

# Application News

## No. L446

高速液体クロマトグラフィー  
High Performance Liquid Chromatography

### Intelligent Peak Deconvolution Analysis (i-PDeA) による未分離不純物の検出

Detection of Non-Separated Impurities by i-PDeA

主成分の定量や分取のための分離条件を検討する場合、不純物と他成分とを確実に分離する必要があります。しかしながら、予期しない不純物や共存成分もあり、その確認にはフォトダイオードアレイ検出器が有用です。

Intelligent Peak Deconvolution Analysis (i-PDeA) では、フォトダイオードアレイ検出器で得られる UV スペクトルを利用し、微分スペクトル上で主成分を消去し、不純物のみを視覚化することができます。これにより、従来のピークピュリティ法よりも確実に不純物を検出でき、分離条件の最適化を迅速に行うことができます。

ここでは高感度フォトダイオードアレイ検出器 SPD-M30A を使用して、i-PDeA による未分離不純物を検出した例をご紹介します。

M. Kawashima

#### ■ i-PDeA によるピーク分離のフロー

##### Procedure for Separating Peaks Using i-PDeA

i-PDeA では、フォトダイオードアレイ検出器で得られた主成分の UV スペクトルの極大、あるいは極小波長でその UV スペクトルを微分した値をクロマトグラムとして視覚化します。主成分と不純物が未分離のまま溶出したクロマトグラムを Fig. 1 に示します。ここでは主成分の UV スペクトルは 242.27 nm に極大、255.91 nm に極小を持つため (Fig. 2)、いずれかの波長でその UV スペクトルを微分した値は、常にゼロとなります (Fig. 3)。

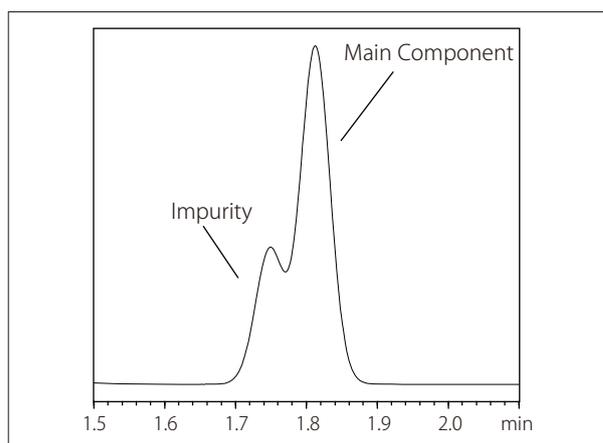


Fig. 1 主成分と未分離で溶出した不純物のクロマトグラム  
Chromatogram of Main Component with Unseparated Impurity

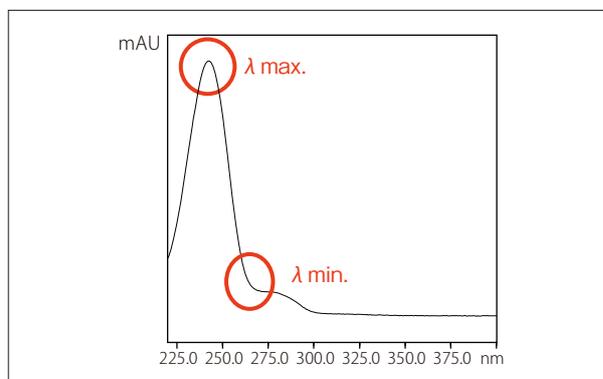


Fig. 2 主成分の UV スペクトル  
UV Spectrum of Main Component

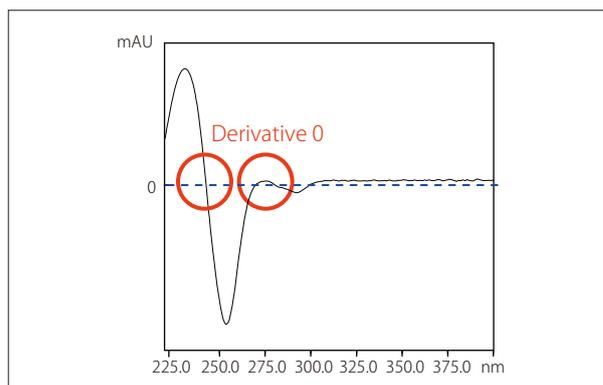


Fig. 3 主成分の UV スペクトルの一次微分  
First Derivative of UV Spectrum of Main Component

ここでは、極小波長である 255.91 nm で UV スペクトルを微分した値にてクロマトグラムを得ました。その結果を Fig. 4 に示します。通常の吸光度に基づいたクロマトグラムでの主成分由来のピークは消失し不純物の微分値はゼロとならないため、濃度に応じたレスポンスが得られました。

なお、UV スペクトルの一次微分値がゼロとなる波長（すなわち、極大または極小波長）は LabSolutions のスペクトルビューで簡単に算出できます。さらに、UV スペクトルの微分値によるクロマトグラム (Fig. 4) は、通常のクロマトグラムと同様の操作で表示・波形処理・レポートといった一連のデータ処理が可能です。

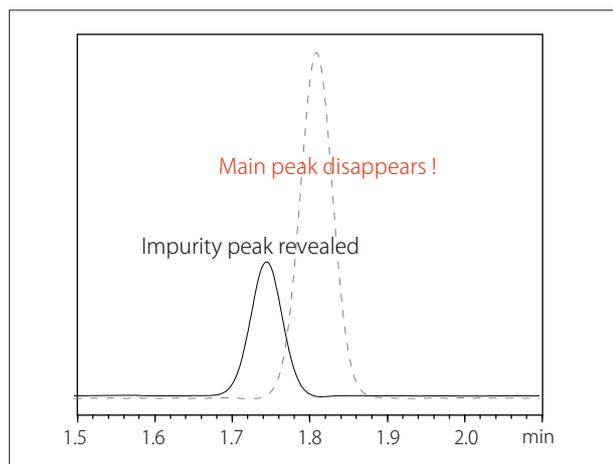


Fig. 4 i-PDeA による主成分消去後の微分スペクトル  
Differential Chromatogram After Removal of the Main Component Peak Using i-PDeA

## ■ i-PDeA の応用

### Applications of i-PDeA

i-PDeA を使用して、メチルナフタレンの分析における不純物との分離確認を行いました。通常のクロマトグラムでピークピュリティ曲線を用いても、ピーク前半に潜む不純物の明確な判断は難しいですが、i-PDeA による微分クロマトグラムでは主成分であるメチルナフタレンのピークが消えることにより、不純物ピークを端的に視覚化することができました。

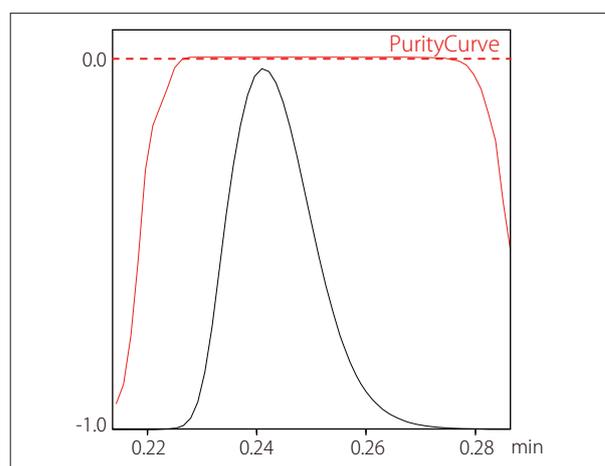


Fig. 5 通常のクロマトグラムとピュリティ曲線  
Typical Chromatogram and Purity Curve

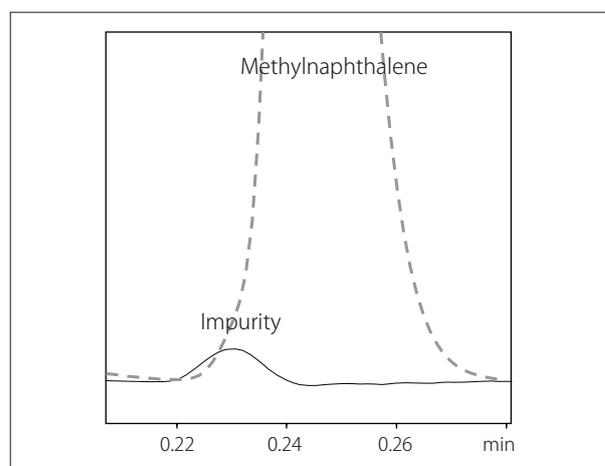


Fig. 6 i-PDeA による主成分消去後のクロマトグラム  
Differential Chromatogram After Removal of the Main Component Peak Using i-PDeA