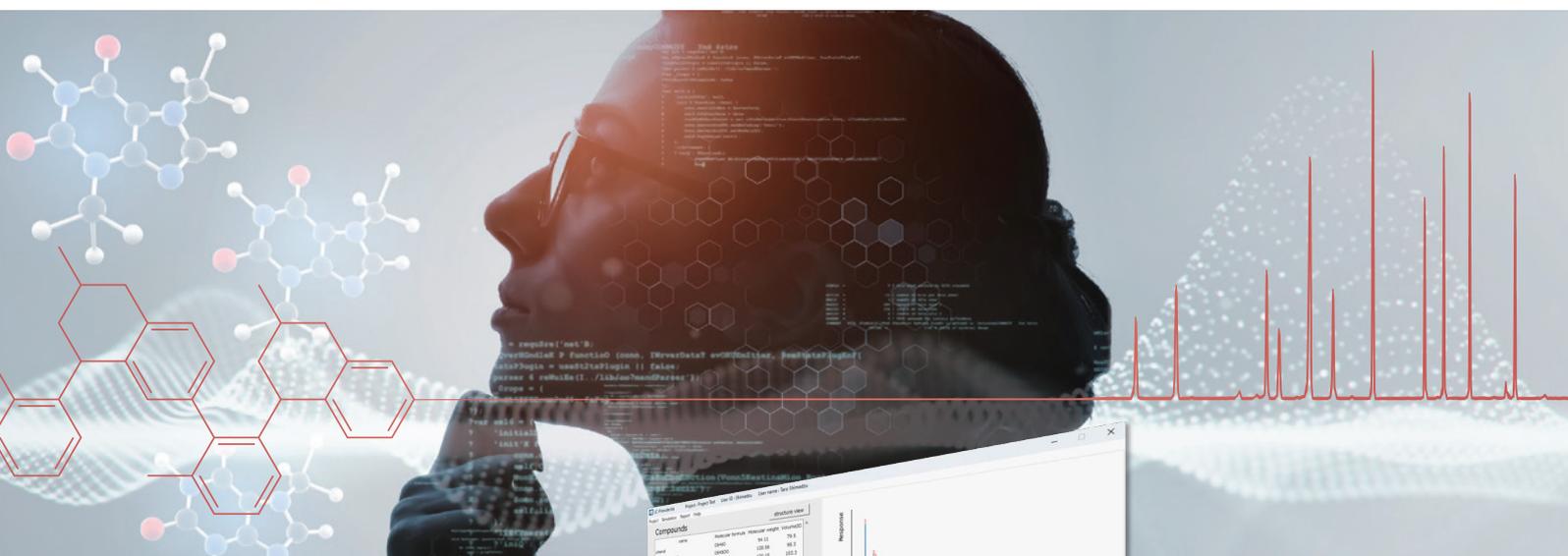


HPLC 保持時間 (t_R) 予測システム

HPLC (t_R) prediction and analysis system

LC-Providentia



LC-Providentia Project / Project Test User ID: Shimadzu User name: Sen Shimadzu

Project Simulation Report Help

Compounds

name	structure view
phenol	
p-chlorophenol	
acetophenone	
nitrobenzene	
nitrochlorobenzene	
chlorobenzene	

Separation mode:

Stationary phase:

Mobile phase A:

Mobile phase B:

Mobile phase B%:

Flow rate(mL/min):

Column temp.(°C):

t_0 (min) @ 1.0 mL/min:

Chromatogram Data:

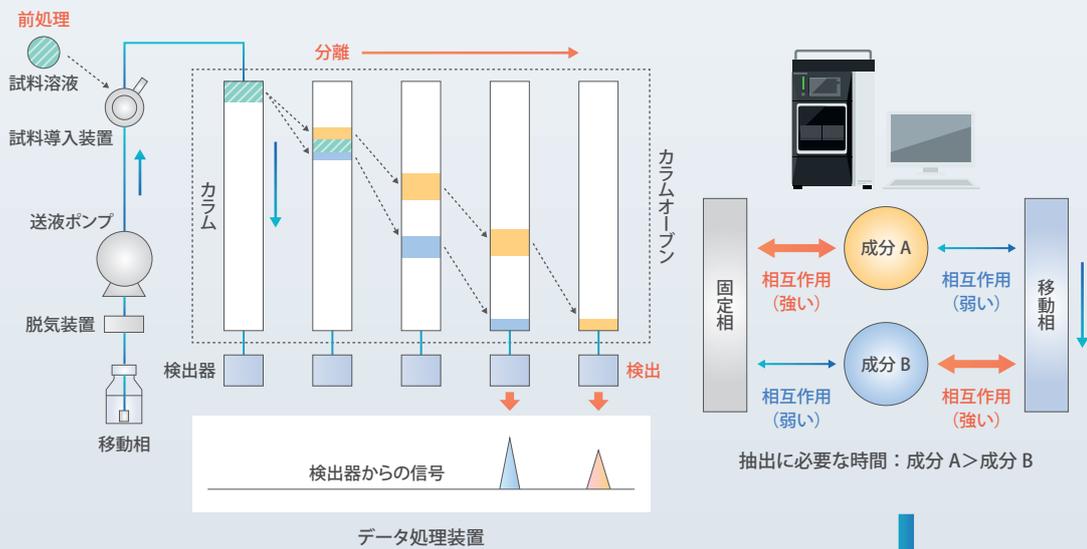
No.	compound	RT(min)	k'	R
1	phenol	2.79	1.233	-
2	p-chlorophenol	4.78	2.515	8.5
3	acetophenone	4.66	2.732	1.3
4	nitrobenzene	6.14	3.911	5.8
5	nitrochlorobenzene	26.84	19.272	25.9

概要

HPLC 保持時間予測システム LC-Providentia™ は、HPLC の保持時間を予測するアプリケーションソフトウェアです。分子構造式と分析条件を入力することで、設定条件での分析種の保持時間を予測することができます。

HPLC は、医薬、食品、化学、ライフサイエンスといった幅広い分野で、物質の分離・分析に使われています。HPLC による物質の分析において、いろいろな指標がありますが、最も基本的な指標は、HPLC によって分離された物質の保持時間（溶出時間）です。保持時間は、分析対象物質（分析種）と移動相の種類、分離カラムの特性によって決まります。保持時間は、分析種の定性分析と定量分析を行う上で、重要な指標になります。

HPLC 分析の標準的な流れ



HPLC 保持時間予測システム LC-Providentia

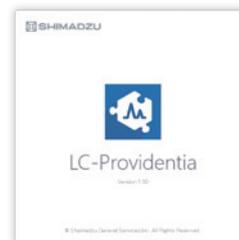


HPLC 保持時間予測システム LC-Providentia は、移動相と固定相、分析種の分子構造情報から保持時間を予測します。

特徴

さまざまな分析種に対応

既存の化学物質のみならず、新規の化学物質などPubChemに登録されていない物質にも対応しており、さまざまな分析種の保持時間を予測することができます。

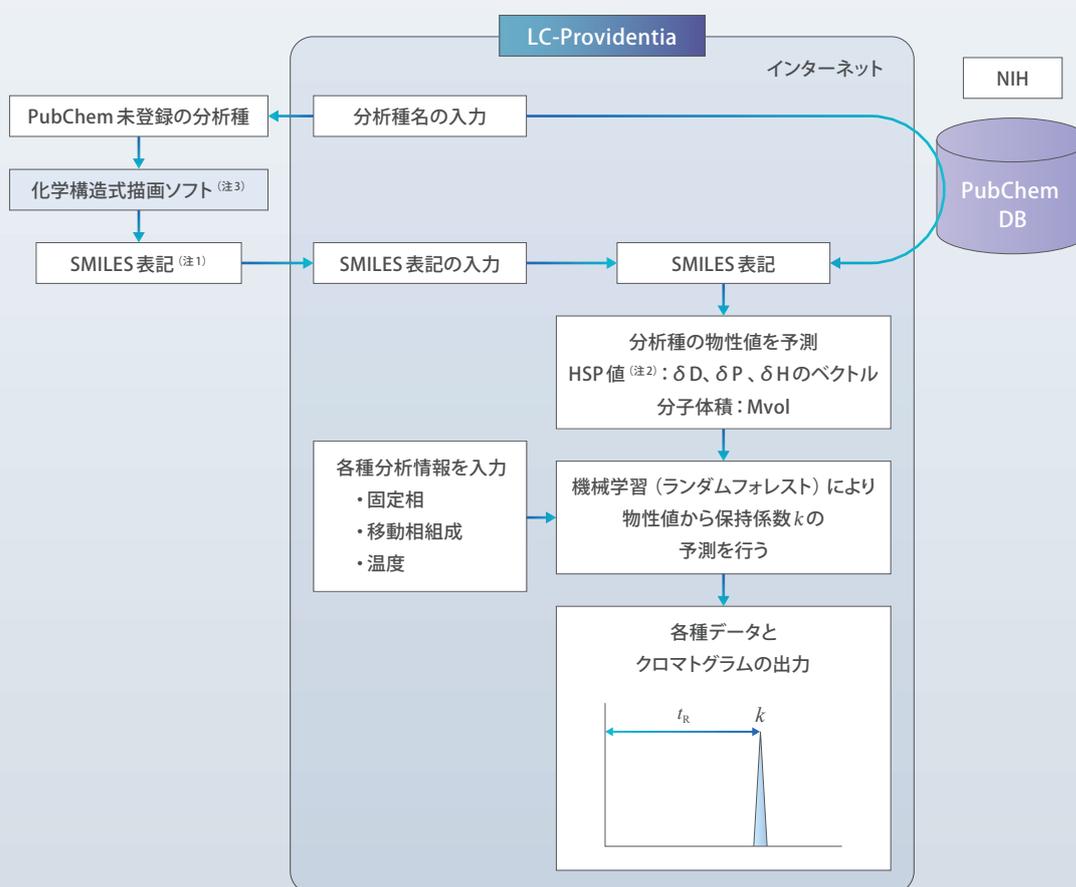


簡単な操作で分析条件の検討が可能

実際の分析と同等の模擬分析が、簡単な操作で行うことができます。

分析経験が少ない人でも、分析条件の検討が容易に行えるため、効率的な分析が実現できます。

本システムのフロー



(注1) SMILES表記: 化合物の構造を1行の文字列で表記するための「線形表記法」の1つ

(注2) HSP値: ハンセン溶解度パラメーター

δD: 分散項 (ファンデルワールスの力)

δP: 極性項 (ダイポールモーメントの力)

δH: 水素結合項

(注3) 化学構造式描画ソフト: ChemSketch¹、ChemDraw² など

1: ChemSketchはACD/Labs社の製品です。

2: ChemDrawはCambridge Soft社の製品です。

操作画面

入力および出力画面

分析種情報と分析条件の入力、予測プロジェクトの作成と編集、およびレポート作成も一つの画面ですべてできます。

分析種入力

分析種情報表示

クロマトグラム表示

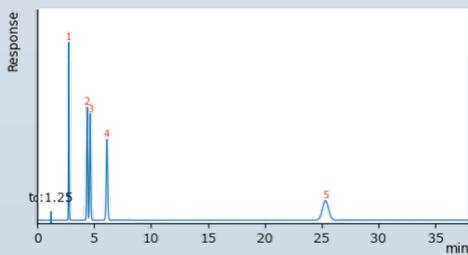
The screenshot shows the LC-Providentia software interface. On the left, there is a 'Compounds' table with columns for name, molecular formula, molecular weight, and volume3D. The compounds listed are phenol, p-chlorophenol, acetophenon, nitrobenzene, and valerophenone. Below the table are input fields for 'Separation mode', 'Stationary phase', 'Mobile phase A', 'Mobile phase B', 'Mobile phase B%', 'Flow rate(mL/min)', 'Column temp.(°C)', and 't₀ (min) @ 1.0 mL/min'. On the right, there is a chromatogram plot showing 'Response' vs 'min' with five peaks labeled 1 through 5. Below the plot is a table of predicted results.

No.	compound	RT(min)	k	R
1	phenol	2.79	1.233	-
2	p-chlorophenol	4.39	2.515	9.5
3	acetophenon	4.66	2.732	1.3
4	nitrobenzene	6.14	3.911	5.8
5	valerophenone	25.34	19.272	25.9

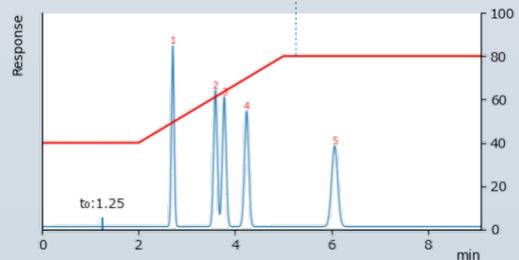
分析条件入力

予測結果データ表示

クロマトグラム表示



グラジエント曲線



出力レポート

PDF 出力

分析条件および、分析種情報、クロマトグラム、予測結果、分子構造図が、PDF ファイルで提供されます。

分析条件

分析種情報

クロマトグラム

予測結果データ

分子構造図

LC-Providentia Report Date: 2025/10/27

Project : Project Test
User ID : Shimadzu
User name : Taro Shimadzu

Conditions

1. Separation mode : Reversed phase
2. Stationary phase : ZORBAX SB-C18, 150.0 mm L. x 4.6 mm I.D., 5.0 μm
Inter porosity: 0.4, Intra porosity: 0.4, N : 10000
3. Mobile phase A : Water
4. Mobile phase B : Acetonitrile
5. Mobile phase B% : 40
6. Flow rate (mL/min) : 1.0
7. Column temp. (°C) : 40
8. Gradient setting : Initial B%: 40, Final B%: 80, start time (min): 2.0, End time (min): 5.0
9. Compound information

Compound	Molecular formula	Molecular Weight	Volume3D
phenol	C6H6O	94.11	79.5
p-chlorophenol	C6H5ClO	128.56	95.3
acetophenon	C8H8O	120.15	103.3
nitrobenzene	C6H5NO2	123.11	96.3
valerophenone	C11H14O	162.23	141.3

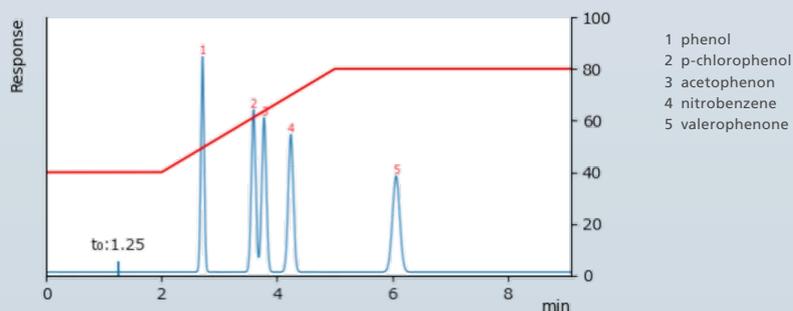
Peak table

No.	Compound	RT (min)	k	R	Smiles
1	phenol	2.79	1.233	-	C1=CC=C(C=C1)O
2	p-chlorophenol	4.39	2.515	9.5	C1=CC(=CC=C1O)Cl
3	acetophenon	4.66	2.732	1.3	CC(=O)C1=CC=CC=C1
4	nitrobenzene	6.14	3.911	5.8	C1=CC=C(C=C1)[N+](=O)[O-]
5	valerophenone	25.34	19.272	25.9	CCCC(=O)C1=CC=CC=C1

Structure

phenol p-chlorophenol acetophenon nitrobenzene valerophenone

Gradient の場合のクロマトグラムとグラジエント曲線表示

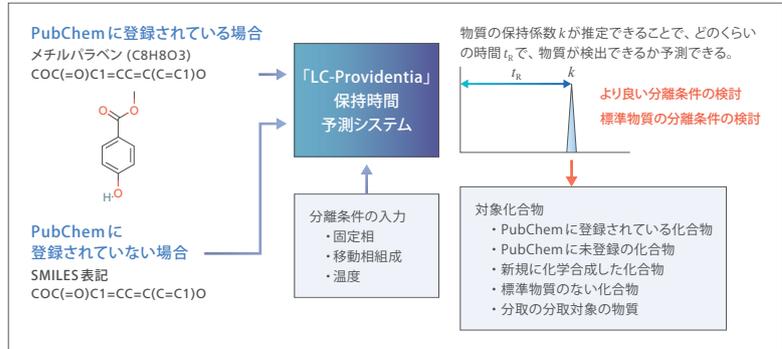


分析条件検討の活用例

1. 分析結果の予測

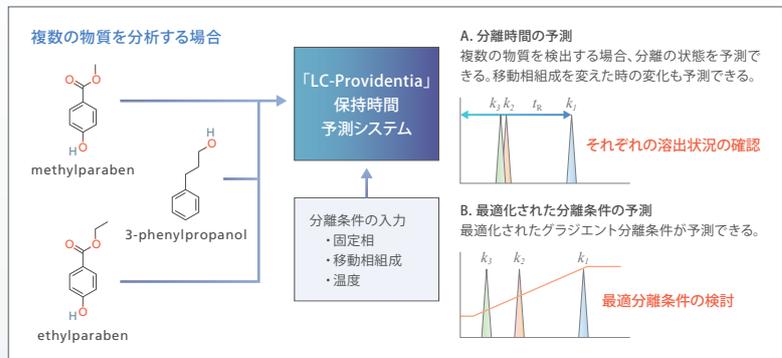
① 保持時間の予測

- HPLCの任意の分離条件を設定し、物質の溶出時間を予測できます。
- 分析状態を机上で、確認でき、分離条件を容易に決定できます。



② 複数の物質の分離状態を予測

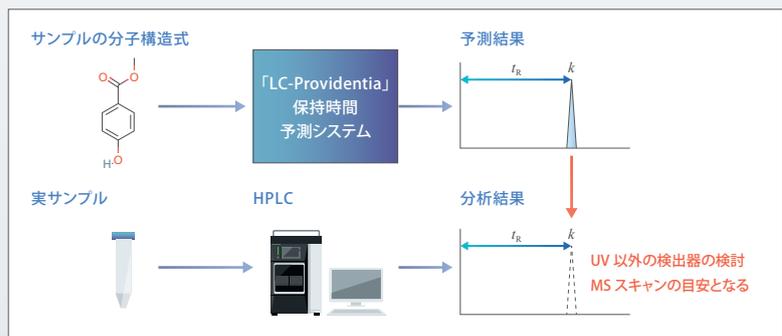
- 複数の物質の分析結果を予測できます。
- グラジエントでの分離条件を検討できます。



2. 分析結果の補完

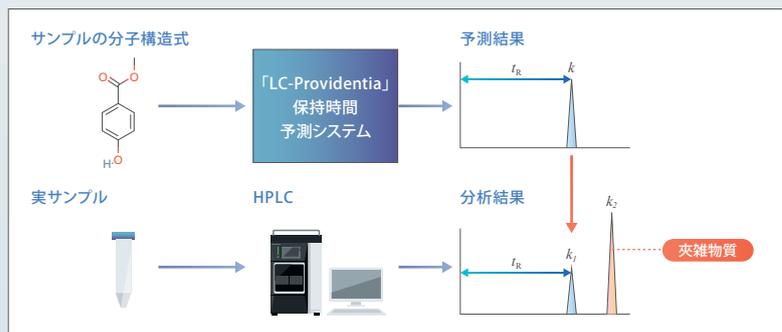
① 分離時間の予測と検出器の選定

- 実サンプルの分離・分析結果と予測システムの結果とを比べ、予測した保持時間に物質のピークが出なかった場合、使用したUV検出器の設定波長では、測定できない物質と推測できます。
- 最適な検出条件や検出方法を検討する指針を得ることができます。



② 分子構造から目的物質と夾雑物質の判定

- 分析条件検討の段階で、実サンプルの分離・分析結果と予測システムの結果とを比べ目的物質と夾雑物質の同定を検討できます。特に標準物質がないサンプルでの分析条件検討に有効です。



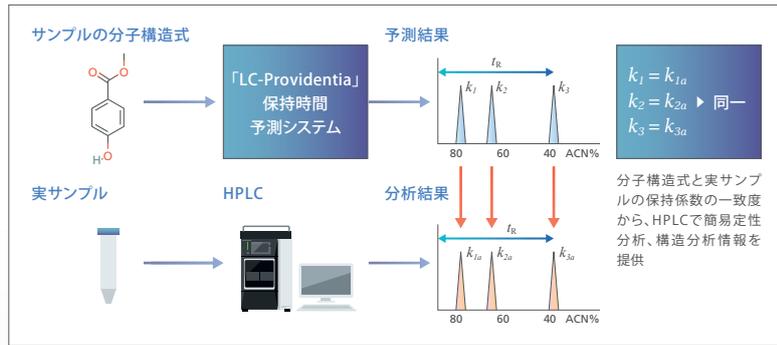
分析条件検討の応用例

予測システムの結果とHPLCでの溶出挙動を比較することから、分子構造の同一性の確認や、MS分析による異性体の同定支援など、分子構造の逆推定にも応用が可能です。

分子構造式の逆推定への適応例

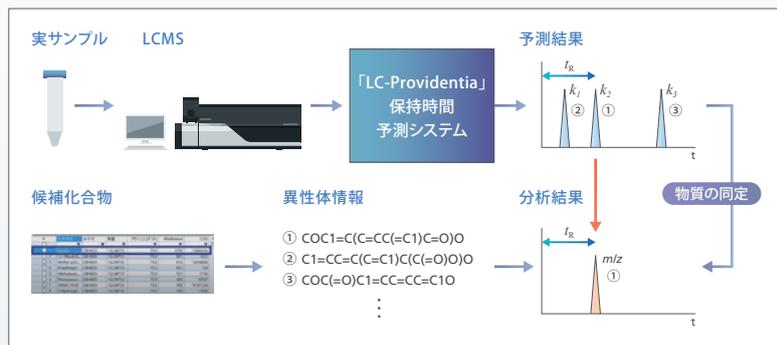
① 分子構造式の同一性の判断への応用

- 分析条件検討の段階で、実際のHPLCの溶出挙動と、分子構造式による予測結果とを比較することで、目的としている分子構造式の物質が実サンプルと同等かを判断することが可能ですので、分析条件検討が容易になります。



② LC/MS分析による異性体の同定支援

- LC/MS分析を行う場合、候補化合物として、分子式が同じ異性体としていくつかの候補が与えられることがあります。分析条件検討の段階で、候補物質の分子構造式から、保持時間を予測し、HPLCの保持時間と比較することで、候補化合物の同定を支援することが可能ですので、分析条件検討が容易になります。
- 特に、標準サンプルがない場合は、有効な支援となります。





3つのメリット

分析業務の改善 (Business Improvement)

実際の分析を行う前に、机上で分析条件を確かめることができるため、実際の分析回数を削減できます。熟練者のノウハウや、経験、専門知識をAI技術で補完することで、分析業務の経験が少ない人でも分析条件の検討を行うことができます。



資源節約と環境負荷の低減 (Green Transformation (GX))

実際の分析回数の削減により、アセトニトリルや消耗品の使用量を削減することで、資源節約、GXに貢献します。分析回数の削減により、廃液の処理量も減らすことができ、環境負荷の低減につながります。



HPLC 教育への活用 (Human Resources Education)

LC-Providentiaは、HPLCの教育にも役立ちます。このソフトウェアは、PC上でHPLC装置を用いた分析を模擬的に行うことができ、実践的な学習を通じてHPLCの基本的な分析知識や条件設定についての理解を深めることができます。



主な仕様

分析条件設定項目	分析種の入力	最大 20種
	分離モード	逆相モード対応
	カラム選択	ZORBAX SB-18C (ODS)、Shim-pack Scepter C18-120 (ODS)
	溶媒 A	水
	溶媒 B	Acetonitrile
	溶媒比率	20% ~ 80%
	流量	0.01 ~ 10.0 mL/min
	カラム温度	25 °C、30 °C、35 °C、40 °C、50 °C
	グラジエント分析	可能
表示項目	入力項目、選択項目	
	クロマトグラム	
	予測結果データ t_R 、 k 、 R	
出力レポート項目	表示項目	分析条件
		分析種データ
		クロマトグラム
		予測結果データ
	形式	PDF
データ操作・処理	データベース保存	
	印刷機能	
動作環境	Windows 11 対応 RAM 8GB以上	
	Internet接続 要	

使用条件・留意点

- 本ソフトウェアは、教師データとして50種類以上の分析種^(注1)の分析データを使用し、機械学習によって保持時間を予測しています。教師データにおける分析種の保持時間は検証済みですが、その他の分子構造をもつ分析種については、機械学習の仕様範囲内で予測された値となります。したがって、本ソフトウェアによる保持時間の予測値は、実際の装置を使用した分析結果と必ずしも一致しない可能性があり、結果の正確性を保証するものではありません。予測値は、実際の装置での分析条件の検討における指標、参考値として活用してください。本ソフトウェアは、疾病の診断、治療又は予防に使用されることを目的としていません。
- お使いのシステムに適用する場合は、お使いのシステムで、 t_0 (ホールドアップタイム) を測定することをお勧めします。

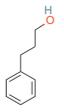
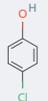
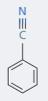
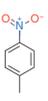
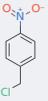
(注1) 分析種のリストは参考資料を参照ください

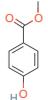
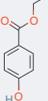
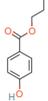
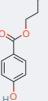
利用料金およびライセンス期間

利用料金	66,000円 (消費税込) / 3か月 / ユーザー
ライセンス期間	3か月間

参考資料

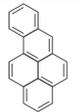
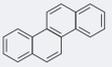
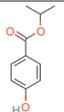
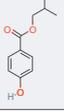
教師データに用いた分析種リスト (1)

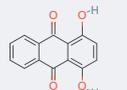
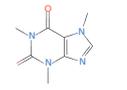
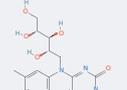
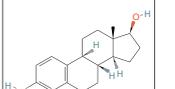
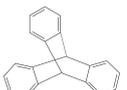
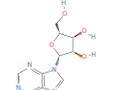
分析種		分子情報	
No.	名称	分子構造	分子式
1	benzyl alcohol		C7H8O
2	phenol		C6H6O
3	3-phenylpropanol		C9H12O
4	p-chlorophenol		C6H5ClO
5	acetophenone		C8H8O
6	benzonitrile		C7H5N
7	nitrobenzene		C6H5NO2
8	methylbenzoate		C8H8O2
9	anisole		C7H8O
10	benzene		C6H6
11	p-nitrotoluene		C7H7NO2
12	p-nitrobenzylchloride		C7H6ClNO2
13	toluene		C7H8
14	benzophenone		C13H10O

分析種		分子情報	
No.	名称	分子構造	分子式
15	bromobenzene		C6H5Br
16	naphthalene		C10H8
17	ethylbenzene		C8H10
18	p-xylene		C8H10
19	p-dichlorobenzene		C6H4Cl2
20	propylbenzene		C9H12
21	n-butylbenzene		C10H14
22	diethylformamide		C5H11NO
23	methylparaben		C8H8O3
24	ethylparaben		C9H10O3
25	propylparaben		C10H12O3
26	butylparaben		C11H14O3
27	acetanilide		C8H9NO
28	propiofenone		C9H10O

参考資料

教師データに用いた分析種リスト (2)

分析種		分子情報	
No.	名称	分子構造	分子式
29	butyrophenone		C10H12O
30	valerophenone		C11H14O
31	hexanophenone		C12H16O
32	heptanophenone		C13H18O
33	octanophenone		C14H20O
34	anthracene		C14H10
35	benzo[a]pyrene		C20H12
36	chrysene		C18H12
37	fluorene		C13H10
38	pyrene		C16H10
39	iso-propylparaben		C10H12O3
40	iso-butylparaben		C11H14O3
41	o-xylene		C8H10
42	m-xylene		C8H10

分析種		分子情報	
No.	名称	分子構造	分子式
43	hydroquinone		C6H6O2
44	resorcinol		C6H6O2
45	catechol		C6H6O2
46	o-terphenyl		C18H14
47	triphenylene		C18H12
48	quinizarin		C14H8O4
49	caffeine		C8H10N4O2
50	riboflavin		C11H14O3
51	estradiol		C18H24O2
52	amylbenzene		C11H16
53	tritycene		C20H14
54	bisphenol A		C15H16O2
55	adenosine		C10H13N5O4
56	bisphenol F		C13H12O2

分析技術に関する製品情報

分析技術の基礎に関する製品を提供しています。詳細は、各 WEB サイトをご覧ください。



セミナー案内

定期的に液体クロマトグラフなどの分析機器に関する分析技術の基礎的な内容に関するセミナーを実施しています。

<https://www.shimadzu.co.jp/sgs/seminar/index.html>



教材販売

セミナーの内容を収録しDVD教材として販売しています。自主学习などに活用ください。

<https://www.shimadzu.co.jp/sgs/kyouzai/index.html>

LC-Providentiaは、株式会社島津総合サービスの日本およびその他の国における登録商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

株式会社 島津総合サービス

住所：京都市中京区西ノ京徳大寺町1

URL：<https://www.shimadzu.co.jp/sgs/>