

OpenLab CDS 自定义计算器工具的高级使用方法：寡核苷酸分析示例

前言

OpenLab CDS 中的自定义计算器功能使您能够利用基本结果信息进行计算。您可以使用这些计算生成以应用为导向的结果或质量控制统计数据。自定义计算使您能够根据现有系统生成的结果，通过数学和非数学计算得到新数值（图 1）。可对样品的逐个峰进行计算或在整个进样组中进行计算，也可进行复杂的多变量计算。单击鼠标即可将自定义计算结合到处理方法中。

自定义计算器和自定义计算可以成为您实验室的强大工具。但是，创建使用自定义计算器的高级工作流程方法可能听起来困难重重。本概述演示了在寡核苷酸采集和分析方法集中，如何使用 OpenLab CDS 的自定义计算器计算和报告寡核苷酸最终产物峰面积（需要大量计算）。

由于低聚物在生产和储存阶段会发生多种分子修饰，必须通过 LCMS 和软件工作流程在纯度分析中对这些修饰进行测定，这使得低聚物分析十分复杂。尽管起始的目标化合物仅有一种，但在分析过程中可能会出现以不同加合物形式存在的物质（钠、钾等）。还可能存在比 FLP（全长产物）短或长一个或多个核酸碱基的工艺杂质和降解物，进一步增加了数据处理过程中需要考虑的物质。采用自定义计算器工作流程有助于在峰面积%报告中将收集到的数据按 FLP、短链物质、长链物质、脱嘌呤物质、氧化 FLP 等组别进行有意义分组，同时减少手动步骤，从而节省大量时间。

本文比较了使用自定义计算器代替原始软件中的手动工作流程处理超过 100 个质谱数据通道所节省的时间，以及您的实验室和工作人员在运行自定义计算器时所承担的职责，从而展示了使用 OpenLab CDS 自定义计算器的自动化纯度分析工作流程和由此流程生成的报告，将帮助您的实验室取得成功。

作者

Jarod N Grossman,
Niels Van Herck, Frederick Thibaut
安捷伦科技有限公司

Willy Verluyten, Anja Deckers,
Jean-Paul Boon, Mario Hellings
强生旗下杨森制药公司

方法创建和使用

合成寡核苷酸样品中含有大量共洗脱的色谱杂质。定量这些杂质的特定色谱方法可用于放行和稳定性检测。作为标准，这些方法应基于 UV 和 MS 检测，并具有稳定性指示性。将色谱选择性和 MS 选择性相结合能够产生准确的纯度数据集。本工作流程可提取所有特定的 m/z 通道并结合预定义时间窗内的数据处理。合并所有结果的峰面积可最终得到列出所有 MS 杂质的峰面积%报告，最多可纳入 120 种杂质。此外，此分析程序应具备准确性、便于质量控制，并且相关流程步骤的工作量应尽可能低。

本应用使用自定义计算器开发得到自动化工具，可用于提取 Agilent MSD XT 单四极杆仪器上的 MS 全扫描通道，并在预定义的时间窗内进行分析，最终生成一份合并所有数据的面积% 报告。

图 2 显示了工作流程的手动和自动创建方法。图 3 展示了用户日常如何使用自定义计算器节省时间。在符合安捷伦推荐的最低要求的工作站 PC 上，在最大需求量下输入手动处理方法至少需要 30-45 分钟的手动操作时间，但对于复杂的样品组可能需要长达几个小时。每个需要在序列中使用的单独处理方法都必须耗费同样的时间。

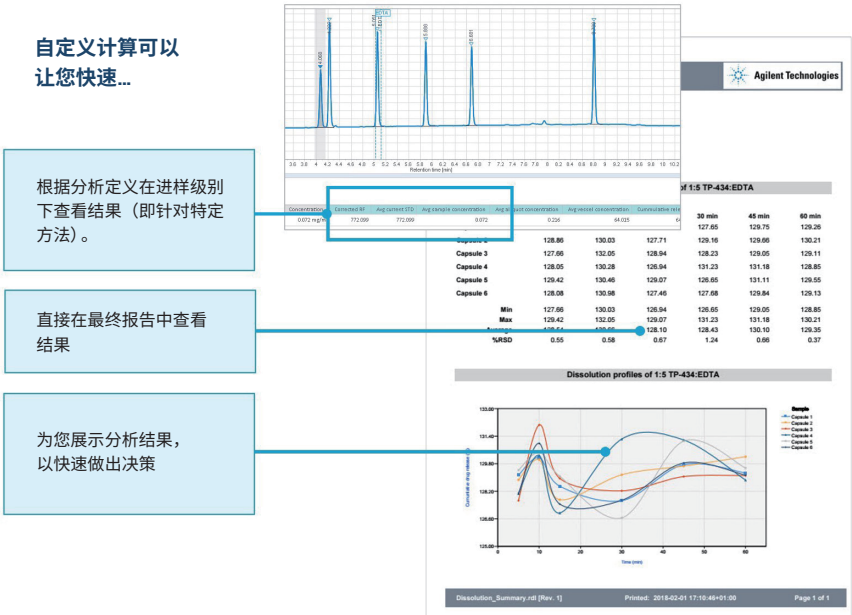


图 1. OpenLab CDS 自定义计算器概览

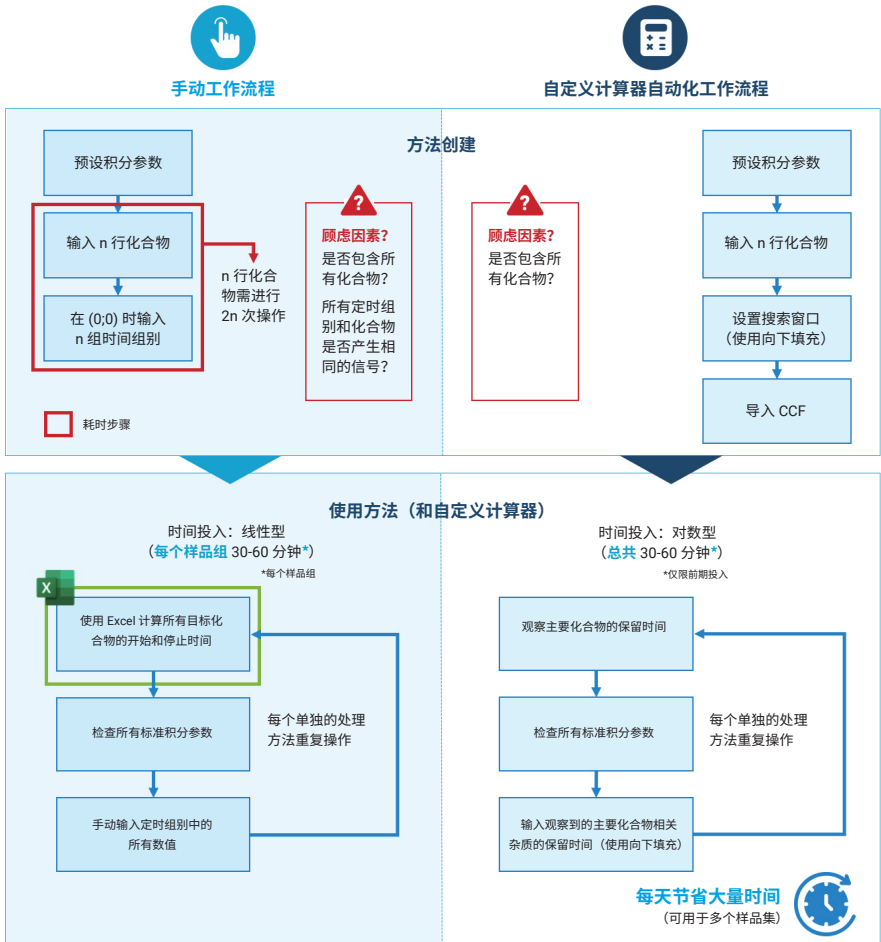


图 2. 比较手动和自动创建方法工作流程。与手动方法相比，自定义计算器自动化工作流程可以节省大量时间

平均而言，手动处理每个样品集至少需要 30 分钟，但通常最多需要 2 小时。而创建自动处理方法仅需要 15 分钟（使用简单方法时），并且之后可用于仪器方法的整个使用周期。计算机仅需要两分钟即可完成自动方法输入；如果实验标准允许自动计算，则计算机可完成大部分工作。此操作为自动化方法的一部分，不需要用户手动操作。如果峰漂移过于严重，则可能需要重复此步骤。如图 3 所示，随着分析样品量的增加，创建和使用自定义计算器自动化工作流程可显著提升效率。

为特定的寡核苷酸项目设定自定义计算器工具后，通常只需将该分析序列的特定保留时间添加到工具中。自定义计算器能够快速提取、处理并准确报告包含大量样品的序列的峰面积% MS 纯度数据。

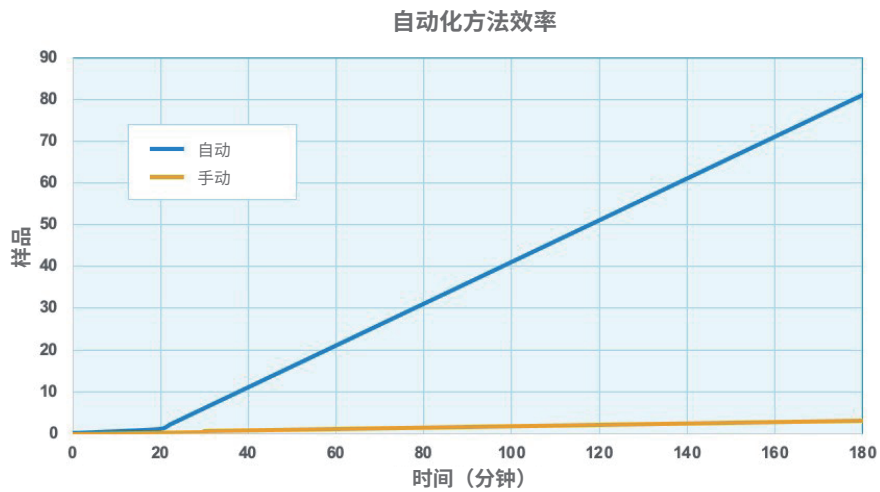


图 3. 通过创建和使用自定义计算器自动化方法，可以显著节省时间并提高样品结果处理/报告通量

工作流程和职责

图 4 显示了自定义计算器与 OpenLab CDS 方法共同运行以及与化合物详细信息交互的技术细节。图中还显示了为使用此自定义计算器的强大功能，实验室工作人员需进行的简单步骤，以及实验室分析人员和管理员保持程序运行所需的工作。

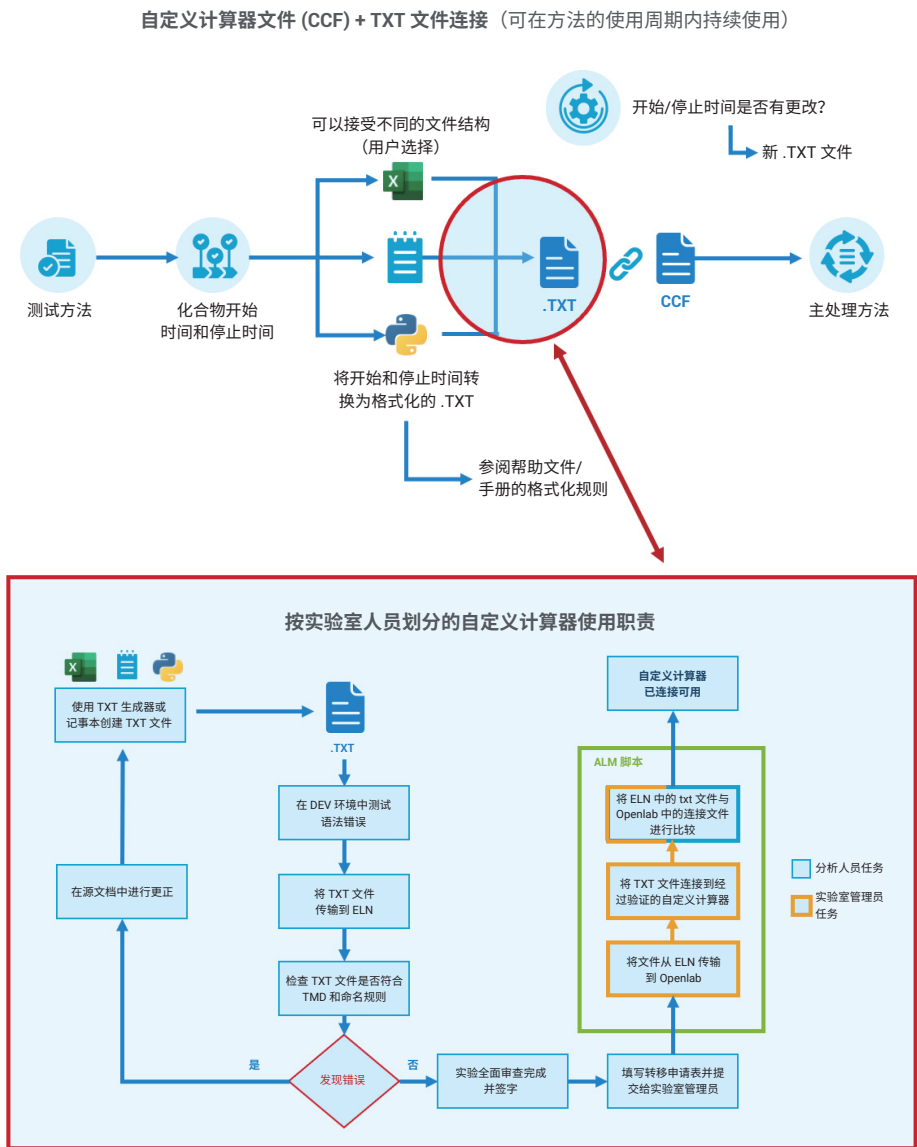


图 4. 图中显示了自定义计算器与 OpenLab CDS 方法共同运行以及与化合物详细信息交互的技术细节。图中还着重显示了为使用此自定义计算器的强大功能，实验室各职责工作人员所需进行的简单明确步骤，以及实验室分析人员和管理员保持程序运行所需的工作

生成报告

本特定自定义计算器方法的总体目标是生产样品的寡核苷酸和所有杂质的 MS 峰面积百分比报告。下图是来自整个自定义计算器流程的实际报告，具备高度可定制性（尚未编辑），可供实验室工作人员、管理人员和实验室笔记本系统使用。

结论

如本文所述，仅需对自定义计算器工作流程进行一次设置，您的实验室即可为每组寡核苷酸进样节省数小时的手动操作时间，免去所有寡核苷酸分析步骤的手动错误，并自动报告纯度详细信息，无需任何手动计算。使用此软件可为您的实验室每天节省大量时间，并为实验室分析人员和管理员免去以前需要执行的困难且耗时的手动步骤。

安捷伦提供定制解决方案和咨询方法/服务，可将 OpenLab 加入客户的工作流程中。请联系我们获取更多信息或与您特定工作相关计算的帮助。

MS 峰面积百分比报告

分析开发

数据文件:

样品名称:

0.25 mg/mL

描述:

结果组版本:

2022-071 8-0911-42644

序列名称:

20220715 172840 与四元泵比较

笔记本代码:

Elims Nr:

样品信息:

标识符:

1

名称	m/z	开始保留时间	停止保留时间	空白峰面积	校正后面积	峰面积%
化合物 1	1438.9	13.45	13.95		0.00	0.00
化合物 2	1451.0	13.40	13.70		0.00	0.00
化合物 3	1463.0	13.90	14.20		1170.26	0.01
化合物 4	1637.2	13.90	14.20		1628.04	0.01
化合物 5	1640.5	13.80	14.10		1036.57	0.01
化合物 6	1641.9	13.85	14.15		0.00	0.00
化合物 7	1645.1	13.90	14.20		21347.39	0.11
化合物 8	1647.6	13.90	14.20		1666.11	0.01
化合物 9	1664.7	14.52	14.82		4632.45	0.02
化合物 10	1668.5	14.20	14.50		6806.11	0.03
化合物 11	1669.9	13.90	14.20		1704.25	0.01
化合物 12	1682.5	13.90	14.20		12149.27	0.06
化合物 13	1685.7	13.85	U.15		0.00	0.00
化合物 14	1690.2	13.90	14.20		28749.61	0.15
化合物 15	1698.5	13.78	14.08		17658.89	0.09
化合物 16	1700.7	13.95	14.25		88707.30	0.45
化合物 17	1702.7	13.85	14.15		0.00	0.00
化合物 18	1705.1	13.45	13.85		193043.26	0.99
化合物 19	1705.9	13.85	14.15		346351.05	1.77
化合物 20	1708.7	11.15	14.00		239922.34	1.22
化合物 21	1709.1	14.00	14.30		18416621.08	94.01
化合物 22	1712.3	14.25	14.55		25261.92	0.13
化合物 23	1712.7	13.75	14.05		136058.06	0.69
化合物 24	1717.8	14.35	14.65		17227.70	0.09
化合物 25	1719.7	14.70	15.00		21026.15	0.11
化合物 26	1738.7	14.55	15.65		0.00	0.00

打印时间: 2022-07-18 11:1 5:23+02:00

第 1 页, 共 2 页

MS 峰面积百分比报告

分析开发

名称	m/z	开始保留时间	停止保留时间	空白峰面积	校正后面积	峰面积%
化合物 27	1748.4	14.35	14.65		0.00	0.00
化合物 28	1770.8	14.20	14.50		0.00	0.00
化合物 29	1773.2	14.15	14.45		0.00	0.00
化合物 30	1776.4	14.20	14.50		0.00	0.00
化合物 31	1777.8	14.30	14.60		2509.73	0.01
化合物 32	1780.9	14.15	14.45		4705.98	0.02

总结

第 1 组化合物总和

0.21

第 3 组化合物总和

0.14

第 2 组化合物总和

19589983.53

第 4 组化合物总和

0.04

总峰面积

电子签名:

电子签名数据不可用。

打印时间: 2022-07-18 11:1 5:23+02:00

第 2 页, 共 2 页

图 5. 此自动化过程生成的最终报告示例

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

如需详细了解自定义计算器的应用，请访问：

www.agilent.com/chem/openlab-custom-calculator

如需了解有关 OpenLab CDS 的更多信息，请访问：

www.agilent.com/chem/openlab-cds

DE49522774

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，2023
2023 年 2 月 1 日，中国出版
5994-5654ZHCN