

分析法開発支援ソフトウェア

Solution for Efficient Method Development

簡単操作で分析法開発を省力化する LabSolutions MD

～独自のAIアルゴリズムによるグラジエント条件の自動最適化～



The screenshot displays the LabSolutions MD software interface, which is used for method development. It includes several key components:

- Method Development Solution (MDS) Editor:** Shows the configuration for two sample groups.
 - Sample Group A (Organic):**

種類	pH	A (%)	B (%)	C (%)	D (%)
PH pH42.7	2.7	16	24	0	60
PH pH6.8	6.8	0	24	16	60
 - Sample Group B (Organic):**

種類	pH	A (%)	B (%)	C (%)	D (%)
ACN 100%	7	100	0	0	0
MeOH 100%	7	0	100	0	0
ACN-MeOH 50%-50	7	50	50	0	0
ACN-MeOH 30%-70	7	30	70	0	0
ACN-MeOH 40%-60	7	40	60	0	0
ACN-MeOH 60%-40	7	60	40	0	0
- Gradient Optimization Graph:** A line graph showing the percentage of MeOH (y-axis, 0-100) versus MeOH time (min) (x-axis, 0-5). The gradient starts at 0% MeOH at 0 min, increases to approximately 50% at 1.4 min, then to 80% at 3.8 min, and finally to 95% at 4.8 min.
- Chromatogram:** A chromatogram showing six distinct peaks. The x-axis is retention time (min) from 0.00 to 4.50, and the y-axis is intensity from 0 to 150k. The peaks are labeled as Compound 1 (#2 Peak ID:1), Compound 2 (#3 Peak ID:3), Compound 3 (#3 Peak ID:4), Compound 4 (#2 Peak ID:5), Compound 5 (#2 Peak ID:6), and Compound 6 (#2 Peak ID:7).
- Peak Data Table:**

#	化合物名	保留時間 (min)	分離度
1	Compound 1 (#2 Peak ID:1)	0.187	0.024
2	Compound 2 (#3 Peak ID:3)	1.011	0.058
3	Compound 3 (#3 Peak ID:4)	1.437	0.049
4	Compound 4 (#2 Peak ID:5)	2.579	0.062
5	Compound 5 (#2 Peak ID:6)	3.645	0.048
6	Compound 6 (#2 Peak ID:7)	4.022	0.045

移動相及びカラムの 自動スクリーニング

移動相やカラムを自動切換し、
最適な組み合わせを無人で探索

グラジエント条件の 自動最適化機能

設定した分離度のクライテリアを満たす
グラジエント条件を自動探索

簡便なソフトウェア 操作性

分析スケジュール作成時、
移動相やカラムは1クリックで選択可能。
得られたクロマトグラムを
分離度が高い順にランキング表示。

簡単操作で分析法開発を省力化するソフトウェア LabSolutions™ MD

The screenshot displays the LabSolutions MD software interface, which is used for method development and data analysis in chromatography. The interface is divided into several main sections:

- Method Development Solution (分析) MDS - [無題]**: The top-left panel shows the method development environment. It includes a list of components (e.g., 50mmol/L リン酸水, 50mmol/L リン酸二水素ナトリウム) and a table for defining mobile phases (A, B, C, D) with their respective pH and percentages.
- Chromatogram (クロマトグラム)**: The top-right panel shows a chromatogram plot with a legend table. The legend table is as follows:

時間 (min)	濃度 (%)
0	30
0.4	30
1.4	50
2	50
3.8	80
3.81	95
4.8	95
4.81	30
5	30
- Chromatogram (クロマトグラム)**: The middle panel shows a chromatogram plot with a legend table. The legend table is as follows:

化合物名	保持時間	ピーク幅	分離度
Compound 1 [#2 Peak ID:1]	0.187	0.024	20.196
Compound 2 [#3 Peak ID:3]	1.011	0.058	7.969
Compound 3 [#3 Peak ID:4]	1.437	0.049	7.969
Compound 4 [#2 Peak ID:5]	2.579	0.062	19.342
Compound 5 [#2 Peak ID:6]	3.645	0.048	8.184
Compound 6 [#2 Peak ID:7]	4.027	0.045	8.184
- Sample Information (サンプル)**: The middle-right panel shows sample information, including a table for sample names and injection volumes.
- Method Parameters (メソッド設定)**: The bottom-right panel shows method parameters, including flow rate (0.000 mL/min), oven temperature (40 °C), and gradient mode (リニア).

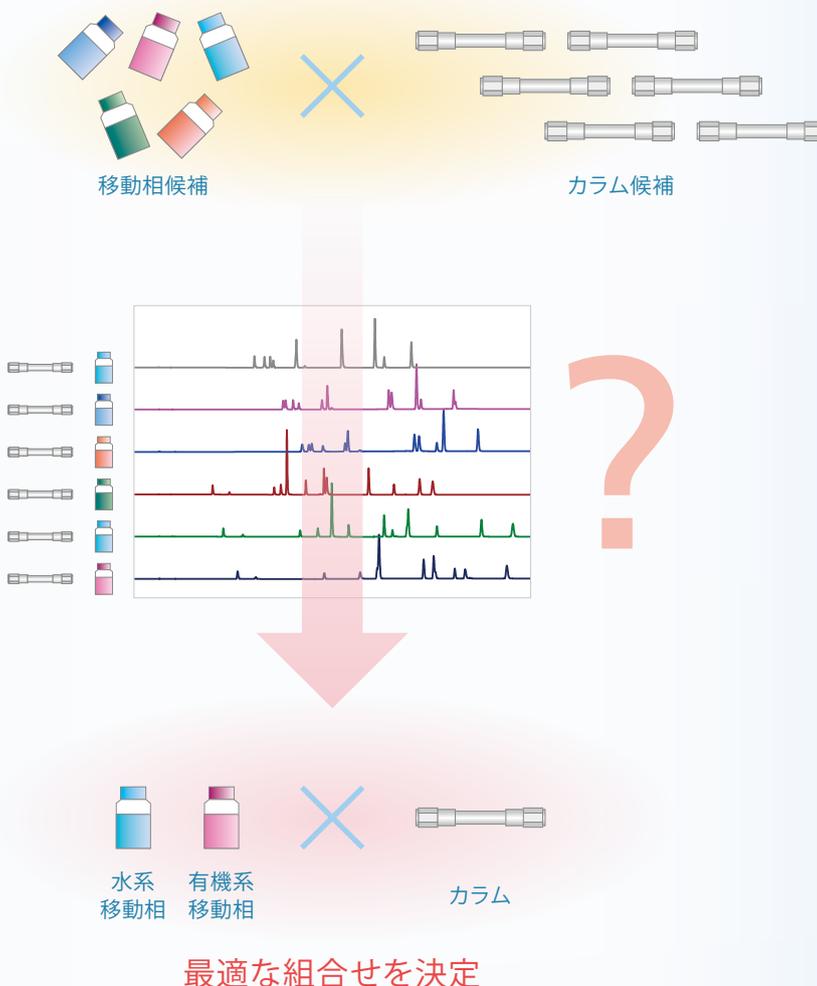
LabSolutions MDにより簡単操作で 分析法開発を省力化

LabSolutions MDは、スクリーニングや最適化といった分析法開発の各フェーズにおける最適条件の探索を、簡単操作で実現します。スクリーニングフェーズでは、移動相やカラムを1クリックで選択し、カラム平衡化も反映した網羅的なスケジュールを自動生成します。また、最適化フェーズでは、設定した分離度のクライテリアを満たすグラジエント条件を自動探索できます。勘や経験に基づくことなく、初心者でも簡単に最適な分析条件を探索可能です。

Screening
Phase

スクリーニングフェーズ

ピークの変離及び保持時間に大きな影響を及ぼす水系移動相のpH、有機系移動相の混合比率、カラム種類等について、最適な組合せを探索します。



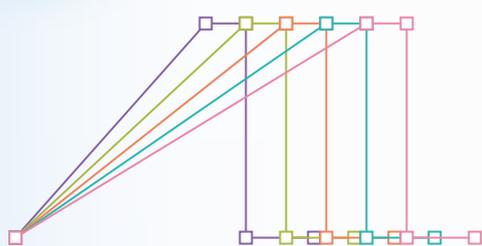
移動相及びカラムスクリーニングの自動化

P.6

Optimization
Phase

最適化フェーズ

スクリーニングにより決定した移動相やカラムに対して、ポンプのグラジエント条件、カラムオープン温度、流量等の各種LCパラメータを調整し、分離を最適化します。



グラジエント条件の検討

**.* °C

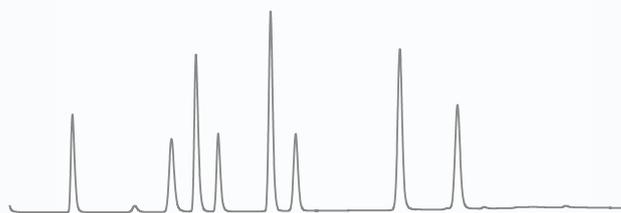


カラムオープン温度の検討

. mL/min



流量の検討

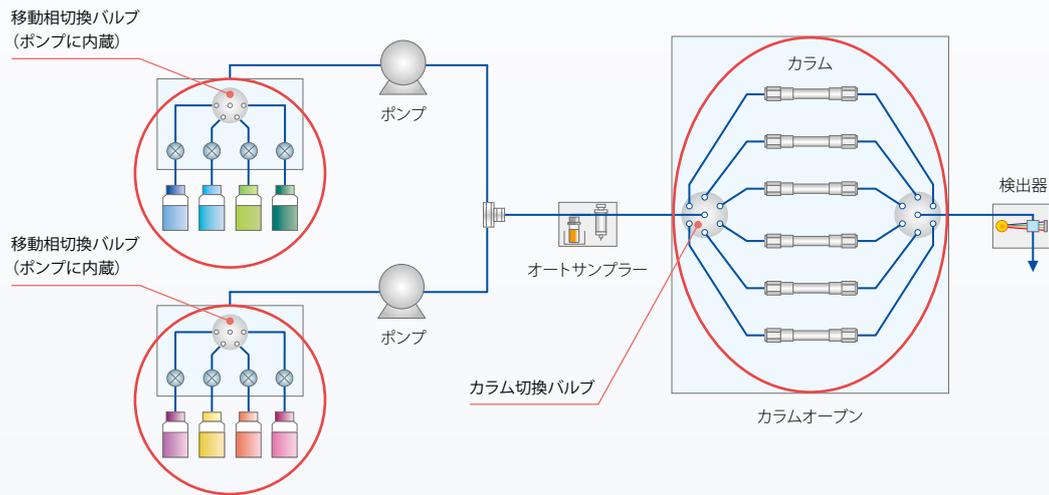


最適化されたクロマトグラム

移動相及びカラムスクリーニングの自動化

移動相/カラムの自動切換による分析の自動化

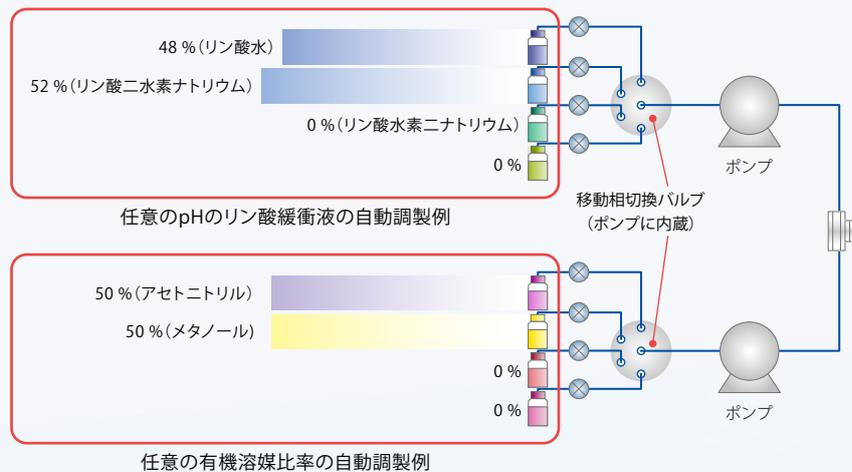
ポンプ及びカラムオープンに切換バルブを搭載することで、複数種の移動相及びカラムを自動切換し、スクリーニングを自動化します。移動相やカラムの手動での付替え作業が不要になります。



切換バルブによる移動相及びカラムの自動切換

移動相ブレンディング機能による移動相の自動調製

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移動相のみで、水系移動相のpHや有機系移動相の混合比率を任意に変更し自動調製可能です。手動での調製作業の負担を大幅に削減するだけでなく、調製ミスも防げます。



移動相ブレンディング機能による移動相の自動調製

移動相/カラムスクリーニング用の分析スケジュールを簡単に作成&実行

スクリーニングに必要な膨大な数のメソッドファイル及び分析スケジュール作成を、下記①～④の4つのステップだけで素早く完了できます。使用する移動相やカラムは1クリックで選択でき、カラム平衡化も反映した網羅的なスケジュールが自動で生成されるため、作業の効率化だけでなく、ミスの低減も可能です。

① 移動相を選択
 ② カラムを選択
 ③ サンプル情報を入力
 ④ 分析スケジュール作成

膨大な数のデータの中から簡単に最適条件を抽出

スクリーニングでは検討した条件の数だけクロマトグラムが得られるため、どの条件が最適かを評価する必要があります。クロマトグラムを全て人が確認して精査すると多くの手間が発生します。LabSolutions MDでは、各分析条件での分離の状態を以下の式1を用いて定量的に評価を行うことで、素早く簡単に最適な移動相及びカラムの組み合わせを探し出すことができます。

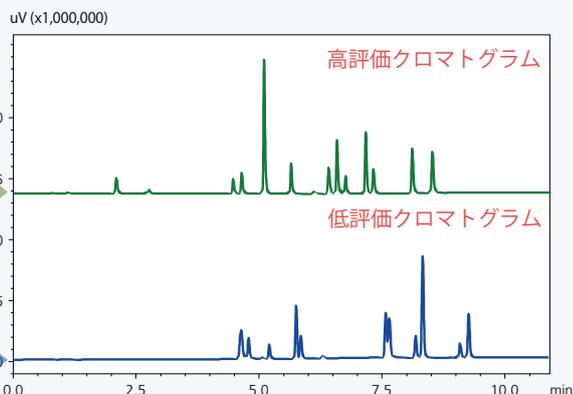
$$E = P \times (R_1 + R_2 + \dots + R_{p-1}) \dots \text{(式1)}$$

評価値(E)はピーク検出数(P)と分離度(R)の和を用いて算出されます。

移動相とカラムの最適な組み合わせ

カラム 略称	移動相A pH	移動相B A (%)	応答
Scepter-Phenyl-120	6.8	50	546.000
Scepter-C8-120	6.8	0	469.894
GIST-C18-AQ	2.7	0	465.124
GIST-C18-AQ	6.8	50	443.580
Scepter-C8-120	6.8	50	436.241
Scepter-Phenyl-120	2.7	50	419.659
Scepter-C18	2.7	0	419.338
Scepter-C18	6.8	50	396.000
Scepter-C4-300	2.7	0	394.239
Scepter-C18	6.8	100	384.553

評価値により最適条件を上からランキング表示

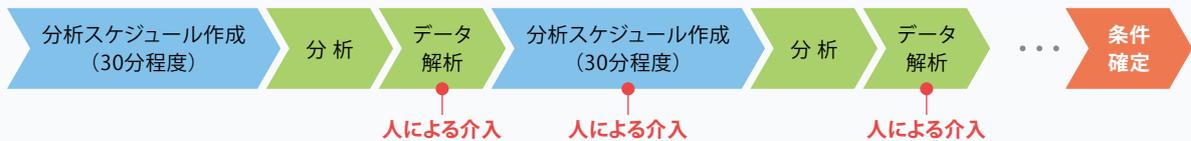


評価値が高いクロマトグラムと低いクロマトグラムの比較

独自のAIアルゴリズムに基づくグラジエント条件の自動最適化

LabSolutions MDは、グラジエント条件の自動最適化のための独自のAIアルゴリズムを搭載しており、分離度のクライテリアを設定することで、これを満たすグラジエント条件の探索を自動化します。通常のメソッド開発ワークフローでは、分析スケジュールの作成やデータ解析においては、「人」による介入が必要です。一方、本機能は分析で得られたデータを基に次のグラジエント条件を自動生成し登録します。初期設定以降は、「人」の介入をなくして、無人でグラジエント条件の探索を可能とするため、作業の大幅な省力化が見込めます。

■ 通常のグラジエント条件最適化のワークフロー



■ LabSolutions MDによるグラジエント条件最適化のワークフロー



分離度のクライテリアを満たすグラジエント条件を自動探索

初期分析条件及び分離度のクライテリアの設定をすることで、クライテリアを満たすグラジエント条件を自動探索できます。AIにより自動探索が行われるため、クロマトグラフィーに対する経験の有無によらず誰でも簡単に条件探索が可能です。



テクニカルレポートはこちら▶

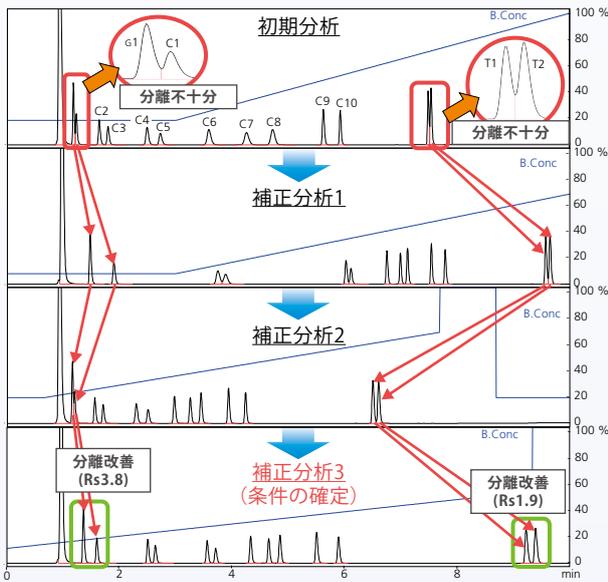


用途に応じて最適化モードを選択可能

グラジエント条件の自動最適化には全ピーク分離モードと指定ピーク分離モードがあり、目的に応じて使い分けことが可能です。

全ピーク分離モード

検出される全てのピークが設定したクライテリアの分離度を満たす条件を探索します。全てのピークが分離が求められる場合に使用します。



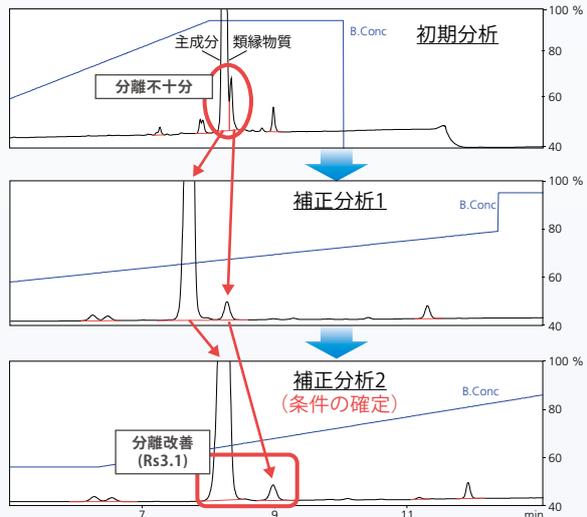
AIによるグラジエント条件の自動探索(カテキン類及びテアフラビン類)

アプリケーションニュースはこちら▶



指定ピーク分離モード NEW

任意のピークが設定したクライテリアの分離度を満たす条件を探索します。例えば、主成分とその類縁物質といった特定のピークに対する分離が求められる場合に使用します。

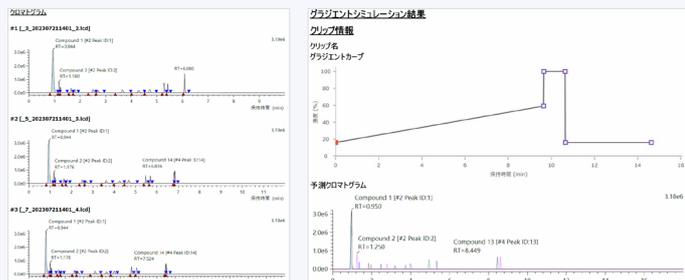


AIによるグラジエント条件の自動探索(医薬品モンテルカスト)

アプリケーションニュースはこちら▶



グラジエント条件の自動最適化においては、最終的に探索された条件に加えて、探索の過程で得られた各クロマトグラム及びグラジエント条件も保存されるため、分離検討の知見としての活用も可能です。また、これらの結果をまとめたレポート出力にも対応しています(右図)。



AIによるグラジエント条件の自動探索(カテキン類及びテアフラビン類)

LabSolutions MDIは、グラジエント条件の自動最適化機能以外にも、カラムオープン温度や流量を網羅的に検証する分析スケジュールの効率的な作成を支援します。例えばカラムオープン温度に関しては、下図のように中心値(40℃)とステップ幅(5℃刻み)とステップ数(40℃を中心として上下に1ステップずつ)を入力するだけで、カラム平衡化も反映したスケジュールが自動生成されるため、分析スケジュール作成の効率化が可能です。

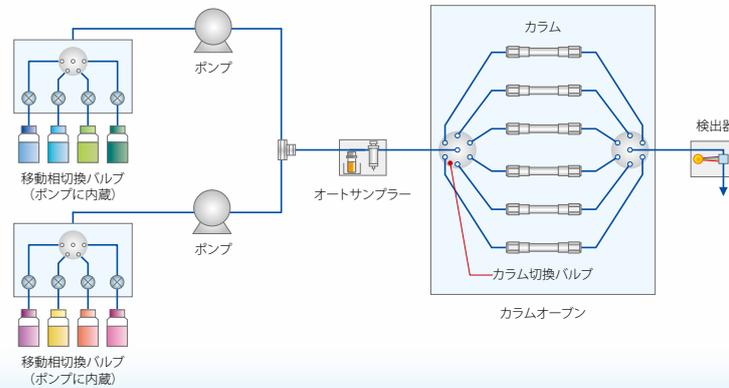
装置パラメータ					# サンプル		オープン温度 (°C)	流量 (mL/min)
パラメータ	有効	中心値	ステップ幅	ステップ数	1	2	3	4
流量 (mL/min)	<input checked="" type="checkbox"/>	1.0	0.1000	1	Sampl	1	35	0.9
オープン温度 (°C)	<input checked="" type="checkbox"/>	40	5	1	2 Sampl	1	35	1.1
注入量 (μL)	<input type="checkbox"/>	1.0	1.0	1	3 Sampl	1	40	0.9
					4 Sampl	1	40	1

豊富なシステム構成に対応

LabSolutions MDはNexeraシリーズ、i-Series及びSFC（超臨界流体クロマトグラフィー）に対応しています。すべてのLC検出器（UV、PDA、RID、RF、ELSD、AD）に対応しており、PDAやシングルMSを組み合わせることで、より正確な解析が可能になります。

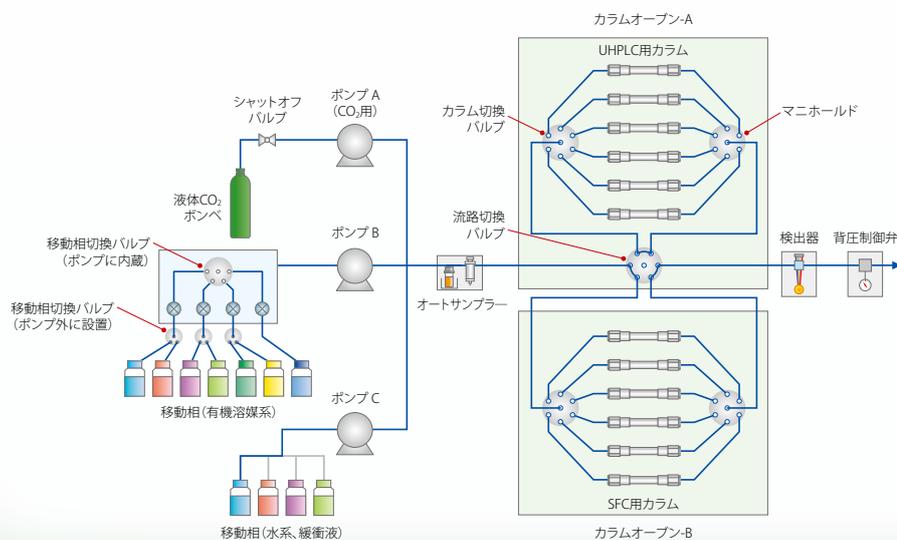
Nexera™ シリーズ

最大耐圧130 MPaを有する超高速液体クロマトグラフであり、8種類の移動相と12種類のカラムを用いた最大192（4×4×12）通りの組み合わせに対応しています。



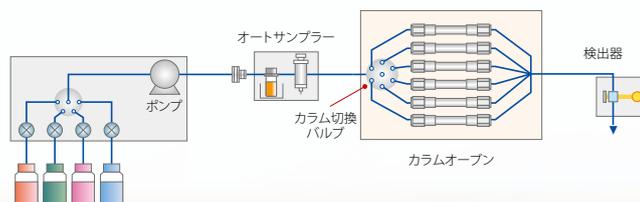
Nexera UC UHPLC / SFC 切換システム

1つのシステムにて、LC及びSFCを自動切換することで、複数の分離モードで最適分離条件を効率的に探索可能です。また、SFC分析においては、最大7液までのモディファイアーの自動切換に対応しています。



i-Series

最大耐圧70 MPaを有する一体型LCシステムであり、省スペース、低コストを実現します。



LCMS-2050との組み合わせでラボの生産性をさらに向上



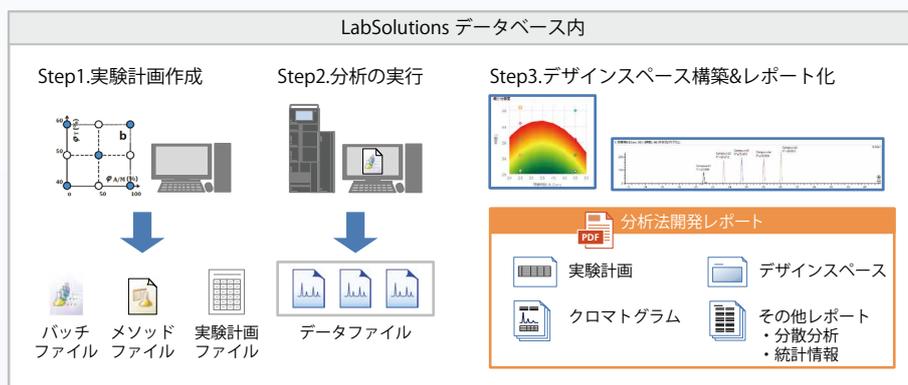
LCMS-2050は、広いマスレンジ (m/z 2~2,000)、最短6分のクイックスタート、工具不要のイージーメンテナンスなど、LCの検出器としての使いやすさに革新をもたらす技術を満載したシングル四重極MSです。LCユニットとの積み重ねが可能のため、MS増設時の省スペース化に貢献します。

LCMS-2050の
カタログはこちら▶



データベース一元管理によるデータインテグリティ対応

一連の分析で得られる実験計画ファイル、メソッドファイル、バッチファイル、データファイル、レポートは、LabSolutionsのデータベース内で管理されるため、データインテグリティも担保します。実験計画の生成、分析の実行、デザインスペースによる解析を通した一連の分析法開発にシームレスに対応するため、ファイルのインポート/エクスポート等の煩わしい作業は一切発生しません。



逆相分析メソッド開発用カラムキット

同じC18 (ODS) カラムといっても分離特性はさまざまであり、当社LCカラムのShim-pack™シリーズにも多様なC18カラムがラインアップされています。カラムスクリーニングのための候補カラムを選ぶ際に悩まれる場合もあるため、分離特性の異なるカラムをあらかじめキット化しました。これらのカラムキットは逆相分析法開発用途向けで、LabSolutions MDと組み合わせることで効率的なカラム選定に役立てていただけます。

名称	HPLC	UHPLC	HPLC (LC-MS)	UHPLC (LC-MS)
① L1キット for HPLC (C18のみ)	◎			
② L1キット for HPLC / UHPLC (LC-MS) (C18のみ)	◎	◎	◎	◎
③ Maximum Selectivity RP キット for HPLC / UHPLC Type A	◎	◎	○	○
④ Maximum Selectivity RP キット for HPLC / UHPLC Type B	◎	◎	○	○
⑤ Maximum Selectivity RP キット for HPLC / UHPLC (LC-MS)	○	○	◎	◎

※ これらカラムキットはすべての分析において最適な分離を保证するものではありません ◎: 最適 ○: 利用可能

カタログはこちら▶



LabSolutions MDのアプリケーション一覧



AIを用いたグラジエント条件の
自動最適化



AIアルゴリズムによる
グラジエント条件の自動最適化
—機能性成分一斉分析の
LCメソッド開発への適用—



AIアルゴリズムによる
グラジエント条件の自動最適化
—不純物分析への適用—



AIアルゴリズムによる
カラムスクリーニング及び
グラジエント条件の自動最適化

LabSolutions MD パッケージ内容

Method Development Solution ライセンスセット

インストールCD（電子版オペレーションガイド・技術解説）

AQbD対応分析法開発支援ソフトウェア
LabSolutions MDのカタログは[こちら](#)▶

LabSolutions、Analytical Intelligenceロゴ、Nexera、LCMSおよびShim-packは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

本文書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

製品情報



価格お問合せ

東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631
(大学担当) (03) 3219-5616
(会社担当) (03) 3219-5622

関西支社 (06) 4797-7230

札幌支社 (011) 700-6605

東北支社 (022) 221-6231

郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511
(会社担当) (029) 851-8515北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095
(会社担当) (048) 646-0081

横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106

(会社担当) (045) 311-4615

静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521
(会社担当) (052) 565-7531京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604
(会社担当) (075) 823-1603

神戸支店 (078) 331-9665

岡山営業所 (086) 221-2511

四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652

九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332
(会社担当) (092) 283-3334島津コールセンター ☎ 0120-131691
(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等:(075) 813-1691