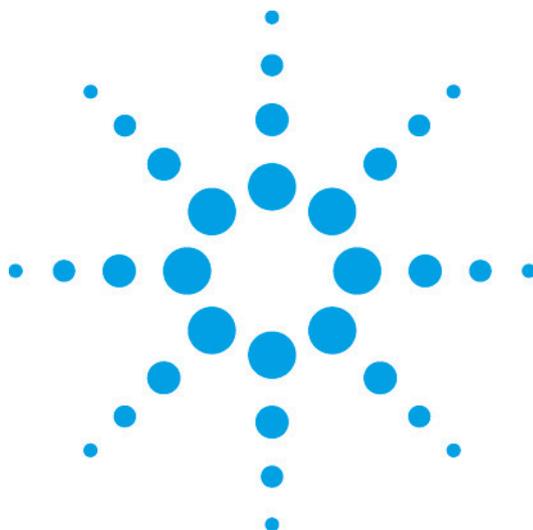


---

## Agilent ChemStation



Agilent 1200 シリーズ  
ケミステーション  
基本操作マニュアル

Rev. B. 04. 0x 以降  
2010年 4月 改訂

---

---

## ご注意

1. 本書に記載した内容は、予告なしに変更することがあります。
2. 本書は、内容について細心の注意をもって作成いたしましたが、万一ご不審な点や誤り、記載もれ等、お気付きの点がございましたら当社までお知らせください。
3. 当社では、下記の項目を補償の対象から除外いたします。
  - ユーザの誤った操作に起因する機器などの損傷、性能上のトラブル、損害
  - 本装置の本来の用途以外の使用に起因する機器などの損傷、性能上のトラブル、損害
  - 本装置の不適切なユーテリティや使用環境に起因する機器などの損傷、性能上のトラブル、損害
  - 当社が指定した業者以外で本装置の修理や改造をしたことに起因する機器などの損傷、性能上のトラブル、損害
  - 当社提供外のソフトウェアの使用による信頼性、機器などの損傷、性能上のトラブル、損害
  - 分析結果に基づく損失
4. 本書の内容の一部または全部を無断で複写、転載したり、他のプログラム言語に翻訳することは法律で禁止されています。複写、転載等の必要が生じた場合は、当社にお問い合わせください。
5. 本製品パッケージとして提供した本マニュアル、フレキシブル・ディスク、テープ・カートリッジまたはCD-ROM等の媒体は本製品用だけにお使いください。プログラムをコピーする場合はバックアップ用だけにしてください。プログラムをそのままの形で、あるいは変更を加えて第三者に販売することは固く禁じられています。

## 分析機器を安全にお取り扱いいただくために

1. 本分析機器は、当該分野に関して基礎的知識のある人が使用することを前提として設計、製作されています。
2. 分析機器内部には、高温部、高圧部、高電圧部、可燃性ガス/液体、毒性ガス/液体、高輝度部、放射線源等が存在することがあります。当該製品を取り扱う際は、本書の安全に関する指示事項に従ってください。なお、これらの指示事項に反する扱いをされた場合、当社は安全性を保証いたしません。
3. 本説明書は、お求めいただいた機器を安全に、正しく操作するために必要な事項が書かれています。本書をよく読み、内容を理解してから機器の操作を開始してください。
4. 本書を読んで不明な点、あるいは機器を操作して不明な点や異常がありましたら、本書巻末に記載されている当社コールセンターにお問い合わせください。
5. 本説明書は、必要なときにすぐ取り出せる場所に、大切に保管してください。万一、本説明書を汚損、紛失した場合には新本を購入してください。
6. シンボルマークの種類と意味は下記の通りです。ただし、下記のシンボルマークが全て本製品に使用されているとは限りません。

シンボルマーク	意 味
	一般的な警告、注意、危険の通告
	特定の条件下での、高温による傷害の可能性の注意、警告
	特定の条件下での、感電の可能性の注意、警告
	特定の条件下での、発火の可能性の注意、警告
	放射性同位元素の使用による危険の警告
	保護接地端子。接地要求
<b>危険/DANGER</b>	無視して取扱いを誤った場合、死亡又は重傷を負う、切迫した危険状態の存在を示す
<b>警告/WARNING</b>	無視して取扱いを誤った場合、重傷又は軽傷を負う、潜在的危険の存在を示す
<b>注意/CAUTION</b>	無視して取扱いを誤った場合、物的損害が発生する潜在的危険の存在を示す

---

—目次—

<b>第1章 システムの始動</b> .....	<b>9</b>
1-1. 装置の電源投入 .....	9
1-2. ケミステーションの起動 .....	10
1-3. ケミステーションのナビゲーションパネル .....	11
<b>第2章 メソッド作成</b> .....	<b>12</b>
<データ取り込みのフロー> .....	12
2-1. シーケンスコンテナ、メソッドの概念 .....	14
<ユニークなフォルダのオン/オフ設定> .....	20
<メソッド/シーケンス/データ保存パスの設定> .....	21
2-2. メソッドの編集 .....	22
2-2-1. 初期メソッドの読み込み .....	22
2-2-2. メソッドパラメータの編集 .....	23
2-2-2-1. モダンビューでのメソッドパラメータの編集 .....	23
<メソッド編集項目> .....	24
<メソッド情報> .....	25
<機器メソッド/データ取り込みに関する設定> .....	26
ウエルプレートサンプラのトレイの割り当てについて .....	38
2-2-2-2. クラシックビューでのメソッドパラメータの編集 .....	52
<メソッド編集項目> .....	53
<メソッド情報> .....	54
<機器メソッド/データ取り込みに関する設定> .....	55
ウエルプレートサンプラのトレイの割り当てについて .....	67
補足：冷却機能付きオートサンプラの温度設定 .....	83
2-2-2-3. メソッドパラメータの編集・データ解析部分 .....	85
<データ解析に関する設定> .....	85
<ランタイムチェックリスト> .....	90

---

---

2-3. メソッドファイルの保存 .....	91
2-4. メソッドの一部変更 .....	93
<b>第3章 システムの起動 .....</b>	<b>96</b>
3-1. 分析装置の準備 .....	96
3-2. 分析装置の起動順序 .....	97
3-3. 分析装置の起動方法 .....	99
ポンプのオン .....	99
3-4. モニタ表示 .....	101
<b>第4章 分析の実行 .....</b>	<b>105</b>
4-1. 1サンプルのみの分析 .....	105
4-1-1. サンプル情報の設定 .....	105
4-1-2. メソッドの実行 .....	109
4-2. シーケンス .....	111
<シーケンスコンテナの設定> .....	111
4-2-1. シーケンステーブルの設定 .....	113
4-2-2. シーケンスパラメータの設定 .....	118
4-2-3. シーケンスファイルの保存 .....	121
4-2-4. シーケンスの実行 .....	122
4-2-5. シーケンスの一時停止 .....	123
<b>第5章 システムの終了 .....</b>	<b>125</b>
ポンプのオフ .....	126

---

---

<b>第6章</b>	<b>データ解析：1本分析及びユニークなフォルダ作成をオフにした場合</b>	
	(シーケンスコンテナをオフにした場合) .....	<b>130</b>
6-1.	データ読み込み .....	133
6-2.	積分 .....	134
6-2-1.	自動積分 .....	134
6-2-2.	積分条件を変更して積分 .....	135
6-2-3.	マニュアル積分 .....	137
6-3.	定量 .....	141
6-3-1.	絶対検量線法 (ESTD) による定量 .....	142
6-3-1-1.	未知濃度サンプルのレポートの印刷 .....	149
6-3-2.	内部標準法 (ISTD) による定量 .....	150
<b>第7章</b>	<b>データ解析：ユニークなフォルダ作成をオンにした場合</b>	
	(シーケンスコンテナをオンにした場合) .....	<b>152</b>
7-1.	データ読み込み .....	154
7-2.	積分 .....	155
7-2-1.	マニュアル積分 .....	155
7-3.	定量 .....	156
7-3-1.	シーケンスメソッドを用いた各データの定量 .....	156
7-3-1-1.	レポートの印刷 .....	157
7-3-2.	シーケンスコンテナ内の連続再解析 .....	158
	<補足：リキャリブレーションを含んだシーケンス再解析による定量> .....	161
<b>第8章</b>	<b>スペクトル解析 .....</b>	<b>162</b>
8-1.	スペクトルオプション .....	162

---

---

8-2. スペクトルの表示・印刷.....	167
8-2-1. スペクトルの表示方法.....	167
8-2-2. スペクトルデータの印刷.....	168
8-3. 純度チェックの実行.....	169
8-4. 等高線表示.....	172
8-4-1. クロマトグラムの表示.....	174
8-4-2. クロマトグラムの抽出.....	175
8-5. 3次元表示.....	176
8-6. スペクトルライブラリサーチ.....	177
8-6-1. 新規ライブラリの作成.....	177
8-6-2. サーチ条件の設定.....	182
8-6-3. ライブラリサーチの実行.....	183
8-6-4. ライブラリ情報の編集.....	185
8-6-5. 自動ライブラリサーチ.....	185
<b>第9章 イージーシーケンスの利用 .....</b>	<b>189</b>
9-1. イージーシーケンスとは (EASY SEQUENCE) .....	189
9-2. イージーシーケンステンプレートを作成する.....	192
9-3. イージーシーケンスをキューに追加する.....	197
9-4. イージーシーケンスを実行する.....	201
9-5. キューの操作.....	203
9-6. 同じ、または類似のイージーシーケンスを実行する.....	206
9-7. 周期的キャリブレーションのプランを作成する.....	208
9-8. イージーシーケンスの設定と操作のヒント.....	211

---

## 第1章 システムの始動

### 1-1. 装置の電源投入

各機器のメイン電源スイッチを下記の順番で投入します。

#### 【LAN 接続の場合】

プリンタ、モニタ



イニシャライズを確認する

コンピュータ



イニシャライズを確認する

Agilent 1200/1100 各モジュール

Windows を起動中、ログオンの開始 (Begin Logon) ウィンドウが表示されます。

指示に従って Ctrl + Alt + Delete キーを同時に押します。(設定によっては、この操作が不要な場合もあります。)

ログオン情報 (Logon Information) でユーザー名とパスワードを入力します。ユーザー名に対するパスワードは下表のとおりです。

OS の種類	ユーザー名 (User Name)	パスワード (Password)	システムを変更する権限
Windows XP	Administrator	3000hanover	有り。 通常こちらを使用します。
Windows XP	Chemist	hp	無し
Windows Vista	admin	3000hanover	有り。 通常こちらを使用します。
Windows Vista	Chemist	hp	無し

---

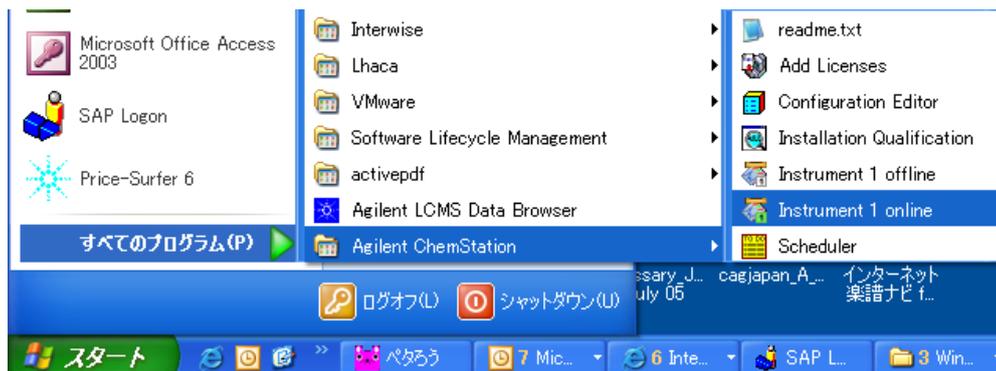
## 1-2. ケミステーション (ChemStation) の起動

Windows の起動後、Windows のタスクバーから下記のように選択します。

スタート (Start) → プログラム (Programs)  
→ Agilent ChemStation → 機器1オンライン (Instrument 1 Online)

以下、コンピュータのコマンドをアンダーラインで表示します。

ケミステーション (Agilent Chemstation) を選択します。

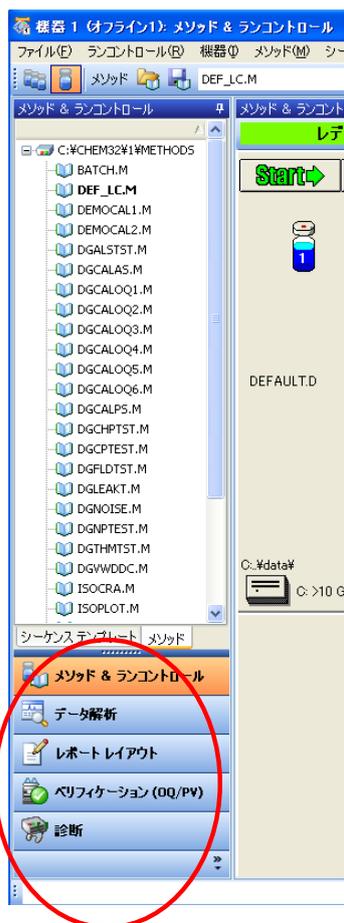


機器1オンライン (Instrument 1 Online) をクリックし、ケミステーションを起動します。

### 1-3. ケミステーション (ChemStation) のナビゲーションパネル

Agilent 1200/1100 シリーズをコントロールする場合、ケミステーションは次の5つの画面で構成されています。

1. Method and Run Control : メソッド&ランコントロール
2. Data Analysis : データ解析
3. Report Layout : レポートレイアウト
4. Verification (OQ/PV) : ベリフィケーション (OQ/PV)
5. Diagnosis : 診断



B. 02. 01 以降のケミステーションでは、左記に示すように、画面左にナビゲーションパネルが表示され、このパネルから、各画面に移動することが可能です。

パネル上部のツリー表示からファイル選択を行うことで、直接、シーケンスファイルやメソッドファイルを読み込むことができます。(シーケンスタブ、メソッドタブ等で、ツリー表示を切り替えます。)

あるいは、表示 (View) の中で選択することにより、画面を切り替えることができます。

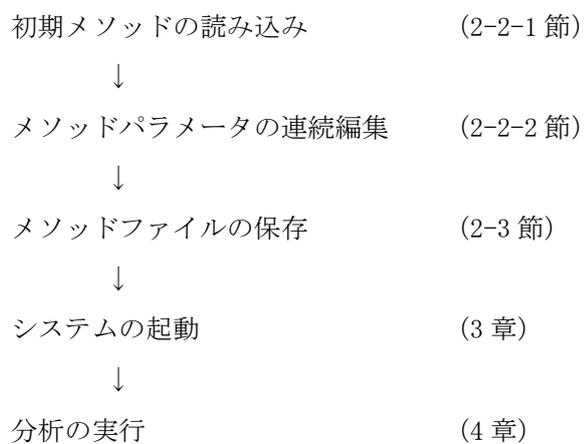
表示(V)	中断(A)	ヘルプ(H)
✓ 1		
2		
3		
4		
5		
6		

---

## 第2章 メソッドの作成

### <データ取り込みのフロー>

データ取り込みは、以下のフローで行います。

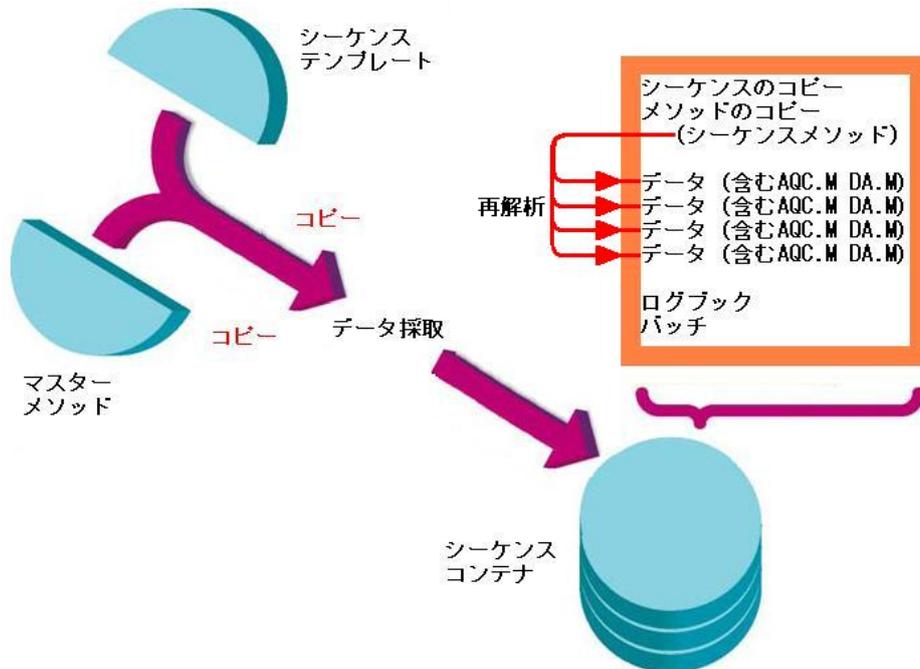


本章では弊社スタンダードカラムとサンプルを用いて分析を行うために、以下の条件のメソッドを作成します。カラムの状態により、分析条件が変更されることがあります。

条 件	
カラム	Zorbax Eclipse XDB-C8カラム 150mm x 4.6mm(内径)
サンプル	アイソクラティック標準試料*1
	ジメチルフタレート Dimethylphthalate :DMP 0.15wt%
	ジエチルフタレート Diethylphthalate :DEP 0.15wt%
	ビフェニル Biphenyl (Diphenyl) 0.01wt%
	o-ターフェニル o-Terphenyl 0.03wt%
移動相	水：アセトニトリル = 30:70 (V/V)
流量	1.5 mL/min
ヒーターブロック温度	25°C または 室温
検出器	ダイオードアレイ検出器 (DAD)
	測定波長／バンド幅 254/4 nm
	リファレンス波長／バンド幅 500/100 nm
	ピーク幅(レスポンスタイム) >0.05 min(1 sec)
	スリット 2 nm
	UV-VIS検出器 (VWD)
	測定波長 254 nm
	ピーク幅(レスポンスタイム) >0.05 min(1 sec)
	プログラマブル3D蛍光検出器 (FLD)
	励起波長 246 nm
	測定波長 317 nm
	PMTゲイン 10
	ピーク幅(レスポンスタイム) >0.2 min(4 sec)
	示差屈折率検出器 (RID)
	光学系温度制御 None
	ピーク幅(レスポンスタイム) >0.2 min(4 sec)
注入量	1 μL (DAD, VWD, FLD)
	20 μL (RID)

\*1 プログラマブル 3D 蛍光検出器の場合には、アセトニトリルで 10 倍希釈して使用します。

## 2-1. シーケンスコンテナ、メソッドの概念



本節の詳細については、別冊の“新しいChemStation ワークフロー入門”を参照ください。

ChemStation B.02.01 以上ではデータファイルとメソッド間の統合性を強化するために、新しいデータ管理基本構造を搭載しています。

**マスターメソッド：** フォルダ Chem32¥1¥methods (Default 設定) のメソッドは **マスターメソッド** となります。これは、取り込み中とデータ解析中は変更されません。

**シーケンステンプレート：** フォルダ Chem32¥1¥sequence (Default 設定) 内のシーケンスは **シーケンステンプレート** となります。

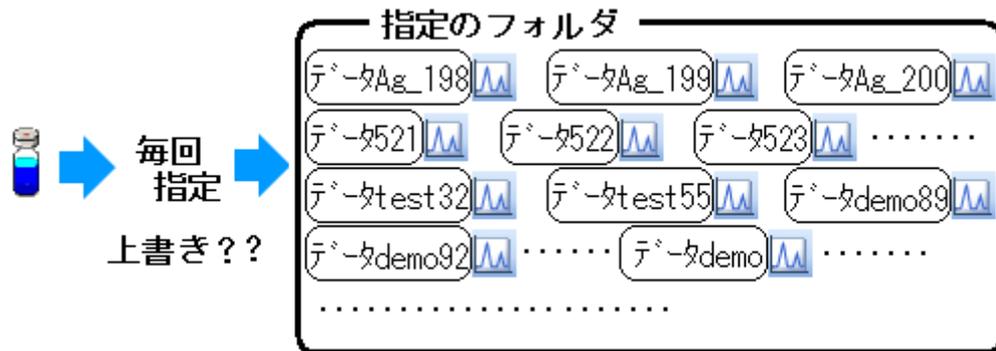
データ保存パターンはシングルランかシーケンスデータ採取かによって異なります。

- 1：シングルサンプルの分析の場合
- 2：ユニークなフォルダを**オフ**にする場合
- 3：ユニークなフォルダを**オン**にする場合 (シーケンスコンテナ**有り**の場合)

以下に特徴を紹介します。

1. シングルサンプルの分析の場合：

指定したサブディレクトリの下にデータファイル (\*.d) が保存されます。

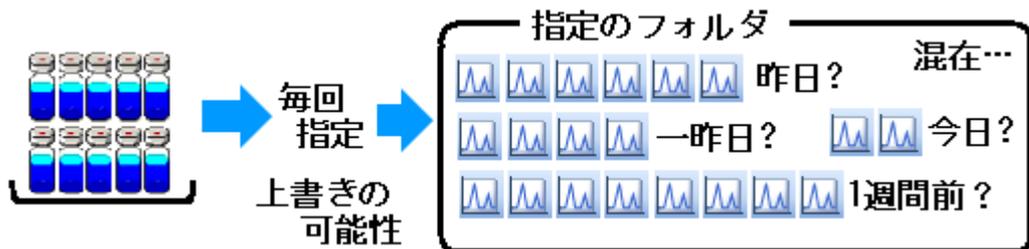


2. ユニークなフォルダをオフにする場合：

指定したサブディレクトリの下にデータファイル (\*.d) が保存されます。

毎回、サブディレクトリを指定する必要があります。

また、同じフォルダを指定すると、データファイル名が同じ場合、上書きされます。



---

### 3. ユニークなフォルダをオンにする場合

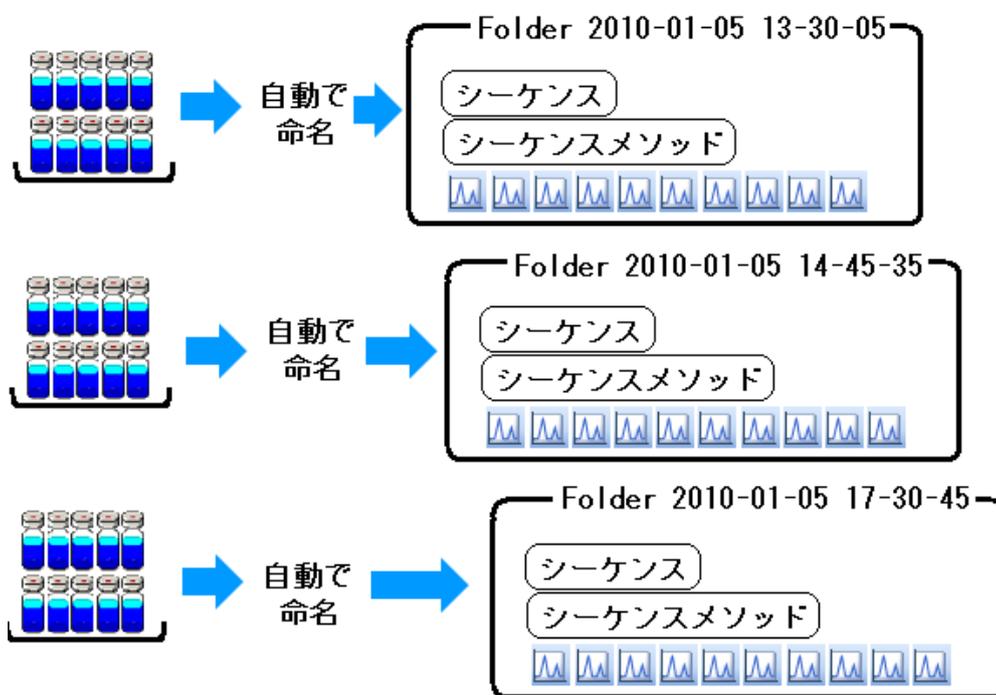
(シーケンスコンテナ有りの場合) :

新しいフォルダ (シーケンスコンテナ) が自動的に作成されます。

シーケンスコンテナ名は、指定に従って自動的に特有のサブディレクトリ名が  
つきます。シーケンスコンテナに格納されるおもな物は、

- ・実行したシーケンステンプレート (\*.s) のコピー
- ・シーケンスで使用する全メソッド (\*.m) のコピー  
(→シーケンスメソッドと呼びます)
- ・取り込まれたデータファイル

です。



ユニークなフォルダをオンにする利点は、以下の通りです。

- 一連のデータ、連続解析に使用する（シーケンスメソッド）及びシーケンスが一括して1つのフォルダに格納されて管理される。
- シーケンスコンテナ名に時刻を入れられるので、上書き防止になる。
- 再解析は、シーケンスコンテナ内のみで行われる。（他に影響を与えない）
- マスターメソッドのフォルダは、取り込み用のメソッドだけになる。  
マスターメソッドのフォルダに解析用メソッドを混在させなくてよい。

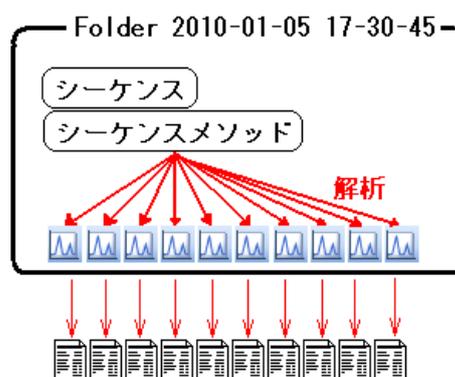
全てのシーケンス関連タスクは、  
シーケンスコンテナ内の  
シーケンスと  
シーケンスメソッドで  
実行されます。

（例えば、

データ採取のみ、

データ解析のみ、

データ採取と解析）

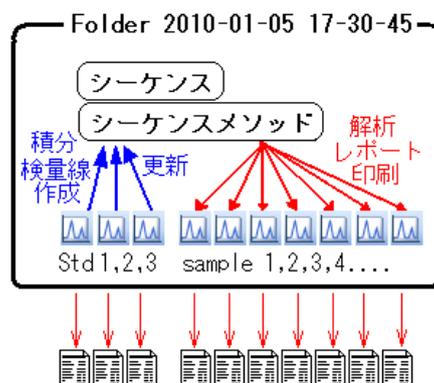


（コンテナ内で再解析できるイメージ図）

シーケンステンプレートとマスターメソッドは自動では変更されません。

積分条件や検量線の更新などの、  
再解析を実施する際も、コンテナ内の  
シーケンスメソッドを編集、更新します。

（補足：バッチファイル (\*.b) や  
シーケンスログファイル (\*.log) も  
共に保存されます。)



（コンテナ内で検量線を作成し定量するイメージ図）

---

データについて補足：



1本分析、シーケンスコンテナのオンのいずれの場合でも、個々のデータファイルには分析時に利用したメソッドのコピーが2つ存在します。

(シーケンスコンテナがオフの場合には、下記は作成されません)

- ACQ.M → 取り込みに使用された装置のメソッド。  
データ採取部分が完了した後に直接保存されます。後で採取時のメソッドがどうであったか確認に使用できます。
- DA.M → 解析部分。取り込み時のデータ解析部分が完了した後に初めて保存されます。また、シーケンス再解析で変更を受けます。  
必ずしもマスターメソッドと同じではありません。
  - DA.Mは、各個のデータにそれぞれ別の解析メソッドを適用したい場合に便利です。  
データフォルダ内にいつも存在しているからです。
- ユニークなフォルダをオンにする場合は、各個の DA.M に関して操作せず、コンテナ内のシーケンスメソッドで解析できます。

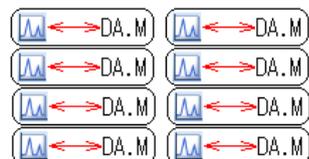
---

以上より、解析メソッドとデータの管理方法には大きく3通り挙げられます。

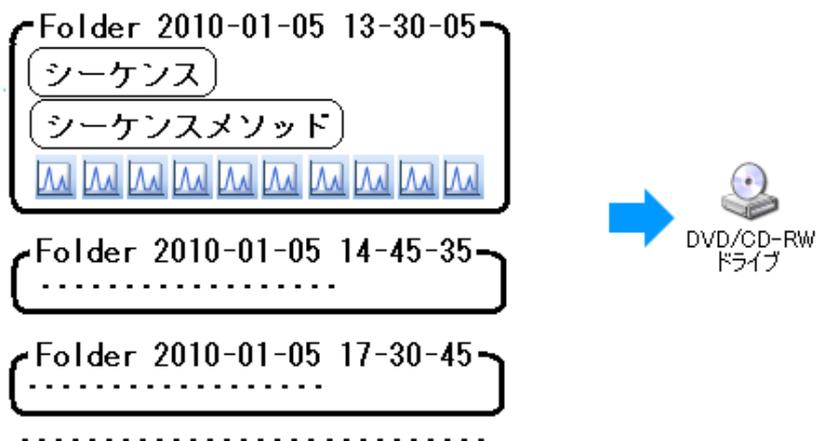
①解析メソッドとデータを、  
常に組にして管理する



②常に各データ内の DA.M を使用する



③シーケンスコンテナ内で一括管理する。



上述③を採用するには、

「ユニークなフォルダをオンにする（シーケンスコンテナをオンにする）」  
設定が必要となります。

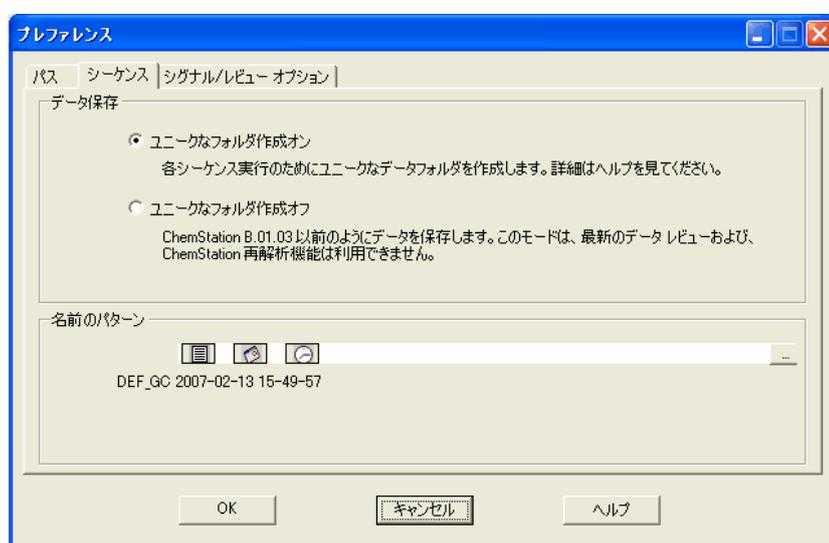
---

この設定を日常的に切り替える場合には、運用する上で、必ず「ユニークなフォルダ」のオン/オフを確認してください。

#### <ユニークなフォルダのオン/オフの設定>

設定順は以下の取りです。

表示 (Vies) → プレファレンス (Preference)



この画面の、シーケンスのタブ内で、オン/オフを選択します。

注意：シーケンス名のパターンを設定する際、  
シーケンス名が 40 文字を超えないように設定してください。  
また、以下の文字は、シーケンス名、ファイル名、ディレクトリ名には含めません。

・ <> : " / ¥ | @ % \* ? ' & 空白 (スペース) など。

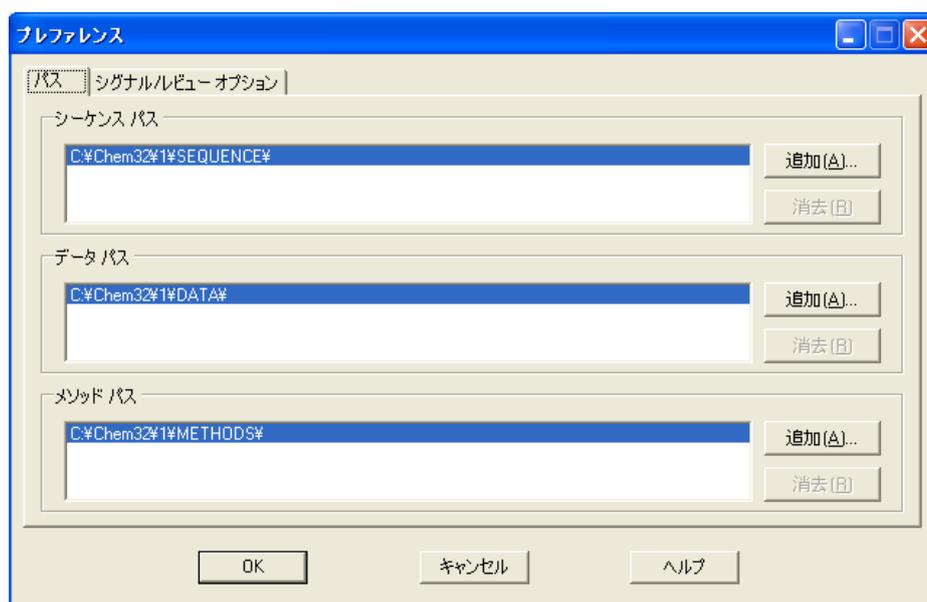
(別冊の「Chemstation の理解」の「1 章 Agilent ChemStation の機能」の「ファイルの命名規則」節を参照ください。)

---

### <メソッド/シーケンス/データ保存パスの設定>

各ファイル保存先のパスを複数設定することが可能です。

表示 (View) → プレファレンス (Preference)



**追加 (Add)** キーを押して、保存したい先のパス名を選択してください。選択するパスは、予め、Explorer 等で作成しておく必要があります。

注意：各ファイルの Default パス

(C:\Chem32\1\SEQUENCE\、C:\Chem32\1\1\DATA\、C:\Chem32\1\METHODS\)

は削除できません。

注意：すでに登録されたパスのさらに下の階層に、

ディレクトリを追加することはできません。

---

## 2-2. メソッドの編集

本章では、メソッド全体の編集 (Edit entire Method) を利用して分析条件 (メソッド) を初期状態から設定します。

すでに編集したメソッドのパラメータの一部を変更する場合は 2-4 節 メソッドの一部変更を参照して下さい。

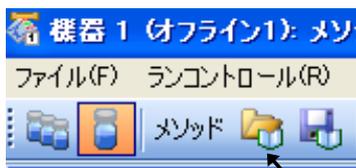
### 2-2-1. 初期メソッドの読み込み

初期状態のメソッドから編集を始めるため、

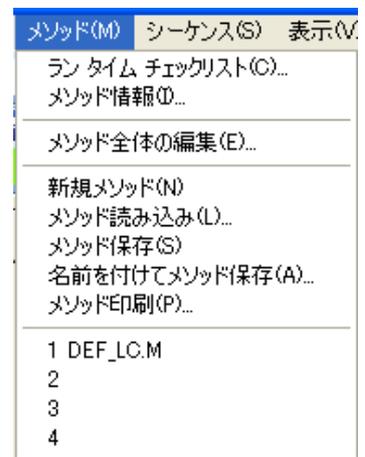
メソッド (Method)  
→ 新規メソッド (New Method)

を選択します。  
画面上には初期メソッド **DEF\_LC.M** が読み込まれます。

あるいは、メソッド読み込みのアイコンをクリックします。



DEF\_LC.M を選択します。



---

## 2-2-2. メソッドパラメータの編集

### 2-2-2-1. モダンビューでのメソッドパラメータの編集

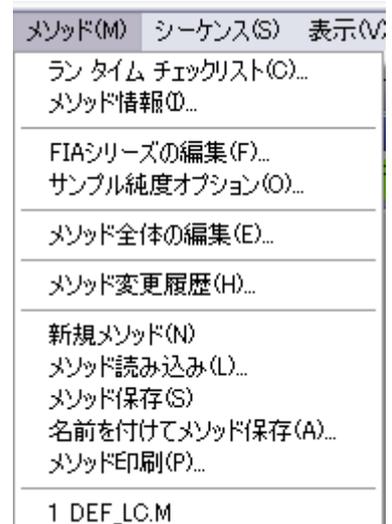
メソッドを初期状態から編集するには、設定画面を連続的に表示するメソッド全体の編集 (Edit entire Method) が便利です。

メニューバーより

メソッド (Method)

→ メソッド全体の編集 (Edit entire Method)

を選択します。



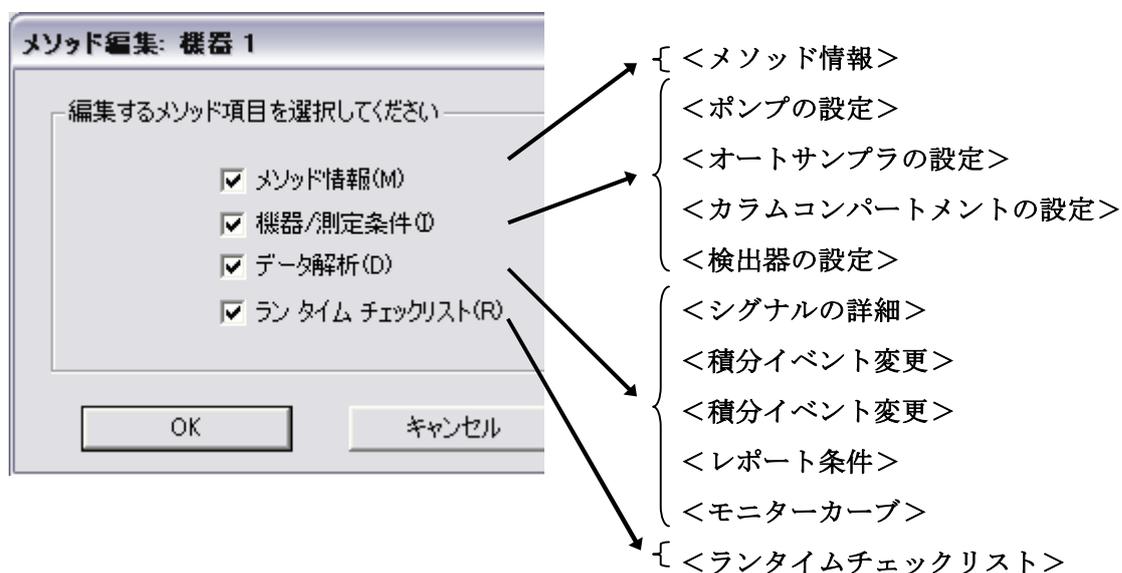
---

## <メソッド編集項目>

メソッドを構成するパラメータの中で、今から連続的に編集したい項目を選択します。

- ① データを取り込むため 装置/データ取り込み (Instrument/Acquisition) を中心に設定します。

ここでは全ての項目をクリックし、データ解析 (Data Analysis) に関する画面も表示します。



- ②  をクリックします。

---

## <メソッド情報>

メソッド情報 (Method Information) の画面が表示されます。

- ① 入力画面内でマウスの左ボタンをクリックし、入力モードにします。



- ② 必要に応じてメソッドに関するコメントを入力して下さい。



- ③ 入力後、**OK** をクリックします。

### <注入ソースの選択>

注入装置を選択します。 通常はオートサンプラーを選択してください。



### <機器メソッド設定>

各機器の設定は、1つのダイアログボックスで設定します。(メソッドセットアップ画面)  
このダイアログボックスのタブをクリックして、各モジュールの設定画面が出ます。

図はバイナリポンプの設定画面の例です。



## <バイナリポンプの設定>

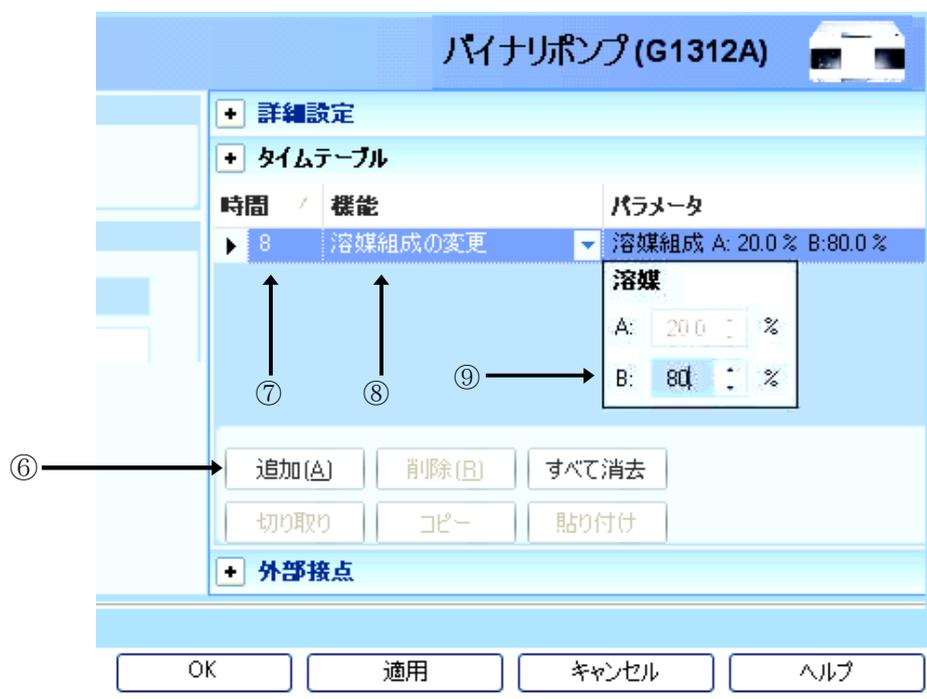
- ① 流量 (Flow) を設定します。
- ② 一検体あたりのストップタイム (Stop Time) を設定します。
- ③ 移動相の混合比はB%のチェックボックスをクリックして、B%を入力します。A%が自動的に変更されます。移動相の名称を入力します。
- ④ 圧力リミット (Pressure Limit) を設定します。
- ⑤ グラジエント分析などで、タイムテーブルを設定する場合、**+タイムテーブル** をクリックしてから編集します。

例：「10分後に」「B%が80%になるように」「流量は変更しないので空欄のまま」

The screenshot shows the 'メソッド セットアップ' (Method Setup) dialog box for a 'バイナリポンプ (G1312A)'. The window is divided into several sections:

- 流量 (Flow):** Set to 1.500 mL/min. Callout ① points to this field.
- 溶媒 (Solvent):**
  - Channel A: 30.0% H<sub>2</sub>O
  - Channel B: 70.0% MeOH. Callout ③ points to the 70.0% value.
- ストップタイム (Stop Time):** Set to 10.00 min. Callout ② points to this field.
- 圧力リミット (Pressure Limit):** Lower limit: 0.00 bar, Upper limit: 400.00 bar. Callout ④ points to the upper limit field.
- 詳細設定 (Detailed Settings):**
  - 最小ストローク (Minimum Stroke): Channel A: 20 μL, Channel B: 20 μL.
  - 圧縮率 (Compression Rate): Channel A: 50 × 10<sup>-6</sup> / bar, Channel B: 115 × 10<sup>-6</sup> / bar.
  - 最大流量グラジエント (Maximum Flow Gradient): 100.000 mL/min/min.
- タイムテーブル (Time Table):** A button labeled '+タイムテーブル' is located at the bottom of the dialog. Callout ⑤ points to this button.
- 外部接続 (External Connection):** A button labeled '+外部接続' is located below the Time Table button.
- Buttons:** 'OK', '適用' (Apply), 'キャンセル' (Cancel), and 'ヘルプ' (Help) buttons are at the bottom. Callout ⑥ points to the 'OK' button.

⑤タイムテーブルの入力例を示します。



⑥「追加」をクリックします。

⑦クリックします。「時刻、何分に向けて」

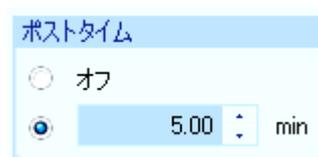
⑧クリックします。「どの項目が」

⑨クリックすると溶媒比率が出ます。「この値に変化します」

溶媒組成比の変更の場合、設定時刻の設定値に向かってグラジェントします。

⑩グラジェントの場合は、「ポストタイム」の設定をしてください。

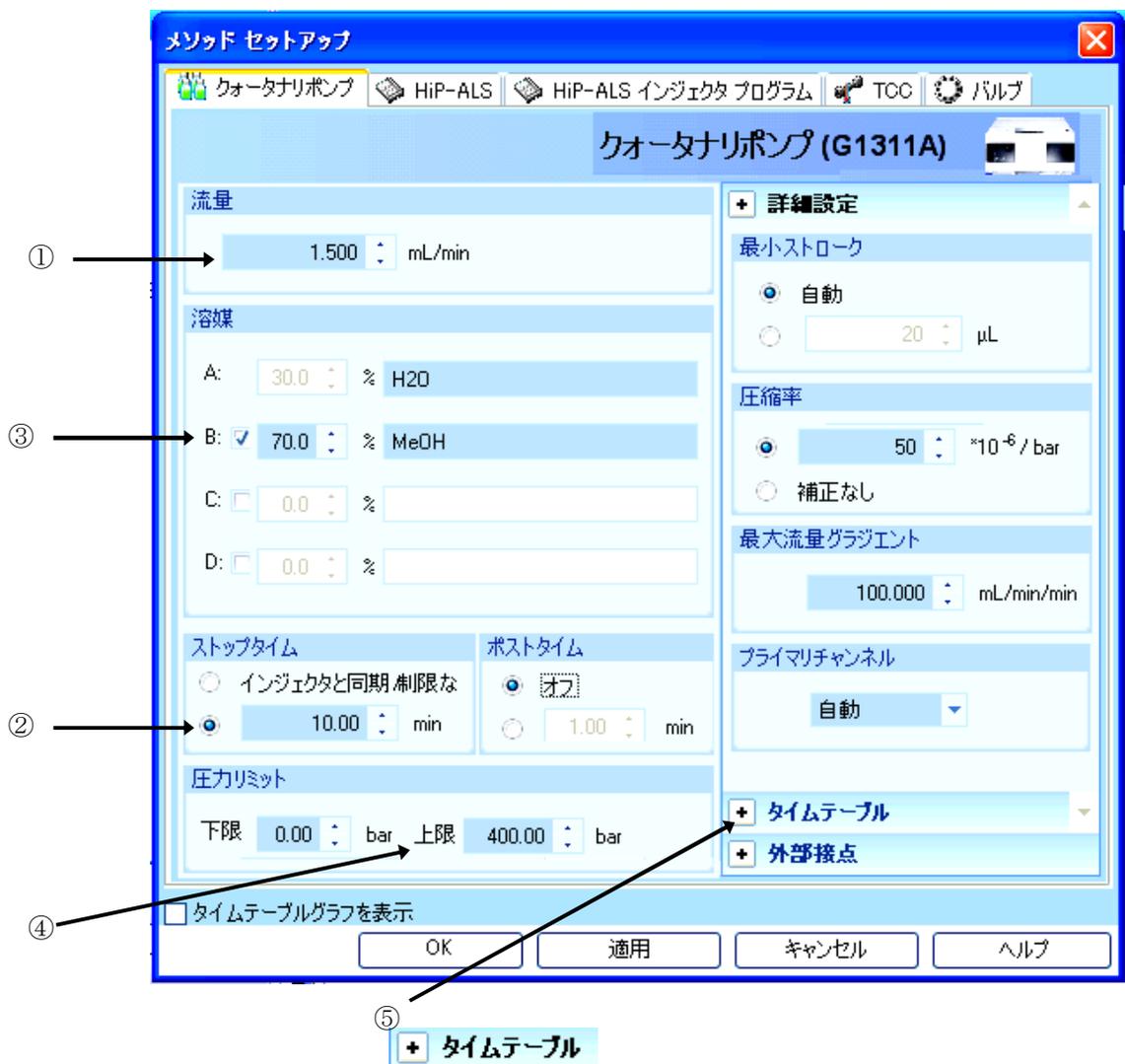
分析終了後、初期移動相条件に戻って何分待つか、を設定します。



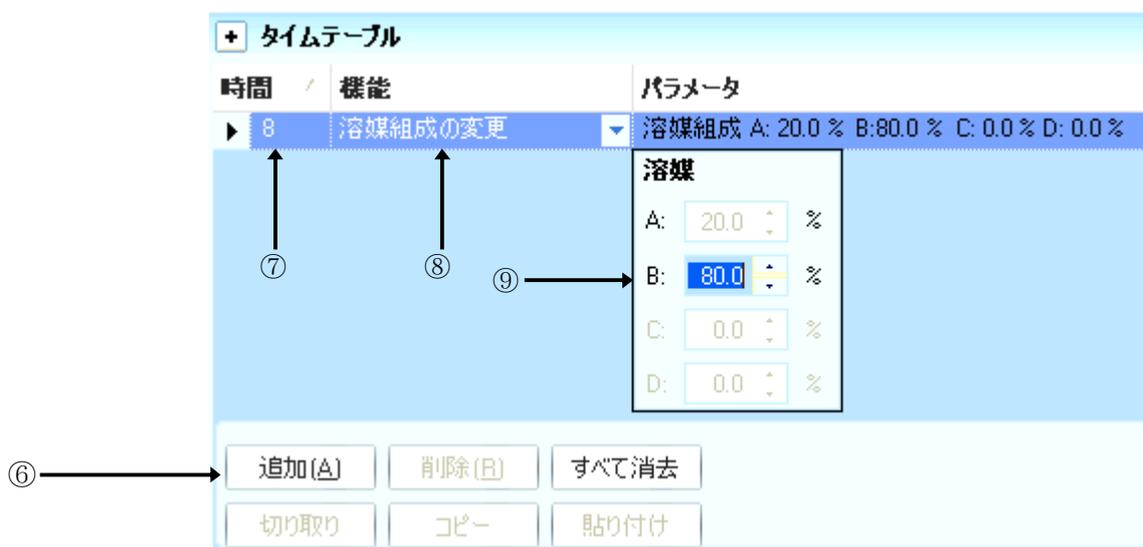
⑪  をクリックします。

### <クォータナリポンプの設定>

- ① 流量 (Flow) を設定します。
- ② 一検体あたりのストップタイム (Stop Time) を設定します。
- ③ 移動相の混合比はB%の矢印をクリックして入力モードにし、B%を入力します。A%が自動的に変更されます。移動相の名称を入力します。
- ④ 圧力リミット (Pressure Limit) を設定します。
- ⑤ グラジエント分析などで、タイムテーブルを設定する場合、**＋タイムテーブル** をクリックしてから編集します。



⑤タイムテーブルの入力例を示します。



例：「10分後に」「B%が80%になるように」「流量は変更しないので空欄のまま」

⑥「追加」をクリックします。

⑦クリックします。「スタートからの時刻、何分に向けて」

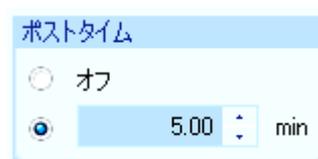
⑧クリックします。「どの項目が」

⑨クリックすると溶媒比率が出ます。「この値に変化します」

溶媒組成比の変更の場合、設定時刻の設定値に向かってグラジェントします。

⑩グラジェントの場合は、「ポストタイム」の設定をしてください。

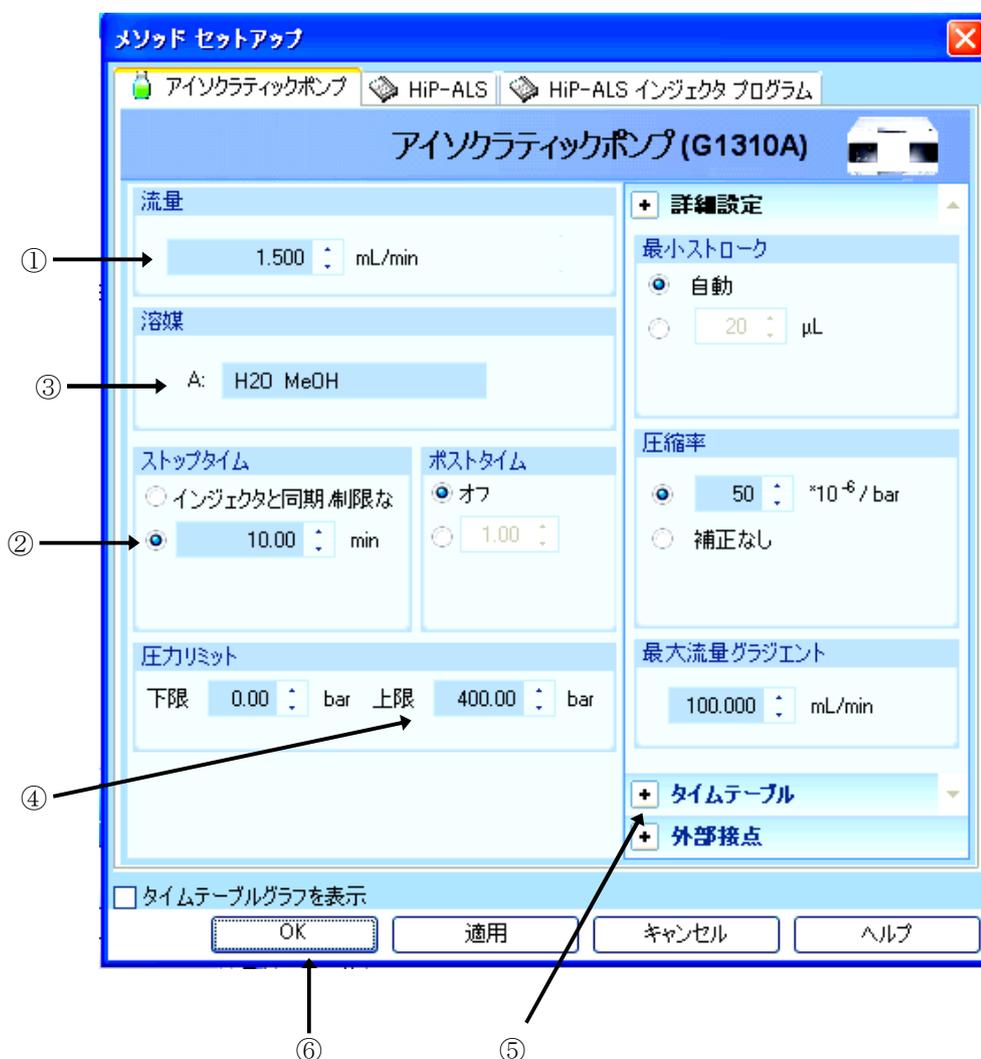
分析終了後、初期移動相条件に戻って何分待つか、を設定します。



⑪  をクリックします。

## <アイソクラティックポンプの設定>

- ① 流量 (Flow) を設定します。
- ② ストップタイム (Stop Time) を設定します。
- ③ 移動相の名称を入力します。
- ④ 圧力リミット (Pressure Limit) を設定します。
- ⑤ 流量などで、タイムテーブルを設定する場合、追加 (Append) をクリックしてから編集します。
- ⑥ OK をクリックします。



<高性能オートサンプラ/ウェルプレートオートサンプラの設定>

① 注入方法を次の3つから選択します。

- ・標準注入
- ・ニードル洗浄+注入 → 洗浄方法を「ニードル洗浄」欄で設定します。
- ・インジェクタプログラム使用 →隣の **インジェクタプログラム** タブで編集します。

注意：インジェクタプログラム使用時は、「注入モード」項目は無視され、  
インジェクタプログラムタブの設定に従います。

② 注入量を設定します。

② → 注入量: 5.00 µL

① → 標準注入

③ → ニードル洗浄付き注入

④ → 注入クリーニング

注入クリーニングは、  
バルブクリーニングと  
オプションの  
ページキット使用の  
2通りがあります  
(後述)

- ③ ニードル洗浄 (Needle Wash) を実施する場合に  
設定します。

「フラッシュポート」の場合は→「洗浄時間」を  
「バイアル」の場合は → 洗浄バイアル位置 (Location) と  
繰り返し回数 (Repeat) を設定します。

④ ニードル洗浄付き注入

ニードル洗浄

モード: フラッシュポート

時間: 30.0 sec

位置:

繰り返し: 3 回

**注意：洗浄にバイアルを使用する際には、バイアルにキャップはつけません。**

**注意：フラッシュポート用に使用できる溶液は、**

**水：メタノール = 50：50      または      水：アセトニトリル = 50：50 です。**

#### 詳細設定

- ④ ⑤ サンプルの粘性を考慮し、

吸引スピード (Draw Speed)

吐出スピード (Eject Speed)

を設定します。

- ⑥ サンプルを吸引する際の

ニードルの位置 (Draw Position)

を設定します。

+ 詳細設定

補助設定

④ 吸引速度: 100.0 μL/min

⑤ 吐出速度: 100.0 μL/min

⑥ 吸引ポジション: 0.0 mm

⑦ 平衡時間: 2.0 sec

⑧ サンプルフラッシュアウト係数: 5.0 × 注入量

バイアルウェル底部センサ

- ⑦ 平衡化時間 (吸引動作直後の待ち時間) (Equilibration Time) を設定します。

- ⑧ この項目は「オーバーラップインジェクション有効 + サンプルはフラッシュアウトされた時」の計算に使われる倍数の設定です。 注入量 (+ニードルシートの容量) の倍数を、サンプルフラッシュアウト係数 (Sample Flush-Out Factor) として設定します。

⑧ ハイスループット (High Throughput) で

使用する場合に選択します。(図は例です)

自動ディレイボリューム低減

(Automatic Delay Volume Reduction)

オーバーラップインジェクション

(Enable Overlapped Injection)

バルブを切り替えるタイミングを、次の2つから選択します。

・ サンプルフラッシュアウト時 (When Sample is flushed out)

→ サンプルフラッシュアウトファクタで計算された分の移動相が流れ出た後

・ 注入後  min (after  min)

ハイスループット

自動ディレイボリューム低減

オーバーラップインジェクションの有効化

サンプルがフラッシュアウトされたとき

注入後

0.00 min

⑨ サンプルサーモスタットの温度設定をします。

サーモスタット

現在の設定で

10 °C

オフ

分析を有効にする

現在の設定で

全温度

温度 ± 1 °C 以内

### <インジェクタクリーニング（バルブクリーニング）の設定>

ここでは、例を示します。

注入バルブのクリーニングの設定です。（パージキット使用の場合は、パージキットの項目を参照ください）

#### + 注入クリーニング

##### 注入バルブクリーニング

**時間 1** では、サンプルがすべて流れ出た後、

バルブをバイパスに切り替えます。

**時間 2** では、カラムからサンプルが

すべて溶出した後に設定します。

有機溶媒がリッチな条件なので、

バルブを切り替えて残ったサンプルを

溶出させます。

**時間 3** では、移動相が初期条件に戻った

ところで、バルブを切り替えて、有機溶媒を追い出します。

**時間 4** は、追加でバルブ切り替えをするときに使います。

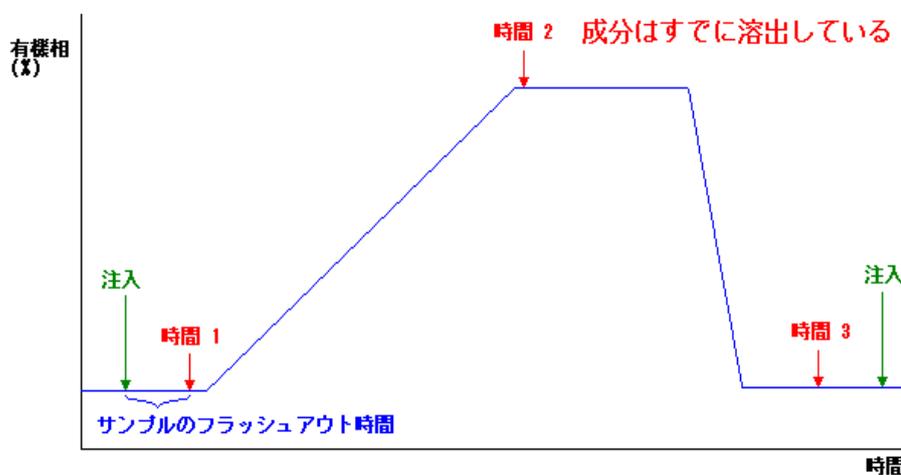
**バルブ切り替え** では、**時間 2** **時間 3** **時間 4** の時にバルブが切り替わる回数を

指定します。

+ 注入クリーニング			
注入バルブクリーニング			
時間 1:	<input checked="" type="checkbox"/>	0.50	min (バイパス)
時間 2:	<input checked="" type="checkbox"/>	5.00	min (メインパス / バイパス)
時間 3:	<input checked="" type="checkbox"/>	6.00	min (メインパス / バイパス)
時間 4:	<input type="checkbox"/>	0.01	min (メインパス / バイパス)
バルブ切り替え:		2	

概念図を示します。

詳細はオンライン  
ペルプを参照くだ  
さい。



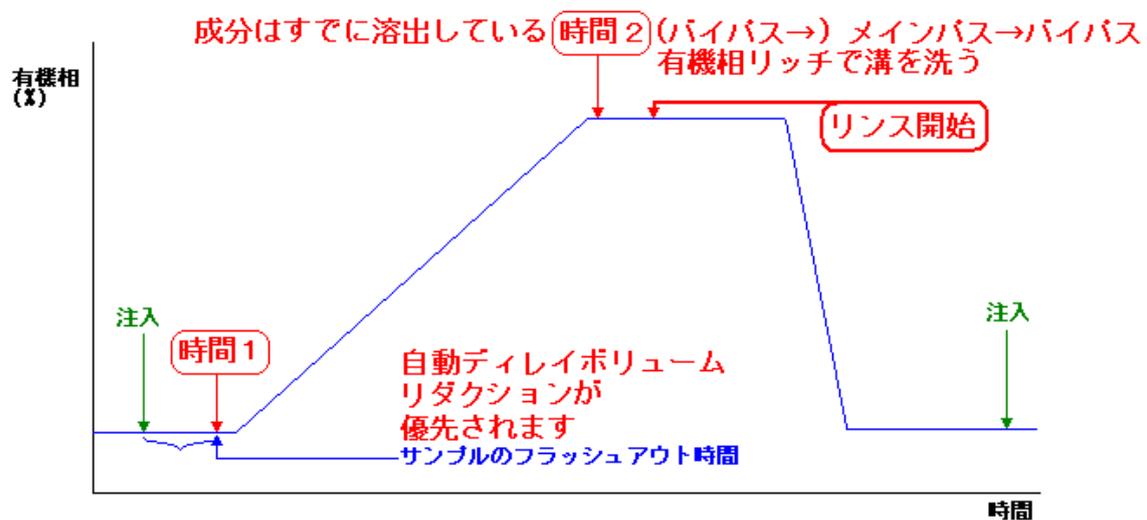
<インジェクタクリーニング（パージキット）の設定>

ここでは、例を示します。

典型的な設定例を示します。

+ 注入クリーニング

インジェクタクリーニング



- ①「洗浄を有効にする」を有効にします。
- ②洗浄時の洗浄液の吸引速度を設定します。
- ③洗浄時の洗浄液の吐出速度を設定します。
- ④有機溶媒での洗浄容量を設定します。
- ⑤水系溶媒での洗浄容量を設定します。

+ 注入クリーニング

インジェクタクリーニング

洗浄を有効にする

洗浄時の吸引速度 2,500.0 μL/min

洗浄時の吐出速度 2,500.0 μL/min

洗浄容量 (有機): 2.0 \*容量 (\*)

洗浄容量 (水): 3.0 \*容量 (\*)

(\*)容量 = シリンジ + ループキャピラリー + シートキャピラリー

①「時間1」は、サンプルがフラッシュアウトされた時間を設定します。

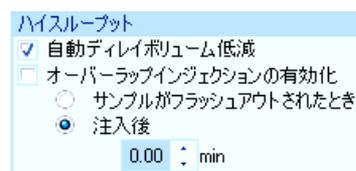
注意：「詳細設定」の「ハイスループット」の

自動ディレイボリュウム低減 (ADVR) が有効になっていると、この設定が優先されます。



バルブは、メインパスからバイパスに切り替わります。

②「時間2」は、サンプルがすでに溶出して、有機溶媒リッチな状態の時間を設定します。バルブの溝が設定回数切り替わり、有機相で洗われます。バルブ切り替え回数は③で指定します。



②の動作の後に、パージキットによるリンス動作が開始されます。

なお、オーバーラップインジェクションの動作は、パージキットのリンス動作が終了してから始まります。

補足：ハイスループット分析を目指した設定をする時

「自動ディレイ低減 (ADVR)」を有効にしたときや、「オーバーラップインジェクション」を有効にした場合、移動相、サンプル、流量などによっては、上記「注入クリーニング (バルブ)」の設定をすべてOFFにした方が良い結果が得られる場合がありますので、ご検討ください。

補足： この補足項目は、今設定しなくてもよい項目です。

分析開始前に確認してください。

ウェルプレートを使用する場合は、

「トレイ上に実際に乗っているプレートの種類」を設定する必要があります。

メニューから

機器 → 続き HiP-ALS (種類によって表記が異なります)

→ ウェルプレートの割り当て (assign well-plate)

GUI からは、

インジェクタアイコン上で  
右クリックして、メニューから  
「ウェルプレートの割り当て」  
を選択します。



ダイアログボックス中の

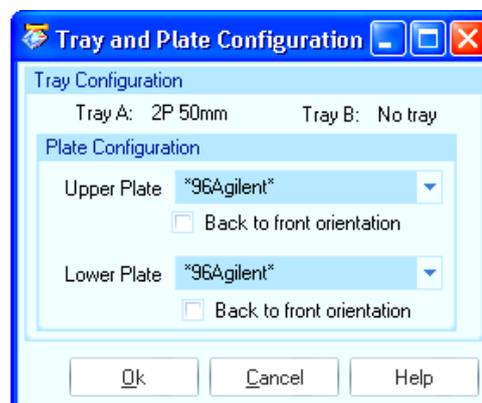
「ウェルプレート」欄を設定します。

「上のプレート」は奥側です。

「下のプレート」は手前側です。

実際にセットしたプレート名を選んで

してください。

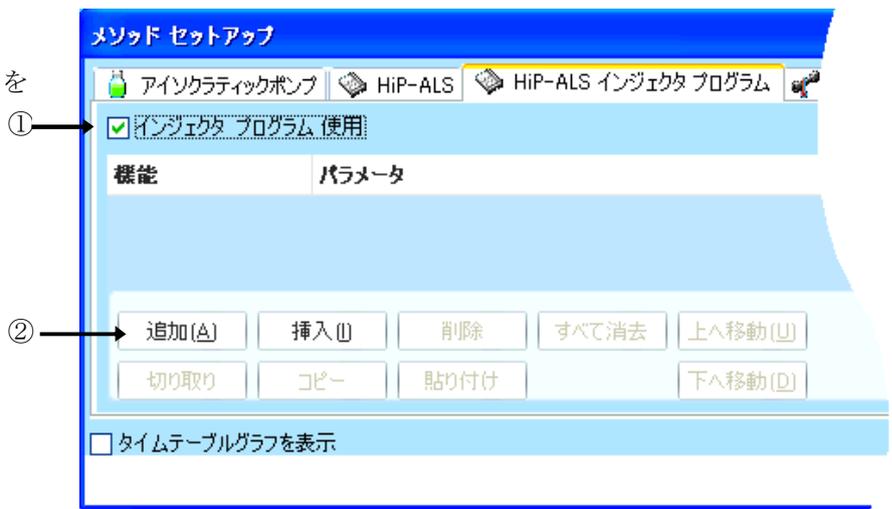


### <インジェクタプログラムの設定例>

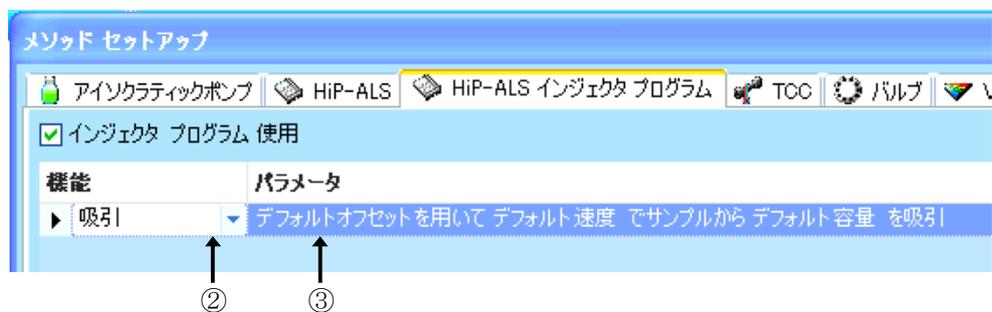
インジェクタプログラムの入力方法の例を示します。

①インジェクタプログラム使用を  
チェックします。

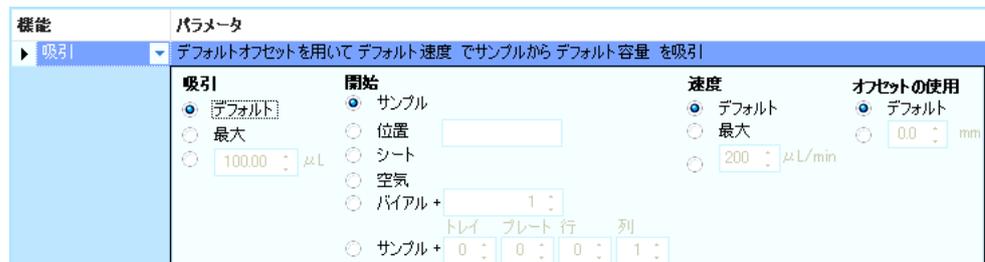
注意：ここをチェックすると、  
インジェクタ設定のタブの  
「注入モード」項目が  
無視されます。  
(標準注入、  
ニードル洗浄付き注入が  
無効になります)



②「追加」をクリックすると、「機能」と「パラメータ」行が増えます。



③選択した「機能」に応じて、パラメータが表示されるので、ここをクリックしてパラメータ  
入力をします。



## <オートサンプラの設定>

① 注入方法を次の3つから選択します。

- ・標準注入
- ・ニードル洗浄+注入 → 洗浄バイアルを「ニードル洗浄」欄で設定します。
- ・インジェクタプログラム使用 →隣の **インジェクタプログラム** タブで編集します。

注意：インジェクタプログラム使用時は、「注入モード」項目は無視され、インジェクタプログラムタブの設定に従います。

The screenshot shows the 'メソッド セットアップ' (Method Setup) dialog for the ALS (G1329A) instrument. The 'ALS インジェクタプログラム' tab is selected. The settings are as follows:

- 注入モード (Injection Mode):** ①  標準注入 (Standard Injection),  ニードル洗浄付き注入 (Injection with Needle Wash).
- 注入量 (Injection Volume):** ② 5.00  $\mu\text{L}$ .
- ニードル洗浄 (Needle Wash):** ③ 位置 (Position): [Empty field].
- ストップタイム (Stop Time):**  ポンプと同様/制限なし (Same as pump/no limit),  1.00 min.
- ポストタイム (Post Time):**  オフ (Off),  1.00 min.
- 補助設定 (Auxiliary Settings):** ⑤ 吸引速度 (Suction Rate): 100  $\mu\text{L}/\text{min}$ , 吐出速度 (Ejection Rate): 100  $\mu\text{L}/\text{min}$ , ⑥ 吸引ポジション (Suction Position): 0.0 mm.
- ハイスループット (High Throughput):**  最適化を有効 (Optimize effective),  バイアルの準備 (Vial preparation),  オーバーラップインジェクション周 (Overlap injection cycle), 0.00 min (Injection time after).
- サーモスタット (Thermostat):** ④  現在の設定で (Current setting) 10  $^{\circ}\text{C}$ ,  オフ (Off).
- 分析を有効にする (Enable analysis):**  現在の設定で (Current setting),  全温度 (All temperature),  温度  $\pm 1^{\circ}\text{C}$  以内 (Within  $\pm 1^{\circ}\text{C}$  temperature).
- タイムテーブル (Time Table):** + タイムテーブル (Time Table), + 外部接点 (External connection).
- Bottom:**  タイムテーブルグラフを表示 (Show time table graph), OK, 適用 (Apply), キャンセル (Cancel), ヘルプ (Help).

⑦ points to the OK button.

---

② 注入量 (Injection Volume) を設定します。

③ 最適化 (Optimization) の方法を選択します。

オーバーラップインジェクション (Overlap Injection Cycle)

: 指定時間後にバルブを切り替え、次のサンプルを吸引します。

サンプルバイアルを準備 (Prefetch Sample Vial)

: 指定時間後にバイアルをインジェクションポートの近くに準備します。

④ サンプルサーモスタットの温度設定をします。

⑤ サンプル溶媒の粘性を考慮し、

吸引スピード (Draw Speed) ・吐出スピード (Eject Speed) を設定します。

⑥ サンプルを吸引する際のニードルの位置 (Draw Position) を設定します。

⑦  をクリックします。

## <カラムコンパートメントの設定>



① ボタンをクリックし、ヒーターブロックの温度を入力します。

② 右のヒーターブロックの温度を設定します。

左と同じ設定するには「組み合わせ」を選択します。

- ・カラムコンパートメントと検出器の組み合わせで

「検出器セルと同期」が選択できます。

- ・モデルによっては、フロントドアの開閉を監視しています。この場合、  
「フロントドアが開いている場合」でも分析がスタートできる設定が可能です。

③ **OK** をクリックします。

\* カラムスッチングバルブの設定例は付属のリファレンスマニュアルをご参照下さい。

<UV-Vis 検出器の設定>



- ① 波長 (Wavelength) を設定します。
- ② 矢印をクリックし、ピーク幅 (Peakwidth) を、予想ピーク幅より小さく設定します。
- ③ 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイムはポンプ同様とします。
- ④ 波長のタイムテーブルを設定する場合には、 + タイムテーブル をクリックして編集モードにします。
- ⑤ オートサンプラ使用時に、測定直前に自動的にバランスをかけられます。プレラン (Prerun) でバランスを実行する、を選択します。
- ⑥ OK をクリックします。

<ダイオードアレイ検出器の設定>

The screenshot shows the 'Method Setup' dialog for the DAD (G1315C) detector. The interface includes a toolbar with icons for various components like the pump, ALS, TCC, and detector. The main area is divided into several sections:

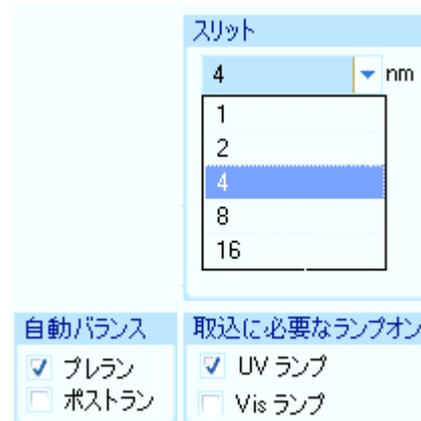
- Signal (S) Table:** A table with columns for 'Signal Used', 'Wavelength', 'Bandwidth', 'Reference Wavelength', and 'Reference Bandwidth'. Signals A through H are listed with their respective values.
- Peak Width:** A dropdown menu set to '>0.10 min (2.0 s response time) (2.5 Hz)'. Callout 3 points to this dropdown.
- Stop Time:** Two sections for 'Stop Time' and 'Post Time', both set to '1.00 min'. Callout 2 points to the 'Pump/ALS synchronization' radio button.
- Auto Balance:** Checkboxes for 'Pre-Scan' and 'Post-Scan', both checked. Callout 4 points to the 'Pre-Scan' checkbox.
- Time Table Graph:** A checkbox labeled 'Show Time Table Graph' which is currently unchecked. Callout 5 points to this checkbox.
- Slit:** A dropdown menu set to '4 nm'. Callout 6 points to this dropdown.
- Spectral Settings:** Includes 'Save' (set to 'All'), 'Range' (190 ~ 400 nm), 'Step' (2.0 nm), and 'Threshold' (10.0 mAU).
- Analog Output:** Settings for 'Output 1' and 'Output 2', including 'Zero Offset' (5%) and 'Attenuation' (1000 mAU).
- Negative Absorption Margin:** Set to 100 mAU.
- Slit:** Set to 4 nm.
- Auto Balance:** 'Pre-Scan' and 'Post-Scan' are checked.
- Required for Acquisition:** 'UV Lamp' is checked, 'Vis Lamp' is unchecked.

- ① シグナル (Signals) は8波長まで採取できます。(G1315A型 G1315B型は5波長まで) 採取するシグナルのチェックボックスをクリックします。サンプルおよびリファレンス波長を設定します
- ② 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイムはポンプ同様とします。
- ③ ピーク幅 (Peakwidth) を選択する矢印をクリックし、選択します。予想される最少ピーク幅より小さく設定します

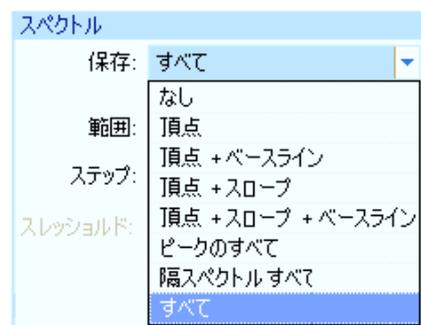
④スリット幅 (Slit) を選択する矢印をクリックし、  
選択します。

⑤分析に必要なランプを選択します。

⑥分析直前に自動的にバランスをかけるため、  
プレラン (Prerun) を選択します。



⑦スペクトル (Spectrum) の採取方法を選択します。  
また、スペクトルを取り込む波長範囲、ステップなどを  
設定します。



⑧ 全てを設定したら **OK** をクリックします。

<プログラマブル 3D 蛍光検出器の設定>



- ① 励起波長 (Excitation) 、蛍光波長 (Emission) を設定します。
- ② 矢印をクリックし、ピーク幅(Peakwidth) を選択します。
- ③ PMT-ゲイン (PMT-Gain) で信号の増幅を設定します。
- ④ マルチ Ex. (Multi Ex.) またはマルチ Em. (Multi Em.) を選択すると、励起または蛍光波長について多波長検出やスペクトル採取を行うことができます。励起波長または蛍光波長について、測定波長を3波長まで追加することができます。(図は設定例です)



⑤ スペクトルの採取方法を選択します。

(図は設定例です)

スペクトルの取り込み	
<input type="radio"/> なし	スキャン範囲: 350 ~ 400 nm
<input type="radio"/> 頂点	ステップ: 10 nm
<input type="radio"/> ピークのすべて	スレッシュホールド: 5,000 LU
<input checked="" type="radio"/> すべて	取得速度: 243 ms
<input type="checkbox"/> スペクトル範囲の適合	

⑥ 波長のタイムテーブルを設定する場合には、**+ タイムテーブル**

をクリックして 編集モードにします。

**+ タイムテーブル**

⑦ さらに詳細な設定を行うためには、**スペシャル設定値** を

クリックします。

**+ スペシャル設定値**

⑧ 検出モード：燐光を測定する時に設定します。

ディレイ：ランプ点灯から取り込みまでの待ち時間  
ゲート(Gate)：測定時間

検出モード	
<input checked="" type="radio"/> 蛍光モード	ディレイ: 50.0 μs
<input type="radio"/> 燐光モード	ゲート: 200.0 μs

⑨ 蛍光スキャン範囲

スキャンを行う波長範囲を設定します。

蛍光スキャン範囲			
	開始	～	ステップ
励起波長:	220	300	10 nm
蛍光波長:	280	400	10 nm

⑩ ランプ(Lamp)：ランプの点灯条件を設定します。

- 分析に必要なランプオン (付けてください)  
分析中にランプを点灯します。
- エコノミーモード： 低周波数でランプを点灯します。  
S/N比は小さくなりますが、ランプの寿命が長くなります。
- 分析中のみ点灯：分析中のみランプを点灯します。  
通常この条件を選択します。
- ランプエネルギーリファレンス：リファレンスダイオードを使用して、  
シグナルを補正します。S/N比が改善されます。

ランプ	
<input checked="" type="checkbox"/> 分析に必要なランプオン	
<input type="checkbox"/> エコノミーモード	<input type="checkbox"/> 実行中のみオン
ランプエネルギーリファレンス <input checked="" type="radio"/> オフ <input type="radio"/> オン	

その他	
⑪ ベースライン処理	<input checked="" type="radio"/> 追加 <input type="radio"/> フリー <input type="radio"/> ゼロ
⑫ シグナル極性:	<input checked="" type="radio"/> ポジティブ (+) <input type="radio"/> ネガティブ (-)

---

⑪ベースライン処理(Baseline Behavior) :

波長または PMT ゲインを変更した時のベースラインの処理方法を設定します。

追加(Append) : 元のベースライン位置にベースラインを合わせます。

フリー(Free) : ベースラインを調整しません。(ベースラインがシフトします。)

ゼロ補正(Zero) : ベースラインを 0 LU(Luminescence Units)にします。

⑫シグナル極性(Signal Polarity) : シグナルの極性を設定します。

⑬  をクリックして、画面を閉じます。

<示差屈折率検出器の設定>



- ①光学系温度 (Optical Unit Temperature) を設定します。
- ②矢印をクリックし、ピーク幅 (Peakwidth) を選択します。
- ③極性 (Polarity) を選択します。
- ④測定直前に自動的にオートゼロをかけるため、on を選択します。
- ⑤分析後に自動的に溶媒のリサイクルを行う時には on に設定します。
- ⑥オートゼロ、注入の前に、自動パージする設定ができます。リファレンスセル内の物質が分解が予想されるときにだけ使ってください。
- ⑦タイムテーブルを設定する場合には、+タイムテーブル をクリックして編集モードにします。
- ⑧ OK をクリックします。

<バルブ類の設定> (例: G1158A 2 PS/6 PT バルブの例)



- ① ポジション (Position) を選択します。  または  をクリックすると選択したポジションにバルブが切り替わります。
- ② 分析終了時に、次の分析のために、バルブを切り替えることができます。
- ③ 各ポジションに、説明を入力できます。
- ④ タイムプログラムでバルブ切替を行う場合は、 ,  をクリックしてタイムテーブルを設定します。
- ⑤  をクリックします。

---

このあと、「メソッド全体の編集」はデータ解析部分に移行します。  
続きは、2-2-2-3 節 「メソッドパラメータの編集・データ解析部分」を  
参照してください。

---

## 2-2-2-2. クラシックビューでのメソッドパラメータの編集

アイコンをクリックします。

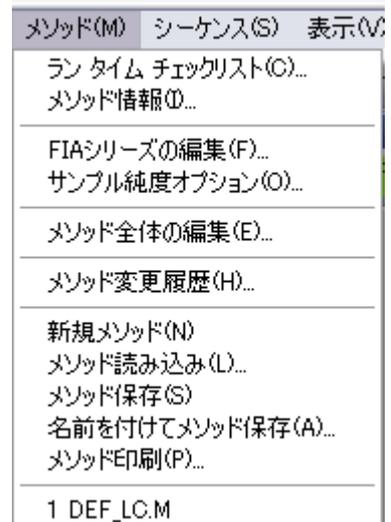


あるいは、メニューバーより

メソッド (Method)

→ メソッド全体の編集 (Edit entire Method)

を選択します。



実行すると、次の画面が表示されます。

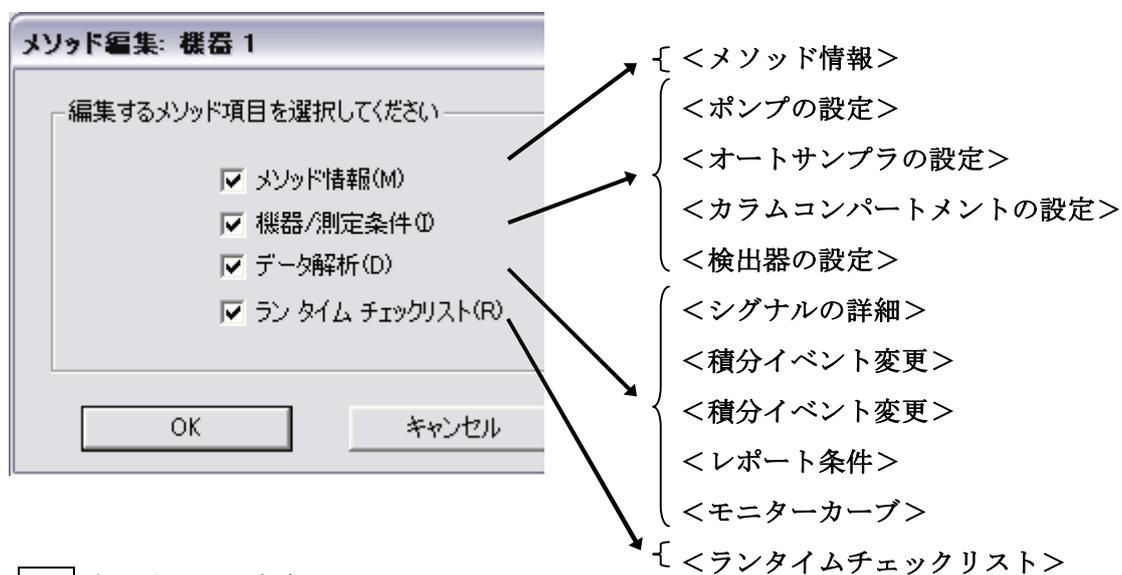
---

## <メソッド編集項目>

メソッドを構成するパラメータの中で、今から連続的に編集したい項目を選択します。

- ① データを取り込むため 装置/データ取り込み (Instrument/Acquisition) を中心に設定します。

ここでは全ての項目をクリックし、データ解析 (Data Analysis) に関する画面も表示します。



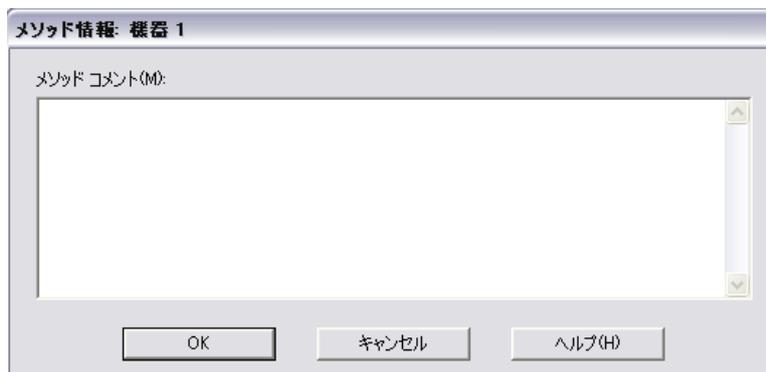
- ②  をクリックします。

---

## <メソッド情報>

メソッド情報 (Method Information) の画面が表示されます。

- ① 入力画面内でマウスの左ボタンをクリックし、入力モードにします。



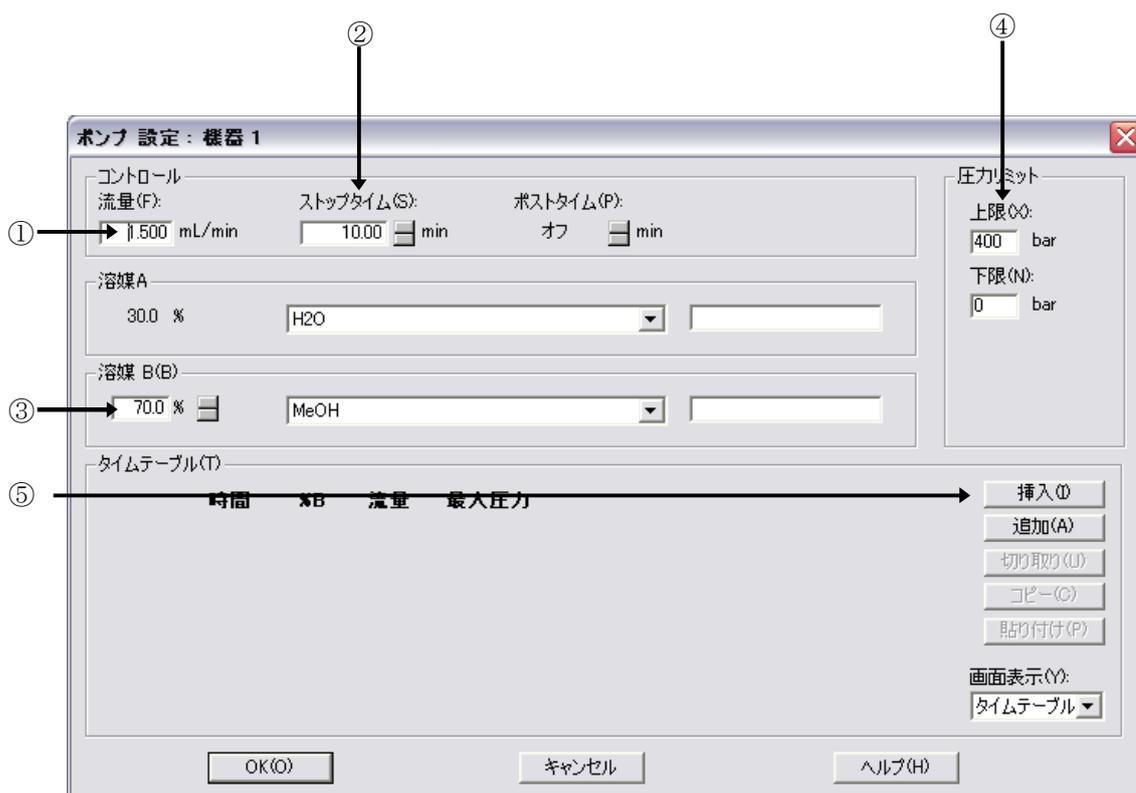
- ② 必要に応じてメソッドに関するコメントを入力して下さい。



- ③ 入力後、**OK** をクリックします。

## <バイナリポンプの設定>

- ① 流量 (Flow) を設定します。
- ② 一検体あたりのストップタイム (Stop Time) を設定します。
- ③ 移動相の混合比はB%の矢印をクリックして入力モードにし、B%を入力します。A%が自動的に変更されます。移動相の名称を入力します。
- ④ 圧力リミット (Pressure Limit) を設定します。
- ⑤ グラジエント分析などで、タイムテーブルを設定する場合、 **追加 (Append)** をクリックしてから編集します。  
例：「10分後に」「B%が80%になるように」「流量は変更しないので空欄のまま」
- ⑥ **OK** をクリックします。



## <クォータナリポンプの設定>

- ① 流量 (Flow) を設定します。
- ② 一検体あたりのストップタイム (Stop Time) を設定します。
- ③ 移動相の混合比はB%の矢印をクリックして入力モードにし、B%を入力します。A%が自動的に変更されます。移動相の名称を入力します。
- ④ 圧力リミット (Pressure Limit) を設定します。
- ⑤ グラジエント分析などで、タイムテーブルを設定する場合、**追加 (Append)** をクリックしてから編集します。

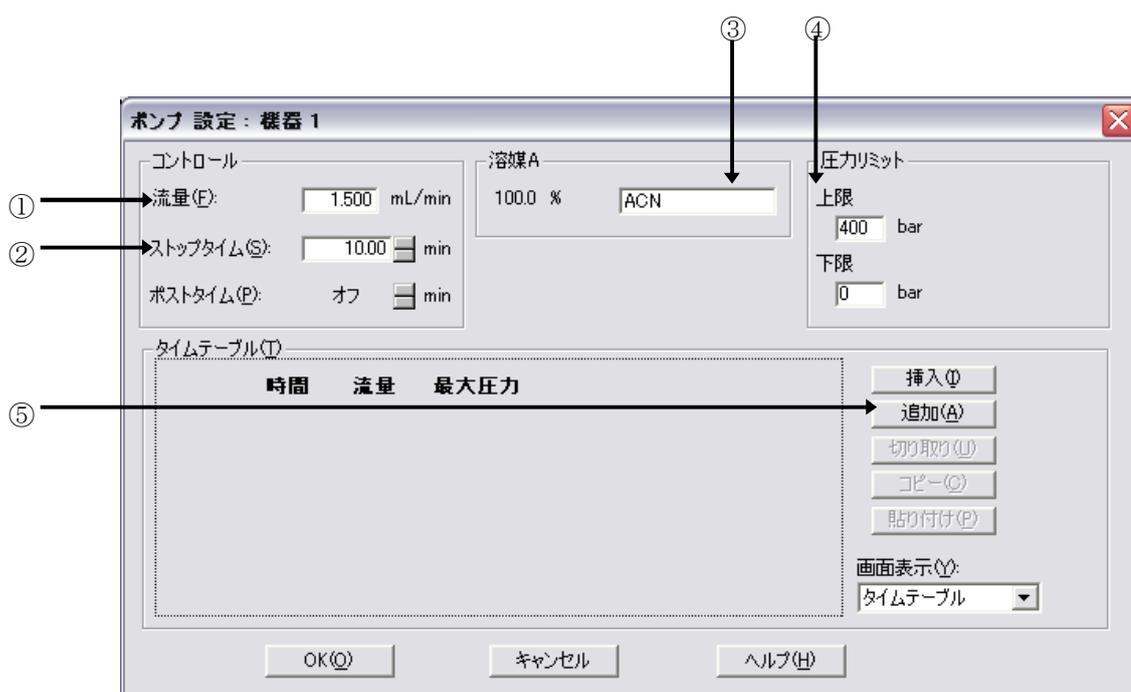
例：「10分後に」「B%が80%になるように」「流量は変更しないので空欄のまま」

- ⑥ **OK** をクリックします。



## <アイソクラティックポンプの設定>

- ① 流量 (Flow) を設定します。
- ② ストップタイム (Stop Time) を設定します。
- ③ 移動相の名称を入力します。
- ④ 圧力リミット (Pressure Limit) を設定します。
- ⑤ 流量などで、タイムテーブルを設定する場合、 **追加 (Append)** をクリックしてから編集します。
- ⑥ **OK** をクリックします。



---

<オートサンプラの設定>



① 注入方法を次の3つから選択します。

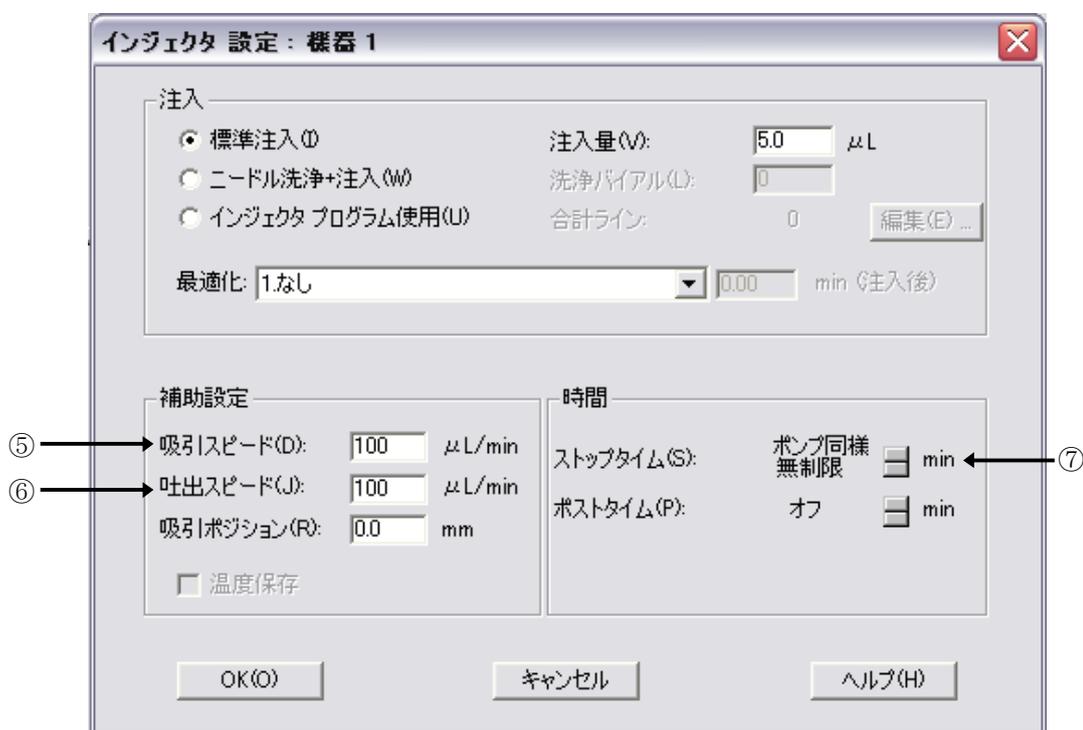
- ・標準注入 (Standard Injection)
- ・ニードル洗浄+注入 (Injection with Needle Wash) → 洗浄バイアル (Wash Vial) を設定します。
- ・インジェクタプログラム使用 (Use Injector Program) → 編集 (Edit) で編集します。

② 注入量 (Injection Volume) を設定します。

③ 最適化 (Optimization) の方法を選択します。

1. なし (None)
2. オーバーラップインジェクション (Overlap Injection Cycle)  
: 指定時間後にバルブを切り替え、次のサンプルを吸引します。
3. サンプルバイアルを準備 (Prefetch Sample Vial)  
: 指定時間後にバイアルをインジェクションポートの近くに準備します。

- ④ さらに詳細な設定を行う為には、**続き (More) >>** をクリックします。



- ⑤ サンプル溶媒の粘性を考慮し、吸引スピード (Draw Speed) ・吐出スピード (Eject Speed) を設定します。

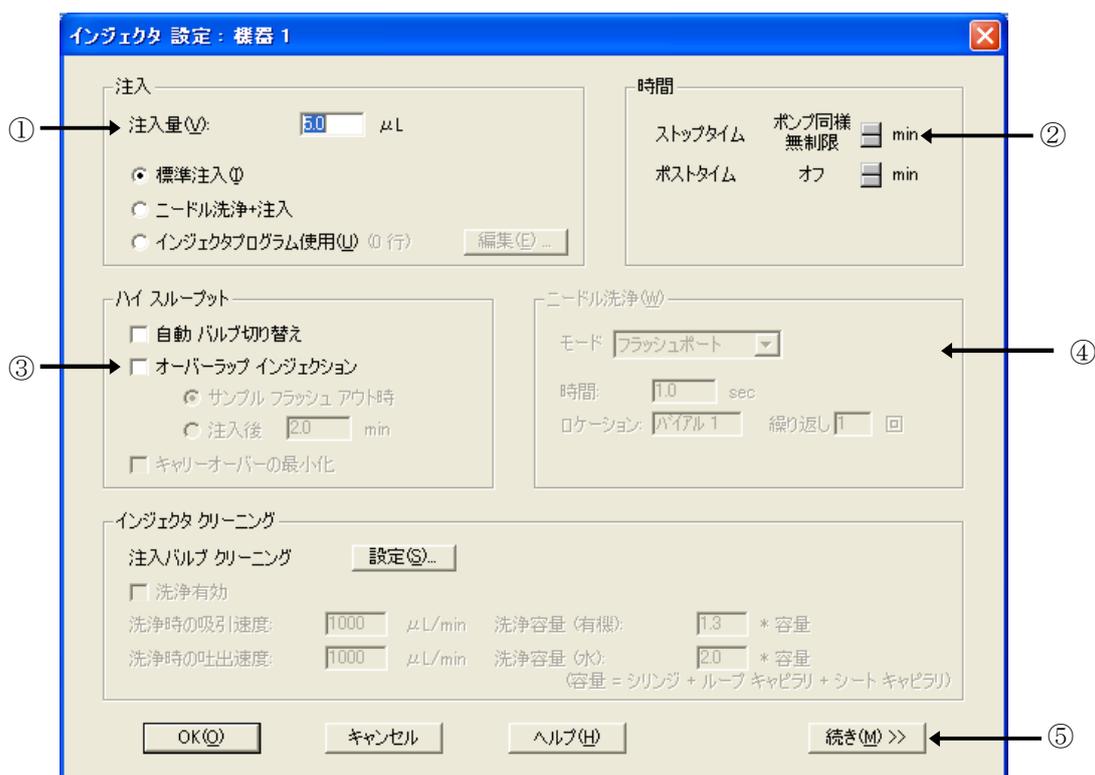
- ⑥ サンプルを吸引する際のニードルの位置 (Draw Position) を設定します。

---

⑦ 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。

⑧  をクリックします。

<高性能オートサンプラ/ウェルプレートオートサンプラの設定>



① 注入量 (Injection Volume) を設定します。また、注入方法を次の3つから選択します。

- ・標準注入 (Standard Injection)
- ・ニードル洗浄+注入 (Injection with Needle Wash) → ④ ニードル洗浄の設定をします。
- ・インジェクタプログラム使用 (Use Injector Program) → 編集 (Edit) で編集します。

② 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。

③ ハイスループット (High Throughput) で使用する場合に選択します。

自動バルブ切り替え (Automatic Delay Volume Reduction)

オーバーラップインジェクション (Enable Overlapped Injection)

バルブを切り替えるタイミングを、次の2つから選択します。

・サンプルフラッシュアウト時 (When Sample is flushed out)

→ ⑨ サンプルフラッシュアウトファクタ (Sample Flush-Out Factor) を設定  
します。

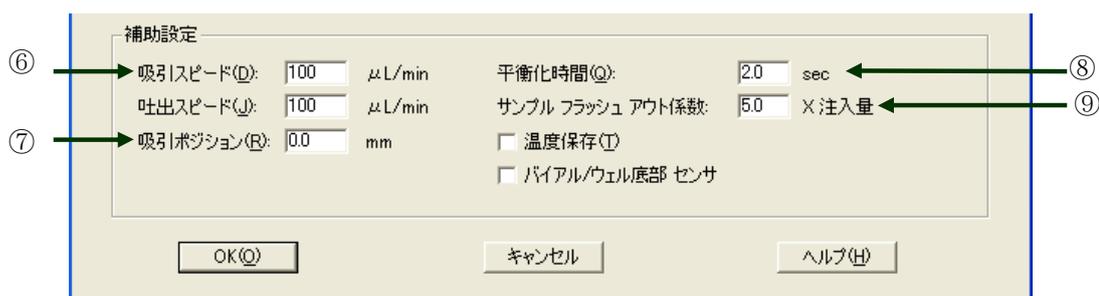
・注入後  min (after  min)

④ ニードル洗浄 (Needle Wash) を実施する場合に設定します。

フラッシュポート (Flushport) → 洗浄時間 (Time) を設定します。

バイアル (Vial) → 洗浄バイアル (Location) と繰り返し回数 (Repeat) を設定  
します。

⑤ さらに詳細な設定を行う為には、 をクリックします。



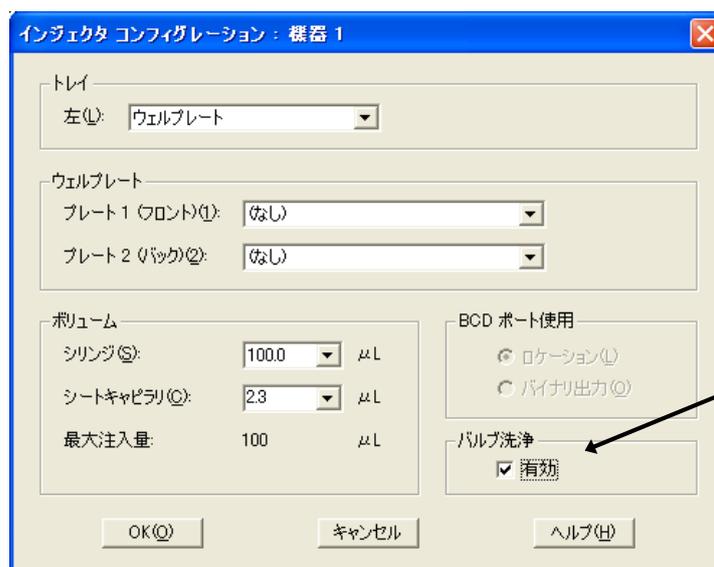
⑥ サンプルの粘性を考慮し、吸引スピード (Draw Speed) 、吐出スピード (Eject Speed) を設定します。

- 
- ⑦ サンプルを吸引する際のニードルの位置 (Draw Position) を設定します。
  - ⑧ 平衡化時間 (吸引動作直後の待ち時間) (Equilibration Time) を設定します。
  - ⑨ サンプルフラッシュアウト係数 (Sample Flush-Out Factor) を、注入量 (+ニードルシートの容量) の倍数で設定します。
  - ⑩  をクリックします。

<インジェクタクリーニング（パージキット）の設定>

装置 (Instrument) → インジェクタ続き (More Injector)

→ コンフィグレーション (Configuration)



バルブ洗浄 (Rinse Valve) の有効 (Enable) をチェックします。

前述のインジェクタ設定画面に入り、インジェクタクリーニングを設定します。



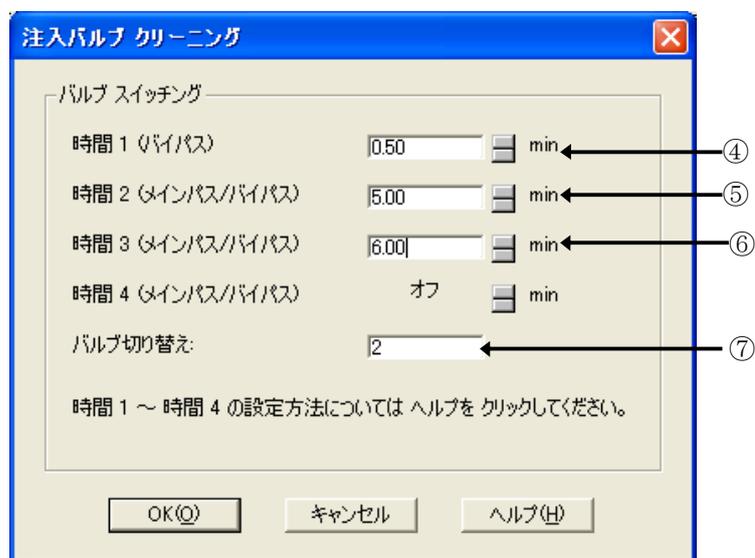
①  洗浄有効をチェックします。

② 洗浄時の吸引速度 (Rinse Draw Speed)、洗浄容量 (有機) (Rinse Volume (Organic)), 洗浄時の吐出速度 (Rinse Eject Speed), 洗浄容量 (水) (Rinse Volume (Water)) を

---

設定します。通常、速度は Default 設定、容量は 2~3 を設定します。分析するサンプル、分析時間によって、速度/容量を調整します。

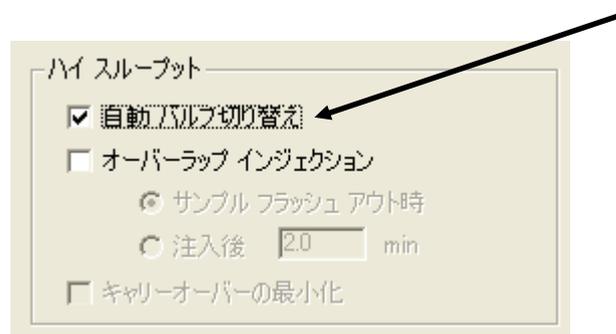
- ③ **設定 (Settings)** を押して、注入バルブクリーニングの設定を行います。



- ④ 有機溶媒で洗浄する時間を設定します。バルブがバイパスに切り替わり洗浄容量（有機）で設定した値に基づいてサンプルループ、ニードル、ニードルシート、バルブ内を有機溶媒で洗浄します。
- ⑤ グラジエント溶離において、目的成分がすべて溶出した後で有機溶媒組成がリッチになった付近での時間を入力します。この時間にバルブ切り替え（Valve movement）で設定された回数、オートサンプラのインジェクションバルブが Main Pass → Bypass と切り替わります。

分析途中でバルブが切り替わるため、若干のベースラインの乱れが起こる場合がありますので、この時間はピークが溶出しない時間を設定してください。バルブ切り替え後、洗浄容量（水）で設定した容量でサンプルループ、ニードル、ニードルシート、バルブ内をパージキットのボトルAに満たした溶媒で洗浄します。

- 
- ① 移動相組成が初期条件になっているところでバルブ切り替え (Valve movement) で設定した回数、オートサンプラのインジェクションバルブが Main Pass → Bypass と切り替わります。
  - ② 上記で設定した各時間で、バルブを何回切り替えるかを設定します。
  - ⑧ 自動バルブ切り替え (Automated Valve switching) にチェックをし、有効にしてください



補足：ハイ スループット分析を目指した設定をする時

「自動ディレイ低減 (ADVR)」を有効にしたときや、「オーバーラップインジェクション」を有効にした場合、移動相、サンプル、流量などによっては、上記「注入クリーニング (バルブ)」の設定をすべてOFFにした方が良い結果が得られる場合がありますので、ご検討ください。

---

補足： この補足項目は、今設定しなくてもよい項目です。

分析開始前に確認してください。

ウエルプレートを使用する場合は、

「トレイ上に実際に乗っているプレートの種類」を設定する必要があります。

メニューから

機器 → インジェクタ続き → コンフィグレーション

GUI からは、

インジェクタアイコン上で左クリックして、メニューから

「コンフィグレーション」を選択します。

ダイアログボックス中の「ウエルプレート」欄に、

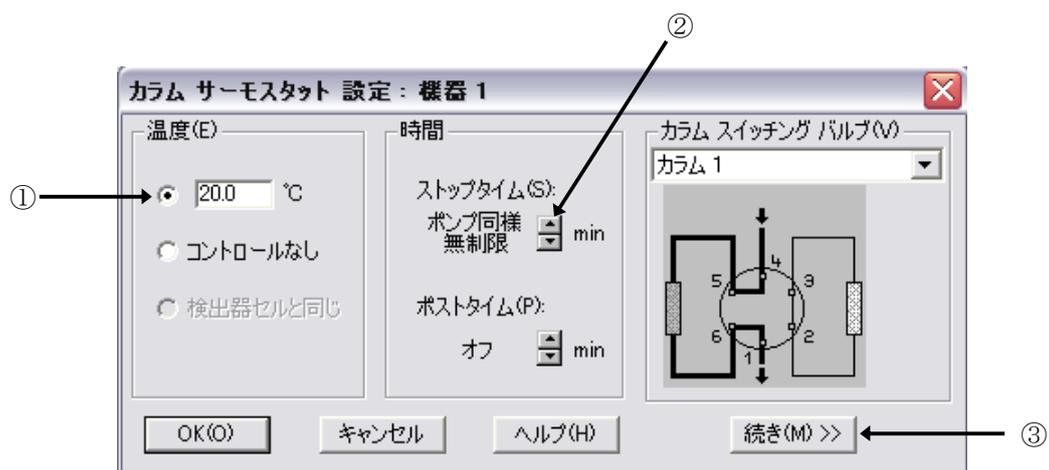
プレート 1 (手前側)

プレート 2 (奥側)

の選択肢の中から、実際にセットしたプレート名を選んで **OK** してください。



<カラムコンパートメントの設定>



- ① ボタンをクリックし、ヒーターブロックの温度を入力します。  
この状態では、左右の2つのヒーターブロックは同じ温度で制御されます。
- ② 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。
- ③ 左右のヒーターブロックをそれぞれ設定するには、続き (More) >> をクリックします。

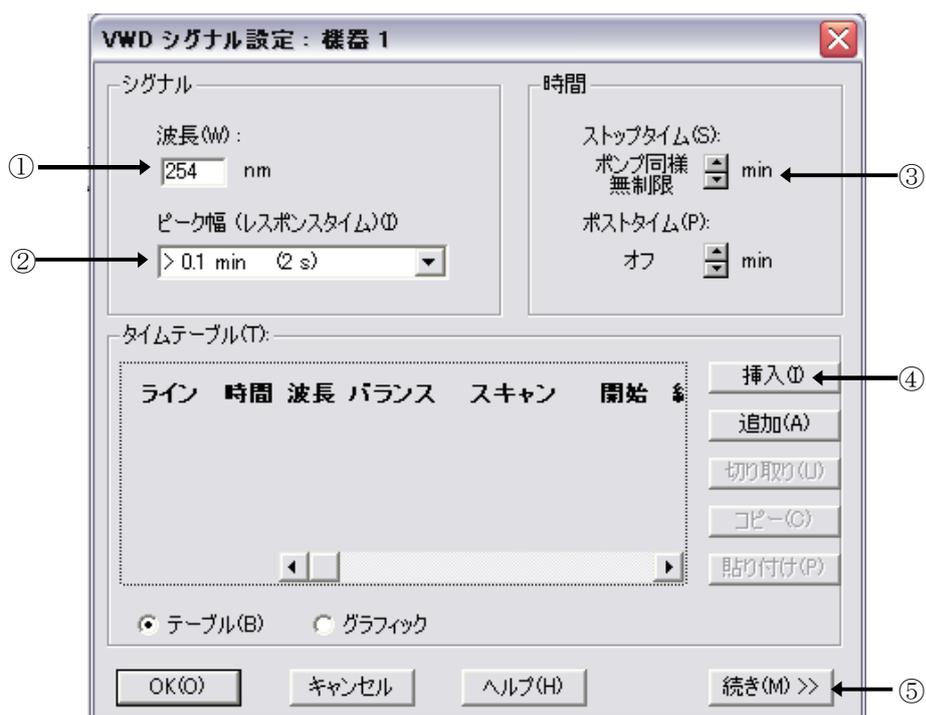


④ 右のヒーターブロックの制御方法を選択します。

⑤ **OK** をクリックします。

\* カラムスイッチングバルブの設定例は付属のリファレンスマニュアルをご参照下さい。

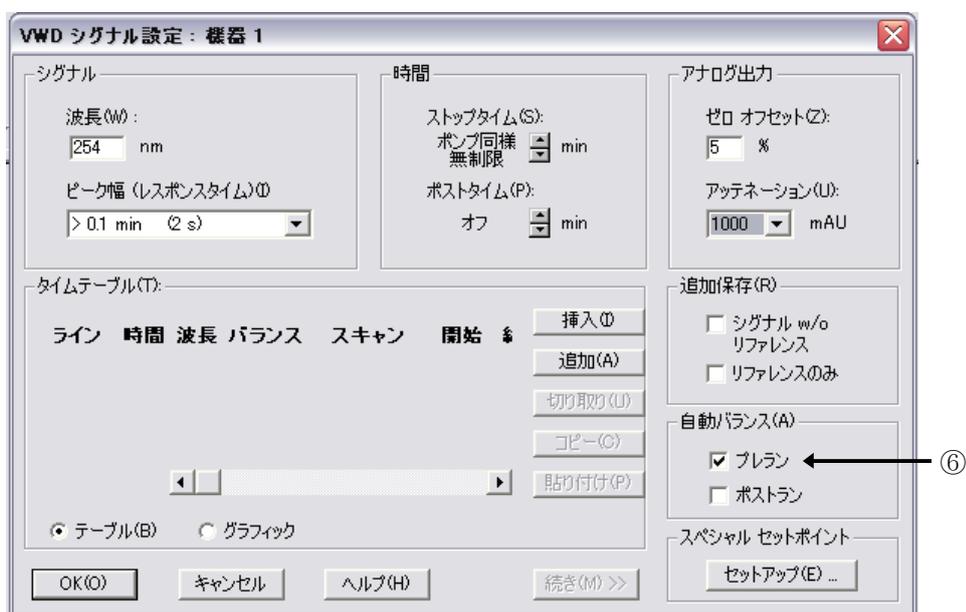
<UV-Vis 検出器の設定>



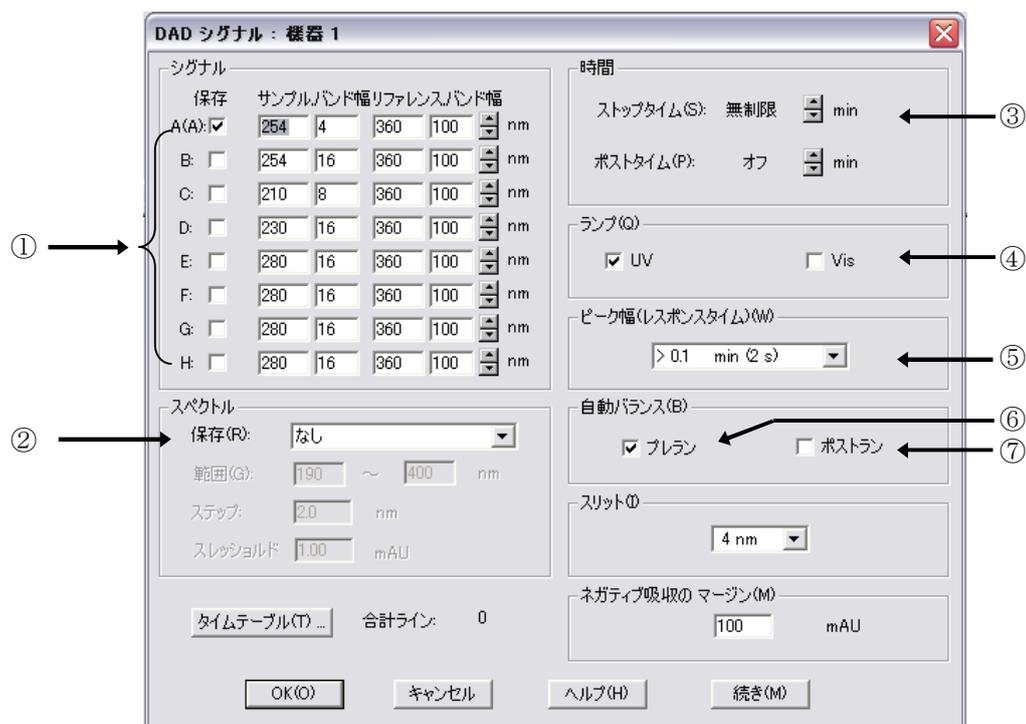
- ① 波長 (Wavelength) を設定します。
- ② 矢印をクリックし、ピーク幅 (Peakwidth) を選択します。
- ③ 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。
- ④ 波長のタイムテーブルを設定する場合には、**追加 (Append)** をクリックして編集モードにします。
- ⑤ 詳細な設定は、**続き (More) >>** をクリックします。

⑤ 測定直前に自動的にバランスをかけるため、プレラン (Prerun) を選択します。

⑥ **OK** をクリックします。

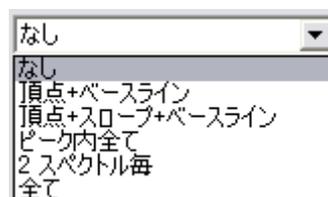


<ダイオードアレイ検出器の設定>



① シグナル (Signals) は 8 波長まで採取できます。(G1315A 型 G1315B 型は 5 波長まで)採取するシグナルのチェックボックスをクリックします。サンプルおよびリファレンス波長を設定します。

② スペクトル (Spectrum) の採取方法を選択します。  
また、スペクトルを取り込む波長範囲、  
ステップなどを設定します。

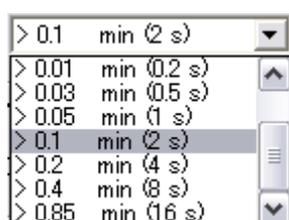


③ 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。

---

④ 分析に必要なランプを選択します。

⑤ ピーク幅 (Peakwidth) を選択する矢印をクリックし、選択します。



⑥ 分析直前に自動的にバランスをかけるため、プレラン (Prerun) を選択します。

⑦ スリット幅 (Slit) を選択する矢印をクリックし、選択します。



⑧ 全てを設定したら  をクリックします。

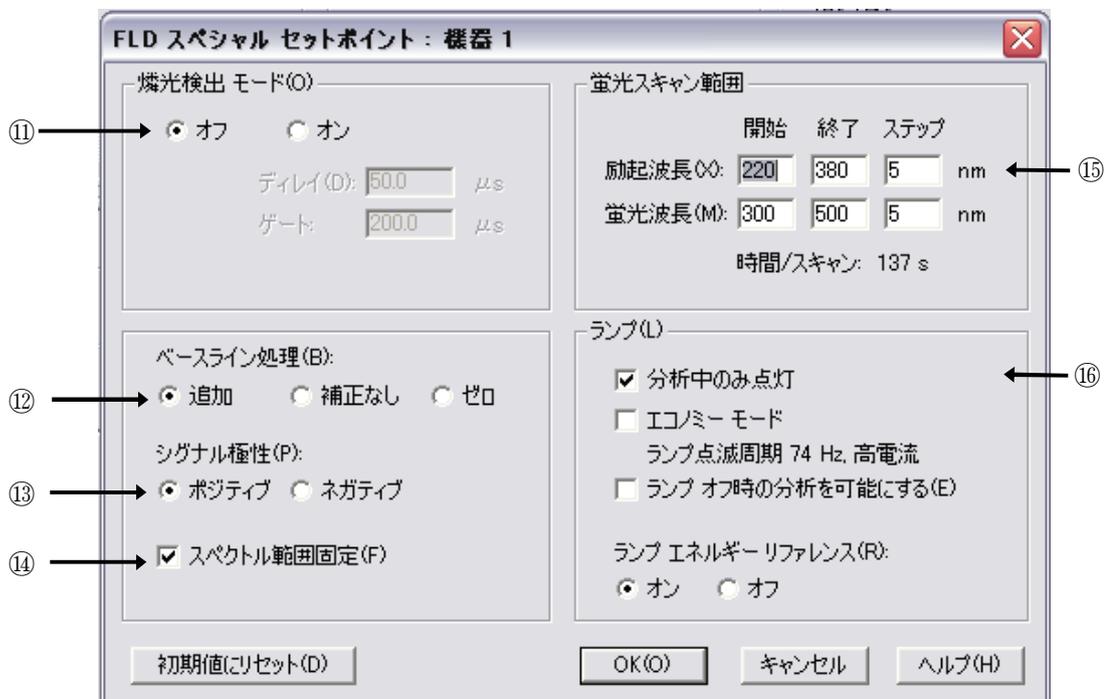
<プログラマブル 3D 蛍光検出器の設定>



- ① 励起波長 (Excitation) 、蛍光波長 (Emission) を設定します。
- ② 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。
- ③ タイムテーブルを設定する場合には、 **追加 (Append)** をクリックして編集モードにします。
- ④ 詳細な設定は、 **フル (Full) >>** をクリックします。



- ⑤ マルチ Ex. (Multi Ex.) またはマルチ Em. (Multi Em.) を選択すると、励起または蛍光波長について多波長検出やスペクトル採取を行うことができます。
- ⑥ 励起波長または蛍光波長について、測定波長を 3 波長まで追加することができます。
- ⑦ スペクトルの採取方法を選択します。
- ⑧ 矢印をクリックし、ピーク幅 (Peakwidth) を選択します。
- ⑨ PMT-ゲイン (PMT-Gain) で信号の増幅を設定します。
- ⑩ さらに詳細な設定を行うためには、スペシャルセットポイント (Special Setpoints...) をクリックします。次ページに示します。



- ⑪ 燐光検出モード (Phosphorescence Detection Mode) : 燐光を測定する時に設定します。  
 デイレイ (Delay) : ランプ点灯から分析までの待ち時間  
 ゲート (Gate) : 測定時間
- ⑫ ベースライン処理 (Baseline Behavior) : 波長または PMT ゲインを変更した時のベースラインの処理方法を設定します。  
 補正 (接続) (Append) : 元のベースライン位置にベースラインを合わせます。  
 補正なし (Free) : ベースラインを調整しません。(ベースラインがシフトします。)  
 ゼロ補正 (Zero) : ベースラインを 0 LU (Luminescence Units) にします。
- ⑬ シグナル極性 (Signal Polarity) : シグナルの極性を設定します。

---

⑭ スペクトル範囲固定(Fit Spectral Range) : 励起波長と蛍光波長の差が 25 nm 以上になるように測定範囲を調整します。

⑮ 蛍光スキャン範囲(Fluorescence Scan Range) : スキャンを行う波長範囲を設定します。

⑯ ランプ(Lamp) : ランプの点灯条件を設定します。

分析中のみ点灯(Only On During Mode) : 分析中のみランプを点灯します。通常この条件を選択します。

エコノミーモード(Economy Mode) : 低周波数または低電流でランプを点灯します。

S/N 比は小さくなりますが、ランプの寿命が長くなります。

ランプオフ時の分析を可能にする(Enable analysis when lamp is off) :

ランプが点灯していない時も分析が可能となります。

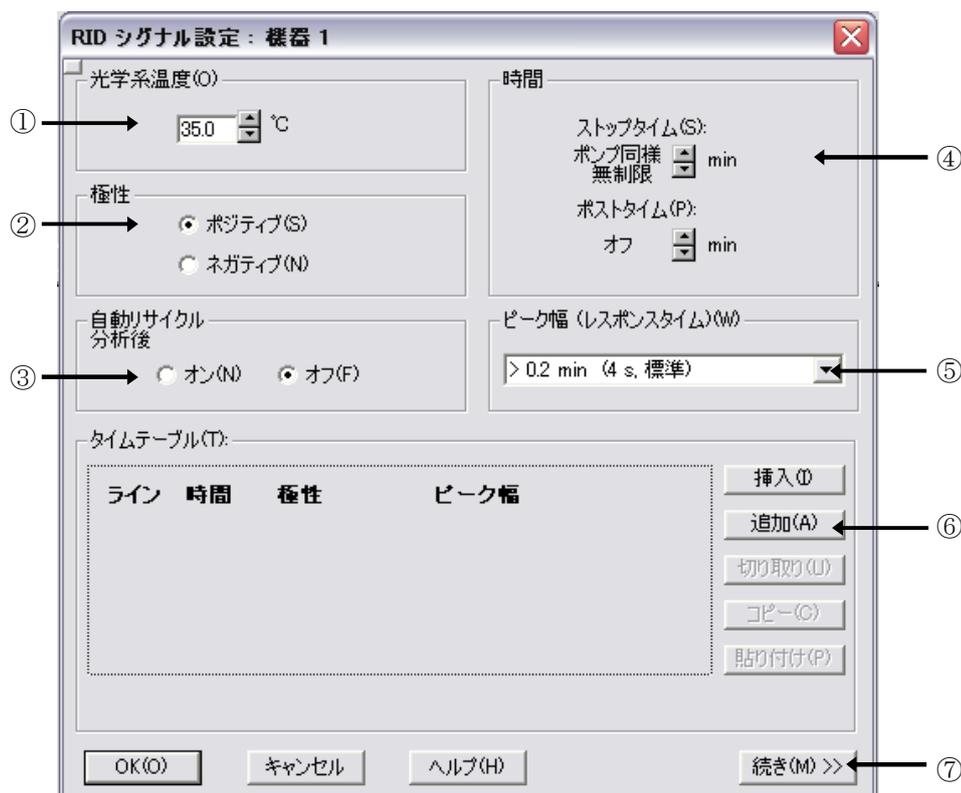
ランプエネルギーリファレンス(Lamp Energy Reference) :

リファレンスダイオードを使用して、シグナルを補正します。S/N 比が改善されます。

⑰  をクリックして、画面を閉じます。

### <示差屈折率検出器の設定>

- ① 光学系温度 (Optical Unit Temperature) を設定します。
- ② 極性 (Polarity) を選択します。
- ③ 分析後に自動的に溶媒のリサイクルを行う時には **on** に設定します。
- ④ 分析時間をポンプと同期させるため、ストップタイム (Stoptime) はポンプ同様 (as Pump) とします。
- ⑤ 矢印をクリックし、ピーク幅 (Peakwidth) を選択します。
- ⑥ タイムテーブルを設定する場合には、**追加 (Append)** をクリックして編集モードにします。
- ⑦ 詳細な設定は、**続き (More) >>** をクリックします。次ページに示します。





⑧ 測定直前に自動的にオートゼロをかけるため、on を選択します。

⑨ **OK** をクリックします。

---

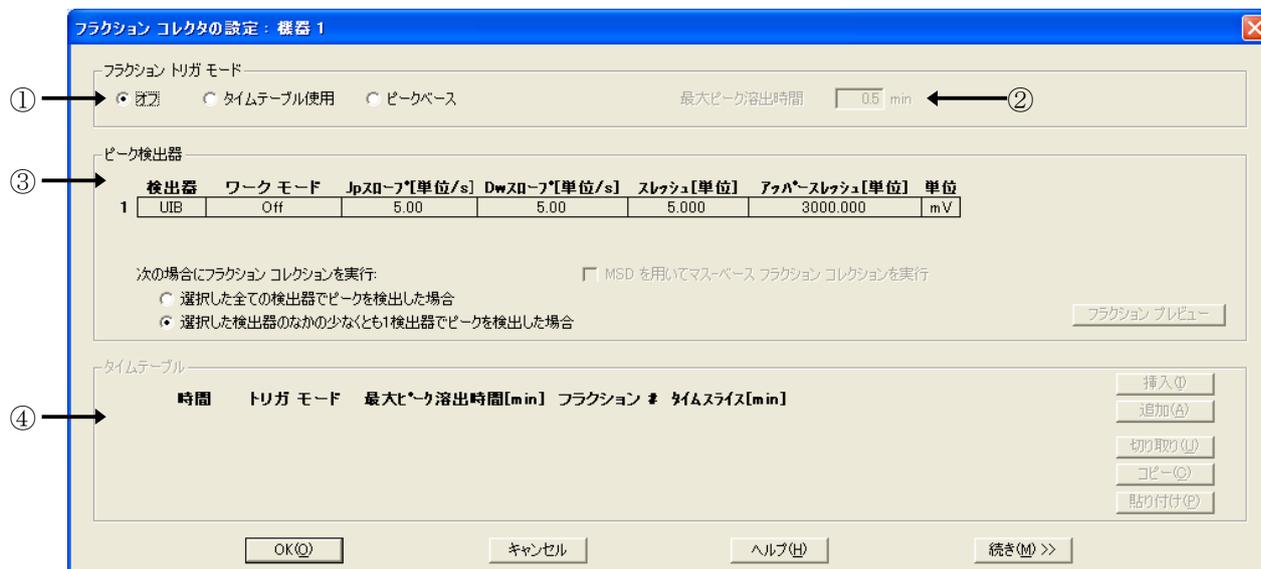
<バルブ類の設定> (例: G1157A 2PS/10PTバルブ)

- ① ポジション (Position) を選択します。OKをクリックすると選択したポジションにバルブが切り替わります。
- ② バルブ名を入力します。
- ③ タイムプログラムでバルブ切替を行う場合は、タイムテーブルを設定します。  
 分析後、次のポジションの選択が可能です。
- ④ ポジション説明を入力します。



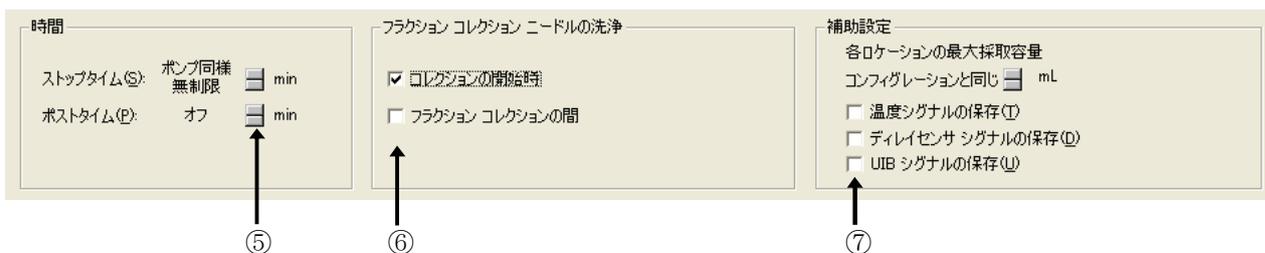
- ⑤ OKをクリックします。

## <フラクションコレクタの設定>



- ① フラクショントリガモード (Fraction Trigger Mode) を選択します。
  - ・オフ (off) : フラクション行わない
  - ・タイムテーブル使用 (Use Timetable) : トリガーモードよりタイムベースフラクションとピークベースフラクションを切り替えることができます。
  - ・ピークベース (Peak-based) : ピークベースフラクションを実施
- ② 最大ピーク容量時間 (Max Peak Duration) を設定します。
- ③ ピーク検出 (Peak Detection) を設定します。フラクショントリガモードにピークベースまたは、タイムテーブルでピークベースフラクションを設定した場合に、トリガとなる検出器の選択及びパラメータの設定を行います。検出器のワークモード (Working Mode) を On にして、各検出パラメータを設定します。フラクションプレビュー (Fraction Preview) の画面で、採取したデータを読み込み各パラメータを画面上で最適化することができます。
- ④ フラクショントリガモードでタイムテーブル使用を選択した場合にタイムテーブルを設定します。

続き (More) を押して、さらに詳細な設定が行えます。



- ⑤ ストップタイム、ポストタイムを設定します。
- ⑥ フラクシオンニードル洗浄の設定を行います。□フラクシオンの開始時を  
チェックすることをお勧めします。
- ⑦ 補助設定を設定します。  
容器にフラクシオンする容量を設定できます。  
(プレート/試験管トレイのみ有効。ハーフトレイでは設定は無効)  
その他、各装置データの保存設定が行えます。

## 補足：冷却機能付きオートサンプラの温度設定

ご使用のオートサンプラが冷却機能付きの場合は、この設定を行って下さい。

トップ画面で、オートサンプラの絵をクリックします。右のようなメニューが表示されます。

メニューからサーモスタット (Thermostat) を選択します。

あるいは、メニューバーから

装置 (Instrument) → インジェクタ続き (More Injector) → サーモスタット (Thermostat) を選択します。



① サーマスタット (Thermostat) を ON に します。

② 温度を入力します。

③電源を入れた時に、自動的にサーモスタットを ON にする場合、チェック します。

④ **OK** をクリック します。



---

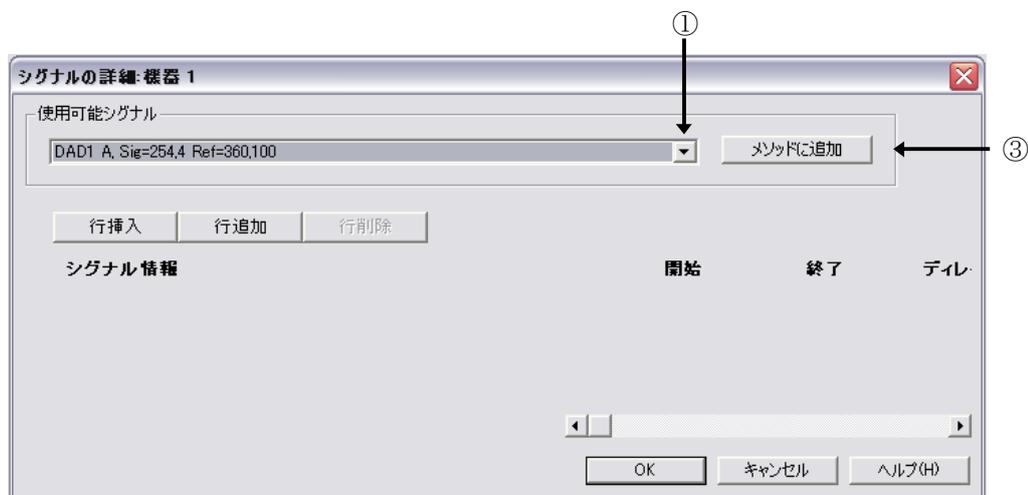
このあと、「メソッド全体の編集」はデータ解析部分に移行します。  
続きは、2-2-2-3節 「メソッドパラメータの編集・データ解析部分」を  
参照してください。

### 2-2-2-3. メソッドパラメータの編集・データ解析部分

この画面からデータ解析に関連する画面が表示されます。「メソッド全体の編集」を実行中の中では、確認のみで結構です。解析部分の詳細は、第6章を参照ください。

#### <シグナルの詳細>

シグナル詳細画面では、積分およびレポート報告したいシグナル（クロマトグラム）を設定します。



① 使用可能シグナル (Available Signals) の矢印をクリックします。

② 目的のシグナルを選択します。

③ **メソッドに追加 (Add to Method)** を押すと、シグナル説明欄に加わります。

スタート・エンド (Start・End) を設定すると、解析対象のシグナルの時間範囲を限定できます。同様に、複数のシグナルおよびモニターカーブを選択することができます。

④ **OK** をクリックします。

\* 検出器の設定で設定したシグナルとシグナル詳細で選択した使用可能シグナルが異なると、メソッドファイルをセーブする際に警告が表示されます。

<積分イベント> データ解析の項に説明があります

積分（インテグレーション）のイベント変更の画面が表示されます。

積分イベント変更

マニュアル イベント

OK キャンセル

全てのシグナルから:

積分イベント	値
タンジェント スキム モード	スタンダード
テール ピーク スキム 高さ	0.00
フロント ピーク スキム 高さ	0.00
スキム 谷比	20.00
ベースライン 補正	クラシカル
ピーク 谷比	500.00

イベント テーブル: MWD デフォルト

時間	積分イベント	値
初期	スロープ 感度	1
初期	ピーク 幅	0.04
初期	面積 リジェクト	1
初期	高さ リジェクト	1.7
初期	ショルダー	オフ

- ① 新しいベースラインコンセプトのために設けられた基本的な積分条件です。変更する場合は目的のイベントを選択し編集モードにします。タンジェントスキムモードとベースライン補正は、表示されるプルメニューから適切なものを選択し、その他イベントには数値を入力します。
- ② その他の基本的な積分イベントです。変更する場合は目的のイベントを選択し、編集モードにします。
- ③ その他のイベントを追加する場合は、イベント追加ボタンをクリックして選択し、値や時間を入力します。
- ④ ここでは、このまま **OK** ボタンをクリックします。

<レポート条件> データ解析の項に説明があります

“レポート”とはシグナルやスペクトルの計算・解析結果をいいます。

レポート条件設定画面では、レポート報告の条件を設定します。



- 
- ① レポートの出力先 (Destination) を選択します。
  - ② 定量方法 (Quantitative Results) を選択します。
  - ③ レポートスタイル (Report Style) を選択します。  
矢印をクリックし、簡易 (Short) を選択します。
  - ④ レポートにクロマトグラムを追加する場合には、クロマトグラム出力の追加 (Add Chromatogram Output) にチェックを入れます。
  - ⑤ クロマトグラムを出力する向きを選択します。
  - ⑥ レポート用紙上に表示するクロマトグラムの割合を設定します。
  - ⑦ シグナルの表示画面を変更できます。
  - ⑧  をクリックします。

---

### <モニターカーブ>

シグナルを読み込む際、シグナルにシステム圧力など実際の分析時の状態を重ね書きすることができます。

① 表示したい項目をクリックします。

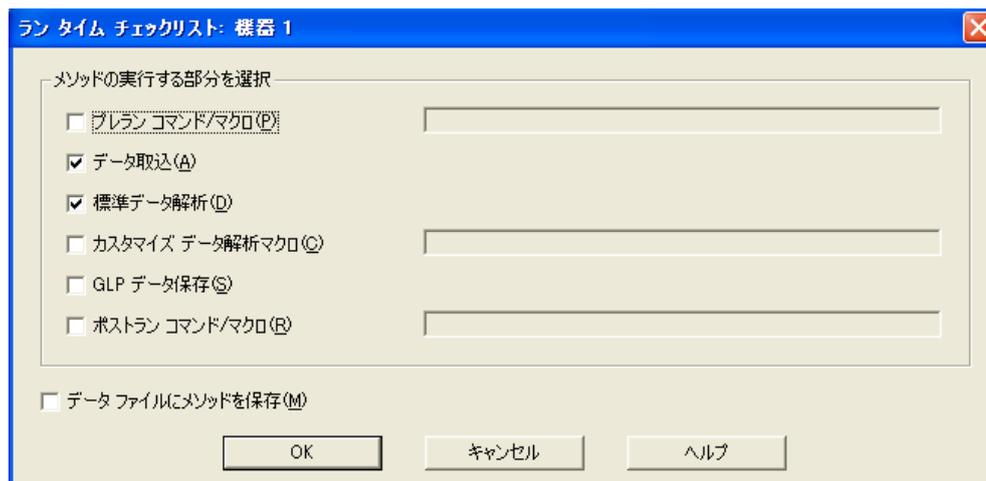
②  OK をクリックします。



---

## <ランタイムチェックリスト>

分析を実行する際、メソッドでどの項目を実行するか設定します。



- ① データ取り込み (Data Acquisition) と標準データ解析 (Standard Data Analysis) のチェックボックスをクリックします。

これにより、分析はデータの取り込みと解析を連続して実施します。

- ② **OK** をクリックします。

\* 以上で メソッド全体の編集 (Edit entire method) によるメソッドの編集が終わりました。

メソッドを保存する前に、再度メソッド全体の編集 (Edit entire method) を実施し、メソッドパラメータを確認してみましょう。

## 2-3. メソッドファイルの保存

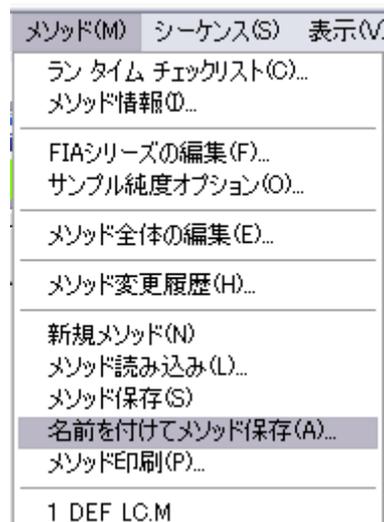
編集したメソッドを保存します。

メソッドファイル名を変更して保存する場合は

メソッド (Method)

→ 名前を付けてメソッド保存 (Save Method As) ...  
を実施します。

- \* DEF\_LC.M の属性は上書き禁止になっています。  
必ずファイル名を変更することになります。



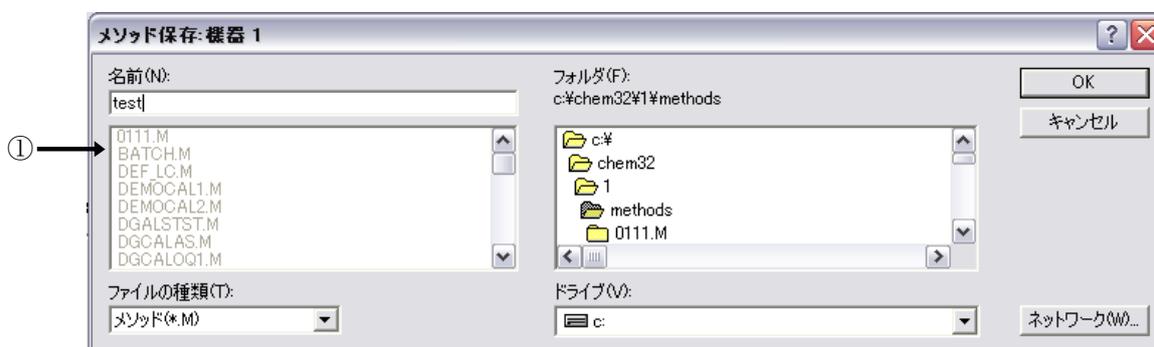
① ファイル名 (Name) を入力します。半角英数字 40 文字以内です。

メソッドファイルの拡張子 (\*.M) は自動的に付けられます。

以下の文字はファイルまたはディレクトリ名には含めません。

・ < > : / ¥ | @ % \* ? ' & 空白 (スペース) など。

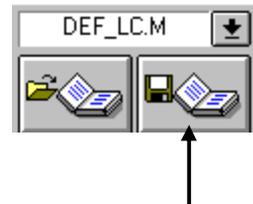
(別冊の「Chemstation の理解」の「1章 Agilent ChemStation の機能」の「ファイルの命名規則」節を参照ください。)



② **OK** をクリックします。

---

メソッド名を変更せず上書きする場合は、アイコンをクリックします。



メソッドを保存するたびに、メソッド編集に関連したコメントを残すことができます。

これによりメソッド名を上書きで保存しても履歴を見ることができます。  
コメントを入力し、 をクリックします。

## 2-4. メソッドの一部変更

すでに編集したメソッドのパラメータを部分的に変更する方法を示します。  
ここではインジェクタ設定を例にして、注入量を変更する例を示します。

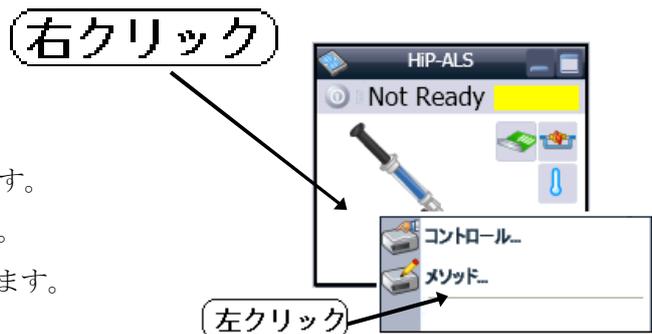
### 【メソッドパラメータの一部変更】

メソッドパラメータの中で目的のパラメータだけを変更するには、  
GUI の利用と、メニューから目的の設定を選ぶ方法があります。

GUI 利用の場合は、モダンビューとクラシックビューでは、操作が一部異なります。

モダンビューの場合

- ・ GUI 部分を利用する。  
右クリックして メニューを出します。  
「メソッド」を 左クリックします。  
機器設定のダイアログボックスが出ます。



- ・ メニューから  
機器 → 機器メソッド設定

の操作で、機器設定の  
ダイアログボックスが出ます。



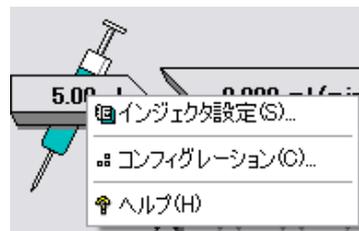
---

クラシックビューの場合

- GUI 部分を利用する。

GUI (システムダイアグラム) のインジェクタの上にマウスのポインタを動かします。ポインタの形状が変わるのを確認したら、そこでマウスの左ボタンをクリックします。

メニューから インジェクタ設定 (Set up Injector) を選択します。

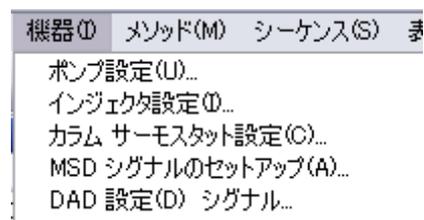


- メニューから

機器 (Instrument)

→ インジェクタ設定 (Set up Injector)

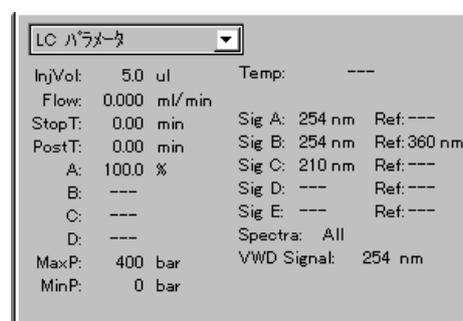
を選択します。



- 補足：クラシックビューの場合 “LC パラメータ”

システムダイアグラムの右下に “LC パラメータ (LC Parameters)” を表示させます。

インジェクタに関連するパラメータ (例えば注入量: **InjVol**) にマウスのポインタを動かします。ポインタの形状が変わるのを確認したら、そこでマウスの左ボタンをクリックすると、設定画面が表示されます。



---

### 【メソッドの保存】

メソッドパラメータを一部でも変更した場合、そのメソッドを保存する必要があります。  
2-3節 メソッドファイルの保存を参照してメソッドを保存してください。

---

## 第3章 システムの起動

### 3-1. 分析装置の準備

#### 【移動相の準備】

LC用溶媒をボトルに入れ、トレイにセットします。

※注意 ・使用する溶媒は液体クロマトグラフ用を使用願います。

特級等は、ベースラインの乱れや、ゴーストピークの原因になります。

- ・バッファを使用する場合は 0.45  $\mu\text{m}$  以下のフィルターで濾過して使用して下さい。
- ・オンラインデガッサが無い場合は、超音波減圧脱気してからセットして下さい。また、ボトル内の液温の変化により気泡が発生するので、室温に近づけるなどの点に留意して下さい。

#### 【オンラインデガッサ】

オンラインデガッサを使用する場合は、デガッサ内部の溶媒を置換します。

**注意：G1379A/B ミクロデガッサの場合は、この作業で、シリンジを使用しないでください。ポンプの送液で行ってください。**

ポンプのオン/オフ、溶媒設定は、次の3-3節を参照してください。

標準デガッサの場合は付属のシリンジを以下のように接続します。

- ・バイナリポンプ，アイソクラティックポンプ：

ボトルヘッドアセンブリからアクティブインレットバルブに接続されているテフロンチューブを外し、シリンジアダプタに接続します。

- ・クォータナリポンプ：マルチチャンネルグラジエントバルブ（4方バルブ）に接続されているテフロンチューブを外し、シリンジアダプタに接続します。

各チャンネルごとに 30ml ほど置換します。

---

## 3-2. 分析装置の起動順序

### 1. ポンプヘッド内の気泡抜き（パージの実施）

ポンプヘッド内の気泡を取り除くためパージ（高流量で移動相を送液）します。

（ポンプのオン/オフ、溶媒設定は、次の3-3節を参照してください。）

ポンプヘッドのパージバルブを反時計方向に回すと、移動相はドレイン側に流れるようになります。

ポンプの流量を 5ml/min に設定し、ポンプを ON にします。各溶媒チャンネルごとに 3~5 分ほど流します。

パージが終了したらポンプを OFF にし、パージバルブを時計方向に回します。

※注意 パージバルブは締めすぎに注意して下さい。

時計方向に回して手応えを感じたら（負荷が大きくなったら）、そこからさらに 1/4 回転ほど回します。

ポンプを ON にした際、ドレイン側チューブに移動相が流れているのが観察されたら、少しずつ時計方向に回し増し締めをして下さい。

### 2. 検出器の準備

ランプを点灯させます。

※注意 安定したベースラインを得るために、30 分以上待ってから分析を開始することをおすすめします。

### 3. 流路の溶媒の置換

カラムを保護するため、カラム入口のコネクタを外します。

設定した流量で移動相を送液し、流路（カラム入口）が十分に置換されるまで流します。

※注意 移動相としてバッファを使用した直後に有機溶媒のみを流すと、塩が析出し配管が詰まることがあります。その際は、まず流路を純水に置換してから、有機溶媒に置換して下さい。

---

#### 4. カラムの接続

ポンプの送液が停止した状態でカラムを接続します。

#### 5. カラムコンパートメントの準備

ヒーターブロックの温度コントロールを ON にします。

※注意 カラムが温まるまではカラムを流路に接続しないか、接続する場合は低流量で送液することをおすすめします。

カラムを接続して送液を始めたら、カラム内部の温度が安定するまで待つてから分析を開始することをおすすめします。流量が 1ml/min の場合、30分が目安です。

#### 6. サンプルバイアルの設置

サンプルバイアルをトレイの 1 番に設置します。

### 3-3. 分析装置の起動方法

#### 【システムの起動方法】

ポンプを例にして、システムを ON にする方法を示します。

#### 【ポンプのオン】

これには以下の (A), (B), (C) の方法があります。

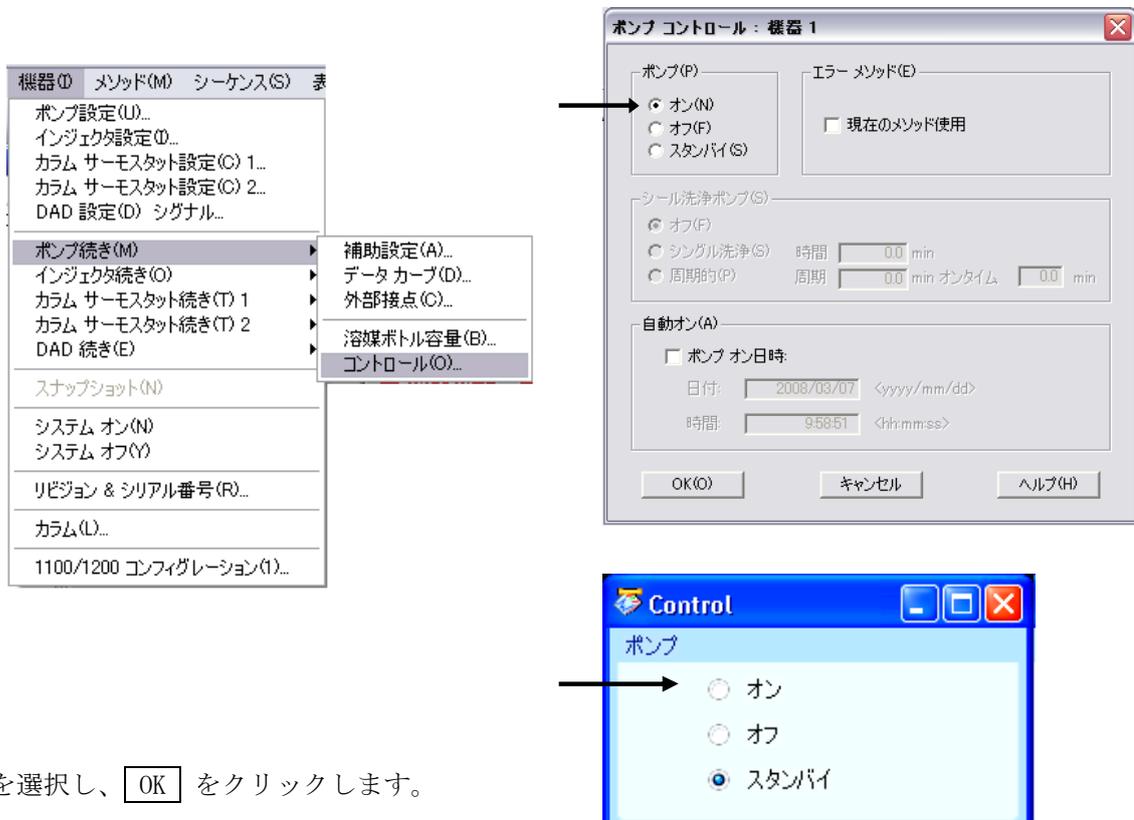
カラム保護のため、実際にシステムを ON にするのは、3-2 節 システム ON の順序に従って行って下さい。

**注意：**ポンプオンの前に、溶媒が正しいか確認してください。

(A) プルダウンメニュー

メニューバーより設定します。

機器 (Instrument) → ポンプ続き (More Pump) → コントロール (Control)

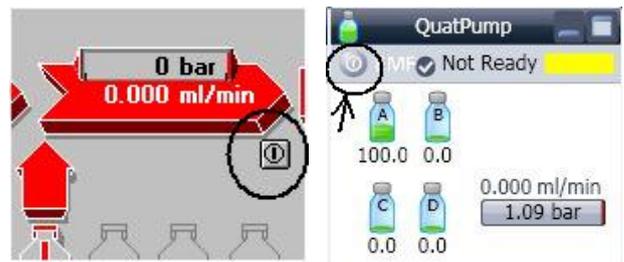


ON を選択し、**OK** をクリックします。

---

(B) GUI の利用 (モジュール単位)

マウスでポンプ GUI 右下のボタンをクリックすると、ポンプを ON にすることができます。



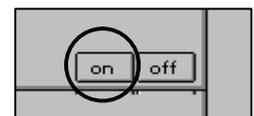
(C) システム全体の ON

システムに含まれる全てのモジュールを同時に ON にすることができます。

システムダイアグラム右下の  on をクリックします。



クラシックビューの場合はメニューからでもシステムオンが可能です。メニューバーから



装置 (Instrument) → システム オン (System On)  
を選択します。

注意：ポンプのパーズを行うなど設定変更した場合、現在のメソッドは、ロードしたものとはことなります。パーズなど設定変更を伴う準備をした場合は、使用するメソッドをロードしなおしてください。

注意：システムオンの状態でメソッドを読み込むと、ポンプ流量などの設定が、**直ちに変わります**。読み込み操作の前にメソッドファイル名を確認するか、あらかじめポンプを停止させてください。

### 3-4. モニタ表示

#### 【システム “Ready”】

GUI のステータスはシステム全体が分析を開始できるかどうかの状態を次のように示します。



**Ready (緑)** : システム中すべてのモジュールが安定し、分析可能な状態。

**Not Ready (赤)** : システム中のモジュールの中で安定していないものがあり、分析を開始できない状態。

**Error (赤)** : エラーが発生している状態。

ステータスが **Ready** を示したら、分析を開始できます。

#### 【ベースラインおよびシステム圧力のモニタリング】

オンラインシグナルモニタでベースラインおよびシステム圧力を表示させ、システムが安定するのを確認します。

オンラインプロットが出ていない場合は、

メニューから、

表示 → オンラインプロット

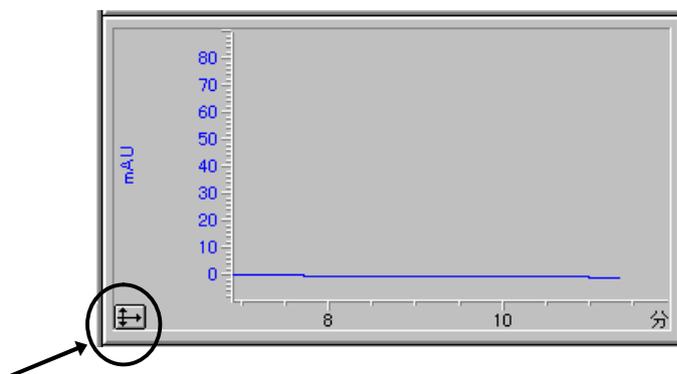
→ シグナルウィンドウ1

を選びます。

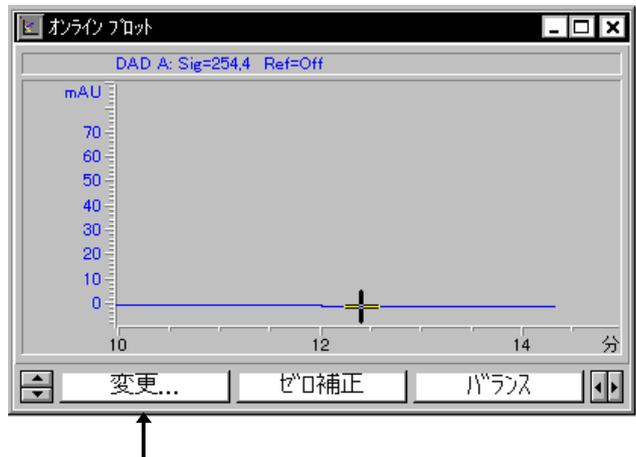
また、クラシックビューの場合は、

GUI のシグナルモニタ左下のボタンを

クリックします。



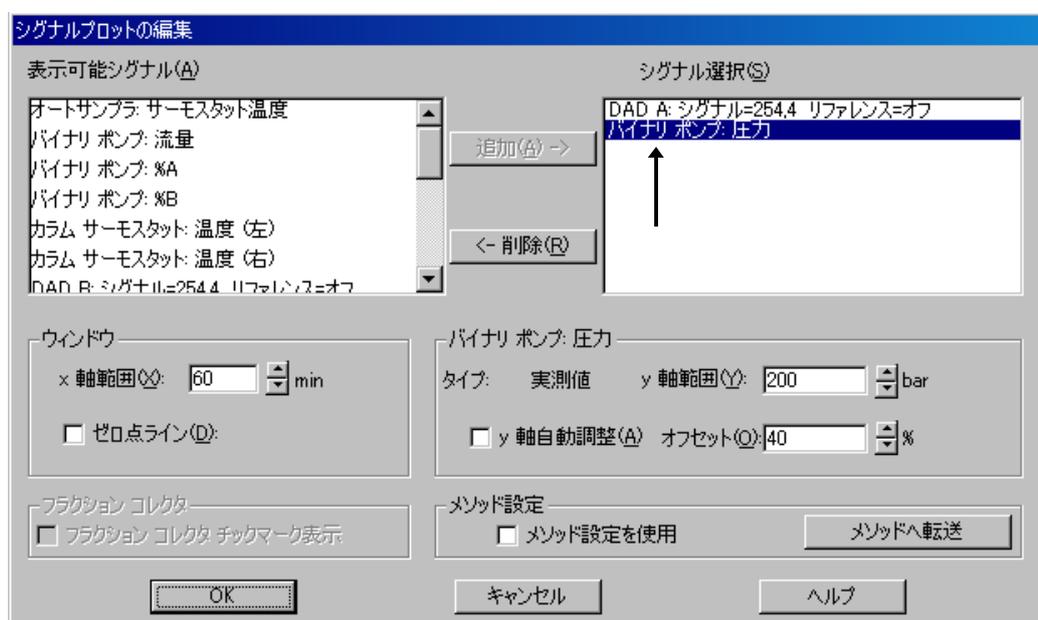
変更 (Change...) をクリックすると  
シグナルプロットの編集  
(Edit Signals) 画面が  
表示されます。



ダイオードアレイ検出器の場合、表示可能シグナル (Available Signals) 欄から **DAD A:** を選択し、追加 (Add) をクリックすると シグナル選択 (Selected Signals) 欄に加わります。

同様に バイナリポンプ圧力 (Binary Pump Pressure) を追加すると以下の画面になります。

シグナル選択 (Selected Signals) 欄のシグナルを個々にハイライトにすると、シグナルを表示する範囲 (y 軸範囲 (y-axis range) ) の設定ができます。



設定後 **OK** をクリックします。

---

## 【オンラインスペクトルモニタの表示】

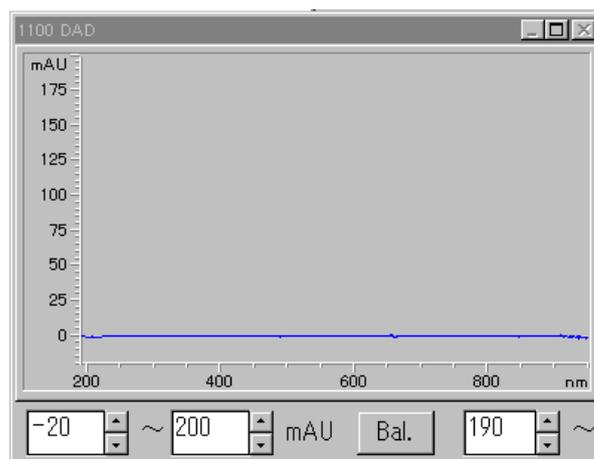
ダイオードアレイ検出器または蛍光検出器の場合、オンラインスペクトルモニタを表示することができます。

メニューバーから

表示 (View)

→ スペクトル表示 (Online Spectra)

を選択します。



---

## 第4章 分析の実行

### 4-1. “1サンプルのみ”の分析

#### 4-1-1. サンプル情報の設定

1サンプルのみのデータを採取する場合には、

- サンプルバイアル番号と
- データの溜まるフォルダと
- データファイル名の設定を

行います。

サンプルがウェルプレートの場合は、「トレイ上に実際に乗っているプレートの種類」を設定してください。

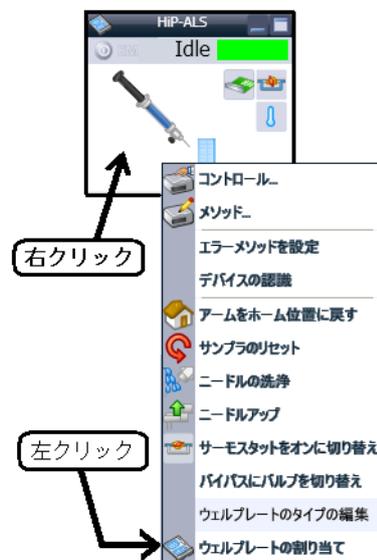
- ・モダンビューの場合、  
メニューから

機器 → 続き HiP-ALS (種類によって表記が異なります)

→ ウェルプレートの割り当て (assign well-plate)

GUIからは、

インジェクタアイコン上で  
右クリックして、メニューから  
「ウェルプレートの割り当て」  
を選択します。



ダイアログボックス中の

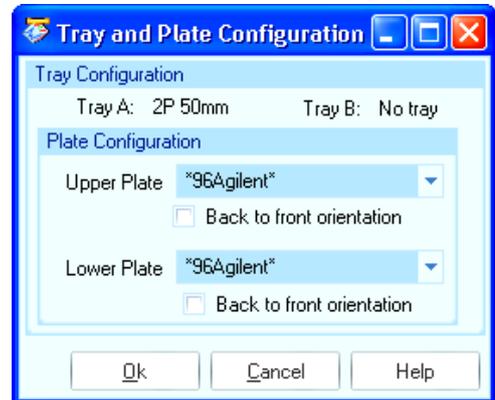
「ウェルプレート」欄を設定します。

「上のプレート」は奥側です。

「下のプレート」は手前側です。

実際にセットしたプレート名を選んで

**OK** してください。



・クラシックビューの場合、

メニューから

機器 → インジェクタ続き → コンフィグレーション

GUI からは、

インジェクタアイコン上で左クリックして、メニューから

「コンフィグレーション」を選択します。

ダイアログボックス中の「ウェルプレート」欄に、

プレート 1 (手前側)

プレート 2 (奥側)

の選択肢の中から、実際にセットしたプレート名を選んで **OK** してください。



1本のバイアルのアイコンをクリックします。

(サンプルが、ウエルプレートでもバイアルでも

1本バイアルアイコンをクリックして下さい)

メニューから



ランコントロール (Run Control) → サンプル情報 (Sample Information)

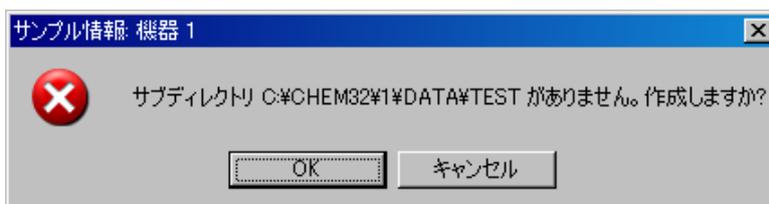
を選択します。

① 分析者名を入力します。

② マニュアルを選択し、ファイル名を入力します。

データファイル名は半角英数字 40 文字以内です。拡張子 (\*.D) は自動的に付けられます。

③ データ管理をしやすいように、サブディレクトリを設定します。半角英数字で 40 文字以内です。入力後、他のパラメータを編集しようとするときメッセージが表示されますので、**OK** をクリックします。



④ロケーション (Location) を設定します。

・バイアル

例) 1 と入力します。

入力後次の項目に進むと、「バイアル 1 (Vial 1) 」と表示が変更されます。

・ウェルプレート (高性能オートサンプラ/ウェルプレートサンプラの場合のみ)

例) p1a1 と入力します。

入力後次の項目に進むと、「P1-A-01」と表示が変更されます。

P1 - A - 01  
↑ ↑ ↑  
プレート番号 (P1 : 手前側、 P2 : 奥側) 行 (Row) 番号 (96Well の場合には A~H) 列 (Column) 番号 (96Well の場合には 1~12)

⑤サンプル名 (Sample Name) やコメント (Comment) を必要に応じて入力します。

⑥ **OK** をクリックします。

ヒント : データファイル名の選択で「プレフィックスとカウンタ」を選択すると、ファイル名は、「先頭文字列固定+数字カウンタ」になります。

(例 : meth\_develop001.D)

この機能は、1 本分析後、次の名前は自動的にカウンタ部分が増えます。

(例 : meth\_develop001.D の次に分析すると、次は meth\_develop002.D)

---

## 4-1-2. メソッドの実行

システムのステータスが **Ready** となり、ベースラインおよびシステム圧力が安定したら、データ採取を始めます。

1本のバイアルのアイコンをクリックします。  
画面上のボタンセットが1本分析用になります。



メニューバーから

ラン コントロール (Run Control) → ラン メソッド (Run Method)

を選択すると、分析が実行されます。

GUI 利用の場合

モダン GUI の場合

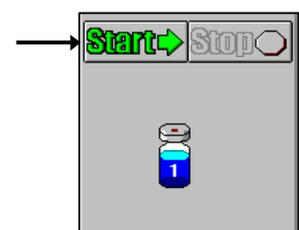


「シングルサンプル開始」ボタンをクリックします。

従来の GUI の場合

バイアルの絵が「1本」であることを確認して

をクリックすると、分析が実行されます。



- 
- \* メソッドを実行すると、検出器にバランスがかかり、それから注入動作を行います。
  - \* オンラインシグナルモニタには分析スタート時点で赤い縦線が表示されます。
  - \* 分析が正常に終了すると、レポートがスクリーンおよびプリンタに出力されます。

スタンダードサンプルは以下の4種類の成分で構成されています。

No.1	: ジメチルフタレート	Dimethylphthalate :DMP
No.2	: ジエチルフタレート	Diethylphthalate :DEP
No.3	: ビフェニル	Biphenyl (Diphenyl)
No.4	: o-ターフェニル	o-Terphenyl

- \* UV-VIS 検出器、ダイオードアレイ検出器、示差屈折率検出器では、No. 1~4 の4本のピークを確認することができます。
- \* プログラマブル 3D 蛍光検出器では、No. 3 のピークを確認することができます。

---

## 4-2. シーケンス (Sequence)

シーケンスとは、

「何番のバイアルを」 「どのメソッドで」 「何回」

「何番のバイアルを」 「どのメソッドで」 「何回」

.....

のように、サンプル毎に指定したメソッドに従い、連続自動分析を行うためのプログラムです。

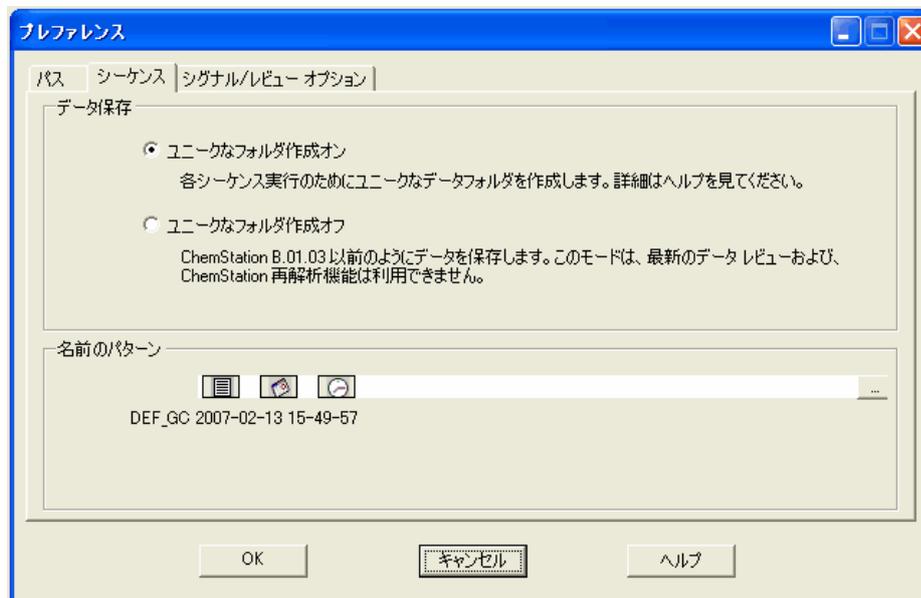
本節の詳細については、別冊の“新しい Chemstation ワークフロー入門”を参照ください。

### <シーケンスコンテナの設定>

表示 (View) → Preference (プレファレンス)

シーケンスタブを選択します。

ユニークなフォルダ作成のオン/オフを切り替えられます。



注意：もし、この設定を日常的に切り替える場合には、運用する上で、必ず「ユニークなフォルダ」のオン/オフを確認してください。

---

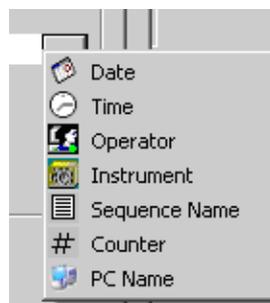
意図しないフォルダヘデータが保存されます

(例：日付時刻ごとに新しくコンテナが作られるはずが、  
ユニークなフォルダ作成がオフだったため、シーケンスパラメータ項目で  
設定した別のフォルダに保存されてしまう)

## 2. シーケンスコンテナ名の設定

名前のパターンを設定します。

右端の  を押すと項目選択メニューが表示されるので、そのなかから項目をクリックします。



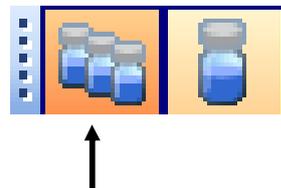
---

## 4-2-1. シーケンステーブル (Sequence Table) の設定

シーケンスには以下の内容が含まれます。

- ・シーケンステーブル (Sequence Table)  
: 実行メソッド, バイアル番号等の設定を行います。
- ・シーケンスパラメータ (Sequence Parameters)  
: データの保存場所 (ディレクトリ) の指定などを行います。

3本のバイアルのアイコンをクリックします。



画面の GUI が、シーケンス実行用に変化します。

メニューから

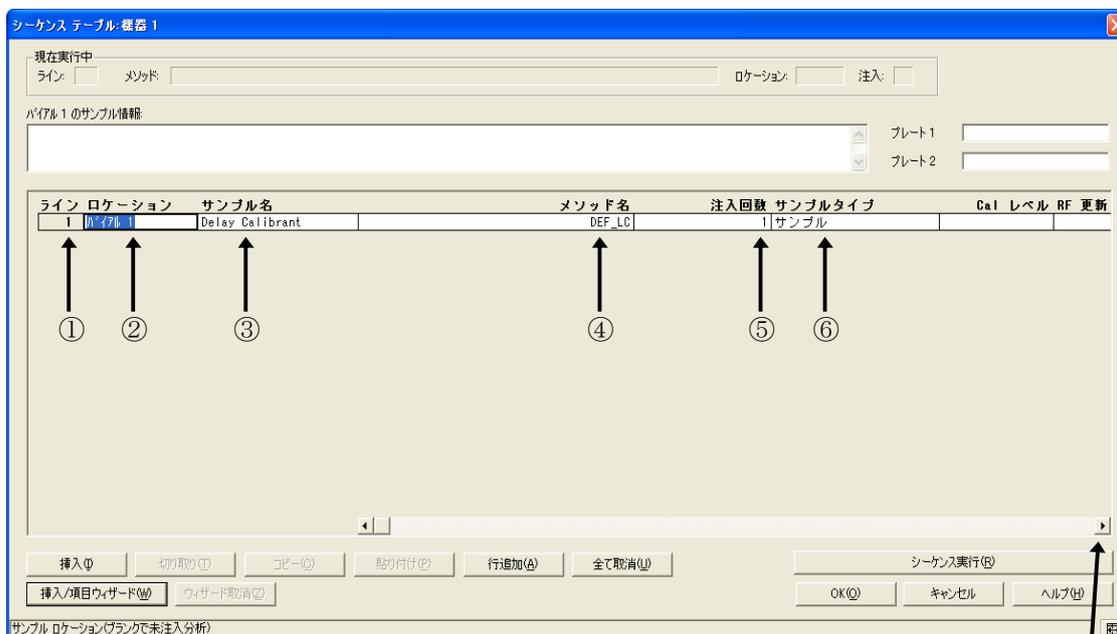
シーケンス (Sequence) → シーケンステーブル (Sequence table)

を選択します。



シーケンステーブルが表示されます。

① ライン (Line) : シーケンスライン番号で自動的に付きます。



- ② バイアル番号 (Vial) : バイアル番号を入力します。
- ③ サンプル名 (Sample Name) : サンプル名。入力しなくても分析できます。
- ④ メソッド名 (Method Name) : 矢印を押すと、保存されているメソッドファイル名が表示されます。使用するメソッドファイル名を選択します。(直接入力も可)
- ⑤ 注入回数 (Inj / Vial) : 1 バイアル毎の注入回数を入力します。
- ⑥ サンプルタイプ (Sample Type) : 通常の分析ではサンプル(Sample)にしておきます。
- ⑦ 注入量 (Inj Volume) : 一番下の矢印を押していくと、この表の一番右端にあります。この設定を行ったラインのサンプルのみ、メソッドで設定した注入量以外の注入が可能です。通常は設定不要です。(この画面には表示されていません)

⑧ **OK** をクリックします。

画面右下にあるキーを押すことでシーケンステーブルの表示項目を選択することができます。



連続したバイアルまたはウェルプレートの設定を行うには、以下の機能を使用すると簡単に設定できます。

シーケンステーブル画面で、**挿入/項目ウィザード (Insert/FillDown Wizard)** をクリックします。次の画面が表示されます。

<ウェルプレートオートサンプラ使用時>



① 動作 (Action) を選択します。新規作成の場合は、追加を選択します。

② ロケーション指定 (Location Assignments) を設定します。

同じ条件、同じサンプルタイプ等を設定するウェルプレートの開始位置と終了位置を入力します。

開始位置と終了位置は同じプレート/トレイである必要があります。

Rectangular を選択するとドラッグで選択した範囲 (長方形) を設定することができます。

③ 終了バイアルを入力します。

- 
- ④ サンプル名を入力します。
  - ⑤ メソッド名を選択します。
  - ⑥ 1バイアル毎の注入回数を入力します。
  - ⑦ サンプルタイプ (サンプル、キャリブレーション、コントロール サンプル) を設定します。
  - ⑧ メソッドで設定した注入量と同じ場合には、入力する必要はありません。  
注入量を変更する場合のみ入力します。
  - ⑨  をクリックすると、テーブルに行が挿入されます。

<標準オートサンプラまたは 100 サンプルトレイ使用時>

- ① 動作 (Action) を選択します。新規作成の場合は、追加を選択します。
- ② ロケーション指定 (Location Assignments) を設定します。  
同じ条件、同じサンプルタイプ等を設定するサンプルセットの開始位置を入力します。
- ③ いくつずつサンプル番号を増加させるか設定します。
- ④ サンプル名を入力します。
- ⑤ メソッド名を選択します。
- ⑥ 1 バイアル毎の注入回数を入力します。
- ⑦ サンプルタイプ (サンプル、キャリブレーション、コントロール サンプル) を設定します。
- ⑧ メソッドで設定した注入量と同じ場合には、入力する必要はありません。  
注入量を変更する場合のみ入力します。
- ⑨ **OK** をクリックすると、テーブルに行が挿入されます。

---

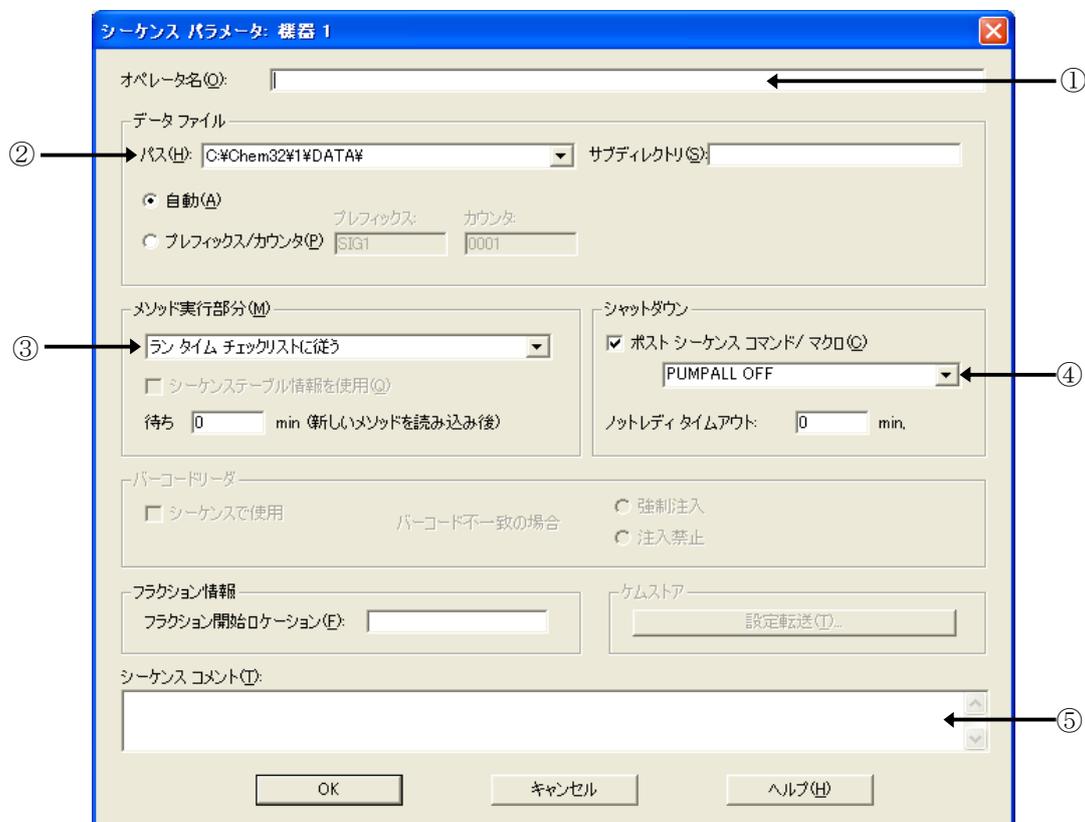
## 4-2-2. シーケンスパラメータ (Sequence Parameter) の設定

メニューから

シーケンス (Sequence) → シーケンスパラメータ (Sequence parameter)



シーケンスパラメータの設定画面が表示されます。



① オペレータ名 (Operator Name) : オペレータの名前を入力します。

② データファイル名 (Data File) : データファイル名と保存先サブディレクトリを設定します。

- ・自動 (Auto) : バイアル番号、シーケンスライン、注入回数から自動的に設定されます。

例 :  $\frac{001}{\uparrow}$  -  $\frac{02}{\uparrow}$   $\frac{03}{\leftarrow}$  .D  
 [バイアル番号] - [シーケンスライン] [注入回数]

- ・プレフィックスカウンタ (Prefix / Counter)

: プレフィックス+カウンタ (数字) で構成されます。最大合計で 15 文字で名前が付けられます。

例 : プレフィックス部分+カウンタ部分 (最大 6 桁) TEST 000001

---

サブディレクトリ名 (Subdirectory) を設定します。

補足： 新しいサブディレクトリ名を設定後、“サブディレクトリ\*\*\*は存在しません。作りますか？”という画面が表示されます。 をクリックし、必ずディレクトリを作成してください。

注意：ユニークなフォルダオンの場合は、サブディレクトリ項目は無視されます。

③ メソッド実行部分 (Part of Method to Run) : メソッドのどの部分を実行するか設定します。

- ・ランタイムチェックリストに従う (According to Runtime Checklist) : メソッドの中で指定したランタイムチェックリストどおりに実行します。
- ・データ取り込みのみ (Data Acquisition) : データ取り込みのみを実行します。
- ・ (オフラインソフトのみ有効)  
データ解析のみ (Reprocessing Only) : データ再解析のみを実行します。

④ シャットダウン (Shut Down) : マクロプログラムによって、シーケンス終了後に装置を OFF にする設定等を行います。

ポストシーケンスコマンド / マクロ (Post-sequence command / macro) にチェックし、矢印を押してマクロプログラムを選択します。

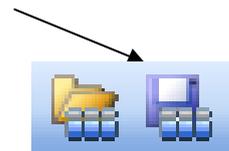
⑤ シーケンスコメント (Sequence Comment) : コメントがあれば入力します。

⑥  をクリックします。

---

### 4-2-3. シーケンスファイルの保存 (Save Sequence)

シーケンスファイルを保存します。  
上書きする場合はアイコンをクリックします。



新しく名前を付けて保存する場合には、

シーケンス (Sequence)

→ 名前を付けてシーケンス保存 (Save Sequence As...)

を選択します。

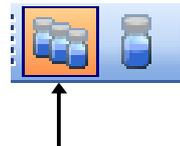


---

#### 4-2-4. シーケンスの実行 (Run Sequence)

シーケンスの実行前に、カラムのコンディショニングや系の安定待ちをしてください。  
このあと、シーケンスで始めに使用するメソッドを読み込んでおくと、  
シーケンス開始後のメソッド読み込み時に、ポンプなどの条件の変化が  
ありませんので、スムーズにシーケンスが開始できます。

3本のバイアルのアイコンをクリックします。  
画面のGUIがシーケンスモードになります。



GUI利用の場合

モダンGUIの場合



「シーケンス開始」ボタンをクリックします。

従来のGUIの場合

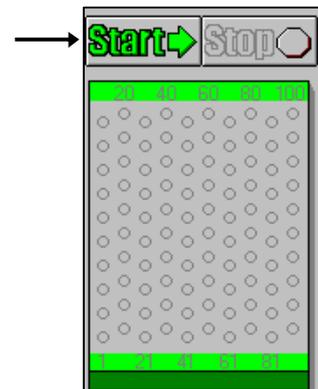
絵がサンプルトレイ (ウエルプレート、  
100トレイ) であることを確認してして

をクリックします。

または、メニューバーから

ラン コントロール (Run Control) → シーケンス開始  
(Run Sequence)

を実行します。



---

## 4-2-5. シーケンスの一時停止

実行中のシーケンスの一時停止／中止など操作は以下の通りです。

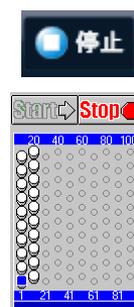
- ・現在のランを最後までデータを採取して、次のサンプルの分析の手前で一時停止させたい場合

→メニューの ランコントロール → シーケンス停止 を選択します。  
ケミステーションソフトのステータスは「シーケンス停止」になります。  
機器のステータスはレディ状態になります。  
移動相など機器の条件は、初期条件に戻ります。  
再開するには、メニューの ランコントロール → シーケンス再開 を選択します。

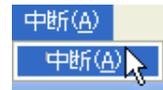


- ・現在のランを直ちに終了（ここまでのデータを保存される）させて、次以降のシーケンス分析を実施しない場合（停止）

→メニューの ランコントロール → シーケンス中止 を選択します。  
現在のランが直ちに終わり、ここまでのデータは採取され解析まで進みます。  
移動相は、すぐに初期条件に戻ります。  
(追い出しが必要な場合があります)  
機器はレディ状態になります。  
ケミステーションソフトのステータスはレディになります。



- 
- 現在のランを直ちに終了（ここまでのデータは破棄する）させて、  
次以降のシーケンス分析を実施しない場合（中断）



→メニューの 中断 → 中断 を選びます。

現在のランが直ちに終わり、ここまでのデータは残りません。

移動相は、すぐに初期条件に戻ります。（追い出しが必要な場合があります）

機器はレディ状態になります。

ケミステーションソフトのステータスはレディになります。

補足：シーケンス実行中にも、ポストシーケンスの設定を変更することが可能です。

---

## 第5章 システムの終了

システムを OFF にします。（3-3 節 システムの起動方法 を参照してください。）

※注意 ケミステーションや Windows を終了してから、コンピュータの電源を OFF にしてください

### 【流路の洗浄】

移動相としてバッファや刺激性の溶媒を使用した場合、純水で流路を置換してください。  
この際、カラムに悪影響がある場合は、カラムを外して実施してください。

### 【分析システムの OFF】

以下の順番で OFF にすることをおすすめします。

ポンプの送液の停止  
↓  
ランプの OFF  
↓  
カラムコンパートメント OFF

\* カラムを保護するため、徐々に流量設定を下げてから送液を停止することもあります。

## 【ポンプのオフ】

(A) GUI を利用する。

モダンビューの場合

ポンプの GUI 部分で右クリックして

メニューを出します。

「コントロール」を左クリックします。

右クリック

左クリック



ダイアログボックスの「オフ」を

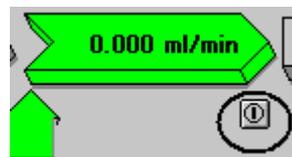
選択し、**OK** をクリックします。

ヒント：このあとすぐに、ポンプオンにする  
予定がある時は、スタンバイでもよいです。



クラシックビューの場合

マウスでポンプ GUI 右下のボタン  
をクリックすると、ポンプをオフに  
することができます。



(B) プルダウンメニューを使用する  
メニューバーより設定します。

機器 (Instrument)

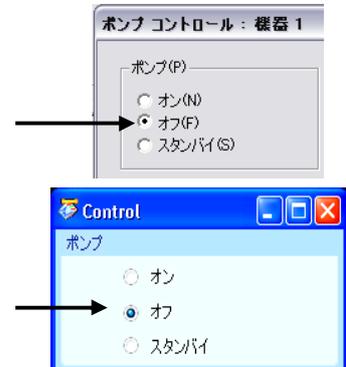
→ ポンプ続き (More Pump)

→ コントロール (Control)



ダイアログボックスの「オフ」を選択し、**OK** をクリックします。

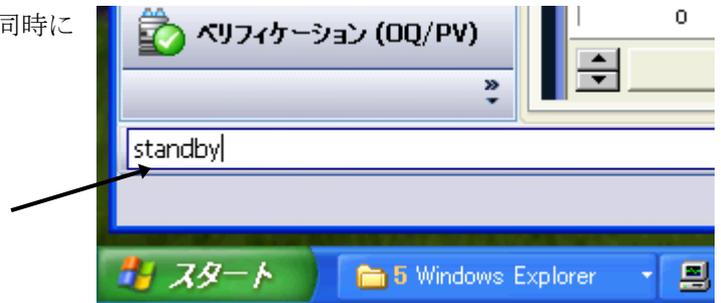
ヒント：このあとすぐに、ポンプオンにする予定がある時は、スタンバイでもよいです。



### 【システム全体の OFF】

システムに含まれる全てのモジュールを同時に OFF にすることができます。

画面左下のコマンドライン  
(白い帯の部分) に  
「standby(エンターキーを押す)」と  
すべての装置をスタンバイにできます。



モダンビューの場合

・すべての機器がレディ状態の時は、システムダイアグラムのオン/オフボタンでシステムオフが可能です。

注意：このボタンは、状態によって意味が変わります。

「すべての機器がレディ状態の時」 は「スタンバイ状態にする」

「いずれかの機器がノットレディの時」 は「レディ状態にする」

ご注意ください。

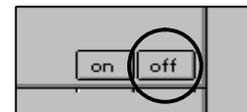


クラシックビューの場合

・システムダイアグラム右下の **off** ボタンをクリックします。

・または、メニューから

装置 (Instrument) → システムオフ (System Off)



\* ソフト終了時にもシステム全体をOFFにするか、確認のメッセージが出ます。

## 【ケミステーションの終了】

ケミステーションを終了します。

メニューバーより

ファイル (File) → 終了 (Exit)

を選択します。



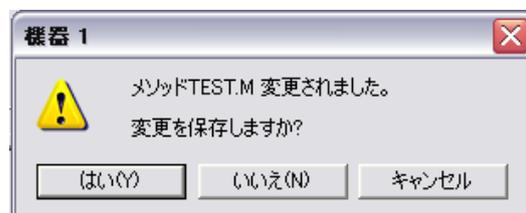
をクリックします。



をクリックします。



メソッドパラメータの一部を変更してから、メソッドファイルを保存していない場合に表示されます。 をクリックするとメソッドファイルは上書きされます。



---

## 【Windows の終了】

Windows を終了します。

スタート (Start)

→ シャットダウン (Shutdown)



## 【機器の電源 OFF】

各機器のメイン電源スイッチを以下の順番で OFF にします。

コンピュータ



プリンタおよびモニタ



Agilent 1200 各モジュール

---

## 第6章 データ解析

### 1 1本分析及び ユニークなフォルダ作成 (シーケンスコンテナ) をオフにした場合

本書ではデータ解析について、

第6章：1本分析及びシーケンスコンテナがオフの場合

第7章：シーケンスコンテナがオンの場合

に分けて、下記のフローに従った操作方法を説明します。データ解析の詳細については、別冊の“新しいChemstation ワークフロー入門”を参照ください。

データ解析は、オフラインソフトの「データ解析画面」の使用を推奨します。

(後述：オンラインソフトのデータ解析画面も可能です)

1本分析及び、シーケンスコンテナがオフの場合の、解析の流れは以下の通りです。

解析条件を設定するメソッドの読み込み



STD データ読み込み (6-1 節参照)



積分 (面積値の決定) (6-2 節)



検量線作成 (6-3 節)



定量レポート条件設定 (6-3 節)



解析メソッドの保存 →[マスターメソッドとして利用可能]



サンプルデータ読み込み (6-1 節参照)



定量レポート出力 (6-3-1-1 節)



データ解析のナビゲーションボタンをクリックします。

---

注意：操作を始める前に、どのメソッドを編集しているのかを、必ず確認して下さい。



レビュー画面の左上のプルダウンから、「現在のメソッド」を選択してください。

補足：「データファイルからメソッド使用」は、各データ内の DA.M が使用されます。データを移動する動作をすると

そのデータに応じて DA.M が自動的に読み込まれます。

特に、オンライン使用時に注意してください。（後述）

#### オンラインソフトの解析画面を使用する場合

もしデータ採取直後、「データ解析画面」に移動した場合、メソッドは変わりません。マスターメソッドを編集している状態です。

解析のために別のメソッドを利用する場合は、メニューから  
メソッド → メソッド読み込み

解析用に編集したいメソッドを読み込みます。

注意：編集するメソッドを読み込むと、機器条件も同時にロードされます。

**移動相、流量、温度などの機器の条件が直ちに変わります。**

マスターメソッドの編集などで、「データ解析」画面を操作する場合、機器をスタンバイにしてください。

オフラインソフトの解析画面での解析の場合（推奨）は、メニューから

メソッド → メソッド読み込み

で解析用に編集するメソッドを読み込みます。

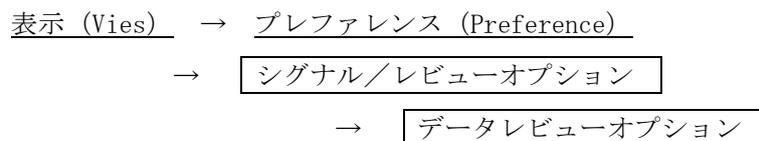
注意：オフラインソフトで解析する場合にも、「**編集中のメソッドはなにか？**」に注意してください。

注意：オンラインソフトで現在使用中のメソッドを編集する場合、上書き保存ができません。一旦別名で保存してください。

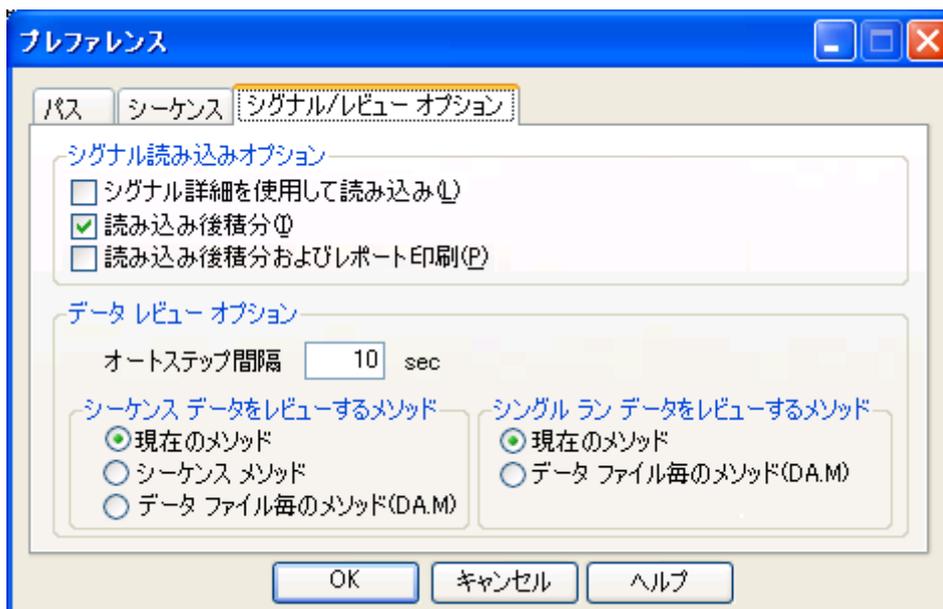
ヒント：取り込みメソッドの解析部分を編集すると、**マスターメソッド**として扱うことができます（7章参照）



データ解析画面で、「どのメソッドを編集するか？」は  
レビュー画面左上のプルダウン、または、



にて、あらかじめ決めることができます。



しかし、プレファレンスの「データレビューオプション」の設定は、解析画面の初期設定で、  
操作途中でも変更できてしまうので、解析開始前に画面左上のプルダウンを確認してください。

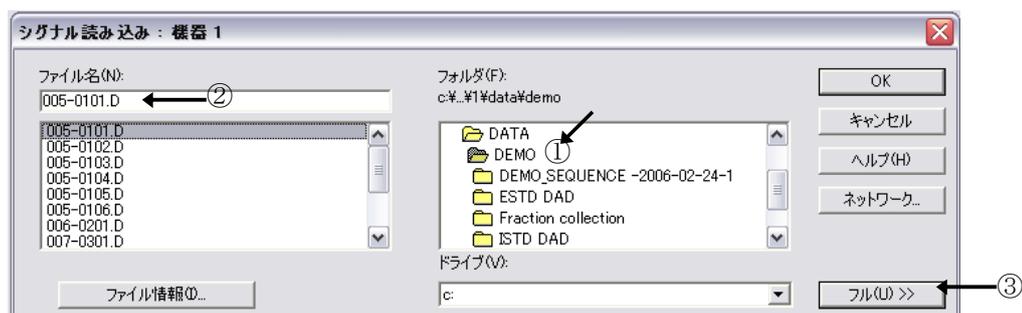
## 6-1. データ読み込み

解析したいデータファイルを読み込みます。アイコンをクリックします。

データ読み込み (Load Signal) 画面が表示されます。

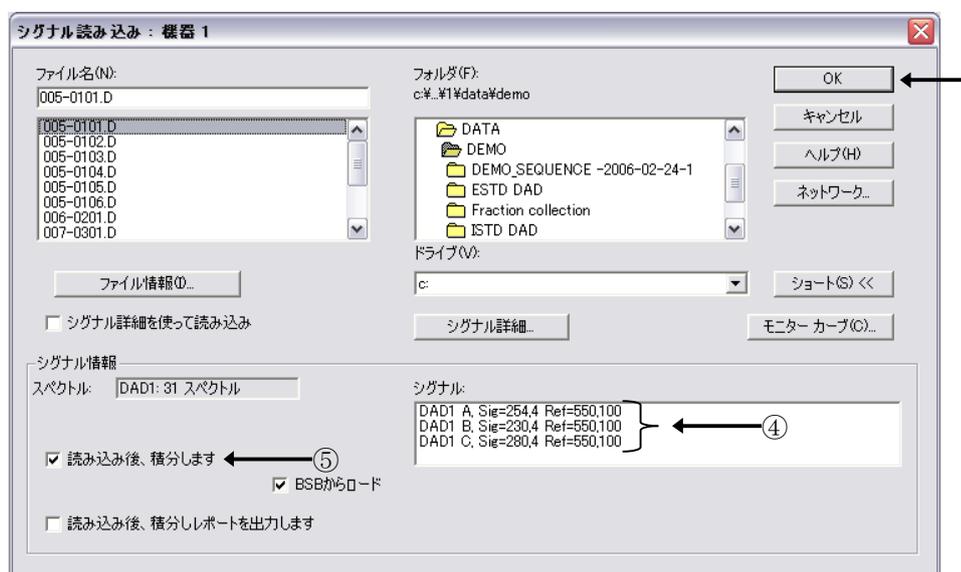


- ① フォルダ (Folder) 名をダブルクリックすると、中に含まれるファイル名が表示されます。



異なるフォルダの中を見るには一度 DATA をダブルクリックして、全てのフォルダ名を表示させてから目的のものを選択します。

- ② データファイル名 (File Name) を選択します。
- ③ 多波長でデータ合は **フル (Full) >>** をクリックし詳細を表示させます。



- ④ 解析する波長を選択します。
- ⑤ データ読み込みと同時に、現在のメソッドで積分するか、を選択します。
- ⑥ **OK** をクリックします。

---

## 6-2. 積分 (Integration)

積分を行うためのツールバーに切り替えます。



積分には以下の3つの方法があります。

1. 自動積分で適切なパラメータを提示させる (Auto Integrate)
2. 積分条件 (Integration Events) を変更して積分パラメータを最適化する
3. マニュアル積分

### 6-2-1. 自動積分 (Auto Integrate)

クロマトグラムに適した条件をケミステーションが自動的に計算し、後述の積分イベント欄に提示します。初回の積分パラメータ設定時など、適当な積分条件が決める時に使用します。

最適なパラメータが決まったら、次回以降は自動積分の必要はありません。

**注意：**マニュアル積分（後述）をした後に、自動積分をすると、

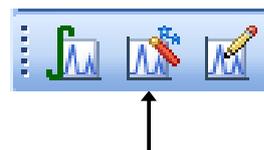
マニュアル積分イベントが消去される場合があります。

マニュアル積分の節を参照ください。

自動積分 (Auto Integrate) の

アイコンをクリックします

(クロマトに魔法のスティックアイコン)



## 6-2-2. 積分条件 (Integration Events) を変更して積分

積分イベントの編集 (Integration Events...) のアイコンをクリックします。  
(クロマトに鉛筆アイコン)



メソッド作成画面で入力した、積分条件変更の画面が表示されます。

ケミステーションでは、複数のクロマトを同時に扱うため、シグナル毎にイベントテーブルの設定が必要です。(例:波長違い、検出器違い)

- ① 積分すべきシグナルを選びます。
- ② シグナル名に対応するテーブルを表示させます。
- ③ タンジェントスキムモードに関するパラメータ条件を設定します。各項目を適切な値に変更します。
- ④ その他の積分条件を設定します。各項目を適切な値に変更します。
- ⑤ 積分イベント (Integration Events) を付け加えるには、行を追加するアイコンをクリックします。積分イベント (Integration Events) の行の下行追加されます。矢印をクリックして、新しい積分イベント (Events) を選択し、値 (Value) を入力します。

1) DAD1 A, Sig...#005-0104.D)

メソッド マニュアル イベント

全てのシグナルの初期イベント:

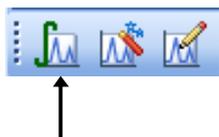
積分イベント		値
タンジェントスキムモード		スタンダード
テールピークスキム高さ		0.00
フロントピークスキム高さ		0.00
スキム谷比		20.00
ベースライン補正		クラシカル
ピーク谷比		500.00

シグナルの特定のイベント:

DAD1 A 指定

時間	積分イベント	値
初期	スロープ感度	1
初期	ピーク幅	0.01
初期	面積リジェクト	1
初期	高さリジェクト	1.7
初期	ショルダー	オフ

- 
- ⑥ トップツールバーにある積分 (Integrate) のアイコンをクリックします。



変更した積分イベント (Events) で積分が実施されます。

- ⑦ 積分結果を確認し、良ければ積分条件を保存して閉じるアイコンをクリックします。  
結果が適切でない場合は③から⑥を繰り返します。

---

### 6-2-3. マニュアル積分 (Manual Integrate)

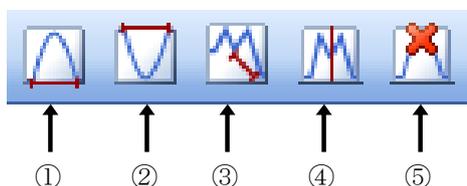
積分条件の変更だけでは適当な積分を行うことのできないクロマトグラムなどに利用します。

ケミステーションのリビジョン B. 04. 01 以降では、各データファイル内にマニュアル積分条件を保存できます。

(マニュアル積分の条件はメソッドに保存することも可能です。メソッドに保存したマニュアル積分条件で別のクロマトグラムに適用した場合は、積分結果を確認する必要があります。)

マニュアル積分を行う前に拡大のアイコンを使って、積分したいピークを拡大しておく便利です。





各アイコンをクリックすると、カーソルが変化します。

#### ① ベースラインを引く (Draw Baseline)

カーソルを積分開始点に移動し、積分終了点までドラッグします。ピークは自動的に積分され、引かれたベースラインとエリア値が表示されます。

#### ② ネガティブピークのマニュアル積分

負のピークを積分します。カーソルを積分開始点に移動し、積分終了点までドラッグします。ピークは自動的に積分され、引かれたベースラインとエリア値が表示されます。

#### ③ タンジェントスキムによるマニュアル積分

カーソルを積分開始点に移動し、積分終了点までドラッグします。ピークは自動的にタンジェントスキムモードに基づいて積分され、引かれたベースラインとエリア値が表示されます。

#### ④ ピークの垂直分割 (Split)

うまく分離していない2つのピークの、1つめのピークの積分開始点から2つめのピークの積分終了点までベースライン (Draw Baseline) を引きます。

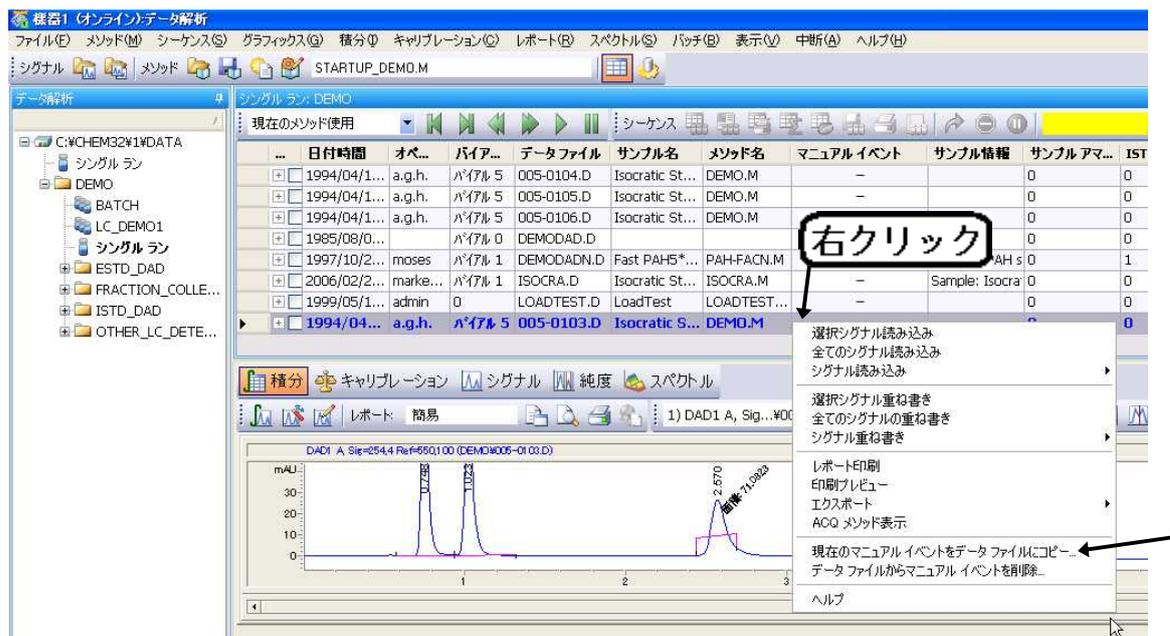
ピークの垂直分割 (Split) のアイコンをクリックして、カーソルの形を変えます。

2つのピークの分割点でクリックします。

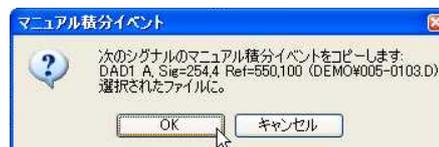
#### ⑤ ピーク削除 (Delete Peak)

積分されているピークのベースラインをクリックします。

マニュアル積分が適切に設定できたら、データファイルにマニュアルイベントを保存します。画面上のレビューウィンドウで、現在解析中のデータファイル行を右クリックしてメニューを出します。



「現在のマニュアルイベントをデータファイルコピー」を選択します。確認の **OK** をクリックします。



データファイル内にマニュアルイベントが保存されました。

注意：マニュアル積分イベントのコピーをせずに、行を移るなどの動作をした時



「このシグナルは、保存していない変更があります。保存しますか？」の確認が出るので、ここで「はい」とするとマニュアルイベントは保存されます。ここで「いいえ」とするとマニュアルイベントは保存されません。

注意：マニュアル積分をした後に、自動積分をすると、マニュアル積分イベントが消去される場合があります。自動積分機能は、イベントテーブルを更新し、マニュアル積分を無効にします。

詳細：レビュー画面で、マニュアル積分イベントの存在する行を選択している時、(M マークのついた行が青色太字になってクロマトグラムが表示されている時)



自動積分を実行した後、行を移るなどの動作をした時、問い合わせがあります。



これは、自動積分したのでマニュアル積分を「消すか？」の問いです。(前出と逆)ここで「はい」とすると自動積分イベントが反映されるため、マニュアルイベントは消去されます。(メソッドもまだ未保存です)ここで「いいえ」とするとマニュアルイベントは保持されます。

---

### 6-3. 定量 (検量線の作成)

ここでは、メソッド内に検量線を作成します。

検量線の作成には、標準溶液のクロマトグラムから導き出された面積値と RT を使用します。

メソッドは、RT と面積値の入ったキャリブレーションテーブルを用意するので、

「成分名」

「標準溶液の濃度」

を入力します。するとメソッドは、ある RT ウィンドウ内のピークを「成分名」と同定するようになり、検量線をあてはめる準備ができます。

標準溶液などを分析したデータファイルを読み込みます。(6-1 節 参照)

また、積分結果を確認しておきます。(6-2 節 参照)

検量線作成 (Calibration) を行うためのツールバーに切り替えます。



## 6-3-1. 絶対検量線法 (ESTD) による定量

### 【検量線テーブルの作成】

新しい検量線テーブルを作成します。

新しいキャリブレーションテーブル

(New Calibration Table) アイコンをクリックします。



- ① レベル (Level) が 1 (検量線の 1 点目) であることを確認します。
- ② 目的とする化合物の濃度が全て同じ場合は、デフォルトアmount (Default Amount) に数値を入れます。個々に濃度が異なる場合は入力しません。
- ③ 2 波長、または 2 検出器以上の場合は、**チェック**を入れてください。  
すると、多波長で測定した場合に、波長別テーブルが作成されます。



- ④ **OK** をクリックします。

キャリブレーションテーブルが表示されます。

キャブレーション テーブル						
<input type="button" value="入力"/> <input type="button" value="削除"/> <input type="button" value="挿入..."/> <input type="button" value="印刷"/> <input type="button" value="OK"/> <input type="button" value="ヘルプ"/>						
#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アmount [ng/ul]	
1	0.747	DAD1 A		1	0.000	
2	1.022	DAD1 A		1	0.000	
3	2.570	DAD1 A		1	0.000	
4	5.852	DAD1 A		1	0.000	

- ① 化合物名 (Compound Name) を入力します。
- ② 標準溶液の既知の濃度 (Amount) を入力します。

PEAK 番号 (#)、リテンションタイム (RT)、シグナルの種類 (Signal)、面積値 (Area) は自動的に入力されています。

- ③  をクリックします。

---

## 【多点検量線の作成】

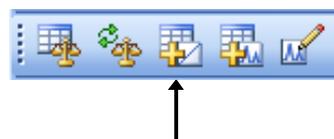
1点検量線作成同様に作成します。

- ① 2点目のデータファイルを読み込み、積分されていることを確認しておきます。
- ② レベル追加 (Add Level) アイコンをクリックします。

または、メニューから

キャリブレーション → レベル追加

の操作をします。



- ③ レベル (Level) に **2** と入力します。
- ④ 化合物の濃度が全て同じ場合は  
デフォルトアmount (Default Amount) に  
数値を入力します。  
個々に濃度が異なる場合は入力しません。



- ⑤ **OK** をクリックします。
- ⑥ キャリブレーションテーブルに2点目用の行が追加されます。  
この2点目の行に、濃度 (Amount) を入力します。  
化合物名 (Compound) は必要ありません。
- ⑦ **OK** をクリックします。

---

## 【検量線の条件設定】

メニューバーより

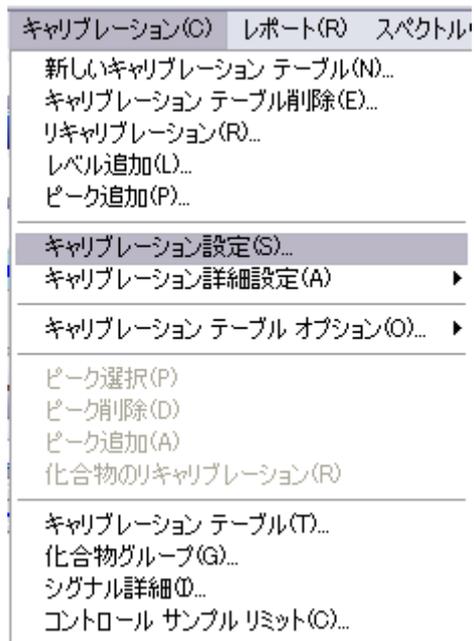
キャリブレーション (Calibration)

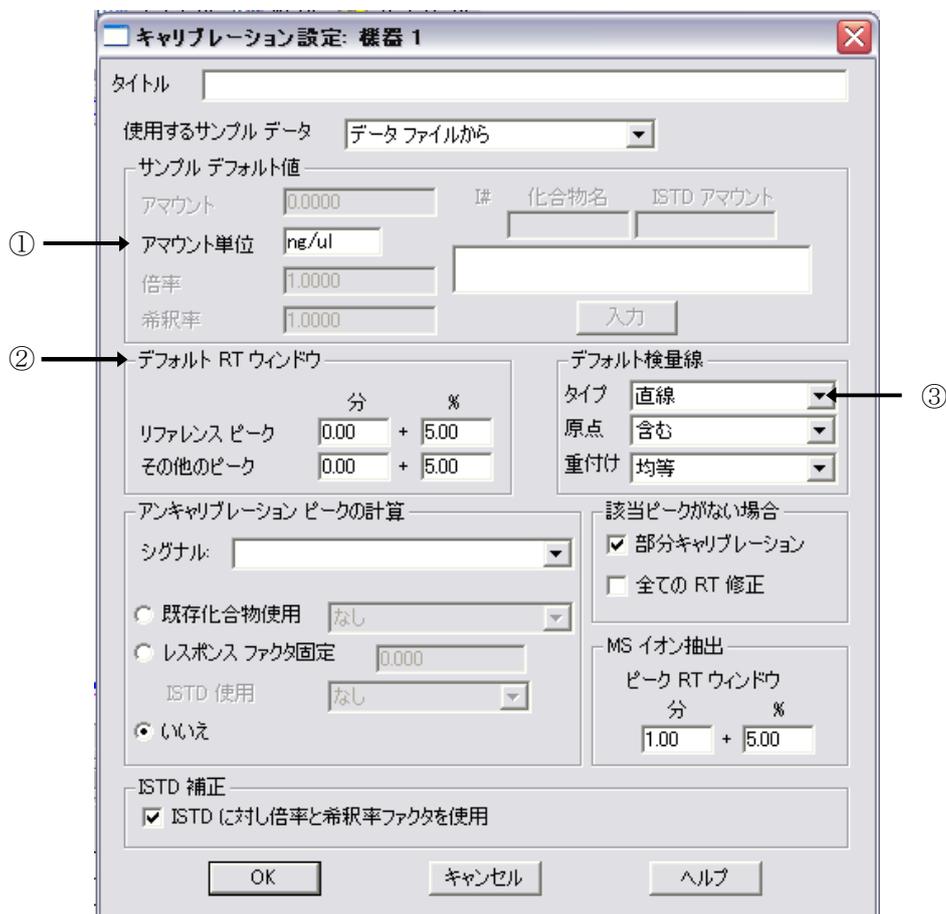
→ キャリブレーション設定

(Calibration Settings...)

を選択します。

検量線の条件設定画面が表示されます。





① アマウント単位 (Amount Unit) : サンプル濃度の単位ラベルを入力します。

② デフォルト RT ウィンドウ (Default RT Windows) : ピークを同定する RT の範囲を設定します。この範囲に RT があるものの最大ピークが、テーブル上の成分と同定されます。「その他のピーク」の入力欄に入力します。

例 : 0.00min + 5% (0.00 ± 2.5%)

RT が 5 分の場合、ピークとして認識される範囲は 4.875 分 ~ 5.125 分となります。

③ デフォルト検量線 (Default Calibration Curve) : 検量線の種類 (TYPE) と原点 (Origin) の処理法、検量線上のデータポイントの重み付け (Weight) を指定します。

## 【定量レポートの計算の設定】

計算方法の設定をします。また、メソッドがRUNされた場合のレポートの出力先を決めておきます。

レポート条件 (Specify Report) アイコンをクリックします。



メソッド作成時に設定した、レポート条件設定の画面が表示されます。

定量方法の欄の (Quantitative Results) 計算方法 (Calculate) を ESTD に変更します。



---

## 【メソッドの保存】

以上で、メソッドの解析部分が設定できました。必要があれば、  
ここでメソッドを保存します。（2-3 節参照）

**注意：メソッドの保存場所を確認してください。**

（マスターメソッドとしますか？解析用メソッドとしますか？）

メソッドファイル名を変更して保存する場合は、メニューの  
メソッド (Method)

→ 名前を付けてメソッド保存 (Save Method As) ...

を実施します。

ヒント：取り込みメソッドにもとに、検量線を作成してメソッド保存すると、  
このメソッドは「取り込み」と「定量レポートの印刷」が  
できるようになります。

例 1：次回、このメソッドで未知サンプルを 1 本分析すると、

**分析終了後に定量レポートが印刷されてきます。**

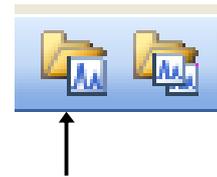
例 2：1 本分析で HPLC 条件と解析条件を最適化して、

**シーケンスコンテナを用いた連続分析のマスターメソッドとして利用できます。**

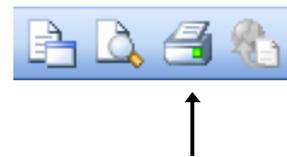
---

### 6-3-1-1. 未知濃度サンプルのレポートの印刷

定量したいサンプルのデータファイルを読み込みます。(6-1 節 参照)



レポート出力 (Print Report) アイコンをクリックしてレポートを出力します。



## 6-3-2. 内部標準法 (ISTD) による定量

### 【内部標準検量線の作成】

絶対検量線と同様にキャリブレーションテーブルを設定します。(6-3-1 節 参照)

注意：テーブル上のアマウントを先に入力してください。

#	面積	レスポンス ファクタ	リファレンス	ISTD	#
1	294.820	0.000	いいえ	いいえ	
2	261.670	0.000	いいえ	いいえ	
3	175.610	0.000	いいえ	はい	
4	228.900	0.000	いいえ	いいえ	

- ① 内部標準ピークの、ISTD 欄で YES を選択します。

ISTD 設定画面が表示されます。

- ② 内部標準の濃度 (Amount) を入力します。

内部標準物質を 2 つ以上使用する場合、ISTD#に番号を入れてから濃度を入力します。

- ③  をクリックして、左の画面を閉じます。

キャリブレーション テーブル: 機器 1

ISTD #:

サンプル デフォルト

ISTD アマウント:

- ④ キャリブレーションテーブル右端の #に、使用する ISTD の番号を入力します。

---

### 【内部標準検量線の条件設定】

絶対検量線作成時と同様に設定します。(6-3-1 節 参照)

Amount	#	化合物名	ISTD Amount
0.0000	1	Dimethylphth	0.09000

通常、入力した内標準濃度 (ISTD Amount) が表示されています。

### 【定量レポートの計算の設定】

レポート条件 (Specify Report) 画面で計算方法を選択します。(6-3-1 節 参照)

定量方法 (Quantitative Results) 内の  
計算方法 (Calculate) を **ISTD** に変更し  
ます。

**【メソッドの保存】** 手順は絶対検量線と同様です。(6-3-1 節 の最後と同じく、2-3 節参照)

**【未知濃度サンプルの定量レポートの印刷】** 手順は絶対検量線と同様です。(6-3-1-1 節参照)

## 第7章 データ解析

### ユニークなフォルダ作成（シーケンスコンテナ）をオンにした場合

操作方法の詳細については、別冊の“新しいケミステーション ワークフロー入門”（Publication Number : G2170-96041）を参照ください。

本書では、シーケンスコンテナ機能を用いた便利なデータ管理と、

一括再解析による一貫性のあるデータ処理とレポート出力について、紹介します。

この場合、データ解析は必ずオフラインソフトウェアで実施してください。

全てのシーケンス関連タスクは、シーケンスコンテナ内のシーケンスとシーケンスメソッドで実行されます。

- 解析メソッド編集、データ再解析は、シーケンスコンテナ内のみで行われます。
- シーケンスプレートとマスターメソッドは、自動では影響を受けません。
- シーケンスコンテナごと保存することで、データの管理が簡便になります。

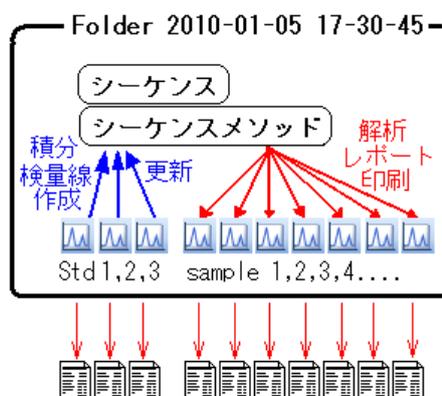
あらかじめ、レビューのオプションを

「シーケンスメソッドを使用する」に設定してください。

表示 (View) → プレファレンス (Preference)

→ シグナル/レビューオプション

→ データレビューオプション



---

解析の流れは以下の通りです。

シーケンスコンテナ、シーケンスメソッドの読み込み

↓

STD データ読み込み (7-1 節参照)

↓

積分 (面積値の決定) (操作は 6-2 節)

↓

検量線作成 (操作は 6-3 節)

↓

定量レポート条件設定 (操作は 6-3 節)

↓

シーケンスメソッドの保存

↓

データ読み込みとレポート出力

(さらに進めて連続再解析が可能です) (7-3-2 節参照)

↓

シーケンス出力の設定

↓

シーケンスの選択分析の設定

↓

シーケンス再解析スタート [レポート印刷]

## 7-1. データ読み込み

解析したい一連のデータを読み込みます。

- ①画面に左のナビゲーションパネルのデータ (Data) タブ内からシーケンスコンテナをダブルクリックし、シーケンス (Sequence) データを読み込みます。

ライン	注	バイアル	サンプル名	メソッド名	サンプルタイプ	コメント	サンプル情報
1	1	バイアル 1	isocratic standard ...	ISOCRA1.M	サンプル		DAD : slit 2n -
2	1	バイアル 1	isocratic standa...	ISOCRA1.M	サンプル		DAD : slit 2n -
3	1	バイアル 1	isocratic standard ...	ISOCRA1.M	サンプル		DAD : slit 2n -
4	1	バイアル 1	isocratic standard ...	ISOCRA1.M	サンプル		DAD : slit 2n -
5	1	バイアル 1	isocratic standard ...	ISOCRA1.M	サンプル		DAD : slit 2n -

#	RT	シグナル	化合物名	レベル	アマウ
1	0.747	DAD1 A	Dimethylphthalate	1	
2	1.022	DAD1 A	Diethylphthalate	1	
3	2.568	DAD1 A	Biphenyl	1	6
4	5.846	DAD1 A	m-Terphenyl	1	1

- ②クロマトグラム表示の上のナビゲーションテーブルに、シーケンスコンテナ内の全データがテーブルとして表示されます。

各データを読み込むときは、テーブル上のラインをダブルクリックします。

するとクロマトグラムが画面下に表示されます。

- ③レビュー画面左上のレビューに使用するメソッド選択欄が

「シーケンスメソッド使用」になっていることを確認してください。



---

データファイル、メソッドファイルは、6-1 節と同様の操作で読み込むことも可能です。

## 7-2. 積分 (Integration)

積分の操作は、6-2 節を参照ください。



注意：もし途中でメソッドを保存するとき、保存先はシーケンスメソッドです。

(7-3-1 節参照ください)

メソッド (Methods) → シーケンスメソッドを保存

### 7-2-1. マニュアル積分 (Manual Integrate)

マニュアル積分の操作は 6-2-3 節を参照ください。



注意：もし途中でメソッドを保存するとき、保存先はシーケンスメソッドです。

(7-3-1 節参照ください)

メソッド (Methods) → シーケンスメソッドを保存

### 7-3. 定量

この節では、検量線など定量条件を含んだシーケンスメソッドを作成し、サンプルデータの定量レポートの印刷方法を紹介します。

ここでは、

- ・シーケンスメソッドに検量線を作成して、シーケンスメソッドを保存して、レビュー画面から各データ毎に再解析を行い、定量結果を印刷します。



#### 7-3-1. シーケンスメソッドを用いた各データの定量

##### 【積分】

##### 【検量線の作成】

##### 【レポート条件の設定】

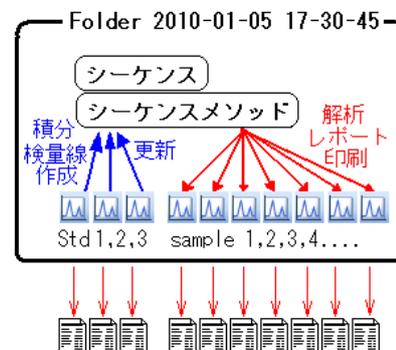
6-3 節の操作と同じです。検量線テーブルを作成し、レポート出力方法を設定します。

##### 【シーケンスメソッドの保存】

作成したメソッド（積分、検量線、レポート条件を含む）を、シーケンスメソッドに保存します。

メソッド (Methods) → シーケンスメソッドを保存

メソッドの保存先は、シーケンスコンテナ内です。



ヒント：このメソッドはシーケンスメソッドですが、保存メニュー内に

「新しいマスターメソッドとして保存」

「マスターメソッドを更新」

のオプションがあります。今後、同じ分析をする際に便利です。

注意：「マスターメソッドを更新」は

マスターメソッドが上書きされますので、十分注意してください。

### 7-3-1-1 レポートの印刷



#### 【サンプルデータの読み込み】

定量したいサンプルのデータファイルを読み込みます。

レビュー画面から、目的のデータ行をダブルクリックでも読み込むことができます。

(7-1 節参照)

ファイルメニューからも読み込みが可能です。(6-4 節 参照)



#### 【レポートの印刷】

レポート出力 (Print Report) アイコンをクリックしてレポートを出力します。



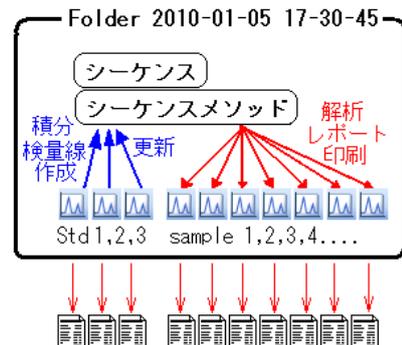
### 7-3-2. シーケンスコンテナ内の連続再解析



前節まででは、検量線など定量条件を含んだシーケンスメソッドを作成しました。  
ここでは、このシーケンスメソッドと、シーケンスの選択実行機能を用いて、  
連続再解析の出力方法を紹介します。

注意：「DA.M」にマニュアル積分条件を保存している場合、（本書では紹介していません）  
シーケンス再解析を実行すると DA.M が上書きされるため、  
マニュアル積分イベントが消えます。  
もし、DA.M を利用するワークフローを運用の場合は、シーケンス再解析ではなく、  
レビューウィンドウからのデータ読み込みとレポート出力を実行してください。

7-3-1 節を参照し、  
検量線テーブル作成、レポート出力方法を設定後、  
シーケンスメソッドを保存します。  
メソッドの保存先は、  
シーケンスコンテナ内です。



連続再解析の結果の出力方法を設定します。

・シーケンスメソッドで「プリンタに印刷」設定  
になっていれば、必要ありません。

・ヒント：設定すると、ページ連番の一括レポート  
や、同定ピークの統計計算が可能になります。

シーケンス (Sequence)

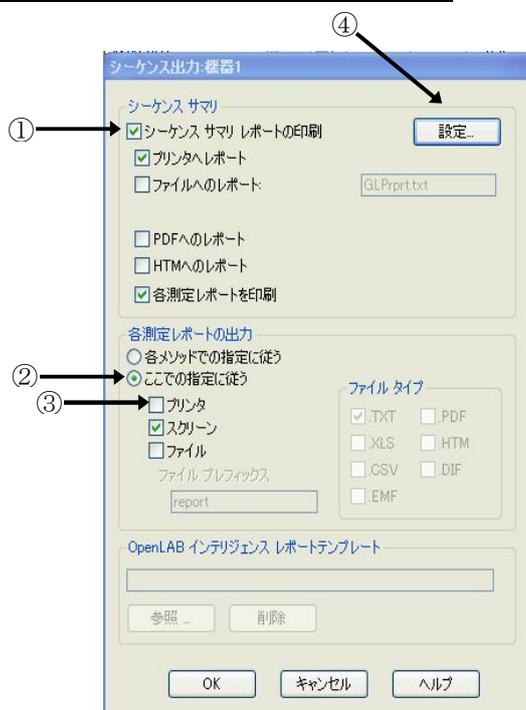
→ シーケンス出力 (Sequence Output)



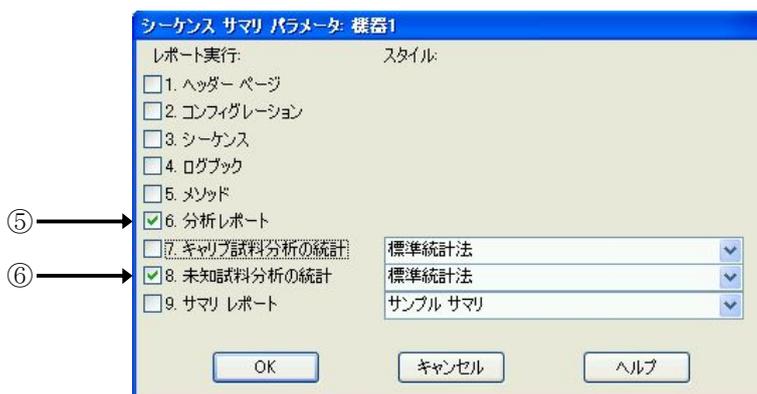
① 連続再解析の結果として、通しのページ番号が振られたレポート印刷するかどうか選択します。

② 及び③は、シーケンスメソッドのレポート出力先の設定にかかわらず、各レポートを個別に印刷するときに設定します。これは「通しページ番号レポート」とば別に印刷されます。

④ ①項の連続レポートの内容を設定します。



⑤ 「分析レポート」にチェックを付けます。



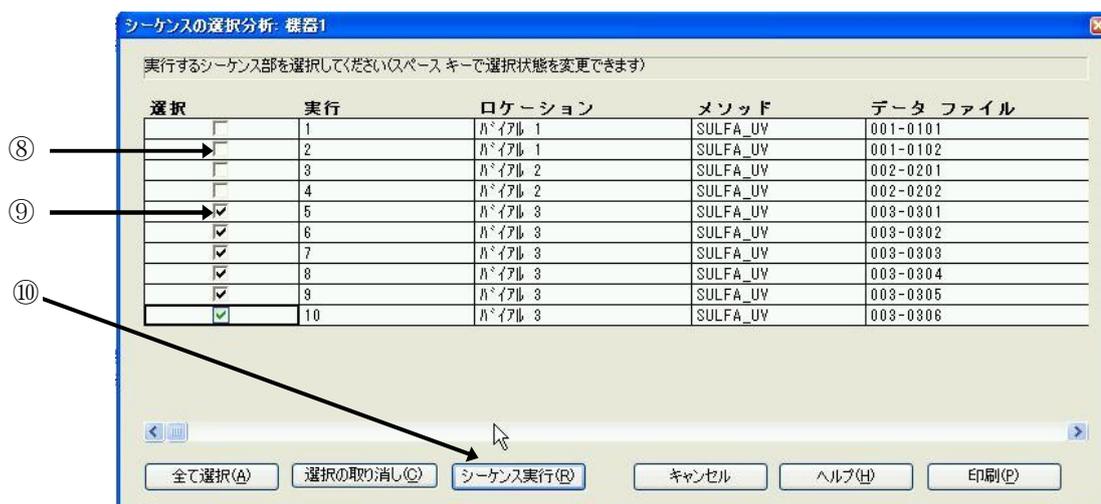
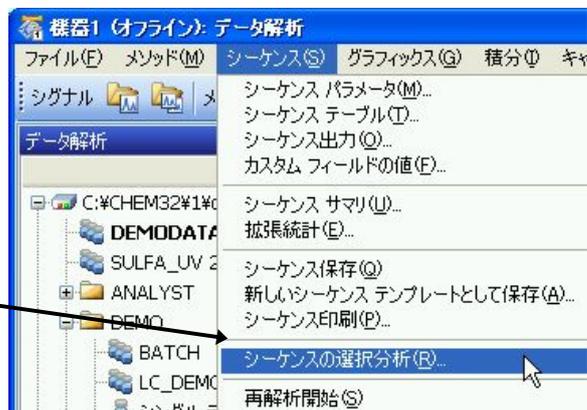
ヒント :

⑥をチェックすると、定量できたピークについて、平均値、分散、相対標準偏差などの一覧レポートが追加できます。

⑦ 再解析対象の未知サンプルデータを指定します。

シーケンス (Sequence)

→ シーケンスの選択分析 (Partial Sequence)



データ採取時のシーケンステーブルが表示されます (コンテナ内のシーケンスです。)

⑧ 標準溶液の行を、選択から外します。

(意図しない自動リキャリブレーションを避けるため：

ここではすでにシーケンスメソッドに検量線が完成されています)

⑨ 定量対象のサンプル行のみ、選択します。

⑩ シーケンス実行をクリックすると、連続再解析され、結果が印刷されます。

<補足：リキャリブレーションを含んだシーケンス再解析による定量>

7-3-2 節では、シーケンスの選択分析機能を使用した連続再解析を紹介しました。

ここでは、さらに進んで、シーケンス内でリキャリブレーション（検量線更新）を含んだ再解析シーケンスを紹介します。

注意：「DA.M」にマニュアル積分条件を保存している場合、（本書では紹介していません）  
シーケンス再解析を実行すると DA.M が上書きされるため、  
マニュアル積分イベントが消えます。

前提は、STD, サンプルとも、ピークが RT ウィンドウ内に入っていることが確認できていることです。これは、シーケンスメソッドを完成させた後レビュー画面で確認ができます。

準備は 7-3-2 節でシーケンス出力の設定方法もでは、同じです。

ここで、メニューから、シーケンス (Sequence) → シーケンステーブル (Sequence table) として、シーケンステーブルを編集します。

ライン	ロケーション	サンプル名	サンプル タイプ	Cal レベル	RF 更新	RT 更新
1	パイアル 1	Sulfa Std 1	キャリブレーション	1	置き換え	置き換え
2	パイアル 2	Sulfa Std 2	キャリブレーション	2	置き換え	置き換え
3	パイアル 3	Sulfa Std 3	サンプル			

テーブル内の、STD を測定した行の

サンプルタイプ を 「キャリブレーション」に

Cal レベル（検量線の何点目か？） を 適切に

RF 更新（レスポンスファクタ更新） を 「置き換え（推奨）」に

RT 更新（リテンションタイム更新） を 「置き換え（推奨）」に

設定し、OK します。必要があれば、シーケンスを保存します。

この後、シーケンス (Sequence) → 再解析開始で連続再解析が始まります。



シーケンス実行時に「サンプルタイプ」項目が「キャリブレーション」の場合、RT と RF は、そのデータの積分結果の RT と RF で変更されます。

---

## 第8章 スペクトル解析

スペクトル解析は有効的な定性手段として利用することができます。

スペクトル解析を行うためのツールバーに切り替えます。



### 8-1. スペクトルオプション (Spectra Option)

スペクトル表示条件を設定します。スペクトル設定のアイコンを選択します。



または、メニューバーより

スペクトル (Spectra) → スペクトルオプション (Spectra Options...)

を選択します。

スペクトルオプションでは1つの設定画面でスペクトル及び純度チェックに関するパラメータを同時に設定することができます。

次ページのようなパラメータの設定および個々の設定に関する説明が表示されます。

## <スペクトルの設定 (Spectra) >



① 波長範囲(Wavelength Range) : にチェックし、表示するスペクトルの波長範囲を入力します。

② ピークあたり スペクトル数 (Spectra per Peak)

ピークあたりスペクトル数 (Spectra per Peak) : 3, 5, 7, 9, All から表示数を設定できます。

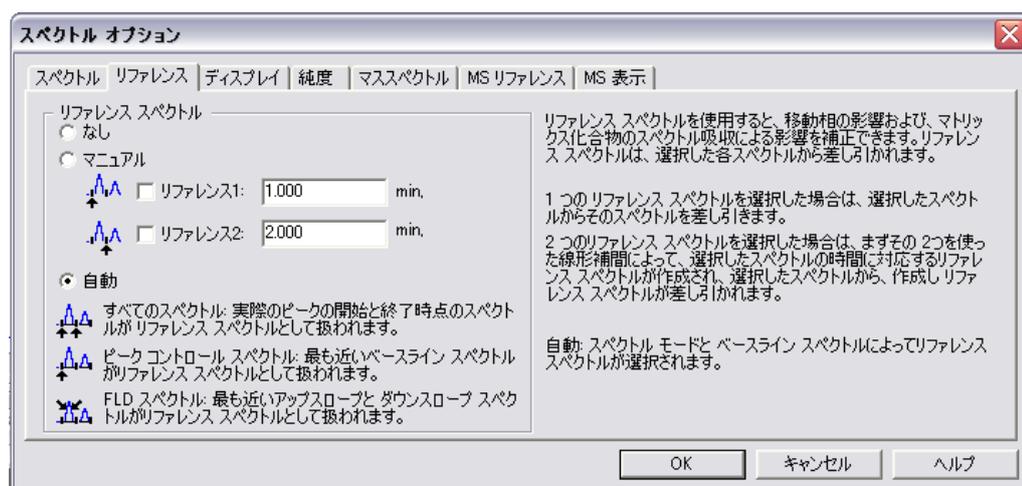
スレッシユホールド (Threshold) : 設定した吸光度以上のスペクトルを表示します。

③ スペクトル処理 (Spectra Processing)

- スムーズファクタ (Smooth Factor) : スペクトルを滑らかに表示します。ノイズの大きいスペクトルに有効です。数字を入力します。
- スプラインファクタ (Spline Factor) : データ採取ポイントを通して、スペクトルを滑らかに表示します。数字を入力します。
- ロガリズム (Logarithm) : 自然対数
- 微分次数 (Derivative Order) : スペクトルの変化が細かく把握できます。数字を入力します。

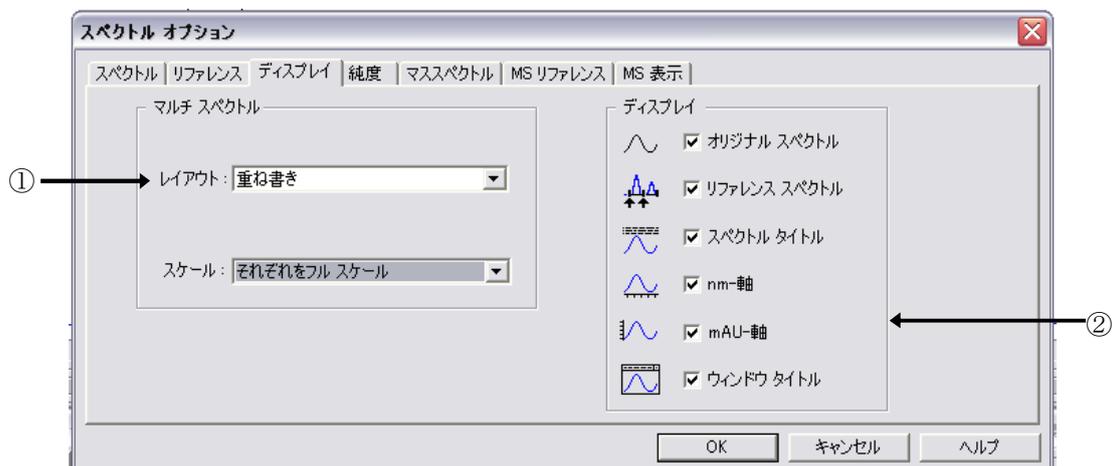
## <リファレンスの設定 (Reference) >

移動相の吸収やマトリックス物質のスペクトル吸収を減算することで影響を補正し、成分のスペクトルをより正しく表示させるために使用します。



- なし (None) : リファレンススペクトルを設定しません。  
表示されるスペクトルは、検出器が測定したそのままのスペクトルになります。
- マニュアル (Manual) : リファレンススペクトルとして設定した時間でのスペクトルをリファレンスに設定します。  
目的ピークの前側をリファレンス 1 に、  
後ろ側をリファレンス 2 に設定します。
- 自動 (Automatic) : スペクトルモードとベースラインスペクトルによってリファレンススペクトルが自動的に設定されます。

## <画面表示の設定 (Display) >



### ① マルチスペクトル (Multi-Spectra)

#### ・レイアウト (Layout)

重ね書き (Overlaid) : スペクトルを重ね書きします。

分割 (Separated) : スペクトルを分割表示します。

#### ・スケール (Scale)

すべて同じスケール (All the same Scale) : 全スペクトルを同じスケールで表示します。

それぞれをフルスケール (Each in full Scale) : それぞれをフルスケールで表示します。

### ② Display の設定

・オリジナルスペクトル (Original Spectrum) : 採取したスペクトルを表示します。

・リファレンススペクトル (Reference Spectra) : リファレンススペクトルを表示します。

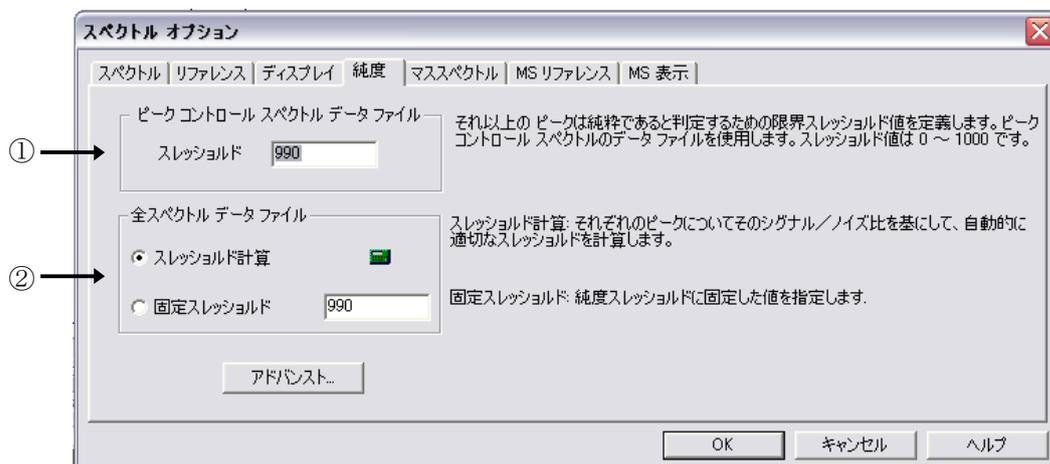
・スペクトルタイトル (Spectra Titles) : スペクトルのタイトル(採取時間等)を表示します。

・nm-軸 (nm-Axes) : スペクトルの波長軸を表示します。

・mAU-軸 (mAU-Axes) : スペクトルの吸光度軸を表示します。

・ウィンドウタイトル (Window Title) : ウィンドウのタイトルを表示します。

## <純度チェックの設定 (Purity) >



スペクトルデータの保存方法により、計算方法が異なるので、基準値も2通りの設定があります。

### ① ピークコントロールスペクトルデータファイル

(Peak Controlled spectra data file)

: “頂点+ベースライン (Apex+Baselines) ”, “頂点+スロープ+ベースライン (Apex+Slopes+Baselines) ”, “ピーク内全て (All in Peak) ” で採取したデータファイルに対しての純度判断の基準値を設定する欄です。

### ② 全スペクトルデータファイル (All Spectra data file)

: “全て (All) ”, “2 スペクトル毎 (Every 2nd Spectrum) ” で採取したデータファイルに対しての純度判断の基準値を設定する欄です。

- ・スレッシュホールド計算 (Calculate Threshold) : S/N 比を基にして、各ピークに適切なスレッシュホールドを自動的に計算させます。
- ・固定スレッシュホールド (Fixed Threshold) : スレッシュホールド値を固定して基準値とします。

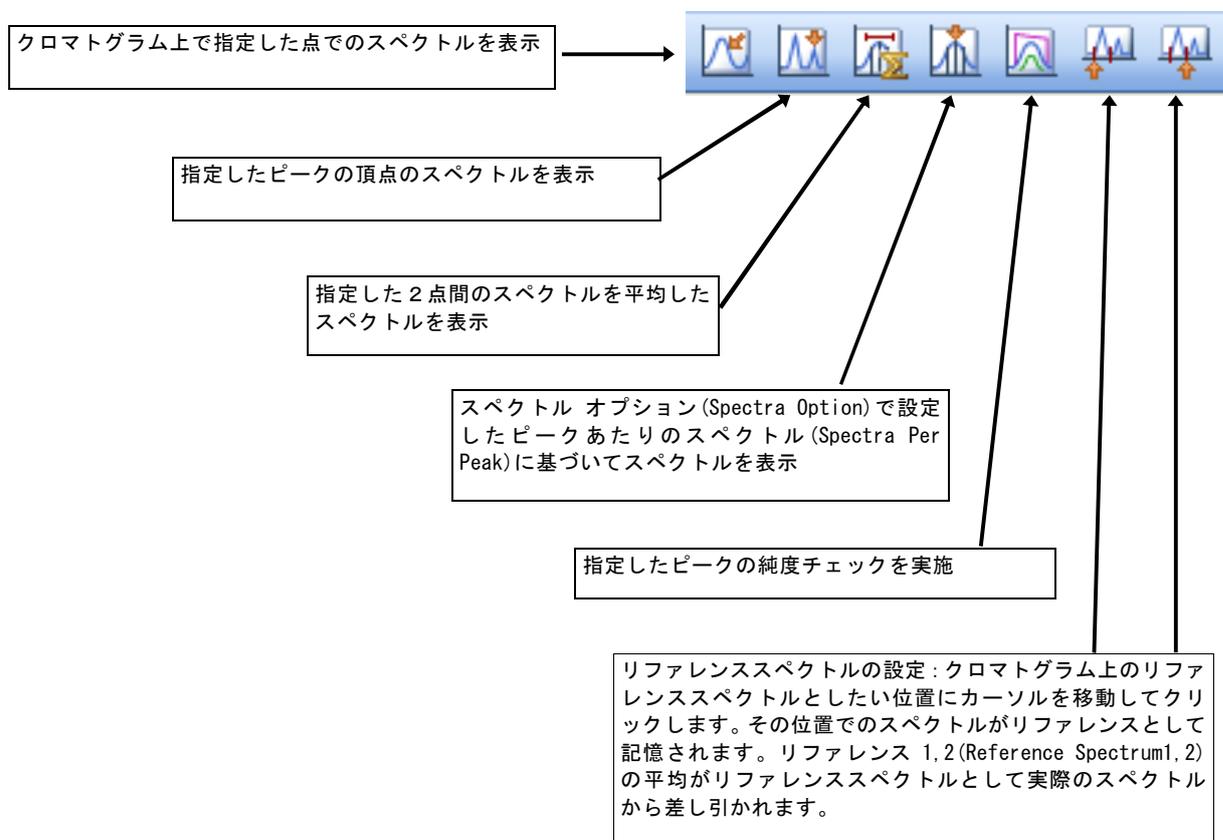
---

## 8-2. スペクトルの表示・印刷

### 8-2-1. スペクトルの表示

① データファイルを読み込みます。

② スペクトルの表示方法を選択します。



③ 目的のピークにカーソルを移動しクリックします。

---

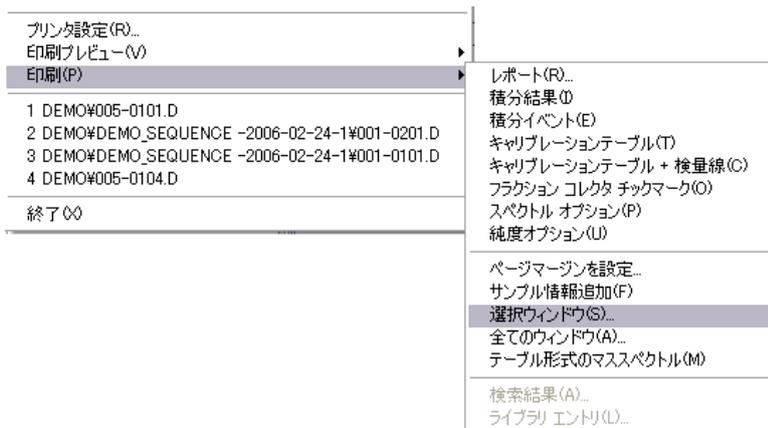
## 8-2-2. スペクトルデータの印刷 (Print Spectra)

画面に表示されているスペクトルやウインドウ内のデータを表示、出力することができます。

- ① 印刷したいスペクトルが表示されているウインドウをクリックしアクティブにします。
- ② メニューバーから

ファイル (File) → 印刷 (Print)

を選択します。



リストから印刷する項目を選択します。

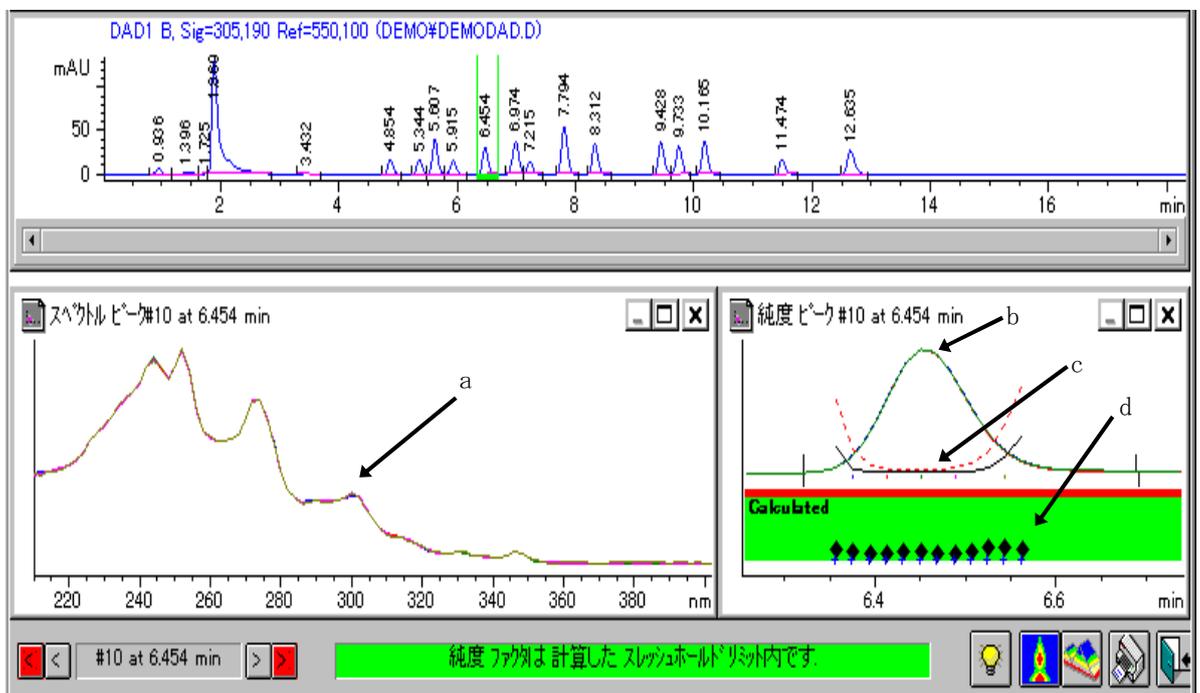
- ・ 選択ウインドウ (Selected Window) : アクティブ・ウインドウの中のデータを印刷します。印刷する大きさの設定画面が表示されるので入力してください。
- ・ 全てのウインドウ (All Windows) : 画面上にある全てのウインドウ内のデータを印刷します。

### 8-3. 純度チェックの実行 (Purity)

① アイコンをクリックします。



② 目的のピークをクリックすると、次の画面が表示されます。



- a) スペクトルの重ね書き
- b) シグナルの重ね書き (複数波長で測定した場合)
- c) シミラリティ/スレッショールドカーブ
- d) 純度計算に使用されたポイント

このアイコンをクリックすると、純度チェックの詳細結果の表示および詳細なパラメータ設定を行うことができます。

## <純度 (Purity) >

純度チェックの結果を表示します。

純度ファクタとスレッシュホールドの値が表示されます。



## <ピークスペクトル (Peak Spectra) >

ピークスペクトル個々の純度結果を表示します。

RT、純度、吸光度範囲、純度計算の基準となるスペクトルとの差を表示します。



---

<計算 (Calculation) >

純度計算に使用されたスペクトル数が表示されます。



## 8-4. 等高線表示 (Iso Plot)

スペクトルを”全て (All) ”, ”2 スペクトル毎 (Every 2nd Spectrum) ”で採取したデータは、等高線表示することができます。

① データファイルを読み込みます。

② メニューバーから

スペクトル (Spectra) → 等高線/3Dプロットオプション (Iso Plot Option...)

を選択します。

カラー配色 (Color Scheme) :

表示する色を選択します。標準的な設定は **Traditional** です。

時間 (Time) :

表示する時間範囲を設定します。

波長 (Wavelength) :

波長範囲を設定します。

吸光度 (Absorbance) :

吸光度範囲を設定します。

吸光度スケール (Absorbance Scale) :

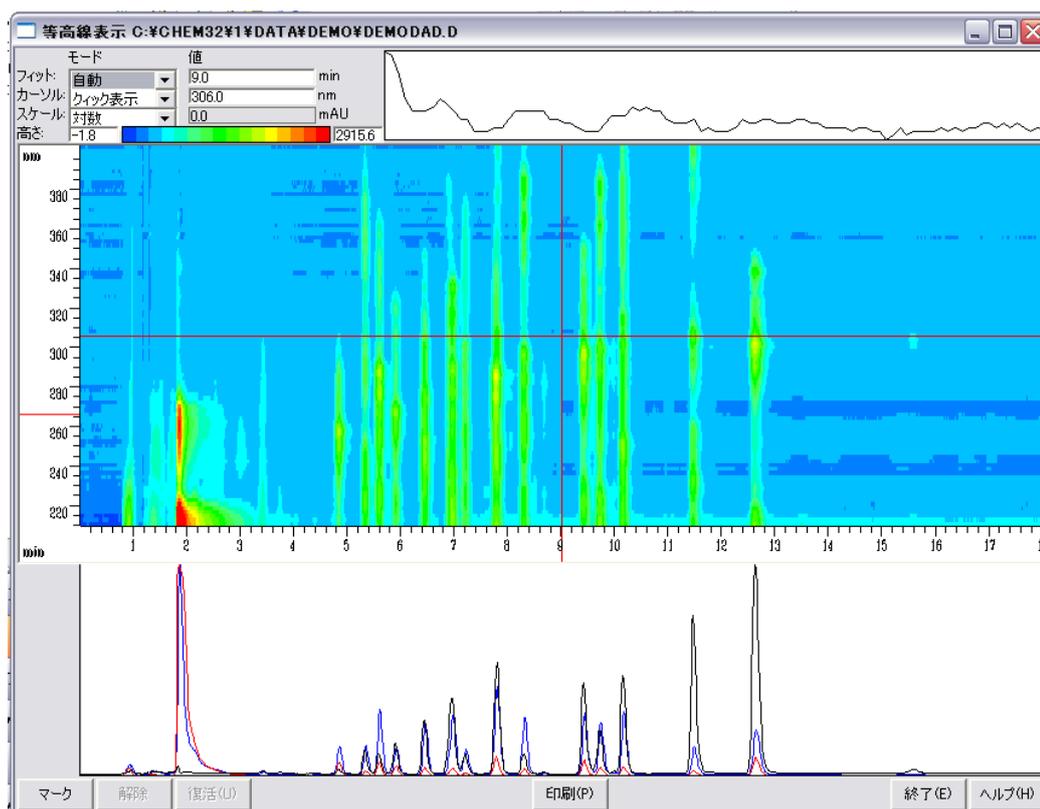
Lin : 等高線表示

Ratio : 比等高線表示

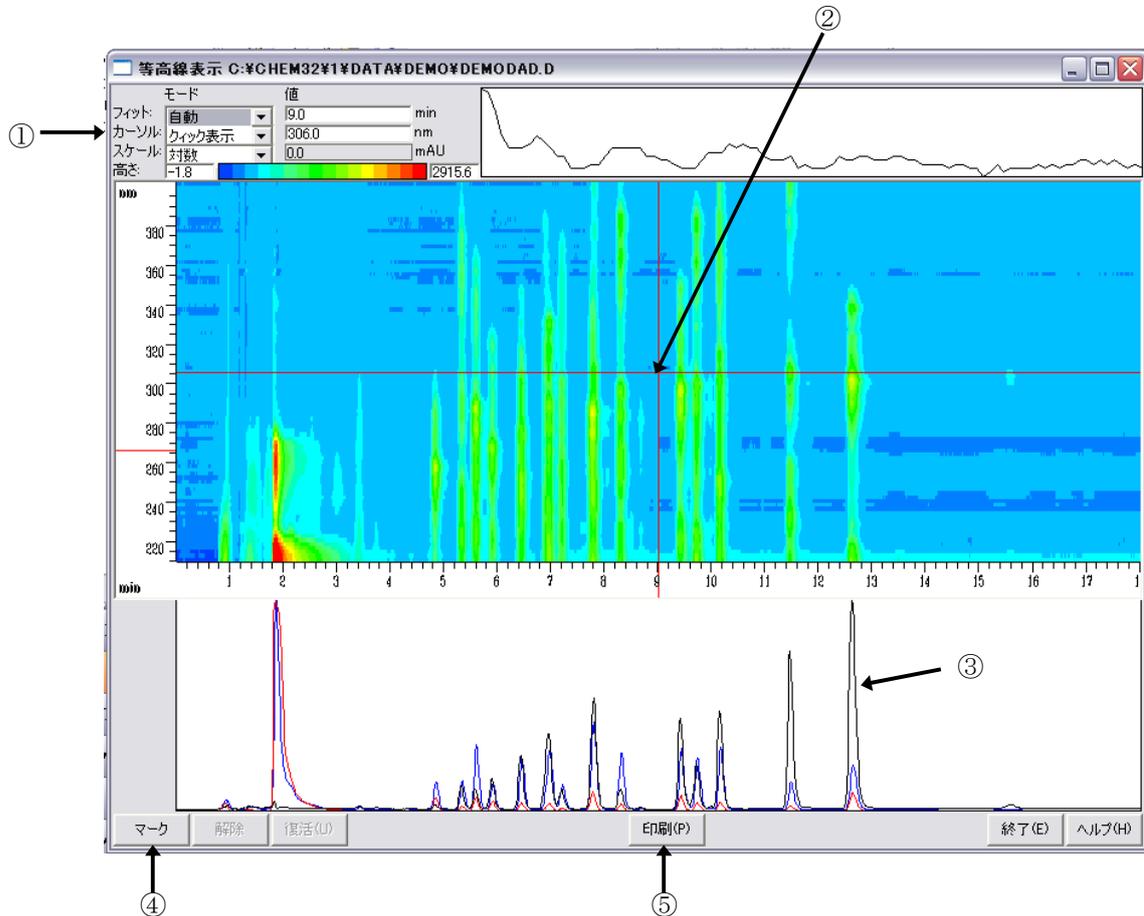
Log : 対数等高線表示



- ③ 前ページの画面上の **等高線表示 (Make Isoplot)** をクリックすると、次の画面が表示されます。



## 8-4-1. クロマトグラムの表示

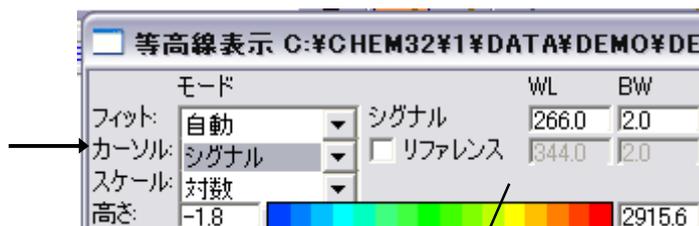


- ① カーソル (Cursor) をクイック表示 (Quick View) にします。
- ② 横軸、縦軸の交差したところにカーソルを移動し、表示したいクロマトグラムの位置までカーソルをドラッグします。
- ③ その位置でのクロマトグラム (下図) が黒い線で表示されます。
- ④ **マーク (Mark)** をクリックすると、クロマトグラムを選択した波長に印をつけることができます。
- ⑤ **印刷 (Print)** で等高線表示画面を印刷できます。

---

## 8-4-2. クロマトグラムの抽出

- ① カーソル (Cursor) の表示をシグナル (Signal) にします。



カーソル表示をシグナルにした画面。カーソルの位置の波長(WL)が自動的に入力されます。  
必要に応じてバンド幅(BW)、リファレンス設定を設定します。

- ② **マーク (Mark)** で印をつけておいた波長まで、画面上の線をドラッグして移動します。
- ③ 画面左下の **コピー (Copy)** をクリックします。  
画面にクロマトグラムが抽出、表示されます。  
クロマトグラムは解析画面にもコピーされます。
- ④ 抽出した図を消去したい場合には、目的のクロマトグラム、スペクトルをクリックし、**削除 (Delete)** を押します。
- ⑤ **終了 (Exit)** で画面をぬけると、抽出されたクロマトグラムが表示されます。

抽出したクロマトグラムは積分など通常の数値データの処理を行うことが可能です。

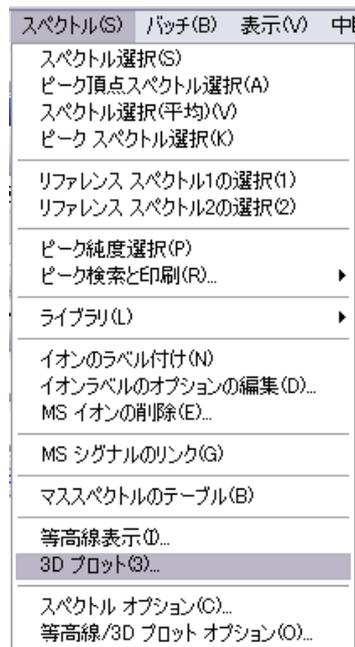
## 8-5. 3次元表示

メニューバーから

スペクトル (Spectra)

→ 3D プロット (3D Plot.)

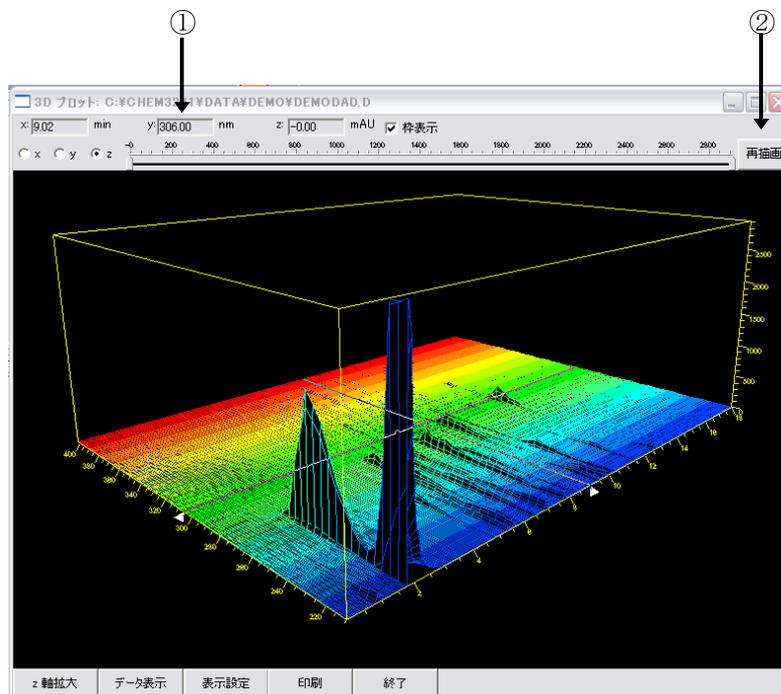
を選択します。



- ① X, Y, Z のスケールを自由に  
変更することができます。  
変更したい軸を選択して、  
右のスケール内のカーソルを  
移動します。

- ② **再描画 (Redraw)** を  
クリックします。

- ③ **閉じる (Close)** で  
3次元表示画面から抜けます。



## 8-6. スペクトルライブラリサーチ (Library Search)

ケミステーションではスペクトルライブラリサーチ機能によりピークを自動的に定性することができます。

### 8-6-1. 新規ライブラリの作成 (New Library)

① 新しくライブラリファイルを作成します。

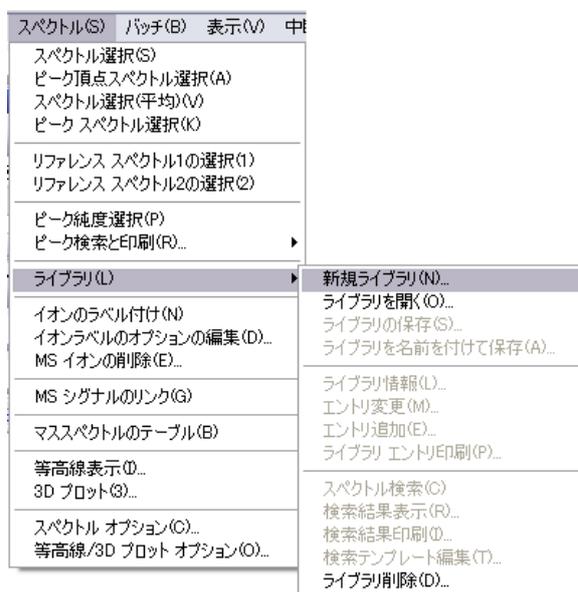
メニューバーから

スペクトル (Spectra)

→ ライブラリ (Library)

→ 新規ライブラリ (New Library)

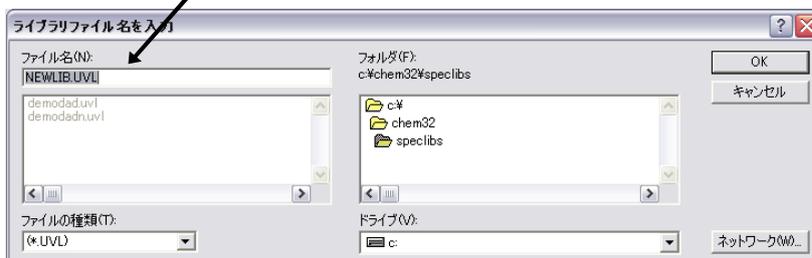
を選択します。



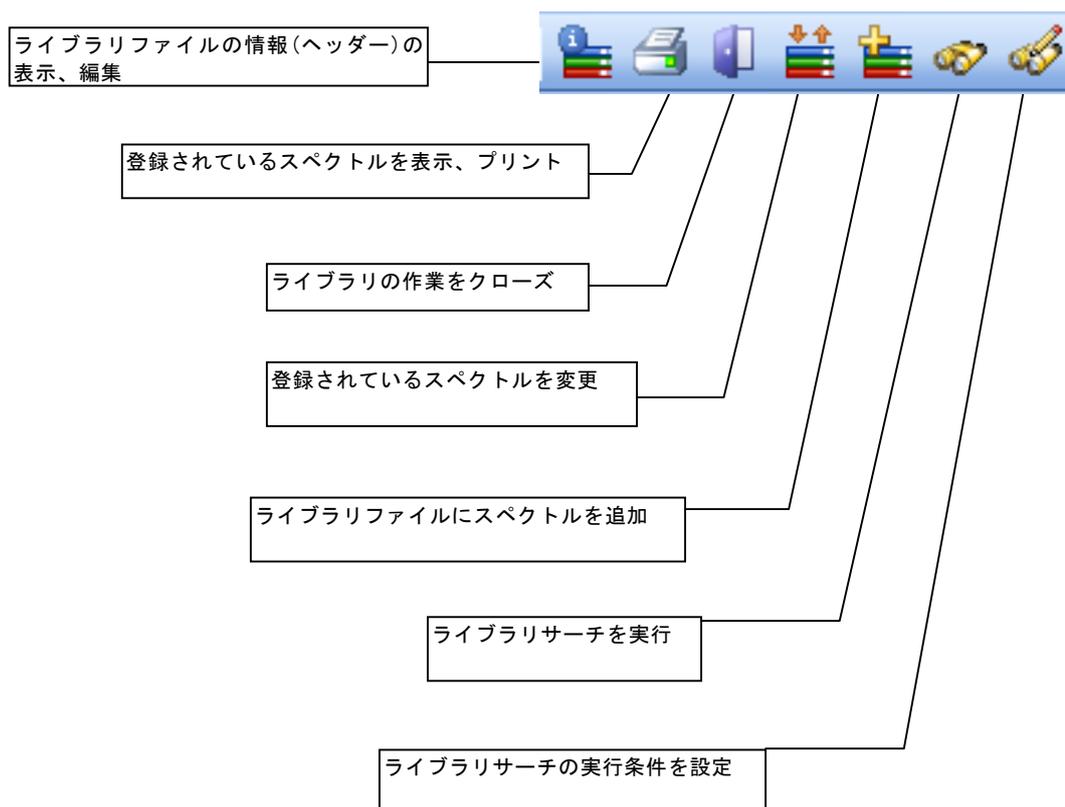
ファイル名を入力します。

※ライブラリのファイルは **C:\chem32\speclibs** に保存されます。

データやメソッドファイルのように装置番号の下 (**C:\chem32\1**) ではないことに注意してください。



- 
- ② ライブラリファイルをロードあるいは作成すると、画面左にライブラリに関するアイコンが画面上に表示されます。



- 
- ③ ライブラリファイル情報 (Edit Library Header) に入力します。

ライブラリ ヘッダー変更

ファイル C:\\*.NEWLIB.UVL      エントリー 0  
作成 26- 2月-2008      最終変更 26- 2月-2008

バージョン LC-UV Library G130x Rev. A.01.00  
機器

情報

ライブラリ名 :  
作成者 :  
変更者 :

OK(O)    キャンセル(C)    ヘルプ(H)

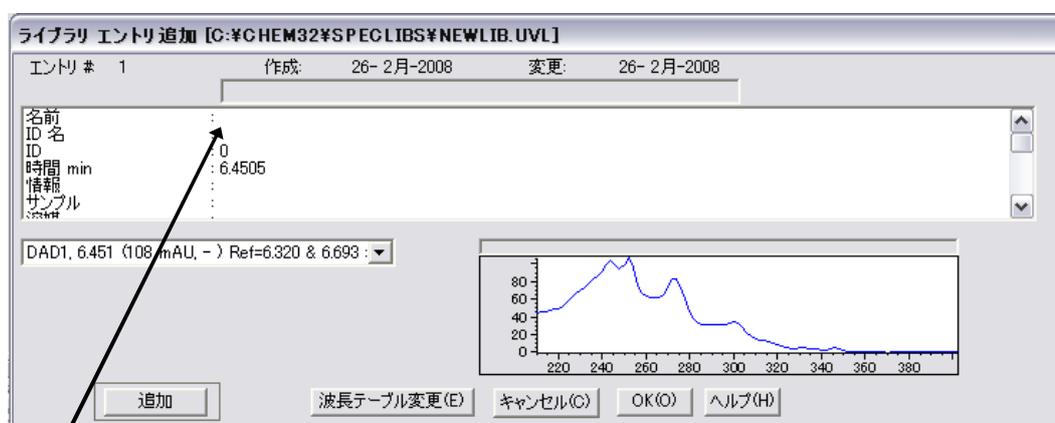
情報、ライブラリ名、作成者名等を入力してください。

ライブラリファイルが作成されます。

- ④ ライブラリに登録する成分を分析したデータファイルを読み込みます。

- ⑤ 登録したいスペクトルを画面に表示させます。(8-2節 参照)

- ⑥ スペクトルを登録します。  
アイコンをクリックします。



Name の項目に成分名を入力します。

その他、ID 番号や、スペクトルを採取した際の移動相組成などを入力できます。

**追加 (Add)** をクリックすると、ライブラリファイルにスペクトルが登録されます。

上記③～⑥の操作を繰り返してスペクトルをファイルに登録してください。

---

⑦ 作成したライブラリファイルを保存 (Save) します。

新しく名前をつけて保存する場合にはメニューバーから

スペクトル (Spectra)

→ ライブラリ (Library)

→ ライブラリの保存 (Save Library as...)

を選択します。

指定したファイル名で保存されます。

上書きの場合はこのアイコンをクリックします。



## 8-6-2. サーチ条件の設定 (Search Template)

ライブラリサーチを実行する際のサーチ条件を設定します。

ライブラリファイルに登録された成分のリテンションタイムや成分名等をサーチパラメータに加えることができます。

アイコンをクリックします。



### ① 左/右ウィンドウ

(Left/Right Window) [%] :

登録された成分の

リテンションタイム幅を

設定します。

### ② スレッショールド

(Threshold) [mAU] :

設定した吸光度以上の

ピークのみ サーチしま  
す。



目的のピークをサーチできない場合、設定が不適切な場合があります。

### ③ シフト (Shift) [nm] : 登録された成分のスペクトルを設定した波長分シフトします。

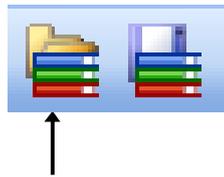
### ④ サーチを行う時間幅等を設定し、サーチする成分を限定するとサーチを早く行うことができます。

その他、成分名、ID ナンバーからサーチすることもできます。各項目は空白なら、サーチのパラメータにはなりません。数字・文字を入力した段階でパラメータとなります。

---

### 8-6-3. ライブラリサーチの実行 (Search)

- ① サーチするデータのファイルを読み込みます。
- ② サーチする目的のピークのスペクトルを表示させます。 (8-2 節参照)
- ③ スペクトルライブラリファイルを読み込みます。



登録したライブラリファイルを選択します。

- ④ ライブラリサーチを実行します。



アイコンをクリックすると、次ページの画面が表示されます。

サンプルとサーチされたスペクトルの重ね書きが表示されます。



ライブラリの結果には、最高 10 個の候補成分のリストが表示されます。

**スペクトル表示 (Show Spectrum)** : サンプルのスペクトルと比較したい成分の # の左側にカーソルを移動してクリックします。行の表示が反転した後、このキーを押すと指定した成分のスペクトルの重ね書きおよびスペクトルの差(相違)が表示されます。

**詳細 (More Info)** : 成分のエントリ情報を表示します。

**印刷 (Print)** : グラフィックデータとリストを含むレポートを印刷します。  
成分名または ID 名の出力設定及びサイズを設定してください。

## 8-6-4. ライブラリ情報の編集 (Spectra Library Manager)

登録したスペクトルの情報の修正などを行います。

アイコンをクリックします。



成分名・ID 番号. から表示を選択します。

リストの中から目的の成分をクリックして指定します。



成分名・ID 番号から表示を選択します。

リストの中から目的の成分をクリックして指定します。

全て選択 (Select All) をクリックすると全ての成分が指定できます。

エントリ変更 (Edit Entry)

: スペクトルの情報を修正します。

エントリ削除 (Delete Entry)

: スペクトルをファイルから削除します。

スペクトル表示 (Show Spectra)

: スペクトルを画面上に表示します。

スペクトルコピー (Copy Spectra)

: スペクトルをプリントします。

---

## 8-6-5. 自動ライブラリサーチ (Automated Library Search)

クロマトグラム上の全ピークのライブラリサーチをまとめて行います。

- 一度に4個のライブラリファイルによるサーチが可能です。
- ライブラリファイル別に異なる条件でのサーチが可能です。
- レポート条件の一部なので、メソッドに含まれるため、サーチ条件をメソッドに保存することが可能です。

① 自動ライブラリサーチの条件を設定します。

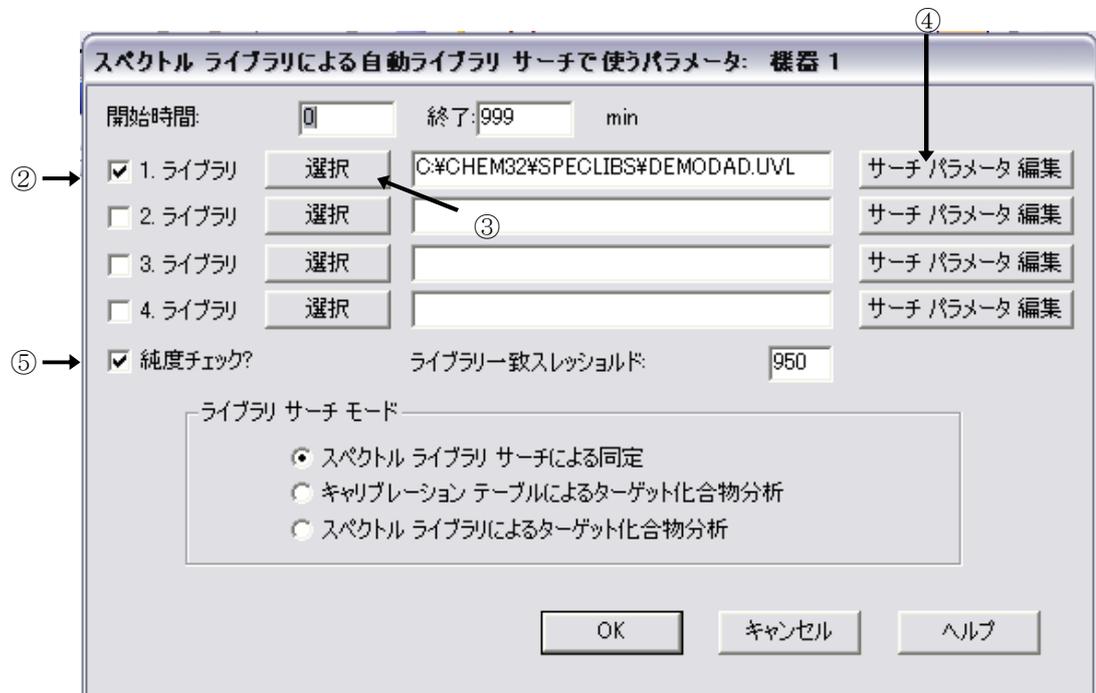
メニューバーより

レポート (Report)

→ 自動ライブラリサーチ (Automated Library Search)

を選択します。





② 使用するライブラリにチェックします。

③ **選択 (Selection)** をクリックし、ライブラリファイルを選択します。

④ ライブラリファイル毎に検索条件を設定します。

⑤ 自動ライブラリサーチと同時に純度チェックを行うかどうか選択します。

純度チェック (Purity check?) をチェックし、ライブラリー一致スレッシュホールド (Library match threshold) を入力してください。設定値よりマッチ度の低いピークは不純と判断され、ピークの立ち上がりと立ち下りの2点でサーチします。

---

⑥ レポートの出力条件を設定します。

メニューバーより

レポート Report

→ レポート条件 (Specify Report)



を選択します。

レポートスタイル (Report Style) の中から ライブラリサーチ (Library Search) を選択します。出力先 (Destination) を選択します。

⑥ データファイルを読み込みます。

画面にロードされているクロマトグラムのライブラリサーチを実行します。

メニューバーより

レポート (Report) → レポート印刷 (Print Report)

を選択します。

自動ライブラリサーチ結果が出力されます。

## 第9章 イージーシーケンスの利用

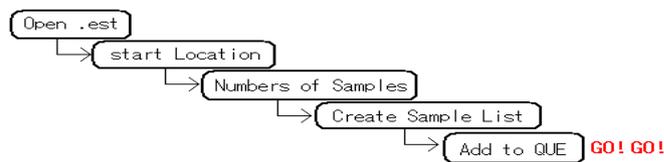
### 9-1. イージーシーケンスとは (Easy Sequence)

イージーシーケンス機能は、簡単なシーケンス分析について、繰り返しや、キューに溜めるなどの簡単機能を追加したものです。ケミステーション リビジョン B.04.02 [98]以上で利用可能です。

イージーシーケンスでは、

- 複数のシーケンスをキューに溜めて、順に分析ができます。
- キューの順序を変えることも可能です。
- サンプル名、データ名を関連付けて  
カウントアップできます。
- 周期的キャリブレーションのプランが視覚的に  
組み立てられます
- 同じシーケンスの繰り返しなら、サンプル登録が簡単です。

バイア...	サンプル名	データファイル
バイアル 1	reprod0001	REPROD0001.D
バイアル 2	reprod0002	REPROD0002.D
バイアル 3	reprod0003	REPROD0003.D



イージーシーケンスでは、

- 一つのシーケンスの中に組み込めるのは1つのメソッドのみです。
- バイアル順は、番号順に連続した順のみ設定可能です。
- シーケンスコンテナの設定をオンにしてください。

イージーシーケンスを利用するには、あらかじめメソッドを作成しておく必要があります。

---

## イージーシーケンスの制限事項

- ・ 1シーケンスで使用できるマスターメソッドは1つのみです。
- ・ 周期的キャリブレーションは、ブラケット（挟み込み）のみ使用可能です。
- ・ 周期的キャリブレーションでは、更新方法が1つのみ使用可能です。

（設定できないケース：始めに「置き換え」以降を「平均」）

これらの機能は、標準のシーケンス機能で実施できます。

## イージーシーケンスの操作タブ

### ①イージーシーケンスセットアップタブ

イージーシーケンステンプレート（.est）を作成するためのタブです。

サンプルカウンタ、データ命名法等を指定します。

### ②イージーシーケンスタブ

イージーシーケンステンプレート（.est）を利用して、

開始位置、サンプル数等を入れて、実際のサンプルリストを作成し

キューに登録するタブです。

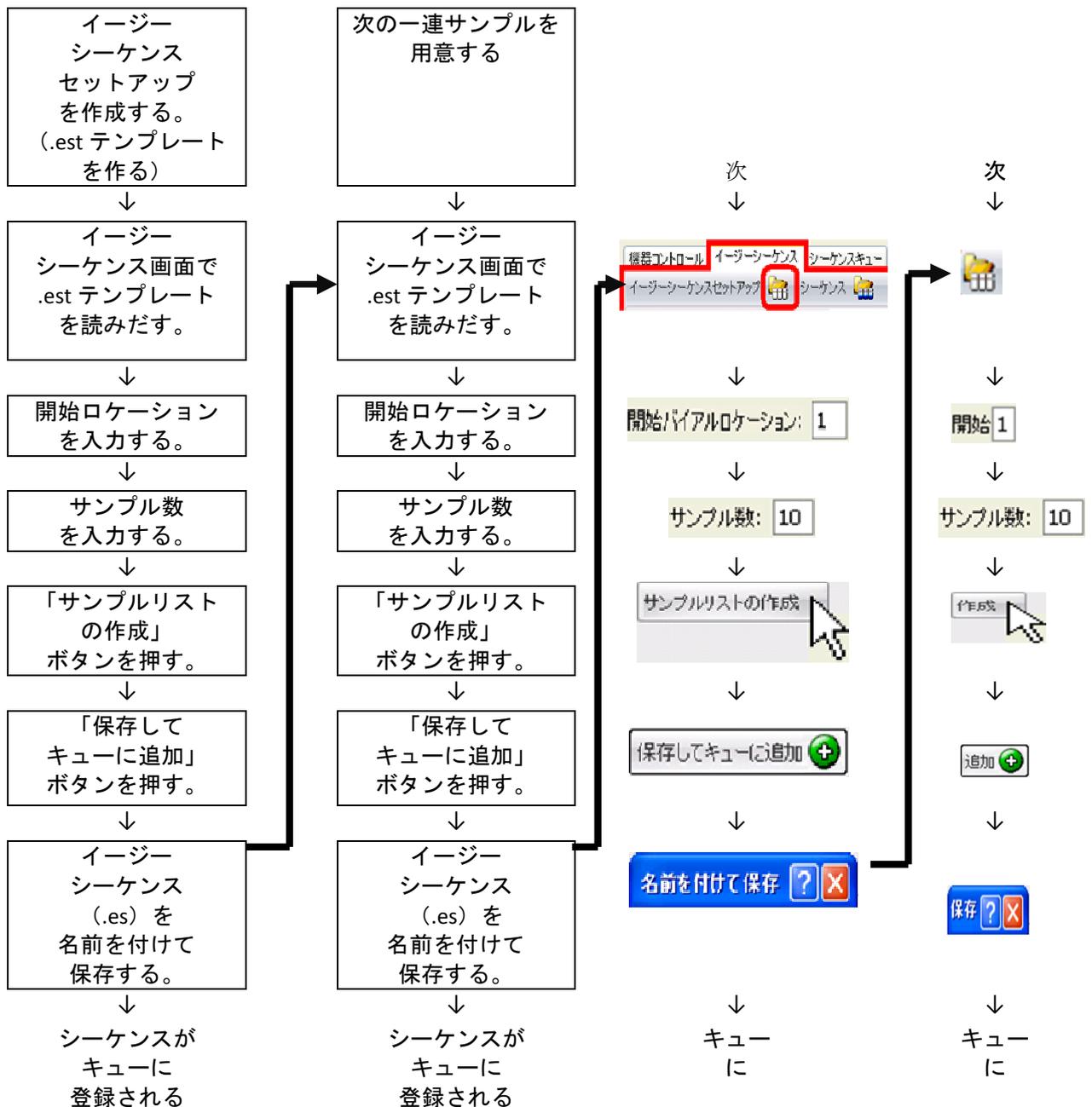
### ③シーケンスキュータブ

現在キューに溜まっているシーケンス一覧を見ることができます。

シーケンスの順を変更することもできます。



イージーシーケンス機能の基本操作は以下の通りです。



## 9-2. イージーシーケンスセットアップテンプレートを作成する

ここでは、イージーシーケンスセットアップテンプレート (.est) について記します。

(例として

「周期的キャリブレーションなし」

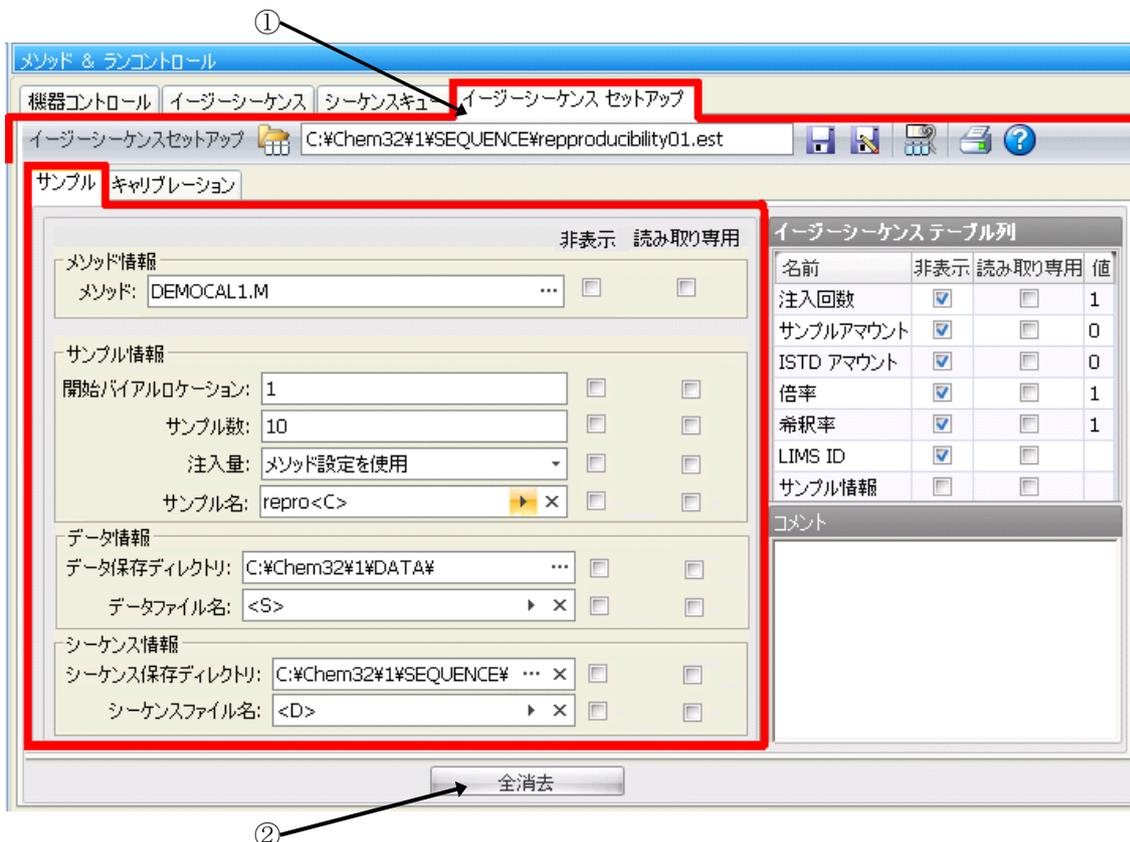
「サンプル名は「repro0001」, 「repro0002」, 「repro0003」… の順」

「データ名は、「サンプル名.D」つまり「repro0001.D」, 「repro0002.D」, …の順」

「データフォルダは、シーケンスコンテナ使用する」

「シーケンス保存名は、日付とする」

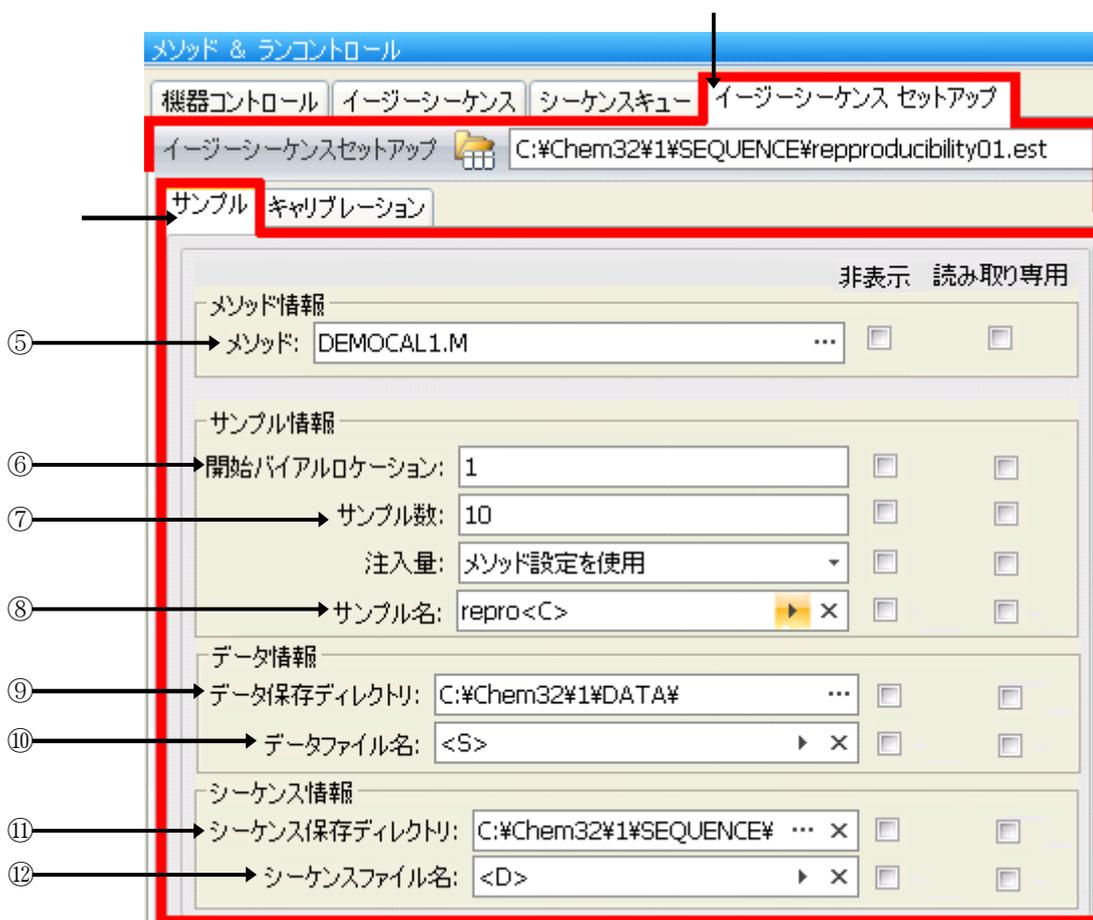
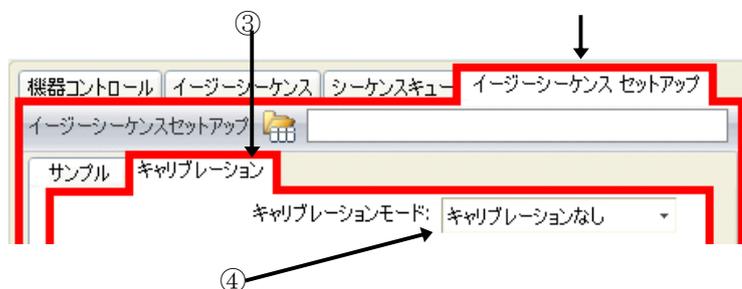
のテンプレートを作成します。)



① 「イージーシーケンスセットアップ」タブをクリックします。

② 新しいテンプレート (.est) を作成するときは、**全消去** ボタンを押してください。

③ ④ 念のため、  
 キャリブレーションタブの、  
 キャリブレーションの設定が、  
 「キャリブレーションなし」に  
 なっていることを確認して下さい。



- ⑤ 使用するマスターメソッドを、一種類選んでください。「…」をクリックすると、選択のダイアログボックスが開きます。
- ⑥ 開始ロケーションを指定します。これは、後の、サンプルリスト作成時に変更できます。
- ⑦ サンプル数を指定します。これは、後の、サンプルリスト作成時に変更できます。

⑧ サンプル名の名前の付け方を指定します。

ここでサンプル名にカウントアップの指定をすると、後の手順のサンプルリスト作成時に、名前の一部がカウンターになります。



入力欄中の三角マークをクリックすると、カウンターが選択できます。

例の中の <C> は、カウンター部分を示します。任意の文字列を追加できます。

この場合、サンプル名は「repro0001」, 「repro0002」, 「repro0003」のように数字部分がカウントアップされます。

⑨ データ保存ディレクトリを指定します。この直下にシーケンスコンテナが作成されます。シーケンスコンテナの命名法は、

表示 → プレファレンス の設定に準じます。

データ保存ディレクトリ: C:\%Chem32%\1\DATA\# ...

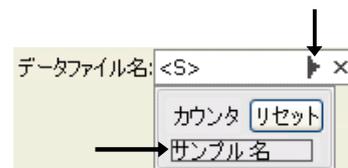
⑩ データファイルの名前の付け方を指定してください。

入力欄中の三角マークをクリックすると、

「カウンター」「サンプル名」が選択できます。

任意の文字列を追加することもできます。

また、後のステップの「サンプルリストの作成」「保存してキューに追加」の操作の前にも変更することができます。



ヒント：例では、前出のサンプル名と同じになるように

設定しています。(サンプル名とデータ名.D が、同じ名前になります。)

⑪ サンプルリスト作成時(後のステップ)で、シーケンスが作成されます。

このシーケンスの保存場所を選択してください。

シーケンス保存ディレクトリ: C:\%Chem32%\1\SEQUENCE\# ... x

デフォルトの C:\%chem32%\sequence で問題ありません。

⑫ 保存するシーケンスの名前の付け方を指定してください。

入力欄中の三角マークをクリックすると、

「カウンター」「サンプル名」が選択できます。

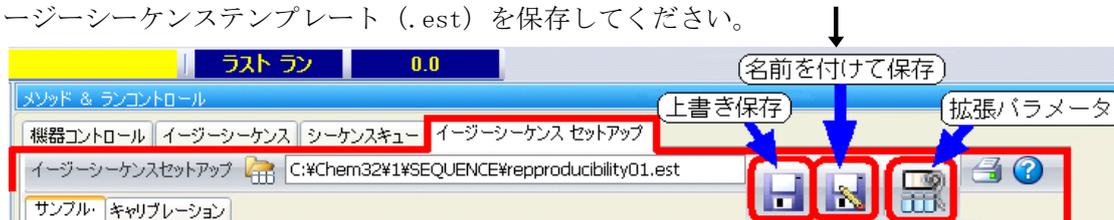
任意の文字列を追加することもできます

例では、日付が付くように設定しています。



ヒント：後のステップの「保存してキューに追加」の操作の前にも変更することができます。その時にサンプルの大分類名を追加することもできます。

⑬ イージーシーケンステンプレート (.est) を保存してください。



初回は、「名前を付けて保存」してください。拡張子の「.est」は、自動で付きます。

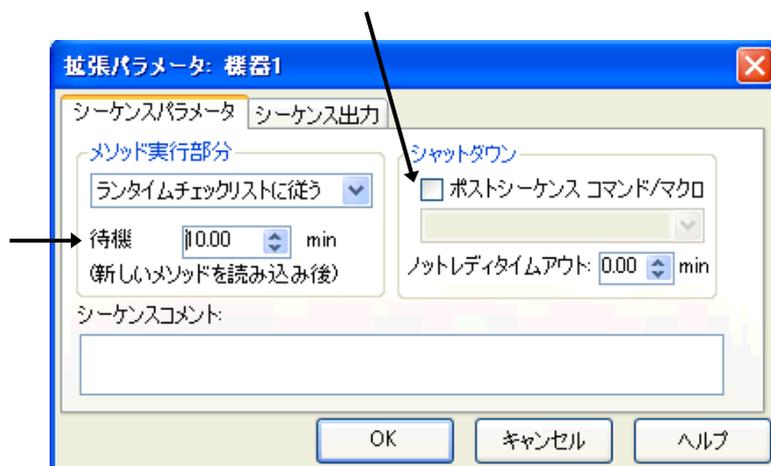
補足： シーケンスをキューに溜めて、連続的に実行する予定がある場合は、以下の2点を確認してください。

1) シーケンスが次に進み、別のメソッドが読み込まれて、移動相条件が変わった時の安定待ち時間  
拡張パラメータ の シーケンスパラメータ の 待機「0.00」min にメソッドが変わった後に、何分待ってから分析を開始するかを入力してください。

2) ポストシーケンスコマンドの設定。

拡張パラメータ の シーケンスパラメータ の ポストシーケンスコマンド/マクロ に「STANDBY」など装置を停止させるコマンドが入っていないことを確認して下さい。実行中のシーケンスが終了した時点で、STANBYになると機器はNotReadyになるので次のキューのシーケンスが始められません。

拡張パラメータの変更をしたら、改めて、イージーシーケンスセットアップ (.est) の保存をしてください。

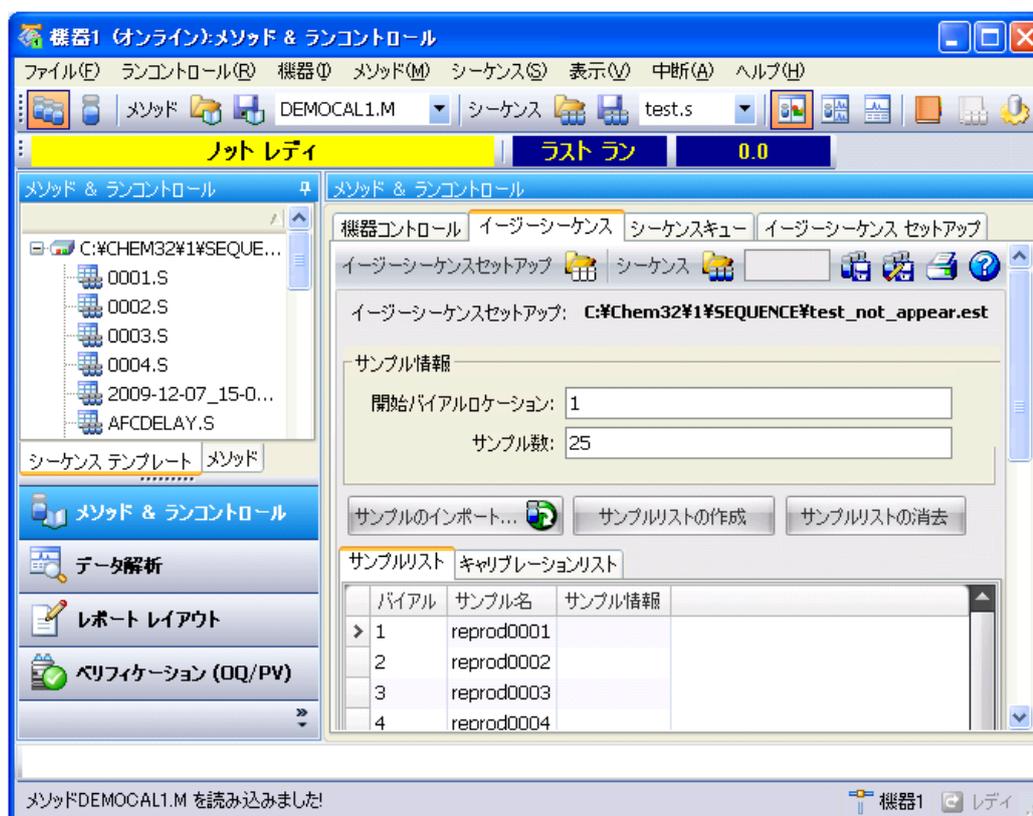


補足：非表示チェックボックスについて

イージーシーケンスセットアップ画面で「非表示」のチェックボックスをオンにすると、その項目は、イージーシーケンス画面（サンプルリスト作成の画面）に表示されなくなります。

サンプルリスト作成時の画面を簡易にできますが、.est ファイルの管理など、運用上の注意が必要です。

画面は、「開始ロケーション」「サンプル数」以外を非表示にした例です。



### 9-3. イージーシーケンスをキューに追加する

ここでは、サンプルリストを作成して、シーケンスをキューに溜める方法について記します。

前準備として、オペレータ名を入力してください。メニューから、

ランコントロール → サンプル情報

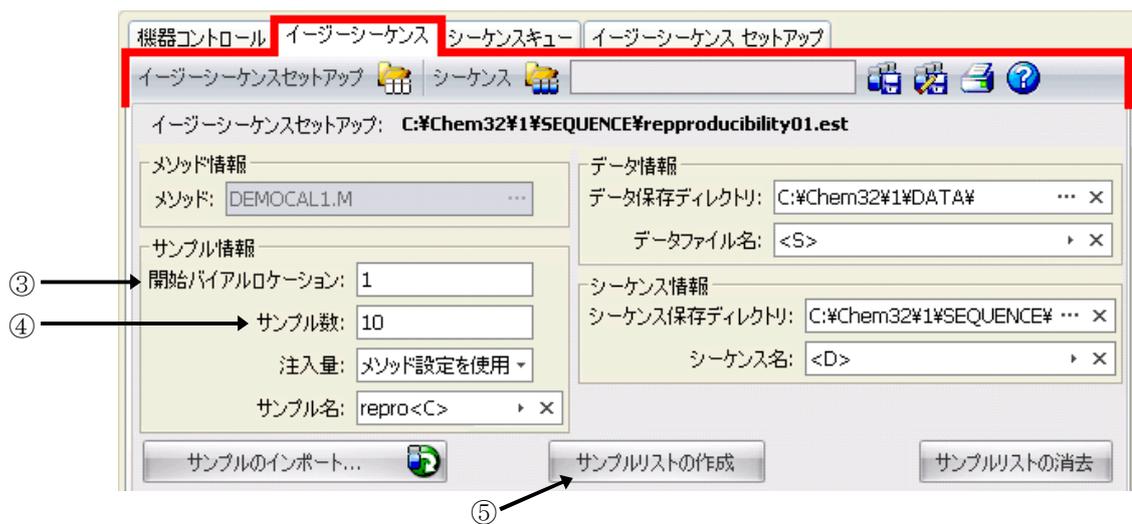
のダイアログボックス中の、オペレータ名の欄を入力してください。この名前は、データファイルに埋め込まれます。後からの変更はできません。



- ① イージーシーケンスタブをクリックして、イージーシーケンス画面を表示します。



- ② イージーシーケンスセットアップ (.est) を開きます。  
読み込みダイアログボックスが現れるので目的のテンプレートを読み込みます。



③ 開始ロケーション（実際にサンプルを並べる開始地点）を指定します。

補足：ウエルプレートサンプラの場合「p1a1」のように入力します。

④ サンプラーに並べる実際のサンプル数を入力します。

注意：ウエルプレートサンプラの場合、

- ・プレートをまたいでの設定はできません。

また、プレートの最後を超えても、p1a1 など、初めの位置に戻る設定はできません。

- ・ニードル動作時は、前面カバーが開けられないようになっています。  
このときは無理に開けないでください。

- ・サンプルを並べる場合時に、トレーは外さないでください。

取り出すときは、プレートのみ（54バイアルプレートも含む）だけ取り出して、サンプルを追加してください。

- ・54バイアルトレイを使用する場合は、

「上のプレート（奥側、プレート2）」は取りはずせません。

無理に取り外そうとすると、ニードルアームに触れてしまいます。

注意：標準型(100 トレータイプ)サンプラーの場合、100 番を超えない範囲で設定してください。

また、100 番の後に、1 番に戻る設定はできません。

⑤ 画面中央の サンプルリストの作成 ボタンをクリックします。

画面の下方にサンプルリストが表示されます。

サンプルリストの作成

サンプルリスト				
	バイアル	サンプル名	注入量	サンプル情報
>	1	repro0001	メソッド設定を使用	
	2	repro0002	メソッド設定を使用	
	3	repro0003	メソッド設定を使用	
	4	repro0004	メソッド設定を使用	
	5	repro0005	メソッド設定を使用	
	6	repro0006	メソッド設定を使用	
	7	repro0007	メソッド設定を使用	
	8	repro0008	メソッド設定を使用	
	9	repro0009	メソッド設定を使用	
	10	repro0010	メソッド設定を使用	

---

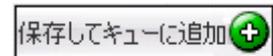
ヒント：サンプルリストは、イージーシーケンスセットアップ (.est) の通りに作成されますが、サンプルリストテーブル上でも編集が可能です。  
その際には、カウントアップ順などに気を付けてください。

- ⑦ 画面上のそのほかの各欄「メソッド情報」「データ情報」「シーケンス情報」に間違いがないか確認してください。  
(イージーシーケンスセットアップ .est の通りです。)

注意：次のステップで、シーケンスがすぐに始まる場合があります。

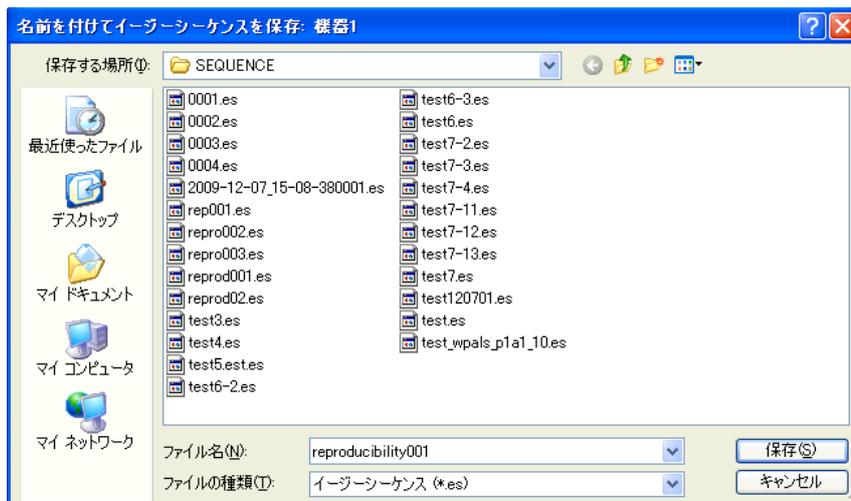
このまますぐにシーケンスを開始する場合は、  
ここで「機器コントロール」タブに戻って、カラム等コンディショニングを実施してください。

- ⑧ 画面中央下部の、保存してキューに追加 ボタンをクリックします。この操作では、イージーシーケンス (.es) を保存してから、このシーケンスをキューに登録します。



画面にはイージーシーケンス (.es) の保存を促す画面が現れます。

(イージーシーケンス (.es) を保存しないと、サンプルリストは登録されません。)



---

適切な名前を付けて、イージーシーケンス(.es)を保存してください。

装置が、レディ状態で、現在のメソッドが読み込み後の変更を受けていなければ、キューに溜まったシーケンスがすぐに実行されます。

## 9-4. イージーシーケンスを実行する

ここでは、キューにあるシーケンスの実行について記します。

1つめのシーケンスがキューに溜まった時、シーケンスがすぐにスタートするかどうかは、機器の状態により違います。

**レディ**

A) 機器がレディ状態で、

**アクティブキュー:シーケンス受け入れ可能です**

現在のメソッド (カレントメソッド) が、読み込み後、変更を受けていない場合。

→シーケンスキューはすぐにスタートします。

B) 機器が、スタンバイなどノットレディーの場合。

**ノットレディ**

機器がオンになってはいるが安定待ちの場合。

**(現在読み込まれているメソッドは変更されています。)**

現在のメソッド (カレントメソッド) が、読み込み後変更を受けている場合。

→シーケンスキューを一時停止します。

カラムのコンディショニング等の準備をします。

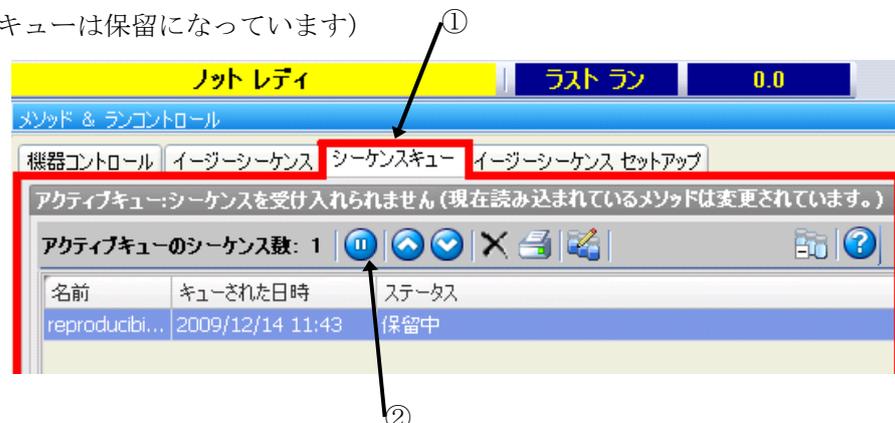
シーケンスキューの始めに使用されるマスターメソッドを読み込みます。

機器のレディと系の安定を確認します。

シーケンスキューの一時停止を解除します。

ここでは、イージーシーケンスの開始について、上記のB) のケースを説明します。

- ① シーケンスキュータブをクリックして、シーケンスキュー画面に移ります。  
(シーケンスキューは保留になっています)



② シーケンスキューを一時停止させます。

③ 機器コントロールタブをクリックして画面を変えます。

④ カラムのコンディショニング  
各機器のオン操作等の  
準備をします。



⑤ シーケンスキューの始めに使用されるマスターメソッドを読み込みます。  
メニューから メソッド → メソッド読み込み

⑥ 機器のレディと系の安定を確認します。

**レディ**

⑦ シーケンスキュータブをクリックして、シーケンスキュー画面に移ります。  
(シーケンスキューは先ほど一時停止にした状態のままです。)



⑧ シーケンスキューの一時停止を解除します。  
シーケンスが開始されます。

---

## 9-5. キューの操作

ここでは、シーケンスキューのアイコン操作を記します。



現在進んでいるキューを一時停止します。  
現在実行しているシーケンスは、停止しません。  
キューは一時停止して進みません。



一時停止したキューを再開します。



キューのシーケンスの順序を変更できます。  
変更させたいシーケンスの行をクリックすると、行の色が反転します。  
この状態で、順序を早めたいときは上向きボタンを、  
順序を後にしたいときは、下向きのボタンを押します。



キューのシーケンスを削除できます。  
削除するには、対象のシーケンスの行をクリックして、行の色が反転させてから、  
ボタンをクリックします。



現在のキューを、印刷します。



キューにあるシーケンスを編集できます。  
(サンプル名、データ名等にカウンタを使う場合が多いので、お勧めしません)

---

注意：次のシーケンスが開始されようとしている時に、シーケンステーブル、  
シーケンスパラメータなど、シーケンスに関するダイアログボックスは、  
閉じておいてください。  
次のシーケンスが実行されません。

補足：シーケンスの途中停止について

現在実行中の連続分析の一時停止/停止の方法は、  
4-2-5 節のシーケンスの一時停止 節の通りですが、イージーシーケンスを使用して  
キューにシーケンスが溜まっている場合注意が必要です。

シーケンスキューに、シーケンスが溜まっている時、  
シーケンスの停止、または中断をするときは、  
あらかじめシーケンスキューを一時停止してください。

シーケンスキュー



キューを一時停止しないで、シーケンス停止、または中断すると、  
キューの次のシーケンスが始まってしまいます。

(シーケンスが停止/中断したあと、機器とソフトウェアはレディになるため。)

シーケンスキューを使用していて、現在のシーケンスを一時停止する場合には、

メニューから、 ランコントロール → シーケンス停止と操作します。

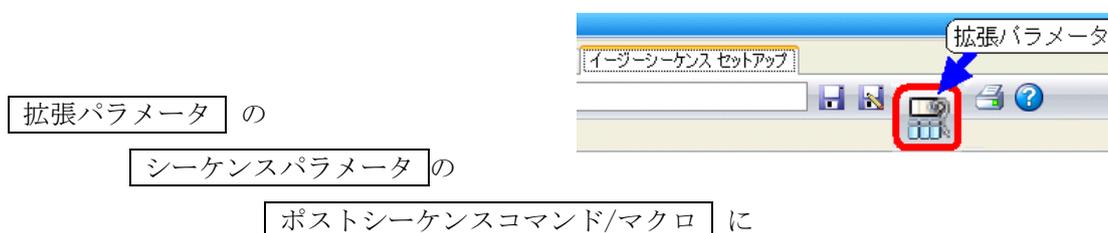
再開するには、 ランコントロール → シーケンス再開と操作します。

(シーケンス自身が一時停止しているため、キューも進みません)

---

ヒント：イージーシーケンスキューが最後まで終わったら、機器をスタンバイにするには  
キューの最後のシーケンスの設定で、最後にスタンバイになるよう設定します。

ポストシーケンスコマンドの設定で、



チェックを付けて、「STANDBY」を選択してください。



注意：もし後からシーケンスを追加した場合には、

STANDBY 設定がされているシーケンスが一番最後になるように、  
順序を変更してください。

---

## 9-6. 同じ、または類似のイージーシーケンスを実行する

ここでは、すでに作成したイージーシーケンステンプレート (.est) から、類似のシーケンスをキューに組み入れる方法について記します。

日常、同じ分析を繰り返す用途ならば、イージーシーケンステンプレートを作成しておけば、操作を簡略化できます。



- 1) **機器コントロール** で各機器をオンにして、オペレータ名を入力し、  
カラムコンディショニング等の準備をしたのち、  
初めに使用されるマスターメソッドを読みだしておきます。
- 2) 「カウンタのリセット」「命名法の文字列を変える」必要等の時は、  
**イージーシーケンスセットアップタブ** で  
イージーシーケンステンプレート (.est) を編集します。  
カウンタのリセットは各設定項目の右向き三角を  
クリックすると、リセットボタンが出てきます。
- 3) **イージーシーケンスタブ** で  
イージーシーケンステンプレートを読み出します。
- 4) 「開始バイアル位置」と「本数」を入力後「サンプルリスト作成」ボタンを押します。
- 5) 「保存してキューに追加」ボタンで、「.es ファイル」を保存するとキューに追加です。
- 6) 装置がレディになれば分析が開始されます。
- 7) 結果はオフラインソフトでシーケンスコンテナ内で解析できます。



---

補足：類似分析をする際には、

「イージーシーケンスセットアップファイル (.est)」を使用することをお勧めします。カウンタの値は、「.est」が持っています。

イージーシーケンス「.es」を読み出して使うとすると

前回保存した時と同じサンプルリストが出てきます。

つまり、同じサンプル名、同じデータファイル名になります。

しかし、イージーシーケンス機能を使用する上での推奨設定の

「ユニークなフォルダをオン」にして、フォルダの命名に「日付と時刻」を

入れておけば、後から取ったデータは別フォルダに溜まるので、

上書きの心配はありません。

ただし、サンプル群を特定するために、フォルダ名やログブックなどの記録から実行された時刻を頼りにしなければいけません。

このため、「.est」の設定で、各種名前の付け方は、

サンプル名 → 識別できる文字列+カウンタ

(日によってサンプル群の名称が異なる場合が多い)

データ名 → サンプル名

(解析時の1対1対応が容易に行える)

シーケンス名 → 日付と時刻、または識別できる文字列との組み合わせ

(実験ノートと、実験項目などを付き合わせが容易になる)

のような設定が考えられます。

## 9-7. 周期的キャリブレーションのプランを作成する

ここでは、イージーシーケンスの機能の一つである、「周期的キャリブレーション」プランの設定について記します。イージーシーケンスでは、「周期的キャリブレーション」と「ブラケットキャリブレーション」の2種類についてプランの作成ができます。

ここでは周期的キャリブレーションのプランの設定を例にあげます。

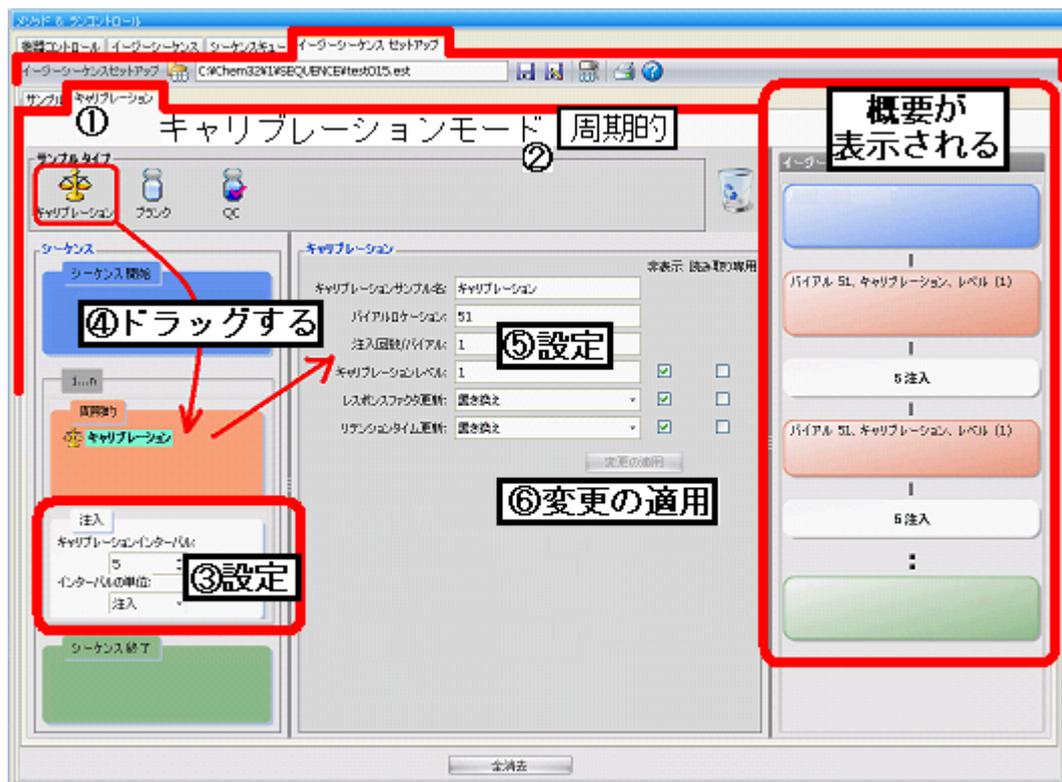
使用するメソッドの条件は、

- ・キャリブレーションテーブルが作製されている
- ・各成分のリテンションタイムが、現在のカラム保持の通り正しく設定されている

です。ここでは例として、

「1点検量線」 「5回に1回リキャリブレーションする」

のプランを作成します。



① イージーシーケンスセットアップタブの、キャリブレーションタブに入ります。

② キャリブレーションモードを「周期的」に設定します。

③ 「注入」項目で、サンプル何回に1回の  
リキャリブレーションするかを設定します。

④ キャリブレーションアイコンを、  
「周期的画面」にドラッグします。

⑤ リキャリブレーションの設定をします。

- ・キャリブレーションサンプル名  
キャリブレーションサンプルの  
名前を設定します。

- ・バイアルロケーション  
キャリブレーションサンプルの  
位置を指定します。

- ・注入回数/バイアル  
注入回数を設定します。

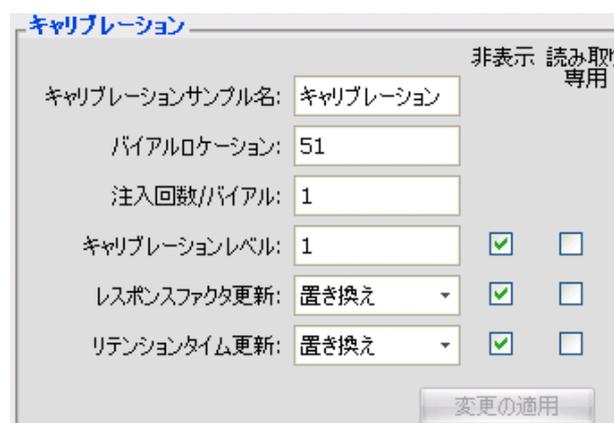
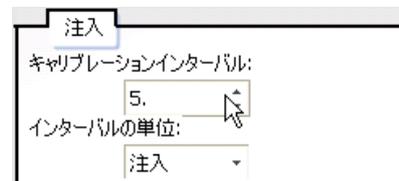
- ・キャリブレーションレベル  
検量線の何点目であるかを指定します。

- ・レスポンスファクタ更新  
このキャリブレーションサンプルの値で、レスポンスファクタをどのように変更するか  
を指定します。

- ・リテンションタイム更新  
このキャリブレーションサンプルの測定結果のRTで、RTウインドウの位置の  
更新方法をどのようにするか指定します。

⑥入力したら **変更の適用** ボタンをクリックして下さい。

多点検量線の場合は、各レベルについて、④⑤のステップを繰り返してください。



キャリブレーションプランの概要が表示されます。確認の上、「サンプルタブ」の編集に進んでください。編集終了後は、イージーシーケンスセットアップ (.est) を保存してください。

---

手順のガイドは、オンラインヘルプもご参照ください。



注意：イージーシーケンス機能では、

「レスポンスファクタ（RF）更新」「リテンションタイム（RT）更新」の方法が、毎回同じ様に設定されます。

（以下のような設定はできません：初回のキャリブレーションで、RF、RTを更新する。2回目以降は平均する）

リキャリブレーション方法が同一でないシーケンスを作成するには、ケミステーションのシーケンステーブルで作成してください。

補足：QC サンプル、ブランクランについて

周期的キャリブレーションを含むイージーシーケンスではシーケンスの中に「QC サンプル」「ブランク」を設定することができます。

これらのサンプルに対しては、

別のサンプル名

別のメソッド

固有のロケーション



シーケンス	
シーケンス開始	
QC	

QC	
QC サンプル名:	QC
QC サンプルのメソッド:	STARTUP_DEMO.M ...
バイアルロケーション:	91
注入回数/バイアル:	1

さらに、

ブランクに対しては、注入の有り/無し

が別に設定できます。



シーケンス	
シーケンス開始	
ブランク	

ブランク	
ブランクサンプル名:	ブランク
ブランクメソッド:	STARTUP_DEMO.M ...
ブランク(注入あり):	<input checked="" type="checkbox"/>
バイアルロケーション:	81
注入回数/バイアル:	1
注入量:	メソッド設定を使用

---

## 9-8. イージーシーケンスの設定と操作のヒント

ここではイージーシーケンスの設定と操作のヒントをいくつか紹介します。



詳細は、各節もしくはオンラインヘルプもご参照ください。

①データの上書きがされないようにするには、どのような設定が必要でしょうか？

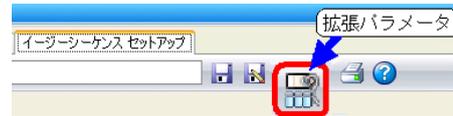
ユニークフォルダを必ずオンにして、名前のパターンに<Date><Time>を入れてください。

操作は、メニューから、表示 (View) → プレファレンス (Preference)

②シーケンスをキューに溜める時の注意点はなんでしょうか？

拡張パラメータに注意してください。

「待機{xx}min 新しいメソッドを読み込み後」の項目に、カラム安定の時間を設定するようにしてください。(9-2 節参照)



③カウンタをリセットするにはどのような操作をしますか？

イージーシーケンスセットアップ (.est) に戻って、カウンタをリセットしてください。

「サンプル名」欄の右矢印ボタンでダイアログボックスを出し、「リセット」を押してください

.est を上書き保存しなくてもカウンタはリセットされます。(9-6 節参照)



④いつも「mysample0001」～のようなサンプルリストを作成するにはどうすればいいでしょうか？

.est セットアップの「サンプル名」欄に、

「mysample<C>」と入力後、右矢印ボタンでダイアログボックスを出し、「リセット」を

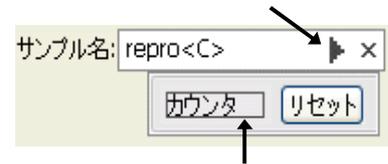
押してください。(文字列部分を変更した場合、.est を、名前を付けて (または上書き) 保存が必要です) (9-2 節参照)



⑤サンプル名や、データ名の、プレフィックスを書き換えるにはどのような操作をしますか？

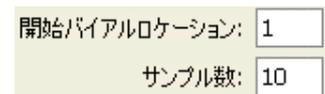
.est セットアップまで戻って、プレフィックス部分を書き換えてください。

.est を上書き保存し、サンプルリストを作成してください。  
「サンプルリスト作成」後のリスト上での修正でも  
できます。(9-2 節参照)



⑥ サンプル数がいつもと違う時はどのような操作をしますか？

イージーシーケンス画面の、「サンプル数」欄に数値を入力後、  
「サンプルリスト作成」ボタンを押してください。(9-3 節参照)



⑦ 開始ロケーションを変更したいときはどうすればいいでしょう？

イージーシーケンス画面の、「開始バイアルロケーション」欄に数値を入力後、  
「サンプルリスト作成」ボタンを押してください。(9-3 節参照)

⑧ イージーシーケンスを使用して、キューにシーケンスが溜まっています。

シーケンスと一旦停止させるにはどうしたらよいでしょう？

まず、シーケンスキューを一時停止してください。

そのあと、メニューから、ランコントロール → シーケンス停止  
を選択します。

再開するには、メニューの

ランコントロール → シーケンス再開 を選択します。

(9-5 節、4-2-5 節参照)

シーケンスキュー



---

---

本書の内容の一部または全部を無断で複写・転載することは禁止されています。

トレーニング受付、操作・修理のご相談は：  
アジレント・テクノロジー株式会社  
カスタムコンタクトセンター

〒192-8510 東京都八王子市高倉町 9-1  
Tel: (フリーダイヤル) 0120-477-111  
受付時間 9:00～18:00 (土,日,祝祭日を除く)

Fax: (フリーダイヤル) 0120-565-154  
E-mail: email\_japan@agilent.com

<http://www.chem-agilent.com>

