

使用Xevo™ G3 QToF系统测定mPEG-OH的分子量分布

Sangeetha Vadivel, Sumit Bobhate, Padmakar Wagh博士

Waters Corporation

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

摘要

使用Xevo G3 QToF系统简化为甲氧基封端的聚乙二醇(mPEG-OH)样品开发分析方法的过程，并测定聚合物的分子量分布(MWD)。

简介

由于多分散性极低的PEG应用广泛，生物制药行业近来对这种物质的关注度越来越高。分子量是PEG的一个重要特性，它决定了材料的特性。研究已经证明，高分辨率质谱(HRMS)是适合用于测定PEG生物治疗药物MWD的优选方法。使用电喷雾电离(ESI)质谱分析PEG样品的难度极大，这是因为ESI形成的聚合物大分子离子会产生彼此重叠的电荷态分布。这通常会将聚合物的数据处理复杂化，导致分子量和电荷态分布之间产生叠加峰，进而需要借助去卷积程序进行处理。为了帮助解决PEG分析面临的挑战，本研究将Xevo G3 QToF质谱仪平台与ACQUITY™ UPLC™ I-Class PLUS系统联用，并配合waters_connect™ UNIFI™软件用于分析mPEG-OH样品的MWD和多分散性。UPLC-HRMS系统配合现代化软件的优势在于可以分离和简化数据，提高解析结果的可信度。

实验结果显示，对于三种不同范围（30k Da、40k Da和50k Da）的mPEG-OH样品，优化后的方法能够有效地测

定其分子量并简化电荷态分布。

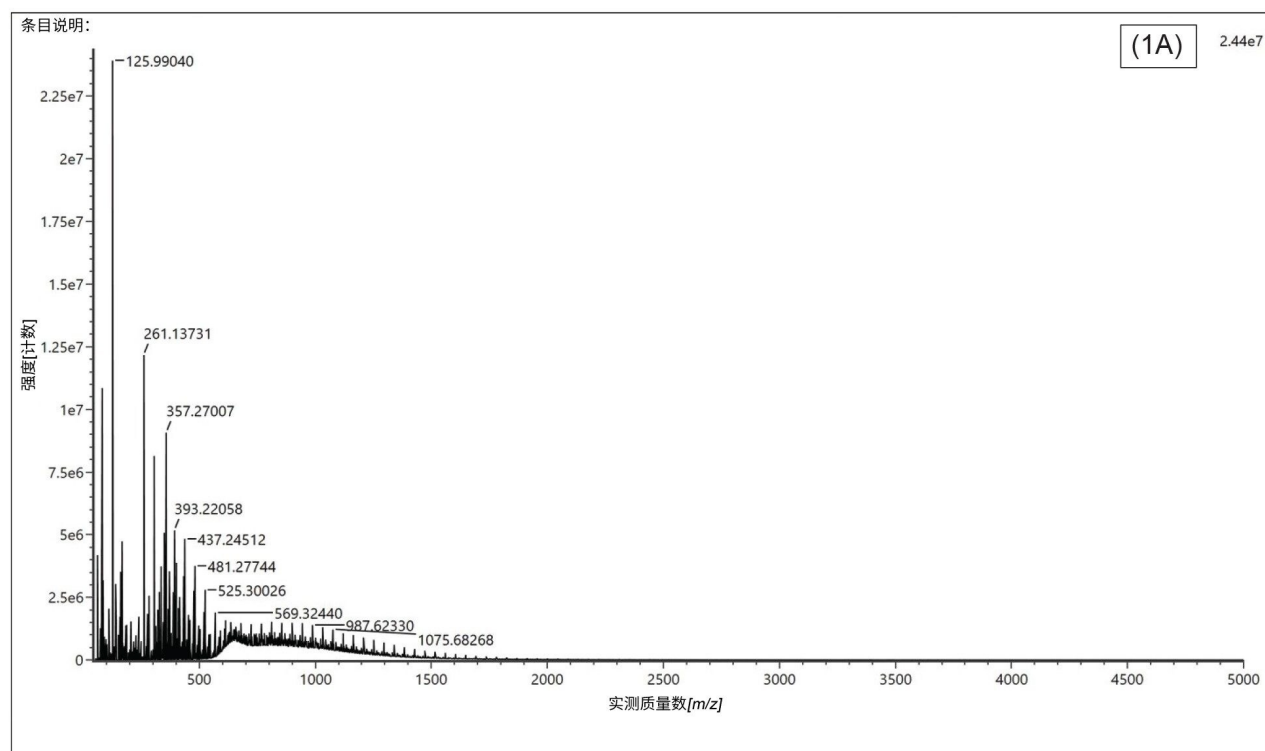


图1A.添加TEA（一种电荷剥离剂）之前(1A)和之后(1B)的mPEG-OH 30k Da质谱图

量(Mw)和多分散性 (PDI或 σ)。通常将Mw/Mn值作为聚合物多分散性的指标。表1详细列出了三个样品的Mn、Mw和PDI计算结果。分布较窄的单官能化线性mPEG的Mw/Mn值大体上约为1.02~1.05。mPEG-OH样品的多分散性计算值几乎接近1.00 (PDI约为1.0009~1.0018)，这清楚地表明其聚合度达到了非常高的纯度。

样品详细信息	实测质量数	Mn	Mw	PDI
30k Da mPEG-OH	32578.1508	32814.57	32845.40	1.00
40k Da mPEG-OH	39407.1415	39147.98	39220.27	1.00
50k Da mPEG-OH	49157.6304	49121.66	49168.62	1.00

表1.三个样品的Mn、Mw和PDI计算结果

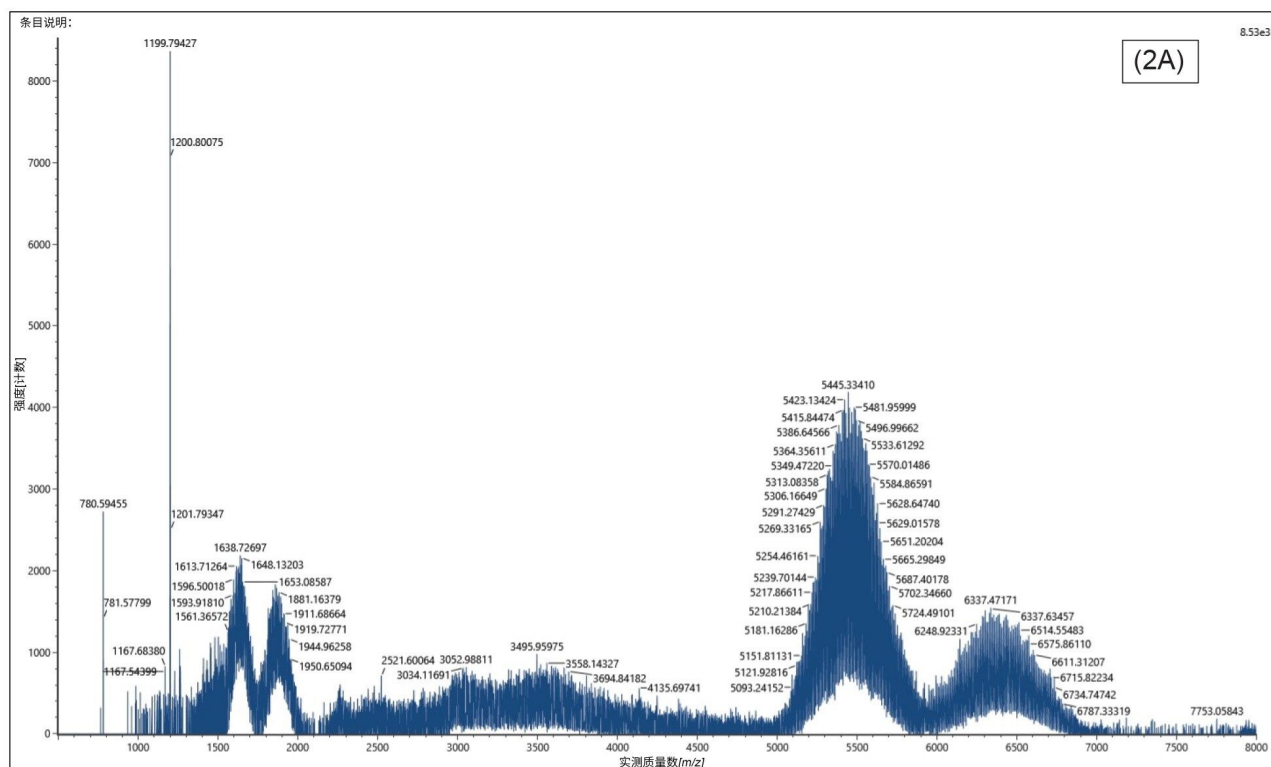


图2.柱后添加TEA的30k Da mPEG-OH质谱图(2A)和去卷积后的30k Da mPEG-OH质谱图(2B)。使用 waters_connect UNIFI软件处理质谱图，获得(2C) Mn、Mw和PDI。

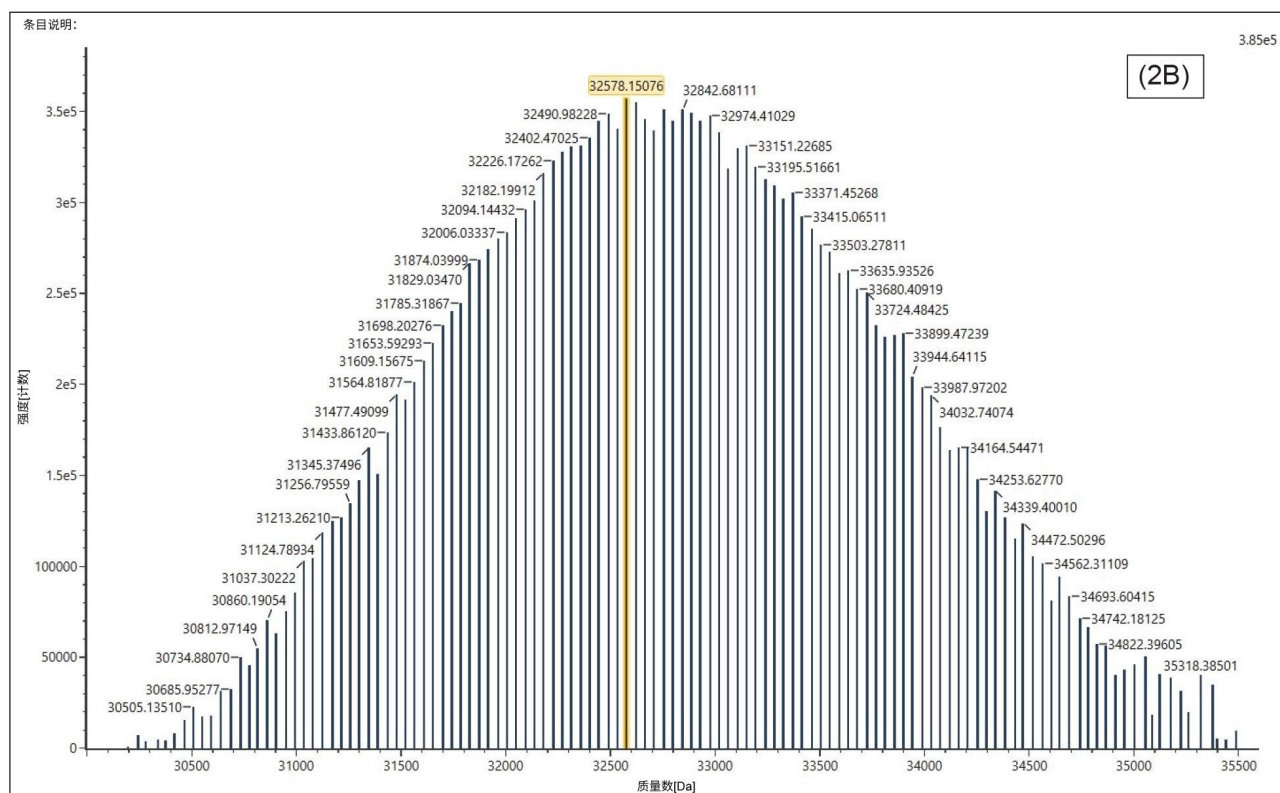


图2.柱后添加TEA的30k Da mPEG-OH质谱图(2A)和去卷积后的30k Da mPEG-OH质谱图(2B)。使用 *waters_connect UNIFI* 软件处理质谱图，获得(2C) Mn、Mw和PDI。

(2C)

	Observed mass (Da)	Observed RT (min)	Response	% Relative Response - Polymer (%)	Mn - Polymer	Mw - Polymer	PDI - Polymer
1	32578.1508	0.70	356910	1.65	32814.57	32845.40	1.00

图2.柱后添加TEA的30k Da mPEG-OH质谱图(2A)和去卷积后的30k Da mPEG-OH质谱图(2B)。使用 *waters_connect UNIFI* 软件处理质谱图，获得(2C) Mn、Mw和PDI。

结论

本研究提供了一种快速方法，该方法将Xevo G3 QToF平台与ACQUITY UPLC I-Class PLUS系统联用，并配合waters_connect UNIFI软件用于PEG样品的常规分析，扩展了这套联用系统的应用范围。

- 实验证明，这种组合工作流程非常适合这种复杂的样品分析方案
- 除了能提供快速分析方法解决方案以外，Xevo G3 QToF平台还能改善去卷积质谱图分布模式，降低谱图复杂性
- 使用waters_connect UNIFI平台能够高效测定Mn、Mw和PDI值

特色产品

ACQUITY UPLC I-Class PLUS系统 <<https://www.waters.com/134613317>>

Xevo G3 QToF <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry-systems/xevo-g3-qtof.html>>

waters_connect <<https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135040165>>

UNIFI科学信息系统 <<https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=134801648>>

720007958ZH，2023年6月



© 2024 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私](#) [商标](#) [招聘](#) [危险化学品生产经营许可证](#) [Cookie](#) [Cookie设置](#)

沪ICP备06003546号-2 京公网安备 31011502007476号