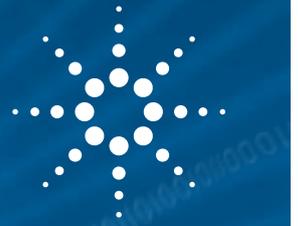


容易なクロマトグラムの比較 (異同判定)

OpenLab CDS MatchCompare

標準およびリファレンスクロマトグラム間の
迅速で厳密な比較



ハイライト

- OpenLAB CDS とのシームレスな統合
- 2つの複合サンプル間でのピークの迅速なマッチングとその特定
- ピーク面積の比較により、成分均一性をモニタリング
- 適合性レポート作成の自動化による時間の節約
- リファレンスサンプルの再注入が不要なため効率が向上

概要

OpenLAB CDS MatchCompare は、品質管理などで長時間を要するクロマトグラムの比較作業を自動化します。元々は2つのクロマトグラムのわずかな違いを特定するために開発されましたが、クロマトグラムに比較 (パターンマッチング) をする必要のあるサンプルに対しても幅広く適用できます。

このソフトウェアは、未知のサンプルと既知の標準を客観的に比較することにより、2つのクロマトグラムで類似する分離ピークを速やかに特定し、その面積をあらかじめ決められた範囲と比較照合するものです。このプロセスにより、さまざまな GC および LC アプリケーションでのスループットが向上します。

成分を個別に定量する作業のほかに、2つの異なるサンプル (または、サンプルとリファレンス) を比較する作業を要求されることがあり、この場合、個別の成分よりもクロマトグラムのフィンガープリント全体に注目する必要があります。通常、この作業を行うには、クロマトグラムを重ね書きして、微量の化合物を手動で調べてから、2つのクロマトグラムの一致具合を判定します。このメソッドは、長年のトレーニングと経験に基づいて行われるため、比較結果が主観的になります。

OpenLAB CDS MatchCompare の詳細については、以下をご覧ください
<http://www.chem-agilent.com/contents.php?id=1002862>



メイン成分と微量化合物の比較

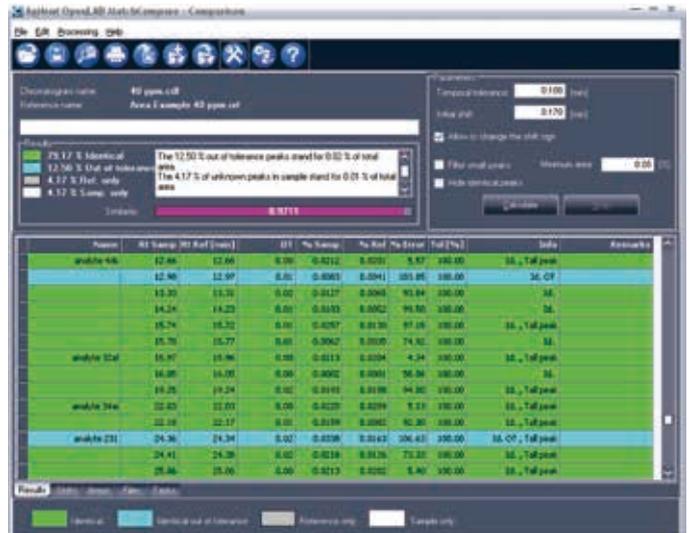
このアプリケーションの最も重要な機能の1つとして、メイン成分と微量化合物の両方を比較する機能があります。これは、一貫性が重要になるスクリーニングアプリケーションに最適なツールです。次のようなアプリケーションに有用です。

- 香りや香水の分析
- 原材料のスクリーニング
- 染料と揮発性着色料
- 偽和物混入または汚染のモニタリング
- ペプチドマッピング
- 炭化水素の詳細な比較

未知のサンプルのクロマトグラムとリファレンスクロマトグラムを簡単に比較できます。ここでは、OpenLAB CDS を使用して各化合物を定量し、OpenLAB CDS MatchCompare でサンプルの真の性質を見極めることにより、大きな利点が得られています。

生産性の向上

強力でインテリジェントなアルゴリズムを備えた OpenLAB CDS MatchCompare を使用することにより、ピーク歪み、スケールリング、リテンションタイムのシフト、および実験条件の変更に対応できます。また、単一のリファレンスクロマトグラムだけを使用し、複数のサンプルを迅速かつ簡単に比較して解析を行うため、リファレンスサンプルを頻繁に再分析する必要がありません。



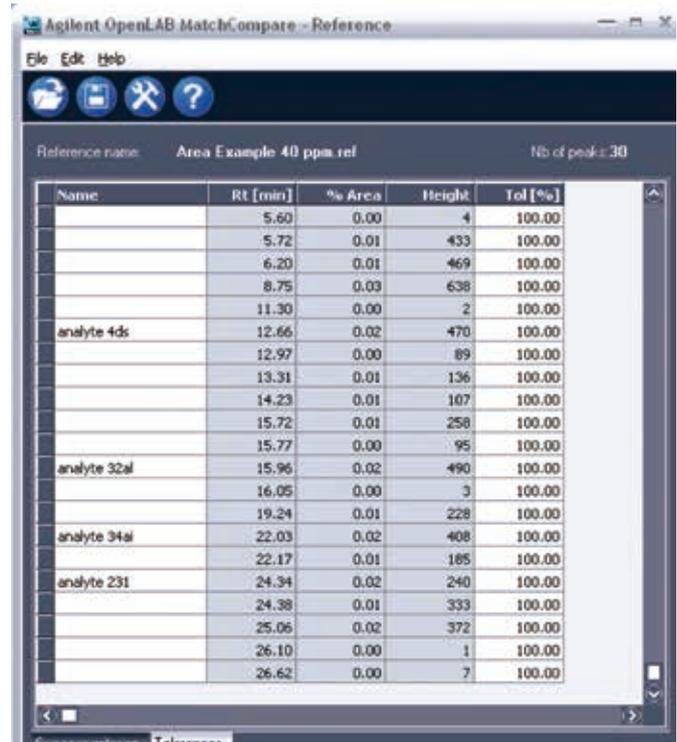
OpenLAB MatchCompare の比較画面には、リファレンスおよびサンプルクロマトグラム間の違いが明確に表示されます。



OpenLAB MatchCompare のグラフィカル比較では、クロマトグラム全体の一致スクリーニングを実施して、違いを迅速に視覚化できます。

自動ピークマッチング

マッチしたピークは表形式で参照でき、数分以内のリテンションタイムのシフトであれば検索の適合条件を変更しなくても対応できます。欠落したピークや不純物は、画面とレポートの両方で色別表示されるため、見落としがなくなり、データ確認作業が高速化されます。



The screenshot shows the 'Reference' window in Agilent OpenLAB MatchCompare. It displays a table with the following columns: Name, Rt [min], % Area, Height, and Tol [%]. The table lists 18 peaks with their respective retention times, area percentages, heights, and tolerances. Some peaks are labeled as 'analyte 4ds', 'analyte 32al', 'analyte 34al', and 'analyte 23l'.

| Name | Rt [min] | % Area | Height | Tol [%] |
|--------------|----------|--------|--------|---------|
| | 5.60 | 0.00 | 4 | 100.00 |
| | 5.72 | 0.01 | 433 | 100.00 |
| | 6.20 | 0.01 | 469 | 100.00 |
| | 8.75 | 0.03 | 638 | 100.00 |
| | 11.30 | 0.00 | 2 | 100.00 |
| analyte 4ds | 12.66 | 0.02 | 470 | 100.00 |
| | 12.97 | 0.00 | 89 | 100.00 |
| | 13.31 | 0.01 | 136 | 100.00 |
| | 14.23 | 0.01 | 107 | 100.00 |
| | 15.72 | 0.01 | 258 | 100.00 |
| | 15.77 | 0.00 | 95 | 100.00 |
| analyte 32al | 15.96 | 0.02 | 490 | 100.00 |
| | 16.05 | 0.00 | 3 | 100.00 |
| | 19.24 | 0.01 | 228 | 100.00 |
| analyte 34al | 22.03 | 0.02 | 408 | 100.00 |
| | 22.17 | 0.01 | 185 | 100.00 |
| analyte 23l | 24.34 | 0.02 | 240 | 100.00 |
| | 24.38 | 0.01 | 333 | 100.00 |
| | 25.06 | 0.02 | 372 | 100.00 |
| | 26.10 | 0.00 | 1 | 100.00 |
| | 26.62 | 0.00 | 7 | 100.00 |

OpenLAB MatchCompare のリファレンス設定画面では、個別のピークに対して名前を付け、相対許容値または絶対許容値を設定できます。

製品品質の迅速なモニタリング

OpenLAB CDS MatchCompare では、リファレンスクロマトグラムのピークごとに、ユーザーが定義した面積の許容範囲がパーセント値で特定され、マッチしたピークごとに比較結果が報告されます。これら面積のパーセント比較結果は、ユーザーが定義した許容値と照らし合わせて確認され、合格/不合格のピークが色別表示されたレポートで即座に特定できます。



OpenLAB MatchCompare のシフト分析画面では、リテンションタイムのシフト度合いを簡単に評価できます。

OpenLAB CDS との互換性

OpenLAB CDS MatchCompare は、OpenLAB CDS がなくても、インストールして使用できます。AIA フォーマットに変換されたデータファイルは、このソフトウェアを使用して解析できます。ただし、OpenLAB CDS MatchCompare を OpenLAB CDS 内で使用する場合、変換は不要で、比較プロセスはさらに簡素化できます。

Agilent データシステムとの互換性

OpenLab CDS MatchCompare for OpenLAB CDS (p/n M8530AA) の互換性チャート

| ソフトウェア | バージョン | サポート状況 |
|--|------------------------|---|
| OpenLAB CDS ChemStation Edition | C.01.04 以上 | サポート対象 |
| OpenLAB CDS EZChrom Edition | A.04.04 以上 | OpenLAB CDS MatchCompare A.01.02 以上でサポート |
| Multi-Technique ChemStation | B.04.03、B.04.03 SP1 以上 | |
| EZChrom Elite Edition | すべてのバージョン | サポート対象外 |
| MS ソフトウェア GC/MS ChemStation、 MassHunter | すべてのバージョン | サポート対象外 |

OpenLAB CDS MatchCompare の詳細については、
以下をご覧ください

<http://www.chem-agilent.com/contents.php?id=1002862>

本文書に記載の情報、説明、仕様等は
予告なしに変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc., 2015
Published in Japan, October 6, 2015
5991-6346JAJP

