



## 超高效合相色谱

完美应对  
手性和非手性分析挑战的  
突破性技术



Acquity IUPC<sup>2</sup>

Convergence Manager

Acquity IUPC<sup>2</sup>

Sample Manager

POWER

RUN

Waters

Waters

Waters

# 强大的手性和非手性分离能力： 以无与伦比的分析速度， 带来前所未有的精准结果

## ACQUITY UPC<sup>2</sup>

ACQUITY UPC<sup>2</sup>®系统采用经济、无毒的压缩液态CO<sub>2</sub>作为主要流动相，使科学家们能够精确地改变流动相强度、压力和温度。他们可对系统的分离能力和选择性进行精微调控，在结构类似物、异构体、对映体和非对映体混合物(所有其它方法通常难以分离此类化合物)的分离检测和定量分析中更好地控制分析物的保留。

ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统作为ACQUITY®家族分离产品中的一员，秉承了一贯的设计理念，强调了从色谱柱填料、到软件及仪器本身以及不同部件之间的功能关系。

ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统将ACQUITY家族的技术优势引入到传统SFC分离技术中，将基于液态CO<sub>2</sub>的分离技术与ACQUITY用户所追求的卓越性能和可靠性完美结合。

ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统与ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil™和Torus™色谱柱化学品的完美组合，使得分离科学家们能够在手性和非手性分离中以无与伦比的分析速度获得前所未有的精准结果，并在一台仪器上同时获得正相色谱的分离能力以及反相色谱的易用性和可靠性。



## 合相色谱

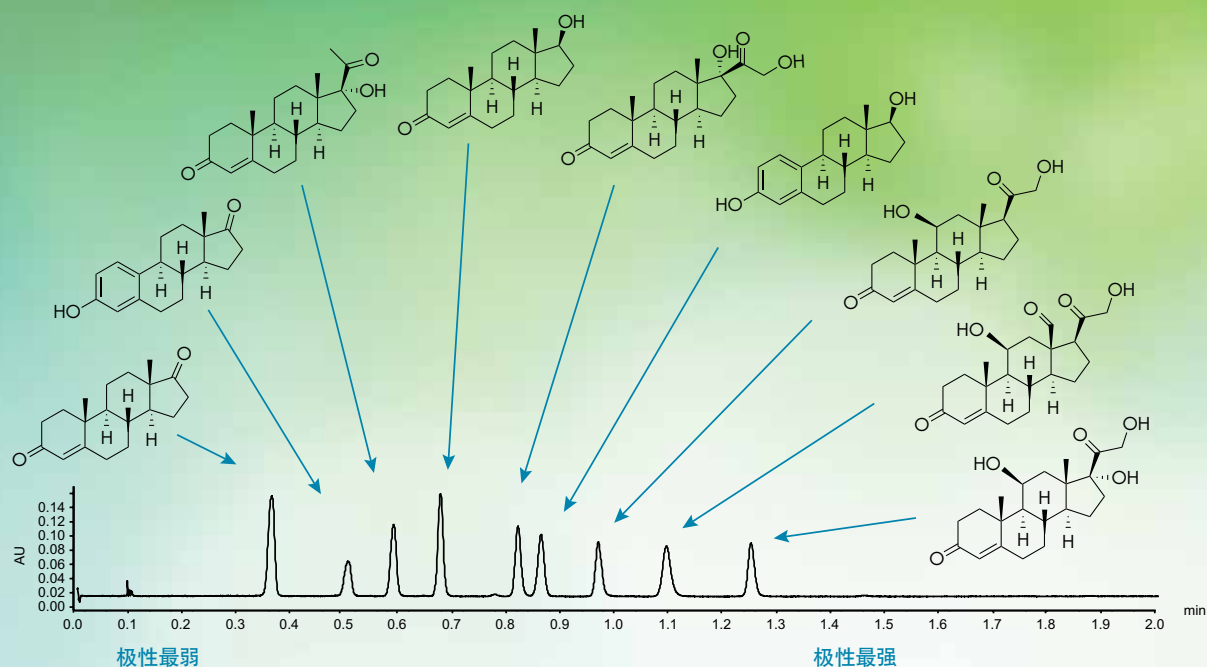
2012年, 沃特世开辟了分离科学的一个新类别—超高效合相色谱(UltraPerformance Convergence Chromatography™, UPC<sup>2</sup>®), 可帮助色谱分析实验室显著提升选择性。UPC<sup>2</sup>采用整体式设计, 使用压缩CO<sub>2</sub>作为主要流动相, 能够充分发挥正相色谱的优势和选择性, 同时还具有反相色谱的易用性及简便的方法开发功能。

UPC<sup>2</sup>起源于SFC(超临界流体色谱)技术, 它利用超临界状态下液化气体的密度差异进行色谱分离。随着技术的进步, SFC逐步发展至使用助溶剂在亚临界状态下进行色谱分离。经过实践证实, 基于液态CO<sub>2</sub>的色谱技术不仅能在超临界状态下完成分离, 还能在亚临界状态下实现分离。由此, 沃特世为这一现代分析制备技术命名为“合相色谱”(Convergence chromatography)。

CO<sub>2</sub>可与极性至非极性的宽范围有机溶剂混溶, 从而使基于液态CO<sub>2</sub>的流动相具有更强的分离能力, 与反相色谱相比, 它能够分离的化合物种类更多, 尤其是能够分离含有高疏水性和/或强极性化合物的混合物。您不仅可以将基于CO<sub>2</sub>的流动相与极性/非极性的多种固定相联用, 还可以使用相同的质谱兼容的助溶剂, 结合各种色谱柱(包括手性色谱柱)进行溶剂梯度调控, 影响色谱分离。

合相色谱的独特之处并非溶剂的状态或条件, 而是它能够同一色谱系统上涵盖(或兼容)更多种类化合物的分离。





合相色谱能够根据分子的整体极性进行分离，如图中所展示的相似度极高的各种类固醇。\*

## 合相色谱的保留机理

合相色谱与正相色谱的保留机理类似，即通常由化合物在流动相中的极性决定其从色谱柱固定相上洗脱下来的顺序。在反相色谱中，极性化合物首先被洗脱，这就给分离带来了一定的难度。而在合相色谱中，极性化合物会被保留，直至最后才会洗脱下来。从上面的色谱图示例中我们可以看出，众多中性类固醇的洗脱分析通常都遵循极性最弱者最先洗脱，极性最强者最后洗脱的规律。

随着压缩液态CO<sub>2</sub>成为合相色谱的主要流动相，其正相分离的强大正交功能逐渐成为主流色谱技术。该技术让我们能够在最宽的极性范围内应用梯度，并将全质谱检测功能引入到日常实验室应用中，它还能分离大部分可溶于有机溶剂的化合物和混合物。此外，使用其它方法通常难以分离的一些化合物，例如：结构类似物、异构体、对映体和非对映体混合物，现在都可以通过合相色谱简单、轻松地完成分离。

## 合相色谱：正相色谱的分离能力结合反相色谱的易用性



# ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统

## ACQUITY UPC<sup>2</sup> PDA检测器 (A)

- 光电二极管阵列检测器 (PDA) 具有高强度石英透镜, 能够补偿CO<sub>2</sub>和助溶剂之间的折射率差异, 大大降低了基线噪音。
- 高灵敏度的小体积10 mm流通池既可实现窄峰宽, 又能保持最佳光谱性能, 满足高通量筛选应用的关键要求。

## 色谱柱管理器 (B)

- 先进的温度控制和主动溶剂预热功能, 可轻松以0.1 °C 的温度增量设定最高90 °C 的温度。
- 提供有可分别安装2、4、6、8和15根色谱柱的多种柱温箱, 用户可以将多根手性和非手性色谱柱安装至同一色谱系统中。

## 合相管理器 (C)

- 动态和静态两级自动反压调节器 (ABPR), 可明显改善密度控制。
- ABPR这一创新型高频动态响应设计, 对于实现ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统最佳性能所需的低噪音条件至关重要。

## 样品管理器 (D)

- 标准配置部分定量环进样器。
- 准确、精密、可重现; 0.1至50 μL, 增量为0.1 μL。
- 采用ACQUITY技术可实现: 极低 (<0.005%) 的进样交叉污染以及极佳 (>0.999 R<sup>2</sup>) 的进样器线性。



ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统和色谱柱。



## 方法开发色谱柱管理器

新增的ACQUITY 30 cm单区色谱柱管理器(CM-30S)，易于安装，并能极大提高您的分析效率。它可以同时容纳最多8根色谱柱，柱长从50 mm到300 mm，柱内径从2.1 mm到8.0 mm。

此管理器能够针对不同规格的色谱柱筛选多种色谱柱填料、改性剂比例、背压设置以及流速，创造了一个灵活的方法开发平台，为用户带来一套集手性分析和非手性分析功能于一体的整合式系统。

在MassLynx®软件的控制下，您可以使用8柱系统进行制备放大前的快速方法筛选或在Open-access下进行质谱引导的分析。如果使用Empower®软件进行控制，则可以串联第二个柱温箱，同时控制15根色谱柱。

滑动式抽盒两侧的色谱柱固定板架均可安装50 mm至300 mm长度不等的色谱柱，它的安装和拆卸也非常方便，仅需一个杠杆臂即可轻松完成，这一优势更有利于加快方法开发。

每个色谱柱位置都连接有被动预加热器，因此8根色谱柱中溶剂的温度能够保持相同，从而有效降低了示差折光效应。



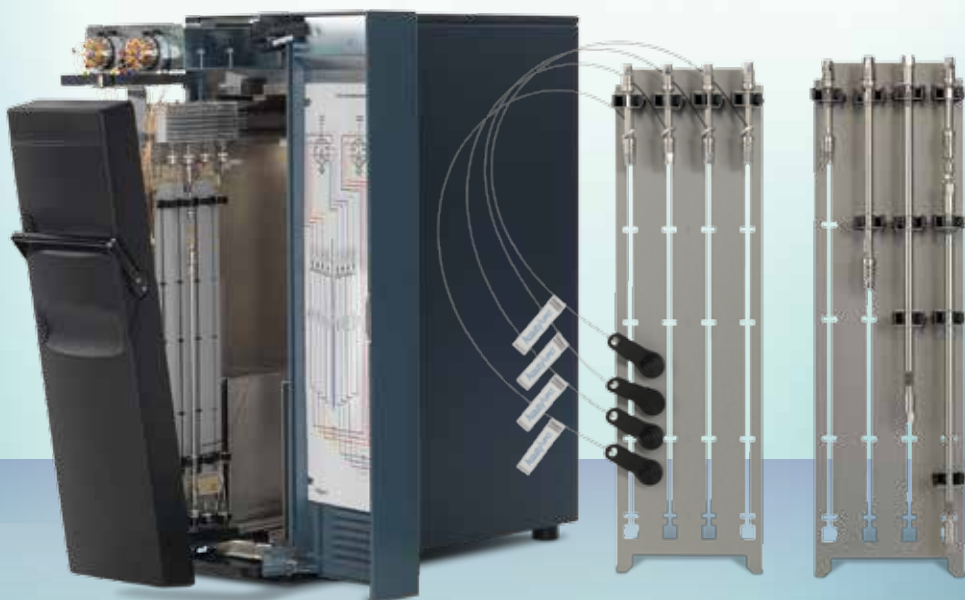
## 二元溶剂管理器 (E)

ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统的核心优势是其独特的泵功能。该系统采用单独的泵系统计量液态CO<sub>2</sub>和共溶剂。

虽然上述两种泵系统均采用UPLC®泵，但其中一套专门针对液态CO<sub>2</sub>进行了改进，具有两级帕尔贴制冷功能。

系统以完全相同的精确度计量可压缩的液态CO<sub>2</sub>和不可压缩的共溶剂，然后进行混合，这对于保证系统的性能和稳定性而言至关重要。

ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统在<5%的共溶剂的传输时性能尤为出色，能够以100%的CO<sub>2</sub>为起始点，以0.1%为增量运行。这一优势弥补了此系统旧版本中最常见的缺陷，是其具有出色稳定性和可靠性的关键所在。



ACQUITY CM-30S和色谱柱固定板架。

## 配备质谱的合相色谱系统

### 配备ACQUITY QDa检测器的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统

采用PDA检测技术的标配8/15根色谱柱筛选系统已广泛应用于手性和非手性分析实验室。增配沃特世ACQUITY QDa®检测器和ACQUITY等度溶剂管理器能够让您对质谱追踪分析结果更有信心，并且能够帮助您更加从容地排除各种故障，大大提升方法开发效率。

借助合相色谱技术在正交分析方面实现的显著提升，这一针对常规应用开发的质谱检测系统逐渐成为手性和非手性分析的重要常规工具。



配备ACQUITY QDa检测器的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统。

### 配备XEVO TQ-S的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统

生物分析/DMPK领域的分析对分离度、灵敏度和分析效率的要求极高。在DMPK实验室中采用ACQUITY UPC<sup>2</sup>技术能够解决人们在反相DMPK分离方面所关注的难题，例如：

- 极性化合物或代谢物的保留
- 手性分析的快速通用梯度方法
- 手性代谢物分离
- 目标化合物或基质干扰物的反相正交分离分析



配备Xevo®TQ-S的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统。



## 配备三重检测器的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统

配备三重检测器的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统将色谱系统在筛选和检测方面的功能扩展到了极致。

这款方法开发工具不仅具备强大的色谱柱和溶剂筛选功能，还能提供最佳的检测性能。当色谱分析面临待分析物无UV发色团及可电离基团的难题时，该系统将发挥出它的关键作用——增加一个蒸发光散射检测器，确保任何待测化合物都不会被遗漏。



配备ACQUITY UPLC® ELS、ACQUITY UPC<sup>2</sup> PDA和ACQUITY QDa检测器的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统。

## 配备XEVO G2-XS的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统

ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统与QToF技术的结合为科学家们带来了能够应对复杂分析(例如，脂类或天然产物)的有效工具。

利用合相色谱宽泛的分离范围，科学家们只需简单地切换色谱柱和梯度条件，就能获得极性/非极性化合物(脂类)的高分辨率精确质量数数据，从而轻松对其进行分析。该系统解决方案专用于：

- 鉴定
- 定量
- 确证

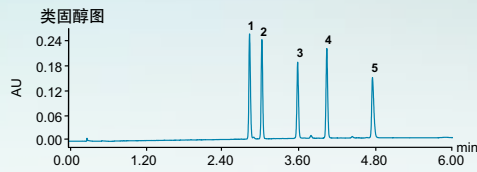


配备Xevo G2-XS的ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统。

## 提高类固醇、维生素A和维生素E的分度

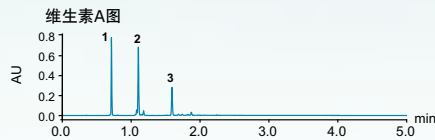
ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统利用SFC的优势帮助复杂疏水性样品的分离, 例如, 类固醇和脂溶性维生素样品。

采用ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA色谱柱, 使用低百分含量(<5%)的共溶剂, 分析人员可快速完成这些极具挑战性的化合物的分析。



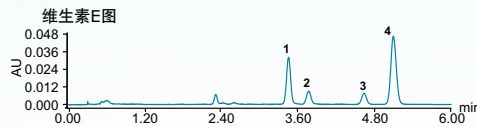
**化合物:**  
1. 17 $\alpha$ -羟孕酮  
2. 雌素酮  
3. 皮质醇  
4. 雌二醇  
5. 皮质酮

**色谱柱:** ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA, 1.7  $\mu$ m, 3.0 x 100 mm (部件号186007629)  
**梯度:** 3-30%甲醇  
**流速:** 1.5 mL/min  
**温度:** 40 °C  
**ABPR:** 1,800 psi  
**UV检测波长:** 220 nm



**化合物:**  
1. 视黄醇乙酸酯  
2. 视黄醇棕榈酸酯  
3. 视黄醇

**色谱柱:** ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA, 1.7  $\mu$ m, 3.0 x 100 mm (部件号186007629)  
**梯度:** 3-40%甲醇  
**流速:** 1.5 mL/min  
**温度:** 35 °C  
**ABPR:** 1,500 psi  
**UV检测波长:** 310 nm



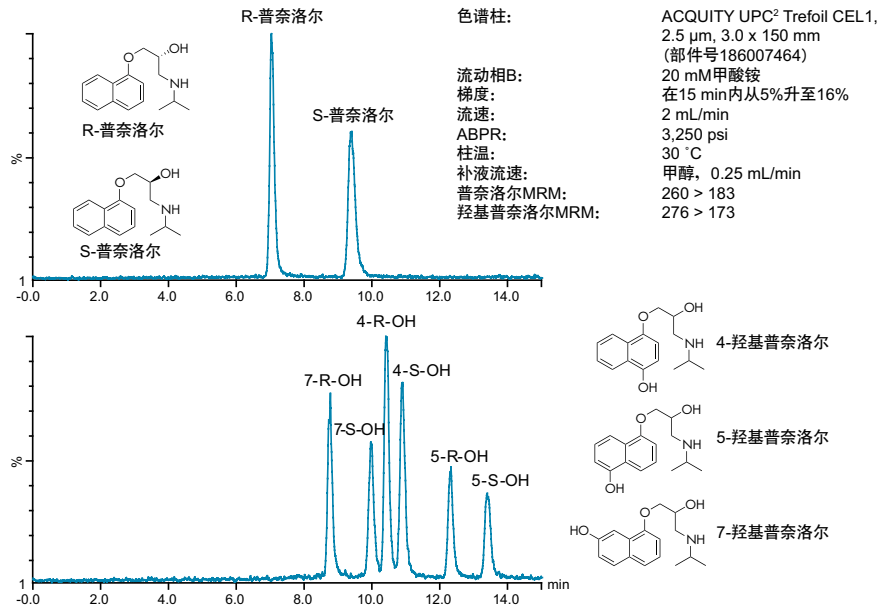
**化合物:**  
1.  $\alpha$ / $\beta$ / $\gamma$ -生育酚  
2.  $\delta$ -生育酚  
3.  $\gamma$ -三烯生育酚  
4.  $\delta$ -三烯生育酚

**色谱柱:** ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA, 1.7  $\mu$ m, 3.0 x 100 mm (部件号186007629)  
**梯度:** 3%甲醇  
**流速:** 1.5 mL/min  
**温度:** 35 °C  
**ABPR:** 1,500 psi  
**UV检测波长:** 290 nm

ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA色谱柱分析所得类固醇和维生素图。

## 在DMPK研究中, 使用UPC<sup>2</sup>-MS/MS对药物及其代谢物进行对映体分离

许多候选药物及其代谢物都含有一个或多个手性中心。识别和监测化合物及其代谢物的不同手性构型是药物开发过程中至关重要的一步, 借助合相色谱可轻松实现此目标。ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil CEL1色谱柱与质谱检测器联用后, 可在15 min内轻松完成普奈洛尔母体化合物及其三种羟基代谢物(4-羟基普奈洛尔、5-羟基普奈洛尔和7-羟基普奈洛尔)的对映体分离和检测。



**色谱柱:** ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil CEL1, 2.5  $\mu$ m, 3.0 x 150 mm (部件号186007464)  
**流动相B:** 20 mM 甲酸铵  
**梯度:** 在15 min内从5%升至16%  
**流速:** 2 mL/min  
**ABPR:** 3,250 psi  
**柱温:** 30 °C  
**补液流速:** 甲醇, 0.25 mL/min  
**普奈洛尔MRM:** 260 > 183  
**羟基普奈洛尔MRM:** 276 > 173

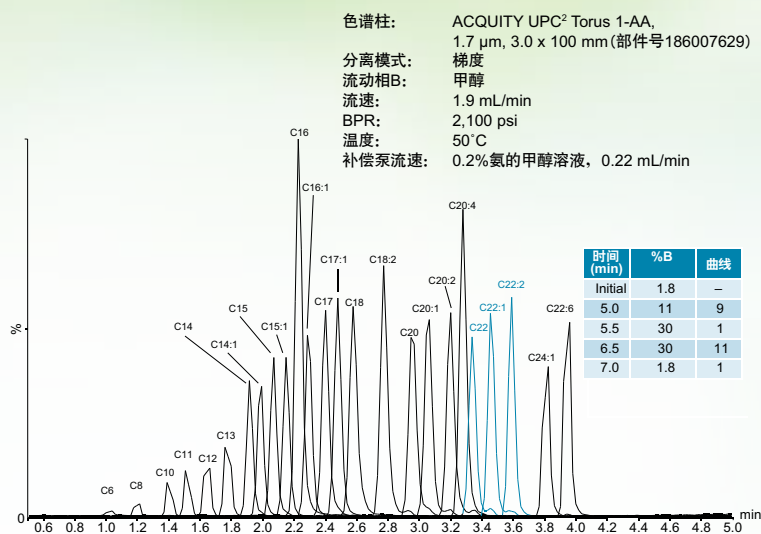
普奈洛尔及其羟基代谢物的分离。请注意, 每个羟基代谢物都具有R构型和S构型。

## 无需衍生化的游离脂肪酸脂质分离

不同游离脂肪酸(FFA)的洗脱顺序取决于脂肪酸链的长度和双键数量。在典型的反相液相色谱分离中, FFA的酰基链越长、饱和度越高, 其保留时间就越长。

使用ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA色谱柱进行分离时, FFA的不饱和度越高, 其保留时间就越长。这样一来, 在分析包含饱和及不饱和FFA(具有不同碳链长度)的复杂生物样品时, 就能够减少共洗脱的脂质种类, 简化分析。

此外, 含有脂质的有机层提取物可以直接进样至系统中, 无需溶剂替换, 而采用反相液相色谱方法时, 出于兼容性的考虑需要溶剂替换。



ACQUITY UPC<sup>2</sup>-MS FFA分析是一种简便快速的方法, 与其它诸如GC/MS等需要进行FAME衍生化的技术相比, 它可以显著缩短分析时间。

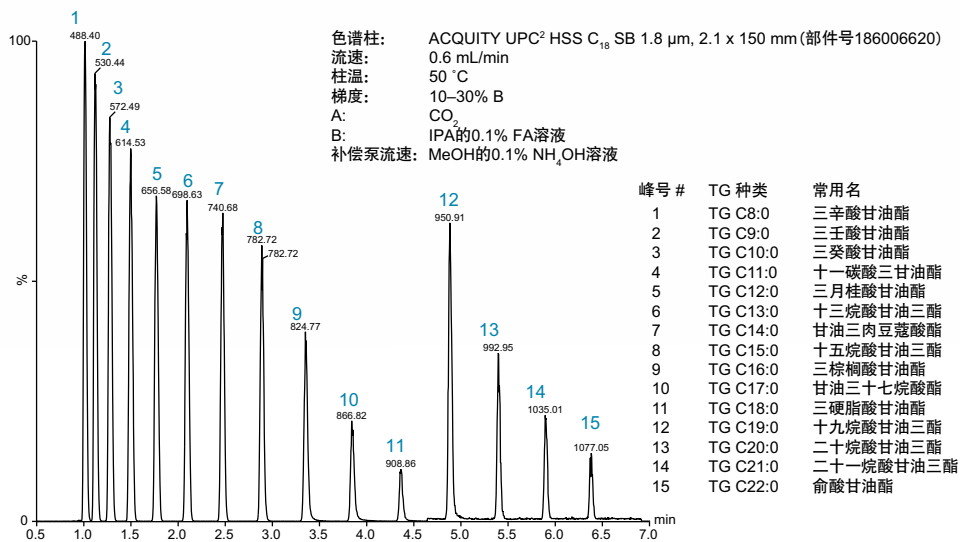
## 脂质分析

ACQUITY UPC<sup>2</sup>已应用于多种脂类的分析:

- 前列腺素
- 类花生酸
- 单/二/三甘油酯
- 胆固醇酯
- 鞘脂
- 糖异构体
- 磷脂

并且适用于多种基质环境:

- 组织(脂肪)
- 全血样品
- 油性藻类提取物
- 牛奶
- 食用油
- 生物柴油



使用UPC<sup>2</sup>-MS分析含15种饱和TAG标准品(Nu-Check GLC 768)复杂混合物的完整三酰甘油。常用的TAG色谱分析方法是RP-HPLC和GC-MS。TAG的RP-HPLC分析法所需色谱运行时间长达2至3小时, 而且还需要对待测样品提取物进行干燥, 然后复溶于RP兼容的进样溶剂中。使用GC-MS分析TAG则需要进行费时费力的FAME衍生化处理步骤。

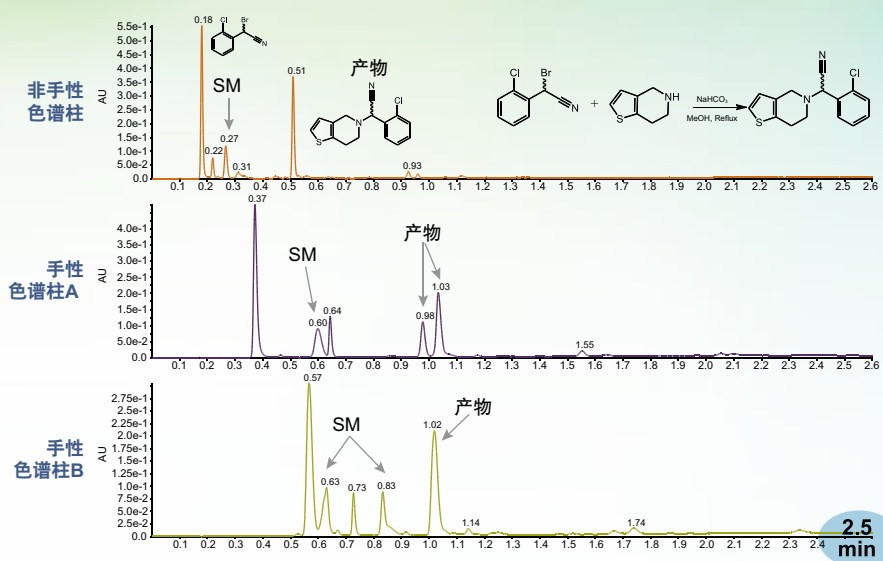
## 合成化学 – 手性分析和非手性分析

在合成化学/药物化学实验室中, ACQUITY UPC<sup>2</sup>可支持手性和非手性分析。

无论是用于非手性合成反应监测和优化, 还是用于手性对映体过量转化(e.e 值)监测, 通常只需要使用一套系统和相同的洗脱液。

该系统可在一个柱温箱中安装8根色谱柱, 因此能够开放、灵活地使用多种色谱柱和流动相。这些色谱柱可固定安装在柱温箱中, 用户只需在多根手性和非手性色谱柱之间切换就能轻松进行方法开发。

此外, 用户只需通过软件控制就可在短色谱柱(用于快速方法筛选)和长色谱柱(用于方法优化)之间进行转换。



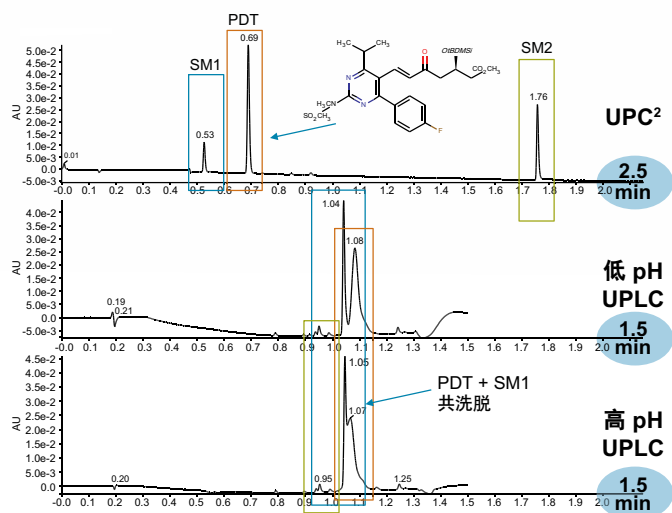
采用ACQUITY UPC<sup>2</sup>, 使用相同的洗脱液即可完成手性和非手性分离, 而且无需转换仪器。对于上图所示特定反应步骤中的起始物质和产物, 需要使用不同的手性色谱柱才能分离出其中的对映异构体。

## 合成化学 – 从正交分离到反相分离

在合成化学/药物化学实验室中, ACQUITY UPC<sup>2</sup>作为反相色谱系统的有效辅助技术, 常被用于快速筛查方法, 无论是在中心支持实验室还是在开放式环境下, 它都能充分发挥重要作用。UPC<sup>2</sup>通过简单的通用梯度方法即可轻松与质谱联用, 以正交分离模式分离极性范围更广的化合物, 因此越来越受到人们的青睐。

对于需要处理分离难题(例如, 分离结构类似物、强极性或非极性化合物)的实验室, 或者仅需进行简单正交反相色谱分离的实验室而言, ACQUITY UPC<sup>2</sup>无疑是理想的选择。

通常情况下, 反相液相色谱难以处理的分析通过ACQUITY UPC<sup>2</sup>均可轻松完成: 一套系统完成手性和非手性分析, 使用相同的溶剂和添加剂, 以及始终固定的色谱柱顺序都充分简化了用户的操作体验。

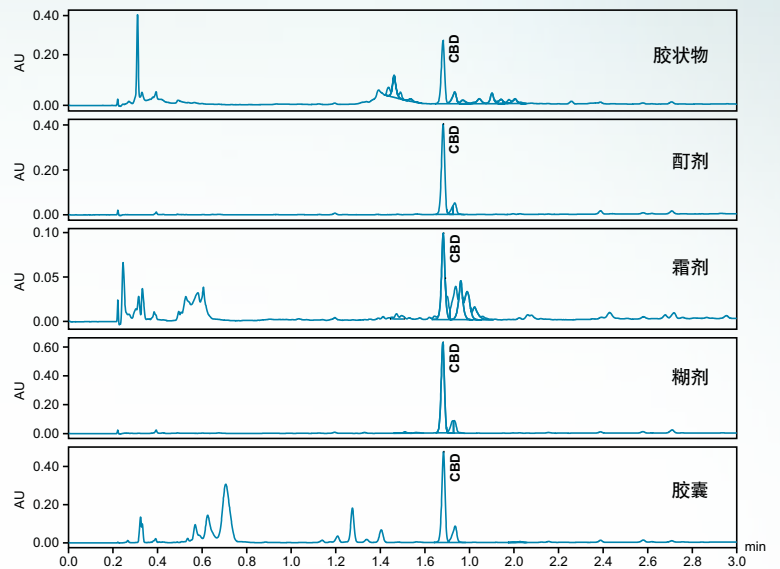
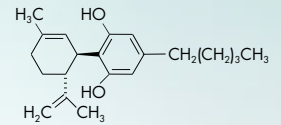


将ACQUITY UPC<sup>2</sup>与最常用的高/低pH反相色谱分析相结合, 进行正交分析, 对于面临各种分离挑战的合成分析而言, 此技术的增加将明显提升分离能力。

## 快速定量分析5种消费品制剂中的大麻二酚 (CBD)

利用某些治疗性大麻品种可以生产出大量的大麻二酚酸 (CBDA)。大麻二酚 (CBD) 是 CBDA 热诱导脱羧产物, 无精神刺激作用, 被认为具有广泛的潜在药用价值。过去, 人们一般通过烟熏或汽化将 CBDA 转化为 CBD 后, 再用于治疗。但如今其替代制剂 (例如, 外用膏) 得到了广泛应用。为了确保这些制剂产品中所有的 CBDA 均以 CBD 形式存在, 治疗性大麻均经过了一定的处理。ACQUITY UPC<sup>2</sup> 系统能够在 3 min 内分离出每个样品赋形剂材料中的 CBD, 并且分离效果良好, 可用于定量分析。这种方法非常适合用于对各种产品制剂中 CBD 含量进行质量控制或产品质量监测的实验室。

系统: 配备 PDA 检测器的 ACQUITY UPC<sup>2</sup>  
 色谱柱: ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 2-PIC, 1.7 μm, 3.0 x 100 mm (部件号 186007602)  
 流动相 A: CO<sub>2</sub>  
 流动相 B: 甲醇  
 流速: 2.0 mL/min  
 梯度: 在 3 min 内, 3%B 增至 15%B  
 柱温: 50 °C  
 ABPR: 1800 psi  
 UV 检测波长: 228 nm (补偿 500-600 nm)  
 进样体积: 1.0 μL



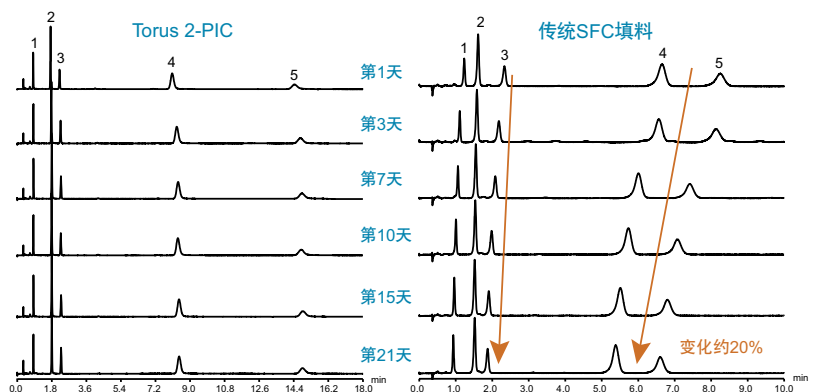
5种不同制剂中的大麻二酚 (CBD) 分析。

## 提高稳定性的同时消除保留漂移

硅胶基质的 SFC 色谱柱的一个常见问题是在使用过程中分析物的保留性会发生变化。研究表明, 选择性和保留时间都可能随时间而变化\*。在某些情况下, 可能需要对色谱柱进行再生处理以恢复其初始性能。ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 色谱柱的设计可消除选择性和保留时间的变化, 从而使方法更稳定, 柱寿命更长。

色谱柱: 3.0 x 100 mm  
 流速: 1.5 mL/min  
 梯度: 90% CO<sub>2</sub>/10% MeOH  
 温度: 35 °C  
 ABPR: 2500 psi  
 UV 检测波长: 220 nm

化合物:  
 1. 罂粟碱  
 2. 苯氧苯丙酸  
 3. 强的松  
 4. 磺胺甲噁唑  
 5. 磺胺



ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 色谱柱性能更强, 可维持稳定的保留特性和选择性, 方法开发工作者和 QC 科学家们均能从中获益。

\* K. Ebinger, H.N. Weller, *J. Chromatogr. A*, Comparative assessment of achiral stationary phases for highthroughput analysis in supercritical fluid chromatography. 2014 <http://dx.doi.org/10.1016/j.chroma.2014.01.060>

## ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil 色谱柱

快速、稳定手性分离的理想之选

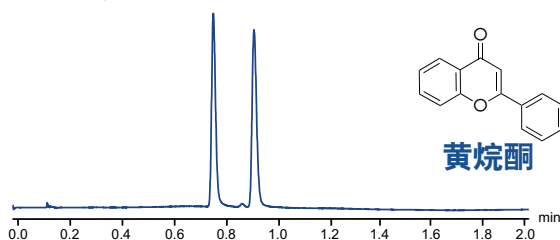
优化的粒径、色谱柱尺寸和流速

充分利用质谱检测的优势

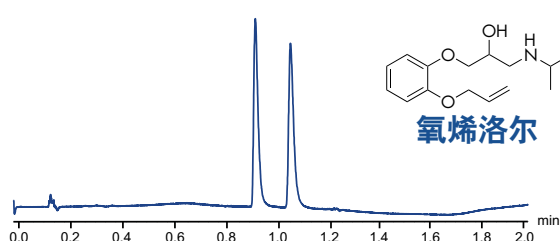
全新的方法开发方案，助您更快获得分析结果

优质、性能始终如一且可重现的色谱柱

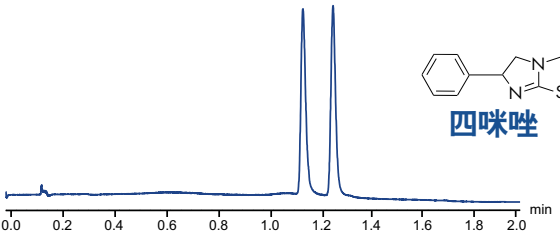
ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil AMY1, 2.5 μm 色谱柱  
直链淀粉-三(3,5-二甲基苯基氨基甲酸酯)



ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil CEL1, 2.5 μm 色谱柱  
纤维素-三(3,5-二甲基苯基氨基甲酸酯)



ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil CEL2, 2.5 μm 色谱柱  
纤维素-三(3-氯-4-甲基苯基氨基甲酸酯)

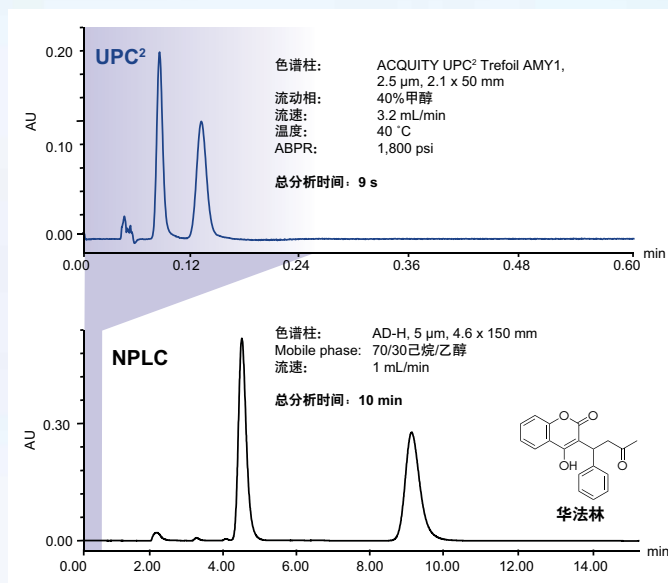


手性分离均采用2 min 筛查方法。

ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil 色谱柱专为ACQUITY UPC<sup>2</sup> 系统而设计，可提高手性分离的选择性和速度，缩短方法开发的时间。Trefoil 技术色谱柱基于改良的多糖型固定相，具有广谱手性选择性。

### 正相手性方法到合相手性方法的转换

使用ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil 色谱柱可将传统的正相(NPLC)手性方法轻松转换至ACQUITY UPC<sup>2</sup> 系统。许多老方法存在一些缺点，例如，运行时间长，而且通常需要结合使用氯化溶剂和THF或己烷，这些试剂价格昂贵且废弃处理费用很高。现在，只需对原有方法进行简单的重新开发，采用经济无毒的压缩液态CO<sub>2</sub>作为主要流动相，即可获得经济高效的全新方法，新方法还可与质谱联用，获得更多分析信息。



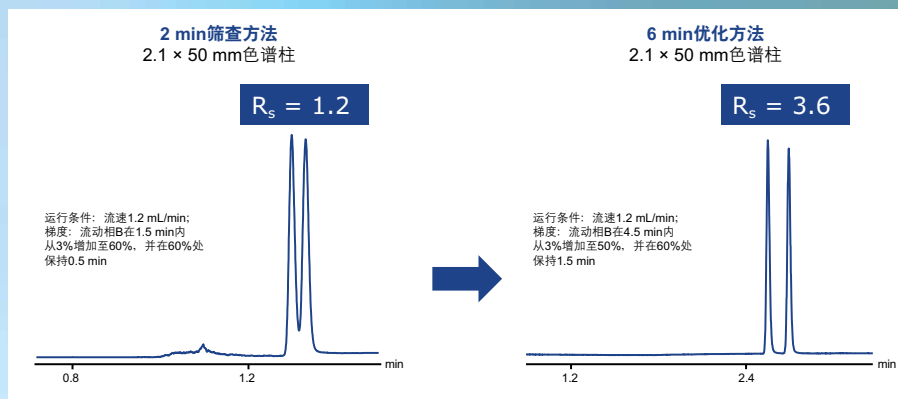
UPC<sup>2</sup> 可将分析速度提高30倍，每次运行仅需传统方法1/75的溶剂，并且可将单次分析成本降至原来的1%。

## 采用ACQUITY UPC<sup>2</sup>的全新合相色谱手性分析方法

集可靠性、高性能、低扩散等众多优点于一身的分析型ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统与采用Trefoil技术的固定相结合之后,新分析方法的开发将更加快速。将较短的窄径色谱柱与优化筛选出的少数几种助溶剂和质谱兼容性添加剂配合使用,常规梯度筛查的运行时间可缩短至2 min以内。

高效、窄径色谱柱与传统的4.6 mm色谱柱相比,溶剂用量减少46%。此套全新的方法具有更高的灵敏度、溶剂用量更低且运行速度更快,同时使用了质谱检测技术,将为您提供更为可靠的确证结果。

方法开发科学家们一直在探索更快的方法,期望能够在最短的时间内、以最少的步骤筛选进样次数获得理想的手性分离方案。为了协助这些研究者们,沃特世采用ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统(配备ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil色谱柱)对55种不同的外消旋化合物进行了实验研究。此研究考察了44种不同的共溶剂混合物和质谱兼容性添加剂,确定出最适用于调节化合物手性识别的共溶剂混合物。沃特世根据本研究的分析结果向研究人员推荐一种方法开发筛选途径,帮助他们在方法开发过程中利用ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil色谱柱以最少的操作步骤获得最高的对映体分离成功率。



从2 min筛查方法转换至6 min优化方法的预期分离度改善示例。

三种手性固定相(CSP)(ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil AMY1、CEL1和CEL2)的实验数据分析结果表明,55种化合物中有44种(80%)均表现出良好的分离效果。对于这44种可分离的化合物,其中有96%仅需使用最优的混合流动相组合以及ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil色谱柱运行4次,即可完成分离。如果不使用最佳混合流动相,而使用单一溶剂,仅能分离出其中82%的化合物。此对比结果充分表明,采用混合溶剂和添加剂的优化筛选途径,具有明显的优势,筛选步骤如下表所示:

步骤	色谱柱与 共溶剂混合	累积 成功率(%)
1	AMY1 乙醇/异丙醇/乙腈 醋酸铵	46%
2	CEL1 甲醇/异丙醇 三氟乙酸	73%
3	CEL2 乙醇/乙腈 三氟乙酸	86%
4	AMY1 乙醇/异丙醇 三氟乙酸	96%

2 min筛查方法  
ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil 2.1 x 50 mm 色谱柱  
流速 1.2 mL/min  
每个步骤的循环时间为 2.5 min

以上结果表明,使用这3种CPS,通过4次混合梯度运行即可在10 min内完成手性化合物的常规方法开发。上述方法开发策略以及相应的研究中采用了2 min超快速梯度运行,所使用的小内径短色谱柱采用了高效的2.5 μm粒径Trefoil技术填料,此填料专门针对合相色谱分析进行过优化。

# ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 色谱柱

一系列非手性填料的设计旨在树立全新的性能标杆

无论是否使用添加剂, 均可获得出色的峰形

独特的配体实现宽泛的独特选择性

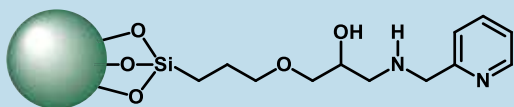
高效且完全遵循QC的稳定性

专为脂质和脂溶性维生素而设计的改良配体

ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 色谱柱经过专门设计, 可充分发挥ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统的各种性能优势, 实现快速、稳定的非手性分离。此外, 该色谱柱还采用了适合于合相色谱的四种全新型1.7 μm填料, 有效简化了方法的开发过程。这些色谱柱的设计可提供出色的峰形, 能够减少添加剂的用量甚至无需使用添加剂, 同时可为多种化合物提供更宽的选择性和更高的稳定性。

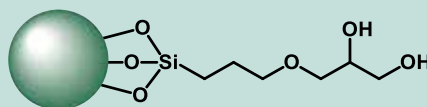
## ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 2-PIC, 1.7 μm 色谱柱

2-氨基吡啶



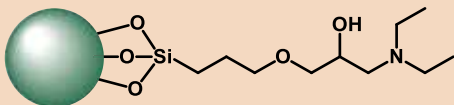
## ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus DIOL, 1.7 μm 色谱柱

高密度二醇



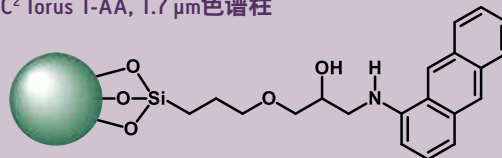
## ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus DEA, 1.7 μm 色谱柱

二乙基胺



## ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus 1-AA, 1.7 μm 色谱柱

1-氨基萘



Torus固定相以亚乙基桥杂化(BEH)颗粒的两级式官能化(正在申请专利)为基础。传统SFC分离过程中固定相表面的改变被认为是色谱发生变化的主要影响来源。ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus系列色谱柱通过两级式键合工艺保护固定相表面不受此类不良反应的干扰, 最终使色谱柱的性能趋于稳定。初步的键合形成亲水表面, 并控制填料的保留特性, 最大限度减少会导致保留和选择性随时间发生变化等负面影响的表面相互作用。第二步的官能化则决定了每种Torus填料的选择性及其用于色谱分析时将得到的峰形特征。完成这些步骤后, 便可得到一系列具有宽泛选择性的固定相, 这些固定相能够在色谱柱的整个寿命期内始终保持稳定的色谱性能。



## 非手性Torus UPC<sup>2</sup>方法开发

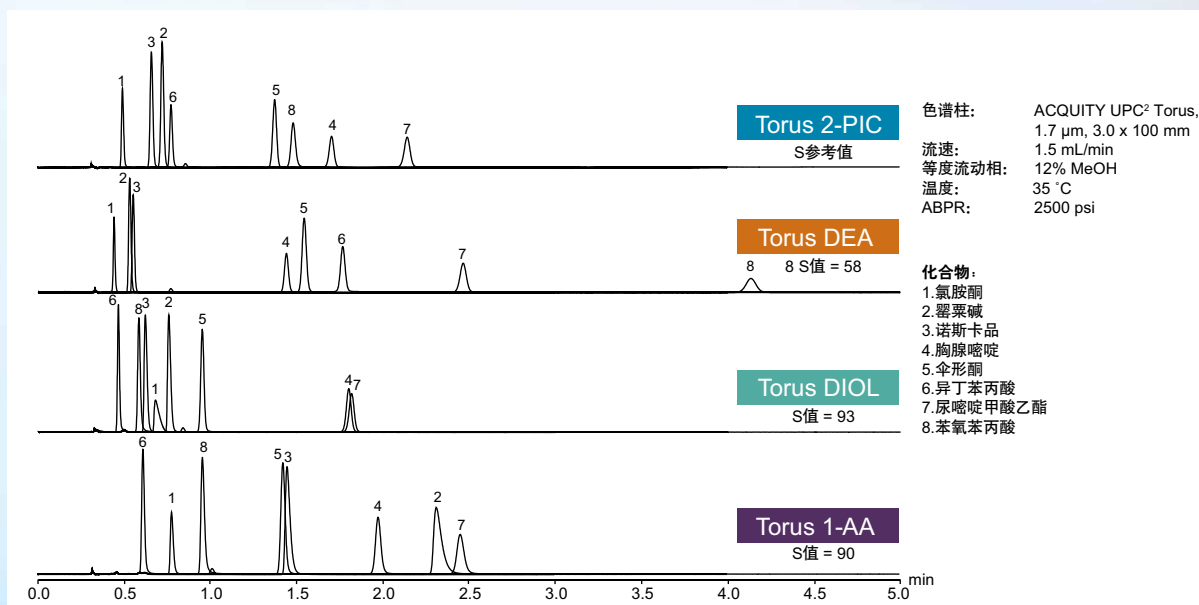
对于方法开发而言, 使用一系列具有显著选择性差异和良好保留性的色谱柱至关重要。Torus填料专为酸性、碱性和中性分析物设计, 并能提供广泛的选择性。它采用了优化的固定相合成工艺, 无论分析时是否使用添加剂, 均能获得卓越的峰形和拖尾特性。要开发出稳定的方法, 就必须使用性能(保留性或选择性)不会随时间发生变化的色谱柱。

### ACQUITY UPC<sup>2</sup> TORUS色谱柱的推荐起始条件

碱性化合物	酸性化合物	中性化合物	混合物或未知物
TORUS 2-PIC	TORUS 2-PIC	TORUS 2-PIC	TORUS 2-PIC
TORUS DEA	TORUS DIOL	TORUS 1-AA + NH <sub>3</sub>	TORUS DIOL
	TORUS DIOL + NH <sub>3</sub>	TORUS 1-AA + TFA	TORUS DEA
			TORUS 1-AA + NH <sub>3</sub>
			TORUS 1-AA + TFA

推荐的ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus色谱柱和分离条件步骤有助于加速方法开发过程。

对于方法开发科学家们来说, 选择最合适的色谱柱和分离条件可能有点棘手。ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus系列色谱柱的设计在保持最佳峰形和最高效率的同时, 最大限度增加了不同色谱柱的选择性。四种Torus填料可提供多种选择性(S值\*), 有效降低了方法开发的难度。



ACQUITY UPC<sup>2</sup> Torus系列色谱柱对酸性、碱性和中性化合物表现出不同的选择性。

\* (1) U.D. Neue, E.S. Grumbach, J.R. Mazzeo, K. Tran, and D.M. Wagrowski-Diehl "Method development in reversed-phase chromatography" Chap. 6 in: I.D. Wilson, ed. Bioanalytical Separations, Handbook of Analytical Separations, Vol. 4 Elsevier, Amsterdam (2003); (2) U.D. Neue, J.E. O'Gara, and A. Méndez "Selectivity in reversed-phase separations: influence of the stationary phase" *J. Chromatogr. A* 1127(1-2): 161-174 (2006); (3) U.D. Neue and A. Méndez "Selectivity in reversed-phase separations: general influence of solvent type and mobile phase pH" *J. Sep. Sci.* 30(7): 949-963 (2007).

# UPC<sup>2</sup>质量控制标准品

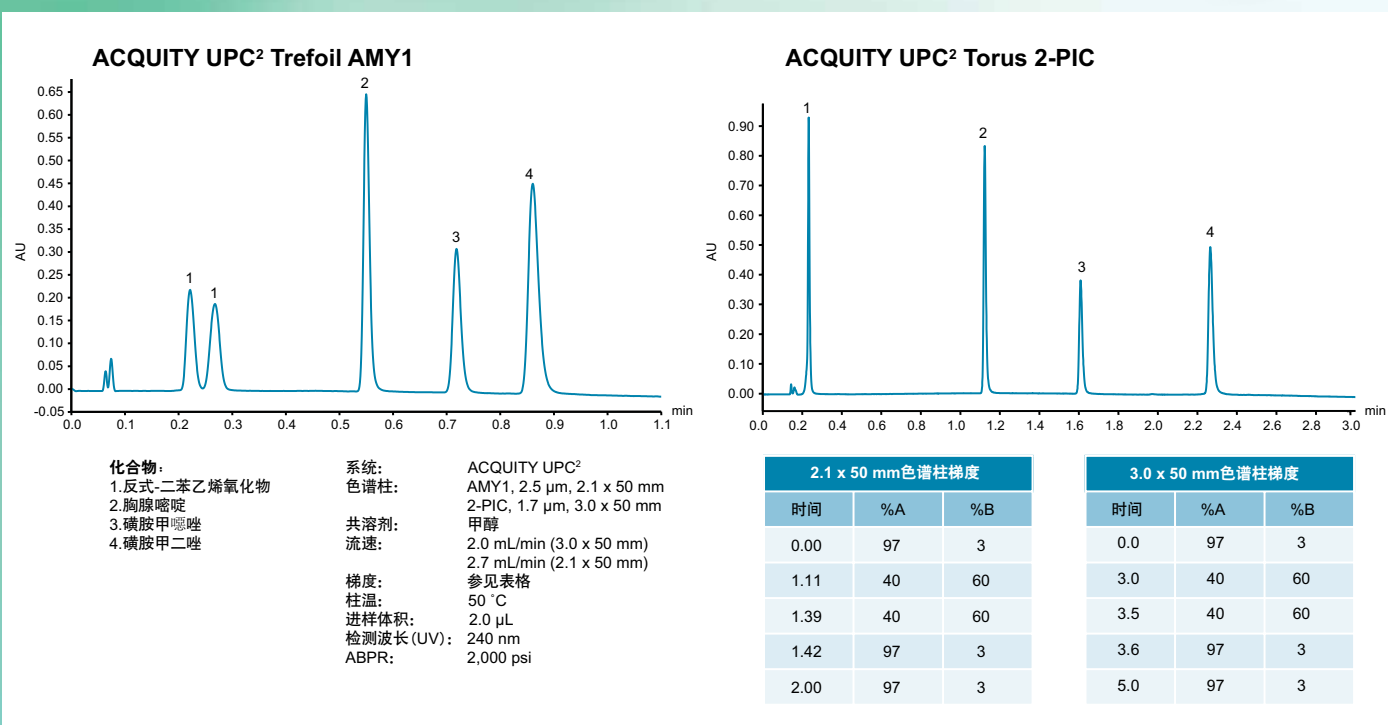
质量控制标准品(QCRM)中包含经过精心选择的标准品混合物,能够为各种色谱系统的性能监测提供简单可靠的方法。通过QCRM,您可以确认所用的色谱柱和系统是否已做好样品分析准备,还可以在日分析中使用QCRM对色谱系统以及可能随时间出现的性能变化趋势进行基准测试,更轻松地主动发现问题,并且更快速地解决问题。



## ACQUITY UPC<sup>2</sup>质量控制标准品(QCRM)

目标用途	目录	部件号
为手性和非手性模式 提供合相色谱性能信息	1.0.50 mg/mL (+/-)反式-二苯乙烯氧化物	186007950
	2.0.50 mg/mL 胸腺嘧啶	
	3.0.50 mg/mL 磺胺甲恶唑	
	4.0.50 mg/mL 磺胺甲二唑	
	溶于1 mL 75:25 ACN:MeOH溶液中	

## 适用于ACQUITY UPC<sup>2</sup>系统中ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil和Torus色谱柱的同一QCRM



采用ACQUITY UPC<sup>2</sup> Trefoil和Torus色谱柱进行UPC<sup>2</sup> QCRM分析所得色谱图。

UPC<sup>2</sup> QCRM的设计适用于所有ACQUITY UPC<sup>2</sup>色谱柱。我们就以下关键色谱性能因素对这种含有4种化合物的混合物进行了优化:

- 4种化合物彼此之间能够很好的分离,并且覆盖较宽的色谱洗脱范围
- 包含一种手性化合物用以检测手性分离能力
- 包含一种可电离化合物以检测质谱性能
- 4种化合物均能在UV条件下进行检测

如需获取与校准、鉴定、仪器和检测器调试相关的标准品详细信息,以及市售标准品与试剂的详细列表,请访问[asr.waters.com](http://asr.waters.com)。

## 订购信息

ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil色谱柱				
规格	粒径	AMY1	CEL1	CEL2
2.1 x 50 mm	2.5 µm	186007457	186007461	186007654
2.1 x 150 mm	2.5 µm	186007458	186007462	186007655
3.0 x 50 mm	2.5 µm	186007459	186007463	186007656
3.0 x 150 mm	2.5 µm	186007460	186007464	186007657

ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil色谱柱方法开发套件	
说明	部件号
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil色谱柱筛选套件, 2.1 x 50 mm色谱柱(AMY1, CEL1, CEL2), 3/包	176003577
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil色谱柱优化套件, 3.0 x 150 mm色谱柱(AMY1, CEL1, CEL2), 3/包	176003578

ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil色谱柱方法验证套件	
说明	部件号
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil AMY1方法验证套件, 2.5 µm, 3.0 x 150 mm色谱柱, 3/包	186008030
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil CEL1方法验证套件, 2.5 µm, 3.0 x 150 mm色谱柱, 3/包	186008031
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Trefoil CEL2方法验证套件, 2.5 µm, 3.0 x 150 mm色谱柱, 3/包	186008032

ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus色谱柱					
规格	粒径	2-PIC	DEA	DIOL	1-AA
VanGuard™预柱, 2.1 x 5 mm, 3/包	1.7 µm	186007604	186007622	186007613	186007631
2.1 x 50 mm	1.7 µm	186007596	186007614	186007605	186007623
2.1 x 75 mm	1.7 µm	186007597	186007615	186007606	186007624
2.1 x 100 mm	1.7 µm	186007598	186007616	186007607	186007625
2.1 x 150 mm	1.7 µm	186007599	186007617	186007608	186007626
3.0 x 50 mm	1.7 µm	186007600	186007618	186007609	186007627
3.0 x 75 mm	1.7 µm	186007601	186007619	186007610	186007628
3.0 x 100 mm	1.7 µm	186007602	186007620	186007611	186007629
3.0 x 150 mm	1.7 µm	186007603	186007621	186007612	186007630

ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus色谱柱方法开发套件	
说明	部件号
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus色谱柱筛选套件, 2.1 x 50 mm色谱柱(2-PIC, DEA, DIOL, 1-AA), 4/包	176003579
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus色谱柱方法开发套件, 3.0 x 100 mm色谱柱(2-PIC, DEA, DIOL, 1-AA), 4/包	176003580

ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus色谱柱方法验证套件	
说明	部件号
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus 2-PIC方法验证套件, 1.7 µm, 3.0 x 100 mm色谱柱, 3/包	186008033
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus DEA方法验证套件, 1.7 µm, 3.0 x 100 mm色谱柱, 3/包	186008034
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus DIOL方法验证套件, 1.7 µm, 3.0 x 100 mm色谱柱, 3/包	186008035
ACQUITY UPC <sup>2</sup> Torus 1-AA方法验证套件, 1.7 µm, 3.0 x 100 mm色谱柱, 3/包	186008036

ACQUITY UPC <sup>2</sup> BEH, CSH和HSS色谱柱					
规格	粒径	BEH 2-EP	BEH	CSH氟-苯基	HSS C <sub>18</sub> SB, 1.8 µm
VanGuard预柱, 2.1 x 5 mm, 3/包	1.7 µm	186006575	186006557	186006566	186006616
2.1 x 50 mm	1.7 µm	186006576	186006558	186006567	186006617
2.1 x 75 mm	1.7 µm	186006577	186006559	186006568	186006618
2.1 x 100 mm	1.7 µm	186006578	186006560	186006569	186006619
2.1 x 150 mm	1.7 µm	186006579	186006561	186006570	186006620
3.0 x 50 mm	1.7 µm	186006580	186006562	186006571	186006621
3.0 x 75 mm	1.7 µm	186006581	186006563	186006572	186006622
3.0 x 100 mm	1.7 µm	186006582	186006564	186006573	186006623
3.0 x 150 mm	1.7 µm	186006688	186006686	186006687	186006685

规格	粒径	BEH 2-EP	BEH	CSH氟-苯基	HSS C <sub>18</sub> SB
VanGuard预柱, 2.1 x 5 mm, 3/包	3.5 µm	186006651	186006633	186006642	186006624
2.1 x 50 mm	3.5 µm	186006652	186006634	186006643	186006625
2.1 x 75 mm	3.5 µm	186006653	186006635	186006644	186006626
2.1 x 100 mm	3.5 µm	186006654	186006636	186006645	186006627
2.1 x 150 mm	3.5 µm	186006655	186006637	186006646	186006628
3.0 x 50 mm	3.5 µm	186006656	186006638	186006647	186006629
3.0 x 75 mm	3.5 µm	186006657	186006639	186006648	186006630
3.0 x 100 mm	3.5 µm	186006658	186006640	186006649	186006631
3.0 x 150 mm	3.5 µm	186006659	186006641	186006650	186006632

ACQUITY UPC <sup>2</sup> 方法开发套件	
说明	部件号
ACQUITY UPC <sup>2</sup> 方法开发套件, 3.0 x 100 mm(BEH 2-EP, BEH, CSH氟-苯基, HSS C <sub>18</sub> SB), 4/包	176003050
ACQUITY UPC <sup>2</sup> 色谱柱筛选套件, 2.1 x 50 mm(BEH 2-EP, BEH, CSH氟-苯基, HSS C <sub>18</sub> SB), 4/包	176003091

## 销售办事处：

奥地利 43 1 877 18 07  
澳大利亚 61 2 9933 1777  
比利时和卢森堡 32 2 726 1000  
巴西 55 11 4134 3788  
加拿大 1 800 252 4752  
中国 86 21 6156 2666  
捷克共和国 420 2 617 11384  
丹麦 45 46 59 8080  
芬兰 358 9 5659 6288  
法国 33 1 30 48 72 00  
德国 49 6196 400 600  
香港 852 2964 1800  
匈牙利 36 1 350 5086  
印度 91 80 2837 1900  
爱尔兰 353 1 448 1500  
以色列 9723 3731391  
意大利 39 02 265 0983  
日本 81 3 3471 7191  
韩国 82 2 6300 4800  
墨西哥 52 55 52 00 1860  
荷兰 31 76 508 7200  
挪威 47 6 384 6050  
波兰 48 22 101 5900  
葡萄牙 351 21 893 61 77  
波多黎各 1 787 747 8445  
俄罗斯 / 独联体 7 495 727 4490 / 290 9737  
新加坡 65 6593 7100  
西班牙 34 93 600 9300  
瑞典 46 8 555 115 00  
瑞士 41 56 676 7000  
中国台湾 886 2 2501 9928  
阿联酋 971 4 214 62 38  
英国 44 208 238 6100  
美国 1 800 252 4752



扫一扫，关注沃特世微信

[www.waters.com/upc2](http://www.waters.com/upc2)

[upc2.waters.com](http://upc2.waters.com)

[www.waters.com/upc2columns](http://www.waters.com/upc2columns)

## 全国免费售后服务热线：

800 (400) 820 2676

## 沃特世科技（上海）有限公司

上海市浦东新区金海路 1000 号金领之都 13 栋

邮编：201206

电话：021-6156 2666

传真：021-6156 2777

[www.waters.com](http://www.waters.com)

# Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

Waters, The Science of What's Possible, ACQUITY, ACQUITY UPLC, ACQUITY UPC<sup>2</sup>, Empower, MassLynx, UPC<sup>2</sup>, UPLC和Xevo是沃特世公司的注册商标。eCord, Trefoil, Torus, VanGuard和UltraPerformance Convergence Chromatography是沃特世公司的商标。其它所有商标均归各自的拥有者所有。

©2015年 沃特世公司。印制于中国  
2015年2月 720004225ZH LM-SIG