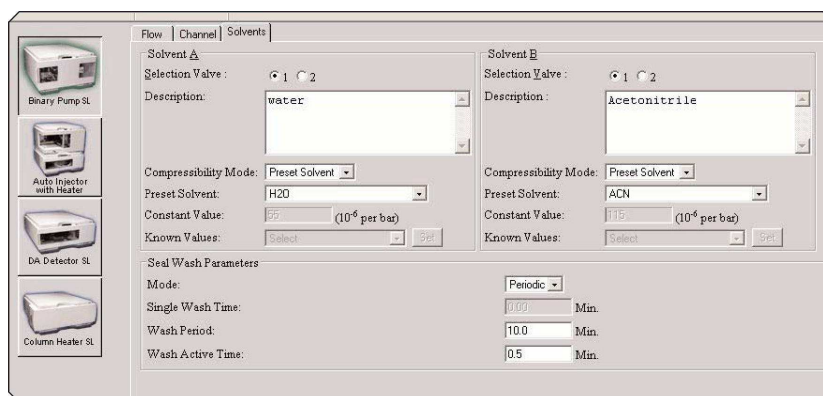


Waters Empower クロマトグラフデータソフトウェアによる Agilent 1200 シリーズ Rapid Resolution (高速高分離能) LC システムのコントロール

技術概要



概要

ICS 1.05を備えたWaters Empower 2クロマトグラフデータソフトウェアは、いくつかの特殊な機能を除き、Agilent 1200シリーズRapid Resolution LC (RRLC) システムを完全にサポートしています。

Empowerクライアントサーバーシステムには、以下の特長があります：

- ・ Agilent 1200シリーズRRLCシステムの設置と設定が容易
- ・ Agilent 1200シリーズSLモジュールのすべての主要パラメータに対応
- ・ Agilent 1200シリーズUV検出器で採取した2D、3D、スペクトルデータを評価
- ・ Agilentラボ診断ソフトウェアによるメンテナンスと診断をサポート
- ・ インスタントパイロットコントロールモジュールにより、Agilent 1200シリーズRRLCシステムに素早くアクセス

はじめに

近年、ラボに配備されたソフトウェアで機器をコントロールできることは、HPLCユーザーにとって重要な要件になっています。このようなことが可能になると、ユーザートレーニングのコストを削減するとともに、ソフトウェアライセンスやIT関連の取り組み、結果の比較などに関するコストを削減することができます。こうしたことから、ソフトウェアと機器メーカーが協力し、システムの相互運用性の向上に取り組んでいます。本論文では、Empowerクロマトグラフデータソフトウェアにより、Agilent 1100シリーズHPLC、1200シリーズHPLC、1200シリーズRRLCシステムをどのように、またどの程度までコントロールできるかについて説明致し、EmpowerによるAgilent 1200シリーズRRLCシステムの設定と操作についても説明致します。

対応するAgilent LCモジュール

表1には、ICS 1.05を備えたEmpower 2ソフトウェアがサポートするAgilent LCモジュールを記載しています。“Agilent LC ICS v1.05は下記リビジョンのEmpowerソフトウェアでテストされています：Empower build 1154 SP L、Empower build 1154 SP M、Empower2 FR3、Empower2 FR4、Empower2 SP D。Empower、Empower2が上記以前のリビジョンだったり、サービスパックが古い場合は、ICSをインストールできません。(Watersリリースノート 716002507、REVA)

AgilentファームウェアのリビジョンA.06.02/003/04、B.01.02/03/04、B.02.01がEmpowerソフトウェアでテストされました

Agilent 1100シリーズLCモジュール	Agilent 1200シリーズLCおよびRRLCモジュール
アイソクラティックポンプ (G1310A)	アイソクラティックポンプ (G1310A)
クォータナリポンプ (G1311A)	クォータナリポンプ (G1311A)
バイナリポンプ (G1312A)	バイナリポンプ (G1312B)
2次アイソクラティックポンプ、自動カラム再生用 (G1310A)	2次アイソクラティックポンプ、自動カラム再生用 (G1310A)
オートサンブラ (G1313A)、追加バイアルのみのG1313A-60004エクステンションを含む	オートサンブラ (G1329A) 参照
高性能オートサンブラ、バイアル、ウェルプレート対応、(G1367A/B)	高性能オートサンブラ、バイアル、ウェルプレート対応、(G1367C)
可変波長検出器 (G1314A)	可変波長検出器 (G1314B) 可変波長検出器SL (G1314C)
ダイオードアレイ検出器 (G1315AおよびG1315B)	ダイオードアレイ検出器SL (G1315C) ダイオードアレイ検出器 (G1315D)
カラム恒温槽 (G1316A)	カラム恒温槽 (G1316B)
蛍光検出器 (G1321A)	蛍光検出器 (G1321A)
真空デガッサ (G1322A、対応、コントロール不可)	真空デガッサ (G1322B、対応、コントロール不可)
温度制御オートサンブラ (G1327A、G1329AとG1330Aに相当)	温度制御オートサンブラ (G1327A、G1329AとG1330Aに相当)
標準オートサンブラ (G1329A)	標準オートサンブラ (G1329A) 標準オートサンブラSL (G1329B)
オートサンブラヒーター/クーラーモジュール (G1330AおよびG1330B)	オートサンブラヒーター/クーラーモジュール (G1330AおよびG1330B)
デガッサ搭載クォータナリポンプ (G1354A)	デガッサ搭載クォータナリポンプ (G1354A)
屈折率検出器 (G1362A)	屈折率検出器 (G1362A)
多波長検出器 (G1365AおよびG1365B)	多波長検出器SL (G1365C) 多波長検出器 (G1365D)
マイクロ真空デガッサ (G1379A、対応、コントロール不可)	マイクロ真空デガッサ (G1379B、対応、コントロール不可)
2p/6p溶媒選択バルブ (G1159)	2p/6p溶媒選択バルブ (G1159)
12p/13pバルブ (溶媒選択) (G1160)	12p/13pバルブ (溶媒選択) (G1160)
ハンドヘルドコントローラ (G1323B)	インスタントパイロットコントローラ (G4208A)

対応しないAgilent LCモジュール

以下の構成および機能は、Empowerソフトウェアでサポートされていません：

- ・インジェクタプログラム
- ・パーキット (G1373A)
- ・フラクションコレクタ
- ・Early Maintenance Feedback (EMF)
- ・ランプおよび検出器セルのRFIDタグ
- ・カラムのRFIDタグ
- ・DADデータリカバリカード
- ・ユーザーによる追加の圧縮率曲線の作成
- ・サンプルキャパシティ拡張モジュール (G2257A)

メンテナンスおよび診断機能のサポート

サードパーティ製ソフトウェアでは通常、Agilent ChemStationソフトウェアとは異なり、Agilent LCシステムのすべての診断およびメンテナンス機能をコントロールできません。こうした溝を埋めるために、Agilentはラボ診断ソフトウェアを提供しています。このソフトウェアは、個々のPC上で稼働し、Early Maintenance Feedback (EMF) などのメンテナンス機能やすべての診断機能をコントロールすることができます。Agilentラボ診断ソフトウェアは、Empowerなどの機器コントロールソフトウェアからは完全に独立して作動します。

ラボ診断ソフトウェアのベシックバージョンがAgilent 1200シリーズバイナリポンプSLに付属して出荷され、ライセンスを購入することで、上級バージョンにアップグレードすることが可能です。

Agilentラボ診断ソフトウェアとEmpowerを並行して使用するためには、LC機器の複数のネットワークインターフェースカード、ラボ診断ソフトウェア専用のPCといった特別な設定が必要となります。

Empower環境では、ラボ診断ソフトウェアを機器のメンテナンスや診断に使用することをお勧めしますが、継続的な機器モニターの目的で使用することはお勧めできません。メンテナンスや診断のためにラボ診断ソフトウェアでLC機器にアクセスする際には、LC機器とEmpowerの接続を断つことをお勧めします。そうすれば、追加のハードウェアやITインフラは必要ありません。

サードパーティのソフトウェアでコントロールされているAgilent 1100シリーズまたは1200シリーズシステムにインスタントパイロットを接続する場合、システム設定のなかに未知のモジュールを検出したことを告げるエラーメッセージが表示されることがあります。インスタントパイロットを他のコントローラに検知されないようにすれば、このエラーを防ぐことができます。

設定を変更するには、「Configure- Controller (設定 - コントローラ)」メニューを開き、「3rd Party Software (サードパーティソフトウェア)」アイテムまでスクロールし、「ON」に変更してください。ケーブルを用いて相互接続しました。

下位互換性：
 OFF 他のコントローラに可視
 (デフォルト)
 ON 他のコントローラに不可視

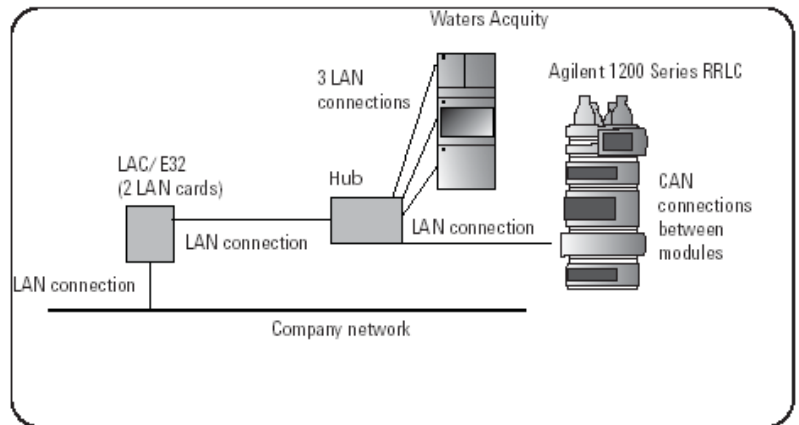


図1 Empowerクライアントサーバー環境でのAgilent 1200シリーズRRLCの設置

Agilent 1200シリーズインスタントパイロットコントロールモジュール

Agilent 1200シリーズインスタントパイロットコントロールモジュール (G4208A) を使えば、あらゆる1200シリーズRRLCシステムに素早くアクセスすることができます。クロマトグラフィパラメータとMACアドレスのほか、機器ステータスやエラーメッセージを確認することが可能です。インスタントパイロットは、ある種の状況に迅速に反応する必要があるような場合にも、強力なツールになります。たとえば、コントロールソフトウェアがダウンした場合に、ポンプのスイッチを即座に切ることができます。

A1100 Comprehensive Status

Sample: isocratic Vial: 1 Inj: 3
 Component Revision 1.04.1035
 Module G1312B
 Product Serial Number DE63057449
 Firmware Revision "A.06.06"
 Module G1315C
 Product Serial Number DE73456902
 Firmware Revision "B.01.06"
 Module G1316B
 Product Serial Number DE60557110
 Firmware Revision "A.06.04"
 Module G1329B
 Product Serial Number DE64156367
 Firmware Revision "A.06.04"

図2 Empowerソフトウェアで採取したハードウェアおよびソフトウェア情報

設置

システム要件

Agilent LCシステムをコントロールするには、Empowerクライアントサーバーシステム1基が必要です (図1)。機器コントロールソフトウェアのインストール方法の詳細については、Watersの提供するリリースノート 716002261、Rev Bを参照してください。Empowerシステムに接続されると、DHCPまたはBOOTPにより、LAC/Eバスから自動的にAgilent 1200シリーズRRLCシステムにIPアドレスが送られます。今回のケースでは、LANケーブルを用いてEmpowerシステムに接続します。Agilent 1200 RRLCシステムの各モジュール間は、CANケーブルを用いて接続します。

Agilent機器

図2には、本テストで使用した Agilent機器を示しています。Empowerソフトウェアでは、Agilent 1200シリーズRRLCシステムがA1100と誤表記されています。これはソフトウェア上の欠陥で、まだ修正されていません。ただし、この誤表記が機能や性能に影響を及ぼすことはありません。Agilent 1200シリーズダイオードアレイ検出器SLシステム向けの最大600 barでの操作や最大80 Hzのデータ速度などの全機能を利用できます。テストの実施は、Agilent 1200シリーズRRLCシステムのエミュレーションモードでの操作は行っておりません。

通信プロトコルの設定

Agilent 1200シリーズRRLCシステムを設定するには、Empowerのメインメニューにある「Configure System (システムの設定)」をクリックします (図3)。LANケーブルでLAC/Eバスに接続したあと、Agilent 1200シリーズRRLCシステムがIPアドレスを受信したかどうかを確認するには、「Configure System (システムの設定)」 - 「LAC/E 32 controller (LAC/E 32コントローラ)」 - 「Properties (プロパティ)」 - 「Configure DHCP (DHCPの設定)」の順にクリックします。

図4を見ると、Agilent 1200シリーズRRLCシステム (A1100と誤表記) が「192.168.0.11」というIPアドレスを割り当てられたことがわかります。これはEmpowerが新しいLCシステムを認識したことを示しています。システム名を修正するには、「A1100」をハイライト表示し、「edit (編集)」をクリックしてから、「AGILENT 1200 SERIES RRLC」などの名前を入力してください。

次の手順では、Agilent 1200シリーズRRLCシステムを使用できるアクティブな状態にします (図5)。設定メニューの「System (システム)」、「New Instrument (新しい機器)」を順にクリックします。設定画面が表示されたら、Agilent 1200シリーズRRLCシステムを左から右へドラッグ&ドロップします。

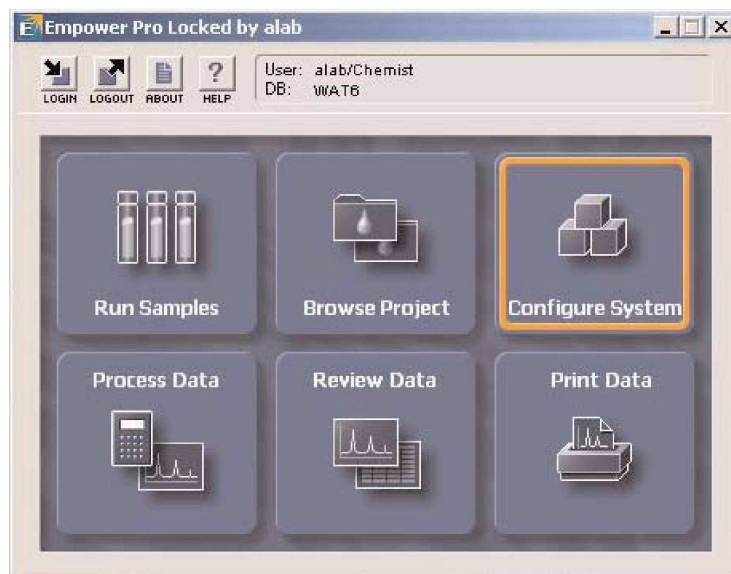


図3 Empowerソフトウェアのメインメニュー

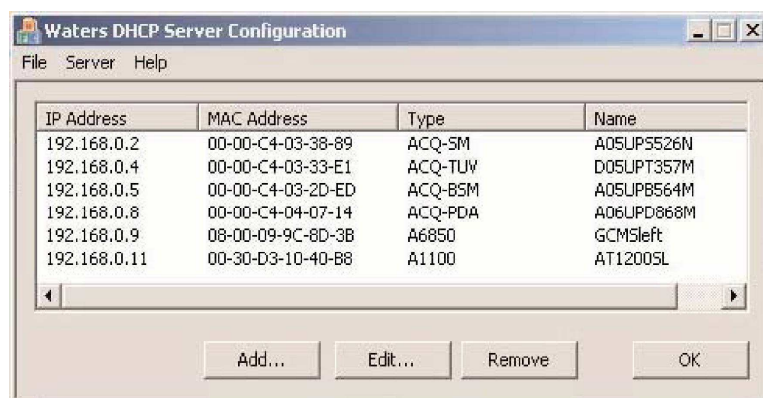


図4 Agilent 1200シリーズRRLCシステムのIPアドレスを確認する

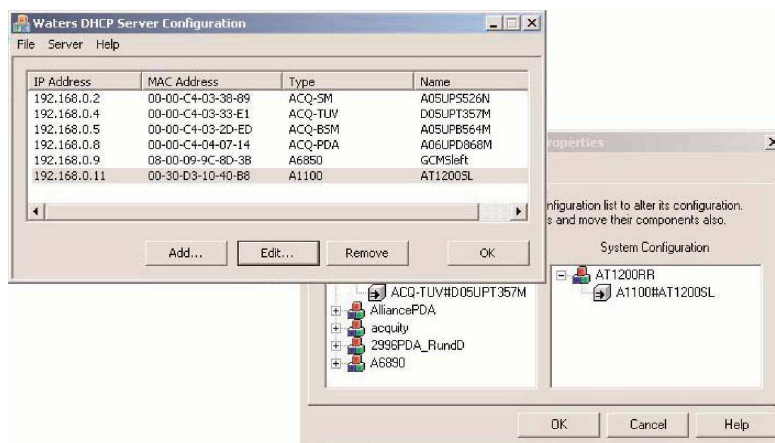


図5 設定画面でのドラッグ&ドロップによりAgilent 1200シリーズRRLCをアクティブな状態にする

- 図6では、通信の準備が整ったかどうかを確認する方法を示しています。この画面を開くには、「Empower Nodes (Empowerノード)」 - 「WAD 5」 - 「Properties (プロパティ)」 - 「Instrument (機器)」の順にクリックします。「OK?」とある列に「Yes」と「No」で準備の状態が示されます。

EmpowerがサポートするAgilent 機器の機能

- Empowerソフトウェアは、以下を除く Agilent 1100シリーズおよび1200シリーズLCシステムの全機能をサポートしています：

- ・ インジェクタプログラミング
- ・ EMFおよび他の診断機能
- ・ ランプおよび検出器セルのRFIDタグ
- ・ カラムのRFIDタグ
- ・ DADデータリカバリカード
- ・ ユーザーによる追加の圧縮率曲線の作成

Agilent 1200シリーズバイナリポンプSLのサポート

図7および8は、Agilent 1200シリーズバイナリポンプSLのメイン設定画面を示しています。グラジエント、流量、ストロークボリュームなどの設定を最初の画面に入力します(図7)。次の画面(図8)では、ベースラインノイズが最小となるように、溶媒に対応する圧縮率補正データを選択します。このテストでは、水とアセトニトリルを選択しました。他のすべてのモジュールも、同様のメニューでサポートされています。詳しくは付記を参照してください。

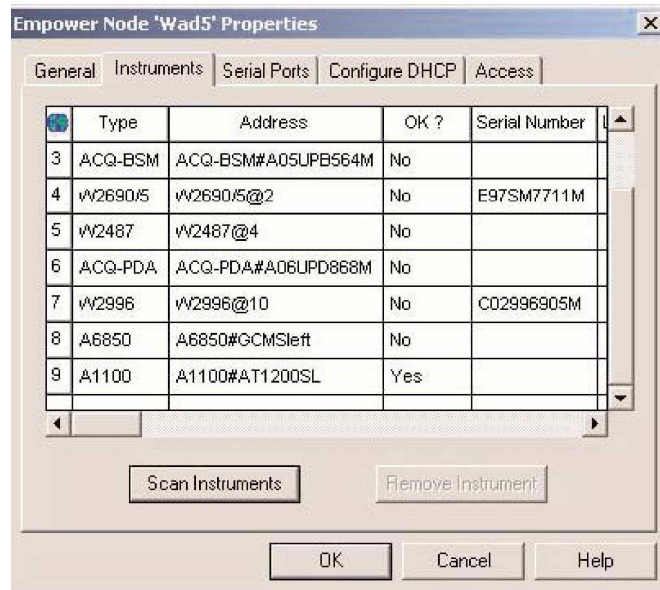


図6 通信がアクティブになったかどうかを確認する

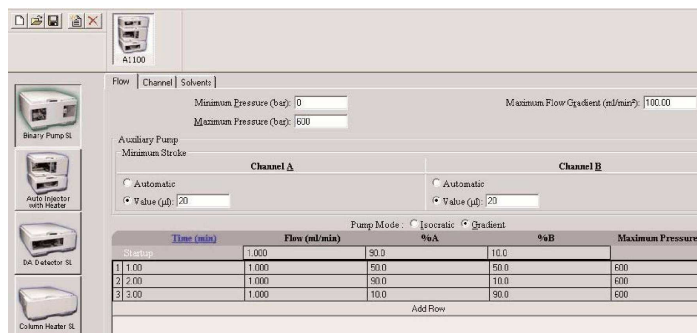


図7 Empowerソフトウェアを用いてAgilent 1200シリーズバイナリポンプSLの主要作用を設定する

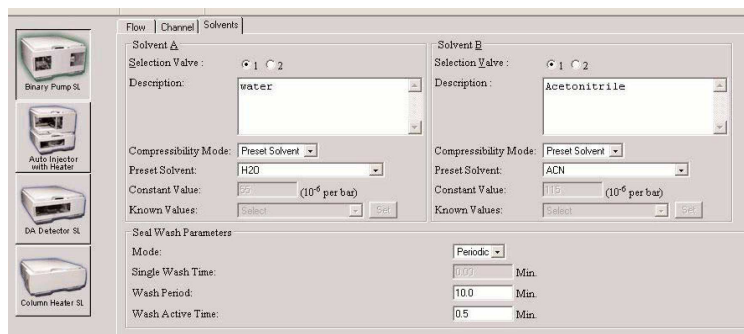


図8 Empowerソフトウェアを用いてAgilent 1200シリーズバイナリポンプSLの補助機能を設定する

アプリケーション例

このアプリケーション例では、以下のワークフローを使用しました：

- ・ 機器の設定
- ・ サンプルの分析
- ・ データの採取
- ・ 結果の検証

各モジュールの機器メソッドパラメータを設定するには、「Instrument Method (機器メソッド)」 - 「Edit (編集)」の順に選択します(図9)。表示された設定画面でパラメータを設定できます。パラメータは機器メソッドとして保存されます。適切なメソッドセットを保存したら、シーケンスを作成します。メソッドセットを用いて、シーケンスの欄に必要な事項を記入します(図10および11)。シーケンスはサンプルセットとして保存されます。システムが調整されたら、シーケンスがスタートし、選択したサンプルセットの名前ですべてのデータファイルが保存されます。図11はシーケンスの例を示しています。

シーケンスが完了したら、2D、3D、スペクトルデータを閲覧し、評価することができます(図12)。レビュー画面では、積分、較正といったデータ評価のためのパラメータを設定し、プロセスメソッドとして保存できます。レポートエディタを使ってレポートを作成することも可能です。図13では、この例で述べたシーケンスとプロセスメソッドを用いて作成したデータのレポート例を示しています。

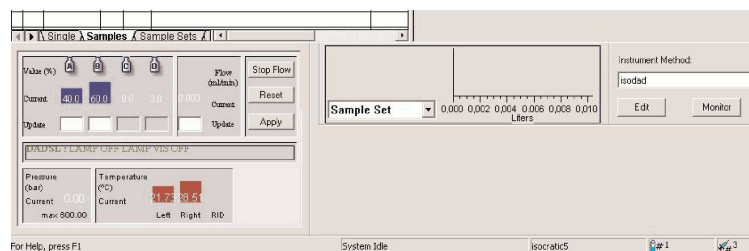


図9
機器メソッドパラメータとシーケンスの編集

The screenshot shows a table with columns: Vial, SampleName, Inj Vol (uL), # of Injs, Function, Method Set / Report Method, Run Time (Minutes), Next Inj. Delay (Minutes), SampleWeight, Dilution, and Level. The table contains four rows of data for different injection steps.

Vial	SampleName	Inj Vol (uL)	# of Injs	Function	Method Set / Report Method	Run Time (Minutes)	Next Inj. Delay (Minutes)	SampleWeight	Dilution	Level
1	isocratic	2.0	3	Inject Samples	testinstrumentset	6.00	0.00	1,0000	1,0000	
2	isocratic	2.0	3	Inject Controls	testinstrumentset	6.00	0.00	1,0000	1,0000	
3	calib	2.0	3	Inject Standards	testinstrumentset	6.00	0.00	1,0000	1,0000	
4	stop	2.0	3	Inject Standards	stop pump	2.00	0.00	1,0000	1,0000	1

図10
シーケンスの作成

The screenshot shows a table with columns: Method Set / Report Method, Run Time (Minutes), Next Inj. Delay (Minutes), SampleWeight, Dilution, and Level. The table contains two rows of data for different injection steps.

Method Set / Report Method	Run Time (Minutes)	Next Inj. Delay (Minutes)	SampleWeight	Dilution	Level
testinstrumentset	1,50	0,00	1,0000	1,0000	
stop pump	0,20	0,00	1,0000	1,0000	

図11
シーケンスの例

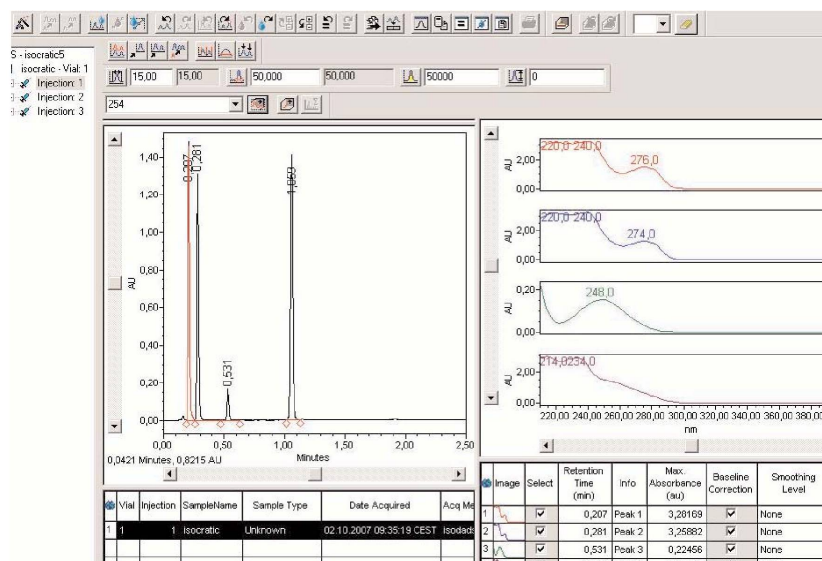


図12
データの評価やプロセスメソッドの作成を実行できるレビュー画面

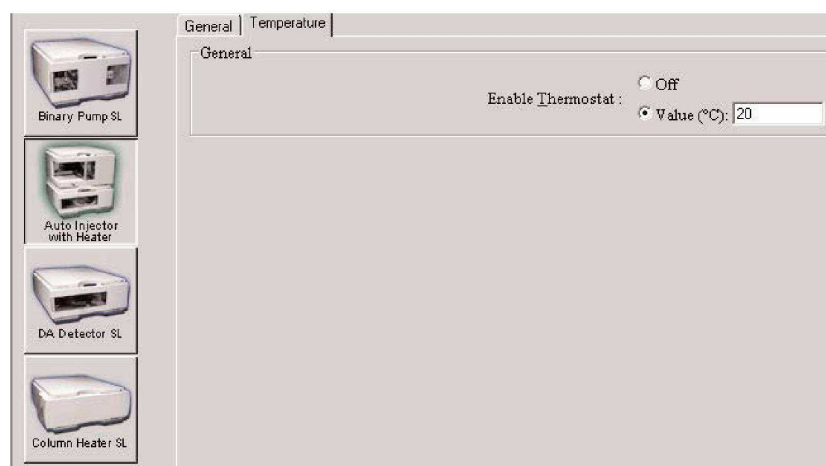
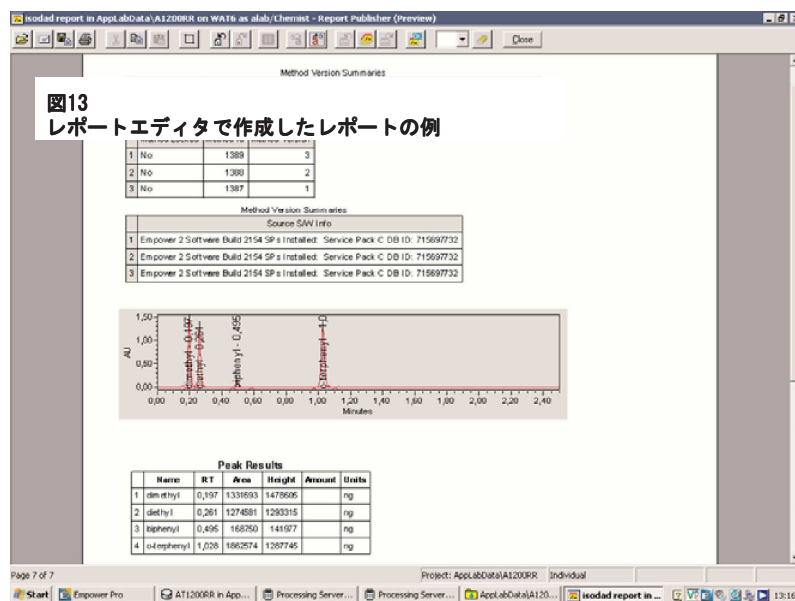
まとめ

Waters Empowerソフトウェアを使えば、Agilent 1200シリーズRRLCシステムをコントロールし、最適な性能を得るのに必要なすべての機器メソッドパラメータを設定することができます。これまでコントロールに必要なだったエミュレーションモードを使用する必要はありません。インジェクタプログラミングなどの一部の特殊な機能は、現時点ではサポートされておりません。

しかし、こうした機能や、現在サポートされていないモジュールについても、順次サポートされるようになります。Agilent 1200シリーズRRLCシステムのメンテナンスおよび診断機能は、Agilentラボ診断ソフトウェアによりサポートされています。このソフトウェアは、個々のPC上で稼働し、LCコントロールソフトウェアからは完全に独立しています。結果として、Agilent 1200シリーズRRLCシステムとEmpowerソフトウェアの組み合わせは、機器コントロールおよびデータ評価のためにEmpowerソフトウェアを導入しているラボにふさわしい選択肢となります。

付記

この付記では、他のAgilent 1200シリーズRRLCシステムモジュールの設定画面(図13~18)を紹介しています。



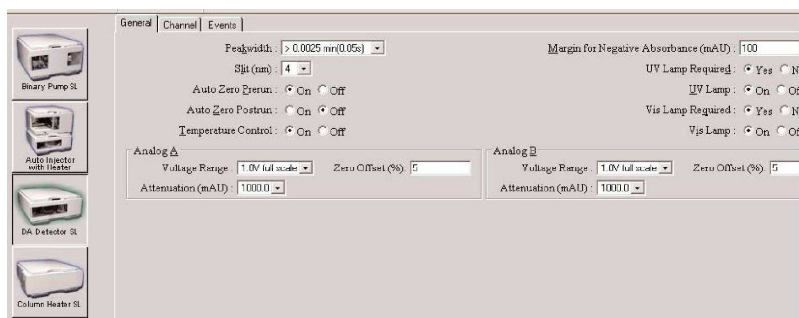


図16 Agilent 1200シリーズダイオードアレイ検出器SLの設定画面

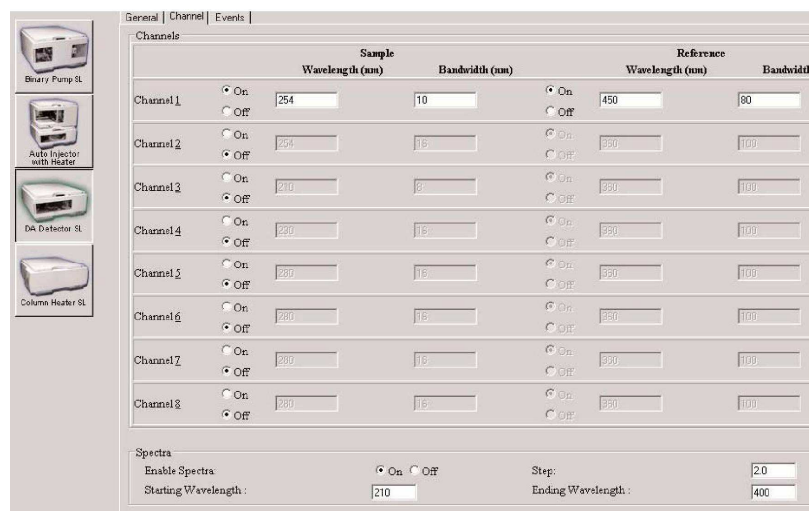


図17 Agilent 1200シリーズダイオードアレイ検出器SLの追加設定画面

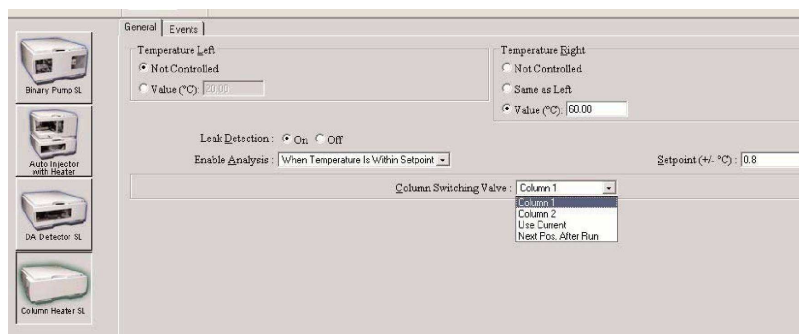


図18 Agilent 1200シリーズカラムコンパートメントの設定画面

www.agilent.com/chem/RR

© 2008 Agilent Technologies

Published January 1, 2008
 Publication Number
 5989-7854JAJP