

メソッド開発用 高速液体クロマトグラフ

High Performance Liquid Chromatograph

# メソッドスカウティングシステム

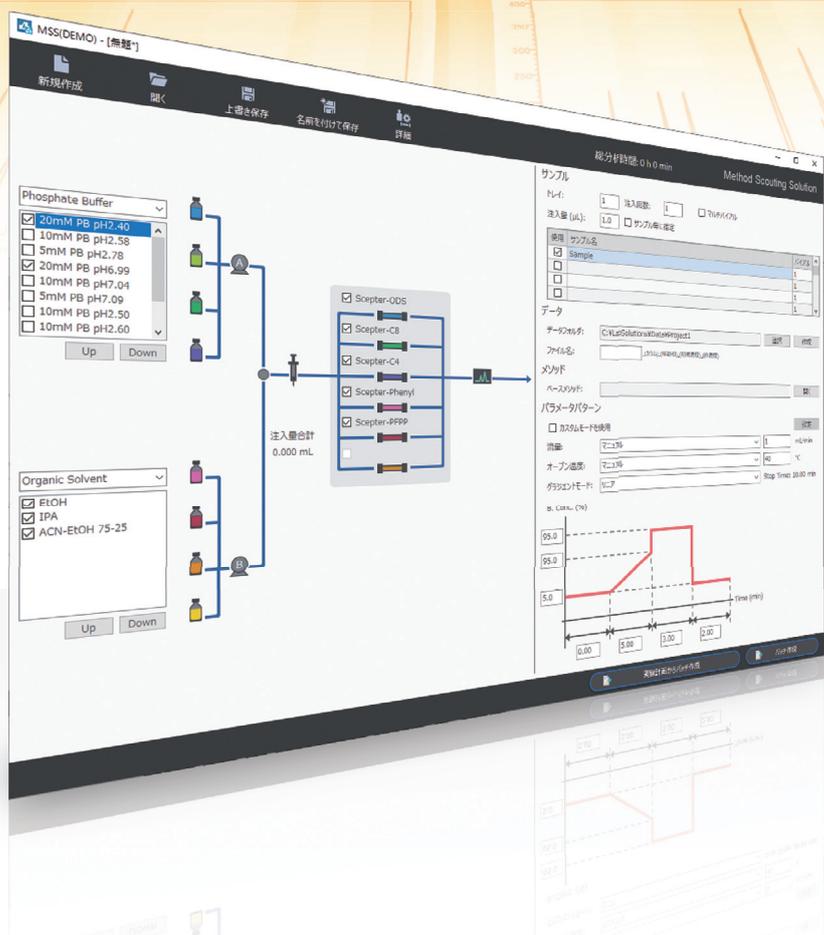


# Maximizing Efficiency for Method Development

## フルオートメーションでメソッドスカウティング

メソッドスカウティングシステムは、島津が提供するUHPLCシステムをベースとしたメソッド開発用システムです。

専用制御ソフトウェア Method Scouting Solution との組み合わせで、迅速で的確なメソッドスカウティングワークフローを実現し、メソッド開発を強力にサポートします。



# わずらわしい分析作業から解放し、 メソッド開発業務の生産性を向上します。

製薬・化学分野における新規化合物やキラル化合物の分析メソッド開発は、カラムや移動相といった分析パラメータの膨大な探索業務を伴います。

メソッドスカウティングシステムは、最適な条件を自動的に探索し、メソッド開発業務を効率化できます。

## › Flexible System Options

島津が提供する多様なLCラインアップでメソッドスカウティングができます。

SFCでの検討や省スペースで簡易的な検討など、運用に即したシステム選択が可能です。

## › Fully-automated Method Scouting

さまざまな移動相やカラムの組み合わせを変えたメソッド探索を自動化し、

効率よく確実にメソッド開発を行うことができます。

## › Optimization and Robustness Evaluation

移動相やカラムの検討だけではなく、グラジエント最適化や頑健性の評価もサポートします。

グラジエント・オープン温度・流量などのパラメータを変動させて分析を実行します。

また、任意の実験計画に基づいた連続分析にも対応します。

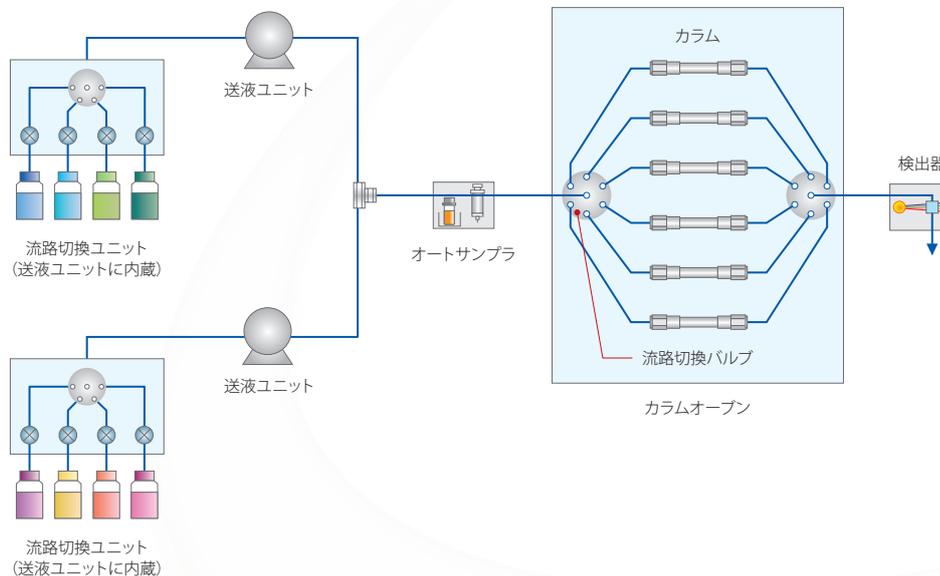


## Flexible System Options

島津が提供する多様なLCラインアップでメソッドスカウティングが可能です。  
SFCでの検討や省スペースで簡易的な検討など、運用に即したシステム構成でお使いいただけます。

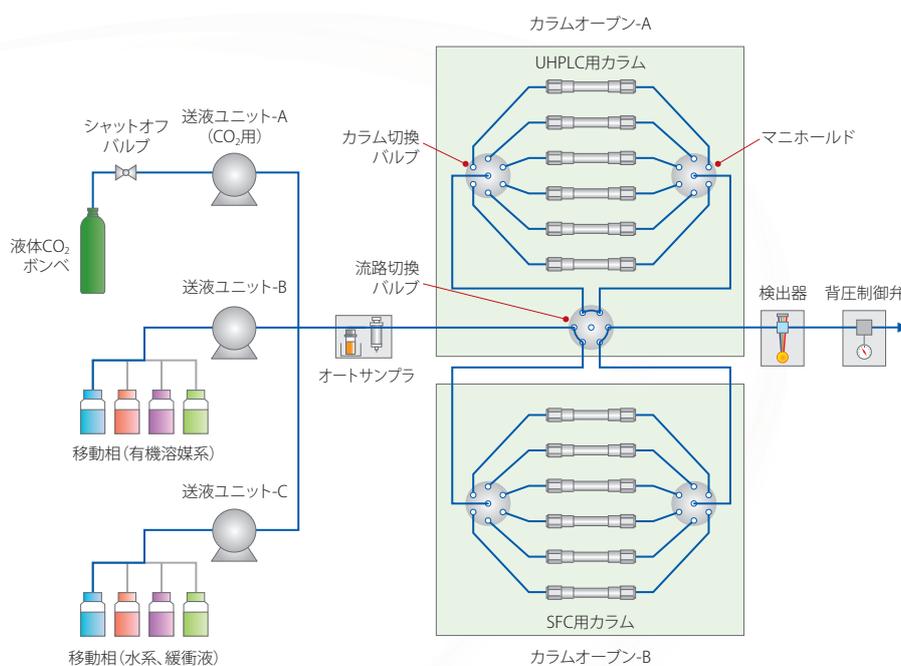
### Nexera™ メソッドスカウティングシステム

- 移動相やカラムを自動で切り換えながら条件検討可能
- 130 MPaのUHPLCモデルやメソッド移管を想定したUHPLC-Likeモデルを用いたシステム構築に対応



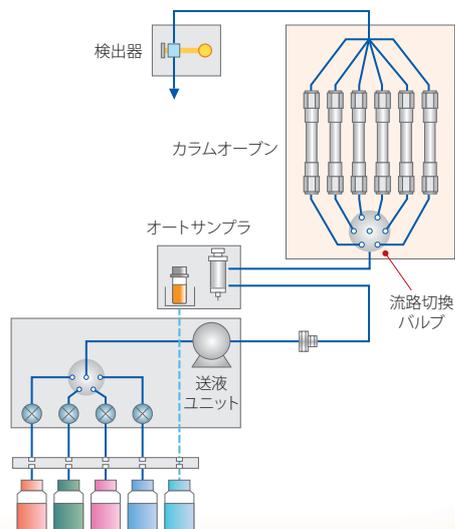
## 超臨界流体クロマトグラフ Nexera/UCs UHPLC/SFC切替システム

- キラル化合物のメソッド検討に最適
- LC/SFC切替に対応し、複数の分離モードで検討が可能



## i-Series メソッドスカウティングシステム

- ルーチン試験への移管コストを削減
- 省スペース・低コストを実現



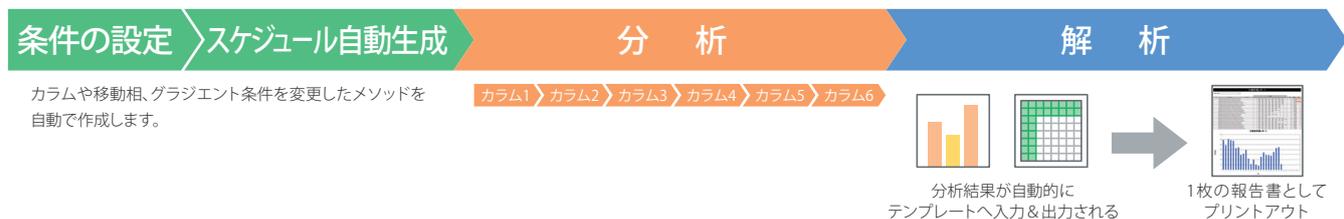
# Fully-automated Method Scouting

専用ソフトウェアMethod Scouting Solutionを用いれば、さまざまな移動相やカラムの組み合わせを変えたメソッド探索を自動化し、効率よく確実にメソッド開発を行うことができます。

## 従来法

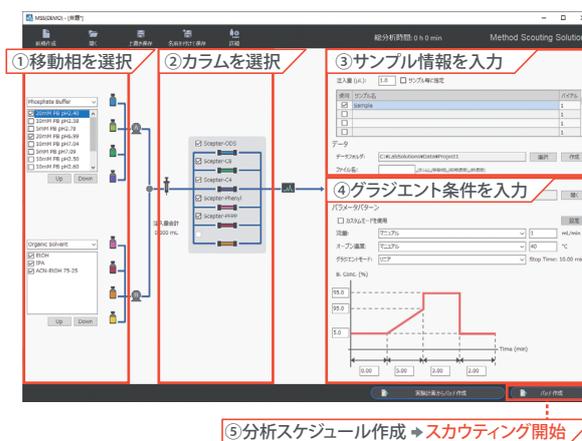


## メソッドスカウティングシステム + Method Scouting Solution



## メソッド・分析スケジュール生成はMethod Scouting Solutionにお任せ

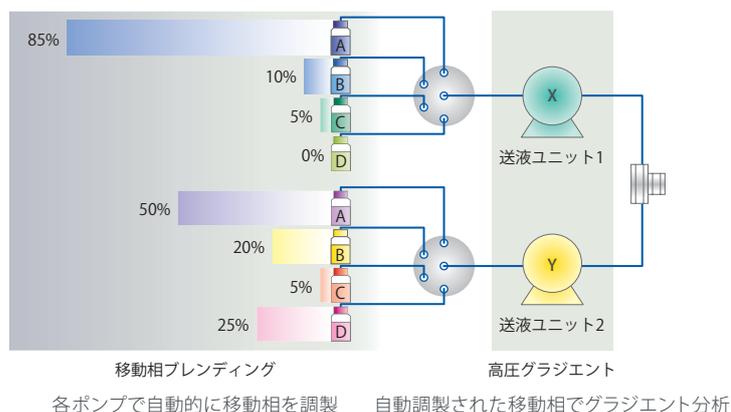
通常、メソッドスカウティングを行う際は、カラムや移動相を切り換えるごとに1つのメソッドを作成しなければなりません。100通りの条件検討をする際には100個のメソッドファイルを作成しなければならないため、膨大な工数を必要とするだけでなく、オペレーションミスの原因となります。Method Scouting Solutionは直感的な操作でカラムや移動相、グラジエント条件を変更したメソッドを自動で作成し、タイムリソースを有効活用できます。



- ①移動相
- ②カラムの選択
- ↓
- ③サンプル情報の入力
- ↓
- ④グラジエント条件の入力
- ↓
- ⑤分析スケジュールの作成

## 移動相ブレンディングによる省力化

メソッドスカウティングシステムが有する移動相ブレンディング機能は、あらかじめ用意した数種の溶媒のみで、塩濃度やpHおよび有機溶媒比率をオンラインで調製し、分析種に適した条件を迅速に探索できます。これまでに移動相の準備や検討に要していた時間を大幅に短縮します。一体型LCシステムi-Seriesでも、低压グラジエントを用いた水系、有機系それぞれ2種ずつの移動相ブレンディングが実行できます。



## 分析

## 解析

カラム3 カラム4 夜間 カラム5 カラム6



### 一連の分析のオートメーション化により稼働率を向上

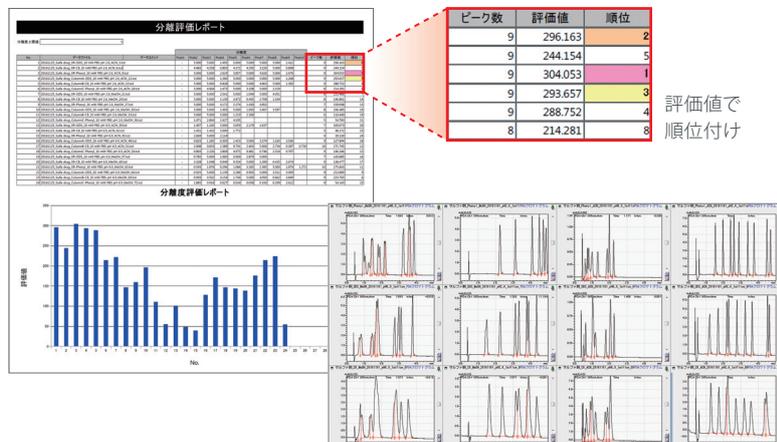
メソッドスカウティングでは移動相やカラムの自動切換時のパージ条件や平衡化が、ひとつのキーポイントとなります。

Method Scouting Solutionでは、あらかじめ設定した条件に基づいてこれらを自動制御、システムチェックからシャットダウンまでのすべてのラボ運営を自動的に行うことができます。



### 結果の評価はマルチデータレポートでシームレスに

得られたデータは、マルチデータレポートを用いることで定量評価できます。当社が考案した分離度とピーク検出数による評価法を用いることにより、定量的にクロマトグラムを解析し、最適なメソッドを導くことができます。当社が提供するテンプレートをMethod Scouting Solution上で登録することで分析終了と同時にレポートが出力されるため、最適な条件を迅速に確認することができます。



ブラウザを使用することで複数のクロマトグラムを視覚的に評価することもできます。

# Optimization and Robustness Evaluation

メソッドスカウティングシステムは、移動相やカラムの検討だけでなく、グラジエント最適化や頑健性の評価もサポートします。グラジエント・オープン温度・流量などのパラメータを変動させて分析を実行します。また、任意の実験計画に基づいた連続分析にも対応します。

## 最適化のための条件作成も容易に

カラムと移動相を選択した後、グラジエント条件の最適化が求められます。Method Scouting Solutionを用いることで、これらのパラメータを自動変動させた分析スケジュールを容易に作成可能です。

1. パターン設定

2. 生成パターン

- グラジエント条件(濃度/時間)
- カラムオープン温度
- 流量

などを変動させた分析スケジュールを簡単に作成可能

変動させるパラメータのステップ数、ステップサイズを設定

## 実験計画法による頑健性評価の効率化

Method Scouting Solutionは任意の実験計画(Excel®形式)をインポートし、計画通りに分析スケジュールを実行することが可能です。流量やオープン温度などの分析パラメータを細かく変動させ、多数の実験を要する頑健性評価を効率化します。

B.Conc	pH	Oven Temp.	Column	Flow Rate
39	2.5	40	Scepter-ODS	1
40	2.5	40	Scepter-ODS	1
41	2.5	40	Scepter-ODS	1
40	2.4	40	Scepter-ODS	1

専用ソフトウェアなどで作成した  
実験計画

データをインポート

実験計画中の因子とHPLCのパラメータを紐づけ

バッチ生成

カラム平衡化を含むバッチスケジュールが自動で生成

## 標準的なLC構成でメソッド最適化と頑健性評価を効率化

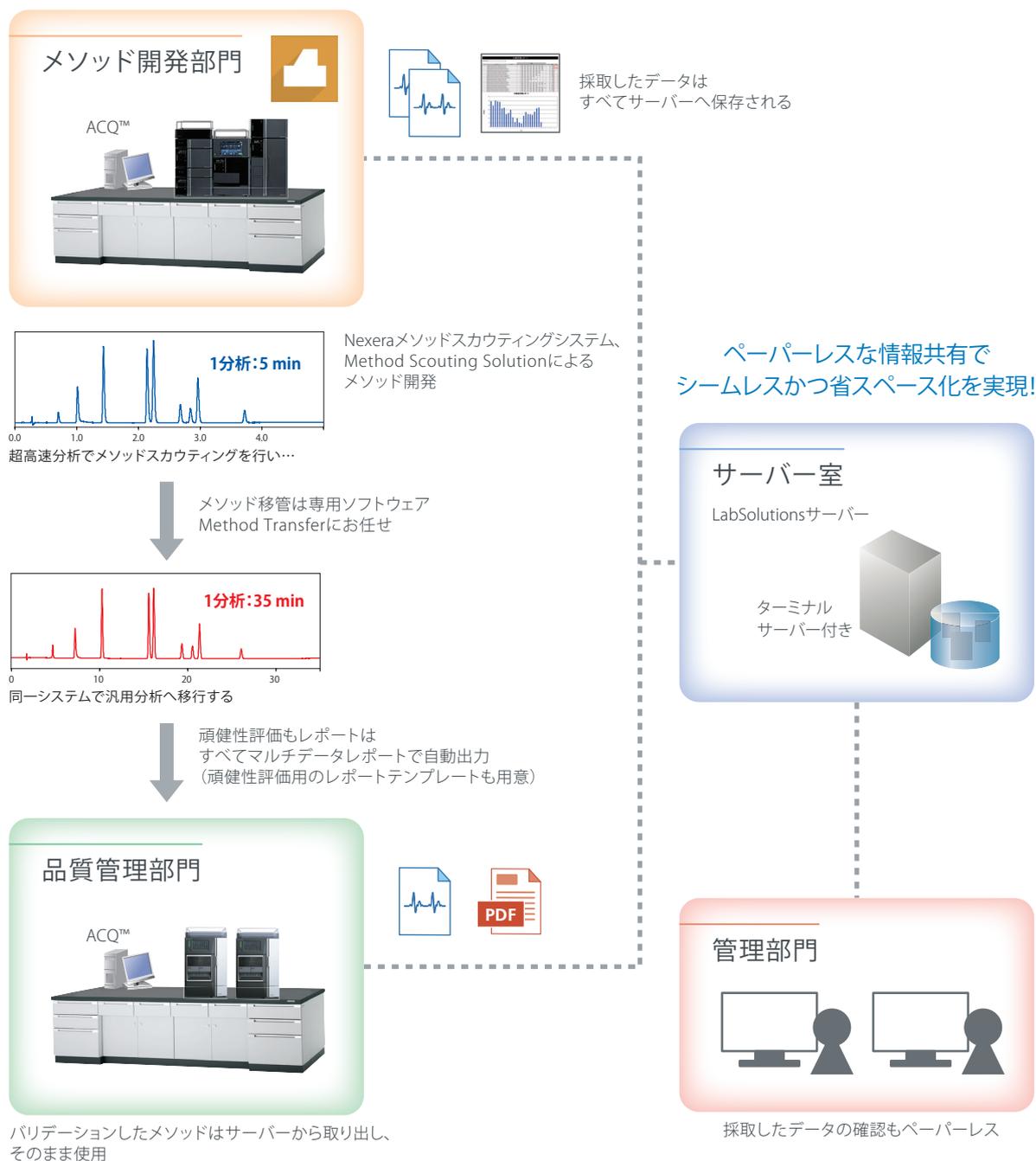
移動相やカラムの自動切換が不要な最適化や頑健性評価のフェーズにおいては、標準的なハードウェア構成でも業務効率の向上が可能です。

Method Scouting Solutionは、移動相やカラムの切換バルブを含まないLCにも対応し、現在お使いのLCをメソッド開発に有効活用していただけます。

シンプルな構成に対応したインターフェース

## LabSolutions™ CSによるシームレスなメソッド移管

開発した最適な条件は汎用分析条件に適用し、関連部門に移管することがあります。そのため、これらのデータは中・長期的に管理され、必要ときにスムーズに取り出せることが理想です。LabSolutions CSとMethod Scouting Solutionの組み合わせはメソッド開発の工程のみならず、他部門への結果報告からメソッドの移管まで、一連の分析業務を効率化します。



# アプリケーション

## メソッドスカウティングプロセスの生産性向上

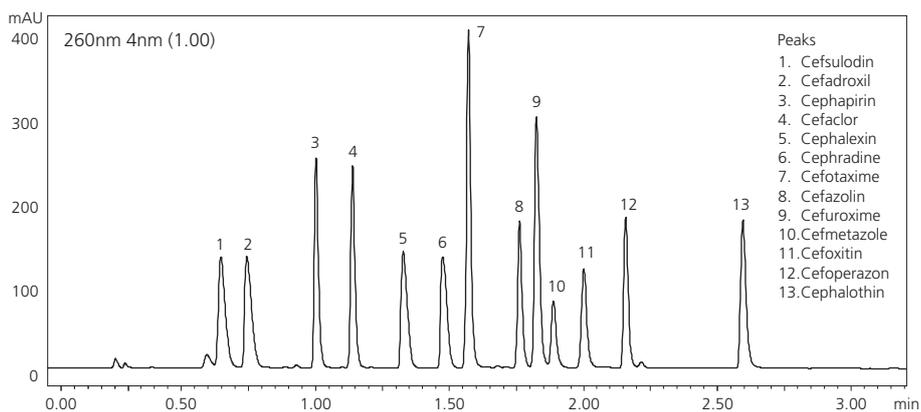
多成分の一斉分析に最適な移動相種やカラム種、ならびにグラジエント条件を効率的に見出すためには、幾つかのステップに分けて検討することが効率的です。下記の例はセフェム系抗生物質13成分の一斉分析を構築するために、STEP1で分析種に適した移動相とカラムを絞り込み、STEP2でグラジエント条件を最適化するという手順により、移動相の消費量を抑えた効率的なメソッドスカウティングを行うことができます。

### セフェム系抗生物質13成分

1. Cefsulodin
2. Cefadroxil
3. Cephapirin
4. Cefaclor
5. Cephalixin
6. Cephradine
7. Cefotaxime
8. Cefazolin
9. Cefuroxime
10. Cefmetazole
11. Cefoxitin
12. Cefoperazone
13. Cephalothin

### 移動相とカラムの準備

- 移動相: (A) (a) リン酸 (ナトリウム) 緩衝液 (pH 2.6)  
 (b) へン酸 (ナトリウム) 緩衝液 (pH 3.1)  
 (c) 酢酸 (アンモニウム) 緩衝液 (pH 4.7)  
 (d) 酢酸 (アンモニウム) 水溶液 (pH 6.7) 水系 4種類
- (B) (a) アセトニトリル  
 (b) メタノール  
 (c) アセトニトリル/メタノール=1/1 (v/v) 有機系 3種類
- カラム: (1) 逆相カラム A (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.2 mm)  
 (2) 逆相カラム B (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.2 mm)  
 (3) 逆相カラム C (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.2 mm)  
 (4) 逆相カラム D (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.6 mm)  
 (5) 逆相カラム E (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.6 mm) カラム 6種類  
 (6) 逆相カラム F (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.6 mm)



移動相 : (A) リン酸 (ナトリウム) 緩衝液 (pH 2.6)  
 (B) アセトニトリル  
 カラム : 逆相カラム E (50 mmL×3.0 mm i.d., 2.6 μm)  
 タイムプログラム : B.Conc. 5% (0 min) → 65% (5 min) → 90% (5.01–7 min)  
 流速 : 1.0 mL/min  
 注入量 : 5 μL  
 カラム温度 : 40℃  
 検出波長 : 260 nm (SPD-M20A)

セフェム系抗生物質13成分のメソッドスカウティング例

## 移動相ブレンディングによる省力化

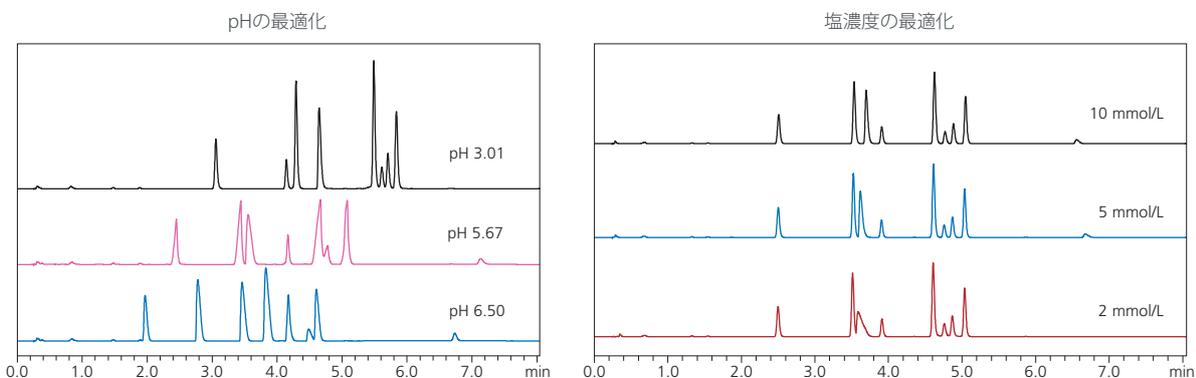
HPLCにおけるメソッド開発では、分析種に適した移動相とカラムを選択する必要があります。特に移動相の最適化は分離に大きな影響を与えることから重要視されています。しかし移動相の最適化は塩濃度やpHおよび有機溶媒比率など多岐にわたるパラメーターを検討する必要があり、これらの作業は一般的に多大な労力や時間および熟練度を要します。

Nexeraメソッドスカウティングシステムが有する移動相ブレンディング機能は、あらかじめ用意した数種の溶媒のみで、塩濃度やpHおよび有機溶媒比率をオンラインで調整し、分析種に適した条件を迅速に見出すことができます。これまでに移動相の準備や検討に要していた時間を大幅に短縮できるだけでなく、溶媒の消費量も削減可能です。

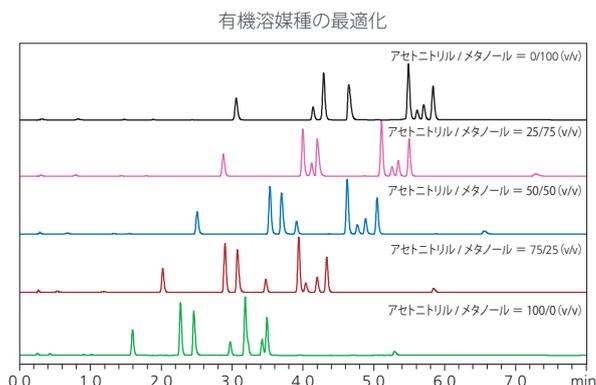


送液ユニットAに水、りん酸水溶液およびりん酸二水素ナトリウム水溶液をそれぞれセットし、混合比率を変えることでpHや塩濃度を自在に調整することができます。

ポンプ A混合比 (a/b/c)		緩衝液濃度 (mmol/L)		
		2	5	10
pH	3.01	90/6/4	75/15/10	50/30/20
	5.67	90/5/5	75/12.5/12.5	50/25/25
	6.50	90/4/6	75/10/15	50/20/30



逆相クロマトグラフィーにおける有機溶媒の種類は保持挙動やピーク形状に影響を及ぼします。単一の有機溶媒では分離が困難であった成分やピーク形状を改善したい場合などには複数の有機溶媒を混合することで解決できる場合があります。



Nexera、LabSolutionsおよびACQは、株式会社島津製作所の商標です。  
Excellは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

本文中に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。  
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。  
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。  
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。  
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。  
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

# 株式会社 島津製作所

## 分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

東京支社 101-8448 東京都千代田区神田錦町1丁目3  
(03) 3219-(官公庁担当) 5631・(大学担当) 5616・(会社担当) 5622

関西支社 530-0012 大阪市北区芝田1丁目1-4 阪急ターミナルビル14階  
(06) 6373-(官公庁・大学担当) 6541・(会社担当) 6556

札幌支店 060-0807 札幌市北区北七条西2丁目8-1 札幌北ビル9階 (011) 700-6605

東北支店 980-0021 仙台市青葉区中央2丁目9-27 プライムスクエア広瀬通12階 (022) 221-6231

郡山営業所 963-8877 郡山市堂前町6-7 郡山フコク生命ビル2階 (024) 939-3790

つくば支店 305-0031 つくば市吾妻3丁目17-1  
(029) 851-(官公庁・大学担当) 8511・(会社担当) 8515

北関東支店 330-0843 さいたま市大宮区吉敷町1-41 明治安田生命大宮吉敷ビル8階  
(048) 646-(官公庁・大学担当) 0095・(会社担当) 0081

横浜支店 220-0004 横浜市西区北幸2丁目8-29 東武横浜第3ビル7階  
(045) 311-(官公庁・大学担当) 4106・(会社担当) 4615

静岡支店 422-8062 静岡市駿河区稲川1丁目1-1 伊伝静岡駅南ビル2階 (054) 285-0124

名古屋支店 450-0001 名古屋市中村区那古野1丁目47-1 名古屋国際センタービル19階  
(052) 565-(官公庁・大学担当) 7521・(会社担当) 7531

京都支店 604-8445 京都市中京区西ノ京徳大寺町1  
(075) 823-(官公庁・大学担当) 1604・(会社担当) 1603

神戸支店 650-0033 神戸市中央区江戸町9-3 栄光ビル9階 (078) 331-9665

岡山営業所 700-0826 岡山市北区磨屋町3-10 岡山ニューシティビル6階 (086) 221-2511

四国支店 760-0017 高松市番町1丁目6-1 高松NKビル9階 (087) 823-6623

広島支店 732-0057 広島市東区二葉の里3丁目5-7 GRANODE広島5階 (082) 236-9652

九州支店 812-0039 福岡市博多区冷泉町4-20 島津博多ビル4階  
(092) 283-(官公庁・大学担当) 3332・(会社担当) 3334

島津コールセンター（操作・分析に関する電話相談窓口） ☎ 0120-131691  
IP電話等：(075) 813-1691

<https://www.an.shimadzu.co.jp/>