



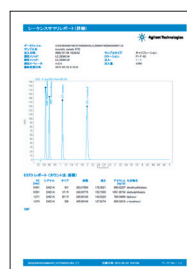
# Agilent OpenLAB インテリジェントレポート 便利なテンプレート集



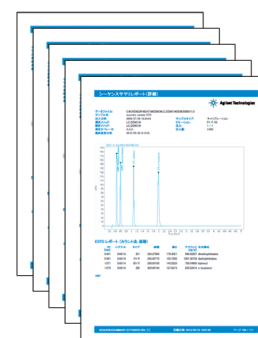
# お望みのレポートを簡単に作成できます

## — OpenLAB インテリジェントレポート

OpenLAB インテリジェントレポートの最大の利点は、標準でインストールされているレポートテンプレートを自由にカスタマイズして、お好みのレポート形式を作成できることです。インストールされているレポートテンプレートには、シングルラン用、シーケンス用のレポートテンプレートが用意されており、それぞれ機能が異なります。シングルラン用のレポートは、それぞれのデータの結果を表示します。シーケンス用のレポートは、複数のデータの結果をまとめた形で表示します。



シングルランレポート



シーケンスレポート

### 標準でインストールされているレポートテンプレート

OpenLAB インテリジェントレポートには、以下のレポートテンプレートが標準でインストールされています。

レポート名	用途	内容
パフォーマンスレポート ※2	分析結果を表示する基本的なレポート	分析情報、クロマトグラム、ピーク情報
キャリブレーションレポート	検量線情報を表示するレポート	分析情報、クロマトグラム、ピーク情報、検量線
拡張パフォーマンスレポート	パフォーマンスレポートより詳細なピーク情報を表示するレポート	分析情報、クロマトグラム、ピーク情報
パフォーマンス & ノイズレポート	パフォーマンスレポートに S/N を追加したレポート	分析情報、クロマトグラム、ピーク情報
ESTD レポート	外部標準法を用いた結果を記載したレポート	サンプル情報、クロマトグラム、ピーク情報
ISTD レポート	内部標準法を用いた結果を記載したレポート	サンプル情報、クロマトグラム、ピーク情報
ESTD 定量レポート	外部標準法を用いた定量結果を記載したレポート	サンプル情報、クロマトグラム、ピーク情報
ISTD 定量レポート	内部標準法を用いた定量結果を記載したレポート	サンプル情報、クロマトグラム、ピーク情報
面積パーセントレポート	サンプルの面積、面積 % の表示を主としたレポート	サンプル情報、クロマトグラム、ピーク情報
サンプルサマリレポート	シーケンスに含まれるサンプルごとの情報を記載したレポート	サンプルごとの分析結果
シーケンスサマリレポート (下記 3 種)	シーケンスを通したまとめのレポート	シーケンステーブルの情報、サンプルの分析結果、化合物ごとの面積の平均値、RSD などの統計値などを記載
シーケンスサマリレポート (簡易)	シーケンスを通したまとめのレポートの簡易版	表紙、サンプルの一覧、統計レポート (キャリブレーションサンプル)、統計レポート (サンプル)
シーケンスサマリレポート (標準) ※2	シーケンスを通したまとめのレポートの標準版	表紙、シーケンステーブル、分析レポート、サンプルサマリ、メソッドサマリ、統計レポート (キャリブレーションサンプル)、統計レポート (サンプル)
シーケンスサマリレポート (詳細)	シーケンスを通したまとめのレポートの詳細版	表紙、機器コンフィグレーション、ログブック、シーケンステーブル、分析レポート、サンプルサマリ、メソッドサマリ、統計レポート (キャリブレーションサンプル)、統計レポート (サンプル)
CSV レポート ※1	外部システムに結果を読み込ませるためのレポート	分析情報、ピーク情報
ISTD グループ ※1	内部標準グループを記載したレポート	分析情報、クロマトグラム、ピーク情報
MS-Libraryserch-Crosspeak ※1	MS ライブラリ検索結果表示の標準版	分析情報、MS ライブラリ検索パラメータ、ライブラリ検索結果
MS-Libraryserch-Long ※1	MS ライブラリ検索結果表示の詳細版	分析情報、MS ライブラリ検索パラメータ、クロマトグラム、ライブラリ検索結果
MS-Libraryserch-Short ※1	MS ライブラリ検索結果表示の簡易版	分析情報、ライブラリ検索結果

※1: OpenLAB CDS 2.x のみ ※2: OpenLAB CDS ChemStation のみ

# レポートテンプレートの編集方法

## レポートテンプレート編集の流れ

レポートテンプレートを展開後、以下の3つの部分を編集します。

- ① データファイル名、メソッドファイル名などの項目の編集
- ② クロマトグラムの表示の大きさ、縦軸、横軸などの編集
- ③ テーブル (表) の表示項目などの編集

**システム適格性試験**

Agilent Technologies

データファイル: C:\CHEM32\1\DATA\LR-2007-02-28-09-54-30\FB-0301.D  
 SS RSD 1  
 サンプル名: 2007/02/28 18:04:55      サンプルタイプ: コントロール  
 測定メソッド: XSR.M1.M      ロケーション: P1-F-02  
 解折メソッド: XSR.MDA.M      注入: 1/6  
 測定オペレータ: R. Homburg      注入量: 5.000  
 解折メソッド最終変更日: 2008/10/15 17:06:13

**①**

DAD1 A, Sig=2708 (Fid=901,10)

DAD1 B, Sig=254.19 (Fid=901,100)

**②**

**ESTD レポート (カウント法: 面積)**

RT [min]	シグナル	タイプ	面積	高さ	アモウント	化合物名
0.884	DAD1 A	BB	0.56336	0.4248	0.83983	o-desm tramadol (D)
1.435	DAD1 A	BB	0.52720	0.4285	1.81695	trans- tramadol (A)
1.573	DAD1 B	BB	205.42928	74.4034	994.13099	TRAMADOL
2.524	DAD1 A	BB	0.66453	0.5465	0.80206	des-hyd cis tramadol (C)
2.648	DAD1 A	BB	0.51422	0.4109	0.75791	des-hyd trans tramadol (B)

**③**

SST-TEST-2.RDL (11)      印刷日時: 2015/06/24 19:11:25      ページ 2 / 9

## ② クロマトグラムの編集

1. 挿入したいクロマトグラムの表示形式をノート部分にドラッグ & ドロップ。

2. ドロップした項目を右クリックして「プロパティ」を選択すると、クロマトグラムの縦軸、横軸、ラベル表示などが変更可能。

## ③ テーブル (表) の編集

1. 挿入したいテーブル (表) の表示形式をノート部分にドラッグ & ドロップ。

2. ドロップした項目を右クリックして「プロパティ」を選択すると、テーブル (表) の表示項目、形式などが変更可能。


## ① データファイル名、メソッドファイル名などの項目の編集

1. 挿入したい項目をノート部分にドラッグ & ドロップ。

2. ドロップした項目を右クリックして「プロパティ」を選択すると、項目の文字の大きさやフォントなどが変更可能。

# システム適格性試験 (SST) レポート

**システム適格性試験**



**統計レポート: サンプル**

化合物: o-desm tramadol (D)      シグナル: DAD1 A, Sig=270.8 Ref=500.100

注入 #	RT [min]	面積	高さ	分離度 <sub>JP</sub>	理論段数 <sub>JP</sub>	シンメトリー係数	サンプル名
1	0.884	0.56	0.42	0.00		1.2	SS RSD 1
2	0.883	0.53	0.42	0.00		1.1	SS RSD 1
3	0.882	0.57	0.43	0.00		1.2	SS RSD 1
4	0.884	0.56	0.43	0.00		1.1	SS RSD 1
5	0.884	0.56	0.42	0.00		1.1	SS RSD 1
6	0.883	0.59	0.43	0.00		1.2	SS RSD 1
平均	0.883	0.56373	0.42689			1.14125	
標準	0.000933	0.02034	0.00441			0.04893	
RSD	0.106	3.60783	1.03348			NaN (非数値)	4.28767

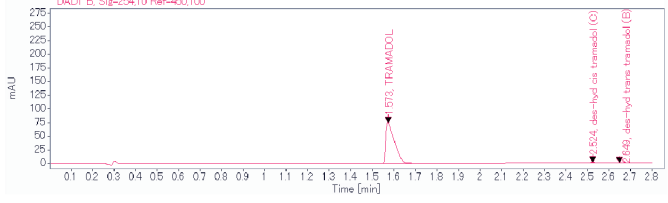
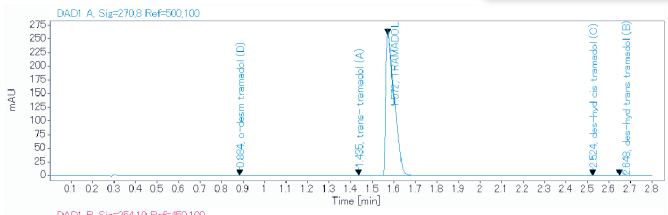
化合物: trans- tramadol (A)      シグナル: DAD1 A, Sig=270.8 Ref=500.100

注入 #	RT [min]	面積	高さ	分離度 <sub>JP</sub>	理論段数 <sub>JP</sub>	シンメトリー係数	サンプル名
							SS RSD 1
							SS RSD 1
							SS RSD 1
							SS RSD 1
							SS RSD 1
							SS RSD 1

**システム適格性試験**

データファイル: C:\CHEM32\1\DATA\LR-2007-2-2007-02-28.09-54-30\SS RSD 1  
 サンプル名: 2007/02/28 18:04:55  
 注入日時: XSR.M1.M      サンプルタイプ:  
 測定メソッド: XSR.MDA.M      ロケーション:  
 解析メソッド: R. Honsberg      注入:  
 測定オペレータ:      注入量:  
 解析メソッド最終変更日時: 2008/10/15 17:06:13

**①既存テンプレートの活用**  
 一見すると項目が多く複雑なレポートでも、標準でインストールされているテンプレートを活用することで、最小限の作業で必要な情報をすべて掲載。



**ESTD レポート (カウント法: 面積)**

RT [min]	シグナル	タイプ	面積	高さ	アmount [μg/ml]	化合物名
0.884	DAD1A	BB	0.56336	0.4248	0.83863	o-desm tramadol (D)
1.435	DAD1A	BB	0.52720	0.4285	0.81695	trans- tramadol (A)
1.573	DAD1B	BB	205.42928	74.4034	994.13099	TRAMADOL
2.524	DAD1A	BB	0.66453	0.5465	0.80206	des-hyd cis tramadol (C)
2.648	DAD1A	BB	0.51422	0.4109	0.75791	des-hyd trans tramadol (B)

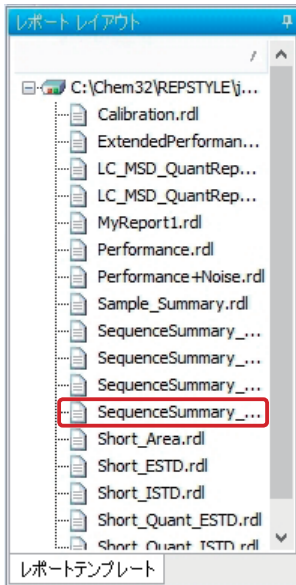
分析者	確認者	承認者

**②印鑑欄**  
 承認の際に必要な印鑑を押す欄は、表示名、大きさ、数、位置など、自由自在に設定可能。

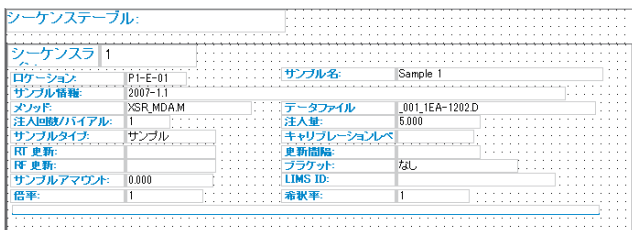


## ① レポートテンプレートの適用

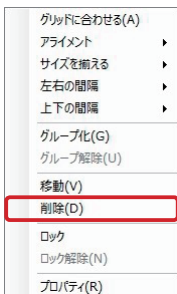
1. レポートテンプレートタブ内の「Sequene\_Summary\_standard.rdl」をダブルクリック。



2. シーケンステーブル上で右クリックし、「削除」を選択して、シーケンステーブルを削除。



このシーケンステーブルで右クリック

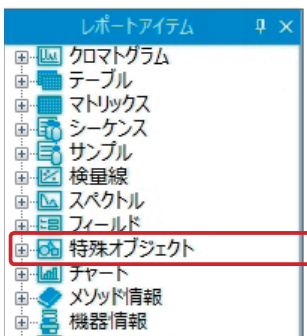


削除をクリック

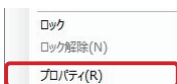
## ② 印鑑欄の作成

### A. 「分析者」、「確認者」、「承認者」枠の作成

1. レポートアイテムから、特殊オブジェクトの中の「テキスト」をドラッグ & ドロップ。



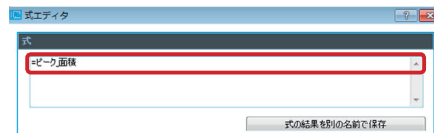
2. テキスト上で右クリックして「プロパティ」を選択。



3. 表示されたプロパティ画面で値タブを選択し、「fx」ボタンをクリック。

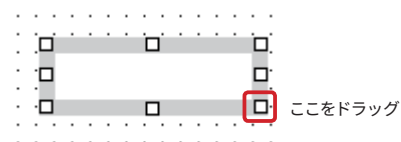


4. 式エディタで「分析者」と入力して保存。



赤枠のところで  
分析者 と入力

5. テキスト上の隅にカーソルを合わせ、マウスをドラッグしてボックスの大きさを変更。

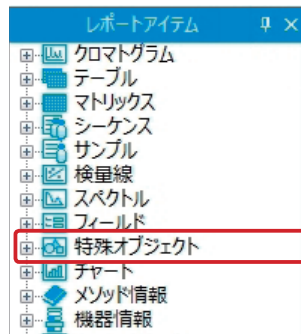


ここをドラッグ

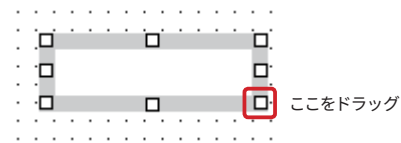
6. 確認者と承認者についても同様に 1~5 を実施。

### B. 印鑑欄の作成

1. レポートアイテムから、特殊オブジェクトの中の「テキスト」をドラッグ & ドロップ。



2. テキスト上の隅にカーソルを合わせ、マウスをドラッグしてボックスの大きさを変更。



ここをドラッグ

3. 確認者用と承認者用についても同様に 1 と 2 を実施。

# 不純物レポート

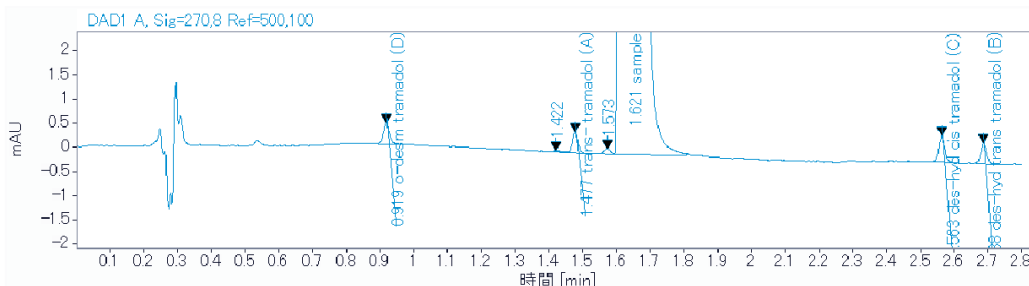
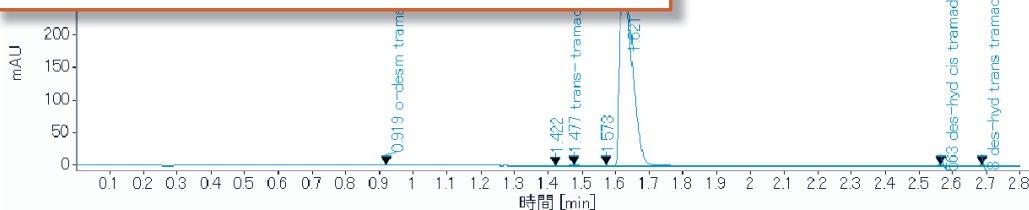
## パフォーマンスレポート



**データファイル:** C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\IR分科会デモデータ\EXAMPLE DATA\EXAMPLE DATA\OPENLAB CDS CHEMSTATION\LIR-2007-1-2007-02-27\_13-43-28\1FD-0401.D  
**サンプル名:** Standard L1  
**サンプル情報:** std1  
**サンプルアmount:** 0.000  
**サンプルタイプ:** キャリブレーション  
**機器:** Instrument 1  
**ロケーション:** P1-F-04  
**注入日時:** 2007/02/27 22:24:14  
**注入:** 1 / 1  
**注入量:** 5.000  
**操作者:** R. Honsberg

### ① 既存テンプレートの活用と編集

欲しいレポート形式が既存テンプレートにない場合も、必要な情報(例えばクロマトグラムの拡大図など)を追加して、テンプレートを自由にカスタマイズ可能。



シグナル: DAD1 A, Sig=270.8 Ref=500,100

RT [min]	k'	面積	高さ	シメトリ係数	ピーク幅 (50%)	理論段数 (JP)	分離度 (JP)	選択性
0.919	7.08	0.55	0.43	1.04	0.02	11974.2	-	-
1.422	11.51	0.05	0.04					
1.477	12.00	0.50	0.43					
1.573	12.84	0.12	0.10					
1.621	13.27	720.79	290.29					
2.563	21.56	0.68	0.54					
2.688	22.65	0.53	0.42	0.99	0.02	107547.6	3.851	1.051

### ② レポート上でも自由度の高い結果データ表現

Excelの計算式を使用するような算出結果の掲載も、レポート内に同様の計算式を設定することで、データをExcelに移すことなくレポート内で全ての結果を表現。

総ピーク面積	723.220
主ピーク面積	720.793
不純物ピークの面積%	0.336
判定	合格

デモとして、不純物ピークの面積%の閾値を2%に設定

## ①主ピーク面積と総ピーク面積の定義

### A. 主ピーク面積の定義

1. レポートレイアウトのテーブル→ピークと化合物の中にある「ピーク結果」をドラッグ & ドロップ。



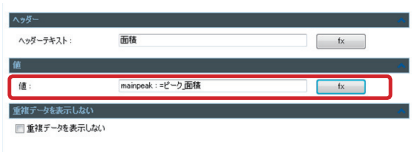
2. 表を右クリックして「プロパティ」を選択。



3. 画面中の「列のプロパティ」ボタンをクリック。



4. 値の「fx」ボタンをクリック。



5. 式の変数名に「= ピーク\_面積」を入力して、「式の結果を別の名前で保存」ボタンをクリック。



6. 計算変数名に「mainpeak」を入力して保存。



7. フィルタで、式に「= 化合物\_名」、演算子に「=」、値に「sample」を入力。

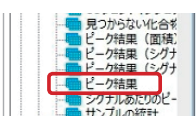


8. 詳細設定で、表示設定の「表示する」チェックをオフ。



### B. 総ピーク面積の定義

1. レポートレイアウトのテーブル→ピークと化合物の中にある「ピーク結果」をドラッグ & ドロップ。



2. 表を右クリックして「プロパティ」を選択。



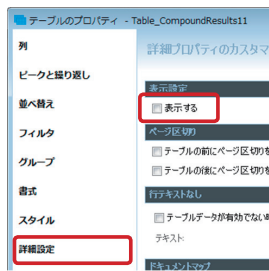
3. 画面中の「列のプロパティ」ボタンをクリック。



4. 集計計算で、「合計」チェックをオンにして、ラベルに「合計」、変数名に「areasum」を入力。



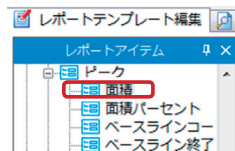
5. 詳細設定で、表示設定の「表示する」チェックをオフ。



## ②計算結果のレポートへの追加

### A. 総ピーク面積値の追加

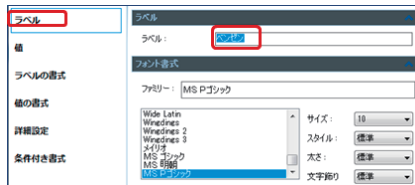
1. レポートレイアウトのフィールド→ピークの中にある「面積」をドラッグ & ドロップ。



2. 追加した項目を右クリックして「プロパティ」を選択。



3. ラベルを「総ピーク面積」に書き換え。



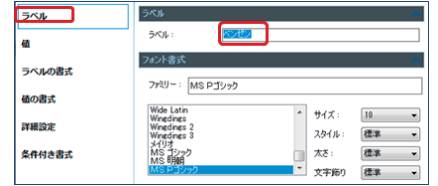
4. 値の編集画面で「=areasum」を入力。



### B. 主ピーク面積値の追加

1. ②の A.1 と A.2 の操作を行う。

3. ラベルを「主ピーク面積」に書き換え。



4. 値の編集画面で「=mainpeak」を入力。



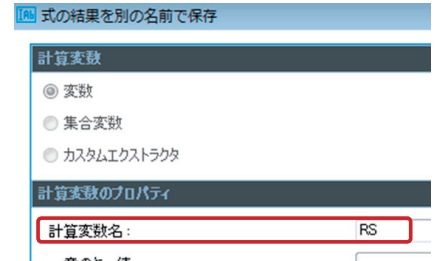
### C. 不純物ピークの面積 % 値の追加

1. ②の A.1 と A.2 の操作を行う。

2. 値の編集画面で、「RS := ((areasum-mainpeak)/areasum)\*100」を入力。



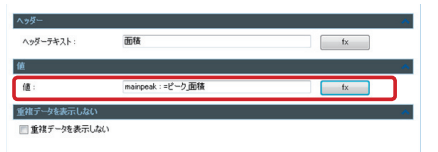
3. 計算変数名に「RS」を入力。



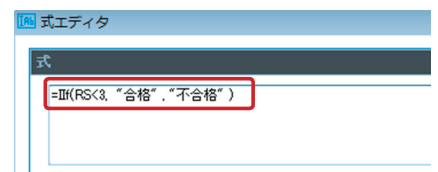
### D. 判定の追加

1. ②の A.1 と A.2 の操作を行う。

2. 値の「fx」ボタンをクリック。



3. 式エディタで、「=IF (RS<3, "合格", "不合格")」を入力して保存。  
\* 不純物ピークが 3 % 未満なら合格、3 % 以上なら不合格と表示される計算式です。



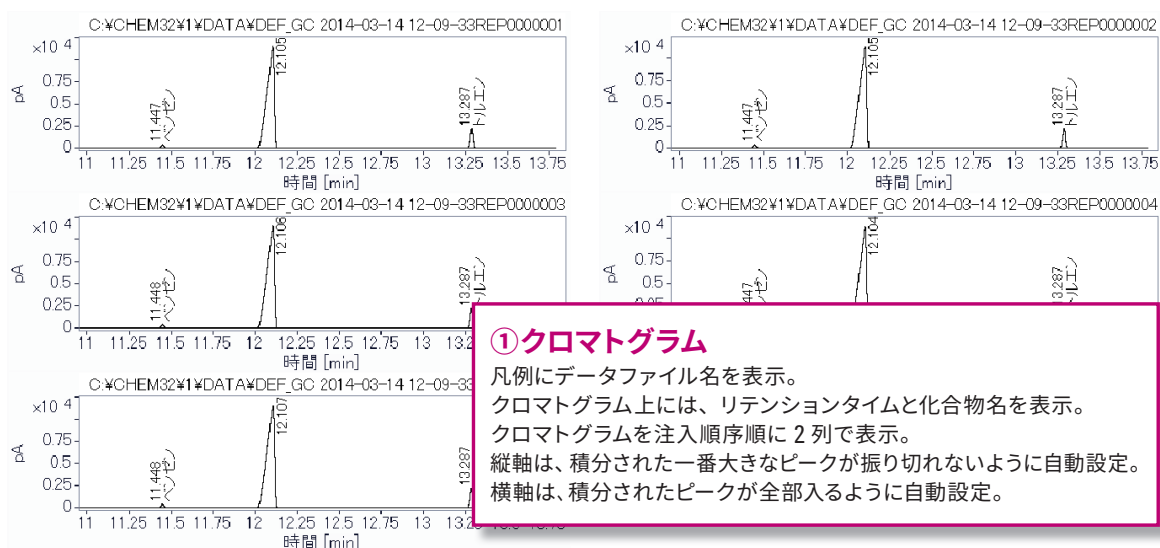
# 判定付きレポート

## 判定付化合物結果(シーケンスサマリレポート)



シーケンス名 DEF\_GC 2014-03-14 12-09-33  
 測定メソッド名 2536\_4.M  
 解析メソッド名 2536\_4.M  
 解析メソッド最終変更日時 2015/12/07 18:00:47

測定開始日時 2014/03/14 12:09:33  
 測定オペレータ システム



### ①クロマトグラム

凡例にデータファイル名を表示。  
 クロマトグラム上には、リテンションタイムと化合物名を表示。  
 クロマトグラムを注入順序順に2列で表示。  
 縦軸は、積分された一番大きなピークが振り切れないように自動設定。  
 横軸は、積分されたピークが全部入るように自動設定。

### 基準値

ベンゼン	2.00
トルエン	10.20

### ②基準値

基準値には下限値を設定していますが、範囲を設定することも可能。  
 基準値を変更する場合には、レポートテンプレート内の基準値を変更。

### 化合物名 ベンゼン

	サンプル名	保持時間 [分]	ピーク幅	面積	高さ	濃度 [ng/ul]
1	再現性サンプル	11.447	0.020	516.2337	399.9391	2.000
1	再現性サンプル	11.447	0.021	514.949	394.4178	1.995
1	再現性サンプル	11.448	0.021	528.4286	406.1231	2.047
1	再現性サンプル	11.447	0.020	513.7901	392.5465	1.991
1	再現性サンプル	11.448	0.020	535.1037	411.8769	2.073

### 化合物名 トルエン

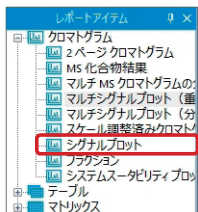
	サンプル名	保持時間 [分]	ピーク幅	面積	高さ	濃度 [ng/ul]
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2519.3979	2177.2207	10.000
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2519.2905	2172.5161	10.000
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2581.9165	2242.7595	10.248
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2521.7312	2172.7935	10.009
1	再現性サンプル	13.287	0.018	2623.0469	2259.4985	10.411

### ③表

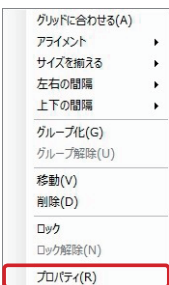
濃度が基準値より小さい場合に、セルの背景色を赤色で表示。  
 背景色だけでなく、文字色の変更、太字、斜体などに変えることも可能。

## ①クロマトグラムの作成

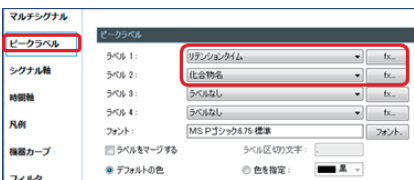
1. クロマトグラムの中の「シグナルプロット」をドラッグ & ドロップ。



2. クロマトグラム上で右クリックして「プロパティ」を選択。



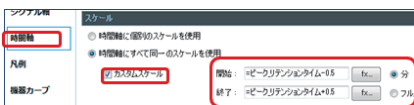
3. ピークラベルで、「リテンションタイム」と「化合物」を選択。



4. シグナル軸のスケールの設定方法で、n 番目に高いピークを「1」に、%を「100」に設定。



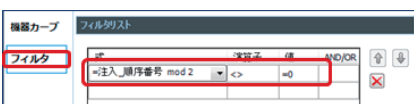
5. 時間軸のスケールの設定でカスタムスケールを選択し、開始に「= ピーク\_リテンションタイム - 0.5」終了に「= ピーク\_リテンションタイム + 0.5」を入力。



6. 凡例で、ラベル名に「= 注入\_データファイルディレクトリ + 注入\_データファイル名」を入力。

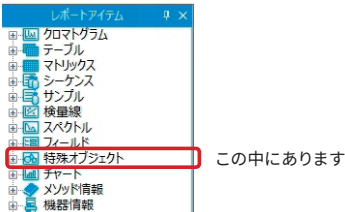


7. フィルタで、式に「注入\_順序番号 mod 2」、値に「=0」、奇数番号を表示させる方の演算子には「<>」、偶数の方には「=」を入力。

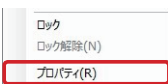


## ②基準値の作成

1. 特殊オブジェクトの中の「テキスト」をドラッグ & ドロップ。



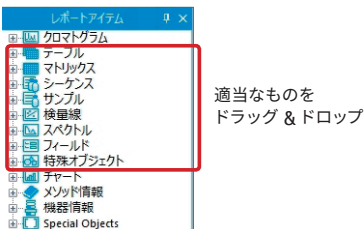
2. テキスト上で右クリックして「プロパティ」を選択。



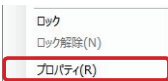
3. 値に「= 基準値」を入力。



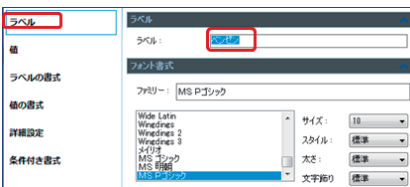
4. 適当なフィールド（例えば化合物名）をドラッグ & ドロップ。



5. ドロップした項目を右クリックして「プロパティ」を選択。



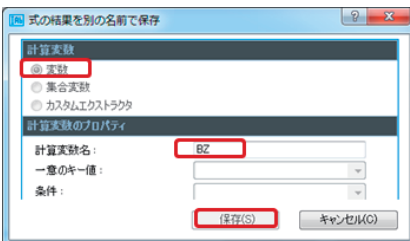
6. ラベルを「ベンゼン」に書き換え。



7. 値の「fx」をクリックし、式に「=2.0」（基準値）を入力後、「式の結果を別の名前でも保存」をクリック。



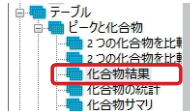
8. 「変数」を選択し、計算変数名に「BZ」を入力し、「保存」をクリック。



9. トルエン用にも 4~8 を設定。

## ③表の作成

1. テーブルの中の「化合物結果」をドラッグ & ドロップ。



2. 表を右クリックして「プロパティ」を選択。



3. 並べ替えで、式に「= 注入\_順序番号」、順序に「昇順」を入力。



4. 濃度の列のプロパティを開く。

5. 条件付き書式の背景色で、式に「= 化合物\_アmount - BZ」、演算子に「<」、値に「0」を入力。「条件を満たす場合に適用する設定」で、赤を選択。



6. 表の上に化合物フィールドをドラッグ & ドロップ。

7. 表と化合物フィールドをグループ化。

化合物名	サンプル名	検出濃度 (ppb)	ピーク	面積	高さ	濃度 (ppm)
1	標準性サンプル	11.447	0.020	518.2337	399.3391	2.000
1	標準性サンプル	11.447	0.011	514.548	394.4178	1.987

8. グループを右クリックして「プロパティ」を選択。

9. フィルタで、式に「= 化合物\_名」、演算子に「=」、値に「= ベンゼン」を入力。



10. ベンゼンのグループをコピーし、トルエン用の表を作成。

11. コピーしたグループ内のテーブルのプロパティを選択。

12. 濃度の列のプロパティを選択。

13. 条件付き書式で、「BZ」を「TOL」に書き換え。

14. コピーしたグループのプロパティを選択。

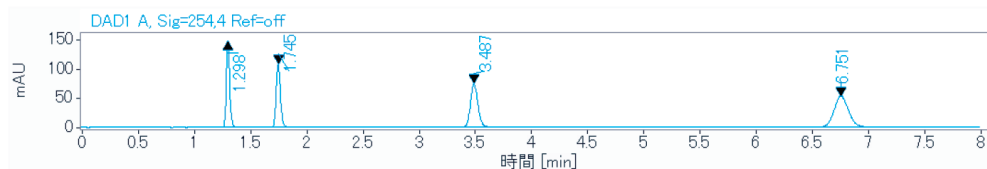
15. フィルタで、「ベンゼン」を「トルエン」に書き換え。



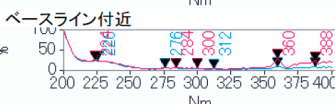
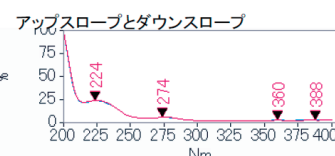
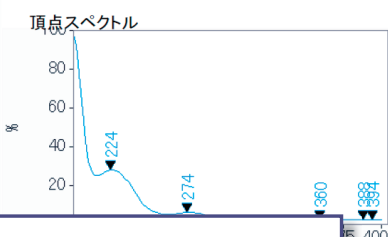
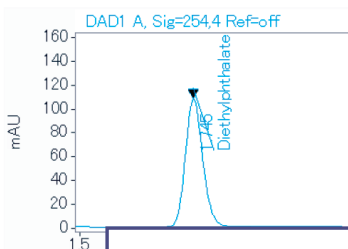
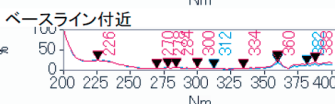
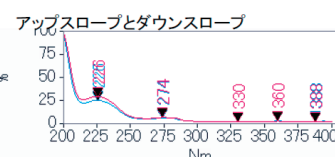
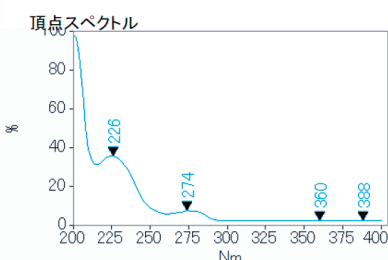
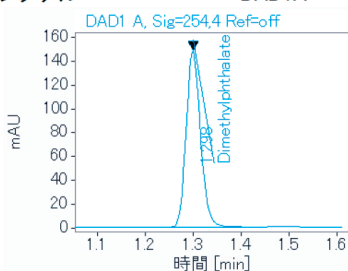
# スペクトルレポート

## スペクトルレポート

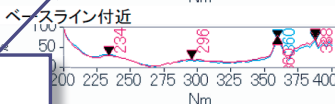
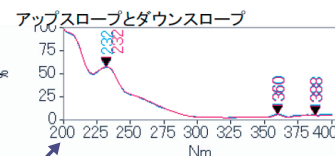
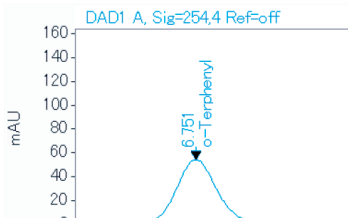
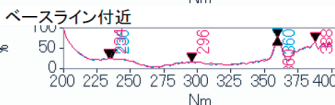
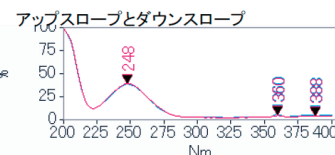
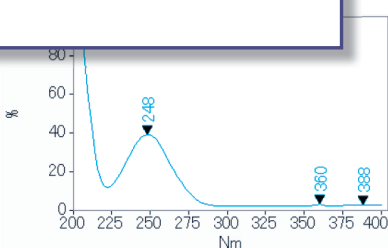
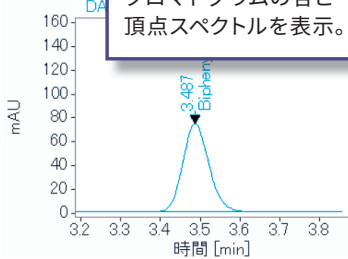
データファイル: C:\CHEM32\F2\DATA\DEMO\ISOCRA.D  
 サンプル名: Isocratic Standard Sample  
 注入日時: 2006/02/28 1:18:07      ロケーション: ハイアル 1  
 測定メソッド: ISOCRA.M                      解析メソッド: ISOCRA.M



シグナル DAD1A



**①ピーク拡大図と頂点スペクトル**  
 クロマトグラムの各ピークを拡大表示させ、そのピークの頂点スペクトルを表示。

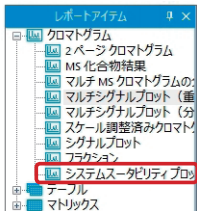


**②アップスロープ、ダウンスロープ、ベースラインスペクトル**  
 アップスロープとダウンスロープ部分のスペクトルと、ベースラインのスペクトルを併記して、ピーク内の不純物の存在評価に使用。

# ① ピーク拡大図と頂点スペクトルの作成

## A. ピーク拡大図の作成

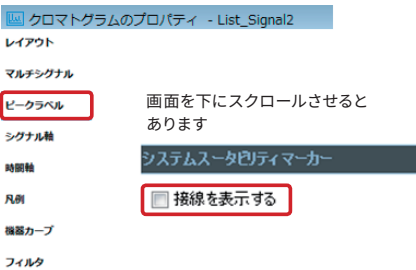
1. クロマトグラムの中の「システムスタートビリティプロット」をドラッグ & ドロップ。



2. クロマトグラム上で右クリックして「プロパティ」を選択。

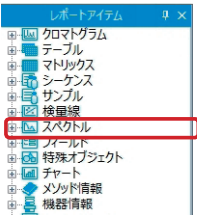


3. ピークラベルで、「接線を表示する」チェックをオフ。



## B. 頂点スペクトルの作成

1. スペクトルの中の「スペクトルプロット (ピークごと)」をドラッグ & ドロップ。



この中にあります

2. スペクトルプロット上で右クリックして「プロパティ」を選択。

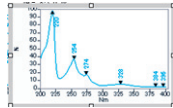
3. スペクトルの項目の、スペクトルの抽出方法で、「頂点」のみチェックをオン。スペクトルの極大波長と極小波長で、「極大波長にラベルする」チェックをオン。



# ② アップスロープ、ダウンスロープ、ベースラインスペクトルの作成

## A. アップスロープとダウンスロープスペクトルの作成

1. ①の B で作成したスペクトルプロットをコピー & ペースト。

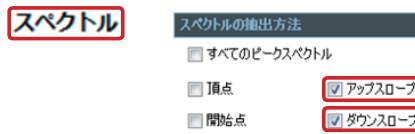


スペクトルを選んで



コピー (左) & ペースト (右)

2. ペーストしたスペクトルプロットを右クリックして「プロパティ」を選択。
3. スペクトルの抽出方法で、「アップスロープ」と「ダウンスロープ」チェックをオン。

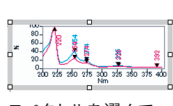


4. スペクトルラベルの項目の中のスペクトルラベルで、「スペクトルラベルを表示する」チェックをオフ。



## B. ベースラインスペクトルの作成

1. ②の A で作成したスペクトルプロットをコピー & ペースト。



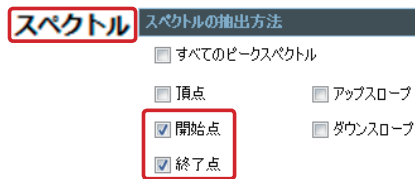
スペクトルを選んで



コピー (左) & ペースト (右)

2. ペーストしたスペクトルプロットを右クリックして「プロパティ」を選択。

3. スペクトルの抽出方法で、「開始点」と「終了点」チェックをオン。

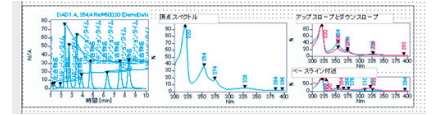
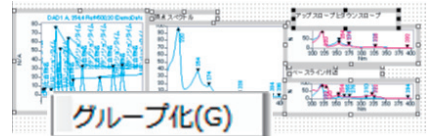


4. スペクトルラベルの項目の中のスペクトルラベルで、「スペクトルラベルを表示する」チェックをオフ。



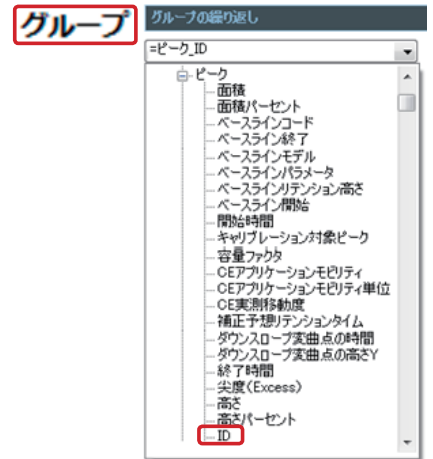
# ③ その他のピークとスペクトルの作成

1. ピーク表示したクロマトグラムと3つのスペクトルを全て囲むようにドラッグしてから、右クリックして「グループ化」をクリック。

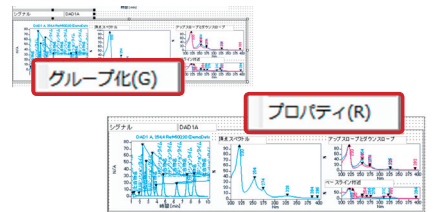


2. グループを選択状態にして右クリックして「プロパティ」を選択。

3. グループの項目のグループの繰り返しにあるプルダウンメニューから、ピークの中にあるIDを選択して、「=ピーク\_ID」を表示。



4. ピークごとの表示部分と、シグナル名を選択表示にしてグループ化し、プロパティを設定。



5. グループの項目のグループの繰り返しを「=シグナル\_名」に設定。フィルタの項目のフィルタリストで、式に「=シグナル\_名」、演算子に「含む」、値に「\*DAD\*」を設定。

\*このフィルタでチャンネルを指定することも可能です (例: \*DAD1A\*)。この部分は、シグナル (チャンネル) ごとの振り分け表示部分になります。



6. グループを選択状態にして、コピー & ペーストして、他のピークとスペクトルを表示。

# 局方レポート

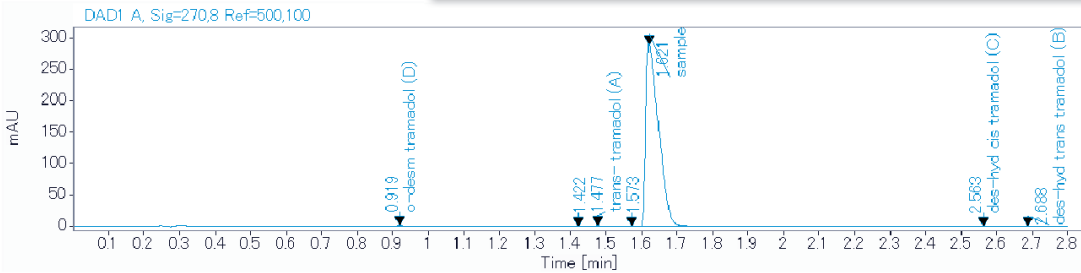
## パフォーマンスレポート



データファイル C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\IR分科会デモデータ\EXAMPLE DATA\EXAMPLE DATA\OPENLAB CDS CHEMSTATION\LIR-2007-1-2007-02-27\_13-43-28\*1FD-0401.D  
 測定オペレータ: R. Honsberg  
 サンプル名 Standard L1  
 測定メソッド XSR\_M1.M  
 シーケンス名 LIR-2007-1 2008  
 最終更新者 cdsadmin  
 解析メソッド XSR\_MDA.M  
 解析メソッド最終変更日時 2015/06/17 20:02  
 機器管理No. Instrument 1

### ①既存テンプレートの活用

一見すると項目が多く複雑なレポートでも、標準でインストールされているテンプレートを活用することで、最小限の作業で必要な情報をすべて掲載。



シグナル: DAD1 A, Sig=270.8 Ref=500,100

RT	面積	理論段数_JP	シンメトリー係数	分離度_JP	化合物名
0.919	0.54697	11974.2	1.04		o-desm tramadol (D)
1.422	0.05290	36199.3	1.22	15.90	
1.477	0.49910	36699.1	1.02	1.83	trans- tramadol (A)
1.573	0.12417	34754.1	0.90	2.96	
1.621	720.79297	9319.1	2.17	0.97	sample
2.563	0.67761	102921.4	0.99	19.05	des-hyd cis tramadol (C)
2.688	0.52601	107547.6	0.99	3.85	des-hyd trans tramadol (B)

RT	面積	理論段数_USP	シンメトリー係数	分離度_USP	化合物名
0.919	0.54697	12502.30374	1.04		o-desm tramadol (D)
				6.10139	
				8.2650	trans- tramadol (A)
				9.4475	
				9.3161	sample
				8.18694	des-hyd cis tramadol (C)
				8.0888	des-hyd trans tramadol (B)

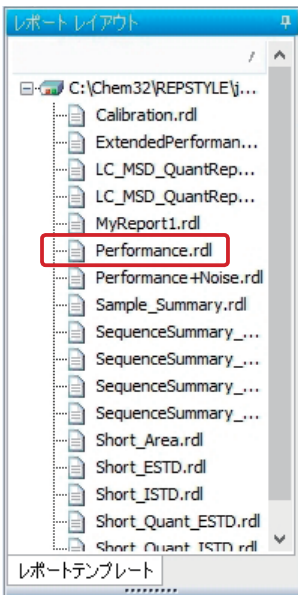
### ②日・米・欧州薬局方に対応した項目

分離度、理論段数、S/N比など、各種薬局方で計算式が異なる結果項目でも、計算式を毎回入力することなく、項目を追加するだけで表示が可能。

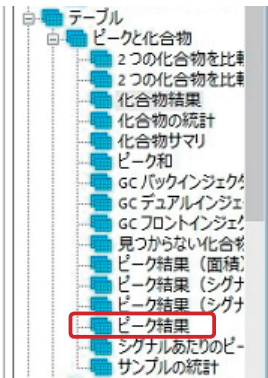
RT	面積	理論段数_EP	シンメトリー係数	分離度_EP	化合物名
0.919	0.54697	11974.20985	1.04		o-desm tramadol (D)
1.422	0.05290	36199.29954	1.22	15.90136	
1.477	0.49910	36699.07590	1.02	1.82768	trans- tramadol (A)
1.573	0.12417	34754.11001	0.90	2.95733	
1.621	720.79297	9319.07509	2.17	0.97048	sample
2.563	0.67761	102921.35843	0.99	19.04611	des-hyd cis tramadol (C)
2.688	0.52601	107547.56409	0.99	3.85120	des-hyd trans tramadol (B)

## レポートテンプレートからテーブルを編集

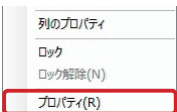
1. レポートレイアウトのレポートテンプレートタブから「Performance.rdl」をダブルクリック。



2. レポートレイアウトのテーブル→ピークと化合物の中にある「ピーク結果」をドラッグ & ドロップ。

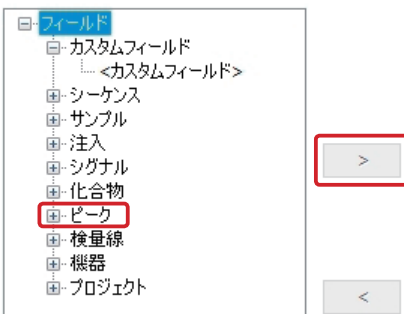


3. 表を右クリックして「プロパティ」を選択。



4. 使用可能フィールドのピークの中にある「分離度 \_JP」を選択後、「右矢印」ボタンをクリックして、分離度 \_JP の列を追加。

使用可能フィールド



5. 同様に、ピークの中にある「理論段数 \_JP」と「テーリングファクタ」(シンメトリー係数に該当) も選択後、右矢印ボタンをクリックしてそれぞれの列を追加。

6. 画面中の「列のプロパティ」ボタンをクリック。



7. テーブルレイアウトに追加されたテーリングファクタの列のヘッダをダブルクリックし、「シンメトリー係数」を入力。

テーブルレイアウト

面積	高さ	RF	テーリングファクタ
<値>	<値>	<値>	<値>
<値>	<値>	<値>	<値>
<値>	<値>	<値>	<値>

赤枠の部分が  
列のヘッダ

8. テーブルのプロパティの画面下部にある「OK」ボタンをクリック。



9. USP 用の表に分離度 \_USP、理論段数 \_USP、テーリングファクタ (シンメトリー係数) の列を追加する工程を、EP 用の表に分離度 \_EP、理論段数 \_EP、テーリングファクタ (シンメトリー係数) の列を追加する工程を、JP の場合と同様に 2~7 を繰り返す。

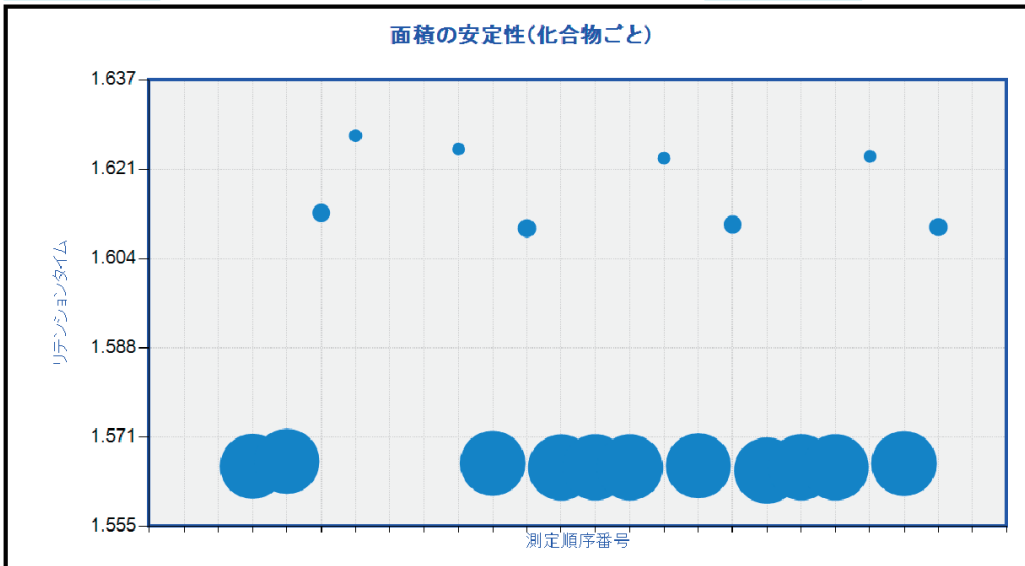
# リテンションタイムとピーク面積の安定性

## シーケンスサマリレポート



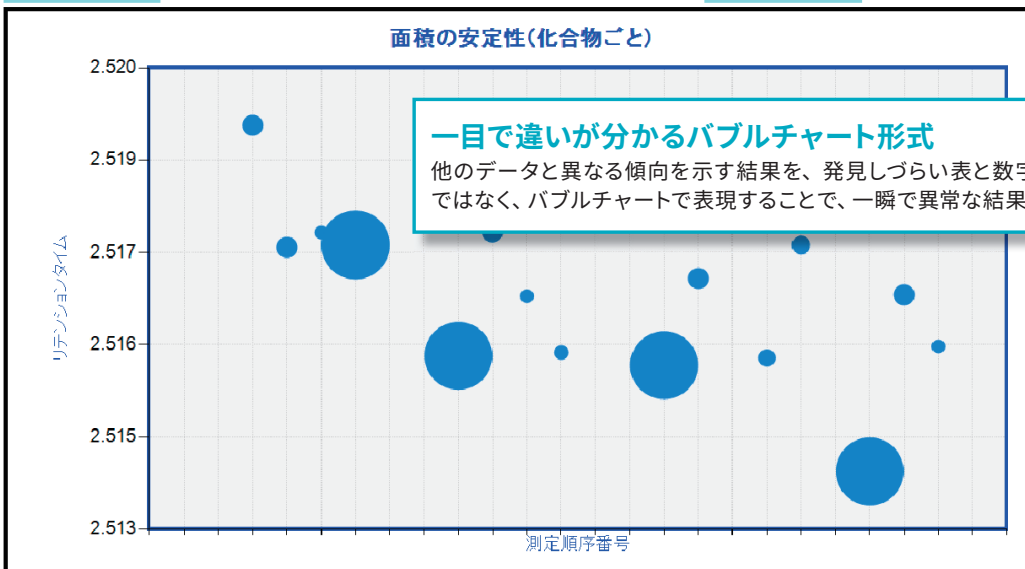
化合物: TRAMADOL

予想 RT: 1.601



化合物: des-hyd cis tramadol (C)

予想 RT: 2.516



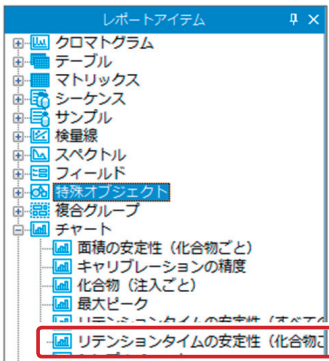
### 一目で違いが分かるバブルチャート形式

他のデータと異なる傾向を示す結果を、発見しづらい表と数字の羅列ではなく、バブルチャートで表現することで、一瞬で異常な結果を発見。



## バブルチャートの作成

1. チャートの中の「リテンションタイムの安定性 (化合物ごと)」をドラッグ & ドロップ。



2. クロマトグラム上で右クリックして「プロパティ」を選択し、チャートのプロパティをクリック。



3. チャートタブの、チャートタイプの選択のところで「バブル」を選択。



4. タイトルで、チャートのメインタイトルに「面積の安定性 (化合物ごと)」、X 軸に表示させるラベルに「測定順序番号」、Y 軸に表示させるラベルに「リテンションタイム」を入力。



5. データタブで、X 軸を選択で「サンプル\_測定順序番号」、Y 軸を選択で「ピーク\_リテンションタイム」、サイズを選択で「ピーク\_面積」を選んだ後、それぞれ「右矢印」ボタンをクリック。



# OpenLAB ソフトウェアで開かれる未来

ラボ管理を効率化する OpenLAB ソフトウェア製品群により、データ収集、解析、共有を通じてビジネスの価値を高めることができます。また、アジレントと知識豊富なプロフェッショナルサービスコンサルタントが、あらゆる段階でお客様をサポートします。豊富な製品群と充実したサポートにより、お客様のラボのさらなる効率アップを実現します。

## クロマトグラフィーデータシステム — OpenLAB CDS

- アジレント製とアジレント製以外の両方の機器を制御
- データ解析およびレポート作成の高速化
- ラボ全体を一元表示できるビューで機器を監視
- ラボと IT のプロセスを合理化

## データ管理 — OpenLAB ECM

- 時間や場所に関係なく、データと情報にアクセス可能
- 実験の開始から終了までファイルを保護
- 規制遵守の業務をサポートし、知的財産を管理
- 紙の使用量を削減

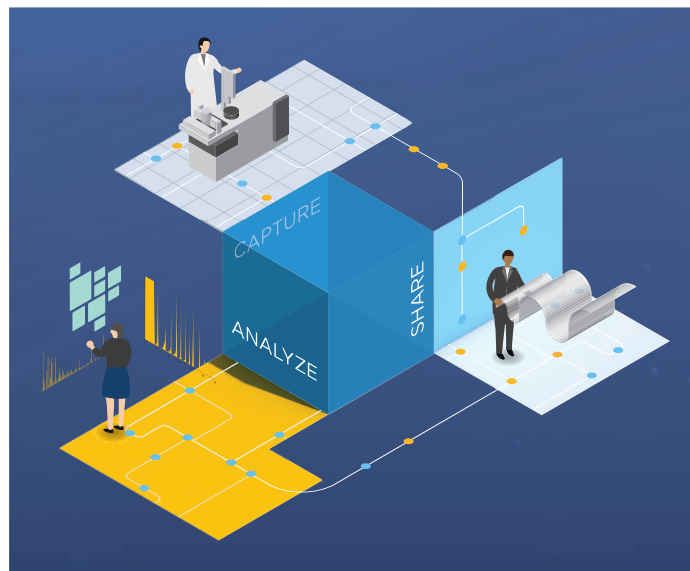
## 電子ラボノート — OpenLAB ELN

- 複数の分析システムからラボの結果を取得
- 高度なクエリ管理による、迅速なデータの検索が可能
- 共同研究や共同作業の簡素化
- 知的所有権の保護と記録のトレーサビリティの維持

## カスタムトレーニングコース — OpenLAB University

ラップトップ PC を使用して、インテリジェントレポートの概要とテンプレートの作成方法を学習することができるトレーニングコース、「OpenLAB CDS ChemStation/EZChrom インテリジェントレポートの使い方」を開設しています。

詳しくは、<https://www.chem-agilent.com/customertr/?cat=29> をご覧いただくか、コールセンター (0120-477-111) または弊社販売店までご連絡ください。



アジレント・テクノロジー株式会社

本社 〒192-8510 東京都八王子市高倉町9-1

カスタムコンタクトセンター ☎0120-477-111

email\_japan@agilent.com

www.agilent.com/chem/jp

©アジレント・テクノロジー 2017

Printed in Japan. March 1, 2017

5991-6805JAJP



Agilent Technologies