

# GCメソッドトランスレーター

## 保証範囲

このソフトウェアは、ユーザーコントリビューテッド ソフトウェアのひとつとしてアジレント・テクノロジー社から無料で配布されているソフトウェアです。したがって通常の製品とは異なり、テレホンコンサルタントやカスタマエンジニアによる取扱説明、インストール等のサポートはありません。またこのソフトウェアのインストールや使用の結果生じた障害に関しても、アジレント・テクノロジー社では一切の責任を追いません。あくまでもユーザーの責任においてのインストールおよびご使用となります。

## 対象機種

このソフトウェアは英語版ですので画面表示等は全て英語です。 Windows3.1 以降で御使用ください。なお日本語環境下でも使用可能ですが、障害等が発生する可能性があります。ご承知おきください。

## インストール方法

1. 全てのホルダー(ファイル)を使用するハードディスクの適当なディレクトリにコピーする
2. コピーしたディレクトリにある **SETUP.EXE** を実行する
3. 画面の指示に従って → [OK] ボタン → [コンピュータの絵] ボタン → の順にクリックすると自動的にインストールが行われ、アイコンが作成されます

なお、この文章は README.TXT に入っています。

## GCメソッドトランスレーターについて

GCメソッドトランスレーターは GCメソッドの変換および最適化に役立つツールです。

分離度を損なうことなしに、GCの分析時間を十分に短縮する場合を仮定してみます。

これを実現する唯一の方法は、より短く細いナローボアカラムを使用することです。

GCメソッドトランスレーターは、新しいメソッドのパラメータを計算するのに用いることができます。

これによって新しいカラムへ変更したときに必要な、メソッド開発のプロセスを大幅に短縮することができます。

さらに広い意味において GCメソッドトランスレーターは、与えられたオリジナル GCメソッド（既存のメソッド）から、縮尺の違うクロマトグラムが得られるトランスレーテッドメソッド（新しいメソッド）を計算します。これによって時間軸とピークエリア軸の、実際のスケールが変更されたクロマトグラムを得ることができます。

特に GCメソッドトランスレーターでは、全てのピークのリテンションファクター（分配比  $k$ ）と全てのピーク間のセパレーションファクター（分配比  $k$  の比、選択性ともいう）を維持する

ように GC メソッドを変換します。

前述の分析時間の短縮という GC メソッドトランスレーターの使い方は、可能なアプリケーションのほんの一例です。その他のアプリケーションとしては、同じカラムでメソッドの最適化を行うメソッドトランスレーション、リテンションタイムロッキングなどがあります。

GC メソッドトランスレーターの簡単な使い方

GC Method Translation

Criterion: ☒ Translate Only ☐ Best Efficiency ☐ Fast Analysis ☐ None Speed gain: 4.43545

Column

Length, m  
Internal Diameter, µm  
Film Thickness, µm  
Phase Ratio

100.0  
250.0  
0.500  
125.0

Carrier Gas

Enter one Setpoint  
Head Pressure, psi  
Flow Rate, mLn/min  
Outlet Velocity, cm/sec  
Average Velocity, cm/sec  
Hold-up Time, min  
Outlet Pressure (absolute), psi  
Ambient Pressure (absolute), psi

40.000  
1.7619  
62.33  
23.77  
7.01259  
14.696  
14.696

Oven Temperature

3-ramp Program

Initial  
Ramp 1  
Ramp 2  
Ramp 3

Ramp Rate °C/min  
Final Temp. °C  
Final Time min

35.00  
45.00  
60.00  
220.00

13.000  
15.000  
15.000  
5.000

Translated Method

40.00  
100.0  
Unlock  
0.200  
125.0

Hydrogen

85.242  
0.8810  
194.77  
42.17  
1.58103  
14.696  
14.696

Ramp Rate °C/min  
Final Temp. °C  
Final Time min

35.00  
45.00  
60.00  
220.00

2.931  
3.382  
3.382  
1.127

Sample Information

None

メソッドテーブル

GC メソッドトランスレーターの画面の大部分は、縦三列からなるメソッドテーブルです。

左の列はメソッドパラメータの名前、適切な測定単位からなっています。

“Original Method” とタイトルがついた中央の列は、新しい条件や最適化のために変換する既存メソッドのデータです。各パラメータの個別入力もしくはオープン温度プログラムのようなタイムテーブルになっています。

“Translated Method” とタイトルがついた右の列は、メソッドトランスレーションの結果です。

表示形式は **Original Method** と同様になっています。

ほとんどの **Translated Method** のパラメータ値の左側には、追加コントロールの欄があります。コントロールは四角いチェックボックスもしくは丸いオプションボタンで行います。コントロールを **on** にすると **Translated Method** のパラメータは対応する **Original Method** の値がそのまま採用されるように設定されます。これによって同じ値の再入力を省略できます。

メソッドパラメータは **Column** セクション、**Carrier Gas** セクション、**Oven Temperature** セクション、**Sample Information** セクションのように水平方向にもグルーピングされています。**Oven Temperature** セクションは **isothermal** (恒温分析) もしくは 6 段までの **temperature program** (昇温分析) の表示に設定可能です。**Sample Information** セクションは **none** (なし) もしくは **gas** (ガス)、**liquid** (液体) サンプル情報の表示に設定可能です。

パラメータの値が入るセルは、白もしくはグレーのバックグラウンドになっています。設定値の入力 (キーボードかマウス) は白のバックグラウンドのセルのみ可能です。グレーのバックグラウンドのセルは **lock** (ロック) され、データの入力はできません。

**GC** メソッドトランスレーターでは、データを入力するセルのロックに幾つかの状態があります。例えば **Original Method** の値がそのまま採用されるように設定している (上述の) 場合などです。

青色で表示される値もあります。これらは、それぞれのメソッドの独立パラメータです。

キャリアガスに関するパラメータの幾つかのように、メソッドパラメータのどのセクションにも他のパラメータから計算される関連パラメータがあります。これらの関連パラメータでは、細い線で囲われているサブセクション内の一つのみが、独立パラメータとして扱えます。

**Original Method** の値がそのまま採用されるように設定している場合では、サブセクションの全パラメータがロックされます。サブセクションのロックを解除したい場合は、**unlock** ボタンをクリックしてください。

関連パラメータがロックされていない場合、クリックもしくは値を入力したセルが自動的に独立パラメータとなります。このとき、サブセクション内のその他のパラメータは関連パラメータとなります。

## Criterion パネルの選択

**GC** メソッドトランスレーターの表示画面の最上部にあるのが **Criterion** パネル (基準パネル) です。4 つのトランスレーションモードを選択できます。

- **Translate Only** : メソッドを忠実に変換。カラムサイズ比が全て同じなら分離度も維持
- **Best Efficiency** : 分離を重視してメソッドを変換
- **Fast Analysis** : 分析スピードを重視してメソッドを変換
- **None** : 各パラメータを自由に設定します

**None** 以外の **Criterion** では全キャリアガスパラメータがロックされ、それぞれのルールに従い **Flow rate** の値を設定します。

None を選択した場合は全キャリアガスパラメータのロックが解除され、任意の値を入力したり、Original Method のパラメータの値がそのまま採用されるように設定できます。

Criterion パネルの右端にはトランスレーションに使用される Speed Gain の値が表示されます。

## システムコマンド

Criterion パネル下の左端には、システムコマンドボタンがあります。これらのボタンを使用すると、GC メソッドトランスレータ画面の Print (プリントアウト) やファイルへの Save (保存)、Open (開く)、Help (ヘルプ) システムへのアクセスができます。

## ニューマティックカリキュレーター

Sample Information と Oven Temperature program の表示をさせないように設定して、画面構成をシンプルにすると、“もしも．．だったら”という使い方ができる ニューマティックカリキュレーターとして使用できます。Original Method と Translated Method の両方で異なるデータを入力し、異なるカラムサイズ、設定値、キャリアガスの種類によってキャリアガスのコンディションがどのようになるかを比較することができます。

## 異なる長さのカラムでの 簡易的なリテンションタイム ロッキング

カラムサイズの公称値が全く同じ新しいカラムに交換した場合でも、クロマトグラム上のピークのリテンションタイムがシフトし、その上キャリブレーションウィンドウからはずれてしまうことがあります。この現象は日常のメンテナンスでよく行われる、カラム先端の切除を行ったときにも起こることがあります。

このリテンションタイムのシフトは、カラムヘッド圧を調整することによってオリジナルのリテンションタイムに戻すことが可能です。

この補正を行うにはいくつかの方法があります。一つはカラムサイズの違いに伴うホールドアップタイム（カラムによって保持されない成分のリテンションタイム。デッドタイムともいう）のずれを、カラムヘッド圧を変更することによって元に戻すという方法です。GC メソッドトランスレータでは、変更するカラムヘッド圧の値を計算することができます。

最初にこの作業を行う場合、Original Method にのみデータを入力してください。次に以下のステップを実行します。

1. 通常の状態を実際のホールドアップタイムを測定してください
2. 表示をシンプルにするため、Sample Information を none に、Oven Temperature program を isothermal に設定します
3. 以下のパラメータを Original Method に入力します
  - Column Parameters : カラムパラメータ
  - Ambient and Outlet Pressure : 大気圧(初期値 14.696psi)もしくは出口圧 (真空は 0)
  - Hold-up time : 測定したホールドアップタイム

・ **Oven Temperature** : オープン初期温度

4.もし必要なら、ホールドアップタイムから計算された **Head Pressure** (カラムヘッド圧) が、実際のものと同じになるように **Original Method** の **length** (カラム長さ) の値を調整します。  
コメント：入力されたカラムサイズが実際のものと異なることについてはあまり重要ではありません。しかしながら、計算された **Head Pressure** (カラムヘッド圧) が実際の値と同じであることが重要です

5.現在の **GC** メソッドトランスレーションの条件をファイルに保存し、必要ならプリントアウトしておきます

新しいカラムでのリテンションタイムを再補正する(オリジナルのリテンションタイムの値に”ロック”する) ために、以下のステップを実行します。

1.保存しておいた **GC** メソッドトランスレーションのファイルを開きます

2.**Criterion** が **None** に設定され、**Translated Method** の以下のパラメータが対応する **Original Method** と同一の値となるように設定 (値左の欄にチェック) されていることを確認します

- ・ **Column Internal Diameter**
- ・ **Film Thickness**
- ・ **Carrier Gas type**
- ・ **Ambient and Outlet Pressure**

3.**Original Method** の **Head Pressure** (カラムヘッド圧) で、新しいホールドアップタイムを実際に測定してください

4.新しく測定したホールドアップタイムの値を **Translated Method** に入力します ( **Head Pressure** は自動的に変更されます) 。

コメント：もしキャリアガスパラメータがロックされている場合は、**Criterion** を **None** にした上で **Carrier Gas** セクションの **Unlock** ボタンをクリックしてください

5.**Translated Method** の **Head Pressure** と **Original Method** の値が同じになるように、**Translated Method** の **length** (カラム長さ) の値を調整します。これにより新しいカラムの有効な長さをキャリブレーションします

6.**Translated Method** の **Hold-up time** が、対応する **Original Method** と同一の値となるように設定 (値左の欄にチェック) します

7.**Translated Method** の **Head Pressure** に、全ピークのリテンションタイムが同じになるように計算された新しい値が表示されています。この値に **GC** のカラムヘッド圧を設定してください

8.将来の使用やドキュメント作成のために、現在の **GC** メソッドトランスレーションの条件をファイルに保存し、プリントアウトしておきます

より高精度なリテンションタイムロッキングを行う場合は、アジレントのリテンションタイムロッキングソフトウェアをご利用ください。