

AI支援によるHPLCメソッド開発の効率化 クロムソードジャパン株式会社/お問合せ : info@chromsword.co.jp

サマリー

- HPLCの条件設定確立に効果的かつ大幅な時間短縮が可能である自動メソッド開発のトータルソリューションソフト、クロムソード (Offline, Auto, AutoRoust) を用いて、シミュレーションから、自動メソッド開発、自動頑健性評価テストを行った。
- ピリミジン誘導体合成におけるHPLCを用いた分析条件の確立に、OffLineによるクロマトグラム最適化シミュレーションから、最適なカラムや溶媒条件の絞り込みを行うことができた。
- Autoによる迅速最適化では、3~5回の自動測定により、無人でメソッド開発が可能であった。
- 煩わしかった頑健性評価も僅かな時間で設定し、HPLCで自動での組み合わせ測定から、デザインスペース構築までを簡単に構築することができた。
- Report Viewerでは大量のHPLCデータの閲覧、解析を、迅速かつ簡便におこなうことができ、またQbD観点からより視覚的にメソッド開発が可能であった。

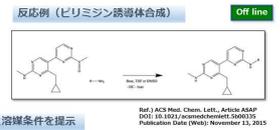


HPLCメソッド開発プロセス

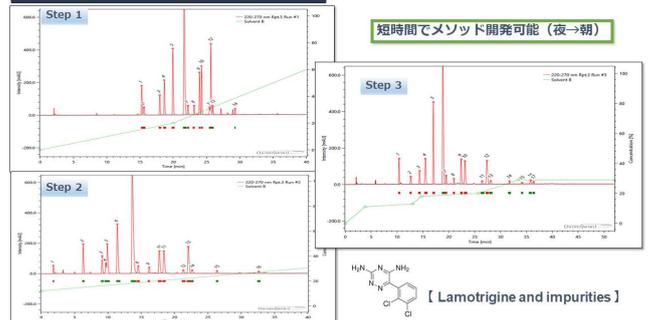


カラムセクション

- 反応中の化合物の構造式から、物性値を予測
- 分離に最適なカラムを自動で選出
- さらに最適な溶媒条件をシミュレーション可。



迅速最適化 <3~5回の実測定>



メソッド開発の効率化ソリューション

オートモード (ChromSword Auto)

- LCを完全制御、クロムソードが独自のAIアルゴリズムで、自動的にHPLCメソッドを最適化

オフラインモード (Off Line)

- 構造式からクロマトグラムをシミュレーション

物性値予測

- 分析結果をもとにクロマトグラムをシミュレーション

実際のクロマトグラムから予測

HPLCダイレクトコントロール

適切な開発メソッドを選択し、後はクロムソードにお任せ!

3-5回の測定で最適グラジエント

主体内高分子、ペプチド、核酸、糖、タンパク質などに対応

メインピークにフォーカスグラジエント

方法

- ChromSword Auto >> 自動メソッド開発
- ReportViewer >> データ迅速ブラウジング、解析、デザインスペース
- AutoRobust >> 自動頑健性評価テスト

【基本測定条件】

- HPLC : Agilent 1200 method development system (Binary pump)
8 カラムスイッチングバルブ、多波長検出器 (MWD)
- カラム : Chromolith SpeedROD RP18e (50 mm, 4.6 mm)
- 移動相 : アセトニトリル/水

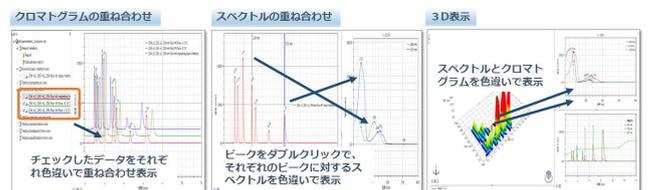
【サンプル】

- ①ピリミジン誘導体合成
- ②ラモトリギン+未知不純物



重ね合わせ、2D 3D表示

- クロマトグラムはデータウィンドウのチェックを入れることで、スペクトルも同時に、異なる色で重ね合わせ表示可能となり容易に比較することができた
- 2D、3Dともに、カーソルを合わせ、ダブルクリックすることで、それぞれにおけるスペクトル、クロマトグラムを異なる色で表示、より簡単にデータの比較・解析を行うことが可能であった



自動頑健性評価テスト/デザインスペース

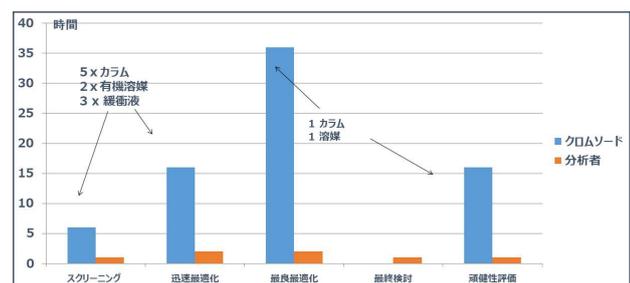
- 条件設定、HPLCで測定、解析、デザインスペース構築まで一連を自動化できた。
- 1時間くらいかかるような設定をわずか数分ですべて設定できた。
- 設定ミスなどのヒューマンエラーの防止にもつながると期待している。
- デザインスペースでは、各パラメータの変化に対するクロマトグラムの予測を、QbDの観点からより視覚的にメソッド開発に活用できることがわかった。

3カラム x 6条件 x 3ステップ 2(+/-) = 108 測定条件 (+基本条件) << 数分



AI支援によるメソッド開発の効率化例

クロムソードを用いることで、メソッド開発における時間と労力の大幅削減が可能



参考) 海外活用例

自動メソッド開発 (API+不純物)

Software (ChromSword) - Assisted HPLC Method Development for Separation of Process-Related Substances

Step1: カラム・最適な初期条件スクリーニング

Step2: OffLineシミュレーションでさらに最適化

ChromSword Auto+OffLineシミュレーションを組み合わせると、短時間で効果的にメソッドを開発