[TECHNOLOGY BRIEF]

メディシナルケミストリーのラボにおける ACQUITY QDa 検出器のメリット

Janet Hammond and Emmanuelle Claude

目的

メディシナルケミストリーのラボで ACQUITY UPLC® システムに ACQUITY® QDa™ 検出器を接続し、さらに MassLynx® 4.1 ソフトウェアの OpenLynx™ Open Access アプリケーションマネージャを活用するメリットをご紹介します。

背景

製薬業界では、プロセスを改良し迅速に医薬品の開発を推し進めることが求められてきました。その結果、創薬および開発の全ての段階で品質を確実なものとし、効率および生産性を向上するというゴールを目指して新しい手法が導入されています。

1995 年頃から、合成研究者は合成反応をモニターし、構造を推定し、新たな不純物を確認するために、年間 100,000 検体以上のサンプルを LC/MS で分析することができるようになっています。これだけの仕事量を可能にするテクノロジーの一つが、MassLynx ソフトウェアの OpenLynx Open Access です。このツールによって、分析サンプルの登録からメソッドの選択およびレポートまでの一連の流れを全自動で実施することができます。

オープンアクセスソフトウェアを搭載した UV および MS 検出器を UPLC システムと組み合わせる相乗効果によって合成研究者は迅速なクロマトグラフィー分離と合成反応生成物の同定確認を行うことができます。

ACQUITY QDa 検出器は、セパレーションシステムと接続することで相乗効果が得られるように設計された MS 検出器です。MS 検出によって、クロマトグラフィーを日常的に行う分析化学者の要望を満たすものとなっています。マススペクトル情報を LC 分析の流れとシームレスに統合することができ、化合物の同定確認によって分離をより完全なものにしています。オープンアクセスの環境で ACQUITY UPLC PDA および ACQUITY QDa 検出器を ACQUITY UPLC システムに組み合わせることで、合成を行っているすぐ隣で合成研究者が反応生成物を確認し、純度をモニターすることが可能です。

ソリューション

UV および MS 検出と合わせてオープンアクセスのツールを用い、合成反応でできた混合物を UPLC で分析する流れをご紹介します。

- 合成研究者は、画面にログインして反応生成物の質量を入力（ここでは 310 Da、図 1）。指定された位置に反応溶液をセット。
- レポートは、合成研究者に直接 E-mail で送信され（図 2）、重要な情報は緑色でハイライト表示：ACQUITY QDa 検出器によって目的の化合物（310 Da）が合成されていることを確認。
- ACQUITY UPLC PDA 検出器によって純度パーセントを確認。

オープンアクセス環境の管理は、以下のようにシンプルです。

- 管理者は、User Management ダイアログボックスでグループを作成し、ここにユーザーを割り当てます（図 3A および 3B）。
- 図 3C のように、グループごとの E-mail アドレス、プレートのレイアウト表示、1 枚のサンプルファイルでのログイン、OALogin レポートの印刷、サンプル ID フォーマット、バーコード対応、メソッド選択、walk-up パラメーターの設定オプションがあり、レポートファイル名を変更することもできます。

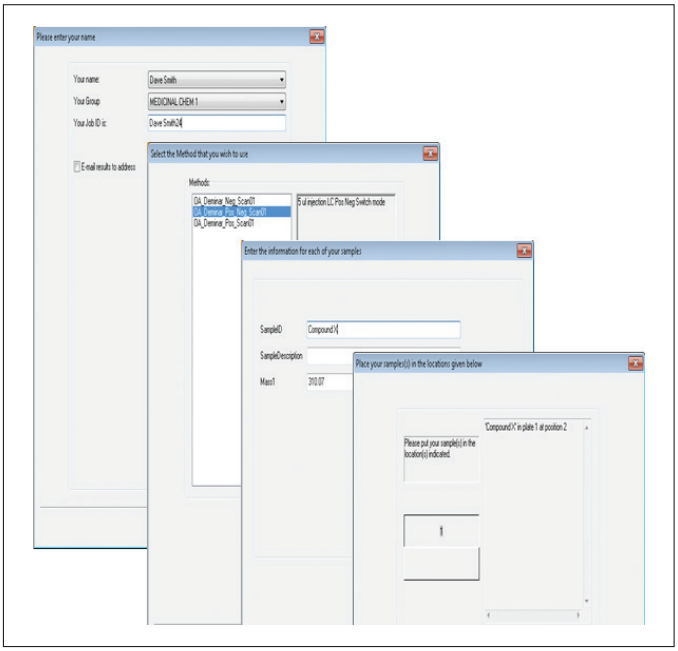

図 1. 合成研究者のためのサンプル分析の流れ

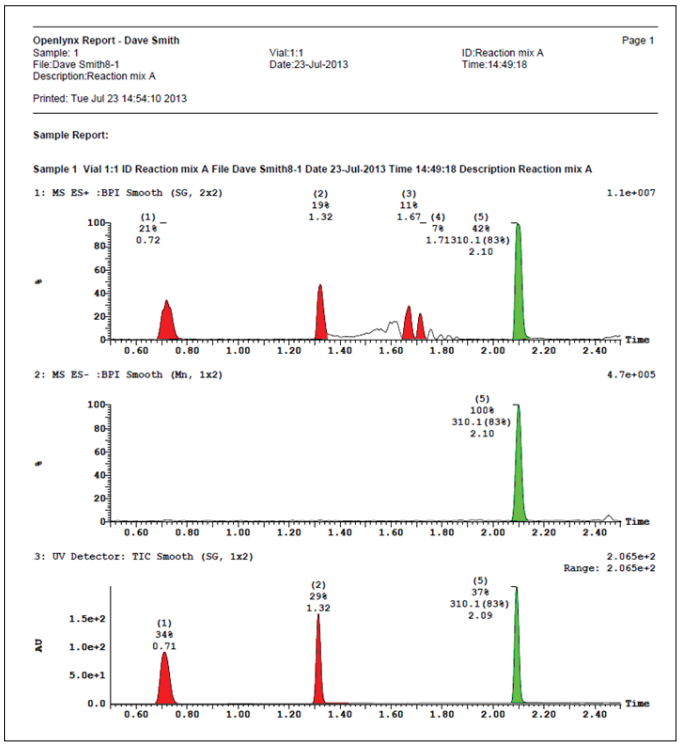

図 2. 合成反応生成物の確認および純度パーセントの標準的なレポート出力例

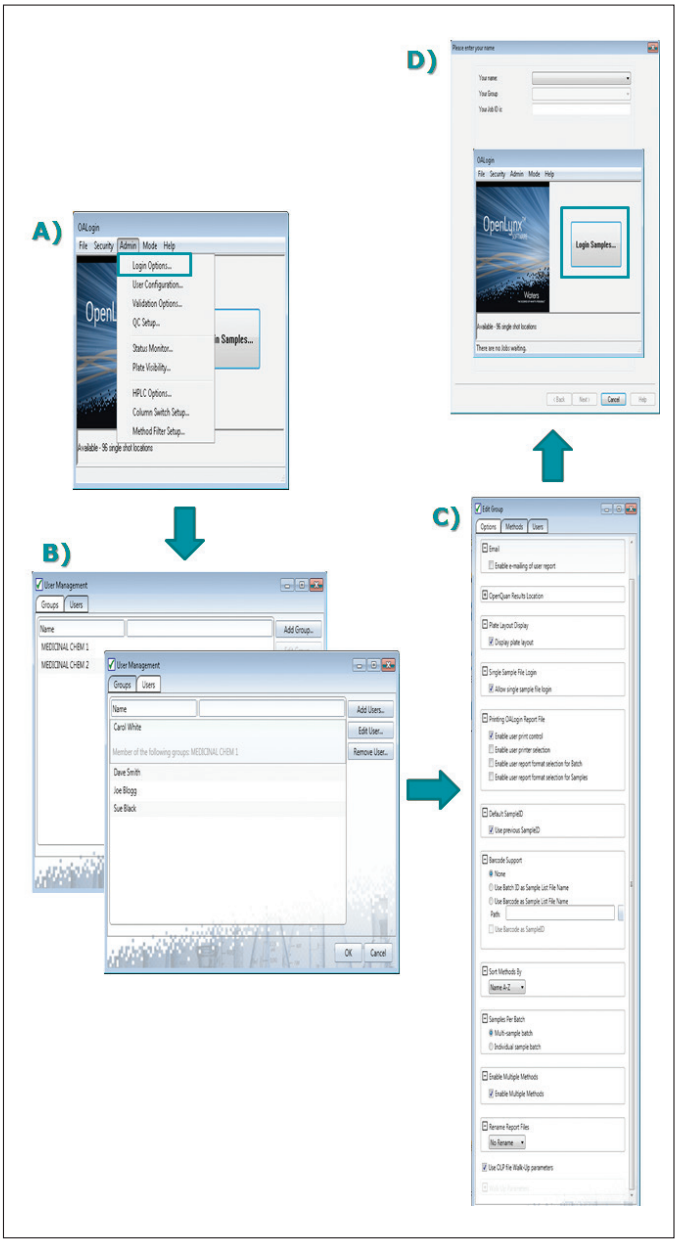

図 3. Open Access OpenLynx ソフトウェアのユーザー管理ダイアログボックス

まとめ

ACQUITY UPLC システムを接続した ACQUITY UPLC PDA および ACQUITY QDa 検出器を MassLynx OpenLynx Open Access ソフトウェアで制御することで、合成研究者のための、迅速なクロマトグラフィー分離と合成反応生成物の同定確認を行うシンプルなワークフローパッケージを提供しています。

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

日本ウォーターズ株式会社 www.waters.com
東京本社 〒140-0001 東京都品川区北品川1-3-12第５小池ビル TEL 03-3471-7191 FAX 03-3471-7118
大阪支社 〒532-0011 大阪市淀川区西中島5-14-10 サムティ新大阪フロントビル11F TEL 06-6304-8888 FAX 06-6300-1734
ショールーム 東京 大阪
テクニカルセンター 東京 大阪 名古屋 福岡 札幌

Waters、The Science of What's Possible、ACQUITY、ACQUITY UPLC、UPLC および MassLynx は Waters Corporation の登録商標です。
OpenLynx および QDa は Waters Corporation の商標です。 その他すべての登録商標はそれぞれの所有者に帰属します。

©2013 Waters Corporation. Printed in Japan. 2013年10月 720004802JA PDF