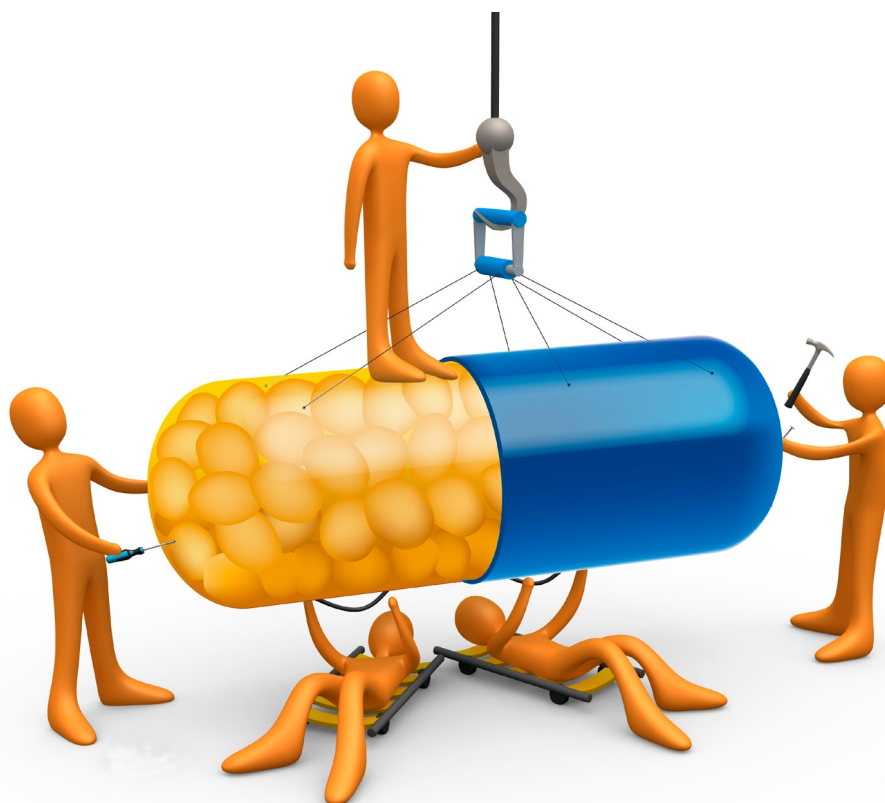


Разрабатывайте QbD-методы для хроматографии



С ПОМОЩЬЮ
ACD/AutoChrom MDS



Visionary Software

Advancing Research

Программное обеспечение ACD/AutoChrom MDS (Method Development Suite) основано на современных принципах Quality by Design (качество как результат реализации плана). В сравнении с традиционным методом проб и ошибок использование этих принципов позволяет разрабатывать методы более эффективно, в меньшие сроки, с меньшими затратами. Результатом использования ACD/AutoChrom MDS является создание более высококачественных и более робастных методов, которые соответствуют Вашим критериям пригодности и надёжности.

Принцип QbD №1 - Начинайте с широким размахом варьирования условий

В системном подходе к разработке метода используйте инструменты прогнозирования для идентификации стартовых параметров. Это даст возможность рассмотреть более широкое пространство варьируемых параметров в сравнении с доступным для экспериментальной проверки диапазоном значений. Более широкий размах является залогом того, что Ваш метод будет базироваться исключительно на истинных оптимальных параметрах. Другой доступный подход использует существующие методы нахождения подходящей начальной точки для соединений с похожей структурой. Любой из двух предложенных подходов к созданию Вашего метода достаточно сфокусирован, а это означает, что его использование избавит Вас от рутинной процедуры проб и ошибок.

Принцип QbD №2 – Многопараметрическая оптимизация

Методы, полученные в результате оптимизации только одного параметра, часто изменчивы во времени. Однако, это не относится к методам, полученным на основе учёта влияния хроматографических параметров друг на друга. Пакет ACD/AutoChrom MDS способен одновременно оптимизировать как один, так и несколько параметров. Эксперименты, которые с меньшей вероятностью способны дать приемлемые результаты, будут заранее исключены, что обеспечит необходимость меньшего количества заколов и скорейшую разработку метода.

Прогнозируйте

- Используйте прогнозы pK_a для выбора pH подвижной фазы до того как сделать первый закол.
- Прогнозируйте времена удерживания новых соединений, исходя лишь из их химической структуры.

Проводите поиск

- Формируйте и осуществляйте поиск в рамках базы данных экспериментальных хроматограмм или в ACD/Общественной базе данных хроматографических приложений.
- Проводите поиск, направленный на нахождение методов для похожих соединений, на основании заданной структуры.

Робастность метода моделируется на протяжении всей оптимизации, она представляется в виде определённого пространства. Графическое представление позволяет надёжнее определить, какие из параметров оказывают влияние на качество разделения. Предварительная оценка робастности является залогом успешной валидации конечного метода.



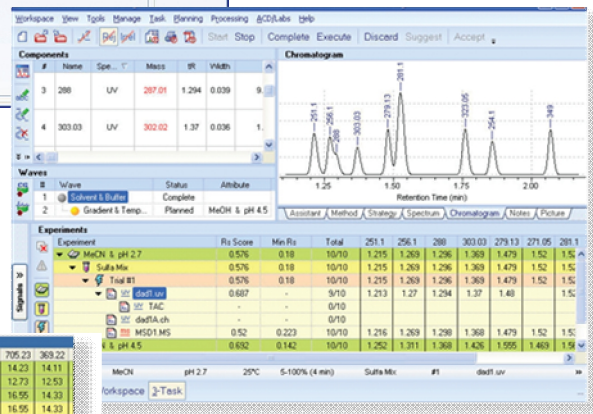
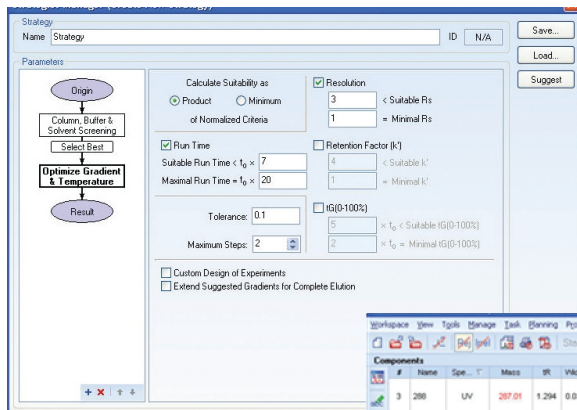
Принцип QbD №3 – Сохраняйте экспериментальные и проектные сведения

Максимально полные экспериментальные сведения важны для реализации концепции QbD. Богатство экспериментальной информации, получаемой в ходе разработки метода, должно быть в достаточной мере защищено.

Соответствующая систематизация и сохранение сведений являются элементами управления жизненным циклом данных и обеспечивают возможность быстрого поиска, отслеживаемость и доступность необходимых сведений. Хранилище данных полезно для будущих исследований и является залогом глубокого понимания проекта разработки.

С помощью удобного представления Project Management, реализованного в ACD/AutoChrom MDS, Вы сможете создать более общее представление о Вашем проекте. Комментируйте и добавляйте примечания, обсуждая проведенные эксперименты, а также дополняйте проект любыми другими документами и относящейся к нему информацией.

- Просматривайте хроматограммы, спектры, записи в сводной таблице пиков.
- Автоматически соотносите пики между хроматограммами.
- Просматривайте параметры разделения для каждого закола.
- Автоматически идентифицируйте ионизированные молекулы и молекулярную массу для каждого хроматографического компонента.
- Сохраняйте ссылки на сырые данные для просмотра или обработки в любой момент.



Experiment	205.21	241.17	426.11	314.12	416.12	297.11	300.07	705.23	369.22
Waters Atlantis T3 & pH 2.5	7.3	7.38	9.8	10.73	10.39	12.04	12.95	14.23	14.11
Supelco Ascentis Express C18 & pH 2.5	5.69	6.05	8.3	9	8.96	10.36	10.93	12.73	12.53
Waters XBridge C18 & pH 4.8	5.95	6.73	8.6	10.95	11.03	13.14	11.79	16.95	14.33
S2	5.95	6.73	8.6	10.95	11.03	13.14	11.79	16.95	14.33
W1_COIL_48_S1.ms[M.S]	5.95	6.73	8.6	10.95	11.03	13.14	11.79	16.95	14.33
W1_COIL_48_S1.ms[D.DAD]	5.95	6.73	8.6	10.95	11.03	13.14	11.79	16.95	14.33
TAC									
Waters XBridge RP18 & pH 4.8	5.15	8.81	8.67	11.44	10.7	12.45	11.57	16.14	13.52
Waters XBridge Phenyl & pH 4.8	6.36	9.08	9.3	10.85	11.86	12.73	11.57	16.13	14.94
Waters Atlantis T3 & pH 4.8	6.61	9.8	9.48	12.26	12.11	14.64	13.1	18.47	15.86
Supelco Ascentis Express C18 & pH 4.8	4.78	7.92	7.8	10.29	10.16	12.26	11.03	16.41	13.69
Waters XBridge C18 & pH 7.0	7.69	9.79	10.44	10.81	14.73	14.51	11.67	16.5	19.31

Поддерживаемые форматы данных

Программное обеспечение ACD/Labs поддерживает форматы данных большинства производителей приборов HPLC, LC/UV и LC/MS. Полный перечень совместимых форматов доступен на нашем сайте www.acdlabs.com/msformats



Разрабатывайте высококачественные методы с помощью передовых алгоритмов обработки данных, оптимизации метода и управления проектом в одном пакете программного обеспечения.

Пакет ACD/AutoChrom MDS способствует разносторонней реализации принципов QbD для разработки эффективных и робастных хроматографических методов

- Системный дизайн рабочего пространства метода как результат многопараметрической оптимизации.
- Сведение к минимуму рисков благодаря созданию робастных методов.
- Использование научных знаний для создания совокупности проектных параметров.

Более высокая эффективность

- Использование подхода QbD обеспечивает робастность хроматографического метода, делая его надёжным, а также исключает затраты и задержки, связанные с повторными разработкой или валидацией ненадёжных методов.
- Более быстрая разработка метода и его лучшее качество означают высокую эффективность, снижение операционных затрат благодаря экономии растворителей, меньшему времени, затрачиваемому на эксперимент, уменьшению доли ручной интерпретации результатов. Исключите дублирование информации и сократите время, затрачиваемое на поиск и обобщение данных.



Автоматизируйте разработку метода на приборах Waters и Agilent

Встройте мощные возможности пакета ACD/AutoChrom MDS по разработке метода в отдельный прибор Waters или Agilent. Пакет ACD/AutoChrom MDS автоматически проведёт Вас через этапы разработки метода, предлагая последующие эксперименты, контролируя инструментальные параметры и настройки для последующего закола.

Пакет ACD/AutoChrom MDS совместим с программным обеспечением Agilent ChemStation и Waters Empower 2

Узнайте больше на www.acdlabs.com/meth_develop

