

sirius T3



SiriusT3

药物理化常数测定仪——“黄金标准”

SiriusT3 只需要非常少量的样品，就可以测定可离子化的药物与小分子物质的pKa, log P, log D和溶解度。也可以在仅1.5mL的溶剂中测定可离子化和中性化合物的溶出度。SiriusT3 设备被各大学，生物化学机构和CRO公司用于实验室中的药物研发。



五个可进入样品瓶的微型探头

主要应用：

早期阶段的化合物筛选

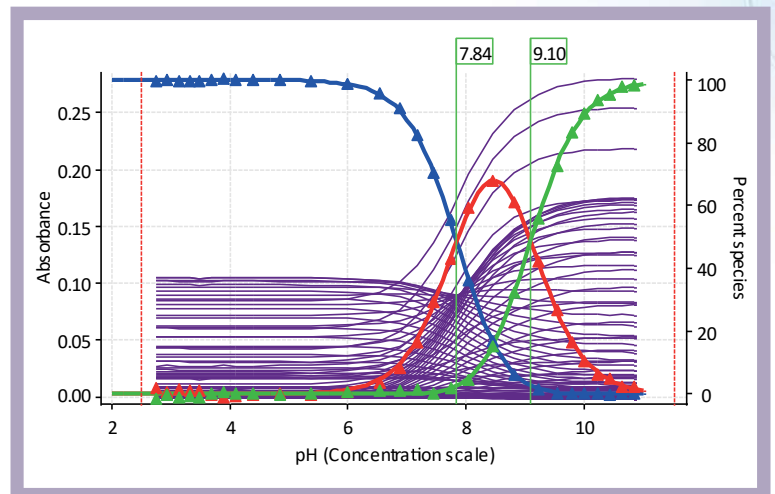
- 在化学合成方面，测定pKa有助于选择最佳的结构进行研究
- 可用于化合物的优化和筛选，从而降低后期药物研发失败风险
- 一天可以测量多达80个样品；自动化技术可以节约操作时间

理化常数测定

- 药物解离状态研究，随pH变化情况以及对药物吸收的影响
- 了解溶剂相互作用，分配，沉淀或结合行为是如何改变pKa的
- ADME预测，并评估分子变化对logP值影响

处方前研究

- 提供详细的物理化学曲线
- 了解分子的过饱和能力与LLPS过程
- 使用非常少量的样品分析溶出速率



光谱数据 vs 有两个pKa的样品的pH值

pKa的重要性

大多数小分子药物可以在水溶液中解离。当体系pH变化，解离过程发生并伴随着氢离子的得失。当pH值升高（例如在胃肠道），基质从离子态转化为中性，从而变得更加亲油、难溶解。这些变化将影响吸收率。pKa值同样会影响许多其他的性质。化学家们通过改变药物的pKa值来改善候选药物的性质。

筛选

SiriusT3是理想的用于药物发现筛选的高通量pKa测量仪器。在大多数实验室中，80% 的样品将会通过快速UV/混合溶剂的方法一次成功。失败的可以用电位滴定法来重新测量，如果该化合物通过了药代动力学（DMPK）测试就要被标记以引起将来的注意。

客户们都在说

“SiriusT3和我们的分析工作流程完美地结合在一起”。

“它是一个很好的配合,填补了我们在公司的空缺”。

“...一个药代动力学研究的必备设备”。

“它已经成为我们筛选流程的一部分,来帮助进行化合物筛选以推进将来的PK测试”。

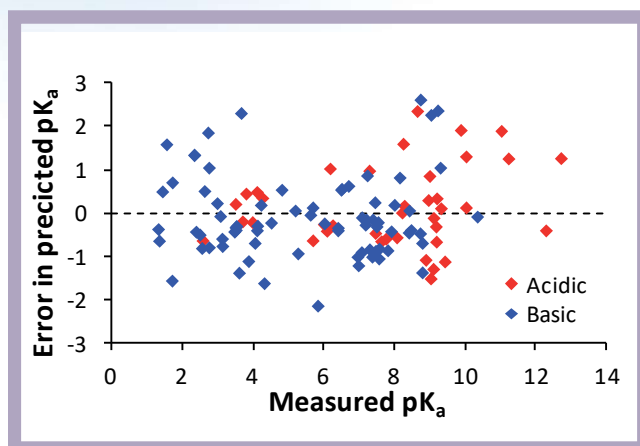
“SiriusT3是化合物理化特征表征仪器不可分割的一部分。对于pKa和log P/D的测量, SiriusT3是黄金标准”。

预测和测量

科学家经常使用软件来预测pKa值。它强大而快速,但并不总是正确的。这张图显示了2013年在我们的应用实验室测量的115个样品的pKa测量值与预测值的对比。我们对测量值很有信心,但在某些预测基础上制定发展战略是有风险的。



192个样品位置的俯视图



测量pKa

如果一个分子的pKa在2到12之间, SiriusT3就会找到它。许多药物能够吸收紫外光,当他们电离的时候,强度会随着波长的不同而改变。我们的UV法从这些变化因素中确定pKa值。大约80%的药物pKa值可以通过快速UV方法在大约15分钟内成功地测定,只需要5 μ L的10mM的原液(通常是10 μ g)。我们可以用电位滴定法测量与紫外变化无关的pKa值,它对固体样品量的要求不到1毫克。

log P, 溶解度和微量样品的溶出度 — 发现更多

Sirius用于测定离子化合物的logP和溶解度的电位滴定法,已得到大量验证性研究的支持。对于化学家而言,如果没有足够的样品进行USP溶出实验, Sirius T3是另一种选择,可进行少量样品在小体积溶液中的溶出研究。Sirius官方网站上列出了实验方法,同时还有关于pKa, logP, 溶解度和溶出度测试的研讨会信息。

SIRIUS T3 技术参数	
pH电极	Ag/AgCl, 双节点参比电极
pH范围	1.8 - 12.2, 通过Sirius Four-Plus™校准
电极储存	电极原位存放, pH7 的缓冲液用于电极校准
搅拌器	顶置, 可变速, 计算机控制
温度	热电偶对每个数据点进行检测 珀尔帖效应控制, 温度范围在12 °C到70 °C
浊度检测	透光检测- 灵敏度低至0.1%
试剂	水、酸、碱、助溶剂和分配溶剂
分配溶剂	支持7种溶剂, 包括辛醇、十二烷、甲苯
助溶剂	支持10种溶剂包括甲醇、乙腈、二甲基亚砷和二氧六环, 安装自动六通阀
分配器	精密的分配器, 0.5mL注射器, 多孔毛细管束, 最小体积为0.024μL
移动探头	X-Y轴全自动移动滴定模块
清洗	清洗站是供静态与动态清洗
自动进样器	拥有192个样品位, 自动机械夹持臂移动进样
吹扫气体	两个内部流量计, 需要氮气或氩气供给
分析体积	1.0 到3.5 mLs
环境要求	只能在室内使用 海拔高度≤2000米 温度5°C~40°C 最大相对湿度80%@31°C 电源电压波动+/-10% 安装超电压Cat II 污染等级2

SIRIUS T3 测量参数	
分析方法	为所有支持的测量提供模板 如果需要, 用户可以保存自定义模板 1-2-3模板设定助溶剂pKa测定
pKa	市场上最高精确度的pKa值测定 <ul style="list-style-type: none"> 大多数样品使用快速UV法在15分钟内可得到结果 UV法使pKa范围拓展到0.5到13.5 电位滴定法用于没有pH/UV活性的样品 助溶剂法用于溶解性差的样品 pKa在混合溶剂的Yasuda-Shedlovsky曲线图 生成各电离种类的分布曲线 确定缓冲容量 标准测试条件: 0.15 M KCl, 25 或 37 °C 样品需求量: UV, 10μg ; pH, 1 mg
log P	<ul style="list-style-type: none"> 测定log P和不同pH值下的log D 研究辛醇/水及其它多种混合体系的分配曲线 内置可用于高、中、低log P值的测定方法 不需要在多种pH缓冲液中进行耗时的摇瓶实验 样品需求量: 1-2 mg
溶解度	<ul style="list-style-type: none"> 确定固有溶解度和动态溶解度 绘制pH vs 溶解度曲线 测定过饱和度 样品需求量: 1-10 mg, 取决于溶解度
溶出度	微量法用于绘制药物溶出度和沉淀速率 <ul style="list-style-type: none"> 研究pH值对溶出度的影响
测试专家	可选的集成软件预测模块(由ACD提供)来进行结构分析和离子基团鉴定, 并确定是酸性物质还是碱性物质, 预估pKa值和logP值。预测值可用于实验设计的自动优化。
试剂	<ul style="list-style-type: none"> 最小运行成本-使用现成的试剂, 不需要特殊的“工具包”。
溶解样品	<ul style="list-style-type: none"> 内置超音波浴, 以帮助测量不溶性化合物。 可运行自动酸碱预处理。
清洗	用于清洁电极和探头的短时间自动化程序。 混合溶剂存在下的低到高, 高到低pH调节; 结束时进行表面清洗。

尺寸	重量	高度	宽度	深度
分配器模块	35 kg/77.16 lbs	700 mm	260 mm	460 mm
滴定模块	23 kg/50.71 lbs	490 mm	215 mm	460 mm
自动进样	27 kg/59.52 lbs	490 mm	350 mm	460 mm
总计	85 kg/187.39 lbs	700 mm	825 mm	460 mm



Sirius Analytical a division of Pion

Riverside, Unit 12, Forest Row Business Park,
Forest Row, East Sussex, RH18 5DW,
UK Telephone: +44 (0) 1342 820720
Fax: +44 (0) 1342 820725
Email: sirius@sirius-analytical.com
web: www.sirius-analytical.com

英国Sirius全国总代理——

上海凯来实验设备有限公司

网址: www.chemlabcorp.com

全国免费客服热线: 400-860-5168转0639

地址: 上海市浦东新区祖冲之路2277弄

世和商务中心1号楼407室

电话: 021-58955731 58955762/63

传真: 021-58955730

