

Переиздание постера

ASMS 2019

ThP349

Упрощение и автоматизация анализов масс-спектрометрии посредством применения ПО MassHunter WalkUp

Кайл Коверт (Kyle Covert), Роберт Лей (Robert Ley)

Agilent Technologies Inc.
Санта-Клара, Калифорния

Введение

Синтез активного фармацевтического ингредиента (АФИ) требует мониторинга многочисленных этапов реакции. Каждый этап необходимо проверить на общую чистоту соединения и выход, чтобы обеспечить установление надежного и экономичного пути синтеза. Быстрое получение результатов лежит в основе определения подходящих решений для следующего этапа. То же самое можно сказать о разработке новых лекарственных препаратов, разработке процессов и контроле и обеспечении качества, когда быстрое получение аналитических результатов дает возможность скорее принимать решения, а также экономить время и деньги. Лучший способ удовлетворить эти потребности — это применять простой в использовании аналитический прибор, позволяющий быстро получить высококачественные результаты. ВЭЖХ-МСД iQ Agilent InfinityLab с ПО Agilent InfinityLab представляет собой именно такой приборный комплекс.

В системе с открытым доступом существует два вида пользователей: администратор и пользователь. Администратором является эксперт, управляющий системой. Он создает методы, применяемые пользователями для анализа проб. Систему можно «защитить» таким образом, чтобы пользователь взаимодействовал исключительно с экранами подачи проб (Рис. 1).

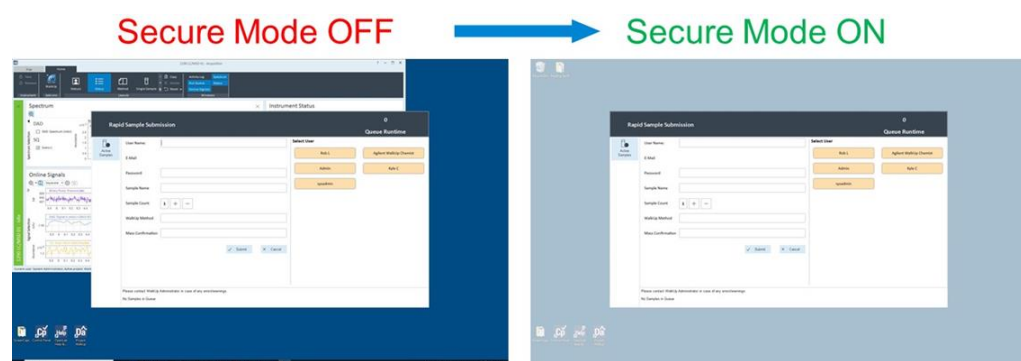


Рис. 1. Функция безопасного режима WalkUp

- При выключенном *безопасном режиме* пользователь имеет доступ к CDS OpenLab и другим программам на компьютере.
- При включенном *безопасном режиме* пользователь ограничен исключительно подачей проб WalkUp. Все остальные программы и команды операционной системы заблокированы.

Что касается пользователей, то им не требуется знаний об Agilent OpenLab CDS и даже о принципах работы прибора. Благодаря WalkUp пользователь может просто подойти к прибору, подать пробу и вернуться к своему столу, чтобы получить по электронной почте отчет с аналитическими результатами (Рис. 2). Это дает возможность лабораториям сократить время на обучение и повысить эффективность работы.



Рис. 2. Стандартный рабочий процесс пользователя системы ВЭЖХ-МСД iQ Agilent WalkUp.

Экспериментальная часть

Стандартное оборудование WalkUp

Система для ВЭЖХ-МСД iQ Agilent InfinityLab WalkUp состоит из следующих модулей:

- Градиентный насос Agilent 1290 Infinity II High-Speed Pump (G7120A)
- Автосамплер Agilent 1290 Infinity II Multisampler (G7167B) или автосамплер Agilent 1290 Infinity II Vialsampler (G7129B)
- Термостат колонок Agilent 1290 Infinity II MCT (G7116B)
- Детектор на диодной матрице Agilent 1290 Infinity II (G7117B)
- ВЭЖХ-МСД iQ Agilent (G6160AA)

Рис. 3. ВЭЖХ-МСД iQ Agilent с конструкцией ВЭЖХ InfinityLab II Prime

Простая подача проб для пользователей с любой квалификацией

Существует два способа подачи проб в зависимости от предусмотренного лабораторией применения системы WalkUp. Быстрая подача проб специально разработана для использования совместно с рабочим процессом Чистота пробы или Подтверждение целевой массы (Рис. 4). Тогда как Классическая подача проб используется для более сложных рабочих процессов, требующих нескольких методов, или для сбора фракций на основе масс (Рис. 5). Оба рабочих процесса подачи проб требуют выполнения пользователями одних и тех же этапов:

- Идентифицироваться в системе WalkUp и ввести дополнительный пароль
- Ввести простую информацию о пробе
- Выбрать из списка аналитических методов
- Ввести целевые массы (дополнительно)
- Загрузить пробу в пробоотборник согласно указаниям системы
- Получить отчет с результатами по электронной почте

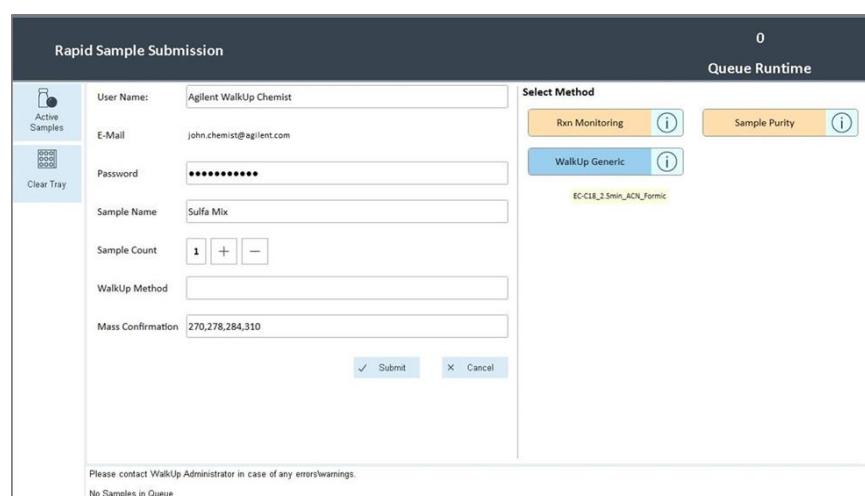


Рис. 4. Быстрая подача проб: все вводы выполняются с этого единого экрана. Правая сторона демонстрирует методы, доступные для пользователей, а для использования сенсорного экрана имеются «кнопки» для выбора метода.

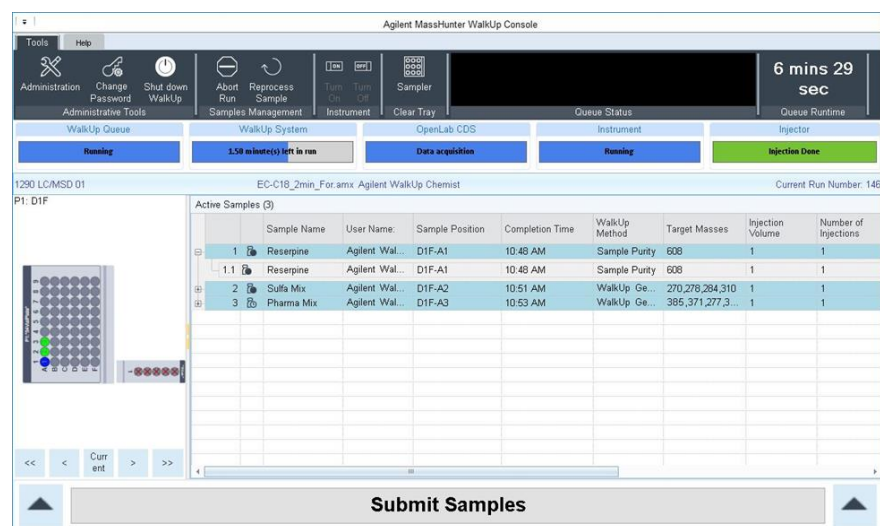


Рис. 5. Классическая подача проб: можно подавать сразу несколько проб с использованием определенных методов для каждой пробы. Очередь активных проб показывает, какая проба анализируется в данный момент.

Преимущества для руководства лабораторией

Некоторые из основных преимуществ WalkUp для администратора системы:

- Функционал сенсорного экрана при использовании быстрой подачи проб
- Управление правами доступа групп и пользователей (Рис. 6)
- Возможность импортировать определенные рабочие списки при классической подаче проб
- Внешний лоток для проб для бесперебойной подачи проб
- Очередь проб и состояние оборудования в режиме реального времени в небольших и крупных лабораториях
- Управление несколькими системами с помощью общего доступа к сервисам CDS OpenLab в конфигурации крупной лаборатории
- Верификация конфигурации системы после внесения изменений
- Оповещения по электронной почте или SMS при возникновении проблем в системе

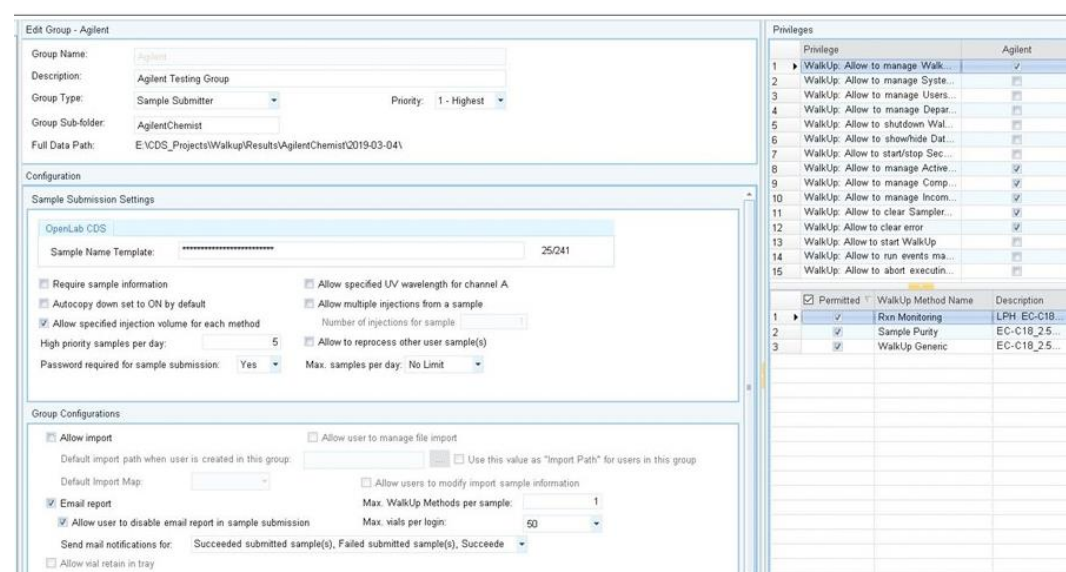


Рис. 6. Вкладка групповых разрешений содержит список всех групп и их пользователей. Каждой группе можно задать набор прав доступа и методов, которые они могут использовать.

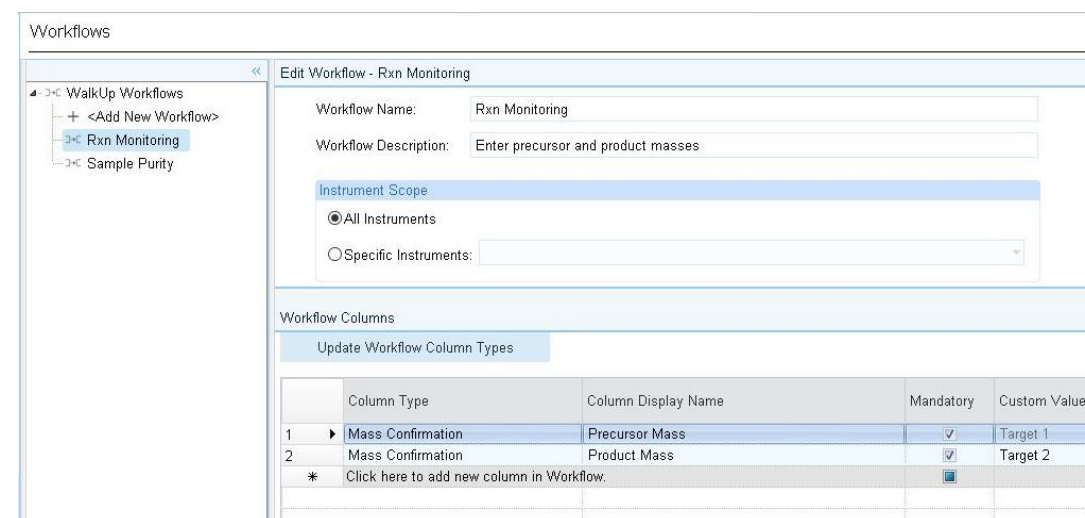


Рис. 7. Рабочий процесс для мониторинга реакции. На экран подачи проб добавляются две колонки для масс целевых исходных ионов и ионов-продуктов.

Автоматическое планирование важных событий системы

Основные события можно запланировать по времени (например, каждый день, неделю, рабочий день) или по подаче проб (например, после заполнения планшета, после N анализов) (Рис. 8). Можно выбрать любое количество методов WalkUp. Виалы с пробами можно хранить в эталонных позициях, которые не используются последовательностью проб. Несколько примеров задач, которые можно выполнить:

- Анализ эталонных стандартов в течение рабочего дня
- Калибровочные стандарты, гарантирующие точность указанных количеств
- Проверка пригодности системы для стабильности прибора и колонки
- Холостые анализы для проверки на предмет эффекта памяти и загрязнения
- Благодаря ВЭЖХ-МСД iQ доступны запланированная автонастройка или проверка настройки.

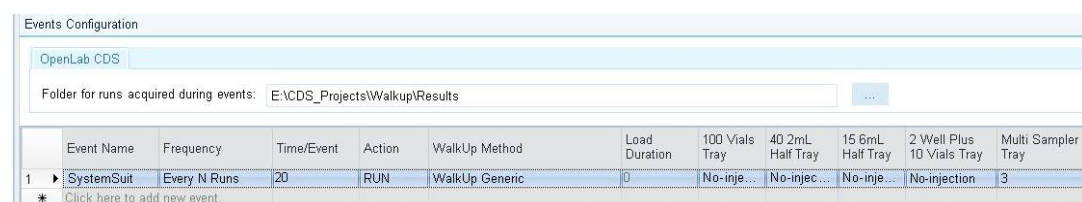


Рис. 8. Экран сбора данных OL CDS.

Отчеты и данные отправляются пользователю по электронной почте.

Полученные данные автоматически обрабатываются методом анализа данных, который создает отчет об анализе данных. Затем администратор настраивает, что именно будет отправлено пользователю (Рис. 9). Пользователь получает отчет, созданный администратором, по электронной почте (Рис. 10).

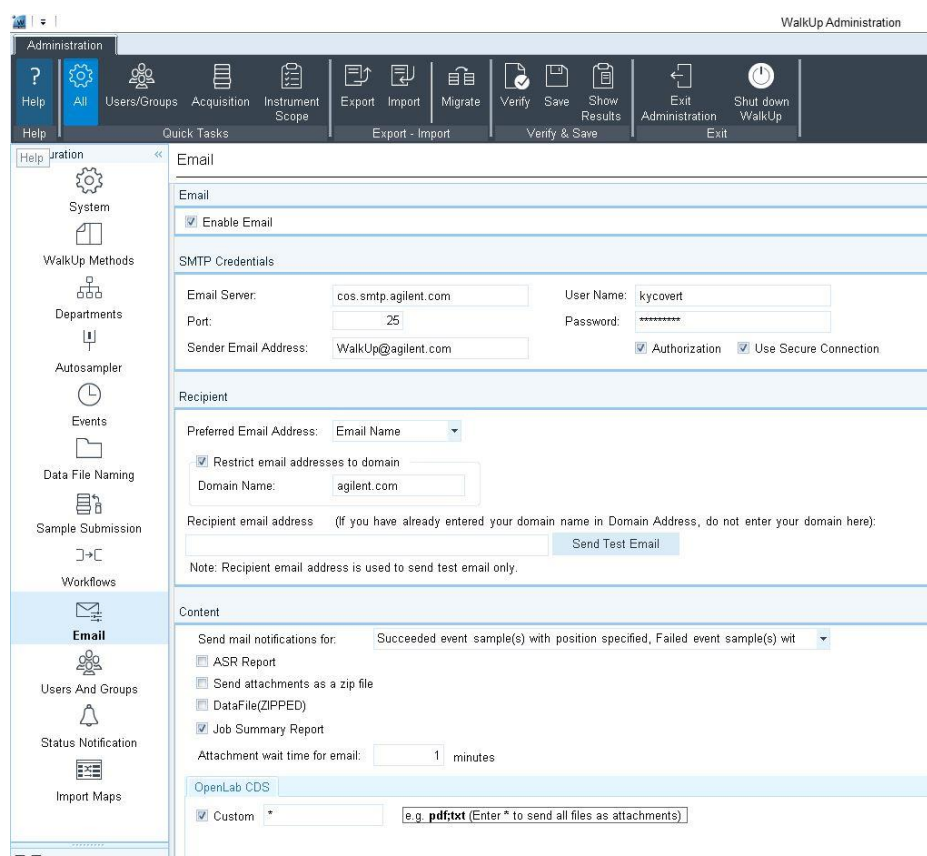


Рис. 9. Пользователям можно отправить по электронной почте файлы данных, отчеты по анализу данных и файлы ASR.

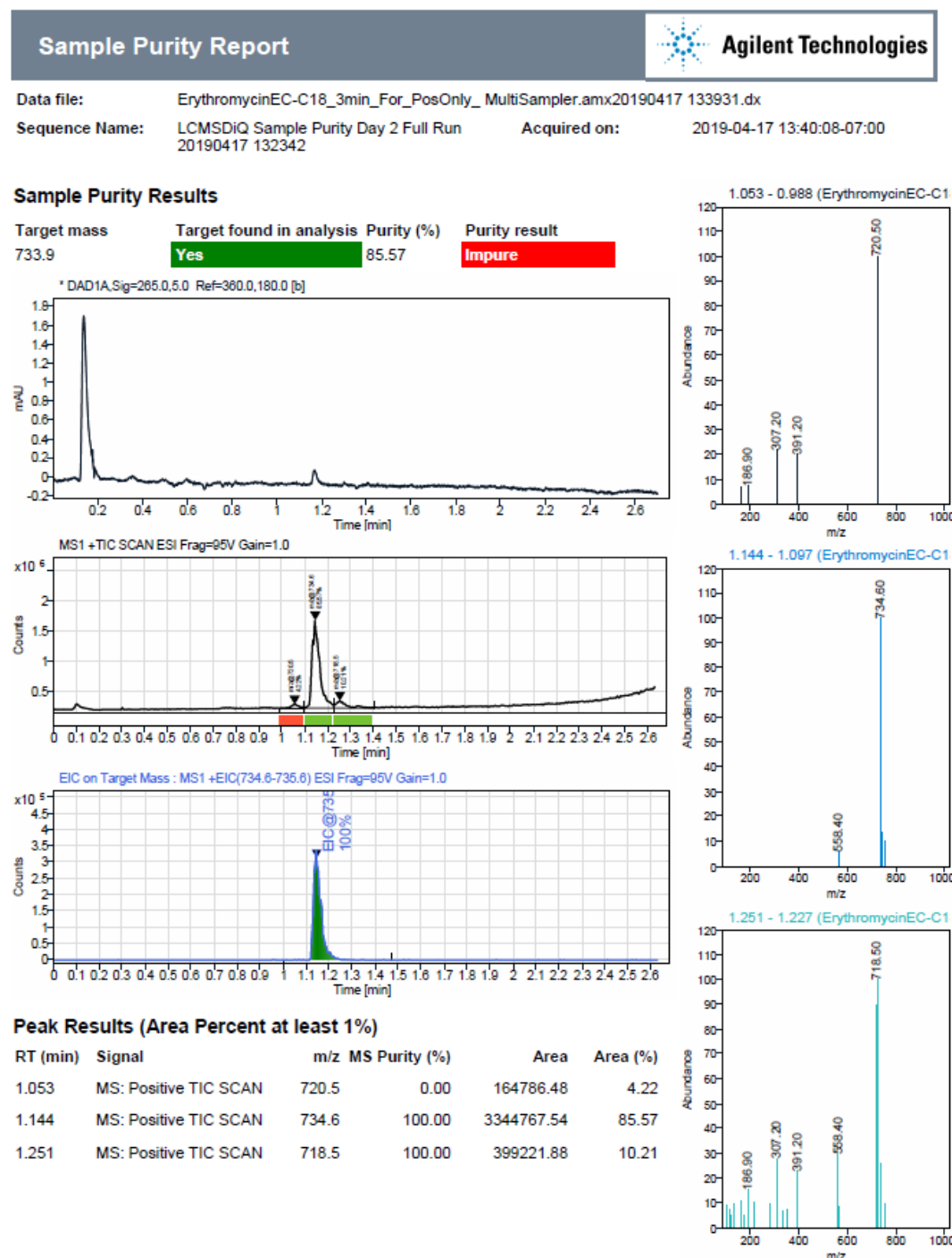


Рис. 10. Отчет WalkUp о чистоте пробы, отправленный пользователю по электронной почте, демонстрирует чистоту пробы целевой массы m/z 733,9 (эритромицин), а также УФ-хроматограмму и полный ионный ток МС. Цветные полосы под пиками общей ионной хроматограммы показывают, является ли пик МС чистым (зеленым) или с примесями (красным).

Выводы

- Благодаря возможностям быстрой, универсальной и понятной подачи проб в сочетании с гибкими возможностями создания отчетов MassHunter WalkUp дает возможность использовать простой в работе режим с открытым доступом с обширным функционалом для пользователей и администраторов.
- В сочетании с ВЭЖХ-МСД iQ InfinityLab пользователи получают данные о массах для более точных идентификаций.
- Высокотехнологичные инструменты администрирования позволяют системному администратору конфигурировать рабочие процессы, которые можно выполнить практически безо всякого обучения.

Только для исследовательских целей. Не для использования в диагностических процедурах.