solo a la remisión de muestras en WalkUp. Todos los demás programas y comandos del sistema operativo quedan bloqueados.

El remitente no tiene por qué conocer Agilent OpenLAB CDS ni tampoco saber cómo usar el instrumento. Con WalkUp, el remitente puede limitarse a acceder al instrumento, remitir una muestra y volver a su escritorio para recibir un informe por correo electrónico con sus resultados analíticos (Figura 2). Esto permite a los laboratorios reducir el tiempo de capacitación y mejorar la eficiencia operativa.

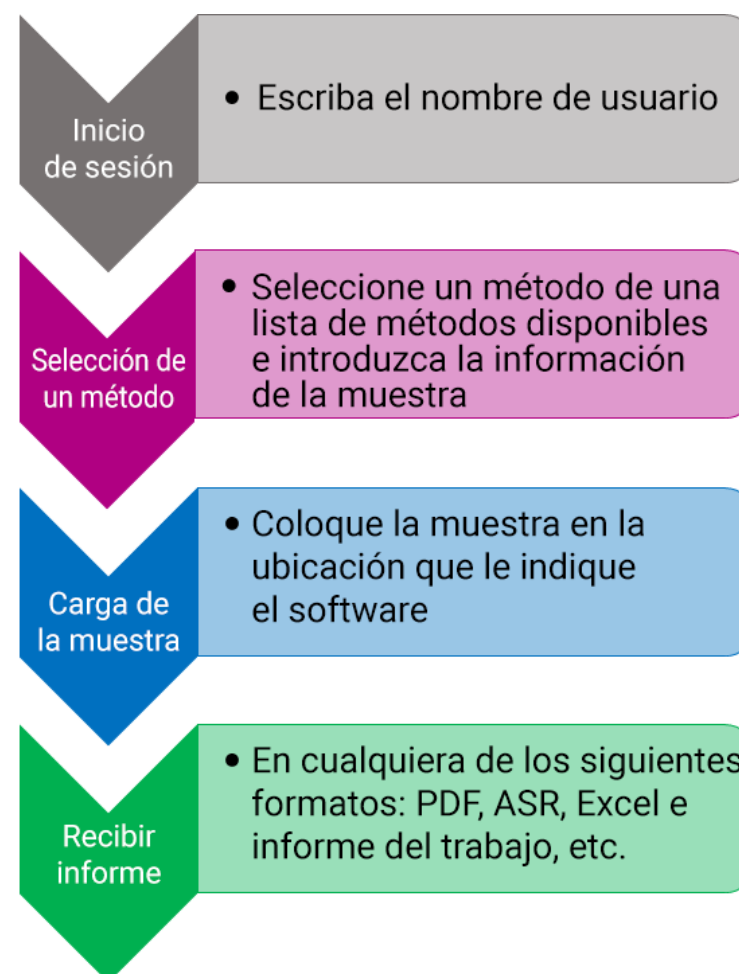


Figura 2. Flujo de trabajo del usuario típico para el sistema Agilent LC/MSD iQ WalkUp.

Experimento

Instrumentación típica de WalkUp

El sistema Agilent InfinityLab LC/MSD iQ WalkUp consta de los módulos siguientes:

- Bomba de alta velocidad Agilent 1290 Infinity II (G7120A)
- Muestreador múltiple Agilent 1290 Infinity II (G7167B) o bien Muestreador de viales Agilent 1290 Infinity II (G7129B)
- Termostato multicolumna Agilent 1290 Infinity II (G7116B)
- Detector de diodo array Agilent 1290 Infinity II (G7117B)
- Sistema Agilent LC/MSD iQ (G6160AA)

Figura 3. Sistema Agilent LC/MSD iQ con una torre para HPLC InfinityLab II Prime

Sencilla remisión de muestras para todo tipo de usuarios

Existen dos formas de remitir muestras, en función del uso previsto por el laboratorio del sistema WalkUp. La *Remisión rápida de muestras* está diseñada específicamente para su uso con un flujo de trabajo de tipo *Pureza de las muestras* o *Confirmación de masa de compuestos diana* (Figura 4). Como alternativa, se puede usar la *Remisión clásica de muestras* para flujos de trabajo más complejos que precisen varios métodos o para la recogida de fracciones basada en la masa (Figura 5). Los remitentes deben seguir los mismos pasos en ambos flujos de trabajo de remisión de muestras:

- identificarse en el sistema WalkUp e introducir una contraseña opcional,
- introducir información sencilla sobre la muestra,
- elegir de entre una lista de métodos analíticos,
- introducir masas de compuestos diana (opcional),
- cargar la muestra en el muestreador, según le indique el sistema,
- recibir el informe de resultados por correo electrónico.

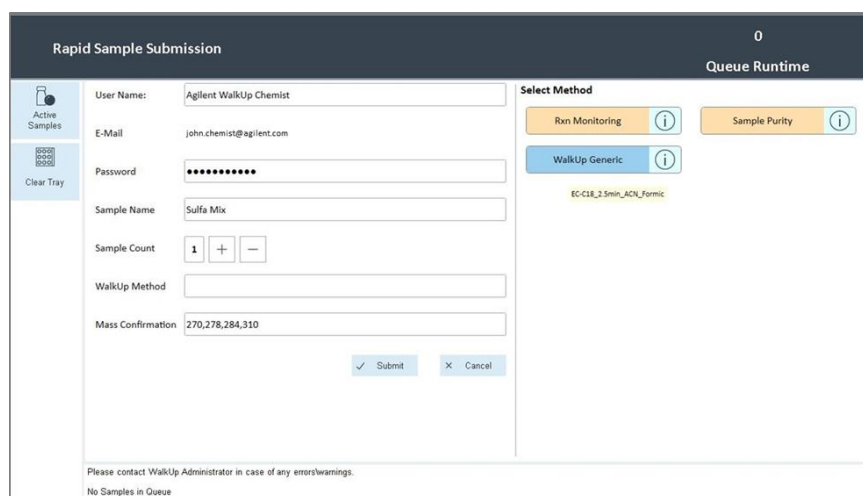


Figura 4. Remisión rápida de muestras: toda la información se introduce desde esta misma pantalla. El lado derecho muestra los métodos disponibles para los remitentes y se proporcionan “botones” para la selección de métodos para el uso de la pantalla táctil.

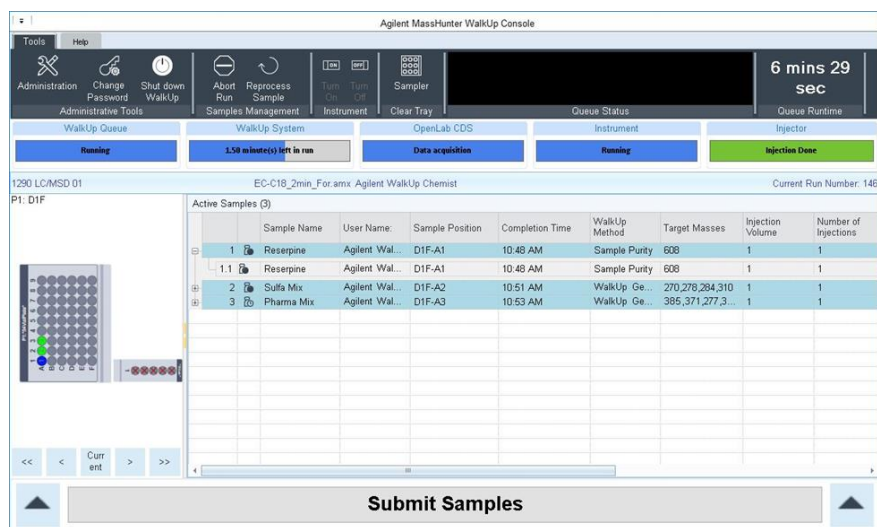


Figura 5. Remisión clásica de muestras: Se pueden remitir varias muestras al mismo tiempo con métodos específicos para cada muestra. Una cola indica cuál de las muestras activas se está analizando actualmente.

Ventajas para los directores de laboratorios

Para el administrador del sistema, algunas de las principales ventajas de WalkUp son:

- capacidad de pantalla táctil con Remisión rápida de muestras
- control de privilegios de grupos y de usuarios (Fig. 6)
- capacidad de importar listas de trabajo definidas con Remisión clásica de muestras
- bandeja de muestras externa para la remisión ininterrumpida de muestras
- cola de muestras y estado del instrumento en tiempo real en laboratorios pequeños y grandes
- administración de varios sistemas con los servicios compartidos de OpenLAB CDS en una configuración de laboratorio grande
- verificación de la configuración del sistema una vez realizados los cambios
- envío de alertas por correo electrónico o SMS cuando se produce un problema con el sistema

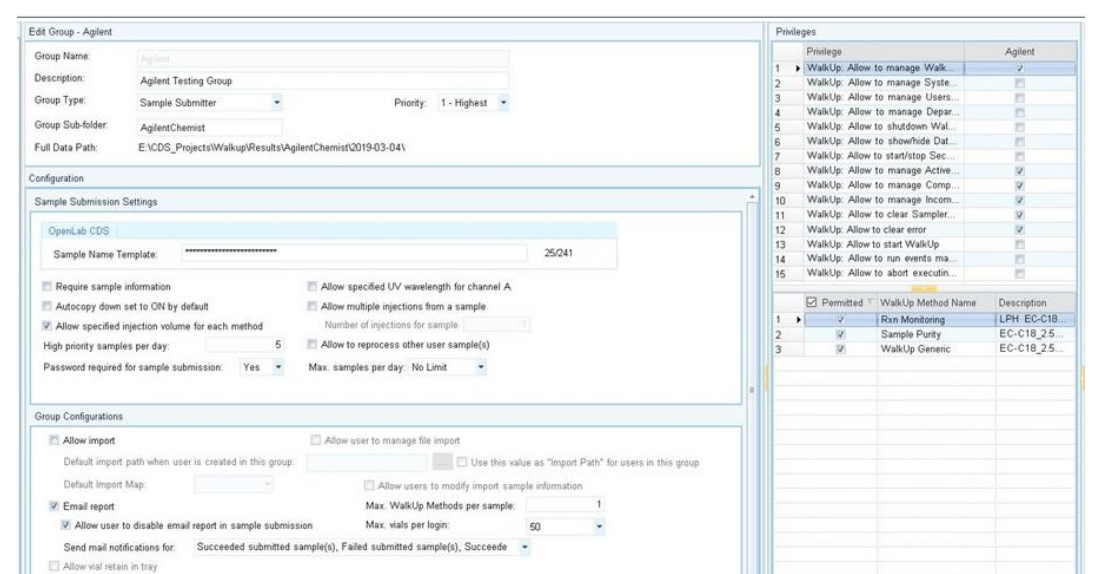


Figura 6. La pestaña de permisos de grupo contiene una lista de todos los grupos y de sus usuarios. Se puede proporcionar a cada grupo un conjunto de privilegios y de los métodos que pueden usar.

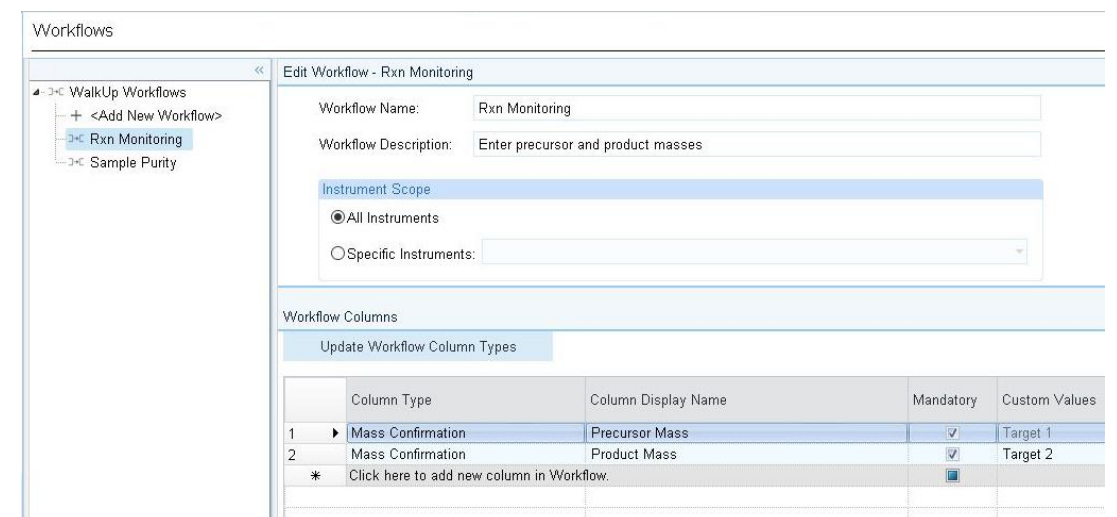


Figura 7. Un flujo de trabajo para la monitorización de reacciones. Se añaden dos columnas a la pantalla de remisión de muestras para la masa diana de un precursor y para las masas diana de los productos.

Programación automática de eventos importantes del sistema

Se pueden programar eventos clave basados en el tiempo (p. ej., todos los días, cada semana, días laborables) o basadas en la remisión de muestras (como una vez finalizada una placa, al cabo de "n" análisis) (Figura 8). Se puede seleccionar cualquier número de métodos WalkUp. Los viales de las muestras se pueden almacenar en las posiciones de referencia que no usa la cola de muestras. Algunos ejemplos de eventos que pueden realizarse:

- analizar patrones de referencia durante todo el día de trabajo
- patrones de calibración para asegurarse de que las cantidades indicadas sean correctas
- verificación de la idoneidad del sistema para la estabilidad del instrumento y de la columna
- análisis de blancos para comprobar si hay arrastre o contaminación
- están disponibles la sintonía o la comprobación de sintonía programadas con el sistema LC/MSD iQ

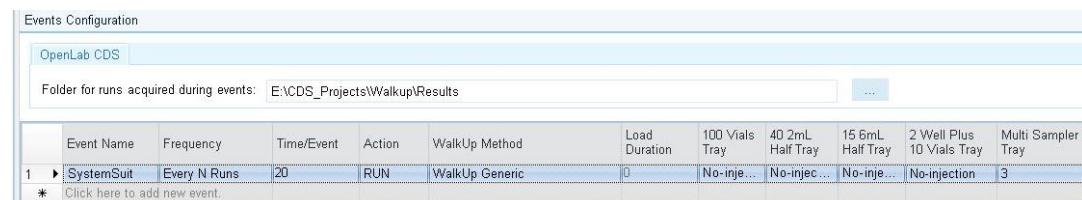


Figura 8. Pantalla de adquisición de datos de OL CDS.

Los informes y los datos se envían por correo electrónico directamente a la bandeja de entrada del remitente

Los datos obtenidos son procesados automáticamente por el método de análisis de datos que crea el informe de análisis de datos. A continuación, el administrador configura lo que se envía al remitente (Figura 9). El remitente recibe el informe creado por el administrador directamente en su bandeja de entrada (Figura 10).

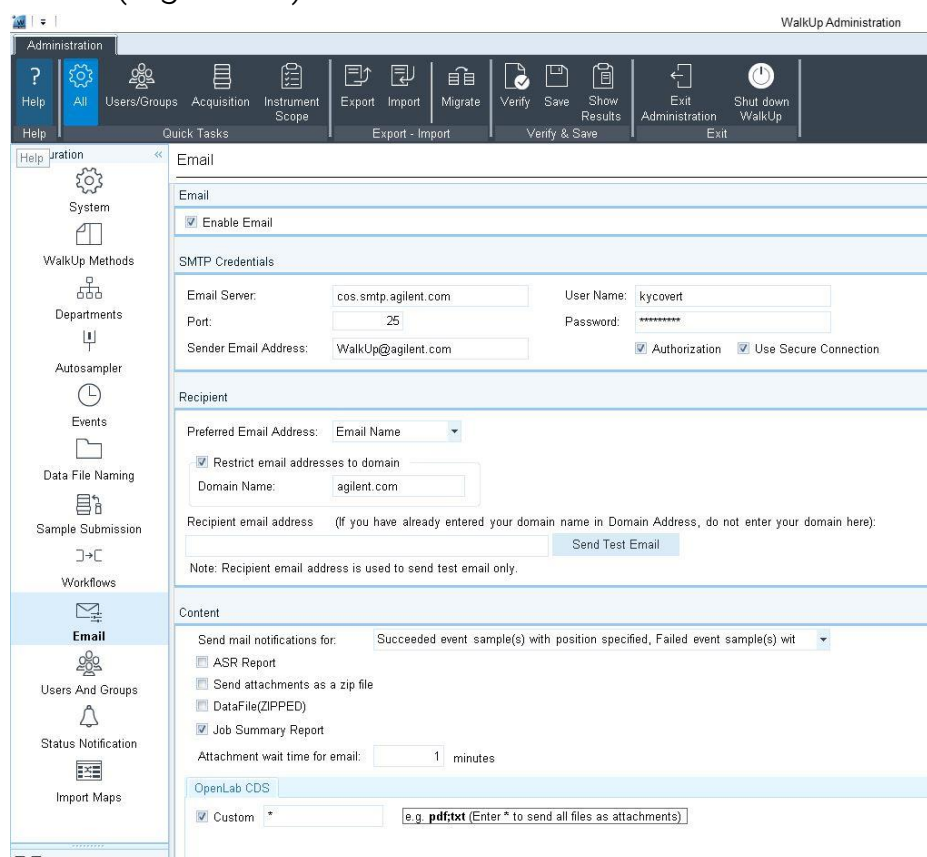


Figura 9. Los ficheros de datos, los informes de análisis de datos y los ficheros ASR se pueden enviar por correo electrónico a los remitentes.

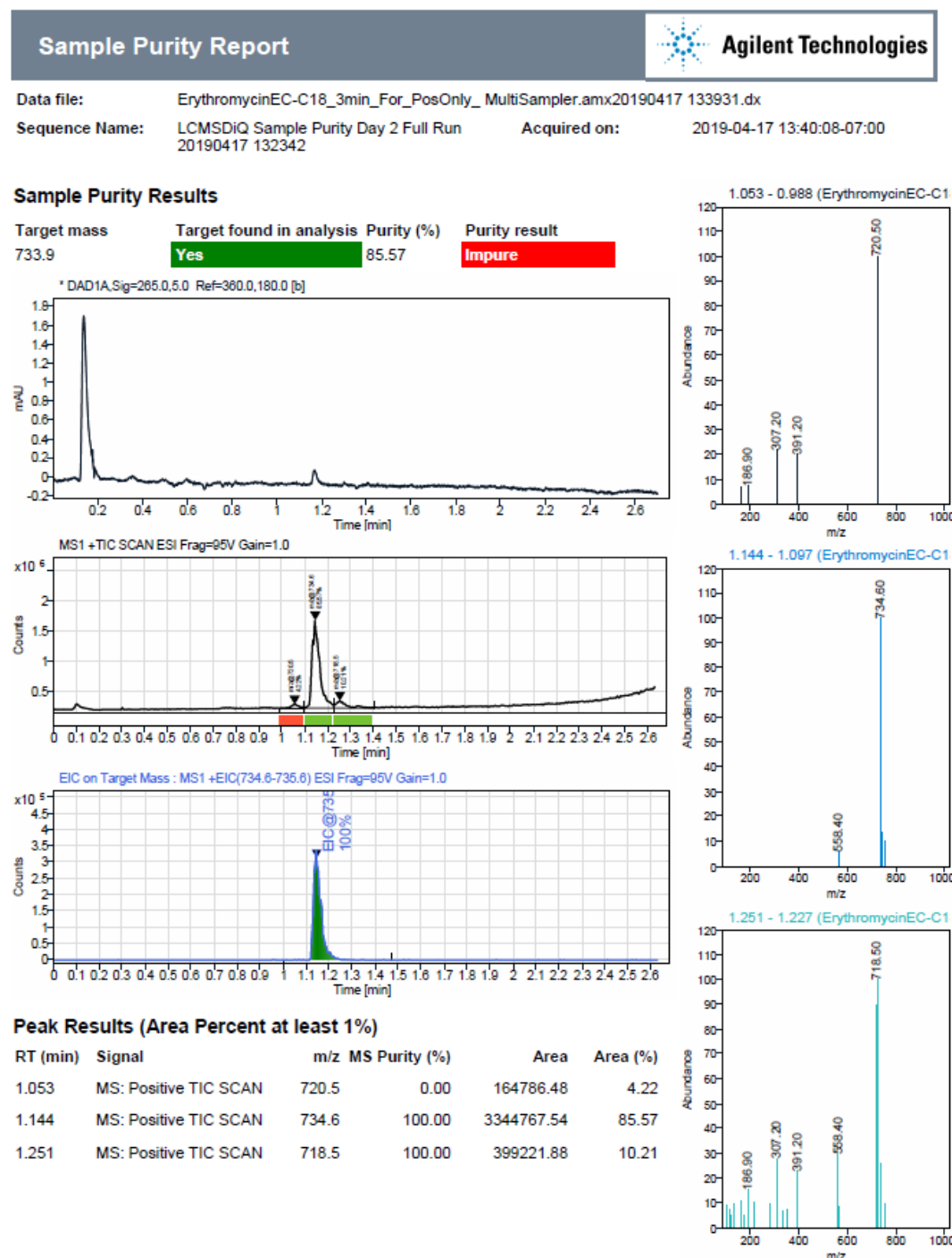


Figura 10. Un informe de WalkUp sobre pureza de la muestra enviado por correo electrónico al remitente indica la pureza de la masa diana $m/z = 733,9$ (eritromicina) junto con el cromatograma UV y el cromatograma de iones totales (TIC) de MS. Las barras de color situadas debajo de los picos del TIC indican si el pico MS es puro (verde) o impuro (rojo).

Conclusiones

- Con una capacidad de remisión de muestras rápida, flexible e intuitiva, junto con opciones flexibles de generación de informes, MassHunter Walkup proporciona una experiencia de acceso abierto con la que resulta sencillo trabajar y que está llena de funciones para remitentes de muestras y administradores.
- En combinación con un sistema InfinityLab LC/MSD iQ, se proporciona a los remitentes información de masas que permiten unas identificaciones más definitivas.
- Las sofisticadas herramientas administrativas permiten al administrador de sistemas configurar flujos de trabajo que se puedan ejecutar prácticamente sin requerir formación.

Solo para uso en investigación. Prohibido su uso en procedimientos diagnósticos.