

ReportViewer5.0有用性の考察

クロムソードジャパン株式会社

サマリー

- メソッド開発において膨大なHPLCデータを閲覧、解析を効率的・効果的に行うために、新たなレポートビューワー(ReportViewer 5.0)の有用性の確認を試みた。
- HPLCの条件設定確立に効果的かつ大幅な時間短縮が可能である自動メソッド開発のトータルソリューションソフトであるクロムソード(ChromSword 4.0)を用いた。そこで得られたHPLCデータをReportViewer 5.0に取り込み、解析、種々閲覧した。
- データフォルダに蓄積されたデータ(Agilent社ChemStation、Waters社Empower、ThermoFisher社Chromeleon、日立社HPLCなどのデータも可能)を自動でシームレスに取り込み、様々な角度からより視覚的に閲覧・解析が可能であった。また、再解析、データの閲覧もよりスピーディかつ簡単に行えることができた。
- 弊社、頑健性評価ソフト(AutoRobust)のデータもそのまま取り込むことが可能で、頑健性評価はより簡便に、デザインスペースをより効果的に活用することができた。
- 新しくなったReport Viewer 5.0は大量のHPLCデータの閲覧、解析を、迅速かつ簡便におこなうことができ、またQbD観点からより視覚的にメソッド開発おこなうための優れたツールであることが示された。

方法

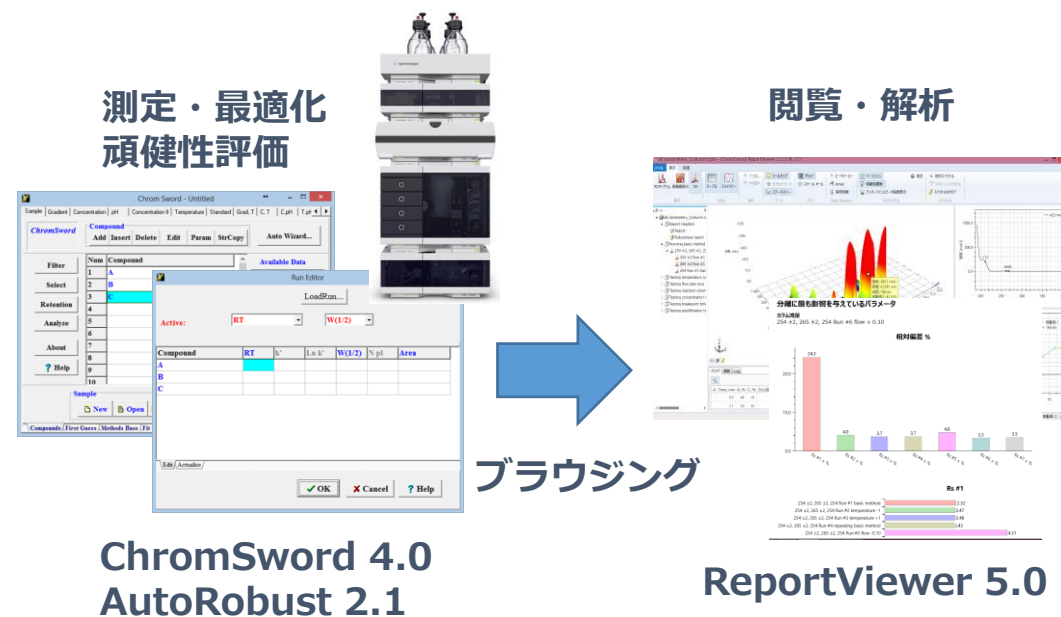
- 下記に示す条件下、7化合物含有の反応混合物をこれまで同様、ChromSword 4.0で最適化、AutoRobust 2.1を用いて頑健性評価をおこなった後、これらのデータを新バージョンのReportViewer 5.0で種々閲覧・解析等をおこなった。

【基本測定条件】

- HPLC : Agilent 1200 method development system (Binary pump)
8 カラムスイッチングバルブ, 多波長検出器 (MWD)
- カラム : Chromolith SpeedROD RP18e
(50 mm, 4.6 mm)
- 移動相 : アセトニトリル/水

【サンプル】

- 反応混合物 (API + 3ペアの異性体)

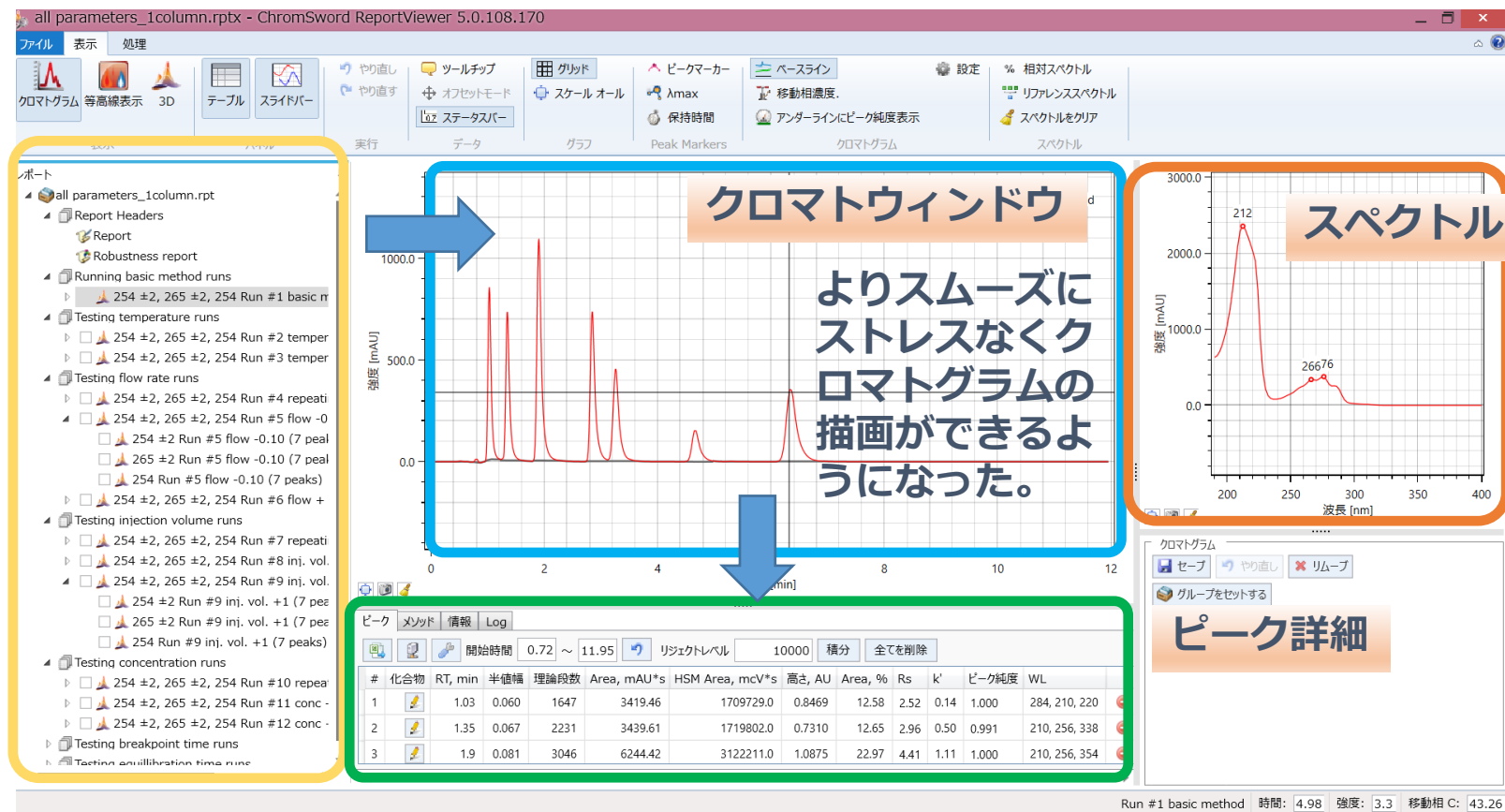


データ取り込み

- ReportViewer 5.0 のデータだけでなく、Agilent社のChemStationなどの chromatography data system (CDS) フォルダから、シームレスに自動取り込みができた。
- 左のレポートブラウザーをクリック、簡単に測定データの閲覧・解析が可能だった。

レポートブラウザー

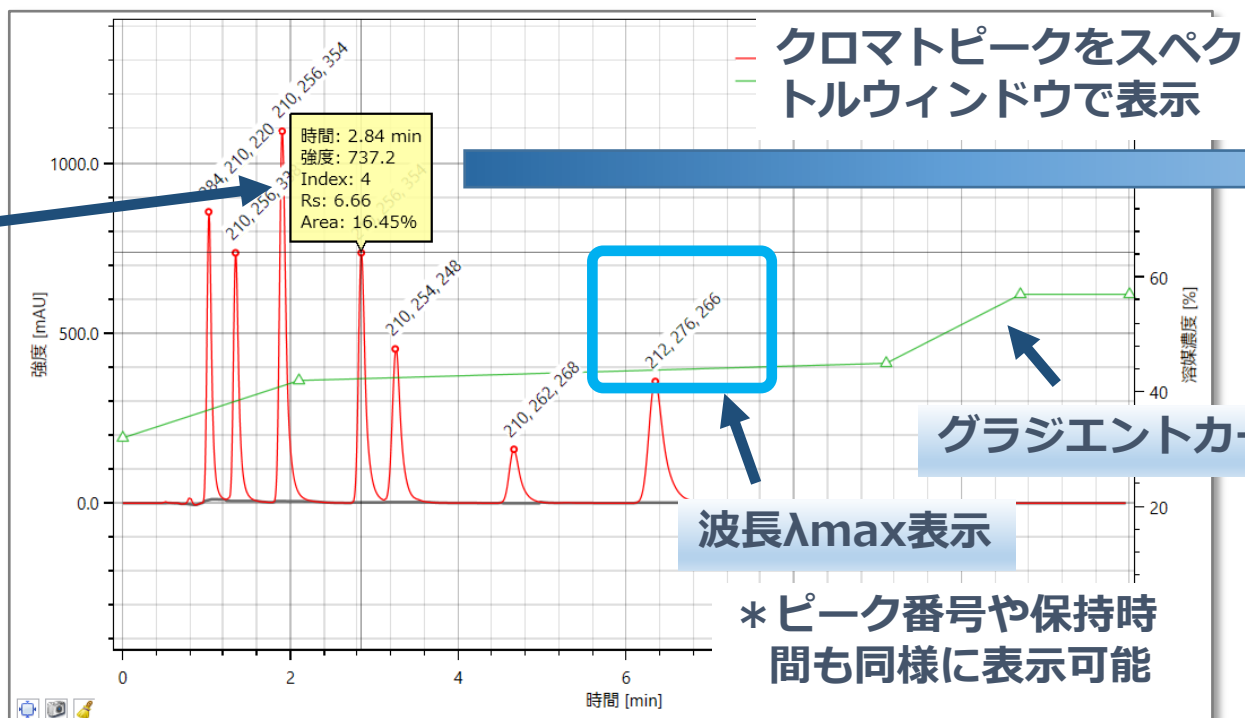
かなり多量のデータでも、快適に取り込むことができ、その後の閲覧が迅速かつ、簡便になった。



クロマトウィンドウでのデータ表示

- ・クロマトウィンドウに様々なデータをより簡単に見やすく表示できた。
- ・カーソルをあわせることで、ViewTabウィンドウが表示、クロマトの詳細を見ることができると同時に、スペクトルウィンドウで、スペクトルの確認も可能だった。
- ・ピークトップにスペクトルの波長 λ_{max} を複数表示でき、より便利になった。

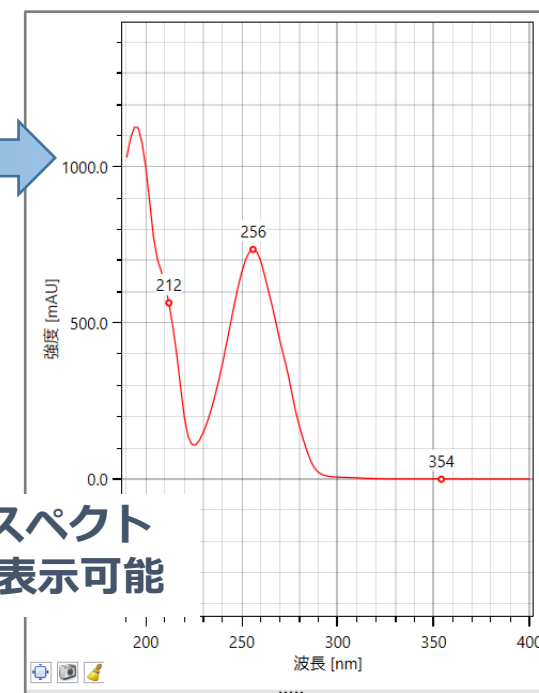
クロマトウィンドウ



ピーク詳細表示

カーソルをあわせることで、ViewTabにより、クロマトの詳細表示が可能

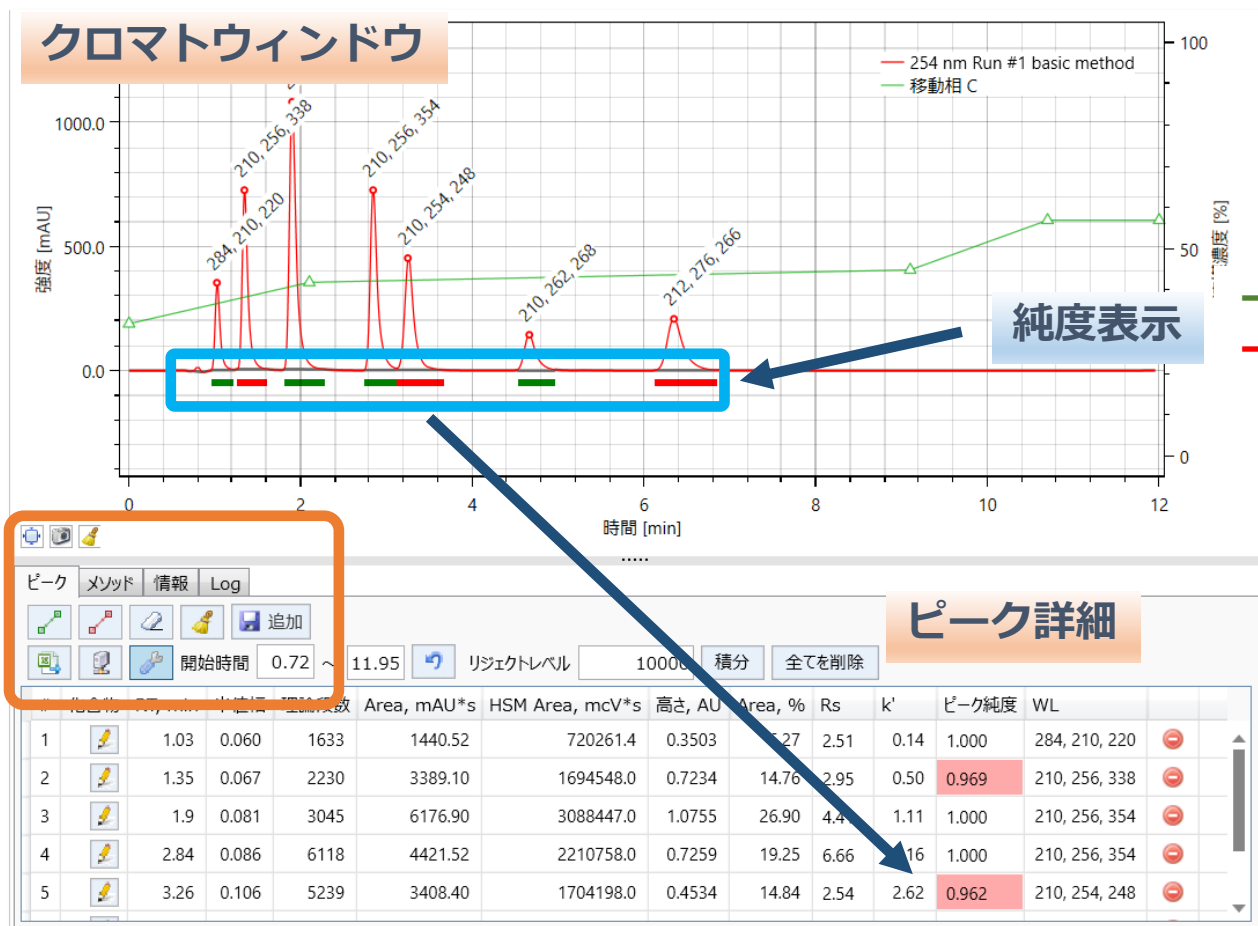
スペクトルウィンドウ



グラジエントカーブ

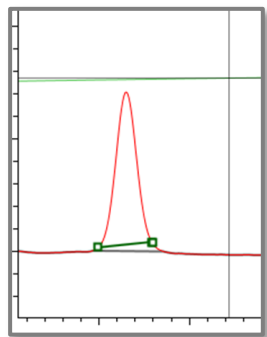
純度と積分

- ・クロマトグラムの各ピークの下にピーク純度を視覚的に表示することが可能となり、より簡単に各ピークの状態を把握できた。
- ・測定後のデータはマニュアル、もしくは自動で再積分・解析が容易に可能だった。



積分ツール

自動再積分したり、マニュアルで簡単に再積分することができる

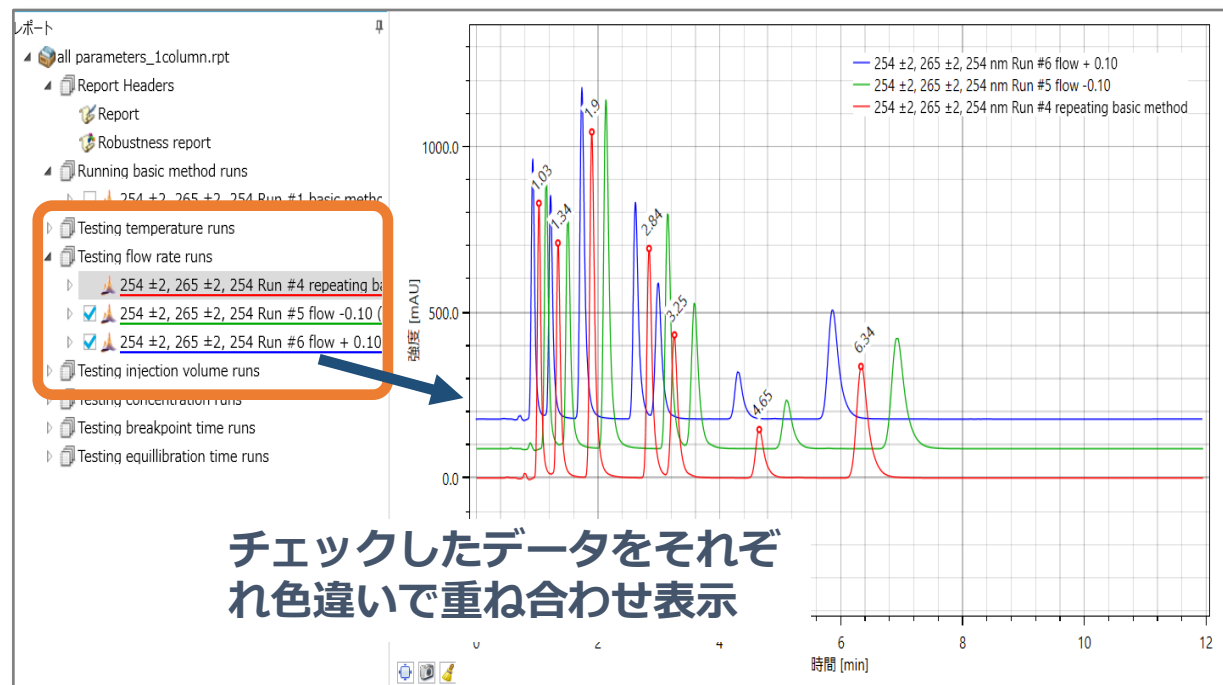


— 高純度
— 低純度

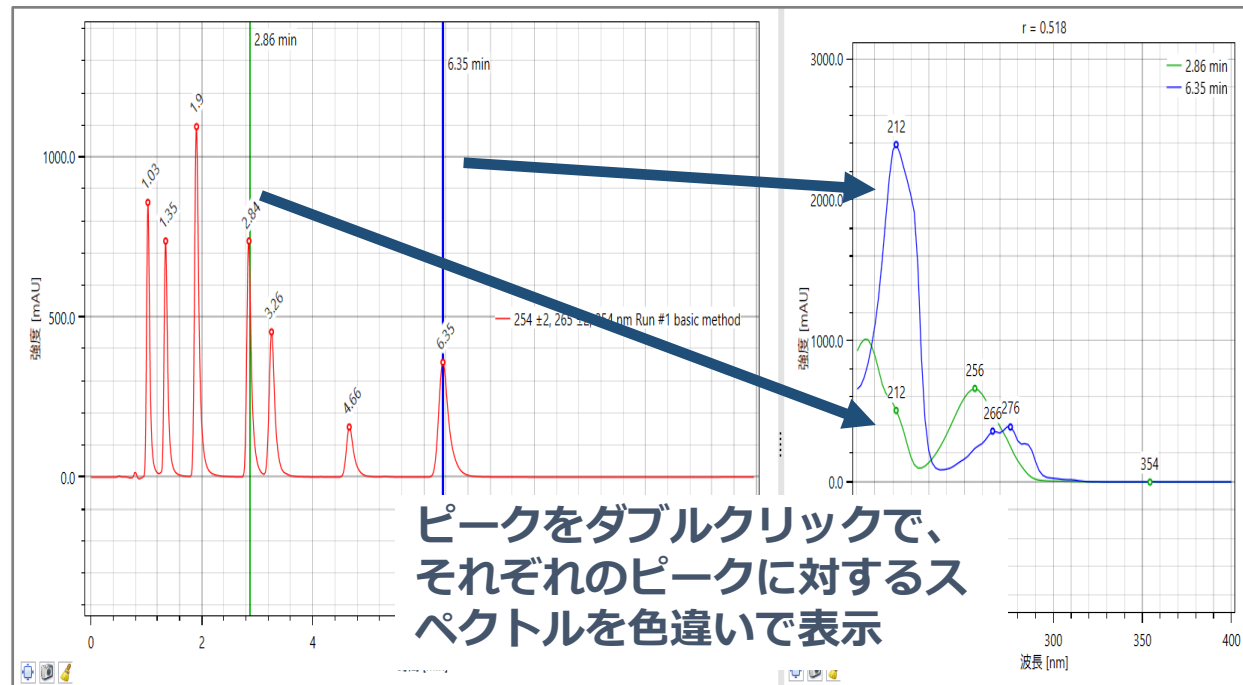
重ねあわせ表示

- クロマトグラムはデータウィンドウのチェックを入れることで、様々なクロマトグラムを異なる色で重ね合わせ表示可能となり容易に比較することができた。
- クロマトグラムのそれぞれのピークにおけるスペクトルも同様に、色違いで重ねあわせ表示することができ、よりわかり易く比較することができた。

クロマトの重ね合わせ



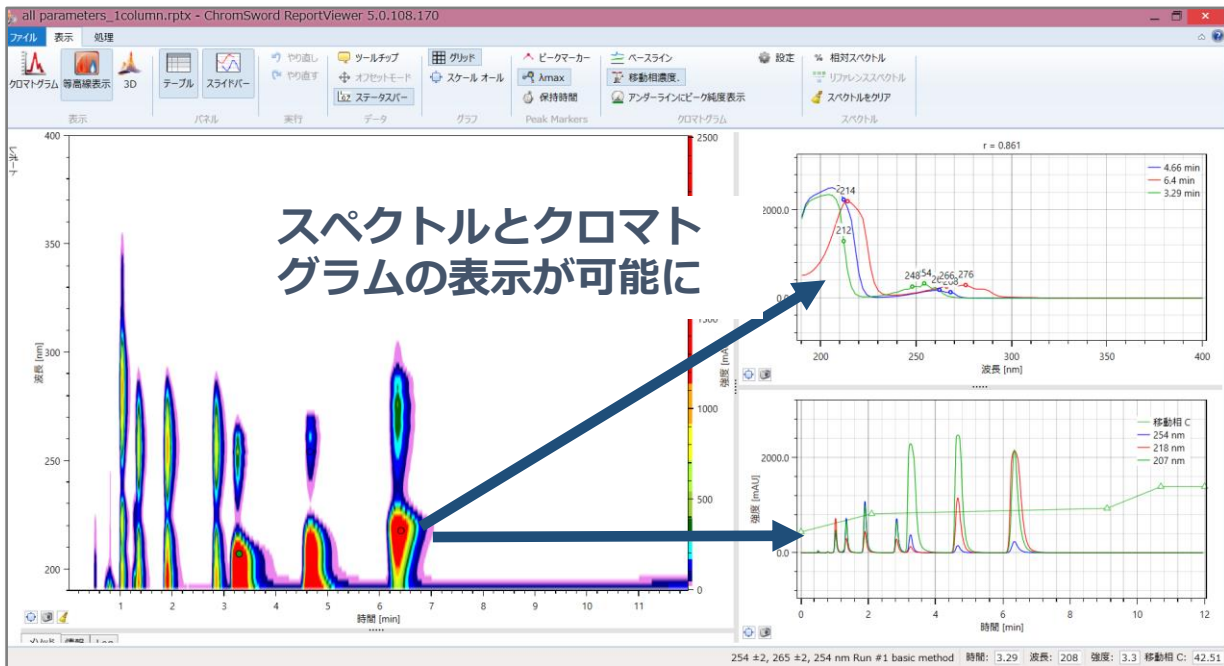
スペクトルの重ね合わせ



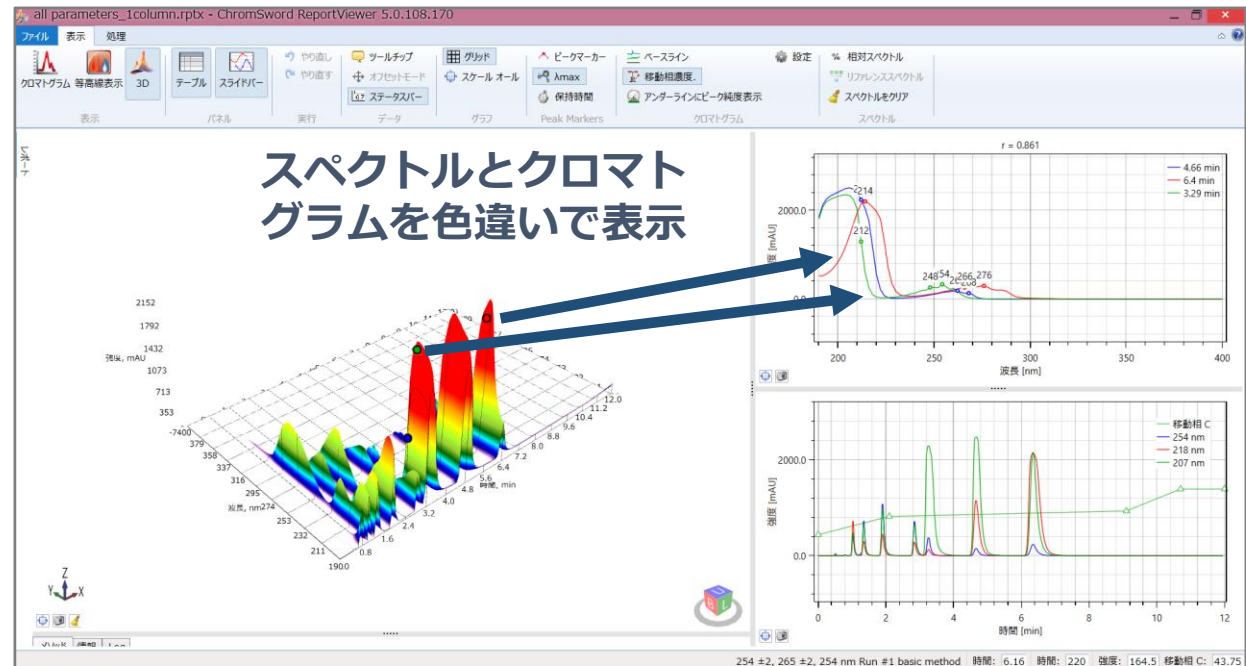
2D, 3D表示

- クロマトグラムは2D, 3D表示をすることが可能で、より視覚的にデータをブラウジングすることができた。
- 2D, 3Dともに、カーソルを合わせ、ダブルクリックすることで、それぞれにおけるスペクトル、クロマトグラムを異なった色で表示、より簡単にデータの比較・解析を行うことが可能であった。

2D表示



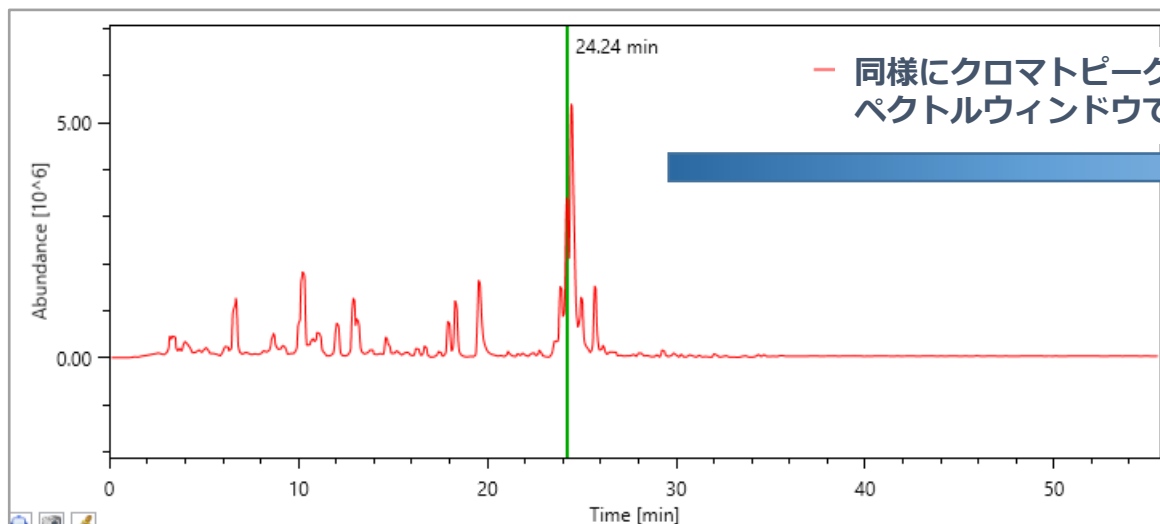
3D表示



MSの表示

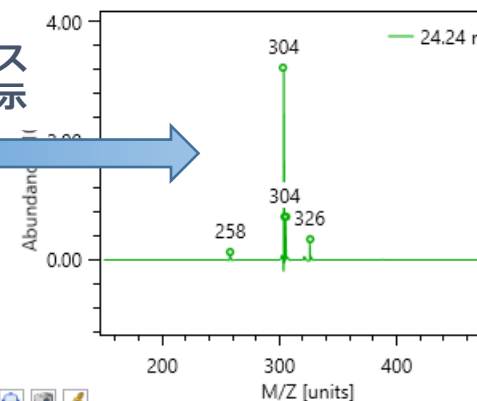
- ・ シングルMSのクロマトグラム、スペクトラムの表示が可能

クロマトウィンドウ



— 同様にクロマトピークをスペクトルウィンドウで表示

スペクトルウィンドウ



#	Compound	RT, min	Width	Plates	Area, mAU*s	HSM Area, mcV*s	Height, AU	Area, %	Rs	Purity	WL
1		2.62	0.834	55	4144.34	2072168.0	0.0872	1.02	1.79	0.794	294, 333, 349
2		3.19	0.150	2507	2782.35	1391176.0	0.3441	0.68	0.69	0.880	332, 333, 313
3		3.41	0.217	1369	4277.99	2138995.0	0.3752	1.05	0.69	0.930	332, 278, 313
4		3.70	0.134	4242	359.75	179873.2	0.0461	0.09	0.07	0.065	316, 333, 333

Chromatogram

Save Undo Add Remove

M/Z

200 M/Z ± 0 M/Z

M/Z range end (max peaks)

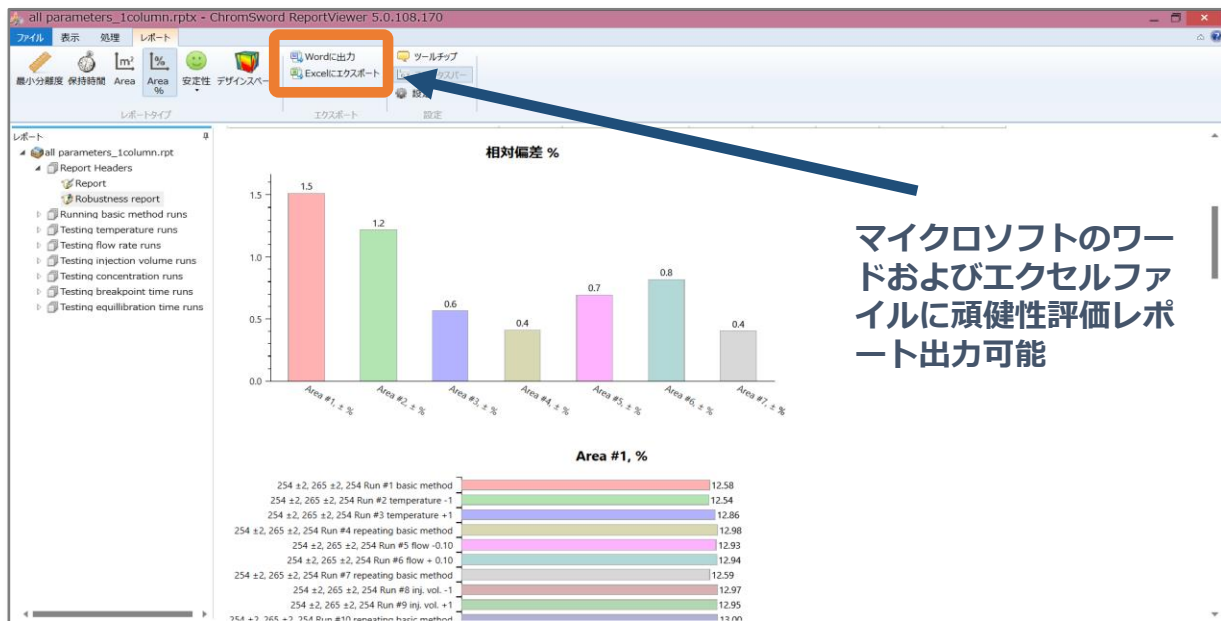
Enabled

350 M/Z

頑健性評価/デザインスペース

- 頑健性評価ソフトであるAutoRobustと高度連携が可能となり、今までエクセル等でデータを授受するといった手間が無くなった。
- データをReportViewer 5.0で直接シームレスで取り込みが可能で、より迅速かつ簡便に頑健性評価することができた。
- 新しくなったデザインスペースでは、各パラメータの変化に対するクロマトグラムの予測を、QbDの観点からより視覚的にメソッド開発に活用できることがわかった。

頑健性評価



マイクロソフトのワードおよびエクセルファイルに頑健性評価レポート出力可能

デザインスペース

