

分析から分取へのスケールアップの問題を 解決! 最適な分取条件の自動選択を可能に するシステム

株式会社島津製作所 分析計測事業部

はじめに

- **LC分取精製について**
 - 分取LCの用途
 - 一般的な分取精製の流れ
 - LCシステム構成
- **分析から分取へのスケールアップ**
 - 分析結果から分取へのスケールアップの基本
 - 負荷量の検討
 - スケールアップの考え方
- **分析/分取LCMSスケールアップシステム**
 - 島津とユーザーで共同開発した分取アルゴリズムASAPrepを搭載したOpen Solutionのご紹介

LC分取精製について

3

分取LCの用途

・ 合成したサンプルの分取

有機化学分野：合成したサンプル中の主成分を分取。主成分以外に不純物や副生成物など成分も分取する場合もある。

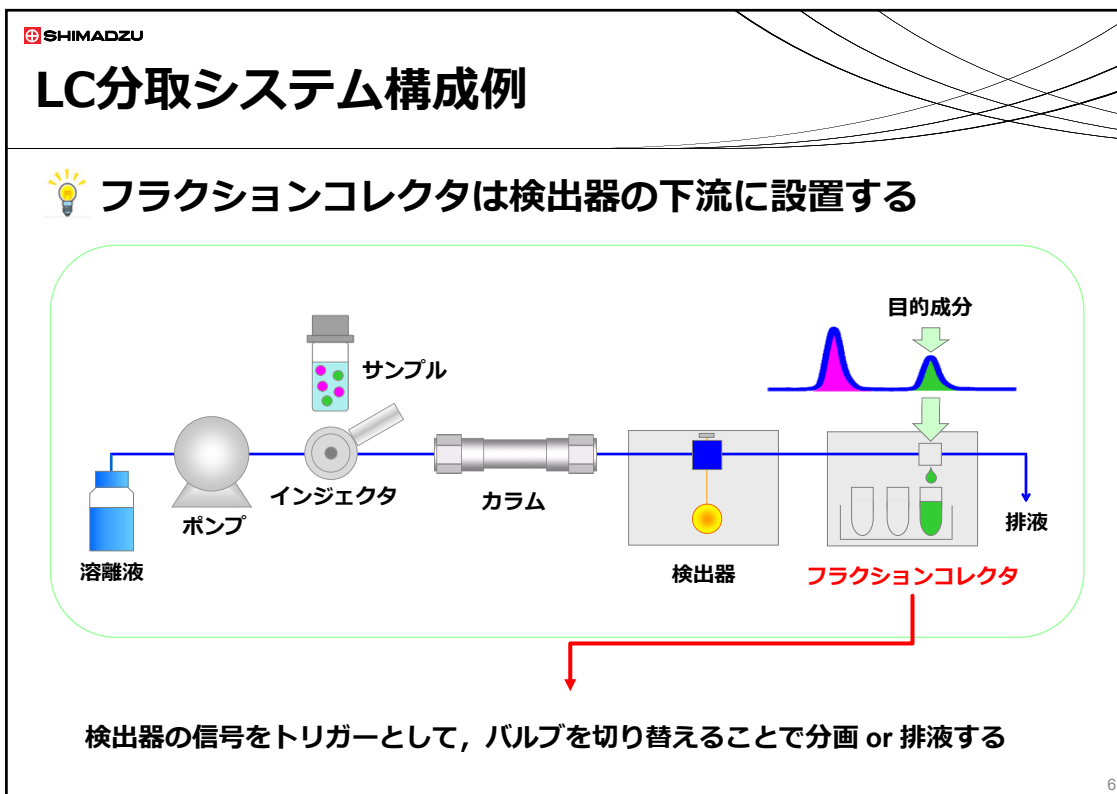
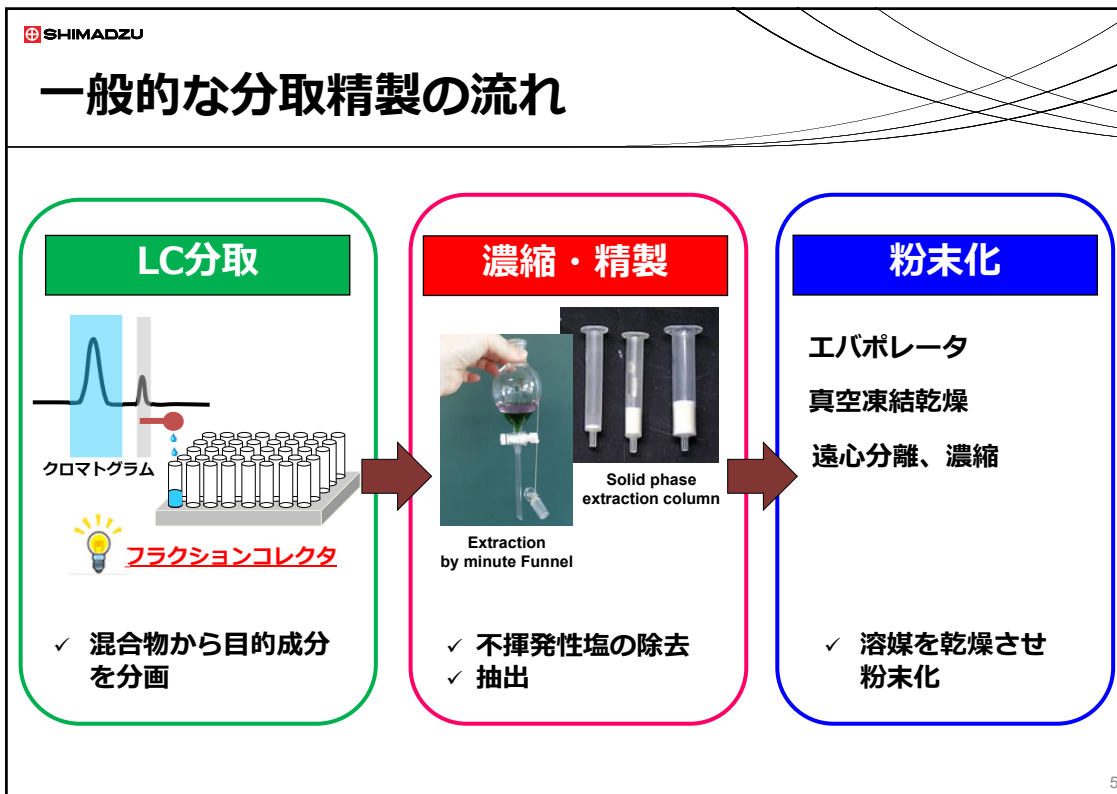
・ タンパク質、高分子などの精製

バイオ分野：サイズ排除クロマトグラフィー(SEC)カラムを使用したタンパク質の精製。

高分子分野：ゲル浸透クロマトグラフィー(GPC)カラムを使用した高分子の精製、分子量分画。

天然物：様々な化合物が含まれているサンプルから目的物を抽出。

4

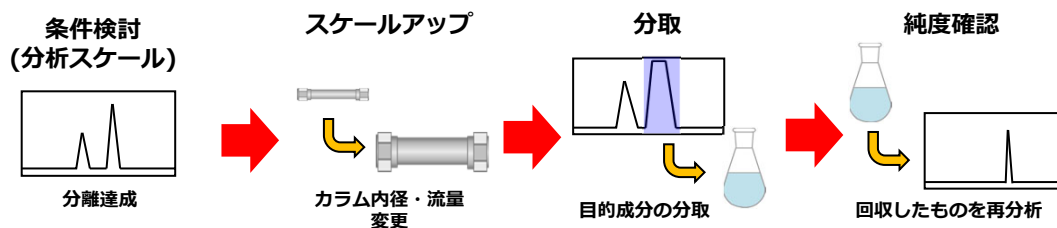


分析から分取のスケールアップ

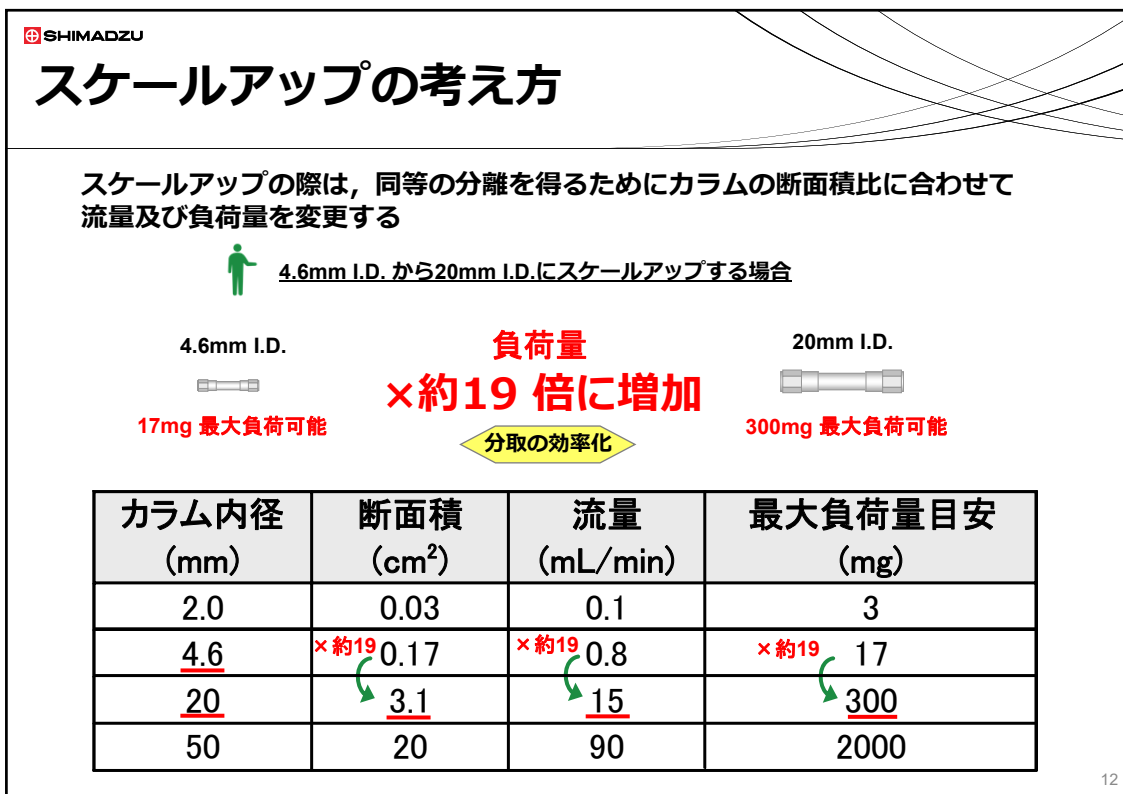
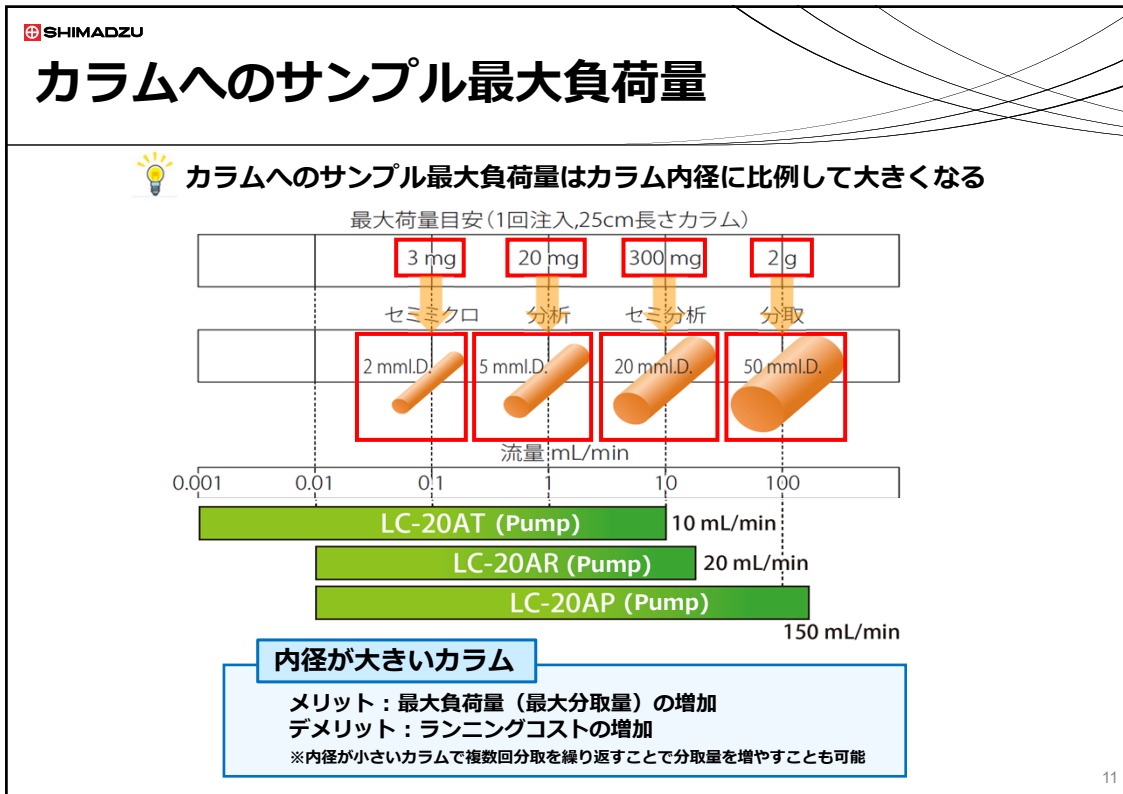
7

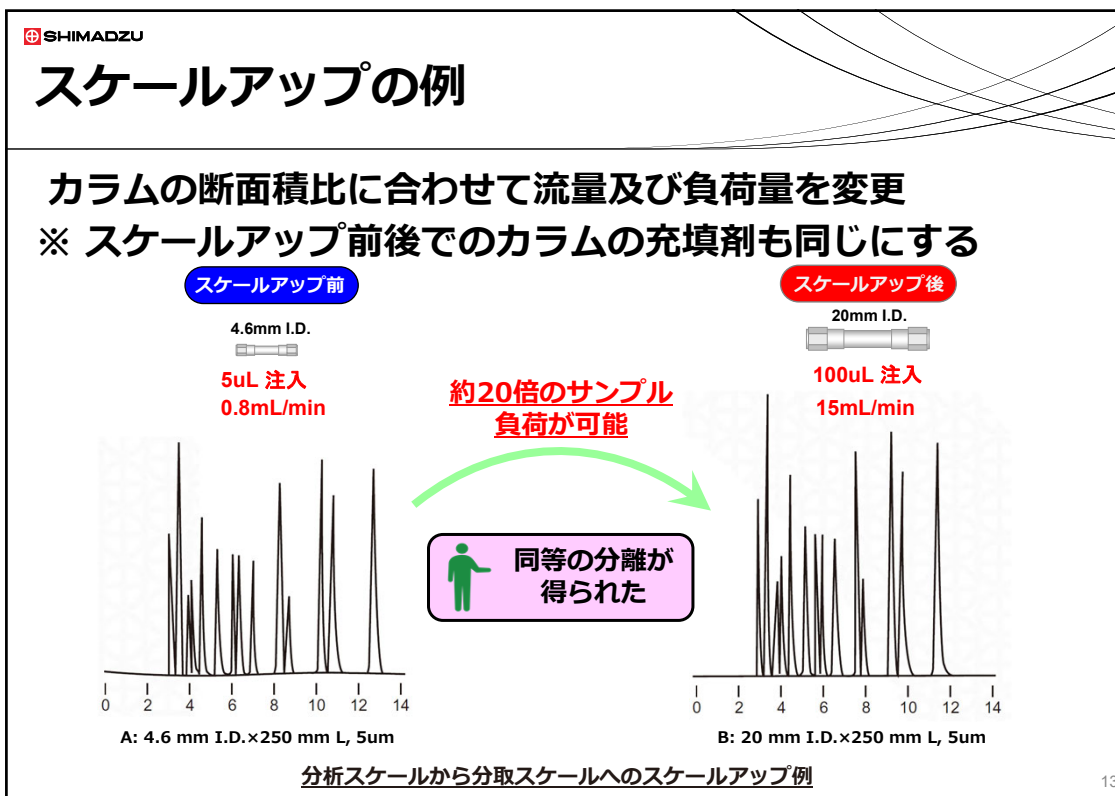
分析から分取へのスケールアップの基本

1. 分析スケールで**分離条件を検討**する（移動相・注入量等検討）
2. 目的の分取量に応じ**スケールアップ**（カラム内径・注入量変更）
3. 分取LCで混合物から**目的物の分取**をする
4. 回収したものを分析スケールで再分析して、**純度確認**をする



8

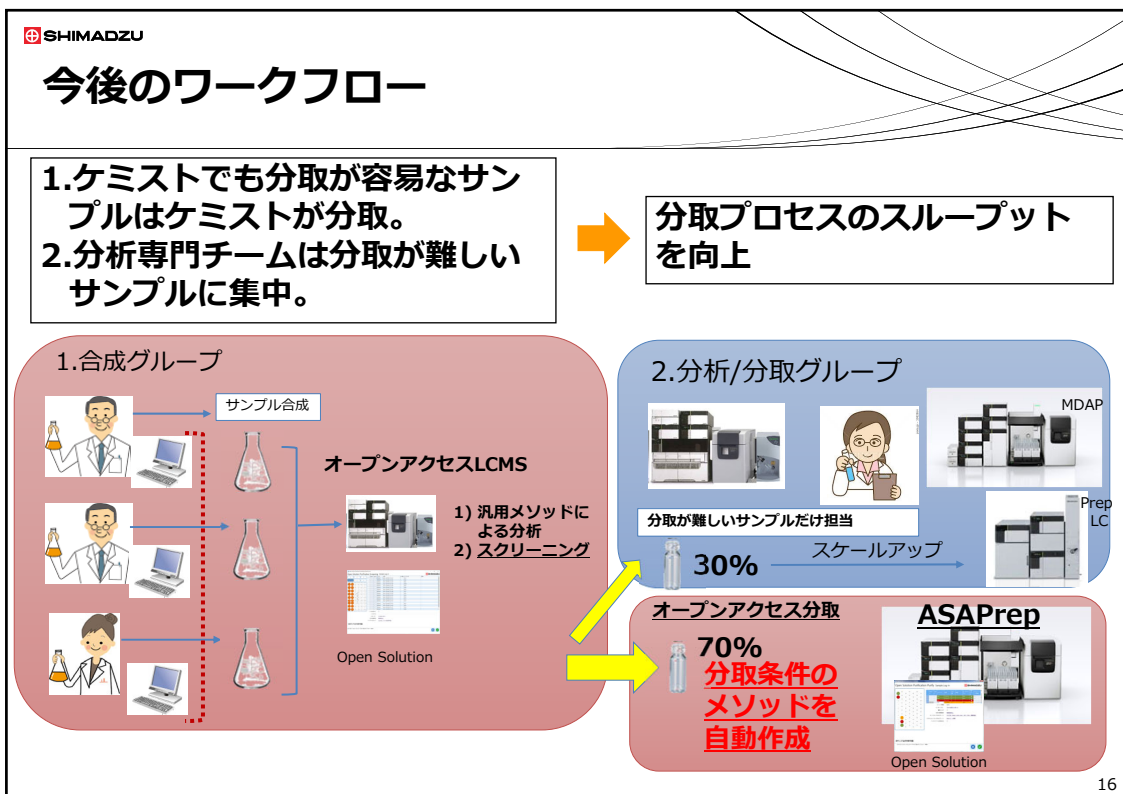
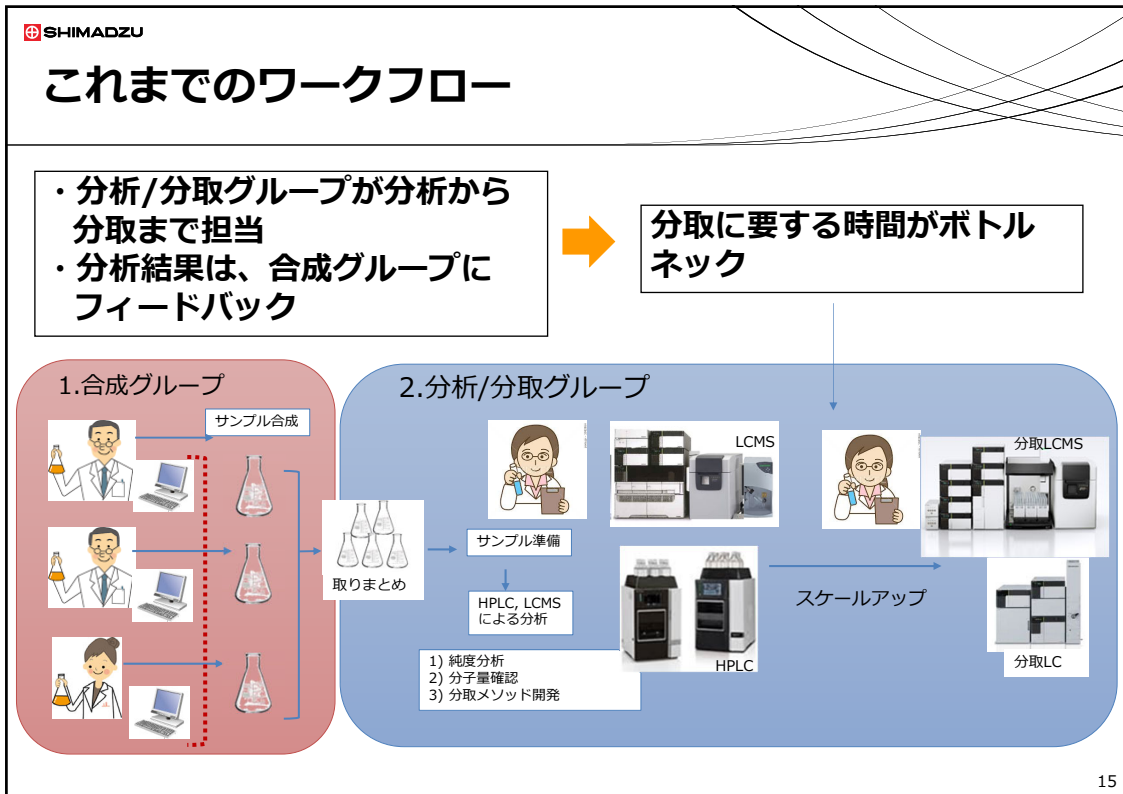




SHIMADZU

分析/分取LCMSスケールアップシステム ~Open Solutionによる運用のご紹介~

14



Open Solutionの特長

1.作業の効率化

サンプル登録からデータ確認まで効率よく少ないステップで行えるソフトウェア。操作は直感的で簡単で、ソフトウェアの習得時間は可能な限り短くできます。

2.安定性

毎朝のスタートアップからシャットダウンまで自動で実行し、装置をいつでも使える状態にすることが可能です。

3.分取へのスケールアップ

島津独自アルゴリズムによる分析結果から分取へのスケールアップの効率化を実現します。

4.ネットワーク活用による生産性の向上

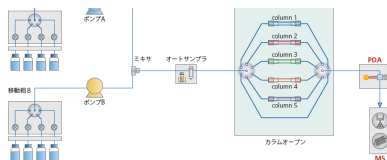
ネットワークを活用したデータ解析による生産性を向上することができます。

17

分取条件の検討

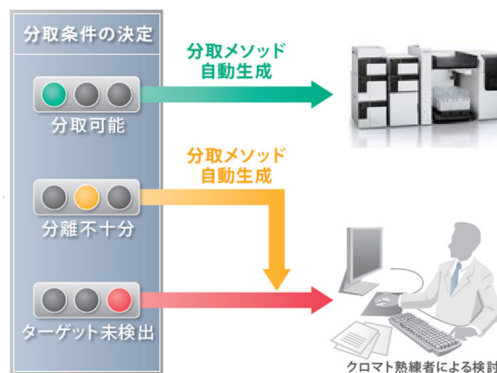
- 同じサンプルに対して、複数移動相による分析を自動で実行。
- 解析結果は、分析データに加えてExcelまたはテキストファイルに出力。

移動相切り替え分析システムでのスクリーニング



スクリーニング判定結果に応じて合成者が分取するかどうか判断し、分取実行

Open Solutionサンプル登録画面



18

SHIMADZU 分析結果の確認

- 一連の分析結果は、データブラウザでクロマト、スペクトルを確認可能。
- 同じサンプルに対して、それぞれの移動相ごとに並べて表示、比較。ピーク形状、カラム保持の強さなどを確認。

酸性条件での結果

塩基性条件での結果

Open Solutionデータブラウザ画面

SHIMADZU 分取実行およびデータ確認

- スクリーニング分析で出力されたExcelファイルをインポートして、分取実行。インポート結果は色分け表示。
- 分取結果は専用データブラウザで分画部を容易に確認可能。

分取サンプル登録

Excelファイルのインポート結果を色分け表示

分取データ確認

サンプルとフラクションの連動は黄色の○で表示

まとめ

1. 必要分取量(mg)やサンプル特性に応じて、ポンプ、検出器(UV, MS, ELSD)などの最適なシステム構成の検討が必要。
2. 分析から分取にスケールアップするには、LCカラム、流速条件などを合わせる。
3. 分析/分取LCMSスケールアップシステムにより、目的化合物を効率よく分取可能

21

ご清聴ありがとうございました

22