

最適なLC分析法の開発を可能にするシステムをご紹介 ～実験計画法を活用し、 効率的なLC分析条件の探索が可能に～

株式会社島津製作所 分析計測事業部

内容

1. 概要

- 1.1 分析法開発における課題
- 1.2 分析法開発に関連したICHガイドラインの動向
- 1.3 AQbDに基づいた分析法開発ワークフロー

2. 分析法開発をサポートするハードウェア

3. 分析法開発をサポートするソフトウェア～LabSolutions MD～

- 3.1 ソフトウェアの全体像
- 3.2 スクリーニング – 最適化 – 頑健性評価各フェイズでの効率化
- 3.3 ソフトウェア上でのファイルの流れ

1.1 分析法開発における課題

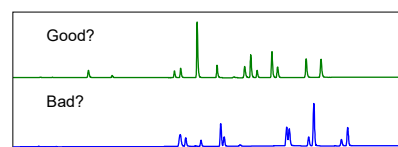
分析条件の検討に時間がかかる

- 移動相やカラムの付け外しが必要で効率よく検討を行うことができない
- メソッドや分析スケジュール等の多数の条件作成に手間がかかる



結果に個人差が発生する

- クロマトグラムの見た目で判断するため結果の解釈が個人により異なる
- 手法が統一されていないため経験やノウハウが蓄積されない



手間がかからず個人スキルに依存しない
分析法開発のワークフローが求められている

3

1.2 分析法開発に関連したICHガイドラインの動向

ICHは科学的アプローチに基づいて分析法をワークフローに沿って実験的/段階的に検証する考え方“Analytical Quality by Design (AQbD)”を提唱している

AQbDの想定される利点

分析法の開発・バリデーション時

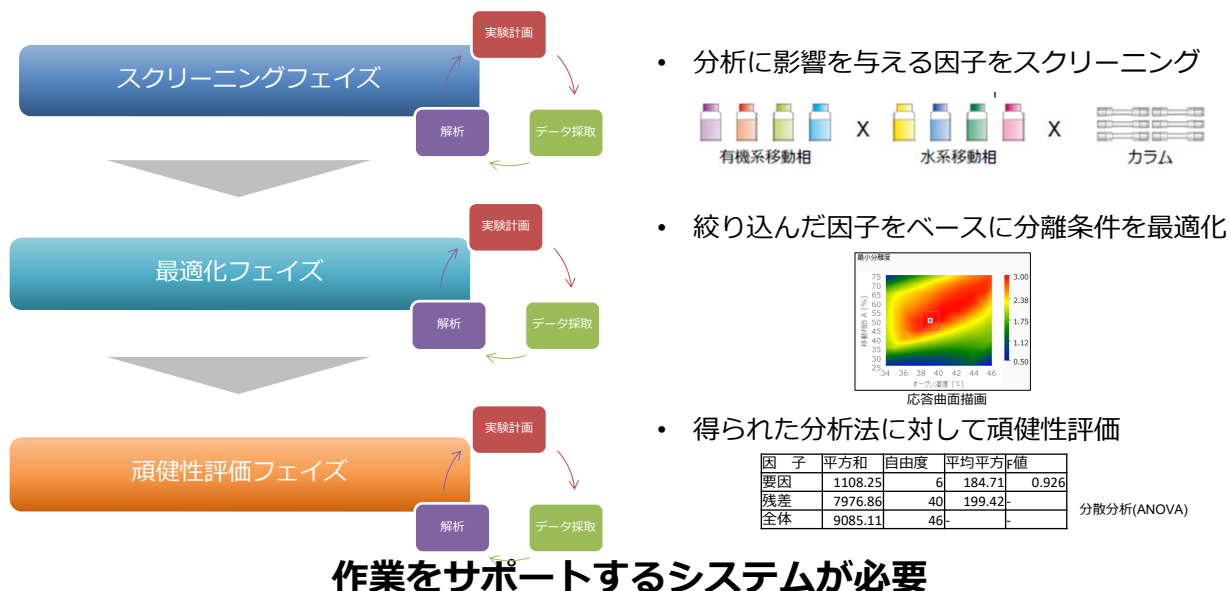
- 経験と勘に頼らない、網羅的な分析法開発検討がなされる
- 体系的なアプローチにより、ナレッジが蓄積され、分析法への理解が深まる
- 頑健で低リスクの分析法が開発可能となる

技術移転・試験運用時

- 試験のトラブル対応による工数の浪費を防げる
- 蓄積されたナレッジにより、試験法の継続的な改善が効率的に行える
- 誤った品質評価をするリスクを管理・減少させることができる

1.3 AQbDに基づいた分析法開発ワークフロー

分析法の性能に影響を与える要因を**実験計画法**などの技術を活用して実験的/段階的に検証

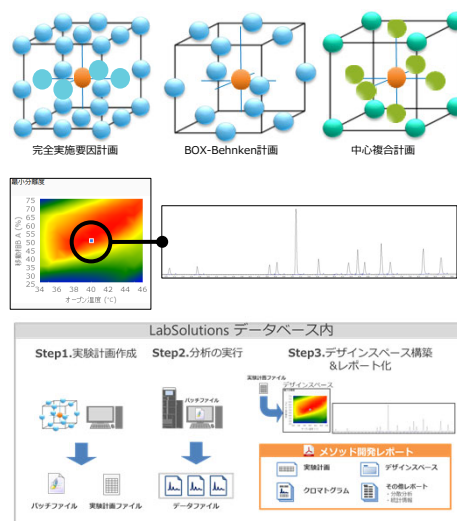


5

AQbD対応分析法開発支援ソフトウェア LabSolutions MD

より効率的に、より信頼性の高いメソッド開発を実現

- **実験計画による実験の効率化**
フェイズに応じた実験計画によるバッチ作成で
効率よく分析法開発が可能
- **応答曲面による有効領域の視覚化**
分析パラメータと分離の関係を応答局面として描画
最も頑健な分析条件の探索機能
最適なメソッド作成をサポート
- **実験結果のデータベース一括管理**
実験計画・応答曲面・クロマトをまとめてレポート出力
データベース管理によりデータを安全に管理



6

まとめ

科学的アプローチに基づいたワークフローにより経験と勘に頼らない 網羅的な分析法開発検討が可能

- 体系的なアプローチにより、ナレッジが蓄積され、分析法への理解が深まる
- 頑健で低リスクの分析法が開発可能となる

LabSolutions MDと島津LCにより分析法開発ワークフローをサポート

- 分析法開発ワークフローの各フェイズでの効率化を実現
 - **スクリーニングフェーズ**：良い条件を一目で判断、実験結果の確認作業の効率化
 - **最適化フェーズ**：複合条件での自動ピーク同定で同定にかかる時間を削減
 - **頑健性評価フェーズ**：クロマトグラム比較、分散分析で効率的に頑健性を確認
- 実験計画・応答曲面・クロマトをまとめてレポート出力が可能
- データベース管理によりデータを安全に管理



ご清聴ありがとうございました。