

ポスターリプリント

ASMS 2019
ThP349

MassHunter WalkUp Open Access

ソフトウェアによる質量分析の簡素化 および自動化

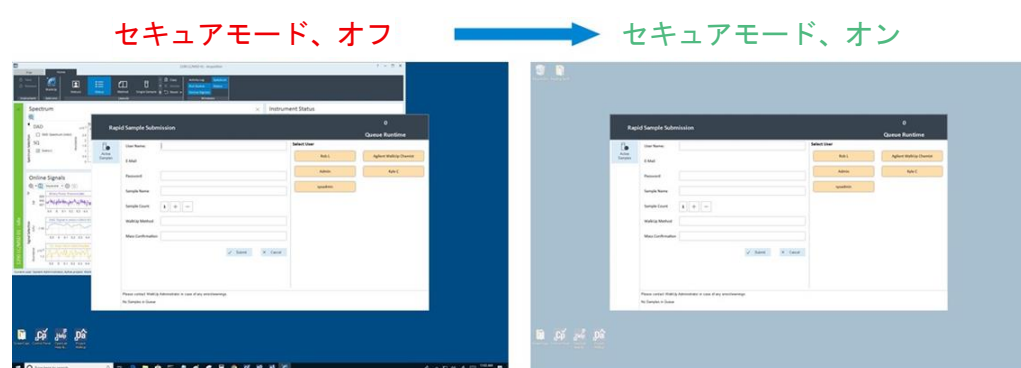
Kyle Covert, Robert Ley

Agilent Technologies Inc., Santa Clara, CA

はじめに

医薬品有効成分 (API) の合成では、多数の反応ステップのモニタリングが必要になります。その各ステップで全体の純度と収率についてテストし、信頼性とコスト効率に優れた合成経路を確立しなければなりません。結果を迅速に得ることが、次のステップでの適切な判定に重要です。創薬、プロセス開発、品質管理の場合も同じで、分析結果の迅速な取得は時間とコストの節約だけでなく、判定時間の短縮にもつながります。これらのニーズに対応する最良のツールは、高品質の結果を迅速に取得でき、しかも容易に使用できるオープンアクセスの分析システムです。Agilent InfinityLab LC/MSD iQ と MassHunter WalkUp ソフトウェアなら、このようなソリューションが実現します。

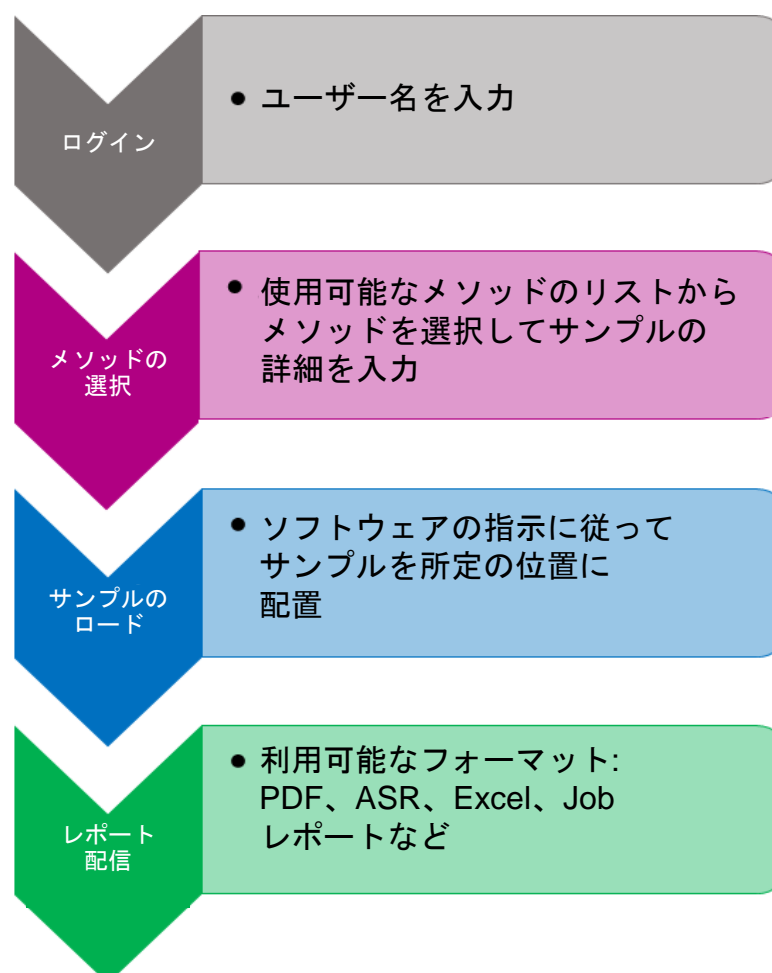
オープンアクセスのシステムには、 アドミニストレータとサブミッターの 2 つのユーザータイプがあります。アドミニストレータは、システムを管理するエキスパートです。アドミニストレータは、サブミッターがサンプルの分析に使用するメソッドを作成します。システムを「セキュアモード」に設定すると、サブミッターはサンプルサブミット画面しか操作できなくなります (図 1)。



1. WalkUp のセキュアモード機能

- セキュアモードをオフにすると、サブミッターは OpenLab CDS やコンピュータ上の他のプログラムにアクセスすることができます。
- セキュアモードがオンの場合、サブミッターは Walkup サンプルサブミット画面にのみアクセスが制限されます。他のすべてのプログラムとオペレーティングシステムコマンドはロックアウトされます。

サブミッターには、Agilent OpenLab CDS の知識も、機器の操作方法についての知識さえも不要です。WalkUp なら、サブミッターは機器が置いてある場所に行き、サンプルをサブミットして、デスクに戻るだけで、分析結果が記載されたレポートを電子メールで受信できます (図 2)。そのため、システムを利用するための学習時間を短縮し、ラボ全体の運用効率を向上させることができます。



2. Agilent LC/MSD iQ WalkUp システムの一般的なユーザーワークフロー

実験方法

代表的な WalkUp システム

Agilent InfinityLab LC/MSD iQ WalkUp システムの一例として、以下のモジュール構成で 사용할 ことが可能です。

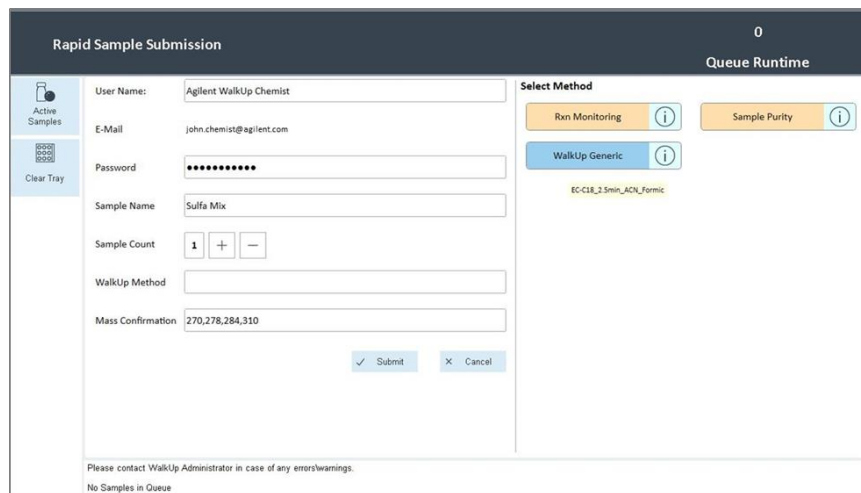
- Agilent 1290 Infinity II
ハイスピードポンプ (G7120A)
- Agilent 1290 Infinity II
マルチサンブラ (G7167B)
または Agilent 1290 Infinity II
バイアルサンブラ (G7129B)
- Agilent 1290 Infinity II
マルチカラムサーモスタット (G7116B)
- Agilent 1290 Infinity II
ダイオードアレイ検出器 (G7117B)
- Agilent LC/MSD iQ (G6160AA)

3. Agilent LC/MSD iQ と InfinityLab II Prime HPLC スタック

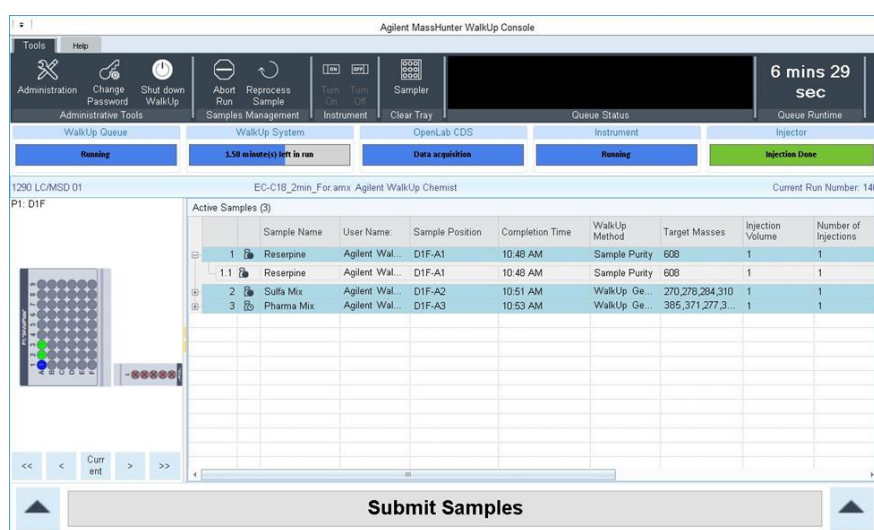
経験の浅いユーザーでも容易なサンプルサブミット

ラボでの WalkUp システムの使用目的に応じて、2 種類のサンプルサブミットの方法を利用できます。高速サンプルサブミットは、サンプル純度またはターゲット質量同定ワークフローと組み合わせて使用する場合に特化して設計されています (図 4)。一方、クラシックサンプルサブミットは、複数のメソッドを使用する複雑なワークフロー、または質量ベースのフラクションコレクションなどに使用されます (図 5)。どちらのサンプルサブミットワークフローにおいても、サブミッターは次に示す同じステップを実行します。

- WalkUp システムでのユーザー認証およびオプションのパスワードの入力
- シンプルなサンプル情報の入力
- 分析メソッドのリストからの選択
- ターゲット質量の入力 (オプション)
- システムの指示に従ったサンプルラへのサンプルのロード
- 電子メールでの結果の受信



4. 高速サンプルサブミット: この 1 つの画面からすべての入力を実行。右側にサブミッターが利用できるメソッドが表示され、タッチスクリーンにメソッド選択の「ボタン」があります。



5. クラシックサンプルサブミット: 各サンプルに固有のメソッドで、複数のサンプルを一括でサブミットできます。アクティブサンプルキューは、分析進行中のサンプルを示します。

ラボ管理者にとっての利点とメリット

WalkUp は、システム管理者にとって主に次のような利点があります。

- タッチスクリーン機能による高速サンプルサブミット
- グループおよびユーザーの権限の管理 (図. 6)
- 定義済みのワークリストをインポートするクラシックサンプルサブミット機能
- 中断のないサンプルサブミットが可能な外部サンプルトレイ
- 小規模および大規模ラボにおけるリアルタイムのサンプルキューと機器状況の監視
- 大規模なラボ構成における OpenLab CDS 共有サービスを用いた複数システムの管理
- 変更後のシステム構成の検証
- システムで問題が生じた場合の電子メールまたは SMS によるアラート

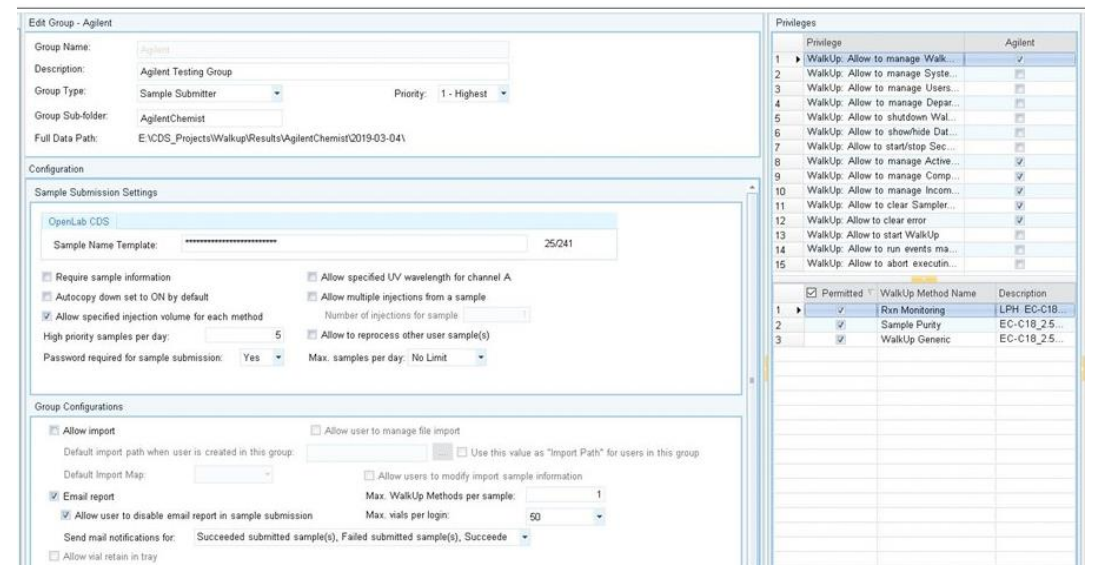


図 6. グループとそのユーザーすべてのリストが含まれるグループ権限タブ。権限のセットと使用可能なメソッドをグループごとに割り当てることができます。

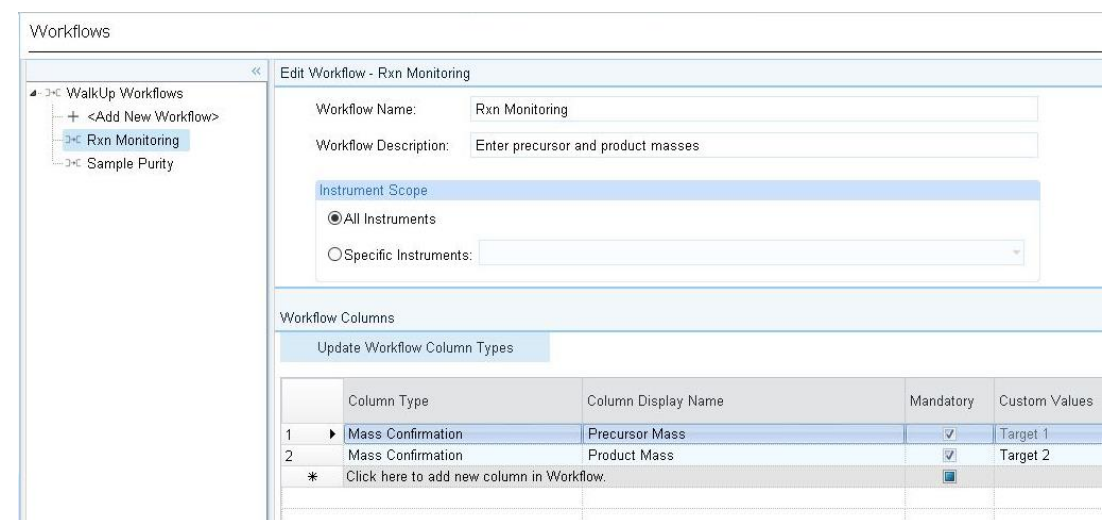


図 7. リアクションモニタリング用のワークフロー。サンプルサブミット画面に、プリカーサターゲット質量の列とプロダクトターゲット質量の列が追加されています。

重要なシステムイベントの自動スケジューリング

重要なイベントを、時間ベース (毎日、毎週、毎営業日など) またはサンプルサブミットベース (1 プレート完了後、N 回実行後など) でスケジューリングできます (図 8)。任意の数の WalkUp メソッドを選択できます。サンプルバイアルは、サンプルキューで使用していない基準位置に保管できます。実行可能なイベントの例は次のとおりです。

- 作業日を通じてリファレンス標準を分析
- 報告された量が目標どおりであることを確認するためのキャリブレーション標準
- 機器とカラムの安定性についてのシステム適合性チェック
- キャリーオーバーまたは汚染を調査するためのブラン克蘭
- LC/MSD iQ で利用できる定期オートチューニングおよびチューニングチェック

Event Name	Frequency	Time/Event	Action	WalkUp Method	Load Duration	100 Vials Tray	40 2mL Half Tray	15 6mL Half Tray	2 Well Plus 10 Vials Tray	Multi Sampler Tray
SystemSut	Every N Runs	20	RUN	WalkUp_Generic	0	No-inje...	No-injec...	No-inje...	No-injection	3

図 8. OL CDS データ取り込み画面

レポートとデータをサブミッターのメールボックスに直接送信

取り込んだデータがデータ解析メソッドによって自動的に処理され、データ解析レポートが作成されます。次に管理者が、サブミッターに送信する内容を構成します (図 9)。サブミッターは管理者権限によって作成されたレポートを受信箱で受け取ります (図 10)。

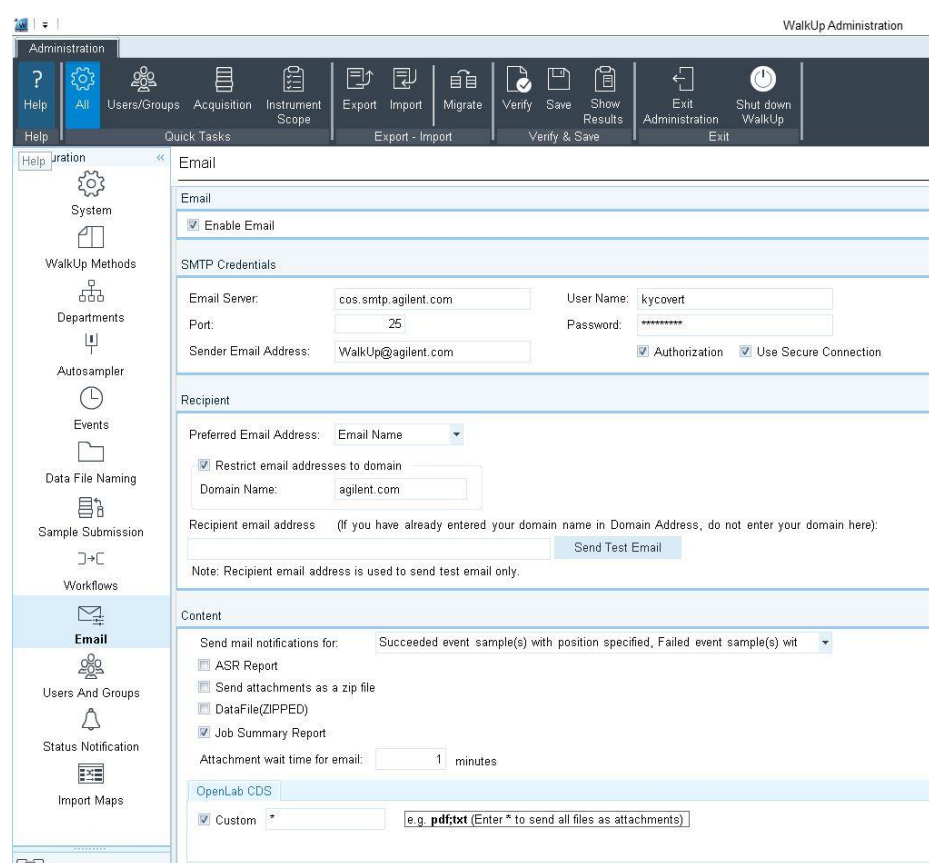


図 9. データファイル、データ解析レポート、ASR ファイルをサブミッターに電子メールで送信可能

製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

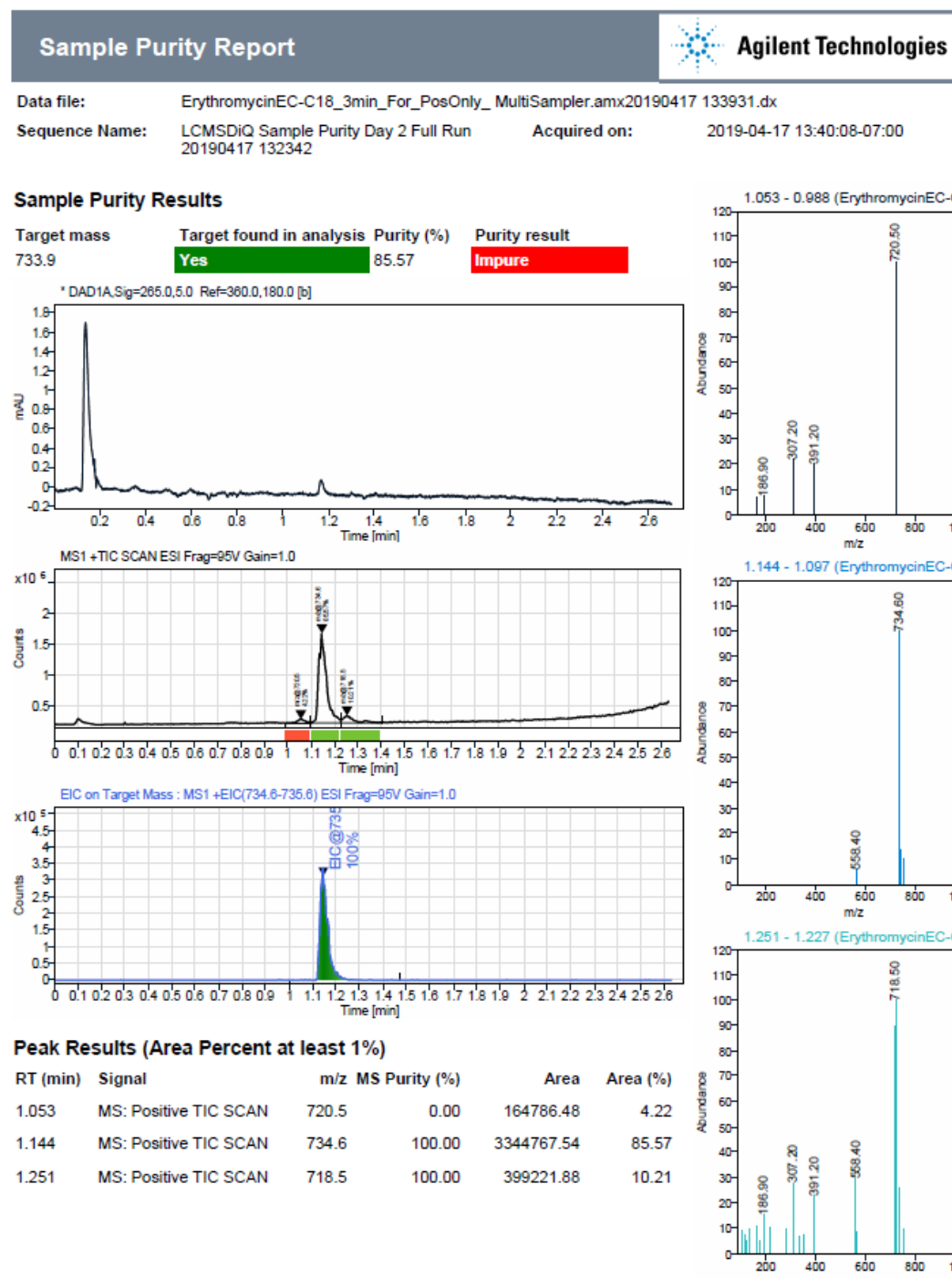


図 10. サブミッターに電子メールで届いたサンプル純度の WalkUp レポート。ターゲット質量 m/z 733.9 (エリスロマイシン) のサンプル純度と UV クロマトグラムおよび MS トータルイオンクロマトグラム (TIC) が記載されています。TIC ピークの下の色つきのバーは、MS ピークが純粋な成分 (緑) か不純物 (赤) かを示しています。

結論

- MassHunter WalkUp は、高速かつ柔軟で直観的なサンプルサブミット機能と、柔軟なレポート作成オプションを兼ね備えており、サンプルサブミッターも管理者も、作業しやすいオープンアクセス体験を得られ、豊富な機能を利用できます。
- InfinityLab LC/MSD iQ と組み合わせると、サブミッターは質量情報を得ることができ、より信頼性の高い同定が実現します。
- システム管理者は、高度な管理者向けツールを利用することで、ほぼトレーニングなしで実行可能なワークフローを構成することができます。

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。