

Réimpression de poster

American Society for Mass Spectrometry 2019

ThP349

Utilisation du logiciel MassHunter en libre accès afin de simplifier et d'automatiser l'analyse par spectrométrie de masse

Kyle Covert, Robert Ley

Agilent Technologies Inc. Santa Clara, CA,
États-Unis

La synthèse d'un principe actif pharmaceutique (API) requiert le suivi de nombreuses étapes réactionnelles. La pureté globale et le rendement de chaque étape doivent être évalués afin de garantir la fiabilité et la rentabilité de la voie de synthèse. La rapidité d'obtention des résultats est essentielle pour prendre les décisions appropriées pour l'étape suivante. Il en est de même pour la découverte de médicaments, le développement de procédés et le contrôle qualité, pour lesquels l'accès rapide aux résultats analytiques permet de prendre des décisions plus efficacement, en plus d'économiser temps et argent. La meilleure façon de répondre à ces besoins est de disposer d'un instrument analytique en libre accès, simple d'utilisation et générant rapidement des résultats de haute qualité. Le LC/MSD iQ Agilent InfinityLab équipé du logiciel MassHunter en libre accès constitue une telle solution.

Un système en libre accès comporte deux types d'utilisateurs : l'administrateur et les usagers. L'administrateur est l'expert qui gère le système. Il crée les méthodes utilisées par les usagers pour analyser leurs échantillons. Le système peut être « sécurisé » afin que les usagers puissent interagir uniquement avec les écrans de soumission des analyses (figure 1).

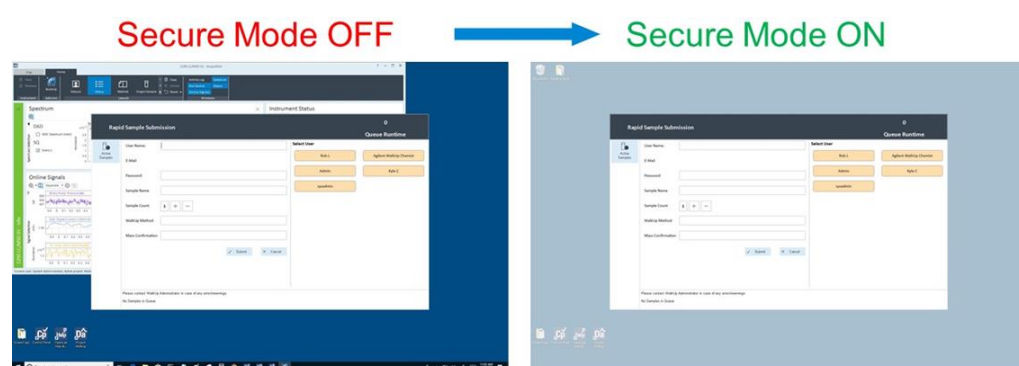


Figure 1. Mode sécurisé du système en libre accès.

- Quand le *mode sécurisé* est désactivé, l'utilisateur peut avoir accès au logiciel de traitement des données chromatographiques OpenLAB et aux autres programmes de l'ordinateur.
- Quand le *mode sécurisé* est activé, l'utilisateur peut uniquement soumettre son échantillon au système en libre accès. Tous les autres programmes et commandes du système d'exploitation sont verrouillés.

L'utilisateur n'a pas besoin de connaître le logiciel de traitement des données chromatographiques OpenLAB ni même de savoir utiliser l'instrument. Avec un système en libre accès, un utilisateur peut simplement aller à l'instrument, soumettre un échantillon et retourner à son bureau pour recevoir par e-mail un rapport avec les résultats analytiques (figure 2). Cela permet aux laboratoires de réduire les temps de formation et d'améliorer l'efficacité opérationnelle.

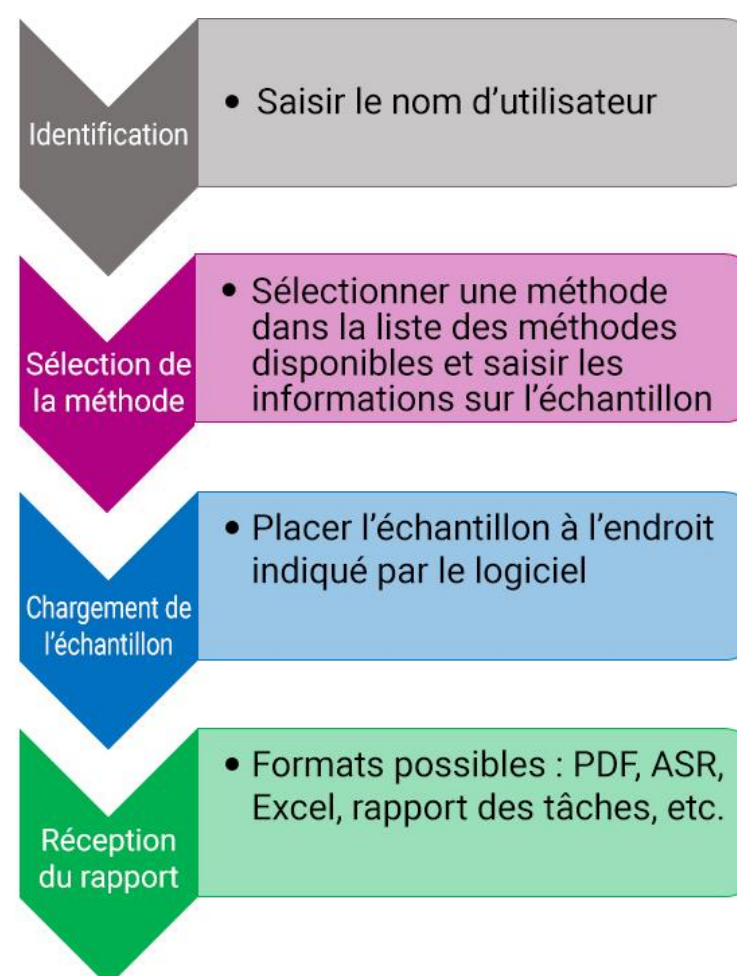


Figure 2. Flux de tâches d'un utilisateur type pour un LC/MSD iQ Agilent en libre accès.

Données expérimentales

Instruments typiques d'un système en libre accès

Le LC/MSD iQ Agilent InfinityLab en libre accès comprend les modules suivants :

- Pompe à haut débit Agilent 1290 Infinity II (G7120A)
- Multi-échantillonneur Agilent 1290 Infinity II (G7167B) ou échantillonneur en mode flacons Agilent 1290 Infinity II (G7129B)
- Thermostat multicolonne Agilent 1290 Infinity II (G7116B)
- Détecteur à barrette de diodes Agilent 1290 Infinity II (G7117B)
- LC/MSD iQ Agilent (G6160AA)

Figure 3. LC/MSD iQ Agilent avec système HPLC Prime InfinityLab II.

Une soumission d'échantillons simplifiée pour les utilisateurs de tout niveau

Il existe deux manières de soumettre des échantillons, en fonction de l'utilisation prévue du système en libre accès par le laboratoire. La *soumission rapide d'échantillon* est conçue spécifiquement pour les flux de tâches de *pureté d'échantillon* ou de *confirmation de la masse cible* (figure 4). L'autre possibilité consiste à utiliser la *soumission classique d'échantillon* pour les flux de tâches plus complexes, qui requièrent plusieurs méthodes ou un collecteur de fraction basé sur la masse (figure 5). Les usagers doivent suivre les étapes ci-dessous pour les deux types de soumission d'échantillons :

- Saisie de leur identifiant dans le système en libre accès et, le cas échéant, d'un mot de passe
- Saisie d'informations simples sur l'échantillon
- Sélection de la méthode dans la liste des méthodes analytiques
- Saisie des masses cibles (optionnel)
- Chargement de l'échantillon dans l'échantillonneur, tel qu'indiqué par le système
- Réception par e-mail du rapport de résultats

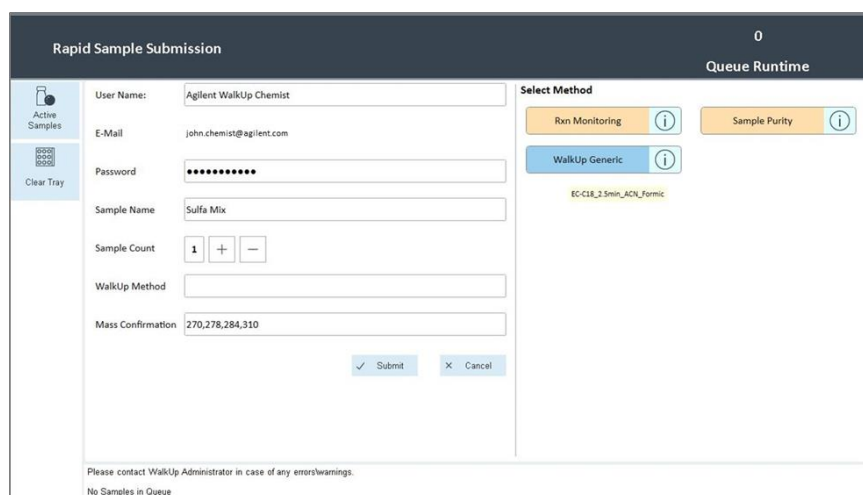


Figure 4. Soumission rapide d'échantillon : toutes les entrées sont effectuées depuis un seul écran. Le volet de droite affiche les méthodes disponibles pour les usagers et les « boutons » pour la sélection de la méthode sont tactiles.

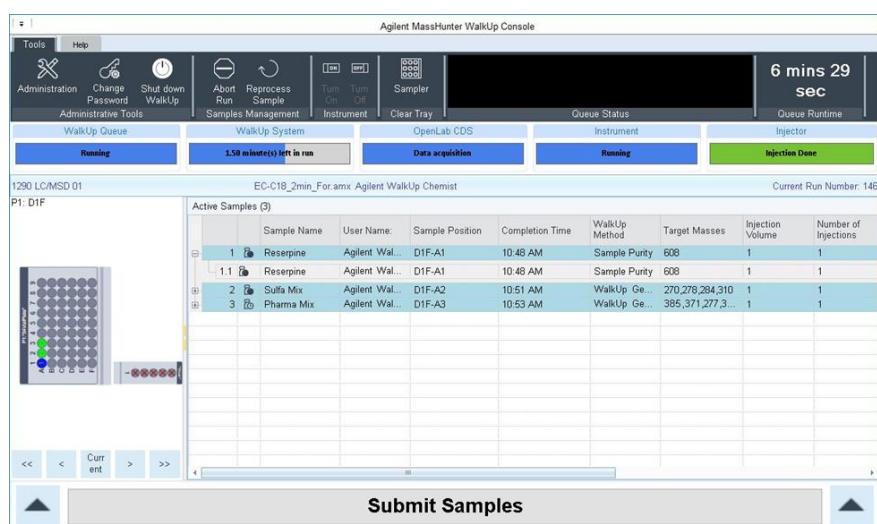


Figure 5. Soumission classique d'échantillons : il est possible de soumettre plusieurs échantillons à la fois avec des méthodes spécifiques pour chaque échantillon. Une file d'attente d'échantillons actifs indique quel échantillon est en cours d'analyse.

Avantages et bénéfices pour les responsables de laboratoire

Pour l'administrateur, quelques-uns des principaux avantages du système en libre accès sont les suivants :

- L'écran tactile associé à la fonction de soumission rapide d'échantillon
- Le contrôle du groupe et les privilèges des utilisateurs (figure 6)
- La capacité d'importer des listes de tâches définies avec la soumission classique d'échantillon
- Un plateau d'échantillons externe pour des soumissions d'échantillons ininterrompues
- La file d'attente d'échantillons et l'état de l'instrument en temps réel pour les petits ou grands laboratoires
- La gestion de plusieurs systèmes à l'aide des services partagés du logiciel de traitement des données chromatographiques OpenLAB dans une configuration de grand laboratoire
- La vérification de la configuration du système après l'introduction de modifications
- Des alertes par SMS ou e-mail quand le système rencontre un problème

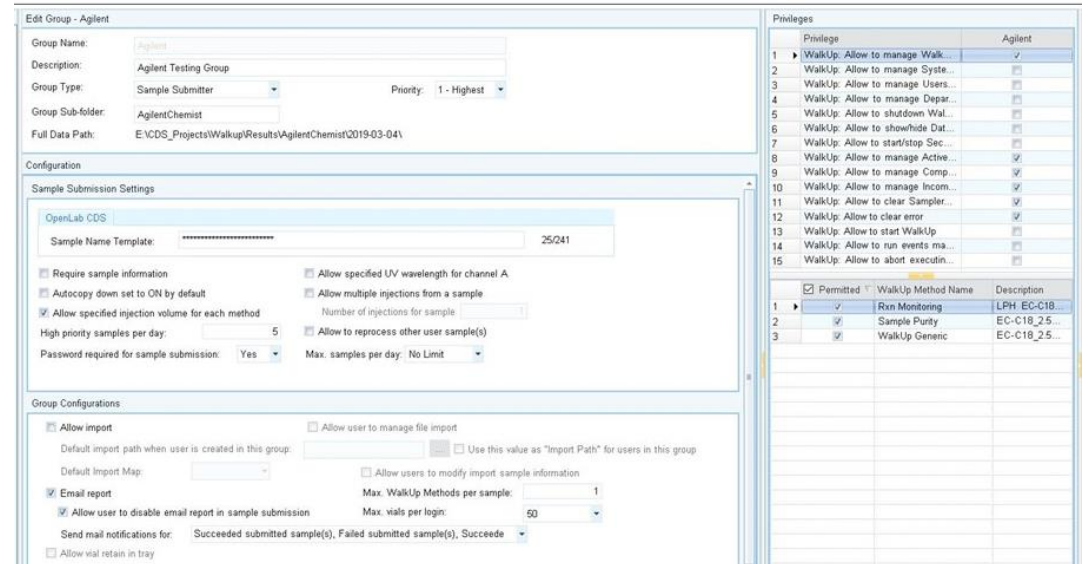


Figure 6. L'onglet des permissions de groupe contient une liste de tous les groupes et de leurs utilisateurs. Chaque groupe peut être doté d'un ensemble de privilèges et de méthodes à utiliser.

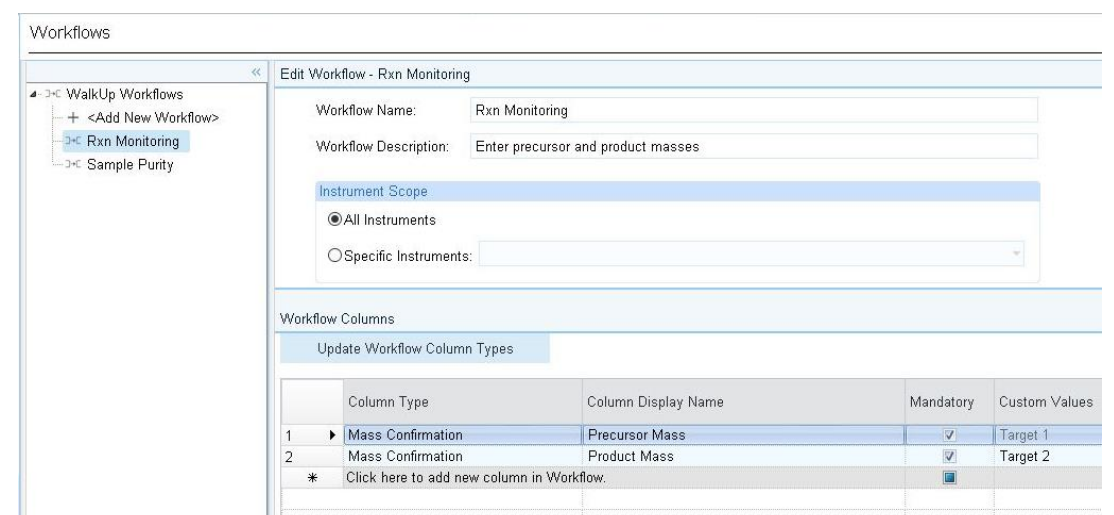


Figure 7. Un flux de tâches de suivi de réaction. Deux colonnes ont été ajoutées à l'écran de soumission d'échantillon pour la masse cible d'un précurseur et les masses cibles des produits.

Programmation automatique des événements importants du système

Les événements importants peuvent être programmés dans le temps (p.ex. par jour, par semaine ou sur une journée de travail) ou sur la base des soumissions d'échantillons (p.ex. à la fin d'un plateau, après N analyses) (figure 8). Il est possible de sélectionner plusieurs méthodes pour une utilisation en libre accès. Les flacons à échantillons peuvent être stockés dans des positions de référence, qui ne sont pas utilisées dans la file d'attente des échantillons. Voici quelques exemples d'événements pouvant être programmés :

- Analyse d'étalons de référence sur l'ensemble de la journée de travail
- Mélanges étalon afin de garantir que les quantités rapportées sont conformes
- Vérification de la conformité du système en termes de stabilité de l'instrument et de la colonne
- Analyse de blancs pour vérifier l'absence d'effet mémoire ou de contamination
- Possibilité de programmer la fonction Autotune ou Checktune sur le LC/MSD iQ.

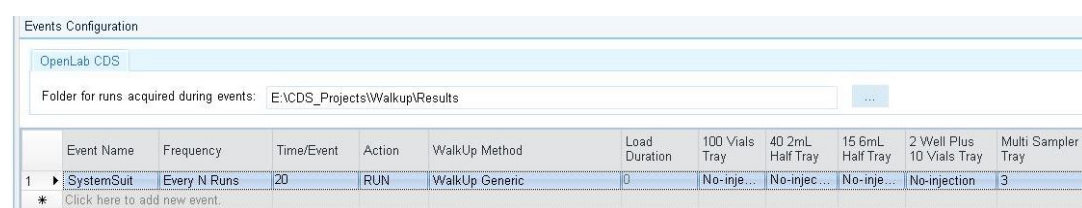


Figure 8. Écran d'acquisition du logiciel OL CDS.

Rapports et données envoyées par e-mail directement dans la boîte de réception de l'utilisateur

Les données acquises sont automatiquement traitées par la méthode de traitement des données, qui génère un rapport. L'administrateur sélectionne les éléments à envoyer à l'utilisateur (figure 9). L'utilisateur reçoit le rapport créé par l'administrateur directement dans sa boîte de réception (figure 10).

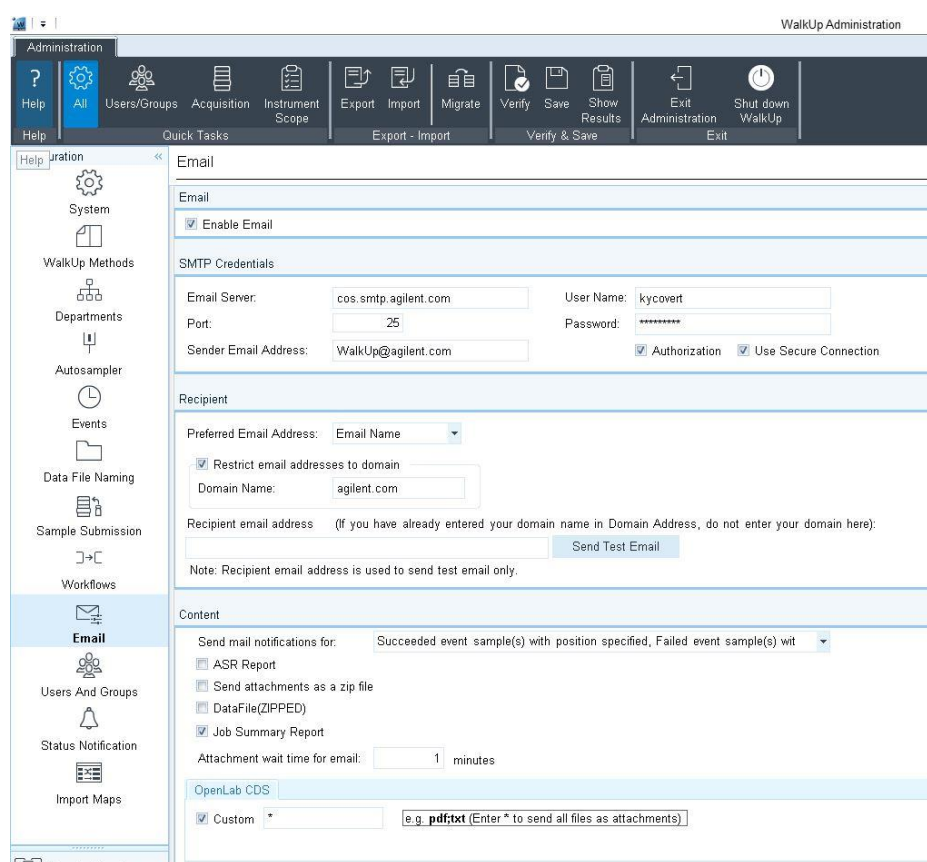


Figure 9. Les fichiers de données, les rapports de traitement des données et les fichiers ASR peuvent être envoyés par e-mail aux usagers.

Ces informations peuvent être modifiées sans préavis.

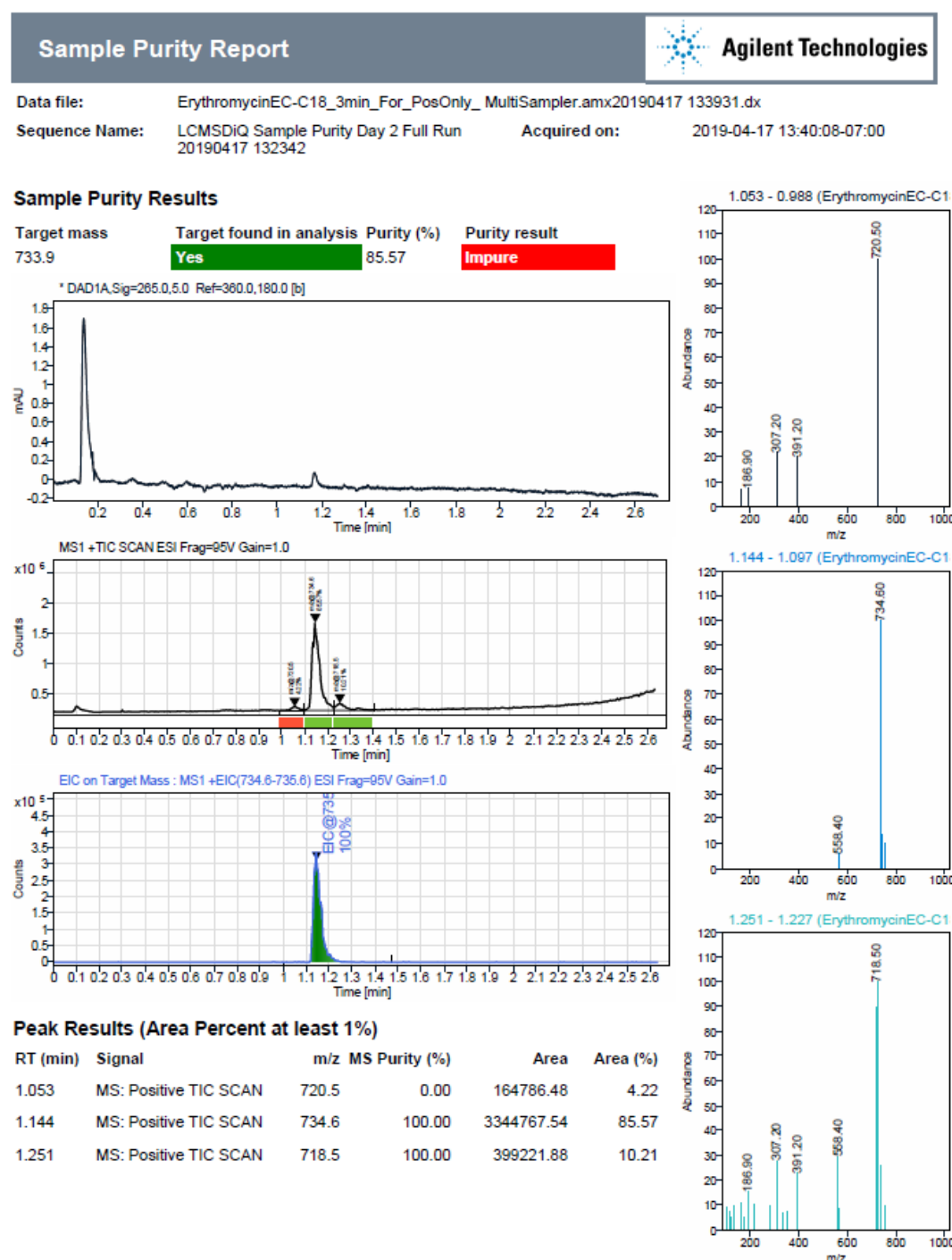


Figure 10. Un rapport de pureté d'échantillon créé par le logiciel en libre accès et envoyé par e-mail à l'utilisateur montre la pureté de l'échantillon pour la masse cible m/z 733,9 (érythromycine) avec les chromatogrammes UV et d'ions totaux MS. Les barres colorées sous les pics du chromatogramme d'ions totaux indiquent que le pic MS est pur (vert) ou impur (rouge).

Conclusions

- Combinant des capacités de soumission d'échantillon rapides, intuitives et modulables avec des options de génération de rapports flexibles, le logiciel MassHunter en libre accès est une solution simple d'utilisation et riche en fonctionnalités pour les usagers et les administrateurs.
- Son association avec le LC/MSD iQ InfinityLab permet aux usagers d'obtenir des informations de masse pour des identifications plus précises.
- Grâce aux outils d'administration sophistiqués, les administrateurs système ont la possibilité de configurer des flux de tâches qui peuvent être suivis pratiquement sans formation.

Destiné à la recherche uniquement. Ne pas utiliser à des fins diagnostiques.