

ACQUITY QDa质谱检测器 在药物化学实验室中的优势

Janet Hammond 和 Emmanuelle Claude



目的

展示集成OpenLynx™ Open Access Application Manager的MassLynx® 4.1软件与ACQUITY UPLC®系统和ACQUITY® QDa™检测器相结合为药物化学实验室所带来的优势。

背景

制药行业对于改进和加速药物开发过程的需求与日俱增，这促使他们在药物发现和开发过程的各个阶段中需要引入新的工作方法，以确保质量、提升效率和生产率。

自从1995年以来，药物化学分析人员每年通过液相色谱/质谱(LC/MS)能够分析超过100,000个样品，从而监控合成反应以及研究新化学成分的结构和纯度。MassLynx软件的OpenLynx Open Access是实现以上高强度工作量的一项技术，它为化学分析人员提供了全自动的工作流程，引导他们完成样品提交、方法选择和报告选项。

在协同式UPLC系统中通过Open Access软件结合UV和质谱检测，药物化学分析人员可实现快速色谱分离以及对化学合成反应产物的确证。

ACQUITY QDa检测器是一款设计用于与分离系统协同工作的质谱检测器，其质谱检测能力可满足分析化学人员进行常规色谱分析的需求。如同LC分析一样，质谱信息可无缝结合到现有工作流程中，对峰进行确证，从而实现更为完整的分离鉴定。通过Open Access环境将ACQUITY UPLC系统与ACQUITY UPLC PDA和ACQUITY QDa检测器相结合，药物化学分析人员可以在合成反应结束后，对反应液进行成分确证和纯度分析。



THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

解决方案

在本示例中，我们演示了使用Open Access工具并结合UV和质谱检测对一种典型合成反应混合物的UPLC分析。

- 药物化学分析人员登录并输入反应产物的分子量(在此例中为310 Da, 图1), 在指定样品瓶位置放置反应混合物。
- 报告将以电子邮件的形式直接发送给药物化学分析人员(图2)。重要信息用绿色突出显示: ACQUITY QDa检测器确认所需产物(310 Da)已成功合成。
- 使用ACQUITY UPLC PDA检测器测定纯度百分比。

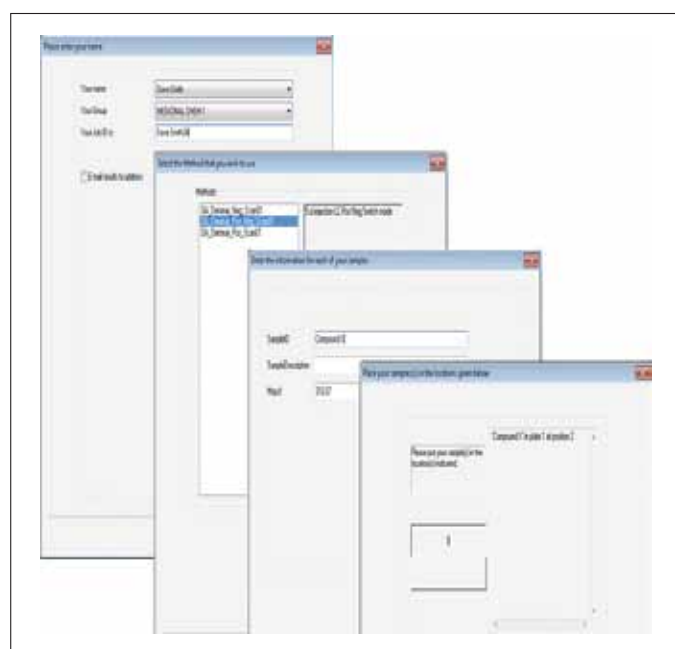


图1. 药物化学分析人员的样品提交工作流程。

Open Access环境的使用管理非常简单:

- 在OpenLynx Open Access中, 添加User Management对话框以简化管理员操作(参见图3A和3B)。管理员现在可以定义用户组并将用户分配到这些组中。
- 如图3C所示, 每组中的选项包括电子邮件地址、样品板布局显示、单个样品文件注册、OALogin报告文件打印、样品ID格式、条形码支持、方法顺序和可用的一站式参数, 以及实现每个样品采用多种方法和重命名报告文件的功能。

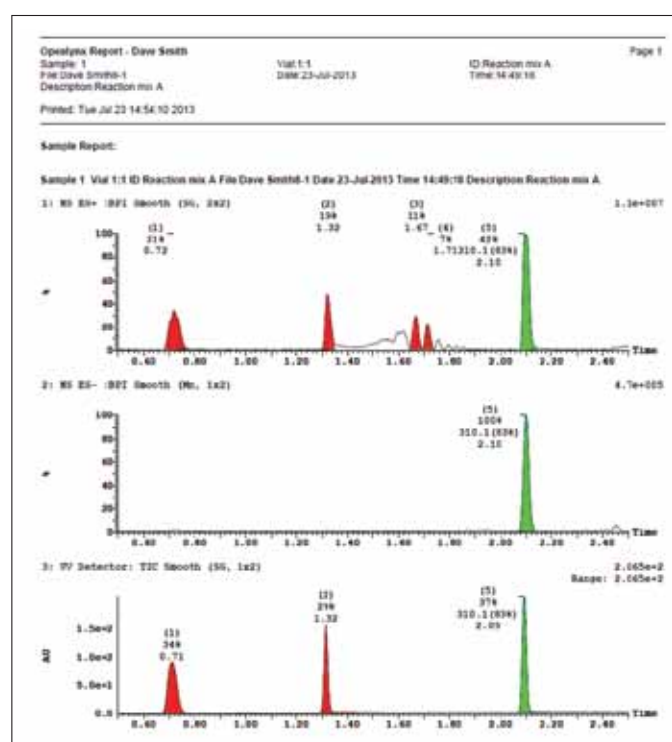


图2. 典型的简化报告示例, 显示出药物化学分析人员合成了正确的反应产物和纯度百分比。

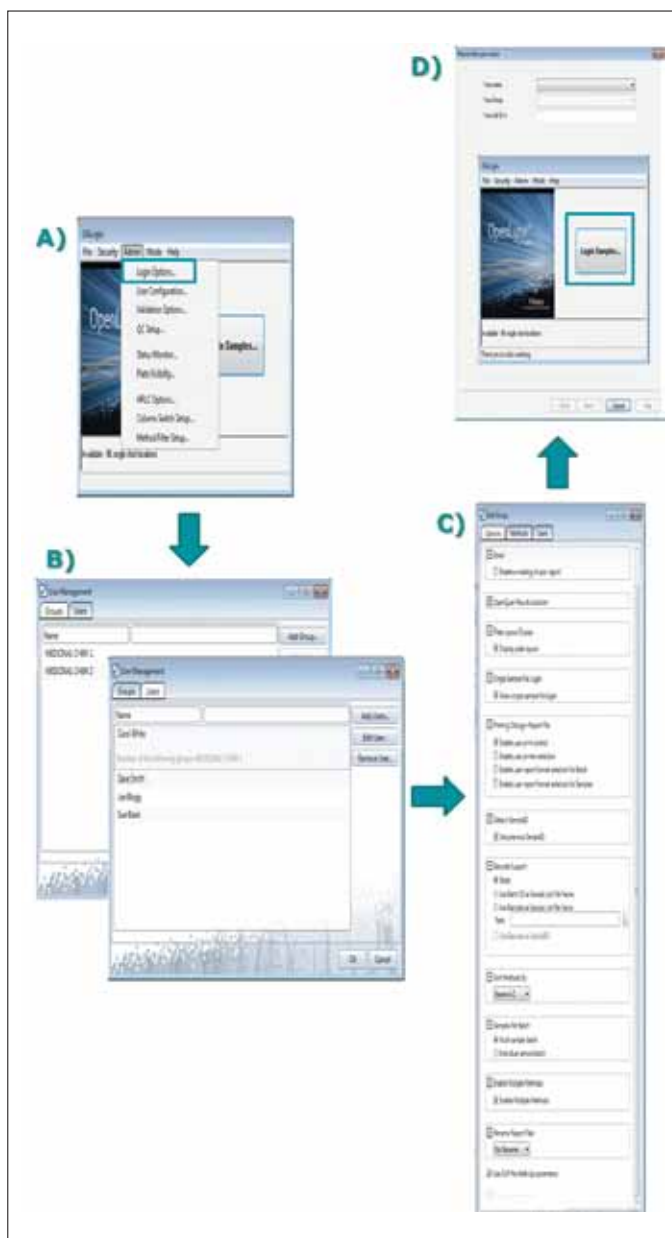


图3. Open Access OpenLynx软件中的User Management对话框。

总结

通过在MassLynx OpenLynx Open Access软件平台上将ACQUITY UPLC系统与ACQUITY UPLC PDA和ACQUITY QDa检测器相结合，简化了药物化学分析人员的工作流程，提供了快速色谱分离和确证化学合成反应产物的完整方案。

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

Waters, The Science of What's Possible, ACQUITY, ACQUITY UPLC和MassLynx是沃特世公司的注册商标。OpenLynx和QDa是沃特世公司的商标。其他所有商标均归各自的拥有者所有。



沃特世科技(上海)有限公司
北京: 010 - 5209 3866
上海: 021 - 6156 2666
广州: 020 - 2829 6555
成都: 028 - 6554 5999

沃特斯中国有限公司
香港: 852 - 2964 1800

©2013 沃特世公司 中国印刷
2013年10月 720004802ZH KP-PDF

免费售后服务热线: 800 (400) 820 2676
www.waters.com