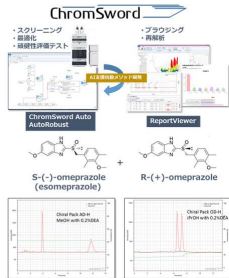


## AI支援によるSFCを用いたキラル分析法開発の効率化

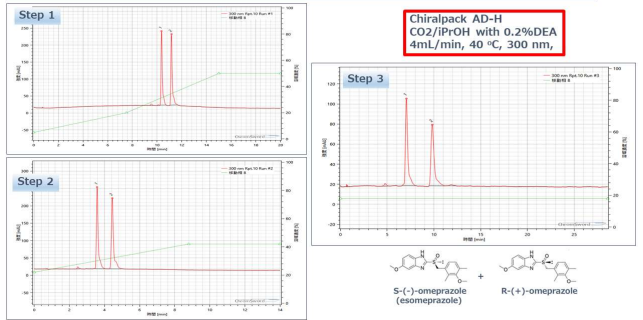
クロムソードジャパン株式会社/お問合せ : info@chromsword.co.jp

### サマリー

- オメプラゾール (ラセミ体混合物) をサンプルとし、SFCにおけるキラル分析メソッド開発を、ChromSword AutoのAIアルゴリズムを用いて検討した。
- SFCはアジレント社、1260 シリーズSFC / HPLC ハイブリッドシステム (カラム選択バルブ、フォトダイオードアレイ検出器) を用い、5種類のカラムと、3種類のモディファイヤーといった様々な条件下、SFCの分析メソッドの開発を行った。
- ChromSword Autoの最適化モードの一つである迅速最適化モードでは、3~5回 (最短3回) で、それぞれの分析条件を自動で最適化、ラセミ体混合物を上手く分離、SFCでのキラル分析メソッドを簡単に開発することができた。
- さらにオートモードで最適化された分析メソッドをOffLineシミュレーションを用いて、さらに高速の分析メソッド (約2分) も確立することができた。



### 迅速最適化モードによるメソッド最適化の例 (最短3回測定)



### 背景・目的

- 近年、医薬品をはじめ、化粧品、農業、材料、食品、環境衛生等の分野においても、製品・サービスの研究開発はもちろん、品質管理でも、SFC(Supercritical Fluid Chromatography, 超臨界流体クロマトグラフィー)は、HPLC (高速液体クロマトグラフィー) とならぶ次世代の分析機器として注目を浴びている。
- 最近、SFCを使用するための高圧ガス保安法下の規制対象が緩和はされ、様々な分野でSFCの導入がいきに進むのではないかと期待されている。
- HPLCと比較し、SFCでは主に二酸化炭素を用いた超臨界流体を用いるため、より低圧かつ高速に流速設定が可能であり、また、分取では逆相HPLC分取と比べ、分取後速やかに二酸化炭素が気化し、溶媒留去の時間および資料量の大幅節約も可能である。
- しかしSFCの分析メソッドの開発にはある程度の知識・経験がないと困難な場合が多く、SFC導入後の効率的な活用のためには、様々なパラメーターが最適化された分離・分析条件の容易かつ迅速な確立法が求められている。
- 本発表では、オメプラゾール (ラセミ体混合物) をサンプルとし、ChromSwordのAIアルゴリズムを用いたSFCのキラル分析メソッド開発法を紹介する。

### メソッド開発の効率化ソリューション

#### オートモード (ChromSword Auto)

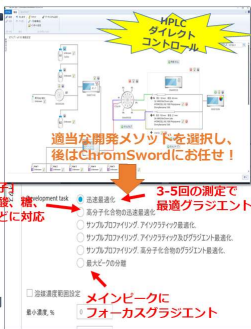
- LCを完全制御、クロムソードがもつAIアルゴリズムで、自動的にHPLCのグラジエント条件を作成

#### オフラインモード (Off Line)

- 構造式からクロマトグラムをシミュレーション

- 分析結果をもとにクロマトグラムをシミュレーション

- 実際のクロマトグラムから予測



### 方法

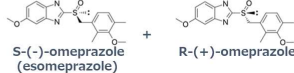
#### 【ソフトウェア】

- ChromSword Auto>> AI支援自動メソッド開発
- Report Viewer>> データブラウジング、再解析、デザインスペース
- OffLine Simulation>> メソッド最適化シミュレーション

#### 【基本分析コンディション】

- HPLC: Agilent 1260 シリーズSFC/HPLC ハイブリッドシステム  
カラム選択バルブ、フォトダイオードアレイ検出器
- カラム x5 : キラルカラム (150 mm, 4.6 mm)
- モディファイヤー x3 : MeOH, EtOH and i-PrOH with 0.2% DEA

#### 【サンプル】



### ワークフロー

#### ①メソッド迅速最適化 (15x3~5回測定、約15時間)

##### 【カラム x 5】

- Kromasil CHI DMB
- Kromasil CHI TBB
- Chiralpack OJ-H
- Chiralpack OD-H
- Chiralpack AD-H

##### 【モディファイヤー x 3】

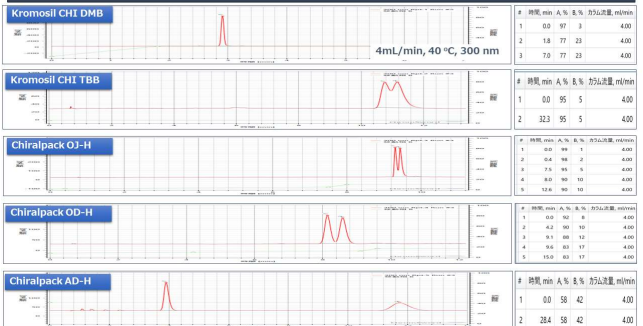
- MeOH with 0.2%DEA
- EtOH with 0.2%DEA
- iPrOH with 0.2%DEA
- 流速: 4ml/min
- カラム温度: 40°C
- 300nm

##### 【最適化モード】

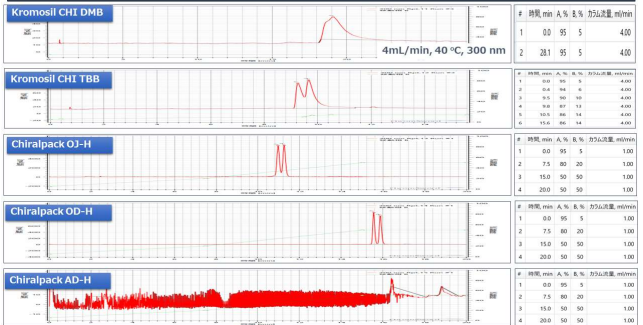


#### ②OffLineシミュレーションでさらに最適化

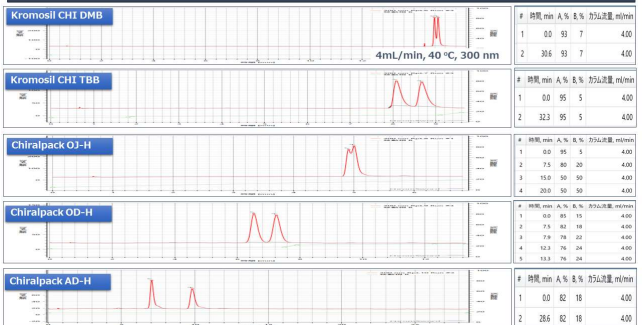
### 迅速最適化 (MeOH+0.2%DEA、5種類のカラム)



### 迅速最適化 (EtOH+0.2%DEA、5種類のカラム)



### 迅速最適化 (iPrOH+0.2%DEA、5種類のカラム)



### OffLineシミュレーションによる、メソッド最適化

