

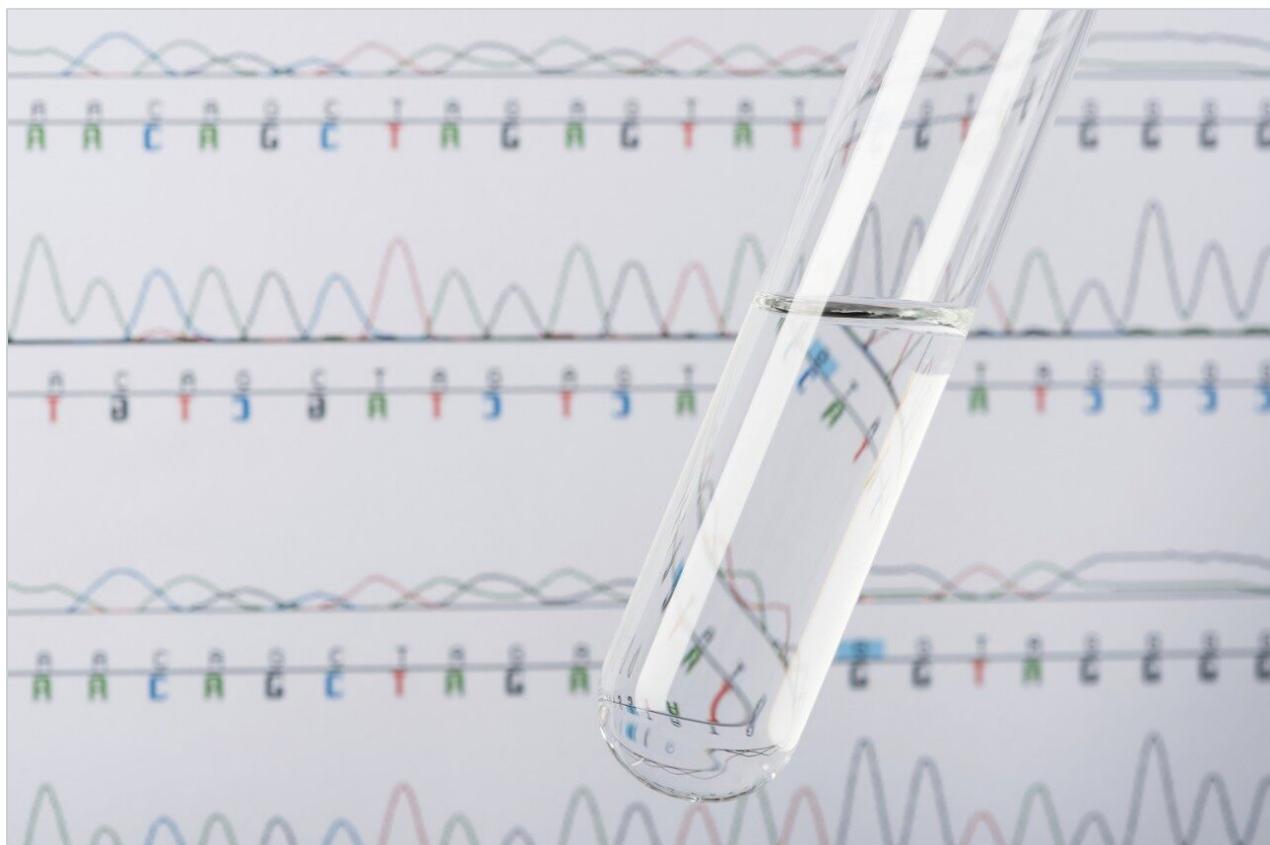
应用纪要

## 使用Empower CDS软件验证色谱峰的光谱纯度

---

Margaret Maziarz

Waters Corporation



---

摘要

本应用简报展示如何通过Empower 3软件使用PDA和质谱数据确认色谱峰的光谱纯度。

## 优势

Empower色谱数据软件使用户能够使用PDA和质谱数据来验证色谱峰的光谱纯度。

---

## 简介

必须证明药品质量检测所用分析方法具有专属性，才能确保所需分析物得到分离，并且不会受到样品基质中其它成分的干扰。如果无法检出峰或无法确定潜在的共流出物，可能会影响药品的安全性和有效性。因此，确认光谱纯度或均一性将有助于鉴定色谱峰表示的是单一化合物还是与样品中的其它物质发生了共流出。另外，在分析定量之前进行峰纯度检查，有助于确保可报告结果的准确度。

本技术简报展示如何使用Empower 3软件中的峰纯度工具来验证Mucinex糖浆样品中活性药物成分(API)的光谱纯度<sup>1</sup>。使用ACQUITY PDA检测器测得的紫外光谱数据与ACQUITY QDa质谱检测器测得的质谱数据，可以确认各种活性成分均未与糖浆样品的任何其它组分共流出。

---

## 结果与讨论

Empower软件中的峰纯度工具可将整个峰中每个数据点的光谱与顶点处的参比光谱进行比较，由此确定色谱峰是否由单一组分组成或者是否具有光谱同质性。如果色谱峰上所有点的紫外光谱均相同，则该色谱峰表示单一化合物。但是，如果色谱峰上各个点的紫外光谱发生变化，则表明该峰由一种以上的成分组成，或者与样品进样中的其它物质发生了共流出<sup>2</sup>。

本研究使用PDA和MS光谱数据验证Mucinex糖浆制剂中API的光谱纯度<sup>1</sup>。首先，我们在Empower处理方法中启用纯度功能，并定义波长和噪音值（图1）。然后评估糖浆样品中API的峰纯度（图2）。例如，紫外纯度图显示，苯肾上腺素的峰纯度角小于阈值角，表明苯肾上腺素具有光谱同质性，并且未与样品中的任何其它组分发生共流出（图2B）。Empower 3“质谱分析”窗口的峰纯度谱图将整个色谱峰的PDA和MS谱图数据显示在一幅图中，这些数据显示在色谱峰的前沿、顶点和后沿（图2C）。质谱图显示整个峰中存在一种质量数( $m/z$ )，其对应于苯肾上腺素。紫外峰纯度图和质谱数据均证实苯肾上腺素具有光谱同质性，并且未与糖浆制剂中的其它组分发生共流出。

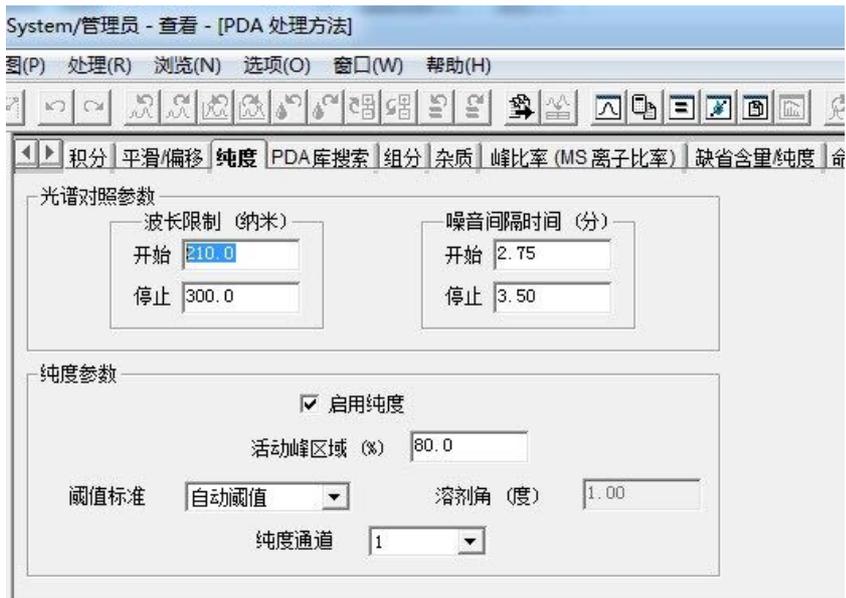


图1. Empower 3软件的处理方法中的峰纯度功能

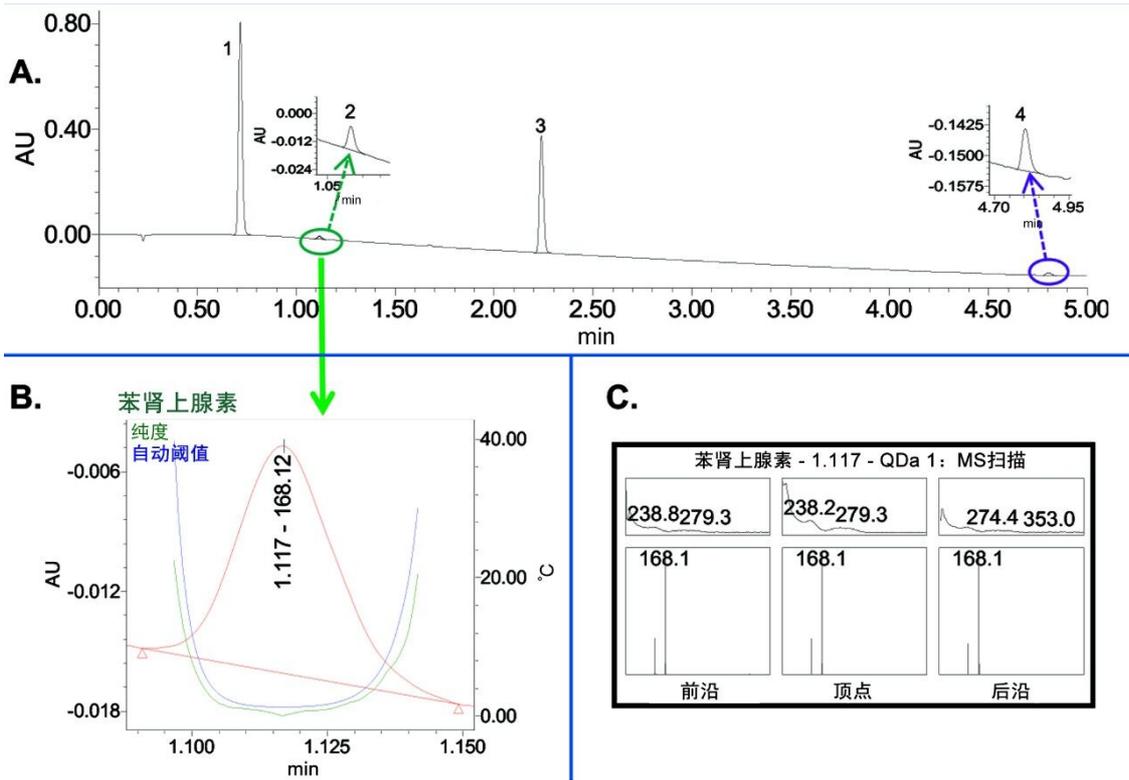


图2.利用紫外检测器在215 nm下对Mucinex糖浆进行分析。分离色谱图(A)。苯肾上腺素API的紫外峰纯度图(B)。Empower 3“质谱分析”窗口，展示了色谱峰前沿、顶点和后沿的苯肾上腺素峰纯度谱图(C)。

总体而言，糖浆样品的分析结果表明，每种API的纯度角均小于阈值角，展示了光谱同质性（图3）。

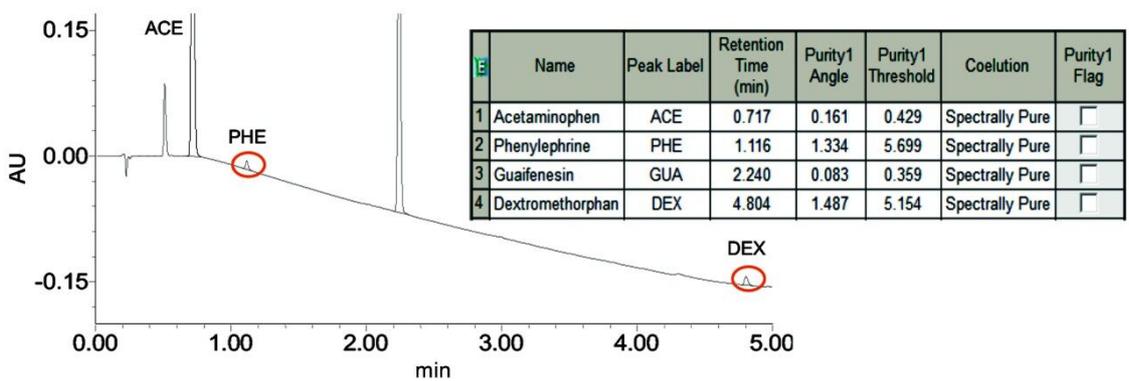


图3.利用峰纯度评估进行Mucinex糖浆分析。UV检测波长为215 nm。

---

## 结论

Empower 3软件峰纯度测定结果验证了Mucinex糖浆样品中活性药物成分具有光谱同质性。这一结果证实活性化合物可得到成功分离，并且未与制剂中的其它组分发生共流出。

利用紫外和质谱数据可以提高色谱峰纯度测定的可靠性和信心，尤其适用于结构类似的物质。谱峰纯度的准确评估对于保证药品的安全性和有效性至关重要。

---

## 参考文献

1. Maziarz M, Rainville P. Robust and Rapid Method for Analysis of Active Pharmaceutical Ingredients in Multi-Component Cold and Flu Medication. Waters Application Note; 2019:720006523EN.
2. Empower PDA Software Getting Starter Guide.沃特世公司用户手册; 2004: 71500031503.

---

## 特色产品

ACQUITY UPLC PDA检测器 <<https://www.waters.com/514225>>

Empower 3色谱数据软件 <<https://www.waters.com/513188>>

ACQUITY QDa质谱检测器 <<https://www.waters.com/134761404>>

720006582ZH, 2019年5月

©2019 Waters Corporation. All Rights Reserved.